

## **Oponentský posudok doktorskej dizertačnej práce Mgr. Terezy Šedivcovej "Properties of metastable states of small dications"**

Predložená dizertačná práca sa zaoberá nesporne aktuálnou problematikou aplikácie kvantovomechanických metód na popis štruktúry, spektrálnych vlastností metastabilných stavov dikatiónových molekúl doplnených štúdiom záporne nabitej molekuly  $C_2^-$ . Mimoriadne kvalitne napísaná práca prehľadne spája problematiku dikatiónov, teoretický aparát potrebný na popis ich energetických, spektrálnych vlastností, na popis metastabilných stavov týchto molekúl. Po výstižnom prehľade sú nemenej výstižne prezentovateľné najzaujímavejšie výsledky, ktoré sa podarilo získať pri štúdiu  $CO^{2+}$  (povrchy, spin-orbitálne interakcie, spektrá). Súčasťou práce sú štyri pôvodné práce publikované v renomovaných medzinárodných vedeckých časopisoch. Práve kvalita prác publikovaných v týchto časopisoch, ktorým predchádza náročné oponentské konanie, je potvrdením úrovne práce doktorandky.

K práci nemám ani z formálneho ani odborného hľadiska žiadne námietky. Otázky, ktoré mám na Mgr. Terezu Šedivcovú, sú skôr námetom pre diskusiu:

- autorka použila na výpočty vnútorne kontrahovanú multireferenčnú metódu konfiguračnej interakcie. Akým spôsobom boli robené kontrakcie?
- aký vplyv na výsledky má zahrnutie core elektrónov do korelácie?
- kvantovochemicky vypočítané body boli fitované do analytického tvaru. Akým spôsobom boli vybrané práve uvádzané tvary PES.
- nemieni využiť autorka uvedenú presnú metodiku na popis systému  $Ne_2^{2+}$ , ktorý Ben-Itzhak označoval ako náročný systém pre teóriu? (Aj keď existujú práce opisujúci tento dikatión)

Záverom môžem konštatovať, že predložená dizertačná práca dokazuje vedeckú kvalitu autorky, ktorá je schopná riešiť problémy chemickej fyziky na vysokojej úrovni. Práca spĺňa kritériá uvedené pre doktorské práce a preto ju doporučujem k obhajobe. Doporučujem, aby po obhájení práce bola Mgr. Tereze Šedivcovej udelená Vedeckou radou Přírodovědecké fakulty UK v Prahe vedecko-akademická hodnosť "philosophiae doctor".

V Bratislave, 7. 2. 2007

Doc. RNDr. Ján Urban, DrSc.