

Posudek disertační práce

RNDr. Karel Netočný, Ph.D.

Název: Teoretický popis nerovnovážných procesů transformace energie na úrovni molekulárních struktur

Autor: RNDr. Viktor Holubec

RNDr. V. Holubec vypracoval disertační práci na téma exaktně řešitelných modelů stochastické termodynamiky. Práci lze rozdělit do dvou základních částí: zatímco první část se týká analýzy distribuce práce a disipovaného tepla v systémech řízených časově závislými vnějšími poli, druhá část se věnuje analýze účinnosti nanoskopických motorů modelovaných prostřednictvím nerovnovážných limitních cyklů. Samotná práce je shrnutím výsledků publikovaných v řadě mezinárodních odborných časopisů. Obecně jde o velmi kvalitní práci, pouze s minimem nedostatků (zde mám na mysli některé drobné „formulační nešikovnosti“ a překlepy; tyto však neubírají práci na její kvalitě). Je nutné velmi ocenit zvládnutí netriviálních matematických postupů.

Statistická fyzika je jedním z pilířů moderní fyziky, jakožto most spojující fundamentální mikroskopické teorie s efektivním popisem kolektivního chování systémů na mezoskopické a makroskopické škále, pomocí metod teorie pravděpodobnosti. Jestliže rovnovážný stav a rovnovážné procesy jsou z teoretického hlediska dobře pochopeny, neexistuje dosud žádná obecná, ucelená a všeobecně akceptovaná teorie nerovnovážných a transportních jevů, s výjimkou teorie lineární odezvy a jí odpovídající lineární ireverzibilní termodynamiky. Absence obecných principů za tímto rámcem znamená, že jednotlivé nerovnovážné systémy je nutné studovat případ od případu, přičemž existuje velké množství (většinou aproximativních) metod. V posledních zhruba dvaceti letech zájem o nerovnovážnou statistickou fyziku opět výrazně vzrostl v souvislosti s objevem konstruktivní role šumu v rezonančních náhodných jevech a v molekulárních motorech, stejně jako s nalezením nových exaktních termodynamických relací a symetrií v distribuci nerovnovážných fluktuací. Těmto otázkám je v současnosti věnována velká pozornost také díky pokroku v oblasti nanotechnologie a molekulární elektroniky a v souvislosti s novými fascinujícími biofyzikálními experimenty.

Detailní neporuchová analýza konkrétních nerovnovážných systémů, již se zabývá tato disertace, navazuje na předchozí výsledky dosažené mimo jiné právě v pracovní skupině prof. P. Chvosty. Je nesporné, že předložená práce dále výrazně rozšiřuje kolekci známých přesně řešitelných modelů, které mohou sloužit jako „benchmark“ pro nejrůznější numerické a aproximativní metody.

1. kapitola obsahuje rozumně koncipované shrnutí známých obecných výsledků v rámci stochastické termodynamiky, včetně srovnání jednotlivých fluktuačních teorémů a poměrně detailního rozboru možných definic dráhových veličin (jako je práce a teplo) a jejich vzájemných vztahů. Rešerše dostupné literatury je provedena velmi pečlivě. Co možná trochu chybí je detailnější diskuse role detailní rovnováhy a známých případů narušení (některých) fluktuačních teorémů v difúzních systémech.

2. kapitola analyzuje termodynamické procesy v systémech s malým počtem diskrétních stavů. Pro každý z diskutovaných modelů jsou zde systematicky konstruovány práce a teplo jako fluktuující veličiny a metodou Greenových funkcí jsou počítány jejich pravděpodobnostní distribuce. Všechny dosažené neporuchové výsledky jsou dále diskutovány v jednotlivých speciálních režimech, porovnávány s exaktními fluktuačními symetriemi a srovnávány s numerickými simulacemi. 3.

kapitola podobným způsobem analyzuje markovovské modely se spojitými stavy, které vyžadují poněkud složitější matematický aparát. Všechny výsledky popsané v těchto dvou kapitolách jsou popsány velmi precizním způsobem a nenacházím zde žádné rozpory.

4. kapitola dále zobecňuje přechodí výsledky na analýzu limitních cyklů periodických časově závislých systémů, které modelují činnost molekulárních motorů. Účinnost těchto motorů je v literatuře velmi obsáhle diskutovaným tématem a exaktně řešitelné modely proto hrají nezastupitelnou úlohu. Jde bezesporu o nejpozoruhodnější část celé práce a nemohu ji nic závažného vytknout. Dosažené výsledky jsou velmi detailně demonstrovány v jednotlivých pracovních režimech, včetně srovnání s předchozími výsledky popsanými v literatuře.

Většina výsledků v této práci byla získána metodami vytvářejících a Greenových funkcí aplikovanými na stochastické procesy, exaktní sumací nekonečných poruchových řad v Laplaceově obraze a metodami komplexní analýzy, Lieových algeber a speciálních funkcí. Je třeba zdůraznit, že techniky prezentované v této práci jsou opravdu pokročilé a úspěšné zvládnutí všech jednotlivých dílčích projektů si zaslouhuje ocenění.

Považuji za nesporné, že tato disertační práce prezentuje sérii originálních výsledků velmi dobré úrovně, které obohacují dynamicky se rozvíjející obor nerovnovážné statistické fyziky o nové netriviální přesně řešitelné modely. Toto dokazuje i množství již přijatých publikací v impaktovaných časopisech: „Europhys. Lett.“, „Physica E“, „J. Stat. Mech.“ a další. Z těchto důvodů soudím, že **RNDr. V. Holubec má velmi dobré předpoklady k samostatné vědecké práci, a že jeho disertace beze zbytku splňuje podmínky nutné k udělení titulu Ph.D.**

Pro RNDr. V. Holubce mám následující dvě otázky:

1. Detailní znalost distribuce práce v celém rozsahu modelových parametrů často není nutná a v konkrétních aplikacích je dostatečné znát jejich chování v jednotlivých limitních režimech. Jedním z takových režimů je okolí kvazistatické limity. Striktně v této limitě je distribuce práce triviální, jak lze jednoduše dokázat z Jarzynského identity. Je možné adaptovat některou z použitých technik k poruchovému výpočtu distribuce práce v *okolí* kvazistatické limity? A v případě že ano, lze tímto postupem odvodit některé (alespoň částečně modelově nezávislé) výsledky pro tvar této distribuce ve slabě nekvazistatickém režimu, například generický tvar druhého statistického momentu pro práci resp. teplo?
2. Zamýšlel jste se nad případným rozšířením použitých teoretických metod na analýzu termodynamických procesů mezi *nerovnovážnými* stacionárními stavy? Jednoduchým příkladem takového systému je brownovská částice pohybující se v dvourozměrném časově závislém parabolickém potenciálu a pod vlivem (časově nezávislé) *nepotenciálové* síly. Vezměte v úvahu, že v tomto případě disipované teplo typicky diverguje v kvazistatické limitě.

V Praze 12.8.2013

RNDr. Karel Netočný, Ph.D.

Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i.
Na Slovance 2
182 21 Praha 8

tel: +420 2 6605 2029
fax: +420 2 8658 8605
e-mail: netocny@fzu.cz