

**Děkanovi Fakulty chemicko-inženýrské
Vysoké školy chemicko-technologické v Praze**

**Návrh na zahájení řízení ke jmenování profesorem
pro obor Fyzikální chemie**

Jméno: **Alexandr Malijevský**

Rodné číslo: 77xxxxx

Bydliště: xxxxxxxx

Pracoviště: Ústav fyzikální chemie

Návrh písemně podpořili:

1. **Prof. Robert Evans, Fellow of Royal Society, Bristol University**
2. **Prof. Andrew Parry, Imperial College London**
3. **Prof. Serafim Kalliadasis, Imperial College London**

Ke svému návrhu přikládám (podle § 74, odst. 2 zákona č. 111/1998 Sb., o vysokých školách a o změně

a doplnění dalších zákonů) v písemné a elektronické formě:

1. Soubor v nerozebíratelné úpravě obsahující

- a) životopis,
- b) přehled pedagogické a odborné činnosti
- c) přehled vědeckých a odborných prací, vynálezecké a realizační činnosti, odborně-spoločenské aktivity, mezinárodní spolupráce, domácích a zahraničních stáží a nejvýznamnějších tvůrčích aktivit,
- d) stručný pedagogický projekt.

2. Dále ke svému návrhu přikládám¹:

- doklady o dosaženém vysokoškolském vzdělání a získaných titulech,
- doklad o habilitačním řízení.

Datum: 7.4.2022

Podpis:

¹Doklady se předkládají na děkanát fakulty k nahlédnutí v originále či jako úředně ověřené kopie a vracejí se zpět uchazeči.

Obsah

1.	Životopis.....	3
1.1.	Osobní údaje	3
1.2.	Vzdělání.....	3
1.3.	Průběh praxe	3
2.	Pedagogická činnost	4
2.1.	Přehled	4
2.2.	Vedení studentů	4
2.3.	Autorství učebních textů a pomůcek, další pedagogické aktivity.....	4
2.4.	Inovační přínos pro pedagogickou práci.....	5
2.5.	Pedagogický projekt	5
3.	Vědecká aktivita	7
3.1.	Přehled vědecko-výzkumných a inovačních aktivit.....	7
3.2.	Vědecké práce v impaktovaných časopisech evidovaných v databázi Web of Science	8
3.3.	Vědecké práce v časopisech evidovaných v databázi Scopus, které nejsou uvedené v databázi Web of Science.....	12
3.4.	Vědecké práce v ostatních časopisech s recenzním řízením.....	12
3.5.	Kapitoly v monografiích, monografie.....	12
3.6.	Články v časopisech bez recenzního řízení, články ve sbornících	12
3.7.	Osobně přednesené přednášky v zahraničí a na mezinárodních konferencích	13
3.8.	Osobně přednesené přednášky na národních konferencích	14
3.9.	Odpovědný řešitel zahraničních grantů a projektů	14
3.10.	Odpovědný řešitel domácích grantů a projektů	14
3.11.	Spoluřešitel zahraničních grantů a projektů.....	15
3.12.	Spoluřešitel domácích grantů a projektů.....	15
4.	Technická a realizační činnost.....	16
4.1.	Udělené evropské nebo mezinárodní patenty (EPO, WIPO), patenty USA a Japonska.....	16
4.2.	Udělené české nebo jiné národní patenty, které jsou využívány na základě platné licenční smlouvy	16
4.3.	Udělené české nebo jiné národní patenty, které jsou využívány jen vlastníkem patentu, nebo nejsou využívány	16
4.4.	Autorství realizovaného komplexního technického díla s udaným společenským přínosem.....	16
4.5.	Poloprovozy, ověřené technologie.....	16
4.6.	Užitné a průmyslové vzory, prototypy, funkční vzorky, software.....	16
4.7.	Expertizní činnost	16
5.	Organizační a odborně-společenská činnost s oborem související.....	16
5.1.	Členství a funkce v mezinárodních a národních odborných společnostech.....	16
5.2.	Členství v odborných komisích a poradních orgánech	16
5.3.	Členství a funkce v redakčních radách odborných časopisů.....	16
5.4.	Členství a funkce v organizačních výborech konferencí	16
5.5.	Členství a funkce v oborových radách grantových agentur	17
5.6.	Ocenění výzkumné a vývojové práce	17
6.	Zahraniční spolupráce a pobyty v zahraničí	17
7.	Nejvýznamnější tvůrčí aktivity.....	17

1. Životopis

1.1. Osobní údaje

Jméno: Alexandr Malijevský

Rodné příjmení: Malijevský

Datum narození: xxxxx 1977

Místo narození: xxxxx

Rodinný stav: xxxxx

Bydliště: xxxxx

1.2. Vzdělání

1991-1995 Gymnázium Korunní (od 1993 Zborovská, dnes Christiana Dopplera)

1995-2000 Mgr., Matematicko-fyzikální fakulta UK, obor Teoretická fyzika

2000-2003 PhD., VŠCHT Praha, obor Fyzikální chemie

1.3. Průběh praxe

2003-2007 VŠCHT Praha – vědecký pracovník

2006-dosud ÚCHP AVČR – vědecký pracovník

2007-2009 Imperial College London – research associate

2010-2016 VŠCHT Praha – odborný asistent

2016-2021 VŠCHT Praha – docent II

2021-dosud VŠCHT Praha – docent I

2. Pedagogická činnost

2.1. Přehled

Předmět (typ studia- magisterské, bakalářské, doktorské)	Rozsah (hod/týden)	Počet semestrů	Druh (P, C, L)	Zkoušeno studentů
Fyzikální chemie I (b)	2	8	C	>100
Fyzikální chemie mikrosvěta (b)	2	5	C	>100
Fyzikální chemie mikrosvěta (b)	3	1	P	15
Laboratoř fyzikální chemie I (b)	9	7	L	>100
Teoretická chemie (b)	3	1	P	20
Teoretická chemie (b)	1	1	C	20
Statistická termodynamika (m)	3	1	P	4
Statistická termodynamika (m)	1	1	C	4
Statistická termodynamika, molekulové modelování a simulace (m)	1	10	C	>100
Statistická termodynamika, molekulové modelování a simulace (m)	3	10	P	>100
Matematické metody fyzikální chemie (m)	2	10	C	>100
Matematické metody fyzikální chemie (m)	1	10	P	>100
Úvod do moderní teorie fázových přechodů (m, d)	3	11	P	30
Úvod do moderní teorie fázových přechodů	3	11	P	>100

2.2. Vedení studentů

Obhájené bakalářské práce: 2

Obhájené diplomové práce: 3

Obhájené doktorské dizertační práce: 3

Lian Wu, Modelling liquid crystalline ordering in anisotropic and inhomogeneous fluids: From simple models of rod- and disc-like particles to polypeptides, 2013 (školitel-specialista)

Martin Láška, A microscopic description of interfacial phenomena on nano-patterned surfaces, 2021 (hlavní školitel)

Martin Pospíšil, A microscopic approach to phase transitions of fluids in confining geometries, 2021 (hlavní školitel)

Současné doktorské dizertační práce: 1

Jiří Janek (školitel-specialista), Time-reversible predictors in molecular dynamics

2.3. *Autorství učebních textů a pomůcek, další pedagogické aktivity*

Malijevský A., „Teorie kritických jevů”, skripta, lektorované, VŠCHT Praha (2019).

Malijevský A. a Pokorný P., „Průvodce matematickými metodami”, skripta, lektorované, VŠCHT Praha (2017).

Podíl na překladu monografie P. Atkins, J. de Paula „Physical Chemistry” do češtiny („Fyzikální chemie”, VŠCHT Praha, 2013).

Další pedagogické aktivity: Působení ve zkušebních komisích pro státní závěrečné zkoušky bakalářského, magisterského i doktorského studia VŠCHT Praha v oborech fyzikální chemie.

2.4. *Inovační přínos pro pedagogickou práci*

Zavedení nového předmětu „Úvod do moderní teorie fázových přechodů“ pro studenty magisterského a doktorského studia, (2011-dosud).

Spoluzavedení nového předmětu „Matematické metody pro fyzikální chemii“ pro studenty magisterského studia, (2013-dosud).

Spoluzavedení nového předmětu „Statistická termodynamika, molekulové modelování a simulace“ pro studenty magisterského studia, (2014-dosud).

Spoluzavedení nového předmětu „Fyzikální chemie mikrosvěta“ (cvičení) pro studenty bakalářského studia, (2012-dosud).

Inovace cvičení z předmětu Fyzikální chemie I pro studenty bakalářského studia využitím matematického softwaru Maple, (2013-dosud).

2.5. *Pedagogický projekt*

Co se týče mých pedagogických plánů, rád bych v první řadě rozvíjel mnou přednášené a garantované předměty, a to tímto způsobem:

- V předmětu „Matematické metody pro fyzikální chemii“ jsem již v loňském roce (2021) využil video-přednášek natočených v době přerušení standardní formy výuky v důsledku pandemie, a to tak, že studentům byl před každou přednáškou zaslán odkaz na video, které mohli zhlédnout, a na přednášku se tak částečně připravit. Tuto možnost využila řada studentů tak, že si připravila dotazy, ať už se týkající nějaké nejasnosti či motivovaných zájmem a žádostí o rozšiřující diskusi nějaké problematiky. Mám za to, že se tento nový prvek vnesený do tohoto kurzu osvědčil a rád bych jej nadále rozvíjel. Předpokládám, že některé video-přednášky lehce modifikuji a případně ještě doplním novými tématy. Ukázalo se také, že vzhledem k tomu, že studenti byli standardně na přednášky teoreticky lépe připraveni, zbývalo více času na počítání konkrétních příkladů, které jsem si musel připravit ve výrazně větším množství než dříve. Plánuji, že bych na jejich základě pro tento kurz připravil v blízké budoucnosti (společně s Dr. Pavlem Pokorným z Ústavu matematiky) skripta s detailně řešenými příklady, která by byla „praktickým“ doplňkem k našim dříve publikovaným skriptům „Průvodce matematickými metodami“.

- Nadále se chci věnovat přednáškám ze statistické termodynamiky, které jsou průběžně modifikovány v zájmu vyváženosti mezi objemem informací a jejich přístupností (brán je ohled na konkrétní ročník posluchačů). Mojí snahou je to, aby se mikroskopický, tj. molekulárně orientovaný popis makroskopických systémů stal alespoň pro absolventy Ústavu fyzikální chemie rovnoprávnou alternativou k fenomenologickému přístupu klasické termodynamiky. Na příští rok plánujeme pro kurz „Statistická termodynamika, molekulové modelování a simulace“ společně s prof. Kolařem přípravu skript, která by co možná nejjednodušším způsobem pokryla jak základní partie ze statistické termodynamiky, tak její využití pro molekulárně orientované pseudoexperimenty, jejichž popularita neustále roste.
- Dále se chci věnovat popularizaci teorie fázových přechodů, což je problematika, která je mému odbornému zaměření patrně nejbližší. Chtěl bych proto zpřístupnit svůj předmět „Úvod do moderní teorie fázových přechodů“ širšímu spektru studentů, a to tak, že bych se v budoucnu vedle základních modelů (jako je např. Isingův model) věnoval ve větší míře i popisu fázového chování komplikovanějších, ale realističtějších systémů (např. koloidních a polymerních roztoků) a dále se věnoval kromě popisu rovnovážných jevů také dynamikou fázových přechodů, což je stále ještě vyvíjející se obor s perspektivou zajímavých aplikací. Chci aktualizovat krátká videa, která zpřístupňují úvod do netriviální problematiky fázových přechodů a kritických jevů a postupně je rozšiřovat až na úroveň svého současného výzkumu.
- Za nedílnou součást své pedagogické aktivity považuji vedení studentů na úrovni bakalářského, magisterského a doktorského studia. Mým cílem není nabírat co největší množství studentů, ale udržovat si menší skupinu (momentálně mám dva studenty magisterského studia), které se budu schopen intenzivně věnovat. Samozřejmostí jsou pak nejen pravidelné a časté konzultace, ale též speciální semináře, jejichž cílem je upevnit a rozšířit znalosti studentů a „postdoců“ v pokročilé problematice teorie nehomogenních kapalin, povrchových fázových přechodů a teorie funkcionálu hustoty.

3. Vědecká aktivita

3.1. Přehled vědecko-výzkumných a inovačních aktivit

Přehled publikačních aktivit, účasti na konferencích, grantových projektech, udělených patentech a technické realizační činnosti

WOS h-index: 19

	Aktivita	Počet	Z toho ve světovém jazyce	SC ²	Suma IF/SJR ³
1.	Vědecké práce v impaktovaných časopisech evidovaných v databázi Web of Science (WoS)	63	63	739	224.8
2.	Vědecké práce v časopisech evidovaných v databázi Scopus, které nejsou uvedené v databázi Web of Science				
3.	Vědecké práce v dalších časopisech s recenzním řízením			-	-
4.	Kapitoly v monografiích, monografie ⁴				-
5.	Články v časopisech bez recenzního řízení, články ve sbornících			-	-
	CELKEM 1 - 5	63	63	739	-

	Aktivita	Počet
6.	Osobně přednesené přednášky v zahraničí a na mezinárodních konferencích	22
7.	Spolupráce ostatních přednášek a posterů na mezinárodních konferencích	28
8.	Osobně přednesené přednášky na národních konferencích	-
9.	Spolupráce ostatních přednášek a posterů na národních konferencích	-
	CELKEM 6 - 9	50
10.	Odpovědný řešitel zahraničních grantů a projektů	-
11.	Odpovědný řešitel domácích grantů a projektů	7
12.	Spoluřešitel ⁵ zahraničních grantů a projektů	-
13.	Spoluřešitel domácích grantů a projektů	2
	CELKEM 10 - 13	9

² Suma citací bez autocitací dle příslušné databáze (pro WoS s nastavením All Databases)

³ Poslední známý IF resp. SJR časopisu

⁴ Pro SC se uvádí suma citací bez autocitací dle WoS s nastavením All Databases

⁵ Spoluřešitel je osoba, která je spolupříjemcem grantu zodpovědná za odbornou část projektu.

	Aktivita	Počet
14.	Udělené evropské nebo mezinárodní patenty (EPO, WIPO), patenty USA a Japonska	-
15.	Udělené české nebo jiné národní patenty, které jsou využívány na základě platné licenční smlouvy	-
16.	Udělené české nebo jiné národní patenty, které jsou využívány jen vlastníkem patentu, nebo nejsou využívány	-
17.	Autorství realizovaného komplexního technického díla s udaným společenským přínosem	-
18.	Poloprovozy, ověřené technologie	-
19.	Užitné a průmyslové vzory, prototypy, funkční vzorky, software	-
	CELKEM 14 - 19	-

3.2. Vědecké práce v impaktovaných časopisech evidovaných v databázi Web of Science

ResearcherID: **F-8672-2013**

1. A. Malijevský, G. Jackson. A perspective on the interfacial properties of nanoscopic liquid drops. *Journal of Physics: Condensed Matter* **24**, 464, (2012). DOI:10.1088/0953-8984/24/46/464121; IF 2.333; počet citací (bez autocitací) 73.
2. J. G. Sampayo, A. Malijevský, E. A. Müller, E. de Miguel, G. Jackson. Communications: Evidence for the role of fluctuations in the thermodynamics of nanoscale drops and the implications in computations of the surface tension. *The Journal of Chemical Physics* **132**, 141, (2010). DOI:10.1063/1.3376612; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 64.
3. A. Malijevský. Does surface roughness amplify wetting? *The Journal of Chemical Physics* **141**, 184, (2014). DOI: 10.1063/1.4901128; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 34.
4. A. Malijevský, P. Bryk, S. Sokolowski. Density functional approach for inhomogeneous star polymer fluids. *Physical Review E* **72**, 032, (2005). DOI:10.1103/PhysRevE.72.032801; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 33.
5. A. Malijevský, S. B. Yuste, A. Santos. Low-temperature and high-temperature approximations for penetrable-sphere fluids: Comparison with Monte Carlo simulations and integral equation theories. *Physical Review E* **76**, 021, (2007). DOI:10.1103/PhysRevE.76.021504; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 26.
6. A. Malijevský, S. B. Yuste, A. Santos. How "sticky" are short-range square-well fluids? *The Journal of Chemical Physics* **125**, 074, (2006). DOI:10.1063/1.2244549; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 24.
7. A. Santos, A. Malijevský. Radial distribution function of penetrable sphere fluids to the second order in density. *Physical Review E* **75**, 021, (2007). DOI:10.1103/PhysRevE.75.021201; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 23.
8. A. Malijevský, A. Santos. Structure of penetrable-rod fluids: Exact properties and comparison between Monte Carlo simulations and two analytic theories. *The Journal of Chemical Physics* **124**, 074, (2006). DOI:10.1063/1.2166385; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 22.

9. M. Svoboda, A. Malijevský, M. Lísal. Wetting properties of molecularly rough surfaces. *The Journal of Chemical Physics* **143**, 104, (2015). DOI:10.1063/1.4930084; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 22.
10. P. Bryk, W. Rzyśko, A. Malijevský, S. Sokolowski. Capillary condensation in pores with rough walls: A density functional approach. *Journal of Colloid and Interface Science* **313**, 041, (2007). DOI: 10.1016/j.jcis.2007.03.077; IF 8.128; počet citací (bez autocitací) 20.
11. R. Fantoni, A. Giacometti, A. Malijevský, A. Santos. Penetrable-square-well fluids: Analytical study and Monte Carlo simulations. *The Journal of Chemical Physics* **131**, 124, (2009). DOI:10.1063/1.3236515; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 19.
12. A. Malijevský, G. Jackson, S. Varga. Many-fluid Onsager density functional theories for orientational ordering in mixtures of anisotropic hard-body fluids. *The Journal of Chemical Physics* **129**, 144, (2008). DOI:10.1063/1.2982501; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 19.
13. A. Malijevský, A. O. Parry. Critical Point Wedge Filling. *Physical Review Letters* **110**, 166, (2013). DOI:10.1103/PhysRevLett.110.166101; IF 9.161; počet citací (bez autocitací) 19.
14. A. Malijevský, F. Karlický, R. Kalus, A. Malijevský. Third virial coefficients of argon from first principles. *The Journal of Physical Chemistry C* **111**, 15565, (2007). DOI:10.1021/jp071939a; IF 4.126; počet citací (bez autocitací) 19.
15. A. Malijevský. Fundamental measure theory in cylindrical geometry. *The Journal of Chemical Physics* **126**, 134, (2007). DOI:10.1063/1.2713106; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 18.
16. L. Wu, A. Malijevský, G. Jackson, E. A. Müller, C. Avendano. Orientational ordering and phase behaviour of binary mixtures of hard spheres and hard spherocylinders. *The Journal of Chemical Physics* **143**, 044, (2015). DOI:10.1063/1.4923291; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 18.
17. R. Fantoni, A. Giacometti, A. Malijevský, A. Santos. A numerical test of a high-penetrability approximation for the one-dimensional penetrable-square-well model. *The Journal of Chemical Physics* **133**, 024, (2010). DOI:10.1063/1.3455330; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 16.
18. A. Malijevský, A. Malijevský. Monte Carlo simulations of thermodynamic properties of argon, krypton and xenon in liquid and gas state using new ab initio pair potentials. *Molecular Physics* **101**, 3335, (2003). DOI:10.1080/00268970310001638808; IF 1.962; počet citací (bez autocitací) 16.
19. R. Fantoni, A. Malijevský, A. Santos, A. Giacometti. The penetrable square-well model: extensive versus non-extensive phases. *Molecular Physics* **109**, 2723, (2011). DOI:10.1080/00268976.2011.597357; IF 1.962; počet citací (bez autocitací) 15.
20. A. Malijevský. Alternative fundamental measure theory for additive hard sphere mixtures. *The Journal of Chemical Physics* **125**, 194, (2006). DOI:10.1063/1.2393242; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 14.
21. R. Fantoni, A. Malijevský, A. Santos, A. Giacometti. Phase diagram of the penetrable-square-well model. *Europhysics Letters* **93**, 26002, (2011). DOI:10.1209/0295-5075/93/26002; IF 1.947; počet citací (bez autocitací) 14.
22. A. Malijevský, A. O. Parry. Filling transitions in acute and open wedges. *Physical Review E* **91**, 052, (2015). DOI:10.1103/PhysRevE.91.052401; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 13.
23. A. J. Archer, A. Malijevský. Crystallization of soft matter under confinement at interfaces and in wedges. *Journal of Physics: Condensed Matter* **28**, 244, (2016). DOI:10.1088/0953-8984/28/24/244017; IF 2.333; počet citací (bez autocitací) 13.

24. A. Malijevský, A. J. Archer. Sedimentation of a two-dimensional colloidal mixture exhibiting liquid-liquid and gas-liquid phase separation: A dynamical density functional theory study. *The Journal of Chemical Physics* **139**, 144, (2013). DOI:10.1063/1.4823768; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 13.
25. A. Malijevský, S. B. Yuste, A. Santos, M. L. de Haro. Multicomponent fluid of hard spheres near a wall. *Physical Review E* **75**, 061, (2007). DOI:10.1103/PhysRevE.75.061201; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 12.
26. A. Malijevský, S. Varga. Phase behaviour of parallel hard rods in confinement: an Onsager theory study. *Journal of Physics: Condensed Matter* **22**, 175, (2010). DOI:10.1088/0953-8984/22/17/175002; IF 2.333; počet citací (bez autocitací) 11.
27. A. Malijevský. Does adsorption in a single nanogroove exhibit hysteresis? *The Journal of Chemical Physics* **137**, 214, (2012). DOI:10.1063/1.4769257; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 10.
28. A. Malijevský, M. Lísal. Density functional study of chemical reaction equilibrium for dimerization reactions in slit and cylindrical nanopores. *The Journal of Chemical Physics* **130**, 164, (2009). DOI:10.1063/1.3125925; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 10.
29. A. Malijevský, A. O. Parry. Density functional study of complete, first-order and critical wedge filling transitions. *Journal of Physics: Condensed Matter* **25**, 305, (2013). DOI:10.1088/0953-8984/25/30/305005; IF 2.333; počet citací (bez autocitací) 9.
30. A. Malijevský, A. Malijevský, S. B. Yuste, A. Santos, M. L. de Haro. Structure of ternary additive hard-sphere fluid mixtures. *Physical Review E* **66**, 061, (2002). DOI:10.1103/PhysRevE.66.061203; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 9.
31. A. Malijevský, A. O. Parry. Bridging transitions for spheres and cylinders. *Physical Review E* **92**, 022, (2015). DOI:10.1103/PhysRevE.92.022407; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 8.
32. L. Wu, A. Malijevský, C. Avendano, E. A. Müller, G. Jackson. Demixing, surface nematization, and competing adsorption in binary mixtures of hard rods and hard spheres under confinement. *The Journal of Chemical Physics* **148**, 164, (2018). DOI:10.1063/1.5020002; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 8.
33. A. Malijevský, O. Pizio, A. Patrykiewicz, S. Sokolowski. Phase behavior of symmetric binary mixtures with partially miscible components in spherical pores. Density functional approach. *Journal of Molecular Liquids* **112**, 81, (2004). DOI: 10.1016/S0167-7322(03)00278-2; IF 6.165; počet citací (bez autocitací) 8.
34. A. Nold, A. Malijevský, S. Kalliadasis. Wetting on a spherical wall: Influence of liquid-gas interfacial properties. *Physical Review E* **84**, 021, (2011). DOI:10.1103/PhysRevE.84.021603; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 7.
35. A. J. Archer, A. Malijevský. On the interplay between sedimentation and phase separation phenomena in two-dimensional colloidal fluids. *Molecular Physics* **109**, 1087, (2011). DOI:10.1080/00268976.2010.544267; IF 1.962; počet citací (bez autocitací) 7.
36. A. Malijevský, S. Sokolowski, T. Zientarski. Structure and phase behavior of Widom-Rowlinson model calculated from a nonuniform Ornstein-Zernike equation. *The Journal of Chemical Physics* **125**, 114, (2006). DOI:10.1063/1.2357146; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 7.
37. A. Malijevský. Filling and wetting transitions at grooved substrates. *Journal of Physics: Condensed Matter* **25**, 445, (2013). DOI:10.1088/0953-8984/25/44/445006; IF 2.333; počet citací (bez autocitací) 6.
38. A. Malijevský, A. O. Parry. Modified Kelvin Equations for Capillary Condensation in Narrow and Wide Grooves. *Physical Review Letters* **120**, 135, (2018). DOI:10.1103/PhysRevLett.120.135701; IF 9.161; počet citací (bez autocitací) 6.

39. A. Malijevský, S. Sokolowski. Monte Carlo study of Widom-Rowlinson interface. *The Journal of Chemical Physics* **126**, 106, (2007). DOI: 10.1063/1.2710251; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 6.
40. A. Malijevský, A. O. Parry. Condensation and evaporation transitions in deep capillary grooves. *Journal of Physics: Condensed Matter* **26**, 355, (2014). DOI:10.1088/0953-8984/26/35/355003; IF 2.333; počet citací (bez autocitací) 5.
41. A. O. Parry, A. Malijevský, C. Rascon. Capillary Contact Angle in a Completely Wet Groove. *Physical Review Letters* **113**, 146, (2014). DOI:10.1103/PhysRevLett.113.146101; IF 9.161; počet citací (bez autocitací) 5.
42. A. Malijevský. Effective interactions between a pair of nanoparticles. *Molecular Physics* **113**, 1170, (2015). DOI:10.1080/00268976.2015.1015640; IF 1.962; počet citací (bez autocitací) 5.
43. A. Santos, A. Malijevský. Radial distribution function of penetrable sphere fluids to the second order in density. *Physical Review E* **75**, 049, (2007). DOI:10.1103/PhysRevE.75.049901; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 5.
44. M. Pospíšil, M. Láská, A. Malijevský. Symmetry-breaking morphological transitions at chemically nanopatterned walls. *Physical Review E* **100**, 062, (2020). DOI:10.1103/PhysRevE.100.062802; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 3.
45. A. Nold, A. Malijevský, S. Kalliadasis. Critical assessment of effective interfacial potentials based on a density functional theory for wetting phenomena on curved substrates. *European Physical Journal: Special Topics* **197**, 185, (2011). DOI:10.1140/epjst/e2011-01456-5; IF 2.707; počet citací (bez autocitací) 3.
46. A. Malijevský, S. Labík, A. Malijevský. Computer simulation of chemical potentials of ternary hard-sphere fluid mixtures. *Physical Chemistry Chemical Physics* **6**, 1742, (2004). DOI:10.1039/b315353c; IF 3.676; počet citací (bez autocitací) 3.
47. A. O. Parry, A. Malijevský. Crossover scaling of apparent first-order wetting in two-dimensional systems with short-ranged forces. *Physical Review E* **93**, 062, (2016). DOI:10.1103/PhysRevE.93.062802; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 3.
48. A. Malijevský, A. O. Parry, M. Pospíšil. Scaling behavior of thin films on chemically heterogeneous walls. *Physical Review E* **96**, 032, (2017). DOI:10.1103/PhysRevE.96.032801; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 2.
49. A. Malijevský. Geometry-induced interface pinning at completely wet walls. *Physical Review E* **99**, 040, (2019). DOI:10.1103/PhysRevE.99.040801; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 2.
50. A. Malijevský, A. O. Parry, M. Pospíšil. Edge contact angle and modified Kelvin equation for condensation in open pores. *Physical Review E* **96**, 020, (2017). DOI:10.1103/PhysRevE.96.020801; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 1.
51. A. Malijevský, A. O. Parry, M. Pospíšil. Bridging of liquid drops at chemically structured walls. *Physical Review E* **99**, 042, (2019). DOI:10.1103/PhysRevE.99.042804; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 1.
52. M. Pospíšil, M. Láská, A. O. Parry, A. Malijevský. Scaling of wetting and prewetting transitions on nanopatterned walls. *Physical Review E* **100**, 032, (2019). DOI: 10.1103/PhysRevE.100.032801; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 1.
53. M. Láská, A. O. Parry, A. Malijevský. Three-Phase Fluid Coexistence in Heterogeneous Slits. *Physical Review Letters* **124**, 115, (2013). DOI:10.1103/PhysRevLett.124.115701; IF 9.161; počet citací (bez autocitací) 1.
54. A. Malijevský. Phase transitions of fluids in heterogeneous pores. *Condensed Matter Physics* **19**, 13604, (2016). DOI:10.5488/CMP.19.13604; IF 1.128; počet citací (bez autocitací) 1.

55. A. Malijevský. Complete wetting near an edge of a rectangular-shaped substrate. *Journal of Physics: Condensed Matter* **26**, 315, (2014). DOI: 10.1088/0953-8984/26/31/315002; IF 2.333; počet citací (bez autocitací) 1.
56. A. Malijevský. Continuous condensation in nanogrooves. *Physical Review E* **97**, 052, (2018). DOI:10.1103/PhysRevE.97.052804; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 1.
57. A. Malijevský, A. O. Parry. Edge Contact Angle, Capillary Condensation, and Meniscus Depinning. *Physical Review Letters* **127**, 115, (2021). DOI:10.1103/PhysRevLett.127.115703; IF 9.161; počet citací (bez autocitací) 0.
58. M. Láská, A. O. Parry, A. Malijevský. Breaking Cassie's Law for Condensation in a Nanopatterned Slit. *Physical Review Letters* **126**, 125, (2021). DOI: 10.1103/PhysRevLett.126.125701; IF 9.161; počet citací (bez autocitací) 0.
59. A. Malijevský. Filling, depinning, unbinding: Three adsorption regimes for nanocorrugated substrates. *Physical Review E* **102**, 012, (2020). DOI:10.1103/PhysRevE.102.012804; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 0.
60. A. Malijevský. Height of a liquid drop on a wetting stripe. *Physical Review E* **102**, 052, (2020). DOI:10.1103/PhysRevE.102.052802; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 0.
61. A. Malijevský, A. O. Parry. Influence of intermolecular forces at critical-point wedge filling. *Physical Review E* **93**, 040, (2016). DOI:10.1103/PhysRevE.93.040801; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 0.
62. L. Wu, A. Malijevský, G. Jackson, E. A. Müller, C. Avendano. Orientational ordering and phase behaviour of binary mixtures of hard spheres and hard spherocylinders. *The Journal of Chemical Physics* **143**, 189, (2015). DOI: 10.1063/1.4935131; IF 3.488; počet citací (bez autocitací) 0.
63. A. Malijevský. Microscopic density functional theory for dendrimers. *Physical Review E* **80**, 042, (2009). DOI:10.1103/PhysRevE.80.042801; IF 2.529; počet citací (bez autocitací) 0.

3.3. Vědecké práce v časopisech evidovaných v databázi Scopus, které nejsou uvedené v databázi Web of Science

Nejsou uváděny.

3.4. Vědecké práce v ostatních časopisech s recenzním řízením

Al. Malijevský, Z. Kluiber, J. Obdržálek, An. Malijevský, Monte Carlo, stavové rovnice a tuhé koule, *Pokroky matematiky, fyziky a astronomie* **40**, 88 (1995).

3.5. Kapitoly v monografiích, monografie

Nejsou uváděny.

3.6. Články v časopisech bez recenzního řízení, články ve sbornících

Nejsou uváděny.

3.7. *Osobně přednesené přednášky v zahraničí a na mezinárodních konferencích*⁶

1. “Monte Carlo Simulation of Hard Spheres Ternary Mixtures”, A. Malijevský, S. Labík, 53. Meeting of chemical society, Banská Bystrica, Slovakia (2001).
2. “Chemical potentials of components of ternary mixtures using the SP-MC method”, A. Malijevský, S. Labík, 6th Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids, Špindlerův Mlýn, Czech Rep. (2002).
3. “Applications of a classical density functional theory for nanoconfined fluids”, A. Malijevský, 2004, Universidad de Extremadura, Badajoz, Spain, (2004).
4. “The penetrable-sphere model: A fluid of ghost particles”, A. Malijevský, A. Santos, Workshop I: Driven Many particle systems - Hopping Particles, Granular Media, and Colloidal Systems Dresden, (2004).
5. “Density functional theory for star polymers”, A. Malijevský, P. Bryk, S. Sokolowski, Maria Curie-Skłodowska University, Lublin, Poland (2005).
6. “Density functional theory for soft fluid models”, A. Malijevský, S. Sokolowski, Universidad de Extremadura, Badajoz, Spain, (2006).
7. “Monte Carlo study of Widom-Rowlinson interface”, A. Malijevský, S. Sokolowski, Imperial College London, London, UK (2007).
8. “Geometrically oriented approaches in density functional theory”, A. Malijevský, Veszpremi Egyetem, Veszprem, Hungary (2007).
9. “Structure and surface tension of microscopic liquid droplets”, A. Malijevský, G. Jackson, Molecular systems engineering workshop, Imperial College London, London, UK (2007).
10. “A density functional study of interfacial properties of spherical fluid interfaces”, A. Malijevský, G. Jackson, 7th Liquid Matter Conference, Lund, Sweden, (2008).
11. “Many-fluid Onsager density functional theories for orientational ordering in mixtures of anisotropic hard-body fluids”, A. Malijevský, S. Varga, G. Jackson, Imperial College London, London, UK (2008).
12. “Effect of confinement on phase behaviour of parallel hard cylinders”, A. Malijevský, S. Varga, Imperial College London, London, UK (2009).
13. “Density functional theory for dendrimers and their wetting properties”, A. Malijevský, Summer school on interfacial phenomena, Loughborough, UK (2009). Zvaná přednáška.
14. “Statistical mechanics of a thin film on a solid substrate”, A. Nold, A. Pereira, A. Malijevský, S. Kalliadasis, 8th Euromech. Fluid Mechanics Conference, Bad Reichenhaller, Germany. (2010).
15. “Surface phase transitions: Beyond a planar symmetry”, A. Malijevský, Bayreuth, Germany (2011).

⁶ Mezi oficiálními jazyky konference nebyl uveden jazyk český nebo slovenský.

16. “Wedge filling: A novel way to observe critical surface phenomena”, A. Malijevský, A. O. Parry, Workshop Smart and Green Interfaces, Prague, Czech Rep. (2013).
17. “Density functional study of complete, first-order and critical wedge filling transitions”, A. Malijevský, A. O. Parry, Loughborough, UK (2013).
18. “Microscopic approach to interfacial phenomena at structured surfaces”, A. Malijevský, A. O. Parry, 9th Liblice Conference on the Statistical Mechanics of Liquids, Seč, Czech. Rep. (2014).
19. “In between of wetting and capillary condensation”, A. Malijevský, Stuttgart, Germany (2016).
20. “Does surface nano-roughness promote wetting?”, EMN meeting on droplets, San Sebastian, Spain (2016). Zvaná přednáška.
21. “Wetting phenomena at structured surfaces: The role of microscopic forces”, A. Malijevský, III CONIN workshop, Lviv, Ukraine (2019). Zvaná plenární přednáška.
22. “Capillary condensation and depinning transitions in open slits”, A. Malijevský, A. O. Parry, Global summit on condensed matter, Valencia, Spain (2021). Zvaná přednáška.

3.8. *Osobně přednesené přednášky na národních konferencích*

Nejsou uváděny.

3.9. *Odpovědný řešitel zahraničních grantů a projektů*

Nejsou uváděny.

3.10. *Odpovědný řešitel domácích grantů a projektů*

1. “Theoretical and pseudoexperimental description of fundamental molecular systems.” 203/06/P432. Poskytovatel: GAČR. Příjemce: VŠCHT Praha. Období řešení projektu: 1.1.2006—31.12.2008.
2. “A controlling of diffusion processes in pores with varying permeability.” GA 13-09914S. Poskytovatel: GAČR. Příjemce: ÚCHP AV ČR. Spolupříjemce VŠCHT Praha. Období řešení projektu: 1.2.2013—31.12.2016.
3. “Studijné materiály (skripta) pro předmět Matematické metody pro fyzikální chemii (403045).” C_VSCHT_2015_068. Poskytovatel: VŠCHT Praha. Období řešení projektu: 1.1.2015—31.12.2015. Interní grant PIGA.
4. “Učební text pro předmět Úvod do moderní teorie fázových přechodů.” C_VSCHT_2016_035. Poskytovatel: VŠCHT Praha. Období řešení projektu: 1.1.2016—31.12.2016. Interní grant PIGA.
5. “Geometrically and chemically heterogeneous wall: From statics to dynamics.” GA 17-25100S. Poskytovatel: GAČR. Příjemce: ÚCHP AV ČR. Období řešení projektu: 1.1.2017—31.12.2019.

6. “Skripta: Multimediální kurz fázových přechodů a kritických jevů C1_VSCHT_2018_048. Poskytovatel: VŠCHT Praha. Období řešení projektu: 1.1.2018—31.12.2018. Interní grant PIGA.
7. “Interfacial and critical phenomena of simple and complex fluids under nano-structured confinement.” GA 20-14547S. Poskytovatel: GAČR. Příjemce: ÚCHP AV ČR. Období řešení projektu: 1.4.2020—31.12.2022.

3.11. *Spoluřešitel zahraničních grantů a projektů*

Není uváděno.

3.12. *Spoluřešitel domácích grantů a projektů*

1. “Hierarchical approach to the study of solid-fluid equilibria in complex systems: theory, simulation and experiment.” GA 16-12291S. Poskytovatel: GAČR. Příjemce: Univerzita Karlova. Spolupříjemce VŠCHT Praha. Období řešení projektu: 1.1.2016—31.12.2018.
2. “Capacitive deionization: Insights from molecular modelling.” GA 21-27338S. Poskytovatel: GAČR. Příjemce: ÚCHP AV ČR. Spolupříjemce VŠCHT Praha. Období řešení projektu: 1.4.2021—30.3.2024.

4. Technická a realizační činnost

4.1. *Udělené evropské nebo mezinárodní patenty (EPO, WIPO), patenty USA a Japonska*

Nejsou uváděny.

4.2. *Udělené české nebo jiné národní patenty, které jsou využívány na základě platné licenční smlouvy*

Nejsou uváděny.

4.3. *Udělené české nebo jiné národní patenty, které jsou využívány jen vlastníkem patentu, nebo nejsou využívány*

Nejsou uváděny.

4.4. *Autorství realizovaného komplexního technického díla s udaným společenským přínosem*

Není uváděno.

4.5. *Poloprovozy, ověřené technologie*

Nejsou uváděny.

4.6. *Užitné a průmyslové vzory, prototypy, funkční vzorky, software*

Nejsou uváděny.

4.7. *Expertizní činnost*

Není uváděna.

5. Organizační a odborně-společenská činnost s oborem související

5.1. *Členství a funkce v mezinárodních a národních odborných společnostech*

Není uváděno.

5.2. *Členství v odborných komisích a poradních orgánech*

1. Člen oborové rady Molekulární chemická fyzika a senzorika, FCHI, 2014-2021
2. Výkonný předseda oborové rady Molekulární chemická fyzika a senzorika, FCHI, 2021-dosud
3. Člen oborové rady Měření a zpracování signálů v chemii, FCHI, 2018-dosud

5.3. *Členství a funkce v redakčních radách odborných časopisů*

Není uváděno.

5.4. *Členství a funkce v organizačních výborech konferencí*

Není uváděno.

5.5. Členství a funkce v oborových radách grantových agentur

Není uváděno.

5.6. Ocenění výzkumné a vývojové práce

Není uváděno.

6. Zahraniční spolupráce a pobyty v zahraničí

6.1. Zahraniční spolupráce

Prof. Andrew O. Parry, Imperial College London, Velká Británie
Prof. Andrew Archer, Loughborough University, Velká Británie
Prof. Stefan Sokolowski, Maria Curie-Skłodowska University, Polsko
Dr. Carlos Rascón, University Carlos III de Madrid, Španělsko
Prof. Orest Pizio, National Autonomos University of Mexico, Mexiko
Prof. George Jackson, Imperial College London, Velká Británie
Prof. Serafim Kaliadasis, Imperial College London, Velká Británie
Dr. Szabolcs Varga, University of Pannonia, Maďarsko
Prof. Andrés Santos, Universidad de Extremadura, Španělsko

6.2. Pobyty v zahraničí

Universidad de Extremadura, Španělsko, 2004 (2 měsíce)
Maria Curie-Skłodowska University, Polsko, 2005 (2 měsíce)
Universidad de Extremadura, Španělsko, 2005 (3 měsíce)
Maria Curie-Skłodowska University, Polsko, 2006 (1 měsíc)
Imperial College London, Velká Británie, 2007-2009 (30 měsíců)
Imperial College London, Velká Británie, 2011 (2 měsíce)
Imperial College London, Velká Británie, 2012 (3 měsíce)
Imperial College London, Velká Británie, 2013 (2 měsíce)

7. Nejvýznamnější tvůrčí aktivity

7.1. Statisticko-mechanický popis fázových a kritických jevů na nanostrukturovaných površích

Během posledních dvou dekád se ukázalo, že tekutiny adsorbované na površích pevných látek, které jsou strukturované na molekulární úrovni (tedy systémy, které mají zásadní relevanci pro vývoj moderních nanotechnologických oborů, jako je např. nanofluidika), vykazují celou řadu povrchových fázových přechodů, které odhalují dramatický vliv jemné struktury povrchů na jejich smáčivých vlastnostech. Popis těchto geometrií indukovaných fázových a kritických jevů je netriviální z řady důvodů (nemají žádnou analogii v objemových systémech vykazujících známé typy fázových přechodů; kritické chování je obvykle neuniverzální, tj. závisí mj. i na povaze mikroskopických interakcí, které je tak třeba do popisu zahrnout; vykazují silné flukтуаční jevy na rozhraní dvou fází, atd). Teoretický popis těchto systémů s pomocí statisticko-mechanických přístupů na různých škálách tvoří hlavní náplň mé vědecké práce. Mým hlavním cílem je propojení víceškálových přístupů k pochopení fundamentálních zákonitostí těchto jevů, speciálně pak závislosti fázových přechodů na geometrii prostředí. Sem spadá i vysvětlení tzv. skrytých symetrií, tj. proč některé zdánlivě zcela rozdílné geometrie vykazují totožné povrchové jevy, a to i kvantitativně. Tyto otázky – navzdory svému fundamentálnímu i aplikačnímu významu – představují v teorii fázových přechodů stále velkou výzvu.

7.2. Teoretický popis struktury a fázového chování systémů v nanoskopicky omezeném prostředí

S výzkumem popsaným v předchozím odstavci souvisí též popis fázového chování modelových systémů, které jsou (v některém směru) omezeny vnějšími stěnami na extrémně malé rozměry. I v tomto případě zkoumám vliv heterogenity stěn, ať už geometrické či chemické, na výsledné fázové chování uvězněné tekutiny. V tomto případě je zahrnutí mikroskopických aspektů systému, jako je např. vliv vyloučeného objemu a s tím související krátkodosahové korelace mezi částicemi, zcela zásadní. Opět se ukazuje, že vlivem heterogenity stěn mohou tyto systémy dramatickým způsobem měnit charakter (například řád) fázového chování tekutiny nebo mohou vykazovat zcela nové typy fázových přechodů, které nemají u modelů předpokládajících homogenní strukturu stěn žádnou analogii.

7.3. Dynamika nehomogenních systémů

Přestože mým hlavním výzkumným zájmem je popis rovnovážných systémů, zabývám se též popisem časového vývoje systémů, které jsou z rovnovážného stavu vychýleny. Relaxaci takových systémů do rovnováhy popisují na mikroskopické úrovni s pomocí teprve nedávno navržené a stále se vyvíjející dynamické teorie funkcionálu hustoty kombinující klasickou teorii funkcionálu hustoty s Langevinovou dynamikou. Tyto studie pak doplňují popis fázového chování studovaného modelu o způsob mechanismu, který daný fázový přechod řídí, což umožňuje interpretaci pozorovaných jevů na molekulární úrovni.

7.4. Vývoj software pro numerické řešení klasické teorie funkcionálu hustoty

Pro mikroskopický popis nehomogenních systémů se ukazuje jako velmi efektivní klasická (statisticko-mechanická) teorie funkcionálu hustoty, která je založena na variačním principu minimalizujícím volnou energii. Tuto minimalizaci je třeba při aplikaci sofistikovaných moderních aproximací realizovat numericky. Pro nehomogenní systémy, kde se jednočásticová hustota mění ve více než v jednom směru, bylo třeba navrhnout a implementovat metody, které efektivně popis takových systémů v rámci teorie funkcionálu hustoty umožňují. Tyto výsledky jsem publikoval v roce 2013 (pro případ translačně invariantních systémů) a v roce 2015 (pro případ axiálně symetrických systémů), přičemž implementaci těchto metod jsem provedl v jazyku Fortran. Tyto algoritmy otevřely dveře pro mikroskopický výzkum nanostrukturovaných systémů a umožnily predikci fázových přechodů, které do té doby nebyly známy. I s pomocí mých studentů a postdoků jsou tyto algoritmy dále rozšiřovány a zefektivňovány.

7.5. Zavedení nových předmětů a tvorba studijních pomůcek

Během svého působení na VŠCHT Praha jsem se též snažil o rozšiřování a popularizování metod statistické mechaniky a teorie fázových přechodů mezi studenty. K tomu mi významnou měrou pomohly tři pedagogické projekty PIGA, které mi umožnily tvorbu studijních pomůcek pro nové předměty Matematické metody pro fyzikální chemii a Úvod do moderní teorie fázových přechodů. Sem spadá i předmět Statistická termodynamika, molekulové modelování a simulace, pro nějž v nejbližší době chystáme společně s prof. Kolařem přípravu skript. V zájmu popularizace teorie nehomogenních systémů jsem též napsal (v češtině) pedagogicky orientovaný článek, který popisuje a vysvětluje základní fenomenologii tohoto oboru a zmiňuje některé metody umožňující jejich popis; tento článek je volně ke stažení na serveru arXiv.