

Posudek oponenta habilitační práce

Masarykova univerzita	
Fakulta	Přírodovědecká
Obor řízení	Fyzikální chemie
Uchazeč	<i>Jana Pavlů, Mgr., Ph.D.</i>
Pracoviště uchazeče	Ústav chemie
Habilitační práce (název)	<i>Ab initio and semiempirical modelling of intermetallic phases</i>
Oponent	doc. Mgr. Miroslav Černý, Ph.D.
Pracoviště oponenta	Vysoké učení technické v Brně

Text posudku

Předkládaná habilitační práce je komentovaným souborem třinácti vybraných autorčiných publikací, které představují průřez její dosavadní vědeckou prací. Ta je kromě zmíněných vybraných publikací dokumentována pěti dalšími časopiseckými výstupy a jednou kapitolou v monografii. Jde vesměs o publikace v renomovaných (a impaktovaných) vědeckých časopisech. Už tato skutečnost potvrzuje jejich vysokou úroveň a počty citací dle WoS (148 bez autocitací) pak i aktuálnost jejich obsahu. Deklarovaný autorčin podíl ukazuje, že přispěla k jejich vzniku významnou měrou. Autorku habilitační práce Mgr. Janu Pavlů, Ph.D. lze spolu s některými spoluautory jejich publikací považovat za jedny z průkopníků v oblasti modelování fázových diagramů systémů s komplexními intermetalickými fázemi s využitím kombinace semiempirické metody CALPHAD a ab initio výpočtů. Výše uvedená publikační činnost je datována od roku 2002 a za zmínku jistě stojí i skutečnost, že kromě vědecké práce se v uvedeném období zvládla věnovat i své rodině. Z tohoto pohledu lze její publikační činnost a citační ohlas (doložený např. h-indexem 8) považovat za úctyhodné.

Publikace tvořící přílohu habilitační práce jsou uvedeny komentářem v rozsahu 34 stran. V něm jsou stručně představeny modelované struktury, použité metody a přístupy, a také stručné shrnutí hlavních dosažených výsledků. Tato část ukazuje, že příložené práce byly vybrány s rozmyslem a že mají společnou platformu, jíž je modelování fázových diagramů zejména Lavesových a sigma fází využívající dat spočtených za pomoci prvoprincipiálních metod. Z textu je také patrná motivace autorčina výzkumu a jeho hlavní vědecký přínos. Celá úvodní část je napsána pečlivě a srozumitelně a mám k ní jen několik málo připomínek:

- V rovnicích nejsou vektorové veličiny odlišeny od skalárních.
- Podmínky elastické stability (str. 13 a 20) pro kubický systém lze zredukovat na tři.
- Formulace podmínky stability (poslední věta na str. 13) na základě fononového spektra je silně zjednodušená až poněkud zavádějící.

Anotace posudku oponenta habilitační práce

Masarykova univerzita	
Fakulta	Přírodovědecká
Obor řízení	Fyzikální chemie
Uchazeč	<i>Jana Pavlů, Mgr., Ph.D.</i>
Pracoviště uchazeče	Ústav chemie
Habilitační práce (název)	<i>Ab initio and semiempirical modelling of intermetallic phases</i>
Oponent	doc. Mgr. Miroslav Černý, Ph.D.
Pracoviště oponenta	Vysoké učení technické v Brně

Zkrácený text posudku

Předkládaná habilitační práce je komentovaným souborem třinácti vybraných autorčiných publikací, které představují průřez její dosavadní vědeckou prací. Ta je dokumentována i pěti dalšími časopiseckými výstupy a jednou kapitolou v monografii. Jde vesměs o publikace v renomovaných (a impaktovaných) vědeckých časopisech. Už tato skutečnost potvrzuje jejich vysokou úroveň a počty citací pak i aktuálnost jejich obsahu. Deklarovaný autorčin podíl ukazuje, že přispěla k jejich vzniku významnou měrou. Publikace tvořící přílohu habilitační práce jsou uvedeny komentářem, v němž jsou stručně představeny modelované struktury, použité metody a přístupy, a také stručně shrnutí hlavních dosažených výsledků. Tato část práce ukazuje, že přiložené publikace byly vybrány s rozmyslem a že mají společnou platformu, jíž je modelování fázových diagramů zejména Lavesových a sigma fází využívající dat spočtených za pomoci prvoprincipiálních metod. Celkově lze považovat úroveň předkládané práce za vysokou, dokazující tak autorčinu vědeckou erudici.

Závěr

Habilitační práce Jany Pavlů „Ab initio and semiempirical modelling of intermetallic phases“ *splňuje* požadavky standardně kladené na habilitační práce v oboru Fyzikální chemie.

V Brně dne 14. 9. 2016