

Praha, 4. března 2021

Oponentský posudek habilitační práce **Ing. Lucie Augustovičové, Ph.D.**

na téma

Quantum dynamics of small molecular systems from diatomics to polyatomics

Habilitační práce paní Ing. Lucie Augustovičové se zabývá různými aspekty dynamického chování malých molekul, které je studováno na plně kvantově mechanické úrovni, což umožňuje popsat jemné efekty, které u semiklasického studia dynamiky velkých molekul jsou nutně zanedbány. Tyto efekty však mohou být velmi důležité v různých specifických situacích, např. v astrochemii, při dosahování extrémně nízkých teplot, či pro testování platnosti standartního modelu a neměnnosti fyzikálních konstant v čase. Jde tedy o téma zajímavé a důležité, i když je poněkud vzdálenější "mainstreamové" molekulové fyzice a teoretické chemii.

Práce se skládá ze čtyř kapitol věnujících se separátním tématům majícím kvantovou dynamiku malých molekul jako svůj "společný jmenovatel" a je k ní přiloženo 13 článků publikovaných v letech 2014-2020 v recenzovaných časopisech, přičemž u 11 z nich je Lucie Augustovičová první autorkou. Prvním diskutovaným tématem jsou radiativní procesy v astrochemických reakcích, zejména radiativní asociace, která je zodpovědná za tvorbu molekul v interstelární hmotě. Autorka detailně studovala tyto procesy v iontech jako např. HeH^+ a provedla výpočty jejich dob života, účinných průřezů a rychlostních koeficientů včetně jejich závislosti na teplotě. Poměrně překvapivé bylo zjištění, že procesy indukované kvadrupólovými přechody mohou mít podobně velké rychlostní koeficienty jako dipólově indukované procesy. Další část práce byla věnována možnosti detekce změny fundamentálních konstant v kosmologickém časovém měřítku pomocí spekter malých molekul a iontů, které mohly existovat již v raném vesmíru. Ve třetí kapitole se autorka zabývá rozptylem ultrachladných molekul a vlivem externích polí na tyto procesy, s cílem přispět k vývoji metod evaporativního a laserového chlazení molekul na extrémně nízké teploty. Poslední kapitola je pak věnována kvantovému chaosu v systémech chladných atomů lanthanoidů a jejich diatomik, který se manifestuje ve spektru energetických stavů a jeho závislosti na externím magnetickém poli.

Po formální stránce nemám k práci žádné připomínky, práce je psána výbornou angličtinou a kontrola originality práce systémem Turnitin neindikuje plagiátorství cizích textů; jistý překryv úvodní teoretické části s dizertací autorky je pochopitelný. Byl bych ale ocenil, kdyby autorka v úvodním textu práce podrobněji popsala použité teoretické a výpočetní metody, s nimiž specialisté z jiným oborů nemusí být nutně familiární. Z tohoto pohledu byl pro mne při prvním otevření práce lehce matoucí její název (Quantum dynamics ...), který u mne evokuje asociace na explicitně časově závislé metody (propagace vlnových balíků), zatímco většina výpočtů byla zřejmě provedena časově nezávislými metodami teorie rozptylu. Toto je ale jen můj pohled jako kvantového chemika, pracovník z jiného oboru může mít diametrálně jiný názor, a výše uvedené

tedy nelze považovat za kritiku kvality práce.

Při čtení práce mne napadlo několik otázek, které bych rád během obhajoby položil:

- Jsou pro účinné průřezy radiativní asociace (např. z obr. 1-4) k dispozici experimentální data pro porovnání? Jaká je přesnost teoretických výpočtů?
- Vzhledem k tomu, že se zabýváte efekty při velmi nízkých energiích, do jaké míry jsou výsledky ovlivněny kvalitou potenciálního povrchu či modelu, který pro danou molekulu používáte? Zkoušeli jste např. studovat radiativní asociaci molekuly na potenciálových křivkách získaných v různé velké bázi a různě kvalitními kvantově chemickými metodami? Jaké jsou minimální požadavky na přesnost PES?
- Jak souvisí časově nezávislá charakterizace kvantového chaosu pomocí energetických hladin s časově závislým pohledem - disipací vlnového balíku - a lze u tohoto typu kvantového chaosu najít klasickou limitu či analogii?

Scientometrický přehled odborných výsledků Ing. Lucie Augustovičové na Web of Science udává v době psaní posudku 23 prací, 110 citací (69 bez autocitací) a h-index 6. To se zdá být relativně málo ve srovnání s kolegy v teoretické a zejména aplikované výpočetní chemii, nicméně takové prosté srovnání by bylo zavádějící. Autorka se pohybuje v úzce zaměřené oblasti, kde nemá tolik kolegů, kteří by její práce citovali, takže relativně nízký počet citací mají i články v prestižních časopisech s $IF > 5$. Není tedy možné srovnávat je s pracemi v populárních oblastech jako např. nanotechnologie, kde je citovanost i jen průměrných prací mnohem vyšší. U většiny článků je Ing. Lucie Augustovičová první autorkou a její podíl na článku tedy byl zásadní. Proto považuji dosavadní vědecký výstup autorky za zcela adekvátní pro její habilitační řízení.

Závěrem nezbyvá než konstatovat, že předložená práce prezentuje výzkum na mezinárodně uznávané úrovni a není tak pochyb, že kandidátka se etablovala jako renomovaná vědecká pracovnice a prokázala schopnost vést samostatně výzkum v této oblasti.

Doporučuji tedy předloženou práci k obhajobě a po jejím úspěšném absolvování navrhuji udělení titulu Docent paní Dr. Augustovičové.



Doc. Mgr. Jiří Pittner, Dr. rer. nat., DSc.
Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.
Dolejškova 3, CZ-18223 Praha