

## Oponentský posudek disertační práce.

*Autor disertační práce:* **Evžen Šubrt.**

*Název disertační práce:* **Diffusion in time – dependent potentials.**

*Studijní obor:* Biofyzika, chemická a makromolekulární fyzika.

*Doktorské studium na:* Matematicko - fyzikální fakulta University Karlovy, Praha,

*Práce dokončena:* 2007.

*Oponent:* doc. RNDr. Milan Marvan, CSc.

Matematicko - fyzikální fakulta

Tato práce řeší dva okruhy otázek. První okruh se týká problému, jak ovlivňuje přítomnost šumu pohyb Brownových částic v potenciálním reliéfu, který je modulován střídavým polem (kapitoly 2,3). Druhý okruh se zabývá problémem, jak pro malé částice formulovat analogii druhého zákona termodynamiky (kapitola 4).

Věnujme se napřed prvnímu okruhu otázek. Zde předložená práce studuje čtyři jevy zajímavé i z praktického hlediska:

(a) zesílení působícího signálu při vhodné velikosti šumu - stochastická resonance,

(b) posunutí středu, kolem něhož částice „kmitá“ ve střídavém poli, proti poloze ve statickém poli - tzv. dynamický shift,

(c) jednosměrný pohyb částice při zapojení střídavého prostorově homogenního pole - princip Brownova (molekulárního) motoru.

d) vliv střídavého pole na tendenci částic zaujímat polohu na krajích nepropustné potenciálové bariery - odstředivý jev.

Studiem prvních třech otázek předložená práce navazuje na práce jiných autorů, které byly uveřejněny v posledních dvou dekáдах. Liší se od nich především tím, že hledá nikoliv přibližná, ale přesná řešení. Tato dosažená přesnost je ovšem vykoupena volbou modelových potenciálů, které idealizují potenciály odpovídající realitě. V této práci se uvažují potenciály po částech přímkové a předpokládá se, že jednotlivé části potenciálu mohou navazovat nespojitě. Ačkoliv jsou zvolené potenciály značnou idealizací, můžeme věřit spolu s autory, že hlavní výsledky aspoň kvantitativně odpovídají realitě.

Poslední jev, který byl označen jako jev odstředivý, je patrně nově předpovězen

E. Šubertem a jeho školitelem doc. P.Chvostou.

Domnívám se, že mnoho čtenářů by mohlo najít v této části práce (kapitoly 2,3) inspiraci pro objasnění jevů ve vlastním oboru nebo k předpovědím konkrétních realizací takových jevů. Ovšem k tomu by přispělo, kdyby v práci byly jasněji formulovány hlavní výsledky.

Poslední okruh studovaných otázek je inspirován více než sto let starým problémem, zda druhý zákon termodynamický platí také pro malé systémy. Přesněji řečeno, jde o to, jakou formu mají vztahy, které limitně - pro velké systémy - přecházejí na formulaci druhého zákona termodynamického. Takové vztahy byly v poslední dekádě nalezeny. V recenzované práci jsou uvedeny dvě formulace: Jarzynského a G. E. Crookse.

Cílem této části recenzované disertace je demonstrovat na jednoduchém modelu dvouhladinového systému, že tyto vztahy platí. Přitom je kladen důraz na to, že se používají přesné neaproximativní matematické metody. Při studiu tohoto modelu se předpokládá, že energetické hladiny se od sebe vzdalují lineárně s časem. Problém se řeší použitím rovnice typu Pauliho. Volba pravděpodobnosti přechodu je omezena jen principem detailní rovnováhy. V práci se uvažují dva možné scénáře závislosti pravděpodobnosti přechodu na čase. (Škoda, že v práci nejsou diskutovány dva odpovídající fyzikální modely, které by těmito scénářům odpovídaly. Mám na mysli např. modely dvoujámky, které jsou časově

modulovány.) Výsledkem této části disertace je nalezení časové závislosti hustoty pravděpodobnosti práce vykonané na uvažovaný systém .

I když pečlivý čtenář může najít, jaké jsou rozdíly mezi výsledky této práce a jiných autorů, bylo by přátelské vůči čtenáři, kdyby mu je autor pomohl hledat. Není mně např. jasné, kdy byl poprvé formulován dynamický shift. Nepochybuji však, že výsledkem prací zahrnutých do disertační práce je matematické upřesnění veličin, které dynamický shift - chápaný v intuitivním významu - popisují.

Chápu doktoranda, že když věnoval velké úsilí vytvoření pěti publikací (ovšem spolu se svým vedoucím), nezbylo mu příliš sil věnovat se podrobněji úvodu. Myslím však, že by bylo užitečné, kdyby autor některé matematické přístupy objasnil podrobněji. Např. by měl podrobněji objasnit rovnice (2.9), (2.10). Autor disertace by si měl uvědomit, že úvod slouží dvěma účelům: a) čtenáři pomůže pochopit hlavní výsledky a hlavní metody použité v publikacích, b) přesvědčit porotu, že byl důležitým spoluautorem publikací, které jsou součástí předkládané disertace.

Po formální stránce je práce psána velmi pečlivě. Práci by však prospělo, kdyby na začátku byl seznam užitých symbolů, případně s uvedením místa, kde symbol je poprvé definován. Obrázky jsou uvedeny pečlivě, trojrozměrné barevné obrázky působí esteticky dobře a ukazují hlavní charakter závislostí. Z druhé strany se v nich špatně čtou číselné hodnoty. Někdy by bylo proto užitečně, kdyby je autor doplnil dvojrozměrnými obrázky, v nichž by třetí souřadnice vystupovala jako parametr. K názornému pochopení dynamického shiftu by bylo dobře, kdyby autor vyloučil čas ze dvou funkcí: závislosti polohy na čase a závislosti vnějších sil na čase. Po této matematické operaci by znázornil závislost polohy na vnějším poli. Přitom by čas hrál roli parametru. Čtenář by lépe pochopil, že výsledky znamenají posun hysterezní křivky ve směru osy souřadnice v závislosti na frekvenci nebo na amplitudě pole, což jsou jevy někdy pozorované.

V obr. 4.2 se vyskytuje parametr  $\eta$ , jeho přesnou definici jsem nenašel i když z kontextu je jasné, že souvisí s hodnotou vykonané práce. Grafy, které se týkají vykonané práce by bylo vhodné doplnit např. grafem odchylky střední práce od reversibilní práce jako funkce času pro různé parametry  $a$ .

V závěru chci konstatovat, že disertační práce přispívá k řešení velmi aktuálního problému základního výzkumu v oblasti termodynamiky a statistické fyziky. Prohlubuje naše znalosti termodynamiky malých systémů, kde tepelná fluktuace není zanedbatelná. Na konkrétních modelech ověřuje planost tvrzení, které můžeme považovat za zobecnění druhého zákona termodynamiky na malé systémy. Všimá si nově pozorovaných jevů, ve kterých šum hraje pozitivní roli. Výsledky, v této práci studované na idealizovaných modelech, mohou inspirovat ke studium těchto jevů na konkrétních fyzikálních systémech. Pro teoretiky jsou cenné matematické neaproximativní metody obsažené v disertaci. Součástí předložené disertaci je pět původních prací, jejímiž spoluautorem je vedoucí doktoranda doc. P. Chvosta. Přirozeně, že těžko mohu posoudit stupeň podílu práce E. Šubrta a jeho vedoucího.

Rád bych zdůraznil, že práce používá komplikovaný matematický aparát a obsahuje bohaté výsledky. Moje výhrady se týkaly jen některých formálních nedostatků.

Považující práci za vynikající a doporučuji ji uznat za doktorskou disertační práci.

V Praze, dne 26. 11. 2007

doc. RNDr. Milan Marvan, Csc.

