

V Praze 6. března 2023

Posudek doktorské disertační práce

**Název práce:** Violation and Conservation of Symmetries in Atomic Systems**Autorka:** Tereza Uhlířová

Předložená doktorská disertační práce se zabývá návrhem, implementací a testováním několika metod sloužícím k vysoce přesným výpočtům elektronové struktury atomů. V úvodu zasazuje autorka studovaná témata do kontextu motivací teoretickým popisem přesných testů standardního modelu pomocí měření procesů narušujících zachování parity. Tím odkazuje na nevyřešené fundamentální otázky v našem chápání přírody a podtrhuje interdisciplinární charakter práce.

Po úvodní části práce sestává vlastně ze tří do jisté míry oddělených kapitol 3, 4 a 5. První z nich navazuje na autorčinu diplomovou práci a přivádí ji k formě, která byla publikována v časopise *Physical Review*. Jde o důkladnou studii konvergence a stability Hartree-Fockovy metody v atomárních systémech a navazuje na předchozí práce renomovaných autorů v tomto oboru a podstatným způsobem je rozšiřuje. Jde tak o netriviální příspěvek k fundamentálním vlastnostem aproximace, která slouží jako základ k dalším výpočtům zahrnujícím elektronovou korelaci. Druhá část (kapitola 4) představuje techničtější příspěvek k numerickým výpočtům relativistické elektronové struktury atomů ve formě procedur k velice přesným výpočtům integrálů mezi bázovými funkcemi a demonstruje jejich použití na poruchový výpočet narušení parity v rozpadu atomu cesia. Nakonec v kapitole 5 autorka diskutuje a testuje rozšíření metody coupled clusters pro výpočty korelační energie. V této části prezentuje částečné testy metody a po dalším doplnění plánuje i její publikaci.

Použité metody představují vysoce netriviální teoretické odvozování i vlastní softwarové implementace a jejich testování. Po formální stránce je práce pečlivě zpracována a napsána dobrou angličtinou. Vyvinuté metody bude bezpochyby možné použít pro další výpočty a druhá ze zmíněných publikací je zveřejněna v časopise *Computer Physics Communications* což je časopis sloužící ke zveřejňování výpočetních metod aplikovatelných dalšími výzkumníky.

Na konci práce autorka shrnuje disertaci a uvádí několik možných směrů, v nichž je možno nebo dokonce plánuje pokračovat.

Na závěr bych rád konstatoval, že práce dle mého názoru prokazuje, že autorka má dobré předpoklady k samostatné tvořivé vědecké práci a práci plně doporučuji uznat jako doktorskou disertační práci.

**Institute of Theoretical Physics**

V Holešovičkách 2, 182 00 Praha 8

phone: +420 22191 2493

fax: +420 28307 2496

e-mail: mfkf@mbx.troja.mff.cuni.cz

**Otázky a komentáře k diskusi během obhajoby:**

V textu práce byly na několika místech zveřejněny výsledky numerických testů a odhadována jejich chyba, ale postrádal jsem podrobnější zdůvodnění hodnoty těchto odhadů. Pochází chyby z ořezání velikosti báze? Nebo naráží výpočty na omezení dané velikostí a propagací zaokrouhlovacích chyb v rekurentních formulích? Ocenil bych v diskusi po obhajobě nějaké komentáře k těmto numerickým aspektům.

Doc. RNDr. Martin Čížek, PhD  
[Martin.Cizek@mff.cuni.cz](mailto:Martin.Cizek@mff.cuni.cz)  
tel: +420 221912513