

Predložená habilitačná práca RNDr. Lukáša Félix Pašteku, PhD. s názvom "**Relativistické výpočty elektrónovej štruktúry a ich presnosť v spektroskopických aplikáciách**" ponúka ucelený pohľad na možnosti vysoko presných výpočtov energií pre jedno a viacatómové systémy ťažkých kovov v základnom a excitovanom stave. Práca má štandardné členenie a viaže sa na 15 vybraných, prestížnych, a tematicky relevantných publikácií.

V úvodnej časti sa na jednej (pol) strane naznačuje nutnosť presných kvantovo chemických výpočtov s cieľom podporiť experimentálne merania pre super ťažké atómy alebo rozšírenie znalostí, či potvrdenie hypotéz, týkajúcich sa fundamentálnych fyzikálnych princípov a modelov. Prvá kapitola metodologickej časti pozostáva z prehľadu relativistických metód (aspoň taký má názov). Osobne by som prehľad relativistických metód oddelil od podkapitoly korelačných metód a jedno-elektrónových funkcií (kvalita bázy AO), alebo by som názov kapitoly rozšíril tak aby zahrnula túto zlatú "tripartitu/triádu" (tri hlavné triedy) presnosti kvantovo chemických výpočtov, tak dobre reprezentovanú obrázkom 2.1 a 2.2. Musím podotknúť že obrázok 2.2 považujem za veľmi vydarený rovnako ako logo ICQC2023, ktorého je RNDr. Lukáša Félix Pašteku, PhD. autorom. Na druhej strane chápem, že názov danej kapitoly je do značnej miery spätý s názvom samotnej habilitačnej práce. Druhá kapitola metodologickej časti nadväzuje na prvú a zameriava sa na výpočty (celkových energií) s čo najväčšou presnosťou zahrňujúc relativistické efekty, elektrónovú koreláciu a kvalitu bázy AO. Zároveň sa kapitola venuje odhadu neistoty týchto príspevkov v rámci praktických prístupov ako dosiahnuť vysokú presnosť použitím "kompozitných" výpočtových schém.

Výsledková časť ponúka výber kľúčových aplikácií súvisiacich s priloženými prácami vybraných publikácií. V prvej podkapitole je predstavená plošne vymedzená časť pôdy (poľa) so zreteľom na dosiahnutie presnosti výpočtov na úrovni meV pomocou kompozičných výpočtových techník pre systémy zlata a astátu, a ich vlastností odvodených z celkovej energie základného stavu (ionizačný potenciál, elektrónová afinita, mullikenova elektronegativita). Druhá podkapitola aplikuje a rozvíja dané metódy presného výpočtu energie základného stavu na dva prípady super ťažkých atómov: nihónium (Nh, $Z = 113$) a oganesón (Og, $Z = 118$). V tretej podkapitole sú predstavené výpočty molekulových systémov fluoridov kovov alkalických zemín (MF). V prípade MF systémov sa jedná o výpočty potenciálových kriviek základného a excitovaného stavu, a výpočtu prechodových momentov vibračných hladín súvisiacich s laserovým chladením. Testy vhodných kandidátov na experimentálne potvrdenie hypotéz ohľadom štandardného modelu boli vykonané pre molekulové systémy LuO, LaO, LaS, alebo BaCH₃, YbCH₃. V spomenutých systémoch sa jednalo o stanovenie hodnoty citlivostí voči vybraným vlastnostiam, ktorých experimentálne potvrdenie by asi znamenalo prekročenie štandardného modelu, elektrický dipólový moment elektrónu, W_d , skalárno-pseudoskalárnej interakcia medzi elektrónmi a nukleónmi, W_s , jadrový magnetický kvadrupóllový moment, W_M , a anapólový moment jadra, W_A (ako aj možnosti efektívnosti laserového chladenia).

Literatúra uvádza 317 citácií, a ukazuje na rozsah obsiahnutých zdrojov nutný na pokrytie danej problematiky. V závere autor stručne a výstižne sumarizuje motiváciu a esenciálne výsledky habilitačnej práce.

K habilitačnej práci nemám žiadne výhrady. Samotné publikácie sú počtom, spoluprácou s prestížnymi pracoviskami (CERN, MIT) a aj témou vynikajúce a prešli recenzným konaním vo vysoko impaktovaných a prestížnych časopisoch (Nature Communications, Phys. Rev. Lett. J Chem. Phys., alebo napr. Phys Rev. A). Práca na mňa pôsobí kompaktným dojmom a výsledková časť naozaj ponúka vlastný pohľad a komentár, a nie je len strohým autoreferátom priložených prác. Dovolím si s rešpektom vyzdvihnúť celkové výsledky RNDr. Lukáša Félix Pašteku, PhD., pre ktorého WOS vykazuje 50 publikácií, H-index 17, a 803 citácií bez vlastných autocitácií. Myslím, že za zmienku stoja aj viac ročné pobyty na Novom Zélande a Holandsku.

Celkovo mám len niekoľko otázok alebo podnetov do diskusie:

- 1; Aké sú výpočtové nároky takto presných výpočtov? Obrázok 4.2 ilustruje časovú náročnosť, a čo nároky na RAM a disk? Koľko CPU alebo GPU jednotiek je nutné, resp. sa dá použiť, napr. v prípade CCSDTQP výpočtu, ktorý podľa uvedeného grafu trval 1200 CPU dni? Jedná sa v obrázku 4.2 vľavo o výpočty v minimálnej báze? Môže autor spomenúť aké sú výhody a nevýhody použitých balíkov a prístupov, resp. čo sú najnáročnejšie miesta z jeho uhlu pohľadu?
- 2; V obrázku 4.4 a relevantnej časti textu sa autor odkazuje na cikcakový charakter správania sa EA pre atóm india v porovnaní s ostatnými prvkami. Dá sa fyzikálne zdôvodniť prečo elektrónová korelácia dominuje viac ako kvalita bázy práve pre tento ľahší atóm?
- 3; Dá sa predpokladať aká bude budúcnosť presných výpočtov pre systémy a otázky týkajúce sa habilitačnej práce? Budú sa dať niektoré hypotézy týkajúce sa základných vlastností hmoty overiť v dohľadnej dobe aj experimentálne, alebo ako blízko sa v súčasnosti nachádzame?
- 4; A opačná otázka, ktorá často postretáva aj mňa (a občas si ju aj sám kladiem): "A na čo je to vlastne celé dobré?"

K protokolu originality nemám žiadnu poznámku a habilitačnú prácu považujem za originálnu.

Záverom konštatujem, že predložená habilitačná práca vysoko prekračuje požadovanú vedeckú úroveň a preto odporúčam Vedeckej rade Prírodovedeckej fakulty UK, aby RNDr. Lukáš Félix Pašteka, PhD. bol vymenovaný za docenta v odbore „Fyzikálna chémia“.

V Bratislave
28. januára 2026

doc. Ing. Lukáš Bučinský, PhD.