

Univerzita Karlova

Matematicko-fyzikální fakulta

Výpis ze zápisu ze 9. jednání Vědecké rady MFF UK konaného dne 2. června 2021

(akademický rok 2020/2021)

Návrh na jmenování Ing. Lucie Augustovičové, Ph.D., docentkou pro obor *Fyzika – teoretická fyzika*.

Habilitační řízení dr. Augustovičové proběhlo v českém jazyce.

K habilitaci uchazečka předložila práci nazvanou **Quantum dynamics of small molecular systems from diatomics to polyatomics**. Habilitační komise pracovala ve složení – předseda: prof. RNDr. Pavel Cejnar, Dr., DSc., (MFF UK, Praha), členové: prof. RNDr. Petr Slavíček, Ph.D., (VŠCHT, Praha), prof. RNDr. Patrik Španěl Dr. rer. nat., (Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., Praha), doc. RNDr. Martin Čížek, Ph.D., (MFF UK, Praha), doc. Mgr. Michal Fárník, Ph.D., DSc., (Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v. v. i., Praha).

Tato komise jmenovala tři oponenty. Stali se jimi: Dr. Jimena D. Gorfinkiel, (The Open University, Velká Británie), doc. RNDr. Karel Houfek, Ph.D., (MFF UK, Praha), doc. Mgr. Jiří Pittner, Dr. rer. nat., DSc., (AV ČR v. v. i., Praha).

Po zhodnocení výsledků vědecké a pedagogické činnosti uchazečky a po obdržení kladných posudků na habilitační práci se komise tajným hlasováním jednomyslně usnesla na návrhu, aby byla Ing. Lucie Augustovičová, Ph.D., jmenována docentkou. Všechny podklady – údaje o uchazečce, stanovisko habilitační komise, CV uchazečky, přehled její pedagogické činnosti, výčet publikací, citací a zahraničních pobytů, aktuální výpis z databáze WoS, posudky oponentů – dostala vědecká rada předem k dispozici, habilitační práce je k veřejnému nahlédnutí na WWW stránce vědecké rady.

Svoji habilitační přednášku uchazečka nazvala **Quantum dynamics of small molecular systems from diatomics to polyatomics**.

Uchazečka pozdravila všechny přítomné a sdílela svou prezentaci. Ve své přednášce se věnovala především těmto tématům: chemický vývoj raného vesmíru, ultra chladné molekuly, kosmologická variabilita fundamentálních konstant a kvantový chaos. Jedna důležitá oblast výzkumu uchazečky je zaměřena na vznik prvních molekul v raném vesmíru. Ve své přednášce se mu šířeji věnovala. Dále popsala ultra chladné atomy a jejich význam, evaporativní chlazení a časovou variabilitu fundamentálních konstant fyziky.

Prod. Doležal přivítal přítomné oponenty doc. Houfka a doc. Pittnera a požádal je o přednesení jejich posudků. Na závěr přednesl část posudku dr. Gorfinkiel.

doc. RNDr. Karel Houfek, Ph.D.:

Co považuji za zcela základní věc je, že před jejími výpočty řada procesů, které studovala, potřebovala často data, která se používají v astrofyzice nebo jiných systémech a byla často odhadována, protože tyto malé molekuly je obtížné měřit experimentálně. Kvalitní teoretická práce a výpočty jsou často náročné a myslím si, že to zvládla ve své práci velice dobře a pro řadu procesů poskytla data, která mohou pomoci v ostatních oborech fyziky. V práci mi chyběl popis, jak se výpočty provádí, abych je mohl lépe pochopit. Přesto, že to není můj obor, ve výpočtech jsem se nakonec zorientoval a práce mi poskytla řadu inspirací i pro můj výzkum. To, co je trochu zarážející v práci je to, že je tam velmi málo srovnání s experimentem. Což mi přijde jako základní, že při výpočtu potřebujete srovnání s experimentem, abyste si ověřili, že výpočty jsou správné. Tady je to trochu pochopitelné v tom, že systémy, které dr. Augustovičová studuje, jsou často radikály a měří se velmi těžce. Přesto výsledky považuji za velice dobré a doufám, že budou inspirovat experimentátory, aby některé předpovědi ověřili a výpočty využili. Jakožto vědecká práce je podle mne tato habilitační práce zcela dostatečná pro získání habilitace.

doc. Mgr. Jiří Pittner, Dr. rer. nat., DSc.:

Habilitační práce paní Ing. 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 aplikacích, např. v astrochemii, při dosahování extrémně nízkých teplot, či pro testování platnosti standardního 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. Byl bych ocenil, kdyby autorka v úvodním textu práce podrobněji popsala použité teoretické a výpočetní metody, s nimiž specialisté z jiných 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, zatímco většina výpočtů byla zřejmě provedena časově nezávislými metodami teorie rozptylu.

Dr. Jimena D. Gorfinkiel:

The thesis shows both the breadth of Dr. Augustovičová's interests and the depth with which she has applied her knowledge and expertise to scientific problems of contemporary relevance. This is demonstrated by the fact that her work has led to a number of publications in high quality journals, both in the areas of Molecular Physics and Quantum Chemistry (Phys. Rev. A, J. Chem Phys., etc.) and those where the outputs of Dr. Augustovičová's research can be used to shed light on more complex phenomena both of applied and fundamental interest (e.g. MNRAS). I believe it also shows the potential of Dr. Augustovičová to make further significant contributions to her area of expertise in the future.

Následovala veřejná rozprava, ve které členové vědecké rady vznesli své dotazy.

Uchazečka na začátek diskuse zodpověděla doplňující dotazy oponentů docenta Pittnera a docenta Houfka.

Další dotazy vznesli prof. Koucký, prof. Tůma, prof. Rezek, prof. Trlifaj, prof. Maslowski a prof. Král. S odpověďmi uchazečky byli všichni tazatelé spokojeni.

Na závěr stručně vystoupil předseda habilitační komise prof. RNDr. Pavel Cejnar, Dr., DSc., a shrnul stanovisko komise.

Uchazečka se intenzívně zapojuje do výuky. Již v době svého magisterského studia na FJFI ČVUT a následného doktorského studia na MFF UK vedla cvičení k různým předmětům z fyziky a matematiky na několika fakultách ČVUT a na MFF UK. V posledních letech na MFF UK vede cvičení mj. k povinnému předmětu bakalářského studia fyziky „Úvod do kvantové mechaniky“, ke kterému spoluvytvořila sbírku příkladů (L. Augustovičová, J. Klimeš, Brain Workouts in Quantum Mechanics, MatfyzPress, Praha 2021). Od akademického roku 2014/15 vede vlastní malou výběrovou přednášku „Symetrie molekul“ a od roku 2018/19 obdobnou přednášku „Variační metody“. Dosavadní vědecká práce uchazečky se soustředila na následující oblasti teoretické chemické fyziky: 1) analýza radiačních procesů v molekulách a jejich relevance v astrofyzice a fundamentální fyzice 2) popis srážek molekul při nízkých teplotách v externích elektromagnetických polích a 3) kvantově-chaotické vlastnosti molekulárních spekter a rezonancí při nízkoteplotních srážkách molekul. Uvedená témata jsou důležitá nejen v rámci oboru chemické fyziky, ale mají také významný přesah do dalších fyzikálních oborů (astrofyziky, fundamentální fyziky, fyziky Bose-Einsteinových kondenzátů). Lze konstatovat, že dosavadní vědecká činnost uchazečky svědčí o jejím plnohodnotném začlenění do špičkového výzkumu v oblasti teoretické chemické fyziky a je velmi silným argumentem ve prospěch úspěšné habilitace. Uchazečka je mezinárodně uznávanou osobností v teoretické chemické fyzice. Je hlavní autorkou či spoluautorkou řady originálních článků, které byly publikovány v prestižních mezinárodních časopisech. Její práce má interdisciplinární charakter a týká se velmi důležitých vědeckých témat. Aktivně se podílí na výchově bakalářských a magisterských studentů fyziky na MFF UK. Všechny tři recenze na předloženou habilitační práci jsou kladné a doporučují udělení vědecko-pedagogického hodnosti docent. Ke stejnému závěru po předchozí diskusi jednoznačně dospěla i habilitační komise.

Následovala neveřejná část jednání zakončená hlasováním o návrhu. (Tajné hlasování proběhlo v elektronickém systému Chres).

Z celkového počtu 27 členů vědecké rady bylo na zasedání přítomno 24 členů a ti odevzdali 23 kladných hlasů, 0 hlasů záporných a 0 hlasy neplatné, 1 se zdržel hlasování.

Vědecká rada se usnesla na návrhu, aby **Ing. Lucie Augustovičová Ph.D.**, byla jmenována docentkou pro obor **Fyzika – teoretická fyzika**. Návrh bude postoupen rektorovi Univerzity Karlovy.

Za správnost:

Bc. Dominika Brožková



