

**Správa inauguračnej komisie na vymenovanie
doc. RNDr. Jána Titiša, PhD.
zamestnanca Katedry chémie Fakulty prírodných vied UCM v Trnave
za profesora
v odbore habilitačného a inauguračného konania Anorganická chémia**

Dňa 10. októbra 2019 požiadal doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. o začatie vymenúvacieho pokračovania za profesora v odbore habilitačného a inauguračného konania Anorganická chémia. Spolu so žiadosťou predložil požadované doklady v zmysle Rozhodnutia rektora č. 16/2017, ktorým sa určujú kritériá na získanie vedecko-pedagogických titulov docent a profesor na Univerzite P. J. Šafárika v Košiciach a v zmysle Rozhodnutia rektora č. 17/2017 o určení obsahu inauguračného spisu na UPJŠ v Košiciach. Vedecká rada Prírodovedeckej fakulty UPJŠ v Košiciach na svojom zasadnutí dňa 16. októbra 2019 schválila začatie vymenúvacieho konania za profesora v odbore habilitačného a inauguračného konania Anorganická chémia. Vedecká rada Prírodovedeckej fakulty UPJŠ v Košiciach zároveň schválila inauguračnú komisiu a oponentov v zložení:

Predseda

prof. RNDr. Juraj Černák, DrSc.

Ústav chemických vied, Prírodovedecká fakulta UPJŠ v Košiciach

vedný odbor: Anorganická chémia

funkčné zaradenie: profesor

Členovia

prof. Ing. Marián Koman, DrSc.,

Ústav anorganickej chémie, technológie a materiálov FCHPT STU v Bratislave

vedný odbor: Anorganická chémia

funkčné zaradenie: profesor

prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.

Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta UK v Bratislave

vedný odbor: Chemická fyzika

funkčné zaradenie: profesor

prof. RNDr. Petr Štěpnička, PhD., DSc

Katedra anorganickej chémie, Prírodovedecká fakulta UK v Prahe, Česká republika

vedný odbor: Anorganická chémia

funkčné zaradenie: profesor

Oponenti

prof. RNDr. Jiří Pinkas, PhD.

Ústav chémie Prírodovedecká fakulta MU v Brne, Česká republika

vedný odbor: Anorganická chémia

funkčné zaradenie: profesor

prof. RNDr. Gustáv Plesch, DrSc.

Katedra anorganickej chémie Prírodovedecká fakulta UK v Bratislave

vedný odbor: Anorganická chémia

funkčné zaradenie: profesor

prof. Ing. Marian Valko, DrSc.

Ústav fyzikálnej chémie a chemickej fyziky FCHPT STU v Bratislave

vedný odbor: Fyzikálna chémia

funkčné zaradenie: profesor

Dátum a miesto zverejnenia inauguračnej prednášky:

Dňa 08. februára 2020 v denníku SME a na www stránkach univerzity a fakulty

Názov inauguračnej prednášky:

Štruktúrne aspekty statického a dynamického magnetizmu komplexných molekúl

Dátum a miesto konania verejnej inauguračnej prednášky:

26. februára 2020 o 08:00 hod. na Prírodovedeckej fakulte UPJŠ v Košiciach, vo Veľkej zasadacej miestnosti Rektorátu UPJŠ, Šrobárova 2, Košice.

Všeobecné údaje

Uchádzač, doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. sa narodil 07. októbra 1979 v Nitre. V rokoch 1999-2004 študoval odbor Chémia na Fakulte prírodných vied Univerzity sv. Cyrila a Metoda (FPV UCM) v Trnave. Štúdium ukončil v roku 2004 a získal titul Mgr. Následne v rokoch 2004 až 2008 absolvoval na Fakulte chemickej a potravinárskej technológie Slovenskej technickej univerzity (FCHPT STU) v Bratislave doktorandské štúdium v odbore Anorganická chémia a po úspešnej obhajobe dizertačnej práce získal v roku 2008 titul PhD. V roku 2006 ukončil rigorózne konanie na materskom pracovisku, na Fakulte prírodných vied Univerzity sv. Cyrila a Metoda v Trnave, a tým získal titul RNDr. Habilitačnú prácu s názvom „Magneto-štruktúrne *D* korelácie v komplexoch prechodných kovov“ v odbore Anorganická chémia obhájil na Fakulte chemickej a potravinárskej technológie Slovenskej technickej univerzity v Bratislave v roku 2014.

Doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. už počas doktorandského štúdia v roku 2006 nastúpil na Katedru chémie Fakulty prírodných vied Univerzity sv. Cyrila a Metoda v Trnave najprv na funkčné miesto asistenta a neskôr po obhajobe PhD. práce v r. 2008 na funkčné miesto odborného asistenta. V roku 2014, po získaní titulu docent, nastúpil na funkčné miesto docenta a na tejto pozícii pôsobí aj v súčasnosti.

V roku 2003 doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. absolvoval mesačný pobyt na Katedre analytickej chémie Prírodovedeckej fakulty Univerzity Karlovej v Prahe, v roku 2006 trojtýždňový študijný pobyt na Technische Universität v Darmstadte (Nemecko) a krátky prednáškový pobyt na Leibnitz Universität Hannover. V súčasnosti pokračuje v intenzívnej vedeckej spolupráci s kolegami na Palackého univerzite v Olomouci (ČR), Univerzite v Hannoveri (SRN) a Energy Technologies Research Institute, University of Nottingham (UK). Vedeckú spoluprácu „na diaľku“ realizoval, resp. realizuje s NHMFL Florida a s univerzitami vo Wroclawi a Kyjeve.

Hodnotenie vedeckej činnosti

Doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. sa výskumnej problematike zameranej na magnetické vlastnosti koordinačných zlúčenín začal venovať už počas doktorandského štúdia na FCHPT STU v Bratislave, keď študoval magneto-štruktúrne korelácie v komplexoch Ni(II). Ide o prielomové kombinované experimentálno-teoretické práce globálneho impaktu. Po ukončení doktorandského štúdia a nástupe na FPV UCM v Trnave problematiku magnetoaktivity koordinačných zlúčenín a molekulového magnetizmu rozvinul. Jeho výskum sa sústredil najmä na problematiku magneto-štruktúrnych korelácií v súvislosti s magnetickou anizotropiou, výmennou interakciou a pomalými relaxačnými dejmi. Výsledky svojho výskumu publikoval v jednej kapitole monografie a vo viac ako 65-ich pôvodných vedeckých prácach v špičkových vedeckých časopisoch evidovaných vo WoS, z toho značný počet v top časopisoch v oblasti anorganickej chémie, ako sú Inorganic Chemistry, Chemical Communications a Dalton Transactions. Okrem toho zverejnil značný počet ďalších publikačných výstupov vo vedeckých a konferenčných zborníkoch a výsledky výskumu prezentoval aj v podobe prednášok na rôznych medzinárodných fórach a ako pozvaný prednášateľ. O význame jeho vedeckých prác a aktuálnosti riešenej problematiky svedčí aj vysoký počet ohlasov na jeho práce, viac ako 950 registrovaných v citačných indexoch. Jeho H-index je 20 (stav ku koncu roku 2019 podľa WoS).

V súvislosti s jeho výskumom zameraným na magnetoaktívne komplexy uchádzač zaviedol na pracovisku nový teoretický aparát a súdobé metódy kvantovej chémie (DFT, *ab initio*) najmä za účelom štúdia a opisu vzťahu štruktúra–magnetické vlastnosti.

Najdôležitejšie vedecké výsledky doc. RNDr. Jána Titiša, PhD., ktoré dosiahol počas svojej doterajšej kariéry a pri výchove doktorandov, zahŕňajú:

- Formulácia a publikovanie pôvodných magnetoštruktúrnych D -korelácií pre hexakoordinované komplexy Ni(II), zistenie kvázi-lineárnej závislosti D vs D_{str} , ktoré umožnili následnú racionálnu syntézu magneticky anizotropných komplexov Ni(II).
- Opis vzťahu experimentálnych hodnôt D -parametrov pre komplexy Co(II) a ich modelovanie pomocou moderných kvantovo-chemických výpočtov (ORCA) viedlo k objavu, že hodnota D -parametra je silne závislá na uhlových deformáciách chromofóru.
- Zavedenie simultánneho fitovania záznamových magnetických funkcií, čo umožňuje jednoznačné stanovenie znamienka parametra štiepenia v nulovom poli D pre práškové vzorky. Podiel na vývoji programov POLYATOM, TERMS a MIF&FIT z pracoviska UCM v Trnave.
- Rozpracovanie pokročilej teórie magnetizmu multipletov kryštálového poľa, opis súvislosti medzi elektrónovou štruktúrou komplexov determinovanou medzielektrónovou repulziou a potenciálom kryštálového poľa a magnetickými vlastnosťami odvodenými z multipletov kryštálového poľa. Tento prístup umožnil rekonštrukciu magnetických parametrov z experimentálne jednoducho získateľných elektrónových spektier.
- Identifikácia poľom indukovanej pomalej magnetickej relaxácie v rade jednojadrových komplexov obsahujúcich ako centrálné atómy Co(II), Ni(II), Cu(II) a dokonca Mn(II), ktorý má zanedbateľnú magnetickú anizotropiu; v prípade komplexov Ni(II) a Cu(II) sa jedná o prioritu vo svetovom meradle a vykazuje znaky objavu.
- Opis vzťahu experimentálne zistených relaxačných kanálov (ich počtu a charakteru) na jednej strane a supramolekulej štruktúry a externého magnetického poľa na druhej strane.

Doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. prostredníctvom svojej výskumnej práce vytvoril aj vlastnú vedeckú školu, ktorá je zameraná predovšetkým na teoretické interpretácie magneto-štruktúrnych korelácií a z nej vyplývajúcu racionálnu syntézu magneticky aktívnych komplexov s požadovanými vlastnosťami.

Doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. bol zodpovedným riešiteľom 3 vedeckých projektov a vedúcim skupiny riešiteľov za FPV UCM v Trnave, resp. spoluriešiteľom ďalších 8 vedeckých projektov financovaných z domácich grantových agentúr (VEGA, APVV). V súčasnosti vedie jeden projekt VEGA (ukončený v decembri 2019) a podieľa sa na riešení jedného projektu APVV ako hlavný riešiteľ za FPV UCM v Trnave.

Výsledky vo vedeckej výchove

Doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. bol školiteľom troch doktorandov, ktorí úspešne obhájili svoje dizertačné práce v študijnom programe Anorganická chémia v časovom období 2016-2019.

Hodnotenie pedagogickej činnosti

Doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. začal pedagogicky pôsobiť v roku 2004 už počas doktorandského štúdia na FCHPT STU v Bratislave, keď viedol laboratórne cvičenia z anorganickej chémie. Od roku 2006 pedagogicky pôsobí na FPV UCM v Trnave, pričom počas tohto obdobia participoval na všetkých formách výučby od laboratórnej v začiatkoch pedagogického pôsobenie až po prednášky a k nim patriace semináre najmä v ostatnom období po menovaní docentom. Celkove prednášal, resp. aj v súčasnosti prednáša 5 predmetov. Za významný príspevok v tejto oblasti je možné považovať to, že do pedagogického procesu zaviedol aj nové prednášky, menovite Magnetochemia v roku 2013 a Počítačové modelovanie molekúl v roku 2014. Okrem toho významne inovoval niektoré ďalšie predmety, napr. predmet Chémia koordinačných zlúčenín. Je spoluautorom 2 skrípt a VŠ učebných textov. Viedol 6 bakalárskych prác, 8 magisterských diplomových prác, bol konzultantom jednej rigorózneho práce a viedol nadaných študentov formou ŠVOČ. Pôsobil aj ako oponent záverečných prác a predseda, resp. člen

štátnicových komisií a komisie pre rigorózne skúšky. Podieľal sa na príprave akreditačného spisu na akreditáciu bakalárskeho študijného programu Chémia a v tomto študijnom programe pôsobí ako garant. Významná je jeho zahraničná spolupráca v oblasti pedagogiky, najmä s doktorandmi z Leibnitz Universität Hannover (SRN).

Zhodnotenie inauguračnej prednášky

Doc. Titiš v rámci svojej inauguračnej prednášky nazvanej „Štruktúrne aspekty statického a dynamického magnetizmu komplexných molekúl“ predstavil súčasný stav problematiky v oblasti molekulového magnetizmu v medzinárodnom výskumnom priestore a porovnal ho so súčasným stavom na Slovensku s presahom do pedagogického procesu, najmä do doktorandského štúdia. V rámci prednášky sa sústredil na teoretické aspekty molekulového magnetizmu s dôrazom na magneto-štruktúrne korelácie, ale predstavil aj aplikačné možnosti jednomolekulových magnetov. Súčasne predstavil aj svoju vedeckú školu a jej príspevok k rozvoju anorganickej chémie. Z prezentovaných výsledkov bol zrejмый prínos vedeckej školy doc. Titiša k rozvoju poznania v študovanej oblasti v širšom kontexte rozvoja vednej disciplíny. Prednáška bola prezentovaná na vysokej úrovni po didaktickej aj vedeckej stránke. Prednáška vyvolala bohatú diskusiu, v rámci ktorej inaugurant reagoval na otázky a komentáre vecne a so znalosťou súčasného stavu problematiky.

Všetky oponentské posudky o odbornej a pedagogickej spôsobilosti doc. RNDr. Jána Titiša, PhD. na vymenovanie za profesora v odbore habilitačného a inauguračného konania Anorganická chémia sú jednoznačne pozitívne.

Prof. RNDr. Jiří Pinkas, PhD. konštatuje, že pán doc. Titiš je skúseným a výkonným pedagógom, rozvinul nové oblasti magnetochemie a výpočtovej chémie vo výučbe anorganickej chémie a významným podielom prispieva k výchove nových chemikov. Jeho pedagogická činnosť prekračuje požiadavky na profesora v odbore Anorganická chémia.

Vedecko-výskumnej činnosti sa pán doc. Titiš venuje od roku 2005. Jeho práca je prevažne orientovaná na prípravu a spektroskopickú charakterizáciu komplexov prechodných kovov a štúdium ich magnetických vlastností. Hlavným cieľom je racionálna syntéza zlúčenín, ktoré sa správajú ako jednomolekulové magnety. Prostriedkom tohoto výskumu je hľadanie korelácií medzi štruktúrnymi parametrami molekúl, ich elektrónovou štruktúrou a magnetickým chovaním, najmä magnetickou anizotropiou.

Výsledky svojej práce publikoval v 67 pôvodných prácach v odborných časopisoch (podľa WOS január 2020) a zhrnul v jednej kapitole v knihe. Vysoký počet citácií na jeho práce (969 bez autocitácií a jeho h-index je 20) ukazuje na veľmi dobrú akceptáciu výsledkov komunitou vedcov, ktorí sa zaoberajú magnetochemickým výskumom. Z 18 prác predložených k tomuto konaniu je v 13 prípadoch prvým alebo korešpondujúcim autorom. Jeho práca v Inorg. Chem. z roku 2014 získala 99 citácií. Výsledky vedeckého výskumu tiež prezentoval na domácich a medzinárodných konferenciách v USA, Francúzsku, Poľsku a Nemecku.

Doc. Ján Titiš počas svojho pôsobenia na FPV Univerzity sv. Cyrila a Metoda v Trnave preukázal, že je významnou a rešpektovanou vedeckou osobnosťou, ktorá je pre Katedru chémie i pro fakultu ako celok veľkým prínosom. Pracuje vo veľmi aktuálnych vedecko-výskumných oblastiach anorganickej chémie a jeho vedecký prínos a počet a kvalita publikačných výstupov znesie medzinárodné porovnanie.

Prof. RNDr. Gustáv Plesch, DrSc. vo svojom posudku uviedol, že ťažiskom väčšiny autorových prác ako v predloženom výbere tak aj ostatných publikácií bola analýza a interpretácia magnetických experimentov, menovite merania teplotnej závislosti magnetickej susceptibility a pol'ovej závislosti magnetizácie. Táto analýza sa podľa potreby vykonala jednak na štandardnej úrovni pomocou formálneho spinového Hamiltoniánu, prípadne pomocou komplexnejšieho prístupu, ktorý bol autorom rozpracovaný. Tejto oblasti sa v posledných rokoch venuje v medzinárodnom meradle vysoká pozornosť, pretože teoretické pochopenie kolektívnych magnetických javov na molekulárnej úrovni a experimentálne zvládnutie syntézy a charakterizácie relevantných zlúčenín otvára perspektívnu možnosť prípravy magnetov na nanoúrovni, u ktorých je možné cielene ladiť ich magnetické vlastnosti.

Počas svojej vedeckej činnosti bol doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. zodpovedným riešiteľom 5 domácich projektov a participoval na riešení viacerých ďalších ako spoluriešiteľ.

Doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. počas svojho pôsobenia v rokoch 2006 - 2019 vyvíjal aj bohatú pedagogickú činnosť ako prednášajúci. Zaviedol tiež 2 nové prednášky. Bol vedúcim veľkého množstva bakalárskych a diplomových prác a vyškolil troch doktorandov.

Doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. je vyprofilovanou vedeckou osobnosťou, ktorá okrem vysoko kvalitnej vedeckej práce na špičkovej medzinárodnej úrovni vykazuje aj aktívnu pedagogickú činnosť. Významne prispel k rozvoju vedeckého poznania vo svojej oblasti bádania. Jeho vedecká a pedagogická činnosť plne spĺňajú kritériá pre udelenie hodnosti profesora na Univerzita Pavla Jozefa Šafárika v Košiciach.

Prof. RNDr. Marian Valko, DrSc. vo svojom posudku zdôraznil, že vedeckovýskumná činnosť doc. Titiša je bohatá. K dnešnému dňu zahŕňa viac ako 70 impaktovaných publikácií, prevažne v renomovaných zahraničných časopisoch. Viac ako polovica prác inauguranta bola opublikovaná v časopisoch „Inorganic Chemistry“ (ACS) a „Dalton Transactions“ (RSC), ktoré predstavujú absolútnu špičku v odbore anorganická chémia. Kvalitu publikačných výstupov dokumentuje aj vysoko nadpriemerný citačný ohlas (viac ako 900 SCI citácií). H-index doc. Titiša je 15, čo vzhľadom k jeho veku predstavuje vysoko nadpriemernú hodnotu tohto ukazovateľa. Doc. Titiš sa vyprofiloval pod vedením prof. Boču na renomovaného odborníka v magnetochémii.

Oponent prof. Valko uviedol, že pedagogickú činnosť doc. Titiša možno hodnotiť ako rozsiahlu a úspešnú. Rozsah prednášanej problematiky je široký a zahŕňa predmety Počítačové modelovanie molekúl, Chémia koordinačných zlúčenín, Magnetochémia, Chemická väzba a chemická štruktúra a iné predmety. Doc. Titiš je spoluautorom dvoch skript z problematiky Anorganickej chémie a Počítačového modelovania molekúl.

Prof. Valko na záver svojho posudku konštatuje, že vzhľadom na dosiahnuté vedecké výsledky a bohatú pedagogickú činnosť jednoznačne doporučuje udeliť doc. RNDr. Jánovi Titišovi, PhD. vedecko-pedagogický titul profesor v odbore Anorganická chémia

Inauguračná komisia na svojom zasadnutí konštatovala, že doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. svojou inauguračnou prednáškou a odpoveďami v následnej diskusii potvrdil oprávnenosť návrhu na jeho menovanie **za profesora v odbore habilitačného a inauguračného konania Anorganická chémia.**

Stanovisko inauguračnej komisie a oponentov

Inauguračná komisia posúdila dosiahnuté výsledky vedeckovýskumnej činnosti doc. RNDr. Jána Titiša, PhD., jeho publikačné výstupy a registrované ohlasy na nich, jeho pedagogické pôsobenie, pozitívne posudky oponentov a celkové jeho uznanie v domácej a medzinárodnej vedeckej komunite, a súčasne konštatovala, že inauguračná prednáška, v rámci ktorej uchádzač predstavil svoj celkový prínos a prínos jeho vedeckej školy k rozvoju odboru, bola na vysokej odbornej a didaktickej úrovni. Na základe uvedeného inauguračná komisia dospela k záveru, že doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. je výraznou vedeckou a pedagogickou osobnosťou známou vo vedeckej komunite nielen na Slovensku, ale i v zahraničí. Komisia sa stotožnila s názorom oponentov, že doc. RNDr. Ján Titiš, PhD. jednoznačne preukázal splnenie kvantitatívnych kritérií Prírodovedeckej fakulty Univerzity P. J. Šafárika v Košiciach na získanie vedecko-pedagogického titulu profesor, ako aj všetkých náležitostí požadovaných podľa § 5 ods. 11 Vyhlášky MŠVV a Š SR 246/2019 Z. z. v platnom a účinnom znení o postupe získavania vedecko-pedagogických titulov docent a profesor, a že jeho vymenovanie za profesora v odbore habilitačného a inauguračného konania Anorganická chémia sa opiera o jeho medzinárodne potvrdenú a rešpektovanú vedeckú a pedagogickú úroveň.

Komisia na základe uvedeného odporúča vymenovať doc. RNDr. Jána Titiša, PhD. za profesora v odbore habilitačného a inauguračného konania Anorganická chémia.

V Košiciach 26. februára 2020

prof. RNDr. Juraj Černák, DrSc.
predseda komisie