



УНИВЕРЗИТЕТ У НИШУ  
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ  
ДЕПАРТМАН ЗА ФИЗИКУ



**Игор С. Петровић**

**УЛОГА ВЕЛИЧИНЕ И ОБЛИКА  
МОЛЕКУЛСКИХ ПРОПЕЛЕРА У  
ЊИХОВОЈ ДИНАМИЧКОЈ СТАБИЛНОСТИ  
У МОДЕЛУ КВАНТНОГ БРАУНОВОГ  
РОТАТОРА**

ДОКТОРСКА ДИСЕРТАЦИЈА

Ниш, 2021.



UNIVERSITY OF NIŠ  
FACULTY OF SCIENCES AND MATHEMATICS  
DEPARTMENT OF PHYSICS



**Igor S. Petrović**

**THE ROLE OF SIZE AND SHAPE OF  
MOLECULAR PROPELLERS IN THEIR  
DYNAMIC STABILITY IN A QUANTUM  
BROWN ROTATOR MODEL**

DOCTORAL DISSERTATION

Niš, 2021.

## Подаци о докторској дисертацији


Ментор:	др Јасмина Јекнић-Дугић, ванредни професор, Природно-математички факултет, Универзитет у Нишу
Наслов:	Улога величине и облика молекулских пропелера у њиховој динамичкој стабилности у моделу квантног Брауновог ротатора
Резиме:	Предмет истраживања ове докторске дисертације је ротациона динамика молекула специфичног облика, такозваних молекулских пропелера. Главни задатак дисертације је разматрање утицаја величине и облика поменутих молекула на њихову динамичку стабилност. Коришћени модел се заснива на примени теорије отворених квантних система и мастер једначине Калдеире и Легета, као квантног модела Брауновог кретања. Величина молекулских пропелера је уведена у модел кроз зависност момента инерције и јачине интеракције са окружењем од броја лопатица. Динамичка стабилност се испитује анализом стандардних одступања угла и момента импулса и методом квантног времена првог пролаза. Добијени резултати указују на строгу и сложену зависност динамичке стабилности од броја лопатица, температуре и јачине интеракције са окружењем. Резултати такође показују да за постизање жељеног нивоа динамичке стабилности није могуће примењивати једноставна правила већ је неопходна комбинације различитих критеријума стабилности и поступак сличан инжењерској оптимизацији.
Научна област:	Физика
Научна дисциплина:	Квантна механика
Кључне речи:	Брауново кретање, декохеренција, отворени квантни системи, прелаз из квантног у класично, утицај величине и облика, динамичка стабилност молекулских пропелера
УДК:	539.194
CERIF класификација:	P 190
Тип лиценце Креативне заједнице:	CC BY-NC-ND

## Data on Doctoral Dissertation

Doctoral Supervisor:	Jasmina Jeknić-Dugić , Associate professor, Faculty of Sciences and Mathematics, University of Niš
Title:	The role of size and shape of molecular propellers in their dynamic stability in a quantum Brown rotator model
Abstract:	<p>The subject of this doctoral dissertation research is the rotational dynamics of molecules of a specific shape, the so-called molecular propellers. The main task of the dissertation is to consider the influence of the size and shape of the mentioned molecules upon their dynamic stability. The model used is based on the application of the theory of open quantum systems and the master equations of Caldeira and Leget, as a quantum model of Brownian motion. The size of molecular propellers was introduced into the model through the dependence of the moment of inertia and the strength of the interaction with the environment on the number of blades. Dynamic stability is examined by analysis of standard deviations of the angle and momentum and by the method of quantum first time passage. The obtained results indicate a strict and complex dependence of dynamic stability on the number of blades, temperature and strength of interaction with the environment. The results also show that to achieve the desired level of dynamic stability, it is not possible to apply simple rules but a combination of different stability criteria and a procedure similar to engineering optimization is necessary.</p>
Scientific Field:	Physics
Scientific Discipline:	Quantum mechanics
Key Words:	Brownian motion, decoherence, open quantum systems, transition from quantum to classical, influence of size and shape, dynamic stability of molecular propellers
UDC:	539.194
CERIF Classification:	P 190
Creative Commons License Type:	<b>CC BY-NC-ND</b>

	<b>ПРИРОДНО - МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ НИШ</b>
<b>КЉУЧНА ДОКУМЕНТАЦИЈСКА ИНФОРМАЦИЈА</b>	
Редни број, <b>РБР:</b>	
Идентификациони број, <b>ИБР:</b>	
Тип документације, <b>ТД:</b>	монографска
Тип записа, <b>ТЗ:</b>	текстуални / графички
Врста рада, <b>ВР:</b>	докторска дисертација
Аутор, <b>АУ:</b>	Игор С. Петровић
Ментор, <b>МН:</b>	Јасмина Јекнић-Дугић
Наслов рада, <b>НР:</b>	УЛОГА ВЕЛИЧИНЕ И ОБЛИКА МОЛЕКУЛСКИХ ПРОПЕЛЕРА У ЊИХОВОЈ ДИНАМИЧКОЈ СТАБИЛНОСТИ У МОДЕЛУ КВАНТНОГ БРАУНОВОГ РОТАТОРА
Језик публикације, <b>ЈП:</b>	српски
Језик извода, <b>ЈИ:</b>	енглески
Земља публиковања, <b>ЗП:</b>	Србија
Уже географско подручје, <b>УГП:</b>	Србија
Година, <b>ГО:</b>	2021.
Издавач, <b>ИЗ:</b>	ауторски репринт
Место и адреса, <b>МА:</b>	Ниш, Вишеградска 33.
Физички опис рада, <b>ФО:</b> <small>(поглавља/страна/цигата/табела/слика/графика/прилога)</small>	214 стр., граф. прикази
Научна област, <b>НО:</b>	физика
Научна дисциплина, <b>НД:</b>	квантна физика
Предметна одредница/Кључне речи, <b>ПО:</b>	Брауново кретање, декохеренција, отворени квантни системи, прелаз из квантног у класично, утицај величине и облика, динамичка стабилност молекулских пропелера
<b>УДК</b>	539.194
Чува се, <b>ЧУ:</b>	библиотека
Важна напомена, <b>ВН:</b>	/

Извод, <b>ИЗ:</b>	<p>Предмет истраживања ове докторске дисертације је ротациона динамика молекула специфичног облика, такозваних молекулских пропелера. Главни задатак дисертације је разматрање утицаја величине и облика поменутих молекула на њихову динамичку стабилност. Коришћени модел се заснива на примени теорије отворених квантних система и мастер једначине Калдеире и Легета, као квантног модела Брауновог кретања. Величина молекулских пропелера је уведена у модел кроз зависност момента инерције и јачине интеракције са окружењем од броја лопатица. Динамичка стабилност се испитује анализом стандардних одступања угла и момента импулса и методом квантног времена првог пролаза. Добијени резултати указују на строгу и сложену зависност динамичке стабилности од броја лопатица, температуре и јачине интеракције са окружењем. Резултати такође показују да за постизање жељеног нивоа динамичке стабилности није могуће примењивати једноставна правила већ је неопходна комбинације различитих критеријума стабилности и поступак сличан инжењерској оптимизацији.</p>				
Датум прихватања теме, <b>ДП:</b>	29.06.2020				
Датум одбране, <b>ДО:</b> Чланови комисије, <b>КО:</b>	<table border="0"> <tr> <td data-bbox="511 1144 690 1186">Председник:</td> <td data-bbox="722 1123 755 1249" rowspan="3" style="font-size: 4em; vertical-align: middle;">}</td> </tr> <tr> <td data-bbox="511 1186 690 1228">Члан:</td> </tr> <tr> <td data-bbox="511 1228 690 1264">Члан, ментор:</td> </tr> </table>	Председник:	}	Члан:	Члан, ментор:
Председник:	}				
Члан:					
Члан, ментор:					

	<b>ПРИРОДНО - МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ НИШ</b>
<b>KEY WORDS DOCUMENTATION</b>	
Accession number, <b>ANO</b> :	
Identification number, <b>INO</b> :	
Document type, <b>DT</b> :	monograph
Type of record, <b>TR</b> :	textual / graphic
Contents code, <b>CC</b> :	doctoral dissertation
Author, <b>AU</b> :	Igor S. Petrović
Mentor, <b>MN</b> :	Jasmina Jeknić-Dugić
Title, <b>TI</b> :	<b>THE ROLE OF SIZE AND SHAPE OF MOLECULAR PROPELLERS IN THEIR DYNAMIC STABILITY IN A QUANTUM BROWN ROTATOR MODEL</b>
Language of text, <b>LT</b> :	Serbian
Language of abstract, <b>LA</b> :	English
Country of publication, <b>CP</b> :	Serbia
Locality of publication, <b>LP</b> :	Serbia
Publication year, <b>PY</b> :	2021.
Publisher, <b>PB</b> :	author's reprint
Publication place, <b>PP</b> :	Niš, Višegradska 33.
Physical description, <b>PD</b> : <small>(chapters/pages/ref./tables/pictures/graphs/appendixes)</small>	214 p. ; graphic representations
Scientific field, <b>SF</b> :	physics
Scientific discipline, <b>SD</b> :	quantum mechanics
Subject/Key words, <b>S/KW</b> :	Brownian motion, decoherence, open quantum systems, transition from quantum to classical, influence of size and shape, dynamic stability of molecular propellers
<b>UC</b>	539.194
Holding data, <b>HD</b> :	library
Note, <b>N</b> :	

Abstract, <b>AB</b> :	<p>The subject of this doctoral dissertation research is the rotational dynamics of molecules of a specific shape, the so-called molecular propellers. The main task of the dissertation is to consider the influence of the size and shape of the mentioned molecules upon their dynamic stability. The model used is based on the application of the theory of open quantum systems and the master equations of Caldeira and Leget, as a quantum model of Brownian motion. The size of molecular propellers was introduced into the model through the dependence of the moment of inertia and the strength of the interaction with the environment on the number of blades. Dynamic stability is examined by analysis of standard deviations of the angle and momentum and by the method of quantum first time passage. The obtained results indicate a strict and complex dependence of dynamic stability on the number of blades, temperature and strength of interaction with the environment. The results also show that to achieve the desired level of dynamic stability, it is not possible to apply simple rules but a combination of different stability criteria and a procedure similar to engineering optimization is necessary.</p>						
Accepted by the Scientific Board on, <b>ASB</b> :	29.06.2020						
Defended on, <b>DE</b> :							
Defended Board, <b>DB</b> :	<table border="0" style="width: 100%;"> <tr> <td style="width: 20px;">President:</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Member:</td> <td></td> </tr> <tr> <td>Member, Mentor:</td> <td></td> </tr> </table>	President:		Member:		Member, Mentor:	
President:							
Member:							
Member, Mentor:							



*Најлепше се захваљујем ментору, професорки др Јасмини Јекнић-Дугић на предлогу теме и несебичној и свесрдној помоћи у изради докторске дисертације.*

*Захваљујем се професору др Миролубу Дугићу на корисним предлозима и саветима приликом израде докторске дисертације.*

*Захваљујем се др Миролубу Арсенијевићу и професорима др Горану Ђорђевићу, др Љубиши Нешићу и др Милану Пантићу на корисним сугестијама.*

*Захваљујем се својој породици на подршци, стрпљењу и разумевању у току докторских студија.*

## Садржај

Предговор.....	11
1. Увод.....	12
2. Молекулски ротатори и пропелери.....	22
3. Елементи теорије отворених квантних система.....	39
4. Елементи квантне теорије декохеренције и проблем преласка из квантног у класични свет.....	52
5. Модел Калдеире-Легета.....	61
6. Модел утицаја величине молекулских пропелера на њихову динамичку стабилност.....	74
7. Слободни ротатор.....	84
8. Хармонијски ротатор.....	97
9. Слабо нехармонијски ротатор.....	111
10. Дискусија.....	136
11. Закључак.....	145
Додатак 1.....	147
Додатак 2.....	157
Додатак 3.....	177
Додатак 4.....	187
Литература.....	207

## Предговор

У овом раду се примењује теорија отворених квантних система на разматрање ротационе динамике једне специфичне и интересантне врсте молекула, такозваних молекулских пропелера. Проучавање динамике ових молекула има и велики теоријски и велики практични значај. Главни задатак дисертације је разматрање утицаја величине и облика поменутих молекула на њихову динамичку стабилност.

Дисертација се састоји из једанаест поглавља и четири додатка. У првом, уводном поглављу, излаже се мотивација истраживања и разматрање избора модела и метода који се користе у раду. Друго поглавље обрађује молекулске ротаторе и молекулске пропелере, при чему је доста простора посвећено опису класичног приступа, који се у литератури најчешће и користи за проучавање молекулских ротатора. Треће поглавље даје приказ најважнијих елемената теорије отворених квантних система, а четврто приказ основних појмова квантне теорије декохеренције. Пето поглавље даје приказ модела Калдеире и Легета, квантног модела Брауновог кретања, као основног модела који се користи у овом раду. Шесто поглавље садржи опис модела и метода који се користе у овом раду, у оквиру чега се, између осталог, описује и начин на који се уводи величина молекулских пропелера у модел. У седмом, осмом и деветом поглављу се излажу добијени резултати за случај слободног, хармонијског и слабо нехармонијског ротатора, док су следећа два поглавља посвећена дискусији и закључку. У пратећим додацима су изложена математичка извођења, поступак решавања добијених система једначина и изворни кодови програма који су коришћени за нумеричка израчунавања.

## 1. Увод

Пре него што се крене са проучавањем, односно моделовањем, неког физичког система најпре је потребно одабрати одговарајући приступ, односно одговарајући метод. При томе је уобичајено да се на основу величине физичког система, односно његових просторних димензија, бира класични или квантни приступ, при чему се, најчешће, подразумева да макроскопске физичке системе треба моделовати класичним, а микроскопске физичке системе квантномеханичким приступом. Овде се могу поставити два питања: да ли је могуће само на основу величине физичког система одредити да ли је потребан класични или квантномеханички опис, и ако јесте, која је гранична величина физичког система која то одређује? Колико физички систем треба да буде велики да би класични приступ био применљив, односно, колико физички систем треба да буде мали, да би квантномеханички приступ био обавезан? Ово разматрање оправданости квантномеханичког или класичног приступа је блиско повезано са проблемом преласка из квантног у класични свет, као и са проблемом мерења, који је један од највећих концепцијских проблема квантне механике (Giulini et al 1996). Ако су закони квантне механике универзално важећи зашто се онда појаве на макроскопском плану не повинују тим законима, као што је то случај са микроскопским појавама? Зашто приликом мерења добијамо резултате који показују да се физички системи налазе у појединачним стањима, а не добијамо резултате који показују да се физички системи налазе у суперпозицији више различитих стања (Giulini et al 1996)? Зашто на макроскопском плану немамо испољавање принципа суперпозиције, односно зашто не опажамо појаве као што је, на пример, Шредингерова мачка, описана у чувеном мисаоном експерименту? Зашто макроскопски физички системи немају ни једно од карактеристичних квантних својстава које имају атоми и молекули од којих се састоје? Зашто би се нека својства (или чак важење комплетне теорије) губила са порастом величине физичког система?

За поменуто разматрање оправданости квантног или класичног приступа и преласка из квантног у класично, посебно су интересантни неки физички системи чија је величина блиска претпостављеној граници квантног и класичног домена, односно системи за које би се иначе тешко одлучили да ли би за њихово проучавање одабрали квантномеханички или класични приступ. Такви физички системи су управо молекули, а посебно велики молекули и такозвани макромолекули. За њих нису интересантне само њихове просторне димензије, које су, свакако, блиске поменутој граници, већ и

питање самог постојања одређене величине и облика. За молекуле се често подразумева да имају неке одређене облике, иако би, по правилима квантне механике, молекули морали да буду у суперпозицији више могућих облика. Ако посматрамо молекулу као квантни систем који се састоји од одређеног броја атома, који су такође квантни системи, за које важе закони квантне механике, поставља се питање одакле уопште молекулима одређени облик и величина. Ако се у електронским омотачима атома од којих се састоје молекули налазе електрони који немају строго дефинисане класичне трајекторије, како онда може постојати јасна граница између молекула и околног простора, а самим тим како може постојати одређена просторна димензија молекула, одосно његов облик? У складу са законима квантне механике било би за очекивати да се облик молекула константно мења, да није сталан и да евентуално може да се прикаже као суперпозиција више различитих облика. Одређени облик и величина су карактеристике класичних физичких система, тако да се може рећи да молекули, иако су превасходно квантни објекти, испољавају и нека класична својства. Сматра се да је појава која доводи до постојања одређеног облика и величине молекула квантна декохеренција (J. Jeknić-Dugić 2009, Giulini et al 1996). Ова појава се иначе сматра узроком постојања "класичних" особина макроскопских објеката и макросвета, упркос универзално важећим законима квантне механике на основу којих би свет требао да изгледа другачије. Теорија квантне декохеренције полази од једноставне чињенице да су реални физички системи увек у интеракцији са својим окружењем, а затим изводи закључак да се услед те интеракције губи кохерентна суперпозиција неких стања - та стања се иначе називају "базис бројача" (енг.: pointer basis) (Giulini et al 1996). Молекули управо захваљујући декохеренцији имају одређени облик и величину, односно могу се посматрати као просторно дефинисани објекти са специфичном геометријом (J. Jeknić-Dugić 2009, Giulini et al 1996).

Ако се, на основу разматрања величине или из неких других разлога, ипак одлучимо за квантномеханички приступ моделовању неког физичког система, ту се улога величине углавном завршава, односно она се не разматра као особина квантног система у физичком моделу. Још увек не постоји уопштена квантна теорија која повезује динамику система са просторном величином, као ни са геометријом система. Стандардна квантомеханичка теорија је неосетљива на број честица, односно на број степени слободе, или, уопштено говорећи, на величину физичког система. Међутим, ако се систем посматра као отворени систем, односно систем који интерагује са својим

окужењем, онда величина свакако није без утицаја на ту интеракцију. Са величином система се повећава окужење које са њим интерагује тако да укупна интеракција свакако зависи од величине физичког система, што значи да би било пожељно уврстити и величину као особину. Величина физичког система може да утиче и на неке друге параметре, на пример на масу или момент инерције, који могу али и не морају имати директну везу са јачином интеракције система са окужењем. Поред величине, на интеракцију са окужењем може утицати и облик. Да ли неко тело поседује неку симетрију, или је несиметрично, какав је његов облик, све то може да одређује специфични утицај окужења. Два физичка система приближно једнаких просторних димензија, а различитих облика, могу имати различите величине додирних површина са окужењем, а самим тим и различит степен интеракције са окужењем. Када су у питању молекули, можемо рећи да окужење ефективно разликује различите облике молекула тако да се може очекивати да динамика молекула зависи од њиховог облика.

Изучавање поменутог, веома важног, научног проблема квантног мерења и декохеренције се суочава са одређеним изазовима: изучавање, за потребе разматрања ових проблема, довољно великих физичких система је теоријски сложено; појављује се много степена слободе, а мерења која би могла бити корисна по правилу захтевају сложене поступке, како на објекту, тако и на окужењу. Поред тога, сваки овакав научни програм није од практичног значаја ако се не тиче реалних физичких система који могу да имају и неку примену у разним областима модерне технологије.

Поменути велики молекули су готово идеални кандидати за потребе описане научне анализе, њихове карактеристике задовољавају описане критеријуме, а поред тога они су актуелни у бројним теоријским и практичним областима, при чему је посебно интересантна њихова улога у савременој нанотехнологији. Једна од најзанимљивијих области савремене нанотехнологије је конструкција и примена вештачких молекулских машина. Инспирација за разматрање молекулских машина је свакако запажање да такве машине постоје у природи, у ћелијама живих бића (Goodsell 2008). Сложене операције које се одвијају унутар и између ћелија, као што су, на пример, синтеза одређених молекула, транспорт јона као и многе друге важне биолошке функције, заправо обављају сложене молекулске машине. Иако се показало да су молекулске машине које постоје у живим организмима веома сложене, и да је природа за сада недостижни узор на пољу њихове конструкције, очекује се да ће

вештачке молекулске машине у будућности имати значајну и широку примену (Kottas et al 2005).

Да би се конструисала молекулска машина потребан је одређени број функционалних делова, при чему је начин њиховог повезивања блиско повезан са функцијом саме машине. За молекуле, који су саставни делови молекулских машина, је веома важно да имају тачно одређен облик, као и тачно одређену величину да би могли да обављају предвиђену функцију. За функционисање молекулских машина је потребан и висок степен контроле релативног кретања њених саставних делова једних у односу на друге, а у неким случајевима и кретање машине као целине. Контролом трансляционих и ротационих покрета саставних делова машине могуће је остварити унапред одређену функцију. Да би се остварила боља контролабилност, односно управљивост, пожељно је да динамика саставних делова молекулских машина буде што стабилнија, поготову у случају промене параметара окружења.

Под „динамичком стабилношћу“ се подразумева предвидљивост динамике неког физичког система. У идеалном случају детерминистичке динамике је, на основу познавања физичких величина у почетном тренутку и једначина кретања, могуће једнозначно одредити физичке величине у сваком каснијем тренутку. Ове једнозначности нема ни у квантној механици ни у класичној статистичкој физици. Зато се под стабилношћу овде подразумевају што мање статистичке флукуације, односно што мања одступања од средњих вредности.

Услови који одређују кретање и функционисање молекулских машина и њихових саставних делова се разликују у односу на услове који одређују функционисање макроскопских машина. На макроскопској скали доминирају ефекти гравитације, који су на скали молекула занемарљиви. На скали молекулских машина доминантно је такозвано Брауново кретање (Einstein 1905, Uhlenbeck et al 1930, Wang and Uhlenbeck 1945), које је иначе први опазио енглески ботаничар Браун (Brown) још у 19. веку, посматрајући под микроскопом кретање честица полена у течности. Ако претпоставимо да се молекул креће у неком флуиду чији се молекули или атоми крећу хаотично, долазимо до закључка да ће се тај молекул непрестано сударати са молекулима или атомима средине, што ће наравно утицати на кретање тог молекула и довести до тога да то кретање буде хаотично. За овакво кретање би се могло рећи да је налик кретању неког тела у веома густој течности, у којој постоје снажна струјања која

стално мењају правац и смер. У таквој ситуацији би било јако тешко управљати кретањем тог тела, односно постићи и одржати неки одређени правац и смер.

Постоје два приступа разматрању Брауновог кретања као доминантног фактора који утиче на функционисање молекулских машина. У једном приступу на Брауново кретање се гледа као на нешто што може бити потенцијално корисно, док се у другом приступу на Брауново кретање гледа искључиво као на отежавајућу околност, и траже се начини да се његов утицај елиминише у што већој мери. Први поменути аспект проучавања Брауновог кретања у вези са развојем молекулских машина је испитивање могућности да се енергија Брауновог кретања искористи и трансформише у енергију честице која би могла вршити неки користан рад. Константно кретање атома средине заправо подразумева огромну укупну кинетичку енергију честица средине, па не чуди да се доста размишљало о могућности да се та енергија искористи. Управо је у том смеру уложено највише напора истраживача: како постићи конверзију те кинетичке енергије која потиче од кретања у свим правцима и смеровима у кинетичку енергију кретања које се одвија у једном правцу и смеру (Reimann and Hänggi 2002)? Испоставило се да је за постизање тог циља потребно да буду испуњена два услова: константно извођење система из термодинамичке равнотеже и постојање несиметричног потенцијала (Reimann and Hänggi 2002).

Иако је први приступ несумњиво занимљив, у овом раду ће се користити други приступ. Брауново кретање ће се посматрати као фактор који ремети свако уређено кретање, односно ремети покушај да се успостави један одређени начин кретања неке честице, односно саставног дела молекулске машине или молекулске машине као целине.

У складу са тим од велике је важности размотрити како Брауново кретање утиче на динамичку стабилност појединих делова молекулских машина, а такође и наћи начин да се испита како динамичка стабилност у таквим условима зависи од величине и облика саставних делова молекулских машина. У великом броју случајева као саставни делови вештачких молекулских машина, а пре свега такозваних молекулских мотора, користе се молекулски ротатори. Посебно занимљив случај једноставних молекулских склопова су такозвани молекулски зупчаници, који се састоје од два или више молекулских ротатора чија је ротација међусобно повезана (Kottas et al 2005). У постојећој литератури се изучавају поједностављени геометријски модели молекулских



ротатора који нису од непосредне користи за опис реалних модела који су одређени конкретним геометријским обликом молекула. Као што је већ речено геометријски облик молекула утиче на његову интеракцију са окружењем, при чему је разматрање тог утицаја сасвим нови задатак у оквирима квантне теорије отворених система и од прворазредног је интереса у примени на реалне, постојеће молекулске ротаторе. У том смислу, од посебног интереса су такозвани молекулски пропелери (који се у новије време синтетишу хемијским и технолошким лабораторијама) (Kottas et al 2005). Они имају специфичан облик. Састоје се од неколико атомских група које су повезане са једном атомском групом која се налази у центру, тако да цела формација личи на пропелере на макроскопском нивоу, док се поменуте атомске групе које су повезане са централном атомском групом могу посматрати као лопатице пропелера (Kottas et al 2005). Код молекулских пропелера је сам облик оно што карактерише њихову примену и функцију. Молекулски пропелери могу имати примену у такозваним молекулским зупчаницима, односно могу бити међусобно спрегнути са другим пропелерима.

Оно што молекулске пропелере чини најбољим кандидатима за анализу утицаја величине и облика на динамичку стабилност је чињеница да је лако и једноставно квантификовати њихову величину и то бројем лопатица од којих се састоје. Ако посматрамо једну групу молекулских пропелера који имају исту или сличну групу атома у свом централном делу и исту или сличну групу атома која представља лопатицу онда можемо рећи да укупан момент инерције линеарно зависи од броја лопатица. Ако, поред тога, пођемо од претпоставке да јачина интеракције зависи од величине додирне површине са окружењем, онда се може закључити да и јачина интеракције линеарно зависи од броја лопатица. Пораст броја лопатица истовремено повећава и момент инерције и јачину интеракције са окружењем. Поставља се питање: какав је онда укупан ефекат повећања броја лопатица на динамичку стабилност молекулског пропелера? Са једне стране се очекује да повећање момента инерције смањи утицај Брауновог кретања на молекулски ротатор, односно повећа његову динамичку стабилност, али се са друге стране, такође може очекивати да ће истовремени пораст јачине интеракције имати супротан ефекат. Како ће наведени ефекти утицати на динамичку стабилност није могуће предвидети пре детаљне анализе. Описана зависност момента инерције и коефицијента пригушења од величине, односно од броја лопатица молекулског пропелера, није обухваћена стандардним моделом квантног Брауновог кретања, па се овакав модел може сматрати

проширењем модела у којем се обе поменуте величине мењају на исти начин при промени броја лопатица.

Задатак овог рада је, пре свега, испитати како величина молекулских пропелера, односно број њихових лопатица, утиче на њихову динамичку стабилност. Молекулски пропелери ће се моделовати као Браунови ротатори, при чему ће се користити квантномеханички приступ. Браунови ротатори се иначе, углавном, изучавају класичним методама. Најчешће се користи Ланжевенова једначина, која је стохастичка диференцијална једначина у оквиру које се утицај окружења односно Брауновог кретања моделује стохастичком силом (Kottas et al 2005). Иако се показало да је такав приступ углавном задовољавајући са аспекта применљивости, може се поставити питање да ли је и у потпуности оправдан. Оно што је сигурно, молекул свакако није класични систем, и не може се у потпуности и на задовољавајући начин описивати методама класичне физике. Примена метода класичне физике може бити само мање или више добра апроксимација ако се испостави да су квантне поправке, које би се могле наћи, занемарљиво мале. У неким случајевима се може показати да квантне поправке нису занемарљиве, пре свега када се ради о кратким почетним временским интервалима.

Са друге стране, питање је колико квантне поправке, чак и ако нису занемарљиве, утичу на одступања од класичних или полукласичних резултата, односно колико њихово уврштавање у модел може имати практичног значаја. Да би се размотрила корисност квантног приступа потребно је упоредити резултате добијене квантномеханичким методама са већ постојећим резултатима који су добијени класичним методама, наћи разлике, ако их има и одредити њихов потенцијални значај. Посебну пажњу би требало обратити на детаље у моделима који указују на динамичку стабилност, односно видети да ли квантномеханички приступ указује на неке нове детаље у вези динамичке стабилности, које се не могу опазити чисто класичним методама. Очекује се да, иако је модел једнодимензионалан (равански ротатор, тј., вртње се обављају око једне, непомичне осе), услови динамичке стабилности неће бити једноставни и једносмерни. То јест, очекује се појава већег броја критеријума стабилности у режиму који истиче квантне поправке, као и вишеструке везе и условљености ових критеријума. За очекивати је да је, квалитативно, потребна нека врста оптимизације, која је типична за инжењерске макроскопске системе и склопове.

Из наведеног се намеће закључак да би требало размотрити Браунове ротаторе квантним приступом, а ако се узме у обзир да се Браунови ротатори у класичном приступу моделују Ланжевеновом једначином, онда је логично искористити квантномеханички аналогон тог модела, а то је свакако модел квантног Брауновог кретања Калдеире и Легета (Caldeira and Legett 1983, Breuer and Petruccione 2002), који ће се у овом раду користити као квантни модел Брауновог ротатора. Мастер једначина Калдеире и Легета се посматра као феноменолошка једначина, дакле без ограничења параметара која су узета у обзир приликом микроскопског извођења поменуто једначине, што омогућава њену примену у ширем опсегу вредности релевантних величина. Микроскопско извођење Калдеира Легет мастер једначине, између осталог, подразумева слабу интеракцију са окружењем, односно мали фактор пригушења, као и високу температуру (Breuer and Petruccione 2002). Феноменолошки приступ поменутој једначини омогућава и разматрање случајева другачијих комбинација вредности температуре и фактора пригушења, а пре свега омогућава одвојена разматрања два важна случаја, случај малог фактора пригушења и случај великог фактора пригушења. Иако је модел иницијално формулисан за Браунову честицу која врши транслационо кретање у овом раду се разматра модел Брауновог ротатора, односно ротационог кретања, уз ограничење на разматрање случајева малих углова ротације као и малих почетних вредности стандардних одступања.

У реалним физичким ситуацијама Браунов ротатор је, поред тога што је под непрестаним утицајем Брауновог кретања, често и под неким додатним утицајем, што се може моделовати увођењем неког спољашњег поља. У већини случајева то спољашње поље се може сматрати хармонијским, или слабо нехармонијским. У складу са тим, а у циљу добијања резултата који би могли бити од практичне употребе у одговарајућим физичко-хемијским и технолошким лабораторијама, у овом раду биће разматрани следећи модели ротатора: слободни ротатор (ван поља), ротатор у (ефективном) хармонијском спољашњем пољу, те ротатор у слабо нехармонијском спољашњем пољу (са малим кубним чланом). Наведени модели ће у овом раду по први пут бити изучени у оквирима метода успостављеног мастер једначином Калдеире и Легета како би се уочило (очекивано) присуство квантних поправки, а отуда стекао и дубљи увид у динамику ротатора од значаја за практичну употребу.

Поменута спољашња поља се квантитативно описују потенцијалом, што је величина која описује поље и у ситуацији када у пољу нема других честица осим

извора поља. Када се у пољу налази нека честица ("тест честица"), онда та честица има неку потенцијалну енергију. У области којом се бави овај рад је уобичајено да се за потенцијалну енергију коју честица има у неком спољашњем пољу користи термин "потенцијал", што ће бити случај у даљем тексту.

Коришћени су неки од основних метода статистичке анализе за изучавање динамичке стабилности: (1) динамика стандардних одступања (енг.: standard deviations) основног пара канонски коњугованих опсервабли – угла и момента импулса ротатора (Meng and Zhang 2016) и (2) метод времена првог пролаза (енг.: the first passage time) (Coffey et al 2004, Mel'nikov 1991, Burada and Lindner 2012), при чему је уведена нова, квантномеханичка формулација овог метода. На основу концепта времена првог пролаза уведено је као метода "квантно време првог пролаза", односно време после којег средња вредност угла први пут достигне неку унапред одређену вредност. У случају испитивања динамичке стабилности анализом временске еволуције стандардних одступања угла и момента импулса полази се од чињенице да је што су стандардна одступања мања ротатор стабилнији и обрнуто, док се у случају испитивања динамичке стабилности методом квантног времена првог пролаза подразумева да веће време пролаза подразумева већу стабилност.

У раду се креће од мастер једначине Калдеире Легета, из које се изводи једначина временске еволуције произвољног оператора, а онда се формира систем једначина за величине које су потребне за израчунавање стандардних одступања угла и момента импулса на основу којих ће се квантификовати динамичка стабилност ротатора. За сва три случаја је коришћен поменути проширени квантни модел који укључује зависност коефицијента пригушења и момента инерције од броја лопатица пропелера. Приликом разматања слободног ротатора за стандардна одступања коришћена су већ позната решења, док је за случај хармонијског ротатора било неопходно приступити решавању система диференцијалних једначина за налажење момената угла и момента импулса првог и другог реда (који су облика  $\langle \varphi^m \rangle$ ,  $\langle L_z^n \rangle$  и  $\langle \varphi^m L_z^n + L_z^n \varphi^m \rangle$ , где су  $m$  и  $n$  природни бројеви који одређују ред момената). За случај слабо нехармонијског ротатора добијен је систем диференцијалних једначина који није затворен, због чега је формулисан и коришћен поступак пертурбативне природе. Стандардна одступања су добијена нумерички, коришћењем Рунге-Кута методе 4 реда (Runge-Kutta, 4th order). Додатна провера нумерички осетљивих резултата вршена је применом адаптивне Рунге-Кута методе (RK45).

Након добијања резултата аналитичким и нумеричким методама, извршена је њихова детаљна анализа. За сваки појединачни случај потенцијала вршена је опсежна анализа временске еволуције стандардних одступања, при чему је разматрана зависност стандардних одступања од броја лопатица пропелера за различите вредности фактора пригушења и температуре. За случај слабо нехармонијског ротатора испитује се и зависност квантног времена првог пролаза од броја лопатица пропелера, за различите вредности фактора пригушења и температуре, као и за различите почетне положаје. У оквиру анализе је вршено поређење квантно механичких резултата са резултатима аналогних класичних модела који су проширени увођењем горе поменуте зависности коефицијента пригушења и момента инерције од броја лопатица пропелера. Поред тога, вршено је и међусобно упоређивање резултата различитих квантних модела молекулских ротатора (слободни, хармонијски и слабо нехармонијски ротатор), као и анализа резултата у такозваном декохеренцијском лимиту и њихово поређење са резултатима горе поменутих класичних модела. Сви резултати су представљени графички. Након анализе и дискусије резултата донети су закључци на основу којих су успостављени критеријуми за контролу стабилности молекулских пропелера, који при разматрању њихове примене и контроле налажу поступак који је сличан инжењерској оптимизацији.

## 2. Молекулски ротатори и пропелери

Молекулски ротатори и пропелери су интересантни пре свега због своје примене у машинама на молекуларном нивоу. Актуелни тренд минијатуризације у савременој технологији који подразумева производњу све мањих и мањих компонената, при чему се иде од већих ка све мањим структурама (енг.: top-down), има своје лимите, тако да се све више разматра другачији приступ (енг.: bottom-up), у коме се креће од молекула, од којих се даље граде потребне структуре - молекулске машине. Идеја о конструисању машина на молекуларном нивоу настала је запажањем постојања таквих система у природи. Истраживања у молекуларној биологији показују да се живе ћелије састоје од великог броја молекулских машина које обављају сложене операције као што су, на пример, транспорт протона и јона, АТП (аденозин трифосфат, нуклеотид важан за складиштење и транспорт енергије унутар ћелија) синтеза, транспорт унутар и између ћелија, кретање самих ћелија, па и кретања целих организама или њихових делова. Природне молекулске машине које функционишу у живим организмима су веома сложене и још увек не у потпуности проучене. Поред тога сматра се да могу као такве да функционишу само у условима које постоје у оквиру живих организама, што наводи на закључак да је за њихово функционисање веома важан утицај окружења, односно да се морају посматрати као отворени системи. Машина на молекуларном нивоу се може дефинисати као склоп одређеног броја молекулских компонената које се крећу на одређени начин, што се третира као излазна информација, при чему се тим кретањем може управљати спољашњим побудама, што представља улазну информацију. Кључна идеја је да се спољашњим утицајем произведу такве промене у оквиру молекула које подразумевају покрете атома, атомских група или целих молекула, који се могу искористити за обављање корисних функција. Конструкција молекулских машина подразумева дизајнирање и конструисање вишекомпонентних интегрисаних система у којима се механичко кретање различитих компонената одвија повезано, као на пример када се ротационо кретање једне компоненте повеже са транслационим кретањем друге компоненте. Технологија израде, проучавање и примена молекулских машина захтева мултидисциплинарни приступ, истовремену примену знања из физике, хемије, физичке хемије и молекуларне биологије (Browne and Feringa 2006, Hutchinson et al 2014, Jones 2008, Balzani et al 2005, Milburn 1997).

Иако се често праве аналогije између макроскопских и молекулских машина, ипак постоје значајне разлике у законитостима које владају њиховим функционисањем које се обично називају "ефекти скале". Значај и последице топлотног кретања, дисипације, инерције и гравитације значајно се разликују на микроскопској и макроскопској скали. За макроскопске објекте инерцијални и гравитациони ефекти су доминантни, док са смањивањем величине објекта ефекти вискозности и Брауновог кретања почињу да доминирају при чему ефекти гравитације и инерције постају све мање значајни. На довољно малој скали се испољавају и разни квантни ефекти, тако да уместо метода класичне механике треба примењивати методе квантне механике. На молекуларној скали доминантан је утицај Брауновог топлотног кретања. Главни задатак при конструисању молекулских машина заправо и није постизање кретања на молекуларном нивоу већ контролисање тог кретања, пре свега контролисање правца и смера таквог кретања. Постоји посебна класа мотора, такозвани Браунови мотори, који за вршење разних корисних функција користе енергију топлотног Брауновог кретања, а то је могуће само ако се систем неким спољашњим утицајем константно изводи из стања термодинамичке равнотеже (Reimann and Hänggi 2002).

У литератури се уобичајено користи термин молекулски ротор за молекуле који се састоје од два дела која могу да ротирају релативно један у односу на други, при чему се део са већим моментом инерције назива статор, док се део са мањим моментом инерције назива ротатор. И ротатор и статор ротирају око заједничке осе, тако да разликовање статора и ротатора има смисла једино у случају када је статор фиксиран за неки већи објекат. У овом раду користиће се термин молекулски ротатор за молекул који може да ротира као целина око неке осе. У односу на тип средине у којој се налазе и крећу ротатори се могу поделити на ротаторе који се крећу у течной средини, ротаторе који се крећу у оквиру чврстих тела и ротаторе који су нанети на неку површину. Да би се у што већој мери превазишао утицај Брауновог топлотног кретања пожељно је користити ротаторе нанете на површину, односно ротаторе који су ковалентним везама повезани са површином. Ротатори који су нанети на површину тако да површина има улогу статора називају се "Р - ротатори", док се ротатори у којима постоји статор који је фиксиран за површину називају "РС - ротатори". Када је оса ротације око које се ротатор окреће нормална на површину у питању је азимутални ротатор, док је, када је оса ротације паралелна са површином, у питању алтитудинални ротатор. Хемијска природа везе око које се врши ротација утиче на важан параметар -

унутрашњу енергијску баријеру која спречава, односно отежава ротацију. Та веза може бити једнострука веза, трострука веза или координациона веза између централног јона неког метала и једног или више јона или молекула који се називају лиганди (Kottas et al 2005).

Код молекула који имају двоструку везу као осу ротације, ротација је практично онемогућена високом енергијском баријером. Постоје ротатори у којима су статор и ротор повезани ковалентним хемијским везама и ротатори у којима су повезани на неки други начин, на пример међумолекуларним везама. Код неких ротатора потенцијална баријера је довољно мала тако да се ротација одвија при довољно високој температури, док је код неких ротација отежана великом потенцијалном баријером при чему се такви ротатори налазе у конфигурација која има најнижу енергију све док не претрпе неки спољашњи утицај.

За кретање ротатора се каже да је принудно (енг.: driven), ако се одвија под утицајем спољашњег поља, док се кретање које се одвија превасходно под утицајем термалне енергије, при чему присуство спољашњег поља може да доведе до тога да ротација буде једносмерна (без промена смера ротације), назива случајно кретање. Спољашњи утицај може бити успостављен деловањем поља или може бити стерни. Стерни ефекти су они ефекти који настају услед чињенице да сваки атом унутар молекула заузима одређени простор. Ако су атоми превише близу долази до одбијања услед преклапања њихових електронских облака што може да има утицај на облик молекула (конформацију) и реактивност. Стерно ометање се јавља када величина група атома унутар молекула спречава хемијску реакцију која се одвија са сродним или мањим молекулима. Код неких ротатора, чије је кретање случајно, термална енергија је једина незанемарљива енергија, тако да је кретање Брауновског типа. Код неких је термална енергија мала у односу на ротациону баријеру, тако да се ротација одвија само приликом већих промена температуре.

У класичном приступу основна једначина којом се описује кретање једнодимензионалног ротатора је Ланжевенова (Langevin) једначина (Kottas et al 2005):

$$I \frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{dV_{net}}{d\theta} - \eta \frac{d\theta}{dt} + \xi(T, t). \quad (2.1)$$

Ротатор момента инерције  $I$  креће се у потенцијалу  $V_{net}$  којим се моделују све интеракције ротатора и околине, интеракције ротатора са спољашњим пољем под



чијим утицајем се врши ротација у случају принудног кретања, као и интеракција између ротатора и осталих делова ротатора. Величина  $\eta$  је коефицијент трења<sup>1</sup>,  $\xi$  је стохастички момент који представља термалне флукуације у систему,  $T$  је температура окружења, а  $t$  време. Ротатор има један степен слободе  $\theta$ , док су остали степени слободе, који потичу од топлотног кретања, обухваћени фрикционим и стохастичким чланом, односно другим и трећим чланом десне стране (2.1). За хипотетички ротатор који би се налазио у савршеном вакууму и при температури једнакој апсолутној нули, фрикциони и стохастички чланови би били једнаки нули, тако да би се добила једначина која би била еквивалентна Њутновом другом закону за случај ротационог кретања (Kottas et al 2005). За системе које разматрамо најчешће се два последња члана у једначини (2.1) не могу занемарити, при чему су инерциони ефекти мањи у односу на ефекте трења. Стохастичка интеракција са окружењем може се описати као обртни момент  $\tau(t)$  који се може посматрати као збир две компоненте: једне брзо променљиве чија је средња вредност нула и друге која се мења спорије и која је функција угаоне брзине. Прва компонента се може идентификовати са трећим чланом десне стране једначине (2.1), стохастичким моментом  $\xi$ , чија вредност не зависи ни од  $\theta$  ни од  $\frac{d\theta}{dt}$  и чија је средња вредност у току периода релаксације система једнака нули. Друга компонента враћа систем у стање термодинамичке равнотеже и може се идентификовати са моментом силе трења. Ефекти трења се могу посматрати као губитак енергије ротационог кретања које се одвија под дејством спољашњег поља, односно прелазак у вибрационе модове у оквиру система. Спољашње поље мора непрестано обезбеђивати енергију да би ротатор наставио да ротира и поред утицаја термалних кретања атома и момента трења. У молекуларним системима коефицијент трења је веома често функција фреквенције спољашњег поља, што није изненађујуће ако се узме у обзир да молекуларне вибрације имају своје карактеристичне фреквенције, тако да се не очекује да молекули реагују истоветно на ексцитације различитих фреквенција. За ротирајуће молекуле у течностима Стоксова формула за трење у вискозној средини се може искористити за одређивање коефицијента динамичког трења. За макроскопски сферни ротациони објекат у течности вискозности  $\beta$ , фрикциона константа се може изразити преко мерљивих величина система:

---

<sup>1</sup> Дисипација обухвата све феноменолошки познате врсте трења, како трење чврстих тела, тако и вискозност у флуиду. У овој дисертацији се користи општи микроскопски модел, који не разликује ове феноменолошке детаље, али се више тиче вискозности, при чему ће се у даљем тексту користити термин "трење".

$$\eta = 8\pi\beta a^3, \quad (2.2)$$

где је  $a$  полупречник сфере. Из једначине (2.2) се може видети да коефицијент динамичког трења расте са повећањем полупречника сфере. Једначина се користи само у случају јако великих молекула који ротирају као целине, али чак и у таквим случајевима применљивост ове једначине је ограничена (Kottas et al 2005). Детаљнија анализа доводи до везе стохастичког члана и коефицијента трења која се описује такозваном флукуационо-дисипационом теоремом:

$$\eta = \frac{1}{k_B T} \int_0^\infty \langle \xi(t_0) \xi(t_0 + t) \rangle dt, \quad (2.3)$$

која указује на еквивалентност енергије која се издваја из система услед трења и флукуација окружења (Kubo 1966, Kottas et al 2005).

Потенцијална енергија  $V_{net}$  је, као што је већ речено, збир свих осталих унутрашњих и спољашњих енергија у систему, од којих су посебно важне унутрашњи ротациони потенцијал  $V$  и енергија интеракције између ротатора и спољашњег поља и међусобне интеракције ротатора  $U$ . Унутрашњи ротациони потенцијал  $V$  је дефинисан за ротор-статор системе као енергија по јединици угла потребна да би се ротор окренуо око своје осе у одсуству спољашњег поља. Ова величина зависи од интеракције ротора и статора као и од природе саме осе ротације. Најчешће се моделује као косинусна функција са  $n$  минимума и карактеристичном висином енергијске баријере  $W$ :

$$V = \frac{1}{2} W \cos n\theta, \quad (2.4)$$

при чему број поменутих минимума зависи од симетрије система.

Величина енергијске баријере  $W$  такође зависи од природе осе ротације. На пример, за једноструке везе баријера је веома мала, делимично и због кратке дужине таквих ковалентних веза, односно малог растојања између језгара атома који су везани, што доводи до значајне интеракције ротатора и статора. Унутрашњи потенцијали су по дефиницији карактеристика појединих молекула и уобичајено се мере или прорачунавају за гасну фазу. Интеракција ротора са раствором или површином се могу сматрати пертурбацијама овог основног потенцијала. Следећа важна енергија у систему је енергија интеракција ротатора и поља под чијим се дејством одвија ротација (енг.: driving field). Најчешће се разматра пример интеракција сталног електричног дипола са спољашњим електричним пољем, мада

интеракциона енергија може бити последица било каквог другог утицаја, као што је на пример снап атома или проток вискозног флуида, хемијска енергија ослобођена хемијским реакцијама или светлосна ексцитација електрона. Последња наведена компонента потенцијалне енергије је енергија међусобне интеракције два ротатора која може бити стерна интеракција или интеракција путем поља. Стерна интеракција подразумева директни контакт два суседна ротатора, што може да доведе и до ефекта зупчаника. Код стерне интеракције поједини делови суседних ротатора су испреплетени тако да су покрети ротатора повезани. Такви системи се могу описати као ротатори са отежаном ротацијом где постоје најмање два важна ротациона потенцијала - један за независну ротацију оба ротатора и други за повезану ротацију. Повезана ротација је примећена у системима где су суседне групе у блиском контакту и где је независан покрет ротатора онемогућен високом активационом енергијом. У случају електростатичке интеракције директни контакт два суседна ротатора није неопходан и у зависности од диполног момента интеракцијс несуседних ротатора може такође бити незанемарљива. Електростатичка интеракција је најчешће слабија у односу на стерну интеракцију тако да се њен утицај углавном разматра само у системима са ниском енергијском баријером и при ниским температурама.

Понашање ротатора је одређено односом следећих величина:  $k_B T$  - термалне енергије,  $W$  - величине енергијске баријере,  $U$  - интеракционе енергије и  $\eta \frac{d\theta}{dt}$  - моментом силе трења (Kottas et al 2005). Кретање ротатора у односу на то шта је главни узрок кретања можемо поделити на две основне категорије: принудно кретање, где је узрок ротације спољашње поље, при чему се термални ефекти и момент силе трења супротстављају таквом кретању и такозвано случајно (енг.: random) кретање услед термалних ефеката. Принудно кретање може бити синхроно, асинхроно и случајно принудно кретање, док случајно кретање може бити случајно Брауново кретање и случајно кретање са отежаном ротацијом. У најједноставнијем случају принудног кретања енергија интеракције ротатора и поља је доминантна енергија у систему. Размотримо пример интеракције диполног ротатора са електричним пољем непроменљивог правца и величине. У том случају интеракциона енергија је:

$$U = -\mu E, \quad (2.5)$$

где је  $\mu$  диполни момент ротатора, а  $E$  амплитуда електричног поља, при чему електрични дипол има најнижу енергију када је оријентисан у правцу електричног

поља. Термална енергија доводи до осциловања око те позиције. Ако се оријентација електричног поља промени ротатор ће се после одређеног времена реоријентисати и поново поравнати са правцем поља. Динамика ротатора је потпуно одређена интеракцијом са електричним пољем. Ако претпоставимо да ротатор заклапа неки угао  $\theta$  са правцем поља онда се интеракциона енергија може записати као:

$$U = -\mu E \cos\theta. \quad (2.6)$$

Да би ротатор ротирао потребно је електрично поље које и само ротира. Нека је  $\omega$  фреквенција поља којом електрично поље ротира. За анализу принудног кретања важно је размотрити такозвани угао кашњења:

$$\alpha(t) = \omega t - \theta(t), \quad (2.7)$$

који одређује позицију ротатора у координатном систему ротирајућег поља. Све док је брзина ротације довољно мала и јачина поља довољно велика ротатор прати ротацију поља. При врло високим фреквенцијама ефекти трења постају јако велики тако да се губи синхронизација ротационог кретања поља и ротатора. С друге стране, при довољно високим температурама и довољно ниским вредностима јачине поља термална енергија постаје упоредива са енергијом интеракције поља и ротатора тако да се и у тим ситуацијама губи синхронизација ротационог кретања поља и ротатора.

Синхроно кретање настаје када је енергија интеракције ротатора и поља значајно већа од осталих величина ( $U \gg k_B T$ ,  $U \gg W$ ,  $\frac{\partial U}{\partial \theta} \geq \eta \frac{d\theta}{dt}$ ). Ротационо кретање ротатора је у потпуности синхронизовано са ротацијом поља. Ако је  $k_B T = W = \eta = 0$ , на основу (2.1) и (2.6) добија се:

$$I \frac{d^2\alpha}{dt^2} = -\frac{\partial U}{\partial \alpha} = -\mu E \sin\alpha \approx -\mu E \alpha, \quad (2.8)$$

што је заправо једначина хармонијског осцилатора са карактеристичном фреквенцијом  $(\mu E / I)^{\frac{1}{2}}$  (Kottas et al 2005).

Следећи важан случај је када је принудна сила нешто мање доминантна ( $U > k_B T$ ,  $U > W$ ,  $\frac{\partial U}{\partial \theta} \approx \eta \frac{d\theta}{dt}$ ). У ситуацији када су  $k_B T$  и  $W$  занемарљиво мали на ротатор делују само спољашње поље и момент силе трења. Када су поменута два момента у равнотежи имамо случај стабилног кретања при чему важи:

$$\mu E \sin \alpha = \omega \eta. \quad (2.9)$$

Ако се претпостави да важи  $\frac{d\theta}{dt} = \omega$ , односно да ротатор ротира истом фреквенцијом као и поље, угао кашњења је константан. Како се фреквенција кретања повећава момент силе трења расте а повећава се и угао кашњења. Принудни момент има све јачи утицај на ротатор док вредност угла кашњења не достигне вредност  $\pi/2$ , када је тај утицај највећи. Стабилно кретање имамо дакле у случају када је  $\frac{d\theta}{dt} = \omega$  и када је угао кашњења  $\alpha_0$  константан и мањи од  $\pi/2$ . За дату амплитуду и фреквенцију поља угао кашњења се може одредити (Kottas et al 2005) из израза (2.8):

$$\sin \alpha_0 = \frac{\omega \eta}{\mu E}. \quad (2.10)$$

Стављањем  $\sin \alpha_0 = 1$  у једначину (2.10) може се добити минимална вредност поља потребна да би се постигло синхронизовано кретање за дату фреквенцију. За молекуларне ротаторе коефицијент трења је растућа функција фреквенције поља, тако да је за постизање стабилног стања кретања потребна већа јачина поља за случајеве већих фреквенција.

Када је  $W > 0$  једначина (2.9) добија следећи облик (Kottas et al 2005):

$$\mu E \sin \alpha = \frac{\partial V}{\partial \theta} + \omega \eta. \quad (2.11)$$

У случају када постоје унутрашњи ротациони потенцијал и потенцијал индукован под утицајем спољашњег поља, услови за постојање стабилног кретања морају се наћи за сваку тачку унутрашњег потенцијала, а угао кашњења се може добити из једначине (Kottas et al 2005):

$$\sin \alpha_0 = \frac{(\omega \eta + W n / 2)}{\mu E}. \quad (2.12)$$

Спољашње поље мора да савлада и утицај момента трења и дејство унутрашњег потенцијала да би се успоставило синхронизовано кретање. Решавањем једначина (2.9) или (2.12), за случај  $\sin \alpha_0 = 1$ , одређује се минимална амплитуда поља потребног да доведе до синхроног кретања онда када термалне флукуације нису присутне. Ако се узму у обзир и термалне флукуације показује се да је ово поље недовољно да доведе чак и до асинхроног ротационог кретања, при чему је наравно поље потребно за постизање синхронизоване ротације још веће. Овде се могу разликовати три типа

кретања - ротација синхронизована са ротацијом поља, осциловање око потенцијалног минимума и топлотно активирано скоковито кретање. Ефикасност деловања спољашњег поља се може израчунати као просечан угао кашњења по једном циклусу. Ако је после  $N$  циклуса укупан кумулативни угао кашњења  $\alpha_{tot}$ , просечан угао кашњења се добија као:

$$\alpha = \frac{\alpha_{tot}}{2\pi N}. \quad (2.13)$$

На основу овог параметра може се одредити да ли је кретање синхроно или асинхроно. У случају синхроне ротације доминантан тип кретања ротатора је ротација усклађена са ротацијом спољашњег поља. Ако су укључени и ефекти трења, ротатор осцилује са просечним углом кашњења  $\alpha_0$ . Само повремено топлотно индуковани скокови доводе до тога да се поремети синхронизација ротација ротатора и поља. Синхроно кретање је такође могуће у присуству ротационог потенцијала  $W$  али се у том случају захтева јаче спољашње поље за исту фреквенцију поља. У асинхронном режиму ротатор не прати у потпуности поље за време ротације и средња вредност  $\frac{d\theta}{dt}$  се може значајно разликовати од  $\omega$ . Повећањем величина које се супротстављају ротационом кретању ( $k_B T$ ,  $\eta \frac{d\theta}{dt}$ ,  $W$ ) ротатор постепено прелази из принудног у случајно кретање.

У случају када су силе трења још веће,  $U > k_B T$ ,  $U > W$ ,  $\frac{\partial U}{\partial \theta} < \eta \frac{d\theta}{dt}$ , момент импулса који потиче од спољашњег поља више није довољно снажан да надјача силе трења. Угао кашњења који је у случају када нема термалних флуктуација био мањи од  $\pi/2$ , сада је већи од  $\pi/2$ , тако да се кретање ротатора мења са сваким новим циклусом. На основу познавања тренутне оријентације принудног поља не може се одредити тренутна оријентација ротатора, али ако се посматрање врши на нивоу већег броја циклуса може се закључити да се и поред тога ротатор у већој мери оријентише у правцу поља него у осталим правцима. Енергија поља се још увек делимично трансформише у енергију кретања ротатора али је ефикасност деловања на ротатор знатно мања него у претходно разматраним случајевима. За  $W = 0$  просечна угаона брзина се може изразити као (Kottas et al 2005):

$$\left\langle \frac{d\theta}{dt} \right\rangle \approx \frac{\omega}{2} \left( \frac{\mu E}{\eta \omega} \right)^2. \quad (2.14)$$

Поред случаја који је до сада разматран, у коме принудно кретање ротатора настаје услед интеракције индукованог или перманентног диполног момента ротатора и осцилаторног електричног поља, кретање ротатора може настати и услед неке хемијске реакције, као и услед дејства протока флуида на ротатор (Kottas et al 2005). Коришћење протока атома или молекула флуида који предају импулс молекулском ротатору је метод који подсећа на воденицу или ветрењачу. Овај приступ је ограничен на ротаторе у чврстој фази или ротаторе нанете на површину, зато што транслационо кретање ротатора мора да буде занемарљиво у односу на кретање атома или молекула флуида. Овај приступ подразумева постојање усмереног протока атома просечне брзине  $v$  који интерагују са ротатором који садржи неколико атома који имају улогу лопатица код ветрењаче или воденице. Ако се ротатор не може кретати у смеру протока флуида и ако су атоми флуида значајно мањи од лопатица ротатора, сваки атом који погоди лопатицу предаје импулс много масивнијем ротатору. Геометрија ротатора мора бити таква да се индукује ротациони момент а не сила која би довела до транслационог кретања ротатора у правцу и смеру кретања атома флуида. Када је ротатор у стању термодинамичке равнотеже неопходан услов за индуковање једносмерне ротације је присуство асиметричног потенцијала и спољашње пертурбације која изводи систем из равнотеже. У случају принудног кретања спољашње поље може да доведе до испуњења оба поменута услова.

Случајно топлотно кретање или Брауново кретање се одвија у случају када је термална енергија  $k_B T$  доминантна, односно када важи  $k_B T > U$ ,  $\eta \frac{d\theta}{dt} = 0$ . У одсуству било какве зависности потенцијалне енергије од угла ротације, како због унутрашњих ефеката ( $W$ ) или услед интеракције са спољашњим пољем ( $U$ ), оријентација ротатора је случајна.

Када би се температура снизила до апсолутне нуле угао који оса ротатора заклапа са референтном осом би могао имати било коју вредност од 0 до  $2\pi$ , са једнаком вероватноћом. Кретање ротатора се квантификује тако што се посматра флукуација поменутог угла око нулте средње вредности  $\langle \theta \rangle$ .

Следећи тип кретања је такозвана отежана ротација, односно случај када доминира ротациони потенцијал ( $W > U$ ,  $W > k_B T$ ,  $W > \eta \frac{d\theta}{dt}$ ). Могућност да се одвија ротација, као и брзина ротације, су јако зависни од термалне енергије, иако она

није највећа енергија у систему. За разматрање овог типа кретања посебно је важан такозвани Крамерсов (Kramers) ефекат, односно Крамерсов проблем (Coffey et al 2004, Mel'nikov 1991, Burada and Lindner 2012), у оквиру којег се разматра колико брзо Браунова честица може да савлада потенцијалну баријеру под утицајем Брауновог кретања, при чему се разматра случај када је у почетку посматрања честица у равнотежном стању минималне енергије као и случај када је честица у неком метастабилном стању. У поменутом разматрању користи се метод налажења времена првог пролаза, односно времена за које вредност одређене варијабле први пут пређе неку одређену граничну вредност. Поменути метод је идејна основа за један од метода испитивања динамичке стабилности ротатора који ће се примењивати у овом раду. У поменутом случају кретање се одвија под дејством термалних флукуација које се манифестују као термално активирани скокови преко ротационе баријере. При ниским температурама ови скокови су веома ретки, али како температура расте они постају све чешћи, тако да је при довољно великим температурама ротатор увек у покрету, чак и у стању равнотеже. Ако се систем изведе из равнотеже, термално индуковани скокови доводе до топлотне релаксације, тако да су учесталост термално индукованих скокова и брзина релаксације повезани (Kottas et al 2005).

Молекулски зупчаници су једни од најједноставнијих уређаја који се могу конструисати на молекуларној скали (MacKinnon et al 2002, Lapert et al 2011, Korobenko et al 2014). На макроскопском нивоу зупчаници су машински елементи у облику точка са равномерно распоређеним зубима, који се углавном користе за такозвани зупчасти пренос ротационог кретања и ротационог момента дејством једног зупчаника на зубе суседног зупчаника. Најчешће коришћени типови зупчаника (Слика 2.1.) су мамузасте зупчаници (енг.: spur gears), косе зупчаници (енг.: bevel gears), црвасте зупчаници (енг.: worm gears) и спирални зупчаници (енг.: helical gears). Мамузасте зупчаници су најједноставнији и најчешће коришћени у макроскопским машинама а такође су и најефикаснији тип зупчаника. Постоје и такозвани флуидни зупчаници који функционишу у флуидима и који су реда величине једног милиметра или једног центриметра. Флуидни зупчаници имају другачији облик у односу на класичне зупчанике и код њих се повезана ротација преноси путем флуида.



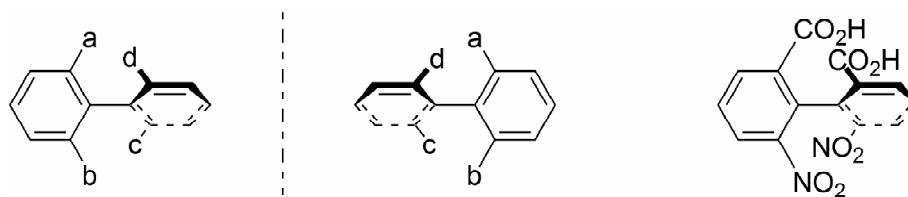


Слика 2.1. Типови зупчаника  
Извор: (Kottas et al 2005).

Грађа молекула је дефинисана бројем и типом атома који чине молекул као и везама између њих. Конституциони изомери су молекули са истим молекуларним формулама али различитим везама између атома. Молекули који имају идентичну структуру, односно исте атоме као и везе између њих, али имају различит просторни распоред су такозвани просторни изомери односно стереоизомери. За два изомера се каже да су интерконвертибилни ако је, под одређеним условима, могућа конверзија једног изомера у други.

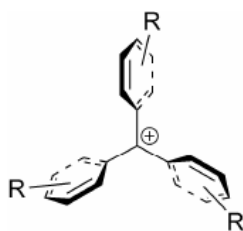
За неки молекул се каже да је хиралан ако се не може поклопити са својим ликом у огледалу. У случају молекула у коме угљеник гради четири једноструке везе, атоми или атомске групе које се везују за атом угљеника су распоређени у простору тетраедарски, атом угљеника се налази у центру тетраедра а атомске групе у теменима тог тетраедра. Ако су за атом угљеника везане бар две исте атомске групе, онда које год комбинације да се направе спајајући атомске групе са атомом угљеника, добиће се молекули који се могу поклопити, односно просторно су идентични. Типичан пример хиралног молекула је молекул у у којем су за угљеников атом везане четири различите атомске групе. У њему су могућа два различита просторна распореда при којима се добијају молекули који нису просторно идентични. Оваква два стереоизомера која се међусобно односе као предмет и лик у огледалу се називају енантиомери, односно енантиомерни облици неке супстанце. Енантиомери показују исте физичке особине, осим у погледу ротације равни поларизоване светлости, где оба енантиомера равн okreћу за исти угао али у супротним смеровима, тако да се овај тип изомерије назива и оптичка изомерија. Два енантиомера показују и исту хемијску реактивност према ахиралним агенсима, док се при реакцијама са хиралним супстанцама понашају различито. Многе органске и биохемијске реакције су стереоселективне и многи ензими су хирални и понашају се различито према два енантиомера (Eliel and Wilen 1994).

Постоје и молекули који не поседују хирални центар али поседују хиралност због специфичног распореда атомских група у молекулу, као и молекули који имају хирални центар али и поред тога нису хирални зато што молекул као целина има неку равну симетрију. У многим случајевима симетрија молекула коју опажамо је у ствари резултат преклапања великог броја различитих конформација од којих су готово све хиралне. Отежана ротација група атома у оквиру молекула који не поседује хирални центар, ако је довољно спора, може да доведе до тога да молекул испољава својство хиралности. Код неких молекула неке интерне ротације су онемогућене из стерних разлога. Један такав пример је бифенил чије се бензенски прстенови не могу заокретати независно један од другог.



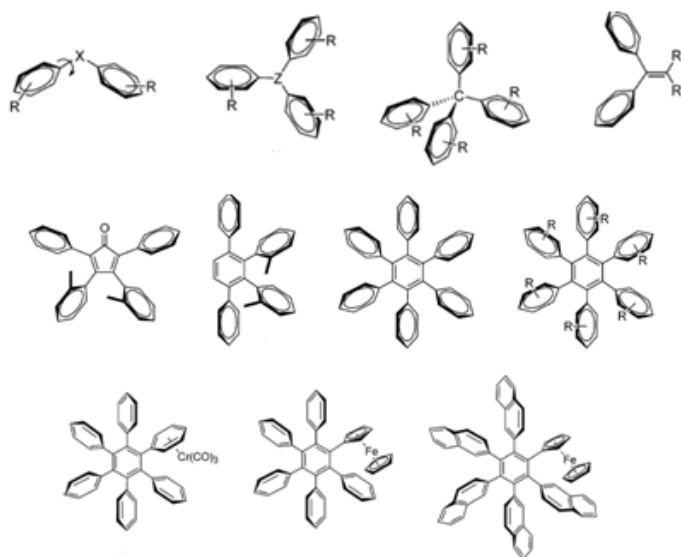
Слика 2.2. Атропоизомери  
Извор: (Kottas et al 2005).

Атропоизомери (Слика 2.2.) су енантиомери који су потенцијално интерконвертибилни ротацијом око једноструке везе али тако да је она онемогућена релативно високом енергијском баријером. Та баријера је ипак коначна, тако да ће при довољно високој температури молекул имати довољно енергије да савлада баријеру и постане статистички ахиралан. При довољно ниској температури готово сва ахирална једињења имају атропоизомере. Код неких једињења енергијска баријера је већа од енергије дисоцијације па је обртање конфигурације немогуће.



Слика 2.3. Молекулски пропелер  
Извор: (Kottas et al 2005).

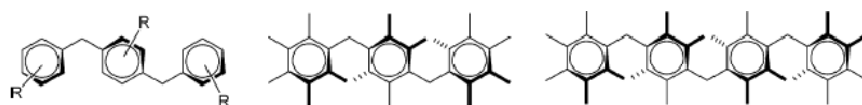
Проучавање бифенила и повезаних атропоизомерних система је било веома важно за разумевање хиралности, енергијских ротационих баријера у функцији стерних интеракција (Bell and Robinson 1927, Kuhn and Albrecht 1927). Таква истраживања су довела и до открића молекула који имају облик пропелера (Kottas et al 2005, Balzani et al 2000, Hutchison et al 2014). Први такви молекули били су трифенилкарбонијум јони. Амерички физикохемичар Луис (Gilbert N. Lewis) је са сарадницима детектовао различите изомере трифенилкарбонијум јона са ниском енергијском баријером за интерконверзију (Lewis et al 1942). На основу експерименталних резултата за поменути молекул је предложена структура пропелера. Примена нуклеарне магнетне резонантне спектроскопије (НМР спектроскопије) је довела до дефинитивног доказа да поједини молекули, као на пример поменути трифенилкарбонијум јони, имају конформацију која подсећа на пропелер (Colter et al 1965, Kurland et al 1965, Schuster et al 1968) (Слика 2.3.), док су молекули који су најсличнији макроскопским пропелерима такозвани полиарилни молекули (Слика 2.4.).



Слика 2.4. Полиарилни молекули - примери молекулских пропелера  
Извор: (Kottas et al 2005).

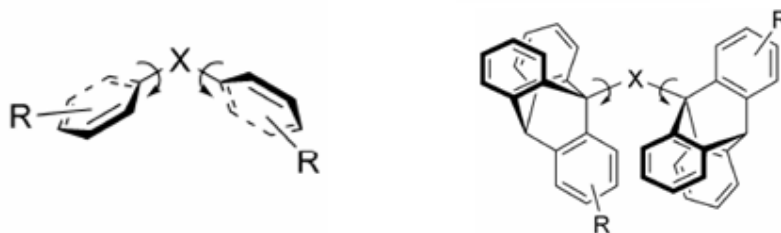
Неколико група аутора је истраживало такозване "пропелерске ланце" (енг.: "propeller chains") (Слика 2.5.), који се састоје од више аренских јединица повезаних атомским групама, при чему се акценат баца на проучавање преноса ротационе

информације дуж описаног ланца (Montaudo et al 1971, Lindner et al 1993, Coluccini et al 2003).



Слика 2.5. Пропелерски ланци  
Извор: (Kottas et al 2005).

Даљим истраживањем и примењивањем НМР спектроскопије се показало да код појединих молекула ротација једне групе атома доводи до истовремене ротације друге групе атома. Ова појава међусобно зависне ротације два различита дела молекула названа је ефектом зупчаника (Слика 2.6.). До ефекта зупчаника долази када је интеракција два ротатора стерна, односно када су поједини делови суседних ротатора испреплетени тако да су покрети ротатора повезани.



Слика 2.6. Молекулски зупчаници  
Извор: (Kottas et al 2005).

Поред тога, показано је да се у неким молекулима ефекат зупчаника јавља *искључиво због квантних ефеката који немају аналогију у макросвету* (Kottas et al 2005). У неким молекулима је примећена и синхронизована ротација два прстена у истом смеру, појава за коју се сматра да настаје услед хемијског ефекта хиперконјугације за коју такође нема аналогије у макросвету. Мислоу (Mislow), са сарадницима, је детаљно истражио повезану ротацију у полифенилским молекулима и тестирао концепт по коме торзиони покрети два повезана ротатора доводе до тога да је повезано кретање два ротатора енергијски повољније од ситуације у којој је ротација појединачних ротатора независна (Mislow 1989). При томе је увео нови термин "резидуални стереоизомеризам" који се још назива и "фазни изомеризам" који описује особину система да поседује изомере зато што је ротација одређених јединица у оквиру

молекула повезана и међусобно зависна. Мислоу је раван која садржи централни атом и арилне групе назвао референтна раван, а такође је дефинисао и стереохемијску кореспонденцију као везу која дефинише конформацију у молекулским пропелерима. Амерички хемичар Роџер Адамс (Roger Adams) је двадесетак година пре експерименталног открића ефекта зупчаника предвидео постојање тог ефекта (Adams et al 1950). Он је разматрао модел молекула тетрафенил-метана и констатовао да је просторни распоред у њему такав да је готово немогуће да један фенилни прстен ротира око своје везе са централним атомом ако су истовремено остала три прстена фиксирана, али је зато могуће да сва четири прстена ротирају истовремено и координирано. У аналогiji са макропоскопским зупчаницима размотримо два зупчаника који ротирају на одређеној удаљености тако да нису у додиру - у том случају они ротирају независно један од другог. С друге стране, када су зупчаници у контакту онда ротација једног диктира ротацију другог. У молекуларној терминологији стерни услови система иницирају одговарајући додир тако да ротација једне арилне групе диктира ротацију друге. У макропоскопској аналогiji један зупчаник ротира у смеру казаљке на сату, док други ротира у смеру супротном од казаљке на сату. На молекуларном нивоу ова појава се назива повезана дисротација. Ако су арилне групе различите постојаће изомери који неће бити интерконвертибилни осим ако не дође до такозваног проклизавања (енг.: gear slippage) када један или више прстена ротира независно од других (Kottas et al 2005).

Након открића НМР спектроскопије откривен је велики број молекула који у својој структури имају ефекат зупчаника. Један од најзанимљивијих примера таквих молекула је етан, који је, иначе, најједноставнији алкан у којем постоји ротациона баријера. У етану обе метил групе имају исти момент инерције око C - C осе тако да је један произвољно дефинисан као ротор а други као статор. У основном стању без спољашњих утицаја и статор и ротор ротирају истом брзином у супротним смеровима. *У етану до ефекта зупчаника не долази због стерних ефеката већ због квантних ефеката* (Kottas et al 2005). Постоји велики број радова у којима је описано истраживање ротационе енергијске баријере и постојање повезане ротације, односно ефекта зупчаника применом НМР спектроскопије. Иако већина молекула за које постоји ефекат зупчаника није директно применљива у молекулским машинама они представљају основу за разумевање повезане ротације и преноса ротационе информације до удаљене локације преко неколико зупчаника (Kottas et al 2005). У

поменути радovima наводи се разлика између статичког и динамичког ефекта зупчаника. Статички ефекат зупчаника је дефинисан као интеракција између појединих атомских група у основном стању услед просторног распореда атома у молекулу, док је динамички ефекат зупчаника дефинисан као специјални ефекат који је много ређи и који подразумева интеракцију ротора са суседним атомским групама.

Појава да ротационо кретање једне атомске групе у молекулу доводи до ротационог кретања друге атомске групе у истом молекулу је експериментално потврђена, мада се чини да сама појава није још увек довољно проучена. Може се поставити и питање да ли је аналогија са макроскопским зупчаницама одговарајућа за све молекуле код којих је примећена повезана ротација две или више атомских група или код неких молекула између кретања атомских група постоје корелације које су квантне и немају аналогију у макросвету.

### 3. Елементи теорије отворених квантних система

За проучавање било ког физичког система основу чини разматрање његове временске еволуције. У квантној механици се временска еволуција вектора стања затвореног система  $|\psi(t)\rangle$  описује Шредингеровом једначином:

$$\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)|\psi(t)\rangle, \quad (3.1)$$

где је  $\hat{H}(t)$  хамилтонијан система. Решење Шредингерове једначине може бити представљено применом оператора временске еволуције  $\hat{U}(t, t_0)$  који трансформише стање  $|\psi(t_0)\rangle$  у неком почетном тренутку  $t_0$  у стање  $|\psi(t)\rangle$ :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle. \quad (3.2)$$

Оператор временске еволуције  $\hat{U}(t, t_0)$  је унитаран, па се за временску еволуцију затвореног квантног система каже да је унитарна (користећи математичку терминологију може се рећи да је оваква еволуција инвертибилна, док је у физичком смислу оваква еволуција реверзибилна). Израз (3.2) је Шредингеров закон временске еволуције затворених квантних система.

Стања физичких система која се могу описати векторима стања  $|\psi(t)\rangle$  су такозвана чиста стања. Поред њих постоје и мешана стања, која представљају мешавину више чистих стања. Код мешаних стања систем се налази у одређеном стању али нам мерење не даје довољно информација о томе у ком се стању налази тако да имамо само статистичку вероватноћу добијања неког резултата. Таква стања се описују такозваним статистичким операторима  $\hat{\rho}$  ("матрицама густине") а не векторима стања. Опис преко статистичких оператора је дакле општији опис квантномеханичких стања зато што се њима могу описати и чиста и мешана стања, при чему за чиста стања важи једнакост  $\text{tr}\rho^2 = \text{tr}\rho$ , док за мешана стања важи неједнакост  $\text{tr}\rho^2 < \text{tr}\rho$ .

Претпоставимо да је у неком почетном тренутку  $t_0$  стање система описано статистичким оператором:

$$\hat{\rho}(t_0) = \sum_{\alpha} \omega_{\alpha} |\psi_{\alpha}(t_0)\rangle \langle \psi_{\alpha}(t_0)|, \quad (3.3)$$

где су  $\omega_{\alpha}$  позитивне статистичке тежине, за које важи  $\sum_{\alpha} \omega_{\alpha} = 1$ , а  $|\psi_{\alpha}(t_0)\rangle$  нормирани вектор стања који еволуира у времену у складу са Шредингеровом

једначином. Стање система у неком временском тренутку  $t$  се може, у складу са изразом (3.2), представити као:

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{\alpha} \omega_{\alpha} \hat{U}(t, t_0) |\psi_{\alpha}(t_0)\rangle \langle \psi_{\alpha}(t_0)| \hat{U}^{\dagger}(t, t_0), \quad (3.4)$$

што се може написати у краћем облику:

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t, t_0) \hat{\rho}(t_0) \hat{U}^{\dagger}(t, t_0). \quad (3.5)$$

Диференцирањем ове једначине по времену лако се добија једначина временске еволуције статистичког оператора:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)], \quad (3.6)$$

која је позната као Лиувил-фон Нојманова (Liouville-von Neumann) једначина.

Као што је већ речено, физички системи за које важи Шредингеров закон и чија је временска еволуција унитарна су такозвани затворени физички системи. Сваком затвореном систему се може приписати хамилтонијан који се у општем случају може изразити као збир:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{ext}, \quad (3.7)$$

где је  $\hat{H}_0$  сопствени хамилтонијан а  $\hat{V}_{ext}$  интеракциони потенцијал који је последица деловања неког спољашњег поља. Физички системи за које важи  $\hat{V}_{ext} = 0$  су такозвани изоловани физички системи. Може се рећи да су изоловани системи специјалан случај затворених система за које не постоји деловање спољашњег поља. Када се у оквиру квантне механике физички систем посматра као изолован претпоставља се да окружење система нема утицај на систем. Када се физички систем посматра као затворен систем узима се у обзир деловање окружења на систем, али се претпоставља да је окружење класични а не квантни систем, при чему постоји само утицај окружења на систем али не и повратни утицај система на окружење. Није тешко увидети да поменуте претпоставке нису у потпуности реалне. Осим можда целокупног универзума, сваки реални физички систем има неко окружење са којим интерагује, при чему се може разматрати колико је та интеракција значајна, односно колики је њен утицај на систем и окружење, тако да је посматрање квантних система као затворених система заправо једна апроксимација. У случајевима када је интеракција са окружењем веома слаба, значајне промене у систему се могу појавити само након времена које је



много дуже од времена трајања типичног експеримента, тако да тада поменута апроксимација може дати задовољавајуће резултате, што не значи да у случају слабе интеракције са окружењем системе треба посматрати као затворене. Познати и веома важни Марковљеви процеси (Rivas and Huelga 2011) су пример процеса који истовремено подразумевају и веома слабу интеракцију са окружењем и отвореност система. Када је поменута интеракција довољно јака, или када је за извођење неког експеримента потребно дуже време, утицај окружења се не може занемарити, па се у таквим случајевима системи морају моделовати не као затворени већ као отворени квантни системи (Breuer and Petruccione 2002, Rivas and Huelga 2011).

Отворен квантни систем се може дефинисати као физички систем који је у непрекидном, неизбежном и узајамном деловању са било којим другим физичким системом, тако да се његова временска еволуција не може описати Шредингеровим законом. Интеракција отвореног система са другим системима се не може свести на спољашње поље које се појављује у хамилтонијану (3.7) . Отворени системи имају још једну важну особину - не може им се једнозначно приписати хамилтонијан.

Поред наведених аргумената који говоре у прилог томе да је реалне физичке системе потребно посматрати као отворене системе треба имати у виду да и сама поставка квантне теорије као такве налаже потребу за разматрањем отворених квантних система. Квантна теорија обухвата детерминистички закон, Шредингерову једначину, којом је заправо одређена временска еволуција вероватноће налажења честице у неком делу простора. Када се разматра вероватноћа потребно је претпоставити случајно појављивање догађаја који су реализације дистрибуције вероватноће. Да би се такви догађаји дешавали квантни систем мора бити под деловањем неког окружења. Такође сам чин мерења, емпиријски тест статистичких предвиђања, захтева интеракцију квантних система са мерним уређајима, дакле у току извођења било каквог експеримента физички систем је отворен (Breuer and Petruccione 2002, Rivas and Huelga 2011).

Када интеракција система и окружења није занемарљива то са собом повлачи бројне и занимљиве последице. Окружење може апсорбовати део енергије система, а такође може и предати део своје енергије систему. Као последица отворености квантног система долази и до појаве квантне декохеренције, појаве која се најједноставније може описати као прелаз из чистог у мешано стање услед квантне

сплетености са окружењем. Једна од последица отворености је и другачија временска еволуција. Главна разлика временске еволуције отворених у односу на временску еволуцију затворених система је управо у томе што у случају отворених система долази до декохеренције - чиста стања не остају увек чиста стања, тако да временска еволуција отворених система није унитарна. То управо значи да теорија отворених квантних система не може бити формулисана стандардним формализмом вектора стања, него се мора користити општији формализам такозваних статистичких оператора, као и то да се за опис временске еволуције не може користити Шредингерова једначина већ неке друге једначине чије су формулације управо један од главних задатака теорије отворених квантних система.

Отворени систем је квантни систем  $A$  који је повезан са другим квантним системом  $B$ , којим се моделује окружење. Систем  $A$  дакле представља подсистем сложеног система  $A + B$ , при чему се комбиновани сложени систем типично (а свакако у теорији отворених квантних система) посматра као затворен систем. Окружење  $B$  није остатак света, нити је сложени систем комплетан универзум већ и сам има неко окружење, па се зато може поставити питање да ли је посматрање сложеног система као затвореног система довољно добра апроксимација. У пракси се разматрају управо такви модели где је сложени систем у таквом стању да су промене у њему изазване спољашњим утицајима занемарљиве тако да се он може сматрати затвореним системом, што значи да се његова временска еволуција може сматрати унитарном. Стање подсистема  $A$  се мења и услед сопствене динамике и услед интеракције са окружењем  $B$ . Интеракција са окружењем доводи до извесних корелација између система и окружења тако да се промене стања система  $A$  не могу описивати унитарном динамиком. Динамика подсистема  $A$  индукована еволуцијом сложеног система се назива динамика редукованог система, док се за сам систем  $A$  користи назив редуковани систем. Када се говори о отвореном квантном систему  $A$  за систем  $B$  се користи термин окружење. Термин резервоар се користи у случају када окружење има бесконачни број степени слободе, док се термин купатило или термално купатило користи за резервоар који се налази у стању термодинамичке равнотеже (Breuer and Petruccione 2002, Rivas and Huelga 2011).

Може се рећи да је најважнији практични разлог као и највећи проблем за изучавање и примену отворених квантних система то што је у бројним важним физичким ситуацијама комплетан математички модел динамике комбинованог система

превише компликован. Окружење може, на пример, имати бесконачно много степени слободе, при чему би егзактни модел захтевао решавање бесконачног система једначина. Чак и када би решење таквог проблема било могуће након тога би било потребно из тако великог скупа података издвојити релевантне физичке величине. Поред тога честе су ситуације у којима многи степени слободе окружења или нису познати или су без могућности контроле. Зато се покушава са једноставнијим описом у простору редукованих стања који је формиран ограниченим скупом физички релевантних параметара што се постиже разним аналитичким или апроксимативним методама које се формулишу у оквиру теорије отворених квантних система.

Ако се сложени систем који се састоји од два подсистема А и В посматра као затворени систем његова временска еволуција је унитарна. Временска еволуција појединачних подсистема није унитарна тако да се не може описивати Шредингеровом једначином. Означимо са  $\mathcal{H}_A$  Хилбертов простор стања система А, а са  $\mathcal{H}_B$  Хилбертов простор стања окружења В. Хилбертов простор стања сложеног система А + В је онда дат као тензорски производ простора  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ . Хамилтонијан сложеног система се може изразити на следећи начин:

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_A \otimes \hat{I}_B + \hat{I}_A \otimes \hat{H}_B + \hat{H}_I(t), \quad (3.8)$$

где су  $\hat{I}_A$  и  $\hat{I}_B$  идентични оператори у Хилбертовом простору  $\mathcal{H}_A$ , односно  $\mathcal{H}_B$ ,  $\hat{H}_A$  сопствени хамилтонијан отвореног система А,  $\hat{H}_B$  хамилтонијан окружења, а  $\hat{H}_I(t)$  хамилтонијан којим се описује интеракција система и окружења и који у општем случају зависи од времена. Сва разматрања од интереса се тичу подсистема А. Опсервабле које се тичу система А имају форму  $\hat{X} \otimes \hat{I}_B$ , где је  $\hat{X}$  оператор који делује на Хилбертовом простору  $\mathcal{H}_A$ . Ако је стање система описано статистичким оператором  $\hat{\rho}$  онда очекиване вредности свих опсервабли које делују у Хилбертовом простору отвореног система могу да се дефинишу на следећи начин:

$$\langle \hat{X} \rangle = \text{tr}_A \{ \hat{X} \hat{\rho}_A \}, \quad (3.9)$$

где је:

$$\hat{\rho}_A = \text{tr}_B \hat{\rho}, \quad (3.10)$$

редуковани статистички оператор отвореног квантног система А. Овде  $\text{tr}_A$  означава парцијални траг у односу на Хилбертов простор отвореног система, док  $\text{tr}_B$  означава

парцијални траг по степенима слободе окружења  $B$ . Редуковани статистички оператор  $\hat{\rho}_A(t)$  се добија на основу статистичког оператора сложеног система операцијом парцијалног трага по степенима слободе окружења (3.10). Сложени систем као затворен систем има унитарну временску еволуцију па се за стање отвореног система а може написати:

$$\hat{\rho}_A(t_1) = \text{tr}_B\{\hat{U}(t_1, t_0)\hat{\rho}(t_0)\hat{U}^\dagger(t_1, t_0)\}, \quad (3.11)$$

где је  $\hat{U}(t_1, t_0)$  оператор временске еволуције целог система. Једначина временске еволуције редукованог статистичког оператора  $\hat{\rho}_A$  може се добити узимањем парцијалног трага по степенима слободе окружења обе стране Лиувил-фон Нојманове једначине за цео систем:

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}_A(t) = -\frac{i}{\hbar}\text{tr}_B[\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)]. \quad (3.12)$$

Временска еволуција отвореног система се може приказати као пресликавање стања неког подсистема  $A$  у временском тренутку  $t_0$  у стање тог подсистема у временском тренутку  $t_1$ :

$$\mathcal{E}(t_1, t_0) : \hat{\rho}_A(t_0) \rightarrow \hat{\rho}_A(t_1). \quad (3.13)$$

Овакво пресликавање које описује промену стања отвореног система у току времена назива се динамичка мапа. Простор статистичких оператора није Хилбертов простор, већ Банахов (Banach) простор (Rivas and Huelga 2011), који се дефинише као простор који је комплетан, линеаран и нормиран, при чему у њему није, за разлику од Хилбертовог простора, дефинисан скаларни производ. Сваки Хилбертов простор је и Банахов простор, док обрнуто не важи. Динамичке мапе делују над Банаховим простором стања подсистема  $A$ ,  $\mathcal{B}(\mathcal{H}_A)$ , којег чине ермитски оператори  $\hat{X}$  са коначном нормом дефинисаном на следећи начин:

$$\|\hat{X}\| = \text{tr}\sqrt{\hat{X}^\dagger\hat{X}} = \text{tr}\sqrt{\hat{X}^2}. \quad (3.14)$$

Статистички оператори који описују квантна стања отвореног система припадају овом Банаховом простору при чему испуњавају и додатне услове:  $\hat{\rho} \geq 0$ ,  $\|\hat{\rho}\| = 1$  и  $\text{tr}\hat{\rho} = 1$ . Да би динамичка мапа описивала физички реалну временску еволуцију мора пресликавати позитивне операторе јединичног трага (статистичке операторе) у такође позитивне операторе јединичног трага. Динамичке мапе које имају наведено својство називају се позитивне динамичке мапе. Најопштији облик динамичке мапе која описује

временску еволуцију квантног стања  $\hat{\rho}_A$  отвореног квантног подсистема А дат је следећим изразом (Rivas and Huelga 2011):

$$\hat{\rho}_A(t_1) = \sum_{\alpha} \hat{K}_{\alpha}(t_1, t_0, \hat{\rho}_A(t_0)) \hat{\rho}_A(t_0) \hat{K}_{\alpha}^{\dagger}(t_1, t_0, \hat{\rho}_A(t_0)), \quad (3.15)$$

где су  $\hat{K}_{\alpha}(t_1, t_0, \hat{\rho}_A)$  оператори који зависе и од стања  $\hat{\rho}_A$  у почетном временском тренутку (Breuer and Petruccione 2002, Rivas and Huelga 2011). Динамичка мапа која делује на стање  $\hat{\rho}_A$  у општем случају не зависи само од оператора еволуције  $\hat{U}(t_1, t_0)$  већ и од параметара подсистема В као и од почетног стања подсистема А на који делује. Може се показати да зависност динамичке мапе од стања у почетном временском тренутку постоји само онда када у почетном тренутку постоје незанемарљиве корелације између подсистема А и В (Rivas and Huelga 2011). Почетно стање  $\hat{\rho}(t_0)$  може да се напише као збир тензорског производа почетних стања подсистема А и В и корелационог члана  $\hat{\rho}_{corr}(t_0)$ :

$$\hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}_A(t_0) \otimes \hat{\rho}_B(t_0) + \hat{\rho}_{corr}(t_0), \quad (3.16)$$

при чему члан  $\hat{\rho}_{corr}(t_0)$  не представља квантно стање тако да важи:

$$\text{tr}_A |\hat{\rho}_{corr}(t_0)| = \text{tr}_B |\hat{\rho}_{corr}(t_0)| = 0. \quad (3.17)$$

Користећи спектралну декомпозицију за почетно стање подсистема В:

$$\hat{\rho}_B(t_0) = \sum_i \lambda_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (3.18)$$

и изразе (3.16) и (3.17) добијамо:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(t_1, t_0)[\hat{\rho}_A(t_0)] &= \text{tr}_B \{ \hat{U}(t_1, t_0) [\hat{\rho}_A(t_0) \otimes \hat{\rho}_B(t_0) + \hat{\rho}_{corr}(t_0)] \hat{U}^{\dagger}(t_1, t_0) \} = \\ &= \sum_i \lambda_i \text{tr}_B \{ \hat{U}(t_1, t_0) [\hat{\rho}_A(t_0) \otimes \\ &|\psi_i\rangle\langle\psi_i|] \hat{U}^{\dagger}(t_1, t_0) \} + \text{tr}_B \{ \hat{U}(t_1, t_0) \hat{\rho}_{corr}(t_0) \hat{U}^{\dagger}(t_1, t_0) \}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

тако да се динамичка мапа може написати у облику:

$$\mathcal{E}(t_1, t_0)[\hat{\rho}_A(t_1)] = \sum_i \hat{K}_{\alpha}(t_1, t_0) \hat{\rho}_A(t_0) \hat{K}_{\alpha}^{\dagger}(t_1, t_0) + \delta\hat{\rho}(t_1, t_0), \quad (3.20)$$

где је  $\delta\hat{\rho}(t_1, t_0) = \text{tr}_B \{ \hat{U}(t_1, t_0) \hat{\rho}_{corr}(t_0) \hat{U}^{\dagger}(t_1, t_0) \}$ .

Оператори  $\hat{K}_{\{i,j\}}(t_1, t_0) = \sqrt{\lambda_i} \langle\psi_i|U(t_1, t_0)|\psi_i\rangle$ ,  $\alpha = \{i, j\}$ , зависе само од глобалног унитарног оператора еволуције  $\hat{U}(t_1, t_0)$  и од почетног стања подсистема В, али нехомогени члан  $\delta\hat{\rho}(t_1, t_0)$  није независан од стања  $\hat{\rho}_A$  управо због корелационог члана  $\hat{\rho}_{corr}(t_0)$ . Присуство корелационог члана је заправо узрок зависности динамичке мапе од почетног стања подсистема.

Динамичка мапа која је независна од стања на које делује назива се универзална динамичка мапа (УДМ). Универзална динамичка мапа описује физички реалну временску еволуцију за свако стање  $\hat{\rho}_A$ . Може се показати да важи следеће тврђење: динамичка мапа је универзална динамичка мапа ако и само ако се почетно стање  $\hat{\rho}(t_0)$  може написати у облику:

$$\hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}_A(t_0) \otimes \hat{\rho}_B(t_0), \quad (3.21)$$

при чему је  $\hat{\rho}_B(t_0)$  фиксно за свако  $\hat{\rho}_A(t_0)$  (Rivas and Huelga 2011).

Услов да се почетно стање може приказати као тензорски производ почетних стања подсистема никада није у потпуности испуњен зато што су квантне корелације увек присутне због интеракције подсистема. И поред тога, динамичке мапе које се на основу ове претпоставке сматрају универзалним динамичким мапама могу довољно добро да опишу многе реалистичне физичке ситуације. Најопштији облик универзалне динамичке мапе је дат изразом (Rivas and Huelga 2011):

$$\hat{\rho}_A(t_1) = \sum_{\alpha} \hat{K}_{\alpha}(t_1, t_0) \hat{\rho}_A(t_0) \hat{K}_{\alpha}^{\dagger}(t_1, t_0), \quad (3.22)$$

који се назива Краусова декомпозиција, у којој такозвани Краусови оператори не зависе од почетног стања  $\hat{\rho}_A(t_0)$ , односно тичу се сваког почетног стања, то јест, сваког елемента Банаховог простора статистичких оператора.

Универзалне динамичке мапе поседују још једно важно математичко својство. Размотримо ситуацију у којој је сложени систем А + В део већег сложеног система А + В + С, где је С компонента сложеног система која не реагује ни са А ни са В. Како систем С није повезан са системима А и В онда унитарна еволуција комплетног система А + В + С има форму  $\hat{U}_{AB}(t_1, t_0) \otimes \hat{U}_C(t_1, t_0)$ , где је  $\hat{U}_C(t_1, t_0)$  унитарни оператор еволуције система С. Ако је  $\hat{\rho}_{ABC}(t_0)$  почетно стање сложеног система А + В + С онда се стање у неком временском тренутку  $t_1$  може изразити као:

$$\hat{\rho}_{ABC}(t_1) = \hat{U}_{AB}(t_1, t_0) \otimes \hat{U}_C(t_1, t_0) \hat{\rho}_{ABC}(t_0) \hat{U}_{AB}^{\dagger}(t_1, t_0) \otimes \hat{U}_C^{\dagger}(t_1, t_0). \quad (3.23)$$

Узимањем парцијалног трага по степенима слободе система С добијамо:

$$\hat{\rho}_{AB}(t_1) = \hat{U}_{AB}(t_1, t_0) \text{tr}_C [\hat{U}_C(t_1, t_0) \hat{\rho}_{ABC}(t_0) \hat{U}_C^{\dagger}(t_1, t_0)] \hat{U}_{AB}^{\dagger}(t_1, t_0) = \hat{U}_{AB}(t_1, t_0) \hat{\rho}_{AB}(t_0) \hat{U}_{AB}^{\dagger}(t_1, t_0), \quad (3.24)$$

на основу чега се може закључити да присуство система  $C$  не мења динамику система  $A + B$ . Како је еволуција система  $A$  описана универзалном динамичком мапом почетни услов мора бити:

$$\hat{\rho}_{AB}(t_0) = \hat{\rho}_A(t_0) \otimes \hat{\rho}_B(t_0), \quad (3.25)$$

док се почетно стање за сложени систем  $A + B + C$  може написати као:

$$\hat{\rho}_{ABC}(t_0) = \hat{\rho}_{AC}(t_0) \otimes \hat{\rho}_B(t_0), \quad (3.26)$$

при чему је  $\hat{\rho}_B(t_0)$  фиксно за свако стање  $\hat{\rho}_{AC}(t_0)$ .

За динамику система  $A + C$  онда важи:

$$\begin{aligned} \hat{\rho}_{AC}(t_1) = \text{tr}_B[\hat{U}_{AB}(t_1, t_0) \otimes \hat{U}_C(t_1, t_0) \hat{\rho}_{AC}(t_0) \otimes \hat{\rho}_B(t_0) \hat{U}_{AB}^\dagger(t_1, t_0) \otimes \\ \hat{U}_C^\dagger(t_1, t_0)] = \sum_\alpha K_\alpha(t_1, t_0) \otimes \hat{U}_C(t_1, t_0) \hat{\rho}_{AC}(t_0) K_\alpha^\dagger(t_1, t_0) \otimes \hat{U}_C^\dagger(t_1, t_0) = \\ \mathcal{E}(t_1, t_0) \otimes \mathcal{U}(t_1, t_0)[\hat{\rho}_{AC}(t_0)]. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Мапа  $\mathcal{U}(t_1, t_0)[\cdot] = \hat{U}_C(t_1, t_0)[\cdot] \hat{U}_C^\dagger(t_1, t_0)$  представља унитарну еволуцију подсистема  $C$ . Ако је еволуција система  $A$  дата универзалном динамичком мапом  $\mathcal{E}(t_1, t_0)$  онда је за било коју унитарну еволуцију  $\mathcal{U}(t_1, t_0)$  тензорски производ  $\mathcal{E}(t_1, t_0) \otimes \mathcal{U}(t_1, t_0)$  такође универзална динамичка мапа. Ако се  $\mathcal{E}(t_1, t_0) \otimes \mathcal{U}(t_1, t_0)$  напише у облику:

$$\mathcal{E}(t_1, t_0) \otimes \mathcal{U}(t_1, t_0) = [\mathcal{E}(t_1, t_0) \otimes \hat{I}_C][\hat{I}_A \otimes \mathcal{U}(t_1, t_0)], \quad (3.28)$$

може се закључити да из позитивности мапе  $\mathcal{E}(t_1, t_0) \otimes \mathcal{U}(t_1, t_0)$  следи да је и  $\mathcal{E}(t_1, t_0) \otimes \hat{I}_C$  позитивна мапа. За динамичке мапе  $\mathcal{E}(t_1, t_0)$  које имају ово својство каже се да су комплетно позитивне мапе. Присуство неког система  $C$  се увек мора узимати у обзир тако да се универзална динамичка мапа може дефинисати као динамичка мапа која је комплетно позитивна. Динамичка мапа је комплетно позитивна ако и само ако се може записати у облику Краусове декомпозиције која је дата изразом (3.22). Ова еквиваленција комплетне позитивности и Краусове декомпозиције је позната као Краусова теорема (Rivas and Huelga 2011).

Када је дата универзална динамичка мапа  $\mathcal{E}(t_1, t_0)$  може се поставити питање да ли постоји друга универзална динамичка мапа која описује временску еволуцију у обрнутом смеру, од  $t_1$  до  $t_0$ ,  $\mathcal{E}(t_0, t_1)$  тако да важи:

$$\mathcal{E}(t_0, t_1) \mathcal{E}(t_1, t_0) = \mathcal{E}^{-1}(t_1, t_0) \mathcal{E}(t_1, t_0) = \hat{I}. \quad (3.29)$$

За универзалну динамичку мапу  $\mathcal{E}(t_1, t_0)$  постоји инверзно пресликавање  $\mathcal{E}^{-1}(t_1, t_0)$  које је такође универзална динамичка мапа ако и само ако је универзална динамичка мапа  $\mathcal{E}(t_1, t_0)$  унитарна, дакле ако важи  $\mathcal{E}(t_1, t_0) = \mathcal{U}(t_1, t_0)$ . Чињеница да у општем случају инверзно пресликавање универзалне динамичке мапе не мора бити универзална динамичка мапа одсликава иреверзибилност динамике отвореног квантног система.

Важна карактеристика динамичких мапа је континуалност у времену. Претпоставимо да је позната еволуција система између временских тренутака  $t_0$  и  $t_1$ , као и између временских тренутака  $t_1$  и  $t_2$ . Поменути континуалност би онда значила да за временску еволуцију између тренутака  $t_0$  и  $t_2$  важи следећа релација:

$$\mathcal{E}(t_2, t_0) = \mathcal{E}(t_2, t_1)\mathcal{E}(t_1, t_0). \quad (3.30)$$

Ако је у почетном тренутку  $t_0$  био испуњен услов да нема корелација између отвореног система и окружења то не значи да корелација неће бити ни у временском тренутку  $t_1$ , тако да у општем случају услов да је  $\mathcal{E}(t_2, t_1)$  универзална динамичка мапа није испуњен.

Претпоставимо да је почетно стање  $\hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}_A(t_0) \otimes \hat{\rho}_B(t_0)$  и да су унитарни оператори временске еволуције  $\hat{U}(t_2, t_1)$ ,  $\hat{U}(t_1, t_0)$  и  $\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1)\hat{U}(t_1, t_0)$ . За временску еволуцију подсистема А од  $t_0$  до  $t_1$  важи:

$$\mathcal{E}(t_1, t_0)[\hat{\rho}_A(t_0)] = \text{tr}_B\{\hat{U}(t_1, t_0)\hat{\rho}_A(t_0) \otimes \hat{\rho}_B(t_0)\hat{U}^\dagger(t_1, t_0)\} = \sum_\alpha \hat{K}_\alpha(t_1, t_0)\hat{\rho}_A(t_0)\hat{K}_\alpha^\dagger(t_1, t_0), \quad (3.31)$$

док за временску еволуцију од  $t_0$  до  $t_2$  важи:

$$\mathcal{E}(t_2, t_0)[\hat{\rho}_A(t_0)] = \text{tr}_B\{\hat{U}(t_2, t_0)\hat{\rho}_A(t_0) \otimes \hat{\rho}_B(t_0)\hat{U}^\dagger(t_2, t_0)\} = \sum_\alpha \hat{K}_\alpha(t_2, t_0)\hat{\rho}_A(t_0)\hat{K}_\alpha^\dagger(t_2, t_0). \quad (3.32)$$

Из наведених израза се може закључити да су  $\mathcal{E}(t_1, t_0)$  и  $\mathcal{E}(t_2, t_0)$  универзалне динамичке мапе. За временску еволуцију од  $t_1$  до  $t_2$  важи:

$$\mathcal{E}(t_2, t_1)[\hat{\rho}_A(t_1)] = \text{tr}_B\{\hat{U}(t_2, t_1)\hat{\rho}_A(t_1)\hat{U}^\dagger(t_2, t_1)\} = \sum_\alpha \hat{K}_\alpha(t_2, t_1, \hat{\rho}_A)\hat{\rho}_A(t_1)\hat{K}_\alpha^\dagger(t_2, t_1, \hat{\rho}_A). \quad (3.33)$$



Стање  $\hat{\rho}(t_1)$  се не може записати у облику тензорског производа и зависи од почетних стања тако да  $\mathcal{E}(t_2, t_1)$  није универзална динамичка мапа. Чак и ако мапу  $\mathcal{E}(t_2, t_1)$  дефинишемо на следећи начин:

$$\mathcal{E}(t_2, t_1) = \mathcal{E}(t_2, t_0)\mathcal{E}^{-1}(t_1, t_0), \quad (3.34)$$

тако да тривијално задовољава услов  $\mathcal{E}(t_2, t_0) = \mathcal{E}(t_2, t_1)\mathcal{E}(t_1, t_0)$ , не решава се поменути проблем, зато што мапа  $\mathcal{E}^{-1}(t_1, t_0)$  није комплетно позитивна осим када је мапа  $\mathcal{E}(t_1, t_0)$  унитарна, тако да следи да мапа  $\mathcal{E}(t_2, t_1)$  није универзална динамичка мапа.

Процес који може бити описан фамилијом динамичких мапа таквих да важи услов  $\mathcal{E}(t_2, t_0) = \mathcal{E}(t_2, t_1)\mathcal{E}(t_1, t_0)$ , при чему је мапа  $\mathcal{E}(t_2, t_1)$  универзална динамичка мапа за сваки временски тренутак  $t_1$  назива се квантни Марковљев процес. Марковљеви процеси имају важну улогу у физици и осталим природним наукама (Rivas and Huelga 2011). Многи типови стохастичких процеса се, уз одређене апроксимације, могу сматрати Марковљевим процесима. У класичној теорији вероватноће Марковљев процес се посматра као стохастички процес  $X(t)$  који има кратку меморију, односно процес који брзо заборавља предисторију тако да цела хијерархија заједничких вероватноћа може бити реконструисана на основу само две функције дистрибуције. Услов може бити формулисан преко вероватноће  $\mu$  да важи  $X(t) \in B$  под условом да важе једнакости  $X(t_m) = x_m, \dots, X(t_1) = x_1$

$$\mu(X(t) \in B | X(t_m) = x_m, \dots, X(t_1) = x_1) = \mu(X(t) \in B | X(t_m) = x_m), \quad (3.35)$$

где су  $B$  такозвани Борелови скупови, подскупови скупа реалних бројева који имају форму  $(-\infty, x), x \in \mathbb{R}$ . Ово је такозвани услов Марковљевости. Подразумева се да важи за све вредности  $m = 1, 2, 3, \dots$ , за све уређене скупове вредности параметра  $t$ :

$$t_1 < t_2 < \dots < t_m < t, \quad (3.36)$$

за све Борелове скупове и све вредности  $x_1, x_2, \dots, x_m \in \mathbb{R}^d$ . Услов Марковљевости тврди да вероватноћа догађаја  $X(t) \in B$ , који је условљен скупом  $m$  претходних догађаја  $X(t_1) = x_1, \dots, X(t_m) = x_m$  заправо зависи само од последњег догађаја  $X(t_m) = x_m$ .

Типично динамика отвореног квантног система није Марковљева, зато што се између система развијају корелације у току њихове еволуције тако да редукована

динамичка мапа није универзална динамичка мапа за неко произвољно време  $t_1$ , али ако корелациони члан не утиче знатно на динамику, Марковљев модел може бити добра апроксимација временске еволуције. Марковљеве динамичке мапе се могу довести у везу са одговарајућим диференцијалним једначинама. За неко позитивно  $\varepsilon$  на основу разлике:

$$\hat{\rho}(t + \varepsilon) - \hat{\rho}(t) = [\mathcal{E}(t + \varepsilon, 0) - \mathcal{E}(t, 0)]\rho(0) = [\mathcal{E}(t + \varepsilon, t) - 1] \mathcal{E}(t, 0)\rho(0) = [\mathcal{E}(t + \varepsilon, t) - 1]\hat{\rho}(t), \quad (3.37)$$

може се добити линеарна диференцијална једначина за  $\hat{\rho}(t)$  - такозвана Марковљева мастер једначина:

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{\rho}(t+\varepsilon) - \hat{\rho}(t)}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{[\mathcal{E}(t+\varepsilon, t) - 1]}{\varepsilon} \hat{\rho}(t) = \mathcal{L}_t \hat{\rho}(t), \quad (3.38)$$

где је  $\mathcal{L}_t$  генератор временске еволуције:

$$\mathcal{L}_t = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{[\mathcal{E}(t+\varepsilon, t) - 1]}{\varepsilon}. \quad (3.39)$$

Може се показати да је диференцијална једначина Марковљева ако и само ако може бити написана у следећем облику (Rivas and Huelga 2011):

$$\frac{d\hat{\rho}(t)}{dt} = -i[\hat{H}, \hat{\rho}(t)] + \sum_k \gamma_k(t) \left[ \hat{V}_k(t) \hat{\rho}(t) \hat{V}_k^\dagger(t) - \frac{1}{2} \{ \hat{V}_k^\dagger(t) \hat{V}_k(t), \hat{\rho}(t) \} \right], \quad (3.40)$$

где су  $\gamma_k(t)$  такозване "функције пригушења" које се односе на процесе квантне дисипације или квантне декохеренције и за које важи  $\gamma_k(t) \geq 0$  за свако  $k$  и  $t$ , док су оператори  $\hat{V}_k(t)$  такозвани Линдбладови оператори. Оператор  $\hat{H}$  није само хамилтонијан отвореног система већ садржи и ренормализационе чланове који су последица интеракције отвореног система са окружењем (Rivas and Huelga 2011). Израз (3.40) је такозвани Линдбладов облик мастер једначине и важи само за Марковљеве процесе. На основу (3.40) може се рећи да је динамика Марковљева када генератор временске еволуције има следећи облик:

$$\mathcal{L}_t \hat{\rho}(t) = -i[\hat{H}, \hat{\rho}(t)] + \sum_k \gamma_k(t) \left[ \hat{V}_k(t) \hat{\rho}(t) \hat{V}_k^\dagger(t) - \frac{1}{2} \{ \hat{V}_k^\dagger(t) \hat{V}_k(t), \hat{\rho}(t) \} \right]. \quad (3.41)$$

Ако је генератор еволуције временски независан, има форму:

$$\mathcal{L} \hat{\rho}(t) = -i[\hat{H}, \hat{\rho}(t)] + \sum_k \gamma_k \left[ \hat{V}_k \hat{\rho}(t) \hat{V}_k^\dagger - \frac{1}{2} \{ \hat{V}_k^\dagger \hat{V}_k, \hat{\rho}(t) \} \right], \quad (3.42)$$

и тада се ради о хомогеном Марковљевом процесу за који се фамилија динамичких мапа математички своди на полугрупу (Rivas and Huelga 2011). Хомогеност времена значи да за разматрање динамике система није важан почетни временски тренутак већ само трајање временског интервала. Сматра се да хомогеност времена може бити оправдана претпоставком да је окружење у термодинамичкој равнотежи (Rivas and Huelga 2011).

## **4. Елементи квантне теорије декохеренције и проблем преласка из квантног у класични свет**

Квантна механика има репутацију једне од најуспешнијих и најреволуционарнијих теорија у физици. Сјајне резултате по питању слагања предвиђања теорије са експерименталним подацима и примене теорије на техничка и технолошка достигнућа од почетка су пратиле извесне потешкоће око интерпретације саме теорије. Главни концепцијски проблем квантне механике је проблем мерења и са њим повезан концепт преласка из квантног у класични свет (Giulini et al 1996). Конкретан напредак у разумевању ових проблема почео се назирати седамдесетих година двадесетог века када је уочено да окружење квантних система има много важнију улогу него што се до тада мислило. Такав приступ је био занемарен због утицаја класичне парадигме, која је усмерена на проучавање изолованих физичких система. Поред тога ни у описивању појава у којима постоји дисипација енергије нигде се експлицитно није појављивало окружење као систем са својим степенима слободе, ни интеракција система са поменутиим окружењем. Новим концептом декохеренције (Giulini et al 1996) уочено је да квантни систем брзо мења своју природу чак и при минималној интеракцији са окружењем. Квантна теорија декохеренције разматра проблем мерења и преласка из квантног у класични свет, иако је још увек отворено питање да ли га и решава у потпуности.

Основна идеја квантне теорије декохеренције је веома једноставна: да би се формирала коректна квантномеханичка слика понашања и својстава физичког система, мора се разматрати и интеракција система са његовим окружењем, које у општем случају има велики број степени слободе. У класичној физици на окружење се гледа као на нешто што је, или извор шума, или поремећаја на систему чија својства треба мерити. Због тога је уведен идеализовани појам изолованог система, тако да се експерименталним путем може доћи до поимања истинске природе посматраног система. Постојање појаве квантне испреплетености показује да су корелације интерагујућих система од фундаменталог значаја и да доводе до појава које нису присутне код појединачних система. Теорија декохеренције се базира на ставу да је интеракција између система и окружења незаобилазна и да се при том јављају извесне корелације које се не смеју занемарити. У огромној већини практичних случајева интеракција система са окружењем доминира и ономогућава нам да региструјемо чиста

стања. Показало се да декохеренција делује у изузетно кратком временском периоду и да захтева присуство минималног окружења. С повећањем система ефекти декохеренције расту, тј. што је систем већи то брже наступа декохеренција, или другачије речено, што је систем већи, веће је и његово окружење па је већи и утицај окружења. Модели у којима је окружење моделовано скупом хармонијских осцилатора показују да је временска скала  $\tau_D$ , у оквиру које настају ефекти декохеренције, неколико редова величине мања од временске скале у оквиру које настају ефекти топлотне релаксације. Чак и поједини микроскопски системи, као на пример велики молекули, веома брзо подлежу декохеренцији услед интеракције са окружењем и то за много краће време него што садашња мерења могу регистровати. За мезоскопске системе, као што су на пример честице прашине, позадинско космичко зрачење је довољно да изазове снажну и "тренутну" декохеренцију (Schlosshauer 2004).

Један од најреволуционарнијих концепата уведених у квантну механику је принцип суперпозиције, односно линеарности Хилбертовог простора стања. Ако су  $|s_1\rangle$  и  $|s_2\rangle$  два стања система онда је свака линеарна комбинација ових стања,  $\alpha|s_1\rangle + \beta|s_2\rangle$ , где су  $\alpha$  и  $\beta$  произвољни комплексни бројеви, такође једно од могућих стања. Док је принцип суперпозиције стања за микроскопске системе експериментално потврђен (на пример кроз испољавање интерференционих ефеката), примена овог принципа на појаве макроскопског нивоа није у складу са резултатима мерења и опажања, јер се у процесу мерења увек добија да се систем налази у само једном од стања а не у суперпозицији таквих стања. Неиспољавање принципа суперпозиције у процесу добијања резултата мерења је основа онога што се назива проблемом мерења у квантној механици, који је главни концепцијски проблем квантне механике још од њеног заснивања. Интерпретације квантне механике се међусобно разликују пре свега по различитим приступима овом проблему. По првој шире прихваћеној интерпретацији, тзв. Копенхагенској интерпретацији, сматра се да постоји стриктна граница између квантног и класичног. Питање које се обично повезује са проблемом мерења је како класични свет, односно свет какав опажамо чулима, произилази из квантних закона.

У идеалном моделу квантног мерења, који је поставио фон Нојман (von Neumann) 1932. године (Schlosshauer 2004), микроскопски систем  $S$ , чије се стање разлаже преко базисних вектора  $|s_n\rangle$  у Хилбертовом простору  $\mathcal{H}_S$ , интерагује са

мерним апаратом  $A$ , чије се стање разлаже преко базисних вектора  $|a_n\rangle$  у простору  $\mathcal{H}_A$ , где  $|a_n\rangle$  представљају макроскопски различита стања мерног уређаја која респективно одговарају различитим стањима  $|s_n\rangle$ . Ако је  $S$  у суперпозицији  $\sum_n c_n |s_n\rangle$ , а систем  $A$  у почетном стању  $|a_r\rangle$ , систем  $S + A$ , чија стања припадају простору  $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_A$ , ће због линеарности Шредингерове једначине еволуирати на следећи начин:

$$(\sum_n c_n |s_n\rangle) |a_r\rangle \xrightarrow{t} \sum_n c_n |s_n\rangle |a_n\rangle. \quad (4.1)$$

Динамичка еволуција описана изразом (4.1) се назива предмерење, зато што израз на десној страни још увек не одговара ономе што се добија на крају процеса мерења. Добијени резултат се не може сматрати статистичком мешавином стања зато што би, због једнозначности временске еволуције, из тога следило да и са леве стране (4.1) имамо статистичку мешавину стања, што није случај. Након мерења се, према изложеном моделу, добија суперпозиција стања систем-апарат. Како би се овај резултат повезао са резултатима реалног експеримента (статистичка мешавина стања), мора се или увести додатни механизам (колапс суперпозиције) или на одређен начин интерпретирати добијена суперпозиција. Овај проблем је оно што се најчешће назива проблемом мерења или проблемом одређених стања. Други проблем који заједно са проблемом одређених стања чини проблем мерења је проблем преферираног базиса који показује да у фон Нојмановом моделу идеалног мерења мерена опсервабла није у општем случају одређена. За сваки избор стања система  $\{|s_n\rangle\}$  могу се наћи одговарајућа стања мерног апарата  $\{|a_n\rangle\}$  и обрнуто, и та стања заменити у израз (4.1) којим се описује стање након предмерења. У општем случају за неки избор стања мерног уређаја одговарајућа нова стања система неће бити међусобно ортогонална тако да опсервабла повезана са тим стањима неће бити ермитска. Да би се осигурала различитост исхода мора се захтевати ортогоналност стања мерног уређаја, а када то важи показује се да је развој:

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |s_n\rangle |a_n\rangle, \quad (4.2)$$

јединствен само ако су сви коефицијенти  $c_i$  међусобно различити (Schlosshauer 2004). Ако то није случај развој се може написати користећи различите векторе стања:

$$|\Psi\rangle = \sum_n c'_n |s'_n\rangle |a'_n\rangle, \quad (4.3)$$

тако да је процес предмерања повезан са два различита процеса мерења, мерењем опсервабле  $\hat{A} = \sum_n \lambda_n |s_n\rangle\langle s_n|$  и мерењем опсервабле  $\hat{B} = \sum_n \lambda'_n |s'_n\rangle\langle s'_n|$ , иако у општем случају поменуте опсервабле могу и да не комутирају (Schlosshauer 2004).

Размотримо модел квантног мерења са урачунатим утицајем окружења коме ћемо приписати ознаку  $E$  и почетно стање  $|e_0\rangle$  у Хилбертовом простору  $\mathcal{H}_E$ . Простор стања укупног објекта систем + апарат + окружење је дат тензорским производом одговарајућих Хилбертових простора,  $\mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_E$ . Због линеарности, еволуција укупног система  $S + A + E$  ће тећи на следећи начин:

$$(\sum_n c_n |s_n\rangle) |a_r\rangle |e_0\rangle \xrightarrow{(t_1)} (\sum_n c_n |s_n\rangle |a_n\rangle) |e_0\rangle \xrightarrow{(t_2)} \sum_n c_n |s_n\rangle |a_n\rangle |e_n\rangle, \quad (4.4)$$

где су стања  $|e_n\rangle$  повезана са различитим макроскопским стањима мерног уређаја.

Закључујемо да је стање система забележено у окружењу - створена је корелација између стања систем - апарат и стања окружења. У било каквом мерењу над системом практично је немогуће укључити и посматрати све степене слободе сложеног система  $S + A + E$ . Иако је укључивање окружења неопходно за добијање комплетног описа динамичке еволуције система, у процесу мерења се обично потпуно или делимично занемарује окружење система. У разматраном случају опсервација је ограничена на систем-апарат компоненту, док сви степени слободе окружења остају ван опсега разматрања. Нека оператор  $\hat{O}_{SA}$  представља опсерваблу над  $S + A$  компонентом. Очекивана вредност  $\langle \hat{O}_{SA} \rangle$  опсервабле се добија као:

$$\langle \hat{O}_{SA} \rangle = \text{tr}(\hat{\rho}_{SAE} [\hat{O}_{SA} \otimes \hat{I}_E]) = \text{tr}_{SA}(\hat{\rho}_{SA} \hat{O}_{SA}), \quad (4.5)$$

где је статистички оператор  $\hat{\rho}_{SAE}$  укупног система  $S + A + E$  дат изразом:

$$\hat{\rho}_{SAE} = \sum_{mn} c_m c_n^* |s_m\rangle |a_m\rangle |e_m\rangle \langle s_n| \langle a_n| \langle e_n|, \quad (4.6)$$

док је редуковани статистички оператор:

$$\hat{\rho}_{SA} = \text{tr}_E(\hat{\rho}_{SAE}) = \sum_{mn} c_m c_n^* |s_m\rangle |a_m\rangle \langle s_n| \langle a_n| \langle e_n| e_m\rangle. \quad (4.7)$$

Кључна ствар која се овде разматра је ортогоналност стања средине. Како средину чини огроман број подсистема, показује се да стања средине  $|e_n\rangle$  веома брзо теже ортогоналности,  $\langle e_n | e_m \rangle(t) \rightarrow \delta_{n,m}$ , тако да редуковани статистички оператор прелази у ортогонални облик:

$$\hat{\rho}_{SA} \xrightarrow{t} \hat{\rho}_{SA}^d \approx \sum_n |c_n|^2 |s_n\rangle\langle a_n| \langle s_n| \langle a_n| = \sum_n |c_n|^2 \hat{P}_n^{(S)} \otimes \hat{P}_n^{(A)}, \quad (4.8)$$

гду су  $\hat{P}_n^{(S)}$  и  $\hat{P}_n^{(A)}$  пројектори својствених стања  $S$  и  $A$ . Види се да се у овој репрезентацији губе интерференциони чланови, односно фазна кохеренција се локално губи. То је укратко процес декохеренције узроковане окружењем.

Као што је већ речено, у моделу квантног мерења није јединствено одређен развој стања (4.1) које наступа након мерења, тако да питање која опсервабла је мерена остаје отворено. Показује се да нека стања нису подложна декохеренцији, односно да постоје тзв. преферирана стања система - "показивачка стања" (енг.: pointer states), односно "стања бројача", која су најотпорнија на утицај декохеренције. Та стања су уједно и у најмањој мери испреплетена са окружењем. Такав избор преферираних стања назива се суперселекција изазвана окружењем. У случају међудејства три или више система важи теорема о јединствености тридекомпозиције. Ако се стање  $|\Psi\rangle$  у Хилбертовом простору  $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3$  може приказати у форми:

$$|\Psi\rangle = \sum_i \alpha_i |\varphi_i\rangle_1 |\varphi_i\rangle_2 |\varphi_i\rangle_3, \quad (4.9)$$

онда је та декомпозиција јединствена. Видимо да је увођењем трећег система (окружења) нестала нејасноћа око избора једног преферираног базиса. Ова теорема међутим није довољна, јер иако уводи јединственост у причу, ни на који начин нам не указује на начин избора базиса. Окружење дакле има двоструку улогу у решавању проблема преферираног базиса: (1) бира преферирану базу и (2) као трећи подсистем укључен у процес гарантује, у складу са декомпозиционом теоремом, јединственост тако изабране базе. Природно се намеће један критеријум избора преферираног базиса - критеријум стабилности. Он се огледа у захтеву да корелације које се стварају са окружењем не уништавају већ створене корелације између система и мерног уређаја. Преферирана стања су она за која су корелације између стања система и стања мерног уређаја у најмањој мери промењене услед интеракције са окружењем. Избор стања бројача зависи од хамилтонијана који описује динамику система и његову интеракцију са окружењем, односно од тога која компонента хамилтонијана је доминантна. У том контексту посматрају се три случаја, један у коме интеракциони хамилтонијан доминира у укупном хамилтонијану (тзв. квантни лимит мерења), други у коме је хамилтонијан система доминантни члан укупног хамилтонијана (тзв. квантни лимит декохеренције) и трећи у коме оба хамилтонијана имају приближно једнак утицај на



еволуцију система. У квантном лимиту мерења динамиком система доминира интеракциони хамилтонијан тако да ће стања бројача бити својствена стања интеракционог хамилтонијана. Овај услов се назива критеријум комутативности, зато што је довољан услов за стабилност стања то да пројекциони оператори стања апарата комутирају са хамилтонијаном интеракције:

$$\left[ \hat{P}_n^{(A)}, \hat{H}_{AE} \right] = 0. \quad (4.10)$$

Преферирана стања могу се дакле пронаћи као својствена стања хамилтонијана интеракције а припадајућа показивачка опсервабла је она која комутира с тим истим хамилтонијаном. У квантном лимиту декохеренције интеракциони хамилтонијан је занемарљив у односу на хамилтонијан система, тако да су стања бројача својствена стања енергије. У трећем поменутом случају, када су оба хамилтонијана подједнако присутна у укупном хамилтонијану, преферирана стања произлазе као компромис између прва два случаја.

Хамилтонијан интеракције система и окружења често се описује процесима расејања (Schlosshauer 2004), а како потенцијали које се испољавају у тим процесима најчешће зависе од растојања, хамилтонијан интеракције комутира с положајем, па су својствена стања опсервабле положаја, егзактна преферирана стања (ова стања немају јединичну норму и не припадају Хилбертовом простору, а стања која су им најближа од свих стања која припадају Хилбертовом простору су такозвана "кохерентна стања" која имају минималну неодређеност положаја и импулса). То објашњава зашто је у људском искуству мезоскопских и макроскопских скала префериран управо положај, односно зашто су преферирана просторно локализована стања. Појава "класичности" у макросвету може се дакле приписати управо декохеренцији.

Док код квантних система свако мерење утиче на динамичку еволуцију система који се мери, код класичних система се такав утицај може занемарити тако да се еволуција класичних система може предвидети независно од процеса мерења, односно може се рећи да она имају особину "предвидљивости". Како стања бројача треба тражити међу оним стањима која имају највише особина својствених класичним стањима, може се усвојити као подесна мера за "класичност" управо могућност да се предвиди будућа еволуција стања на основу резултата ранијих мерења и почетних услова, својство које можемо назвати "предвидљивост стања". Може се рећи да је

селекција квантних стања која задржавају својство предвидљивости динамичке еволуције и поред интеракције са окружењем, задовољавајућа стратегија за издвајање класичних стања. Описана особина предвидљивости се користи у алгоритму за налажење скупа преферираних стања који се назива "сито предвидљивости" (eng.: predictability sieve) или критеријум предвидљивости, а као мера се узима или фон Нојманова ентропија или чистоћа стања. Размотримо скуп чистих стања  $\{|\Psi\rangle_i\}$  у Хилбертовом простору за разматрани систем. Када би системи били изоловани од окружења статистички оператори би имали форму:

$$\hat{\rho}_{|\Psi\rangle}(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|, \quad (4.11)$$

пројекционих оператора, али како системи у реалности нису изоловани од окружења, стања ће бити мешана и имаће фон Нојманову ентропију различиту од нуле. Израз којим се дефинише фон Нојманова ентропија:

$$S(\hat{\rho}(t)) = -\text{tr}(\hat{\rho}(t)\log\hat{\rho}(t)), \quad (4.12)$$

посматрајмо као функционал на Хилбертовом простору стања система. Очигледан начин за налажење предвидљивих, ефективно класичних чистих квантних стања је да се најпре издвоји подскуп стања за који је фон Нојманова ентропија минимална после неког одређеног, довољног времена. Када се оваква стања могу издвојити она су приближно стабилна и могу се сматрати добрим кандидатима за класична стања (Zurek 2003). Стања бројача треба да буду релативно стабилна у току интеракције система са окружењем, односно да буду робусна. Робусност се сматра основном феноменолошком особином класичних стања. Поменути критеријум комутативности (4.10) је сличан комутирању варијабли у класичној физици, па се за преферирана стања каже да су носиоци приближно класичних особина или квазикласичних особина.

Као што је већ речено проблем мерења је повезан са питањем како квантни свет, описан линеарним суперпозицијама стања, прелази у свет какав ми опажамо, такозвани "класични свет". Иако је важење закона квантне механике универзално и несумњиво, постоји широк опсег времена, места и скала на којима детерминистички закони класичне физике представљају одличну апроксимацију. Посматрања наводе на закључак да се квазикласичност испољава свуда у космосу, као и да се испољавала од најраније фазе настанка космоса.

Поставља се питање шта је порекло те предвидљиве квазикласичне реалности у космосу у коме владају закони квантне механике, а за коју су карактеристични пробабилистички приступ и недетерминисаност. У недостатку јасног критеријума за разликовање квантних од класичних појава, обично се сматра да су макроскопске појаве класичне, док су појаве на малим скалама квантне, при чему се може поставити питање који ред величине има граница између квантног и класичног домена - колико системи морају бити велики, односно мали, да би се могли третирали као као класични односно као квантни системи? Постоје неки примери испољавања квантних особина у системима макроскопских величина који доводе у сумњу претпоставку да се само на основу величине система може одредити да ли се он треба моделовати као класичан или као квантни систем. Системи за које се сматра да је њихова величина управо негде на граници између квантног и класичног домена су такозвани мезоскопски системи, чије су димензије реда величине  $10\text{ nm}$ , у оквиру којих спадају велики молекули (протеини, полимери...) који у зависности од физичке ситуације у којој се нађу показују квантно или класично понашање.

Посебно је интересантно питање да ли молекули имају одређен облик и величину и како се то може ускладити са законима квантне физике. Још у раној фази развоја квантне механике Хунд (Friedrich Hund) (Hund 1927), један од оснивача квантне хемије, је поставио питање зашто поједини молекули имају одређени облик. Као једноставну илустрацију поменутог проблема искористио је пример молекуларне хиралности. Према принципима квантне механике сви молекули се налазе у неком својственом стању енергије, на пример у основном стању. За хиралне молекуле то очигледно није случај јер у реалности ми опажамо леве или десне енантиомере док су својствена стања енергије симетричне или антисиметричне суперпозиције стања енантиомера. Описано неслагање предвиђања квантне механике и експерименталних резултата познато је као Хундов парадокс (Hund 1927). Сматра се да управо декохеренција проузрокована окружењем доводи до стабилности појединих енантиомера. Окружење има улогу посматрача који може да разликује лева и десна стања, тако да се услед декохеренције губи суперпозиција различитих облика при чему долази до појаве облика молекула као класичне особине.

Квантно мерење и декохеренција тичу се отворених квантних система. Може се рећи да су и квантно мерење и декохеренција заправо последица утицаја система на окружење. У процесу квантног мерења систем утиче на окружење, пре свега на мерни

---

апарат и тај утицај је оно што доводи до добијања резултата мерења, док у процесу декохеренције окружење ефективно записује стања система.

Проблем мерења још увек није решен у потпуности, и пошто се може сматрати фундаменталним проблемом, за очекивати је да ће решавање таквог проблема захтевати промене самих основа квантне механике а самим тим и физике у целини, баш као што је појава квантне механике и теорије релативности утицала на појаву савремене физике.

## 5. Модел Калдеире-Легета (Caldeira, Legget)

Под дисипацијом се у класичној физици подразумева неповратни губитак енергије неког физичког система услед деловања силе трења или отпора средине. Од заснивања квантне механике један од изазова са којима се она суочавала је био како формулисати квантну теорију дисипације, односно како формулисати микроскопску теорију иреверзибилног понашања квантних система и како моделовати појаве трења и пригушења осцилација на микроскопском нивоу. Микроскопска теорија дисипативних система свакако треба да обухвата и детаљне описе процеса који доводе до дисипације, укључујући и разне квантне ефекте. Постоје два приступа решавању проблема квантномеханичког описивања дисипативних система. Први приступ подразумева увођење временски зависних хамилтонијана који обухватају дисипационе чланове. Показало се да се такав приступ суочава са бројним проблемима, од којих је највећи то што, управо због поменутог присуства дисипационих чланова, канонске комутиционе релације престају да важе након довољно дугих временских интервала (Carlesso et al 2016). Ако се има у виду да дисипација подразумева постојање неке интеракције, као и то да важи закон одржања енергије, логички се намеће други приступ, подела целокупног система на два подсистема, на подсистем у коме долази до дисипације, односно подсистем који губи енергију и такозвано окружење, односно део система који прима енергију. Да би се у оваквом моделу избегао повратни ток енергије захтева се да је систем који прима енергију далеко већи при чему се често сматра да тај систем садржи бесконачно велики број степени слободе. Модел Калдеире-Легета је један од првих модела који микроскопским извођењем, под претпоставком слабе интеракције са окружењем, које је на високој температури, уводи дисипацију у квантни формализам кроз квантномеханички модел, тзв. Брауновог кретања (Breuer and Petruccione 2002).

Проучавање Брауновог кретања је од велике важности за квантну теорију дисипације као и за теорију отворених квантних система. Ту појаву је још 1827. године описао енглески ботаничар Браун (Brown), посматрајући непрекидно хаотично кретање честица полена у течности. Алберт Ајнштајн (Albert Einstein) је први указао на то да је узрок оваквог кретања непрекидно сударање честица полена са атомима средине (Einstein 1905), што је у то време допринело томе да се коначно усвоји хипотеза о постојању атома и молекула. Постоје два начина моделовања деловања флуида на честицу (Carlesso et al 2016). Први је такозвани колизионни модел где се

флуид моделује слободним честицама које се налазе у термодинамичкој равнотежи и које интерагују сударима са Брауновом честицом. Овакве моделе су разматрали Ајнштајн и Ланжевен (Langevin). Класично описивање се обично даје Ланжевеновом једначином (Carlesso et al 2016):

$$m\ddot{x}(t) + \eta\dot{x}(t) + \partial_x V(x) = F(t), \quad (5.1)$$

која описује временску еволуцију просторне координате  $x$  честице масе  $m$  у спољашњем потенцијалу  $V(x)$ , при чему на честицу делује сила трења  $\eta\dot{x}(t)$  пропорционална брзини честице, где је  $\eta$  коефицијент трења. Сила  $F(t)$  је такозвана стохастичка сила којом се моделује деловање атома течности на Браунову честицу, за чију се статистичку расподелу подразумева да има облик гаусијана тако да је потпуно одређена својом средњом вредношћу  $\langle F(t) \rangle$  и тзв. аутокорељационом функцијом  $\langle F(t)F(s) \rangle$ .

Други модел подразумева да је честица под утицајем неког окружења које се налази у термодинамичкој равнотежи и које се састоји од великог броја независних хармонијских осцилатора. Описани модел је је такозвани модел топлотног купатила („резервоара“) који је први увео Улерсма (Ullersma 1966). Једначина која је аналогна овом моделу је такозвана генерализована Ланжевенова једначина:

$$m\ddot{x}(t) + \int_0^t ds \sigma(t-s)x(s) + \partial_x V(x) = F(t), \quad (5.2)$$

у којој је члан који садржи силу трења замењен интегралом  $\int_0^t ds \sigma(t-s)x(s)$ , који садржи и информацију о положају честице у претходним тренуцима, дакле може се рећи да постоји одређени меморијски ефекат. Када је динамика Марковљева, односно када окружење врло кратко памти, ова једначина се своди на Ланжевенову једначину. У случају када се меморијски ефекти могу занемарити, Ланжевенова једначина пружа довољно добар опис Брауновог кретања за оба поменутог модела.

Модел Калдеире и Легета (Caldeira and Legett 1983) је, може се рећи, квантни аналогон поменутог модела Улерсма (Ullersma 1966) и представља прототип систем-резервоар модела за описивање квантних дисипационих појава. Мастер једначина Калдеире и Легета је квантни аналогон класичне Ланжевенове једначине, због чега се сматра да има добро дефинисан класични лимес. Облик мастер једначине Калдеире и Легета није Марковљев (то јест, није тзв. Линдбладовог облика), ни за један опсег

температура, или јачину интеракције Браунове честице са топлотним резервоаром. Узрок немарковљевости има свој корен у претпоставкама у (микроскопском) извођењу мастер једначине, чији ће неки детаљи ниже бити представљени. Довољно је рећи да за врло кратке временске интервале, ова мастер једначина нема једну од најважнијих особина Марковљевих процеса (и уопштено свих процеса у теорији отворених квантних система), а која је позната под називом „потпуне позитивности“ (Ferialdi 2017). То, ипак, није ограничење за, иначе, врло широку примену ове мастер једначине за различите физичке моделе и ситуације. Један од општих поступака у раду са мастер једначинама је тзв. *феноменолошки приступ*, у којем микроскопски модел није од значаја. У овом смислу, мастер једначина Калдеире и Легета се користи и мимо претпоставки у микроскопском извођењу, то јест, без ограничења јачине интеракције честице са резервоаром, као и за све вредности температуре на којој се налази (топлотно уравнотежени) резервоар.

Испоставља се да је једини строги опис у оквиру датог микроскопског модела заправо уопштење Калдеире Легета, такозвана Ху-Паз-Жанг (Hu, Paz and Zhang) (HPZ) мастер једначина, која није Марковљева, али јесте потпуно позитивна, и своди се на КЛ мастер једначину под одређеним претпоставкама (Hu et al 1992). Као што је горе наведено, поред истакнутих недостатака, за многе практичне потребе мастер једначина Калдеире Легета је веома корисна и има веома широку примену. Зато јој се може прићи, као што ће у овом раду, по правилу, бити случај, на горе описан феноменолошки начин, односно без узимања у обзир изворних микроскопских ограничења вредности параметара модела, као што су температура, фактор пригушења и фреквенција (када је у питању осцилатор).

Модел Калдеире Легета разматра Браунову честицу масе  $m$  описану просторном координатом  $x$  и канонски коњугованим импулсом  $p$ , која се креће у потенцијалу  $V(x)$  и која је у додиру са окружењем које се састоји од великог броја неинтерагујућих линеарних хармонијских осцилатора (тзв. међусобно некуплованих модова) у топлотној равнотежи на температури  $T$ . Аутори модела сматрали су да је довољно узети у обзир билинеарно купловање положаја Браунове честице (Caldeira and Leggett 1983) са положајима хармонијских осцилатора. Сложени систем „Браунова честица + термално купатило“ се сматра изолованим квантним системом, тј. (видети одељак о отвореним квантним системима), квантним системом изван којег нема ничега

па се стога повинује унитарној квантној динамици (Шредингеровом закону). Хамилтонијан изоловане целине је (Breuer and Petruccione 2002):

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \hat{H}_C + \hat{H}_B + \hat{H}_I, \quad (5.3)$$

где је:

$$\hat{H}_S = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \hat{V}(\hat{x}), \quad (5.4)$$

хамилтонијан Браунове честице, док је:

$$\hat{H}_C = \hat{x}^2 \sum_n \frac{\kappa_n^2}{2m_n \omega_n^2}, \quad (5.5)$$

такозвани контра-члан, који се уводи у модел зато што интеракција Браунове честице и окружења доводи до потребе за ренормализацијом потенцијала  $\hat{V}(x)$  (Breuer and Petruccione 2002). Хамилтонијан  $\hat{H}_B$  којим се описује окружење, односно топлотно купатило, које се састоји од великог броја хармонијских осцилатора масе  $m_n$  и угаоне фреквенције  $\omega_n$ , дат је изразом:

$$\hat{H}_B = \sum_n \hbar \omega_n (\hat{b}_n^\dagger \hat{b}_n + \frac{1}{2}) = \sum_n (\frac{1}{2m_n} \hat{p}_n^2 + \frac{1}{2} m_n \omega_n^2 \hat{x}_n^2). \quad (5.6)$$

Ознакама  $\hat{b}_n$  и  $\hat{b}_n^\dagger$  се уводе бозонски оператори креације и анихилације модова топлотног купатила, док су  $\hat{x}_n$  и  $\hat{p}_n$  одговарајуће координате и канонски коњуговани импулси хармонијских осцилатора.  $\hat{H}_I$  је такозвани интеракциони хамилтонијан који има следећи облик:

$$\hat{H}_I = -\hat{x} \sum_n \kappa_n \hat{x}_n \equiv -\hat{x} \hat{B}, \quad (5.7)$$

где је  $\hat{B}$  оператор топлотног купатила:

$$\hat{B} = \sum_n \kappa_n \hat{x}_n = \sum_n \kappa_n \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n \omega_n}} (\hat{b}_n + \hat{b}_n^\dagger), \quad (5.8)$$

а  $\kappa_n$  одговарајућа константа интеракције (Breuer and Petruccione 2002).

На основу израза (5.4) - (5.8) хамилтонијан  $\hat{H}$  се може написати у облику:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \hat{V}(\hat{x}) + \hat{x}^2 \sum_n \frac{\kappa_n^2}{2m_n \omega_n^2} + \sum_n (\frac{1}{2m_n} \hat{p}_n^2 + \frac{1}{2} m_n \omega_n^2 \hat{x}_n^2) - \hat{x} \sum_n \kappa_n \hat{x}_n, \quad (5.9)$$

односно:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 + \hat{V}_C(\hat{x}) + \sum_n (\frac{1}{2m_n} \hat{p}_n^2 + \frac{1}{2} m_n \omega_n^2 \hat{x}_n^2) - \hat{x} \sum_n \kappa_n \hat{x}_n, \quad (5.10)$$



при чему је:

$$\hat{V}_C(x) = \hat{V}(x) + \hat{x}^2 \sum_n \frac{\kappa_n^2}{2m_n \omega_n^2}. \quad (5.11)$$

У већ поменутом случају слабе интеракције и високе температуре може се применити једна од, тзв. Борн-Марковљевих апроксимација за редуковани статистички оператор Браунове честице (Breuer and Petruccione 2002), која у Шредингеровој слици може бити изражена као:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S + \hat{H}_C, \hat{\rho}_S(t)] + \mathcal{K} \hat{\rho}_S(t), \quad (5.12)$$

при чему се користи супер-оператор:

$$\mathcal{K} \hat{\rho}_S(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \operatorname{tr}_B [\hat{H}_I, [\hat{H}_I(-\tau), \hat{\rho}_S(t) \otimes \hat{\rho}_B]]. \quad (5.13)$$

Претпоставља се да је околина у стању термодинамичке равнотеже  $\rho_B$ :

$$\hat{\rho}_B = \frac{\exp(-\beta H_B)}{\operatorname{tr}_B \exp(-\beta H_B)}, \quad (5.14)$$

на температури  $T$ , при чему је  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ , где је  $k_B$  Болцманова константа.

Ради разраде израза (5.13) уводе се следеће корелационе функције, дисипационо језгро (Breuer and Petruccione 2002):

$$D(\tau) \equiv i \langle [\hat{B}, \hat{B}(-\tau)] \rangle = i [\hat{B}, \hat{B}(-\tau)], \quad (5.15)$$

и језгро шума (Breuer and Petruccione 2002):

$$D_1(\tau) \equiv \langle \{\hat{B}, \hat{B}(-\tau)\} \rangle. \quad (5.16)$$

У изразима (5.15) и (5.16) под усредњавањем величина се подразумева узимање трага за стање топлотног купатила  $\hat{\rho}_B$  задато изразом (5.14). Дисипационо језгро и језгро шума можемо изразити на следећи начин:

$$D(\tau) = 2\hbar \int_0^\infty d\omega J(\omega) \sin \omega \tau, \quad (5.17)$$

$$D_1(\tau) = 2\hbar \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth(\hbar\omega/2k_B T) \cos \omega \tau, \quad (5.18)$$

где је:

$$J(\omega) = \sum_n \frac{\kappa_n^2}{2m_n \omega_n^2} \delta(\omega - \omega_n), \quad (5.19)$$

спектрална густина, док се супер-оператор  $\mathcal{K} \hat{\rho}_S(t)$  може изразити као:

$$\mathcal{K}\hat{\rho}_S(t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \left( \frac{i}{2} D(\tau) [\hat{x}, \{\hat{x}(-\tau), \hat{\rho}_S(t)\}] - \frac{1}{2} D_1(\tau) [\hat{x}, [\hat{x}(-\tau), \hat{\rho}_S(t)]] \right). \quad (5.20)$$

Особине супер-оператора  $\mathcal{K}\hat{\rho}_S(t)$  зависе од особина дисипационог језгра и језгра шума, које су одређене, тзв. спектралном густином  $J(\omega)$ . У феноменолошком моделовању често се уводи претпоставка да је спектрална густина пропорционална угаоној фреквенцији модова осциловања осцилатора окружења за мале вредности  $\omega$ :

$$J(\omega) = \frac{2m\gamma}{\pi} \omega, \quad \text{за } \omega \rightarrow 0. \quad (5.21)$$

Овај облик спектралне густине, који је иначе познат као омска (Ohmic) спектрална густина, доводи до тога да коефицијент пригушења  $\gamma$  не зависи од фреквенције (Breuer and Petruccione 2002). Високе фреквенције модова осциловања осцилатора окружења доводе до ренормализације физичких параметара у потенцијалу. Да би се такав утицај отклонио уводи се такозвана фреквенција одсецања  $\Omega$ , при чему се омска спектрална густина, уз примену Лоренц-Друдове (Lorentz-Drude) функције одсецања високих фреквенција, изражава као:

$$J(\omega) = \frac{2m\gamma}{\pi} \omega \frac{\Omega^2}{\Omega^2 + \omega^2}. \quad (5.22)$$

За ову форму спектралне густине корелационе функције окружења се могу аналитички изразити као (Breuer and Petruccione 2002):

$$D(\tau) = 2m\gamma\hbar\Omega^2 e^{-\Omega|\tau|} \text{sign } \tau, \quad (5.23)$$

$$D_1(\tau) = 4m\gamma k_B T \Omega^2 \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{\Omega e^{-\Omega|\tau|} - |v_n| e^{-|v_n||\tau|}}{\Omega^2 - v_n^2}. \quad (5.24)$$

Језгро шума  $D_1(\tau)$  се добија применом формуле:

$$\coth(\hbar\omega/2k_B T) = \frac{2k_B T}{\hbar} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{\omega}{\omega^2 + v_n^2}, \quad (5.25)$$

где су  $v_n = \frac{2\pi n k_B T}{\hbar}$  такозване Мацубарине (Matsubara) фреквенције (Breuer and Petruccione 2002).

Да би се упростио израз за генератор апроксимира се  $\hat{x}(-\tau)$  на следећи начин (Breuer and Petruccione 2002):

$$\hat{x}(-\tau) \equiv e^{-\frac{iH_S\tau}{\hbar}} \hat{x} e^{\frac{iH_S\tau}{\hbar}} \approx \hat{x} - \frac{i}{\hbar} [H_S, \hat{x}] \tau = \hat{x} - \frac{\hat{p}}{m} \tau. \quad (5.26)$$

Након замене у (5.20) добијамо израз за генератор који се састоји из четири члана:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}\hat{\rho}_S(t) = & \frac{i}{2\hbar^2} \int_0^\infty d\tau D(\tau) [\hat{x}, \{\hat{x}, \hat{\rho}_S\}] - \frac{i}{2\hbar^2 m} \int_0^\infty d\tau \tau D(\tau) [\hat{x}, \{\hat{p}, \hat{\rho}_S\}] - \frac{1}{2\hbar^2} \int_0^\infty d\tau \tau D_1(\tau) [\hat{x}, [\hat{x}, \hat{\rho}_S]] + \\ & \frac{1}{2\hbar^2 m} \int_0^\infty d\tau \tau D_1(\tau) [\hat{x}, [\hat{p}, \hat{\rho}_S]]. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Како је  $[\hat{x}, \{\hat{x}, \hat{\rho}_S\}] = [\hat{x}^2, \hat{\rho}_S]$ , први члан десне стране једнакости (5.27), на основу израза (5.15) и (5.17), добија облик (Breuer and Petruccione 2002):

$$\frac{i}{2\hbar^2} \int_0^\infty d\tau D(\tau) [\hat{x}, \{\hat{x}, \hat{\rho}_S\}] = \frac{i}{2\hbar^2} \int_0^\infty d\tau 2\hbar \int_0^\infty d\omega J(\omega) \sin \omega \tau [\hat{x}^2, \hat{\rho}_S] = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_C, \hat{\rho}_S]. \quad (5.28)$$

За развој другог члана десне стране (5.27) користимо једнакост:

$$\int_0^\infty d\tau \tau \sin \omega \tau = -\frac{\partial}{\partial \omega} \int_0^\infty d\tau \cos \omega \tau = -\pi \delta'(\omega), \quad (5.29)$$

на основу чега се добија:

$$\int_0^\infty d\tau \tau D(\tau) = \hbar \pi J'(0) = 2m\gamma\hbar, \quad (5.30)$$

тако да се други члан на десној страни једначине своди на:

$$-\frac{i\gamma}{\hbar} [\hat{x}, \{\hat{p}, \hat{\rho}_S(t)\}]. \quad (5.31)$$

За трећи члан се на основу:

$$\int_0^\infty d\tau D_1(\tau) = 2\hbar \int_0^\infty d\omega J(\omega) \coth(\hbar\omega/2k_B T) \delta(\omega) = \hbar \pi \lim_{\omega \rightarrow 0} J(\omega) \coth(\hbar\omega/2k_B T) = 4m\gamma k_B T, \quad (5.32)$$

добија:

$$-\frac{2m\gamma k_B T}{\hbar^2} [\hat{x}, [\hat{x}, \hat{\rho}_S(t)]]. \quad (5.33)$$

У лимиту високих температура важи неједнакост  $k_B T \geq \hbar\Omega$ , тако да је:

$$\int_0^\infty d\tau \tau D_1(\tau) \approx \frac{4m\gamma k_B T}{\Omega}, \quad (5.34)$$

па се за четврти члан добија:

$$\frac{2\gamma k_B T}{\hbar^2 \Omega} [\hat{x}, [\hat{p}, \hat{\rho}_S(t)]]. \quad (5.35)$$

На основу  $p = m\dot{x} \sim m\omega_0 x$  може се закључити да се трећи и четврти члан разликују за фактор  $\omega_0/\Omega$ , који је у складу са полазним претпоставкама веома мали, из чега следи да је четврти члан мастер једначине мали у односу на трећи, тако да се може занемарити.

Узимањем у обзир приказаних трансформација долази се до мастер једначине Калдеире и Легета (Caldeira, Leggett, 1983):

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_S(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}_S(t)] - \frac{i\gamma}{\hbar} [\hat{x}, \{\hat{p}, \hat{\rho}_S(t)\}] - \frac{2m\gamma k_B T}{\hbar^2} [\hat{x}, [\hat{x}, \hat{\rho}_S(t)]]. \quad (5.36)$$

У случају када је  $\gamma = 0$ , тј. када нема окружења, остаје само први члан, који се тиче унитарне динамике Браунове честице. Други члан који је пропорционалан фактору пригушења  $\gamma$  је, тзв. дисипативни члан који потиче од дисипационог језгра  $D(\tau)$  и за који се може рећи да је аналоган члану Ланжевенове једначине којим се моделује сила трења. Трећи члан који је пропорционалан температури описује термалне флукуације, које доводе до потискивања и утрнућа недијагоналних елемената у статистичком оператору, односно до појаве декохеренције (о којој је било речи у четвртом поглављу), тако да се назива декохеренцијским чланом. Посебно је занимљив случај велике масе Браунове честице, када је од интереса само последњи члан у једначини. Такав случај се назива декохеренцијским лимитом мастер једначине Калдеире Легета, или лимитом без узмака (енг.: "recoilless limit"), зато што, физички говорећи, у случају када Браунова честица има веома велику масу можемо да занемаримо њен узмак у појединачном судару са атомом средине. Као што је већ речено, може се показати да се мастер једначина дата изразом (5.36) не може записати у Линдбладовој форми, али је то могуће ако јој се на десној страни дода један члан који је занемарљиво мали за случај високих температура (Breuer and Petruccione 2002).

У координатној репрезентацији,  $\hat{\rho}_S(x, x', t) \equiv \langle x | \hat{\rho}_S(t) | x' \rangle$ , мастер једначина добија следећи облик (у даљем тексту овог поглавља се због боље прегледности изостављају "капице" изнад ознака оператора):

$$\frac{d}{dt} \rho_S(x, x', t) = \left[ \frac{i\hbar}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \right) - \frac{i}{\hbar} (V(x) - V(x')) - \gamma(x - x') \left( \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x'} \right) - \frac{2m\gamma k_B T}{\hbar^2} (x - x')^2 \right] \rho_S(x, x', t). \quad (5.37)$$

Уводећи нове променљиве:

$$x = r + \hbar q, \quad x' = r - \hbar q, \quad (5.38)$$

добијамо следећу једначину за функцију  $f(r, q, t) = \rho_S(x, x', t)$ :

$$\frac{d}{dt} f = \left[ \frac{i}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r \partial q} - \frac{i}{\hbar} (V(r + \hbar q) - V(r - \hbar q)) - 2\gamma q \frac{\partial}{\partial q} - 8m\gamma k_B T q^2 \right] f. \quad (5.39)$$

Коришћењем апроксимације:

$$V(r + \hbar q) - V(r - \hbar q) \approx 2V'(r)\hbar q, \quad (5.40)$$

стационарно решење за  $f(r, q)$  се може изразити као:

$$f(r, q) = N \exp \left[ -\frac{V(r)}{k_B T} - 2mk_B T q^2 \right], \quad (5.41)$$

тако да је апроксимативно стационарно решење мастер једначине:

$$\rho_S(x, x') = N \exp \left[ -\frac{V((x+x')/2)}{k_B T} - \frac{mk_B T}{2\hbar^2} (x - x')^2 \right], \quad (5.42)$$

при чему је нормализациони фактор:

$$N^{-1} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp \left[ -\frac{V(x)}{k_B T} \right]. \quad (5.43)$$

Када је  $x = x'$ ,  $\rho_S(x, x')$  представља равнотежну дистрибуцију пропорционалну са  $\exp[-V(x)/k_B T]$ , што је у сагласности са резултатима статистичке механике. Недијагонални елементи опадају експоненцијално са квадратом растојања  $(x - x')$  од дијагонале за  $x$  различито од  $x'$ , где је релевантна скала растојања дата термалном таласном дужином  $\lambda_{th} = \hbar/\sqrt{2mk_B T}$ . За потенцијал облика  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$  стационарно решење се може представити Гаусовом функцијом:

$$\rho_S(x, x') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \exp \left[ -\frac{1}{\sigma_x^2} \left( \frac{x+x'}{2} \right)^2 - \frac{\sigma_p^2}{2\hbar^2} (x - x')^2 \right], \quad (5.44)$$

са одговарајућим изразима за квадрате стандардних одступања координате и импулса:

$$\sigma_x^2 = \langle x^2 \rangle = \frac{k_B T}{m\omega_0^2}, \quad \sigma_p^2 = \langle p^2 \rangle = mk_B T. \quad (5.45)$$

Производ неодређености координате и импулса је:

$$\sigma_x \cdot \sigma_p = \frac{k_B T}{m\omega_0^2} \gg \frac{\hbar}{2}, \quad (5.46)$$

на основу чега се види да је у апроксимацији високих температура производ неодређености координате и импулса велики у односу на минималну могућу вредност дозвољену релацијама неодређености.

Разматрано апроксимативно решење у многим ситуацијама не даје задовољавајуће резултате због чега је неопходно наћи егзактна решења, која следе из одговарајућих Хајзенбергових једначина (Хајзенбергова слика квантне динамике) кретања за Браунову честицу и осцилаторе окружења (Breuer and Petruccione 2002):

$$\dot{x}(t) = \frac{i}{\hbar} [H, x(t)] = \frac{1}{m} p, \quad (5.47)$$

$$\dot{x}_n(t) = \frac{i}{\hbar} [H, x_n(t)] = \frac{1}{m_n} p_n, \quad (5.48)$$

$$\dot{p}(t) = \frac{i}{\hbar} [H, p(t)] = -V'_c(x(t)) + \sum_n \kappa_n x_n(t), \quad (5.49)$$

$$\dot{p}_n(t) = \frac{i}{\hbar} [H, p_n(t)] = -m_n \omega_n^2 x_n(t) + \kappa_n x(t). \quad (5.50)$$

Диференцирањем израза (5.47) добија се:

$$\ddot{x}(t) = \frac{1}{m} \dot{p}(t), \quad (5.51)$$

односно, уз коришћење израза (5.49):

$$m\ddot{x}(t) = \dot{p}(t) = -V'_c(x(t)) + \sum_n \kappa_n x_n(t), \quad (5.52)$$

из чега следи:

$$m\ddot{x}(t) + V'_c(x(t)) - \sum_n \kappa_n x_n(t) = 0, \quad (5.53)$$

док се из једначина (5.48) и (5.50), на сличан начин, добија једначина за координате осцилатора термалног купатила:

$$m_n \ddot{x}_n(t) + m_n \omega_n^2 x_n(t) - \kappa_n x(t) = 0. \quad (5.54)$$

Ова једначина показује да је  $n$ -ти осцилатор под утицајем силе  $\kappa_n x(t)$  која зависи линеарно од координате Браунове честице. Да би се добила затворена једначина кретања за координату  $x(t)$  најпре се решава једначина (5.54) по  $x(t)$ , а онда се тако добијени резултати замењују у једначину (5.53). Почетне вредности координате и импулса осцилатора топлотног купатила се изражавају преко Бозеових оператора, израз (5.6), (добро познатим изразима):

$$x_n(0) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n\omega_n}} (b_n + b_n^\dagger), \quad (5.55)$$

$$p_n(0) = -i\sqrt{\frac{m_n\hbar\omega_n}{2}} (b_n - b_n^\dagger). \quad (5.56)$$

Једначина (5.54) је линеарна нехомогена диференцијална једначина другог реда са константним коефицијентима и може се записати у следећем облику:

$$\ddot{x}_n(t) + \omega_n^2 x_n(t) = \frac{\kappa_n}{m_n} x(t), \quad (5.57)$$

на основу чега следи да је одговарајућа хомогена једначина:

$$\ddot{x}_n(t) + \omega_n^2 x_n(t) = 0, \quad (5.58)$$

док је њена карактеристична једначина:

$$k^2 + \omega_n^2 = 0. \quad (5.59)$$

Опште решење једначине (5.59) има следећи облик:

$$x_n(t) = C_1 e^{\omega_n t} + C_2 e^{-\omega_n t}, \quad (5.60)$$

где су  $C_1$  и  $C_2$  произвољне константе. Решење нехомогене једначине (5.54) се добија као збир решења одговарајуће хомогене једначине и једног њеног партикуларног решења, при чему се константе  $C_1$  и  $C_2$  одређују на основу почетних услова. Налажењем партикуларног решења, уз коришћење израза (5.55) и (5.56), добија се следеће решење једначине (5.54):

$$x_n(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n\omega_n}} (e^{-i\omega_n t} b_n + e^{i\omega_n t} b_n^\dagger) + \frac{\kappa_n}{m_n\omega_n} \int_0^t ds \sin[\omega_n(t-s)] x(s), \quad (5.61)$$

док се заменом овако добијеног израза за  $x_n(t)$  у једначину (5.53) добија:

$$m\ddot{x}(t) + V_c'(x(t)) - \sum_n \frac{\kappa_n^2}{m_n\omega_n} \int_0^t ds \sin[\omega_n(t-s)] x(s) = B(t), \quad (5.62)$$

где је:

$$B(t) = \sum_n \kappa_n \sqrt{\frac{\hbar}{2m_n\omega_n}} (e^{-i\omega_n t} b_n + e^{i\omega_n t} b_n^\dagger). \quad (5.63)$$

Хајзенбергова једначина кретања (5.62) се може написати у следећем облику:

$$\ddot{x}(t) + \frac{1}{m} V_c'(x(t)) + \frac{d}{dt} \int_0^t ds \gamma(t-s) x(s) = \frac{1}{m} B(t), \quad (5.64)$$

где је:

$$\gamma(t-s) = \frac{2}{m} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos[\omega(t-s)], \quad (5.65)$$

језгро пригушења. Једначина (5.64) је тражена једначина кретања за координату Браунове честице и може се сматрати квантномеханичким аналогом класичне стохастичке диференцијалне једначине са језгром пригушења  $\gamma(t-s)$  и стохастичком силом  $B(t)$ . У случају када је спектрална густина омска и када важи  $\Omega \rightarrow \infty$ , добија се да је језгро пригушења:

$$\gamma(t) = 4\gamma\delta(t), \quad (5.66)$$

тако да Хајзенбергове једначине добијају облик:

$$\dot{x}(t) = \frac{1}{m}p, \quad (5.67)$$

$$\dot{p}(t) = -V'(x(t)) - 2m\gamma\dot{x}(t) + B(t). \quad (5.68)$$

Као и у случају стохастичких диференцијалних једначина сила трења је једнака  $-2m\gamma\dot{x}$ . Статистика члана  $B(t)$  је описана квантном корелационом функцијом  $\langle\{B(t), B(t')\}\rangle$ . Ако је почетно стање без корелација поменута корелациона функција је једнака језгру шума  $D_1(t - t')$ , па за случај омске спектралне густине добијамо:

$$D_1(t - t') = \langle\{B(t), B(t')\}\rangle = \frac{4m\gamma\hbar}{\pi} \int_0^\Omega d\omega \omega \coth(\hbar\omega/2k_B T) \cos[\omega(t - t')]. \quad (5.69)$$

У лимиту високих температура, када важи  $2k_B T \gg \hbar\omega$ , добија се:

$$\frac{1}{2}\langle\{B(t), B(t')\}\rangle \approx \frac{2m\gamma\hbar}{\pi} \frac{2k_B T}{\hbar} \int_0^\infty d\omega \cos[\omega(t - t')] = 4m\gamma k_B T \delta(t - t'), \quad (5.70)$$

тако да се добија корелациона функција као у класичним стохастичким диференцијалним једначинама.

За квадратни потенцијал  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$ , Хајзенбергова једначина добија следећи облик:

$$\ddot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) + \frac{d}{dt} \int_0^t ds \gamma(t - s) x(s) = \frac{1}{m} B(t). \quad (5.71)$$

Да би се решила ову једначина уведе се „фундаментална решења“  $G_1(t)$  и  $G_2(t)$  хомогеног дела једначине. Решења се добијају коришћењем следећих почетних услова (Breuer and Petruccione 2002):

$$G_1(0) = 1, \dot{G}_1(0) = 0, \quad (5.72)$$

$$G_2(0) = 0, \dot{G}_2(0) = 1. \quad (5.73)$$

За Лапласове трансформације фундаменталних решења добија се:

$$\hat{G}_1(z) = \frac{z}{z^2 + \omega_0^2 + z\hat{\gamma}(z)}, \quad (5.74)$$

$$\hat{G}_2(z) = \frac{1}{z^2 + \omega_0^2 + z\hat{\gamma}(z)}, \quad (5.75)$$



где је  $\hat{\nu}(z)$  Лапласова трансформација језгра пригушења. Отуда следи опште решење Хајзенбергове једначине

$$x(t) = G_1(t)x(0) + G_2(t)\dot{x}(0) + \frac{1}{m} \int_0^t ds G_2(t-s)B(s). \quad (5.76)$$

У случају слободне Браунове честице, односно за  $V = 0$ , када је спектрална густина Омска, фундаментална решења имају облик:

$$G_1(t) = 1, G_2(t) = \frac{1}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}), \quad (5.77)$$

тако да важи:

$$x(t) = x(0) + \frac{1}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})\dot{x}(0) + \int_0^t ds \frac{1 - e^{-2\gamma(t-s)}}{2m\gamma} B(s), \quad (5.78)$$

$$p(t) = e^{-2\gamma t} p(0) + \int_0^t ds e^{-2\gamma(t-s)} B(s). \quad (5.79)$$

Из мастер једначине Калдеире Легета (5.36) су, поступком који је изложен у додацима, изведене диференцијалне једначине за моменте угла и момента импулса првог, другог и вишег реда и то за различите облике потенцијала, о којима је већ било речи у уводном делу. Решавање и анализа решења ових система једначина биће приказани у наредним поглављима.

## 6. Модел утицаја величине молекулских пропелера на њихову динамичку стабилност

Оригинални модел квантног Брауновог кретања Калдеире и Легета посматра честицу са једним степеном слобде  $x$  и масом  $m$ . Просторна координата  $x$  и канонски коњуговани оператор импулса  $p$  задовољавају познату једнакост  $[\hat{x}, \hat{p}] = \frac{i\hbar}{2\pi} \equiv i\hbar$ , где је  $\hbar$  Планкова константа. Приликом прелаза са транслационог на ротациони модел Брауновог кретања (Suzuki and Tanimura 2001) просторна координата  $x$  се замењује углом ротације  $\varphi$ , док се импулс  $p$  замењује  $z$ -пројекцијом момента импулса ротатора  $L_z$ , а маса  $m$  моментом инерције  $I$ , тако да се мастер једначина Калдеире и Легета, дата изразом (5.36), за равански ротатор у спољашњем пољу  $V(\varphi)$  може написати у облику:

$$\frac{d}{dt} \hat{\rho}_R(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_R, \hat{\rho}_R(t)] - \frac{i\gamma}{\hbar} [\hat{\varphi}, \{\hat{L}_z, \hat{\rho}_R(t)\}] - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} [\hat{\varphi}, [\hat{\varphi}, \hat{\rho}_R(t)]], \quad (6.1)$$

где је:

$$\hat{H}_R = \frac{\hat{L}_z^2}{2I} + \hat{V}(\varphi), \quad (6.2)$$

сопствени хамилтонијан ротатора, док је  $\gamma$  коефицијент пригушења,  $k_B$  Болцманова константа,  $T$  температура окружења, а  $\hat{\rho}_R$  статистички оператор (матрица густине) којим се описује стање Брауновог ротатора (Caldeira and Leggett 1983, Breuer and Petruccione 2002).

Из једначине (6.1) се могу добити следеће диференцијалне једначине (Додатак 1) за моменте првог и другог реда угла и момента импулса, као што је најављено у претходном поглављу (у циљу постизања боље прегледности израза у даљем тексту оператори ће бити представљени ознакама без "капица"):

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi(t) \rangle = \frac{1}{I} \langle L_z(t) \rangle, \quad (6.3)$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z(t) \rangle = -\langle V'(\varphi(t)) \rangle - 2\gamma \langle L_z(t) \rangle, \quad (6.4)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^2(t) \rangle = \frac{1}{I} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle, \quad (6.5)$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle = -2\langle \varphi(t) V'(\varphi(t)) \rangle - 2\gamma \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle + \frac{2}{I} \langle L_z^2(t) \rangle, \quad (6.6)$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z^2(t) \rangle = -\langle L_z(t) V'(\varphi(t)) + V'(\varphi(t)) L_z(t) \rangle - 4\gamma \langle L_z^2(t) \rangle + 4I\gamma k_B T, \quad (6.7)$$

где је  $V'(\varphi) \equiv dV(\varphi)/d\varphi$ .

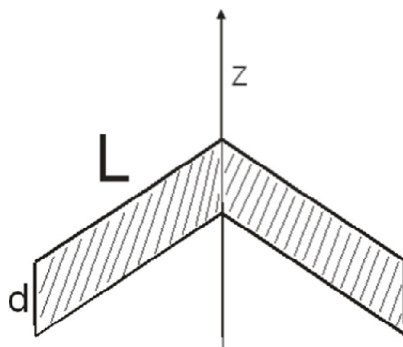
Аналогија између транслационог и ротационог кретања ипак није потпуна у квантномеханичком контексту, пре свега због неважења релација неодређености за угао и момент импулса. Домен оператора  $L_z$  је ограничен на периодичне функције (Herbut 1999), док је  $\varphi$  мултипликативни оператор. Множењем  $L_z$  са  $\varphi$  губи се поменути периодичност па самим тим производ ова два оператора више не припада домену периодичних функција. Због наведених разлога ове две опсервабле се не могу сматрати канонски коњугованим опсерваблама па самим тим за њих не важи релација неодређености (Herbut 1999). Поред тога, испоставља се да се стандардно одступање  $\sigma_\varphi$  може користити као мера неодређености угла само за довољно мале вредности угла  $\varphi$  (Jordan 1927, Breitenberger 1985, Deck and Ozturk 1994), при чему треба имати у виду да за веома мале вредности  $\sigma_\varphi$  ротациони модел постаје формално аналоган транслационом моделу (Jordan 1927, Breitenberger 1985, Deck and Ozturk 1994). Да би ипак била могућа примена стандардног одступања угла као показатеља стабилности динамике опсервабле угла, у овом раду разматрање је ограничено на случајеве малих почетних вредности  $\sigma_\varphi(0)$ , који је иначе близак класичном случају. Поред ограничења на случај малих почетних вредности стандардних одступања у овом раду разматрање је ограничено и на случај малих углова ротације, што је поред наведених узрока условљено и избором потенцијала који ће бити коришћени у моделу, при чему се ротације за веће углове могу посматрати као низ појединачних малих ротација.

Коефицијент пригушења  $\gamma$ , величина којом се квантификује јачина интеракције са окружењем, фигурише и у другом члану десне стране једначине (6.1), дисипационом члану, као и у трећем члану десне стране исте једначине, који представља термалне флукуације, у складу са већ поменутом флукуационо-дисипационом теоремом (2.3). Интеракција молекула са окружењем доводи до појаве њиховог ротационог кретања али и до спречавања истог. Судари молекулског ротатора са честицама окружења воде непрестаној промени смера и брзине ротације. Појава ротације узрокована је термалним флукуацијама окружења док дисипација (тј., пригушење ротација) има супротан ефекат. Сходно томе, динамика ротације, а самим тим и стабилност молекулских пропелера, има сложену зависност од коефицијента

пригушења и температуре окружења. У трећем члану десне стране једначине (6.1) осим температуре окружења и коефицијента пригушења фигурише и момент инерције који додатно одређује динамику ротације. За довољно велике вредности момента инерције расте инерцијални ефекат што води смањењу утицаја поменутих флукуација на ротацију молекула. Пораст момента инерције води декохеренцијском лимиту који је неопходно посебно размотрити.

У стандардној теорији трансляторног Брауновог кретања се уобичајено занемарује утицај величине и облика Браунове честице, при чему се она моделује као материјална тачка, уз феноменолошко моделовање спољашњег шума и трења (Uhlenbeck and Ornstein 1930, Wang and Uhlenbeck 1945). У случајевима када се ипак разматрају величина и облик Браунове честице најчешће се разматрају сферни и елипсоидни облици, при чему се мора разматрати и ротационо кретање (Chandrasekhar 1993, ten Hagen et al 2011). Као геометријски лимес елипсоидне Браунове честице често се разматра ротатор у облику штапа (ten Hagen et al 2011). Такви и слични идеализовани геометријски модели (Roulet et al 2017, Stickler et al 2016, Papendell et al 2016, Stickler et al 2018) могу бити корисни за довољно велике честице, односно честице чији је пречник реда величине 100 nm, док за честице мањих димензија такви модели нису применљиви. Иако за неке примене разматрање величине и облика Браунове честице није од посебног значаја постоје и неки случајеви у којима је разматрање величине и облика веома важно. У случају молекулских пропелера (видети Поглавље 2 за неке детаље) чија је динамичка стабилност основни предмет проучавања овог рада, је управо облик оно што карактерише њихову примену и функцију у оквиру молекулских машина. Сама конфигурација ових молекула, просторни распоред атома и атомских група, односно такозвани стерни услови (Kottas et al 2005), доводе до тога да је једини могући начин ротационог кретања истовремена ротација свих лопатица пропелера, односно ротација молекула као целине око једне осе. У зависности од геометрије лопатица молекулских пропелера, њиховог укупног броја и међусобног положаја, деловању окружења може бити изложен већи или мањи део њихове површине (Слика 2.3.). Осенчене површине на Слици 6.1. дају схематски приказ реалних лопатица пропелера и означавају ефективну површину лопатица које су изложене утицају окружења. Величина површине која је изложена утицају окружења утиче на јачину интеракције молекула и окружења, тако да укупна јачина интеракције зависи од укупне величине оних делова површина лопатица који су

изложени утицају окружења. Поред тога што утичу на јачину интеракције са окружењем, облик и димензије лопатица такође одређују и момент инерције појединачних лопатица. Дакле, закључујемо да димензије лопатице, односно дужина  $L$  и висина  $d$  (Слика 6.1), једнозначно одређују и момент инерције  $I_0$  и јачину интеракције  $\alpha_0$  (која се овде уводи као бездимензионална величина) типичне лопатице пропелера који ротира око фиксне  $z$  осе.



Слика 6.1. Попречни пресек лопатица молекулског пропелера

За број лопатица молекулског пропелера користиће се ознака  $N$ , при чему ће се разматрати само случајеви у којима број лопатица није већи од десет, односно где важи

$$1 \leq N \leq 10. \quad (6.8)$$

У другом поглављу дати су примери реалних молекулских пропелера (Слика 2.4.), одакле се може закључити да је број лопатица молекулских пропелера углавном мањи од 10. Са друге стране, већи број лопатица могао би да утиче на смањење величине дела окружења који интерагује са појединачном лопатицом што би довело у питање ваљаност и применљивост коришћеног модела – у сваком разматрању (микроскопском, или феноменолошком) се захтева да је окружење „макроскопско“. Иако нема општег критеријума за „макроскопност“ у квантној механици, смањење растојања између лопатица (условљено повећањем броја лопатица) геометријски смањује део окружења којем су лопатице изложене. За веома велики број лопатица молекулски пропелер постаје сличан ротирајућем диску, што би захтевало потпуно другачији модел.

Ако је просечни момент инерције једне лопатице  $I_0$  онда је очигледно да пропелер са  $N$  лопатица има укупан момент инерције  $I$  који је једнак:

$$I = NI_0. \quad (6.9)$$

Као и масу честице, овде ћемо момент инерције сматрати класичним параметром ротатора. Како момент инерције зависи од просторног распореда атома, а распореди атома су квантне опсервабле, може се поставити питање оправданости оваквог приступа. Међутим, како је показано, на пример у (Giulini et al 1996), може се очекивати да окружење знатно брже декохерира неке „колективне“ степене слободe, какав је, овде, облик молекула, па тиме и учинити момент инерције класичном величином. То истовремено значи да је динамика осталих степена слободe знатно спорија, а они су предмет изучавања у овом раду. Величина  $I_0$  наравно зависи од хемијске структуре лопатица пропелера док момент инерције  $I$  линеарно расте са повећањем броја лопатица. С друге стране, величина  $\alpha_0$  поред тога што зависи од хемијске структуре лопатица пропелера зависи и од параметара окружења. Ако је  $\alpha_0$  просечна јачина интеракције појединачне лопатице онда је јачина интеракције за цели пропелер једнака:

$$\alpha = N\alpha_0. \quad (6.10)$$

За један исти молекулски пропелер у зависности од параметара окружења величина  $\alpha_0$  може имати различите вредности. У складу са микроскопском основном мастер једначине Калдеире и Легета (то јест, са претпоставком слабе интеракције) је следећа неједнакост:

$$N_{max}\alpha_0 = 10\alpha_0 \ll 1. \quad (6.11)$$

Једноставности ради, ово ограничење биће усвојено за све вредности параметара који се појављују у мастер једначини Калдеире и Легета, коришћених у овом раду. На основу зависности јачине интеракције са окружењем од броја лопатица, може се извести зависност коефицијента пригушења од броја лопатица. Спектрална густина је пропорционална квадрату јачине интеракције  $J \sim \alpha^2$  (Breuer and Petruccione 2002), док је на основу израза (5.22) спектрална густина пропорционална производу момента инерције и коефицијента пригушења  $J \sim I\gamma$ . За једну лопатицу онда важи:

$$\alpha_0^2 \sim I_0\gamma_0, \quad (6.12)$$

док за  $N$  лопатица важи:

$$(N\alpha_0)^2 \sim N I_0\gamma, \quad (6.13)$$

на основу чега долазимо до релације:

$$\gamma = N\gamma_0, \quad (6.14)$$

која показује да коефицијент пригушења такође линеарно зависи од броја лопатица молекулског пропелера. Управо је ова истовремена линеарна зависност коефицијента пригушења и момента инерције од броја лопатица, које нема у оригиналној мастер једначини, нешто што чини додатно занимљивим питање зависности динамичке стабилности од броја лопатица молекулског пропелера.

У многим реалним физичким ситуацијама Браунов ротатор је, поред непрестаног утицаја Брауновог кретања, такође и под утицајем спољашњих поља (Kottas et al 2005). У већини случајева то спољашње поље се може сматрати хармонијским, или слабо нехармонијским са малим кубним чланом. У реалним физичким системима ротирајући делови молекулских ротатора могу бити нанети на неке површине (Kottas et al 2005), при чему веза са површином доводи до појаве спољашњег поља које се у случају малих углова ротације може моделовати као хармонијско или слабо нехармонијско. Слично, спољашње електрично поље примењено на поларне молекуле често доводи до појаве ефективно хармонијског, или слабо нехармонијског поља. У већини реалних физичких ситуација нумеричка проучавања ефективног спољашњег потенцијала указују на постојање локалних минимума тог потенцијала. Ограничење на мале углове ротације, које се примењује у овом раду, практично искључује могућност прелаза између различитих минимума, односно редукује разматрање ефективног спољашњег потенцијала на само један минимум. У складу са тим у овом раду се испитују и упоређују следећи модели ротатора: слободни ротатор (ван поља), за који важи:

$$V = 0, \quad (6.15)$$

ротатор у (ефективном) хармонијском спољашњем пољу за који је потенцијал:

$$V(\varphi) = \frac{1}{2}I\omega^2\varphi^2, \quad (6.16)$$

где је  $\omega$  ознака за угаону фреквенцију ротатора, и ротатор у слабо нехармонијском спољашњем пољу (са малим кубним чланом):

$$V(\varphi) = \frac{1}{2}I\omega^2\varphi^2 + b\varphi^3. \quad (6.17)$$

У претходном поглављу је већ речено да микроскопско извођење Калдеира Легет мастер једначине подразумева случај слабе интеракције и високе температуре.

Феноменолошки приступ мастер једначини Калдеире и Легета, који се такође користи у овом раду, омогућава разматрање динамичке стабилности молекулских пропелера у ширем опсегу вредности коефицијента пригушења и температуре. Два најважнија случаја која се иначе разматрају су случај малог фактора пригушења, "подпригушени" режим (енг: "underdamped"), и случај великог фактора пригушења, "надпригушени" режим (енг: "overdamped"). Мастер једначина Калдеире и Легета се може без одбацивања полазних претпоставки применити само за подпригушени режим, док феноменолошки приступ пре свега подразумева да постоји и могућност разматрања надпригушеног режима.

Модели слободног и хармонијског ротатора у овом раду ће бити разматрани у оквиру подпригушеног режима ротације, дефинисаног следећим неједнакостима:

$$N_{max} \hbar \gamma_0 \ll E < k_B T, \quad (6.18)$$

као и у оквиру неподпригушеног режима (енг: "non-underdamped"), што није исто што и надпригушени режим ротација, који је дефинисан следећим неједнакостима:

$$N_{max} \hbar \gamma_0 \ll k_B T < E. \quad (6.19)$$

У изразима (6.18) и (6.19),  $E$  је сопствена енергија ротатора, која је дата изразом:

$$E = \frac{\hbar^2}{2N_{max} I_0}, \quad (6.20)$$

у случају слободног ротатора, односно изразом:

$$E = \hbar \omega, \quad (6.21)$$

у случају хармонијског ротатора.

Приликом разматрања слабо нехармонијског ротатора, односно ротатора за који је потенцијал дат изразом (6.17), у овом раду се разматра подпригушени режим дефинисан неједнакошћу:

$$10\gamma_0 < k_B T, \quad (6.22)$$

и надпригушени режим за који важи:

$$\gamma_0 > k_B T. \quad (6.23)$$

Већ је наглашена важност испитивања динамичке стабилности молекулских пропелера као саставних делова молекулских машина (видети Поглавље 2.). Основни метод којим се у овом раду испитује динамичка стабилност је разматрање динамике



стандардних одступања угла и момента импулса ротатора (Meng and Zhang 2016), овде проширено разматрањем зависности стандардних одступања од броја лопатица. За израчунавање стандардног одступање угла се користи израз:

$$\sigma_{\varphi}(t) = \sqrt{\langle \varphi^2(t) \rangle - \langle \varphi(t) \rangle^2}, \quad (6.24)$$

док се за израчунавање стандардног одступања момента импулса користи израз<sup>2</sup>:

$$\sigma_{L_z}(t) = \sqrt{\langle L_z^2(t) \rangle - \langle L_z(t) \rangle^2}. \quad (6.25)$$

Иако се оба наведена стандардна одступања могу сматрати показатељима динамичке стабилности молекулског ротатора потребно је размотрити неке суптилне разлике у томе на који начин квантитативно одређују динамичку стабилност молекулског ротатора. Када би молекулски ротатор вршио кретање константном угаоном брзином онда би стандардно одступање момента импулса било једнако нули. Свака промена угаоне брзине доприноси повећању стандардног одступања тако да се стандардно одступање момента импулса може сматрати показатељом нестабилности угаоне брзине ротације молекулског ротатора. Што је мање стандардно одступање момента импулса мања је промена угаоне брзине под утицајем окружења, односно већа је стабилност угаоне брзине и могућност њене контроле. Аналогно томе, када ротатор под утицајем окружења уопште не би ротирао онда би стандардно одступање угла било једнако нули, док свака ротација иницирана утицајем окружења повећава стандардно одступање угла. Мање стандардно одступање угла показује већу стабилност угла односно већу могућност контроле ротације молекулског ротатора. Мање стандардно одступање угла подразумева већу динамичку стабилност у смислу боље контролабилности ротације док мање стандардно одступање момента импулса подразумева већу динамичку стабилност у смислу боље контролабилности угаоне брзине ротације. Тако се временска зависност стандардних одступања угла и момента импулса може сматрати ваљаним критеријумима стабилности ротације молекулских пропелера.

Други метод испитивања динамичке стабилности који се користи у овом раду је базиран на познатом методу налажења времена првог пролаза (енг: the first passage time). Концепт времена првог пролаза је заправо настао као један од начина решавања

<sup>2</sup> Изрази следе из дефиниције стандардног одступања:  $\sigma_{\varphi}(t) = \sqrt{\langle (\varphi(t) - \langle \varphi(t) \rangle)^2 \rangle}$

такозваног Крамерсовог проблема (Kramers 1940) који подразумева налажење брзине којом Браунова честица успева да савлада неку потенцијалну баријеру, при чему Браунова честица може бити, или у стању најниже енергије, или у неком метастабилном стању које је локални минимум енергије као функције просторне координате, али не и апсолутни минимум енергије (Fiasconaro and Spagnolo 2009, Ornigotti et al 2018, Dubkov et al 2004). Када је температура окружења ниска, честица ће провести пуно времена у близини минимума потенцијала и веома ретко ће се дешавати да под утицајем Брауновог кретања савлада потенцијалну баријеру, док се са порастом температуре повећава вероватноћа да честица савлада потенцијалну баријеру. Након што честица савлада потенцијалну баријеру може се и вратити у почетни положај. Један од најчешће коришћених метода решавања Крамерсовог проблема је налажење такозваног времена првог пролаза. Време првог пролаза се дефинише као време након којег честица први пут изађе из оквира потенцијалне јаме, а такође се може дефинисати и као време за које нека физичка величина од значаја достигне неку унапред одређену вредност (Masoliver and J. Perello 2009, Kutnera et al 2019). Услед деловања окружења, и поред истих почетних услова, понављањем експеримената добијају се различита времена првог пролаза па се зато израчунава и разматра средње време првог пролаза (енг: mean first-passage time - MFPT) (Fiasconaro and Spagnolo 2009, Ornigotti et al 2018, Dubkov et al 2004). Поступак преношења метода налажења времена првог пролаза из контекста класичне физике у контекст квантне теорије није једнозначан (Kumar and Pramana 1985, Pawela et al 2015, Rong-Tao et al 2012, Grot et al 1996), пре свега због тога што у квантној теорији не постоји појам трајекторије која је у основи појма времена првог пролаза. У овом раду се, у складу са моделом који се користи на нешто другачији начин, уводи концепт времена првог пролаза. У складу са поменутиим разликама метод је назван "квантно време првог пролаза" (Quantum First Passage Time QFPT) а дефинише се као минимално време за које средња вредност угла  $\langle \hat{\varphi} \rangle$  достиже неку унапред одређену вредност  $\varphi_{th}$  за одабрану почетну вредност  $\varphi_0$ . Имајући у виду ограничење на разматрање малих ротација, ниже ће бити усвојено ограничење  $|\varphi_{th} - \varphi_0| \approx 10^{-4}$ . За сваку одабрану почетну вредност  $\varphi_0$  и одговарајућу граничну вредност  $\varphi_{th}$  опсервабле угла, нумерички ће бити израчунато квантно време првог пролаза,  $t_{QFPT}$ , као минимално време потребно за прелаз  $\varphi_0 \rightarrow \varphi_{th}$ . При испитивању динамичке стабилности овом методом подразумева се да је, што је веће квантно време првог пролаза, молекулски пропелер стабилнији, при чему се посматра

---

зависност квантног времена првог пролаза од броја лопатица и то за различите вредности фактора пригушења и температуре окружења.

## 7. Слободни ротатор

Слободни ротатор, иако математички најједноставнији модел, који је на неки начин и идеализован случај, јер се у њему занемарује утицај било каквог спољашњег поља, има велику важност зато што омогућава најбољи увид у интеракцију ротатора са окружењем. У одсуству било каквог спољашњег поља утицај окружења је једини незанемарљив утицај, тако да је и основни узрок свих динамичких показатеља. У случају слободног ротатора, односно у случају када је  $V = 0$ , једначине (6.3) - (6.7) добијају следећи облик:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi(t) \rangle = \frac{1}{I} L_z(t), \quad (7.1)$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z(t) \rangle = -2\gamma \langle L_z(t) \rangle, \quad (7.2)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^2(t) \rangle = \frac{1}{I} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle, \quad (7.3)$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle = \frac{2}{I} \langle L_z^2(t) \rangle - 2\gamma \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle, \quad (7.4)$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z^2(t) \rangle = -4\gamma \langle L_z^2(t) \rangle + 4I\gamma k_B T. \quad (7.5)$$

Решавањем овог система једначина (поступак је приказан у Додатку 1, видети изразе од (Д1.52) до (Д1.58)), добијају се следећа решења:

$$\langle \varphi(t) \rangle = \langle \varphi(0) \rangle + \frac{1}{2I\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \langle L_z(0) \rangle, \quad (7.6)$$

$$\langle L_z(t) \rangle = e^{-2\gamma t} \langle L_z(0) \rangle, \quad (7.7)$$

$$\langle L_z^2(t) \rangle = \exp(-4\gamma t) [\langle L_z^2(0) \rangle - I k_B T + I k_B T (\exp(4\gamma t))], \quad (7.8)$$

$$\langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle = \exp(-2\gamma t) \left[ \langle L_z(0) \varphi(0) + \varphi(0) L_z(0) \rangle + \frac{1}{\gamma I} (\langle L_z^2(0) \rangle - I k_B T) - \frac{1}{\gamma} k_B T - \frac{1}{\gamma I} (\exp(-2\gamma t)) (\langle L_z^2(0) \rangle - I k_B T) + \frac{1}{\gamma} k_B T \exp(2\gamma t) \right], \quad (7.9)$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi^2(t) \rangle = & (\langle \varphi^2(0) \rangle) + \frac{1}{2\gamma I} \langle L_z(0) \varphi(0) + \varphi(0) L_z(0) \rangle + \frac{1}{2\gamma^2 I^2} (\langle L_z^2(0) \rangle) - \frac{k_B T}{\gamma^2 I} - \\ & \frac{1}{4\gamma^2 I^2} (\langle L_z^2(0) \rangle) + \frac{1}{4\gamma^2 I} k_B T - \frac{1}{2\gamma I} \exp(-2\gamma t) \langle L_z(0) \varphi(0) + \varphi(0) L_z(0) \rangle - \\ & \exp(-2\gamma t) \frac{1}{2\gamma^2 I^2} (\langle L_z^2(0) \rangle) + \exp(-2\gamma t) \frac{k_B T}{\gamma^2 I} + \frac{1}{4\gamma^2 I^2} (\exp(-4\gamma t)) (\langle L_z^2(0) \rangle) - \\ & \frac{1}{4\gamma^2 I} (\exp(-4\gamma t)) k_B T + \frac{1}{\gamma I} k_B T t. \end{aligned} \quad (7.10)$$

За стандардна одступања и корелациону функцију најпре ће се употребити ознаке  $\Delta\varphi(t)$ ,  $\Delta L(t)$  и  $\sigma_{\varphi L}(t)$ , при чему је:

$$\Delta\varphi(t) = \sqrt{\langle\varphi^2(t)\rangle - \langle\varphi(t)\rangle^2}, \quad (7.11)$$

$$\Delta L_z(t) = \sqrt{\langle L_z^2(t)\rangle - \langle L_z(t)\rangle^2}, \quad (7.12)$$

$$\sigma_{\varphi L}(t) = \langle\{L_z(t), \varphi(t)\}\rangle - 2\langle L_z(t)\rangle\langle\varphi(t)\rangle. \quad (7.13)$$

На основу израза (Д1.59) - (Д1.67), датих у Додатку 1, следе изрази за квадрате стандардних одступања угла и момента импулса и корелациону функцију:

$$\begin{aligned} (\Delta\varphi(t))^2 = & (\Delta\varphi(0))^2 + \left(\frac{1-e^{-2\gamma t}}{2\gamma}\right)^2 \frac{(\Delta L_z(0))^2}{I^2} + \frac{1-e^{-2\gamma t}}{2I\gamma} \sigma_{\varphi L}(0) + \frac{k_B T}{I\gamma^2} \left[ \gamma t - (1 - e^{-2\gamma t}) + \right. \\ & \left. \frac{1-e^{-4\gamma t}}{4} \right], \end{aligned} \quad (7.14)$$

$$(\Delta L_z(t))^2 = e^{-4\gamma t} (\Delta L_z(0))^2 + I k_B T (1 - e^{-4\gamma t}), \quad (7.15)$$

$$\sigma_{\varphi L}(t) = e^{-2\gamma t} \sigma_{\varphi L}(0) + \frac{(1-e^{-2\gamma t})}{I\gamma} e^{-2\gamma t} (\Delta L(0))^2 + \frac{k_B T}{\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})^2. \quad (7.16)$$

У асимптотском лимиту ( $t \rightarrow \infty$ ), једначине (7.14) - (7.16) дају:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta\varphi(t) = \sqrt{\frac{k_B T}{I\gamma}} t, \quad (7.17)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta L_z(t) = \sqrt{I k_B T}, \quad (7.18)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \sigma_{\varphi L}(t) = \frac{k_B T}{\gamma}. \quad (7.19)$$

На овом месту уводимо уобичајене ознаке за стандардна одступања,  $\sigma_\varphi(\tau)$  као стандардно одступање угла:

$$\sigma_\varphi(\tau) = \Delta\varphi(t), \quad (7.20)$$

$\sigma_L(\tau)$  и  $\sigma(\tau)$  као бездимензионе величине дефинисане на следећи начин:

$$\sigma_L(\tau) = \frac{\Delta L(t)}{\gamma_0 I_0}, \quad (7.21)$$

$$\sigma(\tau) = \frac{\sigma_{\varphi L}(t)}{\gamma_0 I_0}, \quad (7.22)$$

где је  $\tau$  бездимензиона величина:

$$\tau = \gamma_0 t, \quad (7.23)$$

при чему је:

$$t = \frac{\tau}{\gamma_0}, \quad (7.24)$$

и:

$$\gamma t = N\gamma_0 t = N\tau. \quad (7.25)$$

Применом раније наведених релација (6.9) и (6.14), које приказују зависност момента инерције и коефицијента пригушења од броја лопатица пропелера, уз коришћење (7.23) - (7.25), из (7.14) - (7.16) следе одговарајући изрази за  $\sigma_\varphi^2(\tau)$ ,  $\sigma_L^2(\tau)$  и  $\sigma(\tau)$ . За  $\sigma_\varphi^2(\tau)$  се може написати:

$$\sigma_\varphi^2(\tau) = \sigma_\varphi^2(0) + \left(\frac{1-e^{-2N\tau}}{2N^2}\right)^2 \frac{(\Delta L(0))^2}{\gamma_0^2 I_0^2} + \frac{1-e^{-2N\tau}}{2N^2} \frac{\sigma_{\varphi L}(0)}{\gamma_0 I_0} + \frac{k_B T}{N^3 I_0 \gamma_0^2} \left[ N\tau - (1 - e^{-2N\tau}) + \frac{1-e^{-4N\tau}}{4} \right], \quad (7.26)$$

односно, након сређивања:

$$\sigma_\varphi^2(\tau) = \sigma_\varphi^2(0) + \left(\frac{1-e^{-2N\tau}}{2N^2}\right)^2 \sigma_L^2(0) + \frac{1-e^{-2N\tau}}{2N^2} \sigma(0) + \frac{k_B T}{N^3 I_0 \gamma_0^2} \left[ N\tau - (1 - e^{-2N\tau}) + \frac{1-e^{-4N\tau}}{4} \right]. \quad (7.27)$$

Израз (7.15) добија облик:

$$(\Delta L(\tau))^2 = e^{-4N\tau} (\Delta L(0))^2 + N I_0 k_B T (1 - e^{-4N\tau}), \quad (7.28)$$

па се, након дељења (7.28) са  $(\gamma_0 I_0)^2$ , добија:

$$\sigma_L^2(\tau) = e^{-4N\tau} \sigma_L^2(0) + \frac{N k_B T}{I_0 \gamma_0^2} (1 - e^{-4N\tau}). \quad (7.29)$$

Сменом (7.23) - (7.25) у (7.16) следи:

$$\sigma_{\varphi L}(t) = e^{-2N\tau} \sigma_{\varphi L}(0) + \frac{(1-e^{-2N\tau})}{N I_0 N \gamma_0} e^{-2N\tau} (\Delta L(0))^2 + \frac{k_B T}{N \gamma_0} (1 - e^{-2N\tau})^2. \quad (7.30)$$

Након дељења (7.30) са  $\gamma_0 I_0$ , (7.22) се може написати као:

$$\sigma(\tau) = e^{-2N\tau} \sigma(0) + \frac{(1 - e^{-2N\tau})}{N^2} e^{-2N\tau} \sigma_L^2(0) + \frac{k_B T}{NI_0 \gamma_0^2} (1 - e^{-2N\tau})^2. \quad (7.31)$$

У асимптотском лимиту ( $\tau \rightarrow \infty$ ) важи:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \sigma_\varphi = \sqrt{\frac{k_B T}{I_0 \gamma_0^2 N^2}}, \quad (7.32)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \sigma_L = \sqrt{\frac{N k_B T}{I_0 \gamma_0^2}}, \quad (7.33)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \sigma = \frac{k_B T}{NI_0 \gamma_0^2}. \quad (7.34)$$

На основу израза (7.32) - (7.34) примећује се да асимптотски лимит стандардног одступања угла опада са порастом броја лопатица молекулског пропелера, док асимптотски лимит стандардног одступања момента импулса расте са порастом броја лопатица молекулског пропелера.

У случају класичног Брауновог ротатора на основу једначине (10) у (Uhlenbeck and Ornstein 1930) следи:

$$\langle (\varphi(t) - \varphi_0)^2 \rangle = \frac{2Ik_B T}{f^2} \left( \frac{f}{I} t - 1 + e^{-ft/I} \right), \quad (7.35)$$

где је  $\varphi_0 = \varphi(0)$ , а  $f = 2I\gamma$ . Стандардно одступање угла се може изразити на следећи начин:

$$(\Delta\varphi(t))^2 = \langle (\varphi(t) - \langle \varphi(t) \rangle)^2 \rangle = \langle (\varphi(t) - \varphi_0)^2 \rangle - (\langle \varphi(t) \rangle - \varphi_0)^2. \quad (7.36)$$

Из израза (22) у (Uhlenbeck and Ornstein 1930) следи:

$$\langle \varphi(t) \rangle - \varphi_0 = \frac{L_z(0)}{2I\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}), \quad (7.37)$$

тако да се на основу релације, која следи применом принципа једнаке расподеле енергије на ротационо кретање:

$$L_z^2(0) = Ik_B T, \quad (7.38)$$

може написати:

$$\langle (\varphi(t)) - \varphi_0 \rangle^2 = \frac{Ik_B T}{4I^2 \gamma^2} (1 - e^{-2\gamma t})^2. \quad (7.39)$$

Сменом (7.35) и (7.39) у (7.36), следи:

$$(\Delta\varphi(t))^2 = \frac{k_B T}{I\gamma^2} \left( \gamma t - \frac{1}{2} + \frac{e^{-2\gamma t}}{2} - \frac{1}{4} - \frac{1}{4} e^{-4\gamma t} + \frac{e^{-2\gamma t}}{2} \right), \quad (7.40)$$

односно, након једноставних трансформација:

$$(\Delta\varphi(t))^2 = \frac{k_B T}{I\gamma^2} \left( \gamma t - (1 - e^{-2\gamma t}) + \frac{1}{4}(1 - e^{-4\gamma t}) \right). \quad (7.41)$$

Применом једначина (12) и (14) у (Uhlenbeck and Ornstein 1930) на случај ротационог кретања, и множењем са  $I$ , односно са  $I^2$ , следи:

$$\langle L_z(t) \rangle = \langle L_z(0) \rangle e^{-2\gamma t}, \quad (7.42)$$

и:

$$\langle L_z^2(t) \rangle = I k_B T + (\langle L_z^2(0) \rangle - I k_B T) e^{-4\gamma t}. \quad (7.43)$$

На основу израза (7.12), (7.42) и (7.43) се лако добија:

$$(\Delta L_z(t))^2 = \langle L_z^2(t) \rangle - \langle L_z(t) \rangle^2 = I k_B T + (\langle L_z^2(0) \rangle - I k_B T) e^{-4\gamma t} - \langle L_z(0) \rangle^2 e^{-4\gamma t}, \quad (7.44)$$

односно:

$$(\Delta L_z(t))^2 = I k_B T (1 - e^{-4\gamma t}). \quad (7.45)$$

Да би се добио класичан израз за  $\sigma_{\varphi L}$  најпре се из секције 2 у (Uhlenbeck and Ornstein 1930) преузимају изрази:

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = \frac{L_z(t)}{I}, \quad (7.46)$$

и:

$$\frac{dL_z(t)}{dt} = -\beta L_z(t) + IA(t), \quad (7.47)$$

где је  $\beta = 2\gamma$ , при чему други члан представља стохастичку силу чија је средња вредност једнака нули, односно важи  $\langle IA(t) \rangle = 0$  (Uhlenbeck and Ornstein 1930). Из:

$$\frac{d}{dt} (\langle \varphi(t) L_z(t) \rangle - \langle \varphi(t) \rangle \langle L_z(t) \rangle) = \left\langle \frac{d\varphi(t)}{dt} L_z(t) \right\rangle + \varphi(t) \left\langle \frac{dL_z(t)}{dt} \right\rangle - \left\langle \frac{d\varphi(t)}{dt} \right\rangle \langle L_z(t) \rangle - \left\langle \frac{dL_z(t)}{dt} \right\rangle \langle \varphi(t) \rangle, \quad (7.48)$$

применом (7.46) и (7.47) следи:

$$\frac{d}{dt} (\langle \varphi(t) L_z(t) \rangle - \langle \varphi(t) \rangle \langle L_z(t) \rangle) = \left\langle \frac{L_z(t)}{I} L_z(t) - \varphi(t) \beta L_z(t) \right\rangle - \left\langle \frac{L_z(t)}{I} \right\rangle \langle L_z(t) \rangle + \langle \beta L_z(t) \rangle \langle \varphi(t) \rangle, \quad (7.49)$$

тако да се за  $\sigma_{\varphi L}$  добија следећа диференцијална једначина:



$$\frac{1}{2} \frac{d\sigma_{\varphi L}(t)}{dt} = \frac{(\Delta L_z(t))^2}{I} - \frac{1}{2} \beta \sigma_{\varphi L}(t), \quad (7.50)$$

која се може написати у облику:

$$\frac{d\sigma_{\varphi L}(t)}{dt} + 2\gamma\sigma_{\varphi L}(t) = \frac{2(\Delta L_z(t))^2}{I}, \quad (7.51)$$

односно, уз примену израза (7.45), као:

$$\frac{d\sigma_{\varphi L}(t)}{dt} + 2\gamma\sigma_{\varphi L}(t) = 2k_B T(1 - e^{-4\gamma t}). \quad (7.52)$$

Једначина (7.52) се може решити применом стандардне методе решавања линеарних нехомогених диференцијалних једначина првог реда, тако да се решење може написати у облику:

$$\sigma_{\varphi L} = e^{-2\gamma t} [c + \int 2k_B T(1 - e^{-4\gamma t}) e^{2\gamma t} dt], \quad (7.53)$$

односно, имајући у виду да је почетна вредност  $\sigma_{\varphi L}$  у класичном случају који се разматра једнака нули:

$$\sigma_{\varphi L} = \frac{k_B T}{\gamma} (1 - e^{-2\gamma t})^2. \quad (7.54)$$

Изрази за бездимензионе величине, дефинисане изразима (7.20) - (7.22), се у класичном случају, на основу израза (7.41), (7.45) и (7.54), већ наведеним поступком, свде на:

$$\sigma_{\varphi}^2(\tau) = \frac{k_B T}{N^3 I_0 \gamma_0^2} \left[ N\tau - (1 - e^{-2N\tau}) + \frac{1 - e^{-4N\tau}}{4} \right], \quad (7.55)$$

$$\sigma_L^2(\tau) = \frac{Nk_B T}{I_0 \gamma_0^2} (1 - e^{-4N\tau}), \quad (7.56)$$

$$\sigma(\tau) = \frac{k_B T}{N I_0 \gamma_0^2} (1 - e^{-2N\tau})^2. \quad (7.57)$$

Упоређивањем израза (7.27) и (7.55), (7.29) и (7.56), као и (7.31) и (7.57), може се закључити да су, у случају када су почетне вредности стандардних одступања једнаке нули, изрази за стандардна одступања угла и момента импулса, као и за корелациону функцију, идентични и за класични и за квантномеханички случај. Чланови који се појављују само у квантномеханичким изразима, односно чланови на

основу којих се разликују десне стране наведених израза, представљају квантномеханички допринос, односно порекло квантних корекција. Ови чланови зависе од почетних вредности стандардних одступања, тако да избор малих почетних вредности стандардних одступања одређује и малу вредност квантних поправки.

Изрази (7.27), (7.29) и (7.31) су коришћени за детаљну анализу динамичке стабилности молекулских пропелера, а пре свега за анализу утицаја броја лопатица на динамичку стабилност молекулских пропелера. Да би се добили резултати погодни за графички приказ и детаљну анализу одређују се конкретне почетне вредности стандардних одступања као и конкретне вредности појединих параметара. Почетне вредности  $\sigma_L(0) = 1$ ,  $\sigma_\varphi(0) = 0,1$ ,  $\sigma(0) = 0,1$  су одабране тако да задовољавају Коши-Шварцову (Cauchy-Schwarz) неједнакост:

$$\sigma(0) \leq 2\sigma_\varphi(0)\sigma_L(0). \quad (7.58)$$

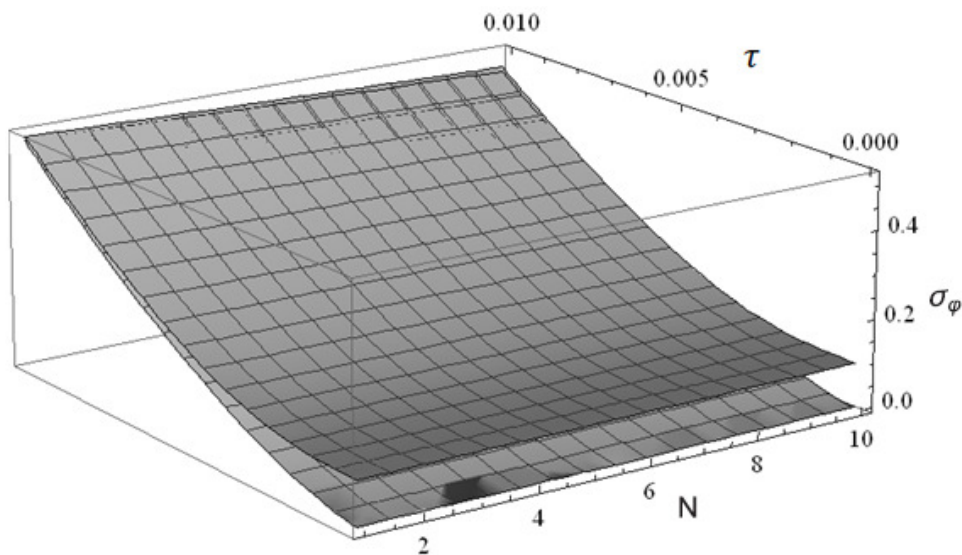
У једначинама (7.27), (7.29) и (7.31) се појављује константа  $A = \frac{k_B T}{I_0 \gamma_0^2}$ , која се може записати у следећем облику:

$$A = \frac{k_B T}{\hbar \gamma_0} \cdot \frac{\hbar}{I_0 \gamma_0}. \quad (7.59)$$

Имајући у виду типичне вредности момента инерције реалних молекулских пропелера и коефицијента пригушења, може се написати  $\frac{k_B T}{\hbar \gamma_0} \gg 1$  и  $\frac{\hbar}{I_0 \gamma_0} \gg 200$ , тако да се, без губљења општости, може поставити да је  $A = 2 \cdot 10^5$  (Jeknić-Dugić et al 2018). Наведене почетне вредности као и вредности наведених константи су уведене у циљу добијања резултата који су презентовани и графички и на основу којих је вршена анализа утицаја броја лопатица, фактора пригушења и температуре на динамичку стабилност молекулског ротатора. При томе потребно је нагласити да избор почетних вредности и вредности појединих параметара не утиче квалитативно на добијене резултате.

Величина  $(N\gamma_0)^{-1}$  је такозвано време релаксације, које се дефинише као време за које динамика ротатора постаје типично класична, односно таква да може бити описана класичном Ланжевеновом једначином. У овом раду се користи квантномеханички модел па је зато важно детаљно анализирати динамику молекулских ротатора у временским интервалима који су краћи од времена релаксације. Резултати

који ће бити презентовани односе се на временски интервал за који важи једнакост  $\tau = \gamma_0 t = 0.01$ . На сликама 7.1. и 7.2., на којима су добијени резултати приказани графички, горња површ је добијена на основу квантномеханичких израза ( (7.27) за стандардно одступање угла, односно (7.29) за стандардно одступање момента импулса), док је доња површ добијена на основу одговарајућих класичних израза (7.55) и (7.56).

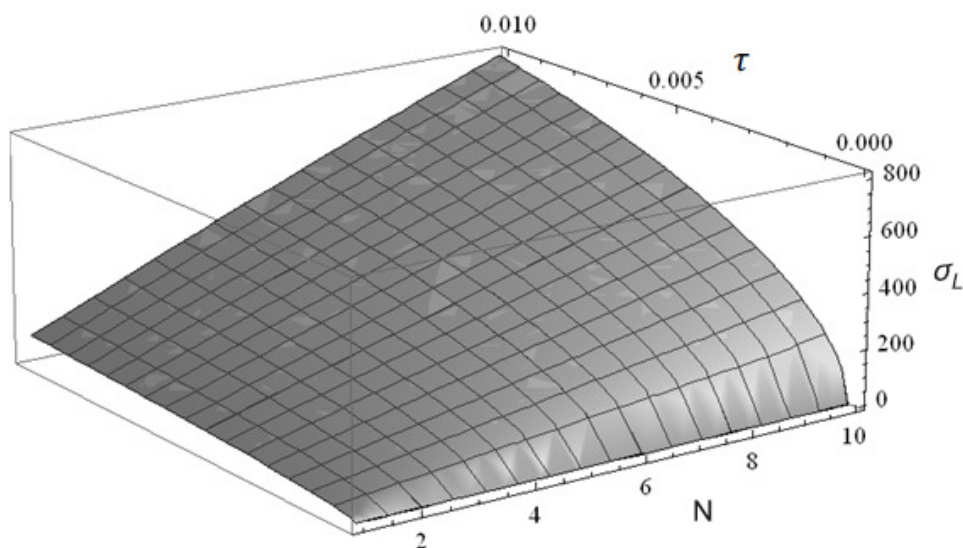


Слика 7.1. Зависност стандардног одступања угла од времена за различите вредности броја лопатица молекулског пропелера,  $\tau \in [0,0.01]$ ,  $N \in [1,10]$

На основу графика приказаним на Сликама 7.1. и 7.2, као и на основу израза (7.27) и (7.29), се може закључити да је прелаз из квантне у класичну динамику и за угао и за момент импулса молекулских пропелера веома брз, при чему се може приметити и да је тај прелаз нешто бржи у случају момента импулса. За кратке временске интервале динамика молекулског ротатора је подложна значајним квантним корекцијама, које брзо опадају са протоком времена, тако да се може рећи да је квантни домен понашања ротатора кратки почетни временски интервал. Квантне поправке опадају и са порастом броја лопатица молекулских пропелера, односно мање су за веће молекулске пропелере.

Са порастом броја лопатица пропелера стандардно одступање угла се смањује док се стандардно одступање момента импулса повећава. Може се рећи да већи пропелери имају бољу стабилност угла, док мањи пропелери имају бољу стабилност момента импулса.

Поред тога, уочава се да се са порастом времена повећава и стандардно одступање угла и стандардно одступање момента импулса, односно да се смањује стабилност молекулских пропелера. Промене стандардних одступања момента импулса у току времена су осетно веће у односу на промене стандардних одступања угла.

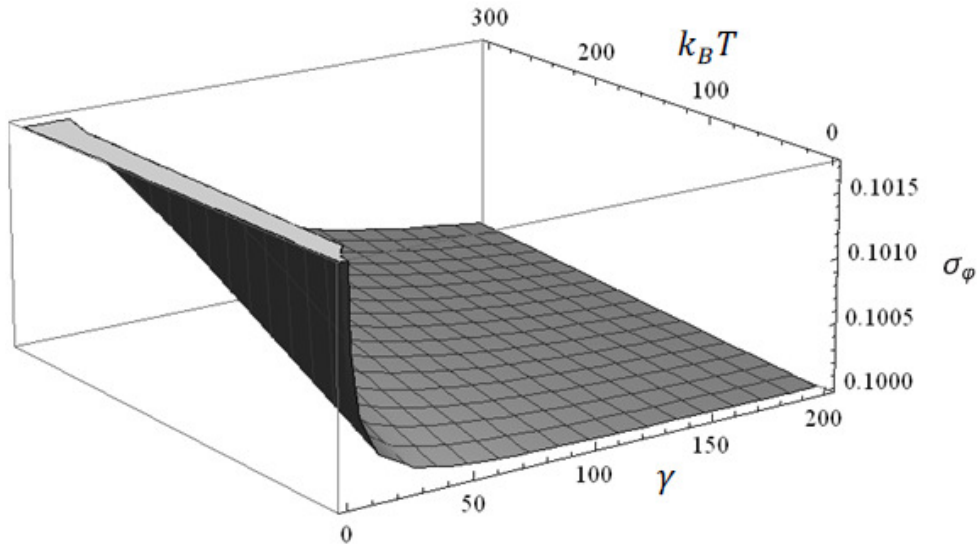


Слика 7.2. Зависност стандардног одступања момента импулса од времена за различите вредности броја лопатица молекулског пропелера,  $\tau \in [0,0.01]$ ,  $N \in [1,10]$

Значај везе геометрије отвореног система и његове динамике се до сада углавном разматрао кроз утицај параметара окружења, коефицијента пригушења и температуре, на динамичке карактеристике отвореног система (Lisowski et al 2015, Valenti et al 2014, Fiasconaro et al 2010, Agudov et al 2003). У циљу упоређивања са резултатима поменутих разматрања, у овом раду се приказују графици зависности стандардних одступања угла и момента импулса од коефицијента пригушења и температуре (Слика 7.3. и Слика 7.4.), који су добијени применом израза (7.14) и (7.15).

За мале вредности коефицијента пригушења, односно у случају слабе интеракције са окружењем, стандардно одступање угла је велико али са порастом коефицијента пригушења опада и то у почетку јако брзо, након чега опадање постаје спорије. Стандардно одступање угла незнатно расте са порастом температуре, односно температура слабо утиче на стабилност угла. И на основу израза (7.14) може се

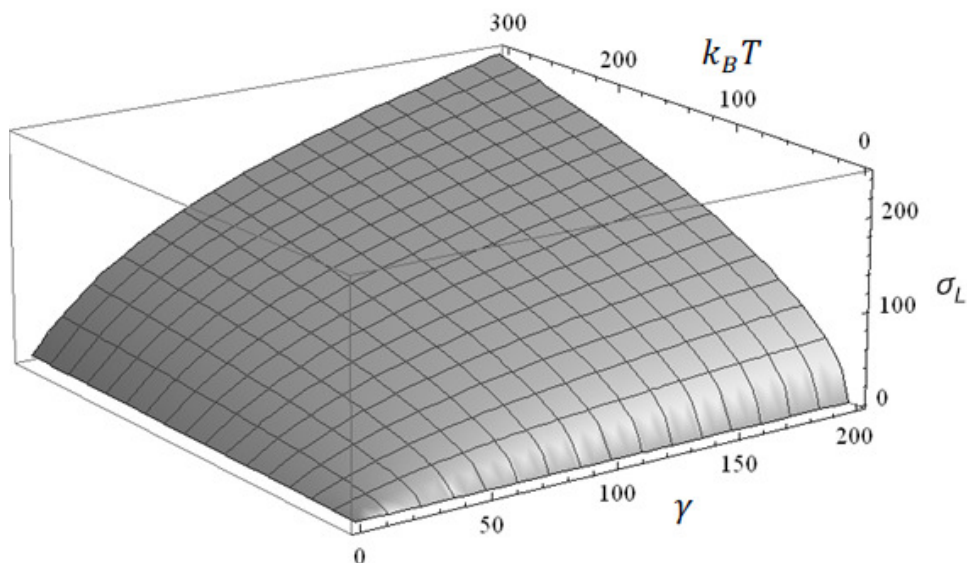
закључити да са порастом коефицијента пригушења стандардно одступање угла опада док са порастом температуре незнатно расте.



Слика 7.3. Зависност стандардног одступања угла од коефицијента пригушења и температуре за  $\gamma \in [1, 200]$ ,  $k_B T \in [0.01, 300]$

Већа стабилност угла услед јаче интеракције са окружењем може да се посматра као ефекат који је сличан познатом ефекту повећања стабилности услед присуства шума (енг : ‘noise-enhanced stability (NES) effect’) (Valenti et al 2014, Fiasconaro et al 2010, Agudov et al 2003). Овај ефекат је најчешће повезан са ситуацијама у којима постоји више локалних минимума или неколико метастабилних стања. Шум може утицати на повећање стабилности неког метастабилног стања тако што систем услед утицаја шума остаје дуже у том стању. У случају слободног ротатора аналогија са поменутиим ефектом стабилности услед присуства шума постоји само по питању зависности стабилности од јачине интеракције са окружењем, док физички узрок такве зависности није исти.

Стандардна одступања момента импулса расту и са порастом коефицијента пригушења и са порастом температуре (Слика 7.4.), при чему нешто већи утицај има температура. Анализом израза (7.15) може се доћи до истих закључака.



Слика 7.4 Зависност стандардног одступања момента импулса од коефицијента пригушења и температуре за  $\gamma \in [1,200]$ ,  $k_B T \in [0.01,300]$

За кратке временске интервале, за које су презентовани резултати, добијена зависност стандардних одступања угла и момента импулса од коефицијента пригушења и температуре је веома занимљива. Са порастом коефицијента пригушења истовремено опада стандардно одступање угла и расте стандардно одступање момента импулса. Коефицијент пригушења је показатељ јачине интеракције са окружењем, тако да описана зависност заправо указује на то да са порастом јачине интеракције са окружењем расте нестабилност момента импулса док истовремено расте стабилност угла. На основу израза (7.6) и (7.7) може се закључити да је за велике вредности коефицијента пригушења средња вредност угла приближно једнака почетној вредности угла док средња вредност момента импулса тежи нули. У ситуацији у којој је стандардно одступање угла мало, док је истовремено стандардно одступање момента импулса велико, највероватније постоји непрестана и веома учестала промена смера угаоне брзине, тако да су временски интервали у оквиру којих се ротација врши у истом смеру веома кратки, па су и углови ротације веома мали. Услед непрестане интеракције са окружењем молекулски ротатор мења не само угаону брзину него и смер ротације. Ако се претпостави да је јачина интеракције пропорционална просечном броју честица окружења које интерагују са молекулским ротатором у јединици времена, онда се може закључити да са порастом јачине интеракције расте број промена смера угаоне брзине у јединици времена, односно да се повећава учесталост

промене смера угаоне брзине. Услед повећања те учесталости промене смера угаоне брзине временски интервали у којима ротатор врши ротационо кретање у једном смеру постају све краћи тако да стандардно одступање угла постаје све мање, док истовремено стандардно одступање момента импулса постаје све веће. Утицај температуре на стандардна одступања угла и момента импулса је нешто другачији. Ако се пође од претпоставке да температура не утиче на поменуто учесталост промене смера угаоне брзине, већ само на интензитет промене угаоне брзине услед повећања просечне кинетичке енергије честица окружења, долази се до закључка да пораст температуре не утиче значајно на промену стабилности угла док истовремено значајно утиче на повећање нестабилности момента импулса.

У склопу разматрања преласка динамике молекулског ротатора из квантног у класични домен од велике је важности испитати да ли се тај прелаз дешава услед ефекта квантне декохеренције. Трећи члан десне стране мастер једначине Калдеире-Легета је сразмеран моменту инерције, па се у случају великог момента инерције други члан десне стране једначине може занемарити, при чему се описан случај назива декохеренцијски лимит, односно лимит без узмака. У декохеренцијском лимиту једначине (7.1) - (7.5) имају следећи облик (у Додатку 1 је дато детаљно извођење):

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi(t) \rangle = \frac{1}{I} L_z(t), \quad (7.60)$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z(t) \rangle = 0, \quad (7.61)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^2(t) \rangle = \frac{1}{I} (\langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle), \quad (7.62)$$

$$\frac{d}{dt} (\langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle) = \frac{2}{I} \langle L_z^2(t) \rangle, \quad (7.63)$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z^2(t) \rangle = 4I\gamma k_B T, \quad (7.64)$$

док су изрази за квадрате стандардних одступања и корелациону функцију (у бездимензионом облику):

$$\sigma_\varphi^2(\tau) = \sigma_\varphi^2(0) + \frac{\sigma(0)\tau}{N} + \sigma_L^2(0) \frac{\tau^2}{N^2} + \frac{4k_B T}{3NI_0\gamma_0^2} \tau^3, \quad (7.65)$$

$$\sigma_L^2(\tau) = \sigma_L^2(0) + \frac{4Nk_B T\tau}{I_0\gamma_0^2}, \quad (7.66)$$

$$\sigma(\tau) = \sigma(0), \quad (7.67)$$

(поступци извођења датих једначина, добијања њихових решења, као и извођење израза (7.65) - (7.67) су приказани у Додатку 1, (Д1.68) - (Д1.86) ). Услед немогућности да се изрази (7.65), (7.66) и (7.67) добију као апроксимација израза (7.55), (7.56) и (7.57) може се закључити да до прелаза са квантног понашања на класично понашање не долази само услед ефекта квантне декохеренције. Познато је да је квантна декохеренција процес који се одвија веома брзо, па је чињеница да прелазом са квантног на класично понашање молекулских пропелера не доминира процес декохеренције уједно и један од фактора који доводе до тога да квантни домен динамике молекулских пропелера није занемарљивог трајања и значаја. Из наведеног се може закључити да је дисипација доминантнији процес.



## 8. Хармонијски ротатор

Као што је већ речено, многе реалне физичке ситуације у којима се могу наћи молекулски пропелери се могу моделовати увођењем хармонијског потенцијала:

$$V(\varphi) = \frac{1}{2}I\omega^2\varphi^2, \quad (8.1)$$

при чему је:

$$V'(\varphi) = \frac{dV}{d\varphi} = I\omega^2\varphi, \quad (8.2)$$

где је  $\omega$  угаона фреквенција осцилатора. Сменом (8.2) у (7.3) - (7.7) добија се, за случај хармонијског ротатора, следећи систем једначина:

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi(t)\rangle = \frac{1}{I}\langle L_z(t)\rangle, \quad (8.3)$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z(t)\rangle = -I\omega^2\langle\varphi(t)\rangle - 2\gamma\langle L_z(t)\rangle, \quad (8.4)$$

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi^2(t)\rangle = \frac{1}{I}\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t)\rangle, \quad (8.5)$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t)\rangle = -2I\omega^2\langle\varphi^2(t)\rangle - 2\gamma\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t)\rangle + \frac{2}{I}\langle L_z^2(t)\rangle, \quad (8.6)$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z^2(t)\rangle = -I\omega^2\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t)\rangle - 4\gamma\langle L_z^2(t)\rangle + 4I\gamma k_B T. \quad (8.7)$$

Прве две једначине овог система, (8.3) и (8.4), се могу посматрати као независан систем једначина. Решавањем овог система (као што је показано у Додатку 2, (Д2.6) - (Д2.17)), уз примену апроксимације која важи у случају слабе интеракције:

$$\frac{\gamma_0}{\omega} \rightarrow 0, \quad (8.8)$$

добијају се следећа решења (Petrović and Jeknić-Dugić 2017):

$$\langle L_z(t)\rangle = e^{-\gamma t}(\langle L_z(0)\rangle \cos\omega t - I\omega\langle\varphi(0)\rangle \sin\omega t), \quad (8.9)$$

$$\langle\varphi(t)\rangle = \frac{1}{I\omega} e^{-\gamma t}(\langle L_z(0)\rangle \sin\omega t + I\omega\langle\varphi(0)\rangle \cos\omega t). \quad (8.10)$$

Преостале три једначине, (8.3) - (8.5), посматрају се као посебан систем једначина који се решава применом матричне методе (што је такође показано у Додатку 2, видети изразе од (Д2.18) до (Д2.83) ), на основу чега следе решења (Petrović and Jeknić-Dugić 2017):

$$\langle \varphi^2(t) \rangle = e^{-2\gamma t} \left( -\frac{4I\gamma k_B T}{4I^2\omega^2} \left( \frac{1}{\gamma} + \frac{1}{\omega^2} (-\gamma \cos 2\omega t + \omega \sin 2\omega t) \right) + \langle \varphi^2(0) \rangle \left( \cos^2 \omega t + \frac{\gamma}{\omega} \sin 2\omega t \right) + \frac{\langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle}{2I\omega} (2\gamma \sin^2 \omega t + \omega \sin 2\omega t) + \frac{\langle L_z(0)^2 \rangle}{I^2\omega^2} \left( \sin^2 \omega t - 2\frac{\gamma^2}{\omega^2} \cos 2\omega t \right) \right) + \frac{k_B T}{I\omega^2}, \quad (8.11)$$

$$\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle = e^{-2\gamma t} \left( \frac{4\gamma k_B T}{\omega^2} \sin^2 \omega t - \langle \varphi^2(0) \rangle (2I\gamma \sin^2 \omega t + I\omega \sin 2\omega t) + \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle \left( -\frac{\gamma^2}{\omega^2} \sin^2 \omega t + \cos 2\omega t \right) - \langle L_z^2(0) \rangle \left( \frac{2\gamma}{I\omega^2} \sin^2 \omega t - \frac{1}{I\omega} \sin 2\omega t \right) \right), \quad (8.12)$$

$$\langle L_z^2(t) \rangle = e^{-2\gamma t} \left( \langle L_z(0)^2 \rangle \left( \cos^2 \omega t - \frac{\gamma}{2\omega} \sin 2\omega t \right) + I^2\omega^2 \langle \varphi^2(0) \rangle \sin^2 \omega t + \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle \left( I\gamma \sin^2 \omega t - \frac{I\omega}{2} \sin 2\omega t \right) + I\gamma k_B T \left( -\frac{1}{\gamma} + \frac{\gamma}{\omega^2} \cos 2\omega t + \frac{1}{\omega} \sin 2\omega t \right) \right) + Ik_B T. \quad (8.13)$$

За стандардна одступања на овом месту употребиће се ознаке  $\Delta\varphi(t)$ ,  $\Delta L(t)$  и  $\sigma_{\varphi L}(t)$ , дефинисане изразима (7.11) - (7.13), за чије се вредности, уз примену апроксимације (8.8), добијају следећи изрази (што је такође показано у Додатку 2, (Д2.84) - (Д2.95)):

$$\Delta\varphi(t)^2 = e^{-2\gamma t} \left( (\Delta\varphi(0))^2 \cos^2 \omega t + \frac{\sigma_{\varphi L}(0)}{2I\omega} \sin 2\omega t + \frac{(\Delta L_z(0))^2}{I^2\omega^2} \sin^2 \omega t \right) + \frac{k_B T}{I\omega^2} (1 - e^{-2\gamma t}) + O\left(\frac{\gamma}{\omega}\right), \quad (8.14)$$

$$\Delta L_z(t)^2 = e^{-2\gamma t} \left( (\Delta L_z(0))^2 \cos^2 \omega t + I^2\omega^2 (\Delta\varphi(0))^2 \sin^2 \omega t - \frac{I\omega}{2} \sigma_{\varphi L}(0) \sin 2\omega t \right) + Ik_B T (1 - e^{-2\gamma t}) + O\left(\frac{\gamma}{\omega}\right), \quad (8.15)$$

$$\sigma_{\varphi L}(t) = e^{-2\gamma t} \left( \frac{4\gamma k_B T}{\omega^2} \sin^2 \omega t - I\omega (\Delta\varphi(0))^2 \sin 2\omega t + \sigma_{\varphi L}(0) \cos 2\omega t - \frac{1}{I\omega} (\Delta L_z(0))^2 \sin 2\omega t \right) + O\left(\frac{\gamma}{\omega}\right). \quad (8.16)$$

У асимптотском лимиту ( $t \rightarrow \infty$ ), једначине (8.14) - (8.16), након одбацивања чланова који су пропорционални  $\frac{\gamma}{\omega}$ , дају (видети Додатак 2, изрази (Д2.96) - (Д2.98)):

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta\varphi(t) = \sqrt{\frac{k_B T}{I\omega^2}}, \quad (8.17)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta L_z(t) = \sqrt{I k_B T}, \quad (8.18)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \sigma_{\varphi L}(t) = 0. \quad (8.19)$$

На овом месту уводе се уобичајене ознаке за стандардна одступања, која се дефинишу на следећи начин,  $\sigma_{\varphi}(\tau)$  као стандардно одступање угла:

$$\sigma_{\varphi}(\tau) = \Delta\varphi(t), \quad (8.20)$$

$\sigma_L(\tau)$  и  $\sigma(\tau)$  као бездимензионе величине дефинисане на следећи начин:

$$\sigma_L(\tau) = \frac{\Delta L(t)}{\omega I_0}, \quad (8.21)$$

$$\sigma(\tau) = \frac{\sigma_{\varphi L}(t)}{\omega I_0}. \quad (8.22)$$

Применом израза (7.23)- (7.25), за квадрат стандардног одступања угла следи:

$$\Delta\varphi(t)^2 = e^{-2N\tau} \left( (\Delta\varphi(0))^2 \cos^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0} + \frac{\sigma_{\varphi L}(0)}{2NI_0\omega} \sin 2\omega \frac{\tau}{\gamma_0} + \frac{(\Delta L_z(0))^2}{N^2 I_0^2 \omega^2} \sin^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0} \right) + \frac{k_B T}{NI_0\omega^2} (1 - e^{-2N\tau}) + O\left(\frac{\gamma}{\omega}\right), \quad (8.23)$$

односно, уз коришћење израза (8.20) - (8.22):

$$\sigma_{\varphi}^2(\tau) = e^{-2N\tau} \left( \sigma_{\varphi}^2(0) \cos^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0} + \frac{\sigma(0)}{2N} \sin 2\omega \frac{\tau}{\gamma_0} + \frac{\sigma_L^2(0)}{N^2} \sin^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0} \right) + \frac{k_B T}{NI_0\omega^2} (1 - e^{-2N\tau}) + O\left(\frac{\gamma}{\omega}\right). \quad (8.24)$$

Израз (8.15) применом (7.23) - (7.25) прелази у:

$$\Delta L_z(t)^2 = e^{-2N\tau} \left( (\Delta L_z(0))^2 \cos^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0} + N^2 I_0^2 \omega^2 (\Delta\varphi(0))^2 \sin^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0} - \frac{NI_0\omega}{2} \sigma_{\varphi L}(0) \sin 2\omega \frac{\tau}{\gamma_0} \right) + NI_0 k_B T (1 - e^{-2N\tau}) + O\left(\frac{\gamma}{\omega}\right). \quad (8.25)$$

Дељењем (8.25) са  $I_0^2 \omega^2$  и коришћењем (8.20) - (8.22) следи:

$$\sigma_L^2(\tau) = e^{-2N\tau} \left( \sigma_L^2(0) \cos^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0} + N^2 \sigma_\varphi^2(0) \sin^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0} - \frac{N}{2} \sigma_{L\varphi}(0) \sin 2\omega \frac{\tau}{\gamma_0} \right) + \frac{Nk_B T}{I_0 \omega^2} (1 - e^{-2N\tau}) + O\left(\frac{\gamma}{\omega}\right). \quad (8.26)$$

Израз (8.16) се може написати у облику:

$$\sigma_{\varphi L}(t) = e^{-2N\tau} \left( \frac{4\gamma k_B T}{\omega^2} \sin^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0} - N I_0 \omega (\Delta\varphi(0))^2 \sin 2\omega \frac{\tau}{\gamma_0} + \sigma_{\varphi L}(0) \cos 2\omega \frac{\tau}{\gamma_0} - \frac{1}{I\omega} (\Delta L_z(0))^2 \sin 2\omega \frac{\tau}{\gamma_0} \right) + O\left(\frac{\gamma}{\omega}\right). \quad (8.27)$$

Након дељења (8.27) са  $I_0 \omega$  следи:

$$\sigma(\tau) = e^{-2N\tau} \left( \frac{4N\gamma_0 k_B T}{I_0 \omega^3} \sin^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0} - N \sigma_\varphi^2(0) \sin 2\omega \frac{\tau}{\gamma_0} + \sigma(0) \cos 2\omega \frac{\tau}{\gamma_0} - \frac{\sigma_L^2(0)}{N} \sin 2\omega \frac{\tau}{\gamma_0} \right) + O\left(\frac{\gamma}{\omega}\right). \quad (8.28)$$

У асимптотском лимиту ( $\tau \rightarrow \infty$ ) добијају се следећи изрази:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \sigma_\varphi(\tau) = \sqrt{\frac{k_B T}{N I_0 \omega^2}}, \quad (8.29)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \sigma_L(\tau) = \sqrt{\frac{NkT}{I_0 \omega^2}}, \quad (8.30)$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \sigma(\tau) = 0. \quad (8.31)$$

На основу израза (8.29) - (8.31) примећује се да са порастом броја лопатица молекуског пропелера асимптотски лимит стандардног одступања угла опада, док асимптотски лимит стандардног одступања момента импулса расте.

Да би се у изразима за стандардна одступања и корелациону функцију идентификовали чланови који потичу од квантних поправки, потребно је упоредити добијене изразе са одговарајућим класичним изразима. За случај хармонијског ротатора класични изрази су дати изразом (55) у (Wang and Uhlenbeck 1945):

$$\Delta\varphi(t)^2 = \frac{D}{\beta \omega^2} \left( 1 - \frac{e^{-\beta t}}{\omega_1^2} \left( \omega_1^2 + \frac{\beta^2}{2} \sin^2 \omega_1 t + \beta \omega_1 \sin \omega_1 t \cos \omega_1 t \right) \right), \quad (8.32)$$

$$\Delta L_z(t)^2 = \frac{I^2 D}{\beta} \left( 1 - \frac{e^{-\beta t}}{\omega_1^2} \left( \omega_1^2 - \frac{\beta^2}{2} \sin^2 \omega_1 t - \beta \omega_1 \sin \omega_1 t \cos \omega_1 t \right) \right), \quad (8.33)$$

$$\sigma_{\varphi L} = \frac{D}{\omega_1^2} e^{-\beta t} \sin^2 \omega_1 t, \quad (8.34)$$

при чему је:

$$D = \frac{\beta k_B T}{I}, \quad (8.35)$$

$$\beta = 2\gamma, \quad (8.36)$$

$$\omega_1 = \sqrt{\omega^2 - \frac{\beta^2}{4}}, \quad (8.37)$$

односно:

$$\omega_1 = \sqrt{\omega^2 - \gamma^2}. \quad (8.38)$$

У случају слабе интеракције важи  $\omega_1 \approx \omega$ , тако да се израз (8.32) може се написати у облику:

$$\Delta\varphi(t)^2 = \frac{k_B T}{I\omega^2} \left( 1 - \frac{e^{-2\gamma t}}{\omega^2} (\omega^2 + 2\gamma^2 \sin^2 \omega t + 2\gamma\omega \sin \omega t \cos \omega t) \right), \quad (8.39)$$

односно, након одбацивања чланова који садрже  $\frac{\gamma}{\omega}$ , као:

$$\Delta\varphi(t)^2 = \frac{k_B T}{I\omega^2} (1 - e^{-2\gamma t}). \quad (8.40)$$

Израз (8.33) прелази у:

$$\Delta L_z(t)^2 = I k_B T \left( 1 - \frac{e^{-2\gamma t}}{\omega^2} (\omega^2 - 2\gamma^2 \sin^2 \omega t - 2\gamma\omega \sin \omega t \cos \omega t) \right), \quad (8.41)$$

односно у:

$$\Delta L_z(t)^2 = I k_B T (1 - e^{-2\gamma t}), \quad (8.42)$$

док се израз (8.34) своди на:

$$\sigma_{\varphi L} = \frac{2\gamma k_B T}{I\omega^2} e^{-2\gamma t} \sin^2 \omega t. \quad (8.43)$$

Изрази (8.40), (8.42) и (8.43) се могу записати и у бездимензионом облику:

$$\sigma_{\varphi}(\tau)^2 = \frac{k_B T}{I\omega^2} (1 - e^{-2N\tau}), \quad (8.44)$$

$$\sigma_L(\tau)^2 = \frac{N k_B T}{I_0 \omega^2} (1 - e^{-2N\tau}), \quad (8.45)$$

$$\sigma(\tau) = \frac{2\gamma_0 k_B T}{I_0^2 \omega^3} e^{-2N\tau} \sin^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0}. \quad (8.46)$$

Из једначина (8.14), (8.15) и (8.16) се могу добити одговарајући класични изрази ако се за почетне вредности стандардних одступања поставе вредности  $\sigma_L(0) = 0$ ,  $\sigma_\varphi(0) = 0$ ,  $\sigma(0) = 0$ . Додатни чланови за које се изрази (8.14), (8.15) и (8.16) разликују од одговарајућих класичних израза (8.40), (8.42) и (8.43) и који представљају квантне поправке, зависе од почетних вредности стандардних одступања, тако да избор малих почетних вредности стандардних одступања подразумева и малу вредност квантних поправки.

Изрази (8.24) и (8.26) су коришћени за испитивање утицаја броја лопатица на динамичку стабилност хармонијског ротатора, и то у подпригушеном режиму, који је дефинисан изразом (6.18) као и у неподпригушеном режиму, који је дефинисан изразом (6.19). Да би се добили резултати погодни за графички приказ и детаљну анализу одређују се конкретне почетне вредности стандардних одступања, које су исте као у случају слободног ротатора ( $\sigma_L(0) = 1$ ,  $\sigma_\varphi(0) = 0.1$ ,  $\sigma(0) = 0.1$ ), као и конкретне вредности појединих параметара. У изразима (8.24) и (8.26) појављују се константе:

$$B = \frac{k_B T}{I_0 \omega^2} \quad (8.47)$$

и:

$$C = \frac{\gamma_0 B}{\omega}, \quad (8.48)$$

чије вредности зависе од тога да ли се молекулски ротатор налази у подпригушеном или у неподпригушеном режиму. Ако величину  $B$  напишемо у следећем облику:

$$B = \frac{k_B T}{\hbar \omega} \cdot \frac{\hbar}{I_0 \omega}, \quad (8.49)$$

при чему за подпригушени случај важи:

$$\frac{k_B T}{\hbar \omega} > 1, \quad (8.50)$$

док за неподпригушени случај важи:

$$\frac{k_B T}{\hbar \omega} < 1, \quad (8.51)$$

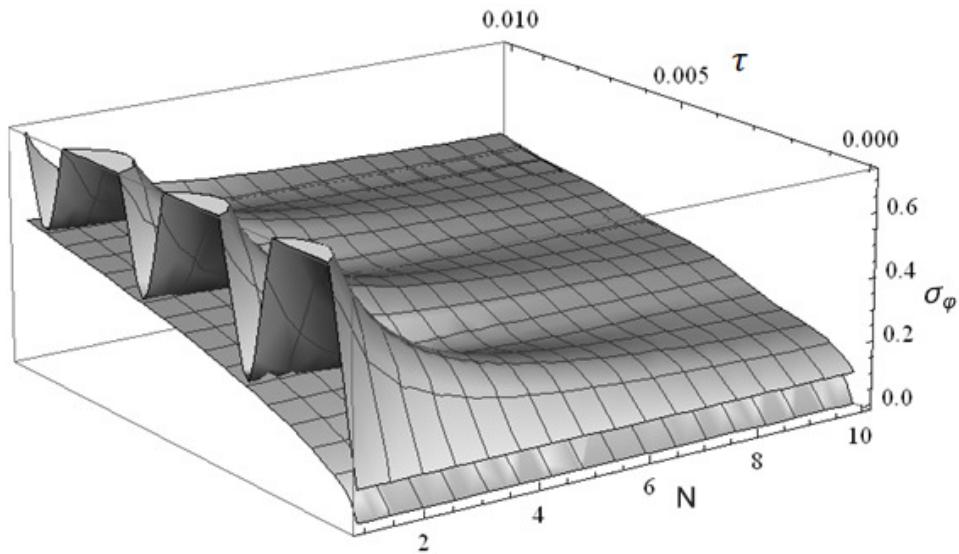
имајући у виду:

$$\hbar\omega \sim \langle H \rangle = \frac{\langle L_z^2 \rangle}{2I_0} + \frac{I_0\omega^2 \langle \varphi^2 \rangle}{2} \sim I_0\omega^2, \quad (8.52)$$

односно:

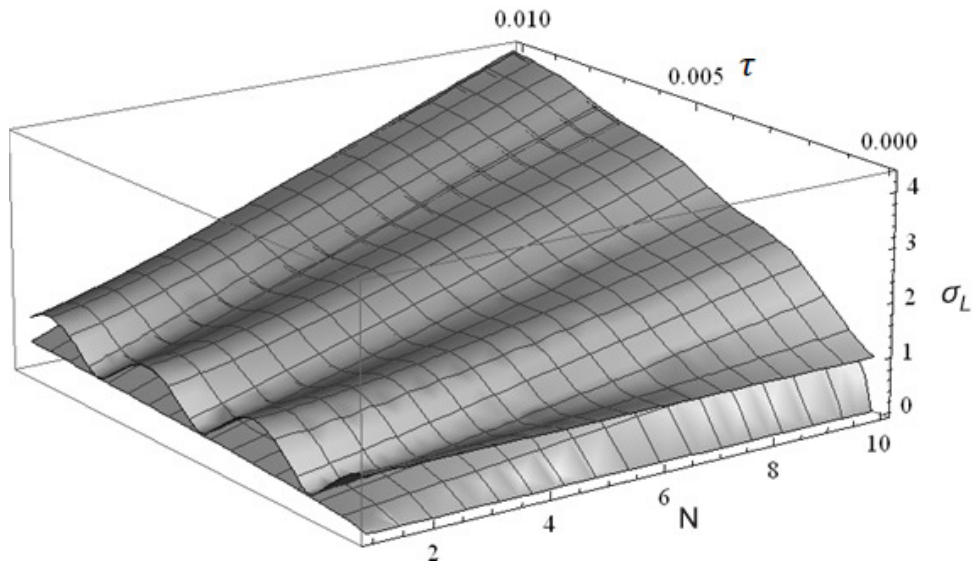
$$\frac{\hbar}{I_0\omega} \sim 1, \quad (8.53)$$

за подпригушени случај вредности ових константи ће бити  $B \sim 10$ ,  $C \sim 10^{-2}$ , док ће за неподпригушени случај вредности бити  $B \sim 0,1$ ,  $C \sim 10^{-4}$  (Jeknić-Dugić et al 2018). Коришћењем наведених почетних вредности и вредности константи  $B$  и  $C$  добијени су графици зависности стандардних одступања угла и момента импулса од броја лопатица молекулских пропелера.



Слика 8.1. Зависност стандардног одступања угла од броја лопатица пропелера за подпригушени режим,  $\tau \in [0,0.01]$ ,  $N \in [1,10]$

Графици приказани на Сликама 8.1. и 8.2. су добијени применом израза (8.24) и (8.26) за подпригушени режим. И на основу графика, као и на основу одговарајућих израза, се може закључити да са порастом времена квантне поправке опадају, док стандардна одступања расту. Са графика на Слици 8.1. се може видети да са порастом броја лопатица молекулских пропелера опадају и квантне поправке и стандардно одступање угла. Угао је стабилнији за молекулске пропелере са већим бројем лопатица.

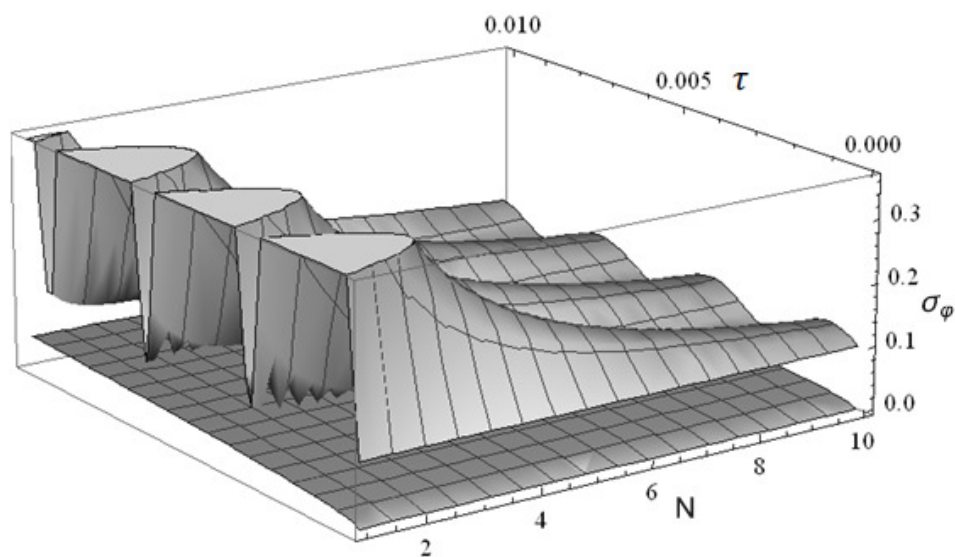


Слика 8.2. Зависност стандардног одступања момента импулса од броја лопатица пропелера за подпригушени режим,  $\tau \in [0,0.01]$ ,  $N \in [1,10]$

Са графика на Слици 8.2. се може видети да стабилност момента импулса опада са порастом броја лопатица, момент импулса је стабилнији за молекулске пропелере са мањим бројем лопатица. За веће вредности броја лопатица стандардна одступања момента импулса су већа и брже расту са протоком времена. Осцилације стандардног одступања момента импулса које потичу од присуства спољашњег поља имају већи значај у случају мањег броја лопатица.

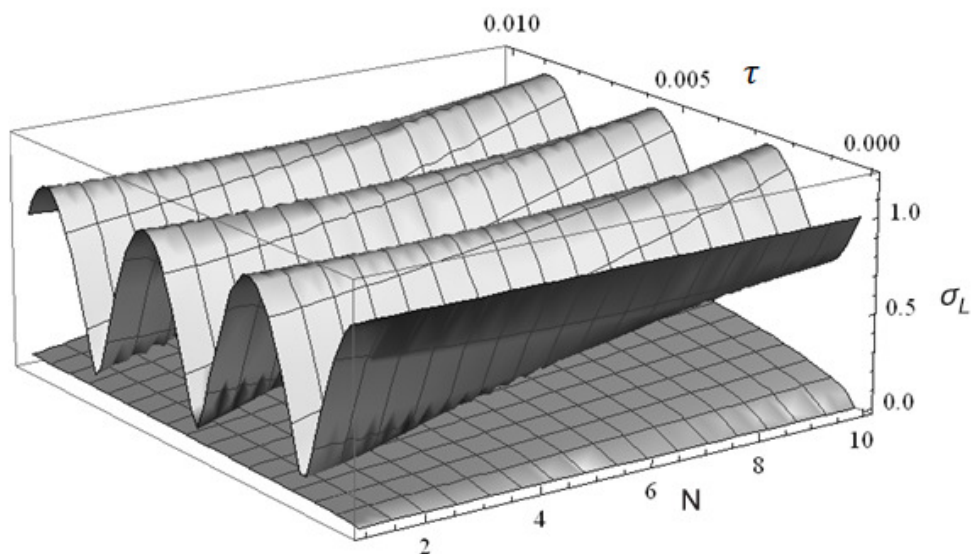
На Сликама 8.3. и 8.4. су приказани графици за случај неподпригушеног режима. Са графика приказаног на Слици 8.3. се може видети да је угао стабилнији за молекулске пропелере са већим бројем лопатица, као и то да су квантне поправке стандардног одступања угла веће и по амплитуди и по трајању за молекулске пропелере са мањим бројем лопатица. Упоредивањем графика на Сликама 8.1. и 8.3. може се видети да је у случају неподпригушеног режима класични допринос нешто мањи и спорије расте са порастом времена, док су квантне поправке нешто веће и опадају спорије и са порастом времена и са повећањем бројем лопатица.





Слика 8.3. Зависност стандардног одступања угла од броја лопатица пропелера за неподпригушени режим,  $\tau \in [0,0.01]$ ,  $N \in [1,10]$

Упоредивањем графика приказаних на Сликама 8.2. и 8.4. може се приметити да је у случају неподпригушеног режима пораст класичног доприноса стандардном одступању момента импулса нешто мањи, док амплитудна вредност квантних поправки стандардног одступања момента импулса спорије расте са порастом броја лопатица и спорије опада са протоком времена. Такође може се приметити да су вредности стандардног одступања момента импулса нешто мање него у случају подпригушеног режима.



Слика 8.4. Зависност стандардног одступања момента импулса од броја лопатица пропелера за неподпригушени режим,  $\tau \in [0,0.01]$ ,  $N \in [1,10]$

Упоређивањем датих графика са одговарајућим графицима за слободни ротатор може се приметити да је зависност стандардног одступања угла и момента импулса од броја лопатица слична као у случају слободног ротатора, са порастом броја лопатица стабилност момента импулса опада док стабилност угла расте. У случају хармонијског ротатора пад стандардног одступање угла са порастом броја лопатица молекулских пропелера је израженији услед присуства квантних поправки, које значајно опадају са порастом броја лопатица. Стандардно одступање угла је истог реда величине као и у случају слободног ротатора, док су промене стандардног одступања момента импулса знатно мање у случају хармонијског ротатора него у случају слободног ротатора. Прелаз из квантног у класично понашање је овде спорији него у случају слободног ротатора, тако да се може рећи да квантни домен хармонијског ротатора има дуже трајање и потенцијално већи значај него у случају слободног ротатора.

Упоређивањем израза (8.16) - (8.18) са одговарајућим изразима за слободни ротатор могу се уочити занимљиве разлике. Асимптотски лимит стандардног одступања угла не зависи од времена што указује на постојање стационарног стања, које не постоји у случају слободног ротатора. Угао је стабилнији за дуже временске интервале у случају хармонијског ротатора него у случају слободног ротатора. За опсервабли угла примећује се и значајно мања вредност стандардног одступања у односу на случај слободног ротатора што се може показати трансформацијом израза (8.16):

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta\varphi(t) = \sqrt{\frac{k_B T}{I\omega^2}} = \sqrt{\frac{k_B T}{I\gamma}} t \sqrt{\frac{1}{\omega t} \frac{\gamma}{\omega}}. \quad (8.54)$$

На основу постојања стационарног стања и мање вредности стандардног одступања угла може се закључити да присуство спољашњег хармонијског поља позитивно утиче на стабилност и контролабилност угла ротације молекулских пропелера пре свега за дуже временске интервале. За производ стандардних одступања угла и момента импулса у асимптотском лимиту важи неједнакост:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \Delta\varphi(t) \Delta L_z(t) = \frac{k_B T}{\omega} \gg \frac{\hbar}{2}, \quad (8.55)$$

на основу које се види да је производ неодређености угла и момента импулса далеко већи од минималне вредности одређене релацијама неодређености.

Изрази (8.23), (8.25) и (8.27) су добијени на основу решења система једначина (8.3) - (8.7) уз коришћење апроксимације (8.8), која се може применити у случају слабе интеракције, тако да се поменути изрази могу сматрати апроксимативним. У приступу који се користи у овом раду мастер једначина Калдеире и Легета се посматра феноменолошки, односно без узимања у обзир ограничења која су коришћена при њеном извођењу. За разматрање општег случаја су потребни одговарајући егзактни изрази, односно изрази који нису апроксимативни. Уводећи нову величину  $\Omega$ , за коју важи:

$$\Omega^2 = \gamma^2 - \omega^2, \quad (8.56)$$

егзактна решења за стандардна одступања и корелациону функцију, добијена применом програма Wolfram Mathematica, можемо написати у следећем облику (Jeknić-Dugić et al 2018):

$$\begin{aligned} \Delta\varphi(t)^2 = & \frac{k_B T}{I\omega^2\Omega^2} (\Omega^2 + e^{-2\gamma t}(\omega^2 - \gamma^2 \cosh(2\Omega t) - \gamma\Omega \sinh(2\Omega t))) + \\ & \frac{(\Delta L_z(0))^2}{I^2\Omega^2} e^{-2\gamma t} \sinh^2(\Omega t) + \frac{(\Delta\varphi(0))^2}{\Omega^2} e^{-2\gamma t} (-\omega^2 \cosh^2(\Omega t) + \gamma^2 \cosh(2\Omega t) + \\ & \gamma\Omega \sinh(2\Omega t)) + e^{-2\gamma t} \frac{\sigma_{\varphi L}(0)}{2I\Omega^2} (2\gamma \sinh^2(\Omega t) + \Omega \sinh(2\Omega t)), \end{aligned} \quad (8.57)$$

$$\begin{aligned} \Delta L_z(t)^2 = & \frac{Ik_B T}{\Omega^2} (-\omega^2(1 - e^{-2\gamma t}) + \gamma^2(1 - e^{-2\gamma t} \cosh(2\Omega t)) - \gamma\Omega e^{-2\gamma t} \sinh(2\Omega t)) + \\ & \frac{e^{-2\gamma t} (\Delta L_z(0))^2}{\Omega^2} (-\omega^2 \cosh^2(\Omega t) + \gamma^2 \cosh(2\Omega t) - \gamma\Omega \sinh(2\Omega t)) + \\ & \frac{I^2\omega^4 (\Delta\varphi(0))^2}{\Omega^2} e^{-2\gamma t} \sinh^2(\Omega t) + e^{-2\gamma t} \frac{I\omega^2 \sigma_{\varphi L}(0)}{2\Omega^2} (2\gamma \sinh^2(\Omega t) - \Omega \sinh(2\Omega t)), \end{aligned} \quad (8.58)$$

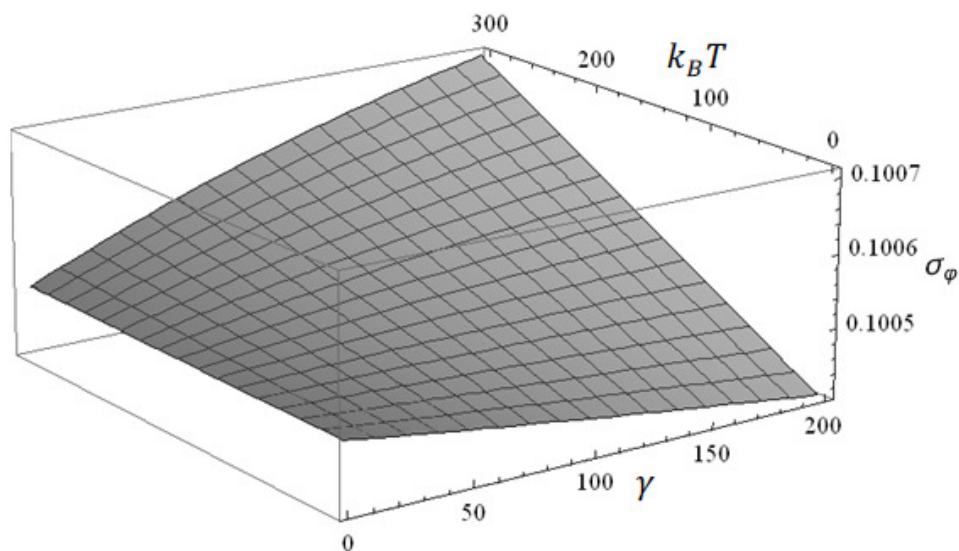
$$\begin{aligned} \sigma_{\varphi L}(t) = & e^{-2\gamma t} \left( \frac{4\gamma k_B T}{\Omega^2} \sinh^2(\Omega t) + \frac{(\Delta L_z(0))^2}{I\Omega^2} (-2\gamma \sinh^2(\Omega t) + \Omega \sinh(2\Omega t)) - \right. \\ & \left. \frac{I\omega^2 (\Delta\varphi(0))^2}{\Omega^2} (2\gamma \sinh^2(\Omega t) + \Omega \sinh(2\Omega t)) - \frac{\sigma_{\varphi L}(0)}{\Omega^2} (\omega^2 \cosh(2\Omega t) - \gamma^2) \right). \end{aligned} \quad (8.59)$$

Из наведених егзактних израза (8.57) - (8.59) могу се добити изрази (8.13) - (8.15) у случају када, у складу са (8.31), важи:

$$\Omega \approx i\omega. \quad (8.60)$$

Егзактни изрази (8.60) - (8.62) (уз  $\omega = 10$ ) су коришћени за добијање графика који показују зависност стандардних одступања од коефицијента пригушења и температуре приказаних на Сликама 8.5. и 8.6.

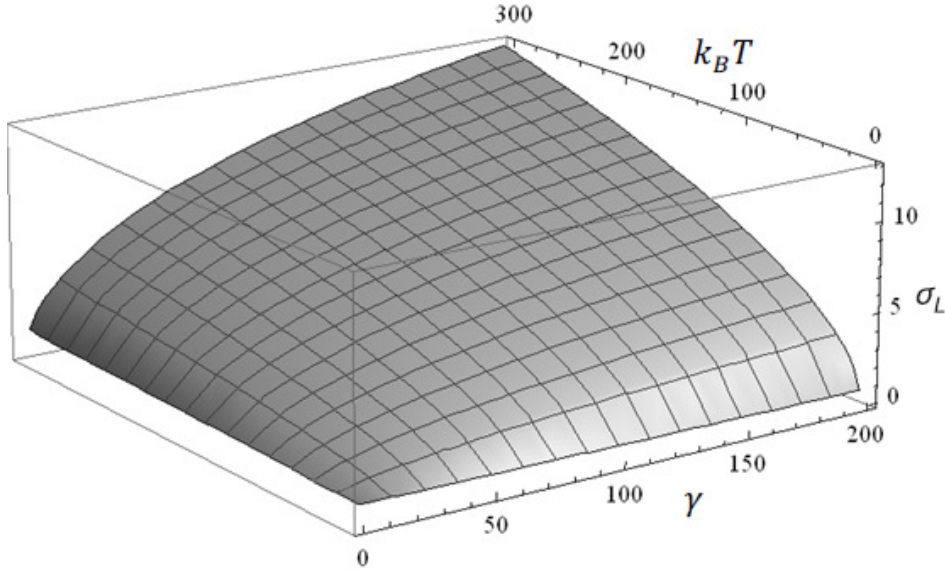
На Слици 8.5. је приказана зависност стандардног одступања угла од коефицијента пригушења и температуре. За мале вредности коефицијента пригушења стандардно одступање угла расте споро са порастом температуре, док са порастом коефицијента пригушења стандардно одступање угла са порастом температуре расте све брже.



Слика 8.5. Зависност стандардног одступања угла од коефицијента пригушења и температуре за  $\gamma \in [1,200]$ ,  $k_B T \in [0.01,300]$

За ниже температуре стандардно одступање угла опада са порастом фактора пригушења док за више температуре стандардно одступање угла расте са порастом фактора пригушења. Најмање стандардно одступање угла, односно највећа стабилност угла се постиже за велике вредности коефицијента пригушења и мале вредности температура. Упоредивањем са одговарајућим графиком примећује се да се зависност стандардног одступања угла од коефицијента пригушења и температуре прилично разликује у односу на случај слободног ротатора.

На Слици 8.6. је приказана зависност одступања момента импулса од коефицијента пригушења и температуре, за коју се може приметити да је слична као и у случају слободног ротатора, при чему је најзначајнија разлика то што су у случају хармонијског ротатора промене стандардног одступања момента импулса мање. Стандардна одступања момента импулса расту и са порастом коефицијента пригушења и са порастом температуре, при чему нешто већи утицај има температура.



Слика 8.6. Зависност стандардног одступања момента импулса од коефицијента пригушења и температуре за  $\gamma \in [1,200]$ ,  $k_B T \in [0.01,300]$

На основу размотреног модела хармонијског ротатора и његовог упоређивања са моделом слободног ротатора може се закључити да присуство спољашњег хармонијског поља доводи до побољшања стабилности молекулских пропелера, из чега следи да се применом неког спољашњег хармонијског поља може побољшати контролабилност молекулских пропелера.

Као што је већ речено у претходном поглављу, потребно је испитати да се ли прелаз динамике ротатора из квантног у класични домен дешава услед ефекта квантне декохеренције. У декохеренцијском лимиту једначине (8.3) - (8.7) имају следећи облик:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi(t) \rangle = \frac{1}{I} \langle L_z(t) \rangle, \quad (8.61)$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z(t) \rangle = -I\omega^2 \langle \varphi(t) \rangle, \quad (8.62)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^2(t) \rangle = \frac{1}{I} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle, \quad (8.63)$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle = -2I\omega^2 \langle \varphi^2(t) \rangle + \frac{2}{I} \langle L_z^2(t) \rangle, \quad (8.64)$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z^2(t) \rangle = -I\omega^2 \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle + 4I\gamma k_B T, \quad (8.65)$$

чијим се решавањем добијају следеће вредности за стандардна одступања угла и момента импулса (што је такође приказано у Додатку 2):

$$(\Delta\varphi(t))^2 = (\Delta\varphi(0))^2 \cos^2 \omega t + \frac{(\Delta L_z(0))^2}{I^2 \omega^2} \sin^2 \omega t + \frac{\sigma_{\varphi L}(0)}{2I\omega} \sin 2\omega t + \frac{2\gamma k_B T}{I\omega^2} t - \frac{\gamma k_B T}{I\omega^3} \sin 2\omega t, \quad (8.66)$$

$$(\Delta L_z)^2 = (\Delta L_z(0))^2 \cos^2 \omega t + I^2 \omega^2 (\Delta\varphi(0))^2 \sin^2 \omega t - \frac{I\omega}{2} \sigma_{\varphi L}(0) \sin 2\omega t + 2I\gamma k_B T t + \frac{I\gamma k_B T}{\omega} \sin 2\omega t. \quad (8.67)$$

Бездимензионе величине могу се добити слично као у општем случају, применом израза (7.23) - (7.26), уз:

$$\gamma = \gamma_0, \quad (8.68)$$

тако да се (8.66) може написати у облику:

$$(\Delta\varphi(t))^2 = (\Delta\varphi(0))^2 \cos^2 \omega t + \frac{(\Delta L(0))^2}{N^2 I_0^2 \omega^2} \sin^2 \omega t + \frac{\sigma_{\varphi L}(0)}{2N I_0 \omega} \sin 2\omega t + \frac{2\gamma_0 k T}{N I_0 \omega^2} t - \frac{\gamma_0 k T}{N I_0 \omega^3} \sin 2\omega t, \quad (8.69)$$

односно као:

$$\sigma_{\varphi}^2(\tau) = \sigma_{\varphi}^2(0) \cos^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0} + \frac{\sigma_L^2(0)}{N^2} \sin^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0} + \frac{\sigma(0)}{2N} \sin 2\omega \frac{\tau}{\gamma_0} + \frac{2kT}{N I_0 \omega^2} \tau - \frac{\gamma_0 k T}{N I_0 \omega^3} \sin 2\omega \frac{\tau}{\gamma_0}. \quad (8.70)$$

Израз (8.67) се може написати у облику:

$$(\Delta L_z(t))^2 = (\Delta L_z(0))^2 \cos^2 \omega t + N^2 I_0^2 \omega^2 (\Delta\varphi(0))^2 \sin^2 \omega t - \frac{N I_0 \omega}{2} \sigma_{\varphi L}(0) \sin 2\omega t + 2N I_0 \gamma_0 k T t + \frac{N I_0 \gamma_0 k T}{\omega} \sin 2\omega t, \quad (8.71)$$

односно, након дељења са  $I_0^2 \omega^2$ :

$$\sigma_L^2(\tau) = \sigma_L^2(0) \cos^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0} + N^2 \sigma_{\varphi}^2(0) \sin^2 \omega \frac{\tau}{\gamma_0} - \frac{N}{2} \sigma_{L\varphi}(0) \sin 2\omega \frac{\tau}{\gamma_0} + \frac{2NkT}{I_0 \omega^2} + \frac{N\gamma_0 k T}{I_0 \omega^3} \sin 2\omega \frac{\tau}{\gamma_0}. \quad (8.72)$$

Изрази (8.66) и (8.67) се не могу добити као апроксимација израза (8.25) и (8.27), ни у случају кратких временских интервала ни у случају дужих временских интервала, па се и за хармонијски ротатор, као што је већ речено за слободни рататор, може закључити да до прелаза са квантног на класично понашање не долази само услед ефекта квантне декохеренције.

## 9. Слабо нехармонијски ротатор

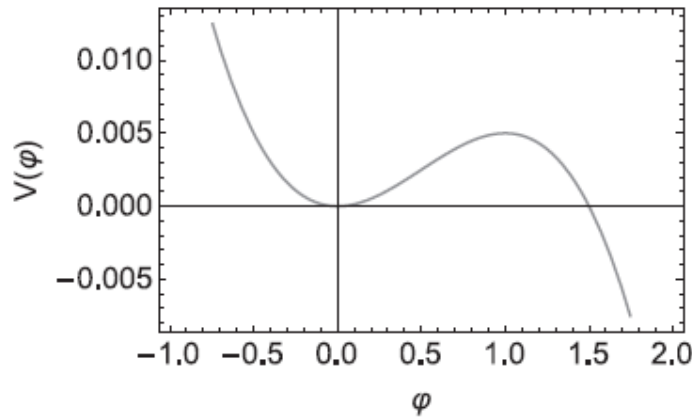
Под слабо нехармонијским ротатором се подразумева молекулски ротатор који се налази у слабо нехармонијском спољашњем пољу (са малим кубним чланом), односно за који је спољашњи потенцијал облика:

$$V(\varphi) = \frac{1}{2}I\omega^2\varphi^2 + b\varphi^3, \quad (9.1)$$

где је  $b$  неки мали реални параметар, при чему је:

$$V'(\varphi) = \frac{dV}{d\varphi} = I\omega^2\varphi + 3b\varphi^2. \quad (9.2)$$

На Слици 9.1. је приказан пример графика потенцијала оваквог облика и то за случај следећих вредности параметара:  $\omega = 0.1$ ,  $I_0 = 3$ ,  $b = -0.01$ .



Слика 9.1. Пример графика слабо нехармонијског потенцијала са малим кубним чланом

Применом (Д1.13) могу се добити одговарајуће једначине за моменте угла и момента импулса слабо нехармонијског ротатора, као што је показано у Додатку 3. За моменте првог и другог реда добијају се следеће једначине:

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi(t)\rangle = \frac{1}{I}\langle L_z(t)\rangle, \quad (9.3)$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z(t)\rangle = -I\omega^2\langle\varphi(t)\rangle - 2\gamma\langle L_z(t)\rangle - 3b\langle\varphi^2(t)\rangle, \quad (9.4)$$

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi^2(t)\rangle = \frac{1}{I}\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t)\rangle, \quad (9.5)$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle = \frac{2}{I}\langle L_z^2(t) \rangle - 2I\omega^2\langle \varphi^2(t) \rangle - 6b\langle \varphi^3(t) \rangle - 2\gamma\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle, \quad (9.6)$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z^2(t) \rangle = -I\omega^2\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle - 3b\langle \varphi^2(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^2(t) \rangle - 4\gamma\langle L_z^2(t) \rangle + 4I\gamma k_B T. \quad (9.7)$$

Систем једначина (9.3) - (9.7) за моменте првог и другог реда није затворен зато што се у њему појављују чланови који садрже моменте трећег реда, члан  $-6b\langle \varphi^3(t) \rangle$  у (9.6) и члан  $-3b\langle \varphi^2(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^2(t) \rangle$  у (9.7).

За моменте трећег реда се применом (Д1.13) добија следећи систем једначина:

$$\frac{d}{dt}\langle \varphi^3(t) \rangle = \frac{3}{2I}\langle L_z(t)\varphi^2(t) + \varphi^2(t)L_z(t) \rangle, \quad (9.8)$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z^3(t) \rangle = -\frac{3}{2}I\omega^2\langle \varphi(t)L_z^2(t) + L_z^2(t)\varphi(t) \rangle - \frac{9}{2}b\langle L_z^2(t)\varphi^2(t) + \varphi^2(t)L_z^2(t) \rangle - 6\gamma\langle L_z^3(t) \rangle + 12I\gamma k_B T\langle L_z(t) \rangle - 3b\hbar^2, \quad (9.9)$$

$$\frac{d}{dt}\langle \varphi(t)L_z^2(t) + L_z^2(t)\varphi(t) \rangle = \frac{2}{I}\langle L_z^3(t) \rangle - 2I\omega^2\langle \varphi^2(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^2(t) \rangle - 6b\langle \varphi^3(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^3(t) \rangle - 4\gamma\langle \varphi(t)L_z^2(t) + L_z^2(t)\varphi(t) \rangle + 8I\gamma k_B T\langle \varphi(t) \rangle, \quad (9.10)$$

$$\frac{d}{dt}\langle \varphi^2(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^2(t) \rangle = \frac{2}{I}\langle \varphi(t)L_z^2(t) + L_z^2(t)\varphi(t) \rangle - 2I\omega^2\langle \varphi^3(t) \rangle - 6b\langle \varphi^4(t) \rangle - 2\gamma\langle \varphi^2(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^2(t) \rangle. \quad (9.11)$$

У наведеним једначинама за моменте трећег реда појављују се чланови који садрже моменте четвртог реда,  $-\frac{9}{2}b\langle L_z^2(t)\varphi^2(t) + \varphi^2(t)L_z^2(t) \rangle$  у (9.9),  $-6b\langle \varphi^3(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^3(t) \rangle$  у (9.10) и  $-6b\langle \varphi^4(t) \rangle$  у (9.11), тако да ни систем једначина који обухвата моменте до трећег реда није затворен.

За моменте четвртог реда добијају се следеће једначине:

$$\frac{d}{dt}\langle \varphi^3(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^3(t) \rangle = \frac{3}{I}\langle L_z^2(t)\varphi^2(t) + \varphi^2(t)L_z^2(t) \rangle + \frac{3}{I}\hbar^2 - 2I\omega^2\langle \varphi^4(t) \rangle - 3b\langle \varphi^5(t) \rangle - 2\gamma\langle \varphi^3(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^3(t) \rangle, \quad (9.12)$$

$$\frac{d}{dt}\langle \varphi^4(t) \rangle = \frac{2}{I}\langle \varphi^3(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^3(t) \rangle, \quad (9.13)$$



$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle L_z^3(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z^3(t) \rangle &= \frac{2}{I} \langle L_z^4(t) \rangle - 3I\omega^2 \langle L_z^2(t)\varphi^2(t) + \varphi^2(t)L_z^2(t) \rangle - \\ &3I\omega^2 \hbar^2 - 9b \langle L_z^2(t)\varphi^3(t) + \varphi^3(t)L_z^2(t) \rangle - 24b\hbar^2 \langle \varphi(t) \rangle - 6\gamma \langle L_z^3(t)\varphi(t) + \\ &\varphi(t)L_z^3(t) \rangle + 12I\gamma k_B T \langle \varphi(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi(t) \rangle, \end{aligned} \quad (9.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle L_z^2(t)\varphi^2(t) + \varphi^2(t)L_z^2(t) \rangle &= \frac{2}{I} \langle L_z^3(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z^3(t) \rangle - 2I\omega^2 \langle \varphi^3(t)L_z(t) + \\ &L_z(t)\varphi^3(t) \rangle - 6b \langle L_z(t)\varphi^4(t) + \varphi^4(t)L_z(t) \rangle - 4\gamma \langle \hbar^2 + L_z^2(t)\varphi^2(t) + \\ &\varphi^2(t)L_z^2(t) \rangle + 8I\gamma k_B T \langle \varphi^2(t) \rangle, \end{aligned} \quad (9.15)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle L_z^4(t) \rangle &= -2I\omega^2 \langle L_z^3(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z^3(t) \rangle - 6b \langle L_z^3(t)\varphi^2(t) + \varphi^2(t)L_z^3(t) \rangle - \\ &12b\hbar^2 \langle L_z(t) \rangle - 8\gamma \langle L_z^4(t) \rangle + 24I\gamma k_B T \langle L_z^2(t) \rangle. \end{aligned} \quad (9.16)$$

У наведеним једначинама за моменте четвртог реда појављују се чланови који садрже моменте петог реда,  $-3b\langle\varphi^5(t)\rangle$  у (9.12),  $-9b\langle L_z^2(t)\varphi^3(t) + \varphi^3(t)L_z^2(t)\rangle$  у (9.14),  $-6b\langle L_z(t)\varphi^4(t) + \varphi^4(t)L_z(t)\rangle$  у (9.15) и  $-6b\langle L_z^3(t)\varphi^2(t) + \varphi^2(t)L_z^3(t)\rangle$  у (9.16), тако да ни систем једначина који садржи моменте до четвртог реда није затворен.

Наведени систем диференцијалних једначина (9.3) - (9.16), који обухвата моменте угла и момента импулса до четвртог реда, може се приказати у матричној форми:

$$\frac{d}{dt} X = \mathcal{M}X + K, \quad (9.17)$$

где је  $\mathcal{M}$  матрица система,  $X$  вектор који се састоји од момената вишег реда, док је  $K$  вектор који садржи нехомогене чланове диференцијалних једначина. Транспоновани вектор  $X^T$  је:

$$\begin{aligned} X^T = \{ \langle \varphi \rangle, \langle L_z \rangle, \langle \varphi^2 \rangle, \langle \varphi L_z + L_z \varphi \rangle, \langle L_z^2 \rangle, \langle \varphi^3 \rangle, \langle \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2 \rangle, \langle \varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi \rangle, \langle L_z^3 \rangle, \langle \varphi^4 \rangle, \langle \varphi^3 L_z + \\ L_z \varphi^3 \rangle, \langle \varphi^2 L_z^2 + L_z^2 \varphi^2 \rangle, \langle \varphi L_z^3 + L_z^3 \varphi \rangle, \langle L_z^4 \rangle \}, \end{aligned} \quad (9.18)$$

док је транспоновани вектор  $K^T$ :

$$\begin{aligned} K^T = \{ 0, 0, 0, 0, 4C_1, 0, 0, 0, -3b\hbar^2, 0, 3\alpha_1\hbar^2 - 3b\langle\varphi^5\rangle, -4\alpha_3\hbar^2 - 6b\langle\varphi^4 L_z + \\ L_z \varphi^4\rangle, -3\alpha_2\hbar^2 - 9b\langle\varphi^3 L_z^2 + L_z^2 \varphi^3\rangle, -6b\langle\varphi^2 L_z^3 + L_z^3 \varphi^2\rangle \}, \end{aligned} \quad (9.19)$$

а матрица  $\mathcal{M}$ :

$$\begin{pmatrix} 0 & \alpha_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\alpha_2 & -2\alpha_3 & -3b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2\alpha_2 & -2\alpha_3 & 2\alpha_1 & -6b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\alpha_2 & -4\alpha_3 & 0 & -3b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 3\alpha_1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2\alpha_2 & -2\alpha_3 & 2\alpha_1 & 0 & -6b & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 8C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2\alpha_2 & -4\alpha_3 & 2\alpha_1 & 0 & -6b & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3\alpha_2/2 & -6\alpha_3 & 0 & 0 & -9b/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\alpha_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2\alpha_2 & -2\alpha_3 & 3\alpha_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2\alpha_2 & -4\alpha_3 & 2\alpha_1 & 0 \\ -24b\hbar^2 & 0 & 0 & 12C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -3\alpha_2 & -6\alpha_3 & 2\alpha_1 \\ 0 & -12b\hbar^2 & 0 & 0 & 24C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2\alpha_2 & -8\alpha_3 \end{pmatrix} \quad (9.20)$$

при чему су у (9.19) и (9.20) коришћене следеће ознаке:  $\alpha_1 = \frac{1}{I}$ ,  $\alpha_2 = I\omega^2$ ,  $\alpha_3 = \gamma$ ,  $C_1 = I\gamma k_B T$ .

Као и за претходно разматране моделе и у случају слабо нехармонијског ротатора најважнији задатак је испитати његову динамичку стабилност и утицај величине, односно броја лопатица молекулских пропелера, на ту стабилност. Основни метод којим се у овом раду испитује динамичка стабилност слабо нехармонијског ротатора је исти као и за случај слободног, односно хармонијског ротатора, разматрање стандардних одступања угла и момента импулса ротатора као и анализа њихове временске еволуције, уз разматрање зависности стандардних одступања од броја лопатица. Као и у случају до сада разматраних модела сматра се да је што су стандардна одступања угла и момента импулса мања молекулски ротатор стабилнији и обрнуто. За израчунавање стандардних одступања угла и момента импулса потребно је решити систем једначина за прве и друге моменте (9.3) - (9.7). Поменути систем није затворен, као ни систем који обухвата моменте до четвртог реда, па се у овом раду за добијање решења користи пертурбативни приступ (Petrović et al 2020, Mao X. 2011, Frewer 2015), али без коришћења стандардних квантномеханичких пертурбационих метода, у оквиру којег се претпоставља се да је  $b$  мала реална константа. За сваки од момената  $A_i(b, t)$ , тражи се апроксимативно решење за малу позитивну вредност параметра  $b$  у облику:

$$A_i(b, t) = A_i(b = 0, t) + f_i(b, t) = A_i(b = 0, t) + bf_i^{(1)}(t) + b^2f_i^{(2)}(t) + \dots, \quad (9.21)$$

где су  $f_i$  поправке које одговарају моментима чији су изводи дати једначинама (9.3) - (9.7). Да би се добио затворен систем диференцијалних једначина одбацују се чланови

који садрже  $b^2$ , док се задржавају чланови који су линеарни по константи  $b$ , тако да моменте првог и другог реда можемо записати на следећи начин:

$$\langle \varphi(t) \rangle = \langle \varphi(t) \rangle_{b=0} + b f_1^{(1)}(t), \quad (9.22)$$

$$\langle L_z(t) \rangle = \langle L_z(t) \rangle_{b=0} + b f_2^{(1)}(t), \quad (9.23)$$

$$\langle \varphi^2(t) \rangle = \langle \varphi^2(t) \rangle_{b=0} + b f_3^{(1)}(t), \quad (9.24)$$

$$\langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle = \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle_{b=0} + b f_4^{(1)}(t), \quad (9.25)$$

$$\langle L_z^2(t) \rangle = \langle L_z^2(t) \rangle_{b=0} + b f_5^{(1)}(t). \quad (9.26)$$

Сменом (9.22) и (9.23) у (9.3) следи:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi(t) \rangle_{b=0} + b \frac{d}{dt} f_1^{(1)}(t) = \frac{1}{I} \langle L_z(t) \rangle_{b=0} + \frac{1}{I} b f_2^{(1)}(t), \quad (9.27)$$

односно:

$$\frac{d}{dt} f_1^{(1)}(t) = \frac{1}{I} f_2^{(1)}(t), \quad (9.28)$$

док се сменом (9.22) - (9.24) у (9.4) добија:

$$\frac{d}{dt} \langle L_z(t) \rangle_{b=0} + b \frac{d}{dt} f_2^{(1)}(t) = -I \omega^2 (\langle \varphi(t) \rangle_{b=0} + b f_1^{(1)}(t)) - 2\gamma (\langle L_z(t) \rangle_{b=0} + b f_2^{(1)}(t)) - 3b (\langle \varphi^2(t) \rangle_{b=0} + b f_3^{(1)}(t)), \quad (9.29)$$

односно:

$$b \frac{d}{dt} f_2^{(1)}(t) = -I \omega^2 b f_1^{(1)}(t) - 2\gamma b f_2^{(1)}(t) - 3b \langle \varphi^2(t) \rangle_{b=0}. \quad (9.30)$$

Сменом (9.24) - (9.25) у (9.5) се добија:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^2(t) \rangle_{b=0} + b \frac{d}{dt} f_3^{(1)}(t) = \frac{1}{I} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle_{b=0} + \frac{1}{I} b f_4^{(1)}(t), \quad (9.31)$$

из чега даље следи:

$$b \frac{d}{dt} f_3^{(1)}(t) = \frac{1}{I} b f_4^{(1)}(t), \quad (9.32)$$

док се сменом (9.24) - (9.26) у (9.6) добија:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle_{b=0} + b \frac{d}{dt} f_4^{(1)}(t) &= 2I\omega^2 (\langle \varphi^2(t) \rangle_{b=0} + b f_3^{(1)}(t)) - \\ 2\gamma (\langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle_{b=0} + b f_4^{(1)}(t)) + \frac{2}{I} (\langle L_z^2(t) \rangle_{b=0} + b f_5^{(1)}(t)) - 6b \langle \varphi^3(t) \rangle_{b=0}, \end{aligned} \quad (9.33)$$

односно:

$$b \frac{d}{dt} f_4^{(1)}(t) = -2I\omega^2 b f_3^{(1)}(t) - 2\gamma b f_4^{(1)}(t) + \frac{2}{I} b f_5^{(1)}(t) - 6b \langle \varphi^3(t) \rangle_{b=0}. \quad (9.34)$$

На еквивалентан начин, сменом (9.25) и (9.26) у (9.7) добија се следећа једначина:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle L_z^2(t) \rangle_{b=0} + b \frac{d f_5^{(1)}(t)}{dt} &= -I\omega^2 (\langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle_{b=0} + b f_4^{(1)}(t)) - \\ 4\gamma (\langle L_z^2(t) \rangle_{b=0} + b f_5^{(1)}(t)) - 3b \langle \varphi^2(t) L_z(t) + L_z(t) \varphi^2(t) \rangle_{b=0} + 4I\gamma k_B T, \end{aligned} \quad (9.35)$$

из које следи:

$$b \frac{d f_5^{(1)}(t)}{dt} = -I\omega^2 b f_4^{(1)}(t) - 4\gamma b f_5^{(1)}(t) - 3b \langle \varphi^2(t) L_z(t) + L_z(t) \varphi^2(t) \rangle_{b=0}. \quad (9.36)$$

На основу наведених израза добија се следећи систем једначина за поправке  $f_i$ :

$$\frac{d}{dt} f_1^{(1)}(t) = \frac{1}{I} f_2^{(1)}(t), \quad (9.37)$$

$$\frac{d}{dt} f_2^{(1)}(t) = -I\omega^2 f_1^{(1)}(t) - 2\gamma f_2^{(1)}(t) - 3 \langle \varphi^2(t) \rangle_{b=0}, \quad (9.38)$$

$$\frac{d}{dt} f_3^{(1)}(t) = \frac{1}{I} f_4^{(1)}(t), \quad (9.39)$$

$$\frac{d}{dt} f_4^{(1)}(t) = -2I\omega^2 f_3^{(1)}(t) - 2\gamma f_4^{(1)}(t) + \frac{2}{I} f_5^{(1)}(t) - 6 \langle \varphi^3(t) \rangle_{b=0}, \quad (9.40)$$

$$\frac{d}{dt} f_5^{(1)}(t) = -I\omega^2 f_4^{(1)}(t) - 4\gamma f_5^{(1)}(t) - 3 \langle \varphi^2(t) L_z(t) + L_z(t) \varphi^2(t) \rangle_{b=0}. \quad (9.41)$$

Када се добију решења за поправке  $f_i$  апроксимативна решења за прве и друге моменте се могу написати у облику:

$$\langle \varphi(t) \rangle = \langle \varphi(t) \rangle_{b=0} + f_1(t), \quad (9.42)$$

$$\langle L_z(t) \rangle = \langle L_z(t) \rangle_{b=0} + f_2(t), \quad (9.43)$$

$$\langle \varphi^2(t) \rangle = \langle \varphi^2(t) \rangle_{b=0} + f_3(t), \quad (9.44)$$

$$\langle L_z^2(t) \rangle = \langle L_z^2(t) \rangle_{b=0} + f_5(t), \quad (9.45)$$

при чему је:

$$f_i(t) = b f_i^{(1)}(t). \quad (9.46)$$

Непертурбоване вредности момената угла и момента импулса, односно вредности за случај када је  $b = 0$ ,  $A_i(b = 0, t)$ , су заправо вредности добијене за случај хармонијског потенцијала, тако да се решавање система диференцијалних једначина (9.3) - (9.7) своди на решавање система диференцијалних једначина (9.37) - (9.41) за поправке  $f_i$  (Petrović et al 2020). Након добијања решења за прве поправке могу се наћи квадрати стандардних одступања угла и момента импулса:

$$\Delta\varphi(t)^2 = \langle \varphi^2(t) \rangle_{b=0} + f_3(t) - (\langle \varphi(t) \rangle_{b=0} + f_1(t))^2, \quad (9.47)$$

$$\Delta L_z(t)^2 = \langle L_z^2(t) \rangle_{b=0} + f_5(t) - (\langle L_z(t) \rangle_{b=0} + f_2(t))^2. \quad (9.48)$$

За решавање система (9.37) - (9.41) потребно је претходно добити вредности следећих момената трећег реда за  $b = 0$ :  $\langle \varphi^3(t) \rangle_{b=0}$  и  $\langle \varphi^2(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^2(t) \rangle_{b=0}$ . За моменте трећег реда се за  $b = 0$ , из (9.8) - (9.11), добијају следеће једначине:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^3(t) \rangle_{b=0} = \frac{3}{2I} \langle L_z(t)\varphi^2(t) + \varphi^2(t)L_z(t) \rangle_{b=0}, \quad (9.49)$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z^3(t) \rangle_{b=0} = -\frac{3}{2} I \omega^2 \langle \varphi(t)L_z^2(t) + L_z^2(t)\varphi(t) \rangle_{b=0} - 6\gamma \langle L_z^3(t) \rangle_{b=0} + 12I\gamma k_B T \langle L_z(t) \rangle_{b=0}, \quad (9.50)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^2(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^2(t) \rangle_{b=0} = \frac{2}{I} \langle \varphi(t)L_z^2(t) + L_z^2(t)\varphi(t) \rangle_{b=0} - 2I\omega^2 \langle \varphi^3(t) \rangle_{b=0} - 2\gamma \langle \varphi^2(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^2(t) \rangle_{b=0}, \quad (9.51)$$

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi(t)L_z^2(t) + L_z^2(t)\varphi(t) \rangle_{b=0} = \frac{2}{I} \langle L_z^3(t) \rangle_{b=0} - 2I\omega^2 \langle \varphi^2(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^2(t) \rangle_{b=0} - 4\gamma \langle \varphi(t)L_z^2(t) + L_z^2(t)\varphi(t) \rangle_{b=0} + 8I\gamma k_B T \langle \varphi(t) \rangle_{b=0}. \quad (9.52)$$

Иако је систем једначина (9.49) - (9.52), уз примену познатих решења за  $\langle \varphi(t) \rangle_{b=0}$  и  $\langle L_z(t) \rangle_{b=0}$  затворен, аналитички изрази који се добијају за моменте трећег реда су веома сложени, тако да се добијају и веома сложени изрази и за стандардна одступања,

који поред тога нису ни довољно информативни. Из наведених разлога за решавање поменутог система се, као и за решавање система (9.37) - (9.41), користи нумерички метод, при чему се добијени резултати за квадрате стандардних одступања презентују графички. За потребне нумеричког решавања система једначина користи се стандардна Рунге Кута метода четвртог реда, уз вођење рачуна о стабилности и поузданости добијених резултата. Нумеричка стабилност резултата се постиже одговарајућим избором вредности параметара за које је вредност детерминанте система једначина различита од нуле, док се поузданост добијених резултата проверава применом и адаптивне Рунге Кута методе. Рунге Кута метода је реализована израдом и применом одговарајућег компјутерског програма (у програмском језику C++), којим се истовремено налазе решења система (9.37) - (9.41) и система (9.49) - (9.52), при чему се решења система (9.49) - (9.52) користе у решавању система (9.37) - (9.41), то јест за једначину (9.40) је потребно решење за  $\langle \varphi^3(t) \rangle_{b=0}$ , док је за једначину (9.41) потребно решење за  $\langle \varphi^2(t)L_z(t) + L_z(t)\varphi^2(t) \rangle_{b=0}$ .

У поступку нумеричког решавања поменутих система једначина су за моменте првог и другог реда, за случај  $b = 0$ , коришћени егзактни изрази, добијени применом програма Wolfram Mathematica, који се свде на одговарајуће изразе за хармонијски ротатор. За примену нумеричких метода било је неопходно користити различите облике поменутих израза у случају малог и великог коефицијента пригушења.

У случају када је  $\gamma_0 > \omega$ , коришћени су следећи облици егзактних израза за моменте првог и другог реда:

$$\langle \varphi(t) \rangle = \exp(-\gamma t) \left( \langle L_z(0) \rangle \frac{1}{i\Omega} \sinh(\Omega t) + \langle \varphi(0) \rangle (\cosh(\Omega t) + \frac{\gamma}{\Omega} \sinh(\Omega t)) \right), \quad (9.53)$$

$$\langle L_z(t) \rangle = -\langle \varphi(0) \rangle \frac{i\omega^2 e^{-t\gamma}}{\Omega} \sinh \Omega t - \langle L_z(0) \rangle \frac{\gamma e^{-t\gamma}}{\Omega} \sinh \Omega t + e^{-t\gamma} \langle L_z(0) \rangle \cosh \Omega t, \quad (9.54)$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi^2(t) \rangle = & \frac{k_B T}{i\omega^2 \Omega^2} (\Omega^2 + e^{-2t\gamma} (\omega^2 - \gamma^2 \cosh(2t\Omega)) - (\gamma\Omega) \sinh(2t\Omega)) + \\ & \langle L_z^2(0) \rangle \frac{1}{i^2 \Omega^2} e^{-2t\gamma} \sinh^2(t\Omega) + \langle \varphi^2(0) \rangle \frac{1}{\Omega^2} e^{-2t\gamma} (-\omega^2 \cosh^2(t\Omega) + \gamma^2 \cosh(2t\Omega) + \\ & \gamma\Omega \sinh(2t\Omega)) + \frac{e^{-2t\gamma}}{2i\Omega^2} \langle \varphi(0) L_z(0) + L_z(0) \varphi(0) \rangle (2\gamma \sinh^2(t\Omega) + \Omega \sinh(2t\Omega)), \quad (9.55) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle L_z^2(t) \rangle &= \frac{Ik_B T}{\Omega^2} \left( -\omega^2 (1 - e^{-2t\gamma}) + \gamma^2 (1 - e^{-2t\gamma} \cosh(2t\Omega)) - \gamma\Omega e^{-2t\gamma} \sinh(2t\Omega) \right) + \\
 \langle L_z^2(0) \rangle &\frac{1}{\Omega^2} e^{-2t\gamma} \left( -\omega^2 \cosh^2(\Omega t) + \gamma^2 \cosh(2t\Omega) - \gamma\Omega \sinh(2t\Omega) \right) + \\
 \langle \varphi^2(0) \rangle &\frac{I^2 \omega^4}{\Omega^2} e^{-2t\gamma} \sinh^2(\Omega t) + \frac{e^{-2t\gamma} I \omega^2}{2\Omega^2} \langle \varphi(0) L_z(0) + L_z(0) \varphi(0) \rangle (2\gamma \sinh^2(t\Omega) - \\
 &\Omega \sinh(2t\Omega)), \tag{9.56}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi(t) L_z(t) + L_z(t) \varphi(t) \rangle &= e^{-2t\gamma} \left( \frac{4\gamma k_B T}{\Omega^2} \sinh^2(\Omega t) + \frac{1}{I\Omega^2} \langle L_z^2(0) \rangle (-2\gamma \sinh^2(\Omega t) + \right. \\
 &\Omega \sinh(2\Omega t)) - \frac{I\omega^2}{\Omega^2} \langle \varphi^2(0) \rangle (2\gamma \sinh^2(\Omega t) + \Omega \sinh(2\Omega t)) - \frac{1}{\Omega^2} \langle \varphi(0) L_z(0) + \\
 &\left. L_z(0) \varphi(0) \rangle (\omega^2 \cosh^2(\Omega t) - \gamma^2) \right), \tag{9.57}
 \end{aligned}$$

при чему је  $\Omega = \sqrt{-\omega^2 + \gamma^2}$ , док су, у случају  $10\gamma_0 < \omega$ , коришћени следећи облици наведених израза:

$$\langle \varphi(t) \rangle = \exp(-\gamma t) \left( \frac{\langle L_z(0) \rangle}{NI_0\Omega} \sin(\Omega t) + \langle \varphi(0) \rangle (\cos(\Omega t) + \frac{\gamma}{\Omega} \sin(\Omega t)) \right), \tag{9.58}$$

$$\langle L_z(t) \rangle = -\langle \varphi(0) \rangle \frac{I\omega^2 e^{-t\gamma}}{\Omega} \sin \Omega t - \langle L_z(0) \rangle \frac{\gamma e^{-t\gamma}}{\Omega} \sin \Omega t + e^{-t\gamma} \langle L_z(0) \rangle \cos \Omega t, \tag{9.59}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi^2(t) \rangle &= \\
 &\frac{k_B T}{I\omega^2 \Omega^2} \left( \Omega^2 - e^{-2t\gamma} (\omega^2 - \gamma^2 \cos(2t\Omega)) + \gamma\Omega \sin(2t\Omega) \right) + \frac{\langle L_z^2(0) \rangle}{I^2 \Omega^2} e^{-2t\gamma} \sin^2(t\Omega) - \\
 &\frac{\langle \varphi^2(0) \rangle}{\Omega^2} e^{-2t\gamma} \left( -\omega^2 \cos^2(t\Omega) + \gamma^2 \cos(2t\Omega) - \gamma\Omega \sin(2t\Omega) \right) + \\
 &\frac{e^{-2t\gamma} \langle \varphi(0) L_z(0) + L_z(0) \varphi(0) \rangle}{2I\Omega^2} (2\gamma \sin^2(t\Omega) + \Omega \sin(2t\Omega)), \tag{9.60}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle L_z^2(t) \rangle &= \frac{Ik_B T}{\Omega^2} \left( \omega^2 (1 - e^{-2t\gamma}) - \gamma^2 (1 - e^{-2t\gamma} \cos(2t\Omega)) - \gamma\Omega e^{-2t\gamma} \sin(2t\Omega) \right) + \\
 &\frac{\langle L_z^2(0) \rangle}{\Omega^2} e^{-2t\gamma} \left( \omega^2 \cos^2(\Omega t) - \gamma^2 \cos(2t\Omega) - \gamma\Omega \sin(2t\Omega) \right) + \frac{\langle \varphi^2(0) \rangle I^2 \omega^4}{\Omega^2} e^{-2t\gamma} \sin^2(\Omega t) + \\
 &\frac{e^{-2t\gamma} I \omega^2 \langle \varphi(0) L_z(0) + L_z(0) \varphi(0) \rangle}{2\Omega^2} (2\gamma \sin^2(t\Omega) - \Omega \sin(2t\Omega)), \tag{9.61}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi(t) L_z(t) + L_z(t) \varphi(t) \rangle &= e^{-2t\gamma} \left( \frac{4\gamma k_B T}{\Omega^2} \sin^2(\Omega t) + \frac{\langle L_z^2(0) \rangle}{I\Omega^2} (-2\gamma \sin^2(\Omega t) + \right. \\
 &\Omega \sin(2\Omega t)) - \frac{\langle \varphi^2(0) \rangle I \omega^2}{\Omega^2} (2\gamma \sin^2(\Omega t) + \Omega \sin(2\Omega t)) + \\
 &\left. \frac{\langle \varphi(0) L_z(0) + L_z(0) \varphi(0) \rangle}{\Omega^2} (\omega^2 \cos^2(\Omega t) - \gamma^2) \right), \tag{9.62}
 \end{aligned}$$

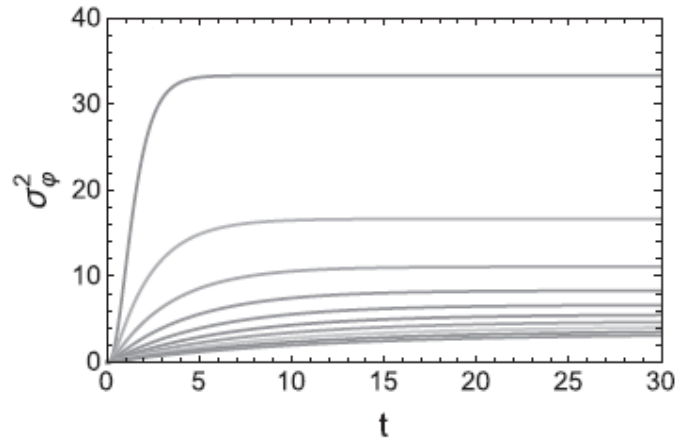
при чему је, у овом случају,  $\Omega = \sqrt{\omega^2 - \gamma^2}$ .

Анализе су вршене за различите комбинације вредности  $\omega$  и  $b$ , при чему су добијени квалитативно исти резултати за све комбинације. У циљу поједностављења презентују се само резултати добијени за комбинацију вредности  $\omega = 1$  и  $b = -0.001$ ,

уз  $I_0 = 3$  и  $k_B T \in \{0.01, 0.1, 1, 100\}$ . Коришћене су следеће почетне вредности  $\langle \varphi^2(0) \rangle = 0.01$ ,  $\langle L_z^2(0) \rangle = 5$ ,  $\langle \varphi(0)L_z(0) + L_z(0)\varphi(0) \rangle = 0$ ,  $\langle \varphi(0) \rangle = 1.1$ ,  $\langle L_z(0) \rangle = 1.2$ , док је за све моменте трећег реда коришћена иста почетна вредност 0.1 (Petrović et al 2020).

У случају када је  $\gamma_0 > \omega$ , разматрани су следећи случајеви вредности коефицијента пригушења:  $\gamma_0 \in \{1.1, 2\}$ . Веће вредности коефицијента пригушења се не разматрају зато што јака интеракција маскира ефекте који се истражују. Резултати су графички приказани само за  $\gamma_0 = 1.1$  и то за три различите вредности температуре, односно за  $k_B T \in \{100, 0.01, 0.1\}$ .

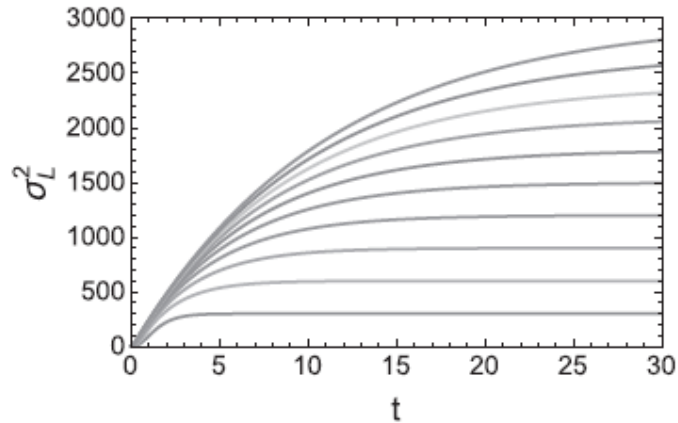
На Сликама 9.2. и 9.3. је приказана зависност квадрата стандардног одступања угла односно момента импулса од времена у случају  $\gamma_0 = 1.1$ ,  $k_B T = 100$ , за  $N \in \{1, 2, 3, \dots, 10\}$ . У овом случају важи једнакост  $10\gamma_0 < k_B T$ , тако да се ради о такозваном подпригушеном режиму (6.22).



Слика 9.2. Зависност  $\sigma_\varphi^2(t)$  за  $N \in \{1, 2, 3, \dots, 10\}$ ,  $\gamma_0 = 1.1$ ,  $k_B T = 100$

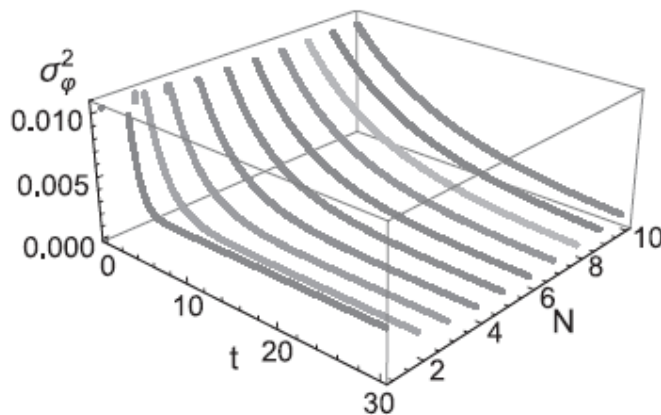
Линија графика на слици 9.2. која је најближа временској оси представља случај  $N = 10$ , линија непосредно изнад ње случај  $N = 9$ , док линија која показује највеће вредности  $\sigma_\varphi^2$  представља случај  $N = 1$ . Молекулски пропелери са мањим бројем лопатица су видно нестабилнији по питању угла, при чему је нестабилност угла посебно велика за случај  $N = 1$ . Са графика се може видети да стандардно одступање угла расте са протоком времена за све вредности  $N$ , при чему је пораст у почетку веома брз, а затим постаје знатно спорији, тако да вредности стандардних одступања угла остају приближно константне са даљим порастом времена.





Слика 9.3. Зависност  $\sigma_L^2(t)$  за  $N \in \{1,2,3, \dots, 10\}$ ,  $\gamma_0 = 1.1$ ,  $k_B T = 100$

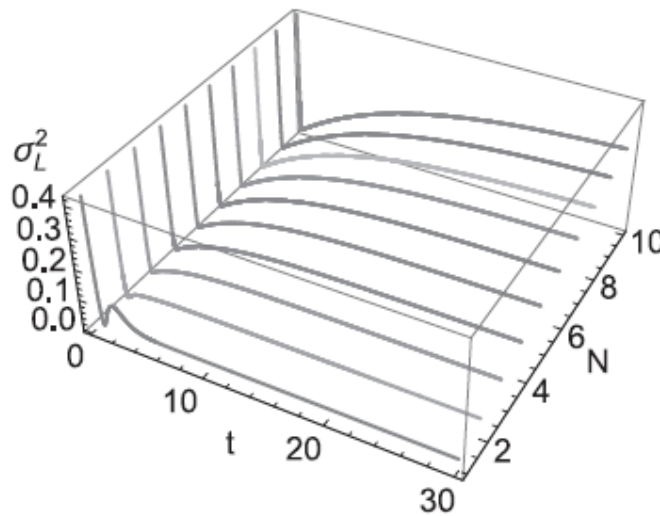
Линија графика на слици 9.3. која је најближа временској оси одговара вредности  $N = 1$ , линија одмах изнад ње вредности  $N = 2$ , док линија која показује највеће вредности  $\sigma_L^2$  представља случај  $N = 10$ . Стандардна одступања момента импулса су већа за веће вредности  $N$ , дакле молекулски пропелери са мањим бројем лопатица имају стабилнији момент импулса. Стандардно одступање момента импулса расте са порастом времена за све вредности  $N$ , при чему је пораст значајнији за веће вредности  $N$ . За мање вредности  $N$  након почетног пораста стандардног одступања момента импулса наступа период у коме је даље повећање занемарљиво.



Слика 9.4. Зависност  $\sigma_\phi^2(t)$  за  $N \in \{1,2,3, \dots, 10\}$ ,  $\gamma_0 = 1.1$ ,  $k_B T = 0.01$

На сликама 9.4. и 9.5. је приказана зависност квадрата стандардног одступања угла и момента импулса од времена за случај  $\gamma_0 = 1.1$ ,  $k_B T = 0.01$ , за  $N \in$

$\{1,2,3,\dots,10\}$ . У овом случају важи неједнакост  $\gamma_0 > k_B T$ , тако да се ради о надпригушеном режиму (6.23). Са графика се уочава да квадрат стандардног одступања угла опада са порастом времена, при чему је у почетку пад веома интензиван и брз, док са протоком времена постаје све спорији. Опадање стандардног одступања угла са порастом времена је свакако неочекиван и занимљив резултат, зато што је уобичајено да стандардна одступања расту са порастом времена. Зависност стандардног одступања угла од броја лопатица није монотона, постоји минимум  $(\sigma_\varphi)_{min}$  за одређене вредности броја лопатица ( $N = 3, N = 4, N = 5$ ).

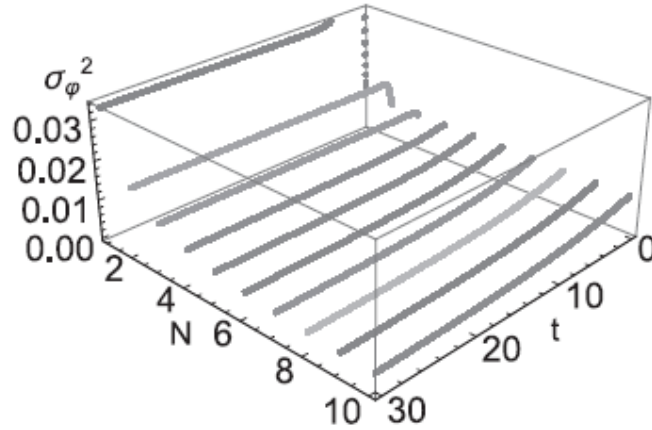


Слика 9.5. Зависност  $\sigma_L^2(t)$  за  $N \in \{1,2,3,\dots,10\}$ ,  $\gamma_0 = 1.1$ ,  $k_B T = 0.01$

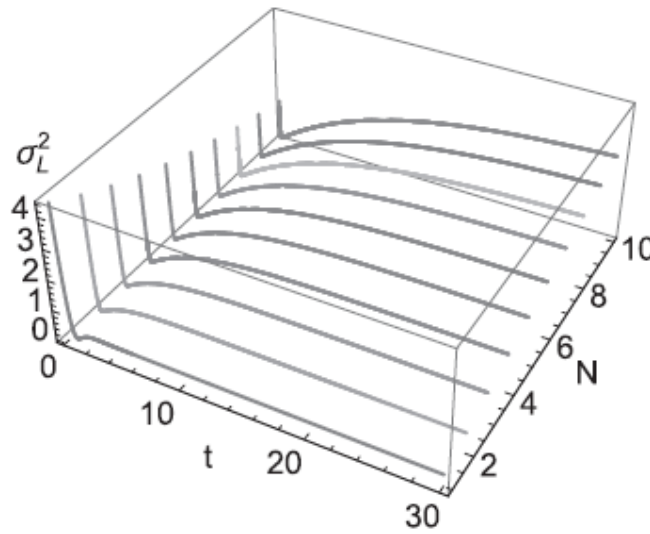
Са графика на Слици 9.5. се може видети да  $\sigma_L^2$  са протоком времена опада веома брзо у почетку, при чему постоје локални минимуми и максимуми у оквиру кратких почетних временских интервала. У случају већих вредности  $N$ , приметан је даљи пораст стандардног одступања момента импулса са протоком времена, док је тај пораст у случају мањих вредности  $N$  занемарљив. Стандардно одступање момента импулса приметно расте и са повећањем броја лопатица.

Зависност стандардних одступања угла и момента импулса од времена и броја лопатица за случај  $\gamma_0 = 1.1$  и  $k_B T = 0.1$ , који се може сматрати случајем средњих температура, је приказана на сликама 9.6. и 9.7. У овом случају важи неједнакост  $\gamma_0 > k_B T$ , тако да се ради о надпригушеном режиму. Временска еволуција стандардних одступања у овом случају има неке од карактеристика оба претходно разматрана

случаја, тако да се овај случај може сматрати прелазом између случаја веома високих и случаја веома ниских температура. Стандардно одступање угла је за већину вредности  $N$  у почетку у благом паду након чега за мање вредности  $N$  наступа zasiћење.



Слика 9.6. Зависност  $\sigma_\varphi^2(t)$  за  $N \in \{1,2,3, \dots, 10\}$ ,  $\gamma_0 = 1.1$ ,  $k_B T = 0.1$

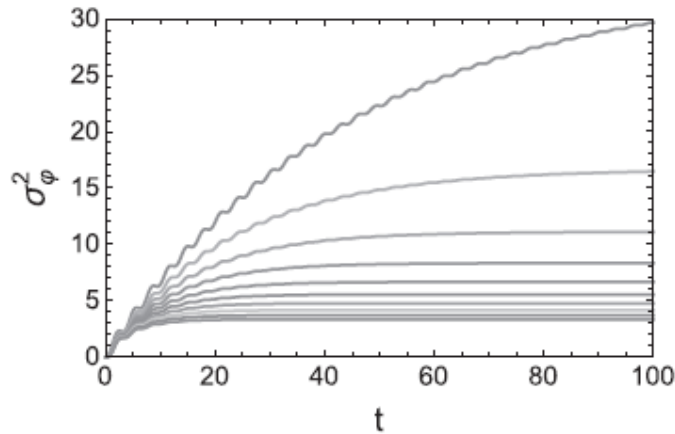


Слика 9.7. Зависност  $\sigma_L^2(t)$  за  $N \in \{1,2,3, \dots, 10\}$ ,  $\gamma_0 = 1.1$ ,  $k_B T = 0.1$

Временска зависност  $\sigma_L^2$ , која се може видети на Слици 9.7., је слична временској зависности исте величине за претходни случај приказан на Слици 9.5. Поменути локални минимуми и максимуми који се појављују у почетку су у овом случају слабије изражени, док су вредности  $\sigma_L^2$  нешто веће, а пораст  $\sigma_L^2$  са протоком времена нешто спорији.

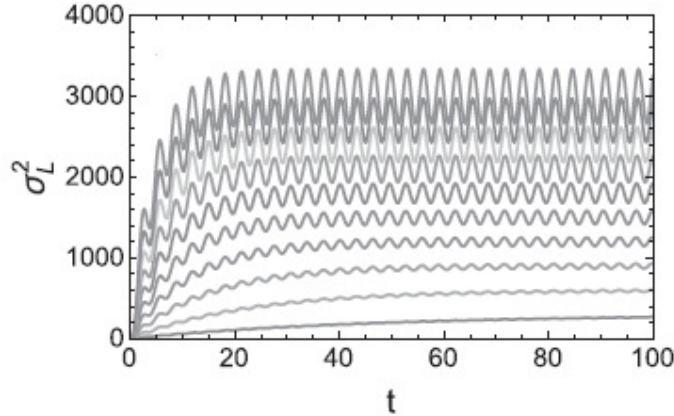
За  $10\gamma_0 < \omega$  су разматрани случајеви  $\gamma_0 \in \{0.00011, 0.0011, 0.011\}$ , при чему су резултати приказани само за вредност  $\gamma_0 = 0.011$ , и то за три различите вредности температуре,  $k_B T \in \{100, 0.01, 0.1\}$ .

За  $\gamma_0 = 0.011$ ,  $k_B T = 100$ , односно за случај високих температура, који је приказан на Сликама 9.8. и 9.9., примећују се динамичке карактеристике сличне као у случају чисто хармонијског ротатора. У овом случају важи једнакост  $10\gamma_0 < k_B T$ , тако да се ради о подпригушеном режиму.



Слика 9.8. Зависност  $\sigma_\varphi^2(t)$  за  $N \in \{1,2,3, \dots, 10\}$ ,  $\gamma_0 = 0.011$ ,  $k_B T = 100$

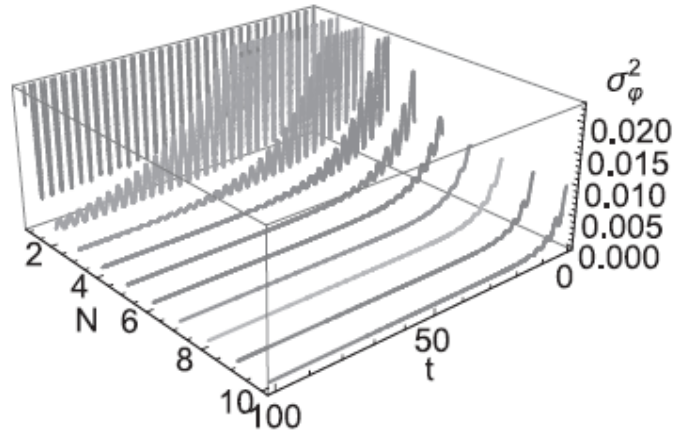
Линија графика на Слици 9.8. која је најближа временској оси представља случај  $N = 10$ , линија изнад ње случај  $N = 9$ , док линија која показује највеће вредности  $\sigma_\varphi^2$  представља случај  $N = 1$ . Мањи молекулски пропелери су видно нестабилнији по питању угла, при чему се посебно велика нестабилност примећује у случају  $N = 1$ . Са графика се може видети да стандардно одступање угла расте са протоком времена за све вредности  $N$ , при чему је пораст у почетку веома брз, а онда након неког времена постаје знатно спорији, тако да вредности стандардних одступања угла остају приближно константне са протоком времена, осим у случају  $N = 1$ .



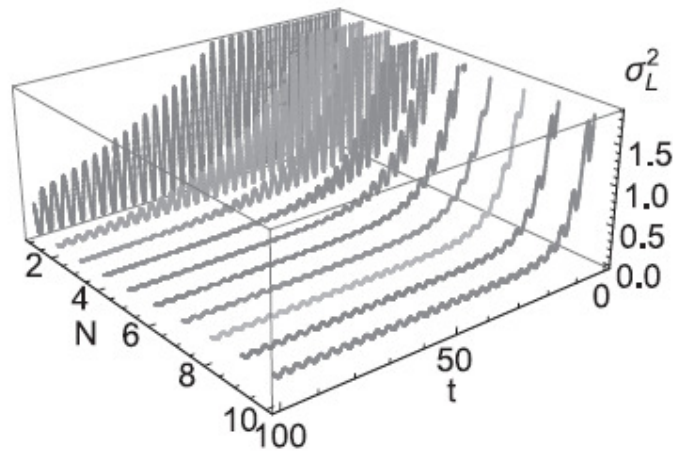
Слика 9.9. Зависност  $\sigma_L^2(t)$  за  $N \in \{1,2,3, \dots, 10\}$ ,  $\gamma_0 = 0.011$ ,  $k_B T = 100$

Са Сlike 9.9. се може приметити да је пораст стандардног одступања момента импулса са протоком времена значајан само у почетку, док су за дуже временске интервале карактеристичне осцилације око равнотежних вредности које се споро повећавају са протоком времена.

Случај  $\gamma_0 = 0.011$ ,  $k_B T = 0.01$  је приказан на Сликама 9.10. и 9.11. Као и у случају ниских температура и великог фактора пригушења и овде се примећује неочекивано опадање стандардних одступања угла и момента импулса са протоком времена. С друге стране, и у овом случају стандардно одступање угла опада са повећањем броја лопатица, док се за стандардно одступање момента импулса може рећи да расте са повећањем броја лопатица само ако се разматрају кратки почетни интервали. Са порастом времена стандардна одступања момента импулса за веће вредности  $N$  брзо опадају, док су за мање вредности  $N$  приметне осцилације са амплитудама које знатно спорије опадају. Опадање амплитуде осцилација стандардних одступања није исто за све вредности  $N$ . За краће временске интервале најмање осцилације стандардних одступања су за  $N = 7$ ,  $N = 8$  и за угао и за момент импулса, док су најмање осцилације стандардних одступања момента импулса за дуже временске интервале за  $N = 3$ ,  $N = 4$ .

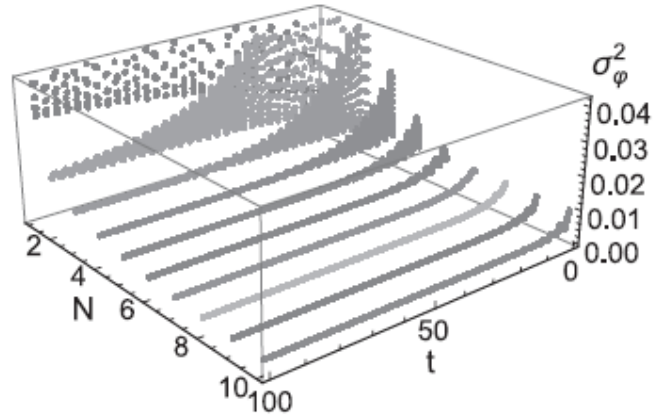


Слика 9.10. Зависност  $\sigma_\phi^2(t)$  за  $N \in \{1,2,3, \dots, 10\}$ ,  $\gamma_0 = 0.011$ ,  $k_B T = 0.01$

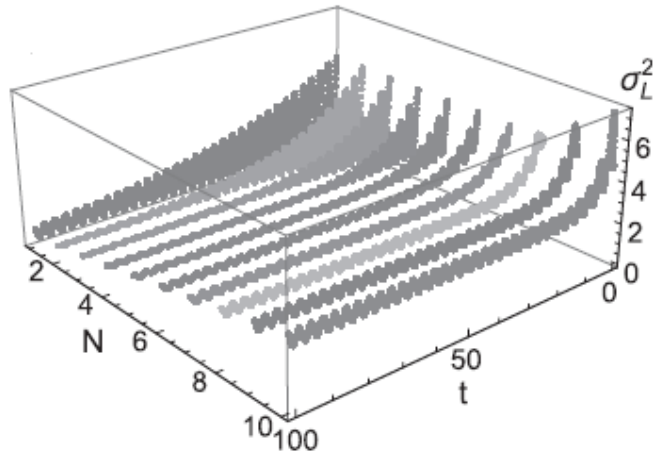


Слика 9.11. Зависност  $\sigma_L^2(t)$  за  $N \in \{1,2,3, \dots, 10\}$ ,  $\gamma_0 = 0.011$ ,  $k_B T = 0.01$

За  $\gamma_0 = 0.011$ ,  $k_B T = 0.1$ , односно за случај који се може сматрати случајем средњих температура, приказан на Сликама 9.12. и 9.13., примећује се засићење временске промене стандардног одступања угла и стандардног одступања момента импулса, односно може се рећи да након неког времена стандардна одступања престају да се мењају са порастом времена, односно осцилују са веома малим амплитудама око неких равнотежних вредности које се занемарљиво мењају са порастом времена. Описано засићење стандардних одступања на неки начин представља прелаз између два претходна разматрана случаја, случаја високих температура, за који је константован пораст стандардног одступања са протоком времена и случаја ниских температура, за који је константовано опадање стандардних одступања са протоком времена.



Слика 9.12. Зависност  $\sigma_\varphi^2(t)$  за  $N \in \{1,2,3, \dots, 10\}$ ,  $\gamma_0 = 0.011$ ,  $k_B T = 0.1$



Слика 9.13. Зависност  $\sigma_L^2(t)$  за  $N \in \{1,2,3, \dots, 10\}$ ,  $\gamma_0 = 0.011$ ,  $k_B T = 0.1$

Након разматрања свих наведених случајева може се закључити да се зависност стандардних одступања од времена и броја лопатица молекулских пропелера знатно разликује за различите комбинације вредности параметара и њихових односа. Чак и за исти однос  $\gamma_0$  и  $\omega$  појављују се различите зависности стандардних одступања од времена и броја лопатица, што се јасно може видети упоређивањем графика на Сликама 9.2. и 9.4., односно 9.3. и 9.5. У случају ниских температура се примећује неочекивано опадање стандардних одступања са протоком времена и за угао и за момент импулса. Поред тога, при ниским температурама, постоји изузетак од правила да стандардно одступање угла опада са порастом броја лопатица - случај  $\gamma_0 = 1.1$ ,  $k_B T = 0.01$ , приказан на Слици 9.4, за који постоји немонотона зависност стандардног одступања угла од броја лопатица.

За неке комбинације вредности параметара примећује се оштри почетни пад стандардног одступања момента импулса, као на пример на Сликама 9.5. и 9.7. У случајевима приказаним на Сликама 9.2. и 9.8. примећује се да за  $N = 1$  постоји велика нестабилност угла, односно велики и брзи пораст стандардног одступања угла за кратке почетне временске интервале. При високим температурама динамичке карактеристике су најсличније случају чисто хармонијског ротатора док се при ниским температурама примећују најдрастичније разлике у односу на случај хармонијског ротатора. У случају високих температура доминантан ефекат је пораст стандардних одступања са протоком времена, док у случају ниских температура долази до опадања стандардних одступања са протоком времена. Случај средњих температура је, може се рећи, прелаз између претходна два случаја. У случају средњих температура доминантан ефекат је појава zasiћења, односно то да након неког времена стандардна одступања постају приближно константна са даљим порастом времена. Посебно је занимљив случај средњих температуре приказан на Слици 9.6. у којем за мање вредности  $N$  постоји један тип временске зависности стандардног одступања угла док је за веће вредности  $N$  та временска зависност потпуно другачија. На основу наведених упоређивања случајева високих, средњих и ниских температура, може се констатовати да у случају слабо нехармонијског потенцијала постоји веома значајан утицај температуре на динамичке карактеристике молекулских пропелера. Вредности стандардног одступања момента импулса су за ред величине већи од вредности стандардног одступања угла за оба режима, тако да се динамика момента импулса може сматрати мање стабилном у односу на динамику угла, при чему треба напоменути да за неке случајеве постоји велика нестабилност угла за  $N = 1$ .

Очекиване динамичке карактеристике, односно динамичке карактеристике које су сличне као у случају чисто хармонијског ротатора, откривене само у случају високих температура. За високе температуре стандардна одступања угла и момента импулса расту са протоком времена, стандардно одступање угла опада док стандардно одступање момента импулса расте са порастом броја лопатица, као и у случају чисто хармонијског ротатора. За све остале комбинације параметара утицај уведеног малог нехармонијског члана се испољава значајним променама динамичких карактеристика у односу на хармонијски ротатор.

Други метод испитивања динамичке стабилности који се у овом раду користи за нехармонијски ротатор је базиран на познатом методу налажења времена првог



пролаза (Dubkov et al 2004, Fiasconaro et al 2005, Fiasconaro et al 2009, Burada and Lindner 2012, Ornigotti et all 2018) који разматра минимално време  $t_{FPT}$  које је потребно да систем достигне граничну вредност неке променљиве од интереса. Што је време првог пролаза мање, бржи је прелаз из почетног стања у неко друго стање, односно систем је мање стабилан. Метод има дугу традицију у физици, у другим природним наукама, као и у инжињерству, а недавно је коришћен и за описивање волатилности финансијских тржишта (одступања цена акција од неке средње вредности) (Valenti et all 2018, Masoliver Perello 2009).

Као што је већ речено у контексту класичне физике од интереса је такозвано средње време првог пролаза које се дефинише као аритметичка средња вредност за различите, стохастички одабране, путање. При покушају да се директном аналогијом формулише одговарајућа квантномеханичка величина наилази се на проблем зато што у квантној механици не постоји класична, детерминистичка трајекторија. У овом раду се уводи квантномеханички аналогон поменутом времену првог пролаза, такозвано квантно време првог пролаза -  $t_{QFPT}$  (енг.: quantum first passage time - QFPT), које се дефинише као минимално време потребно да средња вредност угла  $\varphi = \langle \varphi \rangle$  достигне неку унапред одређену вредност  $\varphi_{th}$  за одабрану почетну вредност  $\varphi_0$ . Гранична вредност  $\varphi_{th}$  се одређује посебно за сваку почетну вредност  $\varphi_0$  при чему се, због ограничења на разматрање малих углова ротације, претпоставља да важи  $|\varphi_{th} - \varphi_0| \approx 10^{-4}$ . За сваки тако одређени пар вредности  $\varphi_0, \varphi_{th}$  се нумерички одређује квантно време првог пролаза  $t_{QFPT}$ , односно минимално време потребно за прелаз  $\varphi_0 \rightarrow \varphi_{th}$ . За средњу вредност угла се користи израз (9.42), тако да је за израчунавање  $t_{QFPT}$  потребно претходно добити израз за  $f_1$ . Једначине (9.37) и (9.38) се могу посматрати као посебан систем једначина чијим су решавањем, применом програма Wolfram Mathematica, уз коришћење (9.55) односно (9.60), добијена решења за  $f_1$  и  $f_2$ . За величине које се користе за израчунавање квантног времена првог пролаза, средњу вредност угла  $\langle \varphi \rangle$  и вредност прве поправке  $f_1$ , користе се различити облици израза у зависности од тога да ли се ради о случају великог или малог коефицијента пригушења. У случају када је  $\gamma_0 > \omega$  за потребе налажења квантног времена првог пролаза за средњу вредност угла коришћен је израз (9.53) док је за вредност прве поправке  $f_1$  коришћен израз:

$$f_1 = 3b \left( -\frac{1}{I\omega^2} + \frac{e^{-\gamma t}}{I\omega^2} \left( \frac{\gamma}{\Omega} \sinh(\Omega t) + \cosh(\Omega t) \right) \right) \left( \frac{k_B T}{I\omega^2} + \frac{e^{-2\gamma t}}{I^2 \Omega^2} (B^2 + q) \sinh^2(\Omega t) + \frac{e^{-2\gamma t}}{2I\Omega^2} (2AB + r) (2\gamma \sinh^2(\Omega t) + \Omega \sinh(2\Omega t)) + \frac{e^{-2\gamma t}}{\Omega^2} (A^2 + p) (-\omega^2 \cosh^2(\Omega t) + \gamma^2 \cosh(2\Omega t) + \gamma \Omega \sinh(2\Omega t)) + \frac{e^{-2\gamma t}}{I\omega^2 \Omega^2} k_B T (\omega^2 - \gamma^2 \cosh(2\Omega t) - \gamma \Omega \sinh(2\Omega t)) \right), \quad (9.64)$$

при чему је  $\Omega = \sqrt{\gamma^2 - \omega^2}$ . У случају  $10\gamma_0 < \omega$  за средњу вредност угла је коришћен израз (9.58) док је за вредност прве поправке  $f_1$  коришћен израз:

$$f_1 = 3b \left( -\frac{1}{I\omega^2} + \frac{e^{-\gamma t}}{I\omega^2} \left( \frac{\gamma}{\Omega} \sin(\Omega t) + \cos(\Omega t) \right) \right) \left( \frac{k_B T}{I\omega^2} + \frac{e^{-2\gamma t}}{I^2 \Omega^2} (B^2 + q) \sin^2(\Omega t) + \frac{e^{-2\gamma t}}{2I\Omega^2} (2AB + r) (2\gamma \sin^2(\Omega t) + \Omega \sin(2\Omega t)) + \frac{e^{-2\gamma t}}{-\Omega^2} (A^2 + p) (-\omega^2 \cos^2(\Omega t) + \gamma^2 \cos(2\Omega t) - \gamma \Omega \sin(2\Omega t)) + \frac{e^{-2\gamma t}}{-I\omega^2 \Omega^2} k_B T (\omega^2 - \gamma^2 \cos(2\Omega t) + \gamma \Omega \sin(2\Omega t)) \right), \quad (9.65)$$

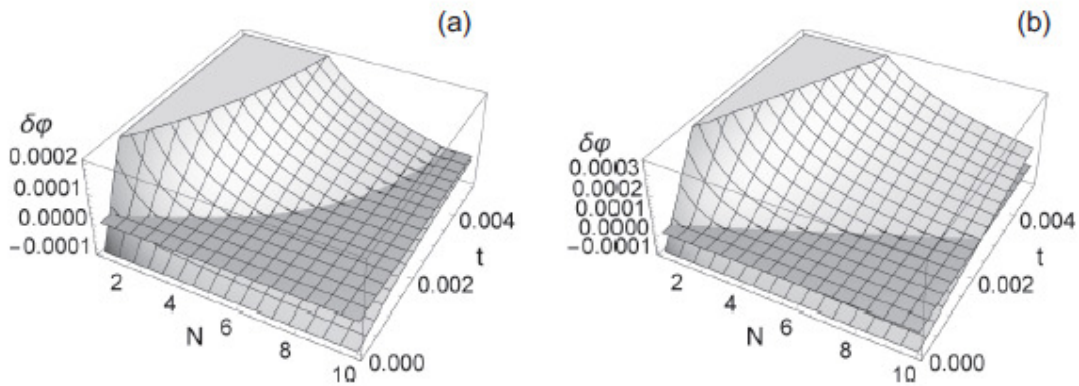
при чему је  $\Omega = \sqrt{\omega^2 - \gamma^2}$ . Ознаке које су коришћене у изразима (9.64) - (9.65) су  $A = \langle \hat{\varphi}(0) \rangle$ ,  $B = \langle \hat{L}_z(0) \rangle$ ,  $p = [\Delta \hat{\varphi}(0)]^2$ ,  $q = [\Delta \hat{L}_z(0)]^2$ ,  $r = \sigma_{\varphi L}(0)$ . Одабране су почетне почетне вредности  $p = 0.01$ ,  $q = 0.005$ ,  $r = 0$ ,  $A = \varphi_0^{(N)}$ ,  $B = 1.2$  за које је задовољена квантна Коши-Шварцова неједнакост (9.46), док су за  $\omega$  и  $b$  коришћене вредности  $\omega = 0.1$  односно  $b = -0.01$  (Petrović et al 2020).

Израчунавање је извршено израдом и применом одговарајућег компјутерског програма у којем се на почетку извршавања за временску променљиву поставља вредност нула а затим се при сваком проласку кроз петљу та вредност повећава за унапред одређени временски корак. У петљи се за текућу вредност временске променљиве израчунава средња вредност угла а затим и разлика тако добијене вредности и почетне вредности угла. Први пут када поменута разлика достигне унапред одређену граничну вредност прекида се извршавање петље, док се тренутна вредност временске променљиве узима као квантно време првог пролаза. Описано налажење квантног времена првог пролаза је извршено за различите комбинације вредности параметара окружења, као и за различите почетне положаје  $\varphi_0^{(N)} \in \{1.1\varphi_{max}^{(N)}, 1.3\varphi_{max}^{(N)}, 1.5\varphi_{max}^{(N)}, 1.6\varphi_{max}^{(N)}\}$  и различите вредности броја лопатица пропелера  $N \in \{1, 2, 3, \dots, 10\}$ . Почетни положаји зависе од  $N$ , док је наведени избор почетних вредности мотивисан избором потенцијала (9.1) чији је график приказан на слици 9.1. Након тога је размотрена зависност  $t_{QFPT}$  од коефицијента пригушења и температуре, као и зависност  $t_{QFPT}$  од броја лопатица молекулског пропелера која је

презентована одговарајућим графицима као и апроксимативним аналитичким изразима. На графицима је приказана зависност величине  $\delta\varphi = \langle \hat{\varphi}(t, N) \rangle - \varphi_{th}$  од времена и броја лопатица пропелера. Квантно време првог пролаза се добија у пресеку графика  $\delta\varphi(t, N)$  и хоризонталне равни  $\delta\varphi = 0$ .

У случају када је  $\gamma_0 > \omega$  разматране су следеће вредности коефицијента пригушења:  $\gamma_0 \in \{0.11, 20\}$ . За ове комбинације вредности параметара примећује се слаба зависност квантног времена првог пролаза од почетне позиције као и практично занемарљив утицај температуре.

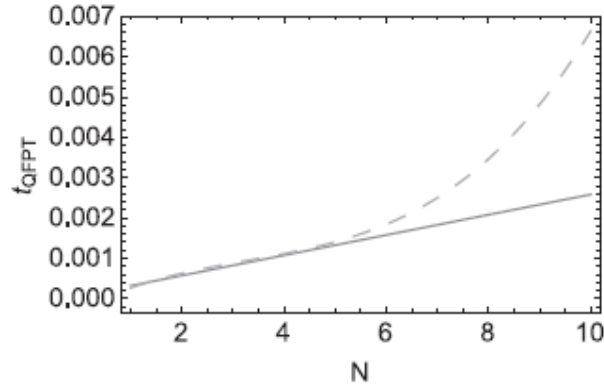
На слици 9.14. су приказана два графика за различите комбинације вредности коефицијента пригушења, почетних позиција и температуре. Са графика се може приметити да су вредности  $t_{QFT}$  мање за мање вредности  $N$ , из чега следи да су молекулски пропелери са већим бројем лопатица стабилнији.



Слика 9.14. Графички приказ  $\delta\varphi = \langle \hat{\varphi}(t, N) \rangle - \varphi_{th}$ , за а)  $\gamma_0 = 20, k_B T = 0.001, \varphi_0^{(N)} = 1.1$ , б)  $\gamma_0 = 0.11, k_B T = 100, \varphi_0^{(N)} = 1.3$

Слика 9.15. показује нумерички добијену зависност квантног времена првог пролаза од броја лопатица молекулских пропелера. Нумерички добијени апроксимативни аналитички изрази за зависност  $t_{QFT}(N)$  су:

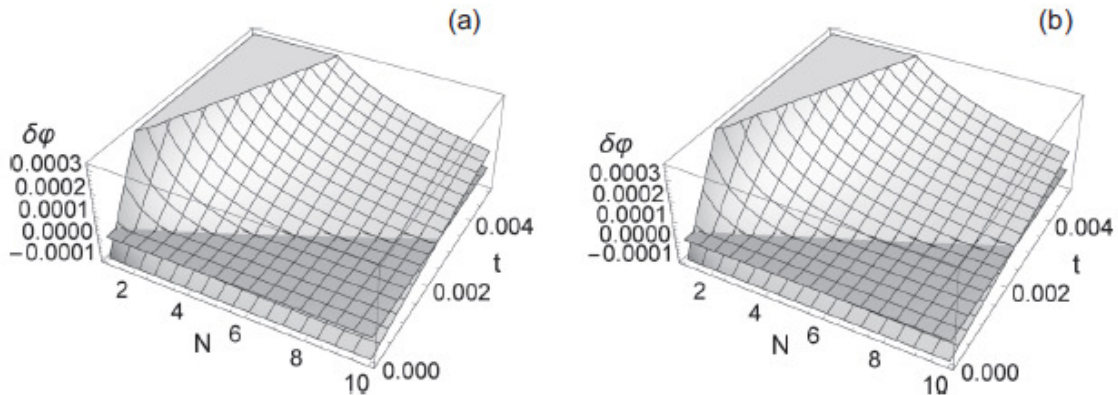
- за случај  $\gamma_0 = 20$ , приказан на слици 9.14. под а) :  $-2.8 + 6.7N - 1.3N^2 + 0.1N^3$ ,
- за случај  $\gamma_0 = 0.11$ , приказан на слици 9. 14. под б) :  $0.67 + 2.5N$ .



Слика 9.15. Приказ зависности  $t_{QFPT}(N)$ , испрекидана линија одговара случају на слици 9.14. а), док пуна линија одговара случају на слици 9.14. б)

У случају малог коефицијента пригушења зависност је готово линеарна док је у случају великог коефицијента пригушења присутан утицај квадратних и кубних чланова, тако да квантно време првог пролаза расте знатно брже са порастом броја лопатица пропелера. Из наведеног се може закључити да је за веће вредности  $N$  угао молекулских пропелера стабилнији у случају већег коефицијента пригушења. Примећени шаблон зависности  $t_{QFPT}(N)$  се не мења променом избора почетних положаја као ни променом температуре.

Како квантно време првог пролаза расте са порастом броја лопатица, важно је размотрити питање да ли је то претежно последица инерцијалних ефеката, односно последица повећања момента инерције. Да би се испитао значај инерцијалног ефекта из израза који се користе за општи режим се уклања зависност од  $N$  за све величине осим за момент инерције.

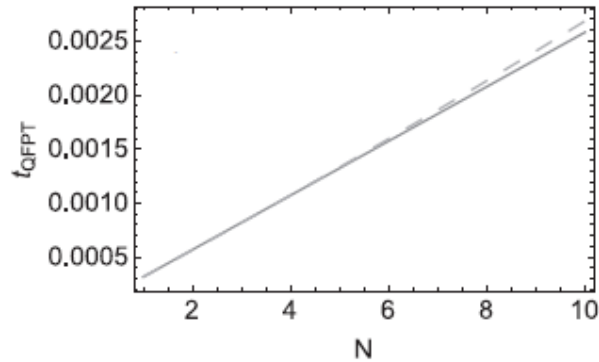


Слика 9.16. Графички приказ  $\delta\varphi = \langle \hat{\varphi}(t, N) \rangle - \varphi_{th}$  у инерцијалном режиму, за а)  $\gamma_0 = 20, k_B T = 0.001, \varphi_0^{(N)} = 1.1$ , б)  $\gamma_0 = 0.11, k_B T = 100, \varphi_0^{(N)} = 1.3$

Резултати за инерцијални режим су приказани на Слици 9.16. при чему су вредности параметара исте као и у случајевима приказаним на слици 9.14. Најуочљивија разлика у односу на слику 9.14. је график на левој страни за  $\gamma_0 = 20$  који показује спорији пораст квантног времена првог пролаза са порастом  $N$ .

За инерцијални режим нумерички добијени апроксимативни аналитички изрази за зависност  $t_{QFPT}(N)$  су:

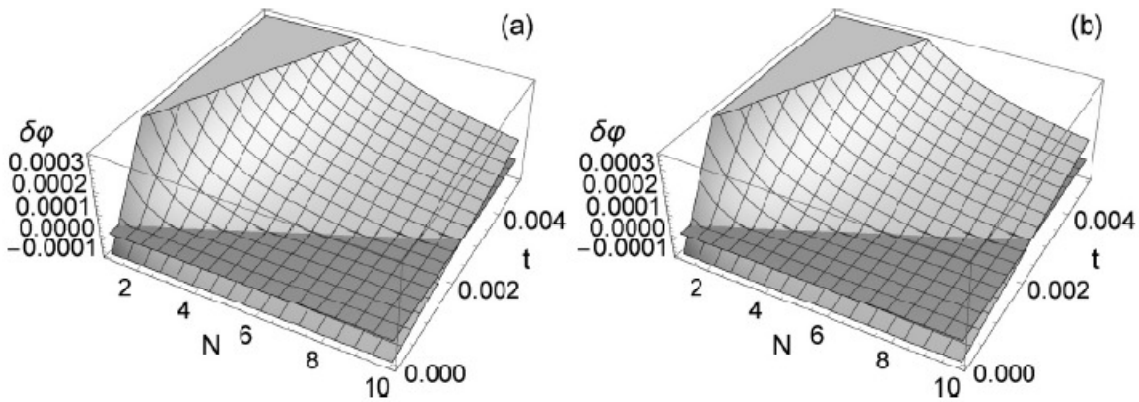
- за случај  $\gamma_0 = 20$  приказан на слици 9.16. под а)  $7.5 + 24N$ ,
- за случај  $\gamma_0 = 0.11$  приказан на слици 9.16. под б)  $6.7 + 25N$



Слика 9.17. Приказ зависности  $t_{QFPT}(N)$  за случај инерцијалног режима

Зависност  $t_{QFPT}(N)$  за инерцијални режим је графички приказана на слици 9.17. Испрекидана линија одговара случају а) на слици 9.16. док пуна линија одговара случају б) на Слици 9.16. На основу графика и добијених израза јасно је да у инерцијалном режиму не долази до наглог пораста квантног времена првог пролаза за веће вредности  $N$ .

За  $10\gamma_0 < \omega$  разматране су следеће бројне вредности коефицијента пригушења:  $\gamma_0 \in [0.00001, 0.0099]$ , при чему је график приказан за случај  $\gamma_0 = 0.0099$ .



Слика 9.18. Графички приказ  $\delta\varphi = \langle \hat{\varphi}(t, N) \rangle - \varphi_{th}$  за  $\gamma_0 = 0.0099$ ,  $k_B T = 0.001$ ,  $\varphi_0^{(N)} = 1.6$ , а) егзактни случај б) инерцијални случај

Примећена је слаба зависност од почетне позиције, као и веома слаба зависност од температуре, тако да су и за општи и за инерцијални случај разматране исте вредности параметара, односно вредности коефицијента пригушења, почетне позиције и температуре. У овом случају зависност  $t_{QFPT}(N)$  је линеарна за оба случаја и може изразити као  $25.1N$ . У случају малог коефицијента пригушења нема значајних разлика између инерцијалног и неинерцијалног режима.

Упоредном анализом свих случајева закључује се да је фактор чији је утицај на квантно време првог пролаза доминантан однос  $\gamma_0$  и  $\omega$ , док остали параметри, као што су, на пример, почетни положај и температура окружења, готово да немају утицај на вредност квантног времена првог пролаза. За  $10\gamma_0 < \omega$  постоји приближно линеарна зависност  $t_{QFPT}(N)$ , док су за  $\gamma_0 > \omega$  нађене су две различите "законитости" квантног времена првог пролаза од броја лопатица  $t_{QFPT}(N)$ : слаба кубна зависност и линеарна зависност од  $N$ . За поменути случај  $\gamma_0 > \omega$  број лопатица молекулског пропелера за који зависности  $t_{QFPT}(N)$  постаје нелинеарна зависи од  $\gamma_0$ : што је  $\gamma_0$  веће вредност  $N$  за коју одступање од линеарне зависности постаје незанемарљиво је мања. На пример за  $\gamma_0 \approx 2$  до одступања долази за  $N \approx 7$ , док за  $\gamma_0 \approx 20$  до одступања долази за  $N \approx 4$ . Као што је већ речено, утицај величине на динамичку стабилност молекулских пропелера се не испољава само кроз повећање момента инерције већ и кроз повећање коефицијента пригушења односно јачине интеракције са окружењем. Нелинеарни чланови у изразима који описују зависност  $t_{QFPT}(N)$  се појављују само за веће вредности  $\gamma_0$ , на основу чега се може закључити да се пораст квантног времена првог

пролаза са повећањем броја лопатица молекулских пропелера не може свести на чисто инерцијални ефекат.

Две коришћене методе за испитивање динамичке стабилности слабо нехармонијског ротатора се, у извесном смислу, међусобно допуњују. Метод квантног времена првог пролаза се показао као погодан за анализу динамике у краћим временским интервалима, при чему квантно време првог пролаза показује нумерички релевантну зависност само од фактора пригушења и величине молекулског пропелера. Стандардна одступања и за угао и за момент импулса показују снажну зависност од већег броја параметара и за краће и за дуже временске интервале.

## 10. Дискусија

Проучавање динамике молекула чије су димензије на граници класичног и квантног домена, може да доведе до корисних закључака у вези преласка из квантног у класични свет, као и квантне декохеренције. Као што је већ речено у уводном делу, молекули имају одређени облик, односно одређене просторне димензије и величину, управо услед квантне декохеренције (J. Jeknić-Dugić 2009, Giulini 1996), тако да је и за теоријска разматрања и за практичне примене важно проучити како та својства утичу на динамику молекула, а посебно на њихову динамичку стабилност.

У овом раду се полази од претпоставке да су молекули отворени системи који су у непрестаној интеракцији са окружењем, при чему се поменута интеракција не може занемарити. Из овога следи да динамику молекула треба моделовати применом теорије отворених квантних система, што је овде остварено применом мастер једначине Калдеире и Легета, као квантног модела Брауновог кретања. Поменута једначина се у овом раду користи феноменолошки, односно без узимања у обзир ограничења која су коришћена у њеном извођењу. То омогућава разматрање динамике молекулских пропелера у ширем опсегу вредности параметара, као што су температура и коефицијент пригушења. За проучавање динамике молекула се иначе веома често примењује класични приступ па је зато битно нагласити које су предности примене квантних метода, односно какав је значај квантних поправки. Поред тога, потребно је показати и предности примене теорије отворених квантних система у односу на примену стандардне квантне механике. Управо молекулски пропелери су готово идеални за оваква разматрања, имајући у виду њихову величину као и специфичан облик. Све то омогућава да се утицај величине моделује преко зависности коефицијента пригушења и момента инерције од броја лопатица пропелера. Као што је већ речено, са порастом броја лопатица молекулских пропелера линеарно расте и коефицијент пригушења и момент инерције. Увођењем броја лопатица у модел, чиме се успоставља веза између две важне величине, коефицијента пригушења и момента инерције, добија се модификовани, односно проширени модел квантног Брауновог ротатора.

Проучавање динамике молекулских пропелера поред горе истакнутог теоријског значаја има и практични значај. Молекулски пропелери су веома интересантни и важни за развој савремене нанотехнологије, пре свега за развој



молекуларних машина које често у оквиру свог састава имају управо молекулске пропелере. За примену молекулских пропелера, као саставних делова молекуларних машина, најважније је размотрити њихову стабилност, односно контролабилност, као и све факторе који утичу на ту стабилност.

У раду су разматрана три модела молекулских пропелера која се међусобно разликују по типу спољашњег потенцијала: модел слободног ротатора, модел хармонијског ротатора и модел слабо нехармонијског ротатора, са малим кубним чланом. Модел слободног ротатора најбоље илуструје утицај окружења, модел чисто хармонијског ротатора илуструје утицај хармонијског потенцијала, док је модел слабо нехармонијског ротатора најближи реалним физичким ситуацијама.

Динамичка стабилност је у овом раду испитана на два начина. Први начин подразумева анализу стандардних одступања угла и момента импулса, њихову временску еволуцију и како ове величине зависе од броја лопатица молекулских пропелера. Други метод који се користи је сличан добро познатом и често коришћеном методу времена првог пролаза. Овај метод је пре свега повезан са класичним моделима и подразумева постојање одређене трајекторије. Зато је за примену идеје која стоји иза овог метода било потребно унети одређене модификације, да би се он ускладио са квантним приступом у оквиру којег не постоји класична трајекторија. Уведен је нови концепт - квантно време првог пролаза, које се дефинише као време након којег средња вредност угла први пут достигне неку унапред одређену вредност. Што је квантно време првог пролаза мање молекулски пропелер је мање стабилан. За слободни и хармонијски ротатор примењена је само метода анализе стандардних одступања, док су за случај слабо нехармонијског ротатора примењена оба поменута метода.

Наша анализа је показала да у случају слободног и хармонијског ротатора, као и у случају слабо нехармонијског ротатора при средњим и високим температурама окружења, постоји супротан утицај повећања броја лопатица на динамичку стабилност угла и момента импулса - са повећањем броја лопатица стабилност угла расте док стабилност момента импулса опада. Величина молекулских пропелера, као и параметри окружења, имају различит утицај на динамичку стабилност угла и момента импулса, пораст стабилности једне од ове две величине је у највећем броју разматраних случајева праћен смањењем стабилности друге величине. Код слабо

нехармонијског ротатора у случају ниских температура и великог фактора пригушења се јавља немонотона зависност стандардног одступања угла од броја лопатица (Слика 9.4.), док је у случају ниских температура и малог фактора пригушења пораст стандардног одступања момента импулса са повећањем броја лопатица приметан само у кратким почетним временским интервалима (Слика 9.11.).

У оквиру испитивања квантног времена првог пролаза слабо нехармонијског ротатора размотрен је и инерцијални режим у коме је искључена зависност коефицијента пригушења од броја лопатица пропелера. На основу анализе инерцијалног режима је закључено да повећање момента инерције, само по себи, не доводи ни до појаве класичних карактеристика динамике, нити до повећања динамичке стабилности, односно да се утицај величине молекулских пропелера на динамичку стабилност не може свести на чисто инерцијалне ефекте.

За сва три разматрана модела констатовано је присуство квантних поправки чији се утицај у кратким, почетним, интервалима не може занемарити. Допринос квантних поправки опада са протоком времена, осим у случају стандардног одступања угла слободног ротатора. Поменуто опадање квантних поправки је интензивније и брже са порастом коефицијента пригушења, односно са порастом јачине интеракције са окружењем. Може се закључити да интеракција са окружењем утиче на то да се квантне одлике динамике молекулских пропелера са протоком времена постепено смањују, односно да динамика молекулских пропелера са протоком времена "полако" поприма класични карактер, што је иначе у складу са општим очекивањима квантне теорије декохеренције. Детаљном анализом случаја великог момента инерције, за који се иначе користи и назив декохеренцијски лимит, услед доминантног утицаја декохеренцијског члана у мастер једначини Калдеире Легета, закључује се да квантна декохеренција није доминантан процес при прелазу из квантног у класично понашање. Овај занимљив и неочекиван закључак указује на потребу за додатном анализом и тумачењем, што би могао бити циљ неког будућег истраживања. У оквиру тога се може поставити питање: да ли је модел молекулских пропелера из неког разлога посебан, односно представља изузетак, или можда указује на неке опште ставове, који могу водити ревидирању постојећих сазнања у вези са проблемом граничне области између квантног и класичног домена?

Упоређивање модела слободног и хармонијског ротатора указује на неке значајне разлике између њих. У случају хармонијског ротатора, за разлику од слободног, примећено је постојање стационарног стања, односно примећено је да асимптотска вредност стандардног одступања угла не зависи од времена. Поред тога, примећено је да су стандардна одступања значајно мања у случају хармонијског ротатора. Може се рећи да присуство спољашњег хармонијског поља позитивно утиче на стабилност молекулских пропелера. Поред разматрања зависности стандардних одступања угла и момента импулса од броја лопатица молекулских пропелера разматрана је и зависност стандардних одступања од параметара окружења - коефицијента пригушења и температуре, при чему је, посебно у случају слободног ротатора, примећена занимљива појава донекле слична познатом ефекту побољшања стабилности услед присуства шума. Наиме, стабилност угла расте са порастом коефицијента пригушења!

Присуство малог кубног члана у спољашњем потенцијалу утиче на појаву значајних разлика у односу на случај хармонијског потенцијала. Значајна сличност динамичких карактеристика хармонијског и слабо нехармонијског ротатора је примећена само у случају високих температура. При високим температурама окружења стандардна одступања угла и момента импулса расту са протоком времена. Стандардно одступање угла опада, док стандардно одступање момента импулса расте са порастом броја лопатица, као и у случају чисто хармонијског ротатора. У случају ниских температура се примећује немонотона зависност стандардног одступања угла од броја лопатица, као и опадање стандардних одступања са протоком времена и за угао и за угаони момент. Ово је неочекиван и занимљив резултат и са тачке гледишта потенцијалне примене и са тачке гледишта теоријских разматрања, јер сугерише да "величина" неког физичког система није тако једноставан појам у квантно/класичном контексту. У случају средњих температура доминантан ефекат је појава засићења, односно: након неког времена стандардна одступања постају приближно константна са даљим протоком времена.

Две коришћене методе за испитивање динамичке стабилности слабо нехармонијског ротатора се, у извесном смислу, међусобно допуњују. Метод квантног времена првог пролаза је погоднији за разматрање динамичке стабилности у краћим временским интервалима док је метода разматрања стандардних одступања погоднија за разматрање динамичке стабилности у дужим временским интервалима. Квантно

време првог пролаза показује нумерички релевантну зависност само од фактора пригушења и величине молекулског пропелера, док стандардна одступања угла и момента импулса показују снажну зависност од већег броја параметара, како за краће, тако и за дуже временске интервале.

Зависност динамичке стабилности молекулских пропелера од њихове величине, односно од броја лопатица  $N$ , је веома сложена, значајно се разликује у зависности од облика спољашњег потенцијала, вредности и међусобних односа параметара окружења (пре свега температуре и коефицијента пригушења). Са порастом броја лопатица стабилност угла углавном расте, док стабилност момента импулса углавном опада. Са протоком времена стабилност угла и момента импулса углавном опада, али постоје и случајеви у којима се стабилност повећава са протоком времена или се значајно не мења са протоком времена након неког кратког почетног временског интервала. У неким случајевима примећена је и немонотона зависност стандардних одступања од броја лопатица, тако да се најбоља контролабилност постиже за неке одређене бројеве лопатица пропелера. Постоје такође и комбинације вредности параметара окружења и њихових односа које омогућавају значајно бољу стабилност. Детаљном анализом утицаја различитих параметара на динамичку стабилност молекулских пропелера може се закључити да још увек не постоје једноставна правила, односно упутства, која би омогућила жељени ниво динамичке стабилности молекулских пропелера. Уместо једноставних правила о постизању што боље контролабилности неопходно је примењивати комбинацију различитих критеријума стабилности:

(1) Избор опсервабле на чију ће се вредност утицати спољашњим деловањем

За примену молекулских пропелера веома је важно размотрити у којим случајевима је лакше постићи задовољавајућу контролабилност угла, односно момента импулса. Као што је већ речено, са порастом броја лопатица стабилност угла углавном расте, док стабилност момента импулса углавном опада, тако да се намеће општи закључак да је у случају молекулских пропелера са већим бројем лопатица лакше остварити контролабилност угла, док је у случају молекулских пропелера са мањим бројем лопатица лакше остварити контролабилност момента импулса. Треба имати у виду и критеријум (4), који иде у прилог лакшем остваривању задовољавајуће контролабилности угла.

У случају слабо нехармонијског ротатора контролабилност угла је најлакше постићи у случају великог коефицијента пригушења и ниских температура и то за релативно дуге временске интервале, односно за период након иницијалне припреме ротатора, при чему је посебно повољан случај када важи  $N \in \{4,5,6\}$ . У случајевима када је потребно извршити велики број брзих спољашњих акција без чекања онда је задовољавајућу контролабилност угаоног момента лакше постићи, при чему је посебно повољан случај  $N \in \{3,4,5\}$ .

### (2) Комбинација вредности параметара окружења

У случају слободног ротатора примећено је да са порастом коефицијента пригушења стабилност угла расте док стабилност момента импулса опада, као и то да са порастом температуре опада и стабилност угла и стабилност момента импулса, при чему је утицај температуре на стабилност момента импулса знатно израженији. У случају хармонијског ротатора, зависност стандардног одступања угла од коефицијента пригушења и температуре је доста сложена, док је зависност стандардног одступања момента импулса од коефицијента пригушења и температуре слична као у случају слободног ротатора.

У случају хармонијског ротатора нема великих разлика у резултатима нађеним за два разматрана режима, подпригушени и неподпригушени режим, при чему је можда најзначајнија разлика што квантни домен траје нешто дуге у случају неподпригушеног режима.

У случају слабо нехармонијског ротатора, чак и за исти однос  $\frac{Y_0}{\omega}$ , појављују се различите зависности стандардних одступања од времена и броја лопатица. Боља контролабилност се постиже у случајевима нижих температура окружења, при чему постоје изузеци у случају кратких почетних временских интервала који су битни за протоколе одмах након почетне иницијализације ротатора.

### (3) Присуство спољашњег поља

Као што је већ речено, у случају хармонијског ротатора је примећено да асимптотска вредност стандардног одступања угла не зависи од времена, као и то да су стандардна одступања значајно мања. Може се рећи да присуство спољашњег хармонијског поља позитивно утиче на стабилност молекулских пропелера. Такође,

може се закључити да присуство спољашњег слабо нехармонијског поља додатно и позитивно утиче на динамичку стабилност, посебно у дужим временским интервалима, зато што се појављују режими у којима долази до засићења стандардних одступања и чак до опадања стандардних одступања са протоком времена.

#### (4) Величина промене стандардних одступања

Величина промена стандардног одступања угла је мања од величине промена стандардног одступања момента импулса: у случају слободног ротатора за неколико редова величине, а у случају хармонијског ротатора за око један ред величине. У случају слабо нехармонијског ротатора величина промене стандардног одступања је такође већа за момент импулса, осим у случају  $N = 1$ , а у неким случајевима постоји и немонотона зависност величине промене стандардних одступања, односно амплитуде осцилација стандардних одступања од  $N$ .

#### (5) Упоредивање динамике у краћим и дужим временским интервалима

Услови остваривања што боље контролабилности молекулских пропелера нису исти за кратке почетне и дуже временске интервале. У кратким почетним временским интервалима морају се узети у обзир и квантне поправке, као и чињеница да се динамичке карактеристике значајно разликују за различите комбинације вредности параметара. Када је у питању слабо нехармонијски ротатор, у случају високих температура стандардна одступања у почетку нагло расту, док у случају ниских температура и великог коефицијента пригушења стандардна одступања нагло опадају. Када се разматрају дужи временски интервали, промена стандардних одступања је нешто мање изражена, при чему у неким случајевима долази и до засићења, односно до престанка зависности стандардних одступања од времена.

#### (6) Начин спољашњег деловања

Практична примена молекулских пропелера у оквиру молекуларних машина захтева одређена спољашња деловања која коришћени модел не узима у обзир, као што су, на пример, узастопна квантна мерења на ротатору, разна деловања јаким спољашњим поља и слично. Поменута спољашња деловања могу повећати и евентуално акумулирати стандардна одступања угла и момента импулса. Ефекат великог пораста стандардних одступања услед акумулирања је израженији у случају великог броја сукцесивних краткотрајних деловања, тако да је у циљу остваривања

задовољавајуће контролабилности пожељно планирати мањи број спољашњих деловања која, по потреби, могу бити и дужег трајања.

Постојање великог броја параметара који утичу на динамичку стабилност молекулских пропелера, и њихов различит утицај на динамичку стабилност у зависности од вредности свих осталих параметара, налаже примену поступка који је сличан инжењерској оптимизацији. Поменута оптимизација је сама по себи сложен задатак чије би решење могло да доведе до напретка у технологији израде молекулских пропелера и њихове примене као саставних делова молекуларних машина.

## 11. Закључак

Анализом динамике молекулских пропелера уочено је присуство квантних поправки које нису занемарљиве, посебно у кратким почетним временским интервалима, што указује на оправданост примене квантног приступа. Услед интеракције са окружењем са порастом времена утицај поменутих квантних поправки постаје све мање значајан, тако да динамика почиње да поприма класични карактер. Закључено је да у прелазу из квантне у класичну динамику у случају молекулских пропелера, супротно очекивањима, квантна декохеренција није доминантан процес, што је резултат који заслужује пажњу и указује на потребу за детаљнијом анализом. Примећена је изразита зависност динамике од температуре и јачине интеракције са окружењем, што указује на оправданост моделовања молекулских пропелера као отворених квантних система. Новоуведени метод квантног времена првог пролаза се показао корисним за испитивање динамичке стабилности, посебно у комбинацији са другим коришћеним методом, анализом стандардних одступања угла и момента импулса.

Показано је да се величина молекулских пропелера може уврстити у модел кроз зависност момента инерције и јачине интеракције са окружењем од броја лопатица, чиме се проширује стандардни модел квантног Брауновог ротатора. Због истовременог пораста јачине интеракције и момента инерције услед пораста броја лопатица, зависност динамичке стабилности од величине је веома сложена. Поред тога, поменута зависност се значајно разликује за различите вредности и међусобне односе параметара окружења, пре свега температуре и коефицијента пригушења. У већини разматраних случајева стабилност угла расте са порастом броја лопатица, док стабилност момента импулса опада. У неким случајевима примећена је и немонотона зависност стандардних одступања од броја лопатица. Све горе наведено указује на то да величина квантног физичког система није једноставан концепт. Примећене су и значајне разлике у динамици и динамичкој стабилности за три разматрана модела - слободни, хармонијски и слабо нехармонијски ротатор, што указује на важност избора одговарајућег потенцијала у циљу постизања потребне контролабилности. У случају слабо нехармонијског потенцијала, за неке комбинације вредности параметара окружења констатовано је неуобичајено опадање стандардних одступања са порастом времена.



Извршене анализе показују да постоји велики број параметара који утичу на динамичку стабилност молекулских пропелера, при чему је њихов утицај различит у зависности од вредности осталих параметара. Због поменуте сложености динамике, за постизање што боље контролабилности молекулских пропелера је, као што је већ речено у Дискусији, потребно примењивати поступак који је сличан инжењерској оптимизацији. При разматрању примена молекулских пропелера у кратким временским интервалима морају се узети у обзир и квантни ефекти, односно квантне поправке. У циљу постизања што веће стабилности пожељно је да неопходна спољашња деловања не буду превише учестала и кратка. Поред тога, за постизање што боље стабилности је јако важно и одабрати одговарајући режим рада, односно одговарајући однос температуре окружења, коефицијента пригушења и величине молекулског пропелера и то у зависности од тога да ли је у конкретном случају циљ постићи контролабилност угла или момента импулса. Такође, треба имати у виду да спољашње поље, посебно слабо нехармонијско, може знатно да повећа стабилност молекулских пропелера, што се може користити и за њихову контролу.

Добијени резултати указују на потенцијалну корист примене сличног модела и на молекулске ротаторе другачијих облика. Посебно би било важно размотрити да ли се у случају других типова молекулских ротатора прелаз из квантне у класичну динамику одвија само услед квантне декохеренције или не, као што је случај са молекулским пропелерима. Поред тога било би занимљиво извршити анализу динамике узајамно спрегнутих ротатора, односно молекулских зупчаника применом истог приступа. Намеће се и потреба за анализирањем случајева другачијих облика потенцијала, као и евентуално налажење потенцијала који би у највећој могућој мери допринио динамичкој стабилности. Било би пожељно поред метода коришћених у овом раду користити и друге статистичке методе, као што је, на пример, метода мартингала. Предложена будућа истраживања, баш као и истраживање спроведено у овом раду, поред теоријског имају и практични значај.

У овом раду је примењен нов приступ проучавања молекулских пропелера, потпуно квантни приступ, уз примену теорије отворених квантних система. Уведена је нова методе испитивања динамичке стабилности - квантно време првог пролаза. Пронађен је начин да се величина отвореног квантног система уведе у модел као параметар физичког система, односно да се уведе истовремена зависност коефицијента пригушења и момента инерције од броја лопатица молекулских

пропелера. Као допринос научном проблему квантног мерења и декохеренције, поменутом у уводном делу, може да се наведе запажање да квантна декохеренција није доминантан процес при прелазу из квантног у класично понашање молекулских пропелера, као и то да постоје случајеви у којима је зависност динамичке стабилности од величине немонотона.

## Додатак 1

На основу мастер једначине Калдеире и Легета:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H, \rho] - \frac{i\gamma}{\hbar}[\varphi, \{L_z, \rho\}] - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2}[\varphi, [\varphi, \rho]], \quad (Д1.1)$$

користећи:

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \text{tr}\left(A \frac{d\rho}{dt}\right), \quad (Д1.2)$$

где је  $A$  неки произвољни оператор, добија се:

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = \text{tr}\left(A \frac{d\rho}{dt}\right) = \text{tr}\left(A \left\{-\frac{i}{\hbar}[H, \rho] - \frac{i\gamma}{\hbar}[\varphi, \{L_z, \rho\}] - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2}[\varphi, [\varphi, \rho]]\right\}\right), \quad (Д1.3)$$

односно:

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle = -\frac{i}{\hbar}\text{tr}(A[H, \rho]) - \frac{i\gamma}{\hbar}\text{tr}(A[\varphi, \{L_z, \rho\}]) - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2}\text{tr}(A[\varphi, [\varphi, \rho]]). \quad (Д1.4)$$

У наведеним изразима, као и у изразима који следе, због поједностављења и боље прегледности, изостављена је назнака временске зависности опсервабли. Први члан десне стране једначине (Д1.4) се може трансформисати користећи следећу особину операције узимања трага:

$$\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA), \quad (Д1.5)$$

на основу чега се може написати:

$$\begin{aligned} \text{tr}(A[H, \rho]) &= \text{tr}(AH\rho - A\rho H) = \text{tr}(AH\rho) - \text{tr}(A\rho H) = \text{tr}(AH\rho) - \text{tr}(HA\rho) = \\ &= \text{tr}(AH\rho - HA\rho) = \text{tr}((AH - HA)\rho) = \text{tr}([A, H]\rho), \end{aligned} \quad (Д1.6)$$

тако да је:

$$-\frac{i}{\hbar}\text{tr}(A[H, \rho]) = -\frac{i}{\hbar}\text{tr}([A, H]\rho). \quad (Д1.7)$$

Други члан десне стране једначине (Д1.4) се може трансформисати, користећи (Д1.5) и  $[A, \varphi] = -[\varphi, A]$ , тако да је:

$$\begin{aligned} \text{tr}(A[\varphi, \{L_z, \rho\}]) &= \text{tr}(A[\varphi, L_z\rho + \rho L_z]) = \text{tr}(A[\varphi, L_z\rho] + A[\varphi, \rho L_z]) = \\ &= \text{tr}(A\varphi L_z\rho - AL_z\rho\varphi + A\varphi\rho L_z - A\rho L_z\varphi) = \text{tr}(A\varphi L_z\rho - \varphi AL_z\rho + A\varphi\rho L_z - \\ &= \varphi A\rho L_z) = \text{tr}([A, \varphi]L_z\rho + [A, \varphi]\rho L_z) = \text{tr}([A, \varphi]L_z\rho + L_z[A, \varphi]\rho) = \\ &= \text{tr}(\{L_z, [A, \varphi]\}\rho) = -\text{tr}(\{L_z, [\varphi, A]\}\rho), \end{aligned} \quad (Д1.8)$$

односно:

$$\frac{i\gamma}{\hbar} \text{tr}(A[\varphi, \{L_z, \rho\}]) = -\frac{i\gamma}{\hbar} \text{tr}(\{L_z, [\varphi, A]\}\rho). \quad (\text{Д1.9})$$

Трећи члан десне стране једнакости (Д1.4) се трансформише на следећи начин:

$$\begin{aligned} \text{tr}(A[\varphi, [\varphi, \rho]]) &= \text{tr}(A[\varphi, (\varphi\rho - \rho\varphi)]) = \text{tr}(A\varphi(\varphi\rho - \rho\varphi) - A(\varphi\rho - \rho\varphi)\varphi) = \\ \text{tr}(A\varphi(\varphi\rho - \rho\varphi) - \varphi A(\varphi\rho - \rho\varphi)) &= \text{tr}([A, \varphi](\varphi\rho - \rho\varphi)) = \text{tr}([\varphi, [A, \varphi]\varphi - \\ \varphi[A, \varphi]\rho) &= \text{tr}([\varphi, [\varphi, A]]\rho), \end{aligned} \quad (\text{Д1.10})$$

на основу чега следи:

$$\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \text{tr}(A[\varphi, [\varphi, \rho]]) = \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \text{tr}([\varphi, [\varphi, A]]\rho). \quad (\text{Д1.11})$$

На основу израза (Д1.7), (Д1.9) и (Д1.11), једначина (Д1.4) добија следећи облик:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{-i}{\hbar} \text{tr}([A, H]\rho) + \frac{i\gamma}{\hbar} \text{tr}(\{L_z, [\varphi, A]\}\rho) - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \text{tr}([\varphi, [\varphi, A]]\rho). \quad (\text{Д1.12})$$

Како је  $\text{tr}(\rho A) = \langle A \rangle$  израз (Д1.12) постаје:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle [A, H] \rangle + \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, A]\} \rangle - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, A]] \rangle. \quad (\text{Д1.13})$$

Једнакост (Д1.13), која важи за произвољни оператор  $A$ , у даљем раду ће се примењивати за формирање система диференцијалних једначина за прве, друге и моменте вишег реда молекулских пропелера. Извођења се обављају за различите облике оператора  $A$ , за општи случај потенцијала  $V$ , при чему хамилтонијан има облик:

$$H = \frac{L_z^2}{2I} + V. \quad (\text{Д1.14})$$

За  $A = \varphi$ , израз (Д1.13) прелази у облик:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi \rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi, H] \rangle + \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, \varphi]\} \rangle - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, \varphi]] \rangle. \quad (\text{Д1.15})$$

Други и трећи члан десне стране (Д1.15) су једнаки нули, док се први члан, користећи:

$$[H, \varphi] = \frac{\hbar}{i} L_z, \quad (\text{Д1.16})$$

своди на:

$$\frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi, H] \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [H, \varphi] \rangle = \frac{i}{\hbar} \frac{\hbar}{i} \langle L_z \rangle = \frac{1}{I} \langle L_z \rangle, \quad (\text{Д1.17})$$

тако да је:

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi\rangle = \frac{1}{i}\langle L_z\rangle. \quad (\text{Д1.18})$$

За  $A = L_z$  се, на основу (Д1.13), добија израз:

$$\frac{d}{dt}\langle L_z\rangle = \frac{-i}{\hbar}\langle [L_z, H]\rangle + \frac{i\gamma}{\hbar}\langle \{L_z, [\varphi, L_z]\}\rangle - \frac{2i\gamma k_B T}{\hbar^2}\langle [\varphi, [\varphi, L_z]]\rangle. \quad (\text{Д1.19})$$

Први члан десне стране израза (Д1.19) применом:

$$[H, L_z] = i\hbar \frac{dV}{d\varphi}, \quad (\text{Д1.20})$$

прелази у:

$$\frac{-i}{\hbar}\langle [L_z, H]\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [H, L_z]\rangle = \frac{i}{\hbar}i\hbar \langle \frac{dV}{d\varphi}\rangle = -\langle \frac{dV}{d\varphi}\rangle, \quad (\text{Д1.21})$$

док се други члан десне стране (Д1.19) своди на:

$$\frac{i\gamma}{\hbar}\langle \{L_z, [\varphi, L_z]\}\rangle = \frac{i\gamma}{\hbar}\langle L_z[\varphi, L_z] + [\varphi, L_z]L_z\rangle = 2\frac{i\gamma}{\hbar}i\hbar\langle L_z\rangle = -2\gamma\langle L_z\rangle, \quad (\text{Д1.22})$$

а трећи на:

$$-\frac{2i\gamma k_B T}{\hbar^2}\langle [\varphi, [\varphi, L_z]]\rangle = -\frac{2i\gamma k_B T}{\hbar^2}\langle \varphi[\varphi, L_z] - [\varphi, L_z]\varphi\rangle = 0, \quad (\text{Д1.23})$$

тако да је:

$$\frac{d}{dt}\langle L_z\rangle = -\langle V'(\varphi)\rangle - 2\gamma\langle L_z\rangle, \quad (\text{Д1.24})$$

при чему је:

$$V'(\varphi) \equiv dV(\varphi)/d\varphi. \quad (\text{Д1.25})$$

За  $A = \varphi^2$  из израза (Д1.13) следи:

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi^2\rangle = \frac{-i}{\hbar}\langle [\varphi^2, H]\rangle + \frac{i\gamma}{\hbar}\langle \{L_z, [\varphi, \varphi^2]\}\rangle - \frac{2i\gamma k_B T}{\hbar^2}\langle [\varphi, [\varphi, \varphi^2]]\rangle. \quad (\text{Д1.26})$$

Користећи:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B, \quad (\text{Д1.27})$$

и:

$$[H, \varphi] = \frac{\hbar}{i}L_z, \quad (\text{Д1.28})$$

први члан десне стране (Д1.26) се може записати у облику:

$$\frac{-i}{\hbar}\langle [\varphi^2, H]\rangle = \frac{-i}{\hbar}\langle \varphi[\varphi, H] + [\varphi, H]\varphi\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle \varphi \frac{\hbar}{i}L_z + \frac{\hbar}{i}L_z\varphi\rangle = \frac{1}{i}\langle L_z\varphi + \varphi L_z\rangle, \quad (\text{Д1.29})$$

док су други и трећи члан десне стране (Д1.26) једнаки нули, тако да је:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^2 \rangle = \frac{1}{i} \langle L_z \varphi + \varphi L_z \rangle. \quad (Д1.30)$$

За  $A = L_z \varphi + \varphi L_z$ , на основу (Д1.13), добија се израз:

$$\frac{d}{dt} \langle L_z \varphi + \varphi L_z \rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle [L_z \varphi + \varphi L_z, H] \rangle + \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, L_z \varphi + \varphi L_z]\} \rangle - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, L_z \varphi + \varphi L_z]] \rangle. \quad (Д1.31)$$

Први члан десне стране (Д1.31) применом (Д1.20), (Д1.27) и (Д1.28), постаје:

$$\begin{aligned} \frac{-i}{\hbar} \langle [L_z \varphi + \varphi L_z, H] \rangle &= \frac{-i}{\hbar} \langle [L_z \varphi, H] + [\varphi L_z, H] \rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle L_z [\varphi, H] + [L_z, H] \varphi + \\ \varphi [L_z, H] + [\varphi, H] L_z \rangle &= \frac{-i}{\hbar} \langle -L_z \frac{\hbar}{i} L_z - \varphi i \hbar \frac{dV}{dX} - \varphi i \hbar \frac{dV}{dX} - L_z \frac{\hbar}{i} L_z \rangle = \\ \frac{-i}{\hbar} \langle -2L_z \frac{\hbar}{i} L_z - 2\varphi i \hbar \frac{dV}{d\varphi} \rangle &= \frac{2}{i} \langle L_z^2 \rangle - 2 \langle \varphi V'(\varphi) \rangle. \end{aligned} \quad (Д1.32)$$

Применом једнакости:

$$[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C, \quad (Д1.33)$$

други члан десне стране (Д1.31) прелази у:

$$\begin{aligned} \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, L_z \varphi + \varphi L_z]\} \rangle &= \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, L_z \varphi] + [\varphi, \varphi L_z]\} \rangle = \\ \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, L_z \varphi] + [\varphi, \varphi L_z]\} \rangle &= \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, L_z] \varphi + \varphi [\varphi, L_z]\} \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, 2i\hbar \varphi\} \rangle = \\ \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, 2i\hbar \varphi\} \rangle &= -2\gamma \langle L_z \varphi + \varphi L_z \rangle, \end{aligned} \quad (Д1.34)$$

док се за трећи члан добија:

$$\begin{aligned} -\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, L_z \varphi + \varphi L_z]] \rangle &= -\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, L_z \varphi] + [\varphi, \varphi L_z]] \rangle = \\ -\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, L_z] \varphi + \varphi [\varphi, L_z]] \rangle &= -\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, 2i\hbar \varphi] \rangle = 0, \end{aligned} \quad (Д1.35)$$

тако да се (Д1.31) може записати као:

$$\frac{d}{dt} \langle L_z \varphi + \varphi L_z \rangle = \frac{2}{i} \langle L_z^2 \rangle - 2 \langle \varphi V'(\varphi) \rangle - 2\gamma \langle L_z \varphi + \varphi L_z \rangle. \quad (Д1.36)$$

За  $A = L_z^2$ , (Д1.13) је облика:

$$\frac{d}{dt} \langle L_z^2 \rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle [L_z^2, H] \rangle + \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, L_z^2]\} \rangle - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, L_z^2]] \rangle. \quad (Д1.37)$$

За први члан десне стране (Д1.37) се, уз примену израза (Д1.20), добија:

$$\frac{-i}{\hbar} \langle [L_z^2, H] \rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle L_z [L_z, H] + [L_z, H] L_z \rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle -i\hbar L_z \frac{dV}{d\varphi} - i\hbar \frac{dV}{d\varphi} L_z \rangle = -\langle L_z V'(\varphi) + V'(\varphi) L_z \rangle, \quad (\text{Д1.38})$$

док за други члан десне стране (Д1.37) следи:

$$\frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, L_z^2]\} \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, L_z^2]\} \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, 2i\hbar L_z\} \rangle = -4\gamma \langle L_z^2 \rangle, \quad (\text{Д1.39})$$

а за трећи:

$$-\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, L_z^2]] \rangle = -\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, 2i\hbar L_z] \rangle = -\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} 2i\hbar i\hbar = 4I\gamma k_B T, \quad (\text{Д1.40})$$

тако да је:

$$\frac{d}{dt} \langle L_z^2 \rangle = -\langle L_z V'(\varphi) + V'(\varphi) L_z \rangle - 4\gamma \langle L_z^2 \rangle + 4I\gamma k_B T. \quad (\text{Д1.41})$$

До сада изложеним поступцима добијен је следећи систем диференцијалних једначина за прве и друге моменте, за случај произвољног потенцијала  $V$ :

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi(t) \rangle = \frac{1}{I} \langle L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д1.42})$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z(t) \rangle = -\langle V'(\varphi) \rangle - 2\gamma \langle L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д1.43})$$

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^2(t) \rangle = \frac{1}{I} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д1.44})$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle = \frac{2}{I} \langle L_z^2(t) \rangle - 2\langle \varphi(t) V'(\varphi) \rangle - 2\gamma \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д1.45})$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z^2(t) \rangle = -\langle L_z(t) V'(\varphi) + V'(\varphi) L_z(t) \rangle - 4\gamma \langle L_z^2(t) \rangle + 4I\gamma k_B T. \quad (\text{Д1.46})$$

У случају слободног ротатора, односно када је  $V = 0$ , систем једначина (Д1.42) - (Д1.46) постаје:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi(t) \rangle = \frac{1}{I} \langle L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д1.47})$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z(t) \rangle = -2\gamma \langle L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д1.48})$$

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^2(t) \rangle = \frac{1}{I} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д1.49})$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle = \frac{2}{I} \langle L_z^2(t) \rangle - 2\gamma \langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle, \quad (Д1.50)$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z^2(t) \rangle = -4\gamma \langle L_z^2(t) \rangle + 4I\gamma k_B T. \quad (Д1.51)$$

Прве две једначине, (Д1.47) и (Д1.48), формирају независан систем једначина. Решење једначине (Д1.48) је:

$$\langle L_z(t) \rangle = e^{-2\gamma t} \langle L_z(0) \rangle, \quad (Д1.52)$$

на основу чега се, директном интеграцијом (Д1.47), добија:

$$\langle \varphi(t) \rangle = \int \frac{1}{I} e^{-2\gamma t} \langle L_z(0) \rangle = -\frac{1}{2I\gamma} e^{-2\gamma t} \langle L_z(0) \rangle + C, \quad (Д1.53)$$

односно:

$$\langle \varphi(t) \rangle = \langle \varphi(0) \rangle + \frac{1}{2I\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \langle L_z(0) \rangle. \quad (Д1.54)$$

Једначина (Д1.51) је линеарна нехомогена диференцијална једначина првог реда, па је њено решење:

$$\langle L_z^2(t) \rangle = \exp(-4\gamma t) [\langle L_z^2(0) \rangle - Ik_B T + Ik_B T (\exp(4\gamma t))]. \quad (Д1.55)$$

Сменом (Д1.55) у (Д1.50), добија се такође линеарна нехомогена једначина првог реда, чије је решење:

$$\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle = \exp(-2\gamma t) \left[ \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle + \frac{1}{\gamma I} (\langle L_z^2(0) \rangle - Ik_B T) - \frac{1}{\gamma} k_B T - \frac{1}{\gamma I} (\exp(-2\gamma t)) (\langle L_z^2(0) \rangle - Ik_B T) + \frac{1}{\gamma} k_B T \exp(2\gamma t) \right]. \quad (Д1.56)$$

Након смене (Д1.56) у (Д1.49) следи:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^2(t) \rangle = \frac{1}{I} \exp(-2\gamma t) \left[ \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle + \frac{1}{\gamma I} (\langle L_z^2(0) \rangle - Ik_B T) - \frac{1}{\gamma} k_B T - \frac{1}{\gamma I} (\exp(-2\gamma t)) (\langle L_z^2(0) \rangle - Ik_B T) + \frac{1}{\gamma} k_B T \exp(2\gamma t) \right], \quad (Д1.57)$$

одакле се директном интеграцијом добија:

$$\langle \varphi^2(t) \rangle = (\langle \varphi^2(0) \rangle) + \frac{1}{2\gamma I} \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle + \frac{1}{2\gamma^2 I^2} \langle L_z^2(0) \rangle - \frac{k_B T}{\gamma^2 I} - \frac{1}{4\gamma^2 I^2} \langle L_z^2(0) \rangle + \frac{1}{4\gamma^2 I} k_B T - \frac{1}{2\gamma I} \exp(-2\gamma t) \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \exp(-2\gamma t) \frac{1}{2\gamma^2 I^2} \langle L_z^2(0) \rangle + \exp(-2\gamma t) \frac{k_B T}{\gamma^2 I} + \frac{1}{4\gamma^2 I^2} (\exp(-4\gamma t)) \langle L_z^2(0) \rangle - \frac{1}{4\gamma^2 I} (\exp(-4\gamma t)) k_B T + \frac{1}{\gamma I} k_B T t. \quad (Д1.58)$$



Након решавања система једначина (Д1.47) - (Д1.51) може се приступити израчунавању стандардних одступања и корелационе функције.

Из (Д1.54) следи:

$$\langle \varphi(t) \rangle^2 = \langle \varphi(0) \rangle^2 + \frac{1}{4\gamma^2 I^2} (1 - 2e^{-2\gamma t} + e^{-4\gamma t}) \langle L_z(0) \rangle^2 + 2\langle \varphi(0) \rangle \frac{1}{2\gamma I} (1 - e^{-2\gamma t}) \langle L_z(0) \rangle. \quad (Д1.59)$$

На основу (Д1.58) и (Д1.59) за квадрат стандардног одступања угла:

$$(\Delta\varphi(t))^2 = \langle \varphi^2(t) \rangle - \langle \varphi(t) \rangle^2, \quad (Д1.60)$$

следи:

$$\begin{aligned} (\Delta\varphi(t))^2 &= (\Delta\varphi(0))^2 + \frac{1}{2\gamma I} \langle L_z(0) \varphi(0) + \varphi(0) L_z(0) \rangle + \frac{1}{2\gamma^2 I^2} \langle L_z^2(0) \rangle - \frac{k_B T}{\gamma^2 I} - \\ &\frac{1}{4\gamma^2 I^2} \langle L_z^2(0) \rangle + \frac{1}{4\gamma^2 I} k_B T - \frac{1}{2\gamma I} \exp(-2\gamma t) \langle L_z(0) \varphi(0) + \varphi(0) L_z(0) \rangle - \\ &\exp(-2\gamma t) \frac{1}{2\gamma^2 I^2} \langle L_z^2(0) \rangle + \exp(-2\gamma t) \frac{k_B T}{\gamma^2 I} + \frac{1}{4\gamma^2 I^2} (\exp(-4\gamma t)) \langle L_z^2(0) \rangle - \\ &\frac{1}{4\gamma^2 I} (\exp(-4\gamma t)) k_B T + \frac{1}{\gamma I} k_B T t - \langle \varphi(0) \rangle^2 - \frac{1}{4\gamma^2 I^2} (1 - 2e^{-2\gamma t} + e^{-4\gamma t}) \langle L_z(0) \rangle^2 - \\ &2\langle \varphi(0) \rangle \frac{1}{2\gamma I} (1 - e^{-2\gamma t}) \langle L_z(0) \rangle. \end{aligned} \quad (Д1.61)$$

Након сређивања и узимања у обзир да је:

$$\sigma_{\varphi L}(0) = \langle \{L_z(0), \varphi(0)\} \rangle - 2\langle L_z(0) \rangle \langle \varphi(0) \rangle, \quad (Д1.62)$$

може се записати:

$$\begin{aligned} (\Delta\varphi(t))^2 &= (\Delta\varphi(0))^2 + \frac{1}{2\gamma I} \sigma_{\varphi L}(0) - \frac{\exp(-2\gamma t)}{2\gamma I} \sigma_{\varphi L}(0) + \frac{1}{4\gamma^2 I^2} \sigma_L^2(0) - \frac{k_B T}{\gamma^2 I} + \frac{1}{4\gamma^2 I} k_B T - \\ &\frac{e^{-2\gamma t} \sigma_L^2(0)}{2\gamma^2 I^2} + \exp(-2\gamma t) \frac{k_B T}{\gamma^2 I} + \frac{e^{-4\gamma t}}{4\gamma^2 I^2} \sigma_L^2(0) - \frac{1}{4\gamma^2 I} (\exp(-4\gamma t)) k_B T + \frac{1}{\gamma I} k_B T t = \\ &\sigma_\varphi^2(0) + \left(\frac{1 - e^{-2\gamma t}}{2\gamma}\right)^2 \frac{\sigma_L^2(0)}{I^2} + \frac{1 - e^{-2\gamma t}}{2I\gamma} \sigma_{\varphi L}(0) + \frac{k_B T}{\gamma^2 I} \left[ \gamma t - (1 - e^{-2\gamma t}) + \frac{1 - e^{-4\gamma t}}{4} \right]. \end{aligned} \quad (Д1.63)$$

Сменом (Д1.55) и (Д1.52) у:

$$(\Delta L_z(t))^2 = \langle L_z^2(t) \rangle - \langle L_z(t) \rangle^2, \quad (Д1.64)$$

квадрат стандардног одступања момента импулса постаје:

$$\begin{aligned} (\Delta L_z(t))^2 &= \exp(-4\gamma t) [\langle L_z^2(0) \rangle - I k_B T + I k_B T (\exp(4\gamma t))] - \exp(-4\gamma t) \langle L_z(0) \rangle^2 = \\ &\exp(-4\gamma t) \langle L_z^2(0) \rangle - \exp(-4\gamma t) I k_B T + I k_B T - e^{-4\gamma t} \langle L_z(0) \rangle^2 = \exp(-4\gamma t) (\langle L_z^2(0) \rangle - \\ &\langle L_z(0) \rangle^2) + I k_B T (1 - \exp(-4\gamma t)) = e^{-4\gamma t} (\Delta L_z(0))^2 + I k_B T (1 - e^{-4\gamma t}). \end{aligned} \quad (Д1.65)$$

За корелациону функцију:

$$\sigma_{\varphi L}(t) = \langle \{L_z(t), \varphi(t)\} \rangle - 2\langle L_z(t) \rangle \langle \varphi(t) \rangle, \quad (Д1.66)$$

сменом (Д1.52) (Д1.54) (Д1.52) у (Д1.66) следи:

$$\begin{aligned} \sigma_{\varphi L}(t) = & \exp(-2\gamma t) \left[ \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle + \frac{1}{\gamma I} (\langle L_z^2(0) \rangle - I k_B T) - \frac{1}{\gamma} k_B T - \right. \\ & \left. \frac{1}{\gamma I} (\exp(-2\gamma t)) (\langle L_z^2(0) \rangle - I k_B T) + \frac{1}{\gamma} k_B T \exp(2\gamma t) \right] - 2e^{-2\gamma t} \langle L_z(0) \rangle \left( \langle \varphi(0) \rangle + \frac{1}{2I\gamma} (1 - \right. \\ & \left. e^{-2\gamma t}) \langle L_z(0) \rangle \right) = \exp(-2\gamma t) \left[ \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - 2\langle \varphi(0) \rangle \langle L_z(0) \rangle + \right. \\ & \left. \frac{1}{\gamma I} (\langle L_z^2(0) \rangle - \langle L_z(0) \rangle^2 - I k_B T) - \frac{1}{\gamma} k_B T - \frac{1}{\gamma I} (\exp(-2\gamma t)) (\langle L_z^2(0) \rangle - \langle L_z(0) \rangle^2 - I k_B T) + \right. \\ & \left. \frac{1}{\gamma} k_B T \exp(2\gamma t) \right] = \exp(-2\gamma t) \sigma_{\varphi L}(0) + \frac{(1 - e^{-2\gamma t})}{\gamma I} e^{-2\gamma t} \sigma_L^2(0) + \frac{1}{\gamma} k_B T (1 - e^{-2\gamma t})^2. \end{aligned} \quad (Д1.67)$$

У такозваном декохеренцијском лимиту други члан једначине (Д1.1) се може занемарити у односу на трећи, тако да се поменути једначина може написати у следећем облику:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} [\varphi, [\varphi, \rho]], \quad (Д1.68)$$

на основу чега је очигледно да се израз (Д1.13) своди на:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle [A, \varphi] \rangle - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, A]] \rangle. \quad (Д1.69)$$

Једначине за прве и друге моменте угла и момента импулса се могу добити из једначина (Д1.42) до (Д1.46), одбацивањем чланова који потичу од поменутог изостављеног члана десне стране (Д1.13).

За  $A = \varphi$ , као и за  $A = \varphi^2$ , поменути чланови одговарајућих једначина се сведе на нулу, тако да се и у случају декохеренцијског лимита добијају исте једначине, дате изразима (Д1.18) и (Д1.30).

За  $A = L_z$ ,  $A = L_z\varphi + \varphi L_z$  и  $A = L_z^2$ , одговарајуће једначине се добијају након одбацивања поменутих чланова, датих изразима (Д1.22), (Д1.34) и (Д1.39), тако да се добија следећи систем једначина:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi(t) \rangle = \frac{1}{I} \langle L_z(t) \rangle, \quad (Д1.70)$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z(t) \rangle = -\langle V'(\varphi) \rangle, \quad (\text{Д1.71})$$

$$\frac{d}{dt}\langle \varphi^2(t) \rangle = \frac{1}{I}\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д1.72})$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle = \frac{2}{I}\langle L_z^2(t) \rangle - 2\langle \varphi(t)V'(\varphi) \rangle, \quad (\text{Д1.73})$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z^2(t) \rangle = -\langle L_z(t)V'(\varphi) + V'(\varphi)L_z(t) \rangle + 4I\gamma k_B T. \quad (\text{Д1.74})$$

За случај  $V = 0$ , односно за слободни ротатор, систем једначина (Д1.70) - (Д1.74) у случају декохеренцијског лимита постаје:

$$\frac{d}{dt}\langle \varphi(t) \rangle = \frac{1}{I}\langle L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д1.75})$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z(t) \rangle = 0, \quad (\text{Д1.76})$$

$$\frac{d}{dt}\langle \varphi^2(t) \rangle = \frac{1}{I}\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д1.77})$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle = \frac{2}{I}\langle L_z^2(t) \rangle, \quad (\text{Д1.78})$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z^2(t) \rangle = 4I\gamma k_B T, \quad (\text{Д1.79})$$

при чему се лако уочава да су решења:

$$\langle L_z(t) \rangle = \langle L_z(0) \rangle, \quad (\text{Д1.80})$$

$$\langle \varphi(t) \rangle = \langle \varphi(0) \rangle + \frac{\langle L_z(0) \rangle}{I} t, \quad (\text{Д1.81})$$

$$\langle L_z^2(t) \rangle = \langle L_z^2(0) \rangle + 4I\gamma k_B T t, \quad (\text{Д1.82})$$

$$\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle = \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle + 2\frac{\langle L_z^2(0) \rangle t}{I} + 4\gamma k_B T \frac{t^2}{2}, \quad (\text{Д1.83})$$

$$\langle \varphi^2(t) \rangle = \langle \varphi^2(0) \rangle + \frac{t}{I}\langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle + \frac{\langle L_z^2(0) \rangle}{I^2} t^2 + 4\frac{1}{I}\gamma k_B T \frac{t^3}{3}. \quad (\text{Д1.84})$$

Квадрат стандардног одступања угла је у овом случају облика:

$$\begin{aligned}
\sigma_\varphi^2(t) &= \langle \varphi^2(t) \rangle - \langle \varphi(t) \rangle^2 = \langle \varphi^2(0) \rangle + \frac{t}{I} \langle L_z(0) \varphi(0) + \varphi(0) L_z(0) \rangle + \frac{\langle L_z^2(0) \rangle}{I^2} t^2 + \\
&4 \frac{1}{I} \gamma k_B T \frac{t^3}{3} - \langle \varphi(0) \rangle^2 - \frac{\langle L_z(0) \rangle^2}{I^2} t^2 - 2 \langle \varphi(0) \rangle \frac{\langle L_z(0) \rangle}{I} t = \langle \varphi^2(0) \rangle - \langle \varphi(0) \rangle^2 + \frac{t^2}{I^2} (\langle L_z^2(0) \rangle - \\
&\langle L_z(0) \rangle^2) + \frac{t}{I} \langle L_z(0) \varphi(0) + \varphi(0) L_z(0) \rangle + 4 \frac{1}{I} \gamma k_B T \frac{t^3}{3} - 2 \langle \varphi(0) \rangle \frac{\langle L_z(0) \rangle}{I} t = \sigma_\varphi^2(0) + \\
&\frac{t^2}{I^2} \sigma_L^2(0) + \frac{t}{I} \sigma_{\varphi L}(0) + 4 \frac{1}{I} \gamma k_B T \frac{t^3}{3}, \tag{Д1.85}
\end{aligned}$$

док се за квадрат стандардног одступања момента импулса добија:

$$\sigma_L^2(t) = \langle L_z^2(t) \rangle - \langle L_z(t) \rangle^2 = \langle L_z^2(0) \rangle - \langle L_z(0) \rangle^2 + 4I\gamma k_B T t = \sigma_L^2(0) + 4I\gamma k_B T t, \tag{Д1.86}$$

а за корелациону функцију:

$$\begin{aligned}
\sigma_{\varphi L}(t) &= \langle \{L_z(t), \varphi(t)\} \rangle - 2 \langle L_z(t) \rangle \langle \varphi(t) \rangle = \langle L_z(0) \rangle \left( \langle \varphi(0) \rangle + \frac{\langle L_z(0) \rangle}{I} t \right) + \left( \langle \varphi(0) \rangle + \right. \\
&\left. \frac{\langle L_z(0) \rangle}{I} t \right) \langle L_z(0) \rangle - 2 \langle L_z(0) \rangle \left( \langle \varphi(0) \rangle + \frac{\langle L_z(0) \rangle}{I} t \right) = \sigma_{\varphi L}(0). \tag{Д1.87}
\end{aligned}$$

## Додатак 2

За случај хармонијског потенцијала потребно је решити следећи систем диференцијалних једначина:

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi(t)\rangle = \frac{1}{I}\langle L_z(t)\rangle, \quad (\text{Д2.1})$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z(t)\rangle = -I\omega^2\langle\varphi(t)\rangle - 2\gamma\langle L_z(t)\rangle, \quad (\text{Д2.2})$$

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi^2(t)\rangle = \frac{1}{I}\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t)\rangle, \quad (\text{Д2.3})$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t)\rangle = -2I\omega^2\langle\varphi^2(t)\rangle - 2\gamma\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t)\rangle + \frac{2}{I}\langle L_z^2(t)\rangle, \quad (\text{Д2.4})$$

$$\frac{d}{dt}\langle L_z^2(t)\rangle = -I\omega^2\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t)\rangle - 4\gamma\langle L_z^2(t)\rangle + 4I\gamma k_B T. \quad (\text{Д2.5})$$

Прве две једначине, (Д2.1) и (Д2.2), решавају се као независан систем, уз примену апроксимације  $\frac{\gamma}{\omega} \rightarrow 0$ . Диференцирањем једначине (Д2.2) добија се:

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle L_z(t)\rangle = -I\omega^2 \frac{d\langle\varphi(t)\rangle}{dt} - 2\gamma \frac{d}{dt}\langle L_z(t)\rangle, \quad (\text{Д2.6})$$

односно:

$$\frac{d^2\langle L_z(t)\rangle}{dt^2} + 2\gamma \frac{d\langle L_z(t)\rangle}{dt} + I\omega^2 \frac{1}{I} L_z(t) = 0, \quad (\text{Д2.7})$$

хомогена диференцијална једначина другог реда са константним коефицијентима, чија је карактеристична једначина:

$$k^2 + 2\gamma k + \omega^2 = 0, \quad (\text{Д2.8})$$

док су њена решења, уз узимање у обзир апроксимације  $\frac{\gamma}{\omega} \rightarrow 0$ :

$$k_{1,2} = -\gamma \pm i\omega, \quad (\text{Д2.9})$$

на основу чега је опште решење једначине (Д2.7):

$$\langle L_z(t)\rangle = e^{-\gamma t}(C_1 \cos\omega t + C_2 \sin\omega t), \quad (\text{Д2.10})$$

при чему је:

$$C_1 = \langle L_z(0) \rangle. \quad (\text{Д2.11})$$

На основу (Д2.2), (Д2.10) и (Д2.11) следи:

$$-\gamma e^{-\gamma t} (L_z(0) \cos \omega t + C_2 \sin \omega t) + \omega e^{-\gamma t} (-L_z(0) \sin \omega t + C_2 \cos \omega t) = -I \omega^2 \langle \varphi(t) \rangle - 2\gamma \langle L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д2.12})$$

и:

$$\langle \varphi(t) \rangle = \frac{\gamma}{I \omega^2} e^{-\gamma t} (L_z(0) \cos \omega t + C_2 \sin \omega t) - \frac{\omega}{I \omega^2} e^{-\gamma t} (-L_z(0) \sin \omega t + C_2 \cos \omega t) - \frac{2\gamma \langle L_z(t) \rangle}{I \omega^2}, \quad (\text{Д2.13})$$

што се, након примене апроксимације  $\frac{\gamma}{\omega} \rightarrow 0$ , своди на:

$$\langle \varphi(t) \rangle = \frac{1}{I \omega} e^{-\gamma t} (L_z(0) \sin \omega t - C_2 \cos \omega t), \quad (\text{Д2.14})$$

из чега се лако одређује константа  $C_2$ :

$$C_2 = -I \omega \langle \varphi(0) \rangle, \quad (\text{Д2.15})$$

тако да је:

$$\langle \varphi(t) \rangle = \frac{1}{I \omega} e^{-\gamma t} (\langle L_z(0) \rangle \sin \omega t + I \omega \langle \varphi(0) \rangle \cos \omega t), \quad (\text{Д2.16})$$

и:

$$\langle L_z(t) \rangle = e^{-\gamma t} (\langle L_z(0) \rangle \cos \omega t - I \omega \langle \varphi(0) \rangle \sin \omega t). \quad (\text{Д2.17})$$

Једначине (Д2.3) - (Д2.5) сачињавају систем нехомогених линеарних диференцијалних једначина првог реда. За решавање поменутог система се у овом раду примењује стандардни матрични метод (Nagle et al 2011). Након увођења ознака:

$$x(t) \equiv \langle \varphi^2(t) \rangle, \quad (\text{Д2.18})$$

$$y(t) \equiv \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д2.19})$$

$$z(t) \equiv \langle L_z^2(t) \rangle, \quad (\text{Д2.20})$$

$$D \equiv 4I \gamma k_B T, \quad (\text{Д2.21})$$

где је  $D$  нехомогени члан, тако да је вектор решења:

$$X = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (Д2.22)$$

док је матрица система:

$$M = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{I} & 0 \\ -2I\omega^2 & -2\gamma & \frac{2}{I} \\ 0 & -I\omega^2 & -4\gamma \end{pmatrix}, \quad (Д2.23)$$

при чему се нехомогени део представља као:

$$F = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ D \end{pmatrix}, \quad (Д2.24)$$

систем једначина (Д2.3) - (Д2.5) може да се напише у следећој матричној форми:

$$\frac{d}{dt}X = MX + F. \quad (Д2.25)$$

Да би се решио овај нехомогени систем најпре је потребно решити одговарајући хомогени систем:

$$\frac{d}{dt}X = MX. \quad (Д2.26)$$

Решавањем карактеристичне једначине:

$$\det(M - \lambda I) = 0, \quad (Д2.27)$$

односно:

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda & \frac{1}{I} & 0 \\ -2I\omega^2 & -2\gamma - \lambda & \frac{2}{I} \\ 0 & -I\omega^2 & -4\gamma - \lambda \end{pmatrix} = 0, \quad (Д2.28)$$

добија се следећа једначина:

$$-\lambda \left( (-2\gamma - \lambda)(-4\gamma - \lambda) - \left(\frac{2}{I}\right)(-I\omega^2) \right) - \frac{1}{I}(-2I\omega^2)(-4\gamma - \lambda) = 0, \quad (Д2.29)$$

која се једноставним алгебарским трансформацијама своди на:

$$(\lambda + 2\gamma)(\lambda^2 + 4\lambda\gamma + 4\omega^2) = 0. \quad (Д2.30)$$

Решавањем једначине (Д2.30) добијају се следеће својствене вредности:

$$\left\{ -2\gamma, -2\left(\gamma - \sqrt{-\omega^2 + \gamma^2}\right), -2\left(\gamma + \sqrt{-\omega^2 + \gamma^2}\right) \right\}, \quad (Д2.31)$$

за које, применом услова  $\omega \gg \gamma$ , добијамо следеће приближне вредности:

$$\{-2\gamma, -2(\gamma - i\omega), -2(\gamma + i\omega)\}. \quad (Д2.32)$$

Својствене векторе система  $v$  налазимо решавањем једначине:

$$(M - \lambda I)v = 0, \quad (Д2.33)$$

за сваку својствену вредност  $\lambda$ .

За  $\lambda = -2\gamma$  се добија својствени вектор:

$$v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{I^2 \omega^2} \\ -\frac{2\gamma}{I \omega^2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (Д2.34)$$

за  $\lambda = -2(\gamma - i\omega)$  својствени вектор је:

$$v_2 = \begin{pmatrix} -\frac{\omega^2 - 2i\gamma\omega}{I^2 \omega^4} \\ -\frac{2(\gamma + i\omega)}{I \omega^2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (Д2.35)$$

док је за  $\lambda = -2(\gamma + i\omega)$  својствени вектор облика:

$$v_3 = \begin{pmatrix} -\frac{\omega^2 + 2i\gamma\omega}{I^2 \omega^4} \\ -\frac{2(\gamma - i\omega)}{I \omega^2} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (Д2.36)$$

Ако матрица  $M$  система диференцијалних једначина (Д2.26) има линеарно независне својствене векторе  $v_1, v_2, \dots, v_n$ , којима одговарају својствене вредности  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ , онда је опште решење система једначина дато са:

$$x(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} v_1 + c_2 e^{\lambda_2 t} v_2 + \dots + c_n e^{\lambda_n t} v_n, \quad (Д2.37)$$

где су  $c_1, c_2, \dots, c_n$  произвољне константе (Nagle et al 2011). За систем (Д2.3) - (Д2.5), на основу нађених својствених вредности и својствених вектора, можемо написати решење у облику:

$$X(t) = c_1 e^{-2\gamma t} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{I^2 \omega^2} \\ -\frac{2\gamma}{I \omega^2} \\ 1 \end{pmatrix} + c_2 e^{-2(\gamma - i\omega)t} \begin{pmatrix} -\frac{\omega^2 - 2i\gamma\omega}{I^2 \omega^4} \\ -\frac{2(\gamma + i\omega)}{I \omega^2} \\ 1 \end{pmatrix} + c_3 e^{-2(\gamma + i\omega)t} \begin{pmatrix} -\frac{\omega^2 + 2i\gamma\omega}{I^2 \omega^4} \\ -\frac{2(\gamma - i\omega)}{I \omega^2} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (Д2.38)$$



тако да се фундаментална матрица система  $X_f$ , односно матрица чији су елементи решења система једначина, може записати у облику:

$$X_f = \begin{pmatrix} \frac{e^{-2\gamma t}}{I^2 \omega^2} & -\frac{(-2i\gamma\omega + \omega^2)e^{-2(\gamma-i)t}}{I^2 \omega^4} & -\frac{(2i\gamma\omega + \omega^2)e^{-2(\gamma+i)t}}{I^2 \omega^4} \\ -\frac{2\gamma e^{-2\gamma t}}{I\omega^2} & -\frac{2(\gamma+i\omega)e^{-2(\gamma-i\omega)t}}{I\omega^2} & -\frac{2(\gamma-i\omega)e^{-2(\gamma+i\omega)t}}{I\omega^2} \\ e^{-2\gamma t} & e^{-2(\gamma-i\omega)t} & e^{-2(\gamma+i\omega)t} \end{pmatrix}, \quad (Д2.39)$$

при чему је опште решење дато као  $X_f(t)c$ , где је  $c$  тродимензионални вектор чији су елементи константе  $C_1, C_2, C_3$ .

Након налажења општег решења одговарајућег хомогеног система приступа се налажењу решења нехомогеног система и то применом методе варијације константи. Претпоставимо да се партикуларно решење нехомогеног система може записати у облику:

$$x_p(t) = X_f(t)\eta(t), \quad (Д2.40)$$

где је  $\eta(t)$  нека непозната функција од  $t$ . Из:

$$x_p'(t) = X_f(t)\eta'(t) + X_f'(t)\eta(t), \quad (Д2.41)$$

следи:

$$X_f(t)\eta'(t) = F, \quad (Д2.42)$$

односно:

$$\begin{pmatrix} \frac{e^{-2\gamma t}}{I^2 \omega^2} & -\frac{(-2i\gamma\omega + c^2)e^{-2(\gamma-i)t}}{I^2 \omega^4} & -\frac{(2i\gamma\omega + c^2)e^{-2(\gamma+i)t}}{I^2 \omega^4} \\ -\frac{2\gamma e^{-2\gamma t}}{I\omega^2} & -\frac{2(\gamma+i\omega)e^{-2(\gamma-i\omega)t}}{I\omega^2} & -\frac{2(\gamma-i\omega)e^{-2(\gamma+i\omega)t}}{I\omega^2} \\ e^{-2\gamma t} & e^{-2(\gamma-i\omega)t} & e^{-2(\gamma+i\omega)t} \end{pmatrix} \eta'(t) = F. \quad (Д2.43)$$

Непознату функцију  $\eta(t)$  можемо одредити уз помоћ израза:

$$\eta(t) = \int X_f^{-1}(t)F(t)dt, \quad (Д2.44)$$

на основу чега се, након налажења матрице  $X_f^{-1}(t)$  и интеграције, добија:

$$\eta(t) = \begin{pmatrix} \frac{De^{2\gamma t}}{4\gamma} \\ \frac{(2i\gamma+\omega)De^{2(\gamma-i\omega)t}}{8(\gamma-i\omega)\omega} \\ \frac{(-2i\gamma+\omega)De^{2(\gamma+i\omega)t}}{8(\gamma+i\omega)\omega} \end{pmatrix}. \quad (Д2.45)$$

Након налажења партикуларног решења  $x_p(t)$ , опште решење нехомогеног система једначина се налази као:

$$x(t) = x_h(t) + x_p(t) = X_f(t)c + X_f(t)\eta(t) = X_f(t)(c + \eta(t)). \quad (Д2.46)$$

На основу (Д2.46) опште решење нехомогеног система (Д2.3) - (Д2.5) је:

$$x(t) = \left( A + \frac{De^{2\gamma t}}{4\gamma} \right) \frac{e^{-2\gamma t}}{I^2\omega^2} - \left( B + \frac{(2i\gamma+\omega)De^{2(\gamma-i\omega)t}}{8(\gamma-i\omega)\omega} \right) \frac{(-2i\gamma+\omega+\omega^2)e^{-2(\gamma-i\omega)t}}{I^2\omega^4} - \left( C + \frac{(-2i\gamma+\omega)De^{2(\gamma+i\omega)t}}{8(\gamma+i\omega)\omega} \right) \frac{(2i\gamma+\omega+\omega^2)e^{-2(\gamma+i\omega)t}}{I^2\omega^4}, \quad (Д2.47)$$

$$y(t) = -\left( A + \frac{De^{2\gamma t}}{4\gamma} \right) \frac{2\gamma e^{-2\gamma t}}{I\omega^2} - \left( B + \frac{(2i\gamma+\omega)De^{2(\gamma-i\omega)t}}{8(\gamma-i\omega)\omega} \right) \frac{2(\gamma+i\omega)e^{-2(\gamma-i\omega)t}}{I\omega^2} - \left( C + \frac{(-2i\gamma+\omega)De^{2(\gamma+i\omega)t}}{8(\gamma+i\omega)\omega} \right) \frac{2(\gamma-i\omega)e^{-2(\gamma+i\omega)t}}{I\omega^2}, \quad (Д2.48)$$

$$z(t) = \left( A + \frac{De^{2\gamma t}}{4\gamma} \right) e^{-2\gamma t} + \left( B + \frac{(2i\gamma+\omega)De^{2(\gamma-i\omega)t}}{8(\gamma-i\omega)\omega} \right) e^{-2(\gamma-i\omega)t} + \left( C + \frac{(-2i\gamma+\omega)De^{2(\gamma+i\omega)t}}{8(\gamma+i\omega)\omega} \right) e^{-2(\gamma+i\omega)t}, \quad (Д2.49)$$

где су  $A$ ,  $B$  и  $C$  интеграционе константе. Увођењем следећих ознака за почетне вредности:

$$x_0 = x(t=0), \quad (Д2.50)$$

$$y_0 = y(t=0), \quad (Д2.51)$$

$$z_0 = z(t=0), \quad (Д2.52)$$

из (Д2.47) - (Д2.49), за  $t=0$ , добијамо следећи систем једначина:

$$x_0 = \left( A + \frac{D}{4\gamma} \right) \frac{1}{I^2\omega^2} - \left( B + \frac{(2i\gamma+\omega)D}{8(\gamma-i\omega)\omega} \right) \frac{(-2i\gamma+\omega+\omega^2)}{I^2\omega^4} - \left( C + \frac{(-2i\gamma+\omega)D}{8(\gamma+i\omega)\omega} \right) \frac{(2i\gamma+\omega+\omega^2)}{I^2\omega^4}, \quad (Д2.53)$$

$$y_0 = -\left(A + \frac{D}{4\gamma}\right) \frac{2\gamma}{I\omega^2} - \left(B + \frac{(2i\gamma+\omega)D}{8(\gamma-i\omega)c}\right) \frac{2(\gamma+i\omega)}{I\omega^2} - \left(C + \frac{(-2i\gamma+\omega)D}{8(\gamma+i\omega)\omega}\right) \frac{2(\gamma-i\omega)}{I\omega^2}, \quad (Д2.54)$$

$$z_0 = \left(A + \frac{D}{4\gamma}\right) + \left(B + \frac{(2i\gamma+\omega)D}{8(\gamma-i\omega)\omega}\right) + \left(C + \frac{(-2i\gamma+\omega)D}{8(\gamma+i\omega)\omega}\right), \quad (Д2.55)$$

који се, уз примену  $\frac{\gamma}{\omega} \rightarrow 0$ , решава по константама  $A, B, C$ :

$$A = -\frac{D}{4\gamma} + \frac{1}{2}I^2\omega^2x_0 + \frac{I\gamma y_0}{2} + \frac{z_0}{2}, \quad (Д2.56)$$

$$B = \frac{(\gamma-i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma-i\omega)\omega^2Iy_0+2(2i\gamma+\omega)\omega z_0}{8\omega^2}, \quad (Д2.57)$$

$$C = B^* = \frac{(\gamma+i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma+i\omega)\omega^2Iy_0+2(-2i\gamma+\omega)\omega z_0}{8\omega^2}. \quad (Д2.58)$$

Сменом добијених константи у (Д2.47) - (Д2.49) добијамо следеће изразе за  $x(t)$ ,  $y(t)$  и  $z(t)$ :

$$\begin{aligned} x(t) = & \left(-\frac{D}{4\gamma} + \frac{1}{2}I^2\omega^2x_0 + \frac{I\gamma y_0}{2} + \frac{z_0}{2} + \frac{De^{2\gamma t}}{4\gamma}\right) \frac{e^{-2\gamma t}}{I^2\omega^2} - \left(\frac{(\gamma-i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma-i\omega)\omega^2Iy_0+2(2i\gamma+\omega)\omega z_0}{8\omega^2} + \right. \\ & \left. \frac{(2i\gamma+\omega)De^{2(\gamma-i\omega)t}}{8(\gamma-i\omega)\omega}\right) \frac{(-2i\gamma+\omega^2)e^{-2(\gamma-i\omega)t}}{I^2\omega^4} - \left(\frac{(\gamma+i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma+i\omega)\omega^2Iy_0+2(-2i\gamma+\omega)\omega z_0}{8\omega^2} + \right. \\ & \left. \frac{(-2i\gamma+\omega)De^{2(\gamma+i\omega)t}}{8(\gamma+i\omega)\omega}\right) \frac{(2i\gamma+\omega^2)e^{-2(\gamma+i\omega)t}}{I^2\omega^4}, \quad (Д2.59) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y(t) = & -\left(-\frac{D}{4\gamma} + \frac{1}{2}I^2\omega^2x_0 + \frac{I\gamma y_0}{2} + \frac{z_0}{2} + \frac{De^{2\gamma t}}{4\gamma}\right) \frac{2\gamma e^{-2\gamma t}}{I\omega^2} - \\ & \left(\frac{(\gamma-i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma-i\omega)\omega^2Iy_0+2(2i\gamma+\omega)\omega z_0}{8\omega^2} + \frac{(2i\gamma+\omega)De^{2(\gamma-i\omega)t}}{8(\gamma-i\omega)c}\right) \frac{2(\gamma+i\omega)e^{-2(\gamma-i\omega)t}}{I\omega^2} - \\ & \left(\frac{(\gamma+i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma+i\omega)\omega^2Iy_0+2(-2i\gamma+\omega)\omega z_0}{8\omega^2} + \frac{(-2i\gamma+\omega)De^{2(\gamma+i\omega)t}}{8(\gamma+i\omega)\omega}\right) \frac{2(\gamma-i\omega)e^{-2(\gamma+i\omega)t}}{I\omega^2}, \quad (Д2.60) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} z(t) = & \left(-\frac{D}{4\gamma} + \frac{1}{2}I^2\omega^2x_0 + \frac{I\gamma y_0}{2} + \frac{z_0}{2} + \frac{De^{2\gamma t}}{4\gamma}\right) e^{-2\gamma t} + \left(\frac{(\gamma-i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma-i\omega)\omega^2Iy_0+2(2i\gamma+\omega)\omega z_0}{8\omega^2} + \right. \\ & \left. \frac{(2i\gamma+\omega)De^{2(\gamma-i\omega)t}}{8(\gamma-i\omega)\omega}\right) e^{-2(\gamma-i\omega)t} + \\ & \left(\frac{(\gamma+i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma+i\omega)\omega^2Iy_0+2(-2i\gamma+\omega)\omega z_0}{8\omega^2} + \frac{(-2i\gamma+\omega)De^{2(\gamma+i\omega)t}}{8(\gamma+i\omega)\omega}\right) e^{-2(\gamma+i\omega)t}. \quad (Д2.61) \end{aligned}$$

Изрази (Д2.59) - (Д2.61), који представљају решења система (Д2.3) - (Д2.5), су сложени, тако да их је, пре израчунавања стандардних одступања и корелационе

функције, потребно поједноставити одговарајућим алгебарским трансформацијама. Најпре се приступа сређивању израза за  $x(t)$ :

$$\begin{aligned}
 x(t) = & e^{-2\gamma t} \left( \left( -\frac{D}{4\gamma} + \frac{1}{2} I^2 \omega^2 x_0 + \frac{I\gamma y_0}{2} + \frac{z_0}{2} \right) \frac{1}{I^2 \omega^2} - \right. \\
 & \frac{(\gamma-i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma-i\omega)I\omega^2y_0+2(\omega+2i\gamma)\omega z_0}{8\omega^2} \frac{(-2i\gamma\omega+\omega^2)e^{2i\omega t}}{I^2\omega^4} - \\
 & \left. \frac{(\gamma+i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma+i\omega)I\omega^2y_0+2(\omega-2i\gamma)\omega z_0}{8\omega^2} \frac{(2i\gamma\omega+\omega^2)e^{-2i\omega t}}{I^2\omega^4} \right) - \frac{\gamma D}{4I^2\omega^4} + \frac{D}{4I^2\omega^2\gamma}, \quad (Д2.62)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 x(t) = & e^{-2\gamma t} \left( -\frac{D}{4I^2\omega^2\gamma} + \frac{1}{2} x_0 + \frac{I\gamma y_0}{2I^2\omega^2} + \frac{z_0}{2I^2\omega^2} - \right. \\
 & \frac{(\gamma-i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma-i\omega)I\omega^2y_0+2(\omega+2i\gamma)\omega z_0}{8I^2\omega^5} (-2i\gamma+\omega)e^{2i\omega t} - \\
 & \left. \frac{(\gamma+i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma+i\omega)I\omega^2y_0+2(\omega-2i\gamma)\omega z_0}{8I^2\omega^5} (2i\gamma+\omega)e^{-2i\omega t} \right) - \frac{\gamma D}{4I^2\omega^4} + \frac{D}{4I^2\omega^2\gamma}, \quad (Д2.63)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 x(t) = & e^{-2\gamma t} \left( D \left( -\frac{1}{4I^2\omega^2\gamma} - \frac{(\gamma-i\omega)}{8I^2\omega^5} (-2i\gamma+\omega)e^{2i\omega t} - \frac{(\gamma+i\omega)}{8I^2\omega^5} (2i\gamma+\omega)e^{-2i\omega t} \right) + \right. \\
 & x_0 \left( \frac{1}{2} + \frac{2I^2\omega^4}{8I^2\omega^5} (-2i\gamma+\omega)e^{2i\omega t} + \frac{2I^2\omega^4}{8I^2\omega^5} (2i\gamma+\omega)e^{-2i\omega t} \right) + \\
 & y_0 \left( \frac{I\gamma}{2I^2\omega^2} + \frac{2(\gamma-i\omega)I\omega^2}{8I^2\omega^5} (-2i\gamma+\omega)e^{2i\omega t} + \frac{2(\gamma+i\omega)I\omega^2}{8I^2\omega^5} (2i\gamma+\omega)e^{-2i\omega t} \right) + z_0 \left( \frac{1}{2I^2\omega^2} - \right. \\
 & \left. \frac{2(\omega+2i\gamma)\omega}{8I^2\omega^5} (-2i\gamma+\omega)e^{2i\omega t} - \frac{2(\omega-2i\gamma)\omega}{8I^2\omega^5} (2i\gamma+\omega)e^{-2i\omega t} \right) \left. \right) - \frac{\gamma D}{4I^2\omega^4} + \frac{D}{4I^2\omega^2\gamma}, \quad (Д2.64)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 x(t) = & e^{-2\gamma t} \left( -\frac{1}{4I^2\omega^2} D \left( \frac{1}{\gamma} + \frac{(-\gamma\omega-i\omega^2)}{2\omega^3} e^{2i\omega t} + \frac{(-\gamma\omega+i\omega^2)}{2\omega^3} e^{-2i\omega t} \right) + x_0 \left( \frac{1}{2} + \right. \right. \\
 & \frac{2I^2\omega^4}{8I^2\omega^5} (-2i\gamma+\omega)e^{2i\omega t} + \frac{2I^2\omega^4}{8I^2\omega^5} (2i\gamma+\omega)e^{-2i\omega t} \left. \right) + y_0 \left( \frac{I\gamma}{2I^2\omega^2} + \frac{2(\gamma-i\omega)I\omega^2}{8I^2\omega^5} (-2i\gamma+\omega) \right. \\
 & \left. e^{2i\omega t} + \frac{2(\gamma+i\omega)I\omega^2}{8I^2\omega^5} (2i\gamma+\omega)e^{-2i\omega t} \right) + z_0 \left( \frac{1}{2I^2\omega^2} - \frac{2(\omega+2i\gamma)\omega}{8I^2\omega^5} (-2i\gamma+\omega) e^{2i\omega t} - \right. \\
 & \left. \frac{2(\omega-2i\gamma)\omega}{8I^2\omega^5} (2i\gamma+\omega)e^{-2i\omega t} \right) \left. \right) - \frac{\gamma D}{4I^2\omega^4} + \frac{D}{4I^2\omega^2\gamma}, \quad (Д2.65)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 x(t) = & e^{-2\gamma t} \left( -\frac{1}{4I^2\omega^2} D \left( \frac{1}{\gamma} + \frac{1}{\omega^2} (-\gamma \cos 2\omega t + \omega \sin 2\omega t) \right) + x_0 \left( \cos^2 \omega t + \right. \right. \\
 & \left. \frac{\gamma}{\omega} \sin 2\omega t \right) + \frac{y_0}{2I\omega^2} (2\gamma \sin^2 \omega t + \omega \sin 2\omega t) + \frac{z_0}{I^2\omega^2} \left( \sin^2 \omega t - 2 \frac{\gamma^2}{\omega^2} \cos 2\omega t \right) \left. \right) - \\
 & \frac{\gamma D}{4I^2\omega^4} + \frac{D}{4I^2\omega^2\gamma}. \quad (Д2.66)
 \end{aligned}$$

Враћањем ознака у (Д2.66) следи:

$$\begin{aligned}
 x(t) \equiv \langle \varphi^2(t) \rangle = & e^{-2\gamma t} \left( -\frac{4I\gamma kT}{4I^2\omega^2} \left( \frac{1}{\gamma} + \frac{1}{\omega^2} (-\gamma \cos 2\omega t + \omega \sin 2\omega t) \right) + \right. \\
 & \langle \varphi^2(0) \rangle \left( \cos^2 \omega t + \frac{\gamma}{\omega} \sin 2\omega t \right) + \frac{\langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle}{2I\omega} (2\gamma \sin^2 \omega t + \omega \sin 2\omega t) + \\
 & \left. \frac{\langle L_z^2(0) \rangle}{I^2\omega^2} \left( \sin^2 \omega t - 2\frac{\gamma^2}{\omega^2} \cos 2\omega t \right) \right) - \frac{k_B T}{I\omega^2} \frac{\gamma^2}{\omega^2} + \frac{k_B T}{I\omega^2}, \quad (Д2.67)
 \end{aligned}$$

односно:

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi^2(t) \rangle = & e^{-2\gamma t} \left( -\frac{\gamma kT}{I\omega^2} \left( \frac{1}{\gamma} + \frac{1}{\omega^2} (-\gamma \cos 2\omega t + \omega \sin 2\omega t) \right) + \langle \varphi^2(0) \rangle \left( \cos^2 \omega t + \right. \right. \\
 & \left. \frac{\gamma}{\omega} \sin 2\omega t \right) + \frac{\langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle}{2I\omega} (2\gamma \sin^2 \omega t + \omega \sin 2\omega t) + \frac{\langle L_z^2(0) \rangle}{I^2\omega^2} \left( \sin^2 \omega t - \right. \\
 & \left. \left. 2\frac{\gamma^2}{\omega^2} \cos 2\omega t \right) \right) + \frac{k_B T}{I\omega^2}. \quad (Д2.68)
 \end{aligned}$$

Затим се приступа сређивању израза за  $y(t)$ , на следећи начин:

$$\begin{aligned}
 y(t) = & e^{-2\gamma t} \left( -\left( -\frac{D}{4\gamma} + \frac{1}{2} I^2 \omega^2 x_0 + \frac{I\gamma y_0}{2} + \frac{z_0}{2} \right) \frac{2\gamma}{I\omega^2} - \right. \\
 & \frac{(\gamma-i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma-i\omega)I\omega^2y_0+2(\omega+2i\gamma)\omega z_0}{8\omega^2} \frac{2(\gamma+i\omega)e^{2i\omega t}}{I\omega^2} - \\
 & \left. \frac{(\gamma+i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma+i\omega)I\omega^2y_0+2(\omega-2i\gamma)\omega z_0}{8\omega^2} \frac{2(\gamma-i\omega)e^{-2i\omega t}}{I\omega^2} \right) + \frac{3D\gamma^2}{2I\omega^4}, \quad (Д2.69)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 y(t) = & e^{-2\gamma t} \left( \frac{D}{2I\omega^2} - I\gamma x_0 - \frac{\gamma^2 y_0}{\omega^2} - \frac{\gamma z_0}{I\omega^2} - \frac{(\gamma-i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma-i\omega)I\omega^2y_0+2(\omega+2i\gamma)\omega z_0}{8\omega^2 I\omega^2} 2(\gamma + \right. \\
 & \left. i\omega)e^{2i\omega t} - \frac{(\gamma+i\omega)D-2I^2\omega^4x_0-2(\gamma+i\omega)I\omega^2y_0+2(\omega-2i\gamma)\omega z_0}{8\omega^2 I\omega^2} 2(\gamma - i\omega)e^{-2i\omega t} \right) + \frac{3D\gamma^2}{2I\omega^4}, \quad (Д2.70)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 y(t) = & e^{-2\gamma t} \left( D \left( \frac{1}{2I\omega^2} - \frac{(\gamma-i\omega)}{8\omega^2 I\omega^2} 2(\gamma + i\omega)e^{2i\omega t} - \frac{(\gamma+i\omega)}{8\omega^2 I\omega^2} 2(\gamma - i\omega)e^{-2i\omega t} \right) + \right. \\
 & x_0 \left( -I\gamma + \frac{2I^2\omega^4}{8\omega^2 I\omega^2} 2(\gamma + i\omega)e^{2i\omega t} + \frac{2I^2\omega^4}{8\omega^2 I\omega^2} 2(\gamma - i\omega)e^{-2i\omega t} \right) + \\
 & y_0 \left( -\frac{\gamma^2}{\omega^2} + \frac{2(\gamma-i\omega)I\omega^2}{8\omega^2 I\omega^2} 2(\gamma + i\omega)e^{2i\omega t} + \frac{2(\gamma+i\omega)I\omega^2}{8\omega^2 I\omega^2} 2(\gamma - i\omega)e^{-2i\omega t} \right) + z_0 \left( -\frac{\gamma}{I\omega^2} - \right. \\
 & \left. \left. \frac{2(\omega+2i\gamma)\omega}{8\omega^2 I\omega^2} 2(\gamma + i\omega)e^{2i\omega t} - \frac{2(\omega-2i\gamma)\omega}{8\omega^2 I\omega^2} 2(\gamma - i\omega)e^{-2i\omega t} \right) \right) + \frac{3D\gamma^2}{2I\omega^4}, \quad (Д2.71)
 \end{aligned}$$

$$y(t) = e^{-2\gamma t} \left( \frac{D}{I\omega^2} \sin^2 \omega t + x_0 (-2I\gamma \sin^2 \omega t - I \omega \sin 2\omega t) + y_0 \left( -\frac{\gamma^2}{\omega^2} + \cos 2\omega t \right) - z_0 \left( \frac{\gamma}{I\omega^2} - \left( \frac{\gamma}{I\omega^2} \cos 2\omega t + \frac{1}{I\omega} \sin 2\omega t \right) \right) \right) + \frac{3D\gamma^2}{2I\omega^4}, \quad (D2.72)$$

$$y(t) = e^{-2\gamma t} \left( \frac{D}{I\omega^2} \sin^2 \omega t + x_0 (-2I\gamma \sin^2 \omega t - I \omega \sin 2\omega t) + y_0 \left( -\frac{\gamma^2}{\omega^2} + \cos 2\omega t \right) - z_0 \left( \frac{2\gamma}{I\omega^2} \sin^2 \omega t - \frac{1}{I\omega} \sin 2\omega t \right) \right) + \frac{3D\gamma^2}{2I\omega^4}. \quad (D2.73)$$

Након враћања ознака, даље следи:

$$y(t) \equiv \langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle = e^{-2\gamma t} \left( \frac{4\gamma k_B T}{\omega^2} \sin^2 \omega t - \langle \varphi^2(0) \rangle (2I\gamma \sin^2 \omega t + I \omega \sin 2\omega t) + \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle \left( -\frac{\gamma^2}{\omega^2} + \cos 2\omega t \right) - \langle L_z^2(0) \rangle \left( \frac{2\gamma}{I\omega^2} \sin^2 \omega t - \frac{1}{I\omega} \sin 2\omega t \right) \right) + \frac{3D\gamma^2}{2I\omega^4}, \quad (D2.74)$$

$$\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle = e^{-2\gamma t} \left( \frac{4\gamma k_B T}{\omega^2} \sin^2 \omega t - \langle \varphi^2(0) \rangle (2I\gamma \sin^2 \omega t + I \omega \sin 2\omega t) + \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle \left( -\frac{\gamma^2}{\omega^2} + \cos 2\omega t \right) - \langle L_z^2(0) \rangle \left( \frac{2\gamma}{I\omega^2} \sin^2 \omega t - \frac{1}{I\omega} \sin 2\omega t \right) \right) + \frac{k_B T}{\omega} 6 \left( \frac{\gamma}{\omega} \right)^3. \quad (D2.75)$$

За променљиву  $z(t)$ , сређивање је приказано следећим корацима:

$$z(t) = e^{-2\gamma t} \left( -\frac{D}{4\gamma} + \frac{1}{2} I^2 \omega^2 x_0 + \frac{I\gamma y_0}{2} + \frac{z_0}{2} + \frac{(\gamma-i\omega)D-2I^2\omega^4 x_0-2(\gamma-i\omega)\omega^2 I y_0+2(\omega+2i\gamma)\omega z_0}{8\omega^2} e^{2i\omega t} + \frac{(\gamma+i\omega)D-2I^2\omega^4 x_0-2(\gamma+i\omega)\omega^2 I y_0+2(\omega-2i\gamma)\omega z_0}{8\omega^2} e^{-2i\omega t} \right) - \frac{\gamma D}{4\omega^2} + \frac{D}{4\gamma}, \quad (D2.76)$$

$$z(t) = e^{-2\gamma t} \left( D \left( -\frac{1}{4\gamma} + \frac{(\gamma-i\omega)}{8\omega^2} e^{2i\omega t} + \frac{(\gamma+i\omega)}{8\omega^2} e^{-2i\omega t} \right) + x_0 \left( \frac{1}{2} I^2 \omega^2 - \frac{I^2 \omega^2}{4} e^{2i\omega t} - \frac{I^2 \omega^2}{4} e^{-2i\omega t} \right) + y_0 \left( \frac{I\gamma}{2} - \frac{(\gamma-i\omega)I}{4} e^{2i\omega t} - \frac{(\gamma+i\omega)I}{4} e^{-2i\omega t} \right) + z_0 \left( \frac{1}{2} + \frac{(\omega+2i\gamma)}{4\omega} e^{2i\omega t} + \frac{(\omega-2i\gamma)}{4\omega} e^{-2i\omega t} \right) \right) - \frac{\gamma D}{4\omega^2} + \frac{D}{4\gamma}, \quad (D2.77)$$

$$\begin{aligned}
z(t) = e^{-2\gamma t} & \left( D \left( -\frac{1}{4\gamma} + \frac{(\gamma-i\omega)}{8\omega^2} e^{2i\omega t} + \frac{(\gamma+i\omega)}{8\omega^2} e^{-2i\omega t} \right) + \frac{1}{2} I^2 \omega^2 x_0 \left( 1 - \frac{1}{2} e^{2i\omega t} - \right. \right. \\
& \left. \left. \frac{1}{2} e^{-2i\omega t} \right) + y_0 \left( \frac{I\gamma}{2} - \frac{(\gamma-i\omega)I}{4} e^{2i\omega t} - \frac{(\gamma+i\omega)I}{4} e^{-2i\omega t} \right) + \right. \\
& \left. z_0 \left( \frac{1}{2} + \frac{(\omega+2i\gamma)}{4\omega} e^{2i\omega t} + \frac{(\omega-2i\gamma)}{4\omega} e^{-2i\omega t} \right) \right) - \frac{\gamma D}{4\omega^2} + \frac{D}{4\gamma}, \tag{Д2.78}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
z(t) = e^{-2\gamma t} & \left( D \left( -\frac{1}{4\gamma} + \frac{\gamma}{4\omega^2} \cos 2\omega t + \frac{1}{4\omega} \sin 2\omega t \right) + I^2 \omega^2 x_0 \sin^2 \omega t + y_0 \left( I\gamma \sin^2 \omega t - \right. \right. \\
& \left. \left. \frac{I\omega}{2} \sin 2\omega t \right) + z_0 \left( \cos^2 \omega t - \frac{\gamma}{2\omega} \sin 2\omega t \right) \right) - \frac{\gamma D}{4\omega^2} + \frac{D}{4\gamma}. \tag{Д2.79}
\end{aligned}$$

Након враћања ознака следи:

$$\begin{aligned}
z(t) \equiv \langle L_z^2(t) \rangle = e^{-2\gamma t} & \left( D \left( -\frac{1}{4\gamma} + \frac{\gamma}{4\omega^2} \cos 2\omega t + \frac{1}{4\omega} \sin 2\omega t \right) + I^2 \omega^2 \langle \varphi^2(0) \rangle \sin^2 \omega t + \right. \\
& \langle L_z(0) \varphi(0) + \varphi(0) L_z(0) \rangle \left( I\gamma \sin^2 \omega t - \frac{I\omega}{2} \sin 2\omega t \right) + \langle L_z^2(0) \rangle \left( \cos^2 \omega t - \frac{\gamma}{2\omega} \sin 2\omega t \right) \left. \right) - \\
& \frac{\gamma D}{4\omega^2} + \frac{D}{4\gamma}, \tag{Д2.80}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle L_z^2(t) \rangle = e^{-2\gamma t} & \left( I\gamma k_B T \left( -\frac{1}{\gamma} + \frac{\gamma}{\omega^2} \cos 2\omega t + \frac{1}{\omega} \sin 2\omega t \right) + I^2 \omega^2 \langle \varphi^2(0) \rangle \sin^2 \omega t + \right. \\
& \langle L_z(0) \varphi(0) + \varphi(0) L_z(0) \rangle \left( I\gamma \sin^2 \omega t - \frac{I\omega}{2} \sin 2\omega t \right) + \langle L_z^2(0) \rangle \left( \cos^2 \omega t - \frac{\gamma}{2\omega} \sin 2\omega t \right) \left. \right) + \\
& \left( 1 - \frac{\gamma^2}{\omega^2} \right) I k_B T, \tag{Д2.81}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle L_z^2(t) \rangle \approx e^{-2\gamma t} & \left( I\gamma k_B T \left( -\frac{1}{\gamma} + \frac{\gamma}{\omega^2} \cos 2\omega t + \frac{1}{\omega} \sin 2\omega t \right) + I^2 \omega^2 \langle \varphi^2(0) \rangle \sin^2 \omega t + \right. \\
& \langle L_z(0) \varphi(0) + \varphi(0) L_z(0) \rangle \left( I\gamma \sin^2 \omega t - \frac{I\omega}{2} \sin 2\omega t \right) + \langle L_z^2(0) \rangle \left( \cos^2 \omega t - \frac{\gamma}{2\omega} \sin 2\omega t \right) \left. \right) + \\
& I k_B T, \tag{Д2.82}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle L_z^2(t) \rangle = e^{-2\gamma t} & \left( \langle L_z^2(0) \rangle \left( \cos^2 \omega t - \frac{\gamma}{2\omega} \sin 2\omega t \right) + I^2 \omega^2 \langle \varphi^2(0) \rangle \sin^2 \omega t + \langle L_z(0) \varphi(0) + \right. \\
& \left. \varphi(0) L_z(0) \rangle \left( I\gamma \sin^2 \omega t - \frac{I\omega}{2} \sin 2\omega t \right) + I\gamma k_B T \left( -\frac{1}{\gamma} + \frac{\gamma}{\omega^2} \cos 2\omega t + \frac{1}{\omega} \sin 2\omega t \right) \right) + I k_B T. \tag{Д2.83}
\end{aligned}$$

Након решавања система једначина може се приступити израчунавању квадрата стандардних одступања угла и момента импулса као и корелационе функције.

На основу (Д2.16) и (Д2.68) следи:

$$\begin{aligned}
(\Delta\varphi(t))^2 &= \langle\varphi^2(t)\rangle - \langle\varphi(t)\rangle^2 = e^{-2\gamma t} \left( -\frac{\gamma k_B T}{I\omega^2} \left( \frac{1}{\gamma} + \frac{1}{\omega^2} (-\gamma \cos 2\omega t + \omega \sin 2\omega t) \right) + \right. \\
&\langle\varphi^2(0)\rangle \left( \cos^2 \omega t + \frac{\gamma}{\omega} \sin 2\omega t \right) + \frac{\langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0)\rangle}{2I\omega} (2\gamma \sin^2 \omega t + \omega \sin 2\omega t) + \\
&\left. \frac{\langle L_z^2(0)\rangle}{I^2\omega^2} \left( \sin^2 \omega t - 2\frac{\gamma^2}{\omega^2} \cos 2\omega t \right) - \left( \langle\varphi(0)\rangle^2 \cos^2 \omega t + \frac{\langle L(0)\rangle^2}{I^2\omega^2} \sin^2 \omega t + \frac{\langle\varphi(0)\rangle\langle L(0)\rangle}{I\omega} \sin 2\omega t \right) \right) + \\
&\frac{k_B T}{I\omega^2}, \tag{Д2.84}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\Delta\varphi(t))^2 &\approx e^{-2\gamma t} \left( (\langle\varphi^2(0)\rangle - \langle\varphi(0)\rangle^2) \cos^2 \omega t + \langle\varphi^2(0)\rangle \frac{\gamma}{\omega} \sin 2\omega t + \frac{1}{2I\omega} (\langle L_z(0)\varphi(0) + \right. \\
&\varphi(0)L_z(0)\rangle - 2\langle\varphi(0)\rangle\langle L(0)\rangle) \sin 2\omega t + \frac{\langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0)\rangle}{I\omega} \frac{\gamma}{\omega} \sin^2 \omega t + \frac{1}{I^2\omega^2} (\langle L_z^2(0)\rangle - \\
&\langle L_z(0)\rangle^2) \sin^2 \omega t - 2\frac{\langle L(0)\rangle^2}{I^2\omega^2} \frac{\gamma^2}{\omega^2} \cos 2\omega t \left. \right) + \frac{k_B T}{I\omega^2} (1 - e^{-2\gamma t}), \tag{Д2.85}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\Delta\varphi(t))^2 &\approx e^{-2\gamma t} \left( (\Delta\varphi(0))^2 \cos^2 \omega t + \langle\varphi^2(0)\rangle \frac{\gamma}{\omega} \sin 2\omega t + \frac{\sigma_{L\varphi(0)}}{2I\omega} \sin 2\omega t + \right. \\
&\left. \frac{\langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0)\rangle}{I\omega} \frac{\gamma}{\omega} \sin^2 \omega t + \frac{(\Delta L(0))^2}{I^2\omega^2} \sin^2 \omega t - 2\frac{\langle L(0)\rangle^2}{I^2\omega^2} \frac{\gamma^2}{\omega^2} \cos 2\omega t \right) + \frac{k_B T}{I\omega^2} (1 - e^{-2\gamma t}). \tag{Д2.86}
\end{aligned}$$

Узимањем у обзир  $\frac{\gamma}{\omega} \rightarrow 0$  претходни израз постаје:

$$(\Delta\varphi(t))^2 \approx e^{-2\gamma t} \left( (\Delta\varphi(0))^2 \cos^2 \omega t + \frac{\sigma_{L\varphi(0)}}{2I\omega} \sin 2\omega t + \frac{(\Delta L(0))^2}{I^2\omega^2} \sin^2 \omega t \right) + \frac{k_B T}{I\omega^2} (1 - e^{-2\gamma t}). \tag{Д2.87}$$

На основу (Д2.17) и (Д2.83) добијамо:

$$\begin{aligned}
(\Delta L_z(t))^2 &= \langle L_z^2(t)\rangle - \langle L_z(t)\rangle^2 = \\
&e^{-2\gamma t} \left( \langle L_z(0)^2\rangle \left( \cos^2 \omega t - \frac{\gamma}{2\omega} \sin 2\omega t \right) + I^2\omega^2 \langle\varphi^2(0)\rangle \sin^2 \omega t + \langle L_z(0)\varphi(0) + \right. \\
&\varphi(0)L_z(0)\rangle \left( I\gamma \sin^2 \omega t - \frac{I\omega}{2} \sin 2\omega t \right) + I\gamma k_B T \left( -\frac{1}{\gamma} + \frac{\gamma}{\omega^2} \cos 2\omega t + \frac{1}{\omega} \sin 2\omega t \right) - \\
&\left. \langle L_z(0)\rangle^2 \cos^2 \omega t - I^2\omega^2 \langle\varphi(0)\rangle^2 \sin^2 \omega t + \langle\varphi(0)\rangle\langle L(0)\rangle I\omega \sin 2\omega t \right) + Ik_B T, \tag{Д2.88}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\Delta L_z(t))^2 &= e^{-2\gamma t} \left( (\langle L_z^2(0)\rangle - \langle L_z(0)\rangle^2) \cos^2 \omega t - \langle L_z^2(0)\rangle \frac{\gamma}{2\omega} \sin 2\omega t + I^2\omega^2 (\langle\varphi^2(0)\rangle - \right. \\
&\langle\varphi(0)\rangle^2) \sin^2 \omega t - \frac{I\omega}{2} (\langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0)\rangle - 2\langle\varphi(0)\rangle\langle L_z(0)\rangle) \sin 2\omega t + \\
&\left. (\langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0)\rangle) I\gamma \sin^2 \omega t + I\gamma k_B T \left( -\frac{1}{\gamma} + \frac{\gamma}{\omega^2} \cos 2\omega t + \frac{1}{\omega} \sin 2\omega t \right) \right) + Ik_B T, \tag{Д2.89}
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
(\Delta L_z(t))^2 = e^{-2\gamma t} & \left( (\Delta L_z(0))^2 \cos^2 \omega t - \langle L_z^2(0) \rangle \frac{\gamma}{2\omega} \sin 2\omega t + I^2 \omega^2 (\Delta \varphi(0))^2 \sin^2 \omega t - \right. \\
\frac{I\omega}{2} \sigma_{L\varphi}(0) \sin 2\omega t & + (\langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle I\gamma \sin^2 \omega t) + I\gamma kT \left( -\frac{1}{\gamma} + \frac{\gamma}{\omega^2} \cos 2\omega t + \right. \\
\left. \left. \frac{1}{\omega} \sin 2\omega t \right) \right) + Ik_B T. & \tag{Д2.90}
\end{aligned}$$

Применом  $\frac{\gamma}{\omega} \rightarrow 0$ , израз (Д2.90) постаје:

$$\begin{aligned}
(\Delta L_z(t))^2 \approx e^{-2\gamma t} & \left( (\Delta L_z(0))^2 \cos^2 \omega t + I^2 \omega^2 (\Delta \varphi(0))^2 \sin^2 \omega t - \frac{I\omega}{2} \sigma_{L\varphi}(0) \sin 2\omega t \right) + \\
IkT(1 - e^{-2\gamma t}). & \tag{Д2.91}
\end{aligned}$$

На основу (Д2.75), (Д2.16) и (Д2.17) следи:

$$\begin{aligned}
\sigma_{L\varphi}(t) = \langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle - 2\langle \varphi(t) \rangle \langle L_z(t) \rangle = \\
e^{-2\gamma t} \left( \frac{4\gamma kT}{\omega^2} \sin^2 \omega t - \langle \varphi^2(0) \rangle (2I\gamma \sin^2 \omega t + I\omega \sin 2\omega t) + \right. \\
\langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle \left( -\frac{\gamma^2}{\omega^2} + \cos 2\omega t \right) - \langle L_z^2(0) \rangle \left( \frac{2\gamma}{I\omega^2} \sin^2 \omega t - \frac{1}{I\omega} \sin 2\omega t \right) \Big) + \\
\frac{kT}{\omega} 6 \left( \frac{\gamma}{\omega} \right)^3 - 2\langle \varphi(0) \rangle \langle L_z(0) \rangle e^{-2\gamma t} \cos 2\omega t - e^{-2\gamma t} \left[ \frac{\langle L_z(0) \rangle^2}{I\omega} - \langle \varphi(0) \rangle^2 I\omega \right] \sin 2\omega t, & \tag{Д2.92}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{L\varphi}(t) = e^{-2\gamma t} \left( \frac{4\gamma kT}{\omega^2} \sin^2 \omega t - I\omega (\langle \varphi^2(0) \rangle - \langle \varphi(0) \rangle^2) \sin 2\omega t + 2I\gamma \langle \varphi^2(0) \rangle \sin^2 \omega t + \right. \\
(\langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - 2\langle \varphi(0) \rangle \langle L_z(0) \rangle) \cos 2\omega t - \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle \frac{\gamma^2}{\omega^2} - \\
\left. \frac{1}{I\omega} (\langle L_z^2(0) \rangle - \langle L_z(0) \rangle^2) \sin 2\omega t - \langle L^2(0) \rangle \frac{2\gamma}{I\omega^2} \sin^2 \omega t \right) + \frac{kT}{\omega} 6 \left( \frac{\gamma}{\omega} \right)^3, & \tag{Д2.93}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{L\varphi}(t) = e^{-2\gamma t} \left( \frac{4\gamma kT}{\omega^2} \sin^2 \omega t - I\omega (\Delta \varphi(0))^2 \sin 2\omega t + 2I\gamma \langle \varphi^2(0) \rangle \sin^2 \omega t + \right. \\
\sigma_{L\varphi}(0) \cos 2\omega t - \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle \frac{\gamma^2}{\omega^2} - \frac{1}{I\omega} (\Delta L_z(0))^2 \sin 2\omega t - \\
\left. \langle L_z^2(0) \rangle \frac{2\gamma}{I\omega^2} \sin^2 \omega t \right) + \frac{kT}{\omega} 6 \left( \frac{\gamma}{\omega} \right)^3. & \tag{Д2.94}
\end{aligned}$$

Применом  $\frac{\gamma}{\omega} \rightarrow 0$  корелациона функција се своди на:

$$\begin{aligned}
\sigma_{L\varphi}(t) \approx \\
e^{-2\gamma t} \left( \frac{4\gamma kT}{\omega^2} \sin^2 \omega t - I\omega (\Delta \varphi(0))^2 \sin 2\omega t + \sigma_{L\varphi}(0) \cos 2\omega t - \frac{1}{I\omega} (\Delta L(0))^2 \sin 2\omega t \right) + \\
\frac{kT}{\omega} 6 \left( \frac{\gamma}{\omega} \right)^3. & \tag{Д2.95}
\end{aligned}$$

Асимптотске вредности квадрата стандардних одступања угла и момента импулса и корелационе функције су:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (\Delta\varphi(t))^2 \approx \lim_{t \rightarrow \infty} \left( e^{-2\gamma t} \left( (\Delta\varphi(0))^2 \cos^2 \omega t + \frac{\sigma_{L\varphi}(0)}{2I\omega} \sin 2\omega t + \frac{(\Delta L(0))^2}{I^2 \omega^2} \sin^2 \omega t \right) + \frac{kT}{I\omega^2} (1 - e^{-2\gamma t}) \right) = \frac{k_B T}{I\omega^2}, \quad (\text{Д2.96})$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \sigma_{L\varphi}(t) \approx \lim_{t \rightarrow \infty} \left( e^{-2\gamma t} \left( \frac{4\gamma kT}{\omega^2} \sin^2 \omega t - I \omega (\Delta\varphi(0))^2 \sin 2\omega t + \sigma_{L\varphi}(0) \cos 2\omega t - \frac{1}{I\omega} (\Delta L(0))^2 \sin 2\omega t \right) + \frac{kT}{\omega} 6 \left( \frac{\gamma}{\omega} \right)^3 = + \frac{k_B T}{\omega} 6 \left( \frac{\gamma}{\omega} \right)^3, \quad (\text{Д2.97})$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} (\Delta L(t))^2 \approx \lim_{t \rightarrow \infty} \left( e^{-2\gamma t} \left( (\Delta L(0))^2 \cos^2 \omega t + I^2 \omega^2 (\Delta\varphi(0))^2 \sin^2 \omega t - \frac{I\omega}{2} \sigma_{L\varphi}(0) \sin 2\omega t \right) + I k_B T (1 - e^{-2\gamma t}) \right) = I k_B T. \quad (\text{Д2.98})$$

Када се у систем једначина за декохеренцијски лимит (Д1.106) - (Д1.110) унесе хармонијски потенцијал добија се следећи облик:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi(t) \rangle = \frac{1}{I} \langle L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д2.99})$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z(t) \rangle = -I\omega^2 \langle \varphi(t) \rangle, \quad (\text{Д2.100})$$

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^2(t) \rangle = \frac{1}{I} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д2.101})$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle = -2I\omega^2 \langle \varphi^2(t) \rangle + \frac{2}{I} \langle L_z^2(t) \rangle, \quad (\text{Д2.102})$$

$$\frac{d}{dt} \langle L_z^2(t) \rangle = -I\omega^2 \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle + 4I\gamma k_B T. \quad (\text{Д2.103})$$

Диференцирањем једначине (Д2.100):

$$\frac{d^2 \langle L_z(t) \rangle}{dt^2} = -I\omega^2 \frac{d \langle \varphi(t) \rangle}{dt}, \quad (\text{Д2.104})$$

и сменом (Д2.99) у (Д2.104) следи:

$$\frac{d^2 \langle L_z(t) \rangle}{dt^2} = -I\omega^2 \frac{1}{I} \langle L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д2.105})$$

односно:

$$\frac{d^2 \langle L_z(t) \rangle}{dt^2} + \omega^2 \langle L_z(t) \rangle = 0, \quad (\text{Д2.106})$$

Решење једначине (Д2.106) је:

$$\langle L_z(t) \rangle = C_1 \cos \omega t + C_2 \sin \omega t, \quad (\text{Д2.107})$$

одакле за  $t = 0$  одмах следи да је  $C_1 = \langle L_z(0) \rangle$ , док на основу (Д2.100) можемо записати да је:

$$\frac{d \langle L_z \rangle}{dt} = -\omega \langle L_z(0) \rangle \sin \omega t + \omega C_2 \cos \omega t = -I\omega^2 \langle \varphi(t) \rangle. \quad (\text{Д2.108})$$

На основу претходног израза момент угла је:

$$\langle \varphi(t) \rangle = -\frac{C_2 \cos \omega t}{I\omega} + \frac{\langle L_z(0) \rangle \sin \omega t}{I\omega}. \quad (\text{Д2.109})$$

Из (Д2.109) се може одредити константа  $C_2$ :

$$C_2 = -I\omega \langle \varphi(0) \rangle, \quad (\text{Д2.110})$$

тако да се решења једначина (Д2.99) и (Д2.100) своде на следеће облике:

$$\langle \varphi(t) \rangle = \langle \varphi(0) \rangle \cos \omega t + \frac{\langle L_z(0) \rangle \sin \omega t}{I\omega}, \quad (\text{Д2.111})$$

$$\langle L_z(t) \rangle = \langle L_z(0) \rangle \cos \omega t - I\omega \langle \varphi(0) \rangle \sin \omega t. \quad (\text{Д2.112})$$

Диференцирањем (Д2.102) :

$$\frac{d^2 \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle}{dt^2} = -2I\omega^2 \frac{d \langle \varphi^2(t) \rangle}{dt} + \frac{2}{I} \frac{d \langle L_z^2(t) \rangle}{dt}, \quad (\text{Д2.113})$$

и сменом (Д2.101) и (Д2.103) у (Д2.113), следи:

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle = -2I\omega^2 \frac{1}{I} \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle + \frac{2}{I} (-I\omega^2 \langle L_z(t) \varphi(t) + \varphi(t) L_z(t) \rangle + 4I\gamma k_B T). \quad (\text{Д2.114})$$

Увођењем да је:

$$f = \langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle, \quad (\text{Д2.115})$$

једначина (Д2.114) се може записати као:

$$\frac{d^2 f}{dt^2} + 4\omega^2 f = 8\gamma k_B T, \quad (\text{Д2.116})$$

при чему је одговарајућа хомогена једначина:

$$\frac{d^2 f}{dt^2} + 4\omega^2 f = 0, \quad (\text{Д2.117})$$

док је њена карактеристична једначина:

$$k^2 + 4\omega^2 = 0. \quad (\text{Д2.118})$$

Решења једначине (Д2.118) су  $k_1 = -2i\omega$  и  $k_2 = 2i\omega$ , тако да је опште решење једначине (Д2.117):

$$f = C_1 \cos 2\omega t + C_2 \sin 2\omega t. \quad (\text{Д2.119})$$

За решавање нехомогене једначине (Д2.116) примењује се метод варијације константи, тако да се решење може написати на следећи начин:

$$f = C_1(t) \cos 2\omega t + C_2(t) \sin 2\omega t, \quad (\text{Д2.120})$$

док се за  $C_1'(t)$  и  $C_2'(t)$  добија следећи систем једначина:

$$C_1'(t) \cos 2\omega t + C_2'(t) \sin 2\omega t = 0, \quad (\text{Д2.121})$$

$$-2\omega C_1'(t) \sin 2\omega t + 2\omega C_2'(t) \cos 2\omega t = 8\gamma k_B T. \quad (\text{Д2.122})$$

На основу прве једначине система:

$$C_1'(t) = -\frac{C_2'(t) \sin 2\omega t}{\cos 2\omega t}, \quad (\text{Д2.123})$$

а затим, сменом (Д2.123) у (Д2.122):

$$\frac{C_2'(t) \sin 2\omega t}{\cos 2\omega t} 2\omega \sin 2\omega t + 2\omega C_2'(t) \cos 2\omega t = 8\gamma k_B T, \quad (\text{Д2.124})$$

даље следи:

$$2\omega C_2'(t) \sin^2 2\omega t + 2\omega C_2'(t) \cos^2 2\omega t = 8\gamma k_B T \cos 2\omega t, \quad (\text{Д2.125})$$

односно:

$$C_2'(t) = \frac{4\gamma k_B T \cos 2\omega t}{\omega}, \quad (\text{Д2.126})$$

Након смене (Д2.126) у (Д2.121) добија се једначина:

$$C_1'(t) \cos 2\omega t + \frac{4\gamma k_B T \cos 2\omega t}{\omega} \sin 2\omega t = 0, \quad (\text{Д2.127})$$

из које директно можемо изразити  $C_1'(t)$  као:

$$C_1'(t) = -4\gamma k_B T \frac{\sin 2\omega t}{\omega}. \quad (\text{Д2.128})$$

Интеграцијом (Д2.128) и (Д2.126) добијамо:

$$C_1(t) = \frac{2\gamma k_B T}{\omega^2} \cos 2\omega t + D_1, \quad (\text{Д2.129})$$

$$C_2(t) = \frac{2\gamma k_B T}{\omega^2} \sin 2\omega t + D_2, \quad (\text{Д2.130})$$

где су  $D_1$  и  $D_2$  нове интеграционе константе. Сменом (Д2.129) и (Д2.130) у (Д2.119) следи:

$$\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle = \left( \frac{2\gamma k_B T}{\omega^2} \cos 2\omega t + D_1 \right) \cos 2\omega t + \left( \frac{2\gamma k_B T \sin 2\omega t}{\omega^2} + D_2 \right) \sin 2\omega t, \quad (\text{Д2.131})$$

односно, након упрошћавања:

$$\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle = D_1 \cos 2\omega t + D_2 \sin 2\omega t + \frac{2\gamma k_B T}{\omega^2}. \quad (\text{Д2.132})$$

За  $t = 0$  из (Д2.132) се може одредити константа  $D_1$ :

$$\langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle = D_1 + \frac{2\gamma k_B T}{\omega^2}, \quad (\text{Д2.133})$$

тако да је:

$$D_1 = \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \frac{2\gamma k_B T}{\omega^2}. \quad (\text{Д2.134})$$

Сменом  $D_1$  у (Д2.132) добија се да је:

$$\langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle = \left( \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \frac{8\gamma k_B T}{4\omega^2} \right) \cos 2\omega t + D_2 \sin 2\omega t + \frac{2\gamma k_B T}{\omega^2}, \quad (\text{Д2.135})$$

Након смене (Д2.135) у (Д2.102) може се написати:

$$\begin{aligned} & -2\omega \left( \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \frac{8\gamma kT}{4\omega^2} \right) \sin 2\omega t + 2\omega D_2 \cos 2\omega t = \\ & -2I\omega^2 \langle \varphi^2(t) \rangle + \frac{2}{I} \langle L_z^2(t) \rangle, \end{aligned} \quad (\text{Д2.136})$$

што се за  $t = 0$  своди на:

$$2\omega D_2 = -2I\omega^2 \langle \varphi^2(0) \rangle + \frac{2}{I} \langle L_z^2(0) \rangle, \quad (\text{Д2.137})$$

тако да је:

$$D_2 = -I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle + \frac{1}{\omega I} \langle L_z^2(0) \rangle. \quad (\text{Д2.138})$$

Сменом (Д2.134) и (Д2.138) у (Д2.132) следи:

$$\begin{aligned} \langle L_z(t)\varphi(t) + \varphi(t)L_z(t) \rangle = & \left( \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \frac{2\gamma kT}{\omega^2} \right) \cos 2\omega t + \left( \frac{1}{\omega I} \langle L_z^2(0) \rangle - \right. \\ & \left. I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right) \sin 2\omega t + \frac{2\gamma k_B T}{\omega^2}. \end{aligned} \quad (\text{Д2.139})$$

Након диференцирања (Д2.139) и смене у (Д2.103) добија се:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle L_z^2(t) \rangle}{dt} = & -I\omega^2 \left( \left( \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \frac{2\gamma k_B T}{\omega^2} \right) \cos 2\omega t + \left( \frac{1}{\omega I} \langle L_z^2(0) \rangle - \right. \right. \\ & \left. \left. I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right) \sin 2\omega t + \frac{2\gamma kT}{\omega^2} \right) + 4I\gamma k_B T, \end{aligned} \quad (\text{Д2.140})$$

односно:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle L_z^2(t) \rangle}{dt} = & -I\omega^2 \left( \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \frac{2\gamma kT}{\omega^2} \right) \cos 2\omega t - I\omega^2 \left( \frac{1}{\omega I} \langle L_z^2(0) \rangle - \right. \\ & \left. I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right) \sin 2\omega t + 2I\gamma k_B T. \end{aligned} \quad (\text{Д2.141})$$

Након интеграције претходног израза очекивана вредност квадрата момента импулса постаје:

$$\begin{aligned} \langle L_z^2(t) \rangle = & \\ & -I\omega^2 \frac{1}{2\omega} \left( \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \frac{2\gamma kT}{\omega^2} \right) \sin 2\omega t + \frac{1}{2\omega} I\omega^2 \left( \frac{1}{\omega I} \langle L_z^2(0) \rangle - \right. \\ & \left. I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right) \cos 2\omega t + 2I\gamma k_B T t + C, \end{aligned} \quad (\text{Д2.142})$$

где је  $C$  интеграциона константа која се може одредити када је  $t = 0$ :

$$\langle L_z^2(0) \rangle = \frac{1}{2\omega} I\omega^2 \left( \frac{1}{\omega I} \langle L_z^2(0) \rangle - I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right) + C, \quad (\text{Д2.143})$$

из чега следи:

$$C = \frac{1}{2}L_z^2(0) + \frac{1}{2}I^2\omega^2\langle\varphi^2(0)\rangle. \quad (\text{Д2.144})$$

Сменом (Д2.144) у (Д2.143) добија се опште решење за средњу вредност квадрата момента импулса:

$$\begin{aligned} \langle L_z^2(t) \rangle = & \\ -I\omega \frac{1}{2} \left( \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \frac{2\gamma kT}{\omega^2} \right) \sin 2\omega t + \frac{1}{2}I\omega \left( \frac{1}{\omega I} \langle L_z^2(0) \rangle - \right. & \\ \left. I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right) \cos 2\omega t + 2I\gamma k_B T t + \frac{\langle L_z^2(0) \rangle}{2} + \frac{1}{2}I^2\omega^2 \langle \varphi^2(0) \rangle. & \end{aligned} \quad (\text{Д2.145})$$

Коришћењем решења (Д2.139) једначина (Д2.101) постаје:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \varphi^2(t) \rangle}{dt} = \frac{1}{I} \left( \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \frac{2\gamma kT}{\omega^2} \right) \cos 2\omega t + \frac{1}{I} \left( \frac{1}{\omega I} \langle L_z^2(0) \rangle - \right. & \\ \left. I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right) \sin 2\omega t + \frac{2\gamma k_B T}{I\omega^2}, & \end{aligned} \quad (\text{Д2.146})$$

одакле се директном интеграцијом добија:

$$\begin{aligned} \langle \varphi^2(t) \rangle = \frac{1}{2\omega I} \left( \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \frac{2\gamma kT}{\omega^2} \right) \sin 2\omega t - \frac{1}{2\omega I} \left( \frac{1}{\omega I} \langle L_z^2(0) \rangle - \right. & \\ \left. I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right) \cos 2\omega t + \frac{2\gamma k_B T}{I\omega^2} t + C. & \end{aligned} \quad (\text{Д2.147})$$

За  $t = 0$  важи:

$$\langle \varphi^2(0) \rangle = -\frac{1}{2\omega I} \left( \frac{1}{\omega I} \langle L_z^2(0) \rangle - I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right) + C, \quad (\text{Д2.148})$$

тако да је интеграциона константа  $C$ :

$$C = \langle \varphi^2(0) \rangle + \frac{1}{2\omega I} \left( \frac{1}{\omega I} \langle L_z^2(0) \rangle - I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right), \quad (\text{Д2.149})$$

па се решење за  $\langle \varphi^2(t) \rangle$  може написати у облику:

$$\begin{aligned} \langle \varphi^2(t) \rangle = \frac{1}{2\omega I} \left( \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \frac{2\gamma k_B T}{\omega^2} \right) \sin 2\omega t - \frac{1}{2\omega I} \left( \frac{1}{\omega I} \langle L_z^2(0) \rangle - \right. & \\ \left. I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right) \cos 2\omega t + \frac{2\gamma k_B T}{I\omega^2} t + \langle \varphi^2(0) \rangle + \frac{1}{2\omega I} \left( \frac{1}{\omega I} \langle L_z^2(0) \rangle - I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right). & \end{aligned} \quad (\text{Д2.150})$$

Након добијања решења за прве и друге моменте може се приступити налажењу стандардних одступања угла и момента импулса. За стандардно одступање угла се добија:

$$\begin{aligned}
 (\Delta\varphi(t))^2 &= \langle\varphi^2(t)\rangle - \langle\varphi(t)\rangle^2 = \frac{1}{2\omega l} \left( \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \frac{2\gamma k T}{\omega^2} \right) \sin 2\omega t - \\
 &\frac{1}{2\omega l} \left( \frac{1}{\omega l} \langle L_z^2(0) \rangle - I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right) \cos 2\omega t + \frac{2\gamma k T}{I\omega^2} t + \langle \varphi^2(0) \rangle + \\
 &\frac{1}{2\omega l} \left( \frac{1}{\omega l} \langle L_z^2(0) \rangle - I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right) - \langle \varphi(0) \rangle^2 \cos^2 \omega t - 2\langle \varphi(0) \rangle \frac{\langle L_z(0) \rangle \sin 2\omega t}{2I\omega} - \frac{\langle L_z(0) \rangle^2 \sin^2 \omega t}{I^2 \omega^2},
 \end{aligned} \tag{Д2.151}$$

$$\begin{aligned}
 (\Delta\varphi(t))^2 &= \\
 &\frac{1}{I^2 \omega^2} \langle L_z^2(0) \rangle \left( \frac{1 - \cos 2\omega t}{2} \right) - \frac{\langle L_z(0) \rangle^2 \sin^2 \omega t}{I^2 \omega^2} + \langle \varphi^2(0) \rangle \left( \frac{1 + \cos 2\omega t}{2} \right) - \langle \varphi(0) \rangle^2 \cos^2 \omega t + \\
 &\frac{1}{2\omega l} \sigma_{\varphi L}(0) \sin 2\omega t + \frac{2\gamma k_B T}{I\omega^2} t - \frac{\sin 2\omega t}{2\omega l} \frac{2\gamma k_B T}{\omega^2},
 \end{aligned} \tag{Д2.152}$$

$$(\Delta\varphi(t))^2 = (\Delta\varphi(0))^2 \cos^2 \omega t + \frac{(\Delta L(0))^2}{I^2 \omega^2} \sin^2 \omega t + \frac{\sigma_{\varphi L}(0)}{2I\omega} \sin 2\omega t + \frac{2\gamma k T}{I\omega^2} t - \frac{\gamma k T}{I\omega^3} \sin 2\omega t, \tag{Д2.153}$$

док је стандардно одступање момента импулса:

$$\begin{aligned}
 (\Delta L_z(t))^2 &= \langle L_z^2(t) \rangle - \langle L_z(t) \rangle^2 = -I\omega \frac{1}{2} \left( \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \frac{2\gamma k T}{\omega^2} \right) \sin 2\omega t + \\
 &\frac{1}{2} I\omega \left( \frac{1}{\omega l} \langle L_z^2(0) \rangle - I\omega \langle \varphi^2(0) \rangle \right) \cos 2\omega t + 2I\gamma k_B T t + \frac{\langle L_z^2(0) \rangle}{2} + \frac{1}{2} I^2 \omega^2 \langle \varphi^2(0) \rangle - \\
 &\langle L_z(0) \rangle^2 \cos^2 \omega t + \frac{1}{2} I\omega 2\langle \varphi(0) \rangle \langle L_z(0) \rangle \sin 2\omega t - I^2 \omega^2 \langle \varphi(0) \rangle^2 \sin^2 \omega t,
 \end{aligned} \tag{Д2.154}$$

$$\begin{aligned}
 (\Delta L_z(t))^2 &= \langle L_z^2(0) \rangle \left( \frac{1 + \cos 2\omega t}{2} \right) - \langle L_z(0) \rangle^2 \cos^2 \omega t - I\omega \frac{1}{2} \left( \langle L_z(0)\varphi(0) + \varphi(0)L_z(0) \rangle - \right. \\
 &2\langle \varphi(0) \rangle \langle L_z(0) \rangle \left. \right) \sin 2\omega t + I^2 \omega^2 \left( \frac{1 - \cos 2\omega t}{2} \right) \langle \varphi^2(0) \rangle - I^2 \omega^2 \langle \varphi(0) \rangle^2 \sin^2 \omega t + \\
 &I \frac{\gamma k_B T}{\omega} \sin 2\omega t + 2I\gamma k_B T t,
 \end{aligned} \tag{Д2.155}$$

$$(\Delta L_z(t))^2 = (\Delta L_z(0))^2 \cos^2 \omega t + I^2 \omega^2 (\Delta\varphi(0))^2 \sin^2 \omega t - \frac{I\omega}{2} \sigma_{\varphi L}(0) \sin 2\omega t + 2I\gamma k_B T t + \frac{I\gamma k_B T}{\omega} \sin 2\omega t. \tag{Д2.156}$$



### Додатак 3

У случају слабо нехармонијског потенцијала, односно када је потенцијал:

$$V(\varphi) = \frac{1}{2}I\omega^2\varphi^2 + b\varphi^3, \quad (\text{Д3.1})$$

где је  $b$  неки мали реални параметар, при чему је:

$$V'(\varphi) = \frac{dV}{d\varphi} = I\omega^2\varphi + 3b\varphi^2, \quad (\text{Д3.2})$$

а хамилтонијан:

$$H = \frac{L_z^2}{2I} + V = \frac{L_z^2}{2I} + \frac{1}{2}I\omega^2\varphi^2 + b\varphi^3, \quad (\text{Д3.3})$$

једначине за моменте првог и другог реда можемо добити на основу одговарајућих једначина за општи облик потенцијала које су изведене у Додатку 1. У изразима који следе у овом додатку у циљу постизања боље прегледности изостављена је назнака временске зависности величина.

У случајевима када је  $A = \varphi$  и  $A = \varphi^2$ , одговарајуће једначине, (Д1.17) и (Д1.30), не зависе од потенцијала, тако да и у овом случају имају исти облик:

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi\rangle = \frac{1}{I}\langle L_z\rangle, \quad (\text{Д3.4})$$

$$\frac{d}{dt}\langle\varphi^2\rangle = \frac{1}{I}\langle L_z\varphi + \varphi L_z\rangle. \quad (\text{Д3.5})$$

У случају када је  $A = L_z$ , на основу израза (Д1.43) који важи за произвољни облик потенцијала, користећи (Д3.2), следи:

$$\frac{d}{dt}\langle L_z\rangle = -\langle V'(\varphi)\rangle - 2\gamma\langle L_z\rangle = -I\omega^2\langle\varphi\rangle - 3b\langle\varphi^2\rangle - 2\gamma\langle L_z\rangle, \quad (\text{Д3.6})$$

односно:

$$\frac{d}{dt}\langle L_z\rangle = -I\omega^2\langle\varphi\rangle - 2\gamma\langle L_z\rangle - 3b\langle\varphi^2\rangle. \quad (\text{Д3.7})$$

У случају када је  $A = L_z\varphi + \varphi L_z$ , користећи (Д1.36) и (Д3.2), добијамо:

$$\frac{d}{dt}\langle L_z\varphi + \varphi L_z\rangle = \frac{2}{I}\langle L_z^2\rangle - 2I\omega^2\langle\varphi^2\rangle - 6b\langle\varphi^3\rangle - 2\gamma\langle L_z\varphi + \varphi L_z\rangle. \quad (\text{Д3.8})$$

док се за  $A = L_z^2$ , на основу израза (Д1.45) и (Д3.2) може записати:

$$\frac{d}{dt}\langle L_z^2 \rangle = -I\omega^2\langle L_z\varphi + \varphi L_z \rangle - 3b\langle \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2 \rangle - 4\gamma\langle L_z^2 \rangle + 4I\gamma k_B T. \quad (Д3.9)$$

У једначинама (Д3.8) и (Д3.9) појављују се моменти трећег реда што значи да систем једначина који обухвата моменте првог и другог реда није затворен. Диференцијалне једначине за моменте угла и момента импулса трећег реда могу се добити применом израза (Д1.13).

За  $A = \varphi^3$  на основу (Д1.13) следи:

$$\frac{d}{dt}\langle \varphi^3 \rangle = \frac{-i}{\hbar}\langle [\varphi^3, H] \rangle + \frac{i\gamma}{\hbar}\langle \{L_z, [\varphi, \varphi^3]\} \rangle - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2}\langle [\varphi, [\varphi, \varphi^3]] \rangle. \quad (Д3.10)$$

Други и трећи члан десне стране (Д3.10) су једнаки нули док је први члан:

$$\frac{-i}{\hbar}\langle [\varphi^3, H] \rangle = \frac{-i}{\hbar}\langle [\varphi^3, \frac{L_z^2}{2I} + \frac{1}{2}I\omega^2\varphi^2 + b\varphi^3] \rangle = \frac{-i}{2I\hbar}\langle [\varphi^3, L_z^2] \rangle. \quad (Д3.11)$$

Користећи:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B, \quad (Д3.12)$$

комутор у (Д3.11) постаје:

$$[\varphi^3, L_z^2] = -[L_z^2, \varphi^3] = -L_z[L_z, \varphi^3] - [L_z, \varphi^3]L_z = L_z[\varphi^3, L_z] + [\varphi^3, L_z]L_z. \quad (Д3.13)$$

На основу

$$[\varphi^2, L_z] = \varphi[\varphi, L_z] + [\varphi, L_z]\varphi = 2i\hbar\varphi, \quad (Д3.14)$$

следи:

$$[\varphi^3, L_z] = \varphi^2[\varphi, L_z] + [\varphi^2, L_z]\varphi = \varphi^2 i\hbar + 2i\hbar\varphi^2 = 3i\hbar\varphi^2, \quad (Д3.15)$$

и:

$$[\varphi^3, L_z^2] = 3i\hbar(L_z\varphi^2 + \varphi^2 L_z), \quad (Д3.16)$$

тако да се израз (Д3.10) своди на:

$$\frac{d}{dt}\langle \varphi^3 \rangle = \frac{3}{2I}\langle L_z\varphi^2 + \varphi^2 L_z \rangle. \quad (Д3.17)$$

Када је  $A = L_z^3$  на основу (Д1.13) добијамо:

$$\frac{d}{dt}\langle L_z^3 \rangle = \frac{-i}{\hbar}\langle [L_z^3, H] \rangle + \frac{i\gamma}{\hbar}\langle \{L_z, [\varphi, L_z^3]\} \rangle - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2}\langle [\varphi, [\varphi, L_z^3]] \rangle. \quad (Д3.18)$$

Први члан десне стране (Д3.18) се може написати као:

$$\frac{-i}{\hbar}\langle [L_z^3, H] \rangle = \frac{-i}{\hbar}\langle [L_z^3, \frac{L_z^2}{2I} + \frac{1}{2}I\omega^2\varphi^2 + b\varphi^3] \rangle = \frac{-i}{2\hbar}I\omega^2\langle [L_z^3, \varphi^2] \rangle + b\frac{-i}{\hbar}\langle [L_z^3, \varphi^3] \rangle. \quad (Д3.19)$$

Применом (Д3.12) први комутатор са десне стране (Д3.19) једнак је:

$$[L_z^3, \varphi^2] = [L_z^2 L_z, \varphi^2] = L_z^2 [L_z, \varphi^2] + [L_z^2, \varphi^2] L_z, \quad (Д3.20)$$

па даље, на основу:

$$[\varphi, L_z^2] = -[L_z^2, \varphi] = -[L_z L_z, \varphi] = -L_z [L_z, \varphi] - [L_z, \varphi] L_z = 2i\hbar L_z, \quad (Д3.21)$$

$$[\varphi^2, L_z^2] = \varphi [L_z^2, \varphi] + [L_z^2, \varphi] \varphi = \varphi 2i\hbar L_z + 2i\hbar L_z \varphi = 2i\hbar (L_z \varphi + \varphi L_z), \quad (Д3.22)$$

и (Д3.14) следи:

$$\begin{aligned} [L_z^3, \varphi^2] &= -2i\hbar L_z^2 \varphi - 2i\hbar (L_z \varphi + \varphi L_z) L_z = -2i\hbar L_z^2 \varphi - 2i\hbar L_z \varphi L_z - 2i\hbar \varphi L_z^2 = \\ &= -3i\hbar L_z^2 \varphi - 3i\hbar \varphi L_z^2 - i\hbar (L_z \varphi L_z - L_z^2 \varphi + L_z \varphi L_z - \varphi L_z^2) = -3i\hbar (L_z^2 \varphi + \varphi L_z^2) - \\ &= i\hbar (L_z (\varphi L_z - L_z \varphi) - (\varphi L_z - L_z \varphi) L_z) = -3i\hbar (L_z^2 \varphi + \varphi L_z^2). \end{aligned} \quad (Д3.23)$$

Комутатор  $[L_z^3, \varphi^3]$  применом (Д3.12) постаје:

$$[L_z^3, \varphi^3] = [L_z^2 L_z, \varphi^3] = L_z^2 [L_z, \varphi^3] + [L_z^2, \varphi^3] L_z, \quad (Д3.24)$$

а затим, на основу (Д3.15) и (Д3.16):

$$\begin{aligned} [L_z^3, \varphi^3] &= -L_z^2 3i\hbar \varphi^2 - 3i\hbar (L_z \varphi^2 + \varphi^2 L_z) L_z = -3i\hbar (L_z^2 \varphi^2 + L_z \varphi^2 L_z + \varphi^2 L_z^2) = \\ &= -3i\hbar \left( \frac{1}{2} L_z \varphi^2 L_z - \frac{1}{2} L_z^2 \varphi^2 + \frac{1}{2} L_z^2 \varphi^2 + \frac{1}{2} L_z \varphi^2 L_z - \frac{1}{2} \varphi^2 L_z^2 + \frac{1}{2} \varphi^2 L_z^2 + L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2 \right) = \\ &= -3i\hbar \left( \frac{1}{2} L_z (\varphi^2 L_z - L_z \varphi^2) + \frac{1}{2} (L_z \varphi^2 - \varphi^2 L_z) L_z + \frac{3}{2} \varphi^2 L_z^2 + \frac{3}{2} L_z^2 \varphi^2 \right) = -3i\hbar \left( \frac{2i\hbar}{2} L_z \varphi - \right. \\ &\left. \frac{2i\hbar}{2} \varphi L_z + \frac{3}{2} \varphi^2 L_z^2 + \frac{3}{2} L_z^2 \varphi^2 \right) = -3i\hbar (\hbar^2 + \frac{3}{2} \varphi^2 L_z^2 + \frac{3}{2} L_z^2 \varphi^2), \end{aligned} \quad (Д3.25)$$

тако да је:

$$\frac{-i}{\hbar}\langle [L_z^3, H] \rangle = -\frac{3}{2}I\omega^2\langle \varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi \rangle + b\frac{-i}{\hbar}\langle (-3i\hbar) (\hbar^2 + \frac{3}{2}L_z^2 \varphi^2 + \frac{3}{2}\varphi^2 L_z^2) \rangle. \quad (Д3.26)$$

Други члан десне стране (Д3.18) се применом:

$$[\varphi, L_z^3] = -[L_z^3, \varphi] = -[L_z^2 L_z, \varphi] = L_z^2 [\varphi, L_z] + [\varphi, L_z^2] L_z = L_z^2 i\hbar + 2L_z^2 i\hbar = 3i\hbar L_z^2, \quad (Д3.27)$$

своди на:

$$\frac{i\gamma}{\hbar}\langle \{L_z, [\varphi, L_z^3]\} \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar}\langle \{L_z, 3i\hbar L_z^2\} \rangle = -6\gamma\langle L_z^3 \rangle. \quad (Д3.28)$$

Трећи члан (Д3.18) применом (Д3.27) прелази у:

$$-\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, L_z^3]] \rangle = -\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, 3i\hbar L_z^2] \rangle = -\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} 3i\hbar 2i\hbar \langle L_z \rangle = 12I\gamma k_B T \langle L_z \rangle, \quad (Д3.29)$$

тако да се (Д3.18) своди на:

$$\frac{d}{dt} \langle L_z^3 \rangle = -\frac{3}{2} I \omega^2 \langle \varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi \rangle - \frac{9}{2} b \langle L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2 \rangle - 6\gamma \langle L_z^3 \rangle + 12I\gamma k_B T \langle L_z \rangle - 3b\hbar^2. \quad (Д3.30)$$

Када је  $A = \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2$  на основу (Д1.13) важи:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2 \rangle = \\ \frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi^2 L_z + L_z \varphi^2, H] \rangle + \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2]\} \rangle - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2]] \rangle. \end{aligned} \quad (Д3.31)$$

Први члан десне стране (Д3.31) сређивањем добија облик:

$$\begin{aligned} \frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi^2 L_z + L_z \varphi^2, H] \rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi^2 L_z + L_z \varphi^2, \frac{L_z^2}{2I} + \frac{1}{2} I \omega^2 \varphi^2 + b\varphi^3] \rangle = \frac{-i}{2I\hbar} \langle [\varphi^2 L_z + \\ L_z \varphi^2, L_z^2] \rangle + \frac{-i}{2\hbar} I \omega^2 \langle [\varphi^2 L_z + L_z \varphi^2, \varphi^2] \rangle + \frac{-i}{\hbar} b \langle [\varphi^2 L_z + L_z \varphi^2, \varphi^3] \rangle = \frac{-i}{2I\hbar} \langle [\varphi^2, L_z^2] L_z + \\ L_z [\varphi^2, L_z^2] \rangle + \frac{-i}{2\hbar} I \omega^2 \langle \varphi^2 [L_z, \varphi^2] + [L_z, \varphi^2] \varphi^2 \rangle + \frac{-i}{\hbar} b \langle [\varphi^2 L_z + L_z \varphi^2, \varphi^3] \rangle, \end{aligned} \quad (Д3.32)$$

односно, на основу (Д3.12), (Д3.14) и (Д3.22):

$$\frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi^2 L_z + L_z \varphi^2, H] \rangle = \frac{2}{I} \langle \varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi \rangle - 2I \omega^2 \langle \varphi^3 \rangle - 6b \langle \varphi^4 \rangle. \quad (Д3.33)$$

Други члан десне стране (Д3.31) је:

$$\frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2]\} \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, 2i\hbar \varphi^2\} \rangle = -2\gamma \langle \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2 \rangle, \quad (Д3.34)$$

док је трећи члан десне стране (једнак нули, тако да се Д3.31) своди на:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2 \rangle = \frac{2}{I} \langle \varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi \rangle - 2I \omega^2 \langle \varphi^3 \rangle - 6b \langle \varphi^4 \rangle - 2\gamma \langle \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2 \rangle. \quad (Д3.35)$$

Када опсервабла има облик  $A = \varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi$  из (Д1.13) следи:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi \rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi, H] \rangle + \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, \varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi]\} \rangle - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, \varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi]] \rangle. \quad (Д3.36)$$

Први члан десне стране (Д3.36) се може написати као:

$$\frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi, H] \rangle = \frac{-i}{2I\hbar} \langle [\varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi, L_z^2] \rangle + \frac{-i}{2\hbar} I \omega^2 \langle [\varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi, \varphi^2] \rangle + \frac{-i}{\hbar} b \langle [\varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi, \varphi^3] \rangle. \quad (Д3.37)$$

Применом (Д3.21), (Д3.21) и (Д3.16) следи:

$$\begin{aligned} \frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi, H] \rangle &= \frac{-i}{2i\hbar} 4i\hbar \langle L_z^3 \rangle + \frac{-i}{2\hbar} I\omega^2 (-2i\hbar) \langle \varphi(\varphi L_z + L_z \varphi) + (\varphi L_z + L_z \varphi)\varphi \rangle + \\ \frac{-i}{\hbar} b(-3i\hbar) \langle \varphi(\varphi^2 L_z + L_z \varphi^2) + (\varphi^2 L_z + L_z \varphi^2)\varphi \rangle &= \frac{2}{I} \langle L_z^3 \rangle - 2I\omega^2 \langle \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2 \rangle - \\ 6b \langle \varphi^3 L_z + L_z \varphi^3 \rangle. \end{aligned} \quad (Д3.38)$$

сменом (Д3.21) у други члан десне стране (Д3.36):

$$\frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, \varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi]\} \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, 2i\hbar(\varphi L_z + L_z \varphi)\} \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} 2i\hbar 2 \langle \varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi \rangle, \quad (Д3.39)$$

док се за трећи члан може записати:

$$-\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, \varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi]] \rangle = -\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, 2i\hbar(\varphi L_z + L_z \varphi)] \rangle = 8I\gamma k_B T \langle \varphi \rangle, \quad (Д3.40)$$

тако да је:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi \rangle &= \frac{2}{I} \langle L_z^3 \rangle - 2I\omega^2 \langle \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2 \rangle - 6b \langle \varphi^3 L_z + L_z \varphi^3 \rangle - 4\gamma \langle \varphi L_z^2 + L_z^2 \varphi \rangle + \\ 8I\gamma k_B T \langle \varphi \rangle. \end{aligned} \quad (Д3.41)$$

У добијеним једначинама за моменте трећег реда појављују се моменти четвртог реда што значи да систем једначина који обухвата моменте до трећег реда такође није затворен. Диференцијалне једначине за моменте угла и момента импулса четвртог реда добијају се на исти начин.

За момент четвртог реда  $A = \varphi^3 L_z + L_z \varphi^3$  важи:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \varphi^3 L_z + L_z \varphi^3 \rangle &= \\ \frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi^3 L_z + L_z \varphi^3, H] \rangle &+ \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, \varphi^3 L_z + L_z \varphi^3]\} \rangle - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, \varphi^3 L_z + L_z \varphi^3]] \rangle. \end{aligned} \quad (Д3.42)$$

Први члан десне стране (Д3.42) применом (Д3.15) и (Д3.16) постаје:

$$\begin{aligned} \frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi^3 L_z + L_z \varphi^3, H] \rangle &= \frac{-i}{2i\hbar} (L_z [\varphi^3, L_z^2] + [\varphi^3, L_z^2] L_z) + \frac{-i}{2\hbar} I\omega^2 (\varphi^3 [L_z, \varphi^2] + [L_z, \varphi^2] \varphi^3) + \\ \frac{-i}{\hbar} b (\varphi^3 [L_z, \varphi^3] + [L_z, \varphi^3] \varphi^3), \end{aligned} \quad (Д3.43)$$

односно:

$$\begin{aligned} \frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi^3 L_z + L_z \varphi^3, H] \rangle &= \frac{-i}{2i\hbar} 3i\hbar (2L_z \varphi^2 L_z + L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2) + \frac{-i}{2\hbar} I\omega^2 (-2i\hbar) 2 \langle \varphi^4 \rangle + \\ \frac{-i}{\hbar} b (-3i\hbar) \langle \varphi^5 \rangle. \end{aligned} \quad (Д3.44)$$

Први члан десне стране (Д3.44) се може написати као:

$$\frac{-i}{2i\hbar} 3i\hbar (2L_z \varphi^2 L_z + L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2) = \frac{-i}{2i\hbar} 3i\hbar (2L_z \varphi^2 L_z - L_z^2 \varphi^2 - \varphi^2 L_z^2 + 2L_z^2 \varphi^2 + 2\varphi^2 L_z^2), \quad (Д3.45)$$

а онда, имајући у виду:

$$L_z \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2 L_z - L_z^2 \varphi^2 - \varphi^2 L_z^2 = L_z (\varphi^2 L_z - L_z \varphi^2) + (L_z \varphi^2 - \varphi^2 L_z) L_z = L_z (\varphi^2 L_z - L_z \varphi^2) - (\varphi^2 L_z - L_z \varphi^2) L_z = 2i\hbar L_z \varphi - 2i\hbar \varphi L_z = 2\hbar^2, \quad (Д3.46)$$

као и:

$$\frac{-i}{2i\hbar} 3i\hbar (2L_z \varphi^2 L_z + L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2) = \frac{3}{i} (L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2) + \frac{3}{i} \hbar^2, \quad (Д3.47)$$

следи:

$$\frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi^3 L_z + L_z \varphi^3, H] \rangle = \frac{3}{i} (L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2) + \frac{3}{i} \hbar^2 - 2I\omega^2 \langle \varphi^4 \rangle - 3b \langle \varphi^5 \rangle. \quad (Д3.48)$$

Други члан десне стране (Д3.42) постаје:

$$\frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, \varphi^3 L_z + L_z \varphi^3]\} \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, 2i\hbar \varphi^3\} \rangle = -2\gamma \langle \varphi^3 L_z + L_z \varphi^3 \rangle, \quad (Д3.49)$$

док је трећи члан једнак нули, тако да се добија да је:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^3 L_z + L_z \varphi^3 \rangle = \frac{3}{i} (L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2) + \frac{3}{i} \hbar^2 - 2I\omega^2 \langle \varphi^4 \rangle - 3b \langle \varphi^5 \rangle - 2\gamma \langle \varphi^3 L_z + L_z \varphi^3 \rangle. \quad (Д3.50)$$

У случају када је  $A = \varphi^4$  на основу (Д1.13) следи:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^4 \rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi^4, H] \rangle + \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, \varphi^4]\} \rangle - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, \varphi^4]] \rangle. \quad (Д3.51)$$

Други и трећи члан десне стране (Д3.51) су једнаки нули док се за први члан на основу:

$$[\varphi^4, L_z^2] = [\varphi^2 \varphi^2, L_z^2] = \varphi^2 [\varphi^2, L_z^2] + [\varphi^2, L_z^2] \varphi^2 = \varphi^2 2i\hbar (L_z \varphi + \varphi L_z) + 2i\hbar (L_z \varphi + \varphi L_z) \varphi^2 = 4i\hbar (\varphi^3 L_z + L_z \varphi^3), \quad (Д3.52)$$

добија:

$$\frac{-i}{\hbar} \langle [\varphi^4, H] \rangle = \frac{-i}{2i\hbar} \langle [\varphi^4, L_z^2] \rangle = \frac{-i}{2i\hbar} 4i\hbar \langle \varphi^3 L_z + L_z \varphi^3 \rangle, \quad (Д3.53)$$

тако да је:

$$\frac{d}{dt} \langle \varphi^4 \rangle = \frac{2}{i} \langle \varphi^3 L_z + L_z \varphi^3 \rangle. \quad (Д3.54)$$

На основу (Д1.13), у случају када је  $A = L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2$ , можемо записати:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2 \rangle = \\ \frac{-i}{\hbar} \langle [L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2, H] \rangle + \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2]\} \rangle - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2]] \rangle. \end{aligned} \quad (Д3.55)$$

Први члан (Д3.55) уз примену (Д3.16) и (Д3.22) се сређивањем своди на:

$$\begin{aligned} \frac{-i}{\hbar} \langle [L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2, H] \rangle &= \frac{-i}{2I\hbar} \langle [L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2, L_z^2] \rangle + \frac{-i}{2\hbar} I\omega^2 \langle [L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2, \varphi^2] \rangle + \\ \frac{-i}{\hbar} b \langle [L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2, \varphi^3] \rangle &= \\ \frac{-i}{2I\hbar} 2i\hbar (L_z^2 (\varphi L_z + L_z \varphi) + (\varphi L_z + L_z \varphi) L_z^2) + \frac{-i}{2\hbar} I\omega^2 (-2i\hbar) (\varphi^2 (\varphi L_z + L_z \varphi) + \\ (\varphi L_z + L_z \varphi) \varphi^2) + \frac{-i}{\hbar} b ([L_z^2, \varphi^3] \varphi^2 + \varphi^2 [L_z^2, \varphi^3]) &= \frac{1}{I} (L_z^2 (\varphi L_z + L_z \varphi) + (\varphi L_z + \\ L_z \varphi) L_z^2) - I\omega^2 (\varphi^2 (\varphi L_z + L_z \varphi) + (\varphi L_z + L_z \varphi) \varphi^2) + \frac{-i}{\hbar} b [-3i\hbar (L_z \varphi^2 + \varphi^2 L_z) \varphi^2 - \\ 3i\hbar \varphi^2 (L_z \varphi^2 + \varphi^2 L_z)] &= \frac{1}{I} (L_z^2 \varphi L_z + L_z \varphi L_z^2 + L_z^3 \varphi + \varphi L_z^3) - I\omega^2 (\varphi^2 L_z \varphi + \varphi L_z \varphi^2 + \\ \varphi^3 L_z + L_z \varphi^3) - 3b (L_z \varphi^4 + \varphi^4 L_z + 2\varphi^2 L_z \varphi^2). \end{aligned} \quad (Д3.56)$$

На основу:

$$\begin{aligned} L_z^2 \varphi L_z + L_z \varphi L_z^2 + L_z^3 \varphi + \varphi L_z^3 &= L_z^2 \varphi L_z - L_z^3 \varphi - \varphi L_z^3 + L_z \varphi L_z^2 + 2L_z^3 \varphi + 2\varphi L_z^3 = \\ L_z^2 (\varphi L_z - L_z \varphi) + (L_z \varphi - \varphi L_z) L_z^2 + 2L_z^3 \varphi + 2\varphi L_z^3 &= 2L_z^3 \varphi + 2\varphi L_z^3, \end{aligned} \quad (Д3.57)$$

$$\begin{aligned} \varphi^2 L_z \varphi + \varphi L_z \varphi^2 + \varphi^3 L_z + L_z \varphi^3 &= \varphi^2 L_z \varphi + \varphi L_z \varphi^2 - \varphi^3 L_z - L_z \varphi^3 + 2\varphi^3 L_z + 2L_z \varphi^3 = \\ \varphi^2 (L_z \varphi - \varphi L_z) + (\varphi L_z - L_z \varphi) \varphi^2 + 2\varphi^3 L_z + 2L_z \varphi^3 &= 2\varphi^3 L_z + 2L_z \varphi^3, \end{aligned} \quad (Д3.58)$$

и:

$$\begin{aligned} L_z \varphi^4 + \varphi^4 L_z + 2\varphi^2 L_z \varphi^2 &= 2L_z \varphi^4 + 2\varphi^4 L_z + \varphi^2 L_z \varphi^2 - L_z \varphi^4 + \varphi^2 L_z \varphi^2 - \varphi^4 L_z = \\ 2L_z \varphi^4 + 2\varphi^4 L_z + (\varphi^2 L_z - L_z \varphi^2) \varphi^2 + \varphi^2 (L_z \varphi^2 - \varphi^2 L_z) &= 2L_z \varphi^4 + 2\varphi^4 L_z, \end{aligned} \quad (Д3.59)$$

даље следи:

$$\frac{-i}{\hbar} \langle [L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2, H] \rangle = \frac{2}{I} (L_z^3 \varphi + \varphi L_z^3) - 2I\omega^2 (\varphi^3 L_z + L_z \varphi^3) - 6b (L_z \varphi^4 + \varphi^4 L_z). \quad (Д3.60)$$

Други члан десне стране (Д3.56) на основу:

$$\begin{aligned} [\varphi, L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2] &= [\varphi, L_z^2 \varphi^2] + [\varphi, \varphi^2 L_z^2] = [\varphi, L_z^2] \varphi^2 + \varphi^2 [\varphi, L_z^2] = 2i\hbar L_z \varphi^2 + \\ \varphi^2 2i\hbar L_z, \end{aligned} \quad (Д3.61)$$

прелази у:

$$\frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2]\} \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} 2i\hbar \langle L_z L_z \varphi^2 + L_z \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2 L_z + \varphi^2 L_z L_z \rangle. \quad (Д3.62)$$

На основу:

$$\begin{aligned} L_z L_z \varphi^2 + L_z \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2 L_z + \varphi^2 L_z L_z &= 2L_z^2 \varphi^2 + 2\varphi^2 L_z^2 + L_z \varphi^2 L_z - L_z^2 \varphi^2 + L_z \varphi^2 L_z - \\ \varphi^2 L_z^2 &= 2L_z^2 \varphi^2 + 2\varphi^2 L_z^2 + L_z (\varphi^2 L_z - L_z \varphi^2) - (L_z \varphi^2 - \varphi^2 L_z) L_z = 2L_z^2 \varphi^2 + 2\varphi^2 L_z^2 + \\ L_z 2i\hbar\varphi - 2i\hbar\varphi L_z &= L_z^2 \varphi^2 + 2\varphi^2 L_z^2 - 2i\hbar i\hbar = 2(\hbar^2 + L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2), \end{aligned} \quad (\text{Д3.63})$$

даље следи:

$$\frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2]\} \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} 2i\hbar 2(\hbar^2 + L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2) = 4\gamma \langle \hbar^2 + L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2 \rangle. \quad (\text{Д3.64})$$

За трећи члан десне стране (Д3.56) се на основу:

$$[\varphi, L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2] = [\varphi, L_z^2 \varphi^2] + [\varphi, \varphi^2 L_z^2] = [\varphi, L_z^2] \varphi^2 + \varphi^2 [\varphi, L_z^2] = 2i\hbar L_z \varphi^2 + \varphi^2 2i\hbar L_z, \quad (\text{Д3.65})$$

добија:

$$-\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} 2i\hbar 2i\hbar \langle \varphi^2 \rangle = 8I\gamma k_B T \langle \varphi^2 \rangle, \quad (\text{Д3.66})$$

тако да је:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2 \rangle &= \frac{2}{I} (L_z^3 \varphi + \varphi L_z^3) - 2I\omega^2 (\varphi^3 L_z + L_z \varphi^3) - 6b(L_z \varphi^4 + \varphi^4 L_z) - \\ 4\gamma \langle \hbar^2 + L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2 \rangle &+ 8I\gamma k_B T \langle \varphi^2 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{Д3.67})$$

За  $A = L_z^3 \varphi + \varphi L_z^3$  следи:

$$\frac{d}{dt} \langle L_z^3 \varphi + \varphi L_z^3 \rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle [L_z^3 \varphi + \varphi L_z^3, H] \rangle + \frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, L_z^3 \varphi + \varphi L_z^3]\} \rangle - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, L_z^3 \varphi + \varphi L_z^3]] \rangle, \quad (\text{Д3.68})$$

Применом:

$$\begin{aligned} [L_z^3, \varphi^2] &= [L_z^2 L_z, \varphi^2] = L_z^2 [L_z, \varphi^2] + [L_z^2, \varphi^2] L_z = -2i\hbar L_z^2 \varphi - 2i\hbar (L_z \varphi + \varphi L_z) L_z = \\ -2i\hbar L_z^2 \varphi - 2i\hbar L_z \varphi L_z - 2i\hbar \varphi L_z^2 &= -3i\hbar L_z^2 \varphi - 3i\hbar \varphi L_z^2 - i\hbar (L_z \varphi L_z - L_z^2 \varphi + L_z \varphi L_z - \\ \varphi L_z^2) &= -3i\hbar (L_z^2 \varphi + \varphi L_z^2) - i\hbar (L_z (\varphi L_z - L_z \varphi) - (\varphi L_z - L_z \varphi) L_z) = -3i\hbar (L_z^2 \varphi + \varphi L_z^2), \end{aligned} \quad (\text{Д3.69})$$

$$\begin{aligned} \langle [L_z^3, \varphi^2] \varphi + \varphi [L_z^3, \varphi^2] \rangle &= -3i\hbar (L_z^2 \varphi + \varphi L_z^2) \varphi - \varphi 3i\hbar (L_z^2 \varphi + \varphi L_z^2) = -3i\hbar (L_z^2 \varphi^2 + \\ \varphi L_z^2 \varphi + \varphi L_z^2 \varphi + \varphi^2 L_z^2) &= -3i\hbar (2L_z^2 \varphi^2 + 2\varphi L_z^2 \varphi + \varphi L_z^2 \varphi - L_z^2 \varphi^2 - \varphi^2 L_z^2 + \varphi L_z^2 \varphi + \\ \varphi^2 L_z^2) &= -3i\hbar (2L_z^2 \varphi^2 + 2\varphi L_z^2 \varphi + (\varphi L_z^2 - L_z^2 \varphi) \varphi - \varphi (\varphi L_z^2 - L_z^2 \varphi)) = -3i\hbar (2L_z^2 \varphi^2 + \\ 2\varphi L_z^2 \varphi + (2i\hbar L_z) \varphi - \varphi (2i\hbar L_z)) &= (-6i\hbar) \langle \hbar^2 + L_z^2 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^2 \rangle, \end{aligned} \quad (\text{Д3.70})$$

и:



$$\begin{aligned}
[L_z^3, \varphi^3]\varphi + \varphi[L_z^3, \varphi^3] &= -3i\hbar\left(\hbar^2 + \frac{3}{2}\varphi^2 L_z^2 + \frac{3}{2}L_z^2\varphi^2\right)\varphi - 3i\hbar\varphi\left(\hbar^2 + \frac{3}{2}\varphi^2 L_z^2 + \frac{3}{2}L_z^2\varphi^2\right) \\
&= -6i\hbar^3\varphi - 3i\hbar\frac{3}{2}(\varphi^2 L_z^2\varphi + L_z^2\varphi^3 + \varphi^3 L_z^2 + \varphi L_z^2\varphi^2) = -6i\hbar^3\varphi - \\
3i\hbar\frac{3}{2}(2L_z^2\varphi^3 + 2\varphi^3 L_z^2 + \varphi^2 L_z^2\varphi - \varphi^3 L_z^2 + \varphi L_z^2\varphi^2 - L_z^2\varphi^3) &= -6i\hbar^3\varphi - 3i\hbar\frac{3}{2}(2L_z^2\varphi^3 + \\
2\varphi^3 L_z^2 + \varphi^2(L_z^2\varphi - \varphi L_z^2) - (L_z^2\varphi - \varphi L_z^2)\varphi^2) &= -6i\hbar^3\varphi - 3i\hbar\frac{3}{2}(2L_z^2\varphi^3 + 2\varphi^3 L_z^2 - \\
2i\hbar[\varphi^2, L_z]) &= -6i\hbar^3\varphi - 3i\hbar\frac{3}{2}(2L_z^2\varphi^3 + 2\varphi^3 L_z^2 + 4\hbar^2), \tag{Д3.71}
\end{aligned}$$

за први члан десне стране (Д3.68) се добија:

$$\begin{aligned}
\frac{-i}{\hbar}\langle[L_z^3\varphi + \varphi L_z^3, H]\rangle &= \frac{-i}{\hbar}\langle[L_z^3\varphi + \varphi L_z^3, \frac{L_z^2}{2I}]\rangle + \frac{-i}{\hbar}\langle[L_z^3\varphi + \varphi L_z^3, \frac{1}{2}I\omega^2\varphi^2]\rangle + \frac{-i}{\hbar}\langle[L_z^3\varphi + \\
\varphi L_z^3, b\varphi^3]\rangle &= \\
\frac{-i}{2I\hbar}\langle L_z^3[\varphi, L_z^2] + [\varphi, L_z^2]L_z^3 \rangle + \frac{-i}{2\hbar}I\omega^2\langle[L_z^3, \varphi^2]\varphi + \varphi[L_z^3, \varphi^2]\rangle + \frac{-i}{\hbar}b\langle[L_z^3, \varphi^3]\varphi + \varphi[L_z^3, \varphi^3]\rangle, \tag{Д3.72}
\end{aligned}$$

односно:

$$\begin{aligned}
\frac{-i}{\hbar}\langle[L_z^3\varphi + \varphi L_z^3, H]\rangle &= \frac{-i}{2I\hbar}2i\hbar\langle 2L_z^4 \rangle + \frac{-i}{2\hbar}I\omega^2(-6i\hbar)(\hbar^2 + L_z^2\varphi^2 + \varphi^2 L_z^2) - b\langle 6\hbar^2\varphi + \\
9(L_z^2\varphi^3 + \varphi^3 L_z^2) + 18\hbar^2\varphi \rangle. \tag{Д3.73}
\end{aligned}$$

За други члан десне стране (Д3.68) следи:

$$\begin{aligned}
\frac{i\gamma}{\hbar}\langle\{L_z, [\varphi, L_z^3\varphi + \varphi L_z^3]\}\rangle &= \frac{i\gamma}{\hbar}3i\hbar\langle\{L_z, \varphi L_z^2 + L_z^2\varphi\}\rangle = \frac{i\gamma}{\hbar}3i\hbar 2\langle L_z^3\varphi + \varphi L_z^3 \rangle = -6\gamma\langle L_z^3\varphi + \\
\varphi L_z^3 \rangle, \tag{Д3.74}
\end{aligned}$$

а за трећи:

$$\begin{aligned}
-\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2}\langle[\varphi, [\varphi, L_z^3\varphi + \varphi L_z^3]]\rangle &= -\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2}3i\hbar\langle[\varphi, \varphi L_z^2 + L_z^2\varphi]\rangle = -\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2}3i\hbar 2i\hbar\langle\varphi L_z + \\
L_z\varphi\rangle &= 12I\gamma k_B T\langle\varphi L_z + L_z\varphi\rangle, \tag{Д3.75}
\end{aligned}$$

тако да је:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle L_z^3\varphi + \varphi L_z^3 \rangle &= \frac{2}{I}\langle L_z^4 \rangle - 3I\omega^2\langle L_z^2\varphi^2 + \varphi^2 L_z^2 \rangle - 3I\omega^2\hbar^2 - 9b\langle L_z^2\varphi^3 + \varphi^3 L_z^2 \rangle - \\
24b\hbar^2\langle\varphi\rangle - 6\gamma\langle L_z^3\varphi + \varphi L_z^3 \rangle + 12I\gamma k_B T\langle\varphi L_z + L_z\varphi\rangle. \tag{Д3.76}
\end{aligned}$$

За  $A = L_z^4$  се добија:

$$\frac{d}{dt}\langle L_z^4 \rangle = \frac{-i}{\hbar}\langle[L_z^4, H]\rangle + \frac{i\gamma}{\hbar}\langle\{L_z, [\varphi, L_z^4]\}\rangle - \frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2}\langle[\varphi, [\varphi, L_z^4]]\rangle. \tag{Д3.77}$$

Први члан десне стране (Д3.77) :

$$\frac{-i}{\hbar} \langle [L_z^4, H] \rangle = \frac{-i}{\hbar} \langle [L_z^4, \frac{L_z^2}{2I} + \frac{1}{2} I \omega^2 \varphi^2 + b \varphi^3] \rangle = \frac{-i}{2\hbar} I \omega^2 \langle [L_z^4, \varphi^2] \rangle + \frac{-i}{\hbar} b \langle [L_z^4, \varphi^3] \rangle, \quad (\text{Д3.78})$$

након сређивања:

$$[L_z^4, \varphi^2] = [L_z^2 L_z^2, \varphi^2] = L_z^2 [L_z^2, \varphi^2] + [L_z^2, \varphi^2] L_z^2 = L_z^2 2i\hbar (L_z \varphi + \varphi L_z) + 2i\hbar (L_z \varphi + \varphi L_z) L_z^2 = 4i\hbar (L_z^3 \varphi + \varphi L_z^3). \quad (\text{Д3.79})$$

$$[L_z^2, \varphi^3] = [L_z L_z, \varphi^3] = L_z [L_z, \varphi^3] + [L_z, \varphi^3] L_z = -(L_z [\varphi^3, L_z] + [\varphi^3, L_z] L_z) = -3i\hbar (L_z \varphi^2 + \varphi^2 L_z), \quad (\text{Д3.80})$$

$$\begin{aligned} [L_z^4, \varphi^3] &= [L_z^2 L_z^2, \varphi^3] = L_z^2 [L_z^2, \varphi^3] + [L_z^2, \varphi^3] L_z^2 = -3i\hbar L_z^2 (L_z \varphi^2 + \varphi^2 L_z) = \\ &= -3i\hbar (L_z \varphi^2 + \varphi^2 L_z) L_z^2 = -3i\hbar (L_z^3 \varphi^2 + L_z^2 \varphi^2 L_z + L_z \varphi^2 L_z^2 + \varphi^2 L_z^3) = -3i\hbar (2L_z^3 \varphi^2 + \\ &L_z^2 \varphi^2 L_z - L_z^3 \varphi^2 - \varphi^2 L_z^3 + L_z \varphi^2 L_z^2 + 2\varphi^2 L_z^3) = -3i\hbar (2L_z^3 \varphi^2 + L_z^2 (\varphi^2 L_z - L_z \varphi^2) + \\ &(L_z \varphi^2 - \varphi^2 L_z) L_z^2 + 2\varphi^2 L_z^3) = -3i\hbar (2L_z^3 \varphi^2 + L_z^2 2i\hbar \varphi - 2i\hbar \varphi L_z^2 + 2\varphi^2 L_z^3) = \\ &= -3i\hbar (2L_z^3 \varphi^2 - 2i\hbar L_z 2i\hbar + 2\varphi^2 L_z^3), \end{aligned} \quad (\text{Д3.81})$$

постаје:

$$\frac{-i}{\hbar} \langle [L_z^4, H] \rangle = \frac{-i}{2\hbar} I \omega^2 (-4i\hbar) \langle L_z^3 \varphi + \varphi L_z^3 \rangle + \frac{-i}{\hbar} b (-2i\hbar) (3L_z^3 \varphi^2 + 3\varphi^2 L_z^3 + 6\hbar^2 L_z), \quad (\text{Д3.82})$$

док за други члан десне стране (Д3.77) на основу:

$$[L_z^4, \varphi] = [L_z^2 L_z^2, \varphi] = L_z^2 [L_z^2, \varphi] + [L_z^2, \varphi] L_z^2 = -L_z^2 2i\hbar L_z - 2i\hbar L_z L_z^2 = -4i\hbar L_z^3, \quad (\text{Д3.83})$$

следи:

$$\frac{i\gamma}{\hbar} \langle \{L_z, [\varphi, L_z^4]\} \rangle = \frac{i\gamma}{\hbar} 8i\hbar \langle L_z^4 \rangle = -8\gamma \langle L_z^4 \rangle, \quad (\text{Д3.84})$$

док је трећи члан десне стране (Д3.77):

$$-\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} \langle [\varphi, [\varphi, L_z^4]] \rangle = -\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} 4i\hbar \langle [\varphi, L_z^3] \rangle = -\frac{2I\gamma k_B T}{\hbar^2} 4i\hbar 3i\hbar \langle L_z^2 \rangle = 24I\gamma k_B T \langle L_z^2 \rangle. \quad (\text{Д3.85})$$

Сменом (Д3.82), (Д3.84) и (Д3.85) у (Д3.77) диференцијална једначина за момент импула четвртог реда  $\langle L_z^4 \rangle$  се своди на:

$$\frac{d}{dt} \langle L_z^4 \rangle = -2I\omega^2 \langle L_z^3 \varphi + \varphi L_z^3 \rangle - 6b \langle L_z^3 \varphi^2 + \varphi^2 L_z^3 \rangle - 12b\hbar^2 \langle L_z \rangle - 8\gamma \langle L_z^4 \rangle + 24I\gamma k_B T \langle L_z^2 \rangle. \quad (\text{Д3.86})$$

## Додатак 4

Изворни код C++ програма за нумеричко израчунавање квадрата стандардних одступања угла и момента импулса за слабо нехармонијски осцилатор у случају када је  $\gamma_0 > \omega$ :

```
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
const double t0 = 0;
const double w = 1;
const double gama_nula = 1.1;
const double kT=100;
const double inicijalna_pocetna_vrednost=1.1;
const double I0 = 3;
const double y10 = 0.1;
const double y20 = 0.1;
const double y30 = 0.1;
const double y40 = 0.1;
const double f10 = 0;
const double f20 = 0;
const double f30 = 0.00;
const double f40 = 0.00;
const double f50 = 0.00;
const double a = - 0.001;
const double b =0.01;
const double L0= 1.2;
const double B=1.2;
const double p=0.01;
const double q=5;
const double r=0;
double izvod_od_y1(double t, double y1, double y2 , double y3,double y4, double N)
{
    double dy1;
    dy1= (3/(2*N*I0)) * y2;
    return dy1;
}
```

```

double izvod_od_y2(double t, double y1, double y2 , double y3, double y4,double N)
{
    double dy2;
    dy2= - 2*N*I0*w*w*y1 - 2*N*gama_nula*y2 + (2/(N*I0)) * y3 ;
    return dy2;
}

double izvod_od_y3(double t, double y1, double y2 , double y3, double y4,double N)
{
    double dy3;
    double fi_0= inicijalna_pocetna_vrednost;
    double omega_veliko=sqrt( N*N*gama_nula*gama_nula - w*w);
    dy3=-2*N*I0*w*w*y2 - 4*N*gama_nula*y3 + (2/(N*I0)) * y4 + kT*8*N*N*I0*gama_nula *
        exp(- N*gama_nula*t)* (fi_0* ( cosh(omega_veliko*t) + (N*gama_nula/omega_veliko) *
            sinh(omega_veliko*t) ) + (L0/(N*I0*omega_veliko))*sinh(omega_veliko*t) );
    return dy3;
}

double izvod_od_y4(double t, double y1, double y2 , double y3, double y4,double N)
{
    double dy4;
    double A= inicijalna_pocetna_vrednost;
    double fi_0=A;
    double omega_veliko=sqrt( N*N*gama_nula*gama_nula - w*w);
    dy4=-(3/2)*N*I0*w*w * y3 - 6*N*gama_nula*y4 + kT*12*N*N*I0*gama_nula
        * exp(-N*gama_nula*t) * ( L0* ( cosh(omega_veliko*t) - (N*gama_nula/omega_veliko) *
            sinh(omega_veliko*t) ) - (N*I0*w*w)*fi_0*sinh(omega_veliko*t)/omega_veliko );
    return dy4;
}

double izvod_od_f1(double t, double f1, double f2,double N)
{
    double df1;
    df1= (1/(N*I0)) * f2;
    return df1;
}

double izvod_od_f2(double t, double f1, double f2,double N)
{
    double df2;

```

```

double omega_veliko=pow(N,2) * pow (gama_nula , 2 ) - pow(w,2);
double g;
g=sqrt(omega_veliko);
double A= inicijalna_pocetna_vrednost;
double LzFi_plus_FiLZ_Nula=r + 2*A*B;
double Lz_na_kvadrat_nula=q + B*B;
double fi_na_kvadrat_nula= p + A*A;
double gama=N*gama_nula;
double I=N*I0;
double w_na_kvadrat=w*w;
double fi_na_kvadrat= (1/ (I*w_na_kvadrat*omega_veliko) ) * (omega_veliko + exp(-
2*gama*t) * (w_na_kvadrat - pow(gama,2)*cosh(2*g*t) - gama*g* sinh(2*g*t) ) ) +
exp(-2*N*gama_nula*t)* ( + (fi_na_kvadrat_nula/omega_veliko)* (- w_na_kvadrat
* pow(cosh(g*t),2) + pow(gama,2)*cosh(2*g*t) + gama*g* sinh(2*g*t) )
+ (LzFi_plus_FiLZ_Nula/(2*I*omega_veliko) ) * ( 2*gama * pow(sinh(g*t),2) + g*
sinh(2*g*t) ) + (Lz_na_kvadrat_nula/pow(I*g,2) ) * pow(sinh(g*t),2) );
df2= - I0*N*w*w*f1 - 2*N * gama_nula * f2 - 3*fi_na_kvadrat;
return df2;
}
double izvod_od_f3(double t, double f3, double f4, double f5, double y1 , double y2, double N)
{
double df3;
df3= (1/(N*I0)) * f4;
return df3;
}
double izvod_od_f4(double t, double f3, double f4, double f5, double y1 , double y2, double N)
{
double df4;
df4=-2*N*I0*w*w * f3 - 2*N*gama_nula*f4 +(2/(N*I0))*f5 - 6*y1;
return df4;
}
double izvod_od_f5(double t, double f3, double f4, double f5, double y1 , double y2, double N)
{
double df5;
df5=-N*I0*w*w * f4- 4*N*gama_nula*f5 - 3 * y2;
return df5;
}

```

```
}
int main(void)
{
double y1,y2,y3,y4, f1,f2,f3,f4,f5, vrednost_ugla_nepert, t;
double h = 0.001;
FILE *file1;
file1 = fopen("fi_kvadrat_st_dev.txt", "a");
FILE *file2;
file2 = fopen("L_kvadrat_st_dev.txt", "a");
double delta_fi_na_kvadrat, delta_L_na_kvadrat, delta_fi, delta_L;
for (int n=1 ; n < 11 ; n++)
{
double omega_veliko= n*n*gama_nula*gama_nula - w*w;
double g=sqrt(omega_veliko);
double gama=n*gama_nula;
double I=n*I0;
double A= inicijalna_pocetna_vrednost;
double LzFi_plus_FiLZ_Nula=r + 2*A*B;
double Lz_na_kvadrat_nula=q + B*B;
double fi_na_kvadrat_nula= p + A*A;
double w_na_kvadrat=w*w;
t=t0;
y1=y10;
y2=y20;
y3=y30;
y4=y40;
f1=f10;
f2=f20;
f3=f30;
f4=f40;
f5=f50;
for (int i = 0; i < 1000; i += 1)
{
for (int j = 0; j < 30; j += 1)
{
double k1_f1i2 = h * izvod_od_f1( t,f1,f2,n);
```

```

double l1_f1i2 = h * izvod_od_f2( t,f1,f2,n);
double k2_f1i2 = h * izvod_od_f1(t + h / 2, f1+ k1_f1i2 / 2 , f2 + l1_f1i2 / 2,n);
double l2_f1i2 = h * izvod_od_f2(t + h / 2, f1+ k1_f1i2 / 2 , f2 + l1_f1i2 / 2,n);
double k3_f1i2= h * izvod_od_f1(t + h / 2, f1+ k2_f1i2 / 2 , f2 + l2_f1i2 / 2,n);
double l3_f1i2 = h * izvod_od_f2(t + h / 2, f1+ k2_f1i2 / 2 , f2 + l2_f1i2 / 2 ,n);
double k4_f1i2= h * izvod_od_f1(t + h, f1+ k3_f1i2, f2 + l3_f1i2 ,n);
double l4_f1i2 = h * izvod_od_f2(t + h, f1+ k3_f1i2 , f2 + l3_f1i2,n);
double f1_prirastaj=(k1_f1i2 + 2 * k2_f1i2 + 2 * k3_f1i2 + k4_f1i2) / 6;
double f2_prirastaj=(l1_f1i2 + 2 * l2_f1i2 + 2 * l3_f1i2 + l4_f1i2) / 6;
f1=f1 + f1_prirastaj;
f2=f2 + f2_prirastaj;
double f_k1 = h * izvod_od_f3( t,f3,f4,f5,y1 , y2 ,n);
double f_l1 = h * izvod_od_f4( t,f3,f4,f5,y1 , y2 ,n);
double f_m1 = h * izvod_od_f5( t,f3,f4,f5,y1 , y2 ,n);
double f_k2 = h * izvod_od_f3(t + h / 2, f3+ f_k1 / 2 , f4 + f_l1 / 2, f5 + f_m1 / 2,y1 ,y2, n);
double f_l2 = h * izvod_od_f4(t + h / 2, f3+ f_k1 / 2 , f4 + f_l1 / 2, f5 + f_m1 / 2,y1 , y2,n);
double f_m2 = h * izvod_od_f5(t + h / 2, f3+ f_k1 / 2 , f4 + f_l1 / 2, f5 + f_m1 / 2,y1 , y2, n);
double f_k3 = h * izvod_od_f3(t + h / 2, f3+ f_k2 / 2 , f4 + f_l2 / 2, f5 + f_m2 / 2,y1 , y2, n);
double f_l3 = h * izvod_od_f4(t + h / 2, f3+ f_k2 / 2 , f4 + f_l2 / 2, f5 + f_m2 / 2,y1 , y2,n);
double f_m3 = h * izvod_od_f5(t + h / 2, f3+ f_k2 / 2 , f4 + f_l2 / 2, f5 + f_m2 / 2,y1 , y2, n);
double f_k4 = h * izvod_od_f3(t + h, f3+ f_k3 , f4 + f_l3, f5 + f_m3 ,y1 , y2, n);
double f_l4 = h * izvod_od_f4(t + h, f3+ f_k3 , f4 + f_l3, f5 + f_m3,y1 , y2,n);
double f_m4 = h * izvod_od_f5(t + h, f3+ f_k3 , f4 + f_l3, f5 + f_m3,y1 , y2, n);
double f3_prirastaj=(f_k1 + 2 * f_k2 + 2 * f_k3 + f_k4) / 6;
double f4_prirastaj=(f_l1 + 2 * f_l2 + 2 * f_l3 + f_l4) / 6;
double f5_prirastaj=(f_m1 + 2 * f_m2 + 2 * f_m3 + f_m4) / 6;
f3=f3 + f3_prirastaj;
f4=f4 + f4_prirastaj;
f5=f5 + f5_prirastaj;
double k1 = h * izvod_od_y1( t,y1,y2,y3,y4,n);
double l1 = h * izvod_od_y2( t,y1,y2,y3,y4,n);
double m1 = h * izvod_od_y3( t,y1,y2,y3,y4,n);
double n1 = h * izvod_od_y4( t,y1,y2,y3,y4,n);
double k2 = h * izvod_od_y1(t + h / 2, y1+ k1 / 2 , y2 + l1 / 2, y3 + m1 / 2, y4 + n1 / 2 ,n);
double l2 = h * izvod_od_y2(t + h / 2, y1+ k1 / 2 , y2 + l1 / 2, y3 + m1 / 2, y4 + n1 / 2 ,n);
double m2 = h * izvod_od_y3(t + h / 2, y1+ k1 / 2 , y2 + l1 / 2, y3 + m1 / 2, y4 + n1 / 2, n);

```

```

double n2 = h * izvod_od_y4(t + h / 2, y1 + k1 / 2, y2 + l1 / 2, y3 + m1 / 2, y4 + n1 / 2, n);
double k3 = h * izvod_od_y1(t + h / 2, y1 + k2 / 2, y2 + l2 / 2, y3 + m2 / 2, y4 + n2 / 2, n);
double l3 = h * izvod_od_y2(t + h / 2, y1 + k2 / 2, y2 + l2 / 2, y3 + m2 / 2, y4 + n2 / 2, n);
double m3 = h * izvod_od_y3(t + h / 2, y1 + k2 / 2, y2 + l2 / 2, y3 + m2 / 2, y4 + n2 / 2, n);
double n3 = h * izvod_od_y4(t + h / 2, y1 + k2 / 2, y2 + l2 / 2, y3 + m2 / 2, y4 + n2 / 2, n);
double k4 = h * izvod_od_y1(t + h, y1 + k3, y2 + l3, y3 + m3, y4 + n3, n);
double l4 = h * izvod_od_y2(t + h, y1 + k3, y2 + l3, y3 + m3, y4 + n3, n);
double m4 = h * izvod_od_y3(t + h, y1 + k3, y2 + l3, y3 + m3, y4 + n3, n);
double n4 = h * izvod_od_y4(t + h, y1 + k3, y2 + l3, y3 + m3, y4 + n3, n);
double y1_prirastaj = (k1 + 2 * k2 + 2 * k3 + k4) / 6;
double y2_prirastaj = (l1 + 2 * l2 + 2 * l3 + l4) / 6;
double y3_prirastaj = (m1 + 2 * m2 + 2 * m3 + m4) / 6;
double y4_prirastaj = (n1 + 2 * n2 + 2 * n3 + n4) / 6;
vrednost_ugla_nepert = exp(-n * gama_nula * t) * (inicijalna_pocetna_vrednost * (cosh(g * t) +
(n * gama_nula / g) * sinh(g * t)) + (L0 / (n * I0 * g)) * sinh(g * t));
double vrednost_ugla_pert = vrednost_ugla_nepert + a * f1;
double vrednost_L_nepert = exp(-n * gama_nula * t) * (L0 * (cosh(g * t) - (n * gama_nula / g) *
sinh(g * t)) - (n * I0 * w * w) * inicijalna_pocetna_vrednost * sinh(g * t) / g);
double vrednost_L_pert = vrednost_L_nepert + a * f2;
double fi_na_kvadrat_nepert = (kT / (I * w_na_kvadrat * omega_veliko)) * (omega_veliko +
exp(-2 * gama * t) * (w_na_kvadrat - pow(gama, 2) * cosh(2 * g * t) - gama * g * sinh(2 * g * t))) +
exp(-2 * n * gama_nula * t) * (
+ (fi_na_kvadrat_nula / omega_veliko) * (-w_na_kvadrat * pow(cosh(g * t), 2) +
pow(gama, 2) * cosh(2 * g * t) + gama * g * sinh(2 * g * t)) +
(LzFi_plus_FiLZ_Nula / (2 * I * omega_veliko)) * (2 * gama * pow(sinh(g * t), 2) + g *
sinh(2 * g * t)) + (Lz_na_kvadrat_nula / pow(I * g, 2)) * pow(sinh(g * t), 2));
double fi_na_kvadrat_pert = fi_na_kvadrat_nepert + a * f3;
double fiL_plus_Lfi_nepert = exp(-2 * n * gama_nula * t) * ((4 * n * gama_nula * kT / omega_veliko)
* pow(sinh(g * t), 2) + (Lz_na_kvadrat_nula / (I * omega_veliko)) * (-2 * n * gama_nula)
* pow(sinh(g * t), 2) + g * sinh(2 * g * t)) - (I * w_na_kvadrat / omega_veliko) * fi_na_kvadrat_nula
* ((2 * n * gama_nula) * pow(sinh(g * t), 2) + g * sinh(2 * g * t)) - (LzFi_plus_FiLZ_Nula /
omega_veliko) * (w_na_kvadrat * cosh(2 * g * t) - pow(gama, 2)));
double fiL_plus_Lfi_pert = fiL_plus_Lfi_nepert + a * f4;
double e_na = exp(-2 * n * gama_nula * t);
double L_na_kvadrat_nepert = (kT * I / omega_veliko) * (-pow(w, 2) * (1 - e_na) + pow(gama, 2) * (1 -
e_na * cosh(2 * g * t)) - gama * g * e_na * sinh(2 * g * t)) + (e_na
* Lz_na_kvadrat_nula / omega_veliko) * (-w_na_kvadrat * pow(cosh(g * t), 2) +
pow(gama, 2) * cosh(2 * g * t) - g * gama * sinh(2 * g * t))
+ (e_na * pow(I, 2) * pow(w, 4) * fi_na_kvadrat_nula / omega_veliko) * pow(sinh(g * t), 2)

```



```

    + (e_na*I*pow(w,2)*LzFi_plus_FiLZ_Nula/(2*omega_veliko)) * ( 2*gamma* pow(
sinh(g*t), 2 ) - g*sinh(2*g*t) );
double L_na_kvadrat_pert=L_na_kvadrat_nepert + a * f5;
delta_fi_na_kvadrat=fi_na_kvadrat_pert - pow( vrednost_ugla_pert , 2);
delta_L_na_kvadrat=L_na_kvadrat_pert - pow( vrednost_L_pert , 2);
t=t + h;
y1=y1 + y1_prirastaj;
y2=y2 + y2_prirastaj;
y3=y3 + y3_prirastaj;
y4=y4 + y4_prirastaj;
}
fprintf(file1, "%g, %u, %g\n", t, n, delta_fi_na_kvadrat );
fprintf(file2, "%g, %u, %g\n", t, n, delta_L_na_kvadrat );
}
}
return 0;
}

```

Изворни код програма за нумеричко израчунавање квадрата стандардних одступања угла и момента импулса за слабо нехармонијски осцилатор у случају када је  $10\gamma_0 < \omega$ :

```

#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
const double t0 = 0;
const double w = 1;
const double inicijalna_pocetna_vrednost=1.1;
const double m0=3;
const double I0 = 3;
const double y10 = 0.1;
const double y20 = 0.1;
const double y30 = 0.1;
const double y40 = 0.1;
const double f10 = 0;
const double f20 = 0;
const double f30 = 0.00;

```

```

const double f40 = 0.00;
const double f50 = 0.00;
const double L0= 1.2;
const double q=5;
const double a =-0.001;
const double gama_nula =0.011;
const double kT=0.01;
const double B=1.2;
const double p=0.01;
const double r=0;
double izvod_od_y1(double t, double y1, double y2 , double y3,double y4, double N)
{
    double dy1;
    dy1= (3/(2*N*I0)) * y2;
    return dy1;
}
double izvod_od_y2(double t, double y1, double y2 , double y3, double y4,double N)
{
    double dy2;
    dy2= - 2*N*I0*w*w*y1 - 2*N*gama_nula*y2 + (2/(N*I0)) * y3 ;
    return dy2;
}
double izvod_od_y3(double t, double y1, double y2 , double y3, double y4,double N)
{
    double dy3;
    double fi_0= inicijalna_pocetna_vrednost;
    double omega_veliko= sqrt(1 - pow(N * gama_nula / w , 2));
    double s=omega_veliko;
    double vrednostFI=exp(-N*gama_nula*t) * (
        B*sin(t*w*s) / (N*m0*s*w) + fi_0* ( cos(t*s*w) + N* sin(t*s*w)*gama_nula / (w*s) ));
    dy3=-2*N*I0*w*w*y2 - 4*N*gama_nula*y3 + (2/(N*I0)) * y4 + kT*8*N*N*I0*gama_nula *
        vrednostFI;
    return dy3;
}
double izvod_od_y4(double t, double y1, double y2 , double y3, double y4,double N)
{

```

```

double dy4;
double omega_veliko=1 - pow(N * gama_nula / w , 2);
double s=sqrt(omega_veliko);
double A= inicijalna_pocetna_vrednost;
double fi_0=A;
double L=exp(-N*gama_nula*t) * ( L0 * ( cos(s*w*t)- N*gama_nula*sin(s*w*t)/(s*w) ) -
      N*I0*w* A *sin(s*w*t) / s );
dy4=-((3/2)*N*I0*w*w * y3 - 6*N*gama_nula*y4 + kT*12*N*N*I0*gama_nula * L;
return dy4;

}

double izvod_od_f3(double t, double f3, double f4, double f5, double y1 , double y2, double N)
{
double df3;
df3= (1/(N*I0)) * f4;
return df3;
}

double izvod_od_f4(double t, double f3, double f4, double f5, double y1 , double y2, double N)
{
double df4;
df4=-2*N*I0*w*w * f3 - 2*N*gama_nula*f4 +(2/(N*I0))*f5 - 6*y1;
return df4;
}

double izvod_od_f5(double t, double f3, double f4, double f5, double y1 , double y2, double N)
{
double df5;
df5=-N*I0*w*w * f4- 4*N*gama_nula*f5 - 3 * y2;
return df5;
}

double izvod_od_f1(double t, double f1, double f2,double N)
{
double df1;
df1= (1/(N*m0)) * f2;
return df1;
}

double izvod_od_f2(double t, double f1, double f2,double N)

```

```

{
double df2;
double omega_veliko=1 - pow(N * gama_nula / w , 2);
double s=sqrt(omega_veliko);
double A= inicijalna_pocetna_vrednost;
double LzFi_plus_FiLZ_Nula=r + 2*A*B;
double Lz_na_kvadrat_nula=q + B*B;
double fi_na_kvadrat_nula= p + A*A;
double gama=N*gama_nula;
double I=N*I0;
double w_na_kvadrat=w*w;
double fi_na_kvadrat= (-kT)* (-pow(s*w,2) + exp(-2*N*gama_nula*t)* ( pow(w,2) -
pow(N*gama_nula ,2)*cos(2*s*w*t) + N*gama_nula*w*s* sin(2*s*w*t) ) ) / (
N*I0*pow(w,4)*pow(s,2) )
+ (Lz_na_kvadrat_nula/(N*N*I0*I0*w*w*s*s ))* exp(-
2*N*gama_nula*t)*pow(sin(s*w*t),2)
- fi_na_kvadrat_nula* exp(-2*N*gama_nula*t)*
( -w*w*pow(cos(s*w*t),2) + pow(N*gama_nula,2) *cos(2*s*w*t) - N*gama_nula*s*w*
sin(2*s*w*t) ) / pow(s*w,2) +(LzFi_plus_FiLZ_Nula* exp(-
2*N*gama_nula*t)/ (2*N*I0*pow(w*s,2) ) )*( 2*N*gama_nula*pow(sin(s*w*t),2) + s*w*
sin(2*s*w*t) );
df2= - I0*N*w*w*f1 - 2*N * gama_nula * f2 - 3*fi_na_kvadrat;
return df2;
}
int main(void)
{
double y1,y2,y3,y4,f1,f2,f3,f4,f5;
double t;
double h = 0.001;
FILE *file1;
file1 = fopen("fi_kvadrat_st_dev.txt", "a");
FILE *file2;
file2 = fopen("L_kvadrat_st_dev.txt", "a");
for (int n=1; n < 11; n++)
{
int N=n;
double omega_veliko=1 - pow(N * gama_nula / w , 2);

```

```

double s=sqrt(omega_veliko);
double g=sqrt(omega_veliko);
double gama=n*gama_nula;
double I=n*I0;
double A= inicijalna_pocetna_vrednost;
double LzFi_plus_FiLZ_Nula=r + 2*A*B;
double Lz_na_kvadrat_nula=q + B*B;
double fi_na_kvadrat_nula= p + A*A;
double w_na_kvadrat=w*w;

t=t0;
y1=y10;
y2=y20;
y3=y30;
y4=y40;
f1=f10;
f2=f20;
f3=f30;
f4=f40;
f5=f50;

double delta_fi_na_kvadrat,delta_L_na_kvadrat;
for (int i = 0; i < 1000; i += 1)
{
for (int j = 0; j < 100; j += 1)
{
double k1_f1i2 = h * izvod_od_f1( t,f1,f2,n);
double l1_f1i2 = h * izvod_od_f2( t,f1,f2,n);
double k2_f1i2 = h * izvod_od_f1(t + h / 2, f1+ k1_f1i2 / 2 , f2 + l1_f1i2 / 2,n);
double l2_f1i2 = h * izvod_od_f2(t + h / 2, f1+ k1_f1i2 / 2 , f2 + l1_f1i2 / 2,n);
double k3_f1i2= h * izvod_od_f1(t + h / 2, f1+ k2_f1i2 / 2 , f2 + l2_f1i2 / 2,n);
double l3_f1i2 = h * izvod_od_f2(t + h / 2, f1+ k2_f1i2 / 2 , f2 + l2_f1i2 / 2 ,n);
double k4_f1i2= h * izvod_od_f1(t + h, f1+ k3_f1i2, f2 + l3_f1i2 ,n);
double l4_f1i2 = h * izvod_od_f2(t + h, f1+ k3_f1i2 , f2 + l3_f1i2,n);
double f1_prirastaj=(k1_f1i2 + 2 * k2_f1i2 + 2 * k3_f1i2 + k4_f1i2) / 6;
double f2_prirastaj=(l1_f1i2 + 2 * l2_f1i2 + 2 * l3_f1i2 + l4_f1i2) / 6;
f1=f1 + f1_prirastaj;
f2=f2 + f2_prirastaj;
}
}

```

```

double f_k1 = h * izvod_od_f3( t,f3,f4,f5,y1 , y2 ,n);
double f_l1 = h * izvod_od_f4( t,f3,f4,f5,y1 , y2 ,n);
double f_m1 = h* izvod_od_f5( t,f3,f4,f5,y1 , y2 ,n);
double f_k2 = h * izvod_od_f3(t + h / 2, f3+ f_k1 / 2 , f4 + f_l1 / 2, f5 + f_m1 / 2,y1 , y2, n);
double f_l2 = h * izvod_od_f4(t + h / 2, f3+ f_k1 / 2 , f4 + f_l1 / 2, f5 + f_m1 / 2,y1 , y2,n);
double f_m2 = h* izvod_od_f5(t + h / 2, f3+ f_k1 / 2 , f4 + f_l1 / 2, f5 + f_m1 / 2,y1 , y2, n);
double f_k3 = h * izvod_od_f3(t + h / 2, f3+ f_k2 / 2 , f4 + f_l2 / 2, f5 + f_m2 / 2,y1 , y2, n);
double f_l3 = h * izvod_od_f4(t + h / 2, f3+ f_k2 / 2 , f4 + f_l2 / 2, f5 + f_m2 / 2,y1 , y2,n);
double f_m3 = h * izvod_od_f5(t + h / 2, f3+ f_k2 / 2 , f4 + f_l2 / 2, f5 + f_m2 / 2,y1 , y2, n);
double f_k4 = h * izvod_od_f3(t + h, f3+ f_k3 , f4 + f_l3, f5 + f_m3 ,y1 , y2, n);
double f_l4 = h * izvod_od_f4(t + h, f3+ f_k3 , f4 + f_l3, f5 + f_m3,y1 , y2,n);
double f_m4 = h * izvod_od_f5(t + h, f3+ f_k3 , f4 + f_l3, f5 + f_m3,y1 , y2, n);
double f3_prirastaj=(f_k1 + 2 * f_k2 + 2 * f_k3 + f_k4) / 6;
double f4_prirastaj=(f_l1 + 2 * f_l2 + 2 * f_l3 + f_l4) / 6;
double f5_prirastaj=(f_m1 + 2 * f_m2 + 2 * f_m3 + f_m4) / 6;
f3=f3 + f3_prirastaj;
f4=f4 + f4_prirastaj;
f5=f5 + f5_prirastaj;
double k1 = h * izvod_od_y1( t,y1,y2,y3,y4,n);
double l1 = h * izvod_od_y2( t,y1,y2,y3,y4,n);
double m1= h* izvod_od_y3( t,y1,y2,y3,y4,n);
double n1= h * izvod_od_y4( t,y1,y2,y3,y4,n);
double k2= h * izvod_od_y1(t + h / 2, y1+ k1 / 2 , y2 + l1 / 2, y3 + m1 / 2, y4 + n1 / 2 ,n);
double l2= h * izvod_od_y2(t + h / 2, y1+ k1 / 2 , y2 + l1 / 2, y3 + m1 / 2, y4 + n1 / 2 ,n);
double m2= h * izvod_od_y3(t + h / 2, y1+ k1 / 2 , y2 + l1 / 2, y3 + m1 / 2, y4 + n1 / 2 ,n);
double n2= h * izvod_od_y4(t + h / 2, y1+ k1 / 2 , y2 + l1 / 2, y3 + m1 / 2, y4 + n1 / 2 ,n);
double k3= h * izvod_od_y1(t + h / 2, y1+ k2 / 2 , y2 + l2 / 2, y3 + m2 / 2, y4+ n2 / 2 ,n);
double l3= h * izvod_od_y2(t + h / 2, y1+ k2 / 2 , y2 + l2 / 2, y3 + m2 / 2, y4+ n2 / 2 ,n);
double m3= h * izvod_od_y3(t + h / 2, y1+ k2 / 2 , y2 + l2 / 2, y3 + m2 / 2, y4+ n2 / 2 ,n);
double n3= h * izvod_od_y4(t + h / 2, y1+ k2 / 2 , y2 + l2 / 2, y3 + m2 / 2, y4+ n2 / 2 ,n);
double k4= h * izvod_od_y1(t + h, y1+ k3 , y2 + l3, y3 + m3, y4 + n3 ,n);
double l4 = h * izvod_od_y2(t + h, y1+ k3 , y2 + l3, y3 + m3 , y4 + n3 ,n);
double m4 = h * izvod_od_y3(t + h, y1+ k3 , y2 + l3, y3 + m3, y4 + n3 ,n);
double n4 = h * izvod_od_y4(t + h, y1+ k3 , y2 + l3, y3 + m3, y4 + n3 ,n);
double y1_prirastaj=(k1 + 2 * k2 + 2 * k3 + k4) / 6;
double y2_prirastaj=(l1 + 2 * l2 + 2 * l3 + l4) / 6;

```

```

double y3_prirastaj=(m1 + 2 * m2 + 2 * m3 + m4) / 6;
double y4_prirastaj=(n1 + 2 * n2 + 2 * n3 + n4) / 6;
double vrednost_ugla_nepert=exp(-N*gama_nula*t) * ( B*sin(t*w*s) / (N*m0*s*w) +
    inicijalna_pocetna_vrednost* ( cos(t*s*w) + N* sin(t*s*w)*gama_nula / (w*s) ) );
double vrednost_ugla_pert=vrednost_ugla_nepert + a * f1;
double vrednost_L_nepert=exp(-N*gama_nula*t) * ( L0 * ( cos(s*w*t) -
    N*gama_nula*sin(s*w*t) / (s*w) ) - N*I0*w* A *sin(s*w*t) / s );
double vrednost_L_pert=vrednost_L_nepert + a * f2;
double fi_na_kvadrat_nepert= (-kT)* (-pow(s*w,2) + exp(-2*N*gama_nula*t)* ( pow(w,2) -
    pow(N*gama_nula,2)*cos(2*s*w*t) + N*gama_nula*w*s* sin(2*s*w*t) ) ) / (
    N*I0*pow(w,4)*pow(s,2) )
    + (Lz_na_kvadrat_nula/(N*N*I0*I0*w*w*s*s)) * exp(-
    2*N*gama_nula*t)*pow(sin(s*w*t),2)
    - fi_na_kvadrat_nula* exp(-2*N*gama_nula*t)* ( -w*w*pow(cos(s*w*t),2) +
    pow(N*gama_nula,2) *cos(2*s*w*t) - N*gama_nula*s*w* sin(2*s*w*t) ) / pow(s*w,2)
    + (LzFi_plus_FiLZ_Nula * exp(-2*N*gama_nula*t) / (2*N*I0*pow(w*s,2) ) ) * (
    2*N*gama_nula*pow(sin(s*w*t),2) + s*w* sin(2*s*w*t) );
double fi_na_kvadrat_pert=fi_na_kvadrat_nepert + a * f3;
double fiL_plus_Lfi_nepert=exp(-2*n*gama_nula*t) * ( (4*kT/ pow(s*w,2) ) *pow(sin(s*w*t),2)
    - ( Lz_na_kvadrat_nula/ ( n*I0* pow(s*w,2) ) ) * ( 2*n*gama_nula * pow(sin(s*w*t),2)
    - s*w*sin(2*s*w*t) ) - (n*I0/pow(s,2))*fi_na_kvadrat_nula * ( -2*n*gama_nula *
    pow(sin(s*w*t),2) - s*w*sin(2*s*w*t) ) + (LzFi_plus_FiLZ_Nula/ pow(s*w,2))* (w*w *
    cos(2*s*w*t) - pow(n*gama_nula,2) ) );
double fiL_plus_Lfi_pert=fiL_plus_Lfi_nepert + a * f4;
double e_na= exp(-2*n*gama_nula*t);
double L_na_kvadrat_nepert= (-N*I0*kT)* ( -pow(w,2) *(1- exp(-2*N*gama_nula*t) )
    + pow(N*gama_nula,2) * ( 1 - exp(-2*N*gama_nula*t) * cos(2*s*w*t) )
    + N*gama_nula*w*s* sin(2*s*w*t) ) / ( pow(w,2)*pow(s,2) ) - Lz_na_kvadrat_nula*
    exp(-2*N*gama_nula*t) * ( - w*w*pow(cos(s*w*t),2) + pow(N*gama_nula,2)*
    cos(2*s*w*t) + N*gama_nula*w*s* sin(2*s*w*t) ) / pow(s*w,2) +
    fi_na_kvadrat_nula* exp(-2*N*gama_nula*t)* pow(N*I0*w,2)*pow(sin(s*w*t),2)/
    pow(s,2) - N*I0* LzFi_plus_FiLZ_Nula* exp(-2*N*gama_nula*t)
    * ( -2*N*gama_nula*pow(sin(s*w*t),2) + s*w*sin(2*s*w*t) ) / ( 2* pow(s,2) );
double L_na_kvadrat_pert=L_na_kvadrat_nepert + a * f5;
delta_fi_na_kvadrat=fi_na_kvadrat_pert - pow( vrednost_ugla_pert , 2);
delta_L_na_kvadrat=L_na_kvadrat_pert - pow( vrednost_L_pert , 2);
t=t + h;
y1=y1 + y1_prirastaj;
y2=y2 + y2_prirastaj;

```

```

y3=y3 + y3_prirastaj;
y4=y4 + y4_prirastaj;
}
fprintf(file1, "%g, %u, %g\n", t, n, delta_fi_na_kvadrat );
fprintf(file2, "%g, %u, %g\n", t, n, delta_L_na_kvadrat );
}
}
return 0;
}

```

Изворни код C++ програма за налажење кватног времена првог пролаза у случају  $10\gamma_0 < \omega$ :

```

#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
const double t0 = 0;
const double w = 0.1;
const double f10=0;
const double f20=0;
const double B=1.2;
const double k=0.01;
const double p=0.01;
const double q=5;
const double r=0;
double vrednostUglaFi(double N, double gama_nula, double t , double kT, double A , double m0)
{
double vrednostFI;
double omega_veliko= 1 - pow(N * gama_nula / w , 2);
double s;
s=sqrt(omega_veliko);
vrednostFI=exp(-N*gama_nula*t) * (
B*sin(t*w*s) / (N*m0*s*w) + A* ( cos(t*s*w) + N* sin(t*s*w)*gama_nula / (w*s) ) );
return vrednostFI;
}
double vrednostF(double N, double gama_nula, double t , double kT, double A, double m0)

```



```

{
double F;
double omega_veliko= 1 - pow(N * gama_nula / w , 2);
double s;
s=sqrt(omega_veliko);
double n_gama_nula=N * gama_nula;
double n_m_0= N * m0;
double e1=exp(-N*gama_nula*t);
double e2=exp(-2*N*gama_nula*t);
double w_na_2=pow(w,2);
F=3*( - 1/( n_m_0*w_na_2 ) + e1*( ( cos(w*s*t)+n_gama_nula*(sin(w*s*t)/(w*s)) ) /
(n_m_0*w_na_2) ) )
* (kT/(n_m_0*w_na_2)+e2* (pow(B,2) +q ) * ( pow(sin(w*s*t),2) / pow( n_m_0*w*s ,2))
+e2*(2*A*B + r)
* ( (2*n_gama_nula* pow(sin(w*s*t),2) +w*s*sin(2*w*s*t))/(2*n_m_0*omega_veliko*w_na_2) )+
e2*(pow(A,2)+p) * ( ( -w_na_2*pow( cos(w*s*t),2)+pow(n_gama_nula,2)*cos(2*w*s*t)-
n_gama_nula*w*s*sin(2*w*s*t) ) / (-1*omega_veliko*w_na_2)) + kT*e2*( ( w_na_2 -
pow(n_gama_nula,2) *cos(2*w*s*t) + n_gama_nula*w*s*sin(2*w*s*t) ) / (-
1*n_m_0*w_na_2*w_na_2*omega_veliko) ) );
return F;
}
int main(void)
{
double niz_pocetnih_vrednosti[4];
niz_pocetnih_vrednosti[0]=11;
niz_pocetnih_vrednosti[1]=13;
niz_pocetnih_vrednosti[2]=15;
niz_pocetnih_vrednosti[3]=16;
double niz_gama_nula[2];
niz_gama_nula[0]=0.001;
niz_gama_nula[1]=0.0001;
double niz_kT[3];
niz_kT[0]=0.01;
niz_kT[1]=1;
niz_kT[2]=100;
double m0=3;
double y1,y2,y3;

```

```
double t;
t=0;
double tKorak=0.00001;
FILE *f;
f = fopen("rez1.txt", "a");
for (int i1 = 0; i1 < 4 ; i1 += 1)
{
for (int i2 = 0; i2 < 2; i2 += 1)
{
double gama_nula=niz_gama_nula[i2];
for (int i3 = 0; i3 < 3; i3 += 1)
{
double kT=niz_kT[i3];
for (int i_n = 1; i_n < 11; i_n += 1)
{
int n= i_n;
double pocetna_vrednost=n * niz_pocetnih_vrednosti[i1];
int nKorak=0;
t=0;
int kraj=0;
while (kraj==0)
{
double vrednostUgla=vrednostUglaFi(n, gama_nula, t , kT , pocetna_vrednost , m0);
double vrednostFunkcijeF=vrednostF(n, gama_nula, t , kT , pocetna_vrednost , m0);
double vrednost_f=vrednostUgla - 0.001*vrednostFunkcijeF;
if ((vrednost_f - pocetna_vrednost) >= 0.0001)
{
kraj=1;
fprintf(f, "%g, %g, %g , %u, %g, %g, %g\n", pocetna_vrednost, gama_nula, kT , n ,
0.001*vrednostFunkcijeF , vrednost_f - pocetna_vrednost, t);
}
if (nKorak > 100000)
{
kraj=1;
}
}
t=t+tKorak;
```

```

    nKorak++;
}
}
}
}
return 0;
}

```

Изворни код C++ програма за налажење кватног времена првог пролаза у случају  $\gamma_0 > \omega$ :

```

#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
const double t0 = 0;
const double w = 0.1;
const double f10=0;
const double f20=0;
const double B=1.2;
const double k=0.01;
const double p=0.01;
const double q=5;
const double r=0;
double vrednostUglaFi(double N, double gama_nula, double t , double kT, double A , double m0)
{
    double vrednostFI;
    double omega_veliko=pow(N,2) * pow (gama_nula , 2 ) - pow(w,2);
    double g;
    g=sqrt(omega_veliko);
    vrednostFI=exp(-N*gama_nula*t) * (
    B*sinh(t*g) / (N*m0*g) + A * ( cosh(t*g) + N* sinh(t*g)*gama_nula / g ));
    return vrednostFI;
}
double vrednostF(double N, double gama_nula, double t , double kT, double A, double m0)
{

```

```

double F;
double omega_veliko=pow(N,2) * pow ( gama_nula , 2 ) - pow(w,2);
double g;
g=sqrt(omega_veliko);
double n_gama_nula=N * gama_nula;
double n_m_0= N * m0;
double e1=exp(-N*gama_nula*t);
double e2=exp(-2*N*gama_nula*t);
double sinhgt=sinh(g*t);
double sinh2gt=sinh(2*g*t);
double coshgt=cosh(g*t);
double cosh2gt=cosh(2*g*t);
double w_na_2=pow(w,2);
F=3*( - 1/( n_m_0*w_na_2 ) + e1*( ( coshgt+n_gama_nula*(sinhgt/g) ) / (n_m_0*w_na_2) ) )
* (kT/(n_m_0*w_na_2)+e2*( pow(B,2) +q ) * ( pow(sinhgt,2) / pow( n_m_0*g ,2)) +e2*(2*A*B +
r) * ( (2*n_gama_nula* pow(sinhgt,2) +g*sinh2gt)/(2*n_m_0*omega_veliko) )+e2*(pow(A,2)+p
* ( ( -w_na_2*pow(coshgt,2)+pow(n_gama_nula,2)*cosh2gt+n_gama_nula*g*sinh2gt ) /
omega_veliko) + kT*e2*( ( w_na_2 - pow(n_gama_nula,2) *cosh2gt - n_gama_nula*g*sinh2gt ) /
(n_m_0*w_na_2*omega_veliko) ) );
return F;
}
int main(void)
{
double niz_pocetnih_vrednosti[4];
niz_pocetnih_vrednosti[0]=11;
niz_pocetnih_vrednosti[1]=13;
niz_pocetnih_vrednosti[2]=15;
niz_pocetnih_vrednosti[3]=16;
double niz_gama_nula[3];
niz_gama_nula[0]=0.11;
niz_gama_nula[1]=1;
niz_gama_nula[2]=10;
double niz_kT[3];
niz_kT[0]=0.01;
niz_kT[1]=1;
niz_kT[2]=100;

```

```
double m0=3;
double y1,y2,y,t;
t=0;
double tKorak=0.00001;
FILE *f;
f = fopen("rez.txt", "a");
for (int i1 = 0; i1 < 4 ; i1 += 1)
{
for (int i2 = 0; i2 < 3; i2 += 1)
{
double gama_nula=niz_gama_nula[i2];
for (int i3 = 0; i3 < 3; i3 += 1)
{
double kT=niz_kT[i3];
for (int i_n = 1; i_n < 11; i_n += 1)
{
int n= i_n;
double pocetna_vrednost=n * niz_pocetnih_vrednosti[i1];
int nKorak=0;
t=0;
int kraj=0;
while (kraj==0)
{
double vrednostUgla=vrednostUglaFi(n, gama_nula, t , kT , pocetna_vrednost , m0);
double vrednostFunkcijeF=vrednostF(n, gama_nula, t , kT , pocetna_vrednost , m0);
double vrednost_f=vrednostUgla - 0.001*vrednostFunkcijeF;
if ((vrednost_f - pocetna_vrednost) >= 0.0001)
{
kraj=1;
fprintf(f, "%g, %g, %g , %u, %g, %g, %g\n", pocetna_vrednost, gama_nula, kT , n ,
0.001*vrednostFunkcijeF , vrednost_f - pocetna_vrednost, t);
}
}
if (nKorak > 100000)
{
kraj=1;
}
}
```

```
t=t+tKorak;  
nKorak++;  
}  
}  
}  
}  
}  
return 0;  
}
```

**Литература**

- Agudov N. V., Dubkov A. A. and Spagnolo B. 2003. *Physica A* 325 144.
- Adams R., Campbell J. J. 1950. *Am. Chem. Soc.* 72, 153.
- Balzani V., Credi A., Marchioni F., Silvi S. and Venturi M. 2005. *Molecular nanotechnology: Towards Artificial Molecular Machines and Motors*
- Balzani V., Credi A., Raymo F. M., Stoddart J. F., 2000. Artificial Molecular Machines *Angew. Chem., Int. Ed.*, 39, 3348–3391.
- Bell and Robinson. J., 1927. *Chem. Soc.* 2234.
- Boyke Schönborn J., Rainer Herges J., Hartke B. 2009. *J. Chem. Phys.* 130, 234906
- Breitenberger E. 1985. *Found. Phys.* 15, 353
- Breuer, H.-P., Petruccione, F. 2002. *The Theory of Open Quantum Systems*, Clarendon Press, Oxford.
- Browne, W., Feringa, B.L. 2006. *Nature Nanotech.* 1, 25-35
- Burada P. S. and Lindner B., 2012. *Phys. Rev. E* 85, 032102
- Caldeira A.O., Leggett A.J. 1983. *Physica.A* 121, 587-616
- Carlesso, Matteo & Bassi, Angelo, 2016. *Quantum Brownian Motion in the Heisenberg picture: derivation of the adjoint master equation and applications.*
- Chandrasekhar S. 1993. *Rev. Mod. Phys.* 15 1
- Coffey W. T., Kalmykov Y. P. and Titov S. V., 2004. *J. Chem. Phys.* 120, 9199
- Colter, A. K.; Schuster, I. I.; Kurland, R. J. J., 1965. *Am. Chem. Soc.* 87, 2278.
- Coluccini, C.; Grilli, S.; Lunazzi, L.; Mazzanti, A. J., 2003. *Org. Chem.* 68, 7266
- Deck, R. T., Ozturk, N., 1994. *Found. Phys. Lett.* 7, 419
- Dubkov A. A., Agudov N. V. and Spagnolo B., 2004. *Phys. Rev. E* 69, 061103
- Einstein A, 1905. *Ann. Phys.* 1V 549
- Eliel, E. L.; Wilen, S. H.; Mander, L. N., 1994. *Stereochemistry of Organic Compounds*; Wiley: New York
- Fiasconaro A., Spagnolo B., and Boccaletti S., 2005. *Phys. Rev. E* 72, 061110
- Fiasconaro A. and Spagnolo B., 2009. *Phys. Rev. E* 80, 041110

- Fiasconaro A, Mazo J J and Spagnolo B, 2010. *Phys. Rev. E* 82 041120
- Ferialdi, L., 2017. *Physical Review A* 95.5 : n. pag. Crossref. Web.
- Frewer M., 2015. arXiv:1511.00002v1.
- Giulini D., Joos E., Kiefer C., Kupsch J., Stamatescu I.-O., Zeh H. D., 1996. *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, Springer, Berlin
- Goodsell D. S., 2008. *The Machinery of Life* (Springer, New York).
- Grot N., Rovelli C. and Tate R. S. , 1996. *Phys. Rev. A* 54, 4676
- Herbut Fedor, 1999. *Kvantna mehanika za istraživače*, Univerzitet u Beogradu
- Hu B L, Paz J P and Zhang Y, 1992. *Phys. Rev. D* 45 2843
- Hund F, 1927. *Z. Phys.* 43 805
- Hutchison J.A., et al, 2014. *Nature Nanotech.* 9, 131–136
- Jeknić-Dugić J., 2009, *Europ. Phys. J. D* 51, 193
- Jeknić-Dugić J., Petrović I., Arsenijević M. and Dugić M., 2018. *J. Phys.: Condens. Matter* 30, 195304
- Jones, R.A., 2008. *Soft Machines: Nanotechnology and Life*, Oxford University Press
- Jordan, P., 1927. *Z. Phys.* 44, 1
- Korobenko A., Milner A. A., Milner, V., 2014. *Phys. Rev. Lett.* 112, 113004
- Kottas, G.S., Clarke, L.I., Horinek, D., Michl, J. 2005. *Chem. Rev.* 105, 1281-1376
- Kramers H. A., 1940. *Physica (Amsterdam)* 7, 284
- Kubo, R., 1966. *Rep. Prog. Phys.* Part 1 29, 255.
- Kuhn and Albrecht, 1927. *Annalen* 455, 272.
- N. Kumar, *Pramana* , 1985. 25, 363
- Kurland, R. J.; Schuster, I. I.; Colter, A. K. J. 1965. *Am. Chem. Soc.* 87, 2279.
- Kutnera R., Ausloos M., Grech D., Di Matteo T., Schinckus C. and Stanley H. E., 2019. *Physica A (Amsterdam)* 516, 240
- Lewis, G. N.; Magel, T. T.; Lipkin, D. J., 1942. *Am. Chem. Soc.* 64, 1774
- Lindner, A. B.; Grynszpan, F.; Biali, J., 1993. *Org. Chem.* 58,6662



- Lisowski B, Valenti D, Spagnolo B, Bier M and Gudowska-Nowak E, 2015. *Phys. Rev. E* 91 042713
- Mao X., 2011. *Stochastic Differential Equations and Applications*, (Horwood Publishing, Chichester, UK).
- Masoliver J. and Perello J., 2009. *Phys. Rev. E* 80, 016108
- Mel'nikov V. I., 1991. *Phys. Rep.* 209, 1
- Meng X, Zhang J-W and Guo H, 2016. *Physica A* 452 281
- Milburn, G.J., 1997. *Schrodinger's Machines: The Quantum Technology Reshaping Everyday Life*, W. H. Freeman
- Mislow, K., 1989. *Chemtracts: Org. Chem.* 2, 151.
- Montaudou, G.; Finocchiaro, P.; Caccamese, S.; Bottino, F. J. , 1971. *Am. Chem. Soc.* 93, 4208
- Nagle, R.K., Saff, E.B., Snider, A.D., 2011. *Fundamentals of differential equations*, Pearson (8th edition)
- Ornigotti L., Ryabov A., Holubec V., and Filip R., 2018. *Phys. Rev. E* 97, 032127
- B. Papendell, B. A. Stickler, and K. Hornberger, 2017. *New J. Phys.* 19, 122001
- L. Pawela, P. Gawron, J. Adam Mischczak, and P. Sadowski, 2015. *PLoS ONE* 10, e0130967
- Petrović I and Jeknić-Dugić J, 2017. *Facta Universitatis* 15 71
- Petrović I., Jeknić-Dugić J., Arsenijević M., and Dugić M., 2020. 10.1103/PhysRevE. 101. 01210
- Reimann, P., Hänggi, P., 2002. *Appl Phys A* 75, 169–178
- Rivas, A., Huelga, S.F., 2011. *Open Quantum Systems. An Introduction*, SpringerBriefs in Physics, Berlin.
- Rong-Tao Q., Wu-Sheng D. and Mi X., *Physica A*, 2012. (Amsterdam) 391, 4748
- A. Roulet, S. Nimmrichter, J. M. Arrazola, S. Seah, and V. Scarani, 2017. *Phys. Rev. E* 95, 062131
- Schlosshauer, M., 2004. *Rev. Mod. Phys.* 76, 1267
- Schuster, I. I.; Colter, A. K.; Kurland, R. J. J. 1968. *Am. Chem. Soc.* 90, 4679
- B. A. Stickler, B. Papendell, and K. Hornberger, 2016. *Phys. Rev. A* 94, 033828
- B. A. Stickler, B. Schriniski, and K. Hornberger, 2018. *Phys. Rev. Lett.* 121, 040401

- Suzuki Y., Tanimura Y, J. , 2001. *Phys. Soc. Japan* 70, 1167
- ten Hagen B, van Teeffelen S and Löwen H, 2011. *J. Phys.: Condens. Matter* 23 194119
- Zurek, W. H., 1991. *Physics Today*, 36
- Zurek, W. H., 2003. *Rev. Mod. Phys.* 76
- Uhlenbeck G E and Ornstein L S , 1930. *Phys. Rev.* 36 823
- Ullersma P., 1966. *Physica (Utrecht)* 1, 27
- Valenti D., Fazio G. and Spagnolo B., 2018. *Phys. Rev. E* 97, 062307
- Valenti D, Magazzu L, Caldara O and Spagnolo B , 2015. *Phys. Rev. B* 91 235412
- Valenti D, Guarcello C and Spagnolo B, 2014. *Phys. Rev. B* 89 214510
- Wang M C and Uhlenbeck G E, 1945. *Rev. Mod. Phys.* 17 323

## Биографија аутора

Игор С. Петровић је рођен 12.07.1972. године у Београду. Завршио је Математичку гимназију "Вељко Влаховић" у Београду 1991. године. Звање дипломирани физичар за општу физику је стекао на Одсеку за физику Природно математичког факултета Универзитета у Нишу 2013. године са просечном оценом 8,23. Дипломски рад са темом "Хигсова честица - од идеје до открића" је одбранио са оценом 10. Докторске студије физике уписао 2013. године на Природно математичком факултету. По завршетку основних студија физике радио је као наставник физике у основној школи "Митрополит Михаило" у Сокобањи.

## Библиографија

1. Igor Petrović, Jasmina Jeknić-Dugić, The first and second moments for the quantum Brownian planar rotator in external harmonic classical field, *Facta Universitatis* 15, 071 (2017).
2. Jasmina Jeknic-Dugic, Igor Petrovic, Momir Arsenijevic, Miroljub Dugic, Dynamical stability of the one-dimensional rigid Brownian rotator: The role of the rotator's spatial size and shape, *J. Phys.: Condens. Matter* 30, 195304 (2018)
3. I. Petrovic, J. Jeknic-Dugic, M. Arsenijevic, M. Dugic, On the stability of the quantum Brownian rotator, TINKOS 2019, Belgrade, October 15-16, 2019, pp. 6.
4. I. Petrovic, J. Jeknic-Dugic, M. Arsenijevic, M. Dugic, Dynamical stability of the weakly nonharmonic propeller-shaped planar Brownian rotator, *Phys. Rev. E* 101, 012105 (2020).

## Изјава 1.

### ИЗЈАВА О АУТОРСТВУ

Изјављујем да је докторска дисертација, под насловом

---

Улога величине и облика молекулских пропелера у њиховој  
динамичкој стабилности у моделу квантног Брауновог ротатора

---

која је одбрањена на Природно-математичком факултету Универзитета у Нишу:

- резултат сопственог истраживачког рада;
- да ову дисертацију, ни у целини, нити у деловима, нисам пријављивао/ла на другим факултетима, нити универзитетима;
- да нисам повредио/ла ауторска права, нити злоупотребио/ла интелектуалну својину других лица.

Дозвољавам да се објаве моји лични подаци, који су у вези са ауторством и добијањем академског звања доктора наука, као што су име и презиме, година и место рођења и датум одбране рада, и то у каталогу Библиотеке, Дигиталном репозиторијуму Универзитета у Нишу, као и у публикацијама Универзитета у Нишу.

У Нишу, 11. фебруар 2021.

Потпис аутора дисертације:

---

Игор С. Петровић

**Изјава 2.**

**ИЗЈАВА О ИСТОВЕТНОСТИ ЕЛЕКТРОНСКОГ И ШТАМПАНОГ ОБЛИКА  
ДОКТОРСКЕ ДИСЕРТАЦИЈЕ**

Наслов дисертације:

---

Улога величине и облика молекулских пропелера у њиховој  
динамичкој стабилности у моделу квантног Брауновог ротатора

---

Изјављујем да је електронски облик моје докторске дисертације, коју сам предао за уношење у **Дигитални репозиторијум Универзитета у Нишу**, истоветан штампаном облику.

У Нишу, 11. фебруар 2021.

Потпис аутора дисертације:

---

Игор С. Петровић

### Изјава 3:

#### ИЗЈАВА О КОРИШЋЕЊУ

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Никола Тесла“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Нишу унесе моју докторску дисертацију, под насловом:

---

Улога величине и облика молекулских пропелера у њиховој динамичкој стабилности у моделу квантног Брауновог ротатора

---

Дисертацију са свим прилозима предао сам у електронском облику, погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију, унету у Дигитални репозиторијум Универзитета у Нишу, могу користити сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons), за коју сам се одлучио/ла.

1. Ауторство (CC BY)
2. Ауторство – некомерцијално (CC BY-NC)
- 3. Ауторство – некомерцијално – без прераде (CC BY-NC-ND)**
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима (CC BY-NC-SA)
5. Ауторство – без прераде (CC BY-ND)
6. Ауторство – делити под истим условима (CC BY-SA)

У Нишу, 11. фебруар 2021.

Потпис аутора дисертације:

---

Игор С. Петровић