

H - Personální zabezpečení - ostatní přednášející (školitel, člen obor. rady) na VŠ					
Název VŠ / součásti VŠ	UK/MFF				
Název SP	Fyzika				
Jméno a příjmení	Pavel Jungwirth		Tituly	Doc.,Mgr.,CSc.	
Rok narození	1966	Rozsah pr. vzt. na VŠ			
Přednášející	ANO	Školitel	ANO	Člen oborové rady	ANO
Forma prac.vztahu k VŠ	---				
Název hl.zaměstnavatele	ÚOCHB, AVČR				
Sídlo hl.zaměstnavatele	Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6				
Přednášky v předmětech	Klasická a kvantová molekulová fyzika				
Údaje o praxi od VŠ	1989-1993 - doktorand na ÚFCH JH AV ČR, 1994-5 postdoc na Hebrew University of Jerusalem a University of California at Irvine, 1995-2003 vědecký pracovník na ÚFCH JH AV ČR, 2001 - visiting professor na Hebrew University of Jerusalem a University of Southern California, 2004 - dosud vědecký pracovník na ÚOCHB AV ČR				
Přehled o publ. a další tvůrčí čin. za posl. 5 let	Celkový počet publikací v recenzovaných časopisech: 45				
	Knipping, E. M.; Lakin, M. J.; Foster, K. L.; Jungwirth, P.; Tobias, D. J.; Gerber, R. B.; Dabdub, D.; Finlayson-Pitts, B. J.: Experiments and simulations of ion-enhanced interfacial chemistry on aqueous NaCl aerosols. Science, 288 (2000) 301 (25%) Jungwirth P.; Spirko, V.: Double tunneling: An overlooked quantum effect in anionic molecular clusters. Physical Review Letters, 84 (2000) 1140 (70 %) Jungwirth, P.; Tobias, D. J.: The molecular structure of salt solutions: A new view of the interface with implications for heterogeneous atmospheric chemistry. Journal of Physics Chemistry B, 105 (2001) 10468 (50 %), Ronen, S.; Nachtigallova, D.; Schmidt, B.; Jungwirth, P.: Non-adiabatic chemical reaction triggered by electron photodetachment: An ab initio quantum dynamical study. Physical Review Letters, 93 (2004) 048301 (30 %), Yang, X.; Fu, Y.-J.; Slavicek, P.; Mucha, M; Jungwirth, P.; Wang, L.-S.: Solvent-mediated folding of a doubly charged anion. Journal of the American Chemical Society, 126 (2004) 876 (25 %)				
Anotace nejvýznam. publikací, projektů, děl nebo další tvůrčí čin.	1. Modelování heterogenních atmosférických procesů na aerosolech mořské soli. 2. Studium a řízení fotochemických procesů v kryogenních klastrech. 3. Vývoj výpočetních metod pro kvantovou dynamiku velkých polyatomických systémů				
Působení v zahraničí	Hebrew University, Jerusalem, 1994, Golda Meir Fellow, University of California, Irvine, 1995, postdoc University of Southern California, 2001, visiting professor, Hebrew University of Jerusalem, 2001, visiting professor, University of California at Irvine, 2004, visiting researcher				
Obor habilitačního nebo jmenovacího řízení nebo udělení vědecké hodnosti	molekulová fyzika		řízení na VŠ		
			UK		
			ohlasy publikací		
Rok udělení (Doc.)	Doc.	2000	zahr.	tuzem.	
			600		
Písemný souhlas přednášejícího, školitele nebo člena oborové rady s působením v SP v uvedeném rozsahu			Datum	5. ledna 2005	

H - Personální zabezpečení - ostatní přednášející (školitel, člen obor. rady) na VŠ					
Název VŠ / součásti VŠ	UK/MFF				
Název SP	Fyzika				
Jméno a příjmení	Jaroslav Vacek		Tituly	RNDr. PhD.	
Rok narození	1969	Rozsah pr. vzt. na VŠ			
Přednášející	ANO	Školitel	ANO	Člen oborové rady	ANO
Forma prac. vztahu k VŠ					
Název hl. zaměstnavatele	Ústav organické chemie a biochemie AV ČR				
Sídlo hl. zaměstnavatele	Praha				
Přednášky v předmětech	Počítačové simulace biomakromolekul				
Údaje o praxi od VŠ					
1992- 1996 - ÚFCH-JH, AVČR (PhD student) 1996- 1998 - University of Colorado, Boulder, University of California, SF (Postdoc) 1998- 2003 - ÚFCH-JH, AVČR 2004- ÚOCHB, AVČR					
Přehled o publ. a další tvůrčí čin. za posl. 5 let		Publikace v recenz. časopisech za 5 let: 9			
1. Chocholousova J.; Vacek J.; Hobza P. "Acetic acid dimer in the gas phase, nonpolar solvent, microhydrated environment, and dilute and concentrated acetic acid: Ab initio quantum chemical and molecular dynamics simulations", J. Phys. Chem. A 2004, 107, 3086-3092. 2. Sychrovsky V.; Vacek J.; Hobza P.; Zidek L.; Sklenar V.; Cremer D. "Exploring the structure of a DNA hairpin with the help of NMR spin-spin coupling constants: An experimental and quantum chemical investigation" J Phys. Chem. B 2002, 106, 10242-10250. 3. Vacek, J.; Michl, J. "A Molecular "Tinkertoy" Construction Kit: Computer Simulation of a Molecular Dipolar Rotor in a Rotating Electric Field", PNAS, 98, 2001, 5481. 4. Vacek, J.; Hobza, P.; Jortner, J. "Nuclear Dynamics of Benzene---(Ar)n Clusters", J. Phys. Chem. A 1998, 102, 8268 - 8278. 5. Bludský, O.; Chocholoušová, J.; Vacek, J.; Huisken, F.; Hobza, P. "Anharmonic treatment of the lowest-energy conformers of glycine: A theoretical study", J. Chem. Phys., 2000, 113, 4629-4635.					
Anotace nejvýznam. publikací, projektů, děl nebo další tvůrčí čin.		Počítačové simulace nanostrukturovaných materiálů, molekulárních motorů, rotorů, vrtulí, molekulárních mříží a biomolekul, molekulová dynamika, statistická mechanika, výpočty volných energií, výpočty van der Waalsových clusterů			
Působení v zahraničí		Postdoc u Prof. Josefa Michla, Boulder, Colorado 1996-1997 Postdoc u Petera Kollmana, UCSF, San Francisco, 1997-1998 Krátkodobé pobyty u Prof. Thomase Frauenheima, University of Paderborn, 2001, u Prof. Michla, University of Colorado, 1999-2005			
Obor habilitačního nebo jmenovacího řízení nebo udělení vědecké hodnosti		Fyzika molekulových struktur		řízení na VŠ	
Rok udělení (PhD)		PhD	1996	ohlasy publikací	
				zahr.	tuzem.
				100	
Písemný souhlas přednášejícího, školitele nebo člena oborové rady s působením v SP v uvedeném rozsahu		Datum 10. ledna 2005			