

# Vedecko/umelecko-pedagogická charakteristika osoby <sup>1</sup>

## Research/art/teacher profile of a person <sup>2</sup>

Tlačivo VUPCH určuje štruktúru dát Vedecko/umelecko-pedagogickej charakteristiky osoby pre spracovanie príloh žiadostí SAAVŠ.  
The form determines the data structure of the Research/art/teacher profile of a person. It is used for processing the annexes to the Slovak Accreditation Agency for Higher Education (SAAHE) applications.

Dátum poslednej aktualizácie / Date of last update:

I. Základné údaje / Basic information	
I.1 Priezvisko / Surname	Černušák
I.2 Meno / Name	Ivan
I.3 Tituly / Degrees	Prof., DrSc.
I.4 Rok narodenia / Year of birth	1952
I.5 Názov pracoviska / Name of the workplace	Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta
I.6 Adresa pracoviska / Address of the workplace	Ilkovičova 6, 84215 Bratislava
I.7 Pracovné zaradenie / Position	profesor
I.8 E-mailová adresa / E-mail address	<a href="mailto:ivan.cernusak@uniba.sk">ivan.cernusak@uniba.sk</a>
I.9 Hyperlink na záznam osoby v Registri zamestnancov vysokých škôl / Hyperlink to the entry of a person in the Register of university staff	<a href="https://www.portalvs.sk/regzam/detail/4188">https://www.portalvs.sk/regzam/detail/4188</a>
I.10 Názov študijného odboru, v ktorom osoba pôsobí na vysokej škole / Name of the study field in which a person works at the university	teoretická a počítačová chémia / theoretical and computational chemistry
I.11 ORCID ID <sup>3</sup>	0000-0002-6597-3095

II. Vysokoškolské vzdelanie a ďalší kvalifikačný rast / Higher education and further qualification growth			
	II.a Názov vysokej školy alebo inštitúcie / Name of the university or institution	II.b Rok / Year	II.c Odbor a program / Study field and programme
II.1 Vysokoškolské vzdelanie prvého stupňa / First degree of higher education			
II.2 Vysokoškolské vzdelanie druhého stupňa / Second degree of higher education	Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta / Comenius University in Bratislava, Fac. Nat. Sci.	1976	chémia / chemistry
II.3 Vysokoškolské vzdelanie tretieho stupňa / Third degree of higher education	Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta / Comenius University in Bratislava, Fac. Nat. Sci.	1983	fyzikálna chémia / physical chemistry
II.4 Titul docent / Associate professor	Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta / Comenius University in Bratislava, Fac. Nat. Sci.	1995	fyzikálna chémia / physical chemistry
II.5 Titul profesor / Professor	Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta / Comenius University in Bratislava, Fac. Nat. Sci.	2006	teoretická a počítačová chémia / theoretical and
II.6 Titul DrSc. / Doctor of Science (DrSc.)	Univerzita Komenského v Bratislave, Prírodovedecká fakulta / Comenius University in Bratislava, Fac. Nat. Sci.	2001	fyzikálna chémia / physical chemistry

III. Súčasná a predchádzajúca zamestnanie / Current and previous employment		
III.a Zamestnanie-pracovné zaradenie / Occupation-position	III.b Inštitúcia / Institution	III.c Časové vymedzenie / Duration
vedecký pracovník/research fellow	Chemický ústav UK/Chemical institute Comenius University	1983-1989
samostatný vedecký pracovník/senior research fellow	Chemický ústav UK/Chemical institute Comenius University	1989-1995
docent / associate professor	Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie PrIFUK / Department of Physical & Theoretical Chemistry, Fac. Nat. Sci., Comenius Univ.	1995 - 2006
profesor / full professor	Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie PrIFUK / Department of Physical & Theoretical Chemistry, Fac. Nat. Sci., Comenius Univ.	2006 -

IV. Rozvoj pedagogických, odborných, jazykových, digitálnych a iných zručností / Development of pedagogical, professional, language, digital and other skills		
IV.a Popis aktivity, názov kurzu (ak išlo o kurz), iné / Activity description, course name, other	IV.b Názov inštitúcie / Name of the institution	IV.c Rok / Year
Manažérske zručnosti, kurz / Manager skills	Prírodovedné vzdelávacie centrum UK	2005
Kurz francúzskeho jazyka / French language A1.1, A1.2	Francúzsky inštitút na Slovensku / Institut français de Slovaquie	2020


## V. Prehľad aktivít v rámci pedagogického pôsobenia na vysokej škole / Overview of activities within the teaching career at the university

### V.1. Prehľad zabezpečovaných profilových študijných predmetov v aktuálnom akademickom roku podľa študijných programov / Overview of the profile courses taught in the current academic year according to study programmes

V.1.a Názov profilového predmetu / Name of the profile course	V.1.b Študijný program / Study programme	V.1.c Stupeň / Degree	V.1.d Študijný odbor / Field of study
Teória chemickej väzby / Theory of chemical bond	chémia / chemistry	I.	chémia/Chemistry
Chemické modelovanie / Chemical modeling	chémia / chemistry	I.	chémia/Chemistry
Počítačové modelovanie (1), molekuly, interakcie a reaktivita / Computational modelling (1), molecules, interactions and reactivity	teoretická a počítačová chémia / theoretical and computational chemistry	II.	chémia/Chemistry
Moderné počítačové metódy kvantovej chémie / Modern computational methods in quantum chemistry	teoretická a počítačová chémia / theoretical and computational chemistry	III.	chémia/Chemistry
Teoretická chémia / Theoretical chemistry	teoretická a počítačová chémia / theoretical and computational chemistry	III.	chémia/Chemistry

### V.2. Prehľad o zodpovednosti za uskutočňovanie, rozvoj a zabezpečenie kvality študijného programu alebo jeho časti na vysokej škole v aktuálnom akademickom roku / Overview of the responsibility for the delivery, development and quality assurance of the study programme or its part at the university in the current academic year<sup>4</sup>

V.2.a Názov študijného programu / Name of the study programme	V.2.b Stupeň / Degree	V.2.c Študijný odbor / Field of study
teoretická a počítačová chémia / theoretical and computational chemistry	II.	chémia/Chemistry
teoretická a počítačová chémia / theoretical and computational chemistry	III.	chémia/Chemistry

### V.3. Prehľad o zodpovednosti za rozvoj a kvalitu odboru habilitačného konania a inauguračného konania v aktuálnom akademickom roku / Overview of the responsibility for the development and quality of the field of habilitation procedure and inaugural procedure in the current academic year

V.3.a Názov odboru habilitačného konania a inauguračného konania / Name of the field of habilitation procedure and inaugural procedure	V.3.b Študijný odbor, ku ktorému je priradený / Study field to which it is assigned
teoretická a počítačová chémia / theoretical and computational chemistry	chémia/Chemistry

### V.4. Prehľad vedených záverečných prác / Overview of supervised final theses

	V.4.a Bakalárske (prvý stupeň) / Bachelor's (first degree)	V.4.b Diplomové (druhý stupeň) / Diploma (second degree)	V.4.c Dizertačné (tretí stupeň) / Dissertation (third degree)
V.4.1 Počet aktuálne vedených prác / Number of currently supervised theses	0	0	1
V.4.2 Počet obhájených prác / Number of defended theses	7	12	10

### V.5. Prehľad zabezpečovaných ostatných študijných predmetov podľa študijných programov v aktuálnom akademickom roku / Overview of other courses taught in the current academic year according to study programmes

V.5.a Názov predmetu / Name of the course	V.5.b Študijný program / Study programme	V.5.c Stupeň / Degree	V.5.d Študijný odbor / Field of study
Perspektívy chémie / Chemistry perspectives	Chémia / Chemistry	I.	chémia/Chemistry
Numerická matematika / Numerical methods	Chémia / Chemistry	I.	chémia/Chemistry
Cvičenie k bakalárskej práci z teoretickej a počítačovej chémie/Lab. works for Bc. Thesis in theoretical and computational chemistry	Chémia / Chemistry	I.	chémia/Chemistry
Bakalárska práca z teoretickej a počítačovej chémie (1)/Bc. Thesis in theoretical and computational chemistry (1)	Chémia / Chemistry	I.	chémia/Chemistry
Bakalárska práca z teoretickej a počítačovej chémie (2)/Bc. Thesis in theoretical and computational chemistry (2)	Chémia / Chemistry	I.	chémia/Chemistry
Čo je fyzikálna a teoretická chémia? / What is physical and theoretical chemistry?	Chémia / Chemistry	I.	chémia/Chemistry

Výberová prax z chémie / Optional practice in chemistry	<b>Chémia / Chemistry</b>	I.	chémia/Chemistry
Computational chemistry and molecular modelling	<b>Biological chemistry</b>	I.	biológia / Biology
Špeciálne cvičenie diplomantov z teoretickej a počítačovej chémie (1) / Special exercise in theoretical and computational chemistry (1)	<b>teoretická a počítačová chémia / theoretical and computational chemistry</b>	II.	chémia/Chemistry
Špeciálne cvičenie diplomantov z teoretickej a počítačovej chémie (2) / Special exercise in theoretical and computational chemistry (2)	<b>teoretická a počítačová chémia / theoretical and computational chemistry</b>	II.	chémia/Chemistry
Seminár k diplomovej práci / Diploma thesis seminar	<b>teoretická a počítačová chémia / theoretical and computational chemistry</b>	II.	chémia/Chemistry
Vybrané kapitoly z teoretickej a počítačovej chémie (1) / Selected chapters from theoretical and computational chemistry (1)	<b>teoretická a počítačová chémia / theoretical and computational chemistry</b>	II.	chémia/Chemistry
Doktorandský seminár z teoretickej chémie / Theoretical chemistry seminar for PhD students	<b>teoretická a počítačová chémia / theoretical and computational chemistry</b>	III.	chémia/Chemistry

## VI. Prehľad výsledkov tvorivej činnosti / Overview of the research/artistic/other outputs

VI.1. Prehľad výstupov tvorivej činnosti a ohlasov na výstupy tvorivej činnosti / Overview of the research/artistic/other outputs and the corresponding citations		
	VI.1.a Celkovo / Overall	VI.1.b Za posledných šesť rokov / Over the last six years
VI.1.1 Počet výstupov tvorivej činnosti / Number of the research/artistic/other outputs	99	26
VI.1.2 Počet výstupov tvorivej činnosti registrovaných v databázach Web of Science alebo Scopus / Number of the research/artistic/other outputs registered in the Web of Science or Scopus databases	99	26
VI.1.3 Počet ohlasov na výstupy tvorivej činnosti / Number of citations corresponding to the research/artistic/other outputs	1017	335
VI.1.4 Počet ohlasov registrovaných v databázach Web of Science alebo Scopus na výstupy tvorivej činnosti / Number of citations registered in the Web of Science or Scopus databases	1017	335
VI.1.5 Počet pozvaných prednášok na medzinárodnej a národnej úrovni / Number of invited lectures at the international, national level	12	2

VI.2. Najvýznamnejšie výstupy tvorivej činnosti / The most significant research/artistic/other outputs <sup>5</sup>	
1.	Čerušák I., Diercksen GHF, Sadlej AJ: Finite-field many-body perturbation-theory 10. electric-field gradients and other properties of N <sub>2</sub> , Chem. Phys. <b>108</b> , 45, 1986.
2.	Čerušák I; Fowler PW; Steiner E: Ring currents in six-membered heterocycles: the diazaborinines (CH) <sub>2</sub> B <sub>2</sub> N <sub>2</sub> , MOLECULAR PHYSICS <b>98</b> , 945, 2000.
3.	Čerušák I, Kello V; Sadlej AJ: Standardized medium-size basis sets for calculations of molecular electric properties: Group IIIA, Coll. Czechoslov. Chem. Commun. <b>68</b> , 211, 2003.
4.	Dedikova P; Pitonak M; Neogrady P; Čerušák I; Urban M: Toward more efficient CCSD(T) calculations of intermolecular interactions in model hydrogen-bonded and stacked dimers, J. Phys. Chem A <b>112</b> , 7115, 2008.
5.	Šulka M, Šulková K, Louis F, Neogrady P, Čerušák I.: A Theoretical Study of the X-Abstraction Reactions (X = H, Br, or I) from CH <sub>2</sub> I <sub>2</sub> by OH Radicals: Implications for Atmospheric Chemistry, Z. Phys. Chemie <b>227</b> , 1337, 2013.

VI.3. Najvýznamnejšie výstupy tvorivej činnosti za ostatných šesť rokov / The most significant research/artistic/other outputs over the last six years <sup>6</sup>	
1.	Khanniche, S; Louis, F; Cantrel, L; Čerušák, I: A theoretical study of the microhydration of iodic acid (HOIO <sub>2</sub> ), Comput. Theoret. Chem. <b>1094</b> , 98, 2016.
2.	Khanniche, S; Louis, F; Cantrel, L; Čerušák, I: A Density Functional Theory and ab Initio Investigation of the Oxidation Reaction of CO by IO Radicals, J. Phys. Chem. <b>120</b> , 1737, 2016.
3.	Škoviera J; Neogrady P; Louis F; Čerušák I: Caesium hydride: MS-CASPT2 potential energy curves and A(1)Sigma(+) -> X-1 Sigma(+) absorption/emission spectroscopy, J. Chem. Phys. <b>146</b> , Article Number: 104304, 2017.
4.	Bučko T; Novotný M; Čerušák I: On the work function of the surface Mo(001) and its temperature dependence: an ab initio molecular dynamics study, J. Phys.-Cond. Matter <b>30</b> , Article Number: 505001, 2018.
5.	Taamalli S, Khiri D, Suliman S, Khanniche S, Čerušák I, Cantrel L, Ribaucour M, Louis F: Unraveling the Tropospheric Microhydration Processes of Iodous Acid HOIO, ACS EARTH AND SPACE CHEMISTRY, <b>4</b> , 92, 2020

VI.4. Najvýznamnejšie ohlasy na výstupy tvorivej činnosti / The most significant citations corresponding to the research/artistic/other outputs <sup>7</sup>	
1.	SCI -Pyrykko, P: The nuclear-quadrupole moments of the 20 1st elements - high-precision calculations on atoms and small molecules, Zeitschrift fur naturforschung section a-a journal of physical sciences, <b>47</b> , 189, 1992 - (Čerušák I., Diercksen GHF, Sadlej AJ: Finite-field many-body perturbation-theory 10. electric-field gradients and other properties of N <sub>2</sub> , Chem. Phys. 108, 45, 1986.).
2.	SCI -Romero, AH; Squitieri, E: Potential use of small basis set on the calculations of electronic properties of some four-membered heterocycles: a conformational study, Mol. Phys. <b>115</b> , 261, 2017 - (Čerušák I., Diercksen GHF, Sadlej AJ: 4th-order many-body perturbation-theory study of the electron-correlation contribution to polarizabilities of Ne, Phys. Rev. A <b>33</b> , 814, 1986)
3.	SCI -Popov, Ivan A.; Boldyrev, Alexander I.: Chemical Bonding in Inorganic Aromatic Compounds, in " CHEMICAL BOND: CHEMICAL BONDING ACROSS THE PERIODIC TABLE Pages: 421-444 Published: 2014. (Cernusak, I; Fowler, PW; Steiner, E.: Ring currents in six-membered heterocycles: the diazaborinines (CH) <sub>2</sub> B <sub>2</sub> N <sub>2</sub> , MOLECULAR PHYSICS Volume: 98 Issue: 14 Pages: 945-953 Published: JUL 20 2000 )
4.	SCI -Van Orden, A; Saykally, RJ, Small carbon clusters: Spectroscopy, structure, and energetics, CHEMICAL REVIEWS Volume: 98 Issue: 6 Pages: 2313-2357 Published: SEP-OCT 1998, (WATTS, JD; CERNUSAK, I; BARTLETT, RJ: A COUPLED-CLUSTER STUDY OF THE PHOTOELECTRON-SPECTRA OF C <sub>4</sub> (-), CHEMICAL PHYSICS LETTERS Volume: 178 Issue: 2-3 Pages: 259-265 Published: MAR 22 1991)
5.	SCI - Sherrill, C. David, Wavefunction Theory Approaches to Noncovalent Interactions, in: NON-COVALENT INTERACTIONS IN QUANTUM CHEMISTRY AND PHYSICS: THEORY AND APPLICATIONS Pages: 137-168 Published: 2017. (Dedikova, P; Pitonak, M ; Neogrady, P; Cernusak, I; Urban, M: Toward more efficient CCSD(T) calculations of intermolecular interactions in model hydrogen-bonded and stacked dimers, JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A Volume: 112 Issue: 30 Pages: 7115-7123 Published: JUL 31 2008)

VI.5. Účasť na riešení (vedení) najvýznamnejších vedeckých projektov alebo umeleckých projektov za posledných šesť rokov / Participation in conducting (leading) the most important research projects or art projects over the last six years <sup>8</sup>	
1.	FP8: Eurofusion Work Package Heating and Current Drive (ENR-PRD.HCD-T015-D004-6) Computational Modelling of Cs-Mo interactions in NBI sources, principal investigator of the Tasks D004-6.
2.	LAMatCU — H2020-WIDESPREAD-03-2017-ERA Chairs, Project Board member
3.	APVV - 15 - 0105 Noncovalent interactions in systems of increasing complexity, member of the research team
4.	VEGA 1/0777/19 Benchmark calculations of properties, interactions and reactivity of chemical systems, deputy head of the project.
5.	

## VII. Prehľad aktivít v organizovaní vysokoškolského vzdelávania a tvorivých činností <sup>9</sup> / Overview of organizational experience related to higher education and research/artistic/other activities

VII.a Aktivita, funkcia / Activity, position	VII.b Názov inštitúcie, grémia / Name of the institution, board	VII.c Časové vymedzenia pôsobenia / Duration
prodekan v rozvoj a IKT / vicedean for development and information technologies	Prírodovedecká fakulta UK / Fac. Nat. Sci. CU	<b>2004 -2007</b>
vedúci katedry fyzikálnej a teoretickej chémie	Prírodovedecká fakulta UK / Fac. Nat. Sci. CU	<b>2014 - 2021</b>
Organizátor/Organizer, Výstava/Exhibition "Margarita Cinadevila: Ciencia EX AEQUO" European week of science and technolgy	Prírodovedecká fakulta UK, Filozofická fakulta UK / Fac. Nat. Sci and Fac Arts CU	<b>2012</b>
Predseda org.výboru/Chair of the organizing committee: 6th European Conference on Computational Chemistry, Tále 2006	Prírodovedecká fakulta UK / Fac. Nat. Sci. CU	<b>2006</b>
Člen komisie K3-VEGA	Vedecká grantová agentúra MŠVVŠ / Grant Agency of Ministry of Education	<b>2013 - 2020</b>

**VIII. Prehľad zahraničných mobilít a pôsobenia so zameraním na vzdelávanie a tvorivú činnosť v študijnom odbore / Overview of international mobilities and visits oriented on education and research/artistic/ other activities in the given field of study**

VIII.a Názov inštitúcie / Name of the institution	VIII.b Sídlo inštitúcie / Address of the institution	VIII.c Obdobie trvania pôsobenia/pobytu (uviesť dátum odkedy dokedy trval pobyt) / Duration (indicate the duration of stay)	VIII.d Mobilitná schéma, pracovný kontrakt, iné (popísať) / Mobility scheme, employment contract, other (describe)
Max-Planck Institute for Astrophysics	Garching b. München, Germany	Okt. 1984 - Sept. 1985	DAAD fellowship
University of Maryland Baltimore County	Baltimore, MD, USA	Feb. 1997 - July 1997	Fulbright fellowship
University of Exeter	Exteter, UK	August, 2000	hostujúci profesor / visiting professor
Lille University	Villeneuve d'Ascq, France	January, 2010	hostujúci profesor / visiting professor
Nicolaus Copernicus University	Toruń, Poland	September, 2011	hostujúci profesor / visiting professor
Lille University	Villeneuve d'Ascq, France	July 2015, September 2015	hostujúci profesor / visiting professor

**IX. Iné relevantné skutočnosti / Other relevant facts <sup>10</sup>**

IX.a Ak je to podstatné, uvádzajú sa iné aktivity súvisiace s vysokoškolským vzdelávaním alebo s tvorivou činnosťou / If relevant, other activities related to higher education or research/artistic/other activities are mentioned

1993 - 2105 Slovenský delegát/Slovak delegate: Division for Computational Chemistry of the Federation of European Chemical Societies (EUChEMs).