

Praha, 13. ledna 2026

Posudek habilitační práce pana **RNDr. Lukáše Félix Paštěky, PhD.**

na téma

Relativistické výpočty elektronové struktury a ich presnosť v spektroskopických aplikáciách

Tématem předložené habilitační práce pana Dr. Paštěky jsou přesné relativistické kvantově chemické výpočty elektronové struktury a spektroskopických vlastností atomů a molekul. Práce představuje přehled těchto metod s důrazem na metody spřažených klastrů, jejichž relativistické varianty dokáží velmi efektivně popsat dynamickou elektronovou korelaci v těžkých atomech a jejich sloučeninách. Toto téma je z hlediska současné chemie velice aktuální. Vliv relativistických efektů na vlastnosti molekul byl v minulosti často podceňován, patrně i z důvodu neexistence metod, programů a výkonných počítačů použitelných k provedení příslušných výpočtů. V současné době jsou již proveditelné i čtyřkomponentové či exaktní dvoukomponentové výpočty včetně Breitových interakcí a QED korekcí, se zahrnutím elektronové korelace na vysoké úrovni, což umožňuje dosažení spektroskopické přesnosti u těžkých atomů. Předložená práce přináší přehled výpočetních metod, popis výpočetních protokolů pro přesné výpočty a určování jejich nejistot a ilustruje jejich použití na vybraných aplikacích.

K práci je přiloženo 15 článků publikovaných v letech 2015–2025 v impaktovaných časopisech. Publikace tvoří tematicky jednotný celek věnovaný relativistickým efektům v kvantové chemii a kandidát ke všem přispěl významným autorským podílem. Aktuálně podle WOS má Dr. Paštěka 50 impaktovaných prací, 860-krát citovaných (797 bez autocitací), s h-indexem 17.

Předložená práce se skládá z 5 kapitol: po stručném úvodu následuje kapitola 2, která zavádí relativistický mnohoelektronový Hamiltonián, podává přehled relativistických metod kvantové chemie a vysvětluje podstatu v nich použitých aproximací. Třetí kapitola je věnována praktickým aspektům aplikace relativistických metod spřažených klastrů (CC) a výpočetním strategiím použitým v autorově práci. V této kapitole jsou analyzovány zdroje výpočetních chyb (nejistot) a způsoby jejich odhadu. Kapitola 4 ilustruje úspěšné aplikace relativistických výpočtů pro atomy i molekuly a ukazuje, že je možné dosáhnout vynikající přesnosti ve shodě teorie a experimentu. Jedním z příkladů je výpočet IP a EA atomu zlata, kde rozdíl vůči experimentálním výsledkům je na úrovni jednotek meV. Teoretické metody ale umožňují získat i predikce pro experimentálně obtížně přístupné supertěžké prvky s atomovým číslem 113–118. Prezentované metody nejsou limitovány jen na základní stav, ale autor ukazuje i výpočty excitovaných stavů radikálů monofluoridů kovů alkalických zemin, které jsou zajímavými kandidáty na laserové Dopplerovské chlazení, umožňující dosažení vysoce přesného spektroskopického rozlišení. Přesné výpočty molekul s těžkými atomy mohou ve spolupráci s experimentem být i vhodným testem hranic standartního modelu (SM), neboť lze porovnat porušení fundamentálních symetrií C, P, T v těchto molekulách s teoretickou předpovědí podle SM. Pátá kapitola pak uzavírá práci a podává výhled do budoucího autorova výzkumu.

K práci nemám žádné zásadní věcné ani formální připomínky, nicméně při jejím čtení mne napadlo několik otázek, které bych rád během obhajoby položil:

- V kapitole 2 mi trochu chyběla podrobnější diskuse QED efektů a efektivních operátorů používaných k jejich aproximativnímu výpočtu. Vyžaduje použití těchto operátorů plný 4-komponentový přístup a explicitní zahrnutí pozitronických stavů, nebo je lze použít i na X2C úrovni?
- PRL článek o EA a IP atomu zlata ukázal, že rozdíl mezi dřívějšími teoretickými výsledky a experimentem byl v důsledku elektronové korelace a že korelace ve stavech se zápornou energií nehrála roli. Dá se to zobecnit na ostatní prvky, lze všeobecně pro chemické systémy korelaci pozitronických stavů zanedbat?
- Existuje nějaké kvalitativní zdůvodnění, proč diagonalita FCF matic (obr. 4.10) u CaF a BaF má opačný trend (X-B resp. X-A přechod)? Výpočet RaF, který by ověřil, že jde o relativistický trend směrem dolů v periodické tabulce, nebyl proveden?
- V souvislosti s výpočty polyatomických molekul mám technický dotaz, zda autor má k dispozici 4c-CASSCF program fungující i pro chirální molekuly (C_1^* double grupa). Před dvěma lety jsem takový výpočet chtěl provést, ale nebyl jsem schopen najít žádný program, který by v této situaci správně fungoval.
- Mnoho těžkých atomů vykazuje kromě relativistických efektů a dynamické korelace i silnou korelaci díky konfiguraci s otevřenými slupkami d či f. Plánuje se autor v budoucnu věnovat i studiu těchto systémů, např. pomocí 4c-DMRG metody?

Závěrem nezbyvá než konstatovat, že předložená práce prezentuje vysoce kvalitní výzkum a výsledky autora byly publikovány v řadě článků v impaktovaných časopisech, jež mají výborný citační ohlas. Není tak pochyb, že kandidát se etabloval na mezinárodní úrovni jako expert na relativistickou kvantovou chemii a prokázal schopnost vést samostatně výzkum v této oblasti. Vřele tedy doporučuji předloženou práci k obhajobě a po jejím úspěšném absolvování navrhuji udělení titulu Docent panu Dr. Paštěkovi.

Prof. Mgr. Jiří Pittner, Dr. rer. nat., DSc.
 Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.
 Dolejškova 3
 CZ-18223 Praha