

\*423\*

**RNDr. Štěpán Sklenák, PhD.** (naroz. 1967)

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i.

**DFT a ab initio výpočty – struktury, reaktivity a katalytických vlastností zeolitů; vlastností a reaktivity organických molekul a biomolekul**

návrh podává: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i.

J. R. Fulton, S. Sklenak, M. W. Bouwkamp, and R. G. Bergman: Investigating the Basicity of a Parent Amidoruthenium Complex: Experimental and Computational Results, *J. Am. Chem. Soc.*, 2002, 124, 4722

S. Sklenak, L. Yao, R. I. Cukier and H. Yan: Catalytic Mechanism of Yeast Cytosine Deaminase. An ONIOM Computational Study, *J. Am. Chem. Soc.*, 2004, 126, 14879

L. Yao, S. Sklenak. H. Yan and R. I. Cukier: A Molecular Dynamics Exploration of the Catalytic Mechanism of Yeast Cytosine Deaminase, *J. Phys. Chem. B*, 2005, 109, 7500

S. Sklenak and J. Hrušák:  $\text{CuNO}_2$  and  $\text{Cu}^+\text{NO}_2$  revisited: A komparative ab initio and DFT study, *J. Chem. Tudory Comput.*, 2006, 2, 997

K. B. Wiberg, Yi-gui Wang, S. Sklenak C. Deutsch and G. Trucks: Permanganate Oxidation of Alkenes. Substituent and Solvent Effects. Difficulties with MP2 Calculations, *J. Am. Chem. Soc.*, 2006, 128, 11537.