

Název práce: Entropie a nevratnost přechodů přes energetické bariéry

Autor: Šimon Pajger

Katedra: Katedra makromolekulární fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Artem Ryabov, Ph.D., Katedra makromolekulární fyziky

Abstrakt: Moderní experimenty zaměřené na studium dob trvání nerovnovážných přechodových dějů poskytují cenné informace o mikroskopické dynamice těchto procesů. Teoreticky jsou výsledky takových experimentů dobře popsány pouze pro systémy, na něž nepůsobí časově závislá vnější síla, kde jednou z nejobecnějších teoretických předpovědí je tvrzení o rovnosti distribucí časů přechodů dopředu a zpět mezi libovolnými dvěma body krajiny volné energie. Nedávno však bylo experimentálně zjištěno, že tato identita může být narušena působením vnější časově závislé síly. V práci teoreticky zkoumáme tuto situaci a diskutujeme, za jakých podmínek lze identitu distribucí zobecnit na časově závislý případ. Za tímto účelem zavádíme rozdělení přechodových časů vážená produkcí entropie. Zejména ukazujeme, že je možné najít váhu pro každou trajektorii takovou, že vážená rozdělení přechodových časů, vyplývající z těchto vah, jsou identická. Speciální případ periodického vnějšího působení diskutujeme v kontextu dvou experimentálně relevantních způsobů měření přechodových trajektorií. Nejprve předpokládáme, že trajektorie realizující přechody budou statisticky nezávislé. Zadruhé studujeme přechodové události podél jedné dlouhé trajektorie. V práci dále provádíme analýzu jak v podtlumené, tak v přetlumené dynamice a diskutujeme podobnosti a nejvýraznější rozdíly mezi nimi. Naše výsledky mohou být experimentálně testovány v časově závislých experimentech prováděných na jednotlivých molekulách, kde mohou pomoci pochopit vliv disipace na rychlosti průběhů tepelně aktivovaných dějů.

Klíčová slova: doby trvání přechodových jevů, problém prvního průchodu, teorie přechodového stavu, Brownův pohyb, produkce entropie, dvojjámový potenciál