

Stanovisko

pracovnej skupiny AK k zmenám v kritériách,
na ktorých základe bola posúdená spôsobilosť uskutočňovať habilitačné konanie a konanie na vymenúvanie za profesora podľa § 83 ods. 12 zákona

Číslo žiadosti:	158/2017-AK
Žiadajúca vysoká škola (aj pracovisko, kde sa ŠP bude uskutočňovať):	Slovenská technická univerzita v Bratislave Fakulta chemickej a potravinárskej technológie
Študijný odbor (číslo a názov podľa sústavy ŠO)	4.1.21. teoretická a počítačová chémia
Predseda pracovnej skupiny:	prof. RNDr. Miroslav Urban, DrSc.
Pracovná skupina (názov):	12: Chémia, chemická technológia a biotechnológia

Zmena sa týka kritéria: (Vyberie sa príslušné kritérium a zhodnotí sa jeho zmena, ako napr. kritérium KHKV-A5. Nezmenené kritériá sa neuvádzajú.)

KHKV A1-A4	Bez zmeny
KHKV A5	Pôvodný garant
	meno, priezvisko
	Stanislav Biskupič
	tituly
	prof. Ing. DrSc.
	Navrhovaný garant
	meno, priezvisko
	Anton Gatial
	tituly
	prof. Ing. DrSc.
	rok narodenia
	1953 (pred 31. augustom)
	funkčné miesto v odbore
	fyzikálna chémia (profesor)
	habilitácia v odbore
	fyzikálna chémia
	rok
	1997
	inaugurácia v odbore
	fyzikálna chémia
	rok
	2011
	prac. úväzok
	100%
	Spolugarant* bez zmeny
	meno, priezvisko
	Martin Breza
	tituly
	Doc. Ing. CSc.
	rok narodenia
	1955 (pred 31. augustom)
	funkčné miesto v odbore
	teoretická a počítačová chémia
	habilitácia v odbore
	chemická fyzika
	rok
	1994
	inaugurácia v odbore
	rok
	prac. úväzok
	100%
	Navrhovaný spolugarant
	meno, priezvisko
	Lukáš Bučinský
	tituly
	Doc. Ing. PhD.
	rok narodenia
	1981 (pred 31. augustom)
	funkčné miesto v odbore
	teoretická a počítačová chémia
	habilitácia v odbore
	teoretická a počítačová chémia
	rok
	2016
	inaugurácia v odbore
	rok
	prac. úväzok
	100%
Najvýznamnejšie výsledky garanta	
Počet výstupov 82, z toho evidovaných vo Web of Science celkovo / za posledných 6 rokov 64/4	
Počet citácií Web of Science 230/57	
Počet projektov získaných na financovanie výskumu 1/1	
Počet pozvaných prednášok na medzinárodnej/národnej úrovni 12/3 za posledných 6 rokov 9/2	
Patenty 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., Klaeboe P., Lehrich 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., Klaeboe P., Nielsen C.J., Sablinskas V., Powell D.L., Kondow A.J., Incavo J.A.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., Klaeboe P., Biskupič S., Scheller D., Jurašková, J.Structural Chemistry 7, (1996) 17.	
4.Nucleophilic Vinylic Substitution (S _N V) of Activated Alkoxyethylene Derivatives with 6-	

	<p><i>Aminoquinoxaline</i>, Saloň J., Milata V., Gatial A., Prónayová N., Leško J., Černuchová P., Rappoport Z., Thanh G. V., Loupy A., <i>Eur. J. Org. Chem.</i>, (2005) 4870.</p> <p>5. <i>The isomers and conformers of some push-pull enamines studied by vibrational and NMR spectroscopy and by ab initio calculations</i>, Pigošová J., Gatial A., Milata V., Černuchová P., Prónayová N., Liptaj T., Matějka P. <i>J. Mol. Struct.</i>, 744-747, (2005) 315</p> <p>Najvýznamnejšie publikované vedecké práce verejne realizované alebo prezentované umelecké diela alebo výkony za posledných šesť rokov.</p> <p>1. <i>Conformational studies of 3-[(2,2-dimethylhydrazinyl)methylene]-pentane-2,4-dione using vibrational and NMR spectra, X-ray analysis and ab initio calculations</i>, Gatial A., Herich P., Tarabová D., Milata V., Prónayová N. <i>J. Mol. Struct.</i>, xxx (2017) 1-10, (accepted 28.12.2016)</p> <p>2. <i>Isomerizational and conformational study of 3-fluorophenylamino-2-acetyl propenenitrile (FPAAPN)</i> Gatial A., Dorotiková S., Plevová K., Milata V., Prónayová N., Matějka P. <i>J. Mol. Struct.</i>, 1090, (2015) 112-120</p> <p>3. <i>Raman and infrared spectra, conformations and ab initio calculations of 3-methoxymethylene-2,4-pentanedione</i>, Gatial A., Milata M., Prónayová N., Herzog K., Salzer R. <i>Acta Chimica Slovaca</i> 8, (2015) 203-216</p> <p>4. <i>Structure and vibrational spectra of copper(II) 2-pyridylmethanolate tetrahydrate</i> Gatial A., Mudra M., Moncol J., Dankova M., Lonneck P., Breza M. <i>Chemical Papers</i> 68, (2014) 940-94.</p> <p>5. <i>Isomerizational and conformational study of methyl-2-cyano-3-methoxyacrylate and methyl-2-cyano-3-aminoacrylate and its N-methyl derivatives</i>, Gatial A., Juhásová H., Gróf M., Kožíšek J., Milata V., Prónayová N., Matějka P., <i>J. Mol. Struct.</i>, 993, (2011) 232-242</p> <p>Účasť na riešení (vedení) najvýznamnejších vedeckých projektov alebo umeleckých projektov za posledných šesť rokov.</p> <p><i>Poznaním detailov elektrónovej štruktúry k interpretácii a predikcii fyzikálno-chemických vlastností látok</i>, VEGA-1/0327/12</p> <p><i>Elektrónová štruktúra - prostriedok k pochopeniu chemických a fyzikálnochemických vlastností</i>, VEGA - 1/0679/11 (zástupca vedúceho projektu)</p> <p><i>Polyaplikovateľné heterocykly - návrh štruktúry, syntéza a vlastnosti</i>, APVV-0038-11</p> <p><i>Poznanie elektrónovej štruktúry ako cesta k predikcii potenciálnych liečiv</i>, APVV-0202-10</p> <p><i>Vývoj a aplikácia metód na štúdium systémov s neobvyklou elektrónovou štruktúrou</i>, VEGA-1/0127/09</p> <p><u>Najvýznamnejšie výsledky nového spolugaranta, doc. Lukáša Bučinského</u></p> <p>Počet výstupov 27, z toho evidovaných vo Web of Science celkovo / za posledných 6 rokov 27/19</p> <p>Počet citácií Web of Science 76/71</p> <p>Počet projektov získaných na financovanie výskumu 1/1</p> <p>Počet pozvaných prednášok na medzinárodnej úrovni 3, za posledných 6 rokov 3</p> <p>Najvýznamnejšie publikované vedecké práce, verejne realizované alebo prezentované umelecké diela a výkony nového spolugaranta, doc. Lukáša Bučinského</p> <p>1. L. Bucinsky, G.T. Rohde, L. Que, A. Ozarowski, J. Krzystek, M. Breza, J. Telser, <i>HFEPR and Computational Studies on the Electronic Structure of a High-Spin Oxidoiron(IV) Complex in Solution</i>, <i>Inorganic Chemistry</i>, 55 (2016) 3933-394.</p> <p>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, <i>On the electronic structure of mer,trans-[rucl3(1h-indazole) 2(no)]</i>, a hypothetical metabolite of the antitumor drug candidate kp1019: An experimental and dft study, <i>European Journal of Inorganic Chemistry</i> (14) (2013) 2505–251.</p> <p>3. L. Bučinský, S. Biskupič, D. Jayatilaka, <i>Picture change error correction of radon atom electron density</i>, <i>Journal of Chemical Physics</i> 133 (2010) 17412.</p> <p>4. L. Bučinský, S. Biskupič, M. Ilčin, V. Lukeš, V. Laurinc, <i>On relativistic effects in ground state potential curves of Zn2, Cd2, and Hg2 dimers. a ccSD(t) study</i>, <i>J. Comput. Chem.</i> 30 (2009) 65–74.</p> <p>5. M. Hudák, D. Jayatilaka, L. Perašínová, S. Biskupič, J. Kožíšek, L. Bučinský, <i>X-ray constrained unrestricted hartree-fock and Douglas-Kroll-Hess wavefunctions</i>, <i>Acta Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography</i> 66 (2010) 78–9</p> <p>Najvýznamnejšie publikované vedecké práce verejne realizované alebo prezentované umelecké diela alebo výkony nového spolugaranta, doc. Lukáša Bučinského za posledných šesť rokov.</p> <p>1. L. Bučinský, D. Jayatilaka, S. Grabowsky, <i>Importance of relativistic effects and electron correlation in structure factors and electron density of diphenyl mercury and triphenyl bismuth</i>, <i>Journal of Physical Chemistry A</i>, 120 (2016) 6650-6669.</p> <p>2. S. Komorovsky, M. Repisky, L. Bucinsky, <i>New quantum number for the many-electron Dirac-Coulomb</i></p>
--	---

