

Zápis ze zasedání VR chemické sekce dne 2. 11. 2023

Přítomni: prof. Němec, dr. Kotvalt, prof. Ryšlavá, doc. Šmejkal, prof. Veselý, doc. Teplá, prof. Štěpnička, prof. Čejka, doc. Kubiček, prof. Bosáková, doc. Nesměrák, doc. Míšek

Hosté: prof. Mgr. Lubomír Rulišek, CSc., DSc.; prof. RNDr. Ing. Jaroslav Burda, DrSc.

Omluveni: prof. Obšil, prof. Hodek, dr. Hraníček

1. Projednání návrhu na úpravu složení VRS

Proděkan Němec předložil návrh na úpravu složení VRS. Materiály nového člena (odborné CV a publikační činnost) byly rozeslány s předstihem. **Navrhované úpravy:**

- **odvolání člena VRS** – doc. RNDr. Jindřich Jindřich, CSc. – odvolání na vlastní žádost
- **doplnění členů VRS** – doc. RNDr. Jiří Míšek, Ph.D. – katedra organické chemie

Usnesení: Členové VRS schválili návrh jednomyslně

2. Habilitační řízení

- Projednání návrhu na habilitační řízení **RNDr. Lukáše Grajciara, Ph.D.** odborného asistenta na katedře fyzikální a makromolekulární chemie, ke jmenování docentem pro obor **Fyzikální chemie**

Podklady viz:

<https://www.natur.cuni.cz/fakulta/veda-a-vyzkum/akademicke-kvalifikace/habilitacni-rizeni/prehled/rok-2023/rndr-lukas-grajciar-ph-d>

Proděkan Němec konstatoval, že vědecká rada je usnášeníschopná. Dále jmenoval skrutátory prof. Bosákovou a prof. Ryšlavou. Představil členy hodnotící komise, oponenty a uchazeče.

Předseda:

prof. Mgr. Lubomír Rulišek, CSc., DSc.

ÚOCHB, AV ČR, Praha

Členové:

prof. RNDr. Tomáš Obšil, Ph.D.

PřF UK, Praha

prof. RNDr. Ing. Jaroslav Burda, DrSc.

MFF UK, Praha

prof. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.

Univerzita Palackého, Olomouc

doc. Ing. David Kubička, Ph.D., MBA

VŠCHT, Praha

Dr. Lukáš Grajciar dokončil magisterské studium v oboru Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur na PřF UK v roce 2009 a v roce 2011 získal titul RNDr. Doktorské studium programu Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur dokončil na PřF UK v roce 2013. Od roku 2013 do roku 2014 pracoval jako postdoktorandský výzkumník a softwarový vývojář TURBOMOLE GmbH na Univerzitě v Jeně v Německu. Od roku 2015 do roku 2016 pracoval jako nezávislý vědecký pracovník tamtéž.

V letech 2017 až 2020 pracoval dr. Grajciar na pozici vědeckého pracovníka na PřF UK, kde byl členem Centra pokročilých materiálů Univerzity Karlovy – CUCAM. Od roku 2020 do současnosti je zaměstnán na PřF UK jako odborný asistent na katedře fyzikální a makromolekulární chemie.

RNDr. Lukáš Grajciar, Ph.D. seznámil přítomné s nejdůležitějšími výsledky své vědecké a pedagogické činnosti.

Uchazeč odpověděl na dotazy a připomínky členů VRS a hostů.

Diskutovali: doc. Kubíček, prof. Štěpnička, prof. Němec

Následně byly prezentovány posudky oponentů a uchazeč zodpověděl dotazy a podněty k diskuzi.

Oponenti:

Prof. Barbara Gil	Jagielonska Univerzita, Krakov, Polsko
Doc. Ing. Tomas Bucko, Ph.D.	Univerzita Komenského, Bratislava
Doc. Mgr. Piotr Błoński, Ph.D.	Univerzita Palackého, Olomouc

Prof. Mgr. Lubomír Rulišek, CSc., DSc. předseda habilitační komise, seznámil VRS s hlavními body jednání a se závěry komise ze dne **23. 6. 2023**.

Veřejná habilitační přednáška s názvem „**Towards reliable simulations of zeolites under operating conditions**“ se uskutečnila dne 18. 10. 2023 v posluchárně CH3.

Přednášku zhodnotili 2 pověřeni členové VRF:

prof. RNDr. Ivan Němec, Ph.D.
Prof. RNDr. Tomáš Obšil, Ph.D.

Zhodnocení veřejné habilitační přednášky:

RNDr. Lukáš Grajciar, Ph.D. přednesl přednášku nazvanou na semináři katedry Fyzikální a makromolekulární chemie PřF UK konaném ve středu, 18. října 2023. Přednáška byla hojně navštívena pracovníky a studenty katedry fyzikální a makromolekulární chemie včetně dvou členů Vědecké rady PřF UK.

Habilitační přednáška Dr. Grajciara se skládala ze dvou částí. V první spíše pedagogicky laděné části představil Dr. Grajciar aplikační zaměření své práce, tj. zeolitické materiály, na což navázal shrnutím klíčových teoretických konceptů metod potřebných k získání spolehlivého výpočetního popisu těchto materiálů v provozních podmínkách. Ve druhé části přednášky Dr. Grajciar poskytl přehled svých vybraných prací, včetně mnoha společných prací s experimentálními kolegy, ve kterých byly využity metody přiblížené v úvodu ke studiu zeolitických materiálů za provozních podmínek se zaměřením na reaktivní interakci zeolitů s vodnými

roztoky. Tato část byla zakončena obširným popisem nedávno navrženého simulačního frameworku založeného na neuronových sítích, u kterého bylo prokázáno, že umožňuje vysoce výkonné screeningové (high-throughput) výpočty s prvotřídní přesností pro široké třídy zeolitických materiálů.

Habilitační přednáška tak poskytla ucelený a přehledný pohled na danou oblast a byla dobře srozumitelná i studentům a odborníkům z jiných výzkumných oblastí. To prokázala i navazující diskuse (diskutovali: doc. Košovan, prof. Němec, prof. Obšil, prof. Rulíšek), ve které dr. Grajciar v adekvátním rozsahu zodpověděl všechny dotazy.

Pronesená habilitační přednáška jasně prokázala, že RNDr. Lukáš Grajciar, Ph.D. dokáže s vysokou mírou odbornosti a didakticky na vyšší prezentovat obecné poznatky svého oboru i výsledky svého výzkumu. Přítomní členové vědecké rady fakulty proto konstatují, že přednáška odpovídala všem požadavkům habilitačního řízení a doporučují v započatém řízení pokračovat.

Hlasování:

Počet členů VRS s právem hlasovat: **12**

Počet kladných hlasů: **10**

Počet záporných hlasů: **1**

Počet neplatných hlasů: **1**

Unesení: Vědecká rada chemické sekce (tajné hlasování 10 : 1 : 1) rozhodla postoupit návrh na jmenování RNDr. Lukáše Grajciara, Ph.D., docentem pro obor Fyzikální chemie k dalšímu řízení.

3. Jmenovací řízení

– Projednání návrhu na jmenování **doc. Mgr. Jiřího Pittnera, Dr.rer.nat., DSc.** vedoucího oddělení teoretické chemie ÚFCH JH AV ČR, profesorem pro obor Fyzikální chemie.

Podklady viz:

<https://www.natur.cuni.cz/fakulta/veda-a-vyzkum/akademicke-kvalifikace/jmenovaci-řízení/prehled/2022/doc-mgr-jiri-pittner-dr-rer-nat-dsc>

Proděkan Němec zahájil jednání vědecké rady a konstatoval, že je usnášeníschopná. Dále jmenoval skrutátory prof. Bosákovou a prof. Ryšlavou. Představil členy hodnotící komise a uchazeče.

Návrh na jmenování vypracovala jmenovací komise ve složení:

Předseda:

prof. RNDr. Ing. Jaroslav Burda, DrSc., MFF UK, Praha

Členové:

prof. RNDr. Petr Slaviček, Ph.D., VŠCHT, Praha
prof. Mgr. Lubomír Rulíšek, CSc., DSc, ÚOCHB AV ČR, Praha
prof. RNDr. Jiří Šponer, DrSc., Masarykova univerzita, Brno
prof. RNDr. Tomáš Obšil, Ph.D., PřF UK, Praha

Doc. Jiří Pittner absolvoval v roce 1991 magisterské studium fyzikální chemie na PřF UK. V roce 1996 získal titul Ph.D. na Svobodné univerzitě v Berlíně a Humboldtově univerzitě v Berlíně. V roce 2013 získal titul DSc. na Akademii věd České republiky. V roce 2015 dokončil habilitační řízení pro obor Fyzikální chemie na PřF UK.

V roce 1997 pracoval jako postdoktorand na Humboldtově univerzitě v Berlíně. Následně do roku 2005 pracoval na pozici výzkumného pracovníka Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR. Od roku 2005 dosud pracuje na pozici vedoucího oddělení teoretické chemie Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR.

Absolvoval řadu kratších zahraničních pobytů na University of Florida, Gainesville, USA, Humboldtově univerzitě, Berlín, a University of Waterloo, Ontario, Kanada.

Doc. Pittner získal rovněž řadu ocenění, například v roce 1997 Cenu Carla Ramsauera za disertační práci, Berlín, v roce 1999 Cenu Josefa Hlávky pro mladé vědce, v roce 2001 Cenu Učené společnosti české pro mladé vědce a v roce 2003 Cenu Otto Wichterle pro mladé vědce.

Doc. Mgr. Jiří Pittner, Dr.rer.nat., DSc. seznámil přítomné s nejdůležitějšími výsledky vědecké a pedagogické činnosti.

Uchazeč odpověděl na dotazy a připomínky členů VRS a hostů.

Diskutovali: prof. Němec, doc. Míšek, doc. Kubíček,

– **prof. RNDr. Ing. Jaroslav Burda, DrSc.**, předseda jmenovací komise, seznámil VRS s hlavními body jednání a se závěry komise ze dne **3. 5. 2023**.

Veřejná profesorská přednáška s názvem „**Molecules in states with different spin multiplicity: Theoretical approaches and applications**“ se uskutečnila dne **25. 10. 2023** v posluchárně CH3.

Přednášku zhodnotili 2 pověřeni členové VRF:

prof. RNDr. Tomáš Obšil, Ph.D.

prof. RNDr. Martin Katora, CSc.

Zhodnocení veřejné profesorské přednášky:

Doc. Mgr. Jiří Pittner, Dr.rer.nat., DSc. přednesl přednášku na semináři katedry fyzikální a makromolekulární chemie PřF UK konaném ve středu, 25. října 2023. Přednáška byla hojně navštívena pracovníky a studenty katedry fyzikální a makromolekulární chemie včetně dvou členů Vědecké rady PřF UK.

V úvodu své jmenovací přednášky doc. Pittner na příkladu molekuly kyslíku ilustroval, že v excitovaném stavu s jinou spinovou multiplicitou může mít molekula diametrálně odlišné chemické vlastnosti než v základním stavu. Tento fakt je podstatou fotochemie a fotofyziky a má mnoho aplikací nejen v technologii a materiálovém výzkumu, ale i při studiu živých organismů. V rámci této části přednášky doc. Pittner kromě teoretického popisu představil i praktické využití tohoto jevu v rámci fotodynamické terapie rakoviny, či funkce OLED. V další části přednášky doc. Pittner představil pokročilé metody kvantové chemie vyvinuté jeho skupinou, které slouží k teoretickému modelování a pochopení chování elektronově excitovaných molekul. Ukázal, jak zásadní je nutnost umět s dostatečnou přesností vypočítat energii

studovaných molekul a porozumět elektronové struktuře jejich kvantového stavu. V této souvislosti přednášející prezentoval multireferenční metody spřažených klastrů a dále metody spřažených klastrů externě korigovaných pomocí metody DMRG, které jsou vhodné pro studium takových systémů. Po stručném přehledu jeho skupinou vyvinutých metod doc. Pittner prezentoval jejich aplikaci na molekulu cyclazinu, která je kandidátem na efektivní médium pro OLED.

V další části přednášky doc. Pittner přešel k časově závislým metodám a prezentoval např. metodu neadiabatické molekulové dynamiky pro modelování fotochemických procesů jako je interní konverze a mezisystémový přechod. V rámci této části doc. Pittner prezentoval i aplikaci této metody na halogenderiváty molekuly BODIPY, které jsou potenciálními kandidáty na fotosenzitizátor ve fotodynamické terapii.

Jmenovací přednáška tak poskytla ucelený a přehledný pohled na danou oblast kvantové chemie a byla dobře srozumitelná i studentům a odborníkům z jiných výzkumných oblastí. To prokázala i navazující diskuse (diskutovali: prof. Obšil, prof. Štěpánek, studenti katedry), ve které doc. Pittner v adekvátním rozsahu zodpověděl všechny dotazy.

Pronesená přednáška prokázala, že doc. Jiří Pittner dokáže s vysokou mírou odbornosti a didakticky na vyšší prezentovat obecné poznatky svého oboru i výsledky svého výzkumu. Přítomní členové vědecké rady fakulty proto konstatují, že přednáška odpovídala všem požadavkům jmenovacího řízení a doporučují v započatém řízení pokračovat.

Hlasování:

Počet členů VRS s právem hlasovat: 12

Počet kladných hlasů: 11

Počet záporných hlasů: 0

Počet neplatných hlasů: 1

Usnesení: Vědecká rada chemické sekce (tajné hlasování 11 : 0 : 1) rozhodla postoupit návrh na jmenování doc. Mgr. Jiřího Pittnera, Dr.rer.nat., DSc. profesorem pro obor Fyzikální chemie k dalšímu řízení.

4. Schválení zápisu z VRS ze dne 12. 10. 2023

Závěr: Členové VRS schválili zápis jednomyslně.

5. Studijní záležitosti

– **Představení programu „Dne otevřených dveří“**

Dr. Teplý seznámil členy VRS s programem konání akce „Den otevřených dveří“, který se bude konat 19. – 20. 1. 2024. Dále je informoval o programu a organizaci. Veškeré informace zašle dr. Teplý všem vedoucím kateder e-mailem.

Na toto téma proběhla krátká diskuze.

– Odevzdávání závěrečných studentských prací

V souladu s OD 13/2023 se nyní závěrečné studentské práce odevzdávají pouze v elektronické formě v SIS v termínu dle harmonogramu. Datum odevzdání práce se zaznamená automaticky. VRS diskutovala o možnosti předkládání jednoho exempláře tištěné verze závěrečné studentské práce (v kroužkové vazbě) pro obhajoby. Proděkan Němec zdůraznil, že toto rozhodnutí je v kompetenci garantů studijních programů (předsedů oborových rad). Nicméně způsob realizace a hrazení nákladů (primárně ze zdrojů školícího pracoviště) musí být jednoznačně s předstihem definován.

Závěr: Členové VRS vzali informace na vědomí.

– Návrh na doplnění složení komise pro státní závěrečné zkoušky bakalářského studijního programu (oboru) Klinická a toxikologická analýza.

Garant bakalářského studijního programu (oboru) Klinická a toxikologická analýza prof. RNDr. Zuzana Bosáková, CSc., navrhuje jmenovat následující nové členy komise pro státní bakalářské zkoušky studijního programu (oboru) Klinická a toxikologická analýza:

Doc. Mgr. Radim Hrdina, Ph.D.	PřF UK, Praha, katedra organické chemie
Dr. Lukáš Rýček, M.Sc.	PřF UK, Praha, katedra organické chemie
RNDr. Kateřina Bělonožníková, Ph.D.	PřF UK, Praha, katedra biochemie
RNDr. Božena Kubíčková, Ph.D.	PřF UK, Praha, katedra biochemie
Ing. Ondřej Baszczyński, Ph.D.	PřF UK, Praha, katedra organické chemie
PharmDr. Eliška Matoušová, Ph.D.	PřF UK, Praha, katedra organické chemie

Usnesení: Členové VRS schválili návrh jednomyslně.

– Návrh na doplnění složení komise pro státní závěrečné zkoušky magisterského studijního programu (oboru) Klinická a toxikologická analýza.

Garant magisterského studijního programu (oboru) Klinická a toxikologická analýza prof. RNDr. Zuzana Bosáková, CSc., navrhuje jmenovat následující nové členy komise pro státní magisterské zkoušky studijního programu (oboru) Klinická a toxikologická analýza:

RNDr. Kateřina Bělonožníková, Ph.D.	PřF UK, Praha, katedra biochemie
RNDr. Božena Kubíčková, Ph.D.	PřF UK, Praha, katedra biochemie
Ing. Ondřej Baszczyński, Ph.D.	PřF UK, Praha, katedra organické chemie
PharmDr. Eliška Matoušová, Ph.D.	PřF UK, Praha, katedra organické chemie

Usnesení: Členové VRS schválili návrh jednomyslně.

– Návrh na doplnění složení komise pro státní závěrečné zkoušky bakalářského studijního programu (oboru) Chemie.

Garant bakalářského studijního programu (oboru) Chemie prof. RNDr. Jan Kotek, Ph.D., navrhuje jmenovat následující nové členy komise pro státní bakalářské zkoušky studijního programu (oboru) Chemie:

RNDr. Kateřina Bělonožníková, Ph.D. PřF UK, Praha, katedra biochemie

RNDr. Božena Kubíčková, Ph.D. PřF UK, Praha, katedra biochemie

Usnesení: Členové VRS schválili návrh jednomyslně.

– Návrh na doplnění složení komise pro státní závěrečné zkoušky bakalářského studijního programu (oboru) Medicinální chemie.

Garant bakalářského studijního programu (oboru) Medicinální chemie prof. RNDr. Jan Veselý, Ph.D., navrhuje jmenovat následující nové členy komise pro státní bakalářské zkoušky studijního programu (oboru) Medicinální chemie:

RNDr. Kateřina Bělonožníková, Ph.D. PřF UK, Praha, katedra biochemie

RNDr. Božena Kubíčková, Ph.D. PřF UK, Praha, katedra biochemie

Usnesení: Členové VRS schválili návrh jednomyslně.

– Návrh na jmenování nehabilitovaného školitele doktorských studentů doktorského studijního programu Analytická chemie.

Garant doktorského studijního programu Analytická chemie prof. RNDr. Jiří Zima, CSc. navrhuje jmenovat následujícího nehabilitovaného školitele doktorských studentů:

RNDr. Jan Fischer, Ph.D. PřF UK, Praha,
katedra analytické chemie

Usnesení: Členové VRS schválili návrh jednomyslně.

– Návrh na jmenování nehabilitovaného školitele doktorských studentů doktorského studijního programu Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur.

Garant doktorského studijního programu Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur prof. RNDr. Miroslav Štěpánek, Ph.D., navrhuje jmenovat následující nehabilitované školitele doktorských studentů:

Mgr. Štěpán Timr, Ph.D. ÚFCH JH, AV ČR, Praha

RNDr. Zdeněk Tošner, Ph.D. PřF UK, Praha,
Laboratoř NMR spektroskopie

Usnesení: Členové VRS schválili návrh jednomyslně.

– Návrh na jmenování nehabilitovaného školitele doktorských studentů doktorského studijního programu Didaktika chemie.

Garant doktorského studijního programu Didaktika chemie doc. RNDr. Petr Šmejkal, Ph.D., navrhuje jmenovat následujícího nehabilitovaného školitele doktorských studentů:

Ing. Jan Hrdlička, Ph.D. Západočeská univerzita Plzeň,
Fakulta pedagogická, katedra chemie

Usnesení: Členové VRS ve veřejném hlasování návrh **neschválili**.

Počet kladných hlasů	– 0
Počet záporných hlasů	– 9
Hlasování se zdrželo	– 3

– Nominace na ocenění „Cum laude“ pro absolventy doktorského studia:

Na ocenění „Cum laude“ byli nominováni:

Mgr. Ondřej Veselý, Ph.D.	– katedra fyzikální a makromolekulární chemie
RNDr. Petr Vosáhlo, Ph.D.	– katedra anorganické chemie
RNDr. Mgr. Jakub Vávra, Ph.D.	– katedra biochemie
Mgr. Sofie Tvorynská, Ph.D.	– katedra analytické chemie

Usnesení: Členové VRS schválili návrh jednomyslně.

6. Věda a výzkum

– Kampus Albertov

Proděkan Němec informoval o vývoji a průběhu jednání o společných laboratořích NMR a RTG ve spolupráci s MFF v rámci projektu Kampus Albertov. Informoval o využití zdrojů projektu ERDF III.

Závěr: Členové VRS vzali informace na vědomí.

7. Provozní záležitosti

– Propagace sekce chemie na úrovni středoškolských studentů

Za chemickou sekci byli do komise zaměřené na diskuzi dalšího směřování propagace studia chemie jmenováni:

katedra	jméno zástupce
KUDCH	doc. Šmejkal
Analytická chemie	doc. Nesměrák
Anorganická chemie	doc. Kubíček
KFMCH	prof. Čejka
Organická chemie	prof. Veselý
Biochemie	doc. Heidingsfeld

Proděkan Němec požádal jmenované zástupce o realizaci první schůzky.

Závěr: Členové VRS vzali informace na vědomí.

8. Zprávy z KD

Proděkan Němec informoval o agendě řešené v rámci KD – konkrétně např:

- Změna formuláře pro přijetí hosta.
- Příkaz tajemníka ohledně dlouhodobého pobytu v zahraničí.
- Nastavení % využití přístrojů v rámci ERDF III pro výuku a vědeckou činnost.
- Termín nominování nových témat STARS do 4. 12. 2023 a odsouhlasení nominovaných témat na VRS dne 7. 12. 2023.
- Fakultní koncert se bude konat 6. 12. 2023 a v jeho rámci budou předány Ceny děkana a Medaile fakulty.

Závěr: Členové VRS vzali informace na vědomí

9. Různé

– Žádost o Tvůrčí volno („Sabbatical“) – doc. RNDr. Peter Košovan, Ph.D.

Členové VRS byli informováni o žádosti doc. Košovana o poskytnutí Tvůrčího volna v roce 2024. Proděkan Němec požádal členy VRS o schválení této žádosti, která je podporována vedoucím KFMCH.

Usnesení: Členové VRS schválili žádost doc. Košovana jednomyslně.

– Projednání možnosti vstupu do Knihovny chemie mimo pracovní dobu

Proděkan Němec informoval o personálním obsazení knihovny a o vykonávání funkce vedoucí knihovny Mgr. Barborou Bájecnou, která současně vykonává tuto funkci i v knihovně geologie. Požádal členy VRS o vyjádření k možnosti vstupu do knihovny mimo pracovní dobu. Po krátké diskuzi se členové VRS dohodli na zrušení možnosti vstupu do knihovny mimo pracovní dobu knihovny.

– Cena Wernera von Siemens

Cena je vypisována celkem v osmi kategoriích:

- Nejlepší pedagogický pracovník
- Nejvýznamnější výsledek základního výzkumu
- Nejlepší diplomová práce
- Nejlepší disertační práce
- Zvláštní ocenění za překonání překážek při studiu
- Zvláštní ocenění generálního ředitele společnosti Siemens za vynikající kvalitu ženské vědecké práce
- Nejlepší absolventská (diplomová/disertační) práce zabývající se tématy konceptu Průmysl 4.0
- Nejlepší absolventská (diplomová/disertační) práce – Chytrá infrastruktura a energetika

Do první kategorie navrhuje účastníky rektorka nebo prorektor univerzity, do dalších kategorií se autoři přihlašují sami.

Návrhy v rámci kategorie **Nejlepší pedagogický pracovník** je nutno zaslat nejpozději do čtvrtka **9. 11. 2023** k rukám L. Dvořáčkové.

– Projekt UNCE – seminář

Prof. Štěpnička informoval o končícím projektu UNCE/SCI/014. Závěrečný seminář proběhne dne 28. 11. 2023.

Závěr: Členové VRS vzali informace na vědomí.

Další jednání VRS se bude konat 7. 12. 2023.

Zapsala: Ladislava Dvořáčková

Schválil: prof. RNDr. Ivan Němec, Ph.D.