

Oponentský posudok na habilitačnú prácu

Mgr. Michala Pitoňáka, PhD.

**Využitie kvantovo-chemických metód na presný popis nekovalentných komplexov
atómov a molekúl**

Predložená habilitačná práca veľmi výstižne sumarizuje dosiahnuté výsledky vedeckej činnosti Mgr. Michala Pitoňáka a jeho spolupracovníkov. Ich orientácia na detailné štúdium komplexov atómov a molekúl bola správna, pretože práve táto problematika je stále veľmi aktuálna tak pre experimentátorov ako aj pre teoretické bádanie.

Snaha o čo najkvalitnejší popis interakcií pomocou kvantovo-chemických metód vyústila v rozšírenie existujúcej databázy interakčných energií komplexov. Publikované práce poukazujú na možnosti jednotlivých použitých metód pri výpočtoch interakčných energií. Aplikáciu mnohočasticových metód na toto štúdium značne podporili výsledky vývoja algoritmov, ktoré znižujú časovú náročnosť výpočtov a umožňujú efektívny výpočet korelačnej energie.

Všetky práce Mgr. Pitoňáka boli publikované v renomovaných odborných časopisoch kde prešli recenziou, preto sa ťažko hľadajú nejaké nedostatky, skôr možno vyzdvihnúť klady predložených prác.

Osobne veľmi kladne hodnotím prácu finalizujúcu komplexný popis interakcií od výberu metód cez výsledky a ich zhodnotenie, ktorá bola publikovaná v Chemical Reviews. K tomu možno taktiež priradiť zhodnotenie kvality popisu interakčných energií na úrovni MP2 a MP3 metód a v neposlednom rade tvorbu algoritmov a počítačových kódov na zefektívnenie výpočtov.

Ako prípadný námet do diskusie pri obhajobe by bolo zaujímavé počuť habilitantov názor na:

- definíciu presných interakčných energií
- určenie „univerzálnej“ interakčnej koordináty pre štúdium komplexov
- definíciu nekovalentných komplexov, ktoré v práci spomína

Záverom konštatujem, že habilitand preukázal vo svojej doterajšej vedecko-publikačnej činnosti vysokú úroveň vedeckej práce a preto navrhujem, aby **Mgr. Michalovi Pitoňákovi, PhD.** bola na základe predloženej habilitačnej práce a výsledkov priznaná vedecko-pedagogická hodnosť **docent**.

V Bratislave 1. 11. 2014



prof. RNDr. Ján Urban, DrSc.