

Vyjádření školitele k diplomové práci Mariana Simona

Předložená diplomová práce Mariana Simona "Přibližné symetrie atomu helia" se zabývá diagonalizací operátoru velikosti rozdílu Rungeho-Lenzových (dále R-L) vektorů jednotlivých elektronů.

Práce je členěna do šesti kapitol.

V kapitole 1 je podána motivace a cíle celé práce. V kapitole 2 jsou shrnuty symetrie atomu vodíku a zdůrazněn význam Rungeho-Lenzova vektoru. Poté je v kapitole 3 shrnuta dosud používaná metoda diagonalizace velikosti rozdílu R-L vektorů prostřednictvím 9-j koeficientů. V kapitole 4 je vysvětlena přímá metoda diagonalizace tohoto operátoru, která je původním diplomantovým příspěvkem. V této kapitole je rovněž porovnána výpočetní náročnost nově navržené metody s dosud užívanou. Z tohoto porovnání vyplývá, že metoda navržená diplomantem je pro praktické účely výhodnější než dosud užívaná metoda. V kapitole 5 je ukázáno, že báze diagonalizující operátor velikosti rozdílu R-L vektorů zároveň i pozoruhodně přesně diagonalizuje Hamiltonián dvou-elektronových atomů v podprostorech ve kterých jsou hlavní kvantová čísla obou elektronů stejná. V závěru je zmíněna možnost využití výsledků práce k zjednodušení výpočtu Coulombovy interakce pro případy, kdy se elektrony nacházejí ve vysoce excitovaných stavech.

K práci je přiložen program, který převádí do numerické podoby rovnice odvozené v kapitole 4.

Práce je napsána podle mého názoru velice pedagogicky.

Jako školitel mohu konstatovat, že diplomant pracoval s potřebným zaujetím a nasazením. Zvláště bych chtěl vyzdvihnout diplomantovu pečlivost, potřebu úplného vyjasnění a pochopení problematiky a schopnost dotáhnout náročné výpočty do konce.

Předloženou práci navrhuji klasifikovat známkou výborně.

Doc. Mgr. Jaroslav Zamastil, PhD.

KCHFO MFF UK

P.S.

Omlouvám se, že se nemohu osobně zúčastnit obhajoby, jsem na pracovní cestě v Kanadě.