

Charakteristika predkladaného výstupu tvorivej činnosti / Characteristics of the submitted research/ artistic/other output

Tlačivo VTC slúži na predkladanie výstupov tvorivej činnosti podľa metodiky hodnotenia tvorivých činností (časť V. Metodiky na vyhodnocovanie štandardov) / The form is used to submit the research/artistic/other outputs according to the evaluation methodology of research/artistic/other activities (part V. The Methodology for Standards Evaluation).

ID konania/ID of the procedure: ¹	
Kód VTC/Code of the research/artistic/other output (RAOO): ¹	

OCA1. Priezvisko hodnotenej osoby / Surname awarded to the assessed person ²	Vranovičová	
OCA2. Meno hodnotenej osoby / Name awarded to the assessed person ²	Beáta	
OCA3. Tituly hodnotenej osoby / Degrees awarded to the assessed person ²	RNDr., PhD.	
OCA4. Hyperlink na záznam osoby v Registri zamestnancov vysokých škôl / Hyperlink to the entry of the person in the Register of university staff ³	https://www.portalvs.sk/regzam/detail/14358?do=filterForm-submit&surname=Vranovi%C4%8Dov%C3%A1&sort=surname&employment_state=yes&filter=Vyh%C4%BEada%C5%A5	
OCA5. Oblasť posudzovania / Area of assessment ⁴	Aplikovaná analytická chémia I.stupeň profesijne orientovaný	
OCA6. Kategória výstupu tvorivej činnosti / Category of the research/artistic/other output <i>Výber zo 6 možností (pozri Vysvetlivky k položke OCA6) / Choice from 6 options (see Explanations for OCA6).</i>	vedecký výstup / scientific output	
OCA7. Rok vydania výstupu tvorivej činnosti / Year of publication of the research/artistic/other output	2020	
OCA8. ID záznamu v CREPČ alebo CREUČ (ak je) / ID of the record in the Central Registry of Publication Activity (CRPA) or the Central Registry of Artistic Activity (CRAA) ⁵	ID: 179512	
OCA9. Hyperlink na záznam v CREPČ alebo CREUČ / Hyperlink to the record in CRPA or CRAA ⁶	https://app.crepc.sk/?fn=detailBiblioForm&sid=D2CDA85DA56256F2713F8485A6	
a registrovaný v CREPČ alebo CREUČ / Characteristics of the output that is not registered in CRPA or CRAA	OCA10. Hyperlink na záznam v inom verejne prístupnom registri, katalógu výstupov tvorivých činností / Hyperlink to the record in another publicly accessible register, catalogue of research/artistic/other outputs ⁷	https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S157266572030103X
	OCA11. Charakteristika výstupu vo formáte bibliografického záznamu CREPČ alebo CREUČ, ak výstup nie je vo verejne prístupnom registri alebo katalógu výstupov / Characteristics of the output in the format of the CRPA or the CRAA bibliographic record, if the output is not available in a publicly accessible register or catalogue of outputs	Beata Vranovičová, Jaroslav Vatrál, Roman Boča, Correlation of electrochemical parameters for the redox couple Fe(III)/Fe(II) in the presence of amino acids and catecholamines, Journal of Electroanalytical Chemistry, Volume 860, 2020, 113920, ISSN 1572-6657, https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2020.113920 .
	OCA12. Typ výstupu (ak nie je výstup registrovaný v CREPČ alebo CREUČ) / Type of the output (if the output is not registered in CRPA or CRAA) <i>Výber zo 67 možností (pozri Vysvetlivky k položke OCA12) / Choice from 67 options (see Explanations for OCA12).</i>	článok/ article
	OCA13. Hyperlink na stránku, na ktorej je výstup sprístupnený (úplný text, iná dokumentácia a podobne) / Hyperlink to the webpage where the output is available (full text, other documentation, etc.)	https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S157266572030103X
	OCA14. Charakteristika autorského vkladu / Characteristics of the author's contribution	45%

Charakteristika výstupu, ktorý nie je	<p>OCA15. Anotácia výstupu s kontextovými informáciami týkajúcimi sa opisu tvorivého procesu a obsahu tvorivej činnosti a pod. / Annotation of the output with contextual information concerning the description of creative process and the content of the research/artistic/other activity, etc. ⁸</p> <p><i>Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak</i></p> <p><i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>	<p>Elektrochemické údaje redoxného páru Fe(II)/Fe(III) v prítomnosti aminokyselín a/alebo catecholamínov boli vzájomne korelované pomocou moderného chemometrického prístroja. Pomocou zhlukovej analýzy bolo štrnásť vzoriek charakterizovaných dvanástimi experimentálnymi parametrami rozdelených do troch hlavných tried podľa ich "vzdialeností". Analýza hlavných komponentov (PCA) prepojila súbor experimentálnych parametrov podľa ich podobnosti. Špičkové prúdy (I_{pa}, I_{pc}) a difúzne koeficienty (D_{ox}, D_{red}) sú úzko prepojené, čo potvrdzujú biploty PCA a párové korelačné koeficienty. Na základe elektrochemických údajov ponúka pravdepodobnostná neurónová sieť klasifikáciu skúmaných druhov do troch skupín.</p>
	<p>OCA16. Anotácia výstupu v anglickom jazyku / Annotation of the output in English ⁹</p> <p><i>Rozsah do 200 slov / Range up to 200 words</i></p>	<p>Electrochemical data of a Fe(II)/Fe(III) redox couple in the presence of amino acids and/or catecholamines have been mutually correlated by using modern apparatus of chemometry. By using cluster analysis, fourteen samples characterized by twelve experimental parameters have been classified into three main classes according their "distances". The principal component analysis (PCA) interrelates the set of experimental parameters according to their similarities. Peak currents (I_{pa}, I_{pc}) and the diffusion coefficients (D_{ox}, D_{red}) are closely related as confirmed by the PCA biplots and the pair correlation coefficients. Using electrochemical data, the probability neural network offers a classification of the studied species into three groups.</p>
	<p>OCA17. Zoznam najviac 5 najvýznamnejších ohlasov na výstup / List of maximum 5 most significant citations corresponding to the output</p> <p><i>Rozsah do 200 slov / Range up to 200 words</i></p>	
	<p>OCA18. Charakteristika dopadu výstupu na spoločensko-hospodársku prax / Characteristics of the output's impact on socio-economic practice</p> <p><i>Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak</i></p> <p><i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>	<p>Elektrochemické údaje redoxného páru Fe (II) / Fe (III) v prítomnosti aminokyselín a / alebo catecholamínov boli vzájomne korelované pomocou moderného prístroja na chemometriu. Pomocou klastrovej analýzy bolo štrnásť vzoriek charakterizovaných dvanástimi experimentálnymi parametrami klasifikovaných do troch hlavných tried podľa ich „vzdialeností“. Analýza hlavných komponentov (PCA) dáva do vzájomného vzťahu súbor experimentálnych parametrov podľa ich podobnosti. Špičkové prúdy (I_{pa}, I_{pc}) a difúzne koeficienty (D_{ox}, D_{red}) spolu úzko súvisia, čo potvrdzujú biploty PCA a párové korelačné koeficienty. Pomocou elektrochemických údajov ponúka neurónová sieť pravdepodobnosti klasifikáciu študovaných druhov do troch skupín.</p>
	<p>OCA19. Charakteristika dopadu výstupu a súvisiacich aktivít na vzdelávací proces / Characteristics of the output and related activities' impact on the educational process</p> <p><i>Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak</i></p> <p><i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>	<p>V práci sa využívajú nové poznatky (vedecké aj metodické), ktoré je možné uplatniť v odboroch chémie. Tieto výsledky buď priamo alebo nepriamo súvisia a prinášajú aj nové poznatky využiteľné pri výučbe predmetov napr. analytická chémia, aplikovaná analytická chémia a pod. Tieto výsledky môžu slúžiť ako základ záverečných prác študentov, ale ich metodiky môžu byť využité aj pri tvorbe cvičení pre uvedené predmety.</p>

Charakteristika predkladaného výstupu tvorivej činnosti / Characteristics of the submitted research/ artistic/other output

Tlačivo VTC slúži na predkladanie výstupov tvorivej činnosti podľa metodiky hodnotenia tvorivých činností (časť V. Metodiky na vyhodnocovanie štandardov) / The form is used to submit the research/artistic/other outputs according to the evaluation methodology of research/artistic/other activities (part V. The Methodology for Standards Evaluation).

ID konania/ID of the procedure: ¹	
Kód VTC/Code of the research/artistic/other output (RAOO): ¹	

OCA1. Priezvisko hodnotenej osoby / Surname awarded to the assessed person ²	Vranovičová	
OCA2. Meno hodnotenej osoby / Name awarded to the assessed person ²	Beáta	
OCA3. Tituly hodnotenej osoby / Degrees awarded to the assessed person ²	RNDr., PhD.	
OCA4. Hyperlink na záznam osoby v Registri zamestnancov vysokých škôl / Hyperlink to the entry of the person in the Register of university staff ³	https://www.portalvs.sk/regzam/detail/14358?do=filterForm-submit&surname=Vranovi%C4%8Dov%C3%A1&sort=surname&employment_state=yes&filter=Vyh%C4%BEada%C5%A5	
OCA5. Oblasť posudzovania / Area of assessment ⁴	Aplikovaná analytická chémia I.stupeň profesijne orientovaný	
OCA6. Kategória výstupu tvorivej činnosti / Category of the research/artistic/other output <i>Výber zo 6 možností (pozri Vysvetlivky k položke OCA6) / Choice from 6 options (see Explanations for OCA6).</i>	vedecký výstup / scientific output	
OCA7. Rok vydania výstupu tvorivej činnosti / Year of publication of the research/artistic/other output	2018	
OCA8. ID záznamu v CREPČ alebo CREUČ (ak je) / ID of the record in the Central Registry of Publication Activity (CRPA) or the Central Registry of Artistic Activity (CRAA) ⁵	ID: 75352	
OCA9. Hyperlink na záznam v CREPČ alebo CREUČ / Hyperlink to the record in CRPA or CRAA ⁶	https://app.crepc.sk/?fn=detailBiblioForm&sid=AEB4C3C556F210C7A53CA8E5	
v CREPČ alebo CREUČ / Characteristics of the output that is not registered in CRPA or CRAA	OCA10. Hyperlink na záznam v inom verejne prístupnom registri, katalógu výstupov tvorivých činností / Hyperlink to the record in another publicly accessible register, catalogue of research/artistic/other outputs ⁷	https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2018/dt/c8dt02290a#!divAbstract
	OCA11. Charakteristika výstupu vo formáte bibliografického záznamu CREPČ alebo CREUČ, ak výstup nie je vo verejne prístupnom registri alebo katalógu výstupov / Characteristics of the output in the format of the CRPA or the CRAA bibliographic record, if the output is not available in a publicly accessible register or catalogue of outputs	Nesterova, OV; Nesterov, DS; Vranovičová, B; Boča, R; Pompeiro, AJL: Heterometallic CuIIFeIII and CuIIMnIII alkoxo-bridged complexes revealing a rare hexanuclear M6(μ-X)7(μ3-X)2 molecular core. Dalton Transactions (Online) ISSN: 1477-9234, 47, 32, 10941-10952.
	OCA12. Typ výstupu (ak nie je výstup registrovaný v CREPČ alebo CREUČ) / Type of the output (if the output is not registered in CRPA or CRAA) <i>Výber zo 67 možností (pozri Vysvetlivky k položke OCA12) / Choice from 67 options (see Explanations for OCA12).</i>	článok/ article
	OCA13. Hyperlink na stránku, na ktorej je výstup sprístupnený (úplný text, iná dokumentácia a podobne) / Hyperlink to the webpage where the output is available (full text, other documentation, etc.)	
	OCA14. Charakteristika autorského vkladu / Characteristics of the author's contribution	30%

<p>Charakteristika výstupu, ktorý nie je registrovaný</p>	<p>OCA15. Anotácia výstupu s kontextovými informáciami týkajúcimi sa opisu tvorivého procesu a obsahu tvorivej činnosti a pod. / Annotation of the output with contextual information concerning the description of creative process and the content of the research/artistic/other activity, etc. ⁸</p> <p><i>Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak</i> <i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>	<p>Nové hexanukleárne komplexy boli pripravené prostredníctvom reakcií samoporiadania práškovej medi a chloridu železa (II) alebo mangánu (II) s N-terc-butyl dietanolamínom (H2tBuDea) a kyselinou pivalovou (HPiv) v acetonitrile. Kryštalografické štúdie odhalili nezvyčajný typ molekulového jadra M6(μ-X)7(μ3-X)2 v 1 a 2, ktorý možno považovať za kombináciu dvoch trimetalických fragmentov M3(μ-X)2(μ3-X) spojených tromi premostujúcimi atómami. Bola vykonaná analýza a klasifikácia hexanukleárnych komplexov, ktoré majú ako jadro tvoriaci fragment M3(μ-X)2(μ3-X), pomocou údajov z Cambridgeskej štruktúrnej databázy (CSD). Merania magnetickej susceptibility 1 pri premenlivej teplote (1,8-300 K) ukázali pokles hodnoty efektívneho magnetického momentu pri nízkej teplote, čo svedčí o antiferromagnetickej väzbe medzi magnetickými centrami (JFe-Cu/hc = -6,9 cm-1, JCu-Cu/hc = -4,1 cm-1, JFe-Fe/hc = -24,2 cm-1). Pri všetkých troch katalytických reakciách boli podrobne skúmané a diskutované vedľajšie produkty.</p>
	<p>OCA16. Anotácia výstupu v anglickom jazyku / Annotation of the output in English ⁹</p> <p><i>Rozsah do 200 slov / Range up to 200 words</i></p>	<p>The novel hexanuclear complexes were prepared through one-pot self-assembly reactions of copper powder and iron(II) or manganese(II) chloride with N-tert-butyl diethanolamine (H2tBuDea) and pivalic acid (HPiv) in acetonitrile. Crystallographic studies revealed the uncommon molecular core type M6(μ-X)7(μ3-X)2 in 1 and 2, which can be viewed as a combination of two trimetallic M3(μ-X)2(μ3-X) fragments joined by three bridging atoms. The analysis and classification of the hexanuclear complexes having a M3(μ-X)2(μ3-X) moiety as a core forming fragment using data from the Cambridge Structural Database (CSD) were performed. Variable-temperature (1.8–300 K) magnetic susceptibility measurements of 1 showed a decrease of the effective magnetic moment value at low temperature, indicative of antiferromagnetic coupling between the magnetic centres (JFe–Cu/hc = –6.9 cm–1, JCu–Cu/hc = –4.1 cm–1, JFe–Fe/hc = –24.2 cm–1). In all three catalytic reactions the by-products were investigated in detail and discussed.</p>
	<p>OCA17. Zoznam najviac 5 najvýznamnejších ohlasov na výstup / List of maximum 5 most significant citations corresponding to the output</p> <p><i>Rozsah do 200 slov / Range up to 200 words</i></p>	<p>1. New members of the polynuclear manganese family: MnII2MnIII2 single-molecule magnets and MnII3MnIII8 antiferromagnetic complexes. Synthesis and magnetostructural correlations Nuno Reis Conceição, Oksana V. Nesterova, Cyril Rajnák, Roman Boča, Armando J. L. Pombeiro, M. Fátima C. Guedes da Silva and Dmytro S. Nesterov Dalton Trans., 2020, 49, 13970 DOI: 10.1039/D0DT02652B</p> <p>2. A Comparative Study of the Catalytic Behaviour of Alkoxy-1,3,5-Triazapentadiene Copper(II) Complexes in Cyclohexane Oxidation Oksana V. Nesterova, Maximilian N. Kopylovich and Dmytro S. Nesterov Inorganics, 2019, 7, 82 DOI: 10.3390/inorganics7070082</p>
	<p>OCA18. Charakteristika dopadu výstupu na spoločensko-hospodársku prax / Characteristics of the output's impact on socio-economic practice</p> <p><i>Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak</i> <i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>	<p>Nové hexanukleárne komplexy sa pripravili reakciou na samočinný rozklad v jednej nádobe na prášok medi a chlorid železitý alebo manganatý s N-terc-butyl dietanolamínom (H2tBuDea) a kyselinou pivalovou (HPiv) v acetonitrile. Kryštalografické štúdie odhalili neobvyklé molekulárne jadro typu M6(μ-X)7(μ3-X)2 v 1 a 2, ktoré možno považovať za kombináciu dvoch trimetalických fragmentov M3(μ-X)2(μ3-X) spojených tromi premostujúcimi atómami. Uskutočnila sa analýza a klasifikácia hexanukleárnych komplexov, ktoré majú časť M3(μ-X)2(μ3-X) ako fragment tvoriaci jadro, s použitím údajov z Cambridge Structural Database (CSD). Merania magnetickej susceptibility 1 s premenlivou teplotou (1,8–300 K) ukázali pokles hodnoty efektívneho magnetického momentu pri nízkej teplote, čo naznačuje antiferromagnetické spojenie medzi magnetickými stredmi (JFe – Cu / hc = –6,9 cm – 1, JCu– Cu / hc = –4,1 cm – 1, JFe – Fe / hc = –24,2 cm – 1). Pri všetkých troch katalytických reakciách boli vedľajšie produkty podrobne skúmané a diskutované. Všetky výsledky majú exaktný dopad na ďalšie smerovanie vedy a tým aj na hospodársku prax.</p>

OCA19. Charakteristika dopadu výstupu a súvisiacich aktivít na vzdelávací proces / Characteristics of the output and related activities' impact on the educational process

Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak
Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English

V práci sa využívajú nové poznatky (vedecké aj metodické), ktoré je možné uplatniť v odboroch chémie. Tieto výsledky buď priamo alebo nepriamo súvisia a prinášajú aj nové poznatky využiteľné pri výučbe predmetov napr. analytická chémia, aplikovaná analytická chémia a pod. Tieto výsledky môžu slúžiť ako základ záverečných prác študentov, ale ich metodiky môžu byť využité aj pri tvorbe cvičení pre uvedené predmety.

Charakteristika predkladaného výstupu tvorivej činnosti / Characteristics of the submitted research/ artistic/other output

Tlačivo VTC slúži na predkladanie výstupov tvorivej činnosti podľa metodiky hodnotenia tvorivých činností (časť V. Metodiky na vyhodnocovanie štandardov) / The form is used to submit the research/artistic/other outputs according to the evaluation methodology of research/artistic/other activities (part V. The Methodology for Standards Evaluation).

ID konania/ID of the procedure: ¹	
Kód VTC/Code of the research/artistic/other output (RAOO): ¹	

OCA1. Priezvisko hodnotenej osoby / Surname awarded to the assessed person ²	Vranovičová	
OCA2. Meno hodnotenej osoby / Name awarded to the assessed person ²	Beáta	
OCA3. Tituly hodnotenej osoby / Degrees awarded to the assessed person ²	RNDr., PhD.	
OCA4. Hyperlink na záznam osoby v Registri zamestnancov vysokých škôl / Hyperlink to the entry of the person in the Register of university staff ³	https://www.portalvs.sk/regzam/detail/14358?do=filterForm-submit&surname=Vranovi%C4%8Dov%C3%A1&sort=surname&employment_state=yes&filter=Vyh%C4%BEada%C5%A5	
OCA5. Oblasť posudzovania / Area of assessment ⁴	Aplikovaná analytická chémia I.stupeň profesijne orientovaný	
OCA6. Kategória výstupu tvorivej činnosti / Category of the research/artistic/other output <i>Výber zo 6 možností (pozri Vysvetlivky k položke OCA6) / Choice from 6 options (see Explanations for OCA6).</i>	vedecký výstup / scientific output	
OCA7. Rok vydania výstupu tvorivej činnosti / Year of publication of the research/artistic/other output	2017	
OCA8. ID záznamu v CREPČ alebo CREUČ (ak je) / ID of the record in the Central Registry of Publication Activity (CRPA) or the Central Registry of Artistic Activity (CRAA) ⁵	ID: UCM.Trnava.PC023435	
OCA9. Hyperlink na záznam v CREPČ alebo CREUČ / Hyperlink to the record in CRPA or CRAA ⁶	http://www.crepc.sk/portal?fn=*review&uid=2205899&pageId=resultform&full=0	
CREUČ / Characteristics of the output that is not registered in CRPA or CRAA	OCA10. Hyperlink na záznam v inom verejne prístupnom registri, katalógu výstupov tvorivých činností / Hyperlink to the record in another publicly accessible register, catalogue of research/artistic/other outputs ⁷	https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.inorgchem.7b00605
	OCA11. Charakteristika výstupu vo formáte bibliografického záznamu CREPČ alebo CREUČ, ak výstup nie je vo verejne prístupnom registri alebo katalógu výstupov / Characteristics of the output in the format of the CRPA or the CRAA bibliographic record, if the output is not available in a publicly accessible register or catalogue of outputs	Elena A. Buvaylo, Vladimir N. Kokozay, Olga Yu. Vassilyeva, Brian W. Skelton, Andrew Ozarowski, Ján Titiš, Beáta Vranovičová, a Roman Boča: Field-Assisted Slow Magnetic Relaxation in a Six-Coordinate Co(II)–Co(III) Complex with Large Negative Anisotropy. Inorganic Chemistry 2017 56 (12), 6999-7009 DOI: 10.1021/acs.inorgchem.7b00605
	OCA12. Typ výstupu (ak nie je výstup registrovaný v CREPČ alebo CREUČ) / Type of the output (if the output is not registered in CRPA or CRAA) <i>Výber zo 67 možností (pozri Vysvetlivky k položke OCA12) / Choice from 67 options (see Explanations for OCA12).</i>	článok/ article
	OCA13. Hyperlink na stránku, na ktorej je výstup sprístupnený (úplný text, iná dokumentácia a podobne) / Hyperlink to the webpage where the output is available (full text, other documentation, etc.)	
	OCA14. Charakteristika autorského vkladu / Characteristics of the author's contribution	15%

<p>Charakteristika výstupu, ktorý nie je registrovaný v CREPČ alebo C</p>	<p>OCA15. Anotácia výstupu s kontextovými informáciami týkajúcimi sa opisu tvorivého procesu a obsahu tvorivej činnosti a pod. / Annotation of the output with contextual information concerning the description of creative process and the content of the research/artistic/other activity, etc. ⁸</p> <p><i>Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak</i></p> <p><i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>	<p>Reakciou $\text{Co}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ so Schiffovým bázičným ligandom LH4 odvodeným od o-vanilínu a tris(hydroxymetyl)aminometánu vzniká dvojjadrový komplex so zmiešanými hodnotami $[\text{CoII}(\text{LH}_2)_2(\text{CH}_3\text{COO})(\text{H}_2\text{O})](\text{H}_2\text{O})_3$ (1), ktorý bol skúmaný pomocou IČ spektroskopie, röntgenovej kryštalografie, magnetickej susceptibility závislej od teploty, magnetizácie, HFEPK spektroskopie a meraní ac susceptibility pri rôznych frekvenciách, teplotách a vonkajších magnetických poliach. Štruktúra 1 pozostáva z neutrálnych molekúl, v ktorých sú dva kobaltové ióny s deformovanou oktaedrickou geometriou, $\text{CoII}(\text{O}_6)$ a $\text{CoIIIN}_2\text{O}_4$, premostované dvoma deprotonovanými $-\text{CH}_2\text{O}-$ skupinami dvoch LH22- ligandov. 1 dopĺňa sériu s aniónmi Cl, Br, NO_3 a NCS, ktorú už predtým publikovali rôzni autori. Nízokoteplotné HFEPK merania odhalili, že základný elektronický stav $\text{Co}(\text{II})$ centra v 1 je vysoko anizotropný Kramersov dublet; efektívne hodnoty g 7,18, 2,97 a 1,96 sú frekvenčne nezávislé vo frekvenčných rozsahoch 200-630, 200-406 a 200-300 GHz pre najvyššie, stredné a najnižšie hodnoty geff, v uvedenom poradí. Dve nižšie hodnoty neboli pri vyšších frekvenciách pozorované, pretože magnetické pole nebolo dostatočne vysoké. Údaje o magnetickej susceptibilitě v závislosti od teploty a magnetizácii v závislosti od poľa potvrdzujú vysokú magneticú anizotropiu typu ľahkej osi. Komplex 1 sa pri malom aplikovanom vonkajšom poli správa ako jednoiónový magnet a vykazuje dva relaxačné módy, ktoré silne závisia od aplikovaného statického jednosmerného poľa. Pozorovanie viacerých relaxačných ciest jasne odlišuje komplex 1 od analógov Cl a Br.</p>
	<p>OCA16. Anotácia výstupu v anglickom jazyku / Annotation of the output in English ⁹</p> <p><i>Rozsah do 200 slov / Range up to 200 words</i></p>	<p>The reaction of $\text{Co}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ with the Schiff base ligand LH4 derived from o-vanillin and tris(hydroxymethyl)aminomethane produces the dinuclear mixed-valence complex $[\text{CoII}(\text{LH}_2)_2(\text{CH}_3\text{COO})(\text{H}_2\text{O})](\text{H}_2\text{O})_3$ (1), which has been investigated using IR spectroscopy, X-ray crystallography, temperature-dependent magnetic susceptibility, magnetization, HFEPK spectroscopy, and ac susceptibility measurements at various frequencies, temperatures, and external magnetic fields. The structure of 1 consists of neutral molecules in which two cobalt ions with distorted octahedral geometries, $\text{CoII}(\text{O}_6)$ and $\text{CoIIIN}_2\text{O}_4$, are bridged by two deprotonated $-\text{CH}_2\text{O}-$ groups of the two LH22- ligands. 1 completes a series with Cl, Br, NO_3, and NCS anions published before by different authors. Low-temperature HFEPK measurements reveal that the ground electronic state of the $\text{Co}(\text{II})$ center in 1 is a highly anisotropic Kramers doublet; the effective g values of 7.18, 2.97, and 1.96 are frequency-independent over the frequency ranges 200–630, 200–406, and 200–300 GHz for the highest, intermediate, and lowest geff values, respectively. The two lower values were not seen at higher frequencies because the magnetic field was not high enough. Temperature-dependent magnetic susceptibility and field-dependent magnetization data confirm high magnetic anisotropy of the easy axis type. Complex 1 behaves as a single-ion magnet under a small applied external field and demonstrates two relaxation modes that strongly depend on the applied static dc field. The observation of multiple relaxation pathways clearly distinguishes 1 from the Cl and Br analogues.</p>

<p>OCA17. Zoznam najviac 5 najvýznamnejších ohlasov na výstup / List of maximum 5 most significant citations corresponding to the output <i>Rozsah do 200 slov / Range up to 200 words</i></p>	<p>1. Fumiya Kobayashi, Yuki Komatsumaru, Ryohei Akiyoshi, Masaaki Nakamura, Yingjie Zhang, Leonard F. Lindoy, Shinya Hayami. Water Molecule-Induced Reversible Magnetic Switching in a Bis-Terpyridine Cobalt(II) Complex Exhibiting Coexistence of Spin Crossover and Orbital Transition Behaviors. <i>Inorganic Chemistry</i> 2020, 59 (23), 16843-16852. https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c00818</p> <p>2. Ghénadie Novitchi, Shangda Jiang, Sergiu Shova, Fatima Rida, Ivo Hlavička, Milan Orlita, Wolfgang Wernsdorfer, Rana Hamze, Cyril Martins, Nicolas Suaud, Nathalie Guihéry, Anne-Laure Barra, and Cyrille Train. From Positive to Negative Zero-Field Splitting in a Series of Strongly Magnetically Anisotropic Mononuclear Metal Complexes. <i>Inorganic Chemistry</i> 2017, 56 (24), 14809-14822. https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.7b01861</p> <p>3. Santarupa Thakurta, Monami Maiti, Georgina M. Rosair, Aleksey Kuznetsov. A Rare Angular Trinuclear Mixed Valence Cobalt(III-II-III) Complex With Azido Bridges And Salpn-Type Schiff-Base Ligand: Synthesis, Crystal Structure And DFT Study. <i>Journal of Molecular Structure</i> 2021, 1230, 129863. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.129863</p> <p>4. María A. Palacios, Ismael F. Díaz-Ortega, Hiroyuki Nojiri, Elizaveta A. Sutura, Mykhaylo Ozerov, J. Krzystek, Enrique Colacio. Tuning magnetic anisotropy by the π-bonding features of the axial ligands and the electronic effects of gold(I) atoms in 2D $\{Co(L)_2[Au(CN)_2]_2\}_n$ metal-organic frameworks with field-induced single-ion magnet behaviour. <i>Inorganic Chemistry Frontiers</i> 2020, 7 (23), 4611-4630. https://doi.org/10.1039/D0QI00996B</p> <p>5. Abhisek Banerjee, Shouvik Chattopadhyay. Synthesis and characterization of mixed valence cobalt(III)/cobalt(II) complexes with N,O-donor Schiff base ligands. <i>Polyhedron</i> 2019, 159, 1-11. https://doi.org/10.1016/j.poly.2018.10.059</p>
<p>OCA18. Charakteristika dopadu výstupu na spoločensko-hospodársku prax / Characteristics of the output's impact on socio-economic practice <i>Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak</i> <i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>	<p>Reakciou Co(CH₃COO)₂·2H₂O s ligandom Schiffovej zásady LH4 odvodeným od o-vanilínu a tris(hydroxymetyl)aminometánu sa získal dvojjadrový zmiešaný valenčný komplex [CoII CoIII(LH₂)₂(CH₃COO)(H₂O)](H₂O)₃ (1), ktorý bol skúmaný pomocou IR spektroskopie, röntgenovej kryštalografie, teplotne závislej magnetickej susceptibility, magnetizácie, HFEPD spektroskopie a meraní AC citlivosti pri rôznych frekvenciách, teplotách a vonkajších magnetických poliach. Nízko teplotné merania HFEPD ukazujú, že základný elektronický stav Co(II) centra v 1 je vysoko anizotropný Kramersov dublet; efektívne hodnoty g 7,18, 2,97 a 1,96 sú frekvenčne nezávislé vo frekvenčných pásmach 200 - 630, 200 - 406 a 200 - 300 GHz pre najvyššiu, strednú a najnižšiu hodnotu Geff. Dve nižšie hodnoty neboli viditeľné na vyšších frekvenciách, pretože magnetické pole nebolo dostatočne vysoké. Údaje o magnetickej susceptibilite závislej od teploty a údaje magnetizácie závislé od poľa potvrdzujú vysokú magneticкую anizotropiu typu ľahkej osi a majú významný dopad na hospodársku prax.</p>
<p>OCA19. Charakteristika dopadu výstupu a súvisiacich aktivít na vzdelávací proces / Characteristics of the output and related activities' impact on the educational process <i>Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak</i> <i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>	<p>V práci sa využívajú nové poznatky (vedecké aj metodické), ktoré je možné uplatniť v chemických odboroch. Tieto výsledky buď priamo alebo nepriamo súvisia a prinášajú aj nové poznatky využiteľné pri výučbe predmetov napr. analytická chémia, aplikovaná chémia, laboratórne cvičenia z analytickej chémie a pod. Tieto výsledky môžu slúžiť ako základ záverečných prác študentov, ale ich metodiky môžu byť využité aj pri tvorbe cvičení pre uvedené predmety.</p>

Charakteristika predkladaného výstupu tvorivej činnosti / Characteristics of the submitted research/ artistic/other output

Tlačivo VTC slúži na predkladanie výstupov tvorivej činnosti podľa metodiky hodnotenia tvorivých činností (časť V. Metodiky na vyhodnocovanie štandardov) / The form is used to submit the research/artistic/other outputs according to the evaluation methodology of research/artistic/other activities (part V. The Methodology for Standards Evaluation).

ID konania/ID of the procedure: ¹

Kód VTC/Code of the research/artistic/other output (RAOO):¹

OCA1. Priezvisko hodnotenej osoby / Surname awarded to the assessed person ²	Vranovičová	
OCA2. Meno hodnotenej osoby / Name awarded to the assessed person ²	Beáta	
OCA3. Tituly hodnotenej osoby / Degrees awarded to the assessed person ²	RNDr., PhD.	
OCA4. Hyperlink na záznam osoby v Registri zamestnancov vysokých škôl / Hyperlink to the entry of the person in the Register of university staff ³	https://www.portalvs.sk/regzam/detail/14358	
OCA5. Oblasť posudzovania / Area of assessment ⁴	Aplikovaná analytická chémia I.stupeň profesijne orientovaný	
OCA6. Kategória výstupu tvorivej činnosti / Category of the research/ artistic/other output <i>Výber zo 6 možností (pozri Vysvetlivky k položke OCA6) / Choice from 6 options (see Explanations for OCA6).</i>	vedecký výstup / scientific output	
OCA7. Rok vydania výstupu tvorivej činnosti / Year of publication of the research/artistic/other output	2024	
OCA8. ID záznamu v CREPČ alebo CREUČ (ak je) / ID of the record in the Central Registry of Publication Activity (CRPA) or the Central Registry of Artistic Activity (CRAA) ⁵	ID: 1221727	
OCA9. Hyperlink na záznam v CREPČ alebo CREUČ / Hyperlink to the record in CRPA or CRAA ⁶	https://app.crepc.sk/?fn=detailBiblioForm&sid=72C84F3CCF0D479C0A80035BBB18	
registrovaný v CREPČ alebo CREUČ / Registered in CRPA or CRAA Charakteristika výstupu, ktorý nie je registrovaný v CREPČ alebo CREUČ / Characteristics of the output that is not registered in CRPA or CRAA	OCA10. Hyperlink na záznam v inom verejne prístupnom registri, katalógu výstupov tvorivých činností / Hyperlink to the record in another publicly accessible register, catalogue of research/ artistic/other outputs ⁷	
	OCA11. Charakteristika výstupu vo formáte bibliografického záznamu CREPČ alebo CREUČ, ak výstup nie je vo verejne prístupnom registri alebo katalógu výstupov / Characteristics of the output in the format of the CRPA or the CRAA bibliographic record, if the output is not available in a publicly accessible register or catalogue of outputs	Boča, Roman, Imrich Richard, Štofko Juraj, Vranovičová Beáta, Rajnák Cyril: Molecular Properties of Branched Aliphatic α -Amino Acids in Water, The Journal of Physical Chemistry C : Energy Conversion and Storage, Optical and Electronic Devices, Interfaces, Nanomaterials, and Hard Matter. – Washington (USA) : American Chemical Society. – ISSN 1932-7447. – ISSN (online) 1932-7455. – Roč. 128, č. 38 (2024), s. 8088-8095 DOI10.1021/acs.jpca.4c04538
	OCA12. Typ výstupu (ak nie je výstup registrovaný v CREPČ alebo CREUČ) / Type of the output (if the output is not registered in CRPA or CRAA) <i>Výber zo 67 možností (pozri Vysvetlivky k položke OCA12) / Choice from 67 options (see Explanations for OCA12).</i>	článok/ article
	OCA13. Hyperlink na stránku, na ktorej je výstup sprístupnený (úplný text, iná dokumentácia a podobne) / Hyperlink to the webpage where the output is available (full text, other documentation, etc.)	https://www.scopus.com/record/display.uri?eid=2-s2.0-85203832509&origin=resultslist
	OCA14. Charakteristika autorského vkladu / Characteristics of the author's contribution	35%

<p>Charakteristika výstupu, ktorý nie je re</p>	<p>OCA15. Anotácia výstupu s kontextovými informáciami týkajúcimi sa opisu tvorivého procesu a obsahu tvorivej činnosti a pod. / Annotation of the output with contextual information concerning the description of creative process and the content of the research/artistic/other activity, etc. ⁸</p> <p><i>Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak</i></p> <p><i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>	
<p>OCA16. Anotácia výstupu v anglickom jazyku / Annotation of the output in English ⁹</p> <p><i>Rozsah do 200 slov / Range up to 200 words</i></p>	<p>Four branched-chain aliphatic α-amino acids—α-alanine, valine, leucine, and isoleucine (1–4)—were investigated by quantum-chemical calculations in water as a solvent by two methods. The B3LYP variant of DFT calculations was used to obtain the electronic structure and molecular descriptors of these species in their canonical amino acid form as well as the related zwitterionic form in three oxidation states (cation, neutral molecule, and anion). A total of 24 species were subjected to full geometry optimization and complete vibration analysis. Quantities related to ionization or affinity processes were evaluated under adiabatic conditions. The calculated standard reaction Gibbs energy facilitates evaluation of the absolute oxidation and reduction potential. The absolute reduction potential correlates with the electrophilicity index, and the absolute oxidation potential correlates with the adiabatic ionization energy. This finding makes it possible to skip the tedious vibrational analysis and use electronic properties to estimate the redox potentials. The molecular descriptors were compared with the calculated properties of four linear amino acids (glycine, β-alanine, GABA, and DAVA). Parallel calculations using the DLPNO–CCSD(T) method gave analogous results for 24 species. The absolute oxidation potential was related to the antioxidant activity index, which showed only a moderate antioxidant activity of 1–4.</p>	
<p>OCA17. Zoznam najviac 5 najvýznamnejších ohlasov na výstup / List of maximum 5 most significant citations corresponding to the output</p> <p><i>Rozsah do 200 slov / Range up to 200 words</i></p>		
<p>OCA18. Charakteristika dopadu výstupu na spoločensko-hospodársku prax / Characteristics of the output's impact on socio-economic practice</p> <p><i>Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak</i></p> <p><i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>	<p>Štyri alifatické α-aminokyseliny s rozvetveným reťazcom – α-alanín, valín, leucín a izoleucín (1-4) – boli skúmané pomocou kvantovo-chemických výpočtov vo vode ako rozpúšťadla dvoma metódami. Variant B3LYP výpočtov DFT sa použil na získanie elektronickej štruktúry a molekulárnych deskriptorov týchto druhov v ich kanonickej aminokyselinovej forme, ako aj v príbuznej zwitteriónovej forme v troch oxidačných stavoch (katión, neutrálna molekula a anión). Celkom 24 druhov bolo podrobených úplnej optimalizácii geometrie a kompletnej vibračnej analýze. Vypočítaná štandardná reakčná Gibbsova energia uľahčuje vyhodnotenie absolútneho oxidačného a redukčného potenciálu. Absolútny redukčný potenciál koreluje s indexom elektrofilnosti a absolútny oxidačný potenciál koreluje s adiabatickou ionizačnou energiou. Toto zistenie umožňuje preskočiť únavnú vibračnú analýzu a použiť elektronicke vlastnosti na odhadnutie redoxných potenciálov. Molekulové deskriptory sa porovnávali s vypočítanými vlastnosťami štyroch lineárnych aminokyselín (glycín, β-alanín, GABA a DAVA). Paralelné výpočty s použitím metódy DLPNO-CCSD(T) poskytli analogické výsledky pre 24 druhov. Absolútny oxidačný potenciál súvisel s indexom antioxidačnej aktivity, ktorý vykazoval len miernu antioxidačnú aktivitu 1-4.</p>	

OCA19. Charakteristika dopadu výstupu a súvisiacich aktivít na vzdelávací proces / Characteristics of the output and related activities' impact on the educational process

Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak
Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English

V práci sa využívajú nové poznatky (vedecké aj metodické), ktoré je možné uplatniť v chemických odboroch. Tieto výsledky buď priamo alebo nepriamo súvisia a prinášajú aj nové poznatky využiteľné pri výučbe predmetov napr. fyzikálna chémia, analytická chémia, aplikovaná chémia a pod. Tieto výsledky môžu slúžiť ako základ záverečných prác študentov, ale ich metodiky môžu byť využité aj pri tvorbe cvičení pre uvedené predmety.

Charakteristika predkladaného výstupu tvorivej činnosti / Characteristics of the submitted research/ artistic/other output

Tlačivo VTC slúži na predkladanie výstupov tvorivej činnosti podľa metodiky hodnotenia tvorivých činností (časť V. Metodiky na vyhodnocovanie štandardov) / The form is used to submit the research/artistic/other outputs according to the evaluation methodology of research/artistic/other activities (part V. The Methodology for Standards Evaluation).

ID konania/ID of the procedure: ¹

Kód VTC/Code of the research/artistic/other output (RAOO):¹

OCA1. Priezvisko hodnotenej osoby / Surname awarded to the assessed person ²	Vranovičová	
OCA2. Meno hodnotenej osoby / Name awarded to the assessed person ²	Beáta	
OCA3. Tituly hodnotenej osoby / Degrees awarded to the assessed person ²	RNDr., PhD.	
OCA4. Hyperlink na záznam osoby v Registri zamestnancov vysokých škôl / Hyperlink to the entry of the person in the Register of university staff ³	https://www.portalvs.sk/regzam/detail/14358?do=filterForm-submit&surname=Vranovi%C4%8Dov%C3%A1&sort=surname&employment_state=yes&filter=Vyh%C4%BEada%C5%A5	
OCA5. Oblasť posudzovania / Area of assessment ⁴	Aplikovaná analytická chémia I.stupeň profesijne orientovaný	
OCA6. Kategória výstupu tvorivej činnosti / Category of the research/ artistic/other output <i>Výber zo 6 možností (pozri Vysvetlivky k položke OCA6) / Choice from 6 options (see Explanations for OCA6).</i>	vedecký výstup / scientific output	
OCA7. Rok vydania výstupu tvorivej činnosti / Year of publication of the research/artistic/other output	2014	
OCA8. ID záznamu v CREPČ alebo CREUČ (ak je) / ID of the record in the Central Registry of Publication Activity (CRPA) or the Central Registry of Artistic Activity (CRAA) ⁵	ID: STU.Bratislava.0002236	
OCA9. Hyperlink na záznam v CREPČ alebo CREUČ / Hyperlink to the record in CRPA or CRAA ⁶	http://www.crepc.sk/portal?fn=*review&uid=1362804&pageId=resultform&full=0	
v CREPČ alebo CREUČ / Characteristics of the output that is not registered in CRPA or CRAA	OCA10. Hyperlink na záznam v inom verejne prístupnom registri, katalógu výstupov tvorivých činností / Hyperlink to the record in another publicly accessible register, catalogue of research/ artistic/other outputs ⁷	https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0277538713008188
	OCA11. Charakteristika výstupu vo formáte bibliografického záznamu CREPČ alebo CREUČ, ak výstup nie je vo verejne prístupnom registri alebo katalógu výstupov / Characteristics of the output in the format of the CRPA or the CRAA bibliographic record, if the output is not available in a publicly accessible register or catalogue of outputs	ADC : Magnetostructural correlation in tetracopper(II) cubanes / Puterová Tokárová Zita, Mrázová Viera, Kožíšek Jozef, Valentová Jindra, Vranovičová Beáta, Boča Roman. - OXFORD : PERGAMON-ELSEVIER SCIENCE LTD, 2014. - ISSN 0277-5387. In: Polyhedron. - ISSN 0277-5387. - Vol. 70 (2014), p. 52-58.
	OCA12. Typ výstupu (ak nie je výstup registrovaný v CREPČ alebo CREUČ) / Type of the output (if the output is not registered in CRPA or CRAA) <i>Výber zo 67 možností (pozri Vysvetlivky k položke OCA12) / Choice from 67 options (see Explanations for OCA12).</i>	článok/ article
	OCA13. Hyperlink na stránku, na ktorej je výstup sprístupnený (úplný text, iná dokumentácia a podobne) / Hyperlink to the webpage where the output is available (full text, other documentation, etc.)	
	OCA14. Charakteristika autorského vkladu / Characteristics of the author's contribution	5%

<p>Charakteristika výstupu, ktorý nie je registrovaný</p>	<p>OCA15. Anotácia výstupu s kontextovými informáciami týkajúcimi sa opisu tvorivého procesu a obsahu tvorivej činnosti a pod. / Annotation of the output with contextual information concerning the description of creative process and the content of the research/artistic/other activity, etc. ⁸</p> <p><i>Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak</i></p> <p><i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>	<p>Tetradendátový ligand Schiffovej bázy N-2-hydroxy-3-metoxibenaldehid-α-amino-izobutyrate (H23-MeOSAIB) bol komplexovaný s meďou (II), čím vznikol tetranukleárny komplex [Cu₄(3-MeOSAIB)₄]. Magnetické údaje sa rekonštruujú pomocou dvoch výmenných väzbových konštánt. Štvornásobný otvorený uhol Cu1 – O1 – Cu2 ($\alpha = 114^\circ$) umožňuje silnú antiferomagnetickú väzbu, ktorá konkuruje feromagnetickým interakciám vyskytujúcim sa štyrikrát cez cestu Cu1 – O2 – Cu2 ($\alpha^* = 88^\circ$); výsledná väzbová konštanta je $J_4 / hc = -80,5 \text{ cm}^{-1} (4 \times)$. Druhá výmenná väzbová konštanta, ktorá sa vyskytuje dvakrát, je $J_2 / hc = +6,2 \text{ cm}^{-1} (2 \times)$ v dôsledku slabšej feromagnetkej interakcie cez mosty Cu1 – O1 – Cu1 a Cu2 – O2 – Cu2 ($\beta_1 = 92^\circ$ a $\beta_2 = 94^\circ$). Analýza dostupných experimentálnych údajov odhaľuje transparentnú magnetostrukturálnu koreláciu J_2 verzus β (stredná hodnota) podľa priamky so záporným sklonom; J_4 slabo koreluje s uhlom α. Na odhalenie latentných magnetostrukturálnych korelácií bola použitá hĺbková chemometrická analýza.</p>
<p>OCA16. Anotácia výstupu v anglickom jazyku / Annotation of the output in English ⁹</p> <p><i>Rozsah do 200 slov / Range up to 200 words</i></p>	<p>OCA16. Anotácia výstupu v anglickom jazyku / Annotation of the output in English ⁹</p> <p><i>Rozsah do 200 slov / Range up to 200 words</i></p>	<p>The tetradendate Schiff base ligand N-2-hydroxy-3-methoxybenzaldehyde-α-amino-iso-butyrate (H23-MeOSAIB) has been complexed with copper(II) giving rise to a tetranuclear complex [Cu₄(3-MeOSAIB)₄]\cdotH₂O with cubane structure classified, according to the number of Cu\cdotsCu contacts and bridging angles Cu–O–Cu, as 4+2 (type II) cubane. Magnetic data is reconstructed with two exchange coupling constants. The open angle Cu1–O1–Cu2 ($\alpha = 114^\circ$) existing four times facilitates a strong antiferromagnetic coupling that is in competition with ferromagnetic interactions through the path Cu1–O2–Cu2 ($\alpha^* = 88^\circ$) occurring four times; the resulting coupling constant is $J_4/hc = -80.5 \text{ cm}^{-1} (4x)$. The second exchange coupling constant occurring twice is $J_2/hc = +6.2 \text{ cm}^{-1} (2x)$ as a result of weak ferromagnetic interaction via bridges Cu1–O1–Cu1 and Cu2–O2–Cu2 ($\beta_1 = 92$ and $\beta_2 = 94^\circ$). The analysis of available experimental data reveals a transparent magnetostructural correlation of J_2 versus β (mean value), according to a straight line with negative slope; J_4 weakly correlates with the angle α. A deep chemometric analysis has been applied in order to unhide latent magnetostructural correlations.</p>
<p>OCA17. Zoznam najviac 5 najvýznamnejších ohlasov na výstup / List of maximum 5 most significant citations corresponding to the output</p> <p><i>Rozsah do 200 slov / Range up to 200 words</i></p>	<p>OCA17. Zoznam najviac 5 najvýznamnejších ohlasov na výstup / List of maximum 5 most significant citations corresponding to the output</p> <p><i>Rozsah do 200 slov / Range up to 200 words</i></p>	<p>1. Patel S.K., Patel R.N., Singh Y., Singh Y.P., Kumhar D., Jadeja R.N., Roy H., Patel A.K., Patel N., Banerjee A., Choquesillo-Lazarte D., Gutierrez A. Three new tetranuclear phenoxy-bridged metal(II) complexes: Synthesis, structural variation, cryomagnetic properties, DFT study and antiproliferative properties Polyhedron, Volume 161, 2019</p> <p>2. Tian L., Yao Y., Wang Y., Liu J. Synthesis, structure and property of diorganotin complexes with chiral N-(5-chlorosalicylidene)valinate ligand Journal of Molecular Structure, Volume 1156, 2018</p> <p>3. Emami M., Noshiranzadeh N., Bikas R., Gutierrez A., Kozakiewicz A. Synthesis, crystal structure and magnetic studies of linear and cubane-type tetranuclear Cu(II) complexes obtained by stoichiometric control of the reagents Polyhedron, Volume 122, 2017</p>
<p>OCA18. Charakteristika dopadu výstupu na spoločensko-hospodársku prax / Characteristics of the output's impact on socio-economic practice</p> <p><i>Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak</i></p> <p><i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>	<p>OCA18. Charakteristika dopadu výstupu na spoločensko-hospodársku prax / Characteristics of the output's impact on socio-economic practice</p> <p><i>Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak</i></p> <p><i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>	<p>Tetradendátový ligand Schiffovej bázy N-2-hydroxy-3-metoxibenaldehid-α-amino-izobutyrate (H23-MeOSAIB) bol komplexovaný s meďou (II), čím vznikol tetranukleárny komplex [Cu₄(3-MeOSAIB)₄]. Magnetické údaje sa rekonštruujú pomocou dvoch výmenných väzbových konštánt. Štvornásobný otvorený uhol Cu1 – O1 – Cu2 ($\alpha = 114^\circ$) umožňuje silnú antiferomagnetickú väzbu, ktorá konkuruje feromagnetickým interakciám vyskytujúcim sa štyrikrát cez cestu Cu1 – O2 – Cu2 ($\alpha^* = 88^\circ$); výsledná väzbová konštanta je $J_4 / hc = -80,5 \text{ cm}^{-1} (4 \times)$. Druhá výmenná väzbová konštanta, ktorá sa vyskytuje dvakrát, je $J_2 / hc = +6,2 \text{ cm}^{-1} (2 \times)$ v dôsledku slabšej feromagnetkej interakcie cez mosty Cu1 – O1 – Cu1 a Cu2 – O2 – Cu2 ($\beta_1 = 92^\circ$ a $\beta_2 = 94^\circ$). Analýza dostupných experimentálnych údajov odhaľuje transparentnú magnetostrukturálnu koreláciu J_2 verzus β (stredná hodnota) podľa priamky so záporným sklonom; J_4 slabo koreluje s uhlom α. Na odhalenie latentných magnetostrukturálnych korelácií bola použitá hĺbková chemometrická analýza. Všetky výsledky majú exaktný dopad na ďalšie smerovanie vedy v danej oblasti a tým aj na hospodársku prax.</p>

OCA19. Charakteristika dopadu výstupu a súvisiacich aktivít na vzdelávací proces / Characteristics of the output and related activities' impact on the educational process

Rozsah do 200 slov v slovenskom jazyku / Range up to 200 words in Slovak
Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English

V práci sa využívajú nové poznatky (vedecké aj metodické), ktoré je možné uplatniť v chemických odboroch. Tieto výsledky buď priamo alebo nepriamo súvisia a prinášajú aj nové poznatky využiteľné pri výučbe predmetov napr. analytická chémia, aplikovaná chémia, laboratórne cvičenia z analytickej chémie a pod. Tieto výsledky môžu slúžiť ako základ záverečných prác študentov, ale ich metodiky môžu byť využité aj pri tvorbe cvičení pre uvedené predmety.