

**Zápis z obhajoby doktorské disertační práce Mgr. Petra Daněčka konané dne
19. prosince 2007 v 9:00 na MFF UK, Ke Karlovu 3, Praha 2**

Předseda komise:

Prof. RNDr. J. Štěpánek, CSc. (MFF UK)

Členové komise:

Prof. RNDr. I. Barvík, DrSc. (MFF UK)

Doc. Ing. RNDr. J. Burda, CSc. (MFF UK)

Prof. RNDr. L. Skála, DrSc. (MFF UK) - omluven

RNDr. J. Vacek, Dr. (ÚOCHB AV ČR)

Prof. Ing. K. Dušek, DrSc. (ÚMCH AV ČR) – omluven

Doc. RNDr. J. Fišer, CSc. (PřF UK)

Oponenti:

Doc. Ing. RNDr. Jaroslav Burda, CSc. (MFF UK)

Ing. Vladimír Špirko, DrSc. (ÚOCHB AV ČR)

Školitel:

Doc. RNDr. Petr Bouř, CSc. (ÚOCHB AV ČR)

Konzultant:

Doc. RNDr. Vladimír Baumruk, DrSc. (UK MFF)

Hosté:

RNDr. L. Bednářová, CSc. (ÚOCHB AV ČR), Bc. J. Hrudíková (MFF UK)

1. Předseda komise prof. Štěpánek zahájil obhajobu disertační práce uchazeče a seznámil komisi s osobními daty uchazeče. Konstatoval, že uchazeč splnil všechny nutné podmínky pro zahájení obhajoby. Dizertační práci si nikdo nevyžádal a nepřišly k ní žádné připomínky. Poté Doc. Bouř přečetl stanovisko školitele.
2. Mgr. Daněček ve svém cca 30 minutovém vystoupení seznámil přítomné s hlavními výsledky svojí disertační práce.
3. Oponenti, doc. Burga a ing. Špirko, poté přečetli svoje posudky disertační práce uchazeče a položili mu řadu otázek, které uchazeč zodpověděl k jejich plné spokojenosti. Oba oponenti ocenili vysokou obsahovou i formální kvalitu předložené disertační práce i připravené prezentace. Ocenili také, že krom publikačního výstupu je výsledkem práce i veřejně dostupný programátorský výstup (programový balík GVIB pro analýzu vibrací molekul, viz <http://gvib.sf.net>).
4. Uchazeč postupně zodpověděl i otázky položené dalšími členy komise (prof. Štěpánek, dr. Vacek), které se dotýkaly některých výpočetních problémů a možných přístupů k zahrnutí rozpouštědla do výpočtů (implicitní a explicitní modely a možnosti jejich kombinace).
5. Po diskusi předseda komise prof. Štěpánek ukončil veřejnou část jednání komise.
6. Komise ve svém hlasování na základě úspěšné obhajoby předložené dizertační práce jednomyslně rozhodla o udělení titulu Ph.D. uchazeči.

V Praze dne 19. prosince 2007 zapsal doc. RNDr. Vladimír Baumruk, DrSc.

