

## **Zápis z obhajoby doktorské dizertační práce Mgr. Milana Šimánka**

Obhajoba se konala dne 24. dubna 2008 na MFF UK, Ke Karlovu 3, Praha 2 od 9 hod.

Název obhajované práce:

### **Přesné výpočty energií elektronových hladin atomů**

Složení komise pro obhajobu (obor F4 - Biofyzika, chemická a makromolekulární fyzika) dle prezenční listiny:

Prof. RNDr. J. Štěpánek, CSc.	(MFF UK), předseda
Prof. RNDr. Ivan Barvík, DrSc.	(FÚ MFF UK)
Doc. RNDr. Ing. Jaroslav Burda, CSc.	(KCHFO MFF UK)
Prof. RNDr. Jan Hála, DrSc.	(KCHFO MFF UK)
Doc. RNDr. Petr Chvosta, CSc.	(KMF MFF UK)
Prof. RNDr. Jaromír Plášek, CSc.	(FÚ MFF UK)
Prof. Ing. Karel Dušek, DrSc.	(ÚMCH AV ČR)
Doc. RNDr. Jiří Fišer, CSc.	(PřF UK)

#### Oponenti:

Doc. RNDr. J. Fišer, CSc.	(PřF UK)
Ing. Vladimír Špirko, DrSc.	(ÚOCHB AV ČR)

#### Omluveni:

Doc. RNDr. Vlastimil Fidler, CSc.	(FJFI ČVUT)
Doc. RNDr. Pavel Jungwirth, CSc.	(ÚOCHB AV ČR)
Doc. RNDr. Otakar Jelínek, CSc.	(1.LF UK)

Předseda komise zahájil obhajobu a konstatoval, že komise je usnášeníschopná. Dále představil uchazeče Mgr. Šimánka a seznámil přítomné s jeho životopisem a s tím, že doktorand splnil všechny podmínky nutné pro obhajobu. Obhajoba byla včas vyhlášena a k veřejně přístupné disertační práci nepřišly žádné připomínky. Dále předseda seznámil přítomné se seznamem publikací, který nechal spolu s kopií disertace kolovat.

Prof. Skála přečetl posudek školitele a zhodnotil podíl Mgr. Šimánka na publikacích, které jsou součástí práce.

Mgr. Šimánek poté v pětadvacetiminutovém vystoupení seznámil přítomné s problematikou disertační práce a prezentoval její hlavní výsledky.

Oponenti, Doc. Fišer a Dr. Špirko, seznámili přítomné se svými posudky. Oba posudky byly kladné a doporučovaly udělení titulu PhD. Doc. Fišer ve svém posudku položil několik otázek: Jsou možné další aplikace Lieových algeber v souvislosti s jinými metodami? Proč je shoda výsledků pro excitované stavy lepší? Je možné použít bázi Gaussových funkcí? Je možné rozšíření na molekulové integrály? Dr. Špirko ve svém posudku vyzdvihl význam hledání numericky stabilních algoritmů a zdůraznil potřebu širší diskuse včetně kritického rozboru možných aplikací na řešení

jiných typů úloh.

Mgr. Šimánek odpověděl na otázky oponentů a oponenti vyjádřili spokojenost s jeho odpověďmi.

Následovala všeobecná diskuze, do které se zapojila většina přítomných členů komise:

Doc. Chvosta otevřel otázku souvislosti diferenčních rovnic a metody řetězových zlomků, srovnání s metodou řetězových zlomků a sumační pravidla.

Prof. Štěpánek se zeptal, zda byly výsledky dizertace využity v publikacích týkajících se výpočtů iontů mědi.

Doc. Burda se zeptal na možnou aplikaci Gaussových funkcí pro vyvinutou metodu.

Prof. Plášek se zeptal, zda se nechystá publikace, ve které by byly rozebrány obecné základy metody.

Prof. Špirko připomněl souvislosti s jinými problémy, jako jsou ultra studené srážky, poslední vázané stavy a výpočty rotačně-vibračních stavů.

Doc. Chvosta se zeptal, na kolik platných míst jsou v současné době měřeny energie hladin atomu helia a na kterých místech se ve výpočtech začínou uplatňovat relativistické korekce.

Na všechny otázky odpovídal uchazeč s přehledem a ukazoval hluboké detailní znalosti problematiky disertační práce.

Zapsal: Dr. J. Zamastil

V neveřejné části obhajoby, které se zúčastnili členové komise včetně oponentů a školitele, proběhlo tajné hlasování (členů komise a oponentů) s tímto výsledkem:

přítomných členů s hlasovacím právem:	9
počet odevzdaných hlasů:	9
kladných hlasů:	9
záporných hlasů:	0
neplatných hlasů:	0

Skrutátoři: Prof. K. Dušek a Doc. P. Chvosta

Závěrečné stanovisko komise:

**Bylo konstatováno, že práce splňuje požadavky kladené MFF UK na doktorskou disertační práci, a proto komise uděluje Mgr. Milanu Šimánkovi titul Ph.D. v oboru Biofyzika, chemická a makromolekulární fyzika.**

Praha 5. 5. 2008

