

Školitelský posudek bakalářské práce

pana Jakuba Langa

na téma

Multireferenční CC výpočty s použitím optimalizovaných virtuálních orbitalů

Cílem bakalářské práce pana Jakuba Langa bylo otestovat, jak funguje technika optimalizovaných virtuálních orbitalů (OVOS) pro multireferenční CC výpočty. CC metody, ať už jedno- nebo multireferenční se vyznačují poměrně velkou výpočetní náročností, která škáluje prudce s počtem virtuálních orbitalů (např. N_v^4 v případě CCSD). Je tedy zřejmé, že optimalizací virtuálních orbitalů a následným zanedbáním jejich méně důležité části lze docílit výrazných výpočetních úspor. Metoda OVOS a příbuzné metody jako FNO byly vyvinuty nejprve pro jednoreferenční CC, v této práci je metoda OVOS poprvé použita v multireferenčním kontextu.

V úvodní části své bakalářské práce pan Lang nejprve popisuje metodu Hartree-Focka a jednoreferenční metodu spřažených klastrů, pak se stručně věnuje multireferenčním CC metodám a trochu podrobněji technice OVOS. Práce obsahuje drobné překlepy a nepřesnosti, např. v obr.3b BWCC a MkCC patří do třídy "State-specific", znaménko v rovnici (46), nicméně je třeba vzít v úvahu, že pan Lang napsal práci zcela samostatně. Další část práce počínaje kap. 5 je věnována vlastním výsledkům pana Langa, což jsou výpočty molekul tetrametylenetanu a methylenu. V práci bylo ukázáno, že redukce virtuálního prostoru (VOS) o 20% dovoluje snížit výrazně výpočetní náročnost při zachování požadované přesnosti. Presentace těchto výsledků by mohla být provedena poněkud lépe, např. by bylo vhodné uvést přímo graf závislosti singlet-triplet štěpení na redukci VOS. Do budoucna by bylo též vhodné rozšířit výpočty o BWCCSD(T) a MkCCSD(T) metody.

Přes tyto drobné nedostatky bych rád ocenil velmi samostatnou práci pana Langa a doporučuji udělení bakalářského titulu.

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