

Školitelský posudek doktorské disertační práce pana Mgr. Jana Brandejse na téma

*Tensor Network-based Computational Methods for Strongly Correlated Molecular Quantum Mechanics*

Disertační práce pana Brandejse se zabývá kvantově chemickými metodami založenými na metodě renormalizační grupy matice hustoty (density matrix renormalization group, DMRG), jejichž vývojem se v naší skupině zabýváme. Metoda DMRG je jednou z mála výpočetních metod, která je vhodná pro popis elektronové struktury molekul se silně korelovanými elektrony vyžadující velké aktivní prostory, jako jsou například biologicky relevantní polynukleární komplexy přechodných kovů. Pan Brandejse se v rámci svého doktorského studia podílel na vývoji nové masivně paralelní implementace, která posouvá hranice možností DMRG výpočtů zmíněných molekul.

Dalším důležitým příspěvkem pana Brandejse je vývoj a aplikace metod pro popis v DMRG chybějící dynamické elektronové korelace pomocí externě korigovaných metod vázaných klastrů (coupled clusters). Konkrétně se jednalo o relativistickou verzi metody tailored coupled clusters a její aplikaci na dvouatomové molekuly s atomy těžkých kovů a také vylepšení nerelativistické verze s využitím lokálních párových přirozených orbitalů. Za zmínku dále stojí využití metody DMRG při analýze elektronově deficitních vazeb, kterému se pan Brandejse v rámci svého studia také věnoval.

Jako školitel mohu bez nejmenších pochybností konstatovat, že pan Brandejse pracoval se zájmem, samostatně a iniciativně. Podílel se velkou měrou na vývoji nových výpočetních metod, jejich netriviální aplikaci, ale také na psaní publikací a vedení mladších studentů. V rámci doktorského studia pana Brandejse vznikly 4 publikace s jeho autorstvím, které byly otištěny v renomovaných zahraničních časopisech *Journal of Chemical Theory and Computation*, *Journal of Computational Chemistry* a *Journal of Chemical Physics* a také česky psané review pro časopis *Chemické listy*.

Závěrem bych rád řekl, že pan Brandejse se jako doktorand velmi osvědčil a vřele doporučuji jeho disertační práci k obhajobě. Navrhuji, aby jeho práce byla uznána jako podklad pro udělení titulu Ph.D.

Praha, 7. března 2022

RNDr. Libor Veis, Ph.D.