

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	Titiš	
OCA2. Meno hodnotenej osoby / Name awarded to the assessed person ²	Ján	
OCA3. Tituly hodnotenej osoby / Degrees awarded to the assessed person ²	prof. 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/14383	
OCA5. Oblasť posudzovania / Area of assessment ⁴	Chémia, 1. stupeň; Aplikovaná chémia, 2. stupeň; Aplikovaná analytická a bioanalytická chémia, 3. stupeň/ Chemistry, 1st; Applied chemistry, 2nd; Applied Analytical and Bioanalytical Chemistry, 3rd	
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</i>	vedecký výstup / scientific output	
OCA7. Rok vydania výstupu tvorivej činnosti / Year of publication of the research/artistic/other output	2010	
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.PC007344	
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=137999&pageId=resultform&full=0	
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://ucm.dawinci.sk/?fn=*review&uid=32888&pageId=resultform&full=0&focusName=bsktchRZ7
	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 D Correlation in Nickel(II) Complexes: Reinvestigation of the Zero-Field Splitting / Titiš Ján, Boča Roman, 2010. In: Inorganic Chemistry. - ISSN 0020-1669. - 49 (2010), s. 3971-3973.
	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://pubs.acs.org/doi/10.1021/ic902569z
	OCA14. Charakteristika autorského vkladu / Characteristics of the author's contribution	autor / author (90 %)

<p>Charakteristika výstupu, ktorý nie je</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>Bola pripravená a detailne študovaná séria hexakoordinovaných komplexov Ni(II), pre ktoré sa vykonali magnetochemické merania a určila sa ich kryštalová štruktúra. Získané experimentálne údaje sa analyzovali pokročilými teoretickými metódami za účelom definície magnetoštruktúrnych D korelácií. Magnetoštruktúrna D korelácia dáva do vzájomného vzťahu parameter štiepenia v nulovom poli D získaný z magnetochemických meraní so štruktúrnym parametrom tetragonality Dstr. Táto korelácia umožňuje kvantitatívne predikovať magnetickú anizotropiu v komplexoch Ni(II), t. j. že $D < 0$ sa vyskytuje v tetragonálne stlačených štruktúrach. Poznatok sa využíva pri racionálnom dizajne magneticky anizotropných molekúl (jednomolekulové a jednoiónové magnety) s potenciálom ich využitia v mikroelektronike.</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>A series of hexacoordinated Ni (II) complexes were prepared and studied in detail, for which magnetochemical measurements were performed and their crystal structure was determined. The obtained experimental data were analyzed by advanced theoretical methods in order to define magnetostructural D correlations. The magnetostructural D correlation interrelates the zero-field-splitting parameter D withdrawn from the magnetic data with the structural tetragonality parameter Dstr. This correlation allows the quantitative prediction that $D < 0$ occurs for the tetragonally compressed nickel(II) complexes. This finding is used in the rational design of magnetically anisotropic molecules (single-molecule and single-ion magnets) with the potential for their use in microelectronics.</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. Wojnar, M.K., Laorenza, D.W., Schaller, R.D., Freedman, D.E. Nickel(II) metal complexes as optically addressable qubit candidates (2020) Journal of the American Chemical Society, 142 (35), pp. 14826-14830.</p> <p>2. Manson, J.L., Brambleby, J., Goddard, P.A., Spurgeon, P.M., Villa, J.A., Liu, J., Ghannadzadeh, S., Foronda, F., Singleton, J., Lancaster, T., Clark, S.J., Thomas, I.O., Xiao, F., Williams, R.C., Pratt, F.L., Blundell, S.J., Topping, C.V., Baines, C., Campana, C., Noll, B. Implications of bond disorder in a S=1 kagome lattice (2018) Scientific Reports, 8 (1), art. no. 4745.</p> <p>3. Maurice, R., Broer, R., Guihéry, N., de Graaf, C. Zero-field splitting in transition metal complexes: Ab initio calculations, effective hamiltonians, model hamiltonians, and crystal-field models (2016) Handbook of Relativistic Quantum Chemistry, pp. 765-796.</p> <p>4. Chorazy, S., Podgajny, R., Majcher, A.M., Nitek, W., Rams, M., Suturina, E.A., Ungur, L., Chibotaru, L.F., Sieklucka, B. Magnetic anisotropy of Coll-WV ferromagnet: Single crystal and ab initio study (2013) CrystEngComm, 15 (13), pp. 2378-2385.</p> <p>5. Maganas, D., Krzystek, J., Ferentinos, E., Whyte, A.M., Robertson, N., Psycharis, V., Terzis, A., Neese, F., Kyritsis, P. Investigating magnetostructural correlations in the pseudooctahedral trans - [NiII(OPPh2)(EPPH2)N]2(sol) 2] Complexes (E = S, Se; Sol = DMF, THF) by magnetometry, HFEPFR, and ab initio quantum chemistry (2012) Inorganic Chemistry, 51 (13), pp. 7218-7231.</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>Základný výskum, bez priameho dopadu na spoločensko-hospodársku prax. Vedecký článok je zaradený v najprestížnejšej vedeckej výberovej databáze Nature Index. / Basic research, without direct impact on socio-economic practice. The scientific article is included in the most prestigious scientific selection database Nature Index.</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> <i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>	<p>Poznatky, ktoré výstup prináša, ako aj metodika výskumu, ktorú využíva priamo súvisia s kvalitou záverečných prác, predovšetkým diplomových, rigorózných a dizertačných, keďže študenti sa v rámci riešenia práce priamo podieľajú na výskumnej činnosti tohto typu. Zároveň majú výsledky dopad aj do ďalších oblastí vzdelávacej činnosti, konkrétne do oblasti kvality výuky predmetov ako: všeobecná chémia, fyzikálna chémia, chemická väzba a chemická štruktúra, atómová a molekulová spektroskopia a počítačové modelovanie molekúl. / The findings, as well as the research methodology used, are directly related to the quality of final theses, especially diploma, rigorous and dissertation theses, as students are directly involved in research activities of this type. At the same time, the results have an impact on other areas of educational activity, specifically on the quality of subjects such as: general chemistry, physical chemistry, chemical bonding and chemical structure, atomic and molecular spectroscopy and computer modeling of molecules.</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	Titiš	
OCA2. Meno hodnotenej osoby / Name awarded to the assessed person ²	Ján	
OCA3. Tituly hodnotenej osoby / Degrees awarded to the assessed person ²	prof. 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/14383	
OCA5. Oblasť posudzovania / Area of assessment ⁴	Chémia, 1. stupeň; Aplikovaná chémia, 2. stupeň; Aplikovaná analytická a bioanalytická chémia, 3. stupeň/ Chemistry, 1st; Applied chemistry, 2nd; Applied Analytical and Bioanalytical Chemistry, 3rd	
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</i>	vedecký výstup / scientific output	
OCA7. Rok vydania výstupu tvorivej činnosti / Year of publication of the research/artistic/other output	2011	
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.PC011286	
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=402259&pageId=resultform&full=0	
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://ucm.dawinci.sk/?fn=*review&uid=42043&pageId=resultform&full=0&focusName=bsktchRZ8
	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 D Correlations in Hexacoordinated Cobalt(II) Complexes / Titiš Ján, Boča Roman, 2011. In: Inorganic Chemistry. - ISSN 0020-1669. - 50 (2011), s. 11838-11845.
	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://pubs.acs.org/doi/10.1021/ic202108j
	OCA14. Charakteristika autorského vkladu / Characteristics of the author's contribution	autor / author (90 %)

<p>Charakteristika výstupu, ktorý nie je reš</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>Bola definovaná magnetoštruktúrálna D korelácia pre hexakoordinované komplexy Co(II). Štruktúrálna a magnetické vlastnosti série jednojadrových komplexov so zložením [CoII(L)6]X2, [CoII(L)2X2] a [CoII(L)2(H2O)2(auto) 2] boli detailne študované. Chromofóry týchto zlúčenín sú typu {CoN6}, {CoO6}, {CoO4O'2}, {CoN2O2O'2} a {CoN2O2Cl2}. Magnetické vlastnosti boli merané SQUID magnetometrom v teplotnom intervale 2 – 300 K. Analýza experimentálnych dát potvrdila prítomnosť štiepenia v nulovom poli vo väčšine komplexov. Pre komplex [Co(H2O)6](6-OHnc)2 sa potvrdila prítomnosť orbitálneho momentu hybnosti v základnom stave. Získané hodnoty magnetickej anizotropie (D alebo δ) boli korelované so štruktúrnymi údajmi. Korelácia bola teoreticky interpretovaná pomocou pokročilej teórie kryštálového poľa.</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 magnetostructural D correlation for hexacoordinated cobalt(II) complexes is outlined. The structural and magnetic properties of a series of mononuclear cobalt(II) complexes with the general formulas [CoII(L)6]X2, [CoII(L)2X2], and [CoII(L)2(H2O)2(car)2] have been investigated where the coordination sphere is formed by nitrogen/oxygen-donor heterocycle (L), carboxylato (car), aqua, and chlorido ligands. The chromophores of these compounds involve {CoN6}, {CoO6}, {CoO4O'2}, {CoN2O2O'2}, and {CoN2O2Cl2}. All complexes were subjected to magnetochemical investigation down to 2 K (SQUID susceptibility and magnetization measurements). Most of the studied complexes show magnetic behavior typical for zero-field-splitting systems. The magnetism of the complex [Co(H2O)6](6-OHnc)2 reflects the presence of the magnetic angular momentum in the ground-state crystal-field term. The obtained values of the magnetic anisotropy (D or δ) have been correlated with the structural distortion of the coordination polyhedron. This correlation can be understood with the help of crystal-field theory, where the magnetic anisotropy parameters are related to the splitting of the lowest crystal-field multiplets.</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. Tanuhadi, E., Al-Sayed, E., Novitchi, G., Roller, A., Giester, G., Rompel, A. Cation-Directed Synthetic Strategy Using 4f Tungstoantimonates as Nonlacunary Precursors for the Generation of 3d-4f Clusters (2020) Inorganic Chemistry, 59 (12), pp. 8461-8467.</p> <p>2. Ferentinos, E., Xu, M., Grigoropoulos, A., Bratsos, I., Raptopoulou, C.P., Psycharis, V., Jiang, S.-D., Kyritsis, P. Field-induced slow relaxation of magnetization in the: S = 3/2 octahedral complexes trans-[Co{(OPPh2)(EPPH2)N}2(dmf)2], e = S, Se: Effects of Co-Se vs. Co-S coordination (2019) Inorganic Chemistry Frontiers, 6 (6), pp. 1405-1414.</p> <p>3. Bar, A.K., Pichon, C., Sutter, J.-P. Magnetic anisotropy in two- to eight-coordinated transition-metal complexes: Recent developments in molecular magnetism (2016) Coordination Chemistry Reviews, 308, pp. 346-380.</p> <p>4. Maurice, R., Broer, R., Guihéry, N., de Graaf, C. Zero-field splitting in transition metal complexes: Ab initio calculations, effective hamiltonians, model hamiltonians, and crystal-field models (2016) Handbook of Relativistic Quantum Chemistry, pp. 765-796.</p> <p>5. Wu, D., Zhang, X., Huang, P., Huang, W., Ruan, M., Ouyang, Z.W. Tuning transverse anisotropy in CoIII-CoII-Co III mixed-valence complex toward slow magnetic relaxation (2013) Inorganic Chemistry, 52 (19), pp. 10976-10982.</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>Základný výskum, bez priameho dopadu na spoločensko-hospodársku prax. Vedecký článok je zaradený v najprestížnejšej vedeckej výberovej databáze Nature Index. / Basic research, without direct impact on socio-economic practice. The scientific article is included in the most prestigious scientific selection database Nature Index.</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

Poznatky, ktoré výstup prináša, ako aj metodika výskumu, ktorú využíva priamo súvisia s kvalitou záverečných prác, predovšetkým diplomových, rigorózných a dizertačných, keďže študenti sa v rámci riešenia práce priamo podieľajú na výskumnej činnosti tohto typu. Zároveň majú výsledky dopad aj do ďalších oblastí vzdelávacej činnosti, konkrétne do oblasti kvality výuky predmetov ako: všeobecná chémia, fyzikálna chémia, chemická väzba a chemická štruktúra, atómová a molekulová spektroskopia a počítačové modelovanie molekúl. / The findings, as well as the research methodology used, are directly related to the quality of final theses, especially diploma, rigorous and dissertation theses, as students are directly involved in research activities of this type. At the same time, the results have an impact on other areas of educational activity, specifically on the quality of subjects such as: general chemistry, physical chemistry, chemical bonding and chemical structure, atomic and molecular spectroscopy and computer modeling of molecules.

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	Titiš	
OCA2. Meno hodnotenej osoby / Name awarded to the assessed person ²	Ján	
OCA3. Tituly hodnotenej osoby / Degrees awarded to the assessed person ²	prof. 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/14383	
OCA5. Oblasť posudzovania / Area of assessment ⁴	Chémia, 1. stupeň; Aplikovaná chémia, 2. stupeň; Aplikovaná analytická a bioanalytická chémia, 3. stupeň/ Chemistry, 1st; Applied chemistry, 2nd; Applied Analytical and Bioanalytical Chemistry, 3rd	
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</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: UCM.Trnava.PC016382	
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=1352863&pageId=resultform&full=0	
:orý 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	https://ucm.dawinci.sk/?fn=*review&uid=55261&pageId=resultform&full=0&focusName=bsktchR22
	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 : Simple mononuclear cobalt(II) complex: a single-molecule magnet showing two slow relaxation processes / Boča Roman, Miklovič Jozef, Titiš Ján, 2014. In: Inorganic Chemistry. - ISSN 0020-1669. - Roč. 53 (2014), s. 2367-2369.
	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://pubs.acs.org/doi/10.1021/ic5000638
	OCA14. Charakteristika autorského vkladu / Characteristics of the author's contribution	spoluautor / co-author (25 %)

<p>Charakteristika výstupu, kt</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>Pokročilými experimentálnymi a teoretickými metódami magnetochémie sa zistilo, že komplex [Co(PPh₃)₂Br₂] má výraznú zápornú hodnotu parametra ZFS, $D/hc = -13 \text{ cm}^{-1}$. Vykazuje superparamagnetické správanie v neprítomnosti magnetického poľa, ako aj v poliach $B_{dc} = 0,05, 0,1, 0,15$ a $0,2 \text{ T}$. Pri $B_{dc} = 0,1 \text{ T}$ je energetická bariéra otočenia spinu $U/kB = 37 \text{ K}$ a extrapolovaný relaxačný čas $\tau_0 = 9,4 \times 10^{-11}$, čo umožňuje klasifikovať látku ako jednomolekulový magnet. Pri $B_{dc} = 0,2 \text{ T}$ sa pozorovali dva relaxačné procesy.</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>Complex [Co(PPh₃)₂Br₂] possesses intermediate magnetic anisotropy, $D/hc = -13 \text{ cm}^{-1}$. It displays superparamagnetic behavior either in the absence of the magnetic field or in fields of $B_{dc} = 0.05, 0.1, 0.15$, and 0.2 T. At $B_{dc} = 0.1 \text{ T}$, the barrier to spin reversal $U/kB = 37 \text{ K}$ and the extrapolated relaxation time $\tau_0 = 9.4 \times 10^{-11} \text{ s}$ confirm its classification as a single-molecule magnet. At $B_{dc} = 0.2 \text{ T}$, two relaxation processes are evidenced.</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. Yao, B., Singh, M.K., Deng, Y.-F., Wang, Y.-N., Dunbar, K.R., Zhang, Y.-Z. Trigonal Prismatic Cobalt(II) Single-Ion Magnets: Manipulating the Magnetic Relaxation through Symmetry Control (2020) Inorganic Chemistry, 59 (12), pp. 8505-8513.</p> <p>2. Ho, L.T.A., Chibotaru, L.F. Intermolecular mechanism for multiple maxima in molecular dynamic susceptibility (2018) Physical Review B, 98 (17), art. no. 174418.</p> <p>3. Ferrando-Soria, J., Vallejo, J., Castellano, M., Martínez-Lillo, J., Pardo, E., Cano, J., Castro, I., Lloret, F., Ruiz-García, R., Julve, M. Molecular magnetism, quo vadis? A historical perspective from a coordination chemist viewpoint (2017) Coordination Chemistry Reviews, 339, pp. 17-103.</p> <p>4. Xiang, J., Liu, J.-J., Chen, X.-X., Jia, L.-H., Yu, F., Wang, B.-W., Gao, S., Lau, T.-C. Slow magnetic relaxation in a mononuclear 8-coordinate Fe(II) complex (2017) Chemical Communications, 53 (9), pp. 1474-1477.</p> <p>5. Woods, T.J., Ballesteros-Rivas, M.F., Gómez-Coca, S., Ruiz, E., Dunbar, K.R. Relaxation Dynamics of Identical Trigonal Bipyramidal Cobalt Molecules with Different Local Symmetries and Packing Arrangements: Magnetostructural Correlations and ab initio Calculations (2016) Journal of the American Chemical Society, 138 (50), pp. 16407-16416.</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>Základný výskum, bez priameho dopadu na spoločensko-hospodársku prax. Vedecký článok je zaradený v najprestížnejšej vedeckej výberovej databáze Nature Index. / Basic research, without direct impact on socio-economic practice. The scientific article is included in the most prestigious scientific selection database Nature Index.</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>Poznatky, ktoré výstup prináša, ako aj metodika výskumu, ktorú využíva priamo súvisia s kvalitou záverečných prác, predovšetkým diplomových, rigorózných a dizertačných, keďže študenti sa v rámci riešenia práce priamo podieľajú na výskumnej činnosti tohto typu. Zároveň majú výsledky dopad aj do ďalších oblastí vzdelávacej činnosti, konkrétne do oblasti kvality výuky predmetov ako: všeobecná chémia, fyzikálna chémia, chemická väzba a chemická štruktúra, atómová a molekulová spektroskopia a počítačové modelovanie molekúl. / The findings, as well as the research methodology used, are directly related to the quality of final theses, especially diploma, rigorous and dissertation theses, as students are directly involved in research activities of this type. At the same time, the results have an impact on other areas of educational activity, specifically on the quality of subjects such as: general chemistry, physical chemistry, chemical bonding and chemical structure, atomic and molecular spectroscopy and computer modeling of molecules.</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	Titiš	
OCA2. Meno hodnotenej osoby / Name awarded to the assessed person ²	Ján	
OCA3. Tituly hodnotenej osoby / Degrees awarded to the assessed person ²	prof. 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/14383	
OCA5. Oblasť posudzovania / Area of assessment ⁴	Chémia, 1. stupeň; Aplikovaná chémia, 2. stupeň; Aplikovaná analytická a bioanalytická chémia, 3. stupeň/ Chemistry, 1st; Applied chemistry, 2nd; Applied Analytical and Bioanalytical Chemistry, 3rd	
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</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 = 75361	
OCA9. Hyperlink na záznam v CREPČ alebo CREUČ / Hyperlink to the record in CRPA or CRAA ⁶	https://app.crepc.sk/?fn=detailBiblioFormChildK2PV1&sid=717506A4B21BEA6645FADC02&seo=CREP%C4%8C-detail-%C4%8C%C3%A1nok	
OCA10-14: výstupy, ktoré nie sú registrované 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://ucm.dawinci.sk/?fn=*review&uid=99278&pageId=resultform&full=0&focusName=bsktchRZ3
	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	Titiš, J., Rajnák, C., Valigura, D., Boča, R. Field influence on the slow magnetic relaxation of nickel-based single ion magnets (2018) Dalton Transactions, 47 (24), pp. 7879-7882.
	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://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2018/dt/c8dt01445k
	OCA14. Charakteristika autorského vkladu / Characteristics of the author's contribution	autor / author (20 %)

<p>Charakteristika výstupu, kt</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>Bol pripravený a skúmaný jednojadrový komplex Ni(II), [Ni(pydc)(dmpy)]·H₂O, pre ktorý sa určila kryštálová štruktúra. Boli charakterizované kľúčové vlastnosti zluččeniny použitím spektrálnych a magnetochemických metód. Zistila sa pomalá magnetická relaxácia v aplikovanom magnetickom poli s dvomi až tromi relaxačnými kanálmi. Využitím moderných metód kvantovej chémie sa charakterizovala elektrónová štruktúra, vypočítali sa magnetické parametre a skúmal sa vplyv štruktúrnych detailov na magnetizmus.</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>A mononuclear Ni(II) complex, [Ni(pydc)(dmpy)]·H₂O, pyridine-2,6-dicarboxylato-2,6-dimethanolpyridine nickel(II) monohydrate, exhibits a slow magnetic relaxation under an applied magnetic field with two and/or three relaxation channels. While at BDC = 0.2 T, the low-frequency relaxation mode is weakly developed, its intensity grows rapidly with the field so that at BDC = 0.6 T, this is the dominating relaxation path giving rise to a relaxation time of τ_{LF} = 322 ms at T = 2.0 K. At BDC = 1.2 T the relaxation time is as slow as τ_{LF} = 876 ms.</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. Manson, J.L., Curley, S.P.M., Williams, R.C., Walker, D., Goddard, P.A., Ozarowski, A., Johnson, R.D., Vibhakar, A.M., Villa, D.Y., Rhodehouse, M.L., Birnbaum, S.M., Singleton, J. Controlling Magnetic Anisotropy in a Zero-Dimensional S = 1 Magnet Using Isotropic Cation Substitution (2021) Journal of the American Chemical Society, 143 (12), pp. 4633-4638.</p> <p>2. Tupolova, Y.P., Shcherbakov, I.N., Korchagin, D.V., Tkachev, V.V., Lebedev, V.E., Popov, L.D., Zakharov, K.V., Vasiliev, A.N., Pali, A.V., Aldoshin, S.M. Fine-Tuning of Uniaxial Anisotropy and Slow Relaxation of Magnetization in the Hexacoordinate Co(II) Complexes with Acidoligands (2020) Journal of Physical Chemistry C, 124 (47), pp. 25957-25966.</p> <p>3. Bhowmick, I., Shaffer, D.W., Shaffer, D.W., Yang, J.Y., Shores, M.P. Single molecule magnet behaviour in a square planar: S = 1/2 Co(II) complex and spin-state assignment of multiple relaxation modes (2020) Chemical Communications, 56 (49), pp. 6711-6714.</p> <p>4. Mondal, A., Wu, S.-Q., Sato, O., Konar, S. Effect of Axial Ligands on Easy-Axis Anisotropy and Field-Induced Slow Magnetic Relaxation in Heptacoordinated FeII Complexes (2020) Chemistry - A European Journal, 26 (21), pp. 4780-4789.</p> <p>5. Chen, L., Zhao, W., Yi, G., Zhou, J., Yuan, A. Single-Ion Magnets Based on 3d Transition Metal (2019) Progress in Chemistry, 31 (2-3), pp. 337-350.</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>Základný výskum, bez priameho dopadu na spoločensko-hospodársku prax. / Basic research, without direct impact on socio-economic practice.</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> <i>Rozsah do 200 slov v anglickom jazyku / Range up to 200 words in English</i></p>		<p>Poznatky, ktoré výstup prináša, ako aj metodika výskumu, ktorú využíva priamo súvisia s kvalitou záverečných prác, predovšetkým diplomových, rigorózných a dizertačných, keďže študenti sa v rámci riešenia práce priamo podieľajú na výskumnej činnosti tohto typu. Zároveň majú výsledky dopad aj do ďalších oblastí vzdelávacej činnosti, konkrétne do oblasti kvality výuky predmetov ako: všeobecná chémia, fyzikálna chémia, chemická väzba a chemická štruktúra, atómová a molekulová spektroskopia a počítačové modelovanie molekúl. / The findings, as well as the research methodology used, are directly related to the quality of final theses, especially diploma, rigorous and dissertation theses, as students are directly involved in research activities of this type. At the same time, the results have an impact on other areas of educational activity, specifically on the quality of subjects such as: general chemistry, physical chemistry, chemical bonding and chemical structure, atomic and molecular spectroscopy and computer modeling of molecules.</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	Titiš	
OCA2. Meno hodnotenej osoby / Name awarded to the assessed person ²	Ján	
OCA3. Tituly hodnotenej osoby / Degrees awarded to the assessed person ²	prof. 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/14383	
OCA5. Oblasť posudzovania / Area of assessment ⁴	Chémia, 1. stupeň; Aplikovaná chémia, 2. stupeň; Aplikovaná analytická a bioanalytická chémia, 3. stupeň/ Chemistry, 1st; Applied chemistry, 2nd; Applied Analytical and Bioanalytical Chemistry, 3rd	
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</i>	vedecký výstup / scientific output	
OCA7. Rok vydania výstupu tvorivej činnosti / Year of publication of the research/artistic/other output	2019	
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 = 109387	
OCA9. Hyperlink na záznam v CREPČ alebo CREUČ / Hyperlink to the record in CRPA or CRAA ⁶	https://app.crep.sk/?fn=detailBiblioFormChildC4CJL&sid=8D39D4BB5D14C9C02145EED6A3&seo=CREP%C4%8C-detail-%C4%8C%C3%A1nok	
OCA10-14: 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	https://ucm.dawinci.sk/?fn=*review&uid=108969&pageId=resultform&full=0&cusName=bsktchrZ1
	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	Dey, B., Roy, S., Titiš, J., Boča, R., Bera, S.P., Mondal, A., Konar, S. Above Room Temperature Spin Transition in Thermally Stable Mononuclear Fe(III) Complexes (2019) Inorganic Chemistry, 58 (2), pp. 1134-1146.
	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://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.inorgchem.8b02405
	OCA14. Charakteristika autorského vkladu / Characteristics of the author's contribution	spoluautor / co-author (10 %)

<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>Jednojadrové komplexy Fe(III) komplexu boli syntetizované použitím nového π-konjugovaného azo-fenyl substituovaného ligandu, 2-((E)-((2-(ethylamino)etyl)imino)metyl)-4-(2-fenyldiazenyl)fenol (HL). Zistilo sa, že nekoordinované časti ligandu zaujímajú rôzne konformácie, ktoré výrazne ovplyvňujú magnetické správanie komplexu za účasti tzv. spinového kríženia. Magnetické, ako aj spektroskopické merania ukázali, že komplex 1 vykazuje spinový prechod nad izbovou teplotou, zatiaľ čo komplex 2 vykazuje neúplný spinový prechod. Spinový prechod bol charakterizovaný aj diferenciálnou skenovacou kalorimetriou a elektrónovou paramagnetickou rezonanciou. Oba komplexy navyše prejavujú vysokú termickú stabilitu vďaka silným medzimolekulovým interakciám. Magnetické údaje boli analyzované použitím Isingovho modelu. Ab initio výpočty poskytli energie základného stavu a excitovaných stavov.</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>Two solvent-free mononuclear Fe(III) complexes have been synthesized by employing a new π-conjugated azo-phenyl substituted ligand, 2-((E)-((2-(ethylamino)ethyl)imino)methyl)-4-(2-phenyldiazenyl)phenol (HL). The noncoordinated azo-phenyl part of the ligand adopts two different conformations which can exert a varied local distortion around the metal center affecting the spin crossover behavior. The magnetic data reveal that complex 1 displays spin crossover above room temperature where the ligand is in linear form, while complex 2 shows an incomplete spin transition where the ligand adopts a skew form in the solid state. These complexes represent rare examples of high-temperature spin transition for mononuclear Fe(III) complexes with $T_{1/2} > 350$ K with very high thermal stability. Presence of strong intermolecular interactions and solvent-free nature of the complexes leads to exceptional thermal stability up to 485 K (for 1) and 496 K (for 2) as revealed by thermogravimetric analysis. The magnetic data for complex 1 have been analyzed by employing an Ising-like model with vibrations yielding the enthalpy change ΔH and entropy change ΔS of the spin transition along with the critical temperature $T_{1/2}$ and the solid-state cooperativeness Δ. Spin crossover behavior of complex 1 has also been characterized by differential scanning calorimetry and electron paramagnetic resonance measurements. Ab initio calculations have been performed to analyze the difference in energies of the ground state and excited states of the complexes.</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>		<ol style="list-style-type: none"> Ouyang, Z.-J., Mo, X.-Y., Ye, J.-Q., Yu, X.-X., Huang, S.-Y., Liu, X.-L., Chen, W.-B., Gao, S., Dong, W. High temperature anionic Fe(III) spin crossover behavior in a mixed-valence Fe(II)/Fe(III) complex (2021) Dalton Transactions, 50 (17), pp. 5960-5967. Ishikawa, R., Noda, T., Ueno, S., Okubo, T., Yamakawa, H., Sakamoto, K.-I., Kawata, S. Spin crossover in bipyridine derivative bridged one-dimensional iron(III) coordination polymer (2020) Magnetochemistry, 6 (3), art. no. 29, pp. 1-14. Al-Azzani, M.A., Al-Mjeni, F., Mitsuhashi, R., Mikuriya, M., Al-Omari, I.A., Robertson, C.C., Bill, E., Shongwe, M.S. Unusual Magneto-Structural Features of the Halo-Substituted Materials [Fe(III)(5-X-salMeen)2]Y: a Cooperative [HS-HS] \leftrightarrow [HS-LS] Spin Transition (2020) Chemistry - A European Journal, 26 (21), pp. 4766-4779. Ouyang, Z.-J., Mo, X.-Y., Yang, M., Zhong, L., Chen, W.-B., Gao, S., Dong, W. High temperature Fe(III) spin crossover behaviours in three unprecedented Fe(II)-M(II)-Fe(III) (M = Fe, Cd) linear trinuclear complexes (2020) Inorganic Chemistry Frontiers, 7 (7), pp. 1526-1531. Chervonova, U.V., Gruzdev, M.S., Zueva, E.M., Vorobeva, V.E., Ksenofontov, A.A., Alexandrov, A.I., Pashkova, T.V., Kolker, A.M. Synthesis, EPR study and photophysical properties of a mononuclear Fe(III) Schiff base complex functionalized by 3,6-di-tert-butyl-carbazole moieties (2020) Journal of Molecular Structure, 1200, art. no. 127090.
<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>Základný výskum, bez priameho dopadu na spoločensko-hospodársku prax. Vedecký článok je zaradený v najprestížnejšej vedeckej výberovej databáze Nature Index. / Basic research, without direct impact on socio-economic practice. The scientific article is included in the most prestigious scientific selection database Nature Index.</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

Poznatky, ktoré výstup prináša, ako aj metodika výskumu, ktorú využíva priamo súvisia s kvalitou záverečných prác, predovšetkým diplomových, rigorózných a dizertačných, keďže študenti sa v rámci riešenia práce priamo podieľajú na výskumnej činnosti tohto typu. Zároveň majú výsledky dopad aj do ďalších oblastí vzdelávacej činnosti, konkrétne do oblasti kvality výuky predmetov ako: všeobecná chémia, fyzikálna chémia, chemická väzba a chemická štruktúra, atómová a molekulová spektroskopia a počítačové modelovanie molekúl. / The findings, as well as the research methodology used, are directly related to the quality of final theses, especially diploma, rigorous and dissertation theses, as students are directly involved in research activities of this type. At the same time, the results have an impact on other areas of educational activity, specifically on the quality of subjects such as: general chemistry, physical chemistry, chemical bonding and chemical structure, atomic and molecular spectroscopy and computer modeling of molecules.