

# Stanovisko

pracovnej skupiny AK k zmenám v kritériách,  
na ktorých základe bola posúdená spôsobilosť uskutočňovať študijný program  
podľa § 83 ods. 12 zákona

Číslo žiadosti:	157/2017-AK
Žiadajúca vysoká škola (aj pracovisko, kde sa ŠP bude uskutočňovať):	Slovenská technická univerzita v Bratislave Fakulta chemickej a potravinárskej technológie
Predseda pracovnej skupiny:	Prof. RNDr. Miroslav Urban, DrSc.
Pracovná skupina (názov):	12: Chémia, chemická technológia a biotechnológia

Názov ŠP	Číslo a názov ŠO (v súlade so SŠO)	Stupeň	Forma	Štandardná dĺžka štúdia	Jazyk uskutočňovania	Akademický titul
teoretická a počítačová chémia	4.1.21. teoretická a počítačová chémia	3.	denná	4	1.slovenský a anglický 2. anglický	PhD.
teoretická a počítačová chémia	4.1.21. teoretická a počítačová chémia	3.	externá	5	1.slovenský a anglický 2. anglický	PhD.

**Zmena sa týka kritéria: KSP-A6** (Vyberie sa príslušné kritérium a zhodnotí sa jeho zmena, ako napr. kritérium KSP-A6, ostatné nezmenené sa neuvádzajú)

napr. Ankeut 1831-18, 1

## Patenty 2

### IV.2 Najvýznamnejšie publikované vedecké práce, verejne realizované alebo prezentované umelecké diela a výkony.

1. *The molecular structure of 3-methylene-1,4-pentadiene studied by gas-phase electron diffraction and by vibrational, NMR and ultraviolet spectroscopy*

Almenningen A., Gatial A., Grace D.S.B., Hopf H., Klæboe P., Leirich F., Nielsen C.J., Powell D.L., Traetteberg M. *Acta Chem. Scand.* A42, (1988) 634

2. *Vibrational spectra including matrix isolation and conformations of 1,1,2-trichloro-2,3,3-trifluorocyclobutane*, Gatial A., Klæboe P., Nielsen C.J., Sablinskas V., Powell D.L., Kondow A.J., Inca-vo J.A.J. *J. Mol. Struct.* 295, (1993) 73

3. *The Vibrational and NMR Spectra, Conformations and ab initio Calculation of aminomethylene-propanedinitrile and its N-methyl derivatives*, Gatial A., Sklenák Š., Milata V., Klæboe P., Biskupič S., Scheller D., Jurašková, J. *Structural Chemistry* 7, (1996) 17.

4. *Nucleophilic Vinylic Substitution ( $S_NV$ ) of Activated Alkoxyethylene Derivatives with 6-Aminoquinoxaline*, Saloň J., Milata V., Gatial A., Prónayová N., Leško J., Černuchová P., Rappoport Z., Thanh G. V., Loupy A., *Eur. J. Org. Chem.*, (2005) 4870.

5. *The isomers and conformers of some push-pull enamines studied by vibrational and NMR spectroscopy and by ab initio calculations*, Pigošová J., Gatial A., Milata V., Černuchová P., Prónayová N., Liptaj T., Matějka P. *J. Mol. Struct.*, 744-747, (2005) 315

### IV.3 Najvýznamnejšie publikované vedecké práce verejne realizované alebo prezentované umelecké diela alebo výkony za posledných šesť rokov.

1. *Conformational studies of 3-[(2,2-dimethylhydrazinyl)methylene]-pentane-2,4-dione using vibrational and NMR spectra, X-ray analysis and ab initio calculations*, Gatial A., Herich P., Tarabová D., Milata V., Prónayová N. *J. Mol. Struct.*, xxx (2017) 1-10, (accepted 28.12.2016)

2. *Isomerizational and conformational study of 3-fluorophenylamino-2-acetyl propenenitrile (FPAAPN)* Gatial A., Dorotiková S., Plevová K., Milata V., Prónayová N., Matějka P. *J. Mol. Struct.*, 1090, (2015) 112-120

3. *Raman and infrared spectra, conformations and ab initio calculations of 3-methoxymethylene-2,4-pentanedione*, Gatial A., Milata M., Prónayová N., Herzog K., Salzer R. *Acta Chimica Slovaca* 8, (2015) 203-216

4. *Structure and vibrational spectra of copper(II) 2-pyridylmethanolate tetrahydrate* Gatial A., Mudra M., Moncol J., Dankova M., Lonneck P., Breza M. *Chemical Papers* 68, (2014) 940-94.

5. *Isomerizational and conformational study of methyl-2-cyano-3-methoxyacrylate and methyl-2-cyano-3-aminoacrylate and its N-methyl derivatives*, Gatial A., Juhásová H., Gróf M., Kožíšek J., Milata V., Prónayová N., Matějka P., *J. Mol. Struct.*, 993, (2011) 232-242

### IV.4 Účast' na riešení (vedení) najvýznamnejších vedeckých projektov alebo umeleckých projektov za posledných šesť rokov.

*Poznaním detailov elektrónovej štruktúry k interpretácii a predikcii fyzikálno-chemických vlastností látok*, VEGA-1/0327/12

*Elektrónová štruktúra - prostriedok k pochopeniu chemických a fyzikálnochemických vlastností*, VEGA - 1/0679/11 (zástupca vedúceho projektu)

*Polyaplikovateľné heterocykly - návrh štruktúry, syntéza a vlastnosti*, APVV-0038-11

*Poznanie elektrónovej štruktúry ako cesta k predikcii potenciálnych liečiv*, APVV-0202-10

*Vývoj a aplikácia metód na štúdium systémov s neobvyklou elektrónovou štruktúrou*, VEGA-1/0127/09

### Najvýznamnejšie výsledky nového spolugaranta, doc. Lukáša Bučinského

Počet výstupov 27, z toho evidovaných vo Web of Science celkovo / za posledných 6 rokov 27/19

Počet citácií Web of Science 76/71

Počet projektov získaných na financovanie výskumu 1/1

Počet pozvaných prednášok na medzinárodnej úrovni 3, za posledných 6 rokov 3

### IV.2 Najvýznamnejšie publikované vedecké práce, verejne realizované alebo prezentované umelecké diela a výkony nového spolugaranta, doc. Lukáša Bučinského

1. L. Bucinsky, G.T. Rohde, L. Que, A. Ozarowski, J. Krzystek, M. Breza, J. Telser, *HFEPR and Computational Studies on the Electronic Structure of a High-Spin Oxidiron(IV) Complex in Solution*, *Inorganic Chemistry*, 55 (2016) 3933-394.

2. L. Bučinský, G. Büchel, R. Ponc, P. Rapt, M. Breza, J. Kožíšek, M. Gall, S. Biskupič, M. Fronc, K. Schiessl, O. Cuzan, D. Prodius, C. Turta, S. Shova, D. Zajac, V. Arion, *On the electronic structure of mer,trans-[rucl3(1h-indazole) 2(no)], a hypothetical metabolite of the antitumor drug candidate kp1019:*

