

**Oponentský posudok dizertačnej práce:**

**„Theory of Relaxation and Energy Transfer in Open Quantum Systems“ ,**

**autor Mgr. Jan Olšina**

Štúdium primárnych transportných procesov vo fotosyntetických jednotkách (PSU) za posledné desaťročia prešlo búrlivým rozvojom, a to hlavne vďaka novým experimentálnym metódam multidimenzionálnej nelineárnej spektroskopie (pump-probe, fotónové echo). Novšie, časovo a frekvenčne viacdimenzionálne experimenty, zasahujúce sub-ps oblasť, ukázali na dôležitosť koherentných procesov. Pomohli rozkláňať energetickú štruktúru PSU jednotiek a vymedziť časovú dynamiku vnútorných procesov na ps-úrovni. Zásadným poznatkom je, že efekty kvantovej koherencie sú podstatné pri popise rýchločasovej dynamiky a prispievajú k efektívnosti prenosu energie. Navyše, nedávno zistený fakt, že vplyv koherencií v PSU komplexoch je dominantný aj pri normálnej teplote, kedy prostredie (tzv. homogénne rozšírenie čiar) by malo mať skôr opačný efekt na dynamiku transportu energie, nie je dodnes úplne objasnený.

Predkladaná dizertačná práca je príspevkom k analýze vplyvu koherencie na výrazný prenos energie v PSU komplexoch. Je založená na dvoch recenzovaných publikáciách v prestížnych svetových časopisoch, jednom konferenčnom príspevku a jeden e-printovom článku v ArXive 2013. Prácu tvorí päť kapitol. V prvej kapitole sú krátko naznačené projekčné metódy používané pri popise sústavy systém-rezervoár, ktoré sú neskôr použité pri numerických simuláciách, tiež je analyzované použitie sekulárnych aproximácií. Je vypichnutá úloha nesekulárnych javov a ich vplyvu na úlohu koherencie pri transporte energie v PSU komplexoch. Porovnaním časovo-lokálneho a nelokálneho prístupu k dynamike systému je vybratá vhodná a stabilná metóda reálnejšie popisujúca experiment.

Kapitola II je letným prehľadom diagramatických techník používaných pre popis viacpulzných techník nelineárnej optiky. Sú tu príklady simulácie 2D elektronických spektier častí PSU jednotiek pri zahrnutí dynamického rezervoáru. Je ukázané, že pre popis viacpulzných experimentov sa má použiť neštandardná technika, t.j. iný prístup k dynamike pre časy koherencie a iný pre čas populácie. Kapitola III je základom numerických simulácií, kde sú kombinované a implementované časovo-lokálne (dynamika koherencií) a nelokálne (dynamika populácií) metódy na 2D optické spektrá PSU komplexov. V kapitole IV je ďalej rozvinutá

a numericky použitá teória parametrických projektorov, kedy projektor zahrňuje doby koherencie a populácie. Konečne, v kapitole V, autor porovnáva ním implementovanú stochastickú techniku so známou ale obecně ťažšie použiteľnou technikou pre zložitejšie systémy, HEOM. Je zrejmé, že autorov prístup je omnoho efektívnejší a obecně použiteľnejší.

Možno povedať, že autor vytvoril a numericky implementoval neštandardnú metódu. Prekročil zaužívané prístupy statického rezervoáru a sekulárnej aproximácie často využívané pri simulácii dynamiky. Poukázal na fakt, že takéto obecně prístupy nevedú k úspechu a je treba zájsť za ich rámec. Pritom je nutný zvláštny prístup k jednotlivým úsekom dynamiky pri viacpulznom experimente. Svoju metodiku úspešne porovnal s modelmi, u ktorých existuje exaktné riešenie.

Analýza projekčných metód spolu s numerickou implementáciou sú významným prínosom práce k diskusii o nekoherentných javoch v PSU komplexoch. Bola vytvorená nádejná technika pre popis dynamiky sústavy systém-rezervoár, ktorá počíta s dynamikou rezervoáru. Navyiac, v spojení s kvantovo-chemickými programami prístupnými na pracovisku autora, je predpoklad použitia jeho implementácie na výpočet reálnych 2D spektier PSU komplexov a molekulárnych štruktúr. Záverom autor správne poukazuje na fakt, že zahrnutie polarónových efektov v blízkej budúcnosti bude nevyhnutné.

Z predloženej dizertačnej práce je zrejmé, že autor si osvojil náročné metódy nerovnovážnej dynamiky, nelineárnej optiky a numeriky. I keď práca obsahuje formálne chyby, tieto neprekážajú čitateľnosti a dajú sa korigovať publikovanými článkami, ktoré mohli byť prílohou práce. Čo však možno autorovi vytknúť je fakt, že práca neobsahuje bližšiu špecifikáciu použitých numerických kódov, na čo je v dizertácii tohto typu miesto.

Záverom môžem prehlásiť, že autor si osvojil metódu vedeckej práce, preukázal schopnosť samostatne a tvorivo pracovať, a preto *odporúčam* dizertačnú prácu Mgr. Jan Olšinu k obhajobe v obore 4f-4 Biofyzika, chemická a makromolekulárna fyzika.

V Bratislave 5. marca 2014

  
RNDr. Vojtech Szöcs, CSc.

Prírodovedecká fakulta UK

Bratislava