

## **Oponentský posudok na habilitačnú prácu:**

### **Relativistické výpočty elektrónovej štruktúry a ich presnosť v spektroskopických aplikáciách**

Autor: RNDr. Lukáš Félix Pašteka, PhD

Práca sa zaoberá vysoko aktuálnou problematikou na pomedzí kvantovej chémie, atómovej fyziky a spektroskopie. Jej hlavným cieľom je systematický prehľad a aplikácia moderných relativistických metód spriahnutých klastrov (CC) na presné výpočty energetických stavov a vlastností ťažkých atómov a molekúl, s dôrazom na kvantifikáciu teoretických neistôt a priamu podporu experimentálneho výskumu. Téma je mimoriadne relevantná v kontexte výskumu superťažkých prvkov, testov fundamentálnych fyzikálnych teórií (ako je štandardný model) a interpretácie experimentov s meV presnosťou.

Práca je formálne veľmi dobre štruktúrovaná. Obsah je logický a postupuje od teoretických základov, cez metodologické aspekty zvyšovania presnosti až ku konkrétnym aplikačným prípadom. Rozsah je primeraný náročnosti témy.

Kapitola 2 poskytuje solídny a hlboký prehľad relativistických metód. Koncept „výpočtového priestoru“ je názornou pomôckou na pochopenie hierarchie a kompromisov medzi presnosťou a výpočtovou náročnosťou. Technický popis (Hamiltonián, korelácia, bázy) je podaný vysoko kompetentne a tvorí nevyhnutný základ pre pochopenie nasledujúcich častí. Prehľad je aktuálny a demonštruje autorovu hlbokú znalosť problematiky.

Kapitola 3 sa zaoberá metodológiou a výpočtovými stratégiami. Autor opisuje metódy a systematicky rozoberá stratégie na dosahovanie vysokých presností a, čo je obzvlášť cenné, na odhad ich neistôt. Podkapitoly venované relativistickým efektom vyššieho rádu, vyšším korelačným príspevkom a (ne)úplnosti bázy presne definujú hlavné zdroje chýb v takýchto výpočtoch. Tento metodologický prístup, zameraný na robustnú kvantifikáciu chýb, je štandardom v špičkovom výskume a práca ho prezentuje výborne.

Vlastný prínos a aplikácie sú prezentované v kapitole 4. Táto časť demonštruje autorovu schopnosť aplikovať teoretický aparát na reálne, náročné vedecké problémy ako sú výpočty štruktúr zlata a astátu, Supertěžké prvky Nh, Og, ktoré ukazujú univerzálnosť použitých metód. Táto časť má vysokú vedeckú hodnotu a prínos, pretože experimentálne údaje sú tu obmedzené a teoretické predpovede sú kľúčové. Na záver boli predstavené výsledky pre

molekuly, ktoré výrazne rozširujú záber a význam práce. Kapitola 5, predstavuje záver, ktorý výstižne sumarizuje hlavné výsledky práce: robustnosť CC metód, dôležitosť kvantifikácie neistôt a nevyhnutnosť interdisciplinárnej spolupráce medzi teóriou a experimentom.

Predložená habilitačná práca predstavuje vynikajúcu vedeckú úroveň a riešenie aktuálnych problémov v oblasti výpočtovej chémie. Oceňujem systematický a metodický prístup, predovšetkým zameranie na analýzu zdrojov chýb a stratégie na dosiahnutie a overenie presnosti. Autor demonštroval schopnosť vyvinutých metód na vybraných aplikáciách, ktoré pokrývali oblasť ťažkých prvkov až super ťažkých prvkov, ako aj testovanie skúmaných metód na molekulách. Habilitačná práca prešla kontrolou originality a CRZP (6.40%) a systém nenašiel významný prekryv práce s inými autormi, väčšinou sa jedná o prekryv s vlastnými prácami a citáciami.

Predložená habilitačná práca „Relativistické výpočty elektrónovej štruktúry a ich presnosť v spektroskopických aplikáciách“ predstavuje veľmi kvalitné dielo. Práca jasne preukazuje autorovu expertízu, schopnosť samostatného vedeckého myslenia a že je vyzretou vedeckou osobnosťou. Jeho vedecká práca predstavuje významný príspevok v oblasti teoretickej chémie. Uchádzač i práca spĺňajú všetky požiadavky, vyžadované pre udelenie vedecko-pedagogického titulu docent v odbore Teoretická a počítačová chémia.

Otázka do diskusie:

Ktorý faktor (úplnosť bázy, vrátane gaussových alebo splajnových funkcií; zahrnutie vyšších excitácií v CC; alebo QED korekcie) sa dnes považuje za najväčšiu pre ďalšie zvyšovanie presnosti výpočtov pre ťažké prvky ako zlato?

V zmysle platných predpisov preto odporúčam, aby predkladaná habilitačná práca, ktorú hodnotím kladne, bola prijatá ako podklad k obhajobe a po jej úspešnom vykonaní navrhujem, aby bol RNDr. Lukášovi Félixovi Paštekovovi priznaný titul: *docent* v odbore „Teoretická a počítačová chémia“

V Bratislave 18. December 2025

Prof. Dr. Štefan Matejčík, DrSc