

Stanovisko habilitační komise k návrhu na jmenování docentem

Masarykova univerzita

Fakulta Přírodovědecká
Habilitační obor Fyzikální chemie

Uchazeč Mgr. Jana Pavlů, Ph.D.
Pracoviště Ústav chemie
Habilitační práce 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 Šiňor
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 absolvovala 8 vyžádaných přednášek, 35 konferenčních prezentací, 3 zahraniční stáže jakožto 5 zahraničních kurzů na evropských univerzitách a ve výzkumných centrech. Byla řešitelkou 5 GAČR projektů. 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, 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) tři různé předměty: Materiálovou chemii kovů, Statistickou termodynamiku a Výpočetní termodynamiku. Taktéž vyučovala zmíněné předměty 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 učebních textů a 3 vzdělávacích textů a 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 devatenácti 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.

Prof. Dr. rer.nat. Lubomír Špaňhel

Prof. Ing. Pavel Lejček, DrSc.

Prof. Ing. Jozef Janovec, DrSc.

doc. Dr. Ing. Milan Šišor

RNDr. Milan Svoboda, CSc.

Handwritten signatures in blue ink corresponding to the printed names: Lubomír Špaňhel, Pavel Lejček, Jozef Janovec, Milan Šišor, and Milan Svoboda.

Brno, dne 21. října 2016