

Riešiteľ	ŠULKOVÁ Katarína
Pozícia na projekte	Vedecko-výskumný pracovník
Vedecké identifikátory	WoS (Researcher ID): B-7799-2014, Scopus (AuthorID): 55604082400, ORCID:
Vedecké zameranie	počítačové modelovanie elektrónovej štruktúry molekúl a klastrov
Publikačná činnosť s ohlasmí (aktuálne k 31.10.2022)	
V2 Vedecký výstup publikačnej činnosti ako časť editovanej knihy alebo zborníka	
V2_01	ŠULKA, Martin - ŠULKOVÁ, Katarína. Properties of atomically precise nanoclusters. In <i>Bulletin vedeckých príspevkov : Bulletin vedeckých príspevkov z projektu Vedeckovýskumné centrum excelentnosti Slovákion pre materiálový a interdisciplinárny výskum</i> . 1. vyd. Bratislava : Spektrum, 2022, S. 64-67. ISBN 978-80-227-5220-6. Typ výstupu: príspevok; Výstup: domáci; Kategória publikácie do 2021: AED
V3 Vedecký výstup publikačnej činnosti z časopisu	
V3_01	LEPLAT, N. - FEDERIČ, J. - ŠULKOVÁ, Katarína - SUDOLSKÁ, M. - LOUIS, F. - ČERNUŠÁK, Ivan - ROSSI, M.J. The Kinetics of the Reaction C2H5 center dot + HI -> C2H6 + I-center dot over an Extended Temperature Range (213-623 K): Experiment and Modeling. In <i>Zeitschrift für Physikalische Chemie = International Journal of Research in Physical Chemistry and Chemical Physics</i> . Vol. 229, iss. 10-12 (2015), s. 1475-1501. ISSN 0942-9352 (2015: 1.183 - IF, Q4 - JCR Best Q, 0.440 - SJR, Q3 - SJR Best Q). V databáze: SCOPUS ; CC: CCC:000364609000002 ; WOS ; MLJ. Kategória publikácie do 2021: ADC Ohlasy: 1. [1] PAPP, Dóra - GRUBER, Balázs - CZAKÓ, Gábor. Detailed benchmark ab initio mapping of the potential energy surfaces of the X + C2H6 [X = F, Cl, Br, I] reactions. In <i>Physical Chemistry Chemical Physics</i> , 2019, 21, 1, pp. 396-408. ISSN 14639076., Registrované v: SCOPUS, WOS, CC Ohlas: zahraničný 2. [1] ESPINOSA-GARCIA, Joaquin - GARCIA-CHAMORRO, Moises - CORCHADO, Jose C. - BHOWMICK, Somnath - SULEIMANOV, Yury, V. VTST and RPMD kinetics study of the nine-body X + C2H6(X equivalent to H, Cl, F) reactions based on analytical potential energy surfaces. In <i>PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS</i> , 2020, vol. 22, no. 24, pp. 13790-13801. ISSN 1463-9076., Registrované v: WOS, CC, SCOPUS Ohlas: zahraničný
V3_02	ŠULKA, Martin - ŠULKOVÁ, Katarína - ANTUŠEK, Andrej. Exploring water adsorption and reactivity in a series of doped aluminum cluster anions. In <i>Physical Chemistry Chemical Physics</i> . Vol. 23, iss. 41 (2021), s. 896-908. ISSN 1463-9076 (2021: 3.945 - IF, Q1 - JCR Best Q, 0.899 - SJR, Q1 - SJR Best Q). V databáze: DOI: 10.1039/d1cp03104j ; SCOPUS: 2-s2.0-85118452282 ; WOS: 000707408500001 ; CC: 000711558600001. Typ výstupu: článok; Výstup: zahraničný; Kategória publikácie do 2021: ADC
V3_03	ŠULKOVÁ, Katarína - CANTREL, L. - LOUIS, F. Gas-phase reactivity of cesium-containing species by quantum chemistry. In <i>Journal of Physical Chemistry A</i> . Vol. 119, iss. 35 (2015), s. 9373-9384. ISSN 1089-5639 (P) (2015: 2.883 - IF, Q2 - JCR Best Q, 1.148 - SJR, Q1 - SJR Best Q). V databáze: CC ; SCOPUS ; WOS. Kategória publikácie do 2021: ADC Ohlasy: 1. [1] MIYAHARA, Naoya - MIWA, Shuhei - HORIGUCHI, Naoki - SATO, Isamu - MASAHIKO, Osaka. Chemical reaction kinetics dataset of Cs-I-B-Mo-O-H system for evaluation of fission product chemistry under LWR severe accident conditions. In <i>Journal of Nuclear Science and Technology</i> , 2019, 56, 2, pp. 228-240. ISSN 00223131., Registrované v: SCOPUS, WOS, CC Ohlas: zahraničný 2. [1] BOSLAND, Loïc - COLOMBANI, Juliette. Study of the radiolytic decomposition of CsI and CdI2 aerosols deposited on stainless steel, quartz and Epoxy painted surfaces. In <i>Annals of Nuclear Energy</i> , 2020, 141, p. ISSN 03064549., Registrované v: SCOPUS, WOS, CC Ohlas: zahraničný 3. [1] KOZÁKOVÁ, Silvia - ČERNUŠÁK, Ivan. Spectroscopic properties of diatomic molecules CdI and CsCd: ab initio calculations. In <i>Theoretical Chemistry Accounts</i> , 2020, 139, 8, pp. ISSN 1432881X., Registrované v: SCOPUS, WOS, CC Ohlas: zahraničný
I2 Iný výstup publikačnej činnosti ako časť publikácie alebo zborníka	
I2_01	ŠULKA, Martin - ŠULKOVÁ, Katarína - DUBECKÝ, Matúš. Assessing the accuracy of quantum Monte Carlo in hydrogen-bonded and strongly correlated systems. In <i>CESTC 2022 : 18th Central European Symposium on Theoretical Chemistry 2022, 7-10 September 2022, Balatonszárszó, Hungary</i> . 1. vyd. Budapešť : Hungarian Chemical Society, 2022, S. 90. ISBN 978-615-6018-10-6. Typ výstupu: časti, ktoré nemožno zaradiť do kategórie V, O, P, U alebo D; Výstup: zahraničný; Kategória publikácie do 2021: AFK
I2_02	ŠULKOVÁ, Katarína - ŠULKA, Martin - ANTUŠEK, Andrej. Exploring water adsorption and reactivity in a series of doped aluminum cluster anions. In <i>CESTC 2022 : 18th Central European Symposium on Theoretical Chemistry 2022, 7-10 September 2022, Balatonszárszó, Hungary</i> . 1. vyd. Budapešť : Hungarian Chemical Society, 2022, S. 91. ISBN 978-615-6018-10-6. Typ výstupu: časti, ktoré nemožno zaradiť do kategórie V, O, P, U alebo D; Výstup: zahraničný; Kategória publikácie do 2021: AFK

XXX XXX

- _01** LOUIS, Florent - ČERNUŠÁK, Ivan - CANNEAUX, Sebastien - ŠULKOVÁ, Katarína. Atmospheric reactivity of CH3I and CH2I2 with OH radicals: A comparative study of the H- versus I- abstraction. In *Computational and Theoretical Chemistry : Sp. Iss. SI*. Vol. 965, Iss. 2-3 (2011), s. 275-284. ISSN 2210-271X (2011: Q4 - JCR Best Q, 0.586 - SJR, Q2 - SJR Best Q).
 Ohlasy:
 1. [1] ZHANG, Shaoliang - Strekowski, Rafal - Monod, Anne - Bosland, Loic - Zetzsch, Cornelius. Temperature Dependence Kinetic Studies of the Reaction of O(P-3) with CHI3 and C2H5I and the 298 K Reaction of OH(X-2 Pi) with CHI3. In *INTERNATIONAL JOURNAL OF CHEMICAL KINETICS*, 2014, vol. 46, no. 9, pp. 554-566. ISSN 0538-8066., Registrované v: CC, SCOPUS, WOS
 Ohlas: zahraničný
 2. [1] DÁVALOS, Juan Z. - NOTARIO, Rafael - CUEVAS, Carlos A. - OLIVA, Josep M. - SAIZ-LOPEZ, Alfonso. Thermochemistry of halogen-containing organic compounds with influence on atmospheric chemistry. In *Computational and Theoretical Chemistry*, 2017, 1099, pp. 36-44. ISSN 2210-271X., Registrované v: WOS, CC, SCOPUS
 Ohlas: zahraničný
- _02** ŠULKOVÁ, Katarína - ŠULKA, Martin - CANNEAUX, Sebastien - LOUIS, Florent - ČERNUŠÁK, Ivan. A theoretical study of the kinetics of the forward and reverse reactions HI + CH3 = i + CH4. In *Chemical Physics Letters*. Vol. 517, Iss. 4-6 (2011), s.149-154. ISSN 0009-2614 (2011: 2.337 - IF, Q2 - JCR Best Q, 1.159 - SJR, Q1 - SJR Best Q).
 Ohlasy:
 1. [1] SAIZ-LOPEZ, Alfonso - PLANE, John M. C. - CUEVAS, Carlos A. - MAHAJAN, Anoop S. - LAMARQUE, Jean-Francois - KINNISON, Douglas E. Nighttime atmospheric chemistry of iodine. In *ATMOSPHERIC CHEMISTRY AND PHYSICS*, 2016, vol. 16, no. 24, pp. 15593-15604. ISSN 1680-7316., Registrované v: SCOPUS, CC, WOS
 Ohlas: zahraničný
 2. [1] GUO, Jun - XIE, Tian - YANG, Sanke - XIE, Quan - LIU, Qibin - QIN, Jun. Free-Radical and Non-Free-Radical Based Reaction Pathways of Iodide Oxidation by Hydrogen Peroxide in Acid Solution-Ab Initio Calculations. In *RUSSIAN JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*, 2021, vol. 95, no. SUPPL 1, pp. S15-S22. ISSN 0036-0244., Registrované v: WOS, CC, SCOPUS
 Ohlas: zahraničný
- _03** ŠULKOVÁ, Katarína - FEDERIČ, J. - LOUIS, F. - CANTREL, L. - DEMOVIČ, Lukáš - ČERNUŠÁK, Ivan. Thermochemistry of small iodine species. In *Physica scripta*. Vol. 88, Iss. 5 (2013), s.Art. No. 058304. ISSN 0031-8949 (2013: 1.296 - IF, Q3 - JCR Best Q, 0.317 - SJR, Q3 - SJR Best Q).
 Ohlasy:
 1. [1] JIAO, Yuge - DIBBLE, Theodore S. Structures, Vibrational Frequencies, and Bond Energies of the BrHgOX and BrHgXO Species Formed in Atmospheric Mercury Depletion Events. In *Journal of Physical Chemistry A*, 2017, 121, 41, s. 7976-7985. ISSN 1089-5639., Registrované v: CC, WOS, SCOPUS
 Ohlas: zahraničný
- _04** ŠULKOVÁ, Katarína - CANTREL, L. - LOUIS, Florent. A theoretical study of the kinetics of gas-phase elementary reactions containing caesium species of nuclear safety interest. In *Book of abstracts [elektronický zdroj] : CESTC 2014, Nagyborzsöny, Hungary, 2014.09.21-25*. 1. vyd. Budapešť : Connections 2000 KFT, 2014, online, [1] s. ISBN 978-963-313-132-9.
 Kategória publikácie do 2021: AFG

Štatistika: kategória publikačnej činnosti do 2021

I2	I2	2
V2	V2	1
V3	V3	3
XXX	Nezaradené	4
Súčet		10

Štatistika: kategória ohlasov

1	Citácie v zahraničných publikáciách, registrované v citačných indexoch Web of Science a databáze SCOPUS	10
Súčet		10