

**Oponentský posudek disertační práce Mgr. Milana Šimánka**  
**„Přesné výpočty energií elektronových hladin atomů“**

Jádrem posuzované disertační práce jsou tři publikace v renomovaných mezinárodních časopisech, které se zabývají přesnými metodami výpočtu atomových integrálů. První se zabývá použitím  $so(2,1)$  algebry v případě dvouelektronových atomů, druhá metodou variace konstant pro diferenční rovnice (jež se vyskytují při výpočtu radiální části atomových integrálů), třetí práce pojednává o použití komutačních relací při výpočtu atomových integrálů. Celá tato problematika se stává nyní znovu velmi aktuální, zvláště vzhledem k tomu, že současné experimentální metody umožňují měřit atomová spektra s velmi vysokou přesností dovolující dokonce detekci efektů slabých interakcí. Vzhledem k tomu, že tyto efekty jsou velmi malé, jsou nároky na přesnost a numerickou stabilitu příslušných výpočtů velmi vysoké. Předložená disertační práce se věnuje právě vývoji takových metod a algoritmů, jež jsou potřebné pro následné výpočty atomových spekter.

Disertant (spolu se spoluautory jednotlivých článků) ukázal, že pomocí  $so(2,1)$  Lieovy algebry lze vyjádřit maticové elementy radiálních částí dvouelektronových funkcí v analytickém a numericky stabilním tvaru, a že repulzní integrály lze vyjádřit pomocí hypergeometrických funkcí. Metodu výpočtu atomových integrálů formulovanou pro S-stavy dvouelektronových atomů pak rozšířil i na stavy s libovolným momentem hybnosti. Ve třetí práci jsou ze zákonů zachování a určitého typu komutačních relací odvozeny rekurentní vztahy pro redukované integrály a je navrženo, jak je lze využít ke zvýšení numerické stability výpočtů.

Vzhledem k tomu, že všechny práce zřejmě prošly pečlivým recenzním řízením, recenzentova úloha spočívá zejména v posouzení první části práce (kapitoly I-III), které představují úvod do problematiky včetně naznačených teoretických základů k připojeným třem článkům. Disertační práce je sepsána stručně a vcelku srozumitelně s dobrou grafickou úpravou. K práci nemám žádné zásadní výhrady a omezím se pouze na několik připomínek či dotazů:

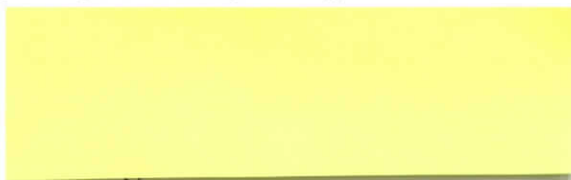
1) Úvodní partie disertační práce mohly být pojaty širěji, autor se mohl zmínit i o jiných kvantověmechanických aplikacích Lieových algeber a o doposud užívaných metodách výpočtu atomových integrálů.

2) V tab. 2.1-2.3 disertant uvádí, že variační hodnoty energie excitovaných stavů  $2^3S$  a  $2^3P$  helia jsou zhruba o 3 řády řády v lepší shodě s přesnými hodnotami než v případě základního stavu. Prosím o vysvětlení či komentář k tomuto poněkud neočekávanému výsledku.

3) Lze efektivně využít některé postupy formulované v disertační práci i v případě Gaussových funkcí a případně i v molekulových výpočtech?

Z drobnějších nedostatků, jež se v práci vyskytly, uvádím: V disertační práci není uvedena přesná definice Lieovy algebry, viz práci [3],  $so(2,1)$  algebra není vlastně definována. Na str. 6 používá autor slovo moment místo hybnost, adjektivum coulombovský (str.4 a 5) a atom helia (str. 5) se píše s malým počátečním písmenem, správně se v češtině píše Wignerův-Eckartův teorém (str.10).

Po prostudování díla mohu konstatovat, že posuzovaná disertační práce Mgr. Milana Šimánka má dobrou úroveň a představuje hodnotný přínos ke studované problematice. Avšak vzhledem k tomu, že disertant není v žádné práci prvním autorem, bylo by, myslím, žádoucí při obhajobě objasnit, jaký je disertantův podíl na uvedených pracech. Nicméně Mgr. Šimánek je navíc spoluautorem třech dalších prací z kvantověchemické problematiky (týkajících se teoretického studia slabých mezimolekulových interakcí kationtů mědi), s nimiž jsem obeznámen, a které jsou také publikované v renomovaných mezinárodních časopisech, např. v *J. Phys. Chem. A.*, a mají rovněž velmi dobrou úroveň. S přihlédnutím k uvedeným skutečnostem soudím, že autor svou disertační prací i svými dalšími publikacemi prokázal, že má předpoklady k samostatné vědecké práci, a proto doporučuji disertační práci Mgr. M. Šimánka k obhajobě.



Doc. RNDr. Jiří Fišer

KFMCh PŘF UK

Praha, 14.2.2008