



Posudek oponenta na doktorskou disertační práci Mgr. Andreje Antalíka

Coupled clusters tailored by matrix product state wave functions

Práce Mgr. Antalíka spadá do oblasti vývoje kvantově chemických metod a jejich aplikací molekulární systémy, konkrétně se zabývá metodou kombinujících teorií spřažených klastrů, která je vhodná pro popis dynamické korelace, s metodou renormalizační grupy matice hustoty, která je vhodná pro popis silně korelovaných systémů. Spojení těchto přístupů je dosaženo pomocí externě korigované metody spřažených klastrů, která byla nejdříve otestována na menších systémech. Za účelem zefektivnění výpočtů pak byla tato metoda ještě modifikována s využitím lokálních párových přirozených orbitalů a vyzkoušena na větších molekulách.

Kromě úvodu a závěru, práce obsahuje dvě kapitoly, celkem obsáhlý seznam použité literatury, seznam použitých zkratk a seznam článků, na kterých je Mgr. Antalík uveden jako spoluautor, včetně vymezení jeho přínosu k jednotlivým publikacím.

V úvodu práce se Mgr. Antalík zaměřil na stručný přehled vývoje kvantově chemických metod a posléze na historii použití metody renormalizační grupy matice hustoty v kvantové chemii. Druhá kapitola je věnována externě korigované metodě spřažených klastrů včetně aplikací na molekuly dusíku a diradikálu tetramethylenethanu. Ve třetí kapitole je do metody zavedeno využití lokálních párových přirozených orbitalů a přesnost je analyzována na větších systémech oxo-Mn(salen) či Fe(II)-porfyrinu.

Práce Mgr. Antalíka je založena na šesti článcích, na kterých se spoluautorsky podílel a které byly publikovány v letech 2016 až 2020 ve významných impaktovaných časopisech (*the Journal of Physical Chemistry Letters*, *Journal of Chemical Theory and Computation*, *the Journal of Chemical Physics*, *Physical Chemistry Chemical Physics*). U dvou článků je Mgr. Antalík prvním autorem a u čtyř článků se podílel přímo na sepsání rukopisu (dle vlastního vymezení svého přínosu).

Dle mého názoru, práce Mgr. Antalíka obsahuje originální výsledky a je napsaná srozumitelně na velmi dobré odborné úrovni. Grafická, jazyková a formální úroveň práce je rovněž dobrá, text obsahuje přiměřeně překlepů. Rozsah práce je standardní, nicméně počet publikací, na kterých je založena, je nadstandardní. To dle mne svědčí o tom, že během svého doktorského studia Mgr. Antalík odvedl velký kus práce.

Jsem přesvědčen o tom, že práce Mgr. Antalíka přináší nové poznatky v oblasti vývoje kvantově chemických metod a že tato práce splňuje všechny požadavky kladené na doktorskou disertační práci. Proto navrhuji uznat práci Mgr. Antalíka jako doktorskou disertační práci a udělit Mgr. Antalíkovi titul *philosophiæ doctor* (Ph.D.) v oboru Biofyzika, chemická a makromolekulární fyzika.



Připomínky a podněty do diskuse:

1. V úvodním historickém přehledu chybí zmínka o objevu spinu elektronu a příslušné teorie kolem. Pauliho vylučovací pravidlo patří k základům moderní chemie.
2. Tvzení, že DFT je přesná teorie (na straně 4), může být pro mnohé zavádějící (zejména, když je to v následující větě v podstatě popřeno). DFT je v současnosti přesná pouze z hlediska existence funkcionálu, ale rozhodně ne z hlediska jeho konstrukce. Tudiž ani z hlediska praktické použitelnosti, což je nejdůležitější, to není přesná teorie.
3. Nenašel jsem žádné odkazy na procedury použité pro numerické výpočty lineární algebry, např. SVD. Byly snad použity vlastní procedury pro tyto netriviální výpočty? Pokud ne, tak jaké procedury byly použity?
4. U obrázků chybí informace o tom, jestli je založen na výpočtu specificky provedeném pro práci nebo jestli je to obrázek převzatý z publikace. Ve druhém případě by tam měl vždy být příslušný odkaz. Například, odkud se vzal obrázek 3.1?
5. Nepochopil jsem úplně diskusi kolem pravého panelu obrázku 2.5. Kde je na obrázku vidět prohození singletního a tripletního stavu kolem 45° ? Vidím tam pouze složky tripletního stavu s různými m_s .
6. Podkapitola 2.2.3 obsahuje teoretickou analýzu výpočetní náročnosti DMRG algoritmu. Jak to pak vypadalo v praxi? Provedlo se porovnání třeba CPU časů pro nějaký systém?

V Praze dne 26. 2. 2021

doc. Ing. Pavel Soldán, Dr.