

Stanovisko habilitační komise k návrhu na jmenování docentem

Masarykova univerzita

Fakulta

Habilitační obor

Přírodovědecká

Fyzikální chemie

Uchazeč

Pracoviště

Habilitační práce

Mgr. Jana Pavlů, Ph.D.

Ústav chemie

Ab initio and semiempirical modelling of intermetallic phases

Složení komise:

Předseda

Prof. Dr. rer.nat. Lubomír Špaňhel

Ústav chemie (CEITEC)

Université de Rennes 1, France

Členové

Prof. Ing. Pavel Lejček, DrSc.

Fyzikální ústav AV ČR v Praze

Prof. Ing. Jozef Janovec, DrSc.

STU v Bratislavě

doc. Dr. Ing. Milan Šišnor

ČVUT v Praze

RNDr. Milan Svoboda, CSc.

Ústav fyziky materiálů AV ČR

Stanovisko habilitační komise:

Hodnocení vědecké kvalifikace uchazeče

Dr. Jana Pavlů (dále Dr. Pavlů) získala vysokoškolské vzdělání studiem v magisterském studijním programu **Učitelství pro střední školy, obor Biologie-chemie**. Studium ukončila s vyznamenáním a svoji diplomovou práci na téma *Počítačové modelování v termochemii* obhájila s výborným výsledkem. Následovalo studium v doktorském programu **Chemie** ve studijním oboru **Fyzikální chemie** na Přírodovědecké fakultě MU v Brně, které ukončila v roce 2002 úspěšnou obhajobou dizertační práce na téma *First-principles studies of ordered structures in systems of transition metals*. Vědecké aktivity Dr. Pavlů se koncentrovaly posledních 13 let v oblasti teoretických studií fyzikálně-chemických vlastností kovových systémů. Výsledky jsou dokumentovány v 18 původních vědeckých článcích a 7 článcích ve sbornících. Dr. Pavlů je spoluautorkou 8 vyžádaných přednášek, absolvovala 35 konferenčních prezentací, 3 zahraniční stáže jakožto 5 zahraničních kurzů na evropských univerzitách a ve výzkumných centrech. Byla řešitelkou 3 GAČR projektů a 1 COST projektu a spoluřešitelkou 1 GAČR projektu. Taktéž byla členkou organizačního výboru dvou celosvětových konferencí CALPHAD XXXVIII (2009) a TOFA 2014. Za zmínku stojí i skutečnost, že kromě vědecké a níže diskutované pedagogické práce se v uvedeném období Dr. Pavlů zvládla věnovat i své rodině. Z tohoto pohledu lze její publikační činnost a citační ohlas (h-index 8) považovat za úctyhodné.

Závěr: Vědecká kvalifikace uchazečky *odpovídá* požadavkům standardně kladeným v rámci habilitačních řízení v oboru Fyzikální chemie na MU.

Hodnocení pedagogické způsobilosti uchazeče

Dr. Pavlů byla zapojena od roku 2006 v pravidelné výuce jak v bakalářských, tak i v magisterských oborech. V rámci laboratorních cvičení Fyzikální chemie pracovala v oborech biologických věd, fyzikální chemie, analytické chemie, makromolekulární chemie a učitelství chemie pro střední školy. V průběhu posledních 3 let přednášela v magisterském programu Fyzikální a materiálové chemie (6hod/týd) v rámci tří různých předmětů: Materiálová chemie kovů, Statistická termodynamika a Výpočetní termodynamika. Taktéž vyučovala na Univerzitě v Marseille ve Francii (9 hodin, výpočetní termodynamiku a aplikace metody CALPHAD). Vedla jednu bakalářskou a dvě diplomové práce. Dr. Pavlů je členkou četných komisí v oborech Materiálové a Fyzikální chemie. Je autorkou dvou pomůcek pro výuku (Učební podklady pro seminář termodynamického modelování a výpočetní klastro ab initio výpočty) a 3 vzdělávacích prezentací.

Závěr: Pedagogická způsobilost uchazečky *odpovídá* požadavkům standardně kladeným v rámci habilitačních řízení v oboru Fyzikální chemie na MU.

Hodnocení habilitační práce uchazeče

Předložená habilitační práce shrnuje výsledky teoretického studia fyzikálně-chemických vlastností vybraných intermetalických sloučenin a systémů tvořených kovovými prvky, které byly autorkou práce získány v letech 2002-2014 a prezentovány v sedmnácti publikacích v respektovaných odborných periodikách (např. Computational Materials Science, CALPHAD, Journal of Alloys and Compounds, Intermetallics, Materials Science and Engineering aj.) sledovaných v databázi WoS. Autorkou deklarované podíly na jednotlivých publikacích v rámci kolektivů autorů jsou v rozmezí 15-90 %. Po stránce tematické jsou publikace (resp. autorčiny příspěvky) zaměřené zejména na *ab-initio* výpočty a dále na termodynamické modelování studovaných systémů. Práce má vysokou odbornou úroveň, kterou nejlépe charakterizují výše zmíněné publikace a odkazy na tyto práce v odborné literatuře (více než 170 v databázi WoS k 7. 9. 2016).

Závěr: Na základě posudků oponentů dospěla habilitační komise k závěru, že habilitační práce Mgr. Jany Pavlů, Ph.D. „Ab initio and semiempirical modelling of intermetallic phases“ *splňuje* požadavky standardně kladené na habilitační práce v oboru Fyzikální chemie na MU.

Výsledek tajného hlasování komise

počet členů komise	5
počet členů komise přítomných hlasování	5
počet odevzdaných hlasů	5
z toho	
kladných	5
záporných	0
neplatných	0

Návrh komise

Na základě výsledku tajného hlasování následujícího po zhodnocení vědecké / umělecké kvalifikace, pedagogické způsobilosti a úrovně habilitační práce uchazeče předkládá komise Vědecké radě ~~Fakulty sociálních studií~~ Masarykovy univerzity návrh

jmenovat uchazečku docentem v oboru Fyzikální chemie na zastavení řízení.
Přirodovědecké fakulty

Prof. Dr. rer.nat. Lubomír Špaňhel

Prof. Ing. Pavel Lejček, DrSc.

Prof. Ing. Jozef Janovec, DrSc.

doc. Dr. Ing. Milan Šišnor

RNDr. Milan Svoboda, CSc.

Brno, dne 21. října 2016