

**F4110**  
**Kvantová fyzika atomárních soustav**  
**letní semestr 2010 - 2011**

**III.**  
**Tepelné fluktuace: lineární oscilátor**  
**Cvičení**

**KOTLÁŘSKÁ 16. BŘEZNA 2011**

# *Kapplerüv pokus*

## *Relace neurčitosti*

Odhad pro kvantové korekce v Kapplerově pokusu (jsou mizivé)

# JIŽ ZNÁME Planckova konstanta jako hraniční hodnota

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar \quad \text{relace neurčitosti}$$

Toto je generická forma Heisenbergových relací. Vlastně je to  $\gtrsim$ , ne  $\geq$   
Pořádně odvozeno

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar \quad \text{relace neurčitosti}$$

$$(\Delta x)^2 = \left\langle (x - \langle x \rangle)^2 \right\rangle, \quad (\Delta p)^2 = \dots$$

To se nám teď hodí na oscilátor, kde pracujeme vlastně přesně, i když tak dalece bez počítání. Musí se ale připomenout

$$\langle O_{\text{op}} \rangle = \langle \psi | O_{\text{op}} | \psi \rangle = \int dx \psi^*(x) O_{\text{op}} \psi(x)$$

To je standard, takže jen schematicky

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$E = \langle H \rangle = \frac{1}{2m} \langle p^2 \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle x^2 \rangle$$

$$= \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta x)^2 \quad \text{protože} \quad \langle x \rangle = \langle p \rangle = 0$$

$$= \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hbar^2 (\Delta p)^{-2} \quad \text{z relace neurč. pro rovnost}$$

$$\equiv \frac{1}{2m} \left( q + \frac{1}{4} m \omega^2 \hbar^2 / q \right)$$

Z podmínky

$$\frac{\partial E}{\partial q} = 0$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

Energie nulových kmitů podle očekávání

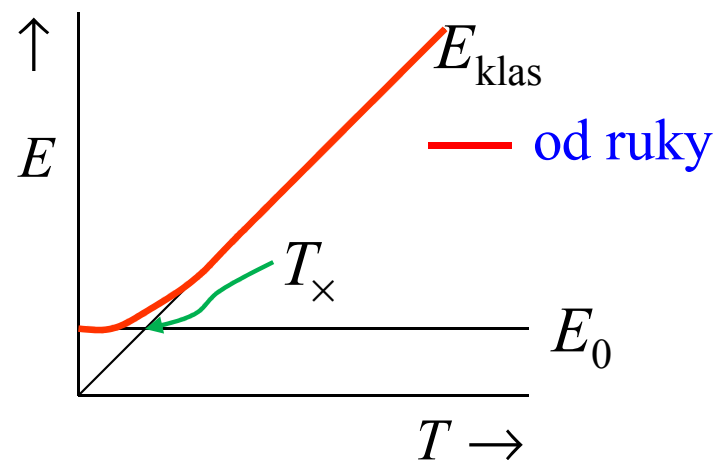
Tady opět **bez počítání**:

- Klasicky je energie oscilátoru daná ekvipartičním zákonem
- Při nulové teplotě je ryze kvantová a oscilátor je v nejnižším stavu

$$E_{\text{klas}} = k_{\text{B}}T \quad \text{asymptota vysokých teplot}$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad \text{asymptota nízkých teplot}$$

$$T_{\times} = \frac{\hbar \omega}{2k_{\text{B}}} \quad \text{crossover}$$



Tady opět **bez počítání**:

- Klasicky je energie oscilátoru daná ekvipartičním zákonem
- Při nulové teplotě je ryze kvantová a oscilátor je v nejnižším stavu

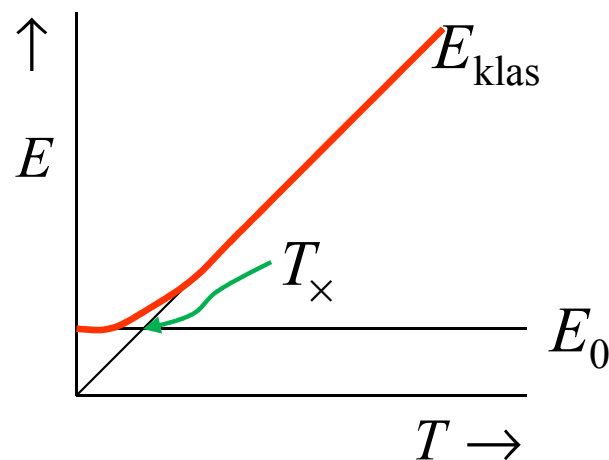
$$E_{\text{klas}} = k_{\text{B}}T \quad \text{asymptota vysokých teplot}$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad \text{asymptota nízkých teplot}$$

$$T_{\times} = \frac{\hbar \omega}{2k_{\text{B}}} \quad \text{crossover}$$

Přesný vzorec (červeně) má ty dvě asymptoty

$$E = \hbar \omega \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \right) \quad \text{Přesně}$$



# Souboj kvantových a termických fluktuací

Tady opět **bez počítání**:

- Klasicky je energie oscilátoru daná ekvipartičním zákonem
- Při nulové teplotě je ryze kvantová a oscilátor je v nejnižším stavu

$$E_{\text{klas}} = k_B T \quad \text{asymptota vysokých teplot}$$

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \quad \text{asymptota nízkých teplot}$$

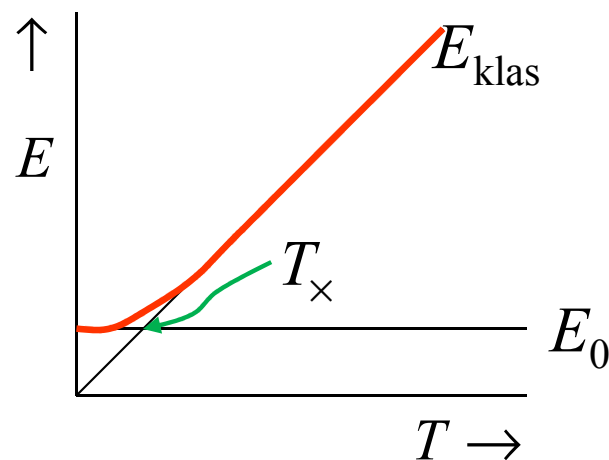
$$T_{\times} = \frac{\hbar \omega}{2k_B} \quad \text{crossover}$$

Přesný vzorec (červeně) má ty dvě asymptoty

$$E = \hbar \omega \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \right) \quad \text{Přesně}$$

$$E = \frac{1}{2} \hbar \omega \left( 1 + O(e^{-\hbar \omega / k_B T}) \right) \quad T \ll T_{\times}$$

$$E = k_B T \left( 1 + \frac{1}{12} \left( \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 + \dots \right) \quad T \gg T_{\times}$$





# Z těchto Kapplerových měření odhadneme $\omega$



vysoký tlak, přetlumený oscilátor

Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung (Methode B) (natürliche Größe).  
Direktionskraft  $2,66 \cdot 10^{-9}$  abs. Einh. Trägheitsmoment  $6,1 \cdot 10^{-6}$  abs. Einh. Skalabstand: 86,5 cm.  
Zeitmarke: 30 sec  $d x = 2$  mm. a) Atmosphärendruck. Temperatur  $15^{\circ}$  C

Fig. 4a



snížený tlak, podtlumený oscilátor

Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung (natürliche Größe).  
Direktionskraft  $2,66 \cdot 10^{-9}$  abs. Einh. Trägheitsmoment  $6,1 \cdot 10^{-6}$  abs. Einh. Abstand Spiegel-Kamera: 86,5 cm.  
Zeitmarke: 30 sec  $d x = 2$  mm. b)  $4 \cdot 10^{-3}$  mm Hg. Temperatur  $10^{\circ}$  C

Fig. 4b

# Z těchto Kapplerových měření odhadneme $\Omega$



vysoký tlak, přetlumený oscilátor

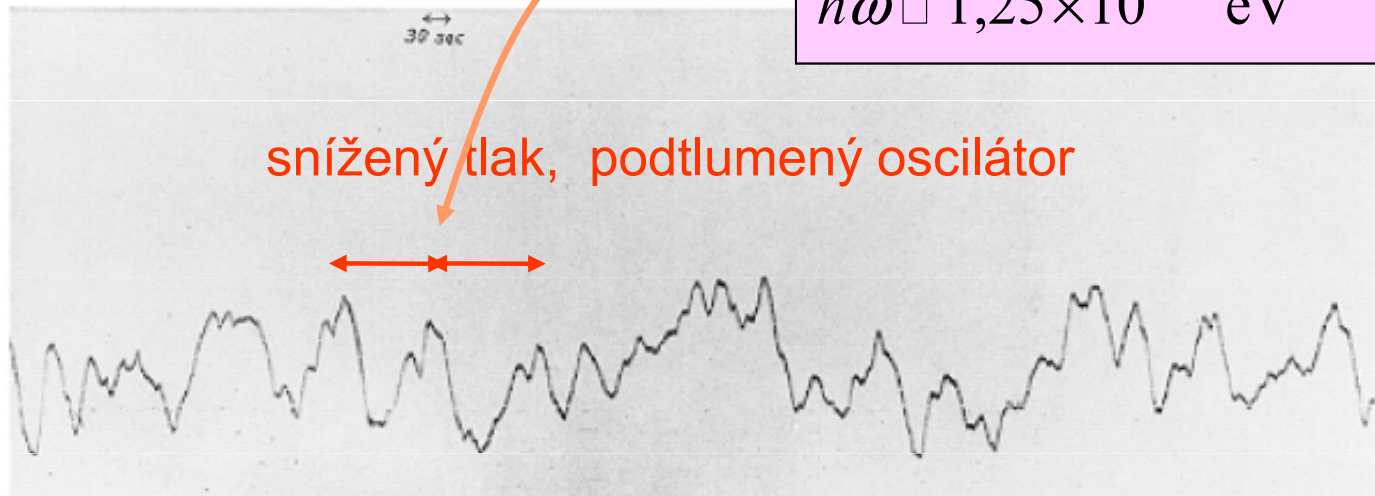
Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung  
 Direktionskraft  $2,66 \cdot 10^{-9}$  abs. Einh. Trägheitsmoment  $6,1$   
 Zeitmarke: 30 sec  $d x = 2$  mm. a) Atmosphä  
 Fig. 4a

$$\omega = \sqrt{\frac{D}{J}} = \sqrt{\frac{2,66 \times 10^{-9}}{6,10 \times 10^{-6}}} = 0,04 \text{ s}^{-1}$$

$$\frac{2\pi}{\omega} = 157 \text{ s} \quad \text{perioda volného kmitu}$$

$$\hbar\omega \approx 10^{-34} \cdot 0,04 / 1,6 \times 10^{-19} \text{ eV}$$

$$\hbar\omega \square 1,25 \times 10^{-16} \text{ eV}$$



snížený tlak, podtlumený oscilátor

Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung (natürliche Größe).  
 Direktionskraft  $2,66 \cdot 10^{-9}$  abs. Einh. Trägheitsmoment  $6,1 \cdot 10^{-6}$  abs. Einh. Abstand Spiegel-Kamera: 86,5 cm.  
 Zeitmarke: 30 sec  $d x = 2$  mm. b)  $4 \cdot 10^{-3}$  mm Hg. Temperatur  $10^{\circ} \text{C}$

Fig. 4b

# Z těchto Kapplerových měření odhadneme $\omega$

JE MALÉ

vysoký tlak, přetlumený oscilátor

Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung (Methode B) (natürliche Größe).  
Direktionskraft  $2,66 \cdot 10^{-9}$  abs. Einh. Trägheitsmoment  $6,1 \cdot 10^{-6}$  abs. Einh. Skalenabstand: 86,5 cm.  
Zeitmarke: 30 sec  $d x = 2$  mm. a) Atmosphärendruck. Temperatur  $15^{\circ}$  C  
Fig. 4a

snížený tlak, podtlumený oscilátor

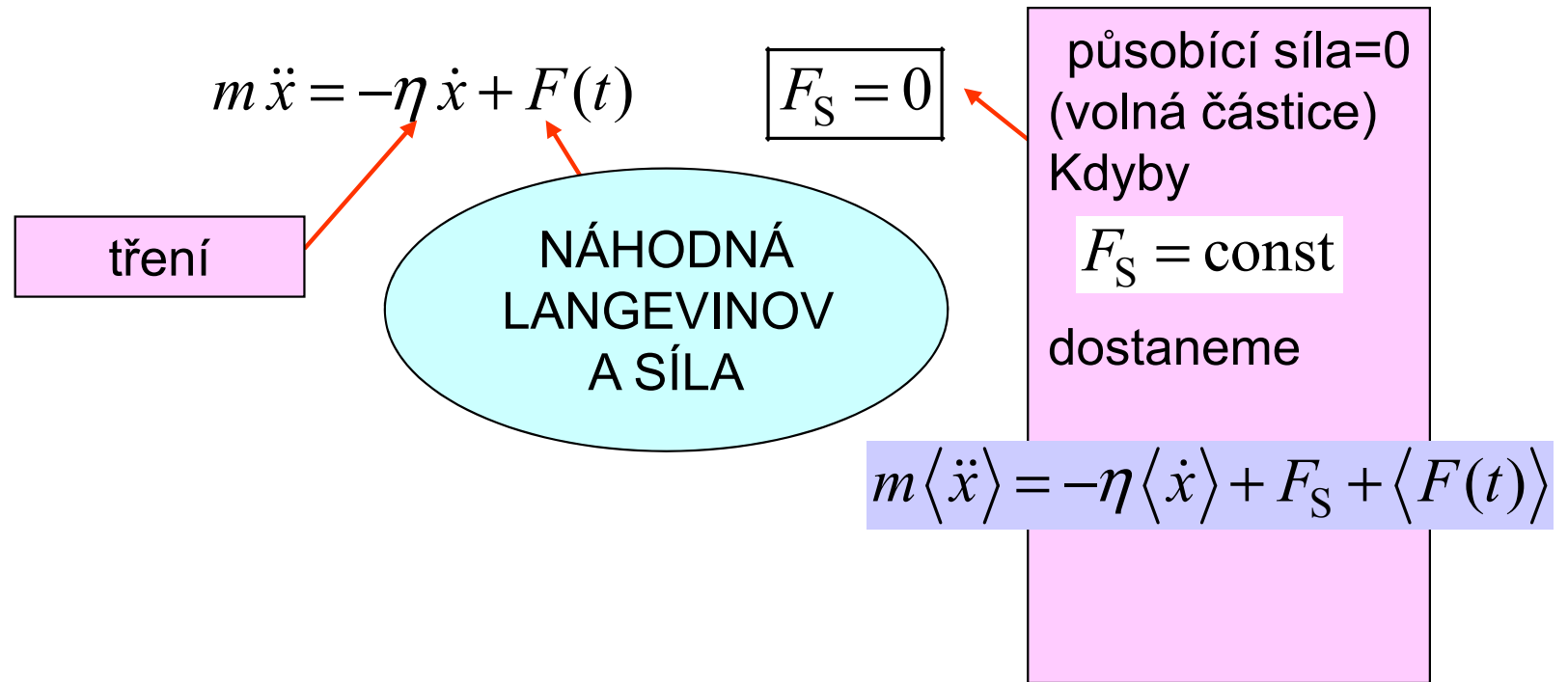
Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung (natürliche Größe).  
Direktionskraft  $2,66 \cdot 10^{-9}$  abs. Einh. Trägheitsmoment  $6,1 \cdot 10^{-6}$  abs. Einh. Abstand Spiegel-Kamera: 86,5 cm.  
Zeitmarke: 30 sec  $d x = 2$  mm. b)  $4 \cdot 10^{-3}$  mm Hg. Temperatur  $10^{\circ}$  C  
Fig. 4b

## *Langevinova rovnice*

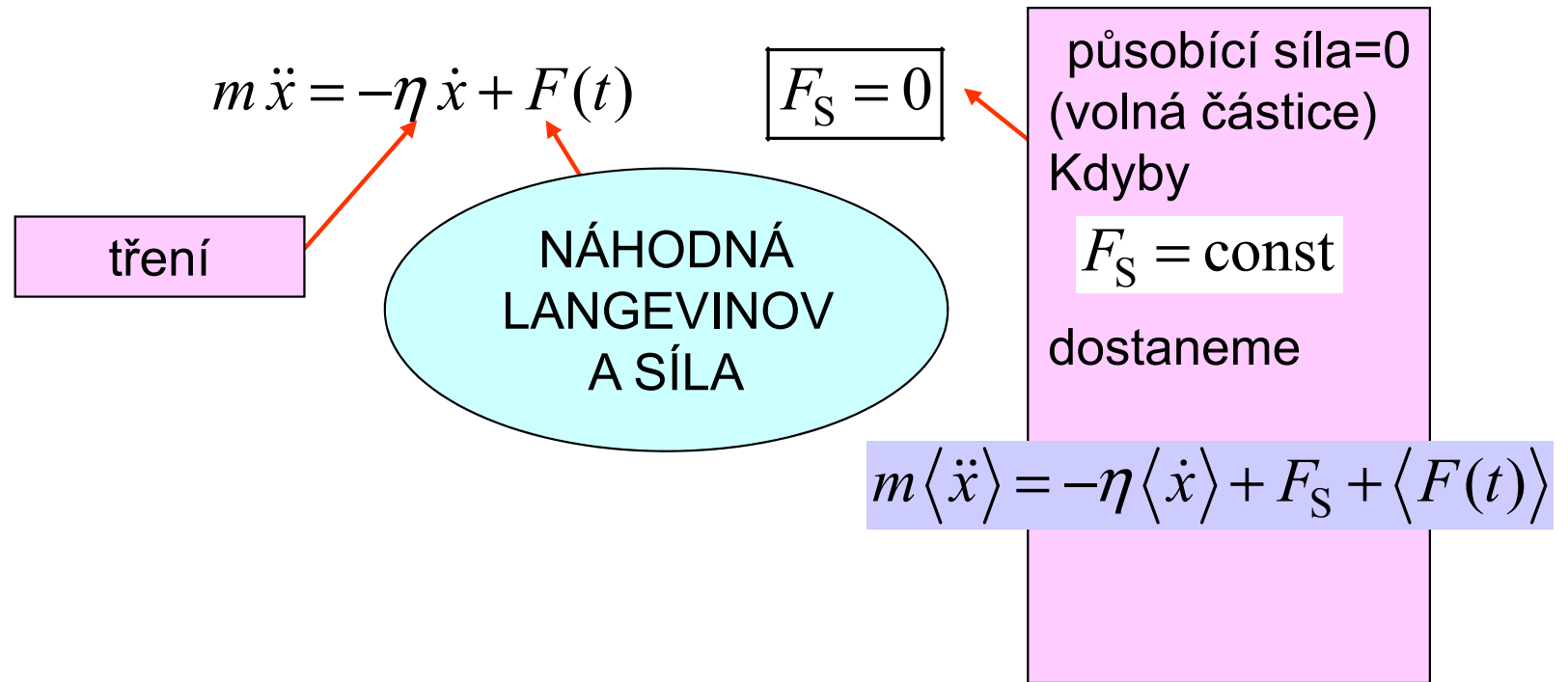
Pro volnou částici ověříme vlastnosti středované  
LR v konstatním silovém poli ... identifikace s  
Newtonovským předpokladem podle Einsteina

Tady se prostě přepočtou ty rámečky a identifikuje  
pohyblivost

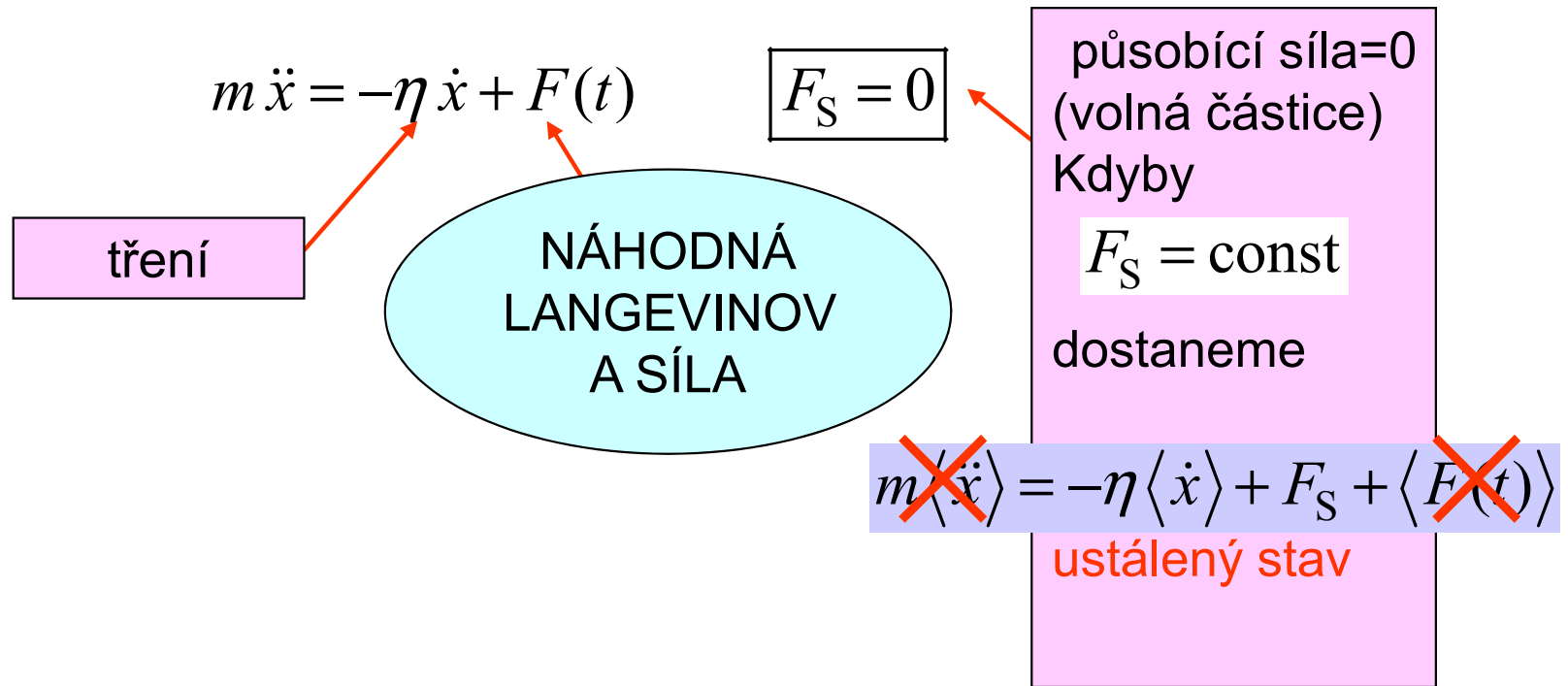
# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



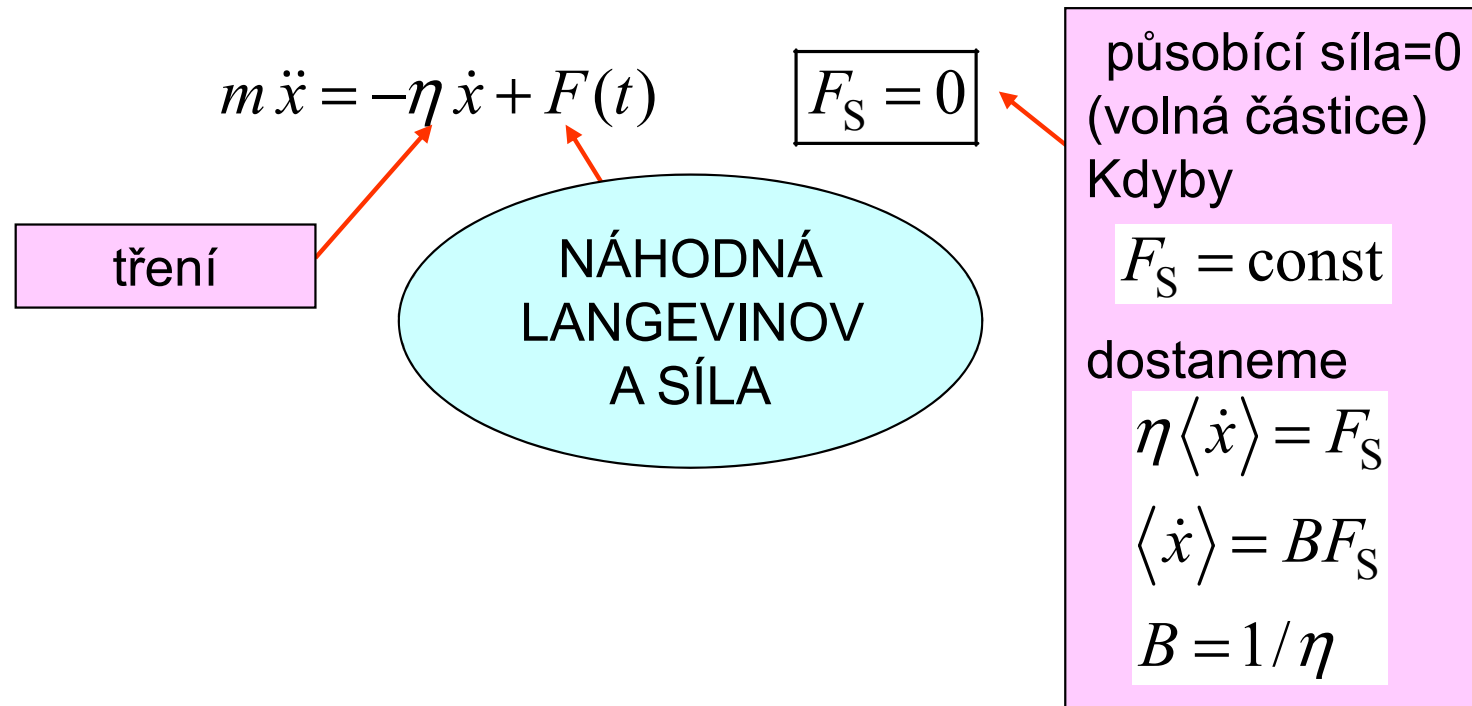
# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



# Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici





## *Langevinova rovnice I.*

Původně použita na volnou Brownovu částici.

Významné pokroky v pochopení.

Difusní řešení je správné v limitě dlouhých časů.

Pro krátké časy se projeví inerciální efekty.

# Langevinovo řešení jeho rovnice pro 1D Brownovu částici

$$\langle x^2 \rangle = 2 \frac{k_B T}{m\gamma} \left( t - \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) \right)$$

VÝSLEDEK

♣ Pro  $t \rightarrow \infty$   $t \gg \tau$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &\rightarrow 2 \frac{k_B T}{m\gamma} \left( t - \frac{1}{\gamma} \right) \\ &\approx 2 \frac{k_B T}{m\gamma} t \end{aligned}$$

$$e^{-\gamma t} \equiv e^{-t/\tau}$$

$$\frac{1}{\gamma} \equiv \tau \quad \text{relaxační doba}$$

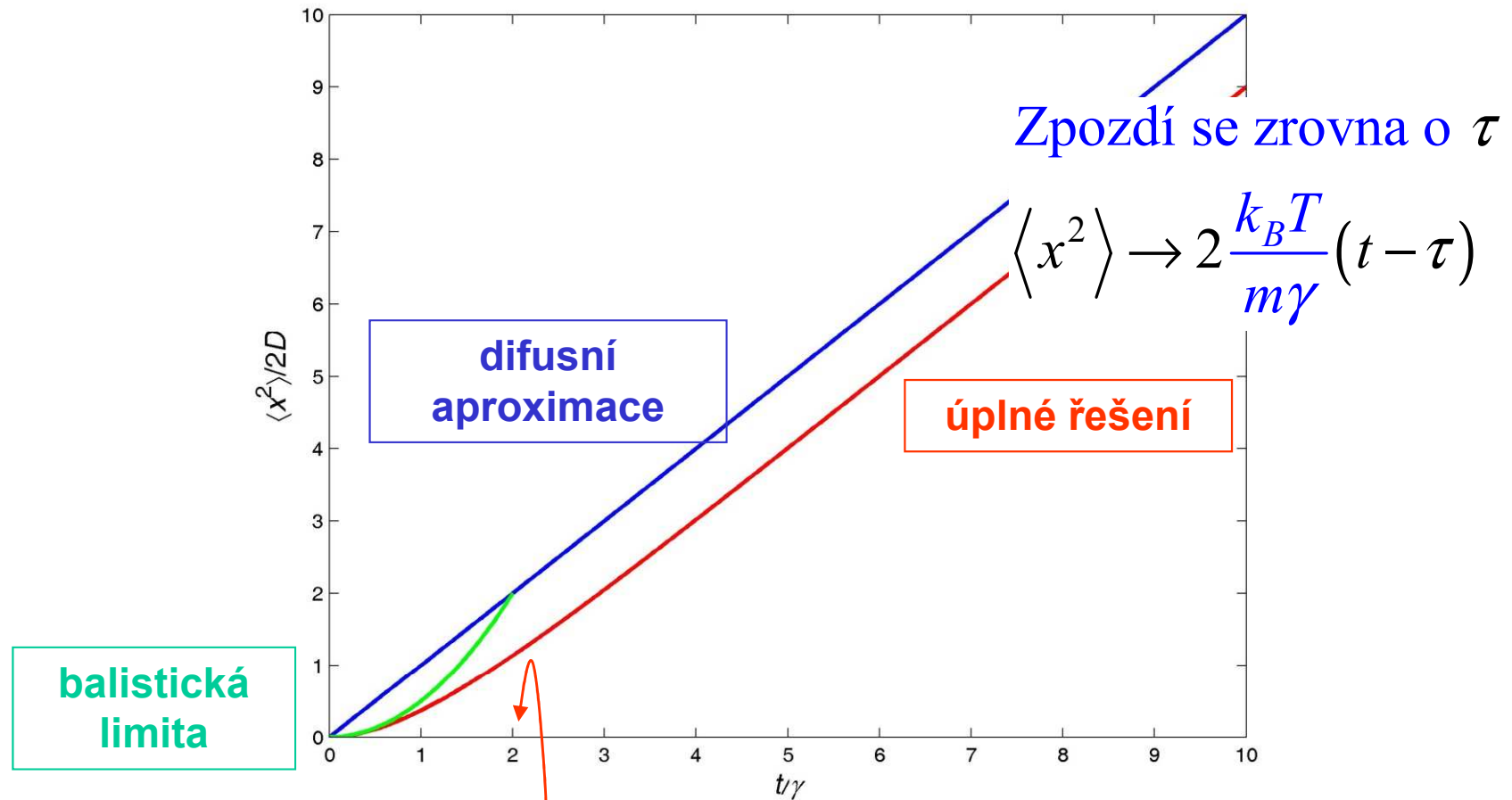
$\Rightarrow$  identifikace  $\frac{k_B T}{m\gamma} \equiv D$  ....  $k_B T \cdot B = D$  EINSTEINŮV VZTAH

♣ Pro  $t \rightarrow 0$   $t \ll \tau$

$$\langle x^2 \rangle = 2 \frac{k_B T}{m\gamma} \left( t - \frac{1}{\gamma} (1 - 1 + \gamma t - \frac{1}{2} \gamma^2 t^2 + \dots) \right) \approx \langle (\dot{x}t)^2 \rangle$$

BALISTICKÝ ROZLET

# Langevinovo řešení jeho rovnice pro 1D Brownovu částici



Balistický rozlet je zpočátku pomalejší, pak ovšem roste kvadraticky i nadále a od  $\tau$  je už mnohem rychlejší.

Crossover u  $\tau$  odpovídá první srážce

## *Langevinova rovnice II.*

Pro lineární oscilátor je řešení pomocí středovacích procedur také možné.

Středovat budeme trajektorii vyjádřenou pomocí Greenovy funkce

Cvičení je věnováno nejprve odvození GF

# Langevinova rovnice pro lineární oscilátor – řešení

Langevinova rovnice pro lineární oscilátor je  
LODR 2. řádu s pravou stranou (... nehomogenní r.)

$$\frac{d^2}{dt^2} x(t) + \gamma \frac{d}{dt} x(t) + \omega_0^2 x(t) = f(t)$$

obecné řešení = obecné řešení homog. rovnice  
+ partikulární řešení nehomog. rovnice

$$x(t) = C_1 \cdot \exp(-\lambda_1 t) + C_2 \cdot \exp(-\lambda_2 t) + \tilde{x}(t)$$

sekulární rovnice  $\lambda^2 - \gamma \cdot \lambda + \omega_0^2 = 0$

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \gamma \pm \sqrt{\frac{1}{4} \gamma^2 - \omega_0^2}$$

kritická hodnota

podtlumené kmity

$$\frac{1}{2} \gamma = \omega_0$$

přetlumené kmity

# Langevinova rovnice – Greenova funkce

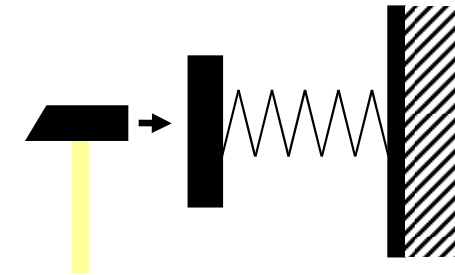
partikulární řešení nehomog. rovnice

hledáme pomocí Greenovy funkce

$$\frac{d^2}{dt^2} G(t, t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t, t') + \omega_0^2 G(t, t') = \delta(t - t')$$

PAK

$$\tilde{x}(t) = \int dt' \cdot G(t, t') \times f(t')$$



pulsní excitace

Ověření:  $LG = \delta$

Proto  $L\tilde{x} = \int dt' LGf = \int dt' \delta \times f = f$

## Langevinova rovnice – stanovení Greenovy funkce

hledáme Greenovu funkci

$$\frac{d^2}{dt^2} G(t, t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t, t') + \omega_0^2 G(t, t') = \delta(t - t')$$

A  $G(t, t') = 0$  pro  $t < t'$

kausalita

B  $\frac{d^2}{dt^2} G(t, t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t, t') + \omega_0^2 G(t, t') = 0$  pro  $t > t'$

C  $\frac{d}{dt} G(t = t' + 0, t') = 1$        $G(t = t' + 0, t') = 0$

okrajové podmínky (sešití při rovných časech)

dostaneme integraci po malém okolí bodu  $t = t'$

# Langevinova rovnice – stanovení Greenovy funkce

hledáme Greenovu funkci

$$\frac{d^2}{dt^2} G(t, t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t, t') + \omega_0^2 G(t, t') = \delta(t - t')$$

A  $G(t, t') = 0$  pro  $t < t'$  kausality

B  $\frac{d^2}{dt^2} G(t, t') + \gamma \frac{d}{dt} G(t, t') + \omega_0^2 G(t, t') = 0$  pro  $t > t'$

C  $\frac{d}{dt} G(t = t' + 0, t') = 1$   $G(t = t' + 0, t') = 0$

okrajové podmínky (sešití při rovných časech)

dostaneme integraci po malém okolí bodu  $t = t'$

$$\int_{t'-\varepsilon}^{t'+\varepsilon} dt \frac{d^2}{dt^2} G(t, t') + \gamma \int_{t'-\varepsilon}^{t'+\varepsilon} dt \frac{d}{dt} G(t, t') + \omega_0^2 \int_{t'-\varepsilon}^{t'+\varepsilon} dt G(t, t') = \int_{t'-\varepsilon}^{t'+\varepsilon} dt \delta(t - t')$$

$\frac{d}{dt} G(t'+0, t')$ 
 $G(t'+0, t') - 0$ 
 $\rightarrow 0|_{\varepsilon \rightarrow 0}$ 
 $1$



## *Shrnutí: výsledné formální řešení pro oscilátor*

$$x(0) = x_0, \quad \dot{x}(0) = v_0$$

$$x(t) = C_1 \cdot \exp(-\lambda_1 t) + C_2 \cdot \exp(-\lambda_2 t) + \tilde{x}(t)$$

$$\tilde{x}(t) = \int_0^t dt' G(t-t') f(t')$$

formální řešení

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \gamma \pm \sqrt{\frac{1}{4} \gamma^2 - \omega_0^2}$$

$$G(t-t') = -\frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \left\{ \exp(-\lambda_1 (t-t')) - \exp(-\lambda_2 (t-t')) \right\} \cdot \vartheta(t-t')$$

$$\langle f(t) f(t') \rangle = 2\Gamma \delta(t-t') \quad \frac{\Gamma}{\gamma} = \frac{k_B T}{m}$$

Bílý šum

Bylo odvozeno pomocí  
ekvipartičního zákona

## *Langevinova rovnice I. & II.*

Volnou Brownovu částici budeme chápat jako lineární oscilátor s frekvencí konvergující k nule.

Najdeme trajektorii vyjádřenou pomocí Greenovy funkce.

Pak znovuodvodíme Langevinovu formuli explicitním středováním  $\langle x^2(t) \rangle$

# Limita volné částice z řešení pro oscilátor

$$x(0) = x_0, \quad \dot{x}(0) = v_0 \quad \text{počáteční podmínka}$$

$$x(t) = C_1 \cdot \exp(-\lambda_1 t) + C_2 \cdot \exp(-\lambda_2 t) + \tilde{x}(t)$$

$$\tilde{x}(t) = \int_0^t dt' G(t-t') f(t')$$

formální řešení v  
obecném tvaru zůstává

$$\langle f(t) f(t') \rangle = 2\Gamma \delta(t-t') \quad \frac{\Gamma}{\gamma} = \frac{k_B T}{m}$$

Taktéž beze změny,  
nezávisí na  $\omega_0$

Bílý šum

Bylo odvozeno pomocí  
ekvipartičního zákona

$$\lambda_{1,2} = \begin{cases} \gamma \\ 0 \end{cases} \quad \underline{\underline{\text{LIMITA}}} \quad \omega_0 \rightarrow 0+0$$

$$G(t-t') = \frac{1}{\gamma} \{1 - \exp(-\lambda(t-t'))\} \cdot \vartheta(t-t')$$

K úvaze: při dlouhých časech  
netriviální záměna pořadí limit

$$t \rightarrow \infty \quad \text{a} \quad \omega_0 \rightarrow 0$$

## Započtení počátečních podmínek

$$\begin{aligned}x(0) &= x_0, & \dot{x}(0) &= v_0 \\x(t) &= C_1 \cdot \exp(-\lambda t) + C_2 + \tilde{x}(t) \\ \tilde{x}(t) &= \int_0^t dt' G(t-t') f(t')\end{aligned}$$

nejprve ukážeme (trochu nepřesně)

$$\tilde{x}(0) = 0, \quad \frac{d}{dt} \tilde{x}(0) = 0$$

pak snadno dostaneme

$$\left. \begin{aligned}x(t) &= x_0 + v_0 \times G(t-0) + \tilde{x}(t) \\ \tilde{x}(t) &= \int_0^t dt' G(t-t') f(t')\end{aligned} \right\} t > 0$$

$$G(t-t') = \frac{1}{\gamma} \{1 - e^{-\lambda(t-t')}\} \vartheta(t-t')$$

# Střední kvadratická odchylka polohy

Zapišeme hodně symbolicky

$$\langle x^2(t) \rangle = \langle (x_0 + Gv_0 + \int dt' Gf)(x_0 + Gv_0 + \int dt'' Gf) \rangle$$

$$= \langle x_0^2 \rangle + G^2 \langle v_0^2 \rangle + \iint dt' dt'' GG \langle ff \rangle \quad \text{záleží na způsobu preparace}$$

$$+ 2G \langle x_0 v_0 \rangle + 2 \int dt' G \langle x_0 f \rangle + 2G \int dt' G \langle v_0 f \rangle \quad \text{samé nuly: nezávislé náhodné proměnné}$$

My volíme  $\langle x_0^2 \rangle = 0$  (přesná bodová injekce),  $\langle v_0^2 \rangle = \frac{k_B T}{m}$  (injekční doba makroskopická)

samozřejmě  $\langle f(t) f(t') \rangle = 2 \frac{k_B T}{m} \gamma \delta(t - t')$

$$\iint dt' dt'' GG \langle ff \rangle = 2 \frac{k_B T}{m} \gamma \int_0^t dt' G^2(t-t')$$

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{k_B T}{m \gamma^2} (1 - \epsilon)^2 + 2 \frac{k_B T}{m \gamma} \left[ t + \frac{2}{\gamma} (\epsilon - 1) - \frac{1}{2\gamma} (\epsilon^2 - 1) \right] \quad \boxed{\epsilon = e^{-\lambda t}}$$

$$\langle x^2(t) \rangle = 2 \frac{k_B T}{m \gamma} \left[ t - \frac{1}{\gamma} (1 - \epsilon) \right] \quad \dots \text{přesně Langevinův výsledek}$$

*The end*