

Oponentský posudek diplomové práce

Nová metoda řešení Schrödingerovy rovnice

předložené **Bc. Jakubem Kocákem**

Předkládaná práce je věnovaná nové metodě řešení Schrödingerovy rovnice založené na propagaci vlnové funkce v imaginárním čase (ITP) a kvantové metodě Monte Carlo (QMC). Zásadním novým prvkem je použití samotné vlnové funkce, a nikoliv kvadrátu její velikosti, jako pravděpodobnosti hustoty použité v QMC simulaci. Práce je rozdělena do tří částí. V první části je popsán princip ITP metod, ve druhé nově vyvíjená metoda a ve třetí výsledky výpočtů pro tři modelové systémy – harmonický oscilátor v šesti dimenzích, anharmonický oscilátor a atom vodíku.

Téma je na diplomovou práci mimořádně originální a současně obtížné. Autor zde bezpochyby prokázal hluboké porozumění kvantové mechaniky, které je na studenta magisterského studia chemie (byť fyzikální) neobvyklé. Vývoj metody se zde skládal jak z odvození potřebných rovnic, jejich implementace, tak z testovacích výpočtů ověřujících přesnost. Toho všeho bylo dosaženo v poměrně krátké době, která je k dispozici pro řešení diplomové práce. Z hlediska obsahu tak hodnotím práci jako mimořádně kvalitní a v mnohých aspektech na úrovni očekávané u práce disertační.

Zatímco obsah práce je zcela vynikající, samotné zpracování přece jen již takových kvalit nedosahuje. Dle mého názoru by si především úvod a závěr zasloužily rozsáhlejší a důkladnější zpracování a bylo by vhodné na těchto místech zdůraznit přednosti nově vyvinuté metody a rovněž uvést, jaké systémy je možné metodou studovat. Čtenáři práce by jistě prospěla i krátká pasáž o základech difusní QMC. Práce je napsána v anglickém jazyce. Jazyková úroveň je poměrně dobrá a ač práce obsahuje řadu drobných gramatických chyb, srozumitelnost textu tím až na několik výjimek netrpí. Pro úplnost přikládám několik drobných připomínek, které ale rozhodně nepředstavují závažné problémy.

- Školitel je na straně (ii) uveden jako vedoucí bakalářské a nikoliv diplomové práce.
- V úvodu autor píše, že přesnost práce byla testována na čtyřech systémech a uvádí pouze tři.
- Malá přirozená čísla, charakterizující počet, je v textu vhodné psát slovy a nikoliv číslicí (viz. např. "there are 2 solutions" ze strany 15).
- Na straně 21 v sekci 2.1.2 vypadl v rovnici pro $\langle x | T e^{-\tau T} | x' \rangle$ ve třetím kroku výraz $\langle x' | \psi \rangle$.
- Autor používá symbol G pro aproximant. Bylo by vhodné toto značení zavést již již rovnici 1.8 či jejím okolí a nikoliv v hlavičce tabulky 1.1.

Vzhledem k odborné kvalitě doporučuji ohodnotit předloženou diplomovou práci známkou **v ý b o r n ě**.