

## Vedecko/umelecko-pedagogická charakteristika osoby 1 Research/art/teacher profile of a person 2

*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: 08. 02. 2021

I. Základné údaje / Basic information	
I.1 Priezvisko / Surname	Pitoňák
I.2 Meno / Name	Michal
I.3 Tituly / Degrees	Doc., Mgr., PhD.
I.4 Rok narodenia / Year of birth	1979
I.5 Názov pracoviska / Name of the workplace	Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Prírodovedecká fakulta, Univerzita Komenského v Bratislave / Department of Physical and Theoretical Chemistry, Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava
I.6 Adresa pracoviska / Address of the workplace	Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava
I.7 Pracovné zaradenie / Position	docent / associate professor
I.8 E-mailová adresa / E-mail address	michal.pitonak@uniba.sk
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/5499">https://www.portalvs.sk/regzam/detail/5499</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	Počítačová chémia / Computational Chemistry
I.11 ORCID iD 3	<a href="http://orcid.org/0000-0002-0601-9488">http://orcid.org/0000-0002-0601-9488</a>

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	Prírodovedecká fakulta, UK v Bratislave / Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava	2001	chémia / chemistry
II.2 Vysokoškolské vzdelanie druhého stupňa / Second degree of higher education	Prírodovedecká fakulta, UK v Bratislave / Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava	2003	chémia, špecializácia „fyzikálna chémia“ / chemistry, specialisation "physical chemistry"
II.3 Vysokoškolské vzdelanie tretieho stupňa / Third degree of higher education	Prírodovedecká fakulta, UK v Bratislave / Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava	2006	Chemická fyzika / Chemical physics
II.4 Titul docent / Associate professor	Prírodovedecká fakulta, UK v Bratislave / Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava	2015	Teoretická a počítačová chémia / Theoretical and Computational Chemistry
II.5 Titul profesor / Professor			
II.6 Titul DrSc. / Doctor of Science (DrSc.)			

III. Súčasný a predchádzajúce zamestnanie / Current and previous employment		
III.a Zamestnanie-pracovné zaradenie / Occupation-position	III.b Inštitúcia / Institution	III.c Časové vymedzenie / Duration
Post-doc/Výskumník / Post-doc/Researcher	Prírodovedecká fakulta, UK v Bratislave / Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava	2006
Post-doc/Výskumník / Post-doc/Researcher	Ústav Organické Chémie a Biochemie, Praha, AVČR / Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Prague, Czech Academy of Sciences	2007-2010
Vedecký a odborný pracovník / Research fellow	Prírodovedecká fakulta, UK v Bratislave / Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava	2008-2015
Docent / associate professor	Prírodovedecká fakulta, UK v Bratislave / Faculty of Natural Sciences, Comenius University in Bratislava	2015 do súčasnosti / until now

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


## 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
Chemické modelovanie / Chemical modeling	Chémia / Chemistry; Chémia konverzný / Chemistry converse	I.	chémia / chemistry
Pokročilá numerická matematika a programovanie / Advanced numerical mathematics and programming	Teoretická a počítačová chémia / Theoretical and Computational Chemistry	II.	chémia / Chemistry
Vybrané kapitoly z teoretickej a počítačovej chémie (1) / Selected chapters from theoretical and computational chemistry (1)	Teoretická a počítačová chémia / Theoretical and Computational Chemistry	II.	chémia / chemistry
Moderné počítačové metódy v kvantovej chémii / 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
Chemická reaktivita / Chemical reactivity	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 4

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	II.	chémia / Chemistry
teoretická a počítačová chémia	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

### 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	1	1
V.4.2 Počet obhájených prác / Number of defended theses	1	1	1

### 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 profilového predmetu / Name of the profile course	V.5.b Študijný program / Study programme	V.5.c Stupeň / Degree	V.5.d Študijný odbor / Field of study
Bakalárska práca z teoretickej a počítačovej chémie (1) / Bachelor thesis from theoretical a computational chemistry (1)	Chémia / Chemistry; Chémia konverzný / Chemistry converse; Biochémia / Biochemistry; Biochémia konverzný / Biochemistry converse	I.	chémia / chemistry
Bakalárska práca z teoretickej a počítačovej chémie (2) / Bachelor thesis from theoretical a computational chemistry (1)	Chémia / Chemistry; Chémia konverzný / Chemistry converse; Biochémia / Biochemistry; Biochémia konverzný / Biochemistry converse	I.	chémia / chemistry
Cvičenia k bakalárskej práci z teoretickej a počítačovej chémie (2) / Exercises for bachelor thesis from theoretical a computational chemistry (2)	Chémia / Chemistry; Chémia konverzný / Chemistry converse; Biochémia / Biochemistry; Biochémia konverzný / Biochemistry converse	I.	chémia / chemistry

Chemical modeling / Chemické modelovanie	Biochémia / Biochemistry; Biochémia konverzný / Biochemistry converse	I.	Chémia / Chemistry
Čo je fyzikálna a teoretická chémia? / What is physical and theoretical chemistry?	Chémia / Chemistry	I.	chémia / Chemistry
Úvod do matematického spracovania chemických dát / Introduction to mathematical processing of chemical data	Chémia / Chemistry; Chémia konverzný / Chemistry converse	I.	chémia / chemistry
Výberová prax v chémii / Selected practice in chemistry	Chémia / Chemistry; Chémia konverzný / Chemistry converse; Biochémia / Biochemistry; Biochémia konverzný / Biochemistry converse	I.	chémia / chemistry
Základy programovania v chémii / Basics of programming in chemistry	Fyzikálna chémia / Physical Chemistry	II.	chémia / chemistry
Pokročilá numerická matematika a programovanie / Advanced numerical mathematics and programming	Fyzikálna chémia / Physical Chemistry	II.	chémia / Chemistry
Vybrané kapitoly z fyzikálnej chémie / Selected topics from physical chemistry	učiteľstvo chémie v kombinácii / teaching chemistry in combination	II,	učiteľstvo a pedagogické vedy / teacher training and education science
Vybrané kapitoly z teoretickej a počítačovej chémie (1) / Selected topics from theoretical and computational chemistry (1)	Fyzikálna chémia / Physical chemistry	II.	chémia / chemistry
Chemická reaktivita / Chemical reactivity	Fyzikálna chémia / Physical Chemistry	III.	chémia / chemistry
Doktorandský seminár z teoretickej chémie (1) / Doctoral seminary from theoretical chemistry (1)	Teoretická a počítačová chémia / Theoretical and Computational Chemistry	III.	chémia / chemistry
Doktorandský seminár z teoretickej chémie (2) / Doctoral seminary from theoretical chemistry (2)	Teoretická a počítačová chémia / Theoretical and Computational Chemistry	III.	chémia / chemistry
Doktorandský seminár z teoretickej chémie (3) / Doctoral seminary from theoretical chemistry (3)	Teoretická a počítačová chémia / Theoretical and Computational Chemistry	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	92	13
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	45	9
VI.1.3 Počet ohlasov na výstupy tvorivej činnosti / Number of citations corresponding to the research/artistic/other outputs	4258	1668
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	4258	1668
VI.1.5 Počet pozvaných prednášok na medzinárodnej a národnej úrovni / Number of invited lectures at the international, national level	3	1

VI.2. Najvýznamnejšie výstupy tvorivej činnosti / The most significant research/artistic/other outputs 5	
1.	Stabilization and Structure Calculations for Noncovalent Interactions in Extended Molecular Systems Based on Wave Function and Density Functional Theories; Riley, KE; Pitonak, M; Jurecka, P; Hobza, P; Chem. Rev. 110 (9) 5023-5063, 2010; DOI: 10.1021/cr1000173
2.	Scaled MP3 Non-Covalent Interaction Energies Agree Closely with Accurate CCSD(T) Benchmark Data; Pitonak, M; Neogrady, P; Cerny, J; Grimme, S; Hobza, ChemPhysChem 10 (1) 282-289, 2009; DOI: 10.1002/cphc.200800718
3.	Accuracy of Quantum Chemical Methods for Large Noncovalent Complexes; Sedlak, R; Janowski, T; Pitonak, M; Rezac, J; Pulay, P; Hobza, P; J. Chem. Theory Comput. 9 (8) 3364-3374, 2013; DOI: 10.1021/ct400036b
4.	A Transferable H-Bonding Correction for Semiempirical Quantum-Chemical Methods; Korth, M; Pitonak, M; Rezac, J; Hobza, P; J. Chem. Theory Comput. 6 (1) 344-352, 2010; DOI: 10.1021/ct900541n
5.	On the Structure and Geometry of Biomolecular Binding Motifs (Hydrogen-Bonding, Stacking, X-H center dot center dot center dot pi): WFT and DFT Calculations; Riley, KE; Pitonak, M; Cerny, J; Hobza, P; J. Chem. Theory Comput. 6 (1), 66-80, 2010; DOI:10.1021/ct900376r.

VI.3. Najvýznamnejšie výstupy tvorivej činnosti za ostatných šesť rokov / The most significant research/artistic/other outputs over the last six years 6	
1.	Adsorption of Organic Molecules to van der Waals Materials: Comparison of Fluorographene and Fluorographite with Graphene and Graphite; Karlicky, F; Otyepkova, E; Lo, R; Pitonak, M; Jurecka, P; Pykal, M; Hobza, P; Otyepka, M; J. Chem. Theory Comput. 13 (2017) 1328-1340, DOI: 10.1021/acs.jctc.6b01130
2.	Benchmark CCSD(T) and DFT study of binding energies in Be7-12: in search of reliable DFT functional for beryllium clusters; Labanc, D; Sulka, M; Pitonak, M; Cernusak, I; Urban, M; Neogrady, P, Mol. Phys. 116 (2018) 1259-1274, DOI: 10.1080/00268976.2017.1420259
3.	[Ni(bpy)(mal)(H2O)(3)]center dot H2O and [Ni(4,4-dmbpy)(mal)(H2O)(3)]center dot 1.5H2O: syntheses, crystal structures, magnetic properties, and computational study of stacking interactions; Uhrinova, A; Kuchar, J; Orendacova, A; Pitonak, M; Federic, J; Noga, J; Cernak, J, J. Coord. Chem. 70 (2017) 2999-3018, DOI: 10.1080/00958972.2017.1376738
4.	Off-center Gaussian functions: Applications toward larger basis sets, post-second-order correlation treatment, and truncated virtual orbital space in investigations of noncovalent interactions; Melicherck, M; Sucha, D; Neogrady, P; Pitonak, M, Int. J. Quant. Chem. 118 (2018) e25580, DOI: 10.1002/qua.25580
5.	Fe-Li Interactions in Ferrocenyllithium Compounds; Malastova, A; Vallo, J; Almasy, A; Pitonak, M; Neogrady, P; Sebesta, R, Eur. J. Inorg. Chem. 2 (2017) 483-488, DOI: 10.1002/ejic.201601114

VI.4. Najvýznamnejšie ohlasy na výstupy tvorivej činnosti / The most significant citations corresponding to the research/artistic/other outputs 7	
1.	Chem. Rev. 110 (9) 5023-5063, 2010; DOI: 10.1021/cr1000173 => Accurate and Efficient Method for Many-Body van der Waals Interactions; Tkatchenko, A; DiStasio, RA; Car, R; Scheffler, M, Phys. Rev. Lett. 108 (23) 236402, 2012; DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.236402 (citations: 1421)
2.	Chem. Rev. 110 (9) 5023-5063, 2010; DOI: 10.1021/cr1000173 => Perspective: Advances and challenges in treating van der Waals dispersion forces in density functional theory; Klimes, J; Michaelides, A, J. Chem. Phys. 137 (12) 120901, 2012; DOI 10.1063/1.4754130 (citations: 704)
3.	J. Chem. Theory Comput. 6 (1) 344-352; DOI: 10.1021/ct900541n => Optimization of parameters for semiempirical methods VI: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters; Stewart, JJP, J. Mol. Mod. 19 (1) 1-32, 2013; DOI: 10.1007/s00894-012-1667-x (citations: 849)
4.	J. Chem. Theory Comput. 6 (1) 344-352; DOI: 10.1021/ct900541n => Dispersion-Corrected Mean-Field Electronic Structure Methods; Grimme, S; Hansen, A; Brandenburg, JG; Bannwarth, C, Chem. Rev. 116 (9) 5105-5154, 2016; DOI: 10.1021/acs.chemrev.5b00533 (citations: 604)
5.	ChemPhysChem 10 (1) 282-289, 2009; DOI: 10.1002/cphc.200800718 => Efficient and Accurate Double-Hybrid-Meta-GGA Density Functionals-Evaluation with the Extended GMTKN30 Database for General Main Group Thermochemistry, Kinetics, and Noncovalent Interactions; Goerigk, L; Grimme, S, J. Chem. Theory Comput. 7 (2) 291-309, 2011; DOI: 10.1021/ct100466k (citations: 678)

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 8	
1.	Vedúci / Principal Investigator: VEGA 1/0092/14 „Presný a výpočtovo efektívny kvantovo chemický popis nekovalentných interakcií“ / "Accurate and computationally efficient quantum chemical description of noncovalent interactions"
2.	Vedúci / Principal Investigator: APVV-15-0105 „Nekovalentné interakcie v systémoch s rastúcou zložitou“ / "Noncovalent interactions in systems with increasing complexity"

3.	Spoluriešiteľ / Investigator: KEGA 011UMB-4/2017 „Rozširovanie kompetencií v práci s ekosystémom vysokovýkonného počítania“ / "Broadening of competencies in working in the high-performance computing ecosystem"
4.	Spoluriešiteľ / Investigator: VEGA 1/0712/18 „Senzitizéry na báze benzotiazolu a tiazol- kondenzovaných heterocyklov pre fotovoltaické aplikácie: od počítačového modelovania k syntézam a praktickému využitiu vo farbivom senzibilizovaných solárnych článkoch“ / "Sensitizers based on benzothiazol and thiazol-condensed heterocycles for photovoltaic applications: from computer modelling to synthesis and practical usage in stain-sensitized solar cells"
5.	

VII. Prehľad aktivít v organizovaní vysokoškolského vzdelávania a tvorivých činností 9 / 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

**VIII. Prehľad zahraničných mobilit 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 (uviest 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)

**IX. Iné relevantné skutočnosti / Other relevant facts 10**

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

--