

**Oponentský posudok na prácu k vymenúvaciemu konaniu na vymenovanie
doc. Ing. Romana Martoňáka, DrSc.
za profesora v odbore fyzika**

Predložená práca k vymenúvaciemu konaniu sa zaoberá nesporne aktuálnou problematikou aplikácie počítačových simulačných metód a techník na tlakom indukované štruktúrne transformácie v rôznych tuhých látkových systémoch. Autor uvádza práce publikované v popredných medzinárodných vedeckých časopisoch s vysokým impact faktorom. Oceňujem pôvodný simulačný algoritmus, ktorý je použitý na simuláciu štruktúrnych fázových prechodov v tuhých látkach. Metóda umožňuje výhodne riešiť problematiku prechodu cez energetické bariéry spojenú s hľadaním energetických miním, čím do značnej miery alebo úplne eliminuje problémy súvisiace s prekonávaním bariéry pri štruktúrnych fázových prechodoch. Jej ďalšou prednosťou je pomerne jednoduchá implementácia do existujúcich počítačových programov. Výsledky prác dokazujú, že prístup založený na metadynamičke predstavuje podstatný pokrok v danej oblasti.

Publikačná aktivita doc. Martoňáka vedie k počtu prác, ktorý spĺňa a značne prevyšuje kritériá stanovené fakultou. Rovnako možno hovoriť aj o citačnej odozve na práce autora, ktoré publikoval. Pri vymenúvaní vedeckej aktivity nemožno obísť pozvané prednášky na medzinárodných konferenciách, pracoviskách a tiež spoluprácu s najlepšimi pracoviskami na svete, ktoré sa venujú danej problematike. V rámci pôsobenia na fakulte získal množstvo grantov, ktoré dokazujú ocenenie jeho vedeckej kvality. Do práce na projektoch začlenil aj svojich doktorandov.

Pedagogická práca, ktorej náplňou sú prednášky, semináre ako aj vedenie diplomantov a bakalárov, spĺňa tak isto kritériá, stanovené fakultou.

Všetky publikované práce autora majú vysokú odbornú úroveň, prešli recenziou a sú obsahom významných vedeckých časopisov. Nie je preto dôvod na hľadanie kritických poznámok. V rámci diskusie by som sa uchádzača rád opýtal na problematiku súvisiacu s molekulovou dynamikou a to výpočet interakcií, teda použitie buď force fieldov alebo DFT výpočty. Aký vplyv majú na kvalitu získaných výsledkov zo simulácií?

Záverom môžem konštatovať, že kvalita výsledkov práce doc. Romana Martoňáka dokazuje veľkú vedeckú kvalitu autora. Táto skutočnosť ako aj kvalita pedagogickej činnosti ma oprávňujú podporiť vymenovanie **doc. Ing. Romana Martoňáka, DrSc. za profesora v odbore fyzika.**

V Bratislave, 3. 9. 2013

prof. RNDK Ján Urban, DrSc.