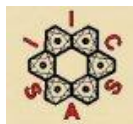


Ústav anorganickej chémie SAV



Správa o činnosti organizácie SAV za rok 2008

Bratislava
január 2009

Obsah osnovy Správy o činnosti organizácie SAV za rok 2008

I. Základné údaje o organizácii.....	1
II. Vedecká činnosť.....	3
III. Doktorandské štúdium, iná pedagogická činnosť a budovanie ľudských zdrojov pre vedu a techniku.....	12
IV. Medzinárodná vedecká spolupráca.....	16
V. Vedná politika.....	25
VI. Spolupráca s VŠ, univerzitami a inými subjektmi v oblasti vedy a techniky v SR.....	26
VII. Spolupráca s aplikačnou a hospodárskou sférou.....	28
VIII. Aktivity pre Národnú radu SR, vládu SR, ústredné orgány štátnej správy SR a iné organizácie.....	30
IX. Vedecko-organizačné a popularizačné aktivity.....	31
X. Činnosť knižnično-informačného pracovníka.....	36
XI. Aktivity v orgánoch SAV.....	37
XII. Hospodárenie organizácie.....	38
XIII. Nadácie a fondy pri organizácii.....	39
XIV. Iné významné činnosti.....	39
XV. Vyznamenania, ocenenia a ceny udelené pracovníkom organizácie v roku 2008.....	39
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).....	40
XVII. Problémy a podnety pre činnosť SAV.....	40

PRÍLOHY

1. Menný zoznam zamestnancov k 31.12.2008.....	41
2. Projekty riešené na pracovisku.....	44
3. Vedecký výstup – bibliografické údaje výstupov.....	60
4. Údaje o pedagogickej činnosti organizácie.....	123
5. Údaje o medzinárodnej vedeckej spolupráci.....	125

I. Základné údaje o organizácii

1. Kontaktné údaje

Názov: Ústav anorganickej chémie SAV

Riaditeľ: prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc.
tel: 59410 400 e-mail: pavol.sajgalik@savba.sk

Zástupca riaditeľa: Ing. Miroslav Boča, PhD.
tel: 59410 490 e-mail: miroslav.boca@savba.sk

Vedecký tajomník: RNDr. Jana Madejová, DrSc.
tel: 59410 406 e-mail: jana.madejova@savba.sk

Predseda vedeckej rady: RNDr. Peter Komadel, DrSc.
tel: 59410 464 e-mail: peter.komadel@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:

Vitrum Laugaricio - Centrum kompetencie skla (VILA), spoločné pracovisko ÚACH SAV, TU AD v Trenčíne, FCHPT STU a RONA, a.s.

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. Údaje o zamestnancoch

Tabuľka I.1: Počet a štruktúra zamestnancov

ŠTRUKTÚRA ZAMESTNANCOV	K	K do 35 rokov		K ved. prac.		F	P
		M	Ž	M	Ž		
Celkový počet zamestnancov	81	14	17			75	59,61
Vedeckí pracovníci	46	9	10	31	15	40	37,21
Odborní pracovníci VŠ	15	4	2			15	12,4
Odborní pracovníci ÚS	13	0	2			13	6
Ostatní pracovníci	3	0	0			3	0
Doktorandi v dennej forme doktorandského štúdia	4	1	3			4	4

Tabuľka I.2: Štruktúra vedeckých pracovníkov (kmeňový stav k 31.12.2008)

Rodová skladba	Pracovníci s hodnosťou				Vedeckí pracovníci v stupňoch		
	DrSc.	CSc., PhD.	prof.	doc.	I.	IIa.	IIb.
Muži	5	26	3	2	5	13	13
Ženy	2	13	0	0	2	1	12

Tabuľka I.3: Štruktúra pracovníkov podľa veku a rodu zo stĺpca F v tabuľke I.1. zaradených do riešenia projektov (domácich alebo medzinárodných)

Veková štruktúra (roky)	< 30	31-34	35-39	40-44	45-49	50-54	55-59	60-64	> 65
Muži	8	4	5	3	1	9	3	4	0
Ženy	8	5	1	3	0	4	3	1	1

Pozn.: Pracovníkov zaradiť podľa veku, ktorý dosiahli v priebehu roka 2008.

Priemerný vek riešiteľov projektov podľa vyššie uvedenej tabuľky:

muži: 43,2

ženy: 40,3

Priemerný vek všetkých kmeňových zamestnancov k 31.12.2008: 42,8

Priemerný vek kmeňových vedeckých pracovníkov k 31.12.2008: 41,5

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

Priemerný vek zamestnancov ÚACH SAV sa dlhodobo nemení a je pod hranicou 45 rokov. Udržanie tohto trendu kladie nároky na personálnu politiku a predovšetkým mzdovú politiku vedenia ústavu. Motivácia mladých pracovníkov pre zotrvanie na ústave sa realizuje predovšetkým prostredníctvom poskytnutia možnosti zvyšovania ich kvalifikácie (stupeň IIb, IIa, Ib a Ia). Zvyšovanie kvalifikácie vedeckých pracovníkov má, logicky za následok zvýšený tlak na mzdový fond. Napriek tomu vedenie ústavu chápe, že je to jediný prostriedok pre zvyšovanie vedeckej výkonnosti organizácie. Tento postoj je nielen v súlade s odsúhlasenou personálnou politikou ústavu vo vedení ako aj vo vedeckej rade, ale tento postoj našiel aj široké pochopenie v akademickej obci. V ÚACH SAV je nadpolovičný počet vedeckých pracovníkov z celkového počtu pracovníkov. Tento stav umožňuje udržiavať dlhodobo vysokú vedeckú produkciu ocenenú nielen v evaluácii roku 2008, kde ústav skončil na prvom mieste z ústavov II. Oddelenia vied SAV, ale aj v akreditácii ústavu pri poslednom hodnotení v roku 2007 (kategória A*). Kritérium nadpolovičného počtu vedeckých pracovníkov z celkového počtu zamestnancov sa pôvodne objavilo aj v identifikácii excelentných inštitúcií vedy a výskumu z pohľadu MŠ SR. Na tento vývoj mzdový fond pridelený každoročne z P SAV nereaguje. ÚACH SAV má spracovanú analýzu, že MF ústavu rástol od roku 2004 podstatne pomalšie ako mzdové fondy ústavov s podobnou veľkosťou a výkonnosťou v II. Oddelení vied SAV. Ešte raz podčiarknutým paradoxom tohto vývoja sa javí fakt, že ÚACH SAV sa umiestnil v predmetnom období na čelných pozíciách nielen v hodnotení

Akreditačnou komisiou SAV, P SAV ale aj nezávislou agentúrou ARRA. Napriek predloženiu žiadosti o prešetrenie tohto stavu na P SAV ešte v apríli 2008, ústav dodnes nedostal od P SAV žiadnu oficiálnu odpoveď. Havarijný stav v mzdovom fonde ÚACH SAV bolo nevyhnutné riešiť odobratím osobných príplatkov všetkým pracovníkom. Je potrebné ešte raz zdôrazniť, že sa tak stalo po excelentných výkonoch ústavu vo všetkých hodnoteniach. Frustráciu pracovníkov ÚACH SAV z existujúceho stavu a postoja P SAV asi netreba v tejto správe komentovať.

II. Vedecká činnosť

1. Domáce projekty

Tabuľka II.1: Zoznam domácich projektov riešených v roku 2008

ŠTRUKTÚRA PROJEKTOV	Počet projektov		Pridelené financie na rok 2008		
	A organizácia je nositeľom projektu *	B organizácia sa zmluvne podieľa na riešení projektu	A		B
			Celkom	pre organi- záciu	
1. Vedecké projekty, ktoré boli v r. 2008 financované VEGA	9	1	1 956 000 Sk	1 956 000 Sk	105 000 Sk
2. Projekty, ktoré boli roku 2008 financované APVV **	7	4	11 229 000 Sk	9 820 000 Sk	3 440 000 Sk
3. Účasť na nových výzvach APVV r. 2008 ***	0		-		
4. Projekty riešené v rámci ŠPVV	0	0	-		-
5. Projekty centier excelentnosti SAV	1	1	500 000 Sk	500 000 Sk	120 000
6. Vedecko-technické projekty, ktoré boli v roku 2008 financované	0	0	-		-
7. Projekty podporované Európskym sociálnym fondom	0	3	-		-
8. Iné projekty (ústavné, na objednávku rezortov a pod.)	1	2	150 000 Sk	150 000 Sk	1 040 000 Sk

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

** Netýka sa to medzinárodných projektov z výziev APVV (medzištátne zmluvy, COST a pod.).

*** Uviesť projekty so začiatkom financovania v roku 2008 z výziev 2008.

Tabuľka II.2: Zoznam domácich projektov podaných v roku 2008

Štruktúra projektov	Miesto podania	A organizácia je nositeľom projektu	B organizácia sa zmluvne podieľa na riešení projektu
1. Účasť na nových výzvach APVV r. 2008 *	-		
2. Projekty výziev OP ŠF 2.1., 4.1., 5.1. podané r. 2008 **	Bratislava regióny	1	
3. Projekty výziev FM EHP **	-	3	

I Uviesť projekty so začiatkom financovania v roku 2009 z výziev 2008.*

*** Uviesť podané projekty z výziev a pod tabuľku: - názov projektu; - podávateľ projektu; - partneri projektu; - stav projektu (projekt na evaluáciu, vyradený z dôvodu nesplnenia odborných požiadaviek, formálnych nedostatkov - akých, celkový názor na spôsob administrovania ŠF). Údaje sa spracujú do kapitoly II. G správy, ktorú SAV predkladá vláde SR.*

Projekt výzy OP ŠF 4.1., podané v r. 2008

Názov projektu: Centrum pre materiály, vrstvy a systémy pre aplikácie a chemické procesy v extrémnych podmienkach,

Kód projektu: ITMS: NFP 26240120002

Podávateľ projektu: ÚACH SAV (prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc.)

Partneri: ÚPo SAV, CHÚ SAV, FCHPT STU

Stav projektu: projekt je schválený

Projekty výziev FM EHP, podané v r. 2008

Názov projektu: Výskumná základňa pre vysokoteplotné taveninové priemyselné aplikácie

Podávateľ projektu: Ústav anorganickej chémie SAV

Partneri projektu: bez partnerov

Stav projektu: projekt v evalvácii

Názov projektu: Štúdium vysokoteplotných fluoridových tavenín na báze zirkónia s potenciálom pre chladiace a teplotransportné aplikácie v jadrovej energetike spojennej s termochemickou výrobou vodíka.

Podávateľ projektu: Ústav anorganickej chémie SAV

Partneri projektu: bez partnerov

Stav projektu: vyradený z dôvodu nesplnenia formálnych nedostatkov - chýbajúci písomný príslub spolufinancovania projektu z vlastných finančných zdrojov.

Názov projektu: Keramické nanokompozity na báze Al_2O_3 s výnimočnými funkčnými a vysokoteplotnými vlastnosťami

Podávateľ projektu: Ústav anorganickej chémie SAV

Partneri: ÚMV SAV, TnU AD

Stav projektu: vyradený z dôvodu formálnych nedostatkov - chýbajúca príloha

Názor na spôsob administrovania: Zbytočné šikanovanie a plytvanie ľudským potenciálom, kedy sa kompletne spracovaný projekt vyradí kvôli formálnej chybe - chýbajúcej prílohe (vyhlásenie štatutárneho zástupcu o zabezpečení spolufinancovania). Takáto príloha navyše absurdne duplikuje rozpočet projektu, v ktorom sa štatutár inštitúcie zaväzuje zabezpečiť spolufinancovanie projektu. Nebola poskytnutá možnosť opravného mechanizmu (doplnenie chýbajúcich príloh). Podľa našich informácií tak bolo pre rovnakú, alebo podobnú chybu vyradených 7 z 9 podaných projektov. Celý proces hodnotenia sa potom nesústreďuje na vedeckú kvalitu projektu, ale na jeho formálnu správnosť, čo považujeme za absurdné a kontraproduktívne.

2. Najvýznamnejšie výsledky vedeckej práce

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

Názov: Fluoridové taveniny nióbu a tantalu

Autori: M. Boča, B. Kubíková, L. Kosa

Systémy fluoridov alkalických kovov a komplexných fluorotantaličnanov a fluoroniobičnanov s prídavkom ich oxidov sa použili na rozvoj termodynamických prístupov pri ich popise a na testovanie možnosti využitia pokročilých inštrumentálnych metód pri štúdiu procesov prebiehajúcich v kvapalnom stave pri vysokých teplotách. Aplikáciou práškovej difrakčnej analýzy využívajúcej neutrónové žiarenie na zlúčenine K_2TaF_7 sa zistila kompatibilita použitého platinového držiaka s roztaveným fluoridovým systémom pri teplotách do 800 °C a získala sa manuálna zručnosť pri manipulácii v podmienkach prítomnosti zdroja neutrónového žiarenia. Pri štúdiu základných fyzikálno-chemických vlastností sa získali rozsiahle údaje o hustote, viskozite, povrchovom napätí a fázových rovnováhach v študovaných systémoch. Na objemových vlastnostiach sa identifikoval protipólly vplyv kationov a aniónov. V prípade asociačných reakcií aniónov dochádza k objemovej kontrakcii a opačne k objemovej expanzii dochádza s poklesom veľkosti kationov v rade K^+ , Na^+ , Li^+ .

Financovanie: VEGA, projekt č. 2/6179/26

Dosiahnuté výsledky sú v publikáciách:

KOSA, Ladislav - MACKOVÁ, Iveta - PROKS, Ivo - PRITULA, Ondrej - SMRČOK, Ľubomír - BOČA, Miroslav – RUNDLÖF, Håkan. Phase transitions of K_2TaF_7 within 680 – 800 °C. In *Central European Journal of Chemistry*, 6, 27-32 (2008)

MLYNÁRIKOVÁ, Jarmila - BOČA, Miroslav - KIPSOVÁ, Linda. The role of the alkaline cations in the density and volume properties of the melts $MF-K_2NbF_7$ ($MF = LiF-NaF, LiF-KF$ and $NaF-KF$). In *Journal of Molecular Liquids*, 140, 101-107 (2008)

b) aplikačného typu (uviesť používateľa, napr. SME, ÚOŠS a pod.)

Názov: Použitelnosť cementov PC Ladce a. s. pre syntézy MDF materiálov

Autori: M. Drábik, S. Balkovic, E. Gáliková

Používateľ výsledku: PC Ladce, a. s.

Projekt vedecko-technickej spolupráce Ústavu anorganickej chémie SAV a Považskej cementárne Ladce, a.s. (PC Ladce, a. s.), ktorý bol riešený na základe priamej objednávky PC Ladce, a. s. od r. 2005

Zistila sa využiteľnosť portlandského cementu v kombinácii s polyfosforečnanmi pre syntézy kvalitných kompozitných hydraulických materiálov bez makrodefektov - MDF materiálov. Technológia spracovania podmieňuje ich unikátne vlastnosti, tieto ich komerčne zaraďujú medzi uvedené kompozity, ktoré sú kvalitatívne vyššie ako betóny. V r. 2008 sa definovalo surovinové zloženie a realizovali sa syntézy aj v poloprevádzkových podmienkach. Takto sa overila reprodukovateľnosť výroby. Syntetizované prototypy MDF materiálov dosahujú požadované atomárne sieťovanie a ním podmienenú odolnosť vo vlhkom prostredí. Dokázalo sa, že s využitím poznatkov o chemických premenách v systéme je možné aj vo výrobe eliminovať alebo aspoň minimalizovať nežiadúci sekundárny vplyv vlhkosti na technologické vlastnosti.

c) medzinárodných vedeckých projektov (uviesť zahraničného partnera alebo medzinárodný program)

Názov: Luminescenčné vlastnosti oxynitridovej keramiky dopovanej európiom

Autori: Z. Lenčoš¹⁾, Y. Zhou²⁾, T. Plachký¹⁾, L. Benco¹⁾, P. Šajgalík¹⁾, K. Hirao²⁾, D. Velič³⁾

¹⁾Ústav anorganickej chémie, Slovenská akadémia vied, Dúbravská cesta 9, 845 36 Bratislava, Slovensko

²⁾National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), 2266-98 Shimo-Shidami, Moriyama-ku, Nagoya 463-8560, Japan

³⁾Medzinárodné laserové centrum, Bratislava, Slovensko

Ternárne nitridy MgSiN_2 a LaSi_3N_5 sa pripravili nitridáciou zmesí $\text{Mg}_2\text{Si/Si/Si}_3\text{N}_4$ a $\text{LaSi/Si/Si}_3\text{N}_4$ v teplotnom intervale 1350-1400 °C. K východiskovej zmesi sa pridal dopant Eu_2O_3 v množstve $x \in \langle 0,06; 0,1 \rangle$ podľa všeobecných vzorcov $\text{La}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Si}_3\text{N}_{5-x}\text{O}_{3/2x}$ a $\text{Mg}_{1-x}\text{Eu}_x\text{SiN}_{2-2/3x}\text{O}_{3/2x}$. Po nitridácii sa prášky dodatočne žihali v odporovej grafitovej peci pri 1650 °C ($\text{MgSiN}_2\text{:Eu}$) a 1850 °C ($\text{LaSi}_3\text{N}_5\text{:Eu}$) v pretlaku dusíka počas 2 hodín. Oba materiály emitovali žiarenie v oblasti viditeľného modro-zeleného svetla. Intenzita žiarenia mierne narastala so zvyšujúcim sa obsahom európie.

Metódou samovoľne sa šíriacej vysokoteplotnej syntézy sa pripravil β -SiAlON dopovaný európiom. V priebehu 3 až 5 minút sa úspešne zosyntetizoval svetlo emitujúci keramický materiál $\text{Si}_{6-z}\text{Al}_z\text{O}_z\text{N}_{8-z}\text{:Eu}^{2+}$. Zloženie SiAlONu bolo v rozmedzí $z \in \langle 0,25; 2,0 \rangle$ a obsah európie bol konštantný v molárnom pomere Eu_2O_3 : $\text{Si}_{6-z}\text{Al}_z\text{O}_z\text{N}_{8-z} = 0,02:1$ pre všetky zloženia. Častice mali predĺžený tvar a emitovali žiarenie v zelenej oblasti viditeľného svetla.

Dosiahnuté výsledky

Publikácie:

Z. Lenčoš, L. Benco, J. Madejová, Y. Zhou, L. Kipsová, K. Hirao: Reaction synthesis and characterisation of lanthanum silicon nitride, *Journal of the European Ceramic Society*, 28, 1917-1922 (2008).

Y. Zhou, Y. Yoshizawa, K. Hirao, Z. Lenčoš and P. Šajgalík, "Preparation of Eu-Doped β -SiAlON Phosphors by Combustion Synthesis," *Journal of the American Ceramic Society*, 91, 3082-3085 (2008).

Patenty:

- 1) Japanese patent application No. 2007-097877: "Preparation of nitride phosphors by combustion synthesis" K. Hirao, Y. Zhou, Z. Lenčoš.
- 2) Invention Jap. Pat. 2007-097877 applied to the World Intellectual Property Organisation (March 24, 2008).

Prednášky:

Z. Lenčoš, P. Šajgalík, L. Benco, D. Velič, Y. Zhou, K. Hirao, R. Riedel: Ternary nitrides with thermo electrical and optical properties and related silicon nitride based composites, *Materials Research Society Fall Meeting*, 26.-30.11. 2007, Boston, USA

Z. Lenčoš, Y. Zhou, L. Benco, D. Velič, I. Bertóti, K. Hirao, P. Šajgalík: Electronic structure and optical properties of silicon-based ternary nitrides, 2nd *International Congress on Ceramics*, 29.6.-4.7. 2008, Verona, Taliansko. (pozvaná prednáška)

Z. Lenčoš, Y. Zhou, L. Benco, D. Velič, K. Hirao, P. Šajgalík: Electronic structure, thermal and optical properties of magnesium and lanthanum silicon nitrides, *International Symposium on New*

Frontiers of Advanced Si-Based Ceramics and Composites (ISASC 2008) 7.-12.06.2008, Jeju, Kórea.

Z. Lenčéš, Y. Zhou, L. Benco, D. Velič, I. Bertóti, K. Hirao, P. Šajgalík: Optical and thermal properties of ternary silicon nitrides, *4th International Workshop on Nitrides and Related Materials*, 31.08.- 05.09. 2008, Rüdesheim, Nemecko.

d) zámery na čerpanie štrukturálnych fondov EÚ v ďalších výzvach

Ústav anorganickej chémie sa plánuje zapojiť do nasledujúcich výziev ŠF EÚ

4.1 Podpora sietí excelentných pracovísk výskumu a vývoja ako pilierov rozvoja regiónu v Bratislavskom kraji (február - máj 2009, august - november 2009) - hlavný riešiteľ

2.2 Prenos poznatkov a technológií získaných výskumom a vývojom do praxe (marec - júl 2009, august - november 2009) - hlavný riešiteľ, detašované pracovisko VILA v Trenčíne

4.2 Prenos poznatkov a technológií získaných výskumom a vývojom do praxe v Bratislavskom kraji marec - júl 2009, august - november 2009) - ako partner

3.1 Obnova a budovanie technickej infraštruktúry výskumu a vývoja v Bratislavskom kraji (november 2009 - marec 2010) - hlavný riešiteľ

3.Vedecký výstup (bibliografické údaje výstupov uviesť v Prílohe č. 3)**Tabuľka II.3: Zoznam publikácií a edícií**

PUBLIKAČNÁ A EDIČNÁ ČINNOSŤ	Počet v r. 2008 a doplnky z r. 2007
1. Vedecké monografie vydané v domácich vydavateľstvách (AAB, ABB, CAB)	0
2. Vedecké monografie vydané v zahraničných vydavateľstvách (AAA, ABA, CAA)	0
3. Odborné monografie vydané v domácich vydavateľstvách (BAB)	0
4. Odborné monografie vydané v zahraničných vydavateľstvách (BAA)	0
5. Kapitoly vo vedeckých monografiách a vysokoškol. učebniciach vydané v domácich vydavateľstvách (ABD, ACD)	4
6. Kapitoly vo vedeckých monografiách a vysokoškol. učebniciach vydané v zahraničných vydavateľstvách (ABC, ACC)	2
7. Kapitoly v odborných monografiách vydané v domácich vydavateľstvách (BBB)	0
8. Kapitoly v odborných monografiách vydané v zahraničných vydavateľstvách (BBA)	0
9. Vedecké práce v časopisoch evidovaných	
a/ v Current Contents (ADC, ADCA, ADCB, ADD, ADDA, ADDB, CDC, CDCA, CDCB, CDD, CDDA, CDDB)	50
b/ v iných medzinárodných databázach	0
10. Vedecké a odborné práce v ostatných časopisoch (ADE, ADEA, ADEB, ADF, ADFA, ADFB, CDE, CDEA, CDEB, CDF, CDFA, CDFB, BDEA, BDEB, BDFA, BDFB)	6
11. Vedecké a odborné práce v zborníkoch (konferenčných aj nekonferenčných, vydaných tlačou alebo na CD)	
a/ recenzovaných (AEC, AED, AFA, AFB, AFBA, AFBB, BEC, BED, CEC, CED)	12
b/ nerecenzovaných (AEE, AEF, AFC, AFD, AFDA, AFDB, BEE, BEF)	19
12. Vedecké a odborné práce v zborníkoch rozšírených abstraktov (AFE, AFF, BFA, BFB, BFBA, BFBB)	15
13. Recenzie vedeckých prác vo vedeckých časopisoch (EDI)	0
14. Vydané periodiká evidované v Current Contents	0
15. Ostatné vydané periodiká	0
16. Vydané alebo editované zborníky z vedeckých podujatí (FAI)	1
17. Vysokoškolské učebnice a učebné texty (ACA, ACB)	3
18. Vedecké práce uverejnené na internete (GHG)	0
19. Preklady vedeckých a odborných textov (EAJ)	0

Tabuľka II.4: Vedecké recenzie, oponentúry a prednášky

	Počet v r. 2008 a doplnky z r. 2007
Vyžiadané recenzie rukopisov monografií a vedeckých prác v zahraničných časopisoch, príspevkov na konferencie s medzinárodnou účasťou, oponovanie grantových projektov	97
Prednášky a vývesky na vedeckých podujatiach s min. 30% zahraničnou účasťou	68
Ostatné prednášky a vývesky	1

Tabuľka II.5: Ohlasy

OHLASY	Počet v r. 2007	Doplnky za r. 2006
Citácie vo WOS (1.1, 2.1)	882	0
Citácie v SCOPUS (1.2, 2.2)	733 (72)*	0
Citácie v iných citačných indexoch a databázach (9, 10)	27	0
Citácie v publikáciách neregistrovaných v citačných indexoch (3, 4)	2	0
Recenzie a umelecké kritiky (5,6,7,8)	0	0

*Z toho 72 citácií sa neprekryva s citáciami z WOS

Zoznam pozvaných príspevkov na medzinárodných konferenciách:

Autor/autori, názov príspevku, konferencia, v prípade publikovania uviesť prameň. Ak boli príspevky publikované, sú súčasťou Prílohy č. 3, kategória (AFC, AFD, AFE, AFF, AFG, AFH)

1. ČEKLOVSKÝ, Alexander - BUJDÁK, Juraj - LANG, K.: Thin films of layered silicates with photochemically-active porphyrin cations. 8th Conference on Solid State Chemistry. 6.7.-11.7.2008, Bratislava
2. DRÁBIK, Milan: The innovations of cement-based materials through materials chemistry. 8th Conference on Solid State Chemistry. 6.7.-11.7.2008, Bratislava.
3. HIRAO, Kiyoshi -ZHOU, You - YOSHIKAWA, Yuichi, LENČEŠ, Zoltán, ŠAJGALÍK, Pavol: Preparation of nitride phosphors by combustion synthesis. International Symposium on New Frontier of Advanced Si-Based Ceramics and Composites, Jeju, Korea, 2008
4. KOMOROVSKÝ, Stanislav: Dirac-Kohn-Sham calculations of shielding tensor with restricted magnetically balanced basis. Workshop on Modern Methods in Quantum Chemistry. Mariapfarr, Rakúsko, 2008
5. LENČEŠ, Zoltán - BENCO, Ľubomír - VELIČ, Dušan - ZHOU, Y. - HIRAO, K. - ŠAJGALÍK, Pavol: "Thermal and optical properties of ternary silicon-nitrides". 4th International Workshop on Spinel Nitrides and Related Materials, Ruedesheim/Rhine, Nemecko, 31.8.-5.9.2008.
6. LENČEŠ, Zoltán - ZHOU, You - BENCO, Ľubomír - VELIČ, Dušan - HIRAO, Kiyoshi - ŠAJGALÍK, Pavol: Electronic structure and optical properties of silicon-based ternary nitrides, 2nd International Congress on Ceramics, Verona, Taliansko, 2008
7. MADEJOVÁ, Jana: "Infrared spectroscopy: Theory and clay minerals applications I". International workshop "ADVANCECLAY - ERASMUS IP", Eötvös L. University, Budapest,

23.7. 2008

8. MADEJOVÁ, Jana: "Infrared spectroscopy: Theory and clay minerals applications II". International workshop "ADVANCECLAY - ERASMUS IP", Eötvös L. University, Budapest, 23.7. 2008
9. MADEJOVÁ, Jana: Possibilities of near IR spectroscopy in investigation of reduced charge smectites. AluSiV. Aberdeen, Scotland, UK, 2008
10. MALKIN, Vladimír: A fully relativistic calculations NMR parameters in the framework of the matrix Dirac-Kohn-Sham equation using a restricted magnetically balanced basis. In: Current Trends in Theoretical Chemistry V. Krakow, Poľsko, 2008
11. NEOGRADY, P. - NOGA, Jozef - PITONAK, M. - URBAN, M.: Towards a more accurate and more efficient coupled cluster implementation in the Bratislava Group' 48th Sanibel Symposium. Georgia, USA, February 21-26, 2008
12. NOGA, Jozef: R12/F12 based theories within and beyond the standard approximation. An analysis and some numbers. Symposium on Atomic, Molecular and Optical Sciences and High Performance Computing: Kalkata, India, 2008
13. NOGA, Jozef: Alternative explicitly correlated approaches based on the R12 theory. Symposium: Electron correlation and molecular dynamics for excited states and photochemistry, Vienna, July 3-4, 2008
14. NOGA, Jozef, KEDZUCH, Stanislav, Simunek, J., Ten-no S.: Coupled cluster F12 theory with Slater geminals. 7th Central European Symposium on Theoretical Chemistry. Hejnice, Czech Republic, Sept 28 - Oct 1, 2008
15. PLACHKÝ, Tomáš - LENČEŠ, Zoltán - HAUSER, Ralf - RIEDEL, Ralf - ŠAJGALÍK, Pavol: Densification of Si₃N₄/SiAlOC ceramic composites. 8th Conference on Solid State Chemistry. Bratislava, 6.7.-11.7.2008
16. ŠAJGALÍK, Pavol: Road map of ceramics for energy. 2nd International Congress on Ceramics, Verona, Taliansko, 29.6.-4.7.2008
17. ŠAJGALÍK, Pavol: Ceramic technologies for the alternative energy, KERMAT, International Symposium: The New Frontiers of Ceramic Materials, Rimini Fair, Taliansko, 1-2.10.2008
18. ŠAJGALÍK, Pavol - HNATKO, Miroslav - LOJANOVÁ, Štefánia - LENČEŠ, Zoltán: SiC/Si₃N₄ nano/micro composites - materials with excellent properties. Polish Ceramics: V International Scientific and Technological Conference, Krakow, Poľsko, 14-17.9.2008. - plenary lecture.
19. ŠAJGALÍK, Pavol - HNATKO, Miroslav - LOJANOVÁ, Štefánia - LENČEŠ, Zoltán: SiC/Si₃N₄ nano/micro composites - processing and mechanical properties, International Symposium on New Frontier of Advanced Si-Based Ceramics and Composites (ISASC-2008), Jeju Island, Korea, 8.6.-11.6.2008
20. ŠAJGALÍK, Pavol - LENČEŠ, Zoltán - HRIC, Ľubomír - PLACHKÝ, Tomáš - RIEDEL, R.: Novel non-oxide ceramics for application in extreme conditions, The 9th International Symposium on Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Applications, Shanghai, China, 10-14.11. 2008
21. ŠAJGALÍK, Pavol - LENČEŠ, Zoltán - ZHOU, Y. - BENCO, Ľubomír - HIRAO, K. - VELIČ, Dušan: Synthesis and physical properties of magnesium and lanthanum silicon nitride, 1st Symposium on Advanced Synthesis and Processing for Materials (ASPM08), Wuhan University of Technology, Wuhan, China, 14-17.11.2008
22. ŠAJGALÍK, Pavol - PLACHKÝ, Tomáš - HRIC, Ľubomír - LENČEŠ, Zoltán - RIEDEL, R.: Processing and properties of silicon-based composites using polymer derived ceramics as sintering aids. 4th International Workshop on Spinel Nitrides and Related Materials, Ruedesheim/Rhine, Nemecko, 31.8.-5.9.2008.

6. Patentová a licenčná činnosť

a) Vynálezy, na ktoré bol udelený patent v roku 2008:

Na Slovensku - počet patentov: 1

Číslo PV: Medzinárodné patentové triedenie: C04B35/565 Verzia MPT: 2006, CO1B31/00

Mená autorov: Šajgalík Pavol, RNDr., DrSc., Prof., Lenčéš Zoltán, Ing., PhD., Sedláček Jaroslav, Ing., PhD.

Názov vynálezu: Spôsob výroby hutnej keramiky na báze karbidu kremíka

Majiteľ / spolumajiteľ: Ústav anorganickej chémie SAV

b) Vynálezy prihlásené v roku 2008:

c) Predané licencie:

d) Realizované patenty:

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 50, čo pri počte 38,21 vedeckých pracovníkov (prepočítaný stav, podľa Tabuľky 2, str. 3) znamená 1,3 karentovanej publikácie na vedeckého pracovníka. Tento relatívne nízky počet je aj výsledkom prehodnotenia tvorby databáz a kategorizácie časopisov (napr. špeciálnych vydaní časopisov venovaných príspevkom z významných konferencií). Cieľom naďalej ostáva 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 1,761. Citovanosť (vo všetkých dostupných databázach WOK - 882, SCOPUS - 72, Scifinder - 27) na vedeckého pracovníka (prepočítaný stav) je 25,7 citácie. Potešiteľný je trvalý trend rastu počtu citácií a ich získavanie pracovníkmi všetkých oddelení ústavu. Dlhodobu 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.

Koncom roku 2008 výberová komisia schválila Centrum pre materiály, vrstvy a systémy pre aplikácie a chemické procesy v extrémnych podmienkach - MACHINA, kód ITMS NFP26240120002 v rámci Operačného Programu Výskum a Vývoj., OPVaV-2008/4.1-SORO kde je ÚACH SAV hlavným riešiteľom projektu.

Kolektív Oddelenia hydrosilikátov pod vedením RNDr. Petra Komadela, DrSc. sa stal partnerom Centra excelentnosti APVV: VVCE-0033-07, ktoré koordinuje Prírodovedecká fakulta UK, Bratislava. Kolektív pracovníkov Oddelenia teoretickej chémie pod vedením Olgy Malkiny, DrSc. sa stal partnerom Centra excelentnosti APVV: VVCE-0004-07, ktoré koordinuje STU Bratislava.

Relatívne vysoké renomé pracovníkov ústavu vo vedeckej komunite dokumentuje aj vysoký počet vyžiadaných prednášok pracovníkov ústavu na medzinárodných vedeckých podujatiach, ktorých bolo 22 v roku 2008, viaceré na veľmi významných svetových konferenciách.

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

1. Údaje o doktorandskom štúdiu

Tabuľka III.1: Zoznam akreditovaných študijných odborov s uvedením univerzity a fakulty alebo vysokej školy kde sa doktorandský študijný program uskutočňuje

Názov študijného odboru (ŠO)	Číslo ŠO	Doktorandský študijný program uskutočňovaný na: (uviesť univerzitu a fakultu alebo vysokú školu)
anorganická chémia	4.1.15	Prírodovedecká fakulta UK
anorganická chémia	4.1.15	Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU
chemická fyzika	4.1.11	Prírodovedecká fakulta UK
anorganické technológie a materiály	5.2.19	Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU

Tabuľka III.2: Počet doktorandov celkovo a počet ukončených v r. 2008

Forma	Počet k 31.12.2008		Počet ukončených doktorantúr v r. 2008							
	Doktorandi								Ukončenie z dôvodov	
	celkový počet		z toho novoprijatí		úspešnou obhajobou		uplynutím času určeného na štúdium	neobhájením dizertačnej práce alebo neudelením vedeckej hodnoty	rodinných, zdravotných a iných, resp. bez udania dôvodu	nevykonania odbornej skúšky
	M	Ž	M	Ž	M	Ž				
Denná	1	3	0	0	2	1	1	0	0	0
Externá	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0

2. Zmena formy doktorandského štúdia

Tabuľka III.3: Preradenie z dennej formy na externú

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

3. Prehľad údajov o doktorandoch, ktorí ukončili doktorandské štúdium úspešnou obhajobou**Tabuľka III.4: Menný zoznam ukončených doktorandov v r. 2008**

Meno doktoranda	Forma DŠ	Mesiac, rok nástupu na DŠ	Mesiac, rok obhajoby	Číslo a názov vedného odboru	Meno a organizácia školiteľa	Fakulta udeľujúca vedeckú hodnotu
Andrejkovičová Slávka	denná	09/2003	03/2008	28-02-9 Anorganická technológia a materiály	Peter Komadel, RNDr. DrSc. ÚACH SAV	FCHPT STU Bratislava
Hrachová Jana	denná	09/2003	03/2008	28-02-9 Anorganická technológia a materiály	Peter Komadel, RNDr. DrSc. ÚACH SAV	FCHPT STU Bratislava
Netriová Zuzana	denná	10/2005	09/2008	5-2-19 Anorganická technológia a materiály	Miroslav Boča, Ing. PhD ÚACH SAV	FCHPT STU Bratislava
Pentrák Martin	denná	10/2005	09/2008	5-2-19 Anorganická technológia a materiály	Jana Madejová, RNDr. DrSc. ÚACH SAV	FCHPT STU Bratislava
Hric Ľubomír	denná	10/2005	09/2008	5-2-19 Anorganická technológia a materiály	Pavol Šajgalík, prof. RNDr. DrSc. ÚACH SAV	FCHPT STU Bratislava
Hrobárik Peter	denná	09/2004	12/2008	14-04-9 Fyzikálna chémia	Oľga Malkin, Dr. DrSc. ÚACH SAV	PríF UK Bratislava

4. Údaje o pedagogickej činnosti**Tabuľka III.5: Prednášky a cvičenia vedené v r. 2008**

PEDAGOGICKÁ ČINNOSŤ	Prednášky		Cvičenia *	
	doma	v zahraničí	doma	v zahraničí
Počet prednášateľov alebo vedúcich cvičení **	4	0	3	0
Celkový počet hodín v r. 2008	65	0	230	0

* - 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**

Tabuľka III.6: Aktivity pracovníkov na VŠ

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

Tabuľka III.7: Členstvá v odborových komisiách pre doktorandské štúdium

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 hodnot' alebo vyšší kvalifikačný stupeň (s uvedením hodnoti/stupňa) *
RNDr. Juraj Bujdák, PhD. (anorganická chémia)	doc. Ing. Dušan Galusek, PhD. (Ústav prírodných a humanitných vied TnUAD)	Mgr. Slávka Andrejkovičová, PhD. (PhD., Slovenská technická univerzita v Bratislave)
RNDr. Milan Drábik, CSc. (anorganická chémia)	prof. Ing. Marek Liška, DrSc. (Fakulta priemyselných technológií TnUAD v Púchove)	RNDr. Jana Hrachová, PhD. (PhD., Slovenská technická univerzita v Bratislave)
doc. Ing. Dušan Galusek, PhD. (anorg. technológia a materiály)	prof. Ing. Marek Liška, DrSc. (Fakulta chemické technologie VŠCHT, Praha, ČR)	Ing. Zuzana Netriová, PhD. (PhD., Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU)
RNDr. Peter Komadel, DrSc. (anorganická chémia)	prof. Ing. Marek Liška, DrSc. (Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne)	Ing. Martin Pentrák, PhD. (PhD., Slovenská technická univerzita v Bratislave)
Ing. Zoltán Lenčes, PhD. (anorg. technológia a materiály)	prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc. (Vysoká škola báňská - TU Ostrava, Česká republika)	Mgr. Ľubomír Hric, PhD. (PhD., Slovenská technická univerzita v Bratislave)
prof. Ing. Marek Liška, DrSc. (anorg. technológia a materiály)	prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc. (Hutnícka fakulta TUKE)	Mgr. Peter Hrobárik, PhD. (PhD., PriFUK v Bratislave)
RNDr. Jana Madejová, DrSc. (anorg. technológia a materiály)	prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc. (Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne)	
prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc. (chemická fyzika)	prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc. (Vysoké učení technické, Brno)	
Ing. Viera Petrušková, PhD. (učiteľstvo profesijných predmetov a praktickej prípravy)		
prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc. (anorg. technológia a materiály)		

5. Iné dôležité informácie k pedagogickej činnosti

(najmä skúsenosti s doktorandským štúdiom)

V roku 2008 Ústav anorganickej chémie požiadal o reakreditáciu doktorandského štúdia v odbore 4.1.11 Chemická fyzika v spolupráci s Prírodovedeckou fakultou UK v Bratislave s dobou štúdia 4 roky. Zmena dĺžky štúdia z troch na štyri roky sa uskutočnila v súvislosti s náročnosťou doktorandského štúdia v tomto odbore.

V roku 2008 bolo na ÚACH SAV vypísaných celkovo 11 tém na vypracovanie dizertačnej práce so začiatkom štúdia v roku 2008, na ktoré sa neprihlásil žiadny záujemca. Tento nepriaznivý stav nastal aj napriek tomu, že sme oslovili fakulty v Brne a Ostrave, s ktorými má ÚACH podpísané zmluvy o spolupráci. Výrazný pokles záujmu o doktorandské štúdium sa pozoroval aj na celoakademickej úrovni. Riaditeľ ústavu upozornil na tento negatívny trend v získavaní nových doktorandov a vyzval všetkých, aby zvýšili úsilie v získavaní študentov nielen z fakúlt v Bratislave, ale z celého Slovenska, prípadne z iných krajín EÚ. Za hlavnú príčinu nezájmu mladých ľudí o doktorandské štúdium považujeme ich nedostatočné finančné ohodnotenie počas štúdia, ktoré sa výrazne nemení ani po dosiahnutí vedeckej hodnosti PhD., a nezáujem na trhu práce o absolventov PhD. štúdia.

V októbri 2008 sa uskutočnila pravidelne organizovaná Súťaž vedeckých prác mladých pracovníkov na pôde ÚACH SAV. Na súťaži sa zúčastnilo 9 mladých pracovníkov a doktorandov nášho ústavu. Komisia udelila prvé miesto Mgr. A. Čeklovskému, druhé miesto Ing. F. Šimkovi, PhD., a tretie miesto Ing. M. Korenkovi, PhD. Konštatovala, že príspevky mali veľmi vysokú úroveň a to v kvalite vedeckých výsledkov aj v úrovni ich prezentácie. Dvaja reprezentanti z ÚACH sa neskôr zúčastnili podobnej súťaže organizovanej na našom partnerskom pracovisku v Řeži u Prahy (ÚACH AV ČR), kde dôstojne reprezentovali náš ústav.

V roku 2008 sa traja pracovníci z ÚACH Mgr. S. Andrejkovičová, PhD., RNDr. J. Hrachová, PhD. a Mgr. S. Kedžuch, PhD. úspešne uchádzali o finančný príspevok z Podporného fondu Štefana Schwarza na vytváranie postdoktorandských miest v SAV.

Na ÚACH naďalej vyvíja činnosť Snem mladých vedeckých pracovníkov ako poradný orgán riaditeľa ústavu, ktorý združuje doktorandov a pracovníkov s VŠ vzdelaním do 35 rokov. Ich reprezentantka Mgr. A. Czimerová, PhD. je členkou vedenia ústavu. Jej prostredníctvom majú členovia snemu možnosť aktívne sa podieľať na chode ústavu a zapájať sa aj do aktivít, ktoré priamo nesúvisia iba s doktorandským štúdiom.

IV. Medzinárodná vedecká spolupráca**1. Medzinárodné projekty****Tabuľka IV.1: Informácie o medzinárodných projektoch**

DRUH PROJEKTU	Počet projektov		Pridelené financie na rok 2008 zo zahraničných zdrojov (prepočítané na Sk)		Pridelené financie na rok 2008 z domácich zdrojov (Sk)	
	A Organizácia je nositeľom projektu *	B Organizácia sa podieľa na riešení projektu	A	B	A	B
1. Projekty 6. rámcového programu EÚ (neuvádzať projekty ukončené pred r. 2008)	0	2	-	449 265	-	355 000
2. Projekty 7. rámcového programu EÚ	0	0	-	-	-	-
3. Multilaterálne projekty v rámci vedeckých programov COST, INTAS, EUREKA, ESPIRIT, PHARE, NATO, UNESCO, CERN, IAEA, ESF (European Science Foundation) a iné	1	0	150 837	-	46 000	-
4. Projekty financované v rámci medzivládnych dohôd o vedeckotechnickej spolupráci (Grécko, ČR, Nemecko a iné)	2	0	48 070	-	-	-
5. Bilaterálne projekty	4	0	-	-	-	-
6. Iné projekty financované alebo spolufinancované zo zahraničných zdrojov	0	0	-	-	-	-

* Koordinátor alebo analogicky ako pri tabuľke II. 1.

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

0/7

Údaje k projektom spracovať v *Prílohe č. 2*.

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

Krátkodobé pobyty pracovníkov ústavu zamerané na riešenie projektov

Bujdák Juraj

- National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japonsko, 7.2.-17.3. 2008. Hlavnou náplňou práce bola príprava optických materiálov, tenkých filmov, na báze vrstevnatých anorganických látok a organických farbív. Študovali sa javy prenosu energie medzi rhodamínovým a oxazínovým farbivom. Aktívna účasť na pracovnom seminári „Workshop on layered materials“. Práca sa týkala problematik projektov APVV 027405 a VEGA 6180/27.
- Katedra analytickej chémie PrF UK a Ústav fyzikálnej chémie J. Heyrovského AVČR, Praha, Česká republika, 20. - 21.5. 2008. Súčasťou krátkej pracovnej cesty bolo stretnutie so zahraničným spoluriešiteľom projektu APVV 027405 Ing. K. Langom, plánovanie a riešenie vedeckých problémov projektu, návšteva uvedených pracovísk a meranie vzoriek pomocou fluorescenčnej mikroskopie.
- Ústav polymérov Bulharskej akadémie vied, Sofia, Bulharsko, 18. - 22.8. 2008. Náplňou cesty bolo zahájenie spoločného bilaterálneho projektu v rámci MAD a zároveň projektu APVV 027405. Na pracovisku sme vybrali a charakterizovali fluorescenčné látky, ktoré sú predmetom ďalšieho spoločného výskumu.
- Katedra chemickej fyziky, Universidad del País Vasco v Bilbao, Bilbao, Španielsko, 23. - 27.6. 2008. Pomocou najmodernejších spektrálnych metód sa nám podarilo charakterizovať kinetiku a anizotropiu viacstupňového prenosu energie medzi neekvivalentnými molekulami farbív interkalovaných v anorganickom nosiči. Práca riešila úlohy projektu APVV 027405.
- Institute of General, Inorganic and Theoretical Chemistry, University of Innsbruck, Innsbruck, Rakúsko, 1.10. – 18.10. 2008. Náplňou experimentálnej práce bolo štúdium vplyvu niektorých kationov kovov na adsorpciu aminokyselín na povrch montmorillonitu. Analýza systému bola zameraná na štúdium kompetitívnej adsorpcii jednotlivých stereoizomérov. Zároveň sme pokračovali v riešení problematiky charakterizácie hybridných materiálov ílových minerálov modifikovaných pomocou polyelektrolytov na báze oligopeptidov. Práca sa čiastočne týkala problematik projektov APVV 027405 a VEGA 6180/27.
- National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japonsko, 1. - 28.11. 2008. Náplňou cesty bola experimentálna práca spoločného bilaterálneho projektu v rámci MAD. Náplňou experimentálnej práce bola príprava filmov nanokompozitu fluorescenčného polyméru s organoílmí, prenos energie z matrice polyméru na častice organoílu, príprava filmov vrstevnatých kremičitanov a fluorescenčné vlastnosti gélov organoílov s adsorbovanými farbivami v xyléne. Práca náplňou nadväzovala na riešenie problémov projektu APVV 027405.

Czímerová Adriana

- National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japonsko, 1. 11.2008. - 28.11. 2008. Práca na báze bilaterálnej spolupráce so skupinou Dr. Nobua Iyi na základe MAD a úloh projektu APVV 027405. Príprava filmov nanokompozitu fluorescenčného polyméru s organoílmí, prenos energie z matrice polyméru na častice organoílu, príprava filmov vrstevnatých kremičitanov pomocou LBL (layer-by-layer assemblies) metódy a riadený prenos energie medzi vrstvami.

Čeklovský Alexander

- Institute of Polymers, Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, Bulharsko, 18. 8. – 22. 8. 2008. Práca na báze bilaterálnej spolupráce s Prof. Ivom Grabchevom na základe MAD dohody.

Zahájenie spoločného projektu. Výber a charakterizácia fluorescenčných látok pre nasledujúci výskum. Seminár prednášok Dr. Juraja Bujdáka a Prof. Iva Grabcheva.

- National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japonsko, 1. 11. - 28. 11. 2008. Práca na báze bilaterálnej spolupráce so skupinou Dr. Nobua Iyiho na základe MAD dohody a úloh projektu APVV 027405. Príprava a charakterizácia hybridných materiálov pozostávajúcich z anorganických nosičov a organických farbív. Fotochemické vlastnosti systémov vrstevnatých kremičitanov s porfyrínovými farbivami. Interakcia porfyrínových farbív s organoími.

Hrobárik Peter

- Institute of Inorganic Chemistry, Julius-Maximilians University, Würzburg, Nemecko, 29.02.2008 - 18. 03.2008. Spolupráca s Prof. M. Kauppom na projekte "Relativistic two-component calculations of electronic g-tensor for oxo-molybdenum(V) and oxo-tungsten(V) complexes". Všetky náklady spojené s cestou hradila pozývajúca strana.
- Institute for Molecules and Materials, Nijmegen, Holandsko, 1.11 - 21.11.2008. Spolupráca s Prof. Alan E. Rowan na projekte: Molecular engineering of novel phthalocyanine-based dyes with high first and second hyperpolarizabilities. Pobyt bol čiastočne financovaný z prostriedkov VEGA-2/6182/27 a APVV-0625-06

Jankovič Ľuboš

- University of Illinois, Natural Resources & Environmental Sciences, Urbana, USA, 15.11 - 15.12.2008. Experimentálna práca na téme: „Interkalácia organických kationov do medzivrstvia nontronitov s redukovaným štruktúrnym železom“. Pobyt bol financovaný z prostriedkov APVV 51-050505.

Komadel Peter

- Faculty of Mining, Geology and Petroleum Engineering, University of Zagreb, Chorvátsko, 08. – 11. 12. 2008. Účelom cesty bolo prednesenie troch prednášok pre študentov a zamestnancov fakulty. Náklady na pobyt boli čiastočne hradené pozývateľom a čiastočne z projektu APVV-VVCE 0033-07.

Komorovský Stanislav

- University of Wuerzburg, Nemecko, 3.08 - 23.08.2008, . Spolupráca na spoločnom projekte so skupinou Prof. Kauppa na vývoji programu ReSpec (Rozšírenie programového balíka ReSpec (MAG-mDKS-RMB - „indirect spin-spin coupling“). Práca na článku. Pobyt bol financovaný z prostriedkov FUNMIG (6RP).
- University of Wuerzburg, Nemecko, 13.11 – 29.11.2008, .Spolupráca na spoločnom projekte so skupinou Prof. Kauppa na vývoji programu ReSpec (Rozšírenie programového balíka ReSpec použitím analytických integrálov). Pobyt bol financovaný z prostriedkov FUMNIG (6RP).

Madejová Jana

- Institute of Catalysis and Surface Chemistry, Polish Academy of Sciences, Krakow, Poľsko, 6.4.-18.4. 2008. Pobyt sa uskutočnil v rámci spolupráce na projekte 6 RP: Transfer of knowledge in design of porous catalysts. (TOK-CATA). Objektom výskumu bola syntéza mezopórovitých materiálov na báze ílových minerálov (porous clay heterostructures -PCH), pripravených z organických derivátov laponitu a smektitov. Náklady na celý pobyt boli hradené z prostriedkov projektu TOK-CATA.
- Institute of Catalysis and Surface Chemistry Polish Academy of Sciences, Krakow, Poľsko, 02.06. – 12.06.2008 Pobyt bol realizovaný v rámci riešenia projektu 6 RP TOK-CATA. Boli

vyhodnotené experimentálne výsledky a pripravili sa podklady pre dve publikácie. Všetky náklady spojené s pobytom hradil pozývateľ.

Malkin Vladimír

- Institute of Catalysis and Surface Chemistry Polish Academy of Sciences, Krakow, Poľsko, 31.03 – 20.04.2008. Spolupráca s Prof. Ewa Broclawik v rámci projektu TOK-CATA (Transfer of Knowledge in Design of Porous Catalysts, TOK-CATA). Všetky náklady spojené s cestou hradila pozývajúca strana.
- Institute of Catalysis and Surface Chemistry Polish Academy of Sciences, Krakow, Poľsko, 8.07 – 18.07.2008. Spolupráca s Prof. Ewa Broclawik v rámci projektu TOK-CATA (Transfer of Knowledge in Design of Porous Catalysts, TOK-CATA). Zorganizovali sme aj workshop na univerzite (Jagiellonian university): „Theoretical prediction and interpretation of NMR and EPR parameters“. Všetky náklady (okrem vreckového a cestovného) spojené s cestou hradila pozývajúca strana.
- Institute of Catalysis and Surface Chemistry Polish Academy of Sciences, Krakow, Poľsko, 28.09 – 04.10.2008. Spolupráca s Prof. Ewa Broclawik v rámci projektu TOK-CATA (Transfer of Knowledge in Design of Porous Catalysts, TOK-CATA). Všetky náklady (okrem vreckového a cestovného) spojené s cestou hradila pozývajúca strana.
- University of Wuerzburg, Nemcko, 3.08 - 16.08.2008. Spolupráca na spoločnom projekte so skupinou Prof. Kauppa na vývoji programu ReSpect („Further development of relativistic DFT methods for calculation and interpretation of the magnetic resonance (NMR and EPR) parameters“). Pobyt bol financovaný z prostriedkov APVV 625-06 a FUNMIG.
- University of Wuerzburg, Nemecko, 13.11 – 29.11.2008. Spolupráca na spoločnom projekte so skupinou Prof. Kauppa na vývoji programu ReSpect („Further development of relativistic DFT methods for calculation and interpretation of the magnetic resonance (NMR and EPR) parameters“). Pobyt bol financovaný z prostriedkov APVV 625-06 a FUNMIG

Malkin Olga

- Institute of Catalysis and Surface Chemistry Polish Academy of Sciences, Krakow, Poľsko, 8.07 – 18.07.2008. Spolupráca s Prof. Ewa Broclawik v rámci projektu TOK-CATA (Transfer of Knowledge in Design of Porous Catalysts, TOK-CATA). Zorganizovali sme aj workshop na univerzite (Jagiellonian university): „Theoretical prediction and interpretation of NMR and EPR parameters“.
- University of Wuerzburg, Germany, 3.08 - 16.08.2008. Spolupráca na spoločnom projekte so skupinou Prof. Kauppa na vývoji programu ReSpect („Further development of relativistic DFT methods for calculation and interpretation of the magnetic resonance (NMR and EPR) parameters“). Pobyt bol financovaný z prostriedkov VVCE-0004-07.
- University of Wuerzburg, Germany, 13.11 – 29.11.2008. Spolupráca na spoločnom projekte so skupinou Prof. Kauppa na vývoji programu ReSpect („Further development of relativistic DFT methods for calculation and interpretation of the magnetic resonance (NMR and EPR) parameters“). Pobyt bol financovaný z prostriedkov VEGA-2/6182/27.

Noga Jozef

- Quantum Theory Project, University of Florida, Gainesville, FL, hradené pozývateľom, 1. 3. – 15. 3. Počas pobytu v QTP na pozvanie Prof. Bartletta sa opätovne rozbehla spolupráca v oblasti výpočtov so zahrnutím elektrónovej korelácie. V prvej fáze vyústi do spoločného článku o ab initio funkcionáli hustoty determinovanom z explicitne korelovaných vlnových funkcií.

Pálková Helena

- UMR-CNRS, University de Poitiers, Francúzsko, 1. 1. 2008 – 31. 1. 2008. Hlavnou úlohou projektu bola syntéza ílového minerálu hectoritu pri teplotách 75 a 90 °C. Pobyt bol financovaný francúzskou stranou.
- Institute of Catalysis and Surface Chemistry, Polish Academy of Sciences, Krakow, Poľsko, 6.4.-27.4. 2008. Pobyt sa uskutočnil v rámci medziakademickej spolupráce (MAD) medzi Ústavom anorganickej chémie SAV a Ústavom katalýzy a fyzikálnej chémie povrchov Poľskej akadémie vied v Krakowe. Náplňou práce bolo uskutočnenie experimentov zahrnutých v spoločnom projekte „Novel porous materials based on layered silicates“. Pobyt bol čiastočne financovaný z prostriedkov VEGA 2/6177/27.
- Institute of Catalysis and Surface Chemistry, Polish Academy of Sciences, Krakow, Poľsko, 02.06. – 12.06.2008. Náplňou práce bolo vyhodnotenie experimentov projekte „Novel porous materials based on layered silicates“. Pobyt bol financovaný poľským partnerom.
- UMR-CNRS, University de Poitiers, Francúzsko, 1. 10. 2008 – 21. 12. 2008. Náplňou projektu bola syntéza ílového minerálu hectoritu pri teplotách 150°C a stanovenie distribučných koeficientov Li/Mg. Pobyt sa uskutočnil v rámci projektu „PROGRAMME RÉGIONAL DE BOURSES DE CHERCHEUR INVITÉ“ a bol financovaný regionálnou správou pre oblasť Poitou-Charentes.

Repiský Michal

- University of Wuerzburg, Nemecko, 3.08 - 23.08.2008. Spolupráca na spoločnom projekte so skupinou Prof. Kauppa na vývoji programu ReSpect („Further development of relativistic DFT methods for calculation and interpretation of the magnetic resonance (NMR and EPR) parameters“). Pobyt bol financovaný z prostriedkov FUNMIG (6RP). Práca na článku.
- University of Wuerzburg, Nemecko, 13.11 – 29.11.2008. Spolupráca na spoločnom projekte so skupinou Prof. Kauppa na vývoji programu ReSpect („Further development of relativistic DFT methods for calculation and interpretation of the magnetic resonance (NMR and EPR) parameters“). Pobyt bol financovaný z prostriedkov VVCE-0004-07.

Scholtzová Eva

- Chalmers University of Technology, Gottenburg, Švédsko, 21.4.-1.5.2008. Pobyt sa uskutočnil v rámci projektov APVV 51-050505 a VEGA 6178. Cieľom pobytu boli monokryštalové difrakčné a spektroskopické experimenty jednak na organických látkach s rôznymi vodíkovými väzbami a jednak na rôznych interkalovaných vermikulitoch.

Smrčok Ľubomír

- Chalmers University of Technology, Gottenburg, Švédsko, 21.4.-1.5.2008. Pobyt sa uskutočnil v rámci projektov APVV 51-050505 a VEGA 6178. Cieľom pobytu boli monokryštalové difrakčné a spektroskopické experimenty jednak na organických látkach s rôznymi vodíkovými väzbami a jednak na rôznych interkalovaných vermikulitoch.

Šimko František

- CNRS-CEMHTI, Orléans, Francúzsko, 21-26.4.2008 a 16-25.11.2008. Pobyt sa uskutočnili v rámci bilaterálneho projektu „Štefánik“ č. SK-FR-0013-07. V oboch prípadoch bola náplňou práce charakterizácia binárnych sústav na báze RbF pomocou viacjadrovej vysokoteplotnej NMR spektroskopie. Použila sa aj MAS NMR spektroskopia na charakterizáciu zlúčenín RbF a LiRbF₂.

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

(viac ako 3 mesiace)

Derzsi Mariana

- Ústav jadrovej fyziky, Poľská akadémia vied, Krakow, Poľsko, 01/2008 – 12/2008. Štúdium vlastností minerálov na báze železa pri vysokých tlakoch a teplotách pomocou ab initio metód.

Hrachová Jana

- Výskumný pobyt na MERI (Materials and Engineering Research Institute) na Sheffield Hallam University v Sheffielde, Veľká Británia, pod vedením Prof. Christophera Breena, 01.04.2008 – 31.07.2008. Výskum bol zameraný na charakterizáciu prírodných a modifikovaných ílov viacerými fyzikálno-chemickými metódami (TA, TA-MS, XRD, Raman, SEM, analýza povrchov).

Hric Ľubomír

- Technische Universität Darmstadt, Nemecko 09/2008 – 12/2008, dlhodobý pobyt v rámci Programm des Projektbezogenen Personenaustauschs. Príprava kompozitov na báze SiOC-SiC z polymérnych prekursorov.

Matúš Milko

- University of Leoben, Leoben, Rakúsko, 03.2007 – 01.2010, dlhodobý pobyt v Ústave fyziky materiálov, výpočty optických vlastností nanotrubíček

Petrušková Viera

- Technische Universität Darmstadt, Nemecko 09/2008 – 12/2008, dlhodobý pobyt v rámci Programm des Projektbezogenen Personenaustauschs. Príprava kompozitov na báze SiOC-Si₃N₄ a SiOC-SiC z polymérnych prekursorov.

Sedláček Jaroslav

- University of Karlsruhe, Karlsruhe, Nemecko, 09/2006–09/2008, dlhodobý pobyt ako štipendista v rámci 6RP, podprogram Mária Currie Fellowship, Nr.: 25284, ALSICOM. Aplikovaný výskum v oblasti prípravy nanokompozitov Al₂O₃-SiC s mikroštruktúrou tvorenou perkolujúcimi fázami oxidu hlinitého a karbidu kremičitého z polymérnych prekursorov. Použitie kvapalného organokovového polymérneho prekursora umožnilo použitie netradičných foriem prípravy keramických kompozitov viacnásobnou infiltráciou pórovitej korundovej keramiky. Študoval sa vplyv jednotlivých procesných parametrov na výsledné mechanické vlastnosti, hustotu, veľkosť častíc a fázové zloženie keramických nanokompozitov.

Pozvané prednášky pracovníkov ústavu na zahraničnom pracovisku

(mimo medzinárodných konferencií)

Bujdák Juraj

„Hybrid materials based on organic dyes embedded in layered inorganic compounds. Phenomena and potential applications“, Workshop on layered materials. National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japonsko, 11.3. 2008.

Komadel Peter

„Chemistry and properties of clay minerals – smectites“, 9.12.2008

„Spectroscopic evidence of chemical composition and changes in clay minerals“, 10.12.2008

„*Manipulation of layer charge of smectites*“, 11.12.2008

Faculty of Mining, Geology and Petroleum Engineering, University of Zagreb, Chorvátsko.

Madejová Jana

„*Near infrared spectroscopy in studies of modified smectites*“, Institute of Catalysis and Surface Chemistry Polish Academy of Sciences, Krakow, Poľsko, 10.6.2008

Malkin Vladimír

„*Introduction in the theory of calculations of NMR and EPR parameters*“

„*Relativistic calculations of NMR and EPR parameters*“

„*Theoretical prediction and interpretation of NMR and EPR parameters*“

Institute of Catalysis and Surface Chemistry Polish Academy of Sciences Niezapominajek Str. 8, 30-239 and Jagiellonian university, Krakow, Poland, 31.03 – 20.04.2008.

Noga Jozef

„*Towards high precision calculations of molecular energies and properties via explicitly correlated coupled cluster theory*“

a) Indian Association for the Cultivation of Science, Kolkata, 13. 1. 2008

b) National Chemical Laboratory, Pune, 17. 1. 2008

Noga Jozef

„*Basic aspects of the Explicitly Correlated Coupled Cluster Theory*“, vyžiadaná séria troch prednášok, Center for Computational Quantum Chemistry, University of Georgia, Athens, GA, USA, 27. 2. – 29. 2. 2008

Pálková Helena

„*Experimental measurement of Li/Mg partitioning between clay and solution during hectorite synthesis*“, UMR-CNRS, University de Poitiers, Francúzsko, 3.12.2008

Petrušková Viera

„*Corrosion of Si_3N_4 and Al_2O_3 ceramics in different melting media*“, Technische Universität Darmstadt, Fachbereich material- und Geowissenschaften, Germany, 10.11.2008.

Prednášky zahraničných pracovníkov, ktorí navštívili ÚACH SAV

Prednášky zorganizované počas pobytu japonských vedcov, ktorí pricestovali na základe MAD - bilateralny japonsko slovenský projekt medzi SAV a Japan Society for the Promotion of Science.

Nobuo Iyi,

„*Preparation of Self-standing Layered Double Hydroxide (LDH) Films and Other Recent Topics on LDHs*“ 21.10. 2008

National Institute for Materials Science, Tsukuba, Japonsko

Ryo Sasai

„*Preparation of Luminous Dye/Layered Material Hybrid Solid Materials with High Emission Quantum Yield and Its Environmental Response Ability*“ 21.10. 2008

Nagoya University, Japonsko

Shinsuke Takagi

„*The Effects of Porphyrin Structure on the Complex Formation Behavior with Clay*“ 21.10. 2008

Tokyo Metropolitan University, Japonsko

Jun Kawamata

"Clay/Organic Hybrid Composites as Nonlinear Optical Materials" 21.10. 2008
Yamaguchi University, Japonsko

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

Drábik Milan

European Association for Chemical and Molecular Sciences (EuCheMS) (funkcia: člen v divízii anorganická chémia)
International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) (funkcia: affiliate member v divízii II (anorganická chémia))

Galusek Dušan

American Ceramic Society (funkcia: člen)
European Society on Glass Science and Technology (funkcia: tajomník)

Komadel Peter

AIPEA (funkcia člen výboru)
The Clay Minerals Society, (funkcia: člen)

Lenčéš Zoltán

American Ceramic Society (funkcia: člen)
Ceramic Society of Japan (funkcia: člen)
European Ceramic Society (funkcia: člen)
Materials Research Society (funkcia: člen)

Malkin Vladimir

World Association of Theoretical and Computational Chemists (funkcia: člen)

Noga Jozef

World Association of Theoretical and Computational Chemists (funkcia: člen)

Šajgalík Pavol

American Ceramic Society (funkcia: člen)
Ceramic Society of Japan (funkcia: člen)
Council of the European Ceramic Society (funkcia: člen)
International Ceramic Federation (funkcia: člen predstavenstva)
Materials Research Society (funkcia: člen)
World Academy of Ceramics (funkcia: volený člen)

Členstvo v redakčných radách časopisov v zahraničí

Drábik Milan

Central European Journal of Chemistry (funkcia: conference editor, hosťovský príspevok k edičnému spracovaniu rukopisov a publikácií odvodených od prezentácií na konferencii SSC 2008)
Pure and Applied Chemistry (funkcia: conference editor, hosťovský príspevok k edičnému spracovaniu rukopisov a publikácií odvodených od prezentácií na konferencii SSC 2008)

Komadel Peter

Applied Clay Science (funkcia: člen)

Clay Minerals (funkcia: člen)
Clays and Clay Minerals (funkcia: associate editor)

Liška Marek

Ceramics - Silikáty (funkcia: člen)
European Journal of Glass Science and Technology (funkcia: regional editor)
Journal of Thermal Analysis and Calorimetry (funkcia: associate editor)
Sklár a keramik (funkcia: člen)

Šajgalík Pavol

Ceramics-Silikáty (funkcia: člen)
Key Engineering Materials (funkcia: člen International Advisory Board)
Processing and Application of Ceramics (funkcia: člen)

Počet pracovníkov v programových a organizačných výboroch medzinárodných konferencií

Organizačné výbory:

Počet členstiev: 13

Názov podujatia: 9th Conference of the European Society on Glass Science and Technology and the Annual Meeting of the International Commission on Glass

Miesto konania: Trenčín

Liška Marek

Funkcia: **predseda** vedeckého výboru konferencie

Galusek Dušan, Šajgalík Pavol

Funkcia: členovia org. výboru

Názov podujatia: Solid State Chemistry 2008

Miesto konania: Bratislava

Komadel Peter

Funkcia: **predseda** organizačného výboru

Boča Miroslav, Drábik Milan, Galusek Dušan, Korenko Michal, Scholtzová Eva, Šajgalík Pavol, Valúchová Jana

Funkcia: členovia org. výboru

Názov podujatia: Česká a slovenská sklárska konferencia

Miesto konania: Luhačovice

Liška Marek

Funkcia: člen

Názov podujatia: 50. medzinárodná galvanická konferencia

Miesto konania: Smolenice

Korenko Michal

Funkcia: člen

Programové/organizačné výbory:

Počet členstiev: 9

Boča Miroslav, Bujdák Juraj

Názov podujatia: 1st Nanomaterials and Nanotechnology Meeting in Ostrava, 1.-4. 9. 2008
Ostrava, ČR
Funkcia: členovia

Drábik Milan

Názov podujatia: 2nd ICC (2. medzinárodný kongres o keramike)
Miesto konania: Verona, Taliansko
Funkcia: člen

Komadel Peter, Madejová Jana

Názov podujatia: MECC 2008, Zakopané, Poľsko, September 22.-27.9.2008
Funkcia: členovia

Šajgalík Pavol

Názov podujatia: 1st Symposium on Advanced Synthesis and Processing for Materials (ASPM08)

Miesto konania: Wuhan, China

Funkcia: člen

Názov podujatia: 4th International Workshop on Spinel Nitrides and Related Materials

Miesto konania: Ruedesheim/Rhine, Germany

Funkcia: člen

Názov podujatia: 9th International Symposium on Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Applications

Miesto konania: Shanghai, China

Funkcia: člen

Názov podujatia: International Symposium on New Frontier of Advanced Si-Based Ceramics and Composites (ISASC-2008)

Miesto konania: Jeju Island, Korea

Funkcia: člen

Účasť expertov na hodnotení projektov RP, ESF, prípadne iných

Noga Jozef

OTKA/H

- počet hodnotených projektov vo výzve: 1

Medzinárodné ocenenia a iné informácie k medzinárodnej vedeckej spolupráci

V. Vedná politika

(štúdie, legislatívne iniciatívy a pod., neopakovať v kap. VIII.)

ÚACH má v rámci svojho Dlhodobého strategického rozvojového plánu v oblasti vedy a techniky stanovené aj vecné priority rozvoja vedy a techniky na svojej pôde. Základná štruktúra cieľov je nasledovná:

1. Zapájanie sa do komplexných aktivít budovania interdisciplinárnych kompetenčných centier a monotematických centier excelentnosti
2. Medzinárodná vedecko-technická spolupráca vo výskume a vývoji ako nástroj na zvyšovanie

kvality a potenciálu vedy a techniky

3. Orientácia na perspektívne oblasti vedy a techniky vo väzbe na medzinárodné trendy a/alebo potreby odberateľskej praxe
4. Transfer poznatkov a technológií do praxe
5. Budovanie infraštruktúry - vytváranie lepších podmienok pre výskum a vývoj.
6. Prepájanie jednotlivých oblastí tzv. vedomostného trojuholníka - špičkové vzdelávanie - excelentný výskum - inovácie
7. Zlepšovanie postavenia vedy a vedcov v spoločnosti.

Pri svojich koncepčných rozvojových zámeroch kladie ÚACH SAV maximálny dôraz nielen na ich súlad so základnými celoštátnymi dokumentmi, a stratégiami a predpismi na úrovni EÚ, ale súčasne za svoju prioritu považuje svoj jedinečný vklad a príspevok v oblasti regionálneho rozvoja. Vyššie uvedené prioritné oblasti sú v plnom súlade s Dlhodobým zámerom rozvoja štátnej vednej a technickej politiky SR do roku 2015, základným smerovaním a cieľmi Operačného programu Výskum a vývoj, Operačného programu Vzdelávanie, Modernizačného programu Slovensko 21 ako aj medzinárodnými trendmi v oblasti výskumu a vývoja - vrátane priorit 7. RP EÚ pre výskum a vývoj.

Pre splnenie dlhodobého zámeru a napĺňanie vyššie uvedených cieľov, ktoré sú v súlade s požiadavkami spoločensko-hospodárskej praxe, je potrebná výrazná inovácia a modernizácia vedecko-výskumnej infraštruktúry organizácie, vrátane podpory ľudských zdrojov. Prostriedky na tieto aktivity treba získať z mimorozpočtových zdrojov.

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

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

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

ÚACH SAV spolupracuje s viacerými fakultami slovenských univerzít predovšetkým formou spoločne riešených projektov, využívaním prísprojev v rámci spoločných pracovísk (pozri III. 5.), prostredníctvom výchovy doktorandov a prostredníctvom pedagogickej činnosti (pozri Prílohu 4). Spolupracuje aj s vysokými školami v ČR a rámcovú dohodu má uzavretú aj s AGH v Krakowe. Najviac rozšírená je spolupráca s týmito vysokoškolskými pracoviskami:

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 spoločné projekty VEGA (1/3578/06 a 2/6181/26), APVV (0171-06) 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 je ústav zapojený do spoločného Centra excelentnosti SAV (COMCHEM) a do výskumno-vzdelávacieho centra excelentnosti APVV (VVCE-0004-07). Intenzívne sa využíva prístrojové vybavenie spoločných pracovísk (pozri III. 5.). Zamestnanci ústavu pravidelne vedú diplomantov z niekoľkých oddelení fakulty a doktorandi ústavu vyučujú na fakulte. Prof. Ing. Pavel Fellner, DrSc. je externým členom Vedeckej rady ÚACH SAV.

Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského v Bratislave

V spolupráci s touto fakultou je ústav zapojený do spoločného Centra excelentnosti SAV (COMCHEM), do výskumno-vzdelávacieho centra excelentnosti APVV (VVCE-0033-07).

Spoločne sa riešia projekty VEGA (2/6180/26), APVV (P SAV II/1/2007), ESF (JDP 3 2004/4-058). V spolupráci s touto fakultou sa intenzívne využíva prístrojové vybavenie spoločných pracovísk (pozri III. 5.). Prof. RNDr. J. Noga, DrSc. má hlavný úväzok 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 spoločné APVV projekty s Elektrotechnickou fakultou (APVV-0448-06), so Strojníckou fakultou (APVV-0517-07) a s Fakultou riadenia a informatiky (P SAV II/1/2007).

Fakulta chemická VUT Brno, ČR

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 2008 pokračuje v doktorandskom štúdiu na ÚACH už tretí absolvent tejto fakulty, ktorý sa zároveň zúčastňuje na riešení aktuálnych APVV projektov ústavu.

Fakulta metalurgie a materiálového inžénrství Vysoká škola báňská, TU Ostrava, ČR

V roku 2008 bola uzatvorená rámcová zmluva o spolupráci, predmetom ktorej je predovšetkým výmena informácií, prednášková a pedagogická činnosť ako aj spoločná účasť na riešení medzinárodných vedecko-výskumných projektoch. Prof. RNDr. P. Šajgalík, DrSc. je členom Vedeckej rady FMML.

The AGH University of Science and technology, Krakow, Poľsko

Oficiálna rámcová zmluva o spolupráci bola uzatvorená v roku 2007.

Členstvo vo vedeckých radách VŠ a fakúlt je spracované v Tabuľke III.7

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

PORFIX - pórobetón, a.s., 972 43 Zemianske Kostol'any; vedecko-technická spolupráca na riešení projektu "Dlhodobé sledovanie pórobetónu vyrobeného z fluidného popolčeka" so zámerom aplikovať výsledky základného výskumu pórobetónu pre možnosti využitia netradičných surovín pri inováciách potenciálu jeho výroby. Cieľom riešenia v priebehu roku 2008 bolo preveriť predpoklady o trvanlivosti a rýchlosti vysychania pórobetónu vyrobeného z fluidného popolčeka z ENO a na základe získaných výsledkov z dlhodobých experimentov o trvanlivosti vzoriek pripraviť predbežný návrh na technologický predpis na výrobu pórobetónu z fluidného popolčeka. Riešenie pokračuje v roku 2009.

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

4. Spoločné pracoviská s VŠ, univerzitami

Sklárske centrum kompetencie VILA (Vitrum Laugaritio): V roku 2008 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 a aplikovaného výskumu v oblastiach súvisiacich so sklom ako materiálom, jeho výrobou a zušľacht'ovaním, a základný a aplikovaný výskum v oblasti pokročilých oxidových keramických a sklokeramických materiálov. Pracovníci centra sa podieľajú na pedagogickej činnosti v rámci vysokoškolského štúdia v odbore "Chemická technológia skla a špeciálnych keramických materiálov" a doktorandského štúdia v odbore "Anorganická technológia a materiály", ako aj na výučbe predmetu Technická chémia na Fakulte špeciálnej techniky TnU AD. Pracovníci VILA školili v roku 2008 6

diplomantov TnU AD, viedli viacero bakalárskych projektov a školili v rámci TnU AD 4 doktorandov, z ktorých 3 ukončili štúdium úspešnou obhajobou dizertačnej práce.

Spoločne s TnU AD sa riešili dva projekty VEGA (2/6181/26 a 1/3578/06), projekt APVV 0171-06 a projekt aplikovaného výskumu AV 4/0025/07. V roku 2008 získal ÚACH SAV v spolupráci s TnU AD spoločný grant na riešenie projektu AV zameraného na vývoj sklenených varných nádob pre indukčný ohrev. Priamym výstupom spolupráce je viacero spoločných publikácií a príspevkov na domácich aj zahraničných konferenciách.

V roku 2008 sa podarilo posunúť spoluprácu s VŠ v rámci VILA na kvalitatívne vyššiu úroveň, keď vstupom **FCHPT STU ako štvrtého rovnocenného zriaďovateľa VILA** došlo k priamej participácii najsilnejšieho subjektu v oblasti výskumu a vzdelávania v chémii a chemickej technológii na Slovensku.

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 a pre pedagogické účely. Vedecké výsledky získané využitím tohto prístroja boli v roku 2008 predmetom viacerých spoločných publikácií a prednášok na 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. V novembri 2008 bol z prostriedkov projektu APVV-VVCE (zod. riešiteľ P. Komadel) zakúpený nový FTIR spektrometer Nicolet 6700 s príslušenstvom, na ktorý čiastočne prispeje v roku 2009 aj jeden z partnerov – CHÚ. Prístroj inštalovaný v priestoroch spoločného pracoviska FTIR výrazne zvýši kapacitu pracoviska a vďaka vybaveniu spektrometra prídavnými zariadeniami aj rozšíri možnosti merania IČ spektier o nové techniky.

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

1. Spoločné pracoviská s aplikačnou sférou

Názov, partner(i), rok založenia, zameranie

Názov: Sklárske centrum kompetencie VILA (Vitrum Laugaritio)

Partneri: RONA a.s., Lednické Rovne, TnU AD, FCHPT STU

Rok založenia: 2004

Zameranie: stimulácia a rozvoj základného a aplikovaného výskumu v oblastiach súvisiacich so sklom ako materiálom, jeho výrobou a zušľachtovaním, a základný a aplikovaný výskum v oblasti pokročilých oxidových keramických a sklokeramických materiálov.

2. Spoločné multilaterálne alebo bilaterálne projekty s účasťou organizácií aplikačnej sféry

Názov, partner(i), obdobie riešenia, zameranie

Názov: NATO SfP 981770, Light weight transparent armours,

Partner: Saint Gobain Advanced Ceramics Turnov, Česká republika

Obdobie riešenia: 03/2006-03/2009

Zameranie: vývoj transparentných pancierov so zníženou hmotnosťou a zvýšenou balistickou odolnosťou voči malokalibrovým protipancierovým strelám

Názov: Projekt APVV 51-050505, Organické modifikácie prírodných nanomateriálov

Partner: Envigeo s.r.o., Banská Bystrica

Obdobie riešenia: 05/2006 - 04/2009

Zameranie: Základný výskum organicky-modifikovaných prírodných nanomateriálov pripravených zo slovenských bentonitov a iných ílových minerálov je zameraný ich využitie pri ochrane životného prostredia a na prípravu polymér/íl-nanokompozitov.

Názov: Projekt APVV-0448-06, Keramické progresívne materiály foto-termicko-mechanickej konverznej sústavy solárneho tepelného motora na báze parného cyklu

Partner: GoldenSUN Slovakia, s.r.o., Liptovský Mikuláš

Obdobie riešenia: 01/02/2007-31/12/2009

Zameranie: Navrh optimálneho materiálového zloženia, konštrukčného tvaru a technológie výroby funkčných keramických kapilárno-poréznych telies absorbéra a regenerátora. Súčasťou projektu je návrh a realizácia skúšobného zariadenia na účely vykonávania skúšok chemicko-fyzikálnych a funkčných vlastností keramických telies absorbéra a regenerátora v reálnych podmienkach konverzných procesov.

Názov: Projekt APVV-0517-07, Mikrokogeneračná jednotka založená na báze biomasy

Partner: GoldenSUN Slovakia, s.r.o., Liptovský Mikuláš

Obdobie riešenia: 01/09/2008-31/12/2010

Zameranie: Riešenie mikrokogeneračného spôsobu konverzie chemicky viazanej energie tuhej biomasy na elektrickú energiu a nízko-potenciálne teplo na báze Clausiusovho-Rankinovho tepelného obehu s využitím patentovaného princípu impulznej generácie pary a regenerácie tepla v pracovnom priestore motora s externým spaľovaním.

3. Kontraktový - zmluvný výskum (vrátane zahraničných kontraktov)

Spolupracujúca firma, objem získaných prostriedkov v danom roku (finančné objemy, ktoré v danom roku prišli na účet organizácie), celková dĺžka kontraktu

Spolupracujúca firma: RHI AG, Technology Center, Standort Leoben, Austria; Montan Universität, Leoben, Austria

Objem získaných prostriedkov v danom roku (finančné objemy, ktoré v danom roku prišli na účet organizácie) 207 463,-Sk

Celková dĺžka kontraktu: 2008-2010

4. Krátkodobé spolupráce s finančným efektom, celková suma prostriedkov, ktoré v danom roku prišli na účet organizácie, zoznam spolupracujúcich firiem, zameranie spolupráce

5. Vývoj nových produktov a technológií

6. Iná činnosť potenciálne využiteľná pre potreby praxe (napr. biomedicínsky, farmaceutický výskum a výskum ekologického charakteru, činnosť s nepriamymi hospodárskymi prínosmi)

7. Najdôležitejšie výsledky spoluprác s aplikačnou sférou (text max. 20 riadkov)

- RONA a.s.: spolupráca na vývoji zariadenia na meranie a mapovanie zvyškových pnutí v kusových sklárskych výrobkoch.

- Považská cementáreň Ladce, a.s.: Potvrdenie využiteľnosti najrozšírenejšieho typu cementu (portlandského) v kombinácii s polyfosforečnanmi pre syntézy kvalitných kompozitných hydraulických materiálov bez makrodefektov (MDF materiálov).
- Montan Universität Leoben a Technology Center, Standort Leoben: Projekt vedecko-technickej spolupráce: V spolupráci s riešiteľskými partnermi boli pripravené a modifikované materiály na báze SiAlON, MgAlON a AlON pre aplikácie do bežných žiaruvzdorných materiálov. Skúmali sa ich fyzikálnochemické a mechanické vlastnosti a podľa výsledkov bolo následne modifikované chemické zloženie ďalších zmesí.

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 zboroch vlády SR, Národnej rady SR, ministerstiev SR a pod.

Bujdák Juraj:

Úrad pre verejné obstarávanie pre námietky pri verejnom obstarávaní (funkcia: externý člen komisie Úradu pre verejné obstarávanie pre námietky pri verejnom obstarávaní)

Galusek Dušan:

Ministerstvo obrany Slovenskej republiky (funkcia: národný expert SR v European Defense Agency)

Úrad pre verejné obstarávanie pre námietky pri verejnom obstarávaní (funkcia: externý člen komisie Úradu pre verejné obstarávanie pre námietky pri verejnom obstarávaní)

Noga Jozef:

Akreditačná komisia SR (funkcia: člen pracovnej skupiny pre oblasť výskumu Chémia, chemická technológia a biotechnológie)

Šajgalík Pavol:

Komisia ministra školstva pre udeľovanie Ceny ministra školstva (funkcia: člen)

Expertízna činnosť a iné služby pre štátnu správu a samosprávu

Boča Miroslav:

Konzultácia pre Kriminalistický a expertízny ústav Policajného zboru

Opis činnosti: S Kriminalistickým a expertíznym ústavom PZ sa konzultovali možnosti analýzy neznámej substancie a hľadali sa riešenia na určenie jej čistoty

Bujdák Juraj

Spoluautor úloh Chemickej olympiády v kategórii B

Kedžuch Stanislav

Spoluautor úloh Chemickej olympiády v kategórii F a člen krajskej komisie CHO

Členstvo v radách štátnych programov a podprogramov ŠPVV a ŠO

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

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

Počet príspevkov v knižných publikáciách: 6

Počet prednášok: 3

Počet príspevkov v tlači: 2

Počet vystúpení v rádiách: 4

Počet televíznych vystúpení: 1

Príspevky v knižných publikáciách:

Galusek Dušan: Sklo okolo nás

Kapitola v knižnej publikácii M. Balog, M. Tatarko a kol.: Odhalené tajomstvá chémie, s. 373 – 391. VEDA, Vydavateľstvo SAV, Bratislava, 2007, (vyšlo 2008) ISBN 978-80-224-0957-5:

Bujdák Juraj, C. Igaz, J. Kmeťová, M. Lichvárová, M. Melicherčík, I. Nagzová, M. Prokša, M. Putala:

Súťažné úlohy chemickej olympiády v kategórii B, Chemické rozhľady 2/2008, IUVENTA, Bratislava, ISSN 1335 - 8391

Kedžuch Stanislav, A. Boháč, B. Lakatoš, A. Ďuricová, M. Putala, M. Gánovská, J. Reguli, K. Jesenák, M. Sališová, A. Sirota, A. Kicková, P. Tarapčík, E. Kulichová:

Súťažné úlohy chemickej olympiády v kategórii F, Chemické rozhľady, IUVENTA, Bratislava, ISSN 1335 - 8391, 2008

Boča, Miroslav: Roztavené soli a taveniny ako také – popoluška v priemysle. In: Rozprávanie o materiáloch a technológiach. Ústav materiálov a mechaniky strojov, Bratislava (2008). – Bratislava: Ústav materiálov a mechaniky strojov, p. 25-34. ISBN 978-80-970027

Korenko, Michal: Nekonenčné aplikácie roztavených anorganických solí. In: Rozprávanie o materiáloch a technológiach. Ústav materiálov a mechaniky strojov, Bratislava (2008). – Bratislava: Ústav materiálov a mechaniky strojov, p. 35-46. ISBN 978-80-970027

Šajgalík, Pavol – Hnatko, Miroslav – Lojanová Štefánia: Keramika – ako ju nepoznáme. In: Rozprávanie o materiáloch a technológiach. Ústav materiálov a mechaniky strojov, Bratislava (2008). – Bratislava: Ústav materiálov a mechaniky strojov, p. 158-176. ISBN 978-80-970027

Prednášky

Balkovic Svetozár, Drábik Milan

Workshop projektu ESF (JDP 3 2004/4-058): Technologické postupy spracovania prírodných nanomateriálov a ich význam v priemyslových aplikáciách: „Macro - Defect - Free" materiály - výzva pre chémiu a technológiu?, Turčianske Teplice, 5 – 7. 5. 2008

Drábik Milan, Balkovic Svetozár

Workshop projektu ESF (JDP 3 2004/4-058): Technologické postupy spracovania prírodných nanomateriálov a ich význam v priemyslových aplikáciách: „Síranové poškodenie betónov a mált“
Turčianske Teplice, 5 – 7. 5. 2008

Drábik Milan

Organizácia série prednášok "Chemické horizonty" v spolupráci so Slovenskou chemickou spoločnosťou (8 prednášok), Prednášky sa konajú na zamestnávateľských inštitúciách prednášateľov (SAV, FCHPT STU, PRIF UK), 2008

Príspevky v tlači

Boča Miroslav, Kubíková Blanka

Kde kovy vznikajú zo solí, Quark č. 12, 2008

Šimko František

Správanie sa nečistôt v priemyselných kyslých elektrolytoch na výrobu hliníka, ENSAV
Expertforum - Elektronické noviny Slovenskej akadémie vied (SAV) a Journaliste-Studia (J/S) č. 5, 2008

Vystúpenia v rádiách

Šajgalík Pavol

Príbeh na týždeň "Ako vzniká objav", Rozhlasová stanica Slovensko, Týždeň vedy a techniky, 24. 11. - 28. 11. 2008

Šajgalík Pavol

Rozhovor "Návšteva v laboratóriách Ústavu anorganickej chémie", Rozhlasová stanica Slovensko, relácia Dobré ráno, Slovensko, 06. 01. 2008

Šajgalík Pavol

Rozhovor "O vývoji keramickej hlavy solárneho motora", Rozhlasová stanica Slovensko, relácia Popoludnie na Slovensku, 09. 10. 2008

Šajgalík Pavol

Rozhovor "Progresívne keramické materiály pre extrémne podmienky", Hospodárske noviny č. 5/2008, 27. 11. 2008

Vystúpenie v televízii

Boča Miroslav

Rozhovor "Slovenská akadémia vied oslavuje", Slovenská televízia, relácia Správy STV, 18. 06. 2008

Iné popopularizačné aktivity

Noc výskumníkov v Bratislave, AUPARK Bratislava, 26. - 27. 09. 2008

P. Šajgalík, Š. Lojanová, F. Frajkorová, L. Kipsová, M. Michalková, M. Hnatková, M. Hnatko, J. Sedláček, Ľ. Hric, Z. Lenčoš

Deň otvorených dverí ÚACH

Dňa 25.11.2008 sa uskutočnil deň otvorených dverí Ústavu anorganickej chémie. Vo vestibule budovy Chemického ústavu SAV náš pracovník privítal jednotlivé skupiny návštevníkov, ktorý ich oboznámil s tým, čo ich čaká na exkurzii po ÚACH. Osemčlenné skupinky si v jednotlivých oddeleniach vypočuli aj odborný výklad s ukážkou experimentálnych zariadení (vysokoteplotné zariadenia pre prípravu keramických materiálov, RTG, DTA, SEM, IČ a iné pracoviská). Potom si

záujemcovia mohli vypočítať originálne hlasy významných vedcov (J. J. Thomson, E. Fermi, A. Einstein, E. Rutherford a iní). Počas celého dňa sa na dvoch miestach premietala videoslučka, ktorá obsahovala prezentácie našich priemyselných partnerov a niektorých zaujímavých vedeckých výstupov. K tomu mali návštevníci možnosť prezrieť si množstvo posterov, ktoré prezentovali ústav na rôznych podujatiach (konferencie, výstavy...). Veľkú pozornosť pútala najmä výstavka predmetov predstavujúcich finálne produkty, ktoré mohli vzniknúť na základe nášho výskumu (umelé kĺby, rezné nástroje ...).

Vzhľadom na výraznú prevahu návštevníkov zo stredných škôl sme študentom v dvoch blokoch ukázali efektne experimenty, ktoré mali priblížiť krásu anorganickej chémie, ale s upozornením na nutnosť určitej dávky opatrnosti. Okrem dojmov a poznatkov si návštevníci mohli odnieť materiály týkajúce sa Ústavu anorganickej chémie – najnovšie vedecké publikácie z každého oddelenia a rôzne propagačné materiály.

Celé podujatie mohlo byť organizované vďaka finančnému príspevku P SAV vo výške 10000 SK.

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

a) zahraničné

The 8th Conference on Solid State Chemistry - SSC 2008 06.07.-11.07.2008, Bratislava, Slovensko, 209 účastníkov

Tieto konferencie sa organizujú od r. 2002 pravidelne každé dva roky striedavo v Prahe (2004, 2010), Pardubiciach (2006) a Bratislave (2002, 2008) Program konferencie bol rozdelený do 7 sekcií: 1. Synthesis and Characterization of Materials, 2. Crystal, Electronic & Magnetic Structure, 3. Electrochemistry and Molten Systems, 4. Chemistry of Glasses, 5. Novel Inorganic Materials and Nanomaterials, 6. Layered Compounds, Clathrates and Intercalates, 7. Deposited Films and Surface Chemistry. Účastníci predniesli 18 pozvaných prednášok, 73 ďalších prednášok a prezentovali 146 posterov. Podľa vyjadrení účastníkov konferencia mala všestranne veľmi vydarený priebeh.

9th ESG Conference and the Annual Meeting of the ICG 22.07.-26.07.2008, Trenčín, Slovensko

Konferenciu zorganizovala Slovenská sklárska spoločnosť v spolupráci s Českou sklárskou spoločnosťou pod záštitou International Commission on Glass. Spoluorganizátori boli ÚACh SAV, TnU AD, sklárň RONA a.s. Lednické Rovne a mesto Trenčín. Hlavnú tému konferencie vyjadroval jej podnázov „Sklo – výzva pre 21. storočie“. Konferencie sa zúčastnilo 280 odborníkov z 32 krajín zo všetkých kontinentov, ktorí predniesli 91 prednášok a prezentovali 80 posterov. Zborník konferencie editovali M. Liška, D. Galusek, R. Klement z Centra kompetencie pre výskum skla VILA a V. Petrušková z ÚACh SAV. Zborník vyšiel ako 39. a 40. zväzok série Advanced Materials Research vydávanej vydavateľstvom TransTech.

Workshop on Calculation and Interpretation of NMR and EPR Parameters – 15.07-16.07.2008, Jagiellonian University, Krakow, Poľsko, 29 účastníkov

Vladimír Malkin DrSc. a Oľga Malkin, DrSc. zorganizovali tento workshop na chemickej fakulte Jagiellonskej Univerzity pre študentov 2. stupňa, 3. stupňa (doktorandov) a pre učiteľov tejto univerzity. Program sa týkal troch základných tém: 1. Teória výpočtov NMR a EPR parametrov, 2. Zahŕňanie relativistických efektov a vplyvu matrice do výpočtov, 3. Metódy interpretácie teoretických výsledkov. Workshop pozostával z prednášok, zoznamovania sa s kvantovo-chemickými programovacími balíkmi deMon a ReSpect a z praktických cvičení so spomínanými programami.

b) domáce

Seminár o analýze materiálov pomocou termickej analýzy a kalorimetrie s kinetickým vyhodnotením dát 10.04.2008, ÚACH SAV, Bratislava, Slovensko,

Na seminári boli odprezentované prednášky na témy týkajúce sa vyhodnocovania výsledkov kalorimetrických meraní pomocou softvéru AKTS, a zhodnotenia riešenia vysokoteplotnej termickej analýzy pre výskum keramických a kovových materiálov. Seminár bol ukončený praktickou ukážkou zariadení.

3. Medzinárodné vedecké podujatia, ktoré usporiada ústav v r. 2009 (anglický a slovenský názov podujatia, miesto a termín konania, meno, telefónne číslo a e-mail zodpovedného pracovníka).

4. Počet pracovníkov v programových a organizačných výboroch národných konferencií

Organizačné výbory: 2

Boča Miroslav, Kubíková Blanka

Názov podujatia: Seminár o analýze materiálov pomocou termickej analýzy a kalorimetrie s kinetickým vyhodnotením dát

Miesto konania: Bratislava

Funkcia: členovia

5. Členstvo v redakčných radách domácich časopisov

Boča Miroslav

Chemical Papers (funkcia: Associate editor pre anorganickú chémiu)

Komadel Peter

Geologica Carpathica (funkcia: člen)

6. Činnosť v domácich vedeckých spoločnostiach

• Humboldtov klub v SR

Členovia

Malkin Vladimír, Noga Jozef, Šajgalík Pavol

• Slovenská akademická spoločnosť

Noga Jozef, člen

• Slovenská chemická spoločnosť

Drábik Milan

podpredseda Predsedníctva SCHS od r. 2007

Korenko Michal

predseda Odbornej skupiny anorganická chémia

Komadel Peter

člen výboru Odbornej skupiny anorganická chémia

Členovia spoločnosti:

Balkovic Svetozár, Boča Miroslav, Kedžuch Stanislav, Kubíková Blanka, Kucharík Marián, Netriová Zuzana, Scholtzová Eva, Šimko František

- **Slovenská ílová spoločnosť**

Komadel Peter

predseda spoločnosti do 30. 09.2008, **člen výboru** od 01.10.2008

Madejová Jana

člen výboru do 01.10.2008, **predseda spoločnosti** od 01.10.2008

Členovia spoločnosti:

Andrejkovičová Slávka, Bujdák Juraj, Czímerová Adriana, Čeklovský Alexander, Hrachová Jana, Jankovič Ľuboš, Pálková Helena Pentrák Martin, Valúchová Jana

- **Slovenská silikátová vedecko-technická spoločnosť**

Šajgalík Pavol

predseda spoločnosti

Lenčéš Zoltán

člen výboru

Členovia spoločnosti:

Drábik Milan, Galusek Dušan, Korenko Michal, Sedláček Jaroslav, Hnatko Miroslav, Lojanová Štefánia, Jurová Anna, Kipsová Linda

- **Slovenská sklárska spoločnosť**

Liška Marek

podpredseda spoločnosti

Galusek Dušan

člen predstavenstva, vedecký tajomník

Šajgalík Pavol

člen predstavenstva

Členovia spoločnosti:

Chromčíková Mária, Karell Radovan, Švančárek Peter

- **Česká sklárska spoločnosť**

Liška Marek

člen výboru

Členovia spoločnosti:

Chromčíková Mária, Karell Radovan,

- **Slovenská nukleárna spoločnosť**

Korenko Michal, člen

- **Slovenská spoločnosť pre povrchové úpravy**

Korenko Michal, člen

7. Účasť na výstavách a jej zhodnotenie

Názov výstavy: Noc výskumníkov v Bratislave

Miesto konania: AUPARK, Bratislava

Zhodnotenie: Oddelenie keramiky sa zúčastnilo na akcii poriadanej spoločnosťou NEULOGY v spolupráci s P SAV pod názvom NOC VÝSKUMNÍKA, ktorá sa uskutočnila 26. a 27.09.2008. O vystavované exponáty z ÚACH SAV, model solárneho motora a nepriestrelné vesty pre osobnú ochranu, bol pomerne veľký záujem u laickej verejnosti. Exponát z ÚACH SAV sa dostal aj na titulnú stranu októbrového čísla SPRÁV SAV

Názov výstavy: NATO R&T day exhibition**Miesto konania:** NATO HQ Brusel

Zhodnotenie: Predstavenie odbornej verejnosti a administratíve NATO prototypu transparentného panciera so zvýšenou odolnosťou voči protipancierovým malokalibrovým strelám vyvinutého v spolupráci s partnermi z Českej republiky, Ruskej federácie a Ukrajiny v rámci projektu NATO SfP 98 17 70 „Light weight and transparent armours“

X. Činnosť knižnično-informačného pracoviska**Tabuľka X.1: Knižničný fond**

Knižničné jednotky spolu		7370
z toho	knihy a zviazané periodiká	7370
	audiovizuálne dokumenty	
	elektronické dokumenty (vrátane digitálnych)	
	mikroformy	
	iné špeciálne dokumenty - dizertácie, výskumné správy	
Počet titulov dochádzajúcich periodík		8
z toho zahraničné periodiká		6
Ročný prírastok knižničných jednotiek		19
v tom	kúpou	19
	darom	
	výmenou	
	bezodplatným prevodom	
Úbytky knižničných jednotiek		
Knižničné jednotky spracované automatizovane		

Tabuľka X.2: Výpožičky a služby

Výpožičky spolu		140
z toho	odborná literatúra pre dospelých	
	výpožičky periodík	60
	prezenčné výpožičky	
MVS iným knižniciam		
MVS z iných knižníc		
MMVS iným knižniciam		
MMVS z iných knižníc		80
Počet vypracovaných bibliografií		
Počet vypracovaných rešerší		

Tabuľka X.3: Používatelia

Registrovaní používatelia	
Návštevníci knižnice spolu (bez návštevníkov podujatí)	200

Tabuľka X.4: Iné údaje

On-line katalóg knižnice na internete (kódy: 1=áno, 0=nie)	0
Náklady na nákup knižničného fondu v tisícoch Sk	60

XI. Aktivity v orgánoch SAV

Členstvo vo výbore Snemu SAV

Členstvo v komisiách Predsedníctva SAV

Milan Drábik

- Komisia pre duševné vlastníctvo (patenty a autorské práva) (člen komisie)

Jozef Noga

- Akreditačná komisia SAV (člen komisie)

Pavol Šajgalík

- Rada SAV pre vzdelávanie a vedeckú výchovu (člen)

Členstvo v orgánoch VEGA

Dušan Galusek

- VEGA č. 7 pre strojárstvo a príbuzné odbory informačných a komunikačných technológií a materiálové inžinierstvo (člen)

Marek Liška

- VEGA č.3 pre chemické vedy, chemické inžinierstvo a biotechnológie (člen)

Jana Madejová

- VEGA č. 3 pre chemické vedy, chemické inžinierstvo a biotechnológie (člen)

Vladimír Malkin

- VEGA č.3 pre chemické vedy, chemické inžinierstvo a biotechnológie (člen)

Členstvo vo vedeckých kolégiách SAV

Peter Komadel

- VK SAV pre chemické vedy (člen)
- VK SAV pre elektroniku, materiálový výskum a technológie (člen)

Jozef Noga

- VK SAV pre chemické vedy (predseda)

Pavol Šajgalík

- VK SAV pre chemické vedy (člen)

XII. Hospodárenie organizácie**1. Rozpočtová/príspevková organizácia SAV****Tabuľka XI.1: Výdavky RO SAV (v tis. Sk)**

Kategória	Posledný upravený rozpočet r. 2008	Čerpanie k 31.12.2008 celkom	z toho:	
			z rozpočtu	z mimoroz. zdrojov
Výdavky celkom	31 603	50 135	31 603	18 532
z toho:				
- kapitálové výdavky	559	3 126	559	2 567
- bežné výdavky	31 044	47 009	31 044	15 965
z toho:				
- mzdové výdavky	19 660*	20 941	19 660	1 281
odvody do poisťovní a NÚP	6 235	6 680	6 234	446
- tovary a ďalšie služby	5 149	19 388	5 150	14 236
z toho:				
výdavky na projekty (VEGA, APVV, ŠPVV, MVTP, ESF)	3 082	19 687	6 234	16 605
výdavky na periodickú tlač	0	0	0	0
transfery na vedeckú výchovu	1 388	1388	1 388	0
suma odvedená pre spoluriešiteľské organizácie na hradenie nákladov spoločných projektov	0	4 849	0	4 849

* vrátane štipendií doktorandov

Tabuľka XI.2: Príjmy RO SAV (v tis. Sk)

Kategória	Posledný upravený rozpočet r. 2008	Plnenie k 31.12.2008
Príjmy celkom:	395	18 927
z toho:		
rozpočtované príjmy (účet 19)	395	395
z toho:		
- príjmy za nájomné	300	300
mimorozpočtové príjmy (účet 780)		18 532

XIII. Nadácie a fondy pri organizácii

XIV. Iné významné činnosti organizácie

Ústav v roku 2008 bol súčasťou Technologického inštitútu SAV (TI). Opodstatnenosť existencie a potreba koordinácie činnosti všetkých zúčastnených inštitúcií v rámci TI sa ukázala ako mimoriadne efektívna najmä pri získavaní projektov z Štrukturálnych fondov EÚ napriek tomu, že Technologický inštitút sa priamo nemohol zúčastniť vyhlásenej výzvy 4.1 "Podpora sietí excelentných pracovísk výskumu a vývoja ako pilierov rozvoja regiónu v Bratislavskom kraji". Pripravenosť TI predkladať a implementovať projekty ŠF v budúcnosti môže byť veľkou výhodou. Prostredníctvom TI je do riešenia troch projektov ŠF zapojených 10 inštitúcií z I. a II. Oddelenia vied SAV.

XV. Vyznamenania, ocenenia a ceny udelené pracovníkom organizácie v roku 2008

Domáce ocenenia

Ocenenia SAV

Cena SAV za rok 2008 za súbor vedeckovýskumných prác v oblasti fyzikálno-chemických vlastností taveninových sústav

Oceňovateľ: Predsedníctvo SAV

Členovia oceneného kolektívu: Boča Miroslav (vedúci kolektívu), Korenko Michal, Kubíková Blanka, Kucharík Marián, Šimko František

Cena SAV za rok 2008 za príspevok k výskumu a vývoju progresívnych keramických materiálov

Oceňovateľ: Vedecká rada SAV

Opis: cena bola udelená kolektívu pracovníkov oddelenia keramiky ÚACH v zložení: Pavol Šajgalík, Zoltán Lenčoš, Miroslav Hnatko, Dušan Galusek, Jaroslav Sedláček

Iné domáce ocenenia

Cena podpredsedu vlády a ministra školstva SR za vedu a techniku za rok 2008, v kategórii vedecko-technický tím roka

Oceňovateľ: Ministerstvo školstva SR

Opis: cena bola udelená kolektívu pracovníkov Centra kompetencie skla - Vitrum Laugaricio, spoločnému pracovisku Trenčianskej univerzity A. Dubčeka, Ústavu anorganickej chémie SAV a akciovej spoločnosti RONA za vynikajúce výsledky dosiahnuté pri prenose poznatkov základného výskumu do priemyselnej praxe a ich uplatnení pri výchove doktorandov.

Vedúci kolektívu: Galusek Dušan

Členovia oceneného kolektívu: Chovanec Jozef, Chromčíková Mária, Karel Radovan, Liška Marek, Sedláček Jaroslav, Švančárek Peter

Hrobárik Peter

Študentská osobnosť roka

Oceňovateľ: Junior Chamber International

Opis: Národná súťaž mladých talentovaných ľudí pod záštitou prezidenta republiky Ivana Gašparoviča, s podporou Slovenskej rektorskej konferencie a pod odbornou garanciou SAV

Hrobárik Peter

Hlava roka 2008 – celonárodná súťaž na podporu slovenskej vedy a techniky

Cena za najlepšiu prácu začínajúcemu vedcovi alebo doktorandovi za projekt Aplikácia kvantovo-chemických metód pri štúdiu biologicky významných komplexov kovov a vývoji nových materiálov pre moderné konštrukcie.

Medzinárodné ocenenia

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

Už prvý kontakt z administráciou projektov Štrukturálnych fondov naznačuje, že manažment projektov tohto typu bude mimoriadne náročný. Bude pravdepodobne ešte komplikovanejší ako to bolo pri projektoch Európskeho sociálneho fondu, kde sú skúsenosti ústavov SAV v prevládajúcej miere negatívne. P SAV by sa mohlo pokúsiť vytvoriť finančné, lobistické, konzultačné a iné mechanizmy vo vzťahu k Agentúre ASFEU, ktoré by pomohli odbúrať administratívne bariéry a prispeli k hladšiemu toku financií z Agentúry k riešiteľom projektov.

V roku 2009 je naplánované veľké množstvo výziev ŠF EÚ. Komplikovaná a časovo náročná agenda spojená s prípravou projektov, súčasne s náročnou implementáciou už schválených projektov bude mať bezpochyby negatívny vplyv na vedeckú výkonnosť organizácií zapojených do riešenia projektov ŠF ako aj na účasť pracovísk SAV vo výzvach 7. RP EÚ. Je preto potrebné, aby sa P SAV zaoberalo možnosťami minimalizácie dopadov týchto aktivít na výkonnosť SAV ako celku.

Správu o činnosti organizácie SAV spracovala:

RNDr. Jana Madejová, DrSc.

Prílohy**Príloha č. 1****Menný zoznam pracovníkov k 31.12.2008**

Meno s titulmi		Úväzok (v %)	Riešiteľská kapacita (v hod/rok)
Vedúci vedeckí pracovníci DrSc.			
1.	RNDr. Peter Komadel, DrSc.	100	2000
2.	prof. Ing. Marek Liška, DrSc.	45	900
3.	RNDr. Jana Madejová, DrSc.	100	2000
4.	Dr. Oľga Malkin, DrSc.	100	2000
5.	Dr. Vladimír Malkin, DrSc.	100	2000
6.	prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.	53	1060
7.	prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc.	100	2000
Samostatní vedeckí pracovníci			
1.	Ing. Ľubomír Benco, CSc.	10	200
2.	Ing. Miroslav Boča, PhD.	100	2000
3.	RNDr. Juraj Bujdák, PhD.	100	2000
4.	RNDr. Milan Drábik, CSc.	100	2000
5.	doc. Ing. Dušan Galusek, PhD.	100	2000
6.	Ing. Miroslav Hnatko, PhD.	100	2000
7.	Ing. Štefan Kavecký, CSc.	33	660
8.	Ing. Ladislav Kosa, CSc.	70	1400
9.	Ing. Zoltán Lenčేశ, PhD.	100	2000
10.	doc. Ing. Pavel Mach, CSc.	25	500
11.	Ing. Ivan Nerád, CSc.	100	2000
12.	Ing. Eva Scholtzová, CSc.	100	2000
13.	RNDr. Ľubomír Smrček, CSc.	100	2000
14.	Ing. Daniel Tunega, CSc.	10	200
Vedeckí pracovníci			
1.	Mgr. Slávka Andrejkovičová, PhD.	100	2000
2.	Ing. Svetozár Balkovic, CSc.	100	2000
3.	Mgr. Adriana Czimerová, PhD.	100	2000
4.	Mgr. Mariana Derzsi, PhD.	100	0
5.	Ing. Katarína Ghillányová, PhD.	50	1000

6.	RNDr. Jana Hrachová, PhD.	100	2000
7.	Mgr. Ľubomír Hric, PhD.	100	2000
8.	Mgr. Peter Hrobárik, PhD.	100	2000
9.	Ing. Mária Chromčíková, PhD.	100	2000
10.	Mgr. Ľuboš Jankovič, PhD.	100	2000
11.	Mgr. Stanislav Kedžuch, PhD.	100	2000
12.	Ing. Michal Korenko, PhD.	100	2000
13.	Ing. Blanka Kubíková, PhD.	100	2000
14.	Ing. Marián Kucharík, PhD.	100	1830
15.	Ing. Matúš Milko, PhD.	100	0
16.	Ing. Jarmila Mlynáriková, PhD.	100	0
17.	Ing. Zuzana Netriová, PhD.	100	2000
18.	Ing. Helena Pálková, PhD.	100	2000
19.	Ing. Martin Pentrák, PhD.	100	2000
20.	Ing. Viera Petrušková, PhD.	100	2000
21.	Ing. Jaroslav Sedláček, PhD.	100	660
22.	Ing. František Šimko, PhD.	100	2000
23.	Mgr. Peter Švančárek, PhD.	100	2000
24.	Ing. Jana Valúchová, PhD.	100	2000
25.	Ing. Štefan Varga, CSc.	100	2000

Odborní pracovníci s VŠ vzdelaním

1.	Mgr. Alexander Čeklovský	100	2000
2.	prom.farm. Ľubica Gáliková	100	2000
3.	RNDr. Klára Hrnčiarová	40	800
4.	Ing. Radovan Karell	100	2000
5.	Mgr. Stanislav Komorovský	100	2000
6.	Ing. Judita Lilová	75	0
7.	Ing. Štefánia Lojanová	100	2000
8.	Ing. Iveta Macková	100	2000
9.	Ing. Eva Mikšíková	100	2000
10.	Ing. Ján Piško	100	0
11.	Ing. Tomáš Plachký	100	2000
12.	Ing. Jozef Priščák	100	2000
13.	Mgr. Michal Repiský	100	2000
14.	RNDr. Roman Vasiljev	100	2000

Odborní pracovníci ÚSV			
1.	Miroslav Baďura	20	0
2.	Iveta Bouadjenak	100	0
3.	Jaromíra Dankovičová	100	0
4.	Jarmila Heinleinová	100	2000
5.	Miriám Hnatková	100	2000
6.	Anna Jurová	100	2000
7.	Zdena Kapišinská	100	0
8.	Magdaléna Kňazovičová	100	2000
9.	Anna Kovárová	100	0
10.	Zora Lukáčová	100	2000
11.	Zuzana Rosíková	100	2000
12.	Jozef Sitár	100	0
13.	Alexandra Tonkovičová	100	0
Ostatní pracovníci			
1.	Ján Maraffko	100	0
2.	Dana Matejkinová	100	0
3.	Terézia Pírová	100	0
Doktorandské štúdium			
1.	Ing. Františka Frajkorová	100	2000
2.	Ing. Jozef Chovanec	100	2000
3.	Ing. Linda Kipsová	100	2000
4.	Ing. Monika Micháľková	100	2000

Pozn.: Pri každom mene uviesť tituly, úväzok v % a riešiteľskú kapacitu v hod/rok.

Príloha č. 2

Projekty riešené na pracovisku

MEDZINÁRODNÉ PROJEKTY

Programy: 6RP

1.) Základné procesy migrácie rádionuklidov (*Fundamental processes of radionuclide migration*)

Zodpovedný riešiteľ:	Vladimír Malkin
Trvanie projektu:	1.1.2005 / 31.12.2008
Evidenčné číslo projektu:	FP6-516514
Organizácia je koordinátorom projektu:	nie
Koordinátor:	Dr. G. Dr. G. Buckau, Institute for Nuclear Waste Disposal, Research Center Karlsruhe, Nemecko
Počet spoluriešiteľských inštitúcií:	51 - Belgicko: 3, Cyprus: 4, Česko: 2, Nemecko: 6, Dánsko: 2, Španielsko: 7, Fínsko: 3, Francúzsko: 6, Veľká Británia: 2, Maďarsko: 4, Švajčiarsko: 2, Holandsko: 4, Rumunsko: 2, Švédsko: 4
Finančné zabezpečenie:	SAV – 123 000 Sk

Dosiahnuté výsledky:

Nami vyvinuté metódy na výpočet chemických posunov na ligandoch atómov v zlúčeninách s ťažkými prvkami sme testovali na komplexoch lantanoidov/aktinoidov. Teoretické výsledky sú vo výbornom súlade s experimentom. Takisto, sme vyvinuli a implementovali novú relativistickú metódu na výpočet konštánt spin-spinového spriahnutia.

Dosiahnuté výsledky sú v práci uvedenej v zozname v prílohe 3 - ADCA22 a v prijatej publikácii:

REPISKÝ, Michal – KOMOROVSKÝ, Stanislav – MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír.

Restricted magnetically balanced basis applied for relativistic calculations of indirect nuclear spin-spin coupling tensors in the matrix Dirac-Kohn-Sham framework. In Chemical Physics, 2008, doi:10.1016/j.chemphys.2008.10.037

2.) Multifunkčná nanokeramika pripravená z polymérov s vopred určenými vlastnosťami (*Tailored Multifunctional Polymer-derived nanoCeramics*)

Zodpovedný riešiteľ:	Pavol Šajgalík
Trvanie projektu:	1.1.2006 / 31.12.2009
Evidenčné číslo projektu:	MRTN-CT-2005-019601
Organizácia je koordinátorom projektu:	nie
Koordinátor:	Chimie de la Matiere Condensée (UMR 7574) Université Pierre et Marie Curie - Paris 6, Dr. Florence BABONNEAU
Počet spoluriešiteľských inštitúcií:	12 - Nemecko: 5, Francúzsko: 3, Taliansko: 2, Rumunsko: 2
Finančné zabezpečenie:	EU - 449265 Sk, SAV - 232000 Sk

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ABC02, ADEB01, ADEB02

Programy: Medziakademická dohoda (MAD)

3.) Anizotropné tenké filmy hybridných materiálov organických farbív a vrstevnatých kremičitanov s luminiscenčnými vlastnosťami (*Anisotropic fluorescent thin films based on organic dyes embedded in layered inorganics*)

Zodpovedný riešiteľ: Juraj Bujdák
Trvanie projektu: 1.4.2008 / 31.3.2010
Evidenčné číslo projektu:
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 4 - Japonsko: 4
Finančné zabezpečenie:

Dosiahnuté výsledky:

V prvom roku riešenia projektu boli práce zamerané na pilotné experimenty testujúce vhodnosť rôznych metód a postupov prípravy fotochemicky aktívnych hybridných filmov na báze anorganického nosiča a organických farbív. Sľubnými sa ukázali niektoré metódy chemickej predmodifikácie nosiča, ako aj metódy prípravy definovaných filmov tzv. metódou „layer-by-layer“.

4.) Nové pórovité materiály na báze vrstevnatých silikátov (*Novel porous materials based on layered silicates*)

Zodpovedný riešiteľ: Jana Madejová
Trvanie projektu: 1.1.2007 / 31.12.2009
Evidenčné číslo projektu: 14
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 1 - Poľsko: 1
Finančné zabezpečenie:

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo AFG32, AFHA15

Za účelom zmapovania elektrónovej štruktúry Zn-porfyrínu sa počítala NBO analýza. Okrem toho bol vytvorený periodický model interakcie Zn-porfyrínu s povrchom tetraédrickej vrstvy vrstevnatého silikátu ako prvý odhad ukotvenia Zn-porfyrínu v kavite PCH.

Programy: Medzivládna dohoda

5.) Charakteristika a mechanické vlastnosti SiCO keramiky (*Characterisation and mechanical properties of SiCO ceramics*)

Zodpovedný riešiteľ: Pavol Šajgalík
Trvanie projektu: 1.1.2007 / 31.12.2008
Evidenčné číslo projektu: 2
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV

Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 2 - Nemecko: 2

Finančné zabezpečenie:

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ABC02, AEC04

6.) Štúdium roztavených fluoridových sústav zaujímavých pre chladiace systémy v pokročilých vysokoteplotných reaktoroch. (*Experimental study of molten fluoride salts as coolants in Advanced High Temperature Reactors.*)

Zodpovedný riešiteľ: František Šimko
Trvanie projektu: 1.2.2008 / 31.12.2009
Evidenčné číslo projektu: SK – FR - 0013 – 07
Organizácia je koordinátorom projektu: áno
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 1 - Francúzsko: 1
Finančné zabezpečenie: APVV – 48 070 Sk

Dosiahnuté výsledky:

Projekt je zameraný na špecifikáciu iónovej štruktúry fluoridových tavenín, ktoré môžu byť využité ako vysoko-teplotné chladiace médiá pre pokročilé jadrové reaktory na báze roztavených solí (Advanced High Temperature Reactor - AHTR). V prvom roku projektu sa uskutočnili vysokoteplotné ^{19}F , ^{85}Rb , ^{23}Na a ^{39}K NMR merania binárnych sústav LiF-RbF , NaF-RbF , KF-RbF , LiF-KF , LiF-NaF v celom koncentračnom rozmedzí, pri teplotách od $750\text{ }^{\circ}\text{C}$ do $1000\text{ }^{\circ}\text{C}$. Pri všetkých skúmaných sústavách sa pozorovala lineárna závislosť chemického posunu izotopu ^{19}F v závislosti od zloženia sústavy. Pri meraniach vo sústavách s obsahom RbF sa pozoroval lineárny vzrast hodnôt ^{85}Rb chemického posunu v závislosti od zloženia sústavy. Tento nárast pokračoval až po hodnoty eutektických bodov jednotlivých sústav. Od tohto zloženia vykazovali hodnoty ^{85}Rb chemického posunu konštantné hodnoty. Vznik takýchto závislostí môžeme vysvetliť tvorbou dlhotrvajúcich asociatívnych štruktúrnych konfigurácií v tavenine. V ďalších experimentoch sa nám ako prvým podarilo namerať spektrá ^{39}K izotopu pri vysokej teplote. Doteraz neboli publikované žiadne takéto ^{39}K vysokoteplotné NMR údaje, z dôvodu veľmi nízkej ^{39}K „larmor“ frekvencie. Taktiež sa uskutočnila syntéza LiRbF_2 , ktorá vzniká ako inkongruentne sa topiaca zlúčenina v binárnej sústave LiF-RbF . Pripravená vzorka, ako aj čistý RbF , sa podrobili kvalitatívnej analýze pomocou ^{19}F (spin-1/2) a ^{85}Rb (spin-3/2) magic angle spinning (MAS) NMR spektroskopie pri vysokom magnetickom poli (17,6 T). Získané výsledky budú podkladom pre vznik publikácie(i), ako aj pre účasť na vybraných konferenciách.

Programy: NATO

7.) Transparentné panciere s nízkou hmotnosťou (*Light weight and transparent armours*)

Zodpovedný riešiteľ: Dušan Galusek
Trvanie projektu: 1.3.2006 / 31.3.2009
Evidenčné číslo projektu: NATO SfP 981770
Organizácia je koordinátorom projektu: áno
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 3 - Česko: 1, Rusko: 1, Ukrajina: 1

inštitúcií:

Finančné zabezpečenie: SAV - 46000 Sk, NATO - 150837 Sk

Dosiahnuté výsledky:

V spolupráci s českou firmou Saint Gobain Advanced Ceramics Turnov bol vyvinutý vrstvený transparentný pancier, ktorý pri hrúbke 40 mm a pri približne 50 % úspore hmotnosti poskytuje rovnakú mieru balistickej ochrany proti malokalibrovej protipancierovej munícii so strelou z wolfrámkarbidu, ako vrstvené float sklo s hrúbkou 120 mm. Balistické testy sú plánované v 03/2009.

Programy: Bilaterálne - iné

8.) Atomárne aspekty pokročilých materiálov na báze cementu (*Atomic level aspects of advanced cementitious materials*)

Zodpovedný riešiteľ: Milan Drábik
Trvanie projektu: 1.7.2003 / 31.7.2008
Evidenčné číslo projektu:
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských 1 - Veľká Británia: 1
inštitúcií:
Finančné zabezpečenie:

Dosiahnuté výsledky uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ABC01, AFFA02 a BEF02

9.) Príprava a tepelno-elektrické vlastnosti ternárnych nitridov na báze kremíka (*Processing and Properties of Si-based Ternary Nitrides as Sintering Additives and Phosphors*)

Zodpovedný riešiteľ: Zoltán Lenčes
Trvanie projektu: 1.4.2006 / 31.3.2008
Evidenčné číslo projektu: 1
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských 1 - Japonsko: 1
inštitúcií:
Finančné zabezpečenie:

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ADCA03, ADCA30, ADCA46, ADCA47, ADCA48

PROJEKTY NÁRODNÝCH AGENTÚR

Programy: VEGA

1.) Štúdium fluoridových taveninových sústav s potenciálom pre priemyselné využitie (*The study of the fluoride molten-salts systems with the potential for industrial application*)

Zodpovedný riešiteľ: Miroslav Boča

Trvanie projektu: 1.1.2006 / 31.12.2008
Evidenčné číslo projektu: 2/6179/26
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 4 - Francúzsko: 2, Rusko: 2
Finančné zabezpečenie: SAV – 200 000 Sk

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ADCA25, ADCA26, ADCA27, ADCA32, ADCA33, ADCA34, ADCA42, ADDA02, AFG36

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*)

Zodpovedný riešiteľ: Juraj Bujdák
Trvanie projektu: 1.1.2006 / 31.12.2008
Evidenčné číslo projektu: 2/6180/26
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 1 - Slovensko: 1
Finančné zabezpečenie: SAV – 164 000 Sk

Dosiahnuté výsledky:

Tvorba supramolekulových systémov kationových farbív - thiazíny (ADCA05, AFHA04), oxazíny, xanténové farbivá (ADCA05), porfyríny (ADCA09, AFG05), kyanínové farbivá (ADCA06, AFHA03), závisí jednak od náboja vrstiev anorganického nosiča ako aj od molekulovej štruktúry farbiva. Z rozhodujúcich parametrov štruktúry farbív ovplyvňujúcich vznik supramolekulových systémov boli veľkosť kationov, náboj, molekulový tvar, podstata a rozmiestenie iónových funkčných skupín, polarita heteroaromatického systému, a podobne. Tieto parametre ovplyvňovali najmä orientáciu a usporiadanie molekúl farbív v medzivrstvových priestoroch, medzirovinnú vzdialenosť, stupeň a počet foriem molekulovej agregácie a optické vlastnosti hybridných materiálov.

3.) Vzťahy chemických premien a fyzikálno-mechanických vlastností vybraných materiálov na báze cementu (*Relations of chemical changes and physico-mechanical properties of selected materials based on cement*)

Zodpovedný riešiteľ: Milan Drábik
Trvanie projektu: 1.1.2008 / 31.12.2010
Evidenčné číslo projektu: 2/0055/08
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 1 - Slovensko: 1
Finančné zabezpečenie: SAV – 123 000 Sk

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo AEC01, AEE01, AEGA01,

AFC02, AFC05, AFC06, AFDA02 a BEF03

4.) Transparentné materiály na báze Al_2O_3 s výnimočnými mechanickými vlastnosťami
(Transparent alumina - based materials with outstanding mechanical properties)

Zodpovedný riešiteľ: Dušan Galusek
Trvanie projektu: 1.1.2006 / 31.12.2008
Evidenčné číslo projektu: 2/6181/26
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 1 - Slovensko: 1
Finančné zabezpečenie: VEGA – 170 000 Sk

Dosiahnuté výsledky:

Najdôležitejšie výsledky:

1. Vývoj zariadenia a optimalizácia prípravy vysoko hutných surových Al_2O_3 výliskov, ktoré sú základným predpokladom pre prípravu transparentného PCA s jemnozrnnou mikroštruktúrou.
2. Optimalizácia dvojstupňového spekania na prípravu hutného PCA so submikrometrovou mikroštruktúrou pri teplotách $< 1350^\circ\text{C}$.
3. Konštrukcia zariadenia na plameňovú syntézu sklených mikroguličiek v systémoch s vysokou taviacou teplotou (1900°C) a vysokým sklonom ku kryštalizácii (1.103. K-1).
4. Príprava transparentného PCA s $D_{50} < 500$ nm kombináciou dvojstupňového spekania a HIP, resp. kombináciou SPS a HIP a stanovenie vplyvu procesných parametrov (t, T) a stopových zložiek (500 ppm MgO, Y_2O_3 a ZrO_2) na zhutňovanie a rast zŕn v priebehu SPS a HIP.
5. Príprava kompozitov Al_2O_3 – YAG žiarovým lisovaním amorfných aluminátov vzácnych zemín pri teplotách $\sim 1300^\circ\text{C}$.

5.) Fyzikálno - chemické vlastnosti vrstevnatých silikátov z hľadiska ich environmentálnych aplikácií
(Physical and chemical properties of layer silicates related to their environmental applications)

Zodpovedný riešiteľ: Peter Komadel
Trvanie projektu: 1.1.2006 / 31.12.2008
Evidenčné číslo projektu: 2/6177/06
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 0
Finančné zabezpečenie: SAV – 357 000 Sk

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ADCA01, ADCA02, ADCA21, AFE05, AFG01, AFG21, AFG33, AFHA01, AFHA16 a v prijatých a zaslaných publikáciách:

MADEJOVÁ J., PENTRÁK M., PÁLKOVÁ H., KOMADEL P. (2008) Near-infrared spectroscopy: A powerful tool in studies of acid-treated clay minerals. Vibrational Spectroscopy, doi:10.1016/j.vibspec.2008.08.001

CARRADO K. A., KOMADEL P.: Modified bentonites and their applications, including nanocomposites. Elements, prijaté.

MADEJOVÁ J., PÁLKOVÁ H., PENTRÁK M., KOMADEL P.: Near infrared spectroscopic

analysis of acid-treated organoclays. *Clays and Clay Minerals*, prijaté.

PENTRÁK M., MADEJOVÁ J., KOMADEL P.: Acid and alkali treatments of kaolins. *Clay Minerals*, zaslané.

6.) Keramické kompozity s netradičnými spekaciami a mikroštruktúru ovplyvňujúcimi prísadami (*Ceramic composites with uncommon sintering and microstructure forming additives*)

Zodpovedný riešiteľ: Zoltán Lenčes
Trvanie projektu: 1.1.2007 / 31.12.2009
Evidenčné číslo projektu: 2/7171/27
Organizácia je koordinátorom projektu: áno
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 0
Finančné zabezpečenie: SAV – 365 000 Sk

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ADCA03, ADCA30, ADCA47, ADCA48

7.) Štruktúra a vlastnosti kremičitanových skiel.- termodynamické modely a molekulodynamické simulácie versus experiment (*Structure and properties of silicate glasses – thermodynamic models and molecular dynamics simulations vs. experiment*)

Zodpovedný riešiteľ: Marek Liška
Trvanie projektu: 1.1.2006 / 31.12.2008
Evidenčné číslo projektu: 1/3578/06
Organizácia je koordinátorom projektu: nie
Koordinátor: Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 1 - Slovensko: 1
Finančné zabezpečenie: SAV – 105 000 Sk

Dosiahnuté výsledky:

Vypracoval sa FORTRAN-ovský software na výpočet termodynamických modelov (TDM) typu Šachmatkina a Vediščevy. Program umožňuje prepojenie s termodynamickou databázou FACT.

Vyvinula sa štatisticky robustná metóda na výpočet povrchového napätia založená na regresnej analýze digitalizovaného profilu niekoľkých ležiacich/visiacich kvapiek. Skonstruovalo sa experimentálne zariadenie, ležiace kvapky sa merajú v horizontálnej rúrovej peci v inertnej atmosfére na podložke zo skleného uhlíka. Profil kvapiek sa sníma CCD kamerou. Potrebný software sa naprogramoval v jazyku FORTRAN. Metóda sa aplikovala na skloviny so zložením blízkym E-skladu.

Experimentálne sa stanovila závislosť fyzikálnych vlastností od zloženia skiel/tavenín so zložením blízkym E-skladu a zo subsystémov sústavy Na₂O-K₂O-CaO-ZnO-ZrO₂-Al₂O₃-SiO₂ so zložením blízkym bezbárnatému krištáľovému sklu. Na základe TDM sa interpretovala závislosť vlastností od štruktúry.

Zaviedla a otestovala sa metóda kvantových molekulovo dynamických (MD) simulácií skiel a tavenín založená na DFT metóde. Samotná DFT metóda sa použila pri výpočte rovnováh v reakciách malých molekúl prebiehajúcich pri haváriách v jadrovej energetike. V sústavách CaO-Al₂O₃ a Y₂O₃-Al₂O₃ (s potenciálnym technologickým významom v keramike a pri výrobe transparentných

pancierov) sa získané MD výsledky úspešne konfrontovali s výsledkami TDM. Vypracovala sa všeobecná metóda kombinácie TDM a štatistického spracovania ramanovských spektier. Jej aplikáciou sa skúmala štruktúra As_2S_3 - As_2Se_3 skiel.

8.) Smerom k detailnému poznaniu elektrónovej štruktúry z kvantovo-chemických výpočtov (Towards detailed knowledge of electronic structure from quantum chemical calculation)

Zodpovedný riešiteľ: Oľga Malkin
Trvanie projektu: 1.1.2006 / 31.12.2008
Evidenčné číslo projektu: 2/6182/27
Organizácia je koordinátorom projektu: áno
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 1 - Slovensko: 1
Finančné zabezpečenie: SAV – 340 000 Sk

Dosiahnuté výsledky:

Vyvinuli, implementovali a testovali sme nové pokročilejšie 4-komponentné metódy na výpočet magnetických vlastností. Okrem toho, sme uskutočnili niekoľko štúdií s aplikáciami relativistických kvantovo-chemických metód pre výskum elektrónovej štruktúry a vlastností zlúčenín obsahujúcich ťažké prvky. Najdôležitejším záverom je nevyhnutnosť zahrnutia jedno-elektrónovej relaxácie.

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo: ADCA04, ADCA22, ADCA35, ADCA43, ADCA44, ADCA45 a v prijatých publikáciách:

REPISKÝ, Michal – KOMOROVSKÝ, Stanislav – MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír.

Restricted magnetically balanced basis applied for relativistic calculations of indirect nuclear spin-spin coupling tensors in the matrix Dirac-Kohn-Sham framework. In Chemical Physics, 2008, doi:10.1016/j.chemphys.2008.10.037

HROBÁRIK, Peter – MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír – KAUPP, M. Relativistic two-component calculations of electronic g-tensor for oxo-molybdenum(V) and oxo-tungsten(V) complexes. The important role of higher-order spin-orbit contributions. In Chemical Physics, 2008, doi:10.1016/j.chemphys.2008.10.028

CHRAPPOVÁ, J. – SCHWENDT, P. – SIVÁK, M. – REPISKÝ, Michal – MALKIN, Vladimír – MAREK, J. Dinuclear fluoro-peroxovanadium(V) complexes with and asymmetric peroxo bridges: syntheses, structures and DFT studies. In Dalton Transactions, 2009, Iss.3, p. 465-473

9.) Štúdium štruktúry a dynamiky vodíkových väzieb v tuhých látkach netrónovou difrakciou, metódami kvantovej chémie a neelastickou neutrónovou spektroskopiou /INS/ (Structure and dynamics of hydrogen bounds in solids by neutron diffraction, quantum chemistry and inelastic neutron spectroscopy/INS/)

Zodpovedný riešiteľ: Ľubomír Smrčok
Trvanie projektu: 1.1.2006 / 31.12.2008
Evidenčné číslo projektu: 2/6178/27
Organizácia je koordinátorom projektu: áno
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 0
Finančné zabezpečenie: SAV – 110 000 Sk

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikácii číslo ADCA41

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

Zodpovedný riešiteľ: František Šimko
Trvanie projektu: 1.1.2007 / 31.12.2009
Evidenčné číslo projektu: 2/7077/27
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 4 - Francúzsko: 2, Rusko: 2
Finančné zabezpečenie: SAV - 127000 Sk

Dosiahnuté výsledky: sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ADCA18, ADCA23, ADCA24, ADCA28, ADDA01, AFG02, AFG23, AFG24, AFG25, AFHA02, AFHA11

Programy: APVV

11.) Anizotropný prenos energie v hybridných nanomateriáloch vrstevnatých kremičitanov s organickými farbivami (*Anisotropical energy transfer in hybrid nanomaterials based on layered silicates with organic dyes*)

Zodpovedný riešiteľ: Juraj Bujdák
Trvanie projektu: 1.3.2006 / 30.9.2009
Evidenčné číslo projektu: APVV-51-027405
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 2 - Česko: 1, Japonsko: 1
Finančné zabezpečenie: APVV – 1 113 000 Sk

Dosiahnuté výsledky:

Hlavným problémom prípravy hybridných materiálov vykazujúcich efektívny prenos energie bola strata fotochemickej aktivity po adsorpcii molekúl fluorescenčných farbív na anorganické nosičoch (ADCA07, AFG03, AFG04). Toto sa prejavovalo najmä pre hybridné materiály v tuhom skupenstve (ADCA08). Tento problém sa nám podarilo vyriešiť chemickou modifikáciou pomocou iónových surfaktantov. Napríklad, adsorpciou aniónového porfyrínu na takto modifikovaný hydrotalcit sa podarilo pripraviť materiál s účinnými dezinfekčnými vlastnosťami (ADCA29). Podobný jav bol potvrdený aj pre hybridné systémy na báze vrstevnatých kremičitanov (AFA01).

12.) Korundová elektrokeramika pre pokročilé typy plazmových zdrojov (*Alumina-based electroceramics for advanced plasma sources*)

Zodpovedný riešiteľ: Dušan Galusek
Trvanie projektu: 1.1.2007 / 31.12.2009
Evidenčné číslo projektu: APVV 0485-06
Organizácia je nie

koordinátorom projektu:

Koordinátor: Fakulta matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 1 - Slovensko: 1
Finančné zabezpečenie: APVV – 492 000 Sk

Dosiahnuté výsledky:

Najdôležitejšie výsledky:

1. Vývoj metodiky odlievania vysoko koncentrovaných keramických suspenzií submikrometrových korundových práškov a submikrometrových korundových práškov s obsahom do 5 hm. % dopantov (MgO, TiO₂, Y₂O₃) metódou slip casting.
2. V laboratórnom meradle príprav polykryštalickej korundovej keramiky s vysokou čistotou, submikrometrovou mikroštruktúrou a dielektrickými vlastnosťami (stratový uhol) porovnateľnými, alebo lepšími, ako referenčná korundová elektrokeramika firmy Wesgo.

13.) Organické modifikácie prírodných nanomateriálov (*Organic modifications of natural nanomaterials*)

Zodpovedný riešiteľ: Peter Komadel
Trvanie projektu: 1.5.2006 / 30.4.2009
Evidenčné číslo projektu: APVV-51-050505
Organizácia je koordinátorom projektu: áno
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 2 - Slovensko: 2
Finančné zabezpečenie: APVV – 2 213 000 Sk

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ADCA13, AFE05, AFG12, AFG19, AFHA09 a v prijatých a zaslaných publikáciách:

MADEJOVÁ J., PÁLKOVÁ H., PENTRÁK M., KOMADEL P.: Near infrared spectroscopic analysis of acid-treated organoclay. *Clays and Clay Minerals*, prijaté.

HRACHOVÁ, Jana - KOMADEL, Peter - CHODÁK, I.: Natural rubber (nano)composites with organo-modified bentonite. *Clays and Clay Minerals*, zaslané

14.) Výskumno-vzdelávacie centrum excelentnosti pre výskum pevnej fázy so zameraním na nanomateriály, environmentálnu mineralógiu a materiálovú technológiu (*Research and education centre of excellence for solid phase research focused on nanomaterials, environmental mineralogy and material science*)

Zodpovedný riešiteľ: Peter Komadel
Trvanie projektu: 1.7.2008 / 30.6.2011
Evidenčné číslo projektu: VVCE-0033-07
Organizácia je koordinátorom projektu: nie
Koordinátor: Prírodovedecká fakulta UK Bratislava
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 2 - Slovensko: 2
Finančné zabezpečenie: APVV – 1 965 000 Sk

Dosiahnuté výsledky:

V prvom polroku riešenia projektu bola pozornosť venovaná predovšetkým organizačnému

zabezpečeniu verejnej súťaže na nákup IČ spektrometra a realizácii nákupu FTIR spektrometra Nicolet 6700 s príslušenstvom. Následne prebehli testovacie merania a prístroj sa začal intenzívne využívať pri riešení úloh projektu. Výsledky budú prezentované v roku 2009 na medzinárodnej konferencii v Taliansku.

15.) 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.*)

Zodpovedný riešiteľ: Zoltán Lenčoš
Trvanie projektu: 1.2.2007 / 31.12.2009
Evidenčné číslo projektu: APVV-0448-06
Organizácia je koordinátorom projektu: áno
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 2 - Slovensko: 2
Finančné zabezpečenie: APVV – 3 880 000 Sk

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ABC02, ABD04, ADCA46, AEC04, AEF02

16.) Mikrokogeneračná jednotka na báze spaľovania tuhej biomasy (*Micro-CHP unit based on solid biomass burning*)

Zodpovedný riešiteľ: Zoltán Lenčoš
Trvanie projektu: 1.9.2008 / 31.12.2010
Evidenčné číslo projektu: APVV-0517-07
Organizácia je koordinátorom projektu: nie
Koordinátor: Strojnícka fakulta Žilinská univerzita, Žilina
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 2 - Slovensko: 2
Finančné zabezpečenie: APVV – 483 000 Sk

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ADCA30, AEF02

17.) Magnetoaktivita, electroaktivita a fotoaktivita koordinačných zlúčenín (*Magnetoactivity, electroactivity and photoactivity of coordination compounds*)

Zodpovedný riešiteľ: Oľga Malkin
Trvanie projektu: 1.7.2008 / 30.6.2011
Evidenčné číslo projektu: VVCE-0004-07
Organizácia je koordinátorom projektu: nie
Koordinátor: FCHPT STU Bratislava
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 2 - Slovensko: 2
Finančné zabezpečenie: APVV – 500 000 Sk

Dosiahnuté výsledky:

Relativistické jedno- a dvoj-komponentné metódy sme využili na výskum štruktúry a magnetických vlastností oxo-molybdenových(V) a oxo-wolframových(V) zlúčenín. Získané výsledky sme dôkladne analyzovali. Sme ukázali dôležitosť spin-orbitálnych efektov vyšších rádov, obzvlášť pre výpočty g-tenzora wolframových zlúčenín.

Publikácie:

HROBÁRIK, Peter – MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír – KAUPP, M. Relativistic two-component calculations of electronic g-tensor for oxo-molybdenum(V) and oxo-tungsten(V) complexes. The important role of higher-order spin-orbit contributions. In Chemical Physics, 2008, doi:10.1016/j.chemphys.2008.10.028

REPISKÝ, Michal – KOMOROVSKÝ, Stanislav – MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír. Restricted magnetically balanced basis applied for relativistic calculations of indirect nuclear spin-spin coupling tensors in the matrix Dirac-Kohn-Sham framework. In Chemical Physics, 2008, doi:10.1016/j.chemphys.2008.10.037

18.) 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*)

Zodpovedný riešiteľ:	Vladimír Malkin
Trvanie projektu:	1.1.2007 / 31.12.2009
Evidenčné číslo projektu:	APVV-0625-06
Organizácia je	áno
koordinátorom projektu:	
Koordinátor:	Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií:	0
Finančné zabezpečenie:	APVV – 555 000 Sk

Dosiahnuté výsledky:

Bola vyvinutá a implementovaná nová relativistická metóda pre výpočet konštánt spin-spinového spriahnutia. Bol implementovaný nový integrálny blok na výpočet NMR parametrov s Dirac-Kohn-Shamovou metódou, ktorý nám umožňuje výrazne zefektívnenie nášho kódu.

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo: ADCA14, ADCA22, ADCA45 a v prijatých publikáciách:

REPISKÝ, Michal – KOMOROVSKÝ, Stanislav – MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír. Restricted magnetically balanced basis applied for relativistic calculations of indirect nuclear spin-spin coupling tensors in the matrix Dirac-Kohn-Sham framework. In Chemical Physics, 2008, doi:10.1016/j.chemphys.2008.10.037

CHRAPPOVÁ, J. – SCHWENDT, P. – SIVÁK, M. – REPISKÝ, Michal – MALKIN, Vladimír – MAREK, J. Dinuclear fluoro-peroxovanadium(V) complexes with and asymmetric peroxo bridges: syntheses, structures and DFT studies. In Dalton Transactions, 2009, Iss.3, p. 465-473

19.) 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*)

Zodpovedný riešiteľ:	Jozef Noga
-----------------------------	------------

Trvanie projektu: 1.3.2006 / 28.2.2009
Evidenčné číslo projektu: P SAV II/1/2007
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských 2 - Slovensko: 2
inštitúcií:
Finančné zabezpečenie: APVV – 98 000 Sk

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ADCA35, ADCA43, AFE07, AFE08

20.) Keramika z polymérnych prekursorov s kontrolovanou kryštalinitou (*Polymer derived nano-ceramic with controlled crystallinity*)

Zodpovedný riešiteľ: Pavol Šajgalík
Trvanie projektu: 1.2.2007 / 31.12.2009
Evidenčné číslo projektu: RPEU-0013-06
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských 0
inštitúcií:
Finančné zabezpečenie: APVV – 565 000 Sk

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ABC02, ADEB01, ADEB02

21.) Výskum keramických materiálov pre vysoko korozívne prostredia (*Research of ceramics materials for high corrosive environments*)

Zodpovedný riešiteľ: Pavol Šajgalík
Trvanie projektu: 1.2.2007 / 31.12.2009
Evidenčné číslo projektu: APVV-0171-06
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských 2 - Slovensko: 2
inštitúcií:
Finančné zabezpečenie: APVV - 2805000 Sk

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ADCA48, ADEB06, AEC02, AEF01, AEF03

Programy: Európsky sociálny fond /ESF/ (MŠ SR, MPSVR SR)

22.) Vedomostný a technologický transfer v oblasti výskumu a vývoja prírodných nanomateriálov

Zodpovedný riešiteľ: Peter Komadel
Trvanie projektu: 1.1.2006 / 1.11.2008
Evidenčné číslo projektu: JDP 3 2004/4-058, kod proejktu: 13120200048
Organizácia je nie

koordinátorom projektu:

Koordinátor: Univerzita Komenského - Prírodovedecká fakulta

Počet spoluriešiteľských 2 - Slovensko: 2

inštitúcií:

Finančné zabezpečenie:

Dosiahnuté výsledky:

Vytvorenie e-learningových kurzov:

1. NMR spektroskopia (P. Komadel)
2. Fe v prírodných nanomateriáloch (P. Komadel)

Účast' na vzdelávacích akciách ESF projektu

1. Tématický deň „Využitie prírodných materiálov pri ochrane životného prostredia“, Bratislava, 25. 2. 2008
2. Workshop: “ Technologické postupy spracovania prírodných nanomateriálov a ich význam v priemyslových aplikáciách”, Turčianske Teplice, 5 – 7. 5. 2008
3. Exkurzia na ložiská prírodných nanomateriálov, Stredné Slovensko a Poľsko (Góra Hruby Riegel) 21 – 22. 9. 2008

23.) Vybudovanie výskumno-vývojovej a inovačnej siete pre oblasť materiálov a technológií ich spájania (MatNet)

Zodpovedný riešiteľ: Pavol Šajgalík

Trvanie projektu: 1.4.2006 / 30.9.2008

Evidenčné číslo projektu: ESF - 13120200076, JPD 3 2005/1- 018

Organizácia je nie

koordinátorom projektu:

Koordinátor: Dr. Ing. Jaroslav Jerz, Ústav materiálov a mechaniky strojov SAV

Počet spoluriešiteľských 9 - Slovensko: 9

inštitúcií:

Finančné zabezpečenie:

Dosiahnuté výsledky:

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ABD01, ABD03, ABD04.

24.) Klaster pokročilých štúdií - rozvoj ďalšej vzdelanosti v oblasti multidisciplinárneho výskumu a vývoja progresívnych materiálov a nanomateriálov s ohľadom na trvalo udržateľný rozvoj.

Zodpovedný riešiteľ: Pavol Šajgalík

Trvanie projektu: 1.1.2006 / 31.5.2008

Evidenčné číslo projektu: ITMS: 13120200055

Organizácia je nie

koordinátorom projektu:

Koordinátor: Fyzikálny ústav SAV

Počet spoluriešiteľských 4 - Slovensko: 4

inštitúcií:

Finančné zabezpečenie:

Dosiahnuté výsledky:

Zorganizovanie seminárov a školení hlavným koordinátorom a aktívna účasť našich pracovníkov (prednášky: Ing. M. Hnatko PhD, Ing. Ľ. Hric PhD., Ing. K. Ghillányová PhD.) na týchto

seminároch.

Programy: Centrá excelentnosti SAV

25.) Centrum pokročilej výpočtovej chémie (*Centre for advanced Computational Chemistry*)

Zodpovedný riešiteľ: Jozef Noga
Trvanie projektu: 1.1.2007 / 31.12.2010
Evidenčné číslo projektu:
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 5 - Slovensko: 5
Finančné zabezpečenie: SAV – 500 000 Sk

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ADCA35, ADCA43, AFE07, AFE08

26.) Centrum nanoštruktúrnych materiálov (*Centre of the nanostructured materials*)

Zodpovedný riešiteľ: Pavol Šajgalík
Trvanie projektu: 1.1.2007 / 31.12.2010
Evidenčné číslo projektu:
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 6 - Slovensko: 6
Finančné zabezpečenie: SAV - 120000 Sk

Dosiahnuté výsledky:

V rámci centra bola pozornosť venovaná aplikácii nano-štruktúrnych keramických materiálov predovšetkým v strojárskom priemysle. Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo ABC02, ABD04, ADCA03, ADEB02, AEC03

Programy: Iné projekty

27.) Dlhodobé sledovanie pórobetónu vyrobeného z fluidného popolčeka (*The long-term investigation of autoclaved aerated concrete produced from fluid ash*)

Zodpovedný riešiteľ: Svetozár Balkovic
Trvanie projektu: 1.1.2008 / 31.12.2009
Evidenčné číslo projektu:
Organizácia je áno
koordinátorom projektu:
Koordinátor: Ústav anorganickej chémie SAV
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 2 - Slovensko: 2
Finančné zabezpečenie:

Dosiahnuté výsledky:

Dosiahnuté výsledky sú uvedené v prílohe 3, v publikáciách číslo AEE02, AFC01, AFDA01, AFDA01, BDFA01 ABEF01

28.) Meranie a výpočet vzniku a relaxácie napätí v sklenených výrobkoch pri ich tvarovaní a chladení

Zodpovedný riešiteľ: Mária Chromčíková
Trvanie projektu: 1.1.2007 / 31.12.2009
Evidenčné číslo projektu: AV 4/0025/07
Organizácia je koordinátorom projektu: nie
Koordinátor: Trenčianska univerzita Alexandra Dubčeka v Trenčíne
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 2 - Slovensko: 2
Finančné zabezpečenie:

Dosiahnuté výsledky:

Skonstruovalo sa zariadenie na meranie napätia v sklárskych výrobkoch pri rôznom smere prechodu lúča určeným bodom skla pri laboratórnej teplote. Toolov-Narayanawamyho relaxačný model s Mazurinovou aproximáciou relaxačného času sa overoval termomechanickými meraniami vzoriek bárnateho krištáľového skla v súčasnosti vyrábaného v sklárni RONA, a.s. Lednické Rovne. Merania sa uskutočnili na vysokokvalitnom termomechanickom analyzátore Q400EM.

Navrhla sa metóda experimentálneho zisťovania zložiek tenzora mechanického napätia v ústnom okraji pohárov založená na Senarmontovej kompenzácii lúčov prechádzajúcich daným bodom vzorky pri rôznych sklonoch k povrchovej normále v dvoch hlavných smeroch (pozdĺžnom a pravoľavom) na mikroskope NIKON upravenom v prvom roku riešenia. Merania ukázali na malú citlivosť k náklonu vzorky spôsobenú zrovnateľnou veľkosťou mechanického napätia v hlavných smeroch kolmých k smeru lúča. V súčasnosti sa konštruuje nové experimentálne zariadenia umožňujúce dosiahnuť zvýšenú citlivosť prechodom k menšiemu zväčšeniu a zvýšenej intenzite zdroja polarizovaného svetla.

Navrhla sa aproximatívna metóda výpočtu vývoja a relaxácie mechanických napätí v ústnom okraji založená na MKP výpočte vývoja teplotného poľa a následnom výpočte vývoja mechanického napätia založenom na aproximácii lokálneho napätia (LSA - Local Stress Approximation). Metóda je v štádiu numerického testovania.

29.) Komplexná analýza vzoriek (*The complex analyze of the samples*)

Zodpovedný riešiteľ: Marek Liška
Trvanie projektu: 5.12.2007 / 18.7.2008
Evidenčné číslo projektu: ZOD č. 1090/2008/K (SUB1184856RB)
Organizácia je koordinátorom projektu: nie
Koordinátor: VUEZ a.s., Levice
Počet spoluriešiteľských inštitúcií: 2 - Slovensko: 2
Finančné zabezpečenie: Alion Science (USA) – 1 040 000 Sk

Dosiahnuté výsledky:

Predmetom plnenia zmlúv o diele (objednávateľ - VÚEZ, a.s.) bola kompletná analýza dodávaných vzoriek z 30 dňových testov chemických vplyvov realizovaných na zariadeniach Elisa a Elisa baby. Stanovoval sa obsah elementárnych prvkov metódou ICP OES (Al, K, Mg, Ca, Cu, Fe, Ni, Si, a Zn) a obsah chloridov metódou ión-selektívnej elektródy. Ďalej sa analyzovali filtračné vrstvy zachytené po 30 dňových testoch metódami SEM analýzy a EDS analýzy.

Príloha č. 3

Bibliografické údaje výstupov

ABC Kapitoly vo vedeckých monografiách vydané v zahraničných vydavateľstvách

- ABC01 DRÁBIK, Milan - GÁLIKOVÁ, Ľubica - BALKOVIC, Svetozár - SLADE, R.C. Macro-defect free materials with controlled moisture resistance. In: Nanotechnology of concrete: Recent developments and future perspectives (Eds.: K. Sobolev, S. P. Shah). American Concrete Institute, Michigan 2008. p. 145-155. ISBN 978-0-97031-299-1.
- ABC02 ŠAJGALÍK, Pavol - DUSZA, J. - LENČEŠ, Zoltán - HNATKO, Miroslav - GALUSEK, Dušan - GHILLÁNYOVÁ, Katarína. Bulk ceramic nanostructures. In: CHEN, I-Wei. Ceramics Science and Technology. Weinheim, 2008. - Weinheim : WILEY-VCH, Vol. 1 2008, p. 347-373. ISBN 978-527-31155-2.

ABD Kapitoly vo vedeckých monografiách vydané v domácich vydavateľstvách

- ABD01 BOČA, Miroslav: Roztavené soli a taveniny ako také – popoluška v priemysle. In: Rozprávanie o materiáloch a technológiach. Ústav materiálov a mechaniky strojov, Bratislava (2008). – Bratislava: Ústav materiálov a mechaniky strojov, p. 25-34. ISBN 978-80-970027.
- ABD02 GALUSEK, Dušan: 25. Sklo okolo nás. In Odhalené tajomstvá chémie. VEDA, Bratislava (2007). - Bratislava : VEDA, 2007, p. 373-391. ISBN 978-80-224-0957-5.
- ABD03 KORENKO, Michal: Nekonenčné aplikácie roztavených anorganických solí. In: Rozprávanie o materiáloch a technológiach. Ústav materiálov a mechaniky strojov, Bratislava (2008). – Bratislava: Ústav materiálov a mechaniky strojov, p. 35-46. ISBN 978-80-970027.
- ABD04 ŠAJGALÍK, Pavol – HNATKO, Miroslav – LOJANOVÁ Štefánia: Keramika – ako ju nepoznáme. In: Rozprávanie o materiáloch a technológiach. Ústav materiálov a mechaniky strojov, Bratislava (2008). – Bratislava: Ústav materiálov a mechaniky strojov, p. 158-176. ISBN 978-80-970027.

ADCA Vedecké práce v zahraničných karentovaných časopisoch impaktovaných

- ADCA01 ANDREJKOVIČOVÁ, Slávka - JANOTKA, I. - KOMADEL, Peter: Evaluation of geotechnical properties of bentonite from Lieskovec deposit, Slovakia. In: Applied Clay Science, vol. 38, 2008 p. 297-303. . IF: 1.861
- ADCA02 ANDREJKOVIČOVÁ, Slávka - ROCHA, F. - JANOTKA, I. - KOMADEL, Peter: An investigation into the use of blends of two bentonites for geosynthetic clay liners. In: Geotextiles and Geomembranes, vol. 26, 2008 p. 436-445. IF: 3.050
- ADCA03 BENCO, Ľubomír - HAFNER, J. - LENČEŠ, Zoltán - ŠAJGALÍK, Pavol: Density functional study of structures and mechanical properties of Y-doped α -SiAlONs. In: Journal of the European Ceramic Society, vol. 28, 2008 p. 995-1002. IF: 1.562
- ADCA04 BOKHAN, D. – TEN-NO. S. – NOGA, Jozef: Implementation of the CCSD(T)-F12 method using cusp conditions. In: Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 10, 2008, p. 3320-3326. IF: 3.343
- ADCA05 BUJDÁK, Juraj - CZÍMEROVÁ, Adriana - IYI, N.: Structure of cationic dyes assemblies intercalated in the films of montmorillonite. In: Thin Solid Films, vol. 517, 2008, p. 793-799. IF: 1.693
- ADCA06 BUJDÁK, Juraj - IYI, N.: Spectral properties and structure of the J-aggregates of pseudoisocyanine dye in layered silicate films. In: Journal of Colloid and Interface Science, vol. 326, 2008, p. 426-432. IF: 2.309
- ADCA07 BUJDÁK, Juraj - IYI, N.: Spectral properties of tetraanionic porphyrin in formamide

- colloids of layered double hydroxides. In: Central European Journal of Chemistry, vol. 6, no. 4, 2008, p. 569-574. *IF: 0.754*
- ADCA08 CZÍMEROVÁ, Adriana - IYI, N. - BUJDÁK, Juraj: Fluorescence resonance energy transfer between two cationic laser dyes in presence of the series of reduced-charge montmorillonites: Effect of the layer charge. In: Journal of Colloid and Interface Science, vol. 320, 2008, p. 140-151. *IF: 2.309*
- ADCA09 ČEKLOVSKÝ, Alexander - CZÍMEROVÁ, Adriana - PENTRÁK, Martin - BUJDÁK, Juraj: Spectral properties of TMPyP intercalated in thin films of layered silicates. In: Journal of Colloid and Interface Science, vol. 324, 2008, p. 240-245. *IF: 2.309*
- ADCA10 DVOŘÁK, V. - DANIELIK, V. - MATAŁ, O. - CHRENKOVÁ, M. - BOČA, Miroslav: Phase diagram of the system NaF-SnF₂. In: Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, vol. 91, no. 2, 2008, p. 541-544. *IF: 1.483*
- ADCA11 GEDEON, O. - LIŠKA, Marek - MACHÁČEK, J.: Connectivity of Q-species in binary sodium-silicate glasses. In: Journal of Non-Crystalline Solids, vol. 354, 2008, p. 1133-1136. *IF: 1.319*
- ADCA12 HESABI, Z.R. - HAGNIGHATZADEH, M. - MAZAHARI, M. - GALUSEK, Dušan: Suppression of grain growth in sub-micrometer alumina via two-step sintering method. In: Journal of the European Ceramic Society, vol. 28, 2008, doi:10.1016/j.jeurceramsoc.2008.08 *IF: 1.562*
- ADCA13 HRACHOVÁ, Jana - KOMADEL, Peter - CHODÁK, I.: Effect of montmorillonite modification on mechanical properties of vulcanized natural rubber composites. In: Journal of Materials Science, vol. 43, 2008, p. 2012-2017. *IF: 1.081*
- ADCA14 HROBÁRIK, Peter - KAUPP, M. - RIEDEL, S.: Is allred's [Hg(cyclam)]³⁺ a true mercury(III) complex?. In: Angewandte Chemie, vol. 47, 2008, p. 8631-8633. *IF: 10.031*
- ADCA15 JÓNA, E. - RUDINSKÁ, G. - SAPIETOVÁ, M. - PAVLÍK, V. - DRÁBIK, Milan. - MOJUMDAR, S.C.: 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=CH₃, Cl, NH₂). In: Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, vol. 90, no. 3, 2008, p. 687-691. *IF: 1.483*
- ADCA16 JORÍK, V. - SCHOLTZOVÁ, Eva - SEGLA, P.: Combined powder diffraction and solid-state DFT study of [Cu(2,6-dimethoxynicotinate)₂(μ-ronicol)₂]_n complex. In: Zeitschrift für Kristallographie, vol. 223, 2008, p. 524-529. *IF: 1.338*
- ADCA17 KARELL, R. - CHROMČÍKOVÁ, Mária - LIŠKA, Marek: Properties of selected zirconia containing silicate glasses III. In: Ceramics-Silikáty, vol. 52, no. 2, 2008, p. 102-108. *IF: 0.488*
- ADCA18 KEPPERT, M. - RAKHMATULLIN, A. - ŠIMKO, František - DESCHAMPS, M. - HAARBERG, G.M. - BESSADA, C.: Multinuclear magnetic resonance study of Na₃AlF₆ - AlPO₄ molten and solidified mixtures. In: Magnetic Resonance in Chemistry, vol. 46, 2008, p. 803-810. *IF: 1.434*
- ADCA19 KRAXNER, J. - KLEMENT, R. - LIŠKA, Marek: High-temperature viscosity and density of alumino-borosilicate glasses as a model system for commercial E-glass. In: Ceramics - Silikáty, vol. 52, no. 3, 2008, p. 148-154. *IF: 0.488*
- ADCA20 KREČMER, N. - LIŠKA, Marek - CHOCHOLOUŠEK, J. - VRÁBEL, P.: Stress profile measurement in axially symmetric glass sample. In: Ceramics - Silikáty, vol. 52, no. 3, 2008, p. 160-164. *IF: 0.488*
- ADCA21 KOMADEL, Peter - ANASTÁCIO, A.S. - ANDREJKOVIČOVÁ, Slávka - STUCKI, J.W.: Iron phases identified in bentonite from the Lieskovec deposit (Slovakia) by variable-temperature mossbauer spectroscopy. In: Clay Minerals, vol. 43, 2008, p. 107-115. *IF: 0.707*
- ADCA22 KOMOROVSKÝ, Stanislav - REPISKÝ, Michal - MALKINA, Olga - MALKIN,

- Vladimír - MALKIN-ONDÍK, I. - KAUPP, M.: A fully relativistic method for calculation of nuclear magnetic shielding tensors with a restricted magnetically balanced basis in the framework of the matrix Dirac-Kohn-Sham equation. In: Journal of Chemical Physics, vol. 128, 2008, p. 104101-1-104101-15. IF: 3.044
- ADCA23 KORENKO, Michal - KUCHARÍK, Marián - OBOŇA, J.V. - JANIČKOVIČ, D. - CÓRDOBA, R. - DE TERESA, J.M. - KUBÍKOVÁ, Blanka: Nanotubes made from deeply undercooled cryolite/alumina melts. In: Helvetica Chimica Acta, vol. 91, 2008, p. 1389-1399. IF: 1.515
- ADCA24 KORENKO, Michal: Interfacial tension between aluminum and cryolite alumina melts. In: Journal of Chemical and Engineering Data, vol. 53, 2008, p. 794-797. IF: 1.729
- ADCA25 KOSA, Ladislav - MACKOVÁ, Iveta - PROKS, I. - PRITULA, O. - SMRČOK, Ľubomír - BOČA, Miroslav - RUNDLOF, H.: Phase transitions of K₂TaF₇ within 680 - 800°C. In: Central European Journal of Chemistry, vol. 6, no. 1, 2008, p. 27-32. IF: 0.754
- ADCA26 KUBÍKOVÁ, Blanka - BOČA, Miroslav - GAUNE-ESCARD, M.: Phases of the K₂TaF₇-TaF₅ binary system. In: Monatshefte fur Chemie, vol. 139, 2008, p. 587-590. IF: 0.972
- ADCA27 KUBÍKOVÁ, Blanka - MLYNÁRIKOVÁ, Jarmila - BOČA, Miroslav: Intermolecular forces in the NaF + KF + K₂NbF₇ system: Investigation of surface tension and viscosity. In: Journal of Chemical and Engineering Data, vol. 53, 2008, p. 812-815. IF: 1.729
- ADCA28 KUCHARÍK, Marián - VASILJEV, Roman: Solubility of AlPO₄ and NaVO₃ in NaF-AlF₃ melts. In: Journal of Chemical and Engineering Data, vol. 53, no. 8, 2008, p. 1817-1819. IF: 1.729
- ADCA29 LANG, K. - KUBÁT, P. - MOSINGER, J. - BUJDÁK, Juraj - HOF, M. - JANDA, P. - SÝKORA, J. - IYI, N.: Photoactive oriented films of layered double hydroxides. In: Physical Chemistry Chemical Physics, vol. 10, 2008, p. 4429-4434. IF: 3.343
- ADCA30 LENČEŠ, Zoltán - BENCO, Ľubomír - MADEJOVÁ, Jana - ZHOU, Y. - KIPSOVÁ, Linda - HIRAO, K.: Reaction synthesis and characterisation of lanthanum silicon nitride. In: Journal of the European Ceramic Society, vol. 28, 2008, p. 1917-1922. IF: 1.562
- ADCA31 LIŠKA, Marek - MACHÁČEK, J. - PERICHTA, P. - GEDEON, O. - PILÁT, J. Thermochemical modelling and ab initio molecular dynamics simulations of calcium aluminate glasses. In: Ceramics-Silikáty, vol. 52, no. 2, 2008, p. 61-65. IF: 0.488
- ADCA32 MLYNÁRIKOVÁ, Jarmila - BOČA, Miroslav - KIPSOVÁ, Linda: The role of the alkaline cations in the density and volume properties of the melts MF-K₂NbF₇ (MF=LiF-NaF, LiF-KF and NaF-KF). In: Journal of Molecular Liquids, vol. 140, 2008, p. 101-107. IF: 0.982
- ADCA33 MLYNÁRIKOVÁ, Jarmila - CHRENKOVÁ, M. - DANIELIK, V. - DANĚK, V. - MATAL, O.: Revised phase diagram of the system NaF-NaBF₄. In: Monatshefte fur Chemie, vol. 139, 2008, p. 77-80. IF: 0.972
- ADCA34 NERÁD, Ivan - MIKŠÍKOVÁ, Eva: Calorimetric study of melts in the system KF - K₂NbF₇. In: Central European Journal of Chemistry, vol. 6, no. 2, 2008, p. 297-303. IF: 0.754
- ADCA35 NOGA, Jozef - KEDŽUCH, Stanislav - ŠIMUNEK, J. - TEN-NO, S.: Explicitly correlated coupled cluster F12 theory with single and double excitations. In: Journal of Chemical Physics, vol. 129, 2008, p. 174103-1-174103-10. IF: 3.044
- ADCA36 PRNOVÁ, Anna - KARELL, R. - GALUSEK, Dušan: The preparation of binary Al₂O₃-Y₂O₃ glass microspheres by flame synthesis from powder oxide precursors. In: Ceramics - Silikáty, vol. 52, no. 2, 2008, p. 109-114. IF: 0.488
- ADCA37 RODOVÁ, M. - LIŠKA, Marek - NITSCH, K. - KOŽÍŠEK, Z.: Solidification of

- molten zinc chloride - experimental and theoretical studies. In: Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, vol. 91, 2008, p. 181-185. *IF: 1.483*
- ADCA38 SEDLÁČEK, Jaroslav - GALUSEK, Dušan - ŠVANČÁREK, Peter - RIEDEL, R. - ATKINSON, A. - WANG, X.: Abrasive wear of $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiC}$ and $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-(SiC)-C}$ composites with micrometer -and submicrometer-sized alumina matrix grains. In: Journal of the European Ceramic Society, vol. 28, 2008, p. 2983-2993. *IF: 1.562*
- ADCA39 SCHOLTZOVÁ, Eva - BENCO, Ľ. - TUNEGA, D.: A model study of dickite intercalated with formamide and N-mythylformamide. In: Physics and Chemsitry of Minerals, vol. 35, no. 6, 2008, p. 299-309. *IF: 1.238*
- ADCA40 SCHWENDT, P. - DUDÁŠOVÁ, D. - CHRAPPOVÁ, J. - DRÁBIK, Milan - MAREK, J.: Synthesis, structure and thermal decomposition of $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_6][\text{VO}(\text{O}_2)_2(\text{NH}_3)]_2$. In: Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, vol. 31, no. 1, 2008, p. 293-297. *IF: 1.483*
- ADCA41 SLÁDKOVIČOVÁ, Mariana - SMRČOK, Ľubomír - MACH, P. - TUNEGA, D. - RAMIREZ-CUESTA, A.J.: Inelasticneutron scattering and DFT study of 1,6-anhydro- β -d-glucopyranose (levoglucosan). In: Journal of Molecular Structure, vol. 874, no. 1-3, 2008, p. 108-120. *IF: 1.486*
- ADCA42 SMRČOK, Ľubomír - BRUNELLI, M. - BOČA, Miroslav - KUCHARÍK, Marián: Structure of K_2TaF_7 at 993 K: the combined use of synchrotron powder data and solid-state DFT calculations. In: Journal of Applied Crystallography, vol. 41, 2008, p. 634-636. *IF: 3.629*
- ADCA43 VALIRON, P. - WERNLI, M. - FAURE, A. - WIESENFELD, L. - RIST, C. - KEDŽUCH, Stanislav - NOGA, Jozef: R12-calibrated $\text{H}_2\text{O-H}_2$ interaction: Full dimensional and vibrationally averaged potential energy surfaces. In: Journal of Chemical Physics. vol. 129, 2008, p. 134306-1-134306-14. *IF: 3.044*
- ADCA44 VARGA, Štefan: Long-range analysis of density fitting in extended systems. In: International Journal of Quantum Chemistry, 2008, vol. 108, p. 1518-1527. *IF: 1.368*
- ADCA45 ZAJAC, M. - HROBÁRIK, Peter - MAGDOLEN, P. - FOLTÍNOVÁ, P. - ZAHRADNÍK, P.: Donor-pí-acceptor benzothiazole-derived dyes with an extented heteroaryl-containing conjugated system: synthesis, DFT study and antimicrobial activity. In: Tetrahedron, vol. 64, 2008, p. 10605-10618. *IF: 2.869*
- ADCA46 ZHOU, Y. - ZHU, X. - HIRAO, K. - LENČEŠ, Zoltán: Sintered reaction-bonded silicon nitride with high thermal conductivity and high strength. In: International Journal of Applied Ceramic Technology, vol. 5, 2008, p. 119-126. *IF: 1.366*
- ADCA47 ZHOU, Y. - YOSHIKAWA, Y. - HIRAO, K. - LENČEŠ, Zoltán: Preparation of Eu-doped β - SiAlON phosphors by combustion synthesis. In: Journal of the American Ceramic Society, vol. 91, 2008, p. 3082-3085. *IF: 1.792*
- ADCA48 ZHU, X. - ZHOU, Y. - HIRAO, K. - LENČEŠ, Zoltán: Processing and thermal conductivity of sintered reaction-bonded silicon nitride: (II) effects of magnesium compound and yttria additives. In: Journal of the American Ceramic Society, vol. 90, 2008, p. 1684-1692. *IF: 1.792*

ADDA Vedecké práce v domácich karentovaných časopisoch impaktovaných

- ADDA01 KORENKO, Michal - KUCHARÍK, Marián - JANIČKOVIČ, D.: Rapid solidification processing in molten salts chemistry: X-ray analysis of deeply undercooled cryolite-alumina melts. In: Chemical Papers, roč. 62, č. 2, 2008, s. 219-222. *IF: 0.367*
- ADDA02 KOSA, Ladislav - PROKS, I.: Determination of dissociation degrees of K_3NbF_8 and K_3TbF_8 by thermodynamic analysis of subsystems of the $\text{KF-K}_2\text{NbF}_7$ and $\text{KF-K}_2\text{TaF}_7$ systems. In: Chemical Papers, roč. 62, č. 6, 2008, s. 616-622. *IF: 0.367*

ADEB Vedecké práce v zahraničných nekarentovaných časopisoch neimpaktovaných

- ADEB01 DUSZA, Ján - KAŠIAROVÁ, M. - HEGEDŮSOVÁ, Lucia - HNATKO, Miroslav - ŠAJGALÍK, Pavol: Bending and contact strength of a $\text{Si}_3\text{N}_4+\text{SiC}$ micro/nano composite. In: Materials Science Forum. ISSN 0255-5476, vol. 567-568, 2008, p. 177-180.
- ADEB02 GALUSEK, Dušan - LENCĚŠ, Zoltán - ŠAJGALÍK, Pavol - RIEDEL, R.: Thermal analysis study of polymer-to-ceramic conversion of organosilicon precursors. In: Journal of Mining and Metallurgy B, vol. 44, 2008, p. 35-38.
- ADEB03 GALUSEK, Dušan - SEDLÁČEK, Jaroslav - PAUČO, T. - ŠVANČÁREK, Peter: Microstructure and abrasive wear of $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-SiC}$ nanocomposites. In: Ceramics, vol. 103, 2008, p. 323-332.
- ADEB04 MIKOCZYOVÁ, Monika - GALUSEK, Dušan: Influence of forming method and sintering process on densification and final microstructure of submicrometre alumina ceramics. In: Processing and Application of Ceramics, vol. 2, no. 1, 2008, p. 13-17.
- ADEB05 PRNOVÁ, Anna - KARELL, Radovan - GALUSEK, Dušan: $\text{Y}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ binary glass microspheres: Synthesis and characterisation. In: Advanced Materials Research, vol. 39-40, 2008, p. 189-192.
- ADEB06 SABOŠOVÁ, J. – VRÁBEL, P. – ŠAJGALÍK, Pavol: Analysis of tableware mouth impact strength. In: Advanced Materials Research, vol. 39-40, 2008, p. 587-590.

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

- AEC01 DRÁBIK, Milan - BALKOVIC, Svetozár: Cements and concrete-based materials. The innovations through materials chemistry. In *ICC2 Proceedings: Global Roadmap for Ceramics*. Verona (2008) ISBN 978-88-8080-084-2, P. 235-244.
- AEC02 GALUSKOVÁ, D. – HNATKO, Miroslav – GALUSEK, Dušan – ŠAJGALÍK, Pavol: Corrosion resistance of silicon nitride and alumina ceramics in aqueous solution of sodium chloride. In: *ICC2 Proceedings: Global Roadmap for Ceramics*. Verona, 2008, (CD ROM)
- AEC03 KAŠIAROVÁ, M. – DUSZA, J. – HNATKO, Miroslav – ŠAJGALÍK, Pavol: Effect of volume fraction of SiC nanoparticles on microstructure and mechanical properties of $\text{Si}_3\text{N}_4\text{SiC}$ micronanocomposites. In: *ICC2 Proceedings: Global Roadmap for Ceramics*. Verona, 2008, (CD ROM)
- AEC04 ŠAJGALÍK, Pavol: Road map of ceramic for energy. In: *ICC2 Proceedings: Global Roadmap for Ceramics*. Verona (2008) ISBN 978-88-8080-084-2, P. 527-536

AED Vedecké práce v domácich recenzovaných vedeckých zborníkoch (aj konferenčných), monografiách

- AED01 CHROMČÍKOVÁ, Mária - LIŠKA, Marek: Stress strain testing of the strand of E-glass fibers. In: 9th EDG Conference, 2008, Trenčín. - Trenčín, 2008, P. 165-168. ISBN 1022-6680.
- AED02 KARELL, R. - CHROMČÍKOVÁ, Mária - LIŠKA, Marek: Structure and properties of selected zirconia silicate glasses. In: 9th EDG Conference, 2008, Trenčín. - Trenčín, 2008, P. 173-176. ISBN 1022-6680.
- AED03 KRAXNER, J. – KLEMENT, - R. – CHROMČÍKOVÁ, Mária – LIŠKA, Marek: The effect of CaO and MgO on physical properties of $\text{MgO-CaO-B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ glasses with composition close to the E-glass fibers. In: 9th EDG Conference. Trenčín, 2008. P. 81-84.
- AED04 KREČMER, N. - LIŠKA, Marek - CHOCHOLOUŠEK, J. - VRÁBEL, P.: Measurement and calculation of residual stress in axi-symmetric glass sample using structural relaxation theory. In: 9th EDG Conference, 2008, Trenčín. - Trenčín, 2008,

- P. 529-532. ISBN 1022-6680.
- AED05 MACHÁČEK, J. – CHARVÁTOVÁ, S. – GEDEON, O. – LIŠKA, Marek: First principles molecular simulations of soda-lime-silica glass. In: 9th EDG Conference. Trenčín, 2008. P. 85-88.
- AED06 MIŠÍKOVÁ, L. - LIŠKA, Marek: Kinetics of E-glass fibers leaching in borate solution and distilled water. In: 9th EDG Conference, 2008, Trenčín. - Trenčín, 2008, ISBN 1022-6680.
- AED07 PERICHTA, P. - LIŠKA, Marek - MACHÁČEK, J. - GEDEON, O.: The yttria-alumina glasses - MD and TD models. In: 9th EDG Conference, 2008, Trenčín. - Trenčín, 2008, P. 93.-96. ISBN 1022-6680.
- AED08 SOLTÉSZ, V. – VICENA, I. – CHROMČÍKOVÁ, Mária – LIŠKA, Marek – MATTEI, J.M.: Chemical durability of glass thermal insulation fibers in borate and phosphate water aolutions. In: 9th EDG Conference. Trenčín, 2008. P. 363-366.

AEE Vedecké práce v zahraničných nerecenzovaných vedeckých zborníkoch (aj konferenčných), monografiách

- AEE01 BAJZA, A. – ROUSEKOVÁ, I. – BALKOVIC, Svetozár: Properties, structure and phase composition of hardened cement pastes corroded by ammonium nitrate solutions. In: 3rd International Symposium: Non-Traditional Cement and Concrete. Jún 10-12. Brno: University of Technology and ŽPSV 2008. ISBN 978-80-214-3642-8. P. 67-74.
- AEE02 BALKOVIC, Svetozár - PETEJA, M. - DRÁBIK, Milan: The re-use of autoclaved aerated concrete wastes in the production of autoclaved aerated concrete. In: 12th International Conference of Research institute of Building Materials. Ecology and new building materials and products. Telč 3.6. - 5.6.2008. - Česká republika, Telč : Výzkumný Ústav stavebních hmot, 2008, P. 36-40. ISBN 978-802542029-4.
- AEE03 CHROMČÍKOVÁ, Mária - NITSCH, K. - RODOVÁ, M. - LIŠKA, Marek: Štruktúrna relaxácia sodno-gadolinito-fosforečnanového skla. In: Mezinárodní slovenský a český kalorimetrický seminář, 2008, Rožnov pod Ráchoštem. - Rožnov pod Radhoštem, 2008, P. 163-166. ISBN 978-80-7395-079-8.
- AEE04 LIŠKA, Marek - HOLUBOVÁ, J. - CHROMČÍKOVÁ, Mária - ČERNOŠKOVÁ, E.: Ramanovské spektrá, štruktúra a termodynamický model skiel sústavy As₂S₃-As₂Se₃. In: Mezinárodní slovenský a český kalorimetrický seminář, 2008, Rožnov pod Radhoštem, 2008, P. 33-36. ISBN 978-80-7395-079-8.

AEF Vedecké práce v domácich nerecenzovaných vedeckých zborníkoch a monografiách

- AEF01 GALUSKOVÁ, Dagmar – GALUSEK, Dušan – ŠAJGALÍK, Pavol: Determination of Si and Al in corrosion medium of sodium chloride solution by inductively coupled plasma atomic emission spectrometry. In: *XIXth Slovak-Czech Spectroscopic Conference*. Košice (2008) ISSN 1335-2334 S. 36-39.
- AEF02 KIPSOVÁ, Linda – LENČEŠ, Zoltán – ZHOU, Y. – ŠAJGALÍK, Pavol: Vplyv neoxidových prísad na tepelnú vodivosť nitride kremičitého. In: *Zborník odborného seminára ALER, 4. ročník*. Liptovský Mikuláš (2008) ISBN 978-80-8070-912-9, S. 46-52
- AEF03 PETRUŠKOVÁ, Viera – VRÁBEL, P. – ŠAJGALÍK, Pavol: Mechanism of Generation of Tableware Surface Defects during Dishwashing Process. Glass – The Challenge for the 21st Century. In: *9th ESG Conference*. Trenčín. (2008) ISBN 978-0-87849-387-6, S. 323-328

AEGA Stručné oznámenia, abstrakty vedeckých prác v zahraničných karentovaných časopisoch impaktovaných

- AEGA01 DRÁBIK, Milan - BALKOVIC, Svetozár: "Macro-defect free" Materiály - výzva pre

chémiu a technológiu?. In: Chemické Listy, 2008, vol. 102, p. 608.

AFC Publikované príspevky na zahraničných vedeckých konferenciách

- AFC01 BALKOVIC, Svetozár – PETEJA, M. – DRÁBIK, Milan: Použitie pórobetónovej drvy vo výrobe pórobetónu a jej vplyv na jeho štruktúru. In: VII. odborná konferencia MALTOVINY. Brno. (2008), p. 10-18.
- AFC02 DRÁBIK, Milan – BALKOVIC, Svetozár – ŽIVICA, V.: Poznámky k problematike taumazitovo síranovej korózie v betónoch. In: VII. odborná konferencia MALTOVINY. Brno. (2008), p. 19-26
- AFC03 GALUSKOVÁ, D. - ŠAJGALÍK, Pavol: Corrosion resistance of alumina and silicon nitride ceramics in 3% water solution of sodium chloride. In: Umweltfreundliche Industrielle Technologien neue Werkstoffe und Erneubare Energiequellen fur eine nachhaltige entwicklung. VŠB-TU, Ostrava, 3.12 - 6.12.2007. - Ostrava : VŠB-TU, 2007, p. 6-10. ISBN 978-80248-1706-4.
- AFC04 PRNOVÁ, Anna - KARELL, Radovan - GALUSEK, Dušan: Flame synthesis of binary aluminate glass microspheres. In: Umweltfreundliche Industrielle Technologien neue Werkstoffe und Erneubare Energiequellen fur eine nachhaltige entwicklung. VŠB-TU, Ostrava, 3.12 - 6.12.2007. - Ostrava : VŠB-TU, 2007, p. 29-34. ISBN 978-80248-1706-4.
- AFC05 ŽIVICA, V. – BÁGEL, Ľ. – BALKOVIC, Svetozár – DRÁBIK, Milan: Alkali - activated slag pastes prepared with very low liquid/solid (l/s) ratio and compacted by high pressures. In: Proceedings of the International Conference: Life Cycle Assesment, Optimisation, Behavior and Properties of Concrete and Concrete Structures Brno, 2008. p. 302-307
- AFC06 ŽIVICA, V. – BALKOVIC, Svetozár – DRÁBIK, Milan: Perspektívy cementu ako nezastupiteľného materiálu pre výrobu betónu. In: VII. odborná konferencia MALTOVINY. Brno. (2008), p. 156-166

AFDA Publikované príspevky na medzinárodných vedeckých konferenciách poriadaných v SR

- AFDA01 BALKOVIC, Svetozár - ŽIVICA, V. - DRÁBIK, Milan. Síranová korózia betónu zapríčinená taumazitom. In: Cement 2008. Stará Lesná, 15.10. - 17.10.2008. - Stará Lesná : Hotel Academia, 2008, p. 1-10.
- AFDA02 DRÁBIK, Milan: Cementové systémy - inovatívne prístupy na báze vedeckých poznatkov. In: Cement 2008. Stará Lesná, 15.10. - 17.10.2008. - Stará Lesná : Hotel Academia, 2008, p. 1-6.
- AFDA03 ŽIVICA, V. - DRÁBIK, Milan - BALKOVIC, Svetozár: Využitie efektov znižovania vodného súčiniteľa pre zvýšenie kvality úžitkových vlastností cementových kompozitov. In: Cement 2008. Stará Lesná, 15.10. - 17.10.2008. - Stará Lesná : Hotel Academia, 2008, p. 1-13.

AFE Abstrakty pozvaných príspevkov zo zahraničných konferencií

- AFE01 HIRAO, Kiyoshi – ZHOU, You – YOSHIZAWA, Yuichi, LENČEŠ, Zoltán, ŠAJGALÍK, Pavol: Preparation of nitride phosphors by combustion synthesis. In: *International Symposium on New Frontier of Advanced Si-Based Ceramics and Composites*, Jeju, Korea (2008) p. 39
- AFE02 KOMOROVSKÝ, Stanislav: Dirac-Kohn-Sham calculations of shielding tensor with restricted magnetically balanced basis. In: *Workshop on Modern Methods in Quantum Chemistry*. Mariapfarr, Austria (2008)
- AFE03 LENČEŠ, Zoltán – BENCO, Ľubomír – VELIČ, Dušan – ZHOU, Y. – HIRAO, K. – ŠAJGALÍK, Pavol: “Thermal and optical properties of ternary silicon-nitrides”. In: 4th International Workshop on Spinel Nitrides and Related Materials,

- Ruedesheim/Rhine, Germany, 31st August to 5th September 2008.
- AFE04 LENČEŠ, Zoltán – ZHOU, You – BENCO, Ľubomír – VELIČ, Dušan – HIRAO, Kiyoshi – ŠAJGALÍK, Pavol: Electronic structure and optical properties of silicon-based ternary nitrides, In *2nd International Congress on Ceramics*, Verona, Italy (2008) p. 66
- AFE05 MADEJOVÁ, Jana: Possibilities of near IR spectroscopy in investigation of reduced charge smectites. In: *AluSiV*. Aberdeen, Scotland, UK (2008), p. 16
- AFE06 MALKIN, Vladimír: A fully relativistic calculations NMR parameters in the framework of the matrix Dirac-Kohn-Sham equation using a restricted magnetically balanced basis. In: *Current Trends in Theoretical Chemistry V*. Krakow, Poland (2008)
- AFE07 NEOGRADY, P. – NOGA, Jozef – PITONAK, M. – URBAN, M.: Towards a more accurate and more efficient coupled cluster implementation in the Bratislava Group' In: *48th Sanibel Symposium*. Georgia, USA, February 21-26, 2008: Gainesville, University of Florida 2008, p. 2
- AFE08 NOGA, Jozef: /R12/F12 based theories within and beyond the standard approximation. An analysis and some numbers. In: *Symposium on Atomic, Molecular and Optical Sciences and High Performance Computing*: Kalkata, Indian, (2008) p.27
- AFE09 ŠAJGALÍK Pavol: Road Map of Ceramics for Energy, In: *2nd International Congress on Ceramics*, Verona, Italy, 29. June – 4. July, 2008.
- AFE10 ŠAJGALÍK, Pavol: Ceramic Technologies for the Alternative Energy, KERMAT, Internhational Symposium: The New Frontiers of Ceramic Materials, Rimini Fair, Italy, 1 – 2 October.
- AFE11 ŠAJGALÍK, Pavol – HNATKO, Miroslav – LOJANOVÁ, Štefánia – LENČEŠ, Zoltán: SiC/Si₃N₄ nano/micro composites – materials with excellent properties Polish Ceramics: V International Scientific and Technological Conference, Krakow, September 14-17, 2008. – plenary lecture.
- AFE12 ŠAJGALÍK Pavol - HNATKO Miroslav - LOJANOVÁ Štefánia - LENČEŠ Zoltán: SiC/Si₃N₄ nano/micro composites – processing and mechanical properties, International Symposium on New Frontier of Advanced Si-Based Ceramics and Composites (ISASC-2008), Jeju Island, Korea, June 8 to 11th, 2008 .
- AFE13 ŠAJGALÍK, Pavol – LENČEŠ, Zoltán – HRIC, Ľubomír - PLACHKÝ, Tomáš – RIEDEL, R.: Novel non-oxide ceramics for application in extreme conditions, The 9th International Symposium on Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Applications, Shanghai, China, November 10-14, 2008.
- AFE14 ŠAJGALÍK, Pavol - LENČEŠ, Zoltán – ZHOU, Y. – BENCO, Ľubomír – HIRAO, K. – VELIČ, Dušan: Synthesis and physical properties of magnesium and lanthanum silicon nitride, In: *1st Symposium on Advanced Synthesis and Processing for Materials (ASPM08)*, Wuhan University of Technology, Wuhan, China, November 14-17, 2008.
- AFE15 ŠAJGALÍK, Pavol – PLACHKÝ, Tomáš – HRIC, Ľubomír – LENČEŠ, Zoltán – RIEDEL, R.: Processing and properties of silicon-based composites using polymer derived ceramics as sintering aids. In: *4th International Workshop on Spinel Nitrides and Related Materials*, Ruedesheim/Rhine, Germany, 31st August to 5th September 2008.

AFFA Abstrakty pozvaných príspevkov z medzinárodných vedeckých konferenciách poriadaných v SR

- AFFA01 ČEKLOVSKÝ, Alexander – BUJDÁK, Juraj – LANG, K.: Thin films of layered silicates with photochemically-active porphyrin cations. In: *8th Conference on Solid State Chemistry*. Júl 6-11. Bratislava (2008), p. 23

- AFFA02 DRÁBIK, Milan: The innovations of cement-based materials through materials chemistry. In 8th Conference on Solid State Chemistry. Bratislava. 6.7. - 7.7.2008. - Bratislava, 2008, p. 26.
- AFFA03 PLACHKÝ, Tomáš – LENČEŠ, Zoltán – HAUSER, Ralf – RIEDEL, Ralf – ŠAJGALÍK, Pavol: Densification of $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiAlOC}$ ceramic composites. In: 8th Conference on Solid State Chemistry. Júl 6-11. Bratislava (2008), p. 31

AFG Abstrakty príspevkov zo zahraničných konferencií

- AFG01 ANDREJKOVIČOVÁ, Slávka – JANOTKA, I. – KOMADEL, Peter: A blend of Al-rich and Fe-rich sodium bentonites - a potential filler for geosynthetic clay liners? In: 4th Mid-European Clay conference. Zakopane, Poland (2008), p. 38
- AFG02 BOČA, Miroslav – KUCHARÍK, Marián – KORENKO, Michal – JANIČKOVIČ, D.: Extrémne rýchle chladenie roztavených solí a iné pokročilé metódy výskumu – aplikácia na kryolitové taveniny. In: 60. Sjezd Chemických společností. Olomouc (2008), p. 605
- AFG03 BUJDÁK, Juraj – IYI, N.: Fluorescent resonant energy transfer in hybrid systems based on rhodamines and synthetic saponite. In: „Nano Ostrava 2008, 1st Nanomaterials and Nanotechnology Meeting”, Ostrava (2008), p. 29.
- AFG04 CZÍMEROVÁ, Adriana – BUJDÁK, Juraj – IYI, N.: Fluorescent resonance energy transfer in the systems based on layered inorganics and organic dyes. In: Nano Ostrava 2008, 1st Nanomaterials and Nanotechnology Meeting”, Ostrava (2008), p. 45.
- AFG05 ČEKLOVSKÝ, Alexander – BUJDÁK, Juraj: Molecular assemblies of cationic porphyrin dyes in colloidal dispersions of layered silicates. In: „Nano Ostrava 2008, 1st Nanomaterials and Nanotechnology Meeting”, Ostrava (2008), p.46.
- AFG06 FAJNOR, V.Š. – BOHÁKOVÁ, N. – HRACHOVÁ, Jana: Interakcia taveniny oktaedecylaminu s kaolinitom. In: 60. Sjezd Chemických společností. Olomouc (2008), p.680
- AFG07 FAJNOR, V.Š. – HRACHOVÁ, Jana: Vplyv vymeniteľných kationov alkalických kovov na rekryštalizáciu montmorillonitu z lokality Jelšovský potok. In: 60. Sjezd Chemických společností. Olomouc (2008), p. 682
- AFG08 FAJNOR, V.Š. – BOHÁKOVÁ, N. – HRACHOVÁ, Jana: Interakcia taveniny kyseliny steárovej s alofánom. In: 60. Sjezd Chemických společností. Olomouc (2008), p. 685
- AFG09 HEGEDŮSOVÁ, Lucia - DUSZA, Ján - HNATKO, Miroslav - ŠAJGALÍK, Pavol: Contact strength measurements and cone crack formation of Si_3N_4 and SiC based ceramics. In Metalurgija. ISSN 0543-5746, 2008, vol. 47, no. 3, p. 245.
- AFG10 HEGEDŮSOVÁ, Lucia - DUSZA, Ján - HNATKO, Miroslav - ŠAJGALÍK, Pavol: Meranie kontaktnej pevnosti a tvorba kónických trhlin v Si_3N_4 a SiC keramických materiáloch. In METAL 2008 : mezinárodní konference metalurgie a materiálů. - Ostrava : TANGER, 2008. ISBN 978-80-254-1987-8, CD ROM..
- AFG11 HNATKO, Miroslav – LOJANOVÁ, Štefánia – ŠAJGALÍK, Pavol: $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiC}$ nanocomposites prepared by the addition of $\text{SiO}_2 + \text{C}$ by hot pressing or gas pressure sintering method. In: The 9th International Symposium on Ceramic Materials and Components for Energy and Environmental Applications, Shanghai, Čína (2008), p. 134
- AFG12 HRACHOVÁ, Jana – BILLÍK, P. – KOMADEL, Peter – FAJNOR, V.Š.: The effect of organocations on the mechanochemical activation of montmorillonite. In: 4th Mid-European Clay conference. Zakopane, Poland (2008), p. 67
- AFG13 HRACHOVÁ, Jana – CHODÁK, I. – KOMADEL, Peter: Rubber-layer silicate (nano)composites. In: 4th Mid-European Clay conference. Zakopane, Poland (2008),

- p. 68
- AFG14 HROBÁRIK, Peter – KEMPER, S. – SCHLOERER, N.E. – MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír – KAUPP, M.: Prediction and interpretation of the NMR spectra of paramagnetic compounds using Density functional theory: The case of pentacoordinated Co(III) Jacobsen's catalyst. In: *19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry*. Santiago de Compostela, Spain (2008), p. 101B
- AFG15 HROBÁRIK, Peter – HORVÁTH, B. – SIGMUNDOVÁ, P. – ZÁHRADNÍK, 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: *19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry*. Santiago de Compostela, Spain (2008), p. 90B
- AFG16 HROBÁRIK, Peter: DFT investigation of paramagnetic NMR chemical shifts and spin-density distribution in decamethylmetallocenes and their metallocenium analogues. In: *Workshop on Modern Methods in Quantum Chemistry*. Mariapfarr, Austria (2008), p. 5
- AFG17 HROBÁRIK, Peter – KOMOROVSKÝ, Stanislav – REPISKÝ, Michal – MALKINA, Oľga – MALKIN, Vladimír: Quantum Chemical Prediction and Interpretation of NMR Spectra of Lanthanide/Actinide Complexes. In: *IP FUNMIG Final Workshop*. Karlsruhe, Germany (2008)
- AFG18 HROBÁRIKOVÁ, V. – HROBÁRIK, Peter – ZÁHRADNÍK, P.: Donor-pi-acceptor benzothiazole derivatives with reverse polarity for nonlinear optics. In: *19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry*. Santiago de Compostela, Spain (2008), p. 82
- AFG19 JANKOVIČ, Ľuboš: Adsorption of an acidic textile dye to organo-bentonite. In: *4th Mid-European Clay conference*. Zakopane, Poland (2008), p. 73
- AFG20 KEDŽUCH, Stanislav – NOGA, Jozef – ŠIMUNEK, J.: Recent developments in MP2-R12 and CCSD-R12 theories. In: *60. Sjezd Chemických společností*. Olomouc (2008)
- AFG21 KOMADEL, Peter: Iron in smectites as seen by infrared spectroscopy. In: *AluSiV*, Aberdeen, UK, 2008, p.6.
- AFG22 KOMOROVSKÝ, Stanislav: Dirac-Kohn-Sham calculations of shielding tensor with restricted magnetically balanced basis. In: *Workshop on Modern methods in Quantum Chemistry*, Mariapfarr, Austria (2008)
- AFG23 KORENKO, Michal – KUCHARÍK, Marián – OBONA, J.V. – JANIČKOVIČ, D. – CORDOBA, R. – DE TERASA, J.M.: Quadrate nanotubes made from deeply undercooled cryolite – alumina melts. In: *Joint Symposium on Molten Salts*. Kobe, Japonsko (2008), p. 65
- AFG24 KORENKO, Michal – HNATKO, Miroslav – PETRUŠKOVÁ, Viera – LENČEŠ, Zoltán – ŠAJGALÍK, Pavol – GALUSEK, Dušan – KLEMENT, R. – DUSZA, J. – KAŠIAROVÁ, M.: Corrosion of Si_3N_4 ceramics in high temperature media. In: *Joint Symposium on Molten Salts*. Kobe, Japonsko (2008), p. 60
- AFG25 KUCHARÍK, Marián – ŠIMKO, František: Vanád ako nečistota v elektrolyzéři na výrobu hliníka hall-héroultovým procesom. In: *60. Sjezd Chemických společností*. Olomouc (2008), p. 651
- AFG26 LENČEŠ, Zoltán – ZHOU, You – BENCO, Ľubomír – BARTÓTI, Imre - VELIČ, Dušan – HIRAO, Kiyoshi – ŠAJGALÍK, Pavol: Optical and thermal properties of ternary silicon nitrides. In: *4th International Workshop on Spinel Nitrides and Related Materials*, Rüdesheim, Nemecko (2008) p. 25
- AFG27 LENČEŠ, Zoltán – ZHOU, You – BENCO, Ľubomír – VELIČ, Dušan – HIRAO, Kiyoshi – ŠAJGALÍK, Pavol: Electronic structure, thermal and optical properties of magnesium and lanthanum silicon nitrides. In: *International Symposium on New Frontier of Advanced Si-Based Ceramics and Composites*, Jeju, Korea (2008) p. 38

- AFG28 MADEJOVÁ, Jana – PÁLKOVÁ, Helena – PENTRÁK, Martin – KOMADEL, Peter: Studies of acid-treated clay minerals by near infrared spectroscopy. In: *4th Mid-European Clay conference*. Zakopane, Poland (2008), p. 108
- AFG29 MALKIN, Vladimír: A fully relativistic calculations NMR parameters in the framework of the matrix Dirac-Kohn-Sham equation using a restricted magnetically balanced basis. In: *Current Trends in Theoretical Chemistry V*, Krakow, Poland (2008)
- AFG30 NOGA, Jozef – KEDŽUCH, Stanislav – ŠIMUNEK, J.: Coupled cluster F12 theory with Slater geminals. In: *Central European Symposium on Theoretical Chemistry*, Hejnice (2008)
- AFG31 NOGA, Jozef – ŠIMUNEK, J. – KEDŽUCH, Stanislav: On the one-particle basis set relaxation in R12 based theories. In: *Central European Symposium on Theoretical Chemistry Systems*. Hejnice (2008)
- AFG32 PÁLKOVÁ, Helena – MADEJOVÁ, Jana – PODOBINSKI, J. – KRYSCIĄK – CZERWENKA, J. – SERWICKA, E.M.: Acid sites developed on aluminated PCH derived from Laponite. In: *4th Mid-European Clay conference*. Zakopane, Poland (2008), p. 128
- AFG33 PENTRÁK, Martin – MADEJOVÁ, Jana: Acid dissolution of differently ordered kaolinites. In: *4th Mid-European Clay conference*. Zakopane, Poland (2008), p. 124
- AFG34 RODOVÁ, M. – CHROMČÍKOVÁ, Mária – NITSCH, K. – LIŠKA, Marek: Structural relaxation of Ce doped Na-Gd phosphate glass. In *AFCAT-GEFTA-STK 2008*, Mulhouse, Francúzsko. - Mulhouse, Francúzsko, 2008, p.123.
- AFG35 SCHOLTZOVÁ, Eva – SMRČOK, Ľubomír: Hydrogen bonding and vibrational spectra in kaolinite-dimethylsulfoxide and –dimethylselenoxide intercalates – a solid-state computational study. In: *4th Mid-European Clay Conference*. Zakopane, Poľsko (2008). p.144
- AFG36 SMRČOK Ľubomír – BRUNELLI M., BOČA Miroslav – KUCHARÍK Marián: Structure of K₂TaF₇ at 720 °C – a combined use of synchrotron powder data and solid state DFT calculations. In: *XVII. regional conference on powder diffraction – RPKD*. Valtice (2008), p. 43.
- AFG37 SMRČOK, Ľubomír – TUNEGA, Daniel – VALÚCHOVÁ, Jana – RAMIREZ-CUESTA, A.J. – IVANOV, A.: Inelastic neutron scattering (INS) study of hydrogen bonds in kaolinitedimethylsulfoxide intercalate. In: *4th Mid-European Clay conference*. Zakopane, Poland (2008), p. 149
- AFG38 STRYCHARZYK, M. – PÁLKOVÁ, Helena – ZIMOWSKA, M. – SERWICKA, E.M. – BAHRANOVSKI, K. – OLEJNICZAK, Z.: Montmorillonite-derived porous clay heterostructures (PCHs): A study of structure evolution. In: *4th Mid-European Clay conference*. Zakopane, Poland (2008), p. 158
- AFG39 VALÚCHOVÁ, Jana – KAVECKÝ, Š. – ČAPLOVIČOVÁ, M. – HEISLER, S. – JANEK, Marián: Synthesis of multiwall carbon nanotubes catalysed by smectite type of clays. In: *4th Mid-European Clay conference*. Zakopane, Poland (2008), p. 171
- AFG40 VARGA, Štefan: Long-range behaviour of density fitting in extended systems. In: *Central European Symposium on Theoretical Chemistry Systems*. Hejnice (2008)

AFHA Abstrakty príspevkov z medzinárodných vedeckých konferenciách poriadaných v SR

- AFHA01 ANDREJKOVIČOVÁ, Slávka – JANOTKA, I. – KOMADEL, Peter: Blends of sodium Al-rich and Fe-rich bentonites - potentially suitable fillers for geosynthetic clay liners. In: *8th Conference on Solid State Chemistry*. Júl 6-11. Bratislava, Slovakia, (2008), p. 240
- AFHA02 BOČA, Miroslav – KUCHARÍK, Marián – KORENKO, Michal – JANIČKOVIČ, D.: Application of rapid quenching on cryolite – alumina melts. In: *8th Conference on Solid State Chemistry*, Bratislava, Slovakia, 2008, p. 62

- AFHA03 BUJDÁK, Juraj – IYI, N.: Thin solid films based on layered silicates intercalated with J-type molecular assemblies of cyanine dye. In: *8th Conference on Solid State Chemistry*. Júl 6-11. Bratislava, Slovakia, (2008), p. 241
- AFHA04 CZÍMEROVÁ, Adriana – BUJDÁK, Juraj – ČEKLOVSKÝ, Alexander: Characterisation of the layer charge of smectites using interactions with thiazine and pyronin dyes. In: *8th Conference on Solid State Chemistry*. Júl 6-11. Bratislava, Slovakia, (2008), p. 243
- AFHA05 GALUSKOVÁ, Dagmar: Corrosion resistance of alumina and silicon nitride ceramics in water solution of sodium chloride. In: *3rd international conference Fractography of Advanced Ceramics*, Stará Lesná, Slovakia, 2008, p. 31.
- AFHA06 GALUSKOVÁ, Dagmar – HNATKO, Miroslav – GALUSEK, Dušan – KAŠIAROVÁ, Monika – ŠAJGALÍK, Pavol – DUSZA, Ján: The Influence of Corrosion in Aqueous NaCl Solution on Fracture and Strength of Structural Ceramics. In: *3rd international conference Fractography of Advanced Ceramics*, Stará Lesná, Slovakia, 2008, p. 26.
- AFHA07 HNATKO, Miroslav – LOJANOVÁ, Štefánia – LENČEŠ, Zoltán – ŠAJGALÍK, Pavol: Mechanical Properties of Si₃N₄/SiC Nanocomposite Prepared by Hot Pressing and Gas Pressure Sintering Methods. In: *3rd international conference Fractography of Advanced Ceramics*, Stará Lesná, Slovakia, 2008, p. 27.
- AFHA08 HRIC, Ľubomír – LENČEŠ, Zoltán – PLACHKÝ, Tomáš – ŠAJGALÍK, Pavol: Utilisation of SiOC glass as a sintering aid for preparation of SiC based material. In: *3rd international conference Fractography of Advanced Ceramics*, Stará Lesná, Slovakia, 2008, p. 32.
- AFHA09 JANKOVIČ, Ľuboš: Adsorption of acid red 88 onto organoclay. In: *8th Conference on Solid State Chemistry*. Júl 6-11. Bratislava, Slovakia 2008, p. 244
- AFHA10 KIPSOVÁ, Linda – LENČEŠ, Zoltán – ZHOU, You: Thermal and mechanical properties of MgSiN₂ and LaSi₃N₅ ceramics and their Si₃N₄ -based composites. In: *3rd international conference Fractography of Advanced Ceramics*, Stará Lesná, Slovakia, 2008, p. 33.
- AFHA11 KORENKO, Michal – KUCHARÍK, Marián – OBONA, J.V. – JANIČKOVIČ, D. – CORDOBA, R. – DE TERESA, J.M.: Quadrate nanotubes made from deeply undercooled cryolite – alumina melts. In: *8th Conference on Solid State Chemistry*. Bratislava, Slovakia, 2008, p. 64
- AFHA12 KOVALČÍKOVÁ, Alexandra – DUSZA, Ján – ŠAJGALÍK, Pavol: Strength degradation flaws in the liquid-phase-sintered SiC based ceramics. In: *3rd international conference Fractography of Advanced Ceramics*, Stará Lesná, Slovakia, 2008, p. 38.
- AFHA13 LENČEŠ, Zoltán – ZHOU, You – PLACHKÝ, Tomáš – BENCO, Ľubomír – VELIČ, Dušan – HIRAO, Kiyoshi – ŠAJGALÍK, Pavol: Silicon-based ternary nitrides: electronic structure and properties. In: *3rd international conference Fractography of Advanced Ceramics*, Stará Lesná, Slovakia, 2008, p. 34.
- AFHA14 LOJANOVÁ, Štefánia – HNATKO, Miroslav – LENČEŠ, Zoltán – ŠAJGALÍK, Pavol: Relationship between grain boundary chemistry and mechanical properties of Si₃N₄ based composites. In: *3rd international conference Fractography of Advanced Ceramics*, Stará Lesná, Slovakia, 2008, p. 35.
- AFHA15 PÁLKOVÁ, Helena – ZIMOWSKA, M. – MADEJOVÁ, Jana – SERWICKA, E.M.: Influence of the amount of cationic surfactant and its counterion on formation of porous clay heterostructures. In: *8th Conference on Solid State Chemistry*. Júl 6-11. Bratislava, Slovakia (2008), p. 144
- AFHA16 PENTRÁK, Martin – MADEJOVÁ, Jana: Effect of wetting/drying cycles on dissolution of K- and NH₄-montmorillonite in HCl. In: *8th Conference on Solid State Chemistry*. Júl 6-11. Bratislava, Slovakia, (2008), P. 250

- AFHA17 PLACHKÝ, Tomáš - LENČEŠ, Zoltán - HRIC, Ľubomír - DORČÁKOVÁ, Františka - ŠAJGALÍK, Pavol - RIEDEL, Ralf: Mechanical Properties of Si₃N₄/PDCs composites. In: *3rd international conference Fractography of Advanced Ceramics*, Stará Lesná, Slovakia, 2008, p. 36.
- AFHA18 PORUBČAN, Vladimír - KAPIŠINSKÝ, Igor - TÚNYI, Igor - ORLICKÝ, Oto - FUNAKI, Minoru - IŽDINSKÝ, Karol - HROUDA, František - ŠAJGALÍK, Pavol: Differences in magnetic properties between meteorite and tectites. In *Contributions to geophysics and geodesy : 11th Castle Meeting. Paleo, rock and environmental magnetism*. ISSN 1335-2806, 2008, vol. 38, special issue, p. 99.
- AFHA19 SEDLÁČEK, Jaroslav - GALUSEK, Dušan - RIEDEL, Ralf - HOFFMANN, Michael: Polymer-derived Al₂O₃-SiC nanocomposites: The influence of two-step hot isostatic pressing on the microstructure, hardness, and indentation fracture toughness. In: *3rd international conference Fractography of Advanced Ceramics*, Stará Lesná, Slovakia, 2008, p. 37.
- AFHA20 TATARKO, Peter - LOJANOVÁ, Štefánia - DUSZA, Ján - ŠAJGALÍK, Pavol: Fracture toughness of the Si₃N₄/SiC ceramics with rare-oxide sintering additives. In: *3rd international conference Fractography of Advanced Ceramics*, Stará Lesná, Slovakia, 2008, p. 39.
- AFHA21 MILATA, V. - SOLČAN, T. - SCHOLTZOVÁ, Eva - LANGER, V.: Structure determination of bezazolyaminoethy-lenes using CP MAS NMR and X-ray analysis. In: *8th Conference on Solid State Chemistry*. Júl 6-11. Bratislava (2008), p. 56

BDFA Odborné práce v domácich nekarentovaných časopisoch impaktovaných

- BDFA01 BALKOVIC, Svetozár - DRÁBIK, Milan: Cementy a betóny súčasnosti a budúcnosti. In *Stavebnícka ročenka*, 2008, p. 148-150.

BEF Odborné práce v domácich nerecenzovaných zborníkoch (konferenčných aj nekonferenčných)

- BEF01 BALKOVIC, Svetozár - DRÁBIK, Milan: Síranové poškodenie betónov a mált. In *Workshop 3: Technologické postupy spracovania prírodných nanomateriálov a ich význam v priemyslových aplikáciach*. Turčianske Teplice, 5-7.máj 2008. - Turčianske Teplice, 2008, p.94-104.
- BEF02 DRÁBIK, Milan - BALKOVIC, Svetozár: "Macro-Defect-Free" materiály - výzva pre chémiu a technológiu?. In *Workshop 3: Technologické postupy spracovania prírodných nanomateriálov a ich význam v priemyslových aplikáciach*. Turčianske Teplice, 5-7.máj 2008. - Turčianske Teplice, 2008, p.5-11.
- BEF03 PALOU, M. - DOVÁL, M. - DRÁBIK, Milan: Application of sol-gel method to synthesize nanoparticles of clinker minerals with upgraded hydration properties. In: *Workshop 3: Technologické postupy spracovania prírodných nanomateriálov a ich význam v priemyslových aplikáciach*. Turčianske Teplice, 2008, p. 31-41

FAI Redakčné a zostavovateľské práce knižného charakteru (bibliografie, encyklopédie, katalógy, slovníky, zborníky...)

- FAI01 BERTO, A.M. - BEST, S. - DAVIDOVITS, J. - FANTOZZI, G. - FISCHER, H. - HAMPSHIRE, S. - HOFFMANN, M. - JANTUNEN, H. - MANDAL, H. - MURALT, P. - RIEDEL, R. - ŠAJGALÍK, Pavol - SUVOROV, D. - VAN Der BIEST, O. - YLÄNEN, H.: Road maps editors. In: *Global Roadmap for Ceramics*, A. Bellosi, Babini G.N. ed. Taliansko, (2008), ISBN 978-88-8080-084-2 p. 1-833.

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

- GII01 ŠAJGALÍK, Pavol - HNATKO, Miroslav - LOJANOVÁ, Štefánia: Keramika ako ju

- nepoznáme. *Silikátnik*, VEDA, vydavateľstvo SAV, p. 75-98, (2008).
GII02 ŠAJGALÍK, Pavol – LENČEŠ, Zoltán: Príprava konštrukčnej keramiky spekaním. *Silikátnik*, VEDA, vydavateľstvo SAV, p. 99-109, (2008).

BCI Učebné texty obsahujúce metodické materiály, návody na cvičenia a pod.

- BCI01 DRÁBIK, Milan: Transdisciplinarita anorganickej a materiálovej chémie: Učebný text študijného predmetu "Nové trendy výskumu v anorganickej a materiálovej chémii". Bratislava : Omega Info, (2008), p. 1-50. ISBN 978-80-89337-01-9.
BCI02 BUJDÁK Juraj, C. Igaz, J. Kmeťová, M. Lichvárová, M. Melicherčík, I. Nagzová, M. Prokša, M. Putala: Súťažné úlohy chemickej olympiády v kategórii B, Chemické rozhľady 2/2008, IUVENTA, Bratislava, ISSN 1335 - 8391
BCI03 KEDŽUCH Stanislav, A. Boháč, B. Lakatoš, A. Ďuricová, M. Putala, M. Gánovská, J. Regulí, K. Jesenák, M. Sališová, A. Sirota, A. Kicková, P. Tarapčík, E. Kulichová: Súťažné úlohy chemickej olympiády v kategórii F, Chemické rozhľady, IUVENTA, Bratislava, ISSN 1335 - 8391, 2008

Ohlasy (citácie)

AARSET,K. – CSÁSZÁR,AG. – SIBERT, EL. – ALLEN, WD. – SCHAEFER,HF. – KLOPPER,W. – NOGA,J. Anharmonic force field, vibrational energies, and barrier to inversion of SiH_3^- . In: *Journal of Chemical Physics*. Vol. 3, no. 9 (2000), p. 4053-4063
Citácie z WOK: 1

1. Call ST; Zubarev DY; Boldyrev AI
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (7) 1177-1186, 2007

AQUINO,AJA. – TUNEGA,D. – HABERHAUER,G. – GERZABEK,M. – LISCHKA,H. A density functional theoretical study on solvated Al^{3+} -oxalate complexes: structures and thermodynamic properties. In: *Physical Chemistry Chemical Physics*. Vol. 2, no. 13 (2000) p. 2845-2850
Citácie z WOK: 1

2. Melero C; Guijarro A; Baumann V; Perez-Jimenez AJ; Yus M
EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY (33) 5514-5526, 2007

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 WOK: 1

3. de Noronha ALO; Guimaraes L; Duarte HA
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (3) 930-937, 2007

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 WOK: 5

4. Rodriguez-Cuamatzi P; Arillo-Flores OI; Bernal-Urucurtu MI; Hoepfl H
SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY 19 (8) 559-578, 2007
5. Marenich AV; Olson RM; Chamberlin AC; Cramer CJ; Truhlar DG
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (6) 2055-2067, 2007
6. Bugrin VS; Melik-Nubarov NS
POLYMER SCIENCE SERIES A 49 (9) 1034-1044, 2007
7. Russ JL; Gu J; Tsai KH; Glass T; Duchamp JC; Dorn HC
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (22) 7018-7027, 2007
8. Oliveira BG; Araujo RCMU; Carvalho AB; Ramos MN; Hernandez MZ; Cavalcante KR
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 802 (1-3) 91-97, 2007

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 WOK: 3

9. Aronov D; Rosenman G
SURFACE SCIENCE 601 (21) 5042-5049, 2007
10. Aronov D; Molotskii M; Rosenman G
PHYSICAL REVIEW B 76 (3) Art. No. 035437,2007
11. Churakov SV
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 71 (5) 1130-1144, 2007

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 WOK: 3

12. Rimola A; Sodupe M; Ugliengo P
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (26) 8333-8344, 2007
13. Rimola A; Rodriguez-Santiago L; Ugliengo P; Sodupe M
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (20) 5740-5747, 2007
14. Meng M; Xia LY; Guo LH
ACTA PHYSICO-CHEMICA SINICA 23 (1) 32-36, 2007

Citácie zo SCO: 2

15. Farkas E; Sovago I
AMINO ACIDS PEPTIDES AND PROTEINS (36) 287-345, 2007
16. Boekfa B; Sirijaraensre J; Limtrakul P; Pantu P; Limtrakul J
NSTI NANOTECHNOLOGY CONFERENCE AND TRADE (1) 454-457, 2007

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 WOK: 5

17. Kossmann S; Kirchner B; Neese F
MOLECULAR PHYSICS 105 (15-16) 2049-2071, 2007
18. Brancato G; Rega N; Barone V
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (49) 15380-15390, 2007

19. Cimino P; Pavone M; Barone V
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (34) 8482-8490, 2007
20. Pavone M; Cimino P; Crescenzi O; Sillanpaa A; Barone V
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (30) 8928-8939, 2007
21. Tuononen HM; Chivers T; Armstrong A; Fedorchuk C; Boere RT
JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY 692 (13) 2705-2715, 2007

Citácie zo SciFinder: 1

22. Neese F
ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE (20) 73-95, 2007

BALOG,M. – ŠAJGALÍK,P. – HNATKO,M. – LENČEŠ,Z. – MONTEVERDE,E. – KEČKÉŠ,J. – HUANG,JL. Nano- versus macro-hardness of liquid phase sintered SiC. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 25, no. 4 (2005), p. 529-534

Citácie z WOK: 1

23. Lee SM; Kim TW; Lim HJ; Kim C; Kim YW; Lee KS
JOURNAL OF THE CERAMIC SOCIETY OF JAPAN 115 (1341) 304-309, 2007

BALOG,M. – KEČKÉŠ,J. – SCHÖBERL,T. – GALUSEK,D. – HOFER,F. – KŘEŠŤAN,J. – LENČEŠ,Z. – HUANG,JL. – ŠAJGALÍK,P. Nano/macro-hardness and fracture resistance of Si₃N₄/SiC composites with up to 13 wt.% of SiC nano-particles. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 27, no. 5 (2007), p. 2145-2152

Citácie z WOK: 1

24. Li J; Riedel R
JOURNAL OF THE AMERICAN CERAMIC SOCIETY 90 (12) 3786-3792, 2007

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 WOK: 1

25. Yanai T; Chan GKL
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (10) Art. No. 104107, 2007

BARTLETT,RJ. – WATTS,JD. – KUCHARSKI,SA. – NOGA,J. Non-iterative fifth-order triple and quadruple excitation energy corrections in correlated methods. In: *Chemical Physics Letters*. Vol. 165, no. 6 (1990), p. 513-522

Citácie z WOK: 24

26. Karton A; Martin JML
MOLECULAR PHYSICS 105 (19-22) 2499-2505, 2007
27. Matthews DA; Vazquez J; Stanton JF
MOLECULAR PHYSICS 105 (19-22) 2659-2666, 2007
28. Distasio RA; Steele RP; Head-Gordon M
MOLECULAR PHYSICS 105 (19-22) 2731-2742, 2007
29. Fang T; Li SH
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (20) Art. No. 204108, 2007
30. Miliordos E; Papakondylis A; Tsekouras AA; Mavridis A
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (39) 10002-10009, 2007
31. Uhlar M; Cernusak I
COLLECTION OF CZECHOSLOVAK CHEMICAL COMMUNICATIONS 72 (8) 1122-1138, 2007
32. Karton A; Taylor PR; Martin JML
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (6) 10.1063/1.2755751, 2007
33. Belau L; Wheeler SE; Ticknor BW; Ahmed M; Leone SR; Allen WD; Schaefer HF; Duncan MA
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (33) 10229-10243, 2007
34. Kasalova V; Allen WD; Schaefer HF; Pillai ED; Duncan MA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (31) 7599-7610, 2007
35. Distasio RA; Head-Gordon M
MOLECULAR PHYSICS 105 (8) 1073-1083, 2007
36. Cortez MH; Brinkmann NR; Polik WF; Taylor PR; Bomble YJ; Stanton JF
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (4) 1267-1274, 2007
37. Janowski T; Ford AR; Pulay P
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (4) 1368-1377, 2007
38. Cernusak I; Dallos M; Lischka H; Muller T; Uhlar M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (21) Art. No. 214311, 2007
39. Karton A; Ruscic B; Martin JML
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE – THEOCHEM 811 (1-3) 345-353, 2007
40. Wheeler SE; Robertson KA; Allen WD; Schaefer HF; Bomble YJ; Stanton JF
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (19) 3819-3830, 2007
41. Kotke M; Schreiner PR
SYNTHESIS – STUTTGART (5) 779-790, 2007
42. Vazquez J; Stanton JF
MOLECULAR PHYSICS 105 (1) 101-109, 2007
43. Wheeler SE; Schleyer PV; Schaefer HF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (10) Art. No. 104104, 2007

44. Miliordos E; Mavridis A
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (10) 1953-1965, 2007
45. Hiberty PC; Volatron F
HETEROATOM CHEMISTRY 18 (2) 129-134, 2007
46. Cernusak I; Cukovicova M; Asiama AA; Gregurick SK; Hoover PA; Tsay SC; Liebman JF
COLLECTION OF CZECHOSLOVAK CHEMICAL COMMUNICATIONS 72 (2) 269-277, 2007
47. Distasio RA; Steele RP; Rhee YM; Shao YH; Head-Gordon M
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (5) 839-856, 2007
48. Haefner F; Marquez M; Gonzalez C
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (2) 268-272, 2007
49. Kerkines ISK; Mavridis A
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (2) 371-374, 2007

BENCO,I. – BARRAS,JL. – DAUL,CA. – DEISS,E. Theoretical study of the intercalation of Li into TiO₂ structures. In: *Inorganic Chemistry*. Vol. 38, no. 1 (1999), p. 20-28

Citácie z WOK: 1

50. Jirkovsky J; Macounova K; Dietz H; Plieth W; Krtel P; Zalis S
COLLECTION OF CZECHOSLOVAK CHEMICAL COMMUNICATIONS 72 (2) 171-184, 2007

BENCO,I. – DEMUTH,T. – HAFNER,J. – HUTSCHKA,F. Brønsted acid sites in gmelinite. In: *Journal of Chemical Physics*. Vol. 111, no. 16 (1999), p. 7537-7545

Citácie zo SCO: 2

51. Nachtigall; P Sauer; J
STUDIES IN SURFACE SCIENCE AND CATALYSIS 168 701-736, 2007
52. Lercher; JA Jentys; A
STUDIES IN SURFACE SCIENCE AND CATALYSIS 168 435-476, 2007

BENCO,I. – 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 2001

Citácie z WOK: 1

53. Ruiz-Salvador AR; Almora-Barrios N; Gomez A; Lewis DW
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (4) 521-532, 2007

BENCO,I. – 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 WOK: 3

54. Cremel S; Zamama O; Dossot M; Lambert J; Humbert B; Ehrhardt JJ
COMPTES RENDUS CHIMIE 10 (10-11) 1050-1059, 2007
55. Balan E; Lazzeri M; Mauri F; Calas G
EUROPEAN JOURNAL OF SOIL SCIENCE 58 (4) 870-881, 2007
56. Larentzos JP; Greathouse JA; Cygan RT
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (34) 12752-12759, 2007

Citácie zo SCO: 1

57. Słonka T; Głowinski J; Mielcarek W; Leluk K; Orzechowski K
SCIENTIFIC PAPERS 46 176-179, 2007

BENCO,I. – TUNEGA,D. – HAFNER,J. – LISCHKA,H. Upper limit of the O-H...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 WOK: 2

58. Larentzos JP; Greathouse JA; Cygan RT
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (34) 12752-12759, 2007
59. Zhang B; Li YF; Pan XB; Jia X; Wang XL
JOURNAL OF PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDS 68 (2) 135-142, 2007

BENCO,I. – 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 WOK: 1

60. Cremel S; Zamama O; Dossot M; Lambert J; Humbert B; Ehrhardt JJ
COMPTES RENDUS CHIMIE 10 (10-11) 1050-1059, 2007

BENCO,I. – DEMUTH,T. – HAFNER,J. – HUTSCHKA,E. – TOULHOAT,H. Linear hydrocarbons adsorbed in the acid zeolite gmelinite at 700 K ab initio molecular dynamics simulation of hexane and hexane. In: *Journal of Catalysis*. Vol. 205, no. 1 (2002), p. 147-156

Citácie z WOK: 1

61. Dabbagh HA; Teimouri A; Chermahini AN
APPLIED CATALYSIS B 76 (1-2) 24-33, 2007

BENCO,Ľ. – DEMUTH,T. – HUTSCHKA,F. Catalytic conversion of hydrocarbons over zeolites from first principles. In: *Computational Materials Science*. Vol. 27, no. 1-2 (2003), p. 87-95

Citácie z WOK: 1

62. Song L; Sun Z; Duan L; Gui H; McDougall GS
MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS 104 (1-3) 115-128, 2007

BENCO,Ľ. – HAFNER,J. – HUTSCHKA,F. – TOULHOAT,H. Physisorption and chemisorption of n-olefins in the zeolite main channel. Ab initio study of the gmelinite structure. In: *Journal of Physical Chemistry B*. Vol. 107, no. 36 (2003), p. 9756-9762

Citácie z WOK: 3

63. Gleeson D; Limtrakul J
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 824 (1-3) 23-31, 2007
64. Guo YH; Pu M; Li HF; Liu LY; Chen BH
MATERIALS CHEMISTRY AND PHYSICS 106 (2-3) 394-398, 2007
65. Guo YH; Pu M; Wu JY; Zhang JY; Chen BH
APPLIED SURFACE SCIENCE 254 (2) 604-609, 2007

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 WOK: 3

66. Joshi YV; Thomson KT
JOURNAL OF CATALYSIS 246 (2) 249-265, 2007
67. Arean CO; Nachtigallova D; Nachtigall P; Garrone E; Delgado MR
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (12) 1421-1436, 2007
68. Cheung P; Bhan A; Sunley GJ; Law DJ; Iglesia E
JOURNAL OF CATALYSIS 245 (1) 110-123, 2007

BENCO,Ľ. – BUČKO,T. – HAFNER,J. – TOULHOAT,H. Periodic DFT calculations of the stability of Al/Si substitutions and extraframework Zn²⁺ cations in mordenite and reaction pathway for the dissociation of H₂ and CH₄. In: *Journal of Physical Chemistry B*. Vol. 109, no. 43 (2005), p. 20361-20369

Citácie z WOK: 4

69. Torninaga H; Nagai M
APPLIED CATALYSIS A-GENERAL 328 (1) 35-42, 2007
70. Barbosa LAMM; van Santen RA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (23) 8337-8348, 2007
71. Joshi YV; Thomson KT
JOURNAL OF CATALYSIS 246 (2) 249-265, 2007
72. Pidko EA; van Santen RA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (6) 2643-2655, 2007

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 WOK: 5

73. Dinca M; Long JR
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (36) 11172-11176, 2007
74. Thuwachaowsoan K; Chotpattananont D; Sirivat A; Rujiravanit R; Schwank JW
MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING B 140 (1-2) 23-30, 2007
75. Barbosa LAMM; van Santen RA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (23) 8337-8348, 2007
76. Torres FJ; Vitillo JG; Civalieri B; Ricchiardi G; Zecchina A
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (6) 2505-2513, 2007
77. Dinca M; Han WS; Liu Y; Dailly A; Brown CM; Long JR
ANGEWANDTE CHEMIE 46 (9) 1419-1422, 2007

Citácie zo SCO: 1

78. Nachtigall P; Sauer J
STUDIES IN SURFACE SCIENCE AND CATALYSIS 168 701-736, 2007

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 WOK: 11

79. Jansma A; Zhang Q; Li B; Ding Q; Uno T; Bursulaya B; Liu Y; Furet P; Gray NS; Geierstanger BH
JOURNAL OF MEDICINAL CHEMISTRY 50 (24) 5875-5877, 2007
80. van Mourik T; Dingley AJ
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (44) 11350-11358, 2007
81. Vokacova Z; Sponer J; Sponer JE; Sychrovsky V
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (36) 10813-10824, 2007
82. Marek R; Lycka A; Kolehmainen E; Sievanen E; Tousek J
CURRENT ORGANIC CHEMISTRY 11 (13) 1154-1205, 2007
83. Tafazzoli M; Grhiasi M
CARBOHYDRATE RESEARCH 342 (14) 2086-2096, 2007

84. Del Bene JE; Elguero J
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (28) 6443-6448, 2007
85. Pham TN; Griffin JM; Masiero S; Lena S; Gottarelli G; Hodgkinson P; Fillip C; Brown SP
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (26) 3416-3423, 2007
86. Del Bene JE
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (25) 5509-5514, 2007
87. Cremer D; Grafenstein J
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (22) 2791-2816, 2007
88. Sass HJ; Schmid FFF; Grzesiek S
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (18) 5898-5903, 2007
89. van Mourik T; Dingley AJ
CHEMPHYSICHEM 8 (2) 288-296, 2007

BISHOP,J. – MADEJOVÁ,J. – KOMADEL,P. – FRÖSCHL,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 WOK: 2

90. Egli M; Mirabella A; Sartori G; Giaccari D; Zanelli R; Plotze M
CLAY MINERALS 42 (3) 373-398, 2007
91. Guinness EA; Arvidson RE; Jolliff BL; Seelos KD; Seelos FP; Ming DW; Morris RV; Graff TG
JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH 112 (8) Art. No. E08S11, 2007

BLUDSKÝ,O. – SILHAN,M. – NACHTIGALL,P. – BUČKO,T. – BENCOŮ. – 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 WOK: 5

92. Rejmak P; Sierka M; Sauer J
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (4) 5446-5456, 2007
93. Zheng XB; Zhang YH; Bell AT
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (36) 13442-13451, 2007
94. Ivanova E; Mihaylov M; Aleksandrov HA; Daturi M; Thibault-Starzyk F; Vayssilov GN; Rosch N; Hadjiivanov KI
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (28) 10412-10418, 2007
95. Zhang Y; Lin H; Truhlar DG
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (4) 1378-1398, 2007
96. Barbosa LAMM; van Santen RA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (23) 8337-8348, 2007

Citácie zo SCO: 2

97. Llewellyn PL; Maurin G
STUDIES IN SURFACE SCIENCE AND CATALYSIS 168 555-610, 2007
98. Morpurgo, S Moretti, G Bossa, M
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (3) 417-424, 2007

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 2000

Citácie z WOK: 1

99. Paital AR; Sarkar M; Mikuriya M; Ray D
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY 30 4762-4769, 2007

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 WOK: 1

100. Halcrow MA
POLYHEDRON 26 (14) 3523-3576, 2007

BOČA,M. – SVOBODA,I. – RENZ,F. – FUESS,H. Poly [methylammonium tris(μ_2 -formato- κ^2 O:O)cobalt(II)]. In: *Acta crystallographica C*. Vol. 60 (2004), p. 631-633

Citácie z WOK: 1

101. Wang CX; Zhou XM; Shi WY
ACTA CRYSTALLOGRAPHICA E 63 411-412, 2007

BOČA,M. – IZAKOVIČ,M. – KICKELBICK,G. – VALKO,M. – RENZ,F. – FUESS,H. – MATUZNÁ,K. Structure of the copper(II) perchlorate complex with Schiff base ligand containing pyridine N-oxide fragments and propylene bridges: Solvatochromic effect. In: *Polyhedron*. Vol. 24, no. 15 (2005), p. 1913-1921 2005

Citácie z WOK: 1

102. Gao FX; Gu W; Qian J; Yang YS; Yan SP
APPLIED ORGANOMETALLIC CHEMISTRY 21 (5) 350-354, 2007

BOČA,R. – BARAN,P. – BOČA,M. – DLHÁŇ,L. – FUESS,H. – HASSE,W. – LINERT,W. – PAPÁNKOVÁ,B. – WERNER,R. Spin crossover in bis(2,6-bis(benzimidazol-2yl)pyridine)iron(II) tetraphenylborate. In: *Inorganica Chimica Acta*. Vol. 278, no. 2 (1998), p. 190-196

Citácie z WOK: 1

103. Halcrow MA
POLYHEDRON 26 (14) 3523-3576, 2007

BOČA,R. – BOČA,M. – JAROŠČIAK,R. – VRBOVÁ,M. Cooperativeness of the spin crossover systems. In: *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. Vol. 355, p. 551-560 1999

Citácie zo SCO: 1

104. Halcrow MA
POLYHEDRON 26 (14) 3523-3576, 2007

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 WOK: 8

105. Roy P; Mara K; Chakraborty J; Nethaji M Banerjee P
INDIAN JOURNAL OF CHEMISTRY A 46 (12) 1947-1950, 2007
106. Nasser JA; Topcu S; Chassagne L; Bousseksou A; Guillon T; Alayli Y
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 446 (4-6) 385-390, 2007
107. Halcrow MA
POLYHEDRON 26 (14) 3523-3576, 2007
108. Hayami S; Motokawa N; Shuto A; Moriyama R; Masuhara N; Inoue K; Maeda Y
POLYHEDRON 26 (9-11) 2375-2380, 2007
109. Singh S; Roesky HW
DALTON TRANSACTIONS 14 1360-1370, 2007
110. Hagiwara H; Hashimoto S; Matsumoto N; Iijima S
INORGANIC CHEMISTRY 46 (8) 3136-3143, 2007
111. Zhang W; Zhao F; Liu T; Yuan M; Wang ZM; Gao S
INORGANIC CHEMISTRY 46 (7) 2541-2555, 2007
112. Pritchard R; Kilner CA; Halcrow MA
CHEMICAL COMMUNICATIONS 6 577-579, 2007

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 WOK: 3

113. Nasser JA; Topcu S; Chassagne L; Bousseksou A; Guillon T; Alayli Y
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 446 (4-6) 385-390, 2007
114. Halcrow MA
POLYHEDRON 26 (14) 3523-3576, 2007
115. Devereux M; Shea DO; Kellett A; McCann M; Walsh M; Egan D; Deegan C; Kgdziora K; Rosair G; Muller-Bunz H
JOURNAL OF INORGANIC BIOCHEMISTRY 101 (6) 881-892, 2007

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 WOK: 4

116. Chakraborty J; Roy P; Mayer-Figge H; Sheldrick WS; Banerjee P
POLYHEDRON 26 (14) 3609-3616, 2007
117. van Albada GA; van der Horst MG; Mutikainen I; Turpeinen U; Reedijk J
INORGANIC CHEMISTRY COMMUNICATIONS 10 (9) 1014-1018, 2007
118. Mautner FA; Landry CN; Gallo AA; Massoud SS
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE 837 (1-3) 72-78, 2007
119. Shevchenko DV; Petrusenko SR; Kokozay VN; Tomkiewicz A; Klak J; Mrozinski J; Krasovska MV; Shishkin OV; Linert W
INORGANICA CHIMICA ACTA 360 (8) 2846-2850, 2007

BOČA,R. – RENZ,F. – BOČA,M. – FUESS,H. – HAASE,W. – KICKELBICK,G. – LINERT,W. – VRBOVÁ-SCHIKORA,M. Tuning the spin crossover above room temperature: iron(II) complexes of substituted and deprotonated 2,6-bis(benzimidazol-2-yl)pyridine. In: *Inorganic Chemistry Communications*. Vol. 8, no. 2 (2005), p. 227-230

Citácie z WOK: 4

120. Shongwe MS; Al-Rashdi BA; Adams H; Morris MJ; Mikuriya M; Hearne GR
INORGANIC CHEMISTRY 46 (23) 9558-9568, 2007
121. Halcrow MA
POLYHEDRON 26 (14) 3523-3576, 2007
122. Zhao PS; Yu HQ; Hu LH; Man E; Wang X
POLISH JOURNAL OF CHEMISTRY 81 (8) 1511-1519, 2007

123. Zhang W; Zhao F; Liu T; Yuan M; Wang ZM; Gao S
INORGANIC CHEMISTRY 46 (7) 2541-2555, 2007

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 WOK: 3

124. Rodriguez YMV; Beltran HI; Vazquez-Labastida E; Linares-Lopez C; Salmon M
JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH 22 (3) 788-800, 2007
125. Yahiaoui A; Hachemaoui A; Belbachir M
JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE 104 1792-1800, 2007
126. Harrane A; Naar N; Belbachir M
MATERIALS LETTERS 61 (17) 3555-3558, 2007

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 1995
Citácie z WOK: 3

127. Wallis PJ; Gates WP; Patti AF; Scott JL; Teoh E
GREEN CHEMISTRY 9 (9) 980-986, 2007
128. Bhattacharyya KG; Sen Gupta S
INDUSTRIAL AND ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH 46 (11) 3734-3742, 2007
129. Rodriguez YMV; Beltran HI; Vazquez-Labastida E; Linares-Lopez C; Salmon M
JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH 22 (3) 788-800, 2007

Citácie zo SCO: 1

130. Oberto T; Sanchez J; Gonzalez E; Solano R; Corrujo G; Moran C; Moronta A
REVISTA TECNICA DE LA FACULTAD DE INGENIERIA UNIVERSIDAD DEL ZULIA 30 (2) 143-150, 2007

BREEN,C. – WATSON,R. – MADEJOVÁ,J. – KOMADEL,P. - KLAPYTA Z. Acid-activated organoclays: Preparation, characterization and catalytic activity of acid-treated tetraalkylammonium-exchanged smectites. In: *Langmuir*. Vol. 13, no. 24 (1997), p. 6473-6479
Citácie z WOK: 6

131. Rachwalik R; Olejniczak Z; Jiao J; Huang J; Hunger M; Sulikowski B
JOURNAL OF CATALYSIS 252 (2) 161-170, 2007
132. Shen W; He HP; Zhu JX; Yuan P; Frost RL
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 313 (1) 268-273, 2007
133. Maki-Arvela P; Holmbom B; Salmi T; Murzin DY
CATALYSIS REVIEWS 49 (3) 197-340, 2007
134. Zhou Q; He HP; Frost RL; Xi YF
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (20) 7487-7493, 2007
135. Zhou Q; Frost RL; He HP; Xi YF
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 307 (1) 50-55, 2007
136. Carmody O; Frost R; Xi YF; Kokot S
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 305 (1) 17-24, 2007

Citácie zo SCO: 1

137. Silva AA; Valenzuela-Diaz FR; Martins GSV; Rodrigues MGF
CERAMICA 53 (328) 417-422, 2007

BREEN,C. – ZAHOO,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 WOK: 4

138. Tran NH; Wilson MA; Milev AS; Dennis GR; Kannangara GSK
SURFACE REVIEW AND LETTERS 14 (2) 235-239, 2007
139. Noyan H; Muserref O; Sarikaya Y
FOOD CHEMISTRY 105 (1) 156-163, 2007
140. Yahiaoui A; Hachemaoui A; Belbachir M
JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE 104 1792-1800, 2007
141. Harrane A; Naar N; Belbachir M
MATERIALS LETTERS 61 3555-3558, 2007

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. 12 (2000), p. 93-104
Citácie z WOK: 4

142. Song RJ; Wang Z; Meng XY; Zhang BY; Tang T
JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE 106 (5) 3488-3494, 2007
143. Li J; Wang ZY; Yang X; Hu L; Liu YW; Wang CX
JOURNAL OF ANALYTICAL AND APPLIED PYROLYSIS 80 (1) 247-253, 2007
144. Song RJ; Jiang ZW; Bi WG; Cheng WX; Lu J; Huang BT; Tang T
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 13 (11) 3234-3240, 2007

145. Sojak L; Kubinec R; Jurdakova H; Hajekova E; Bajus M
JOURNAL OF ANALYTICAL AND APPLIED PYROLYSIS 78 (2) 387-399, 2007

Citácie zo SCO: 1

146. Jie L; Yuwen L; Jingyan S; Zhiyong W; Ling H; Xi Y; Cunxin W
THERMOCHIMICA ACTA 467 (1-2) 20-29, 2007

BUČKO,T. – BENCO,Ľ. – DEMUTH,TH. – HAFNER,J. Ab initio density functional investigation of the (001) surface of mordenite. In: *Journal of Chemical Physics*. Vol. 117, no. 15 (2002), p. 7295-7305

Citácie zo SCO: 2

147. Lercher JA; Jentys A
STUDIES IN SURFACE SCIENCE AND CATALYSIS 168 435-476, 2007
148. Jansang B; Nanok T; Limtrakul J
JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A 264 (1-2) 33-39, 2007

BUČKO,T. – HAFNER,J. – BENCO,Ľ. 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 WOK: 5

149. Zhang Z; Xing JP; Li J; Yang XG
JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A 275 (1-2) 36-46, 2007
150. Thomas B; Prathapan S; Sugunan S
CHEMICAL ENGINEERING JOURNAL 133 (1-3) 59-68, 2007
151. Fernandez AB; Lezcano-Gonzalez I; Boronat M; Blasco T; Corma A
JOURNAL OF CATALYSIS 249 (1) 116-119, 2007
152. Hunger M
CHEMIE INGENIEUR TECHNIK 79 (6) 781-793, 2007
153. Thomas B; Prabhu UR; Prathapan S; Sugunan S
MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS 102 (1-3) 138-150, 2007

Citácie zo SCO: 1

154. Catlow R; Bell R; Cora F; Slater B
STUDIES IN SURFACE SCIENCE AND CATALYSIS 168 659-700, 2007

BUČKO,T. – HAFNER,J. – BENCO,Ľ. 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 WOK: 1

155. Zicovich-Wilson CM; San-Roman ML; Cambor MA; Pascale F; Durand-Niconoff JS
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (37) 11512-11523, 2007

Citácie zo SCO: 1

156. Regli L; Lamberti C; Busco C; Zecchina A; Prestipino C; Lillerud KP; Zones SI; Bordiga S
STUDIES IN SURFACE SCIENCE AND CATALYSIS A 170 585-593, 2007

BUJDÁK,J. – SLOSIARIKOVÁ,H. The reaction of montmorillonite with octadecylamine in solid and melted state. In: *Applied Clay Science*. Vol. 7 (1992), p. 263-269

Citácie z WOK: 1

157. Khaorapapong N; Ogawa M
APPLIED CLAY SCIENCE 35 (1-2) 31-38, 2007

BUJDÁK,J. – SLOSIARIKOVÁ,H. – ČÍČEL,B. Interaction of long chain alkylammonium cations with reduced charge montmorillonite. In: *Journal of Inclusion Phenomena and Molecular Recognition in Chemistry*. Vol. 13, no. 4 (1992), p. 321-327

Citácie z WOK: 1

158. Chavarria F; Nairn K; White P; Hill AJ; Hunter DL; Paul DR
JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE 105 (5) 2910-2924, 2007

BUJDÁK,J. – SLOSIARIKOVÁ,H. – TEXLER,N. – SCHWENDINGER,M. – RODE,BM. On the possible role of montmorillonite in prebiotic peptide formation. In: *Monatshefte für Chemie*. Vol. 125, no. 10 (1994), p.1033-1039

Citácie z WOK: 1

159. Stievano L; Piao LY; Lopes I; Meng M; Costa D; Lambert JF
EUROPEAN JOURNAL OF MINERALOGY 19 (3) 321-331, 2007

BUJDÁK,J. – FAYBÍKOVÁ,K. – EDER,A. – YONGYAI,Y. – RODE,BM. Peptide chain elongation: A possible role of montmorillonite in prebiotic synthesis of protein precursors. In: *Origins of Life and Evolution of the Biosphere*. Vol. 25, no. 5 (1995), p. 431-441

Citácie z WOK: 1

160. Stievano L; Piao LY; Lopes I; Meng M; Costa D; Lambert JF
EUROPEAN JOURNAL OF MINERALOGY 19 (3) 321-331, 2007

BUJDÁK,J. – RODE,BM. The effect of smectite composition on the catalysis of peptide bond formation. In: *Journal of Molecular Evolution*. Vol. 43, no. 4 (1996), p. 326-333

Citácie z WOK: 1

161. Valdre G
EUROPEAN JOURNAL OF MINERALOGY 19 (3) 309-319, 2007

BUJDÁK, J. – EDER, A. – YONGYAI, YY. – FAYBÍKOVÁ, K. – RODE, BM. Investigation on the mechanism of peptide chain prolongation on montmorillonite. In: *Journal of Inorganic Biochemistry*. Vol. 61, no. 1 (1996), p. 69-78

Citácie z WOK: 1

162. Parra JG
ANALES DE LA REAL ACADEMIA NACIONAL DE FARMACIA 73 (2) 419-439, 2007

BUJDÁK, J. – LE SON, H. – RODE, BM. Montmorillonite catalyzed peptide bond formation: The effect of exchangeable cations. In: *Journal of Inorganic Biochemistry*. Vol. 63, no. 2 (1996), p. 119-124

Citácie z WOK: 2

163. Stievano L; Piao LY; Lopes I; Meng M; Costa D; Lambert JF
EUROPEAN JOURNAL OF MINERALOGY 19 (3) 321-331, 2007
164. Parra JG
ANALES DE LA REAL ACADEMIA NACIONAL DE FARMACIA 73 (2) 419-439, 2007

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

Citácie z WOK: 4

165. Kitadai N; Nakashima S; Yokoyama T
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 71 (15) A488-A488, 2007
166. Stievano L; Piao LY; Lopes I; Meng M; Costa D; Lambert JF
EUROPEAN JOURNAL OF MINERALOGY 19 (3) 321-331, 2007
167. Rimola A; Sodupe M; Ugliengo P
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (26) 8333-8344, 2007
168. Meng M; Xia LY; Guo LH
ACTA PHYSICO-CHEMICA SINICA 23 (1) 32-36, 2007

Citácie zo SCO: 1

169. -Santiago; L Ugliengo; P Sodupe; M
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (20) 5740-5747, 2007

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 WOK: 4

170. Stievano L; Piao LY; Lopes I; Meng M; Costa D; Lambert JF
EUROPEAN JOURNAL OF MINERALOGY 19 (3) 321-331, 2007
171. Rimola A; Sodupe M; Ugliengo P
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (26) 8333-8344, 2007
172. Cox JS; Seward TM
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 71 (9) 2264-2284, 2007
173. Rimola A; Rodriguez-Santiago L; Ugliengo P; Sodupe M
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (20) 5740-5747, 2007

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 WOK: 4

174. Liu P; Zhang LX
SEPARATION AND PURIFICATION TECHNOLOGY 58 (1) 32-39, 2007
175. El Mouzdahir Y; Elmchaouri A; Mahboub R; Gil A; Korili SA
JOURNAL OF CHEMICAL AND ENGINEERING DATA 52 (5) 1621-1625, 2007
176. El-Khaiary MI
JOURNAL OF HAZARDOUS MATERIALS 147 (1-2) 28-36, 2007
177. Eren E; Afsin B
DYES AND PIGMENTS 72 (2) 228-232, 2007

Citácie zo SCO: 1

178. El-Khaiary MI
EUROPEAN JOURNAL OF SCIENTIFIC RESEARCH 19 (1) 128-143, 2007

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 WOK: 2

179. Klika Z; Capkova P; Horakova P; Valaskova M; Maly P; Machan R; Pospisil M
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 311 (1) 14-23, 2007
180. Eren E; Afsin B
DYES AND PIGMENTS 72 (2) 228-232, 2007

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 WOK: 6

181. Wang W; Yuan H; Wang X; Yu Z
ADVANCES IN SPACE RESEARCH 40 (11) 1641-1645, 2007
182. Valdre G
EUROPEAN JOURNAL OF MINERALOGY 19 (3) 309-319, 2007
183. Rimola A; Sodupe M; Ugliengo P
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (26) 8333-8344, 2007
184. Ohara S; Kakegawa T; Nakazawa H
ORIGINS OF LIFE AND EVOLUTION OF BIOSPHERES 37 (3) 215-223, 2007
185. Rimola A; Rodriguez-Santiago L; Ugliengo P; Sodupe M
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (20) 5740-5747, 2007
186. Ramachandran E; Baskaran K; Natarajan S
CRYSTAL RESEARCH AND TECHNOLOGY 42 (1) 73-77, 2007

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 WOK: 4

187. Yamaoka K; Kawahata H; Gupta LP; Ito M; Masuda H
ORGANIC GEOCHEMISTRY 38 (11) 1897-1909, 2007
188. Rimola A; Sodupe M; Ugliengo P
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (26) 8333-8344, 2007
189. Costa D; Lomenech C; Meng M; Stievano L; Lambert JF
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 806 (1-3) 253-259, 2007
190. Parra JG
ANALES DE LA REAL ACADEMIA NACIONAL DE FARMACIA 73 (2) 419-439, 2007

Citácie zo SCO: 1

191. -Santiago L; Ugliengo P; Sodupe M
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (20) 5740-5747, 2007

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 WOK: 7

192. Ziesmer S; Lagaly G
CLAY MINERALS 42 (4) 563-573, 2007
193. Son B; Hwang TS; Goo DC
POLYMER-KOREA 31 (5) 404-409, 2007
194. Kaneko MLQA; Torriani IL; Yoshida IVP
JOURNAL OF THE BRAZILIAN CHEMICAL SOCIETY 18 (4) 765-773, 2007
195. Reddy CVS; Wu GP; Zhao CX; Jin-Zhu QY; Chen W; Mho SI
CURRENT APPLIED PHYSICS 7 (6) 655-661, 2007
196. Gintert MJ; Jana SC; Miller SG
POLYMER 48 (14) 4166-4173, 2007
197. Xu BH; Lin BZ; Sun DY; Ding C
ELECTROCHIMICA ACTA 52 (9) 3028-3034, 2007
198. Mondal P; Khakhar DV
JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE 103 (5) 2802-2809, 2007

Citácie zo SCO: 1

199. Carrado KA; Sandi G
CMS WORKSHOP LECTURES 15 201-231, 2007

BUJDÁK,J. – RODE,BM. 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 WOK: 3

200. Benetoli LOB; de Souza CMD; da Silva KL; Souza IGD; de Santana H; Paesano A; da Costa ACS; Zaia CTBV; Zaia DAM
ORIGINS OF LIFE AND EVOLUTION OF BIOSPHERES 37 (6) 479-493, 2007
201. Rimola A; Sodupe M; Ugliengo P
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (26) 8333-8344, 2007
202. Rimola A; Rodriguez-Santiago L; Ugliengo P; Sodupe M
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (20) 5740-5747, 2007

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 WOK: 2

203. Gupta VK; Ali I; Saini VK
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 315 (1) 87-93, 2007

204. Klika Z; Capkova P; Horakova P; Valaskova M; Maly P; Machan R; Pospisil M
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 311 (1) 14-23, 2007

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 WOK: 4

205. Bur AJ; Roth SC; Start PR; Lee YH; Maupin PH
TRANSACTIONS OF THE INSTITUTE OF MEASUREMENT AND CONTROL 29 (5) 403-416, 2007
206. Klika Z; Capkova P; Horakova P; Valaskova M; Maly P; Machan R; Pospisil M
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 311 (1) 14-23, 2007
207. Takagi S; Eguchi M; Shimada T; Hamatani S; Inoue H
RESEARCH ON CHEMICAL INTERMEDIATES 33 (1-2) 177-189, 2007
208. Eren E; Afsin B
DYES AND PIGMENTS 72 (2) 228-232, 2007

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 WOK: 1

209. Takagi S; Eguchi M; Shimada T; Hamatani S; Inoue H
RESEARCH ON CHEMICAL INTERMEDIATES 33 (1-2) 177-189, 2007

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 WOK: 4

210. Chen JY; Cheng HB; Zhu M; Jin LL; Zheng HF
GEOCHEMICAL JOURNAL 41 (4) 283-290, 2007
211. Rimola A; Sodupe M; Ugliengo P
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (26) 8333-8344, 2007
212. Fillon Y; Verma A; Ghosh P; Ernenwein D; Rotello VM; Chmielewski J
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (21) 6676-6677, 2007
213. Rimola A; Rodriguez-Santiago L; Ugliengo P; Sodupe M
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (20) 5740-5747, 2007

BUJDÁK J. – IYI, N. – FUJITA, T. Aggregation and stability of 1,1'-diethyl-4,4'-cyanine dye on the surface of layered silicates with different charge densities. In: *Colloids and Surfaces A*. Vol. 207, no. 1-3 (2002), p. 207-214

Citácie z WOK: 1

214. Sucha V; Uhlik P; Madejova J; Petit S; Kraus I; Puskelova L
CLAYS AND CLAY MINERALS 55 (1) 36-44, 2007

BUJDÁK J. – IYI, N. – HROBÁRIKOVÁ J. – FUJITA, T. Aggregation and decomposition of a pseudoisocyanine dye in dispersions of layered silicates. In: *Journal of Colloid and Interface Science*. Vol. 247, no. 2 (2002), p. 494-503

Citácie zo SCO: 1

215. Bao C; Jin M; Lu R; Song Z; Yang X; Song D; Xu T; Zhao Y
TETRAHEDRON 63 (31) 7443-7448, 2007

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 WOK: 2

216. Pantelie N; Seliskar CJ
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (50) 18595-18604, 2007
217. Arbeloa FL; Martinez VM; Arbeloa T; Arbeloa IL
JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY C 8 (2) 85-108, 2007

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 WOK: 1

218. Klika Z; Capkova P; Horakova P; Valaskova M; Maly P; Machan R; Pospisil M
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 311 (1) 14-23, 2007

Citácie zo SCO: 1

219. Gupta VK; Ali I; Saini VK
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 315 (1) 87-93, 2007

BUJDÁK J. – RODE, B. M. Alumina catalyzed reactions of amino acids. In: *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. Vol. 73, no. 3 (2003), p. 797-805

Citácie z WOK: 2

220. Garcia AR; de Barros RB; Fidalgo A Ilharco LM
LANGMUIR 23 (20) 10164-10175, 2007
221. Chambre D; Iditoui C; Szabo MR
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 88 (3) 681-686, 2007

BUJDÁK,J. – RODE,BM. Peptide bond formation on the surface of activated alumina: peptide chain elongation. In: *Catalysis Letters*. Vol. 91, no. 3-4 (2003), p.149-154

Citácie z WOK: 5

- 222. Garcia AR; de Barros RB; Fidalgo A; Ilharco LM
LANGMUIR 23 (20) 10164-10175, 2007
- 223. Valdre G
EUROPEAN JOURNAL OF MINERALOGY 19 (3) 309-319, 2007
- 224. Rimola A; Sodupe M; Ugliengo P
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (26) 8333-8344, 2007
- 225. Rimola A; Rodriguez-Santiago L; Ugliengo P; Sodupe M
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (20) 5740-5747, 2007
- 226. Wijntje R; Bosch H; de Haan AB; Bussmann PJT
JOURNAL OF CHROMATOGRAPHY A 1142 (1) 39-47,2007

Citácie zo SCO: 1

- 227. Farkas E; Sovago I
AMINO ACIDS PEPTIDES AND PROTEINS 36 287-345, 2007

BUJDÁK,J. – RODE,BM. On the mechanisms of oligopeptide reactions in solution and clay dispersion. In: *Journal of Peptide Science*. Vol. 10, no. 12 (2004), p. 731-737

Citácie z WOK: 1

- 228. Hrachova J; Komadel P; Fajnor VS
MATERIALS LETTERS 61 (16) 3361-3365, 2007

Citácie zo SCO: 1

- 229. Farkas E; Sovago I
AMINO ACIDS PEPTIDES AND PROTEINS 36 287-345, 2007

BUJDÁK,J. – IYI,N. Molecular orientation of rhodamine dyes on surfaces of layered silicates. In: *Journal of Physical Chemistry B*. Vol. 109, no. 10 (2005), p. 4608-4615

Citácie z WOK: 1

- 230. Arbeloa FL; Martinez VM; Arbeloa T; Arbeloa IL
JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY C 8 (2) 85-108, 2007

BUJDÁK,J. Effect of the layer charge of clay minerals on optical properties of organic dyes. A review. In: *Applied Clay Science*. Vol. 34, no. 4 (2006), p. 58-73

Citácie z WOK: 3

- 231. Arbeloa FL; Martinez VM; Arbeloa T; Arbeloa IL
JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY C 8 (2) 85-108, 2007
- 232. Inui Y; Yui T; Itoh T; Higuchi K; Seki T; Takagi K
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (42) 12162-12169, 2007
- 233. Yui T; Kameyama T; Sasaki T; Torimoto T; Takagi K
JOURNAL OF PORPHYRINS AND PHTHALOCYANINES 11 (5-6) 428-433, 2007

BUJDÁK,J. – IYI,N. Molecular aggregation of rhodamine dyes in dispersions of layered silicates: Influence of dye molecular structure and silicate properties. In: *Journal of Physical Chemistry B*. Vol. 110, no. 5 (2006), p. 2180-2186

Citácie z WOK: 2

- 234. Pantelie N; Seliskar CJ
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (50) 18595-18604, 2007
- 235. dos Santos DS; Aroca RF
ANALYST 132 (5) 450-454, 2007

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 WOK: 1

- 236. Hrachova J; Komadel P; Fajnor VS
MATERIALS LETTERS 61 (16) 3361-3365, 2007

BÜHL,M. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. Computations of ⁵⁷Fe-NMR chemical shifts with the SOS-DFPT method. In: *Helvetica Chimica Acta*. Vol. 79, no. 3 (1996), p. 742-754

Citácie z WOK: 1

- 237. Arbuznikov AV
JOURNAL OF STRUCTURAL CHEMISTRY 48 1-31, 2007

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 WOK: 6

- 238. Truflandier L; Paris M; Boucher F
PHYSICAL REVIEW B 76 (3) Art. No. 035102, 2007
- 239. Komin S; Gossens C; Tavernelli I; Rothlisberger U; Sebastiani D
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (19) 5225-5232, 2007

240. de la Lande A; Fressigne C; Gerard H; Maddaluno J; Parisel O
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 13 (12) 3459-3469, 2007
241. Schirmer J; Dreuw A
PHYSICAL REVIEW A 75 (2) Art. No. 022513, 2007
242. Teale AM; Cohen AJ; Tozer DJ
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (7) Art. No. 074101, 2007
243. Antusek A; Jaszunski M; Rizzo A
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (7) Art. No. 074303, 2007

Citácie zo SCO: 1

244. Autschbach J; Le Guennic B
JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION 84 (1) 156-171, 2007

Citácie zo SciFinder: 3

245. Najafpour M
CHEMICAL EDUCATOR 12 (3) 142-149, 2007
246. Truflandier L; Boucher PM
LOS ALAMOS NATIONAL LABORATORY 1-56, 2007
247. Wiench J; Yamini AS; Maity N; Bhaduri S; Goutam LK; Pruski M; Ganapathy S
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (15) 3877-3885, 2007

CÁRSKY,P. – BARTLETT,RJ. – FITZGERALD,G. – NOGA,J. – SPIRKO,V. Ab initio calculations on the energy of activation and tunneling in the aumerization of cyclobutadiene. In: *Journal of Chemical Physics*. Vol. 89, no. 5 (1988), p. 3008-3015

Citácie z WOK: 1

248. Alonso M; Poater J; Sola M
STRUCTURAL CHEMISTRY 18 (6) 773-783, 2007

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 WOK: 1

249. Zanjanchi MA; Ebrahimian A; Alimohammadi Z
OPTICAL MATERIALS 29 (7) 794-800, 2007

Citácie zo SCO: 1

250. Ozcan A; Omeroglu C; Erdogan Y; Ozcan AS
JOURNAL OF HAZARDOUS MATERIALS 140 (1-2) 173-179, 2007

CZÍMEROVÁ,A. – JANKOVIČ,L. – 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 WOK: 5

251. Liu P; Zhang LX
SEPARATION AND PURIFICATION TECHNOLOGY 58 (1) 32-39, 2007
252. Boshoff ET; Morkel J; Vermaak MKG; Pistorius PC
MINERALS ENGINEERING 20 (15) 1351-1359, 2007
253. Eguchi M; Tachibana H; Takagi S; Tryk DA; Inoue H
BULLETIN OF THE CHEMICAL SOCIETY OF JAPAN 80 (7) 1350-1356, 2007
254. Morais CC; da Silva EC; da Silva OG; da Fonseca MG; Arakaki LNH; Espinola JGD
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 87 (3) 767-770, 2007
255. Sucha V; Uhlik P; Madejova J; Petit S; Kraus I; Puskelova L
CLAYS AND CLAY MINERALS 55 (1) 36-44, 2007

Citácie zo SCO: 2

256. Eren E; Afsin B
DYES AND PIGMENTS 73 (2) 162-167, 2007
257. Eren E; Afsin B
DYES AND PIGMENTS 72 (2) 228-232, 2007

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 WOK: 2

258. Hung YT; Aziz HA; Ayob A; Tajarudin HA; Kuo CY; Yeh RYL
WATER ENVIRONMENT RESEARCH 79 (10) 1630-1664, 2007
259. Hrachova J; Madejova J; Billik P; Komadel P; Fajnor VS
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 316 (2) 589-595, 2007

ČERNUŠÁK,I. – NOGA,J. – DIERCKSEN,GHF. – SADLEJ,AJ. CCSDT study of potential energy curve of Be₂. In: *Chemical Physics*. Vol. 125, no. 2-3 (1988), p. 255-260

Citácie z WOK: 1

260. Paldus J; Li XZ
COLLECTION OF CZECHOSLOVAK CHEMICAL COMMUNICATIONS 72 (1) 100-120, 2007

ČÍČEL,B. – KOMADEL,P. – BEDNÁRIKOVÁ,E. – MADEJOVÁ,J. Mineralogical composition and distribution of Si, Al, Fe, Mg and Ca in the fine fractions of some Czech and Slovak bentonites. In: *Geologica Carpathica*. Vol. 43 (1992), p. 3-7

Citácie z WOK: 1

261. Seki Y; Yurdakoc K
CLAY MINERALS 42 153-160, 2007

ČÍČEL,B. – KOMADEL,P. – NIGRIN,M. Catalytic activity of smectites on dimerization of oleic acid. In: *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*. Vol. 57, no. 8 (1992), p. 1666-1671

Citácie z WOK: 1

262. Tolvanen P; Maki-Arvela P; Kumar N; Eranen K; Sjöholm R; Hemming J; Holmbom B; Salmi T; Murzin DY
APPLIED CATALYSIS A 330 1-11, 2007

ČÍČEL,B. – KOMADEL,P. Structural formulae of layer silicates. In: *Quantitative methods in soil mineralogy*. (1994), p. 114-136

Citácie z WOK: 1

263. Tunega D; Goodman BA; Haberhauer G; Thomas G; Gerzabek MH; Lischka H
CLAYS AND CLAY MINERALS 55 220-232, 2007

ČUMAKOV,A. – HRNČIAROVÁ,K. – KOMADEL,P. Extraction of potassium from the clay fraction of a bentonite. In: *Ceramics-Silikáty*. Vol. 44 (2000), p. 48-53

Citácie z WOK: 1

264. Navratilova Z; Wojtowicz P; Vaculikova L; Sugarkova V
ACTA GEODYNAMICA ET GEOMATERIALIA 4 (3) 59-65, 2007

DEMUTH,T. – HAFNER,J. – BENCO,Ľ. – TOULHOAT,HS. 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 WOK: 6

265. Dominguez-Soria VD; Calaminici P; Goursot A
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (15) Art. No. 154710, 2007
266. Barbosa LAMM; van Santen RA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (23) 8337-8348, 2007
267. Oumi Y; Kanai T; Lu BW; Sano T
MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS 101 (1-2) 127-133, 2007
268. Kamakoti P; Barckholtz TA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (9) 3575-3583, 2007
269. Jansang B; Nanok T; Limtrakul J
JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A 264 (1-2) 33-39, 2007
270. Zhang Y; Li ZH; Truhlar DG
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (2) 593-604, 2007

Citácie zo SCO: 2

271. Nachtigall P; Sauer J
STUDIES IN SURFACE SCIENCE AND CATALYSIS 168 701-736, 2007
272. Lercher JA; Jentys A
STUDIES IN SURFACE SCIENCE AND CATALYSIS 168 435-476, 2007

DEMUTH,T. – BENCO,Ľ. – 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 WOK: 1

273. Jansang B; Nanok T; Limtrakul J
JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS A 264 (1-2) 33-39, 2007

Citácie zo SCO: 1

274. van Laak ANC; de Jong KP; de Jongh PE
STUDIES IN SURFACE SCIENCE AND CATALYSIS A 170 934-941, 2007

DEMUTH,T. – ROZANSKA,X. – BENCO,Ľ. – 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 WOK: 1

275. Guo YH; Pu M; Li HF; Liu LY; Chen BH
MATERIALS CHEMISTRY AND PHYSICS 106 (2-3) 394-398, 2007

DRÁBIK,M. – SLADE,RCT. Interaction of soluble polymers and hydrated cement in the model MDF subsystem C4A3S-hpmc-(poly-P)-H: Investigations by nuclear magnetic resonance spectroscopy. In: *British Ceramic Transactions*. Vol. 94, no. 6 (1995), p. 242-245

Citácie z WOK 1:

276. Mojumdar SC; Sain M; Prasad RC; Sun L; Venart JES
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 90 (3) 653-662, 2007

DRÁBIK, M. – GÁLIKOVÁ, Ľ. – SADLEKOVÁ, Z. – KUBRANOVÁ, M. Cross-linking of atoms and thermal stability of new MDF compositions. In: *Journal of Thermal Analysis*. Vol. 46, no. 2 (1996), p. 479-487

Citácie z WOK: 1

277. Mojumdar SC; Sain M; Prasad RC; Sun L; Venart JES
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 90 (3) 653-662, 2007

DRÁBIK, M. – GÁLIKOVÁ, Ľ. – HIX, GB. – PEARCE, AG. – SLADE, RCT. – YOUNG, KE. Model MDFs related to sulfobelitic systems; studies by Fe mossbauer and electrical impedance techniques. In: *Cement and Concrete Research*. Vol. 27, no. 1 (1997), p. 127-135

Citácie z WOK: 1

278. Mojumdar SC; Sain M; Prasad RC; Sun L; Venart JES
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 90 (3) 653-662, 2007

DRÁBIK, M. – GÁLIKOVÁ, Ľ. – 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 WOK: 2

279. Krajci E; Janotka I; Kraus I; Jamnický P
CERAMICS-SILIKATY 51 (4) 217-224, 2007
280. Janotka I; Krajci L; Mojumdar SC
CERAMICS-SILIKATY 51 (2) 74-81, 2007

Iné citácie: 1

281. Krajci L
PROCEEDINGS OF MATBUD 260-266, 2007

DRÁBIK, M. – GÁLIKOVÁ, Ľ. 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 WOK: 1

282. Martucci A; Cruciani G
PHYSICS AND CHEMISTRY OF MINERALS 33 (10) 723-731, 2007

DRÁBIK, M. – GÁLIKOVÁ, Ľ. – VARSHNEY, KG. – QURAISHI, MA. 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 WOK: 2

283. Mojumdar SC; Sain M; Prasad R; Sun L; Venart JES
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 90 (3) 653-662, 2007
284. Sawant SY; Verenkar VMS; Mojumdar SC
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 90 (3) 669-672, 2007

DRÁBIK, M. – TUNEGA, D. – BALKOVIC, S. – FAJNOR Š. Computer simulations of hydrogen bonds for better understanding of the data of thermal analysis of thaumasite. In: *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. Vol. 85, no. 2 (2006), p. 469-475

Citácie z WOK: 1

285. Mojumdar SC; Sain M; Prasad RC; Sun L; Venart JES
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 90 (3) 653-662, 2007

ERIKSSON, LA. – MALKIN, VG. – MALKINA, OL. – SALAHUB, DR. 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 WOK: 2

286. Namai H; Ikeda H; Hirano T; Ishii H; Mizuno K
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (32) 7898-7905, 2007
287. Nuzhdin KB; Feldman VI; Kobzareno AV
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (17) 3294-3301, 2007

ERIKSSON, LA. – MALKIN, VG. – MALKINA, OL. – SALAHUB, DR. The effects of nonlocal gradient corrections in density functional calculations of hydrocarbon radical hyperfine structures. In: *International Journal of Quantum Chemistry*. Vol. 52, no. 4 (1994), p. 879-901

Citácie z WOK: 3

288. Shkrob IA; Chemerisov SD; Wishart JF
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (40) 11786-11793, 2007
289. Namai H; Ikeda H; Hirano T; Ishii H; Mizuno K
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (32) 7898-7905, 2007
290. Shkrob IA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (24) 5223-5231, 2007

Citácie zo SciFinder: 1

291. Shkrob IA; Chemerisov SD; Wishart JF
LOS ALAMOS NATIONAL LABORATORY 1-64, 2007

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 WOK: 5

292. Shkrob IA; Chemerisov SD; Wishart JF
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (40) 11786-11793, 2007
293. Fernandez P; Pritzkow H; Carbo JJ; Hofmann P; Enders M
ORGANOMETALLICS 26 (18) 4402-4412, 2007
294. Bobrowski K; Hug GL; Pogocki D; Marciniak B; Schoneich C
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (29) 9236-9245, 2007
295. Jerosimic SV
JOURNAL OF MOLECULAR SPECTROSCOPY 242 (2) 139-149, 2007
296. Shkrob IA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (24) 5223-5231, 2007

FABRICHNAYA,OB. – NERÁD,I. Thermodynamic properties of liquid in the $\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$ – $\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$ – $2\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$ system. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 20, no. 4 (2000), p. 505-515

Citácie z WOK: 1

297. Rodriguez-Galicia JL; de Aza AH; Rendon-Angeles JC; Pena P
JOURNAL OF THE EUROPEAN CERAMIC SOCIETY 27 (1) 79-89, 2007

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 WOK: 3

298. Barnes BC; Gelb LD
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (5) 1749-1764, 2007
299. Frankcombe TJ; Kroes GJ
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (35) 13044-13052, 2007
300. Hubner O; Klopper W
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (12) 2426-2433, 2007

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 WOK: 3

301. O'Neill DP; Kallay M; Gauss J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (13) Art. No. 134109, 2007
302. Neiss C; Hattig C
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (15) Art. No. 154101, 2007
303. Bartlett RJ; Musial M
REVIEWS OF MODERN PHYSICS 79 (1) 291-352, 2007

GALUSEK,D. – ZNÁŠIK,P. – MAJLING,J. The influence of cold isostatic pressing on compaction and properties of Mg-PSZ ceramics. In: *Journal of Materials Science Letters*. Vol. 18, no. 16 (1999), p. 1347-1351 1999

Citácie z WOK: 1

304. Brito-Chaparro JA; Reyes-Rojas A; Bocanegra-Bernal MH; Aguilar-Elguezabal A; Echeberria J
MATERIALS CHEMISTRY AND PHYSICS 106 (1) 45-53, 2007

GALUSEK,D. – RESCHKE,S. – RIEDEL,R. – DREBLER,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 WOK: 1

305. Qi GJ; Zhang CR; Hu HF
CERAMICS INTERNATIONAL 33 (5) 891-894, 2007

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 WOK: 1

306. Sahin O
CHINESE PHYSICS LETTERS 24 (11) 3206-3209, 2007

GALUSEK,D. – SEDLÁČEK,J. – ŠVANČÁREK,P. – RIEDEL,R. – SATET,R. – HOFFMANN,M. The influence of post-sintering HIP on the microstructure, hardness, and indentation fracture toughness of polymer-derived Al_2O_3 -SiC nanocomposites. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 27, no. 2-3 (2007), p.1237-1245

Citácie z WOK: 2

307. Mukhopadhyay A; Basu B
INTERNATIONAL MATERIALS REVIEWS 52 (5) 257-288, 2007

308. Zou B; Huang CZ; Chen M; Gu ML; Liu HL
ACTA MATERIALIA 55 (12) 4193-4202, 2007

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 WOK: 1

309. Vodyanitskii YN
EURASIAN SOIL SCIENCE 40 (12) 1355-1363, 2007

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 WOK: 1

310. Borsacchi S; Geppi M; Ricci L; Ruggeri G; Veracini CA
LANGMUIR 23 (7) 3953-3960, 2007

GROßMANN,G. – POTRZEBOWSKI,MJ. – FLEISCHER,U. – KRÜGER,K. – CIESIELSKI,W. – MALKINA,OL. 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 WOK: 1

311. Al-Zamil NO; Al-Sadhan KA; Isab AA; Wazeer MIM; Al-Arfaj ARA
SPECTROSCOPY 21 (1) 61-67, 2007

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 WOK: 1

312. Berns AE; Schnitzler F; Drewes N; Vereecken H; Burauel P
ENVIRONMENTAL TOXICOLOGY AND CHEMISTRY 26 (10) 2151-2157, 2007

HAFNER,J. – BENCO,I. – 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 WOK: 2

313. Mikhailov MN; Kazansky VB; Kustov LM
CATALYSIS LETTERS 116 (1-2) 81-86, 2007
314. Raybaud P
APPLIED CATALYSIS A 322 76-91, 2007

HALAMKA,M. – KAVECKÝ,T. – DOČEKAL,B. – MADEJOVÁ,J. – ŠAJGALÍK,P. Synthesis of high purity Si_3N_4 and SiC powders by CVD method. In: *Ceramics-Silikáty*. Vol. 47, no. 3 (2003), p. 88-93

Citácie z WOK: 1

315. Lin YJ; Chuang CM
CERAMICS INTERNATIONAL 33 (5) 779-784, 2007

HARTMANOVÁ,M. – HANIC,F. – PUTYERA,K. – TUNEGA,D. – GLUSHKOVA,VB. Structure and physical-properties of stabilized $\text{HfO}_2\text{-R}_2\text{O}_3$ (R=Sc, Yb, Y, Tb, Gd, Er). In: *Materials Chemistry and Physics*. Vol. 34, no. 2 (1993), p. 175-180

Citácie z WOK: 1

316. Yang ZK; Lee WC; Lee YJ; Chang P; Huang ML; Hong M; Yu KL; Tang MT; Lin BH; Hsu CH; Kwo J
APPLIED PHYSICS LETTERS 91 (20) Art. No. 202909, 2007

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 WOK: 1

317. Ramirez EB; Huanosta A; Sebastian JP; Huerta L; Ortiz A; Alonso JC
JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE 42 (3) 901-907, 2007

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 WOK: 67

318. DeYonker NJ; Ho DS; Wilson AK; Cundari TR
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (42) 10776-10780, 2007
319. Distasio RA; Steele RP; Head-Gordon M
MOLECULAR PHYSICS 105 (19-22) 2731-2742, 2007
320. Harding ME; Gauss J; Pfluger K; Werner HJ
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (51) 13623-13628, 2007
321. Plowright RJ; Ayles VL; Watkins MJ; Gardner AM; Wright RR; Wright TG; Breckenridge WH
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (20) Art. No. 204308, 2007
322. Baranowska A; Siedlecka M; Sadlej AJ
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 118 (5-6) 959-972, 2007

323. Li SG; Dixon DA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (46) 11908-11921, 2007
324. Pai CC; Li AHT; Chao SD
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (46) 11922-11929, 2007
325. Matus MH; Dixon DA; Peterson KA; Harkless JAW; Francisco JS
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (17) Art. No. 174305, 2007
326. Bakowies D
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (16) Art. No. 164109, 2007
327. Puzzarini C; Cazzoli G; Baldacci A; Baldan A; Michauk C; Gauss J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (16) Art. No. 164302, 2007
328. Shepler BC; Balabanov NB; Peterson KA
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (16) Art. No. 164304, 2007
329. Lee HM; Kim D; Singh NJ; Kolaski M; Kim KS
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (16) Art. No. 164311, 2007
330. Janowski T; Pulay P
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 447 (1-3) 27-32, 2007
331. DeYonker NJ; Peterson KA; Steyl G; Wilson AK; Cundari TR
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (44) 11269-11277, 2007
332. Lau KC; Zheng WX; Wong NB
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (15) Art. No. 154302, 2007
333. Mintz B; Driskell S; Shah A; Wilson AK
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 107 (15) 3077-3088, 2007
334. Yamaki D; Koch H; Ten-No S
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (14) Art. No. 144104, 2007
335. Goll E, Stoll H; Thierfelder C; Schwerdtfeger P
PHYSICAL REVIEW A 76 (3) Art. No. 032507, 2007
336. Varandas AJC
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (11) Art. No. 114316, 2007
337. Jeziorska M; Cencek W; Patkowski K; Jeziorski B; Szalewicz K
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (12) Art. No. 124303, 2007
338. Xu D; Cooksy AL
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 815 (1-3) 119-125, 2007
339. Kaminsky J; Jensen F
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (5) 1774-1788, 2007
340. Varandas AJC
PHYSICA SCRIPTA 76 (3) 28-35, 2007
341. Bakowies D
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (8) Art. No. 084105, 2007
342. Harding LB; Klippenstein SJ; Jasper AW
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (31) 4055-4070, 2007
343. Weldon AJ; Tschumper GS
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 107 (12) 2261-2265, 2007
344. Quinto-Hernandez A; Lee YY; Huang TP; Pan WC; Lin JJM; Bobadova-Parvanova P; Morokuma K; Samartzis PC; Wodtke AM
INTERNATIONAL JOURNAL OF MASS SPECTROMETRY 265 (2-3) 261-266, 2007
345. Heislbetz S; Schwerdtfeger P; Rauhut G
MOLECULAR PHYSICS 105 (10) 1385-1394, 2007
346. Belau L; Wheeler SE; Ticknor BW; Ahmed M; Leone SR; Allen WD; Schaefer HF; Duncan MA
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (33) 10229-10243, 2007
347. Simmonett AC; Evangelista FA; Allen WD; Schaefer HF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (1) Art. No. 014306, 2007
348. Ciccioni A; Gigli G; Meloni G; Testani E
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (5) Art. No. 054303, 2007
349. Varandas AJC
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 443 (4-6) 398-407, 2007
350. Kurten T; Noppel M; Vehkamäki H; Salonen M; Kulmala M
BOREAL ENVIRONMENT RESEARCH 12 (3) 431-453, 2007
351. Distasio RA; Head-Gordon M
MOLECULAR PHYSICS 105 (8) 1073-1083, 2007
352. Peterson KA; Shepler BC; Singleton JM
MOLECULAR PHYSICS 105 (9) 1139-1155, 2007
353. Cressiot C; Guitou M; Mitrushchenkov A; Chambaud G
MOLECULAR PHYSICS 105 (9) 1207-1216, 2007
354. Evangelista FA; Allen WD; Schaefer HF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (2) Art. No. 024102, 2007
355. Paier J; Marsman M; Kresse G
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (2) Art. No. 024103, 2007
356. Tsuzuki S; Mikami M; Yamada S
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (27) 8656-8662, 2007

357. Varandas AJC
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (24) Art. No. 244105, 2007
 358. Flad HJ; Hackbusch W; Schneider R
MATHEMATICAL MODELLING AND NUMERICAL ANALYSIS 41 (2) 261-279, 2007
 359. Woodcock HL; Moran D; Pastor RW; MacKerell AD; Brooks BR
BIOPHYSICAL JOURNAL 93 (1) 1-10, 2007
 360. Agapito F; Cabral BJC; Simoes JAM
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 811 (1-3) 361-372, 2007
 361. Kasalova V; Allen WD; Schaefer HF; Czinki E; Csaszar AG
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (8) 1373-1383, 2007
 362. Li J; Yang J; Mo YX; Lau KC; Qian XM; Song Y; Liu JB; Ng CY
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (18) Art. No. 184304, 2007
 363. Antony J; Grimme S
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (22) 4862-4868, 2007
 364. Lochan RC; Shao YH; Head-Gordon M
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (3) 988-1003, 2007
 365. Kurten T; Torpo L; Sundberg MR; Kerminen VM; Vehkamäki H; Kulmala M
ATMOSPHERIC CHEMISTRY AND PHYSICS 7 (10) 2765-2773, 2007
 366. Werner HJ; Adler TB; Manby FR
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (16) Art. No. 164102, 2007
 367. Uchimaru T; El-Nahas AM; Sugie M; Tokuhashi K; Sekiya A
CHEMISTRY LETTERS 36 (3) 400-401, 2007
 368. Wheeler SE; Robertson KA; Allen WD; Schaefer HF; Bomble YJ; Stanton JF
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (19) 3819-3830, 2007
 369. Park YC; Lee JS
BULLETIN OF THE KOREAN CHEMICAL SOCIETY 28 (3) 386-390, 2007
 370. Hopkins BW; ElSohly AM; Tschumper GS
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (13) 1550-1558, 2007
 371. Peterson KA; Figgen D; Dolg M; Stoll H
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (12) Art. No. 124101, 2007
 372. Peterson KA; Shepler BC; Singleton JM
MOLECULAR PHYSICS 105 (4) 445-461, 2007
 373. Feller D; Peterson KA
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (11) Art. No. 114105, 2007
 374. Dyall KG
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 117 (4) 483-489, 2007
 375. Dyall KG
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 117 (4) 491-500, 2007
 376. Kupka T; Lim C
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (10) 1927-1932, 2007
 377. Grimme S; Steinmetz M; Korth M
JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY 72 (6) 2118-2126, 2007
 378. Matus MH; Nguyen MT; Dixon DA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (9) 1726-1736, 2007
 379. Makarewicz J
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (8) 1498-1507, 2007
 380. Distasio RA; Steele RP; Rhee YM; Shao YH; Head-Gordon M
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (5) 839-856, 2007
 381. Strickland N; Harvey JN
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (4) 841-852, 2007
 382. Shibasaki K; Fujii A; Mikami N; Tsuzuki S
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (5) 753-758, 2007
 383. Gerber IC; Angyan JG
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (4) Art. No. 044103, 2007
 384. Matus MH; Nguyen MT; Dixon DA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (1) 113-126, 2007
- Citácie zo SCO: 6
385. Peterson KA
ACS SYMPOSIUM 958 125-151, 2007
 386. Patkowski K; Cencek W; Jeziorska M; Jeziorski B; Szalewicz K
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (31) 7611-7623, 2007
 387. ; Torpo L; Sundberg MR; Kerminen VM; Vehkamäki H; Kulmala M
ATMOSPHERIC CHEMISTRY AND PHYSICS DISCUSSIONS 7 (1) 2937-2960, 2007
 388. Kamiya M; Hirata S
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (13) Art. No. 134112, 2007
 389. Zhang X; MacCarone AT; Nimlos MR; Kato S; Bierbaum VM; Ellison GB; Ruscic B; Schaefer HF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (4) Art. No. 044312, 2007

390. Young CP; Jae SL;
BULLETIN OF THE KOREAN CHEMICAL SOCIETY 28 (3), 386-390 2007

HNATKO,M. – GALUSEK,D. – ŠAJGALÍK,P. Low-cost preparation of Si₃N₄-SiC micro/nano composites by in-situ carbothermal reduction of silica in silicon nitride matrix. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 24, no. 2 (2004), p. 189-195

Citácie z WOK: 2

391. Li J; Riedel R
JOURNAL OF THE AMERICAN CERAMIC SOCIETY 90 (12) 3786-3792, 2007
392. Zou B; Huang CZ; Chen M; Gu ML; Liu HL
ACTA MATERIALIA 55 (12) 4193-4202, 2007

Citácie zo SCO: 2

393. Thompson DP
MATERIALS SCIENCE FORUM 554 1-9, 2007
394. Thompson DP
KEY ENGINEERING MATERIALS 352 137-146, 2007

HROBÁRIK,P. – ZAHRADNÍK,P. – FABIÁN,W.M.F. Computational design of benzothiazole-derived push-pull dyes with high molecular quadratic hyperpolarizabilities. In: *Physical Chemistry Chemical Physics*. Vol. 6, no. 3 (2004), p. 495-502

Citácie z WOK: 2

395. Lodi A; Caselli M; Casnati A; Momicchioli F; Sansone F; Vanossi D; Ponterini G
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE 846 (1-3) 49-54, 2007
396. Batista RMF; Costa SPG; Malheiro EL; Belsley M; Raposo MMM
TETRAHEDRON 63 (20) 4258-4265, 2007

HROBÁRIK,P. – SIGMUNDOVÁ,I. – ZAHRADNÍK,P. Preparation of novel push-pull benzothiazole derivatives with reverse polarity: Compounds with potential non-linear optic application. In: *Synthesis*. no. 4 (2005), p. 600-604

Citácie z WOK: 2

397. Reddy PVG; Lin YW; Chang HT
ARKIVOC 113-122, 2007
398. Batista RMF; Costa SPG; Malheiro EL; Belsley M; Raposo MMM
TETRAHEDRON 63 (20) 4258-4265, 2007

HROBÁRIK,P. – 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: *Chemical Physics Letters*. Vol. 431, no. 1-3 (2006), p. 6-12

Citácie z WOK: 1

399. Denning RG
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (20) 4125-4143, 2007

HROBÁRIK,P. – REVIKINE,R. – ARBUZNIKOV,AV. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. – KÖHLER,FH. – 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, no. 2 (2007), p. 024107-1-024107-19

Citácie z WOK: 3

400. Geethalakshmi KR; Waller MP; Buhl M
INORGANIC CHEMISTRY 46 (26) 11297-11307, 2007
401. Soncini A
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (6) 2243-2257, 2007
402. Vaara J
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (40) 5399-5418, 2007

Citácie zo SciFinder: 2

403. Geethalakshmi KR; Waller MP; Buhl M
INORGANIC CHEMISTRY 46 (26) 11297-11307, 2007
404. Soncini A
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (6) 2243-2257, 2007

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 WOK: 3

405. Chavarria F; Nairn K; White P; Hill AJ; Hunter DL; Paul DR
JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE 105 (5) 2910-2924, 2007
406. Zhu LH; Zhu RL; Xu LH; Ruan XX
COLLOIDS AND SURFACES A 304 (1-3) 41-48, 2007
407. Zhu RL; Zhu LZ; Xu LH
COLLOIDS AND SURFACES A 294 (1-3) 221-227, 2007

HVIZDOŠ,P. – KAŠIAROVÁ,M. – DUSZA,J. – HNATKO,M. – ŠAJGALÍK,P. Mechanical properties of Si₃N₄/SiC nanocomposites studied by instrumented indentation with spheres. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 24, no. 12 (2004), p. 3345-3350

Citácie z WOK: 1

408. Zou B; Huang CZ; Chen M; Gu ML; Liu HL
ACTA MATERIALIA 55 (12) 4193-4202, 2007

CHITU,L. – CHUSHKIN,Y. – LUBY,Š. – MAJKOVÁ,E. – ŠATKA,A. – IVAN,J. – SMRČOK,I. – BUCHAL,A. – GIER SIG,M. – HILGENDORFF,M. Structure and self-assembling of Co nanoparticles. In: *Materials Science and Engineering C*. Vol. 27, no. 1 (2007), p. 23-28

Citácie z WOK: 2

409. Odeh IM; Mahmoud S; Vassilev GP
INTERNATIONAL JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH 98 (9) 884-888, 2007
410. Tan WL; Qin WJ; Yung LYL
BIOMACROMOLECULES 8 (2) 750-752, 2007

CHROMČÍKOVÁ,M. – LIŠKA,M. Simple relaxation model of the reversible part of the StepScan[®] DSC record of glass transition. In: *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. Vol. 84, no. 3 (2006), p. 703-708

Citácie z WOK: 1

411. Svoboda R; Pustkova P; Malek J
JOURNAL OF PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDS 68 (5-6) 850-854, 2007

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 WOK: 2

412. El Batal FH
NUCLEAR INSTRUMENTS AND METHODS IN PHYSICS RESEARCH B 265 (2) 521-535, 2007
413. Das SS; Srivastava V
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 87 (2) 363-367, 2007

JANEK,M. – KOMADEL,P. Autotransformation of H-smectites in aqueous solution. The effect of octahedral iron content. In: *Geologica Carpathica*. Vol. 44 (1993), p. 59-64

Citácie z WOK: 1

414. Assaad E; Azzouz A; Nistor D; Ursu AV; Sajin T; Miron DN; Monette F; Niquette P; Hausler R
APPLIED CLAY SCIENCE 37 (3-4) 258-274, 2007

Citácie zo SCO: 1

415. Fernandes C; Catrinescu C; Castilho P; Russo PA; Carrott MR; Breen C
APPLIED CATALYSIS A 318 108-120, 2007

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

Citácie z WOK: 2

416. Assaad E; Azzouz A; Nistor D; Ursu AV; Sajin T; Miron DN; Monette F; Niquette P; Hausler R
APPLIED CLAY SCIENCE 37 (3-4) 258-274, 2007
417. Letaief S; Detellier C
CHEMICAL COMMUNICATIONS 25 2613-2615, 2007

JANEK,M. – SMRČOK,I. 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 WOK: 1

418. Liu XD; Lu XC; Wang RC; Zhou HQ; Xu SJ
CLAYS AND CLAY MINERALS 55 (6) 554-564, 2007

JANKOVIČ,I. – KOMADEL,P. Metal cation-exchanged montmorillonite catalyzed protection of aromatic aldehydes with Ac₂O. In: *Journal of Catalysis*. Vol. 218, no. 1 (2003), p. 227-233

Citácie z WOK: 8

419. Dabbagh HA; Teimouri A; Chermahini AN
APPLIED CATALYSIS B 76 (1-2) 24-33, 2007
420. Wallis PJ; Gates WP; Patti A; Scott JL; Teoh E
GREEN CHEMISTRY 9 (9) 980-986, 2007
421. Ramirez-Cuesta AJ; Mitchell PCH; Ross DK; Georgiev PA; Anderson PA; Langmi HW; Book D
JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY 17 (24) 2533-2539, 2007
422. Yin L; Zhang ZH; Wang YM
TETRAHEDRON LETTERS 48 (17) 3119-3122, 2007
423. Song GY; Wang B; Luo HT; Yang LM
CATALYSIS COMMUNICATIONS 8 (4) 673-676, 2007
424. Ghiaci M; Kalbasi RJ; Mollahasani M; Aghaei H
APPLIED CATALYSIS A 320 35-42, 2007
425. Legodi MA; de Waal D
SPECTROCHIMICA ACTA A 66 (1) 135-142, 2007
426. Redd CR; Nagendrappa G; Prakash BSJ
CATALYSIS COMMUNICATIONS 8 (3) 241-246, 2007

KAHN,K. – GRANOVSKY,AA. – NOGA,J. Convergence of third order correlation energy in atoms and molecules. In: *Journal of Computational Chemistry*. Vol. 28, no. 2 (2007), p.547-554

Citácie z WOK: 1

427. Curtiss LA; Redfern PC; Raghavachari K
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (12) Art. No.124105, 2007

KANEKO,Y. – IYI,N. – BUJDÁK,J. – SASAI,R. – FUJITA,T. Molecular orientation of methylene blue intercalated in layer-charge-controlled montmorillonites. In: *Journal of Materials Research*. Vol. 18, no. 11 (2003), p. 2639-2643

Citácie z WOK: 1

428. Eguchi M; Tachibana H; Takagi S; Tryk DA; Inoue H
BULLETIN OF THE CHEMICAL SOCIETY OF JAPAN 80 (7) 1350-1356, 2007

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 WOK: 2

429. Klíka Z; Capkova P; Horakova P; Valaskova M; Maly P; Machan R; Pospisil M
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 311 (1) 14-23, 2007
430. Eren E; Afsin B
DYES AND PIGMENTS 72 (2) 228-232, 2007

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 WOK: 2

431. Caulfield JA; Wells TA; Miller KE
CLAYS AND CLAY MINERALS 55 (2) 213-219, 2007
432. Friedrich F; Heissler S; Faubel W; Nuesch R; Weidler PG
VIBRATIONAL SPECTROSCOPY 43 (2) 427-434, 2007

KAUPP,M. – MALKIN,V.G. – MALKINA,OL. – SALAHUB,DR. 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 WOK: 3

433. Pazderski L; Tousek J; Sitkowski J; Kozerski L; Szlyk E
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 45 (12) 1045-1058, 2007
434. Pazderski L; Tousek J; Sitkowski J; Kozerski L; Szlyk E
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 45 (12) 1059-1071, 2007
435. Khodaei S; Hadipour NL; Kasaai MR
CARBOHYDRATE RESEARCH 342 (16) 2396-2403, 2007

KAUPP,M. – MALKIN,V.G. – MALKINA,OL. – SALAHUB,DR. 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 WOK: 3

436. Pazderski L; Tousek J; Sitkowski J; Kozerski L; Szlyk E
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 45 (12) 1045-1058, 2007
437. Pazderski L; Tousek J; Sitkowski J; Kozerski L; Szlyk E
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 45 (12) 1059-1071, 2007
438. Ferrer M; Gutierrez A; Mounir M; Rossell O; Ruiz E; Rang A; Engeser M
INORGANIC CHEMISTRY 46 (8) 3395-3406, 2007

KAUPP,M. – MALKIN,V.G. – MALKINA,OL. – SALAHUB,DR. 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, no. 1 (1996), p. 24-30

Citácie z WOK: 3

439. Feng XJ; Gu JD; Xie YM; King RB; Schaefer HF
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (4) 1580-1587, 2007
440. Jubert AH; Alegre ML; Diez RP; Pomilio AB; Szewczuk VD
SPECTROCHIMICA ACTA A 66 (4-5) 1208-1221, 2007
441. Ferrer M; Gutierrez A; Mounir M; Rossell O; Ruiz E; Rang A; Engeser M
INORGANIC CHEMISTRY 46 (8) 3395-3406, 2007

KAUPP,M. – MALKINA,OL. – 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 WOK: 1

442. Teale AM; Cohen AJ; Tozer DJ
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (7) Art. No. 074101, 2007

KAUPP,M. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. 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 WOK: 1

443. Raabe I; Rohr C; Krossing I
DALTON TRANSACTIONS 46 5376-5386, 2007

Citácie zo SCO: 1

444. Siehl HU
ADVANCES IN PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY 42 125-165, 2007

KAUPP,M. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. – PYYKKÖ,P. How do spin-orbit-induced heavy-atom effects on NMR chemical shifts function? 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, no. 1 (1998), p. 118-126

Citácie z WOK: 10

445. Fantasia S; Petersen JL; Jacobsen H; Cavallo L; Nolan SP
ORGANOMETALLICS 26 (24) 5880-5889, 2007
446. Vaara J
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (40) 5399-5418, 2007
447. Chierotti MR; Garlaschelli L; Gobetto R; Nervi C; Peli G; Sironi A; Della Pergola R
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY 22 3477-3483, 2007
448. Ruspic C; Spielmann J; Harder S
INORGANIC CHEMISTRY 46 (13) 5320-5326, 2007
449. Autschbach J
COORDINATION CHEMISTRY REVIEWS 251 (13-14) 1796-1821, 2007
450. Bagno A; Saielli G
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 117 (5-6) 603-619, 2007
451. Feindel KW; Ooms KJ; Wasylishen RE
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (10) 1226-1238, 2007
452. Molchanov S; Gryff-Keller A
POLISH JOURNAL OF CHEMISTRY 81 (1) 137-140, 2007
453. Katritzky AR; Akhmedov NG; Doskocz J; Hall CD; Akhmedova RG; Majumder S
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 45 (1) 5-23, 2007
454. Pazderski L; Tousek J; Sitkowski J; Kozerski L; Marek R; Szlyk E
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 45 (1) 24-36, 2007

Citácie zo SciFinder: 2

455. Fukui H
NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE 36 113-13, 2007
456. Najafpour M
CHEMICAL EDUCATOR 12 (3) 142-149, 2007

KAUPP,M. – MALKINA,OL. Ab initio ECP/DFT analysis of ^{13}C and ^1H chemical shifts and bonding in mercurimethanes and organomercury hydrides: The role of scalar relativistic, spin-orbit, and substituent effects. In: *Journal of Chemical Physics*. Vol. 108, no. 9 (1998), p. 3648-3659

Citácie z WOK: 3

457. Alabugin IV; Manoharan M; Buck M; Clark RJ
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 813 (1-3) 21-27, 2007
458. Feindel KW; Ooms KJ; Wasylishen RE
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (10) 1226-1238, 2007
459. Alabugin IV; Manoharan M
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (1) 373-390, 2007

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 WOK: 2

460. Raabe I; Rohr C; Krossing I
DALTON TRANSACTIONS 46 5376-5386, 2007
461. Feindel KW; Ooms KJ; Wasylishen RE
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (10) 1226-1238, 2007

KAUPP,M. – REVIKINE,R. – MALKINA,OL. – ARBUZNIKOV,M,A. – SCHIMMELPFENNIG,B. – MALKIN,VG. 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 WOK: 6

462. Neese F
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (16) Art. No. 164112, 2007

463. Lee SU; Belosludov RV; Mizuseki H; Kawazoe Y
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (42) 15397-15403, 2007
464. Vancoillie S; Malmqvist PA; Pierloot K
CHEMPHYSICHEM 8 (12) 1803-1815, 2007
465. Gomzi V; Herak JN
CHEMICAL PHYSICS 333 (2-3) 112-118, 2007
466. Berger R; Stuber JL
MOLECULAR PHYSICS 105 (1) 41-49, 2007
467. de Almeida KJ; Rinkevicius Z; Hugosson HW; Ferreira AC; Agren H
CHEMICAL PHYSICS 332 (2-3) 176-187, 2007

KAUPP,M. – REMENYI,C. – VAARA,J. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. 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 zo SCO: 1

468. Frontana C; Gómez M; González I
ECS TRANSACTIONS 3 (29) 37-44, 2007

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 WOK: 4

469. Brynda M; Britt RD
RESEARCH ON CHEMICAL INTERMEDIATES 33 (8-9) 863-883, 2007
470. Benisvy L; Hammond D; Parker DJ; Davies ES; Garner CD; McMaster J; Wilson C; Neese F; Bothe E; Bittl R; Teutloff C
JOURNAL OF INORGANIC BIOCHEMISTRY 101 (11-12) 1859-1864, 2007
471. Maji S; Sarkar B; Mobin SM; Fiedler J; Kaim W; Lahiri GK
DALTON TRANSACTIONS 23 2411-2418, 2007
472. Pogni R; Teutloff C; Lendzian F; Basosi R
APPLIED MAGNETIC RESONANCE 31 (3-4) 509-526, 2007

Citácie zo SciFinder: 1

473. Neese F
ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE 20 73-95, 2007

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 tetrakisphosphane-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

Citácie z WOK: 2

474. Autschbach J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (12) Art. No. 124106, 2007
475. Cremer D; Grafenstein J
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (22) 2791-2816, 2007

Citácie zo SCO: 2

476. Dyker CA; Burford N; Menard G; Lumsden MD; Decken A
INORGANIC CHEMISTRY 46 (10) 4277-4285, 2007
477. Krivdin LB; Contreras R
ANNUAL REPORTS ON NMR SPECTROSCOPY 61 133-245, 2007

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. 2 (2000), p. 1939-1946

Citácie z WOK: 1

478. Kawamura F; Yamane H; Yamada T; Yin S; Sato T
JOURNAL OF THE CERAMIC SOCIETY OF JAPAN 115 (1337) 74-76, 2007

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 WOK: 4

479. Kordel E; Villani C; Klopper W
MOLECULAR PHYSICS 105 (19-22) 2565-2576, 2007
480. Adler TB; Knizia G; Werner HJ
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (22) Art. No. 221106, 2007
481. Tew DP; Klopper W; Manby FR
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (17) Art. No. 174105, 2007
482. Werner HJ; Adler TB; Manby FR
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (16) Art. No. 164102, 2007

KELM,U. – SANHUEZA,V. – MADEJOVÁ,J. – ŠUCHA,V. – ELSASS,F. Evaluation of identification methods for chrysocolla - a Cu-smectite-like hydrous silicate: Implications for heap-leaching extraction of copper. In: *Geologica Carpathica*. Vol. 52, no. 2 (2001), p.111-121

Citácie z WOK: 1

483. Friedrich F; Heissler S; Faubel W; Nuesch R; Weidler PG
VIBRATIONAL SPECTROSCOPY 43 (2) 427-434, 2007

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 WOK: 1

484. Jeziorska M; Cencek W; Patkowski K; Jeziorski B; Szalewicz K
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (12) Art. No. 124303, 2007

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 WOK: 1

485. Karton A; Taylor PR; Martin JML
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (6) Art. No.064104, 2007

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 WOK: 2

486. Cassam-Chenai P; Granucci G
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 450 (1-3) 151-155, 2007
487. Ten-No S
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (1) Art. No. 014108, 2007

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 WOK: 2

488. Bakowies D
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (16) Art. No. 164109, 2007
489. Bakowies D
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (8) Art. No. 084105, 2007

KOMADEL,P. – STUCKU,JW. – WILKINSON,HT. Reduction of structural iron in smectites by microorganisms. In: *Proceedings 6th Meeting of the European Clay Group*. (1987), p. 322-324

Citácie z WOK: 1

490. Jaisi DP; Dong HL; Liu CX
ENVIRONMENTAL SCIENCE AND TECHNOLOGY 41 (7) 2437-2444, 2007

KOMADEL,P. – STUCKI,JW. Quantitative assay of minerals for Fe²⁺ and Fe³⁺ using USING 1,10-phenanthroline. III. A rapid photochemical method. In: *Clays and Clay Minerals*. Vol. 36, no. 4 (1988), p. 379-381

Citácie z WOK: 4

491. Kruanetr S; Liawruangrath S; Youngvives N
TALANTA 73 (1) 46-53, 2007
492. Zhang GX; Dong HL; Kim JW; Eberl DD
AMERICAN MINERALOGIST 92 (8-9) 1411-1419, 2007
493. Shelobolina ES; Nevin KP; Blakeney-Hayward JD; Johnsen CV; Plaia TW; Krader P; Woodard T; Holmes DE; VanPraagh CG; Lovley DR
INTERNATIONAL JOURNAL OF SYSTEMATIC AND EVOLUTIONARY MICROBIOLOGY 57 126-135, 2007
494. Larese-Casanova P; Scherer MM
ENVIRONMENTAL SCIENCE AND TECHNOLOGY 41 (2) 471-477, 2007

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

Citácie z WOK: 3

495. Noyan H; Muserref O; Sarikaya Y
FOOD CHEMISTRY 105 (1) 156-163, 2007
496. Onal M; Sankaya Y
POWDER TECHNOLOGY 172 (1) 14-18, 2007
497. Alba MD; Chain P
APPLIED GEOCHEMISTRY 22 (1) 192-201, 2007

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 WOK: 5

498. Vodyanitskii YN
EURASIAN SOIL SCIENCE 40 (12) 1355-1363, 2007

499. Yildiz A; Kuscü M
CLAY MINERALS 42 (3) 399-414, 2007
500. Chon CM; Kim JG; Moon HS
HYDROLOGICAL PROCESSES 21 (14) 1957-1967, 2007
501. Matocha CJ; Coyne MS
SOIL SCIENCE SOCIETY OF AMERICA JOURNAL 71 (1) 108-117, 2007
502. Merola RB; Fournier ED; McGuire MM
LANGMUIR 23 (3) 1223-1226, 2007

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 WOK: 2

503. Vodyanitskii YN
EURASIAN SOIL SCIENCE 40 (12) 1355-1363, 2007
504. Fiedler S; Vepraskas MJ; Richardson JL
ADVANCES IN AGRONOMY 94 1-54, 2007

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 WOK: 4

505. Yildiz A; Kuscü M
CLAY MINERALS 42 (3) 399-414, 2007
506. Nunes CD; Vaz PD; Fernandes AC; Ferreira P; Romão CC; Calhorda MJ
EUROPEAN JOURNAL OF PHARMACEUTICS AND BIOPHARMACEUTICS 66 (3) 357-365, 2007
507. Zheng JP; Wang HG; Zhuang H; Xi LF; Yao KD
JOURNAL OF WUHAN UNIVERSITY OF TECHNOLOGY 22 (2) 250-252, 2007
508. Onal M
APPLIED CLAY SCIENCE 37 (1-2) 74-80, 2007

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 WOK: 2

509. Noyan H; Muserref O; Sarikaya Y
FOOD CHEMISTRY 105 (1) 156-163, 2007
510. Onal M; Sankaya Y
POWDER TECHNOLOGY 172 (1) 14-18, 2007

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 WOK: 2

511. Assaad E; Azzouz A; Nistor D; Ursu AV; Sajin T; Miron DN; Monette F; Niquette P; Hausler R
APPLIED CLAY SCIENCE 37 (3-4) 258-274, 2007
512. Onal M; Sankaya Y
POWDER TECHNOLOGY 172 (1) 14-18, 2007

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 WOK: 1

513. Vodyanitskii YN
EURASIAN SOIL SCIENCE 40 (12) 1355-1363, 2007

KOMADEL,P. Structure and chemical characteristics of modified clays. In: *Natural Microporous Materials in Environmental Technology*. (1999), p. 3-18

Citácie z WOK: 1

514. Tsai WT; Su TY; Hsu HC; Lin KY; Lin CM; Tai TH
MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS 102 (1-3) 196-203, 2007

KOMADEL,P. – MADEJOVÁ,J. – LAIRD,DA. – XIA,Y. – STUCKI,JW. Reduction of Fe(III) in griffithite. In: *Clay Minerals*. Vol. 35, no. 4 (2000), p. 625-634

Citácie z WOK: 1

515. Vodyanitskii YN
EURASIAN SOIL SCIENCE 40 (12) 1355-1363, 2007

KOMADEL,P. – HROBÁRIKOVÁ,J. – SMRČOK,L. – KOPPELHUBER-BITSCHNAU,B. Hydration of reduced-charge montmorillonite. In: *Clay Minerals*. Vol. 37, no. 3 (2002), p.543-550

Citácie z WOK: 1

516. Chavarria F; Nairn K; White P; Hill AJ; Hunter DL; Paul DR
JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE 105 (5) 2910-2924, 2007

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

Citácie z WOK: 8

517. Onal M
TURKISH JOURNAL OF CHEMISTRY 31 (6) 579-588, 2007
518. Manoharan C; Venkatachalapathy R; Dhanapandian S; Deenadayalan K
INDIAN JOURNAL OF PURE AND APPLIED PHYSICS 45 (10) 860-865, 2007
519. Noyan H; Muserref O; Sarikaya Y
FOOD CHEMISTRY 105 (1) 156-163, 2007
520. Onal M
APPLIED CLAY SCIENCE 37 (1-2) 74-80, 2007
521. Damonte M; Sanchez RMT; Afonso MD
APPLIED CLAY SCIENCE 36 (1-3) 86-94, 2007
522. Onal M; Sankaya Y
POWDER TECHNOLOGY 172 (1) 14-18, 2007
523. Onal M; Sarikaya Y
COLLOIDS AND SURFACES A 296 (1-3) 216-221, 2007
524. Vlasova M; Leon I; Mendez YE; Dominguez-Patino G; Kakazey M; Dominguez-Patino M; Nikolic MV; Ristic MM
CERAMICS INTERNATIONAL 33 (3) 405-412, 2007

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 WOK: 2

525. Chavarria F; Nairn K; White P; Hill AJ; Hunter DL; Paul DR
JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE 105 (5) 2910-2924, 2007
526. Zhu LH; Zhu RL; Xu LH; Ruan XX
COLLOIDS AND SURFACES A 304 (1-3) 41-48, 2007

KOMOROVSKÝ,S. – REPISKÝ,M. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. – MALKIN,I. – KAUPP,M. Resolution of identity Dirac-Kohn-Sham method using the large component only: Calculations of g-tensor and hyperfine tensor. In: *Journal of Chemical Physics*. Vol. 124, no. 8 (2006), p.084108-1-084108-8

Citácie z WOK: 3

527. Peng DL; Liu WJ; Xiao YL; Cheng L
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (10) Art. No.104106, 2007
528. Wenjian L
PROGRESS IN CHEMISTRY 19 (6) 833-851, 2007
529. Ilias M; Saue T
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (6) Art. No. 064102, 2007

Citácie zo SciFinder: 1

530. Jameson C; de Dios AC
NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE 36 50-71, 2007

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 WOK: 2

531. Cheng F; Kelly SM; Clark S; Bradley JS; Lefebvre F
JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY 692 (17) 3816-3822, 2007
532. Xiong LP; Xu YS
PROGRESS IN CHEMISTRY 19 (4) 567-574, 2007

KOSA,L. – MACKOVÁ,I. Determination of the enthalpy of fusion of K_3TaF_8 and K_3TaOF_6 . In: *Thermochimica Acta*. Vol. 447, no. 2 (2006), p. 209-211

Citácie z WOK: 1

533. Boca M; Danielik V; Ivanova Z; Miksikova E; Kubikova B
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 90 (1) 159-165, 2007

KŘEŠŤAN,J. – ŠAJGALÍK,P. – PÁNEK Z. Carbothermal reduction and nitridation of powder pyrophyllite raw material. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 24, no. 5 (2004), p. 791-796

Citácie z WOK: 1

534. Yilmaz R; Kurt AO
MATERIALS SCIENCE FORUM 554 175-180, 2007

Citácie zo SCO: 1

535. Atasoy A
MATERIALS SCIENCE FORUM 554 157-162, 2007

KUCHARÍK,M. – BOČA,M. – BESSADA,C. – FUESS,H. Do sodium oxofluoroaluminates exist at room temperature?. In: *European Journal of Inorganic Chemistry*. no. 9 (2005),

p. 1781-1786

Citácie z WOK: 1

536. Karpukhina NG; Werner-Zwanziger U; Zwanziger JW; Kiprianov AA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (35) 10413-10420, 2007

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 WOK: 1

537. Sultana A; Alexeev I; Kursula I; Mantsala P; Niemi J; Schneider G
ACTA CRYSTALLOGRAPHICA D 63 149-159, 2007

LANGER,V. – SCHOLTZOVA,E. – KOŮŠ, 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

Citácie z WOK: 1

538. Chopra D; Mohan TP; Vishalakshi B; Row TNG
ACTA CRYSTALLOGRAPHICA C 63 746-750, 2007

LE SON,H. – SUWANNACHOT,Y. – BUJDÁK,J. – RODE,BM. Salt-induced peptide formation from amino acids in the presence of clays and related catalysts. In: *Inorganica Chimica Acta*. Vol. 272, no. 1-2 (1998), p. 89-94

Citácie z WOK: 1

539. Parra JG
ANALES DE LA REAL ACADEMIA NACIONAL DE FARMACIA 73 (2) 419-439, 2007

LENČEŠ,Z. – ŠAJGALÍK,P. – TORIYAMA,M. – BRITO,ME. – KANZAKI,S. Multifunctional Si₃N₄/(β-SiAlOn + TiN) layered composites. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 20, no. 3 (2000), p. 347-355

Citácie z WOK: 1

540. Li YB; Li N; Ruan GZ; Li JW; Li XH
MATERIALS AND DESIGN 28 (3) 969-972, 2007

LENČEŠ,Z. – HIRAO,K. – BRITO,ME. – TORIYAMA,M. – KANZAKI,S. Layered silicon nitride-based composites with discontinuous boron nitride interlayers. In: *Journal of the American Ceramic Society*. Vol. 83, no. 10 (2000), p. 2503-2508

Citácie zo SCO: 1

541. Huang Y; Zhao S; Wang CA; Chen R
KEY ENGINEERING MATERIALS 351 21-25, 2007

LENČEŠ,Z. – HIRAO,K. – YAMAUCHI,Y. – KANZAKI,S. Reaction synthesis of magnesium silicon nitride powder. In: *Journal of the American Ceramic Society*. Vol. 86, no. 7 (2003), p. 1088-1093

Citácie zo SCO: 1

542. Wang F; Shen WP; Bai L; Ge CC
KEY ENGINEERING MATERIALS 336-338 935-938, 2007

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 WOK: 1

543. Nakhimovsky L; Fuchs R
MOLECULAR CRYSTALS AND LIQUID CRYSTALS 473 87-102, 2007

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 Coating Technology*. Vol. 192, no. 1 (2005), p. 106-111

Citácie z WOK: 2

544. Boycheva S; Sytchkova AK; Grilli ML; Piegari A
THIN SOLID FILMS 515 (24) 8469-8473, 2007
545. Wang CY; Liu YX; Xia YL; Ma TC; Wang PW
JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS 353 (22-23) 2244-2249, 2007

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 Coating Technology*. Vol. 185, no. 2-3 (2004), p. 254-263

Citácie z WOK: 2

546. Lim DG; Kang GS; Kwon SI; Park MW; Kwak DJ
JOURNAL OF THE KOREAN PHYSICAL SOCIETY 50 (6) 1697-1700, 2007
547. Kwon YB; Abouzaid M; Ruterana P; Je JH
PHYSICA STATUS SOLIDI B 244 (5) 1583-1588, 2007

Citácie zo SCO: 1

548. Xue SW; Zu XT
MATERIALS SCIENCE FORUM 561-565 1173-1176, 2007

LIN,SS. – HUANG,JL. – ŠAJGALÍK,P. Effects of substrate temperature on the properties of heavily Al-doped ZnO films by simultaneous r.f. and d.c. magnetron sputtering. In: *Surface and Coating Technology*. Vol. 190, no. 1 (2005), p. 39-47

Citácie z WOK: 6

549. Park JH; Cho YC; Shin JM; Cha SY; Cho CR; Kim HS; Yoon SJ; Jeong SY; Park SE; Lim AR
JOURNAL OF THE KOREAN PHYSICAL SOCIETY 51 (6) 1968-1972, 2007
550. Exarhos GJ; Zhou XD
THIN SOLID FILMS 515 (18) 7025-7052, 2007
551. Lu JJ; Lu YM; Tasi SI; Hsiung TL; Wang HP; Jang LY
OPTICAL MATERIALS 29 (11) 1548-1552, 2007
552. Kim S; Lee WI; Lee EH; Hwang SK; Lee C
JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE 42 (13) 4845-4849, 2007
553. Lin W; Ma RX; Shao W; Liu B
APPLIED SURFACE SCIENCE 253 (11) 5179-5183, 2007
554. Yim K; Kim HW; Lee C
MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 23 (1) 108-112, 2007

Citácie zo SCO: 3

555. Wang DM; Lu J; Xu GQ; Wu YC; Zheng ZX
TRANSACTIONS OF MATERIALS AND HEAT TREATMENT 28 (4) 46-50, 2007
556. Kim DS; Oh BY; Jeong MC; Myoung JM
SOLID STATE PHENOMENA 124-126 131-134, 2007
557. Kim S; Jeon J; Lee C
SOLID STATE PHENOMENA 124-126 69-72, 2007

LIN,SS. – HUANG,JL. – ŠAJGALÍK,P. The properties of Ti-doped ZnO films deposited by simultaneous RF and DC magnetron sputtering. In: *Surface and Coating Technology*. Vol. 191, no. 2-3 (2005), p. 286-292

Citácie z WOK: 2

558. Lu JJ; Lu YM; Tasi SI; Hsiung TL; Wang HP; Jang LY
OPTICAL MATERIALS 29 (11) 1548-1552, 2007
559. Zhang Y; Zheng HW; Su JF; Lin BX; Fu ZX
JOURNAL OF LUMINESCENCE 124 (2) 252-256, 2007

LIŠKA,M. – STREČKO,J. Computer calculation of the phase diagrams of silicate systems. II. Regression treatment for systems containing incogruently melting compounds. In: *Ceramics-Silikáty*. Vol. 38, no. 2 (1994), p. 69-74

Citácie z WOK: 1

560. Dolan MD; Mixture ST
GLASS TECHNOLOGY A 48 (2) 89-100, 2007

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 WOK: 1

561. Fluegel A
GLASS TECHNOLOGY A 48 (1) 13-30, 2007

LIŠKA,M. – KLYUEV,VP. – ANTALÍK,J. – ŠTUBŇA,I. Thermodilatometry 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 WOK: 1

562. Fluegel A
GLASS TECHNOLOGY A 48 (1) 13-30, 2007

LIŠKA,M. – KLYUEV,VP. – ANTALÍK,J. – ŠTUBŇA,I. Viscosity of $\text{Na}_2\text{O} \cdot 2(\text{TiO}_2, \text{SiO}_2)$ glasses. In: *Physics and Chemistry of Glasses*. Vol. 38, no. 1 (1997), p. 6-10

Citácie z WOK: 1

563. Fluegel A
GLASS TECHNOLOGY A 48 (1) 13-30, 2007

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 WOK: 2

564. Hadac J; Slobodian P; Riha P; Saha P; Rychwalski RW; Emri I; Kubat J
JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS 353 (28) 2681-2691, 2007
565. Hadac J; Slobodian P; Saha P
JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE 42 (11) 3724-3731, 2007

MADEJ,J. – ŠTEVULA,L. – MADEJOVÁ,J. Assessment of the chemical and mineralogical composition of air-cooled blast-furnace slag for its use as concrete aggregate. In: *Ceramics-Silikáty*. Vol. 37, no. 1 (1993), p. 21-27

Citácie zo SCO: 1

566. Elwan MM; El-Alfi EA; El-Didamony H
SILICATES INDUSTRIELS 72 (7-8) 113-118, 2007

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 WOK: 1

567. Lantenois S; Beny JM; Muller F; Champallier R
CLAY MINERALS 42 (1) 129-141, 2007

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. 23-32

Citácie z WOK: 2

568. Navratilova Z; Wojtowicz P; Vaculikova L; Sugarkova V
ACTA GEODYNAMICA ET GEOMATERIALIA 4 (3) 59-65, 2007
569. Fernandes C; Catrinescu C; Castilho P; Russo PA; Carrott MR; Breen C
APPLIED CATALYSIS A 318 108-120, 2007

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 WOK: 1

570. Friedrich F; Heissler S; Faubel W; Nuesch R; Weidler PG
VIBRATIONAL SPECTROSCOPY 43 (2) 427-434, 2007

MADEJOVÁ J. – KRAUS, I. – TUNEGA D. – ŠAMAJOVÁ, E. Fourier transform infrared spectroscopic characterization of kaolinite group minerals from the main Slovak deposits. In: *Geologica Carpathica C*. no. 6 (1997), p. 3-10

Citácie z WOK: 1

571. Janek M; Emmerich K; Heissler S; Nuesch R
CHEMISTRY OF MATERIALS 19 (4) 684-693, 2007

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 WOK: 7

572. Tran NH; Wilson MA; Milev AS; Dennis GR; Kannangara GSK
SURFACE REVIEW AND LETTERS 14 (2) 235-239, 2007
573. Pereira C; Patricio S; Silva AR; Magalhaes AL; Carvalho AP; Pires J; Freire C
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 316 (2) 570-579, 2007
574. Yildiz A; Kucsu M
CLAY MINERALS 42 (3) 399-414, 2007
575. Wallis PJ; Gates WP; Patti AF; Scott JL; Teoh E
GREEN CHEMISTRY 9 (9) 980-986, 2007
576. Onal M; Sankaya Y
POWDER TECHNOLOGY 172 (1) 14-18, 2007
577. Rodriguez YMV; Beltran HI; Vazquez-Labastida E; Linares-Lopez C; Salmon M
JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH 22 (3) 788-800, 2007
578. Fernandes C; Catrinescu C; Castilho P; Russo PA; Carrott MR; Breen C
APPLIED CATALYSIS A 318 108-120, 2007

MADEJOVÁ J. – ARVAIOVÁ, B. – KOMADEL P. FTIR spectroscopic characterization of thermally treated Cu^{2+} , Cd^{2+} , and Li^{+} montmorillonites. In: *Spectrochimica Acta A*. Vol. 55, no. 12 (1999), p. 2467-2476

Citácie z WOK: 2

579. Friedrich F; Heissler S; Faubel W; Nuesch R; Weidler PG
VIBRATIONAL SPECTROSCOPY 43 (2) 427-434, 2007
580. Tanaka M; Itadani A; Abe T; Taguchi H; Nagao M
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 308 (1) 285-288, 2007

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 WOK: 1

581. Lantenois S; Beny JM; Muller F; Champallier R
CLAY MINERALS 42 (1) 129-141, 2007

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 WOK: 14

582. Li Z; He K; Yin L; Xiong F; Zheng YC
CLAY MINERALS 42 (4) 453-461, 2007
583. Schuttlefield JD; Cox D; Grassian VH
JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH 112 (21) Art. No. D21303, 2007
584. Yang D; Yuan P; Zhu JX; He HP
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 89 (3) 847-852, 2007
585. Hatch CD; Gough RV; Tolbert MA
ATMOSPHERIC CHEMISTRY AND PHYSICS 7 (16) 4445-4458, 2007
586. Estella J; Echeverria JC; Laguna M; Garrido JJ
MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS 102 (1-3) 274-282, 2007

587. Caulfield JA; Wells TA; Miller KE
CLAYS AND CLAY MINERALS 55 (2) 213-219, 2007
588. Lantenois S; Beny JM; Muller F; Champallier R
CLAY MINERALS 42 (1) 129-141, 2007
589. Zimmermann M; Leifeld J; Abiven S; Schmidt MWI; Fuhrer J
GEODERMA 139 (1-2) 171-179, 2007
590. Onal M; Sarikaya Y
COLLOIDS AND SURFACES A 296 (1-3) 216-221, 2007
591. Rodriguez YMV; Beltran HI; Vazquez-Labastida E; Linares-Lopez C; Salmon M
JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH 22 (3) 788-800, 2007
592. Estella J; Echeverria JC; Laguna M; Garrido JJ
JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS 353 (3) 286-294, 2007
593. Janek M; Emmerich K; Heissler S; Nuesch R
CHEMISTRY OF MATERIALS 19 (4) 684-693, 2007
594. Unuabonah EI; Olu-Owolabi BI; Adebawale KO; Ofomaja AE
COLLOIDS AND SURFACES A 292 (2-3) 202-211, 2007
595. Brandt H; Bosbach D; Panak PJ; Fanghanel T
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 71 (1) 145-154, 2007

Citácie zo SCO: 2

596. Hatch CD; Gough RV; Tolbert MA
ATMOSPHERIC CHEMISTRY AND PHYSICS DISCUSSIONS 7 (3) 6999-7034, 2007
597. Yuan P; Yang D; Tao Q; Bergaya F; He HP; Zhu JX; Zhou Q
BULLETIN OF MINERALOGY PETROLOGY AND GEOCHEMISTRY 26 (2) 111-117, 2007

MADEJOVÁ J., JANEK M. – KOMADEL P. – HERBERT HJ. - MOOG HC. FTIR analyses of water in MX-80 bentonite compacted from high salinary salt solution systems. In: *Applied Clay Science*. Vol. 20, no. 6 (2002), p. 255-271

Citácie z WOK: 2

598. Lu LF; Cai JG; Bao YJ; Li CX; Yang SY; Fan DD
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 71 (15) A599-A599, 2007
599. Xue WH; He HP; Zhu JX; Yuan P
SPECTROCHIMICA ACTA A 67 (3-4) 1030-1036, 2007

Citácie zo SCO: 1

600. Xue WH; He HP; Zhu JX; Yuan P
KUANGWU YANSHI 27 (2) 1-6, 2007

MADEJOVÁ J. FTIR techniques in clay mineral studies. In: *Vibrational Spectroscopy*. Vol. 31, no. 1 (2003), p. 1-10

Citácie z WOK: 25

601. Navratilova Z; Wojtowicz P; Vaculikova L; Sugarkova V
ACTA GEODYNAMICA ET GEOMATERIALIA 4 (3) 59-65, 2007
602. Skiba M
CLAYS AND CLAY MINERALS 55 (6) 618-634, 2007
603. Pereira C; Patricio S; Silva AR; Magalhaes AL; Carvalho AP; Pires J; Freire C
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 316 (2) 570-579, 2007
604. Lee KP; Gopalan AY; Kim KS; Santhosh P
JOURNAL OF NANOSCIENCE AND NANOTECHNOLOGY 7 (10) 3386-3393, 2007
605. Manoharan C; Venkatachalapathy R; Dhanapandian S; Deenadayalan K
INDIAN JOURNAL OF PURE AND APPLIED PHYSICS 45 (10) 860-865, 2007
606. Kolli M; Hamidouche M; Fantozzi G; Chevalier J
CERAMICS INTERNATIONAL 33 (8) 1435-1443, 2007
607. Durmus A; Woo M; Kasgoz A; Macosko CW; Tsapatsis M
EUROPEAN POLYMER JOURNAL 43 (9) 3737-3749, 2007
608. Moron A; Cozzolino D
COMMUNICATIONS IN SOIL SCIENCE AND PLANT ANALYSIS 38 (15-16) 1965-1974, 2007
609. Wallis PJ; Gates WP; Patti AF; Scott JL; Teoh E
GREEN CHEMISTRY 9 (9) 980-986, 2007
610. Ugurlu M; Hazirbulan S
FRESENIUS ENVIRONMENTAL BULLETIN 16 (8) 887-895, 2007
611. Xue WH; He HP; Zhu JX; Yuan P
SPECTROCHIMICA ACTA A 67 (3-4) 1030-1036, 2007
612. Caulfield JA; Wells TA; Miller KE
CLAYS AND CLAY MINERALS 55 (2) 213-219, 2007
613. Hang TTX; Truc TA; Nam TH; Oanh VK; Jorcin JB; Pebere N
SURFACE AND COATINGS TECHNOLOGY 201 (16-17) 7408-7415, 2007
614. Akalin E; Akyuz S; Akyuz T
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE 834 477-481, 2007
615. Huang JH; Liu YF; Jin QZ; Wang XG; Yang J
JOURNAL OF HAZARDOUS MATERIALS 143 (1-2) 541-548, 2007

616. Angelini MM; Garrard RJ; Rosen SJ; Hinrichs RZ
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (17) 3326-3335, 2007
617. Wang L; Zhang CB; Wu F; Deng NS
JOURNAL OF PHOTOCHEMISTRY AND PHOTOBIOLOGY B 87 (1) 49-57, 2007
618. Huang JH; Liu YF; Jin QZ; Wang XG
SPECTROSCOPY AND SPECTRAL ANALYSIS 27 (2) 408-410, 2007
619. Ritz M
VIBRATIONAL SPECTROSCOPY 43 (2) 319-323, 2007
620. Soares VLP; Batista LN; San Gil RAS
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 87 (3) 805-809, 2007
621. Patel HA; Somani RS; Bajaj HC; Jasra RV
APPLIED CLAY SCIENCE 35 (3-4) 194-200, 2007
622. Tabak A; Afsin B; Aygun SF; Koksall E
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 87 (2) 375-381, 2007
623. Berna F; Behar A; Shahack-Gross R; Berg J; Boaretto E; Gilboa A; Sharon I; Shalev S; Shilstein S; Yahalom-Mack N; Zorn JR; Weiner S
JOURNAL OF ARCHAEOLOGICAL SCIENCE 34 (3) 358-373, 2007
624. Wang SL; Wang PC
COLLOIDS AND SURFACES A 292 (2-3) 131-138, 2007
625. Smidt E; Meissl K
WASTE MANAGEMENT 27 (2) 268-276, 2007

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 WOK: 1

626. Gionis V; Kacandes GH; Kastiris ID; Chrysosikou GD
CLAYS AND CLAY MINERALS 55 (6) 543-553, 2007

MADEJOVÁ J. – PÁLKOVÁ H. – KOMADEL P. Behaviour of Li^+ and Cu^{2+} in heated montmorillonite: Evidence from far-, mid-, and near-IR regions. In: *Vibrational Spectroscopy*. Vol. 40, no. 1 (2006), p. 80-88

Citácie z WOK: 1

627. Tanaka M; Itadani A; Abe T; Taguchi H; Nagao M
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 308 (1) 285-288, 2007

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 WOK: 5

628. Xu XJ; Zhou LH; Lu CZ
MATERIALS LETTERS 61 (28) 4980-4983, 2007
629. Gao LL; Song SY; Ma JF; Yang J
CRYSTAL GROWTH AND DESIGN 7 (5) 895-899, 2007
630. Zima V; Svoboda J; Benes L; Melanova K; Trchova M; Dybal J
JOURNAL OF SOLID STATE CHEMISTRY 180 (3) 929-939, 2007
631. Yang BP; Mao JG
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE 830 (1-3) 78-84, 2007
632. Stone JW; Smith MD; Loye HCZ
JOURNAL OF CHEMICAL CRYSTALLOGRAPHY 37 (2) 103-108, 2007

MACHÁČEK J. – GEDEON O. – LIŠKA M. Relaxation of structural units in MD simulated silicate glasses. In: *Physics and Chemistry of Glasses B*. Vol. 47, no. 3 (2006), p. 266-270

Citácie z WOK: 1

633. Imre AW; Staesche H; Voss S; Ingram MD; Funke K; Mehrer H
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (19) 5301-5307, 2007

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 WOK: 2

634. Jacob CR; Visscher L; Thierfelder C; Schwerdtfeger P
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (20) Art. No. 204303, 2007
635. Mastalerz R; Barone G; Lindh R; Reiher M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (7) Art. No.074105, 2007

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 WOK: 1

636. Mastalerz R; Barone G; Lindh R; Reiher M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (7) Art. No.074105, 2007

Citácie zo SciFinder: 1

637. Neese F
ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE 20 73-95, 2007

MALKIN,VG. – CHESNOKOV,VV. – PAUKSHTIS,EA. – ZHIDOMIROV,GM. Quantum-chemical calculations of ^{13}C chemical shifts of the alkoxide form in zeolites. In: *Journal of the American Chemical Society*. Vol. 112, no. 2 (1990), p. 666-669

Citácie z WOK: 1

638. Guo YH; Pu M; Wu JY; Zhang JY; Chen BH
APPLIED SURFACE SCIENCE 254 (2) 604-609, 2007

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 WOK: 9

639. Islas R; Heine T; Ito K; Schleyer PVR; Merino G
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (47) 14767-14774, 2007
640. Zienau J; Kussmann J; Koziol F; Ochsenfeld C
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (32) 4552-4562, 2007
641. Kussmann J; Ochsenfeld C
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (5) Art. No. 054103, 2007
642. Islas R; Heine T; Merino G
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (3) 775-781, 2007
643. Ligabue A; Sauer SPA; Lazzeretti P
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (15) Art. No. 154111, 2007
644. Corminboeuf C; King RB; Schleyer PV
CHEMPHYSCHEM 8 (3) 391-398, 2007
645. Gerlach D; Brendler E; Heine T; Wagler J
ORGANOMETALLICS 26 (1) 234-240, 2007
646. Heine T; Islas R; Merino G
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (1) 302-309, 2007
647. Arbuznikov AV
JOURNAL OF STRUCTURAL CHEMISTRY 48 1-31, 2007

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 WOK: 1

648. Corminboeuf C; King RB; Schleyer PV
CHEMPHYSCHEM 8 (3) 391-398, 2007

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 WOK: 18

649. Shao LM; Yates JR; Titman JJ
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (50) 13126-13132, 2007
650. Seiler O; Burschka C; Gotz K; Kaupp M; Metz S; Tacke R
ZEITSCHRIFT FÜR ANORGANISCHE UND ALLGEMEINE CHEMIE 633 (15) 2667-2670, 2007
651. Wu A; Zhang P; Xu X; Yan W
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (15) 2431-2442, 2007
652. Zhang Y; Wu A; Xu X; Yan Y
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (38) 9431-9437, 2007
653. Zienau J; Kussmann J; Koziol F; Ochsenfeld C
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (32) 4552-4562, 2007
654. Milcic MK; Ostojic BD; Zaric SD
INORGANIC CHEMISTRY 46 (17) 7109-7114, 2007
655. Truflandier L; Paris M; Boucher F
PHYSICAL REVIEW B 76 (3) Art. No. 035102, 2007
656. Morkovnik AS; Divaeva LN; Nelyubina YV; Lyssenko KA; Vasilchenko IS
MENDELEEV COMMUNICATIONS 17 (4) 224-226, 2007
657. Kussmann J; Ochsenfeld C
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (5) Art. No. 054103, 2007
658. d'Antuono P; Botek E; Champagne B; Wieme J; Reyniers MF; Marin GB; Adriaenssens PJ; Gelan JM
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 436 (4-6) 388-393, 2007
659. Kupka T; Lim C
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (10) 1927-1932, 2007
660. Precechtelova J; Munzarova ML; Novak P; Sklenar V
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (10) 2658-2667, 2007
661. Corminboeuf C; King RB; Schleyer PV
CHEMPHYSCHEM 8 (3) 391-398, 2007
662. Czinki E; Csaszar AG; Magyarfalvi G; Schreiner PR; Allen WD
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (6) 1568-1577, 2007

663. Rehder D; Polenova T; Buhl M
ANNUAL REPORTS ON NMR SPECTROSCOPY 62 49-114, 2007
664. Wannere CS; Paul A; Herges R; Houk KN; Schaefer HF; Von Schleyer P
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (1) 344-361, 2007
665. Nafikova AA; Aminova RM; Aganov AV; Reznik VS
JOURNAL OF STRUCTURAL CHEMISTRY 48 64-78, 2007
666. Arbuznikov AV
JOURNAL OF STRUCTURAL CHEMISTRY 48 1-31, 2007

Citácie zo SCO: 2

667. Autschbach J; Seth M; Ziegler T
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (17) Art. No. 174103, 2007
668. Siehl HU
ADVANCES IN PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY 42 125-165, 2007

Citácie zo SciFinder: 2

669. Siehl HU
ACS SYMPOSIUM 965 1-31, 2007
670. Truflandier L; Paris M; Boucher F
LOS ALAMOS NATIONAL LABORATORY 1-56, 2007

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 WOK: 5

671. Joyce SA; Yates JR; Pickard CJ; Mauri F
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (20) Art. No. 204107, 2007
672. Vaara J
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (40) 5399-5418, 2007
673. Sanchez-Mendoza E; Hernandez-Trujillo J; del Rio-Portilla F
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (33) 8264-8270, 2007
674. Precechtelova J; Munzarova ML; Novak P; Sklenar V
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (10) 2658-2667, 2007
675. Krivdin LB, Contreras RH
ANNUAL REPORTS ON NMR SPECTROSCOPY 61 133-245, 2007

MALKIN,VG. – MALKINA,OL. – RIKSSON,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 WOK: 6

676. Kossmann S; Kirchner B; Neese F
MOLECULAR PHYSICS 105 (15-16) 2049-2071, 2007
677. Corminboeuf C; King RB; Schleyer PV
CHEMPHYSICHEM 8 (3) 391-398, 2007
678. Wannere ChS; Paul A; Herges R; Houk KN; Schaefer HF; Schleyer PR
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (1) 344-361, 2007
679. Krivdin LB; Contreras RH
ANNUAL REPORTS ON NMR SPECTROSCOPY 61 133-245, 2007
680. Pacholczyk J; Kalisiak J; Jurczak J; Potrzebowski MJ
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (11) 2790-2799, 2007
681. David J; Restrepo A
PHYSICAL REVIEW A 76 (5) 052511-1-052511-5, 2007

Citácie zo SciFinder: 6

682. Hermosilla L; Calle P; Sieiro C; Garcia N; Tiemblo P; Guzman J
CHEMICAL PHYSICS 340 (1-3) 237-244, 2007
683. Shkrob IA; Chemerisov SD; Wishart JF
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (40) 11786-11793, 2007
684. Gajda J; Jeziora A; Ciesielski W; Potrzebowski WM; Prezdo WW; Potrzebowski MJ
SOLID STATE NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE 31 (3) 153-161, 2007
685. Shkrob IA
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (24) 5223-5231, 2007
686. Shkrob IA; Chemerisov SD; Wishart JF
LOS ALAMOS NATIONAL LABORATORY 1-64, 2007
687. Precechtelova J; Munzarova ML; Novak P; Sklenar V
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (10) 2658-2667, 2007

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 WOK: 2

688. Stievano L; Piao LY; Lopes I; Meng M; Costa D; Lambert JF
EUROPEAN JOURNAL OF MINERALOGY 19 (3) 321-331, 2007
689. Esrafil MD; Behzadi H; Hadipour NL
BIOPHYSICAL CHEMISTRY 128 (1) 38-45, 2007

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 WOK: 4

690. Bagno A; Rastrelli F; Saielli G
JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY 72 (19) 7373-7381, 2007
691. Fileti EE; Georg HC; Coutinho K; Canuto S
JOURNAL OF THE BRAZILIAN CHEMICAL SOCIETY 18 (1) 74-84, 2007
692. Kongsted J; Nielsen CB; Mikkelsen KV; Christiansen O; Ruud K
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (3) Art. No. 034510, 2007
693. Pennanen TS; Lantto P; Sillanpaa AJ; Vaara J
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (1) 182-192, 2007

Citácie zo SciFinder: 1

694. Sadlej J; Pecul M
CONTINUUM SOLVATION MODELS IN CHEMICAL PHYSICS 125-144, 2007

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 WOK: 2

695. Vaara J
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (40) 5399-5418, 2007
696. Jackowski K; Kubiszewski M; Wilczek M
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 440 (4-6) 176-179, 2007

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 WOK: 9

697. Joyce SA; Yates JR; Pickard CJ; Mauri F
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (20) Art. No. 204107, 2007
698. Gräfenstein J; Cremer D
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (17) Art. No. 174704, 2007
699. Juaristi E; Cuevas G
ACCOUNTS OF CHEMICAL RESEARCH 40 (10) 961-970, 2007
700. Vaara J
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (40) 5399-5418, 2007
701. Rinkevicius Z; Jha PC; Oprea CI; Vahtras O; Agren H
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (11) Art. No. 114101, 2007
702. Sanchez-Mendoza E; Hernandez-Trujillo J; del Rio-Portilla F
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (33) 8264-8270, 2007
703. Precechtelova J; Munzarova ML; Novak P; Sklenar V
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (10) 2658-2667, 2007
704. van Mourik T; Dingley AJ
CHEMPHYSICHEM 8 (2) 288-296, 2007
705. Krivdin LB; Contreras R
ANNUAL REPORTS ON NMR SPECTROSCOPY 61 133-245, 2007

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 WOK: 2

706. Jackowski K; Kubiszewski M; Wilczek M
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 440 (4-6) 176-179, 2007
707. Neese F; Petrenko T; Ganyushin D; Olbrich G
COORDINATION CHEMISTRY REVIEWS 251 (3-4) 288-327, 2007

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 WOK: 9

708. Brynda M; Britt RD
RESEARCH ON CHEMICAL INTERMEDIATES 33 (8-9) 863-883, 2007
709. Neese F
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (16) Art. No. 164112, 2007

710. Vancoillie S; Malmqvist PA; Pierloot K
CHEMPHYSCHEM 8 (12) 1803-1815, 2007
711. Schnegg A; Dubinskii AA; Fuchs MR; Grishin YA; Kirilina EP; Lubitz W; Plato M; Savitsky A; Mobius K
APPLIED MAGNETIC RESONANCE 31 (1-2) 59-98, 2007
712. Yamaji T; Saiful ISM; Baba M; Yamauchi S; Yamauchi J
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (21) 4612-4619, 2007
713. Gomzi V; Herak JN
CHEMICAL PHYSICS 333 (2-3) 112-118, 2007
714. de Almeida KJ.; Rinkevicius Z; Hugosson HW; Ferreira AC; Agren H
CHEMICAL PHYSICS 332 (2-3) 176-187, 2007
715. Mattar SM
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (2) 251-260, 2007
716. Arbuznikov AV
JOURNAL OF STRUCTURAL CHEMISTRY 48 (1) 1-31, 2007

Citácie zo SCO: 1

717. Neese F; Petrenko T; Ganyushin D; Olbrich G
COORDINATION CHEMISTRY REVIEWS 251 (3-4) 288-327, 2007

Citácie zo SciFinder: 3

718. Barone V; Cimino P; Pavone M
CONTINUUM SOLVATION MODELS IN CHEMICAL PHYSICS 145-166, 2007
719. Basilevsky MV; Chuev GN
CONTINUUM SOLVATION MODELS IN CHEMICAL PHYSICS 94-169, 2007
720. Neese F
ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE 20 73-95, 2007

MALKINA,OL. – HRICOVÍNI,M. – BÍŽIK,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 WOK: 4

721. Wiitala KW; Cramer CJ; Hoyer TR
MAGNETIC RESONANCE IN CHEMISTRY 45 (10) 819-829, 2007
722. Bagno A; Rastrelli F; Saielli G
JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY 72 (19) 7373-7381, 2007
723. Tafazzoli M; Grhiasi M
CARBOHYDRATE RESEARCH 342 (14) 2086-2096, 2007
724. Mobli M; Almond A
ORGANIC AND BIOMOLECULAR CHEMISTRY 5 (14) 2243-2251, 2007

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

Citácie z WOK: 4

725. Grafenstein J; Cremer D
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (17) Art. No. 174704, 2007
726. Autschbach J
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (12) Art. No. 124106, 2007
727. Cremer D; Grafenstein J
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (22) 2791-2816, 2007
728. Krivdin LB; Contreras R
ANNUAL REPORTS ON NMR SPECTROSCOPY 61 133-245, 2007

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 zo SciFinder: 1

729. Krivdin LB; Contreras RH
ANNUAL REPORTS ON NMR SPECTROSCOPY 61 133-245 2007

MEDVEĎ,M. – NOGA,J. – JACQUEMIN,D. – PERPETE,EA. Longitudinal NLO properties of C₂H₂, HCCF, and C₂F₂: Electron correlation and vibration effects. In: *International Journal of Quantum Chemistry*. Vol. 102, no. 2 (2005), p. 209-223

Citácie z WOK: 4

730. Avramopoulos A; Serrano-Andres L; Li JB; Reis H; Papadopoulos MG
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (21) Art. No. 214102, 2007
731. Maraval V; Chauvin R
NEW JOURNAL OF CHEMISTRY 31 (11) 1853-1873, 2007
732. Luis JM; Torrent-Sucarrat M; Christiansen O; Kirtman B
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (8) Art. No. 084118, 2007
733. Alabugin IV; Manoharan M
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (1) 373-390, 2007

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 WOK: 2

734. Zhang XR; Xu Z
MATERIALS LETTERS 61 (7) 1478-1482, 2007
735. Joussein E; Petit S; Delvaux B
APPLIED CLAY SCIENCE 35 (1-2) 17-24, 2007

Citácie zo SCO: 1

736. Pi Z; Liu Z; Yang C; Tian X; Fei J; Zheng J
FRONTIERS OF EARTH SCIENCE IN CHINA 1 (1) 26-29, 2007

MOJUMDAR, SC. – MAZANEC, K. – DRÁBIK, M. Macro-defect-free (MDF) cements. Synthesis, thermal, chemical, SEM and magnetometric study and moisture resistance. In: *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. Vol. 83, no. 1 (2006), p. 135-139

Citácie z WOK: 1

737. Stepkowska ET; Aviles MA; Blanes JM; Perez-Rodriguez JL
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY 87 (1) 189-198, 2007

MÜLLER, H. – KUTZELNIGG, W. – NOGA, J. A CCSD(T)-R12 study of the ten-electron systems Ne, F⁻1, HF, H₂O, NH₃, NH₄⁺ and CH₄. In: *Molecular Physics*. Vol. 92, no. 3 (1997), p. 535-546

Citácie z WOK: 3

738. Gurtubay IG; Needs RJ
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (12) Art. No. 124306, 2007
739. Varandas AJC
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (24) Art. No. 244105, 2007
740. Dahle P; Helgaker T; Jonsson D; Taylor PR
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (24) 3112-3126, 2007

MÜLLER, H. – KUTZELNIGG, W. – NOGA, J. – KLOPPER, W. CH₅⁺: 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 WOK: 3

741. Akhrem I; Orlinov A
CHEMICAL REVIEWS 107 (5) 2037-2079, 2007
742. Tian SX; Yang JL
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (3) 415-418, 2007
743. Scemama A; Caffarel M; Savin A
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (1) 442-454, 2007

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 WOK: 17

745. Harding ME; Gauss J; Pfluger K; Werner HJ
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (51) 13623-13628, 2007
746. Hagen G; Dean DJ; Hjorth-Jensen M; Papenbrock T
PHYSICS LETTERS B 656 (4-5) 169-173, 2007
747. Fang T; Li SH
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (20) Art. No. 204108, 2007
748. Belau L; Wheeler SE; Ticknor BW; Ahmed M; Leone SR; Allen WD; Schaefer HF; Duncan MA
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (33) 10229-10243, 2007
749. Cortez MH; Brinkmann NR; Polik WF; Taylor PR; Bomble YJ; Stanton JF
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (4) 1267-1274, 2007
750. Sur C; Chaudhuri RK
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 442 (1-3) 150-156, 2007
751. Cernusak I; Dallos M; Lischka H; Muller T; Uhlar M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (21) Art. No. 214311, 2007
752. Herrmann T; Ren QH; Balint-Kurti GG; Manby FR
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (22) Art. No. 224309, 2007
753. Chattopadhyay S; Mukhopadhyay D
JOURNAL OF PHYSICS B 40 (10) 1787-1799, 2007
754. Zheng JJ; Zhao Y; Truhlar DG
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (21) 4632-4642, 2007
755. Wheeler SE; Simmonett AC; Schaefer HF
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (20) 4551-4555, 2007
756. Wheeler SE; Robertson KA; Allen WD; Schaefer HF; Bomble YJ; Stanton JF
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (19) 3819-3830, 2007
757. Jaque P; Marenich AV; Cramer CJ; Truhlar DG
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (15) 5783-5799, 2007
758. Feller D; Peterson KA
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (11) Art. No. 114105, 2007

759. Guliamov O; Kronik L; Martin JML
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (10) 2028-2032, 2007
760. Zhu ZL; Sun JF; Shi DH; Zhu ZH
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 802 (1-3) 7-9, 2007
761. Zhang X; Maccarone AT; Nimlos MR; Kato S; Bierbaum VM; Ellison GB; Ruscic B; Simmonett AC; Allen WD; Schaefer HF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (4) Art. No. 044312, 2007

NOGA,J. – BARTLETT,RJ. – 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 WOK: 4

762. Hagen G; Dean DJ; Hjorth-Jensen M; Papenbrock T; Schwenk A
PHYSICAL REVIEW C 76 (4) Art. No. 044305, 2007
763. Hagen G; Dean DJ; Hjorth-Jensen M; Papenbrock T
PHYSICS LETTERS B 656 (4-5) 169-173, 2007
764. Kowalski K; Hammond JR; de Jong WA
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (16) Art. No. 164105, 2007
765. Hammond JR; Valiev M; Dejong WA; Kowalski K
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (25) 5492-5498, 2007

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 WOK: 1

766. Hagen G; Dean DJ; Hjorth-Jensen M; Papenbrock T
PHYSICS LETTERS B 656 (4-5) 169-173, 2007

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 WOK: 4

767. Distasio RA; Steele RP; Head-Gordon M
MOLECULAR PHYSICS 105 (19-22) 2731-2742, 2007
768. Adler TB; Knizia G; Werner HJ
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (22) Art. No. 221106, 2007
769. Bartlett RJ; Musial M
REVIEWS OF MODERN PHYSICS 79 (1) 291-352, 2007
770. Paldus J; Li XZ
COLLECTION OF CZECHOSLOVAK CHEMICAL COMMUNICATIONS 72 (1) 100-120, 2007

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 WOK: 8

771. Distasio RA; Steele RP; Head-Gordon M
MOLECULAR PHYSICS 105 (19-22) 2731-2742, 2007
772. Adler TB; Knizia G; Werner HJ
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (22) Art. No. 221106, 2007
773. Ten-no S
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 447 (1-3) 175-179, 2007
774. Tew DP; Klopper W; Heckert M; Gauss J
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (44) 11242-11248, 2007
775. Neiss C; Hattig C
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (15) Art. No. 154101, 2007
776. Tew DP; Klopper W; Neiss C; Hattig C
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (16) 1921-1930, 2007
777. Luo HJ; Kolb D; Flad HJ; Hackbusch W
PHYSICAL REVIEW B 75 (12) Art. No.125111, 2007
778. Bartlett RJ; Musial M
REVIEWS OF MODERN PHYSICS 79 (1) 291-352, 2007

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 WOK: 2

779. Bakowies D
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (16) Art. No.164109, 2007
780. Dahle P; Helgaker T; Jonsson D; Taylor PR
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (24) 3112-3126, 2007

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 WOK: 3

781. Hellmann R; Bich E; Vogel E
MOLECULAR PHYSICS 105 (23-24) 3013-3023, 2007
782. Ten-no S
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 447 (1-3) 175-179, 2007
783. Crawford TD; Sherrill CD; Valeev EF; King RA; Leininger ML; Brown ST; Janssen CL; Seidl ET; Kenny JP; Allen WD
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (9) 1610-1616, 2007

NOGA,J. – PLUTA,T. Coupled cluster calculations of the electric properties of BeS. An analysis of the fifth-order non-iterative corrections. In: *Chemical Physics Letters*. Vol. 264, no. 1-2 (1997), p. 101-108
Citácie z WOK: 1

784. Srnec M; Zahradnik R
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY 11 1529-1543, 2007

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 WOK: 4

785. Distasio RA; Steele RP; Head-Gordon M
MOLECULAR PHYSICS 105 (19-22) 2731-2742, 2007
786. Tew DP; Klopper W; Heckert M; Gauss J
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (44) 11242-11248, 2007
787. Neiss C; Hattig C
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (15) Art. No. 154101, 2007
788. Bartlett RJ; Musial M
REVIEWS OF MODERN PHYSICS 79 (1) 291-352, 2007

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 WOK: 5

789. Varandas AJC
PHYSICA SCRIPTA 76 (3) 28-35, 2007
790. Bytautas L; Nagata T; Gordon MS; Ruedenberg K
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (16) Art. No. 164317, 2007
791. Bakowies D
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (8) Art. No. 084105, 2007
792. Brown MD; Trail JR; Rios PL; Needs RJ
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (22) Art. No. 224110, 2007
793. Bartlett RJ; Musial M
REVIEWS OF MODERN PHYSICS 79 (1) 291-352, 2007

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 WOK: 1

794. Bartlett RJ; Musial M
REVIEWS OF MODERN PHYSICS 79 (1) 291-352, 2007

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

Citácie z WOK: 1

795. Tew DP; Klopper W; Heckert M; Gauss J
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (44) 11242-11248, 2007

NOGA,J. – KEDŽUCH,S. – 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, no. 3 (2007), p. 034106-1-034106-11

Citácie z WOK: 1

796. Adler TB; Knizia G; Werner HJ
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (22) Art. No. 221106, 2007

NOVOSZAD,M. – GERZABEK,MH. – HABERHAUER,G. – JAKUSCH,M. – LISCHKA,H. – TUNEGA,D. – KIRCHMANN,H. Sorption of naphthalene derivatives to soils from a long-term field experiment. In: *Chemosphere*. Vol. 59, no. 5 (2005), p. 639-647

Citácie z WOK: 4

797. Hanna K; Carteret C
CHEMOSPHERE 70 (2) 178-186, 2007
798. Hanna K
APPLIED GEOCHEMISTRY 22 (9) 2045-2053, 2007
799. Parat C; Denaix L; Leveque J; Chaussod R; Andreux F
CHEMOSPHERE 69 (4) 636-643, 2007
800. Hanna K
JOURNAL OF COLLOID AND INTERFACE SCIENCE 309 (2) 419-428, 2007

PÁLKOVÁ,H. – MADEJOVÁ,J. – RIGHI,D. Acid dissolution of reduced-charge Li- and Ni-montmorillonites. In: *Clays and Clay Minerals*. Vol. 51, no. 2 (2003), p. 133-142

Citácie z WOK: 1

801. Kozai N; Inada K; Adachi Y; Kawamura S; Kashimoto Y; Kozaki T; Sato S; Ohnuki T; Sakai T; Sato T; Oikawa M; Esaka F; Mitamura H
JOURNAL OF SOLID STATE CHEMISTRY 180 (8) 2279-2289, 2007

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 WOK: 2

802. Seki Y; Yurdakoc K
CLAY MINERALS 42 (2) 153-160, 2007
803. Lantenois S; Beny JM; Muller F; Champallier R
CLAY MINERALS 42 (1) 129-141, 2007

PETIT,S. – RIGHI,D. – MADEJOVÁ,J. Infrared spectroscopy of NH_4^+ -bearing and saturated clay minerals: A review of the study of layer charge. In: *Applied Clay Science*. Vol. 34, no. 1-4 (2006), p. 22-30

Citácie z WOK: 1

804. Kostrab G; Lovic M; Janotka I; Bajus M; Mravec D
APPLIED CATALYSIS A 323 210-218, 2007

RAJAMÄKI,T. – KALLAY,M. – NOGA,J. – VALIRON,P. – HALONEN,L. High excitations in coupled-cluster series: vibrational energy levels of ammonia. In: *Molecular Physics*. Vol. 102, no. 21-22 (2004), p.2297-2310

Citácie z WOK: 1

805. Lim IS; Botschwina P; Oswald R; Barone V; Stoll H; Schwerdtfeger P
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (10) Art. No.104313, 2007

RAJAN,K. – ŠAJGALÍK,P. Microstructurally induced internal stresses in $\beta\text{-Si}_3\text{N}_4$ whisker reinforced Si_3N_4 ceramics. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 17, no. 9 (1997), p. 1093-1097

Citácie zo SCO: 2

806. Puyad AL; Raghunath P; Chaitanya KG; Ramakrishna K; Bhanuprakash K
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE –THEOCHEM 1-3 73-85, 2007
807. Xu Y; Cao C; Du H; Li J; Zhu H
MATERIALS LETTERS 61 (18) 3855-3858, 2007

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

Citácie z WOK: 2

808. Wang G; Huang YH
JOURNAL OF PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDS 68 (10) 2003-2007, 2007
809. Bouchmella K; Boury B; Dutremez SG; van der Lee A
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 13 (21) 6130-6138, 2007

RESCHKE,S. – HALUSCHKA,C. – RIEDEL,R. – LENČEŠ,Z. – GALUSEK,D. In situ generated homogeneous and functionally graded ceramic materials derived from polysilazane. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 23, no. 11 (2003), p. 1963-1970

Citácie z WOK: 2

810. Qi GJ; Zhang CR; Hu HF
CERAMICS INTERNATIONAL 33 (5) 891-894, 2007
811. Xiong LP; Xu YS
PROGRESS IN CHEMISTRY 19 (4) 567-574, 2007

REVIKINE,R. – ARBUZNIKOV,AV. – TREMBLAY,JC. – REMENYI,C. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. – KAUPP,M. Calculation of zero-field splitting parameters: Comparison of a two-component noncolinear spin-density-functional method and a one-component perturbational approach. In: *Journal of Chemical Physics*. Vol. 125, no. 5 (2006), p. 054110-1-054110-12

Citácie z WOK: 4

812. Neese F
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (16) Art. No.164112, 2007
813. Duboc C; Phoeung T; Zein S; Pecaut J; Collomb MN; Neese F
INORGANIC CHEMISTRY 46 (12) 4905-4916, 2007
814. Sinnecker S; Svensen N; Barr EW; Ye S; Bollinger JM; Neese F; Krebs C
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (19) 6168-6179, 2007
815. Zerbetto M; Carlotto S; Polimeno A; Corvaja C; Franco L; Toniolo C; Formaggio, Barone V; Cimino P
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (10) 2668-2674, 2007

Citácie zo SciFinder: 2

816. Carmieli R; Larsen TM; Reed GH; Zein S; Neese F; Goldfarb D
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 129 (14) 4240-4252, 2007

817. Neese F
ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE (20) 73-95, 2007

RIBEIRO,FR. – STUCKI,JW. – LARSON,K. – MERDEY,A. – KOMADEL,P. – FABRIS, JD. Degradation of oxamyl by redox-modified smectites: Effects of pH. Layer charge, and extent of Fe reduction. In: *Applied Mineralogy*. (2004), p. 471-474

Citácie z WOK: 1

818. Merola RB; Fournier ED; McGuire MM
LANGMUIR 23 (3) 1223-1226, 2007

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 3

Citácie z WOK: 3

819. Yamaoka K; Kawahata H; Gupta LP; Ito M; Masuda H
ORGANIC GEOCHEMISTRY 38 (11) 1897-1909, 2007
820. Chen JY; Cheng HB; Zhu M; Jin LL; Zheng HF
GEOCHEMICAL JOURNAL 41 (4) 283-290, 2007
821. Chiarabelli C; De Lucrezia D
ORIGINS OF LIFE AND EVOLUTION OF BIOSPHERES 37 (4-5) 357-361, 2007

SAHU,S. – KAVECKÝ,Š. – ILLÉSOVÁ,L. – 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 WOK: 2

822. Termoss H; Toury B; Brioude A; Dazord J; Le Brusq J; Miele P
SURFACE AND COATINGS TECHNOLOGY 201 (18) 7822-7828, 2007
823. Song HS; Zhang J; Lin J; Liu SJ; Luo JJ; Huang Y; Elssafah EM; Elsanousi A; Ding XX; Gao JM; Tang CC
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (3) 1136-1139, 2007

Citácie zo SCO: 1

824. Chen GC; Li B; Tong YM; Lu FX; Boo; JH
KEY ENGINEERING MATERIALS 336-338 2586-2588, 2007

SEDLÁČEK,J. – GALUSEK,D. – ŠAJGALÍK,P. Effect of rare earth oxide and rare earth-alumina-silica glass on mechanical properties of liquid phase sintered alumina ceramics. In: *Key Engineering Materials*. Vol. 290 (2005), p. 246-249

Citácie zo SCO: 1

825. Brahmandam S; Raj R
JOURNAL OF THE AMERICAN CERAMIC SOCIETY 90 (10) 3171-3176, 2007

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 WOK: 3

826. Del Bene JE; Elguero J
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (28) 6443-6448, 2007
827. Cybulski H; Sadlej J
POLISH JOURNAL OF CHEMISTRY 81 (5-6) 683-697, 2007
828. Yuhnevich G; Tsoi OY
JOURNAL OF OPTICAL TECHNOLOGY 74 (5) 299-301, 2007

SCHLEYER,PV. – JIAO,HJ. – HOMMES,NJR.V. – 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, no. 51 (1997), p. 12669-12670

Citácie z WOK: 37

829. Islas R; Chamorro E; Robles J; Heine T; Santos JC; Merino G
STRUCTURAL CHEMISTRY 18 (6) 833-839, 2007
830. Iqbal P; Patel DS; Bharatam PV
JOURNAL OF PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY 20 (12) 1072-1080, 2007
831. Dong WB; Wang HJ; Ge QY; Wang L
STRUCTURAL CHEMISTRY 18 (5) 593-597, 2007
832. Mills NS; Llagostera KB
JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY 72 (24) 9163-9169, 2007
833. Li Z; Zhao C; Chen L
JOURNAL OF THEORETICAL AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY 6 (2) 363-376, 2007
834. Chattaraj PK; Giri S
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (43) 11116-11121, 2007
835. Yao L; Zeng XQ; Ge MF; Wang DX
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE 841 (1-3) 104-109, 2007

836. Schulman JM; Disch RL
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (39) 10010-10014, 2007
837. Esser B; Raskatov JA; Gleiter R
ORGANIC LETTERS 9 (20) 4037-4040, 2007
838. Yong L; Chi XX
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 818 (1-3) 93-99, 2007
839. Subbotina JO; Sadchikova EV; Bakulev VA; Fabian WMF; Herges R
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 107 (13) 2479-2488, 2007
840. Pei XQ; Wu HS; Zhang XQ; Xu XY
ACTA CHIMICA SINICA 65 (14) 1357-1362, 2007
841. Tokitoh N; Shinohara A; Matsumoto T; Sasamori T; Takeda N; Furukawa Y
ORGANOMETALLICS 26 (16) 4048-4053, 2007
842. Lobl J; Timoshkin AY; Cong T; Necas M; Roesky HW; Pinkas J
INORGANIC CHEMISTRY 46 (14) 5678-5685, 2007
843. Siebert MR; Tantillo D
JOURNAL OF PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY 20 (6) 384-394, 2007
844. Li ZW; Zhao CY; Chen LP
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 809 (1-3) 45-54, 2007
845. Liu ZZ; Tian WQ; Feng JK; Li WQ; Cui YH
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 809 (1-3) 171-179, 2007
846. Holtz T; Nguyen MT; Veszpremi T
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 811 (1-3) 27-35, 2007
847. Li QS; Xu Y
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (8) 1446-1455, 2007
848. Islas R; Heine T; Merino G
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (3) 775-781, 2007
849. Wang L; Wang HJ
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 107 (9) 1846-1855, 2007
850. Chi XX; Liu Y
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 107 (9) 1886-1896, 2007
851. Novak I; Kovac B
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 440 (1-3) 70-72, 2007
852. Alonso M; Herradon B
CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 13 (14) 3913-3923, 2007
853. Li ZW; Zhao CY; Chen LP
JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM 807 (1-3) 17-23, 2007
854. Klisch M; Richter P; Puchta R; Hader DP; Bauer W
HELVETICA CHIMICA ACTA 90 (3) 488-511, 2007
855. Hiberty PC; Volatron F
HETEROATOM CHEMISTRY 18 (2) 129-134, 2007
856. Shen W; Li M, Li Y; Wang SL
INORGANICA CHIMICA ACTA 360 (2) 619-624, 2007
857. Wang L; Wang HJ; Dong WB; Ge QY; Lin L
STRUCTURAL CHEMISTRY 18 (1) 25-31, 2007
858. Sun XY; Li ZR; Wu D; Sun CC
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 107 (5) 1215-1222, 2007
859. Sun GY; Nicklaus MC
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 117 (2) 323-332, 2007
860. Liu CH; Tang MS; Wang HM
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (4) 704-709, 2007
861. Chattaraj PK; Sarkar U; Roy DR
JOURNAL OF CHEMICAL EDUCATION 84 (2) 354-357, 2007
862. Despotovic I; Maksic ZB; Vianello R
NEW JOURNAL OF CHEMISTRY 31 (1) 52-62, 2007
863. Heine T; Islas R; Merino G
JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 28 (1) 302-309, 2007
864. Yong L; Wu SD; Chi XX
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 107 (3) 722-728, 2007
865. Zhao Y; Li N; Xu WG; Li QS
INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY 107 (1) 81-91, 2007

SCHOLTZOVA, 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 WOK: 1

866. Larentzos JP; Greathouse JA; Cygan RT
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (34) 12752-12759, 2007

SCHWEIFER, J. – WEINBERGER, P. – MEREITER, 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 WOK: 2

867. Sereidyuk M; Gaspar AB; Munoz MC; Verdaguer M; Villain F; Gutlich P
EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY 28 4481-4491, 2007
868. Bronisz R
INORGANIC CHEMISTRY 46 (16) 6733-6739, 2007

SLOSIARIKOVÁ, H. – BUJDÁK, J. – HLAVATÝ, V. IR-spectra of octadecylammonium-montmorillonite in the range of the Si-O vibrations: In: *Journal of Inclusion Phenomena and Molecular Recognition in Chemistry*. Vol. 113, no. 3 (1992), p. 267-272
Citácie z WOK: 1

868. Boufatit M; Ait-Amar H; McWhinnie WR
DESALINATION 206 (1-3) 394-406, 2007

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 WOK: 1

869. Beghidja A; Welter R; Rabu P; Rogez G
INORGANICA CHIMICA ACTA 360 (3) 1111-1120, 2007

SMRČOK, I. Rietveld refinement of C_3AH_6 . In: *Journal of Applied Crystallography*. Vol. 20, (1987), p. 320-322
Citácie z WOK: 2

870. Hillier S; Lumsdon DG; Brydson R; Paterson E
ENVIRONMENTAL SCIENCE AND TECHNOLOGY 41 (6) 1921-1927, 2007
871. Mercury JMR; Pena P; De Aza AH; Turrillas X; Sobrados I; Sanz J
ACTA MATERIALIA 55 (4) 1183-1191, 2007

SMRČOK, I. – ĎUROVIČ, S. – PETRÍČEK, 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 WOK: 1

872. Zhukhlistov AP
CRYSTALLOGRAPHY REPORTS 52 (2) 208-214, 2007

SMRČOK, I. – BENCO, I. Ab initio periodic Hartree-Fock study of lizardite 1T. In: *American Mineralogist*. Vol. 81, no. 11-12 (1996), p. 1405-1412
Citácie z WOK: 1

873. Tunega D; Goodman BA; Haberhauer G; Reichenauer TG; Gerzabek MH; Lischka H
CLAYS AND CLAY MINERALS 55 (2) 220-232, 2007

SMRČOK, I. – KOPPELHUBER-BITSCHNAU, B. – SHANKLAND, K. – DAVID, W. F. – TUNEGA, D. – RESEL, R. Decafluoroquarterphenyl - crystal and molecular structure solved from X-ray powder data. In: *Zeitschrift für Kristallographie*. Vol. 216, no. 1 (2001), p. 63-66
Citácie z WOK: 1

874. Burla MC; Caliendo R; Carrozzini B; Cascarano GL; De Caro L; Giacovazzo C; Polidori G; Siliqi D
JOURNAL OF APPLIED CRYSTALLOGRAPHY 40 834-840, 2007

SMRČOK, I. – SLÁDKOVIČOVÁ, M. – LANGER, V. – WILSON, C. C. – KOŇŠ, M. On hydrogen bonding in 1,6-anhydro-beta-D-glucopyranose (levoglucosan): X-ray and neutron diffraction and DFT study. In: *Acta Crystallographica B*. Vol. 62 (2006), p. 912-918
Citácie z WOK: 1

875. Brisdon AK; Flower KR; Pritchard RG
INORGANIC CHEMISTRY 46 (17) 7189-7192, 2007

SOSA, C. – NOGA, J. – PURVIS, G. D. – BARTLETT, R. J. An application of the full CCSDT coupled-cluster method to potential energy curves: The $CH_4 \rightarrow CH_3 + H$ dissociation. In: *Chemical Physics Letters*. Vol. 153, no. 2-3 (1989), p. 139-146
Citácie z WOK: 1

876. Azenkeng A; Khait YG; Hoffmann MR
MOLECULAR PHYSICS 105 (19-22) 2819-2827, 2007

SOSA, C. – NOGA, J. – BARTLETT, R. J. A study of the Be_2 potential curve using the full (CCSDT) coupled-cluster method: The importance of T_4 clusters. In: *Journal of Chemical Physics*. Vol. 88, no. 9 (1988), p. 5974-5976
Citácie z WOK: 3

877. Fang T; Li SH
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (20) Art. No. 204108, 2007
878. Chaudhuri RK; Freed KF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (11) Art. No. 114103, 2007
879. Paldus J; Li XZ
COLLECTION OF CZECHOSLOVAK CHEMICAL COMMUNICATIONS 72 (1) 100-120, 2007

STRAKA,M. – HROBÁRIK,P. - KAUPP M. Understanding structure and bonding in early actinide $6d^05f^0MX_6^q$ (M = Th–Np; X = H, F) complexes in comparison with their transition metal $5d^0$ analogues. In: *Journal of the American Chemical Society*. Vol. 127, no. 8 (2005), p. 2591-2599

Citácie z WOK: 4

880. Petit L; Daul C; Adamo C; Maldivi P
NEW JOURNAL OF CHEMISTRY 31 (10) 1738-1745, 2007
881. Raab J; Lindh RH; Wang X; Andrews L; Gagliardi L
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (28) 6383-6387, 2007
882. Cruz CA; Emslie DJH; Harrington LE; Britten JF; Robertson CM
ORGANOMETALLICS 26 (3) 692-701, 2007
883. ; Pykko P
ANGEWANDTE CHEMIE 46 (9) 1427-1430, 2007

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 WOK: 3

884. Zhang GX; Kim JW; Dong HL; Sommer AJ
AMERICAN MINERALOGIST 92 (8-9) 1401-1410, 2007
885. Zhang GX; Dong HL; Kim JW; Eberl DD
AMERICAN MINERALOGIST 92 (8-9) 1411-1419, 2007
886. Fiedler S; Vepraskas MJ; Richardson JL
ADVANCES IN AGRONOMY 94 1-54, 2007

ŠAJGALÍK,P. – PÁNEK,Z. – UHRÍK,M. The surface diffusion coefficients of MgO and Al₂O₃. In: *Journal of Materials Science*. Vol. 22, no. 12 (1987), p. 4460-4464

Citácie z WOK: 1

887. Fan HJ; Knez M; Scholz R; Hesse D; Nielsch K; Zacharias M; Gosele U
NANO LETTERS 7 (4) 993-997, 2007

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 WOK: 3

888. Krstic Z; Yu ZB; Krstic VD
JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE 42 (14) 5431-5436, 2007
889. Foulk JW; Cannon RM; Johnson GC; Klein PA; Ritchie RO
JOURNAL OF THE MECHANICS AND PHYSICS OF SOLIDS 55 (4) 719-743, 2007
890. Xiang QJ; Liu Y; Sheng XX; Dan XH
DENTAL MATERIALS 23 (2) 251-258, 2007

Citácie zo SCO: 1

891. Li HB;Luo JT; Zhang Q; Zhang KF
KEY ENGINEERING MATERIALS 336-338 1069-1071, 2007

ŠAJGALÍK,P. – LENČEŠ,Z. – DUSZA,J. Composites with enhanced room temperature properties. In: *Journal of Materials Science*. Vol. 31, no. 18 (1996), p. 4837-4842

Citácie z WOK: 1

892. Guicciardi S; Nagliati M; Melandri C; Pezzotti G; Sciti D
JOURNAL OF THE EUROPEAN CERAMIC SOCIETY 27 (1) 351-356, 2007

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 WOK: 1

893. Zou B; Huang CZ; Chen M; Gu ML; Liu HL
ACTA MATERIALIA 55 (12) 4193-4202, 2007

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 z WOK: 3

894. Dabhade VV; Mohan TRR; Ramakrishnan P
POWDER METALLURGY 50 (2) 157-164, 2007
895. Zou B; Huang CZ; Chen M; Gu ML; Liu HL
ACTA MATERIALIA 55 (12) 4193-4202, 2007
896. Dabhade VV; Mohan TRR; Ramakrishnan P
POWDER METALLURGY 50 (1) 33-39, 2007

ŠAJGALÍK,P. – HNATKO,M. – LENČEŠ,Z. Silicon nitride/carbide nano/micro composites for room as well as high temperature applications. In: *Key Engineering Materials*. Vol. 175-176 (2000), p. 289-299

Citácie z WOK: 1

897. Lee J; Bradshaw RC; Hyers RW; Rogers JR; Rathz TJ; Wall JJ; Choo H; Liaw PK
MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING A 463 (1-2) 185-196, 2007

ŠAJGALÍK,P. – LENČEŠ,Z. – DUSZA,J. Layered composites with self-diagnostic ability. In: *Composites B*. Vol. 37, no. 6 (2006), p. 515-523

Citácie z WOK: 1

898. Ambrozic M; Kosmac T
JOURNAL OF THE AMERICAN CERAMIC SOCIETY 90 (5) 1545-1550, 2007

ŠIMKO,F. – RAKHMATULLIN,A. – BOČA,M. – DANĚK,V. – BESSADA,C. A high-temperature multinuclear NMR study of $\text{Na}_3\text{AlF}_6\text{-FeO}$ and $\text{Na}_3\text{AlF}_6\text{-Fe}_2\text{O}_3$ melts. In: *European Journal of Inorganic Chemistry*. no. 22 (2006), p. 4528-4532

Citácie z WOK: 1

899. Nerad I; Miksikova E
CENTRAL EUROPEAN JOURNAL OF CHEMISTRY 5 (2) 508-515, 2007

ŠTUBŇA,I. – LIŠKA,M. Formula for correction coefficients for calculating Young's modulus from resonant frequencies. In: *Acustica – Acta Acustica*. Vol.87, no. 1 (2001), p. 149-150

Citácie z WOK: 1

900. Inta R; Lai JCS; Fu EW; Evans TA
JOURNAL OF THE ROYAL SOCIETY INTERFACE 4 (15) 735-744, 2007

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 WOK: 1

901. Poter B; Gottschalk M; Heinrich W
AMERICAN MINERALOGIST 92 (1) 151-165, 2007

ŠUCHA,V. – ELSASS,F. – EBERL,DD. – KUČTA,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 WOK: 4

902. Bhardwaj D; Sharma P; Tomar R
INDIAN JOURNAL OF CHEMISTRY A 46 (11) 1796-1800, 2007
903. Lehmann J; Kinyangi J; Solomon D
BIOGEOCHEMISTRY 85 (1) 45-57, 2007
904. Sindern S; Stanjek H; Hilgers C; Etoundi Y
CLAYS AND CLAY MINERALS 55 (2) 200-212, 2007

ŠUCHA,V. – ŠRODOŇ,J. – CLAUSER,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 WOK: 2

905. Skiba M
CLAYS AND CLAY MINERALS 55 (6) 618-634, 2007
906. Kaepczak A; Derkowski A
CATENA 71 (2) 292-297, 2007

ŠVANČÁREK,P. – GALUSEK,D. – CALVERT,C. – LOUGHRAN,F. – BROWN,A. – BRYDSON,R. – RILEY,F. A comparison of the microstructure and mechanical properties of two liquid phase sintered aluminas containing different molar ratios of calcia-silica sintering additives. In: *Journal of the European Ceramic Society*. Vol. 24, no. 12 (2004), p. 3453-3463

Citácie z WOK: 3

907. Dillon SJ; Tang M; Carter WC; Harmer MP
ACTA MATERIALIA 55 (18) 6208-6218, 2007
908. Dillon SJ; Harmer MP
JOURNAL OF THE AMERICAN CERAMIC SOCIETY 90 (7) 2291-2292, 2007
909. Luo J
CRITICAL REVIEWS IN SOLID STATE AND MATERIALS SCIENCES 32 (1-2) 67-109, 2007

ŠVANČÁREK,P. – GALUSEK,D. – LOUGHRAN,F. – BROWN,A. – BRYDSON,R. – ATKINSON,A. – RILEY,F. Microstructure-stress relationships in liquid-phase sintered alumina modified by the addition of 5 wt. % of calcia-silica additives. In: *Acta Materialia*. Vol. 54, no. 18 (2006), p. 4853-4863

Citácie z WOK: 2

910. Dillon SJ; Tang M; Carter WC; Harmer MP
ACTA MATERIALIA 55 (18) 6208-6218, 2007
911. Luo J
CRITICAL REVIEWS IN SOLID STATE AND MATERIALS SCIENCES 32 (1-2) 67-109, 2007

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 WOK: 4

912. Finevich VP; Allert NA; Karpova TR; Duplyakin VK
RUSSIAN JOURNAL OF GENERAL CHEMISTRY 77 (12) 2265-2271, 2007
913. Yildiz A; Kuscü M
CLAY MINERALS 42 (3) 399-414, 2007
914. Wallis PJ; Gates WP; Patti AF; Scott JL; Teoh E
GREEN CHEMISTRY 9 (9) 980-986, 2007
915. Rodríguez YMV; Beltrán HI; Vázquez-Labastida E; Linares-López C; Salmon M
JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH 22 (3) 788-800, 2007

Citácie zo SCO: 1

916. Kalinowski BE; Schweda P
GEODERMA 142 (1-2) 197-209, 2007

TRUCKS, GW. – SALTER, EA. – NOGA, J. – BARTLETT, RJ. Analytic MBPT response properties. In: *Chemical Physics Letters*. Vol. 150, no. 1-2 (1988), p. 37-44

Citácie z WOK: 2

917. Kossmann S; Kirchner B; Neese F
MOLECULAR PHYSICS 105 (15-16) 2049-2071, 2007
918. Tisko EL; Hunt KLC
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (20) Art. No. 204105, 2007

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 WOK: 1

920. Bendazzoli GL
THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 118 (1) 135-142, 2007

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 WOK: 2

921. Rezabal E; Mercero JM; Lopez X; Ugalde JM
JOURNAL OF INORGANIC BIOCHEMISTRY 101 (9) 1192-1200, 2007
922. Rezabal E; Mercero JM; Lopez X; Ugalde JM
CHEMPHYSICHEM 8 (14) 2119-2124, 2007

TUNEGA, D. – HABERHAUER, G. – GERZABEK, M. H. – 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 WOK: 3

923. Schuttlefield JD; Cox D; Grassian VH
JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH 112 (21) Art. No. 21303, 2007
924. Churakov SV
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 71 (5) 1130-1144, 2007
925. Bougeard D; Smirnov KS
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (2) 226-245, 2007

TUNEGA, D. – BENCO, L. – HABERHAUER, G. – GERZABEK, M. H. – 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 WOK: 4

926. Sellers H
RUSSIAN JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 1 (4) 377-393, 2007
927. Schuttlefield JD; Cox D; Grassian VH
JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH 112 (21) Art. No. 21303, 2007
928. Balan E; Lazzeri M; Mauri F; Calas G
EUROPEAN JOURNAL OF SOIL SCIENCE 58 (4) 870-881, 2007
929. Bougeard D; Smirnov KS
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (2) 226-245, 2007

TUNEGA, D. – GERZABEK, M. H. – 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 WOK: 7

930. Hu XL; Michaelides A
SURFACE SCIENCE 601 (23) 5378-5381, 2007
931. Schuttlefield JD; Cox D; Grassian VH
JOURNAL OF GEOPHYSICAL RESEARCH 112 (21) Art. No. 21303, 2007
932. Larentzos JP; Greathouse JA; Cygan RT
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (34) 12752-12759, 2007
933. Ou RQ; Zhang JG; Deng YL; Ragauskas AJ
JOURNAL OF APPLIED POLYMER SCIENCE 105 (4) 1987-1992, 2007

934. Angelini MM; Garrard RJ; Rosen SJ; Hinrichs RZ
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (17) 3326-3335, 2007
935. Churakov SV
GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA 71 (5) 1130-1144, 2007
936. Bougeard D; Smirnov KS
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (2) 226-245, 2007

TURI NAGY,L. – MICOV,M. – BENCO,L. – LIŠKA,M. – MACH,P. – TUNEGA,D. Electronic structure of alumina surface. In *Internatioanl Journal of Quantum Chemistry*. Vol.

70, no. 2 (1998), p. 341-350

Citácie z WOK: 1

937. Yang R; Rendell AP
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 111 (8) 3384-3392, 2007

URBAN,M. – NOGA,J. – KELLÖ,V. Fourth-order MB-RSPT calculations of the spectroscopic constants and potential energy curve of F2. In: *Theoretica Chimica Acta* Vol. 62, no. 6 (1983), p. 549-562

Citácie zo SCO: 1

938. Bytautas L; Matsunaga N; Nagata T; Gordon MS; Ruedenberg K
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (20) Art. No. 204313, 2007

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 WOK: 16

939. Sur C; Chaudhuri RK
JOURNAL OF PHYSICS B 40 (22) 4307-4315, 2007
940. Dixit G; Sahoo BK; Chaudhuri RK; Majumder S
PHYSICAL REVIEW A 76 (4) Art. No. 042505, 2007
941. Patkowski K; Podeszwa R; Szalewicz K
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (49) 12822-12838, 2007
942. Fang T; Li SH
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (20) Art. No. 204108, 2007
943. Kowalski K; Hammond JR; de Jong WA
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127 (16) Art. No. 164105, 2007
944. Wloch M; Gour JR; Piecuch P
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (44) 11359-11382, 2007
945. Uhlar M; Cernusak I
COLLECTION OF CZECHOSLOVAK CHEMICAL COMMUNICATIONS 72 (8) 1122-1138, 2007
946. Bunker PR; Kraemer WP; Yurchenko SN; Thiel W; Neese CF; Gottfried JL; Jensen P
MOLECULAR PHYSICS 105 (10) 1369-1376, 2007
947. Patkowski K; Cencek W; Jeziorska M; Jeziorski B; Szalewicz K
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (31) 7611-7623, 2007
948. Olson RM; Bentz JL; Kendall RA; Schmidt MW; Gordon MS
JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 3 (4) 1312-1328, 2007
949. Sur C; Chaudhuri RK
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 442 (1-3) 150-156, 2007
950. Cernusak I; Dallos M; Lischka H; Muller T; Uhlar M
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (21) Art. No. 214311, 2007 Ringer AL; Magers DH
JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY 72 (7) 2533-2537, 2007
951. Chaudhuri RK; Freed KF
JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 126 (11) Art. No. 114103, 2007
952. Paldus J; Li XZ
COLLECTION OF CZECHOSLOVAK CHEMICAL COMMUNICATIONS 72 (1) 100-120, 2007
953. Cernusak I; Cukovicova M; Asiama AA; Gregurick SK; Hoover PA; Tsay SC; Liebman JF
COLLECTION OF CZECHOSLOVAK CHEMICAL COMMUNICATIONS 72 (2) 269-277, 2007

Citácie zo SCO: 2

954. Piecuch P; Pimienta ISO; Fan PD; Kowalski K
ACS SYMPOSIUM SERIES 958 37-73, 2007
955. Kotke M; Schreiner PR
SYNTHESIS 5 779-790, 2007 <http://www.scopus.com/scopus/search/submit/citedby.url?eid=2-s2.0-33947582072&src=s&origin=resultslist>

URBAN,M. – ČERNUŠÁK,I. – KELLÖ,V. – NOGA,J. Electron correlation in molecules. In: *Computational Methods in Chemistry*. (1987), p. 117-250

Citácie z WOK: 4

956. Maroulis G
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 442 (4-6) 265-269, 2007
957. Dalgic SS; Canan C; Caliskan M
JOURNAL OF OPTOELECTRONICS AND ADVANCED MATERIALS 9 (6) 1719-1722, 2007

958. Bartlett RJ; Musial M
REVIEWS OF MODERN PHYSICS 79 (1) 291-352, 2007
959. Patkowski K; Cencek W; Jeziorska M; Jeziorski B; Szalewicz K
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 111 (31) 7611-7623, 2007

URBAN,M. – KELLÖ,V. – ČERNUŠÁK,I. – NOGA,J. – DIERCKSEN,GHF. Can the coupled cluster method improve many-body perturbation theory reaction energies significantly? In: *Chemical Physics Letters*. Vol. 135, no. 4-5 (1987), p. 346-351

Citácie z WOK: 1

960. Harding LB; Klippenstein SJ; Jasper AW
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (31) 4055-4070, 2007

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 WOK: 4

961. David J; Restrepo A
PHYSICAL REVIEW A 76 (5) Art. No. 052511, 2007
962. Jackowski K; Kubiszewski M; Wilczek M
CHEMICAL PHYSICS LETTERS 440 (4-6) 176-179, 2007
963. Feindel KW; Ooms KJ; Wasylishen RE
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (10) 1226-1238, 2007
964. Molchanov S; Gryff-Keller A
POLISH JOURNAL OF CHEMISTRY 81 (1) 137-140, 2007

VALERIO,G. – GOURSOT,A. – VETRIVEL,R. – MALKINA,OL. – MALKIN,VG. – SALAHUB,DR. Calculation of ^{29}Si and ^{27}Al MAS NMR chemical shifts in zeolite- β using density functional theory: Correlation with lattice structure. In: *Journal of the American Chemical Society*. Vol. 120, no. 44 (1998), p. 11426-11431

Citácie zo SCO: 2

965. Truflandier L; Paris M; Boucher F
PHYSICAL REVIEW B 76 (3) Art. No. 035102, 2007
966. Wiench JW; Avadhut YS; Maity N; Bhaduri S; Lahiri GK; Pruski M; Ganapathy S
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B 111 (15) 3877-3885, 2007

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 WOK: 2

967. Maschio L; Usyvat D; Manby FR; Casassa S; Pisani C; Schutz M
PHYSICAL REVIEW B 76 (7) Art. No. 075101, 2007
968. Usyvat D; Maschio L; Manby FR; Casassa S; Schutz M; Pisani C
PHYSICAL REVIEW B 76 (7) Art. No. 075102, 2007

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 WOK: 2

969. Maschio L; Usyvat D; Manby FR; Casassa S; Pisani C; Schutz M
PHYSICAL REVIEW B 76 (7) Art. No. 075101, 2007
970. Usyvat D; Maschio L; Manby FR; Casassa S; Schutz M; Pisani C
PHYSICAL REVIEW B 76 (7) Art. No. 075102, 2007

VARSHNEY,KG. – TAYAL,N. – GUPTA,P. – AGRAWAL,A. – DRÁBIK,M. Synthesis, ion-exchange and physico-chemical studies on a polystyrene cerium(IV) phosphate hybrid fibrous ion exchanger. In: *Indian Journal of Chemistry A*. Vol. 43, no. 12 (2004), p. 2586-2589

Citácie z WOK: 1

971. Pissetti FL; Francisco MSP; Landers R; Gushikem Y
JOURNAL OF THE BRAZILIAN CHEMICAL SOCIETY 18 (5) 976-983, 2007

WEBB,JA. – LIU,PH. – MALKINA,OL. – GOROFF,NS. Tetraiodobutatriene: A new cumulenenic carbon iodide. In: *Angewandte Chemie*. Vol. 41, no. 16 (2002), p.3011-3014

Citácie z WOK: 2

972. Maraval V; Chauvin R
NEW JOURNAL OF CHEMISTRY 31 (11) 1853-1873, 2007
973. Liu GZ; Song ZY; Wang C; Xi ZF
CHINESE JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY 27 (7) 837-846, 2007

Citácie zo SciFinder: 1

974. Ogasawara M
SCIENCE OF SYNTHESIS 44 9-7, 2007

WEISS,Z. – RIEDER,M. – SMRČOK,L. – PETŘÍČEK,V. – BAILEY,SW. Refinement of crystal structure of two "protolithionites,, In: *European Journal of Mineralogy*. Vol. 5, no. 3 (1993), p. 493-502

Citácie z WOK: 1

975. Breiter K; Skoda R; Uher P
MINERALOGY AND PETROLOGY 91 (3-4) 225-248, 2007

YAU,BS. – HUANG,JL. – LII,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 WOK: 2

976. Miyamura A; Yamaguchi M; Hattori K; Sato Y; Nakamura S; Shigesato Y
JOURNAL OF VACUUM SCIENCE AND TECHNOLOGY A 25 (4) 1103-1107, 2007
977. Chang YY; Wang DY
SURFACE AND COATING TECHNOLOGY 201 (15) 6699-6701, 2007

Citácie zo SCO: 1

978. Yang SM; Chang YY; Wang; DY; Lin DY; Wu W
JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS 440 (1-2) 375-379, 2007

YAU,BS. – HUANG,JL. – LU,HH. – ŠAJGALÍK,P. Investigation of nanocrystal-(Ti, Al)N_x/amorphous-SiNi nanolaminate films. In: *Surface and Coatings Technology*. Vol. 194, no. 1 (2005), p. 119-127

Citácie zo SCO: 1

979. Gaitan GB; Caicedo JC; Balogh AG; Gottschalk S
PHYSICA STATUS SOLIDI C 4 (11) 4260-4266, 2007

YAZYEV,OV. – HELM,L. – MALKIN,VG. – MALKINA,OL. Quantum chemical investigation of hyperfine coupling constants on first coordination sphere water molecule of gadolinium(III) aqua complexes. In: *Journal of Physical Chemistry A*. Vol. 109, no. 48 (2005), p. 10997-11005

Citácie z WOK: 1

980. Loncke F; De Cooman H; Khaidukov NM; Vrielinck H; Goovaerts E; Matthys P; Callens F
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 9 (39) 5320-5329, 2007

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 WOK: 2

981. Kamperman M; Du P; Scarlat RO; Herz E; Werner-Zwanziger U; Graf R; Zwanziger JW; Spiess HW; Wiesner U
MACROMOLECULAR CHEMISTRY AND PHYSICS 208 (19-20) 2096-2108, 2007
982. Pham TA; Kim P; Kwak M; Suh KY; Kim DP
CHEMICAL COMMUNICATIONS 39 4021-4023, 2007

ZIMERMANN,P. – GÁLIKOVÁ,E. – DRÁBIK,M. Porovnanie vlastností nízkoenergetických cementových slinkov spracovaných metódou „MDF“. In: *Chemické Listy*. Vol. 91 (1997), p. 790-791

Iné citácie: 1

983. Krajci L
PROCEEDINGS OF MATBUD 260-266, 2007

Príloha č. 4

Údaje o pedagogickej činnosti pracovníka

Semestrálne prednášky:

doc. Ing. Dušan Galusek, PhD.

Názov semestr. predmetu: Technická chémia

Počet hodín za týždeň: 2

Počet hodín za semester: 26

Názov katedry a vysokej školy: Fakulta zdravotníctva TU, Katedra laboratórnych vyšetrovacích metód

Ing. Mária Chromčíková, PhD.

Názov semestr. predmetu: Fyzikálna chémia skla II

Počet hodín za týždeň: 0

Počet hodín za semester: 13

Názov katedry a vysokej školy: Fakulta priemyselných technológií TnUAD v Púchove, Katedra anorganických materiálov a environmentálneho inžinierstva

prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc.

Názov semestr. predmetu: Anorganické materiály a technológia ich výroby

Počet hodín za týždeň: 0

Počet hodín za semester: 16

Názov katedry a vysokej školy: Fakulta priemyselných technológií TnUAD v Púchove, Katedra

Semestrálne cvičenia:

Ing. Františka Frajkorová

Názov semestr. predmetu: Laboratórne cvičenia z anorganickej chémie II,

Počet hodín za týždeň: 0

Počet hodín za semester: 70

Názov katedry a vysokej školy: Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov

Ing. Radovan Karell

Názov semestr. predmetu: Základy technickej chémie

Počet hodín za týždeň: 0

Počet hodín za semester: 80

Názov katedry a vysokej školy: Fakulta priemyselných technológií TnUAD v Púchove, Katedra chémie a technológie anorganických materiálov

Preddiplomová prax:

Ing. Eva Scholtzová, CSc.

Názov semestr. predmetu: Modelové DFT výpočty

Počet hodín za týždeň: 0

Počet hodín za semester: 80

Názov katedry a vysokej školy: Univerzita Komenského v Bratislave, Katedra anorganickej chémie

Individuálne prednášky:

doc. Ing. Dušan Galusek, PhD.

Názov semestr. predmetu: Technológia špeciálnych anorganických materiálov

Počet hodín za týždeň: 0

Počet hodín za semester: 2

Názov katedry a vysokej školy: Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov

Ing. Zoltán Lenčes, PhD.

Názov semestr. predmetu: Konštrukčná keramika, príprava, vlastnosti, použitie

Počet hodín za týždeň: 0

Počet hodín za semester: 2

Názov katedry a vysokej školy: Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov

Ing. Zoltán Lenčes, PhD.

Názov semestr. predmetu: Konštrukčná keramika, príprava, vlastnosti, použitie

Počet hodín za týždeň: 0

Počet hodín za semester: 2

Názov katedry a vysokej školy: Prírodovedecká fakulta UK, Katedra anorganickej chemie

prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc.

Názov semestr. predmetu: Konštrukčná keramika, príprava, vlastnosti, použitie

Počet hodín za týždeň: 0

Počet hodín za semester: 2

Názov katedry a vysokej školy: Fakulta chemickej a potravinárskej technológie STU, Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov

prof. RNDr. Pavol Šajgalík, DrSc.

Názov semestr. predmetu: Konštrukčná keramika, príprava, vlastnosti, použitie

Počet hodín za týždeň: 0

Počet hodín za semester: 2

Názov katedry a vysokej školy: Prírodovedecká fakulta UK, Katedra anorganickej chemie

Príloha č. 5**Údaje o medzinárodnej vedeckej spolupráci****(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					Dušan Galusek	4
					Dušan Galusek	3
					Mária Chromčíková	2
Bielorusko					Svetozár Balkovic	2
Bulharsko	Juraj Bujdák	5				
	Alexander Čeklovský	5				
Česko					Svetozár Balkovic	2
					Svetozár Balkovic	2
					Miroslav Boča	1
					Juraj Bujdák	2
					Dušan Galusek	2
					Peter Hrobárik	4
					Mária Chromčíková	5
					Mária Chromčíková	2
					Stanislav Kedžuch	12
					Michal Korenko	1
					Marek Liška	5
					Marek Liška	4
					Marek Liška	6
					Marek Liška	1
					Marek Liška	6
					Marek Liška	6
					Marek Liška	1
					Marek Liška	2
					Jana Madejová	1
					Ľubomír Smrčok	1

					Pavol Šajgalík	1
					Pavol Šajgalík	1
					Pavol Šajgalík	1
					Pavol Šajgalík	1
Francúzsko					Marek Liška	4
					Ľubomír Smrčok	4
					František Šimko	10
					František Šimko	6
Holandsko					Peter Hrobárik	22
Chorvátsko					Peter Komadel	4
India	Jozef Noga	8				
Japonsko	Juraj Bujdák	28			Juraj Bujdák	36
	Adriana Czímerová	28				
	Alexander Čeklovský	28				
Maďarsko					Zoltán Lenčes	1
					Pavol Šajgalík	1
Nemecko					Ľubomír Hric	47
					Peter Hrobárik	19
					Peter Hrobárik	5
					Stanislav Komorovský	17
					Stanislav Komorovský	21
					Marián Kucharík	7
					Oľga Malkin	13
					Oľga Malkin	14
					Vladimír Malkin	14
					Vladimír Malkin	13
					Viera Petrušková	110
					Michal Repiský	17
					Michal Repiský	21

					Ľubomír Smrčok	7
Poľsko	Jana Madejová	11			Svetozár Balkovic	4
	Helena Pálková	12			Svetozár Balkovic	2
	Helena Pálková	11			Milan Drábik	2
					Jana Madejová	13
					Oľga Malkin	11
					Vladimír Malkin	21
					Vladimír Malkin	15
					Vladimír Malkin	10
					Helena Pálková	10
Rakúsko					Juraj Bujdák	18
Rusko					Dušan Galusek	3
Španielsko					Juraj Bujdák	5
					Zoltán Lenčేశ	2
					Pavol Šajgalík	2
Švédsko					Eva Scholtzová	11
					Ľubomír Smrčok	11
Taliansko					Dušan Galusek	2
					Zoltán Lenčేశ	1
					Tomáš Plachký	4
					Pavol Šajgalík	1
					Pavol Šajgalík	4
USA					Ľuboš Jankovič	31
					Jozef Noga	19
Počet vyslaní spolu	9	136			74	696

(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
Bulharsko	Ivo Grabchev	7				
Česko	Bohumil David	5				
	Jiří Hybler	7				
	Jitka Pedlíková	8				
	Petr Kostka	8				
	Olga Procházková	6				
	Jiří Zavadil	6				
Francúzsko			Aydar Rakhmatullin	14		
Japonsko	Nobuo Iyi	6				
	Ryo Sasai	6				
	Jun Kawamata	6				
	Shinsuke Takagi	6				
Poľsko	Malgorzata Zimowska	6				
Rakúsko					Harald Harmuth	8
					Sabine Pichlbauer	44
Španielsko	José Luis Pérez Rodríguez	8				
Počet prijatí spolu	13	85	1	14	2	52

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

Krajina	Názov konferencie	Meno pracovníka	Počet dní
Česká republika	XIII Odborný seminár: Anorganické nekovové materiály	Karell	4
	Seminár firiem: MALVERN a QUANTACHROME	Švančárek	2
		Micháliková	2
		Galusek	2
		Chovanec	2
		Ghillányová	2
	Kolloquium für Humboldt-alumni	Šajgalík	2
		Lenčéš	2
		Galusek	3
		Boča	3
		Malkin V.	3
		Malkin O.	3
	XVII. Regionální konference o práškové difrakci	Smrčok	3
	60. Zjazd českých a slovenských chemikov	Boča	4
		Kucharík	4
		Kedžuch	4
		Drábik	4
		Janek	4
	Kalorimetrický seminár	Chromčíková	4
	XII. Konferencia: "Ekologie a nové stvební hmoty a výrobky,,	Balkovic	3
	CESTC 2008: "7 th Central European symposium on theoretical chemistry,,	Noga	4
		Kedžuch	4
		Varga	4
	Konference mladých chemiků, biochemiků a biologů	Drábik	3
	Aplikace termické analýzy v oblasti polymerů a farmaceutik a využití nanokalorimetrie v life science	Chromčíková	1
	1 st Nanomaterials and nanotechnology meeting	Bujdák	4
		Czímerová	4
		Čeklovský	4
	Sút'áž mladých vedeckých pracovníkov do 35 rokov	Kucharík	2
		Hnatko	2
		Šimko	2
		Šajgalík	2
	Česká a Slovenská sklárska konferencia	Chromčíková	3
		Karell	3
	VII. Odborná konferencia: „MALTOVINY”	Drábik	1
		Balkovic	1
Čína	9 th International symposium on ceramic materials and components for energy and environmental applications	Šajgalík	6
		Hnatko	5
	1 st International symposium on advanced synthesis and processing technology for materials	Šajgalík	5

India	International symposium on tomic, molecular and optical sciences and high performance computing	Noga	5
Japonsko	Workshop on layered materials	Bujdák	4
	Joint symposium on molten salts 2008	Korenko	9
Kórejská republika	ISASC 2008: "International symposium on new frontiers of advanced Si-based ceramics and composites,,	Šajgalík	7
		Lenčేశ	6
Mad'arsko	9 th Annual ede kapuy memorial lecture	Noga	1
		Kedžuch	1
Nemecko	Workshop: "Advanceclay Erasmus IP,,	Madejová	4
	4 th International workshop on spinel nitrides related materials	Šajgalík	6
		Lenčేశ	6
	FUNMIG: Final workshop	Malkin V.	4
Pol'sko	MID-European clay conference	Malkin O.	4
		Hrobárik	5
		Smrčok	4
		Scholtzová	4
		Andrejkovičová	7
		Hrachová	6
		Jankovič	7
		Komadel	7
		Madejová	7
	EPDIC-11: "European powder diffraction conference,,	Pálková	7
		Pentrák	7
		Smrčok	4
Rakúsko	"Current trends in theoretical chemistry,,	Malkin V.	5
		Šajgalík	4
		Polish ceramics 2008	
		Workshop on modern methods in quantum chemistry	
		Malkin V.	6
		Malkin O.	6
Španielsko	19 th IUPAC: Conference on physical organic chemistry	Repiský	6
		Komorovský	6
		Hrobárik	5
Taliansko	ICC2: 2 nd International congress on ceramics	Hrobárik	9
		Šajgalík	7
		Lenčేశ	7
		Galusek	6
		Drábik	4
		Lojanová	6
		Hric	6
		Plachký	6
		Micháľková	6
	Kermat 2008 – "International symposium on advanced ceramic materials,,	Šajgalík	2
USA	"Gordon research conference on composites,,		
		Lenčేశ	8
	48 th Sanibel symposium	Noga	7
	SINTERING 2008	Micháľková	8
		Galusek	8

Veľká Británia	AluSiV	Komadel	5
		Madejová	5
	Workshop materials euroroads	Šajgalík	2
		Lenčేశ	2