

**Oponentský posudek habilitační práce Ing. Lucie Augustovičové, Ph.D.**  
***“Quantum dynamics of small molecular systems from diatomics to polyatomics”***

Habilitační práce Ing. Augustovičové obsahuje přehled výsledků jejího teoretického výzkumu v oboru atomové a molekulové fyziky, které obdržela ve spolupráci s českými i zahraničními vědci v letech 2014-2020 jednak na Matematicko-fyzikální fakultě UK a jednak během svého zahraničního pobytu na institutu JILA Physics Frontiers Center a na Univerzitě v Coloradu v USA. Zajímá se především o přesné výpočty struktury malých molekul a dále procesů, kterých se tyto molekuly účastní a které mají velký význam při modelování raného vývoje vesmíru, hvězd a dalších astrofyzikálních prostředí.

Práce je rozdělena do čtyř hlavních kapitol, které vždy obsahují stručný úvod do specifických témat, kterými se Ing. Augustovičová se svými kolegy blíže zabývala, a dále zevrubný přehled jejich výsledků. Detaily výpočtů a podrobná diskuze obdržených výsledků jsou uvedeny v příložených článcích seřazených podle témat popsanych v jednotlivých kapitolách. Kromě dvou článků je Ing. Augustovičová vždy prvním autorem, což vypovídá o jejím velkém podílu na výsledcích obsažených v jednotlivých článcích. Ve všech specifických oblastech výzkumu publikovala své články v impaktovaných odborných časopisech, jako jsou *Physical Review A*, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, či *Astronomy & Astrophysics*, což vypovídá o nesporné kvalitě její práce.

Šest z prezentovaných článků, které bezprostředně navazují na její výzkum v rámci doktorského studia na MFF UK a jejichž výsledky jsou shrnuty v první kapitole, se zabývá procesem radiační asociace lehkých atomů a iontů (H, He, Li) a konkurenčními neradiačními procesy. Autorka se zabývala především procesy, které nebyly dosud podrobně studovány na plně kvantově mechanické úrovni. Kromě poskytnutí potřebných dat pro astrofyzikální modely vidím jako hlavní přínos poukázání na význam kvadrupólových přechodů pro radiační asociaci.

Další tři články a druhá kapitola této práce je věnována výpočtům mikrovlnných přechodů v malých molekulách, které jsou vhodnými kandidáty pro pozorování případné proměnlivosti základních fyzikálních konstant v čase, především poměru hmotností protonu a elektronu. Se svými kolegy Ing. Augustovičová navrhla řadu přechodů v molekulových iontech  $H_2^+$ ,  $D_2^+$  a  $He_2^+$  a molekulách OH a  $NH_3$ , které mají velkou citlivost na případné změny tohoto poměru hmotností, zvláště pokud se vyskytují v silných magnetických polích, a jsou proto experimentálně zajímavé.

Kromě těchto dvou oblastí se Ing. Augustovičová zabývala též vlivem vnějšího elektrického a magnetického pole na nízkoteplotní srážky molekul NO a CaOH, což má velký význam pro efektivní chlazení molekul a dosažení velmi nízkých teplot, a také přítomností kvantového chaosu ve spektrech Fano-Feshbachových rezonancí dimerů  $Er_2$  a  $Dy_2$ . Tato témata jsou obsahem třetí, resp. čtvrté kapitoly, a v obou případech autorka využívá své zkušenosti s detailními výpočty spekter a dynamiky malých molekul k získání nových netriviálních výsledků.

Práce též obsahuje krátkou přílohu, kde je podrobnější teoretický popis struktury molekuly OH. V závěru autorka shrnuje dosažené výsledky a stručně se zmiňuje o oblastech, kterým se i nadále věnuje.

Jak po odborné, tak i po formální stránce nenacházím v práci nedostatky. Veškeré výpočty byly provedeny velmi pečlivě a na úrovni současného stavu poznání. Obdržené výsledky rozšiřují naši znalost struktury a dynamiky malých molekul a povedou k lepším a přesnějším modelům astrofyzikálních systémů, kde se tyto molekuly vyskytují. Jediné, co by se snad dalo práci vytknout, je absence přímého porovnání výsledků s experimenty, což je ale způsobeno výběrem témat a studovaných molekul, pro které jsou přesné experimenty, zvláště v pozemských podmínkách, velmi náročné. Ale jak uvádí autorka v závěru své práce, její výpočty již inspirovaly experimentální skupinu na Harvardově univerzitě k vytvoření velmi chladného vzorku molekul CaOH, a doufejme, že se objeví i další experimenty potvrzující její předpovědi.

Ing. Augustovičová podle mne patří k předním vědkyním ve svém oboru a prokázala, že ho dokáže aktivně rozvíjet. Během necelých deseti let se etablovala jako odbornice na přesné výpočty spekter malých molekul a souvisejících procesů. Domnívám se, že i nadále bude velkým přínosem pro rozvoj tohoto širokého oboru, zvláště podaří-li se jí přilákat ke svým tématům studenty, kterých bohužel zatím nevedla mnoho vzhledem k velké konkurenci v rámci teoretické fyziky na MFF UK.

Závěrem bych chtěl uvést, že ač kontrola originality habilitační práce systémem Turnitin ukázala velkou shodu (celá první a větší části druhé a třetí kapitoly) s blíže neurčenou studentskou prací na Univerzitě Karlově, jde pravděpodobně o chybu. Disertační práce Ing. Augustovičové obhájená na Univerzitě Karlově sice obsahuje několik pasáží, které jsou velmi podobné těm z její práce habilitační, ale podle mě jde o přiměřenou podobnost vzhledem k odbornému zaměření textu, který obsahuje řadu definic, základních vzorců a odkazů na literaturu. Nenašel jsem žádný jiný text, který by obsahoval např. celou první kapitolu. Shody s jinými odbornými texty jsou poměrně malé a na odborný text běžné.

Vzhledem k výše uvedenému doporučuji, aby byla předložená práce uznána jako habilitační na Matematicko-fyzikální fakultě Univerzity Karlovy v Praze a Ing. Augustovičové byl udělen titul docent.

V Praze dne 5. 4. 2021



doc. RNDr. Karel Houfek, Ph.D.