

Univerzita Karlova v Praze

Přírodovědecká fakulta

Zápis o části státní závěrečné zkoušky Obhajoba závěrečné práce

Student: Mgr. Jan Hermann
Datum narození: 24.04.1989
Identifikační číslo studenta: 63582196

Typ studijního programu: navazující magisterské
Studijní program: Chemie
Studijní obor: Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur
Zaměření:
Identifikační číslo studia: 362552
Datum zápisu do studia: 19.09.2011

Název práce: Non-Local Correlation in Density Functional Theory
Jazyk práce: angličtina
Jazyk obhajoby: čeština
Vedoucí: RNDr. Ota Bludský, Ph.D.
Oponent(i): doc. RNDr. Jiří Fišer, CSc.

Datum obhajoby : 28.05.2013 **Místo obhajoby :** Praha

Termín: řádný

Průběh obhajoby: Diplomant seznámil přítomné se svou prací v patnáctiminutové prezentaci. Poté seznámil se svým posudkem komisi školitel Dr. Bludský a oponent Doc. Fišer. Oponent položil 3 dotazy, které diplomant uspokojive zodpověděl. V následující diskusy byly položeny následující dotazy: doc. Obšil - jak jsou určeny referenční energie u databáze S22? Prof. Vohlídal - jaké látky jsou obsaženy v databázi S22? Prof. Procházka - jakým způsobem se řeší stínění elektronových hustot v nelokálním funkcionálu. Prof. Vlčková - lze metodu vdW-DF/CC použít k výpočtu interakce molekul s povrchy kovů? Doc. Fišer - jak dopadne srovnání výsledků navržené vdW-DF/CC se semiempirickými přístupy typu DFT-D? Doc. Nachtigall - jak pracuje navržená metoda s HF hustotami? Všechny dotazy byly zodpovězeny uspokojivým způsobem. Oponent i školitel navrhují známku výborne. Komise se jednoznačně přiklonila k navržené klasifikaci.

Výsledek obhajoby: výborně

Předseda komise: prof. RNDr. Karel Procházka, DrSc. (přítomen)

Členové komise: doc. RNDr. Petr Nachtigall, Ph.D. (přítomen)

prof. RNDr. Jiří Vohlídal, CSc. (přítomen)

prof. RNDr. Blanka Vlčková, CSc. (přítomen)

doc. RNDr. Tomáš Obšil, Ph.D. (přítomen)

RNDr. Ota Bludský, Ph.D. (přítomen)