

Ab-initio metody pro výpočty elektronových struktur tvoří jednu z důležitých oblastí materiálové fyziky. Úkolem této práce – v rámci řešení projektu zaměřeného na vývoj nové metody pro výpočty elektronových stavů v neperiodických strukturách, založené na teorii funkcionálu hustoty, pseudopotenciálech a metodě konečných prvků – bylo převést Kohn-Shamovy rovnice do tvaru vhodného k diskretizaci, navrhnout vhodnou metodu pro řešení zobecněného problému vlastních čísel, který touto diskretizací vznikne, a implementovat (či upravit existující) řešič pro jeho řešení.

Práce popisuje postup, kterým se z mnohočástečné Schrödingerovy rovnice získá generalizovaný problém vlastních čísel s aktualizací řádu  $k$  (rank- $k$ -update) a věnuje se různým metodám pro jeho řešení. V rámci práce byl modifikován již existující řešič využívající blokovou Lanczosovu metodu pro výpočet vlastních čísel, integrován do frameworku SfePy sloužícího k výpočtu metodou konečných prvků a vzniklý programový kód byl úspěšně otestován.