

Návrh vymenúvacej komisie

Pre vymenovanie *doc. Ing. Pavla Macha, CSc.*,

Z Katedry jadrovej fyziky a biofyziky FMFI UK v Bratislave

za profesora v odbore fyzika

Na základe hodnotenia vedeckej rady FMFI UK v Bratislave, predseda vedeckej rady prof. RNDr. Jozef Masarik, DrSc., vymenoval dňa 27.6.2013 komisiu a oponentov pre vymenovanie *doc. Ing. Pavla Macha, CSc.*, za profesora v odbore fyzika, v zložení:

Vymenúvacia komisia:

prof. RNDr. Andrej Plecenik, DrSc., - predseda (FMFI UK, Bratislava)
prof. Ing. Vladimír Kvasnička, DrSc., (FIIT STU, Bratislava)
prof. Ing. Tomáš Bleha, DrSc., (Ústav polymérov SAV, Bratislava)
prof. Ing. Ladislav Omelka, DrSc., (VÚT Brno, ČR)

Oponenti:

prof. RNDr. Vladimír Kellö, DrSc. (PriF UK, Bratislava)
prof. Ing. Stanislav Biskupič, DrSc., (FCHPT STU Bratislava)
prof. RNDr. Ing. Jaroslav Burda, DrSc., (MFF KU Praha, ČR)

Vymenúvacia komisia zasadla po inauguračnej prednáške dňa 11.11.2013 za účasti oponentov a predkladá nasledujúce vyjadrenia.

Odborné posúdenie úrovne inauguračnej prednášky

Doc. Ing. Pavel Mach, CSc., predniesol dňa 11.11.2013 inauguračnú prednášku na tému *Medzimolekulové interakcie z pohľadu teórie: Čo môžu kvantovochemické výpočty ponúknuť experimentu*. Prednáška sa týkala v súčasnej dobe veľmi aktuálnej problematiky medzimolekulových interakcií a ich vplyve na vlastnosti molekulových sústav. Boli prezentované dve oblasti, kde medzimolekulové interakcie hrajú dôležitú úlohu, a to štruktúra molekulových kryštálov a interakcia v elektrón donor-akceptorových (EDA) komplexoch, ktorá okrem iného hrá dôležitú úlohu pri vytváraní istých typov samoorganizujúcich sa molekulových systémov technologického a biologického významu. Na príklade kryštálovej štruktúry C₆F₁₀ bola dokumentovaná dominantná úloha disperzných interakcií pri jej výstavbe, ako aj spolupráca experimentálnych a výpočtových prístupov pri jej riešení a interpretácii získaných výsledkov. Na príklade komplexov, substituovaných benzénov s tetrakynoetylénom, boli dokumentované vlastnosti EDA komplexov, a to energetické (interakčná energia, medzirovinná vzdialenosť) ako aj spektrálne (posun vibračných pásov vplyvom preneseného náboja, poloha CT pásu v elektrónových spektrách). Ako zvláštny

prípád nekovalentných interakcií bol ukázaný vplyv solventu na elektrónový CT prechod a jeho vystihnutie rôznymi metódami. Práve v sérii komplexov substituovaného benzénu s TCNE je veľmi dobre možné sledovať výkonnosť jednotlivých metód, keďže pre tieto zlúčeniny sú k dispozícii presné merania v plynnej fáze aj v solvente.

Komisia vysoko hodnotila úroveň prednášky, v ktorej uchádzač fundovane prezentoval problematiku a súčasné trendy vo výskume slabých medzimolekulových interakcií, ako aj možnosti spolupráce teoretického a experimentálneho výskumu v tejto oblasti. V prednáške prezentoval niektoré svoje najnovšie výsledky v uvedenej oblasti, a fundovane odpovedal na všetky otázky, ktoré boli položené v diskusii. Prednáška splnila požadované kritériá a predstavila uchádzača ako vyhranenú vedeckú aj pedagogickú osobnosť.

Zhodnotenie pedagogickej činnosti

Doc. P. Mach pôsobí pedagogicky na FMFI od r. 1992. Od r. 1997 je docentom na katedre Biofyziky a chemickej fyziky, po zlúčení na katedre Jadrovej fyziky a biofyziky. Za toto obdobie odučil 166 semestrohodín prednášok, cvičení a seminárov (Teoretické základy spektroskopických metód, Fyzikálna chémia, Aplikácie metód kvantovej chémie a molekulovej dynamiky na molekulové systémy, a ďalšie) v prvom, druhom aj treťom stupni štúdia. Bol školiteľom troch doktorandov, ktorí úspešne obhájili dizertačné práce.

Zhodnotenie vedeckej činnosti

Vedecká práca doc. P. Macha sa ubera dvomi základnými smermi, a to vývinom nových metód popisu elektrónovej korelácie, ako aj aplikáciou teoretických metód kvantovej molekulej fyziky na systémy, zaujímavé z experimentálneho hľadiska. Do prvej oblasti patrí jeho participácia na vývoji nového typu stavovo-špecifických multireferenčných metód, založených na Brillouin-Wignerovej rezolvente, ktoré sa stali jedným zo štandardných prístupov v oblasti multireferenčných metód spriahnutých klastrov. V rámci spolupráce s experimentálnou skupinou prof. Matejčíka na Katedre experimentálnej fyziky FMFI UK a prof. Horáčkom z MFF KU Praha sa podieľal na vývoji a aplikácii metód na popis rezonančných energií nestabilných molekulových aniónov, ako aj na interpretáciu fragmentačných reakcií iónov. V rámci projektu FUSION sa spolu s kolegami z Univerzity v Innsbrucku podieľal na výpočtoch účinných prierezov ionizácie berýlio-vodíkových klastrov, zaujímavých z hľadiska modelovania hraničnej plazmy fúzneho reaktora. V spolupráci s UACH SAV sa venuje aplikácii molekulových výpočtov na interpretáciu, ako aj riešenie štruktúry molekulových kryštálov.

Dosiahnuté výsledky boli publikované v popredných časopisoch v danej oblasti (J. Chem. Phys., Chem. Phys. Lett., Angew. Chem. Int. Ed., Phys. Rev A, Acta Cryst., a iné). Je tiež spoluautorom dvoch kapitol v monografiách („Multireference Brillouin-Wigner coupled-cluster theory.“, In: Computational Chemistry: Reviews of Current Trends, Vol. 3.: World Scientific, - Singapore 1999., a „Brillouin-Wigner expansions in quantum chemistry: Bloch-like and Lippmann-Schwinger-like equations.“ v Advanced Topics in Theoretical Chemical Physics. - Dordrecht : Kluwer Academic Publishers, 2003). Okrem toho uchádzač publikoval

doteraz 78 vedeckých prác v karentovaných časopisoch. Jeho práce boli podľa citačných databáz citované 422 krát. Doc. P. Mach sa od svojho príchodu na fakultu zapájal aktívne do vedeckoorganizačnej činnosti, bol členom organizačných výborov viacerých konferencií (naposledy 3rd Visegrad Symposium on Structural Systems Biology, Smolenice, Jun 19-22, 2013).

Doc. P. Mach sa aktívne zapájal do riešenia viacerých domácich (GAV, VEGA, APVV) a zahraničných (COST) grantov, prakticky v celom období jeho pôsobenia na fakulte bola jeho výskumná kapacita pokrytá grantmi. V súčasnosti je zodpovedným riešiteľom jedného grantu VEGA, a spoluriešiteľom jedného projektu APVV a jedného VEGA. Taktiež sa podieľa na riešení problematiky v rámci aktivít Association EURATOM-CU, v oblasti modelovania vlastností berýlium-vodík-wolfrámových klástrov.

Vedecká škola

Doc. Mach zatiaľ vyškoliť 3 doktorandov, ktorí obhájili dizertačnú prácu (M. Sládkovičová – UACH SAV, E. Malkin, M. Krajčí). Na Katedre experimentálnej fyziky pomáhal etablovať kvantovochemické prístupy k štúdiu fragmentačných reakcií.

Ďalšia činnosť a občianske a morálne vlastnosti uchádzača

Pravidelne posudzuje články pre vedecké časopisy, najmä J. Mol. Mod., J. Mol. Spect. Je členom komisií pre doktorandské štúdium na FMFI UK, PriF UK a CHFPT STU. Svojím osobným príkladom ako aj prístupom k študentom počas prednášok ich inšpiruje k vedeckej práci a k tvorivému riešeniu vedeckých problémov.

Z vyjadrenia oponentov

Prof. Biskupič:

Doc. Ing. Pavel Mach, PhD. je vyhranenou vedeckou osobnosťou, dokladované publikačné výstupy, ohlasy na jeho práce, ale aj aktivity v oblasti školenia doktorandov prevyšujú minimálne kritéria FMFI UK pre vymenúvacie konania za profesora v odbore fyzika, rovnako ako aj jeho pedagogické aktivity na uvedenej fakulte.

Prof. Burda:

The high regards that I have for Dr. Mach is a common thread in all of us that have worked with him, I'm sure that numerous colleagues that read and that follow the work of Dr. Mach share this appreciation. The academic presence of Dr. Mach in the international quantum chemistry community has been much appreciated and trust his opinion on other Works as judicious and well informed.

Prof. Kollő:

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 dvoma kapitolami v knihách vydaných v zahraničných

vydavateľstvách. Vedecký ohlas na jeho práce je dokumentovaný viac ako 400 SCI citáciami.“

Je škodou, že kandidát dosiaľ nepodal DrSc. prácu, hoci požiadavky na ňu kladené určite splňa.

Záver

Vymenúvacia komisia na svojom zasadnutí dňa 11. 11. 2013 po oboznámení sa s dokladmi predloženými uchádzačom, s oponentskými posudkami, po vypočutí inauguračnej prednášky a na základe následnej rozpravy dospela k jednomyselnému stanovisku, že doc. Ing. Pavel Mach, CSc., splňa všetky odborné, pedagogické a morálne kritériá, a preto jednoznačne navrhuje jeho vymenovanie za profesora v odbore *fyzika*.

V Bratislave 11.11.2013

prof. RNDr. Andrej Plecenik, DrSc.

prof. Ing. Vladimír Kvasnička, DrSc.

prof. Ing. Tomáš Bleha, DrSc.

prof. Ing. Ladislav Omelka, DrSc.

Oponenti:

prof. RNDr. Vladimír Kellö, DrSc.

prof. Ing. Stanislav Biskupič, DrSc.

prof. RNDr. . Ing. Jaroslav Burda , DrSc.