

# Vedecko/umelecko-pedagogická charakteristika osoby <sup>1</sup>

## Research/art/teacher profile of a person <sup>2</sup>

Tlačivo VUPCH určuje štruktúru dát Vedecko/umelecko-pedagogickej charakteristiky osoby pre spracovanie príloh žiadostí SAAVŠ.  
The form determines the data structure of the Research/art/teacher profile of a person. It is used for processing the annexes to the Slovak Accreditation Agency for Higher Education (SAAHE) applications.

Dátum poslednej aktualizácie / Date of last update:

I. Základné údaje / Basic information	
I.1 Priezvisko / Surname	Bučko
I.2 Meno / Name	Tomáš
I.3	doc., Ing., PhD.
I.4 Rok narodenia / Year of birth	1975
I.5 Názov pracoviska / Name of the workplace	Katedra fyzikálnej a teoretickej chémie, Univerzita Komenského v Bratislave/Department of physical and theoretical chemistry, Comenius university
I.6 Adresa pracoviska / Address of the workplace	Ilkovičova 6, 842 15 Bratislava
I.7 Pracovné zaradenie / Position	docent/associate professor
I.8 E-mailová adresa / E-mail address	<a href="mailto:tomas.bucko@uniba.sk">tomas.bucko@uniba.sk</a>
I.9 Hyperlink na záznam osoby v Registri zamestnancov vysokých škôl / Hyperlink to the entry of a person in the Register of university staff	<a href="https://www.portalvs.sk/regzam/detail/5712">https://www.portalvs.sk/regzam/detail/5712</a>
I.10 Názov študijného odboru, v ktorom osoba pôsobí na vysokej škole / Name of the study field in which a person works at the university	Počítačová chémia/Computational chemistry
I.11 ORCID ID <sup>3</sup>	<a href="https://orcid.org/0000-0002-5847-9478">https://orcid.org/0000-0002-5847-9478</a>

II. Vysokoškolské vzdelanie a ďalší kvalifikačný rast / Higher education and further qualification growth			
	II.a Názov vysokej školy alebo inštitúcie / Name of the university or institution	II.b Rok / Year	II.c Odbor a program / Study field and programme
II.1 Vysokoškolské vzdelanie prvého stupňa / First degree of higher education	Slovenská technická univerzita, Chemicko-technologická fakulta/Slovak university of technology, Faculty of chemical technology	1997	fyzikálna chémia/physical chemistry
II.2 Vysokoškolské vzdelanie druhého stupňa / Second degree of higher education	Slovenská technická univerzita, Chemicko-technologická fakulta/Slovak university of technology, Faculty of chemical technology	1999	fyzikálna chémia/physical chemistry
II.3 Vysokoškolské vzdelanie tretieho stupňa / Third degree of higher education	Univerzita Viedeň, Fakulta fyziky/University of Vienna, Faculty of physics	2004	fyzika/physics
II.4 Titul docent / Associate professor	Univerzita Viedeň, Fakulta fyziky/University of Vienna, Faculty of physics	2010	chemická fyzika/chemical physics
II.5 Titul profesor / Professor			
II.6 Titul DrSc. / Doctor of Science (DrSc.)			

III. Súčasný a predchádzajúce zamestnanie / Current and previous employment		
III.a Zamestnanie-pracovné zaradenie / Occupation-position	III.b Inštitúcia / Institution	III.c Časové vymedzenie / Duration
odborný asistent/assistant professor	Univerzita Viedeň/University of Vienna	2004-2010
odborný asistent/assistant professor	Univerzita Komenského v Bratislave/Comenius university in Bratislava	2010-2011
docent/associate professor	Univerzita Komenského v Bratislave/Comenius university in Bratislava	2011-present

IV. Rozvoj pedagogických, odborných, jazykových, digitálnych a iných zručností / Development of pedagogical, professional, language, digital and other skills		
IV.a Popis aktivity, názov kurzu (ak išlo o kurz), iné / Activity description, course name, other	IV.b Názov inštitúcie / Name of the institution	IV.c Rok / Year


## V. Prehľad aktivít v rámci pedagogického pôsobenia na vysokej škole / Overview of activities within the teaching career at the university

### V.1. Prehľad zabezpečovaných profilových študijných predmetov v aktuálnom akademickom roku podľa študijných programov / Overview of the profile courses taught in the current academic year according to study programmes

V.1.a Názov profilového predmetu / Name of the profile course	V.1.b Študijný program / Study programme	V.1.c Stupeň / Degree	V.1.d Študijný odbor / Field of study
Úvod do teórie tuhej fázy/Introduction to theory of solid phase	Počítačová chémia/Computational chemistry	II.	chémia/Chemistry
Počítačové modelovanie 2/Computer modeling 2	Počítačová chémia/Computational chemistry	II.	chémia/Chemistry
Teoretická chémia/Theoretical chemistry	Počítačová chémia/Computational chemistry	III.	chémia/Chemistry
Moderné počítačové metódy kvantovej chémie/Modern	Počítačová chémia/Computational chemistry	III.	chémia/Chemistry
Počítačové simulácie/Computer simulations	Počítačová chémia/Computational chemistry	III.	chémia/Chemistry

### V.2. Prehľad o zodpovednosti za uskutočňovanie, rozvoj a zabezpečenie kvality študijného programu alebo jeho časti na vysokej škole v aktuálnom akademickom roku / Overview of the responsibility for the delivery, development and quality assurance of the study programme or its part at the university in the current academic year<sup>4</sup>

V.2.a Názov študijného programu / Name of the study programme	V.2.b Stupeň / Degree	V.2.c Študijný odbor / Field of study
Počítačová chémia/Computational chemistry	II.	chémia/Chemistry
Počítačová chémia/Computational chemistry	III.	chémia/Chemistry

### V.3. Prehľad o zodpovednosti za rozvoj a kvalitu odboru habilitačného konania a inauguračného konania v aktuálnom akademickom roku / Overview of the responsibility for the development and quality of the field of habilitation procedure and inaugural procedure in the current academic year

V.3.a Názov odboru habilitačného konania a inauguračného konania / Name of the field of habilitation procedure and inaugural procedure	V.3.b Študijný odbor, ku ktorému je priradený / Study field to which it is assigned

### V.4. Prehľad vedených záverečných prác / Overview of supervised final theses

	V.4.a Bakalárske (prvý stupeň) / Bachelor's (first degree)	V.4.b Diplomové (druhý stupeň) / Diploma (second degree)	V.4.c Dizertačné (tretí stupeň) / Dissertation (third degree)
V.4.1 Počet aktuálne vedených prác / Number of currently supervised theses	0	0	3
V.4.2 Počet obhájených prác / Number of defended theses	1	1	0

### V.5. Prehľad zabezpečovaných ostatných študijných predmetov podľa študijných programov v aktuálnom akademickom roku / Overview of other courses taught in the current academic year according to study programmes

V.5.a Názov predmetu / Name of the course	V.5.b Študijný program / Study programme	V.5.c Stupeň / Degree	V.5.d Študijný odbor / Field of study
Počítačové simulácie/Computer simulations	Počítačová chémia/Computational chemistry	III.	chémia/Chemistry

## VI. Prehľad výsledkov tvorivej činnosti / Overview of the research/artistic/other outputs

VI.1. Prehľad výstupov tvorivej činnosti a ohlasov na výstupy tvorivej činnosti / Overview of the research/artistic/other outputs and the corresponding citations		
	VI.1.a Celkovo / Overall	VI.1.b Za posledných šesť rokov / Over the last six years
VI.1.1 Počet výstupov tvorivej činnosti / Number of the research/artistic/other outputs	73	25
VI.1.2 Počet výstupov tvorivej činnosti registrovaných v databázach Web of Science alebo Scopus / Number of the research/artistic/other outputs registered in the Web of Science or Scopus databases	73	25
VI.1.3 Počet ohlasov na výstupy tvorivej činnosti / Number of citations corresponding to the research/artistic/other outputs	2500	1500
VI.1.4 Počet ohlasov registrovaných v databázach Web of Science alebo Scopus na výstupy tvorivej činnosti / Number of citations registered in the Web of Science or Scopus databases	2500	1500
VI.1.5 Počet pozvaných prednášok na medzinárodnej a národnej úrovni / Number of invited lectures at the international, national level	16	5

VI.2. Najvýznamnejšie výstupy tvorivej činnosti / The most significant research/artistic/other outputs <sup>5</sup>	
1.	T. Bucko, J. Hafner, S. Lebegue, J. G. Angyan. Improved Description of the Structure of Molecular and Layered Crystals: Ab Initio DFT Calculations with van der Waals Corrections. <i>J. Phys. Chem. A</i> 114 11814, (2010).
2.	T. Bucko, S. Lebegue, J. Hafner, J. G. Angyan. Tkatchenko-Scheffler van der Waals correction method with and without self-consistent screening applied to solids. <i>Phys. Rev. B</i> 87, 064110 (2013).
3.	T. Bucko, J. Hafner, and J. G. Angyan. Geometry optimization of periodic systems using internal coordinates. <i>J. Chem. Phys.</i> 122 124508, (2005).
4.	T. Bucko, L. Benco, J. Hafner, J. G. Angyan. Monomolecular cracking of propane over acidic chabazite: An ab initio molecular dynamics and transition path sampling study. <i>J. Catal.</i> 279, 220 (2011).
5.	P. Lazar, T. Bucko, J. Hafner. Negative thermal expansion of ScF <sub>3</sub> : insights from density-functional molecular dynamics in the isothermal-isobaric ensemble. <i>Phys. Rev. B</i> 92, 224302 (2015).

VI.3. Najvýznamnejšie výstupy tvorivej činnosti za ostatných šesť rokov / The most significant research/artistic/other outputs over the last six years <sup>6</sup>	
1.	T. Bucko, S. Lebegue, T. Gould, J. G. Angyan. Many-body dispersion corrections for periodic systems: an efficient reciprocal space implementation. <i>J. Phys.: Condens. Matter</i> , 28, 045201 (2016).
2.	W. Taifan, T. Bucko, J. Baltrusaitis. Catalytic conversion of ethanol to 1,3-butadiene on MgO: A comprehensive mechanism elucidation using DFT calculations. <i>J. Catal.</i> , 346, 78–91 (2017).
3.	T. Bucko, S. Chibani, J. F. Paul, L. Cantrel, M. Badawi. Dissociative iodomethane adsorption on Ag-MOR and formation of AgI clusters: an ab-initio molecular dynamics study. <i>Phys. Chem. Chem. Phys.</i> , 19, 27530 (2017).
4.	J. Rey, Ch. Bignaud, P. Raybaud, T. Bucko, C. Chizallet. Dynamic features of transition states for beta-scission reactions of alkenes over acid zeolites revealed by AIMD simulations. <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> 59, 18938 (2020).
5.	T. Bucko, M. Gesvandtnerova, D. Rocca. Ab initio calculations of free energy of activation at multiple electronic structure levels made affordable: An effective combination of perturbation theory and machine learning. <i>J. Chem. Theory Comput.</i> 16, 6049–6060 (2020).

VI.4. Najvýznamnejšie ohlasy na výstupy tvorivej činnosti / The most significant citations corresponding to the research/artistic/other outputs <sup>7</sup>	
1.	T. Bjorkman, A. Gulans, A. V. Krashennikov, R. M. Nieminen. van der Waals Bonding in Layered Compounds from Advanced Density-Functional First-Principles Calculations. <i>Phys. Rev. Lett.</i> 108, 235502 (2012).
2.	A. Falin, Q. Cai, E. J. G. Santos, D. Scullion, D. Qian, R. Zhang, Z. Yang, S. Huang, K. Watanabe, T. Taniguchi, M. R. Barnett, Y. Chen, R. S. Ruoff, L. H. Li. Mechanical properties of atomically thin boron nitride and the role of interlayer interactions. <i>Nat. Commun.</i> 8, 15815 (2017).
3.	V. V. Gobre, A. Tkatchenko, Scaling laws for van der Waals interactions in nanostructured materials. <i>Nat. Commun.</i> 4, 2341 (2013).
4.	V. Van Speybroeck, K. Hemelsoet, L. Joos, M. Waroquier, R. G. Bell, C. R. A. Catlow. Advances in theory and their application within the field of zeolite chemistry. <i>Chem. Soc. Rev.</i> 44, 7044 (2015).
5.	D. Wang, T. Sheng, J. Chen, H.-F. Wang, P. Hu. Identifying the key obstacle in photocatalytic oxygen evolution on rutile TiO <sub>2</sub> . <i>Nat. Commun.</i> 1, 291 (2018).

VI.5. Účasť na riešení (vedení) najvýznamnejších vedeckých projektov alebo umeleckých projektov za posledných šesť rokov / Participation in conducting (leading) the most important research projects or art projects over the last six years <sup>8</sup>	
1.	2016-2020: "Noncovalent interactions in systems of increasing complexity" APVV-15-105 (investigator)
2.	2019-2022: "Reference calculations of properties, interactions, and reactivity of chemical systems", VEGA-1/0777/19 (investigator).
3.	2018-202: Eurofusion H2020 Work Package "Heating and Current Drive" with task HCD 3.2.1 Computational Modelling of Cs-Mo interactions in NBI sources as the member of the HCD research team

4.	2021-2025: "Towards reliable finite temperature ab initio calculations of molecules and materials" APVV-20-0127 (principal investigator)
5.	

VII. Prehľad aktivít v organizovaní vysokoškolského vzdelávania a tvorivých činností <sup>9</sup> / Overview of organizational experience related to higher education and research/artistic/other activities		
VII.a Aktivita, funkcia / Activity, position	VII.b Názov inštitúcie, grémia / Name of the institution, board	VII.c Časové vymedzenia pôsobenia / Duration

**VIII. Prehľad zahraničných mobilit a pôsobenia so zameraním na vzdelávanie a tvorivú činnosť v študijnom odbore / Overview of international mobilities and visits oriented on education and research/artistic/ other activities in the given field of study**

VIII.a Názov inštitúcie / Name of the institution	VIII.b Sídlo inštitúcie / Address of the institution	VIII.c Obdobie trvania pôsobenia/pobytu (uviesť dátum odkedy dokedy trval pobyt) / Duration (indicate the duration of stay)	VIII.d Mobilitná schéma, pracovný kontrakt, iné (popísať) / Mobility scheme, employment contract, other (describe)
University of Lorraine	91, avenue de la Libération, F-54001 Nancy Cedex	November 2010, July 2011, November 2012, June 2014, June 2015, May-July 2016	<b>pozvaný profesor/invited professor</b>

**IX. Iné relevantné skutočnosti / Other relevant facts <sup>10</sup>**

IX.a Ak je to podstatné, uvádzajú sa iné aktivity súvisiace s vysokoškolským vzdelávaním alebo s tvorivou činnosťou / If relevant, other activities related to higher education or research/artistic/other activities are mentioned

--