

Školitelský posudek diplomové práce

pana Bc. Jana Brandejse

na téma

Optimizing quantum simulations and the DMRG method

Tématem diplomové práce pana Jana Brandejse bylo studium více než dvoučlenného kvantového provázání (entanglement) v DMRG vlnových funkcích silně korelovaných mnohoelektronových systémů popsaných kvantově chemickým Hamiltoniánem. Jeho úkolem byla jak implementace potřebných výpočetních algoritmů, tak i jejich numerické otestování na konkrétních molekulách.

Z kapitol 2-4 věnovaných teorii je zřejmé, že si pan Brandejse osvojil znalosti DMRG metody a pro jeho práci relevantních partií kvantové mechaniky. Vlastní výsledky pana Brandejse jsou pak podány v páté kapitole, kde popisuje konkrétněji tří-sitovou vzájemnou informaci a podává numerické výsledky pro molekulu diboranu. Během práce v naší skupině se pan Brandejse do hloubky seznámil s metodou DMRG a jejími teoretickými základy, tak i s programátorskými technikami nutnými k implementaci této metody. S prací pana Brandejse jsem byl velmi spokojen, je zřejmé, že jde o nadaného studenta nadšeného pro vědeckou práci, který projevuje vlastní invenci a iniciativu a má zájem o další výzkum na této problematice formou doktorského studia.

Bohužel vzhledem k nedostatku času byly v práci prezentovány numerické výsledky pro jedinou molekulu, což pro diplomovou práci je snad postačující, nicméně pro budoucí publikaci bude zapotřebí dalších numerických studií. Ze stejného důvodu nebyla práce po formální stránce dotažena do perfektní podoby.

Vzhledem k poměrně náročné problematice, jíž se diplomand zabýval, a jeho velmi iniciativnímu a samostatnému přístupu k práci nicméně předloženou diplomovou práci doporučuji hodnotit stupněm výborně.

Richland, WA, 5. 9. 2016

Doc. Mgr. Jiří Pittner, Dr. rer. nat., DSc.
školitel