

Posúdenie vedeckej a pedagogickej činnosti Doc. Ing. Pavla Macha, CSc.

Pedagogická činnosť doc. Macha má veľmi široký záber. V súčasnosti prednáša na FMFI UK predmety: *Fyzikálna chémia, Teoretické základy spektroskopických metód, Aplikácie metód kvantovej chémie a molekulovej dynamiky na molekulové systémy*. Okrem týchto prednášok v minulosti viedol na fakulte aj rad rôznych ďalších cvičení a seminárov. Počas svojej pedagogickej kariéry viedol na FMFI UK 2 diplomantov a vyškolil 3 doktorandov.

Výsledkom vedeckej činnosti kandidáta je viac ako 80 pôvodných vedeckých prác publikovaných v "karentovaných" časopisoch, z čoho je 77 publikácií v zahraničných periodikách. Tento počet je doplnený dvomi kapitolami v knihách vydaných v zahraničných vydavateľstvách. Vedecký ohlas na jeho práce je dokumentovaný viac ako 400 SCI citáciami.

Kandidát predložil k inauguračnému konaniu súbor 5 pôvodných vedeckých prác, ktoré predstavujú reprezentatívny prehľad jeho vedeckých aktivít v období rokov 1991-2009 a získali spolu 150 SCI citácií. Vo svojich starších prácach sa doc. Mach venoval teoretickým modelom vplyvu kvapalného prostredia na fyzikálne a chemické vlastnosti solvatovaných molekúl. Medzi tieto práce patrí aj predložená publikácia (1991) s *ab initio* výpočtami vplyvu polárneho prostredia na anomérny efekt pomocou kontinuálneho modelu. Dve metodologické práce (1998) sú významným príspevkom k rozvoju multi-referenčnej Brillouin-Wigner teórie spriahnutých klastrov (MR BWCC) a ich aplikácii pri výpočtoch malých molekúl. V ostatnom období sa doc. Mach podieľa aj na teoretickej interpretácii výsledkov rôznych veľmi náročných experimentov. Do tejto kategórie prác patrí aj publikácia *Angew. Chem.* (2009) o ión-molekulových reakciách nano-kvapiek hélia s fullerénom a vodou, v ktorej pomocou HF a DFT výpočtov získal interakčné energie fullerénu a malých klastrov vody. Je škodou, že kandidát dosiaľ nepodal DrSc. prácu hoci požiadavky na ňu kladené určite splňa.

Vysoko treba vyzdvihnúť aj jeho intenzívnu vedeckú spoluprácu s poprednými vedeckými laboratóriami v zahraničí: Univerzita v Erlangen (prof. P. R. von Schleyer), Univerzita v Bochum (prof. V. Staemler), Univerzita v Innsbrucku (prof. M. Probst), Univerzita v Jackson, Mississippi (prof. J. Leszczynski).

Záverom konštatujem, že doc. Pavel Mach je vyhranenou vedeckou osobnosťou s rozsiahlou vedeckou a pedagogickou činnosťou a preto navrhujem, aby po úspešnej inauguračnej prednáške bol Vedeckej rade UK predložený návrh na vymenovanie **doc. Ing. Pavla Macha, CSc.** za

profesora v odbore "Fyzika".

V Bratislave, 26. augusta 2013

Prof. RNDr. Vladimír Kellö, DrSc.