



PŘÍRODOVĚDECKÁ
FAKULTA
Univerzita Karlova

Zápis o obhajobě disertační práce

Akademický rok: 2023/2024

Jméno a příjmení studenta: Agnieszka Stańczak
Identifikační číslo studenta: 60772552

Typ studijního programu: doktorský
Studijní program: Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur
ID studia: 682071

Název práce: Theoretical Investigation of the Enzymatic Reactivity of Coupled Binuclear Copper System(s) "Strongly Correlated" with Experiments
Pracoviště práce: Katedra fyzikální a makromol. chemie (2600)
Jazyk práce: angličtina
Jazyk obhajoby: čeština
Školitel: prof. Mgr. Lubomír Rulíšek, DSc.
Oponent(i): prof. Jeremy Harvey
prof. Ulf Ryde

Datum obhajoby: 18.09.2024 **Místo obhajoby:** Praha
Termín: řádný

Průběh zkoušky:

- předseda komise Pavel Jungwirth představil AS
- školitel L. Rulíšek zhodnotil osobnost AS, a poděkoval za spolupráci
- AS představila svůj výzkum (cca 20 min)
- předseda požádal oponenta prof. Rydeho o posudek + otázky k práci; (prof. Ryde konstatoval spokojenost s odpověďmi)
- předseda požádal oponenta prof. Harveyho o posudek + otázky k práci
- předseda požádal členy komise o otázky

oJ. Pittner:

- zkusili jste DMRG? Otázky směřující na multireferenčnost h. fce pro bimolekulární Cu komplexy
- otázka na užití metod se zahrnutím relativistických efektů

oJiráček: otázka na experimentální část publikované práce
oGrajciar: otázka na dynamický aspekt studovaných systémů

- předseda otevírá diskusi/otázky pro ostatní (žádné)
- uzavřené hlasování

Výsledek obhajoby:	prospěl/a (P)	
Předseda komise:	Jungwirth Pavel, prof. Mgr., CSc., DSc. (přítomen)
Členové komise:	Cwiklik Lukasz (přítomen)
	Čejka Jiří, prof. Ing., DrSc.	
	Grajciar Lukáš, doc. RNDr., Ph.D. (přítomen)
	Jiráček Jiří, RNDr., CSc. (přítomen)
	Kolafa Jiří, prof. RNDr., CSc. (přítomen)
	Pittner Jiří, doc. Dr. rer. nat., DSc. (přítomen)