

Slaviček Petr

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

Druhy dokumentů: Článek v impaktovaném periodiku, Článek v odborném periodiku, Monografie, Kapitola v monografii, Konferenční příspěvek (mezinárodní konf.), Konferenční příspěvek (lokální konf.)

Období: 2014, 2015, 2016, 2017, 2018

Databáze: ASEP

0507579 - UFCH-W 2020 RIV CZ cze J - Článek v odborném periodiku

Berka, K. - Sršeň, Š. - Slaviček, Petr

Je strojové učení budoucností teoretické chemie?

[Is machine learning the future of theoretical chemistry?]

Chemické listy. Roč. 112, č. 10 (2018), s. 640-647. ISSN 0009-2770

Institucionální podpora: RVO:61388955

Klíčová slova: Artificial intelligence * Machine learning * Neural networks * qsar * Quantum chemistry * Theoretical chemistry

Kód oboru RIV: CF - Fyzikální chemie a teoretická chemie

Obor OECD: Physical chemistry

Impakt faktor: 0.311, rok: 2018

Trvalý odkaz: <http://hdl.handle.net/11104/0298567>

• [SCOPUS](#)

• [WOS](#)

0495950 - UFCH-W 2019 RIV US eng J - Článek v odborném periodiku

Fárník, Michal - Pysanenko, Andriy - Moriová, Kamila - Ballauf, L. - Scheier, P. - Chalabala, J. - Slaviček, Petr

Ionization of Ammonia Nanoices with Adsorbed Methanol Molecules.

Journal of Physical Chemistry A. Roč. 122, č. 43 (2018), s. 8458-8468. ISSN 1089-5639

Grant CEP: GA ČR(CZ) GA17-04068S

Institucionální podpora: RVO:61388955

Klíčová slova: PROTON-TRANSFER REACTIONS * HYDROGEN-BONDED CLUSTERS * INTERSTELLAR ICE ANALOGS

Kód oboru RIV: CF - Fyzikální chemie a teoretická chemie

Obor OECD: Physical chemistry

Impakt faktor: 2.641, rok: 2018

Fárník, Michal Slaviček, Petr

Trvalý odkaz: <http://hdl.handle.net/11104/0288793>

• [SCOPUS](#)

• [WOS](#)

• [DOI](#)

• [Výsledek v RIV](#)

• [Inst. repozitář](#)

0460163 - UFCH-W 2017 RIV US eng J - Článek v odborném periodiku

Grygoryeva, Kateřina - Kubečka, J. - Pysanenko, Andriy - Lengyel, Jozef - Slaviček, Petr - Fárník, Michal

Photochemistry of Nitrophenol Molecules and Clusters: Intra- vs Intermolecular Hydrogen Bond Dynamics.

Journal of Physical Chemistry A. Roč. 120, č. 24 (2016), s. 4139-4146. ISSN 1089-5639

Grant CEP: GA ČR(CZ) GA15-12386S

Institucionální podpora: RVO:61388955

Klíčová slova: photochemistry * clusters * laser techniques

Kód oboru RIV: CF - Fyzikální chemie a teoretická chemie

Impakt faktor: 2.847, rok: 2016

Trvalý odkaz: <http://hdl.handle.net/11104/0260286>

• [SCOPUS](#)

• [WOS](#)

• [DOI](#)

• [Výsledek v RIV](#)

• [Inst. repozitář](#)

0500331 - UFCH-W 2019 RIV GB eng J - Článek v odborném periodiku

Hollas, D. - Pohl, M. N. - Seidel, R. - Aziz, E. F. - Slaviček, Petr - Winter, B.

Aqueous Solution Chemistry of Ammonium Cation in the Auger Time Window.

Scientific Reports. Roč. 7, č. 1 (2017), č. článku 756. ISSN 2045-2322

GA ČR(CZ) GA13-34168S

Institucionální podpora: RVO:61388955

Klíčová slova: x-ray * liquid water * relaxation processes * proton * photoemission * energies

Kód oboru RIV: CF - Fyzikální chemie a teoretická chemie

Obor OECD: Physical chemistry

Impakt faktor: 4.122, rok: 2017

Trvalý odkaz: <http://hdl.handle.net/11104/0292423>

- [SCOPUS](#)
- [WOS](#)
- [DOI](#)
- [Výsledek v RIV](#)
- [Inst. repozitář](#)

0472673 - UFCH-W 2017 RIV NL eng J - Článek v odborném periodiku

Hollas, D. - Svoboda, O. - Slaviček, Petr

Fragmentation of HCl-water clusters upon ionization: Non-adiabatic ab initio dynamics study.

Chemical Physics Letters. Roč. 622, FEB 2015 (2015), s. 80-85. ISSN 0009-2614

Institucionální podpora: RVO:61388955

Klíčová slova: molecular-dynamics * energy * simulations * acid

Kód oboru RIV: CF - Fyzikální chemie a teoretická chemie

Impakt faktor: 1.860, rok: 2015

Trvalý odkaz: <http://hdl.handle.net/11104/0270053>

- [WOS](#)
- [DOI](#)
- [Výsledek v RIV](#)

0500250 - UFCH-W 2019 RIV US eng J - Článek v odborném periodiku

Hollas, D. - Šiščík, L. - Hohenstein, E. G. - Martínez, T. J. - Slaviček, Petr

Nonadiabatic Ab Initio Molecular Dynamics with the Floating Occupation Molecular Orbital-Complete Active Space Configuration Interaction Method.

Journal of Chemical Theory and Computation. Roč. 14, č. 1 (2018), s. 339-350. ISSN 1549-9618

GA ČR(CZ) GA13-34168S

Institucionální podpora: RVO:61388955

Klíčová slova: quantum chemistry * ethylene * density-functional theory

Kód oboru RIV: CF - Fyzikální chemie a teoretická chemie

Obor OECD: Physical chemistry

Impakt faktor: 5.313, rok: 2018

Slaviček, Petr

Trvalý odkaz: <http://hdl.handle.net/11104/0292351>

- [SCOPUS](#)
- [WOS](#)
- [DOI](#)
- [Výsledek v RIV](#)

0472646 - UFCH-W 2017 RIV CZ cze J - Článek v odborném periodiku

Hollas, D. - Muchová, E. - Slaviček, Petr

Ve stínu elektronů: Kvantové efekty jader v chemii.

[In The Shadow of Electrons: Nuclear Quantum Effects in Chemistry.]

Chemické listy. Roč. 110, č. 5 (2016), s. 394-403. ISSN 0009-2770

Grant CEP: GA MŠK LD12025

Institucionální podpora: RVO:61388955

Klíčová slova: water hexamer * quantum chemistry * nuclear quantum effects * zero point energy * quantum delocalization

Kód oboru RIV: CF - Fyzikální chemie a teoretická chemie

Impakt faktor: 0.387, rok: 2016

Trvalý odkaz: <http://hdl.handle.net/11104/0269894>

- [SCOPUS](#)
- [WOS](#)
- [Výsledek v RIV](#)

0500249 - UFCH-W 2019 RIV US eng J - Článek v odborném periodiku

Chalabala, J. - Uhlíř, F. - Slaviček, Petr

Assessment of Real-Time Time-Dependent Density Functional Theory (RT-TDDFT) in Radiation Chemistry: Ionized Water Dimer.

Journal of Physical Chemistry A. Roč. 122, č. 12 (2018), s. 3227-3237. ISSN 1089-5639

GA ČR(CZ) GA13-34168S; Ga MŠk(CZ) LM2015070

Institucionální podpora: RVO:61388955

Klíčová slova: MOLECULAR-DYNAMICS SIMULATIONS * IRRADIATED LIQUID WATER * ELECTRON DYNAMICS

Kód oboru RIV: CF - Fyzikální chemie a teoretická chemie

Obor OECD: Physical chemistry

Impakt faktor: 2.641, rok: 2018

Slaviček, Petr

Trvalý odkaz: <http://hdl.handle.net/11104/0292350>

- [SCOPUS](#)
- [WOS](#)
- [DOI](#)
- [Výsledek v RIV](#)

0427157 - UFCH-W 2015 RIV US eng J - Článek v odborném periodiku

Lengyel, Jozef - Pysanenko, Andriy - Poterya, Viktoriya - Slaviček, Petr - Fárník, Michal - Kočišek, J. - Fedor, J.

Irregular Shapes of Water Clusters Generated in Supersonic Expansions.

Physical Review Letters. Roč. 112, č. 11 (2014), s. 113401. ISSN 0031-9007

Grant CEP: GA ČR GAP208/11/0161; GA ČR GA14-08937S

Institucionální podpora: RVO:61388955

Klíčová slova: Argon clusters * Guest molecules * Interaction potentials

Kód oboru RIV: CF - Fyzikální chemie a teoretická chemie

Impakt faktor: 7.512, rok: 2014

Trvalý odkaz: <http://hdl.handle.net/11104/0232797>

- [SCOPUS](#)
- [WOS](#)
- [DOI](#)
- [Výsledek v RIV](#)

0500251 - UFCH-W 2019 RIV US eng J - Článek v odborném periodiku

Muchová, E. - Bezek, M. - Suchan, J. - Cibulka, R. - Slaviček, Petr

Molecular dynamics and metadynamics simulations of [2 + 2] photocycloaddition.

International Journal of Quantum Chemistry. Roč. 118, č. 10 (2018), č. článku e25534. ISSN 0020-7608

Grant CEP: GA ČR(CZ) GA17-04068S

Institucionální podpora: RVO:61388955

Klíčová slova: ab initio dynamics * [2 + 2] cycloaddition * metadynamics

Kód oboru RIV: CF - Fyzikální chemie a teoretická chemie

Obor OECD: Physical chemistry

Impakt faktor: 2.263, rok: 2018

Slaviček, Petr

Trvalý odkaz: <http://hdl.handle.net/11104/0292352>

- [SCOPUS](#)
- [WOS](#)
- [DOI](#)
- [Výsledek v RIV](#)

0429553 - UFCH-W 2015 RIV US eng J - Článek v odborném periodiku

Poterya, Viktoriya - Kočišek, Jaroslav - Lengyel, Jozef - Svrčková, Pavla - Pysanenko, Andriy - Hollas, D. - Slaviček, Petr - Fárník, Michal

Clustering and Photochemistry of Freon CF₂Cl₂ on Argon and Ice Nanoparticles.

Journal of Physical Chemistry A. Roč. 118, č. 26 (2014), s. 4740-4749. ISSN 1089-5639

Grant CEP: GA ČR GA14-08937S

Institucionální podpora: RVO:61388955

Klíčová slova: Chemical reactions * nanoparticles * Chlorine

Kód oboru RIV: CF - Fyzikální chemie a teoretická chemie

Impakt faktor: 2.693, rok: 2014

Trvalý odkaz: <http://hdl.handle.net/11104/0234644>

- [SCOPUS](#)
- [WOS](#)
- [DOI](#)
- [Výsledek v RIV](#)

0442955 - UFCH-W 2016 RIV GB eng J - Článek v odborném periodiku

Svrčková, Pavla - Pysanenko, Andriy - Lengyel, Jozef - Rubovič, Peter - Kočišek, Jaroslav - Poterya, Viktoriya - Slaviček, Petr - Fárník, Michal

Photodissociation dynamics of ethanethiol in clusters: complementary information from velocity map imaging, mass spectrometry and calculations.

Physical Chemistry Chemical Physics. Roč. 17, č. 39 (2015), s. 25734-25741. ISSN 1463-9076

Grant CEP: GA ČR GA14-14082S; GA ČR GA14-08937S

Institucionální podpora: RVO:61388955

Klíčová slova: POTENTIAL-ENERGY SURFACES * METHYL MERCAPTAN * CONICAL INTERSECTIONS

Kód oboru RIV: CF - Fyzikální chemie a teoretická chemie

Impakt faktor: 4.449, rok: 2015

Trvalý odkaz: <http://hdl.handle.net/11104/0245777>

- [SCOPUS](#)
- [WOS](#)
- [DOI](#)
- [Výsledek v RIV](#)