

Vzpomínka na prof. Jiřího Čížka

4.2.2025 - | Matematicko-fyzikální fakulta UK

Jiří Čížek se narodil 24. 8. 1938 v Praze do lékařské rodiny. Přestože se o medicínu celý život zajímal, byla to matematika a její použití, jež ho od mládí přitahovala nejvíce a určila jeho životní cestu. Během gymnaziálních studií se seznámil s Jaroslavem Kouteckým, s nímž začal spolupracovat na teoretickém popisu polarografických proudů. Jejich první společná publikace došla do redakce ještě před Jirkovými 17. narozeninami. Do roku 1959 spolu na téma polarografie publikovali v další čtyři práce. Není proto příliš divu, že - podle jeho vlastních slov - bylo studium teoretické fyziky na MFF UK v letech 1956-1961 spíše dálkové. V téže době již byl Jiří zaměstnán na Ústavu fyzikální chemie ČSAV.

Se začátkem 60. let se pozornost Kouteckého a jeho žáků přesunula od polarografie ke kvantové chemii. Během doktorátu začal Jiří pracovat na problému, jehož vyřešení založilo jeho celosvětový význam a proslulost - problému výpočtu korelační energie. Pohyb elektronu v atomech a molekulách je ve velmi dobrém přiblížení popsán nerelativistickou kvantovou mechanikou, kde vzájemná interakce elektronů a interakce elektronů s atomovými jádry je čistě elektrostatická. Potřebné rovnice tedy od vzniku kvantové mechaniky před zhruba 100 lety známe. To, s čím se doteď lidský duch potýká, je najít způsob, jak tyto rovnice s dostatečnou přesností vyřešit. Řešení těchto rovnic umožňuje např. modelování chemických reakcí na počítači, což je podstatně levnější než jejich experimentální realizace ve zkumavce.

První krok k řešení problému kvantové elektrostatiky učinili již ve 30. letech Douglas R. Hartree a Vladimír A. Fok, kdy problém pohybu mnoha elektronů převedli na pohyb jednoho elektronu, který se pohybuje v efektivním poli ostatních elektronů a atomových jader. Tato tzv. Hartreeho-Fokova aproximace dokáže vystihnout kvalitativní rysy problému. Pro skutečně předpovědní schopnost teorie, a tím i její praktickou užitečnost, je ale nutné zahrnout i rozdíl mezi Hartreeho-Fokovým a přesným řešením, kterému se říká problém určení dynamické korelace elektronů. S tímto problémem se zabývala na přelomu 50. a 60. řada fyziků. Nejdále došli Němci Fritz Coester a Hermann Kümmel, kteří první zavedli metodu tzv. spřažených trsů (coupled clusters), která měla automaticky správnou závislost růstu přibližného řešení s množstvím elektronů. Matematické obtíže spojené s touto metodou však byly příliš veliké, a tak i jejich úsilí zůstalo v půli cesty.

V této situaci vchází na scénu tehdy pouze 26letý Jiří Čížek a uspěje tam, kde ostatní ztroskotali. K vyjádření tzv. klastrových operátorů z Coesterovy a Kümmelovy metody použije tzv. kreační a anihilační operátory kvantové teorie pole. V pohledu kvantové teorie pole nejsou elektrony navždy existující částice, ale kvanta elektronového pole, která mohou vznikat a zanikat. Tento pohled je nutný pro popis jevů jako beta-radioaktivita, kdy se neutron v jádře rozpadá na elektron, proton a antineutrino, přičemž všechny tři produkty vzniknou až v okamžiku rozpadu, předtím v jádře nejsou. Elektrony pohybující se v atomech a molekulách ale jsou ve velice dobrém přiblížení nezničitelné, a tak se použití polního pohledu na jejich popis na první pohled jeví podobně jako „jít s kanónem na vrabce“. Jiří si ale uvědomil, že polní popis je přesně to, co potřebuje, aby dokázal Coesterovu a Kümmelovu metodu dovést až do konce. Polní popis totiž v sobě podstatně přirozeněji než standardní částicový přístup zahrnuje klíčovou vlastnost elektronů, jejich nerozlišitelnost. Jiří odvodí potřebné rovnice, které publikuje nejprve ve své kandidátské práci v roce 1966 a o rok později v anglickém překladu v časopise . Tato práce patří do zlatého fondu těch nemnoha odborných prací, které natrvalo změnily tvář kvantové chemie.

Za vytvoření metody se Jiřímu dostane celé řady domácích i mezinárodních ocenění, z nichž ty nejvýznamnější asi jsou cena a členství v Mezinárodní akademii molekulárních věd, členství v

Královské kanadské společnosti a ocenění Humboldtovy nadace. Za svou práci je také několikrát nominován na Nobelovu cenu za chemii. Nejblíže k jejímu získání byl zřejmě v roce 1998, kdy byla cena nakonec udělena britskému teoretickému chemikovi Johnu Popleovi a americkému teoretickému fyzikovi rakouského původu Walteru Kohnovi. V té době ještě výpočetní možnosti počítačů nedovolovaly plné využití Jirkovy metody.

V roce 1968 mu do života zasáhne ruská invaze. Jiří přijme pracovní nabídku z University of Waterloo v Kanadě, sbalí nejnnutnější věci a odletí s rodinou z Československa. Z plánovaného několikaměsíčního pobytu se nakonec stane 22 let strávených v exilu. Zhruba v polovině 70. let změní Jiří ještě jednou problematiku a začne se věnovat své velké vášni – studiu sčítání divergentních řad. Tyto řady vznikají např. při popisu atomů ve vnějších elektrických a magnetických polích, při popisu molekulárních vibrací atd. Toto pozvolné opuštění „rozjetého vagónu“ kvantové chemie a přesedlání na výzkum poměrně esoterické a většině chemiků a fyziků vzdálené problematiky je zajisté pozoruhodné, nikoli však nepochopitelné. Z Jirkova hlediska byla v polovině 70. let ta intelektuálně nejzajímavější část spojená s coupled clusters a kvantovou chemií dávno vyřešena a vyhlídka na rozsáhlé programování spojené s praktickými stránkami coupled clusters ho nikterak nelákala. Počátkem 90. let pak opustí tuto oblast výzkumu úplně.

Po sametové revoluci začal společně se svou ženou Lídou pendlovat mezi Kanadou a Čechy. Přijal místo profesora na Katedře chemické fyziky a optiky MFF UK na částečný úvazek a také mu byl obnoven částečný úvazek na Heyrovského ústavu fyzikální chemie. Na University of Waterloo působil dále jako distinguished professor emeritus. Posledních deset let života strávil v péči své dcery v Torontu.

Pro ty, co měli to štěstí Jirku poznat, byl Jiří především zcela mimořádnou lidskou bytostí. Nejen svým mimořádným intelektem a udivující hloubkou a šíří svých znalostí, které vedle matematiky a přírodních věd zahrnovaly i poezii a krásnou literaturu obecně, zeměpis a historii, ale též jako příklad velice čestného a skromného muže, s ohromným smyslem pro humor, železnou vůlí, s kterou překonával vědecké a životní potíže a přitom nesmírně laskavého, vždy ochotného pomoci druhým, bez velké okázalosti, avšak o to účinněji.

Autor děkuje svým kolegům Vladimíru Špirkovi a Vojtěchu Kapsovi za cenné připomínky.

<https://www.mff.cuni.cz/cs/verejnost/aktuality/vzpominka-na-prof-jiriho-cizka>