

F4110
Kvantová fyzika atomárních soustav
letní semestr 2013 - 2014

III.
Tepelné fluktuace: lineární oscilátor
Cvičení

KOTLÁŘSKÁ 12. BŘEZNA 2014

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

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

Odhad z relace neurčitosti

To je standard, takže jen schematicky

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

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

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

$$= \frac{1}{2m} (\Delta p)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{1}{4} \hbar^2 (\Delta p)^{-2} \quad \text{z relace neurč. pro rovnost}$$

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

Z podmínky

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

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

Energie nulových kmitů podle očekávání

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

Souboj kvantových a termických fluktuací

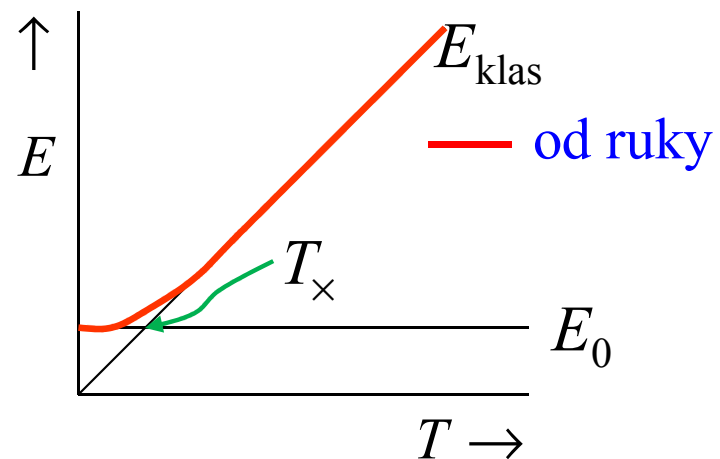
Tady opět **bez počítání**:

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

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

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

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



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

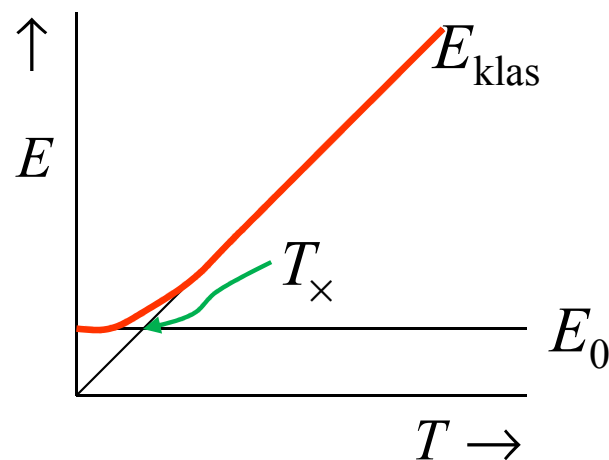
$$E_{\text{klas}} = k_B T \quad \text{asymptota vysokých teplot}$$

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

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

Přesný vzorec (červeně) má ty dvě asymptoty

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



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

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

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

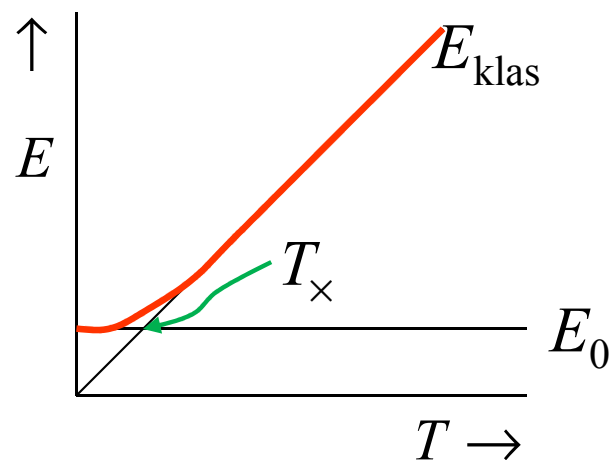
$$T_{\times} = \frac{\hbar \omega}{2k_B} \quad \text{crossover}$$

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 Ω



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 $dx = 2$ mm. a) Atmosphärendruck. Temperatur 15° 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 $dx = 2$ mm. b) $4 \cdot 10^{-3}$ mm Hg. Temperatur 10° C

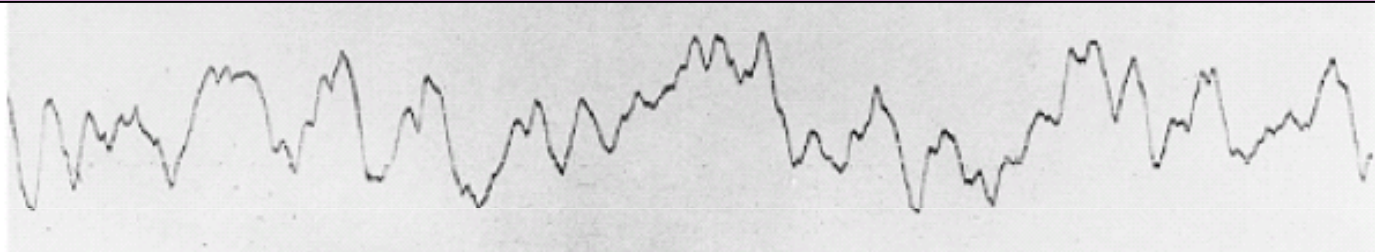
Fig. 4b

Z těchto Kapplerových měření odhadneme ω

ANALOGIE LINEÁRNÍ vs. TORSNÍ OSCILÁTOR

$$\begin{array}{l}
 x \leftrightarrow \varphi \\
 p \leftrightarrow L \\
 m \leftrightarrow J \\
 k \leftrightarrow D
 \end{array}
 \quad
 \Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar \quad \leftrightarrow \quad \Delta \varphi \cdot \Delta L \geq \frac{1}{2} \hbar$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \leftrightarrow \quad \omega = \sqrt{\frac{D}{J}}$$



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° C

Fig. 4b

Z těchto Kapplerových měření odhadneme Ω



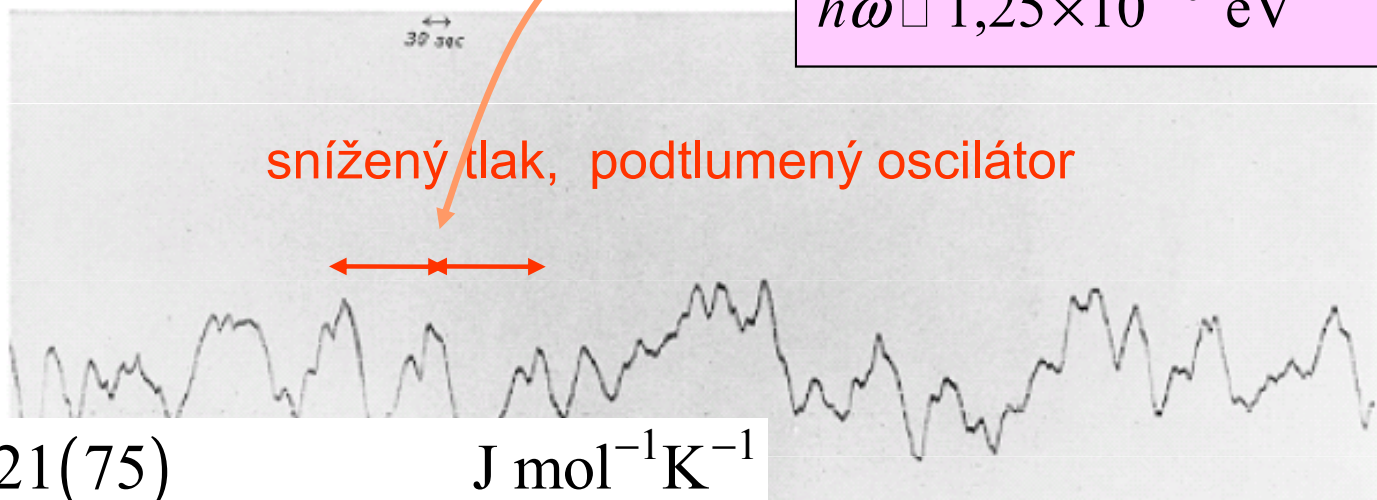
Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung
 Direktionskraft $2,66 \cdot 10^{-9}$ abs. Einh. Trägheitsmoment $6,1$
 Zeitmarke: 30 sec $d \omega = 2$ mm a) Atmosphä
 Fig. 4a

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

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

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

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



snížený tlak, podtlumený oscilátor

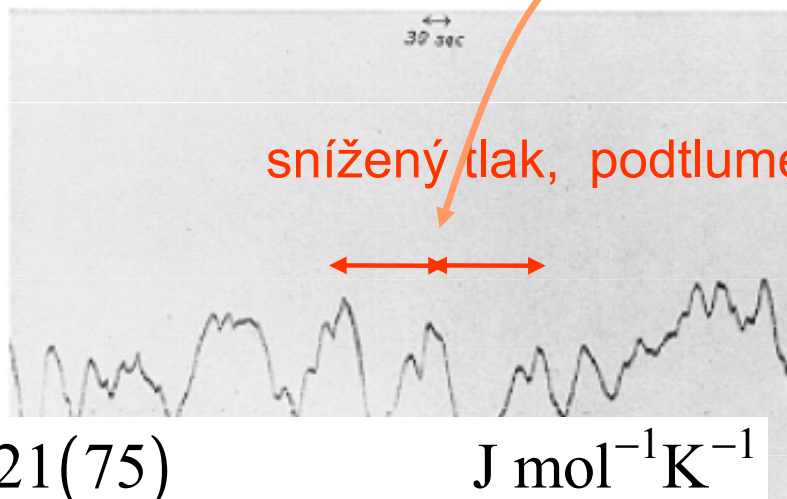
R	8.314 4621(75)	$\text{J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$
k_B	$1.380 6488(13) \times 10^{-23}$	J K^{-1}
N_A	$6.022 141 29(27) \times 10^{23}$	mol^{-1}

regung (natürliche Größe).
 ω abs. Einh. Abstand Spiegel-Kamera: 86,5 cm.
 mm Hg. Temperatur 10°C

Z těchto Kapplerových měření odhadneme ω



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



snížený tlak, podtlumení

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

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

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

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

$$T_x = \frac{\hbar\omega}{2k_B} = 0,625 \times 10^{-16} \cdot 11600$$

$$= 7,25 \times 10^{-13} \text{ K}$$

R	8.314 4621(75)	$\text{J mol}^{-1}\text{K}^{-1}$
k_B	$1.380 6488(13) \times 10^{-23}$	J K^{-1}
N_A	$6.022 141 29(27) \times 10^{23}$	mol^{-1}

regung (natürliche Größe).
 ω abs. Einh. Abstand Spiegel-Kamera: 86,5 cm.
 mm Hg. Temperatur 10°C

Z těchto Kapplerových měření odhadneme Ω

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° C
Fig. 4a

snížený tlak, podtlumený oscilátor

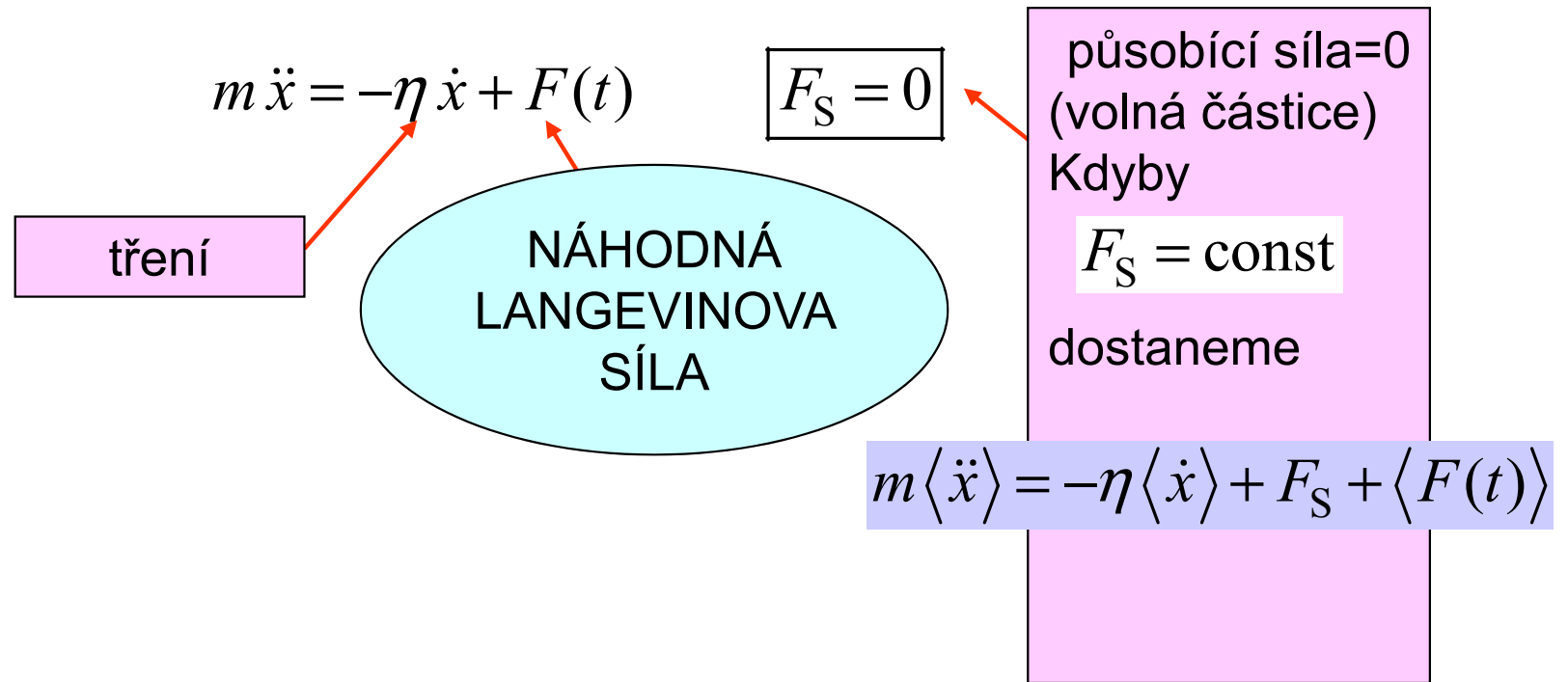
Registrieraufnahme der Brownschen Bewegung (natürliche Größe).
Direktionskraft $2,66 \cdot 10^{-9}$ abs. Einh. Trägheitsmoment $6,1 \cdot 10^{-6}$ abs. Einh. Abstand Spiegel-Kamera: 86,5 cm.
Zeitmarke: 30 sec $d x = 2$ mm. b) $4 \cdot 10^{-3}$ mm Hg. Temperatur 10° C
Fig. 4b

Langevinova rovnice

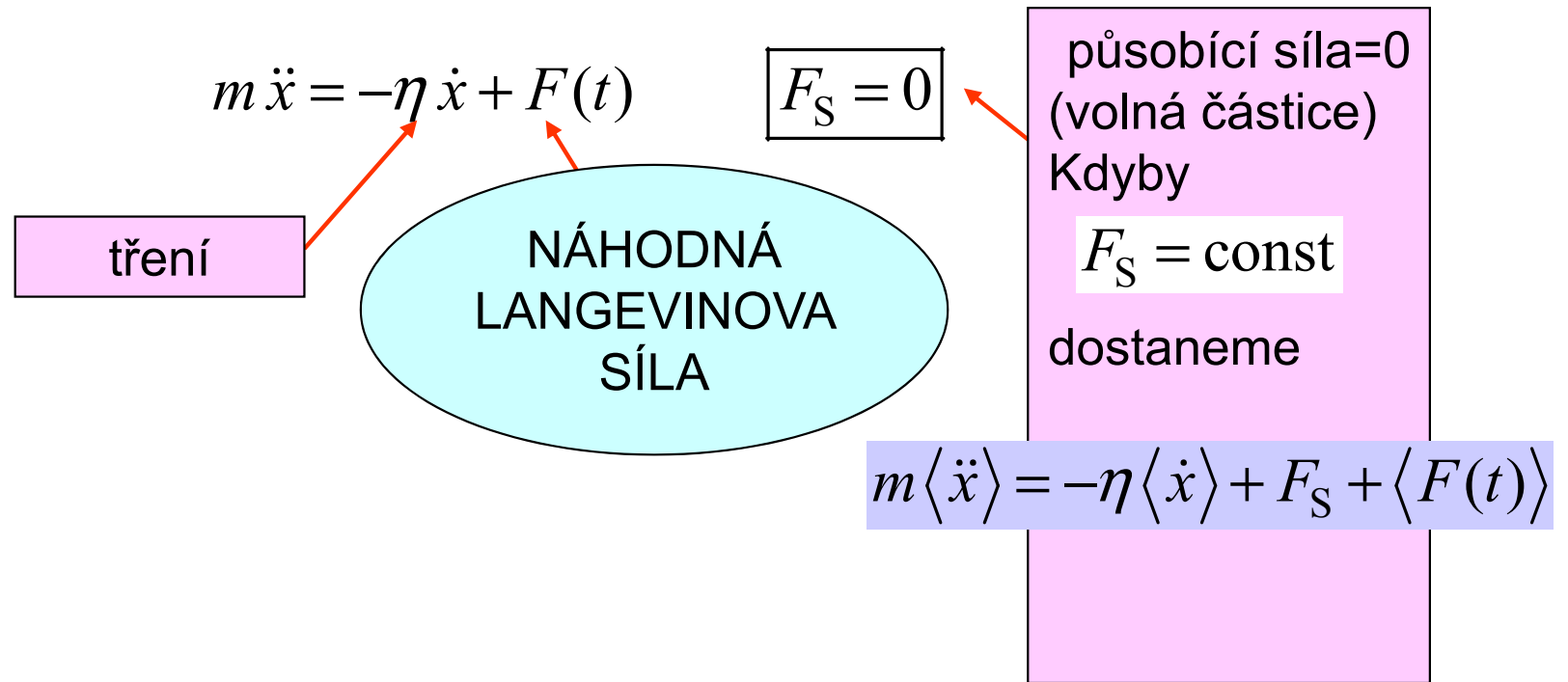
Pro volnou částici ověříme vlastnosti středované
LR v konstatním silovém poli ... identifikace s
Newtonovským předpokladem podle Einsteina

Tady se prostě přepočtou ty rámečky a identifikuje
pohyblivost

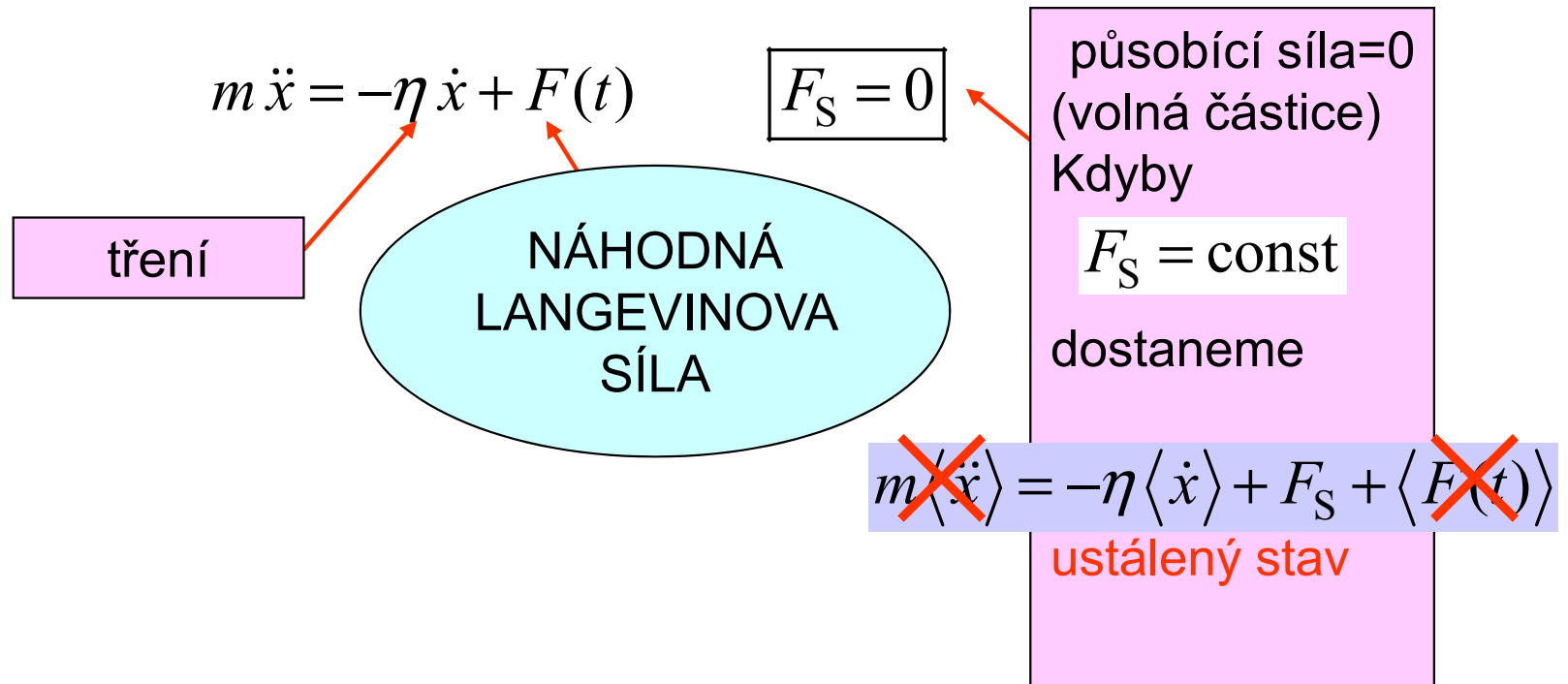
Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



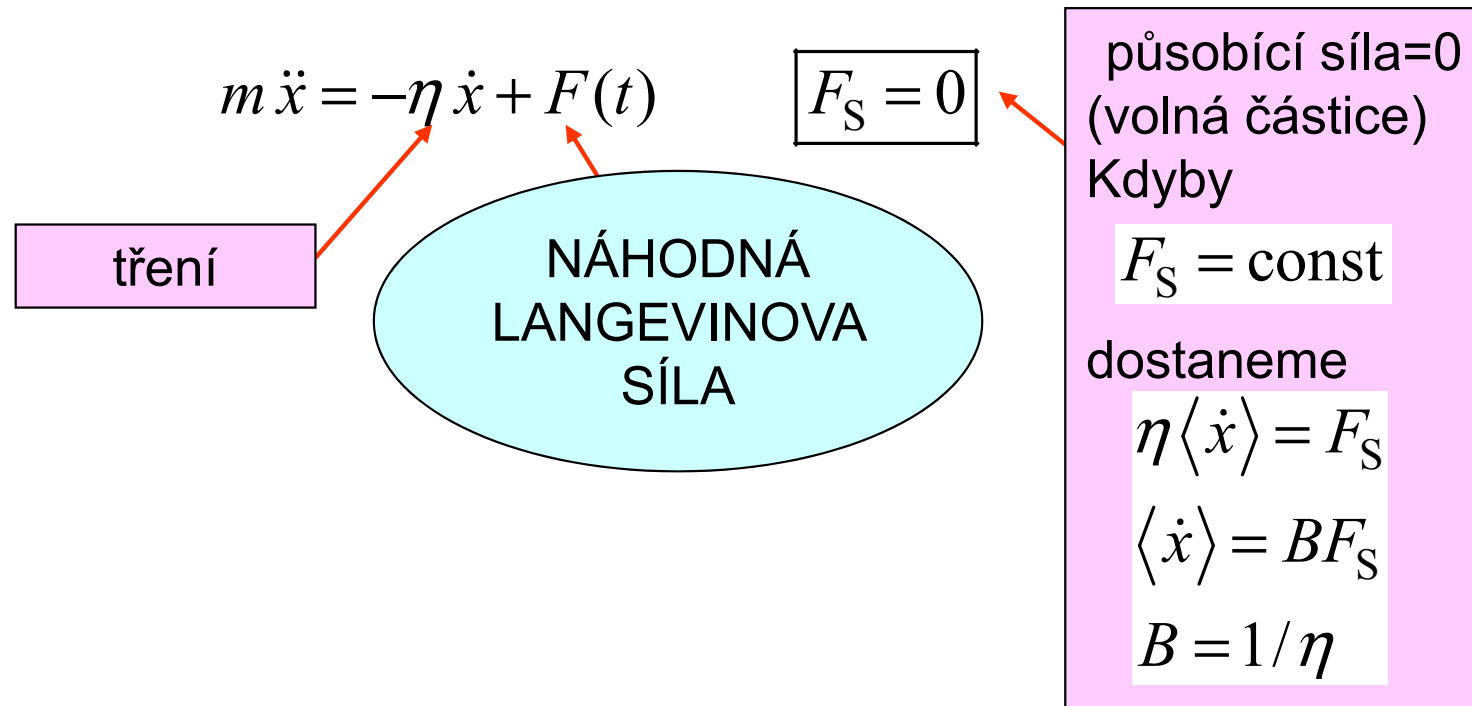
Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



Langevinova rovnice pro 1D Brownovu částici



Langevinova rovnice I.

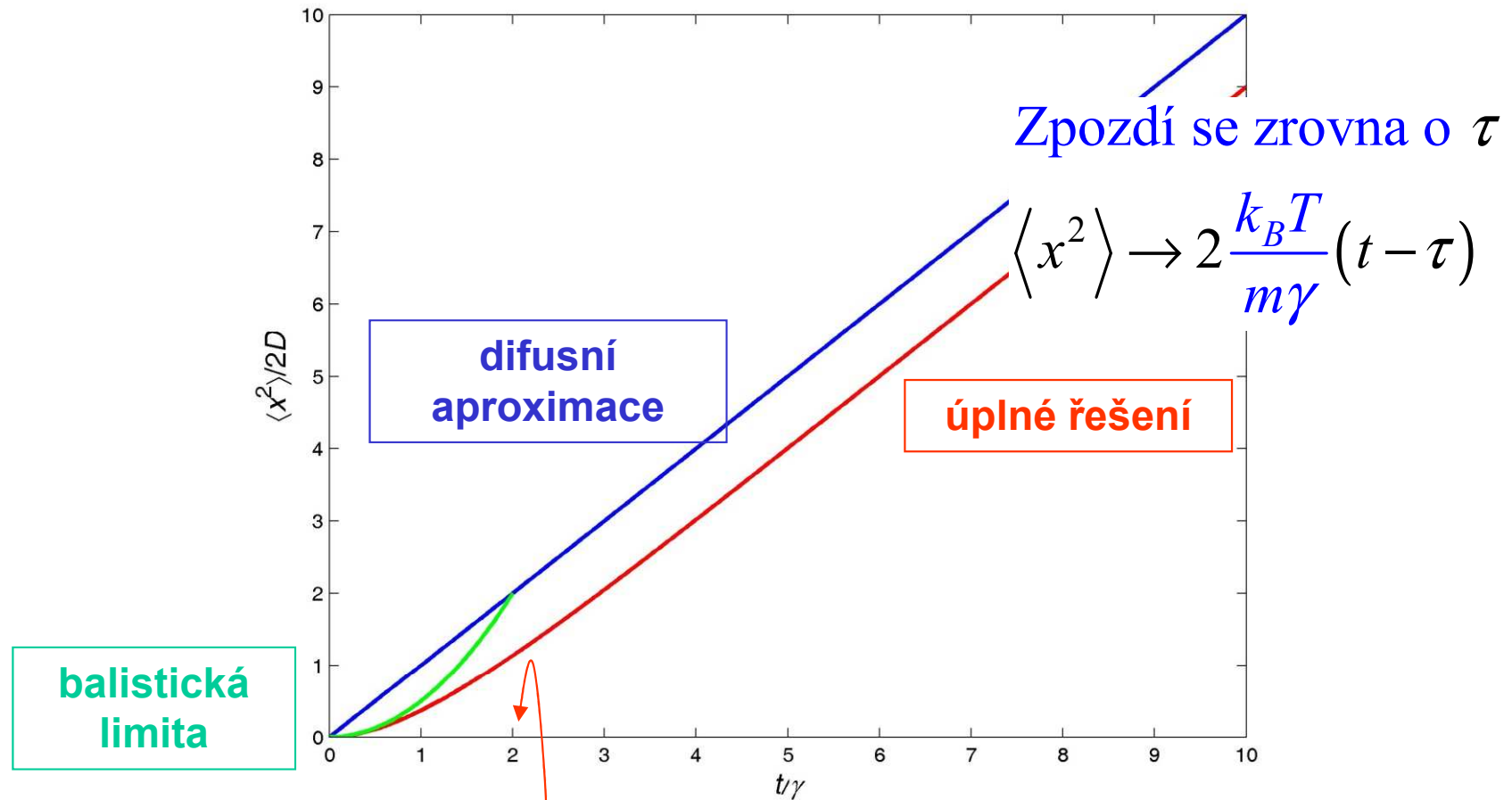
Původně použita na volnou Brownovu částici.

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



Balistický rozlet je zpočátku pomalejší, pak ovšem roste kvadraticky i nadále a od $t = 2\tau$ je už mnohem rychlejší.

Crossover u τ odpovídá první srážce

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

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

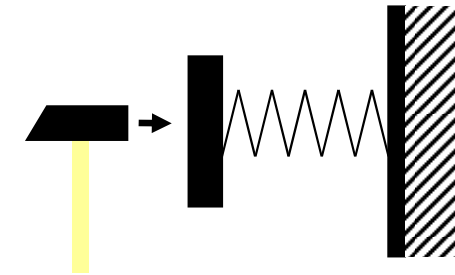
partikulární řešení nehomog. rovnice

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

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

Bílý šum

Bylo odvozeno pomocí
ekvipartičního zákona

Taktéž beze změny,
nezávisí na ω_0

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

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

K úvaze: při dlouhých časech
netriviální záměna pořadí limit

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

Započtení počátečních podmínek

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

nejprve ukážeme (trochu nepřesně)

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

pak snadno dostaneme

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

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

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

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

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

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

The end