

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího     posudek oponenta  
 bakalářské práce     diplomové práce

Autor: Štěpán Kasáček  
Název práce: Influence of relativistic effects on atomic spectra  
Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika (FOF)  
Rok odevzdání: 2023

Jméno a tituly oponenta: Mgr. Vojtěch Patkóš, Ph.D.  
Pracoviště: Katedra chemické fyziky a optiky, MFF UK  
Kontaktní e-mail: vojtech.patkos@mff.cuni.cz

## Odborná úroveň práce:

- vynikající     velmi dobrá     průměrná     podprůměrná     nevyhovující

## Věcné chyby:

- téměř žádné     vzhledem k rozsahu přiměřený počet     méně podstatné četné     závažné

## Výsledky:

- originální     původní i převzaté     netriviální kompilace     citované z literatury     opsané

## Rozsah práce:

- veliký     standardní     dostatečný     nedostatečný

## Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající     velmi dobrá     průměrná     podprůměrná     nevyhovující

## Tiskové chyby:

- téměř žádné     vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet     četné

## Celková úroveň práce:

- vynikající     velmi dobrá     průměrná     podprůměrná     nevyhovující

## Slovní vyjádření, komentáře a připomínky oponenta:

Bakalářská práce Štěpána Kasáčka se věnuje řešení relativistické Diracovy rovnice s Hartree-Fockovým potenciálem pro případ atomu cesia. Užitím Foldy-Wouthuysenovy transformace autor získal poruchovou řadu v mocninách  $Z\alpha$  kde  $Z$  je náboj jádra a  $\alpha$  konstanta jemné struktury. Numerickým výpočtem pro rostoucí řády poruchového rozvoje a velikosti báze pak spočetl energie  $s$  a  $p$  stavů v atomu cesia. Z věcného hlediska se jedná o kvalitní práci, autor provedl řadu náročných numerických výpočtů, získané výsledky jsou zajímavé a metodu je možné aplikovat na ostatní atomy alkalických kovů. Co bych bakalářské práci vytkl jsou občasné jazykové nedostatky v angličtině (gramatické chyby jako například záměna "than" a "then" atd či občasné těžkopádné formulace). K textu mám následující komentáře/upozornění:

- V textu pod rovnicí (1.8) je "As done in [5], while dealing with purely Coulomb field, where  $V_{HF} = 0$  in Eq. (1.2), one obtains another integral of motion for the Dirac Hamiltonian". Chtělo by zdůraznit, že takto získaný dodatečný integrál pohybu je ale pro Diracův Hamiltonián druhého řádu, zavedený až v rovnici (1.10), a ne pro Diracův Hamiltonián prvního řádu, zavedený v rovnici (1.2).
- V textu pod rovnicí (1.16) je "Here  $Y_{l,m}(\vec{n})$ ,  $S_z$  and  $|j, m\rangle$  are spherical harmonics, spin functions and Clebsch-Gordan coefficients, respectively". Zde je překlep, neboť  $|j, m\rangle$  je spinor a ne C-G koeficient. Ve stejném odstavci v následující větě je navíc "From Eqs. (1.8), (1.11) and (1.14) than follows, that the Clebsch-Gordan coefficients  $c$  in the expansion (1.15) satisfy". Zde je opět chyba, protože ani koeficienty  $c$  v rovnici (1.15) nejsou Clebsch-Gordanovy koeficienty.
- U rovnice (1.27) pro Sturmovské funkce by bylo vhodné zmínit, že ji z rovnice (1.10) získáme pomocí transformace  $r \rightarrow r/\xi$  kde  $\xi$  je definováno v rovnici (1.26). Takto to v textu působí, že pouhá substituce (1.26) stačí k převodu rovnice pro vodíkové funkce na rovnici pro Sturmovské funkce, ale ve skutečnosti je nutné provést ještě zmíněnou transformaci.
- U rozvoje radiálních částí vlnové funkce do Sturmovských funkcí v rovnicích (1.31) by bylo vhodné uvést, že například výraz  $R_{k,|G|}(\xi, r)$  používá zkrácenou notaci  $R_{n=k+l+1,|G|}(\xi, r) \rightarrow R_{k,|G|}(\xi, r)$ . Jinak by na první pohled nedávalo smysl počítat od  $k = 0$ .

Až na zmíněné drobnosti je bakalářská práce velmi kvalitní a srozumitelná s dostatkem detailů aby čtenář získal náhled na to, jak autor ve výpočtu postupoval.

## Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- Pro rostoucí řád poruchové řady a velikost báze autor pozoruje zhoršující se charakter výsledků. Dle mého názoru užitá single-float precision je v těchto případech nedostatečná (jak ostatně autor i zmiňuje) a pro eliminaci numerických nestabilit je nutné pracovat s větší přesností. Tak bude možné ve výsledcích lépe odlišit, co je jen důsledek numerických nestabilit během výpočtu, a co je důsledkem oscilujícího chování energií.
- Pro maticové elementy Hartree-Fockova potenciálu předpokládáte jednoduchou závislost na  $Z\alpha$ , danou v rovnici (1.40). Není možné, že pozorované problematické chování výsledků pro vyšší řády poruchové řady může souviset s tím, že závislost na  $Z\alpha$  může být u těchto maticových elementů komplikovanější?

**Práci:**

- doporučuji  
 nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

**Navrhuji hodnocení stupněm:**

- výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl

Místo, datum a podpis oponenta:

Praha, 21. srpna 2023