

Tallinna Reaalkool

Gravitatsiooni mõju erinevate kvantmehaaniliste süsteemide soojusmahtuvusele

Uurimistöö

Kaarel Kivisalu

11. a

Juhendajad: prof Jaan Kalda

õp Toomas Reimann

Tallinn 2019

Sisukord

Tähiste loetelu	
Sissejuhatus	4
1 Ülevaade kirjandusest ja teooriast	6
1.1 Olümpiaadiülesande algne lahendus	6
1.2 Algne lahendus rikub termodünaamika II seadust	7
1.3 Kvantmehaaniline statistiline mehaanika	7
1.4 Kvaasi-klassikaline lähendus	9
1.5 Ajast sõltumatu häiritusteooria	10
2 Soojusmahtuvus erinevate potentsiaalide korral	12
2.1 Mudeli kirjeldus	12
2.2 Tükati lineaarne potentsiaal	12
2.3 Häiritusega harmooniline ostsillaator	18
2.3.1 Harmooniline ostsillaator gravitatsiooniväljas	18
2.3.2 Häiritusega harmooniline ostsillaator gravitatsiooniväljas	20
2.4 Järeldused	23
2.4.1 Tulemuste usaldusväärsus	24
Kokkuvõte	25
Kasutatud materjalid	27
Lisa 1 Maxima kood	28
Resümee	29
Abstract: Effect of gravity on the heat capacity of different quantum-mechanical systems	30

Tähiste loetelu

T	absoluutne temperatuur
\hat{H}	hamiltoniaani operaator
x/\hat{x}	ruumikoordinaat/asukohaoperaator
$\langle \hat{O} \rangle$	operaatori \hat{O} ooteväärtus
$\hat{\rho}$	tihedusmaatriks
Z	statistiline summa
$\langle a $	bra ehk veeruvektor
$ a\rangle$	ket ehk reavektor
\bar{a}	a keskväärtus
ψ	lainefunktsioon
C	soojusmahtuvus
m	mass
g	gravitatsioonivälja tugevus
E	energia
V	potentsiaal
ω	nurksagedus
N	summeerimisel kasutatud liikmete arv
\hbar	taandatud Plancki konstant
k_B	Boltzmanni konstant
i	imaginaarühik

Sissejuhatus

Kehade soojusmahtuvust on põhjalikult uuritud nii klassikaliselt kui ka kvantmehaaniliselt. On olemas head soojusmahtuvuse mudelid tahkiste ja gaaside jaoks. Ometi tõi välja I rahvusvahelise füüsikaolümpiaadi 1967. aasta ülesanne efekti, mida ei oldud varem põhjalikult uuritud. Olümpiaadiülesanne oli järgmine (Gorzkowski 1967: 6):

Kaks homogeenst ühesugust kera on sama algtemperatuuriga. Üks kera on liikumatult horisontaalse tasandil, teine ripub niidi küljes. Mõlemale kerale antakse võrdne soojushulk. Kas kerade lõpptemperatuur on sama või mitte? Soojuskadudega mitte arvestada.

Selle ülesande algses lahenduses leiti, et enamiku materjalide korral on horisontaalsel tasandil oleva kera soojusmahtuvus suurem riputatud kera omast. St, et tasandil oleva kera temperatuur on pärast soojushulga andmist väiksem. Hiljuti leiti Palma ja Sormani poolt, et algne lahendus rikub termodünaamika II seadust. Selle põhjuseks on see, et algses lahenduses ignoreeriti soojusmahtuvuse sõltuvust gravitatsioonivälja tugevusest ja arvati, et vabanev gravitatsiooniline energia muutub soojuseks. Palma ja Sormani pakkusid välja kaks alternatiivset lahendust, kasutades statistilist mehaanikat ja klassikalist termodünaamikat. Mõlema lahendusega saadi samasugune seos kera soojusmahtuvuse ja lineaarse soojuspaisumisteguri vahel.

Käesolevas töös uuritakse konkreetsete potentsiaalide korral konstantse gravitatsioonivälja mõju kerale sarnase, kuid lihtsustatud süsteemi soojusmahtuvusele. Täpsemalt vaadatakse süsteemi, kus kõik osakesed peale ühe on fikseeritud ja see osake saab liikuda ainult ühes dimensioonis. Konstantse gravitatsioonivälja potentsiaal on lineaarne ja selle saab liita süsteemi potentsiaalile. Käesolevas töös tahetakse leida seos süsteemi potentsiaali ja soojusmahtuvuse vahel ning võrrelda omavahel lihtsustatud süsteemi ja kera soojusmahtuvusi.

Töös analüüsitakse kuuphäiritusega harmoonilise ostsillaatori potentsiaali häirituse meetodil ja tükati sirgetest koosnevat potentsiaali kvaasi-klassikaliselt. Harmoonilise ostsillaatori potentsiaal on valitud, kuna selline potentsiaal on tüüpiliselt potentsiaalimiinimumide

ümbruses. Laialdaselt kasutatakse harmoonilise ostsillaatori potentsiaali näiteks kaheaatomilise molekuli lihtsa mudelina. Tükati sirgetest koosnev potentsiaal on valitud selle arvutusliku lihtsuse tõttu.

Uurimistöö hüpoteesiks on, et sõltuvalt valitud potentsiaalist võib gravitatsiooniväli nii tõsta kui ka langetada keha soojusmahtuvust.

Uurimistöö on jaotatud kahte ossa. Esimeses osas tutvustatakse varasemaid tulemusi kera soojusmahtuvuse kohta ja potentsiaalide analüüsis kasutatavaid meetodeid. Teises osas kirjeldatakse töös kasutatavat mudelit ja analüüsitakse erinevaid potentsiaale.

1 Ülevaade kirjandusest ja teooriast

1.1 Olümpiaadiülesande algne lahendus

Algne lahendus põhineb soojuspaisumisega seotud erinevustel. Tasapinnal olevale kerale A soojust andes see paisub ja selle massikese tõuseb. Järelikult peab osa kerale A antavast soojushulgast kuluma kera massikeskme gravitatsioonilise potentsiaalse energia tõstmiseks, mis langetab kera temperatuuri. Vastupidiselt, rippuva kera B massikese langeb soojuspaisumise tõttu ja energiat saadakse juurde, mis tõstab kera B temperatuuri. (Gorzkowski 1967: 6-7)

Olgu kerade soojusmahtuvus C_0 gravitatsioonivälja puudumisel. Algse lahenduse järgi, kui kera A soojendatakse, siis selle massikese tõuseb $dR = \alpha R dT$ võrra, kus dT on temperatuuri tõus, α on soojuspaisumistegur ja R on kera raadius. Kera saab juurde potentsiaalse energia $d\Phi = mg dR$, kus m on keha mass ja g on gravitatsioonivälja tugevus. Järelikult, kui soojushulk δQ antakse süsteemile, siis saadakse, et (Palma, Sormani 2015: 2-3)

$$\delta Q = C_0 dT + mg dR = C_0 dT + mg\alpha R dT = (C_0 + mg\alpha R) dT. \quad (1)$$

See on ekvivalentne väitega, et kera A soojusmahtuvus

$$C_A = C_0 + mg\alpha R. \quad (2)$$

Analoogselt saadakse, et kera B soojusmahtuvus

$$C_B = C_0 - mg\alpha R. \quad (3)$$

Enamiku materjalide korral on $\alpha > 0$, millest tulenevalt $C_A > C_B$. Järelikult on algse lahenduse kohaselt kera A lõpptemperatuur madalam kui kera B lõpptemperatuurist.

1.2 Algne lahendus rikub termodünaamika II seadust

Palma ja Sormani¹ leidsid, et algne lahendus rikub termodünaamika II seadust. Algses lahenduses kaudselt eeldati, et keha siseenergia U ja raadius R sõltuvad ainult temperatuurist T , mitte aga gravitatsioonivälja tugevusest g . Vaadeldakse järgnevat tsüklit: kera asub horisontaalsel külmal tasandil temperatuuriga T_1 ; kera ühendatakse soojema reservuaariga, mille temperatuur $T_2 = T_1 + \Delta T > T_1$; kera riputatakse nõõri külge ja horisontaalne tasand eemaldatakse; kera ühendatakse külma reservuaariga, mille temperatuur on T_1 . Selle protsessi kasutegur on tehtud töö ja neeldunud soojushulga suhe ning avaldub kujul (Palma, Sormani 2015: 3-5)

$$\eta = \frac{2mg\alpha R}{C_0 + mg\alpha R}. \quad (4)$$

Kasutegur η ei sõltu ΔT suurusest. Termodünaamika teist seadust saab sõnastada järgnevalt: iga tsükel, mis töötab ainult temperatuuride T_1 ja T_2 vahemikus ei saa olla efektiivsem Carnot' tsüklist, mis töötab samade temperatuuride juures. Carnot' tsükli efektiivsus on (*Ibid.*: 3-5)

$$\eta_{Carnot'} = \frac{\Delta T}{T_2}. \quad (5)$$

Järelikult, kui ΔT on piisavalt väike, siis on keraga tsükli kasutegur suurem Carnot' tsükli kasutegurist. Teisisõnu rikub algne lahendus termodünaamika II seadust.

1.3 Kvantmehaaniline statistiline mehaanika

Kvantmehaanilises statistilises mehaanikas on mugav kasutada tihedusmaatriksit (ingl *density matrix*) $\hat{\rho}$ kvantmehaanilise operaatori ooteväärtuse (ingl *expectation value*) leidmiseks. Tihedusmaatriks on defineeritud järgnevalt (Kardar 2007: 172):

$$\hat{\rho}(t) \equiv \sum_j p_j |\Psi_j(t)\rangle \langle \Psi_j(t)|, \quad (6)$$

kus $\sum_j p_j = 1$, $p_j > 0$ ja $|\Psi_j\rangle$ on puhas kvantolek (ingl *pure quantum state*). Tihedusmaatriks kujutab segakvantolekut (ingl *mixed quantum state*), kus tõenäosusega p_j on süsteem puhtas kvantolekus $|\Psi_j\rangle$. Selles formalismis avaldub kvantmehaanilise operaatori ooteväärtuse ansambli keskvärtus järgnevalt (*Ibid.*: 172):

$$\overline{\langle \hat{O} \rangle} = \text{tr}(\hat{\rho} \hat{O}), \quad (7)$$

¹Palma, Sormani 2015: 3-5.

kus jälg (ingl *trace*) $\text{tr}(\hat{A}) \equiv \sum_n \langle n | \hat{A} | n \rangle$. Kanoonilise ansambli² jaoks, mis on kvantmehaaniline ja diskreetne, avaldub kanooniline tihedusmaatriks järgnevalt (Kardar 2007: 174):

$$\hat{\rho}(\beta) = \frac{e^{-\beta \hat{H}}}{Z(\beta)}, \quad (8)$$

kus $\beta \equiv \frac{1}{k_B T}$, kus T on absoluutne temperatuur ja k_B on Boltzmanni konstant. Kuna $\langle \Psi_j |$ on normeeritud, siis

$$\langle 1 \rangle = \text{tr}(\hat{\rho}) = \sum_n \langle n | \hat{\rho} | n \rangle = \sum_{n,j} p_j |\langle n | \Psi_j \rangle|^2 = \sum_j p_j = 1. \quad (9)$$

Võrranditest (8) ja (9) ning omadusest $\text{tr}(c\hat{A}) = c \text{tr}(\hat{A})$ saadakse kvantmehaaniline statistiline summa Z , mis avaldub kujul

$$Z = \text{tr}(e^{-\beta \hat{H}}) = \sum_n e^{-\beta E_n}. \quad (10)$$

Kasutades võrrandeid (7), (8) ja (10) saadakse hamiltoniaani \hat{H} keskmine ooteväärtus

$$\overline{\langle \hat{H} \rangle} = \text{tr}(\hat{\rho} \hat{H}) = \frac{\text{tr}(\hat{H} e^{-\beta \hat{H}})}{Z} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}. \quad (11)$$

Hamiltoniaani keskmist ooteväärtust võib mõista kui süsteemi energiat. Kuna ollakse huvitatud temperatuuri muutusest, kui süsteemile antakse mingi energiahulk, siis on kasulik defineerida soojusmahtuvus kui $\overline{\langle \hat{H} \rangle}$ osatuletis T järgi:

$$C = \frac{\partial \overline{\langle \hat{H} \rangle}}{\partial T}. \quad (12)$$

Kombineerides võrrandeid (11) ja (12) saadakse, et

$$C = k_B T^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}. \quad (13)$$

Kasutades selles osas saadud seoseid on võimalik leida kera soojusmahtuvuse sõltuvus gravitatsioonivälja tugevusest (Palma, Sormani 2015: 10-13):

$$\frac{\partial C(g, T)}{\partial g} = -mTY \left(\alpha^2 + \frac{\partial \alpha}{\partial T} \right), \quad (14)$$

kus C on soojusmahtuvus, g on gravitatsioonivälja tugevus, m on kera mass, T on kera temperatuur, Y on massikeskme kõrgus, α on lineaarne soojuspaisumistegur.

²Ansambel, kus süsteem on soojuslikus tasakaalus fikseeritud temperatuuriga reservuaariga.

1.4 Kvaasi-klassikaline lähendus

Kvaasi-klassikaline lähendus (ingl *quasi-classical approximation* või *WKB(J) approximation*) on meetod ajast sõltumatu Schrödingeri võrrandile ühes dimensioonis ligikaudsete lahendite leidmiseks. Ajast sõltumatu Schrödingeri võrrandi ühes dimensioonis

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \quad (15)$$

saab ümber kirjutada järgnevalt:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{p(x)^2}{\hbar^2}\psi, \quad (16)$$

kus

$$p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}. \quad (17)$$

Valem (17) on klassikaline valem osakese impulsi arvutamiseks, mille koguenergia on E ja potentsiaalse energia on $V(x)$. Piirkonnas, kus $E > V(x)$, on $p(x)$ reaalarvuline. Seda piirkonda kutsutakse „klassikaliseks“, kuna klassikaliselt on osake sulustatud selles piirkonnas. Üldiselt on $\psi(x)$ kompleksfunktsioon, mida saab avaldada klassikalises piirkonnas amplituudi $A(x)$ ja faasi $\phi(x)$ kaudu, mis mõlemad on reaalarvulised (Griffiths 2005: 316):

$$\psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)}. \quad (18)$$

Eeldades, et amplituud A muutub aeglaselt,³ avaldub lainefunktsioon klassikalises piirkonnas kujul (*Ibid.*: 316-318)

$$\psi(x) = \frac{C_1}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right) + \frac{C_2}{\sqrt{p(x)}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int p(x) dx\right), \quad (19)$$

kus C_1 ja C_2 on kompleksarvulised konstandid. Valemi (19) saab ka kirja panna kujul (Shankar 1994: 446)

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar} \int p(x) dx + B\right], \quad (20)$$

kus A ja B on reaalarvulised parameetrid. Kahjuks ei kehti (20), kui $E \approx V(x)$, kuna $\sqrt{p(x)} \rightarrow 0$. Olgu $V(x_1) = V(x_2) = E$, $x_1 < x_2$ ja vahemikul (x_1, x_2) on $V(x) < E$. On siiski võimalik vaadeldes lainefunktsiooni x_1 lähedal näidata, et vahemikul (x_1, x_2) on lainefunktsioon (Landau, Lifshitz 2005: 167-170):

$$\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{p(x)}} \cos\left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx - \frac{\pi}{4}\right], \quad (21)$$

³Täpsemalt eeldatakse, et $A''/A \ll (\phi')^2$ ja $A''/A \ll p^2/\hbar^2$.

kui x_2 lähedal on lainefunktsioon

$$\psi(x) = \frac{A'}{\sqrt{p(x)}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right]. \quad (22)$$

Selleks, et need kaks lahendit ühtiksid, peavad A ja A' olema sama mooduliga ja koosinuste faaside vahe peab olema π kordne (Shankar 1994: 446):

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x) dx - \frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x) dx - \frac{\pi}{2} = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (23)$$

või

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \hbar. \quad (24)$$

Saadud tulemus on suhteliselt lihtne valem energiatasemete arvutamiseks.

1.5 Ajast sõltumatu häiritusteooria

Schrödingeri võrrandit täpselt lahendada on võimalik ainult lihtsamatel juhtudel, keerulisemate juhtude jaoks on vaja teha lähendusi. Ajast sõltumatu häiritusteooria (edaspidi häiritusteooria) on lähendusmeetod, mida saab rakendada järgnevas olukorras: teades lahendit hamiltoniaani \hat{H}^0 omaväärtusülesandele (ingl *eigenvalue problem*), tahetakse leida lahendit $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$, kus \hat{H}^1 on suhteliselt väike võrreldes \hat{H}^0 -ga. Eeldatakse, et iga \hat{H}^0 kidumata omaketi (ingl *eigenket*) $|n^0\rangle$ omaväärtusega E_n^0 jaoks leidub \hat{H} kidumata omaket $|n\rangle$ omaväärtusega E_n . Siis eeldades, et \hat{H} omaketid ja omaväärtused võib kirja panna häiritusseerias (*Ibid.*: 451):

$$|n\rangle = |n^0\rangle + |n^1\rangle + |n^2\rangle + \dots \quad (25)$$

$$E_n = E_n^0 + E_n^1 + E_n^2 + \dots \quad (26)$$

Iga liikme ülaindeks k näitab, millise \hat{H}^1 astmega eeldatakse, et iga liige on võrdeline. Liiget astmega k kutsutakse järku k liikmeteks (ilmselt siis korrutis $E_n^k |n^{k'}\rangle$ on järku $k + k'$ liige). Selleks, et leida liikmeid $|n\rangle$ ja E_n arenduses, alustatakse omaväärtusvõrrandiga (*Ibid.*: 451-452):

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad (27)$$

või

$$(\hat{H}^0 + \hat{H}^1)(|n^0\rangle + |n^1\rangle + \dots) = (E_n^0 + E_n^1 + \dots)(|n^0\rangle + |n^1\rangle + \dots). \quad (28)$$

Vaadates võrrandis (28) nullindat järku liikmeid, saadakse võrrand

$$\hat{H}^0|n^0\rangle = E_n^0|n^0\rangle. \quad (29)$$

Eelduse järgi on see võrrand lahendatud ja omaket $|n^0\rangle$ ja omaväärtused E_n^0 on teada. Vaadates võrrandis (28) esimest järku liikmeid, saadakse võrrand

$$\hat{H}^0|n^1\rangle + \hat{H}^1|n^0\rangle = E_n^0|n^1\rangle + E_n^1|n^0\rangle. \quad (30)$$

Korrutades võrrandi (30) mõlemad pooled $\langle n^0|$ -ga ning kasutades omadusi $\langle n^0|\hat{H}^0 = \langle n^0|E_n^0$ ja $\langle n^0|n^0\rangle = 1$ saadakse, et

$$E_n^1 = \langle n^0|\hat{H}^1|n^0\rangle. \quad (31)$$

See on esimest järku parand omaväärtusele E_n^0 . On võimalik leida ka kõrgemat järku parandeid, kuid neid käesolevas töös ei kasutata ja tuletuskäiku nende jaoks ei hakata välja tooma.

2 Soojusmahtuvus erinevate potentsiaalide korral

2.1 Mudeli kirjeldus

Kuna olümpiaadiülesandes oleva kera hamiltoniaan on väga keeruline, siis on vaja soojusmahtuvuse leidmiseks teha lihtsustusi. Kera asemel vaadatakse süsteemi, kus mingid osakesed on fikseeritud ja on üks ühes dimensioonis vabalt liikuv osake. Osakestevahelise vastastikmõju tõttu sõltub süsteemi energia vabalt liikuva osakese asukohast. Sellist vastastikmõju saab kirjeldada Schrödingeri võrrandiga, kus potentsiaal sõltub osakeste paigutusest. Selline mudel vastab näiteks kaheaatomilisele molekulile.

Järgnevalt vaadatakse süsteeme, kus osake liigub gravitatsiooniväljaga samas dimensioonis. Gravitatsiooniväli muudab lineaarselt ühe osakese energiat ja seega lisandub süsteemi potentsiaalile lineaarne potentsiaal. Kera jaoks oleks võimalik seda mudelit laiendada piirates osakeste asukoha kera sisse ja võttest potentsiaali ajas muutuvaks. Praktikas poleks aga kera jaoks sellist mudelit võimalik kasutada, kuna analüütiliselt on väga keeruline juba kahest osakesest koosnevat süsteemi kirjeldada. Samuti ei suuda tänapäevased arvutid simuleerida mõistliku aja piires hea täpsusega juba küllaltki väikse osakeste arvuga süsteeme.

2.2 Tükati lineaarne potentsiaal

Tükati lineaarne potentsiaal koosneb eri lõikudel olevatest sirgetest. Üldisemalt on tegu lõplike elementide meetodiga (ingl *finite element method*). Meetodi rakendamiseks jaotatakse süsteem ligikaudseteks osadeks (näiteks sirgeteks). See on kasulik, kuna lõpliku elemendi jaoks võib lahendi leidmine olla lihtne ja pannes elemendid kokku on võimalik saada hea lähend kogu süsteemile. Tükati lineaarse potentsiaali võimalikuks puuduseks on selle tuletise mittepidevus, kui järgnevalt ei tohiks see midagi mõjutada. Vaadeldakse ühte

lihtsaimat tükati lineaarset potentsiaali kujuga

$$V(x) = \begin{cases} (-a + mg)x, & x < 0, \\ (b + mg)x, & x \geq 0, \end{cases} \quad (32)$$

kus a ja b on positiivsed reaalarvulised konstandid ning $-a + mg < 0$ ja $b + mg > 0$.

Kvaasi-klassikalises lähenduses saame leida vastava energiatasemed:

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar = \int_{x_1}^0 \sqrt{2m[E_n - (-a + mg)x]} dx + \int_0^{x_2} \sqrt{2m[E_n - (b + mg)x]} dx, \quad (33)$$

kus $n \in \{0, 1, 2, \dots\}$, $x_1 = \frac{E_n}{-a+mg}$ ja $x_2 = \frac{E_n}{b+mg}$. Integreerides saadakse, et

$$\begin{aligned} \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar &= \sqrt{2m} \left[-\frac{2(E_n - (-a - mg)x)^{\frac{2}{3}}}{3(-a + mg)} \right] \Big|_{x_1}^0 + \sqrt{2m} \left[-\frac{2(E_n - (b - mg)x)^{\frac{2}{3}}}{3(b + mg)} \right] \Big|_0^{x_2} \\ &= -\frac{2\sqrt{2m}E_n^{\frac{3}{2}}}{3(-a + mg)} + \frac{2\sqrt{2m}E_n^{\frac{3}{2}}}{3(b + mg)}. \end{aligned} \quad (34)$$

E_n avaldades saadakse, et

$$E_n = \left[\frac{3\pi}{2\sqrt{2}} \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{(-a + mg)(b + mg)}{a + b} \right]^{\frac{2}{3}} \left(n + \frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}}. \quad (35)$$

Kombineerides võrrandid (10) ja (35), avaldub statistiline summa järgnevalt:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left(-\beta c \left(n + \frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}} \right), \quad (36)$$

kus $c = \left[\frac{3\pi}{2\sqrt{2}} \frac{\hbar}{\sqrt{m}} \frac{(-a+mg)(b+mg)}{a+b} \right]^{\frac{2}{3}}$. Kui $\beta c \ll 1$, siis saab summa asendada integraaliga ja $n + \frac{1}{2} \approx n$:

$$Z \approx \int_0^{\infty} e^{-\beta c n^{\frac{2}{3}}} dn = \left[\frac{3\sqrt{\pi} \operatorname{erf} \left(n^{\frac{1}{3}} \sqrt{\beta c} \right)}{4(\beta c)^{\frac{3}{2}}} - \frac{3n^{\frac{1}{3}} \exp \left(-\beta c n^{\frac{2}{3}} \right)}{2\beta c} \right] \Big|_0^{\infty} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4(\beta c)^{\frac{3}{2}}}. \quad (37)$$

Võrrandist (13) ja (37) saadakse, et

$$C = k_B T^2 \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln \frac{3\sqrt{\pi}}{4(\beta c)^{\frac{3}{2}}} = -k_B T^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{3}{2\beta} = \frac{3k_B}{2}. \quad (38)$$

See tähendab, et kõrgetel temperatuuridel⁴ ei sõltu süsteemi soojusmahtuvus temperatuurist. Üldisemalt avaldub soojusmahtuvus võrranditest (13) ja (36) järgnevalt:

$$\begin{aligned}
C &= k_B T^2 \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z \\
&= k_B T^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \\
&= k_B T^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{1}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial \beta} \exp \left(-\beta c \left(n + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \right) \\
&= k_B T^2 \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{\sum_{n=0}^{\infty} -c \left(n + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \exp \left(-\beta c \left(n + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \right)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp \left(-\beta c \left(n + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \right)} \\
&= k_B T^2 \left(\frac{c^2 \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2} \right)^{\frac{4}{3}} \exp \left(-c \left(n + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \beta \right)}{\sum_{n=0}^{\infty} \exp \left(-c \left(n + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \beta \right)} \right. \\
&\quad \left. - \frac{c^2 \left(\sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \exp \left(-c \left(n + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \beta \right) \right)^2}{\left(\sum_{n=0}^{\infty} \exp \left(-c \left(n + \frac{1}{2} \right)^{\frac{2}{3}} \beta \right) \right)^2} \right). \tag{39}
\end{aligned}$$

Kui $\beta c \gtrsim 1$, siis avaldise (39) väärtus on võimalik küllaltki heas lähenduses leida vaadates ainult summade esimesi liikmeid.⁵ Väärtuste arvutamiseks ja jooniste tegemiseks on kasutanud töö autor programmi Maxima. Kasutatud käsklused on toodud välja lisas 1. Joonistel on kõik väärtused SI ühikutes ja N tähistab summeeritud liikmete arvu.

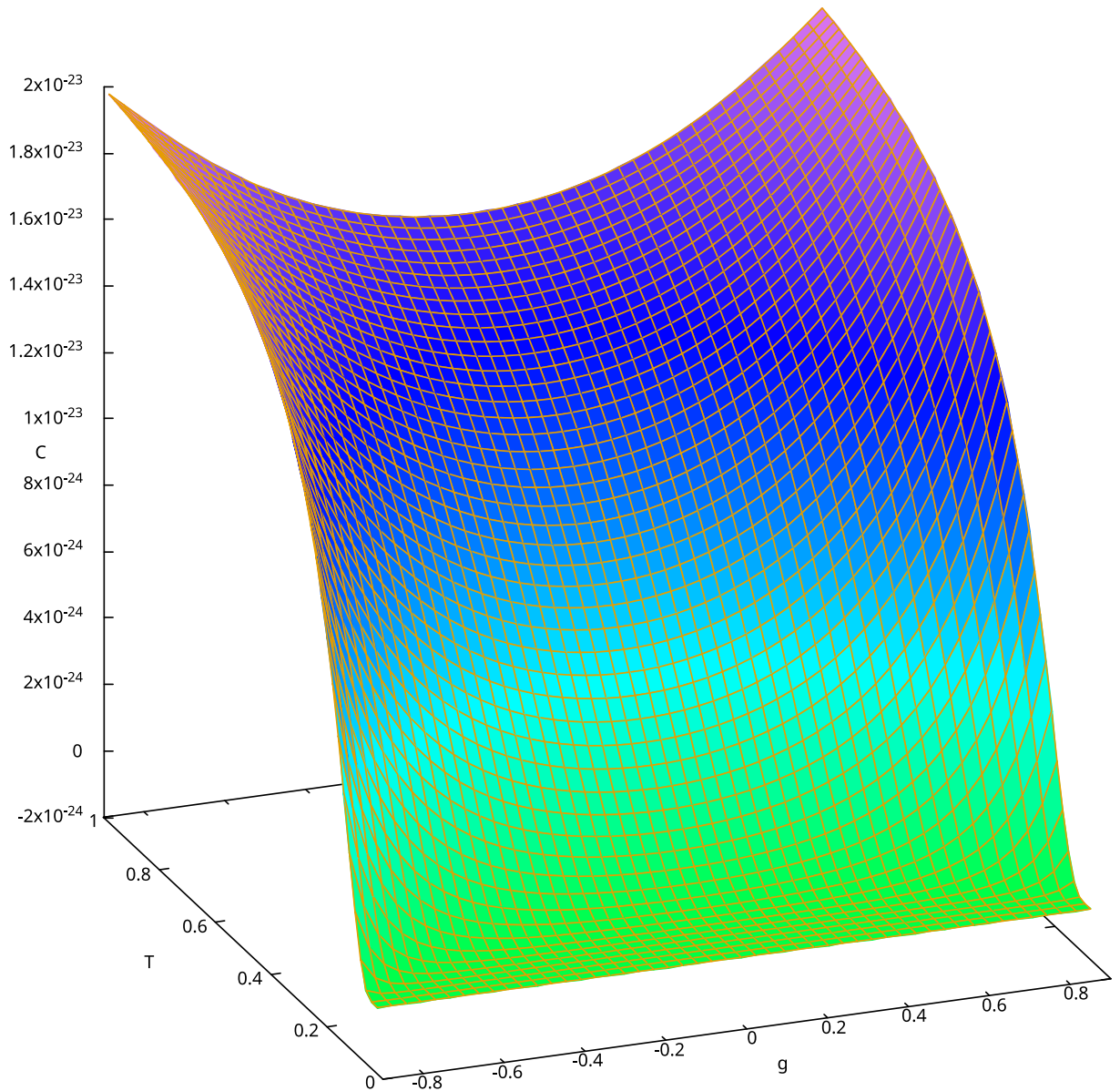
Jooniselt 1 on näha, et väga madalatel temperatuuridel on soojusmahtuvus väike. Gravitatsioonivälja muutus võib nii tõsta kui ka langetada soojusmahtuvust. Kuna potentsiaal (32) on mingi kindla g väärtuse jaoks sümmeetriline nullpunkti suhtes, siis nii gravitatsioonivälja tugevuse suurendamine kui ka vähendamine mõjutavad soojusmahtuvust samamoodi. Jooniselt 1 on näha, et soojusmahtuvus on minimaalne teatud temperatuuril, kui potentsiaal (32) on sümmeetriline nullpunkti suhtes, ja kasvab, kui muuta gravitatsioonivälja.

Joonis 2 erineb joonisest 1 b väärtuse poolest. On näha, et üldine kuju on mõlemal juhul sama. Joonise 2 jaoks on sümmeetriatelg nihutatud. Tõenäoliselt on sümmeetriatelg alati g sellise väärtuse juures, kus potentsiaal (32) on sümmeetriline nullpunkti suhtes. Võrrandist (32) on lihtne näha, et sümmeetria esineb, kui

$$a - mg = b + mg \tag{40}$$

⁴ $T \gg \frac{c}{k_B}$.

⁵ $\beta c = 1$ jaoks piisab küllaltki hea täpsuse jaoks mõnesajast liikmest.



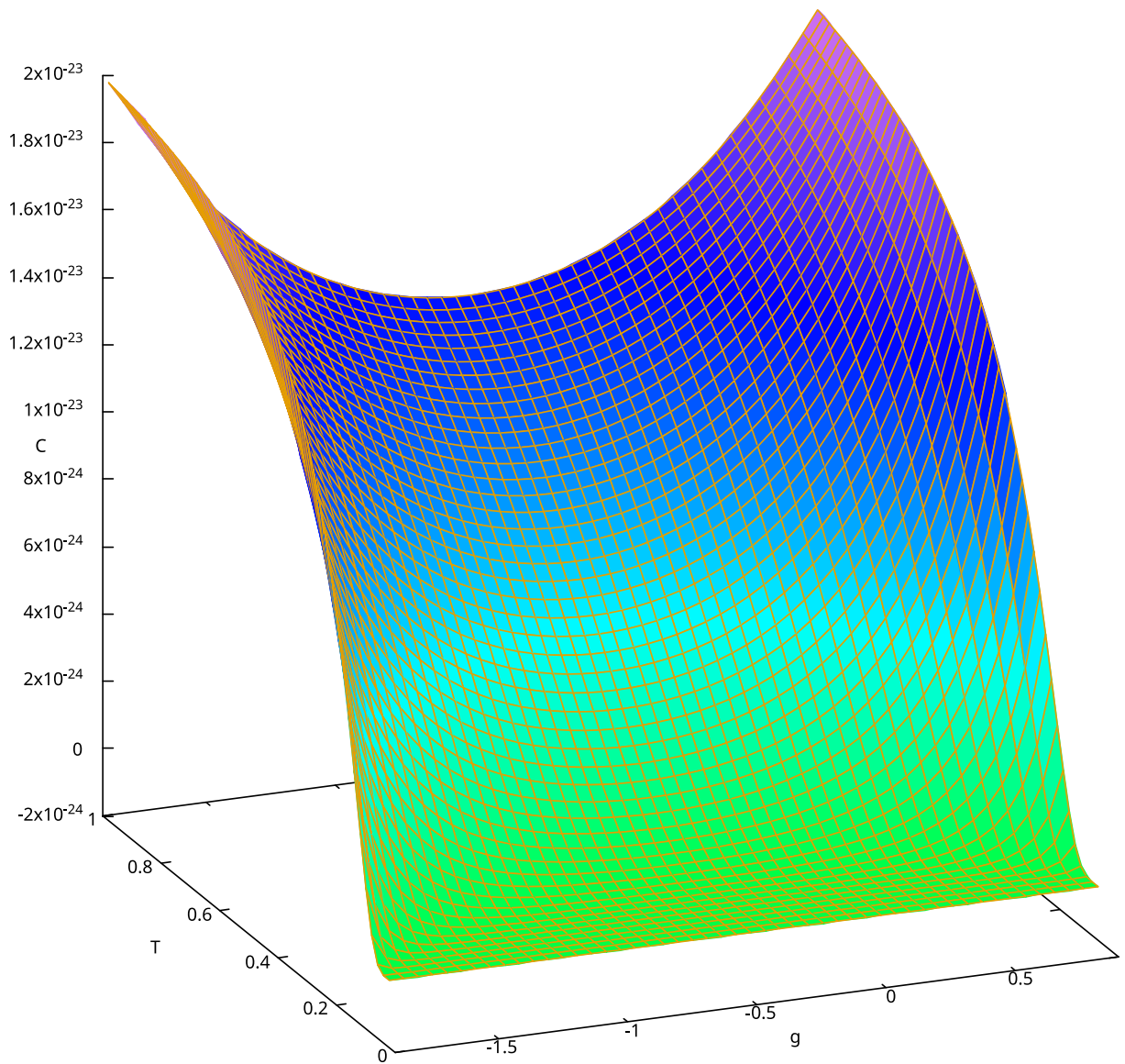
Joonis 1. Soojusmahtuvuse sõltuvus gravitatsioonivälja tugevusest ja temperatuurist tükiti lineaarse potentsiaali korral, kus $a = 1 \text{ N}$, $b = 1 \text{ N}$, $m = 1 \text{ kg}$ ja $N = 400$.

Allikas: Autori erakogu.

ehk

$$g = \frac{a - b}{2m}. \quad (41)$$

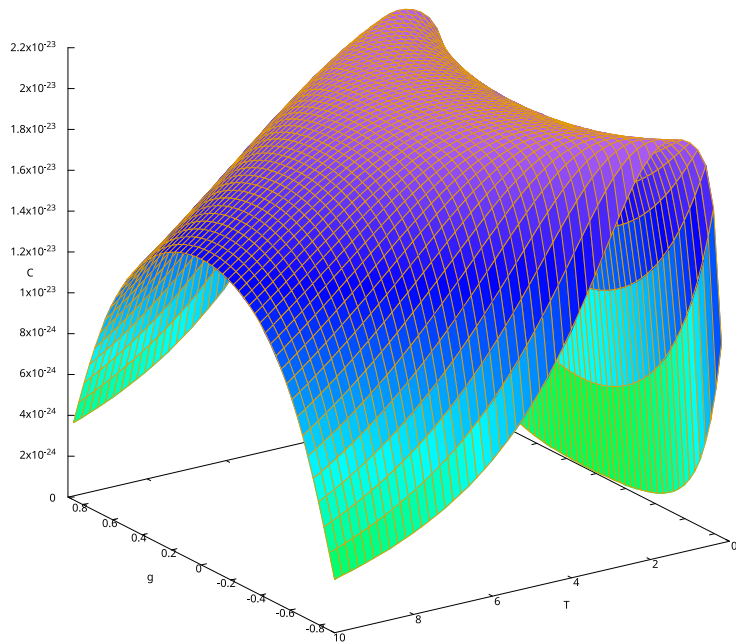
Joonised 3 ja 4 erinevad ainult summeeritud liikmete arvu poolest. On näha mõlemal joonisel, et madalatel temperatuuridel on soojusmahtuvus väike, tõustes mingi väärtuseni ja siis hakates sümmeetriateljest kaugemal vähenema. Kuna maksimaalne väärtus on mõlemal juhul ligikaudu sama avaldise (38) väärtusega, siis tõenäoliselt on sümmeetriateljest



Joonis 2. Soojusmahtuvuse sõltuvus gravitatsioonivälja tugevusest ja temperatuurist tükiti lineaarse potentsiaali korral, kus $a = 1 \text{ N}$, $b = 2 \text{ N}$, $m = 1 \text{ kg}$ ja $N = 400$.

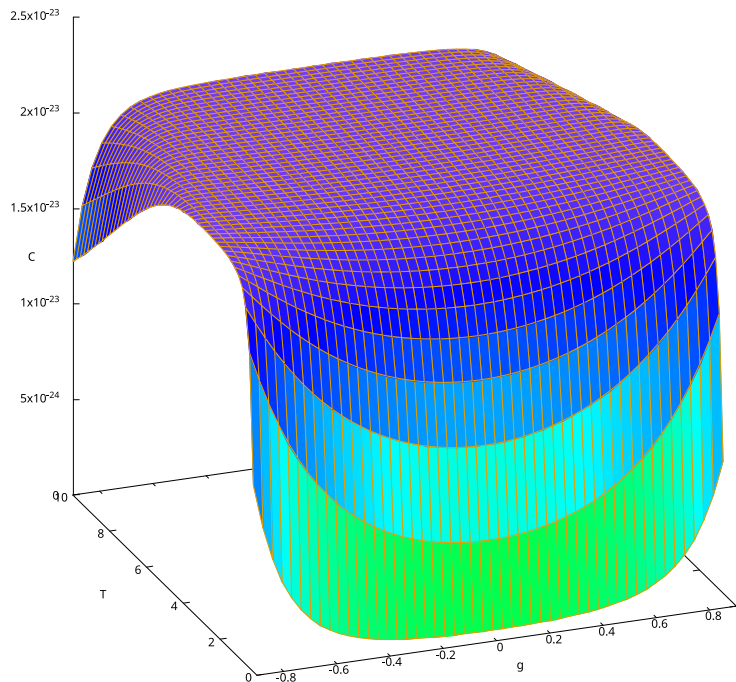
Allikas: Autori erakogu.

kaugemal vähenemine tingitud summeerimise ebatäpsusest ja tegelikult seda ei esine. Seda väidet kinnitab ka täpsemal joonisel (joonis 4) väiksem soojusmahtuvuse vähenemine sümmeetriateljest kaugemal.



Joonis 3. Soojusmahtuvuse sõltuvus gravitatsioonivälja tugevusest ja temperatuurist tükiti lineaarse potentsiaali korral, kus $a = 1 \text{ N}$, $b = 1 \text{ N}$, $m = 1 \text{ kg}$ ja $N = 100$.

Allikas: Autori erakogu.



Joonis 4. Soojusmahtuvuse sõltuvus gravitatsioonivälja tugevusest ja temperatuurist tükiti lineaarse potentsiaali korral, kus $a = 1 \text{ N}$, $b = 1 \text{ N}$, $m = 1 \text{ kg}$ ja $N = 400$.

Allikas: Autori erakogu.

2.3 Häiritusega harmooniline ostsillaator

Käesolevas osas vaadeldakse harmoonilist ostsillaatorit, millele on lisatud kuuphäiritus, gravitatsiooniväljas. Harmoonilise ostsillaatori potentsiaal on enimlevinud potentsiaale kvantmehaanikas. Selle kasulikkus seisneb selles, et tüüpiliselt on potentsiaalimiinimumide ümber just selline potentsiaal. Samuti on see üks vähestest kvantmehaanilistest süsteemidest, mille jaoks on teada analüütiline lahend.

2.3.1 Harmooniline ostsillaator gravitatsiooniväljas

Selleks, et leida häirituse mõju süsteemile lahendatakse kõigepealt omaväärtusprobleem harmoonilise ostsillaatori jaoks gravitatsiooniväljas. Järgnev on sarnane tuletuskäiguga tavalise harmoonilise ostsillaatori jaoks, kuid erineb detailide poolest ja seega on siiski siin ära toodud. Tavalise harmoonilise ostsillaatori jaoks võib leida tuletuskäigu Shankari materjalist (Shankar 1994: 202-216). Gravitatsiooniväljas paiknevale ostsillaatorile vastav hamiltoniaan on

$$\hat{H}^0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} + mg\hat{x} = \hbar\omega(A^\dagger A + 1/2) - k_1, \quad (42)$$

kus $k_1 = \frac{mg^2}{2\omega^2}$ ja

$$\begin{aligned} A &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left[\left(\hat{x} + \frac{g}{\omega^2} \right) + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right], \\ A^\dagger &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left[\left(\hat{x} + \frac{g}{\omega^2} \right) - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right], \end{aligned} \quad (43)$$

A^\dagger on A kaasoperaator. Defineeritakse operaator \mathcal{H} järgnevalt:

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{H}^0}{\hbar\omega} = (A^\dagger A + 1/2) - \frac{k_1}{\hbar\omega}. \quad (44)$$

Tahetakse leida omaväärtused järgmisele võrrandile:

$$\mathcal{H}|\varepsilon\rangle = \varepsilon|\varepsilon\rangle. \quad (45)$$

Kehtivad järgnevad omadused:

$$[A, \mathcal{H}] = A\mathcal{H} - \mathcal{H}A = A, \quad (46)$$

$$[A^\dagger, \mathcal{H}] = A^\dagger\mathcal{H} - \mathcal{H}A^\dagger = -A^\dagger. \quad (47)$$

Operaatorid A ja A^\dagger tekitavad uusi omaseisundeid. Kuna

$$\begin{aligned}\mathcal{H}A|\varepsilon\rangle &= (A\mathcal{H} - [A, \mathcal{H}])|\varepsilon\rangle \\ &= (A\mathcal{H} - A)|\varepsilon\rangle \\ &= (\varepsilon - 1)A|\varepsilon\rangle,\end{aligned}\tag{48}$$

siis peab olema $A|\varepsilon\rangle$ omaseisundeid omaväärtusega $\varepsilon - 1$, st

$$A|\varepsilon\rangle = C_\varepsilon|\varepsilon - 1\rangle,\tag{49}$$

kus C_ε on konstant ja $|\varepsilon - 1\rangle$ ja $|\varepsilon\rangle$ on normeeritud omaketid. Sarnaselt nähakse, et

$$\begin{aligned}\mathcal{H}A^\dagger|\varepsilon\rangle &= (A^\dagger\mathcal{H} - [A^\dagger, \mathcal{H}])|\varepsilon\rangle \\ &= (A^\dagger\mathcal{H} + A^\dagger)|\varepsilon\rangle \\ &= (\varepsilon + 1)A^\dagger|\varepsilon\rangle,\end{aligned}\tag{50}$$

nii et

$$A^\dagger|\varepsilon\rangle = C_{\varepsilon+1}|\varepsilon + 1\rangle.\tag{51}$$

Kuna \mathcal{H} omaväärtused ei saa lõputult väheneda, siis peab olema seisund $|\varepsilon_0\rangle$, mida ei saa enam alandada:

$$A|\varepsilon_0\rangle = 0.\tag{52}$$

Korrutades võrrandi (52) läbi operaatoriga A^\dagger saadakse, et

$$A^\dagger A|\varepsilon_0\rangle = 0.\tag{53}$$

Võrranditest (44) ja (53) saadakse, et

$$\left(\mathcal{H} - 1/2 + \frac{k_1}{\hbar\omega}\right)|\varepsilon_0\rangle = 0\tag{54}$$

või

$$\mathcal{H}|\varepsilon_0\rangle = \left(\frac{1}{2} - \frac{k_1}{\hbar\omega}\right)|\varepsilon_0\rangle\tag{55}$$

või

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2} - \frac{k_1}{\hbar\omega}.\tag{56}$$

Kasutades operaatorit A^\dagger korduvalt, saab suurendada seisundit $|\varepsilon_0\rangle$ lõputult. Seega avalduvad ostsillaatori energiatasemed järgnevalt:⁶

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{k_1}{\hbar\omega}, \quad n = 0, 1, 2, \dots\tag{57}$$

⁶Kuna ühes dimensioonis pole kidumist, siis need on ainsad energiatasemed (Shankar 1994: 176-177).

või

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - k_1, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (58)$$

Kuna $\varepsilon = n + 1/2 - k_1/\hbar\omega$, tähistatakse kette täisarvuga n . Tahetakse leida konstant C_n järgmisest võrrandist:

$$A|n\rangle = C_n|n-1\rangle. \quad (59)$$

Võrrandi (59) kaasvõrrand on

$$\langle n|A^\dagger = \langle n-1|C_n^*. \quad (60)$$

Kombineerides võrrandid (59) ja (60) saadakse, et

$$\langle n|A^\dagger A|n\rangle = \langle n-1|C_n^* C_n|n-1\rangle \quad (61)$$

$$\langle n|\mathcal{H} - \frac{1}{2} + \frac{k_1}{\hbar\omega}|n\rangle = C_n^* C_n \quad (62)$$

$$\langle n|n|n\rangle = |C_n|^2 \quad (63)$$

$$|C_n|^2 = n \quad (64)$$

$$C_n = \sqrt{n}e^{i\phi}. \quad (65)$$

Kuna ϕ väärtus on vabalt valitav, siis on mugav võtta selle väärtus nulliks. Siis saadakse, et

$$A|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \quad (66)$$

Analoogselt saab näidata, et

$$A^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (67)$$

2.3.2 Häiritusega harmooniline ostsillaator gravitatsiooniväljas

Nüüd vaadatakse harmoonilist ostsillaatorit, millele on lisatud kuuphäiritus, gravitatsiooniväljas. Sellele vastav hamiltoniaan on

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1, \quad (68)$$

kus

$$\hat{H}^1 = \lambda \hat{x}^3 = \lambda \left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (A^\dagger + A) - \frac{g}{\omega^2} \right]^3 = \lambda \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} (A^\dagger + A - k_2)^3, \quad (69)$$

kus $k_2 = g\sqrt{\frac{2m}{\hbar\omega^3}}$. Kuna sellele hamiltoniaanile vastava omaväärtusülesande täpne lahendamine pole tõenäoliselt võimalik, siis kasutatakse häiritusteooriat. Võrrandi (31) järgi on esimene parand omaväärtustele

$$E_n^1 = \langle n | \hat{H}^1 | n \rangle = \lambda \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \langle n | (A^\dagger + A - k_2)^3 | n \rangle. \quad (70)$$

Kuna A^\dagger ja A muudavad omaseisundit, siis peab olema neid hulkliikme $(A^\dagger + A + k_2)^3$ üksliikmes sama palju, et eelnev avaldis poleks null. Seega annavad avaldises (70) nullist erinevad liikmed ainult üksliikmed $-k_2^3$, $-3k_2A^\dagger A$ ja $-3k_2AA^\dagger$. Järelikult

$$\begin{aligned} E_n^1 &= \lambda \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} \langle n | -k_2^3 - 3k_2A^\dagger A - 3k_2AA^\dagger | n \rangle \\ &= -\lambda \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} (k_2^3 + 3k_2\sqrt{n}\sqrt{n} + 3k_2\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}) \\ &= -\lambda \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} [k_2^3 + 3k_2(2n+1)]. \end{aligned} \quad (71)$$

Võrranditest (58) ja (71) saadakse, et

$$E_n \approx \left(n + \frac{1}{2} \right) - k_1 - \lambda \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} [k_2^3 + 3k_2(2n+1)]. \quad (72)$$

Võrranditest (10) ja (72) saadakse, et statistiline summa on

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp \left(-\beta \left(\left(n + \frac{1}{2} \right) - k_1 - \lambda \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} (k_2^3 + 3k_2(2n+1)) \right) \right). \quad (73)$$

Tegu on geomeetrilise rea summaga. See koondub järgmisel tingimusel:

$$\frac{3}{\sqrt{2}} k_2 \lambda \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} < 1 \quad (74)$$

või

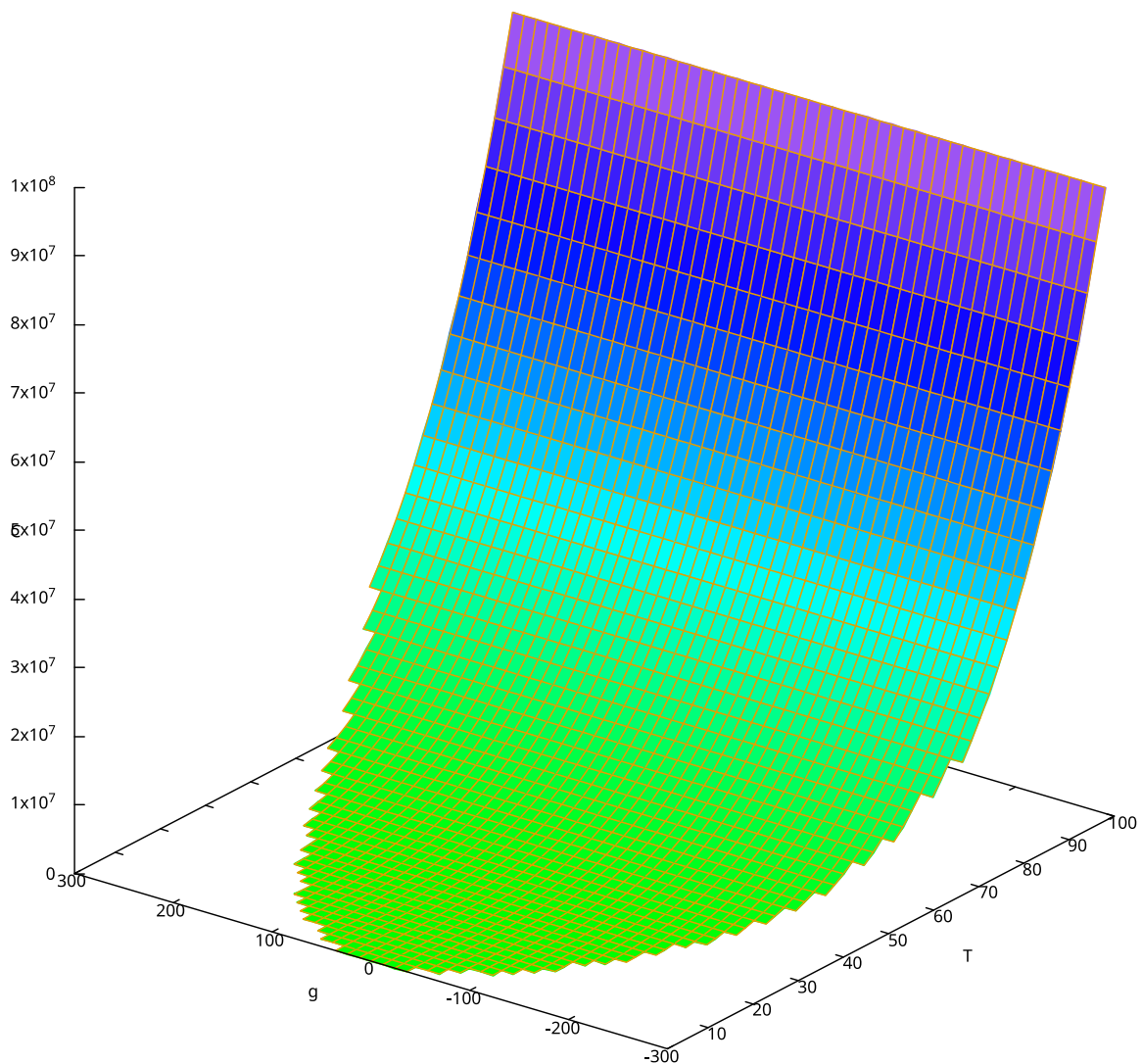
$$3\lambda\hbar g < m\omega^3. \quad (75)$$

Selle eelduse kehtimisel on

$$Z = \frac{\exp \left(\beta \left(\lambda(k_2^3 + 3k_2) \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} + k_1 - \frac{1}{2} \right) \right)}{1 - \exp \left(\beta \left(6k_2\lambda \left(\frac{\hbar}{2m\omega} \right)^{\frac{3}{2}} - 1 \right) \right)}. \quad (76)$$

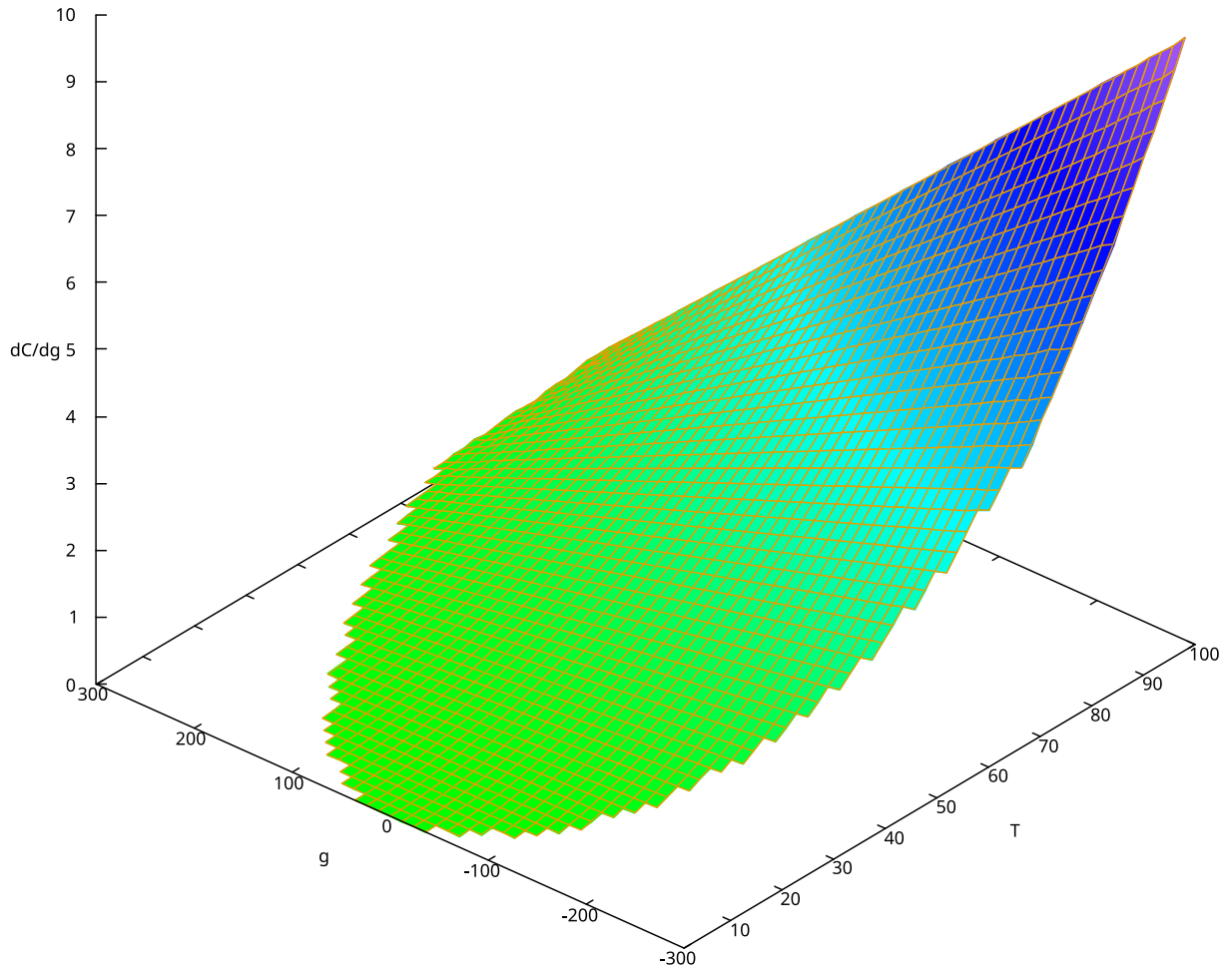
Siit pole raske leida soojusmahtuvuse avaldist, kuid kuna see on küllaltki pikk ja otseselt sellest valemist pole võimalik järeldusi teha, siis ei hakata seda siin välja tooma.

Kasutades Maxima programmi üritas autor teha graafikuid soojusmahtuvuse sõltuvuse kohta temperatuurist ja gravitatsioonivälja tugevusest, kuid \hbar ja k_B tegelike väärtuste korral ei õnnestunud luua ühtegi graafikut. See on tõenäoliselt tingitud sellest, et väärtused lähevad liiga väikseks programmi Maxima jaoks. Teatud väärtuste (vt joonis 5 ja 6) jaoks õnnestus siiski luua graafikud, mis näitavad soojusmahtuvuse ja soojusmahtuvuse tuletise gravitatsioonivälja tugevuse järgi sõltuvust gravitatsioonivälja tugevusest. Graafikute tegemisel on arvestatud, et eeldus (75) kehtiks. Kuna soojusmahtuvus muutub lubatud g muutumiskiirkonnas väga vähe, siis on joonise 6 usaldusväärsus kaheldav ja võib olla tingitud arvutuslikest ebatäpsustest.



Joonis 5. Soojusmahtuvuse sõltuvus gravitatsioonivälja tugevusest ja temperatuurist häiritusega harmoonilise ostsillaatori jaoks gravitatsiooniväljas, kus $\hbar = 1 \text{ J s}$, $k_B = 1 \text{ J K}^{-1}$, $m = 1 \text{ kg}$, $\omega = 1 \text{ s}^{-1}$ ja $\lambda = 1 \times 10^{-3} \text{ J m}^{-3}$.

Allikas: Autori erakogu.



Joonis 6. Soojusmahtuvuse tuletise gravitatsioonivälja suhtes sõltuvus gravitatsioonivälja tugevusest ja temperatuurist häiritusega harmoonilise ostsillaatori jaoks gravitatsiooniväljas, kus $\hbar = 1 \text{ J s}$, $k_B = 1 \text{ J K}^{-1}$, $m = 1 \text{ kg}$, $\omega = 1 \text{ s}^{-1}$ ja $\lambda = 1 \times 10^{-3} \text{ J m}^{-3}$.

Allikas: Autori erakogu.

2.4 Järeldused

Ootuspärastel varasematele tulemustele kera soojusmahtuvuse sõltuvuse jaoks leidis hüpoteesi kinnitust. Saadud tulemused viitavad väga selgelt sellele, et juba küllaltki lihtsate potentsiaalide korral võib soojusmahtuvus sõltuda gravitatsiooniväljast. Tükati lineaarse potentsiaali korral saadi tulemus, mis kinnitab hüpoteesi mõlemat osa: soojusmahtuvus võib nii langeda kui ka tõusta gravitatsioonivälja tugevuse suurenemisel. Häiritusega harmoonilise ostsillaatori jaoks saadud tulemus (vt joonis 6) viitab sellele, et soojusmahtuvus võib ka ainult suureneda või väheneda gravitatsioonivälja tugevuse suurenemisel. Lihtsaid

potentsiaale⁷, mille jaoks sõltub soojusmahtuvus gravitatsiooniväljast on siiski küllaltki vähe.

Töös leitud tulemuste ja varasemate kera jaoks leitud tulemuste vahel esines sarnasusi. Kera soojusmahtuvus enamasti väheneb gravitatsioonivälja tugevuse suurenemisel (vt võrrand (14)). Tükati lineaarse potentsiaali puhul esines nii soojusmahtuvuse suurenemist kui ka vähenemist, häiritusega harmoonilise ostsillaatori tulemused pigem viitasid soojusmahtuvuse vähenemisele, kuid polnud lõplikud. Selline tulemus on mõnevõrra üllatav, kuna vaadeldi ainult kahte potentsiaali süsteemide jaoks, mis on kerast oluliselt lihtsamad.

2.4.1 Tulemuste usaldusväärsus

Kvaasi-klassikaliselt tükati lineaarse potentsiaali jaoks leitud tulemus on küllaltki usaldusväärne. Summeerimisel kasutatud liikmete arv tundub piisav erinevate liikmete arvudega graafikute võrdluse põhjal. Samuti ühtivad summeerimise tulemused valitud parameetrite korral üllatavalt hästi integraalilise tulemusega juba suhteliselt madalate temperatuuride juures. Saadud soojusmahtuvuse väärtused on ka sobivas suurusjärgus osakesete süsteemi soojusmahtuvuse jaoks. Kuna tegu on siiski lähendusega, võiks tulemusi kontrollida Schrödingeri võrrandi numbrilise lahendamisega. Autori arvuti võimsuse tõttu ei suudetud näidata võimalikku soojusmahtuvuse sõltuvust gravitatsiooniväljast juba umbes 10 K juures, kuigi seal esineb tõenäoliselt sarnaselt madalamate tulemustega väike efekt.

Häiritusteooria abil leitud tulemus häiritusega harmoonilise ostsillaatori jaoks on mõnevõrra kaheldavam. Autoril õnnestus leida arvulised väärtused soojusmahtuvusele ainult mittefüüsikaliste Plancki ja Boltzmanni konstandi jaoks. Kuna süsteemi mõjutab siiski vaid väike häiritus ja arvestati ainult esimest järku parandiga energiale, siis on võimalik, et mõju soojusmahtuvusele on väga väike. Leitud valem statistilise summa jaoks koondus vaid teatud tingimustel. Tulemuse kinnitamiseks võiks vaadata ka kõrgemat järku parandeid ja leida soojusmahtuvusele arvulised väärtused.

⁷Lihtsus siinkohal tähendab, et osakest selles potentsiaalis suudetakse vähemalt simuleerida.

Kokkuvõte

Töö täitis oma eesmärgi leida ligikaudsed soojusmahtuvuse avaldised kahe kvantmehaanilise süsteemi jaoks. Tükati lineaarse potentsiaali jaoks gravitatsiooniväljas õnnestus leida, et väga kõrgetel temperatuuridel ei sõltu soojusmahtuvus gravitatsioonivälja tugevusest. Madalatel temperatuuridel leiti, et potentsiaali sümmeetrilisuse tõttu võib soojusmahtuvus nii tõusta kui ka langeda. Häiritusega harmoonilise ostsillaatori jaoks gravitatsiooniväljas ei leitud küll hästi analüüsitavat tulemust ja soojusmahtuvuse sõltuvus gravitatsioonist on kaheldav, kuid selle eest leiti täpne avaldis statistilise summa jaoks, millest pole raske jõuda soojusmahtuvuse avaldiseni.

Kinnitust leidis hüpotees, et on võimalik soojusmahtuvust nii suurendada kui ka vähendada. Hüpotees tugines varasematele tulemustele kera soojusmahtuvuse kohta. Käesolevas töös käsitletud mudeli ja kera jaoks saadud tulemustes esines sarnasusi, kuigi käesolevas töös olev mudel on kerast oluliselt lihtsam. Häiritusega harmoonilise ostsillaatori ja kera soojusmahtuvused olid sarnased. Tükati lineaarse potentsiaalile vastava ja kera soojusmahtuvuse vahel esines nii erinevusi kui ka sarnasusi.

Tulemuste leidmine osutus ootamatult keeruliseks. On väga vähe potentsiaale, mille jaoks on Schrödingeri võrrand analüütiliselt lahenduv. Samuti on suhteliselt lihtsate potentsiaalide jaoks ligikaudsete lahenduste leidmine küllaltki keeruline. Autor ei leidnud ühtegi potentsiaali, milles oleks lineaarselt koordinaadist sõltuv osa ja mille jaoks soojusmahtuvus sõltuks gravitatsioonivälja tugevusest.

Edaspidi tasuks uurida sama teemat, aga ka teistsuguste potentsiaalide jaoks. Tükati lineaarsele potentsiaalile saaks küllaltki lihtsalt juurde lisada tükke. Harmoonilise ostsillaatori jaoks võiks vaadata ka teisi häiritusi peale kuuphäirituse. Teistsugustest potentsiaalidest võiks uurida näiteks tükati paraboolset või Morse'i potentsiaali, kuna need on suhteliselt lihtsad ja nende puhul võiks sõltuda soojusmahtuvus gravitatsiooniväljast.

Peale selle võiks uurida ka ajast sõltuvaid potentsiaale mitmes dimensioonis. Sellised

potentsiaalid vastaksid suuremale hulgale reaalselt eksisteerivatele osakeste süsteemidele. Sellistele süsteemidele pole ilmselt lootust analüütilisi lahendeid leida ja tuleks koostada simulatsioon, kuigi tänapäevaste arvutitega poleks see ilmselt mõistlik.

Kasutatud materjalid

Gorzkowski, W. (1967) Problems of the 1st International Physics Olympiad. Loetud: http://ipho.org/problems-and-solutions/1967/1st_IPhO_1967.pdf, 12.03.2018

Griffiths, D. J. (2005) Introduction to quantum mechanics. Upple Saddle River: Prentice Hall

Kardar, M. (2007) Statistical Physics of Particles. New York: Cambridge University Press

Landau, L. D., Lifshitz, E. M. (2005) Quantum Mechaincs (Non-relativistic Theory). Oxford: Butterworth-Heinemann

Palma, G. D., Sormani, M. C. (2015) „Counterintuitive effect of gravity on the heat capacity of a metal sphere: re-examination of a well-known problem“. American Journal of Physics, nr 83 (723)

Shankar, R. (1994) Principles of quantum mechanics. New York: Plenum Press

Lisa 1 Maxima kood

```
(%i1)  E_n: (3^(2/3)*%pi^(2/3)*(g^2*m^2+b*g*m-a*g*m-a*b)^(2/3)
        *(2*n+1)^(2/3)*hbar^(2/3))/(2^(5/3)*(b+a)^(2/3)*m^(1/3));
(E_n)  (3^(2/3)*%pi^(2/3)*(g^2*m^2+b*g*m-a*g*m-a*b)^(2/3)*(2*n
        +1)^(2/3)*hbar^(2/3))/(2^(5/3)*(b+a)^(2/3)*m^(1/3))
(%i2)  Z: sum(%e^(-E_n*beta), n, 0, 400)$
(%i3)  diff(log(Z), beta, 1)$
(%i4)  subst(1/(k_B*T), beta, %o3)$
(%i5)  diff(%o4, T, 1)$
(%i6)  C: -%o5$
(%i7)  subst(1,m,C)$
(%i8)  subst(1,a,%o7)$
(%i9)  subst(1,b,%o8)$
(%i10) subst(1.38064852e-23,k_B,%o9)$
(%i11) subst(1.054571800e-34,hbar,%o10)$
(%i12) plot3d(%o11, [g,-0.9,0.9], [T,0,1], [grid, 50, 50], [
        xlabel, "C"], [gnuplot_pm3d,true]);
```

Resümee

Gravitatsiooniväli mõjutab osakeste süsteemide ja kehade soojusmahtuvust. Käesolevas töös on leitud ligikaudsed seosed kahe erineva potentsiaali soojusmahtuvuse jaoks gravitatsiooniväljas. Uurimistöös kasutati mudelit, kus on üks ühes dimensioonis vabalt liikuv osake ja ülejäänud osakesed on fikseeritud. Käesolevas töös vaadati kuuphäiritusega kvantmehaanilise harmoonilise ostsillaatori potentsiaali häiritusteooria abil ja tükati lineaarset potentsiaali kvaasi-klassikaliselt.

Tükati lineaarse potentsiaali jaoks leiti, et soojusmahtuvus võib nii langeda kui ka tõusta gravitatsioonivälja tugevuse suurenemisel. Kuuphäiritusega kvantmehaanilise harmoonilise ostsillaatori potentsiaali jaoks leiti valem soojusmahtuvuse jaoks, kuid lõplikku järeldust polnud võimalik teha. Saadud tulemusi võrreldi varasemalt uuritud kera soojusmahtuvusega gravitatsiooniväljas. Leiti, et kuigi süsteemid on mõnevõrra erinevad, esineb süsteemide vahel olulisi sarnasusi.

Abstract: Effect of gravity on the heat capacity of different quantum-mechanical systems

Gravitational field affects the heat capacity of some quantum-mechanical systems. In this study, approximate relationships were found for the heat capacity of two different quantum-mechanical systems in the gravitational field. This study used a model with one free particle in one dimension and the rest of the particles fixed. In this study perturbed quantum harmonic oscillator was examined using the perturbation theory and partially linear potential was examined using the WKB(J) approximation.

For the partially linear potential, it was found that the heat capacity can both decrease and increase as the strength of the gravitational field increases. For the perturbed quantum harmonic oscillator, a formula for heat capacity was found but no final conclusion could be drawn. The results obtained were compared with the heat capacity of a sphere in the gravitational field that had been previously studied. It was found that although the systems are somewhat different, there are significant similarities between the systems.