

Životopis

Prof. RNDr. Miroslav Urban, DrSc.

Osobné údaje: Narodený 6. júna 1942 v Martine

Ženatý od r. 1964 (manželka Tatiana Urbanová, MUDr.). Dve deti, Martin (1968, Ing., strojný inžinier) a Zuzana Závodská (1970, MUDr.).

Vedný (študijný) odbor: Teoretická a počítačová chémia, kvantová chémia. Fyzikálna chémia, Chemická fyzika.

Pracovisko: Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Bratislava

Vzdelanie:

1959-1964 Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Bratislava

1968-1972 Vedecká aspirantúra na Karlovej Univerzite a na ČSAV v Prahe (Školitelia: J. Koutecký, J. Paldus, R. Polák)

1972, 1989 CSc. v odbore fyzikálna chémia; DrSc. v odbore chemická fyzika

Priebeh doterajšieho pracovného pôsobenia:

1964-1980 Asistent na Katedre fyzikálnej chémie, Prírodovedecká fakulta Univerzity Komenského, Bratislava (PRIF UK).

1980-1990 Docent fyzikálnej chémie na Katedre fyzikálnej chémie, PRIF UK

1990-1997 Vedúci Katedry fyzikálnej chémie, PRIF UK

2000-2007 Vedúci Katedry fyzikálnej a teoretickej chémie, PRIF UK

1990 – 2005 Profesor chemickej fyziky na Katedre fyzikálnej chémie, PRIF UK

2005 - 2008 Profesor na funkčnom mieste v odbore 4.1.21 Teoretická a počítačová chémia na Katedre fyzikálnej a teoretickej chémie, PRIF UK

2009 - 2016 Profesor (od r. 2015 vedecký pracovník) Materiálovotechnologická fakulta STU so sídlom v Trnave; Profesor na 30% úväzok, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, PRIF UK.

1017 - Profesor na 54% úväzok, Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, PRIF UK

Ašpiranti a doktorandi ktorých skolil, vedecká škola:

Po ukončení kandidátskej práce na Univerzite Karlovej pracoval a založil skupinu teoretickej a počítačovej chémie na Prírodovedeckej fakulte UK.

Vyškolení ašpiranti resp. doktorandi: 12, školí 1, podieľal sa na školení ďalších.

Traja z nich sú profesori DrSc., dvaja docenti - jeden DrSc. Ide o významné vedecké a pedagogické osobnosti: Prof. RNDr. Vladimír Kellö, DrSc., Prof. RNDr. Ivan Černušák, DrSc., Prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc., doc. Pavel Neogrady DrSc., doc. Miroslav Medveď.

Vedecká a publikačná činnosť:

Vedecké práce v domácich a zahraničných časopisoch:

128 vedeckých publikácií, väčšinou v zahraničných karentovaných časopisoch.

Monografie 3, kapitoly v monografiách 3, počítačové programy.

Počet WOS citácií (s vylúčením samocitácií), vrátane na monografie, viac než 4400.

Vedecké zameranie: Teoretická a počítačová chémia, rozvoj metód a počítačových programov kvantovej chémie. Zaviedol *ab initio* metódy kvantovej chémie v Československu, vrátane počítačového programu *Comenius*. Významná je kniha P. Čársky, M. Urban: "Ab initio calculations. Methods and applications in chemistry". *Lecture Notes in Chemistry*, Vol. 16. Springer Verlag, Berlin, 1980. VI+247 str. (viac ako 350 WOS citácií). So spolupracovníkmi prispel k rozvoju metódy spriahnutých klastrov (CC) pre molekuly s uzavrenou aj otvorenou elektrónovou štruktúrou (radikály). Vytvorené programy sú súčasťou programu MOLCAS (Univerzita Lund, Švédsko), ktorý patrí k významným svetovo distribuovaným programom kvantovej chémie (práca MOLCAS 7: The Next Generation, J.

Comput. Chem. 31, 224 – 247, 2010 bola citovaná viac než 1300 krát). Kľúčová publikácia v J. Chem. Phys. z r. 1985 bola citovaná viac než 550 krát a viedla k zavedeniu jednej z najpoužívanejších metód kvantovej chémie pre presné výpočty vlastností molekúl - CCSD(T), ktorej výsledky sa označujú ako “zlatý štandard kvantovej chémie”. Prvá etapa vývoja týchto metód je zhrnutá v diele M. Urban, I. Černušák, V. Kellö, J. Noga: "Electron correlation in molecules". In *Methods in Computational Chemistry*, Vol. I.: *Electron Correlation in Atoms and Molecules*. Ed. S. Wilson, Plenum Press, New York 1987, str. 117-250 (viac ako 300 citácií). Novšie výsledky sú zhrnuté v kapitolách v troch monografiách. Aplikácie zahŕňujú chemickú reaktivitu, medzimolekulové interakcie, elektrické a spektroskopické vlastnosti atómov a molekúl, návrh nových materiálov. Z predpovedí vlastností atómov a molekúl metódami relativistickej kvantovej chémie je o.i. zaujímavý výpočet vlastností superťažkých atómov (relativistické efekty sú zhrnuté v prehľade M. Iliáš, V. Kellö, M. Urban „Relativistic effects in atomic and molecular properties“, Acta Phys. Slovaca 60, 259-391 (2010)).

Členstvo v medzinárodných nevládných organizáciách, ďalšie profesionálne aktivity:

1990-1991	Prodekan Prírodovedeckej fakulty UK, Bratislava
1990-2009	Člen vedeckej rady Prírodovedeckej fakulty UK, Bratislava
1990-2007	Člen vedeckej rady Univerzity Komenského, Bratislava
1990-1995	Predseda Akreditačnej komisie, poradného orgánu vlády SR
1999-2002	Člen Akreditačnej komisie, poradného orgánu vlády SR
1993-	Člen riadiaceho výboru "Internat. Soc. for Theoretical Chemical Physics"
1998-	Zakladajúci člen Slovenskej akademickej spoločnosti.
1999-	Zvolený za člena WATOC board (World Association of Theoretical and Computational Chemists).
2008-	Zvolený za člena International Academy of Quantum Molecular Science (IAQMS).
2008-	Zvolený za člena Učenej spoločnosti Slovenska.
2012-2019	Člen Akreditačnej komisie, poradného orgánu vlády SR

Vybrané zahraničné pobyty na základe pozvania:

1984	6 mesiacov "posdoctoral fellow" v Quantum Theory Project, University of Florida, Gainesville, USA
1991,1992	1 mesiac (1991) resp. 6 mesiacov (1992) "visiting scientist" v Quantum Theory Project, University of Florida, Gainesville, USA
1987-2004	viacero jedno až dvojmesačných vedeckých pobytov na Max-Planck ústave pre Astrofyziku, Garching, Nemecko
1989-1999	viacero dvojmesačných vedeckých pobytov na Katedre teoretickej chémie, Univerzita v Lunde, Švédsko
2001	1 mesiac, Distinguished Senior Visiting Professor, Center for Computational Quantum Chemistry, University of Georgia, USA.
2005	6 týždňov, Visiting Professor, University of Waterloo, Kanada

Vybrané pozvania na prednášky:

1978	9th Symposium on Problems of Quantum Chemistry, Kühlungsborn, Nemecko
1985,1987	4th and 5th School of Advances Methods of Quantum Chemistry, Bachotek, Poľsko
1987	Congress of the World Association of Theoretical Organic Chemists, Budapest, Maďarsko
1993	Quantum-chemical Micro symposium: Molecules and Solids, Method and Applications, Berlin, Nemecko
1993	1 st Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, Girona, Španielsko
1996	Workshop on Electronic Structure of Complex Systems, Budapest

- 1996 Recent Advances in Computational Quantum Chemistry, Munich, Nemecko
- 1997 Electron Correlation: From Atoms to Biomolecules, Orenas, Švédsko
- 1997 9th International Congress of Quantum Chemistry, Atlanta, USA
- 1999 11th European Seminar on Computational Methods in Quantum Chemistry, Zakopané, Poľsko.
- 2003 Symposium on Recent developments in Computational Chemistry: Can Theory answer Questions in Applied Natural Sciences? Univ. for Bodenkultur, Wien
- 2004 The Systematic Treatment of Electronic Correlation. A Celebration of the Science of Rodney J. Bartlett. Univ. of Florida, Gainesville, St. Simons Island, Georgia, USA;
- 2004 Response Theory and Molecular Properties. Aarhus Univ. Sonderborg, Dánsko.
- 2005 International Conference of Computational Methods in Science and Engineering (ICCMSE 2006), Chania, Crete, Grécko.
- 2007 Symposium of the Advanced Methods of Quantum Chemistry, Torun, Poland.
- 2008 Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Sydney, Australia;
- 2008 Konferencia "Beyond the non-relativistic Schrödinger equation", Auckland, New Zealand.
- 2009 Simulations and dynamics for nanoscale and biological systems. University of Tokyo.
- 2009 Plenárna prednáška, 13th International Congress of Quantum Chemistry, Helsinki.
- 2010 International Conference of Computational Methods in Sciences and engineering, ICCMSE 2010, Kos, Grécko
- 2011 XVIth Intern. Workshop on Quant. Systems. Kanazawa, Japonsko.
- 2011 Central European Symposium on Theoretical Chemistry (CEST), Torun, Poland.
- 2013 5th Intern. Symposium on Theoretical Chemistry, Nara, Japonsko
- 2014 Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2014), Santiago, Chile.
- 2016 Centre For Theoret. Chem. and Chemical Physics, Inst. for Advanced Study, A celebration of P. Schwerdfeger 60th Birthday, Auckland, Nový Zeland.
- 2017 57th Sanibel Symposium, St. Simons Island, GA, USA.
- 2017 Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017), Mníchov, Nemecko.

Viacere ďalšie pozvané prednášky, napr. v rámci zahraničných spoluprác, na viacerých zahraničných univerzitách Nashville, Santa Barbara, New York, Auckland, Lund, Štokholm, Garching, Toruň, Atény, Praha, na ďalších miestach v ČR, Maďarsku, Rakúsku atď.

Vyznamenania:

- 1987 Štátna cena, za vedeckú prácu v teoretickej chémii, (spoluocenení S. Biskupič, I. Hubač, V. Kellö, V. Kvasnička, V. Laurinc, J. Noga)
- 1997, 2002 Strieborná resp. Zlatá medaila Univerzity Komenského
- 1998 Krištáľové krídlo
- 2000 Pamätná medaila Prírodovedeckej fakulty UK k 60. výročiu jej založenia
- 2001 AV ČR: Čestná oborová medaile J. Heyrovského za zásluhy v chemických vedách
- 2002 SAV: Čestná plaketa D. Ilkoviča za zásluhy vo fyzikálno-chemických vedách
- 2009 Cena podpredsedu vlády a ministra školstva SR za vedu a techniku.
- 2013 Rad Ľ. Štúra 2. tr., udelený prezidentom Slovenskej republiky

Pedagogická práca na Prírodovedeckej fakulte:

Množstvo rozmanitých cvičení, seminárov z fyzikálnej chémie, prednášky Fyzikálna chémia II pre pedagogické kombinácie. V priebehu rokov prednášky a semináre pre študentov odboru chémie: Matematika a programovanie, Teória chemickej väzby, Kvantová fyzika, Kvantová chémia, Teória chemickej reaktivity, Relativistické efekty v chémii, novšie

prednášky a semináre z predmetu Počítačové modelovanie. So spolupracovníkmi vybudoval nové študijné programy, najmä Teoretickú a počítačovú chémiu.

Na Prírodovedeckej fakulte UK bol garantom študijného programu Chémia na bakalárskom stupni, garantom programu Teoretická a počítačová chémia na magisterskom a doktorandskom stupni vzdelávania.

Viedol celý rad študentov - víťazov na medzinárodných, celoštátnych a fakultných kolách súťaže študentských vedeckých prác a študentov ocenených cenou dekana PRIF UK a rektora UK.

Pedagogická práca na Materiálovotechnologickej fakulte STU:

Prednášajúci predmetu a vedúci seminára, "Všeobecná chémia", 1. Roč., študijný odbor Materiály, študijný program Materiálové inžinierstvo.

Iné aktivity:

Príspevok k budovaniu prvej Akreditačnej komisie, poradného orgánu vlády SR vytvorenie algoritmov pre akreditácie a hodnotenie vzdelávacej a vedeckej práce vysokých škôl a k medzinárodnej akceptácii AK. Procesy viedli v tých rokoch k posilneniu významu vedeckej práce na univerzitách.

V Bratislave, 10. Feb. 2020