Tallinna Reaalkool

Gravitatsiooni mõju kera soojusmahtuvusele

Uurimistöö

Kaarel Kivisalu

11. a

Juhendajad: prof Jaan Kalda

õp Toomas Reimann

Tallinn 2019

Sisukord

Sissejuhatus

I rahvusvahelisel füüsikaolümpiaadil 1967. aastal oli järgnev probleem Problems of the... 1967:

Kaks homogeenset 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.

Käesolevas töös uuritakse konkreetsete potentsiaalide korral konstantse gravitatsioonvälja mõju kera soojusmahtuvusele. Konstantse gravitatsioonivälja potentsiaal on lineaarne. Vaadatakse soojusmahtuvuse erinevust juhtudel, kui on ainult kera potentsiaal ja kera potentsiaalile on lisatud lineaarne gravitatsioonivälja potentsiaal.

Töös on analüüsitud kuuppolünoompotentsiaali häirituse meetodil ja kahest lineaarsest funktsioonist koosnevat potentsiaali kvaasi-klassikaliselt. Samuti on näidatud, et osade potentsiaalide korral ei mõjuta gravitatsioon soojusmahtuvust.

Varem on uuritud gravitatsiooni mõju metallkera soojusmahtuvusele üldjuhul. Leiti üldine seos soojusmahtuvuse, temperatuuri, gravitatsioonivälja tugevuse ja lineaarse soojuspaisumisteguri vahel. Saadud tulemust on eksperimentaalselt väga raske kinnitada, kuna gravitatsiooni mõju on väga väike. Konkreetsete potentsiaalide läbivaatamine tõstaks ka varem leitud mudeli usaldusväärsust.

Uurimistöö hüpotees on, et sõltuvalt potentsiaalist võib gravitatsioon nii tõsta kui ka langetada keha soojusmahtuvust.

Tähiste loetelu

1 Teoreetiline osa

1.1 Tavapärane lahendus

Tavapärane lahendus põhineb soojuspaisumisega seotud erinevustel. Kerale A soojust andes see paisub ja selle massikese tõuseb. Järelikult peab osa kerale A antavast soojushulgast kuluma kera massikeskme gravitatsioonilise potentsiaalse energia tõstmiseks ja lõpptemperatuur on madalam algsest. Vastupidiselt, kera B massikese langeb soojuspaisumise tõttu ja energiat saadakse juurde, järelikult on kera B lõpptemperatuur kõrgem.

Pannakse ka kirja tavapärasele lahendusele vastavad valemid. Olgu kerade soojusmahtuvus C_0 gravitatsioonivälja puudumisel. Tavapärase lahenduse korrale, kui kera A soojendatakse, siis selle massikese tõused $dR = \alpha R\, dT$ võrra, kus dT on temperatuuri tõus, α on soojuspaisumistegur ja R on kera raadius. Kera saab potentsiaalse energia $d\Phi = mg\, dR$, kus m on keha mass ja g on raskuskiirendus. Järelikult, kui soojushulk δQ antakse süsteemile, siis saadakse, et

$$\delta Q = C_0\, dT + mg\, dR = C_0\, dT + mg\alpha R\, dT = (C_0 + mg\alpha R)dT. \tag{1}$$

See on ekvivalentne väitega, et kera A soojusmahtuvus on:

$$C_A = C_0 + mg\alpha R. \tag{2}$$

Analgoselt saame, et kera B soojusmahtuvus on

$$C_B = C_0 - mg\alpha R. \tag{3}$$

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

1.2 Tavapärane lahendus ja selle termodünaamika II seaduse rikkumine

Tavapärases lahenduses kaudselt eeldatakse, et keha siseenergia U ja raadius R sõltuvad ainult temperatuurist T, mitte aga raskuskiirendusest g. Vaadeltakse järgnevat tsüklit:

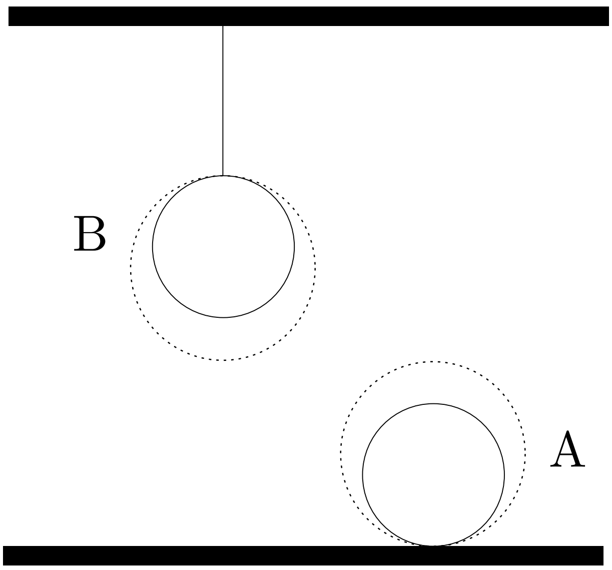
pall asub horisontaalsel külmal tasandil temperatuuriga T_1; pall ühendatakse soojema reservuaariga, mille temperatuur $T_2 = T_1 + dT > T_1$; pall riputatakse nööri külge ja horisontaalne tasand eemaldatakse; pall ühendatakse külma reservuaariga, mille temperatuur on T_1. Selle protsessi kasutegur on tehtud töö ja neeldunud soojuse suhe ning avaldub kujul Palma, Sormani 2015

$$\eta = \frac{2mg\alpha R}{C_0 + mg\alpha R}. \tag{4}$$

Kasutegur η ei sõltu dT suurusest. Termodünaamika teist seadus saab sõastada järgnevalt: iga tsükkel, mis töötab ainult temperatuuride T_1 ja T_2 juures ei saa olla efektiivsem Carnot' tsüklist, mis töötab samade temperatuuride juures. Carnot' tsükli efektiivsus on

$$\eta_{Carnot'} = \frac{dT}{T_2} \tag{5}$$

Järelikult, kui dT on piisavalt väike, siis on palliga tsükli kasutegur suurem Carnot' tsükli kasutegurist. Teisisõnu rikub tavapärane lahendus termodünaamika II seadust.



Joonis 1. Probleemi ülesehitus

Allikas: Palma, Sormani 2015

1.3 Statistiline mehaanika

Kasutades statistilise mehaanika meetodeid on võimalik leida kera soojusmahtuvuse sõltuvus gravitatsioonist (*Ibid.*: test):

$$\frac{\partial C(g,T)}{\partial g} = -mTY\left(\alpha^2 + \frac{\partial \alpha}{\partial T}\right), \tag{6}$$

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

1.4 Energiatasemed ja soojusmahtuvus

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):

$$\hat{\rho}(t) \equiv \sum_j p_j |\Psi_j(t)\rangle\langle\Psi_j(t)|, \tag{7}$$

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

$$\overline{\langle\hat{O}\rangle} = \mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{O}), \tag{8}$$

kus jälg (ingl *trace*) $\mathrm{tr}(\hat{A}) \equiv \sum_n \langle n|\hat{A}|n\rangle$[1] (**viide**). Kanoonilise ansambli[2] jaoks, mis on kvantmehaaniline ja diskreetne, avaldub kanooniline tihedusmaatriks järgnevalt (*Ibid.*: 174):

$$\hat{\rho}(\beta) = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{Z(\beta)}, \tag{9}$$

kus $\beta \equiv 1/k_B T$, kus T on temperatuur ja k_B on Boltzmanni konstant, Kuna $\langle\Psi_j|$ on normaliseeritud, siis

$$\langle 1\rangle = \mathrm{tr}(\hat{\rho}) = \sum_n \langle n|\hat{\rho}|n\rangle = \sum_{n,j} p_j |\langle n|\Psi_j\rangle|^2 = \sum_j p_j = 1. \tag{10}$$

Võrranditest (9) ja (10) ning omadusest $\mathrm{tr}(c\hat{A}) = c\,\mathrm{tr}(\hat{A})$ saadakse kvantmehaaniline statistiline summa Z, mis avaldub kujul

$$Z = \mathrm{tr}(e^{-\beta\hat{H}}) = \sum_n e^{-\beta\hat{H}}. \tag{11}$$

Kasutades võrrandeid (8), (9) ja (11) saadakse hamiltoniaani $\hat{H}$ keskmine ooteväärtus

$$\overline{\langle\hat{H}\rangle} = \mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{H}) = \frac{\mathrm{tr}\,\hat{H}e^{-\beta\hat{H}}}{Z} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial\beta}. \tag{12}$$

[1] `http://en.citizendium.org/wiki/Trace_%28mathematics%29` lõputu dimensioon converges

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

Hamiltoniaani keskmist ooteväärtust võib mõista kui süsteemi energait. Kuna ollakse huvitatud temperatuuri muutusel kui süsteemile antakse mingi enerigiahulk, siis on kasulik defineerida soojusmahtuvus kui

$$C = \frac{\partial \overline{\langle \hat{H} \rangle}}{\partial T}. \tag{13}$$

Kombineerides võrrandeid (12) ja (13) saadakse, et

$$C = kT^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \tag{14}$$

1.5 Kvaasi-klassikaline lähendus

Schrödingeri võrrandi

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

saab ümber kirjutada järgnevalt:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi, \tag{16}$$

kus

$$p(x) \equiv \sqrt{2m[E - V(x)]} \tag{17}$$

on klassikaline valem osakese impulsi jaoks koguenergiaga E ja potentsiaalse energiaga $V(x)$. Piirkonnas, kus $E > V(x)$, on $p(x)$ reaalne. Seda piirkonda kutsutakse „klassikaliseks“, kuna klasskikaliselt on osake piiratud selles piirkonnas. Üldiselt on ψ kompleksfunktsioon, mida saab avaldada klassikalises piirkonnas amplituudi $A(x)$ ja faasi $\phi(x)$ kaudu, mis mõlemad on reaalsed (Griffiths 2005: 316):

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

Kas oleks vaja tuletuskäiku?

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

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

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

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

kus A ja B on reaalsed parameetrid. Kahjuks ei kehti (20) kui $E \approx V(x)$, kuna $\sqrt{p(x)} \to 0$.

Kas oleks vaja tuletuskäiku?

Olgu $V(x_1) = V(x_2) = E$, $x_1 < x_2$ ja lõigul (x_1, x_2) on $V(x) < E$. On siiski võimalik vaadeldes lainefunktsiooni x_1 lähedal näidata, et lõigul (x_1, x_2) on lainefunktsioon järgmine (Landau, Lifshitz 2005: 167-170):

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

kui x_2 lähedal on lainefunktsioon

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

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

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

või

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

1.6 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 H omaketid ja omaväärtused võib kirja panna häiritusseerias (*Ibid.*: 451):

$$|n\rangle = \left|n^0\right\rangle + \left|n^1\right\rangle + \left|n^2\right\rangle + ... \tag{25}$$

$$E_n = E_n^0 + E_n^1 + E_n^2 + ... \tag{26}$$

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

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \tag{27}$$

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

või

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

Vaadates võrrandis (28) nullindat järku liikmeid saadakse võrrand

$$\hat{H}^0|n^0\rangle = E_n^0|n^0\rangle. \tag{29}$$

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

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

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

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

Kas oleks vaja tuletuskäiku?

Sarnaselt on võimalik saada teist järku parand energiale, mis avaldub kujul (Shankar 1994: 451-453):

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n^0|\hat{H}^1|m^0\rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \tag{32}$$

2 Praktiline osa

Käesolevas osas leitakse konkreetsetele võimalikele kera potentsiaalidele vastavad soojusmahtuvuse sõltuvused gravitatsioonist, kus gravitatsiooni potentsiaal on võetud lineaarseks sõltuvalt ühest koordinaadist. Kuigi tegelik kera potentsiaal on keeruline võib anda konkreetne potentsiaal küllaltki täpse lahendi.

2.1 Tükiti lineaarne potentsiaal

Vaadeldakse potentsiaali kujuga

$$V(x) = \begin{cases} (-a+mg)x, & x < 0, \\ (b+mg)x, & x \geq 0, \end{cases} \tag{33}$$

kus a ja b on positiivsed reaalarvulised konstandid ning $-a+mg < 0$ ja $b+mg > 0$. Kvaasi-klassikalises lähenduses saame leida vastava energiatasemed:

$$\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar = \int_{x_1}^{0} \sqrt{2m[E_n - (-a+mg)x]}\,dx + \int_{0}^{x_2} \sqrt{2m[E_n - (b+mg)x]}\,dx, \tag{34}$$

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

$$\begin{aligned} \left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar &= \sqrt{2m}\left[-\frac{2(E_n-(-a-mg)x)^{\frac{2}{3}}}{3(-a+mg)}\right]\Bigg|_{x_1}^{0} + \sqrt{2m}\left[-\frac{2(E_n-(b-mg)x)^{\frac{2}{3}}}{3(b+mg)}\right]\Bigg|_{x_2}^{0} \\ &= -\frac{2\sqrt{2m}E_n^{\frac{3}{2}}}{3(-a+mg)} + \frac{2\sqrt{2m}E_n^{\frac{3}{2}}}{3(b+mg)}. \end{aligned} \tag{35}$$

E_n avaldades saadakse, et

$$E_n = \left[\frac{3\pi}{2\sqrt{2}}\frac{\hbar}{\sqrt{m}}\frac{(-a+mg)(b+mg)}{a+b}\right]^{\frac{2}{3}}\left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}}. \tag{36}$$

Asendades võrrandisse (36) $c = \left[\frac{3\pi}{2\sqrt{2}}\frac{\hbar}{\sqrt{m}}\frac{(-a+mg)(b+mg)}{a+b}\right]^{\frac{2}{3}}$ avaldub statistiline summa järgnevalt:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\beta c\left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}}\right). \tag{37}$$

Kui $\beta c \ll 1$, siis saab summa asendada integraaliga ja $n + \frac{1}{2} \approx n$:

$$Z \approx \int_0^\infty e^{-\beta c n^{\frac{2}{3}}}\,dn = \left[\frac{3\sqrt{\pi}\,\mathrm{erf}\left(n^{\frac{1}{3}}\sqrt{\beta c}\right)}{4(\beta c)^{\frac{3}{2}}} - \frac{3n^{\frac{1}{3}}e^{-\beta c n^{\frac{2}{3}}}}{2\beta c}\right]\Bigg|_0^\infty = \frac{3\sqrt{\pi}}{4(\beta c)^{\frac{3}{2}}}. \tag{38}$$

Võrrandist (14) ja (38) saadakse, et

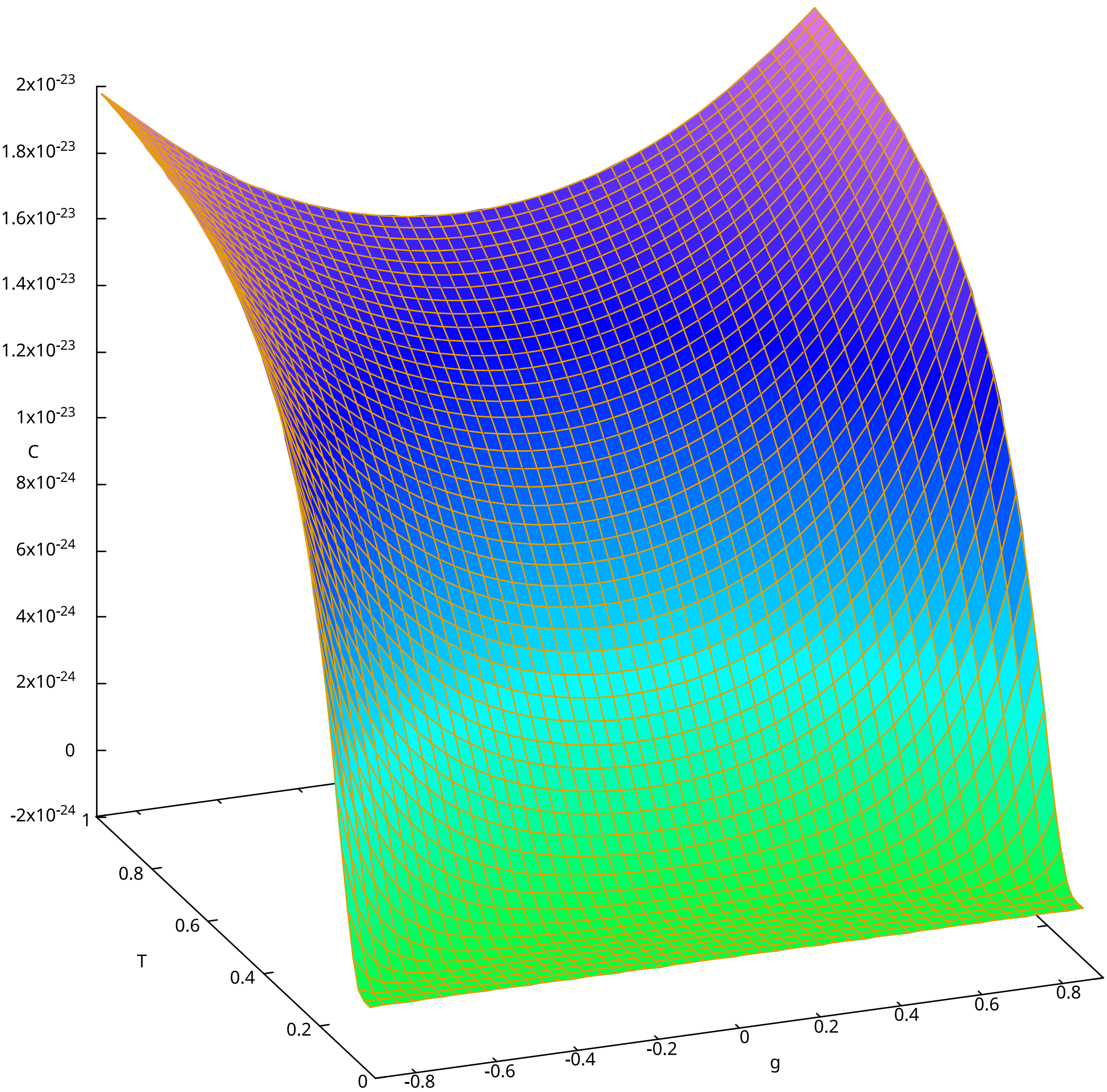
$$C = kT^2\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\ln\frac{3\sqrt{\pi}}{4(\beta c)^{\frac{3}{2}}} = -k_B T^2\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{3}{2\beta} = \frac{3k_B}{2} \tag{39}$$

See tähendab, et kõrgetel temperatuuridel ei sõltu süsteemi soojusmahtuvus temperatuurist. Üldisemalt avaldub soojusmahtuvus võrranditest (14) ja (37) järgnevalt:

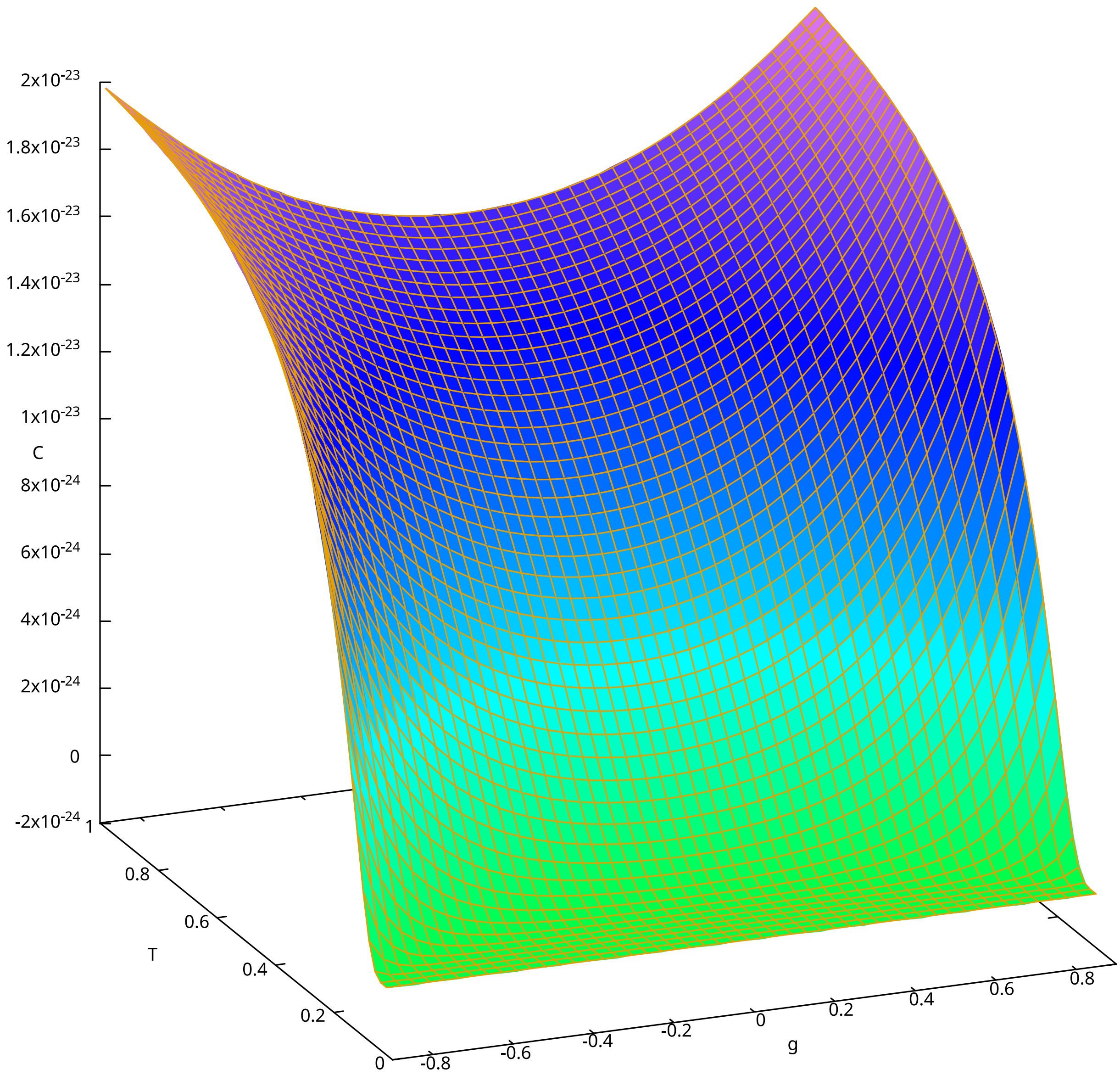
$$\begin{aligned}
C &= kT^2\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\ln Z \\
&= kT^2\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{1}{Z}\frac{\partial Z}{\partial\beta} \\
&= kT^2\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{1}{Z}\sum_{n=0}^\infty\frac{\partial}{\partial\beta}\exp\left(-\beta c\left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}}\right) \\
&= kT^2\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{\sum_{n=0}^\infty -c\left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}}\exp\left(-\beta c\left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}}\right)}{\sum_{n=0}^\infty\exp\left(-\beta c\left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}}\right)} \\
&= kT^2\frac{c^2\sum_{n=0}^\infty\left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{4}{3}}\exp\left(-c\left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}}\beta\right)}{\sum_{n=0}^\infty\exp\left(-c\left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}}\beta\right)} \\
&\quad - \frac{c^2\left(\sum_{n=0}^\infty\left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}}\exp\left(-c\left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}}\beta\right)\right)^2}{\left(\sum_{n=0}^\infty\exp\left(-c\left(n+\frac{1}{2}\right)^{\frac{2}{3}}\beta\right)\right)^2}
\end{aligned} \tag{40}$$

Kui $\beta c \gtrsim 1$, siis avaldise (40) väärtus on võimalik küllaltki heas lähenduses leida vaadates ainult summade esimesi liikmeid.[4]

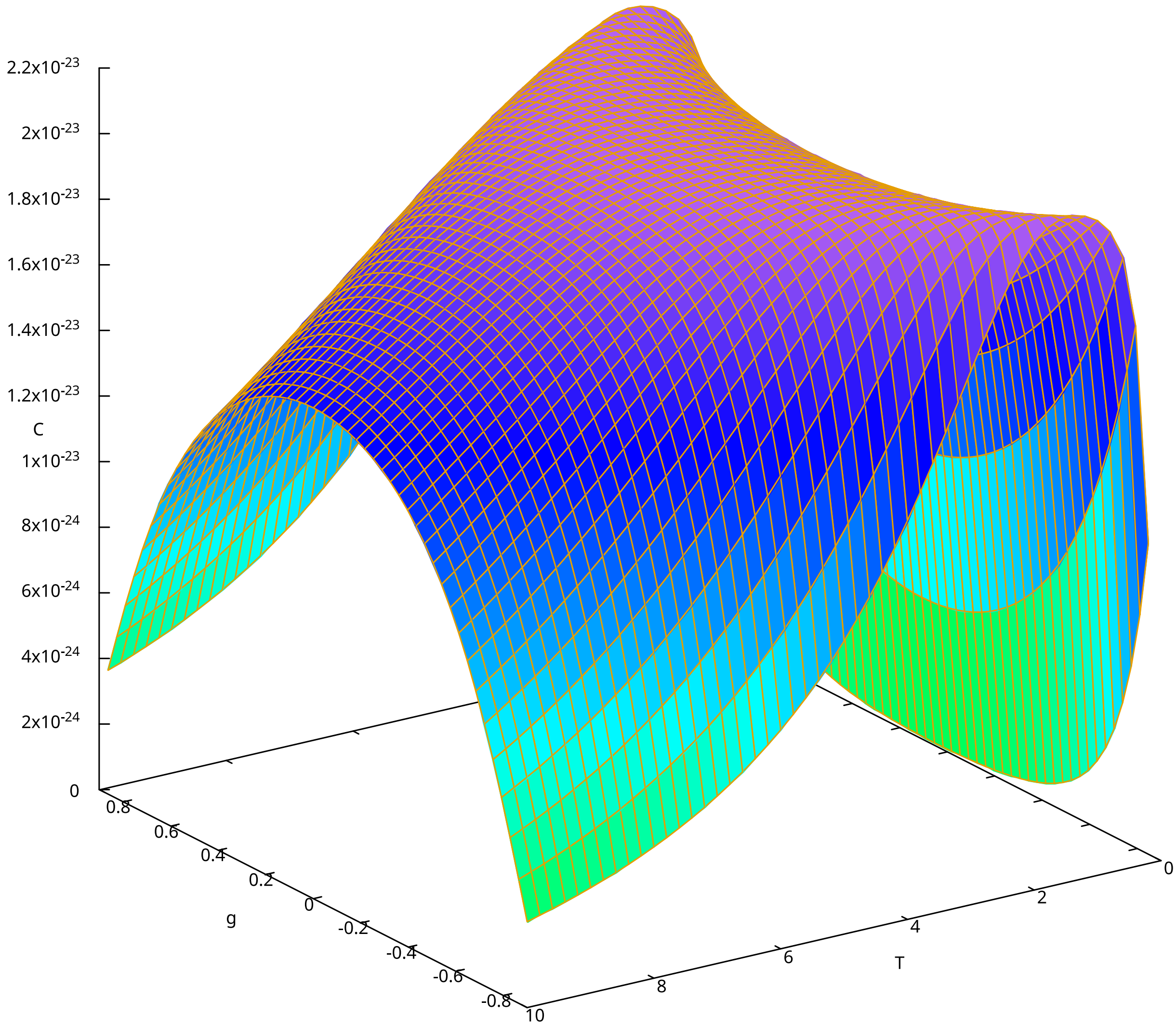
[4] $\beta c = 1$ jaoks piisab küllaltki hea täpsuse jaoks mõnesajast liikmest.



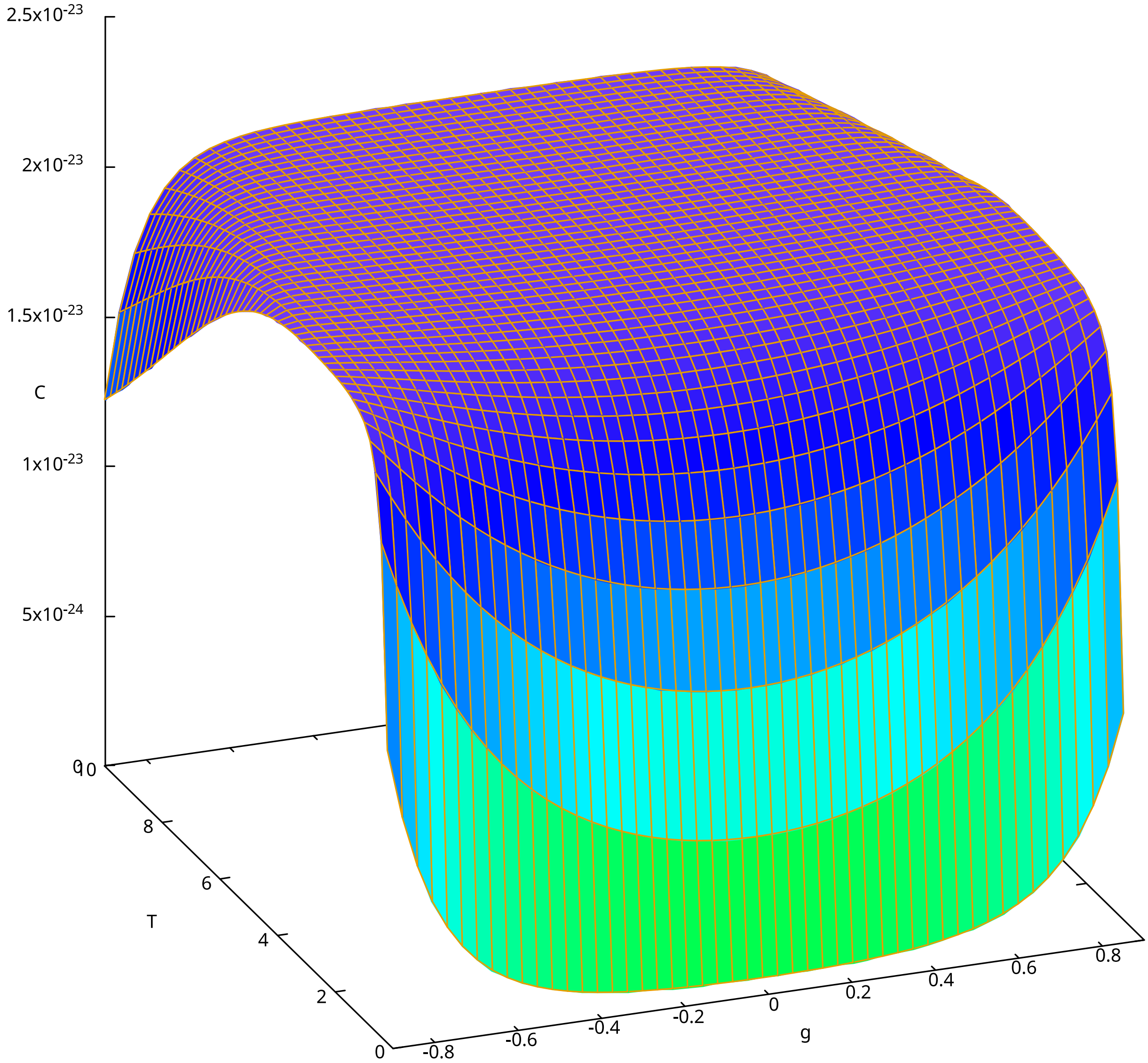
Joonis 2. Soojusmahtuvuse sõltuvus gravitatsiooniväljast ja temperatuurist.
Allikas: Autori erakogu.



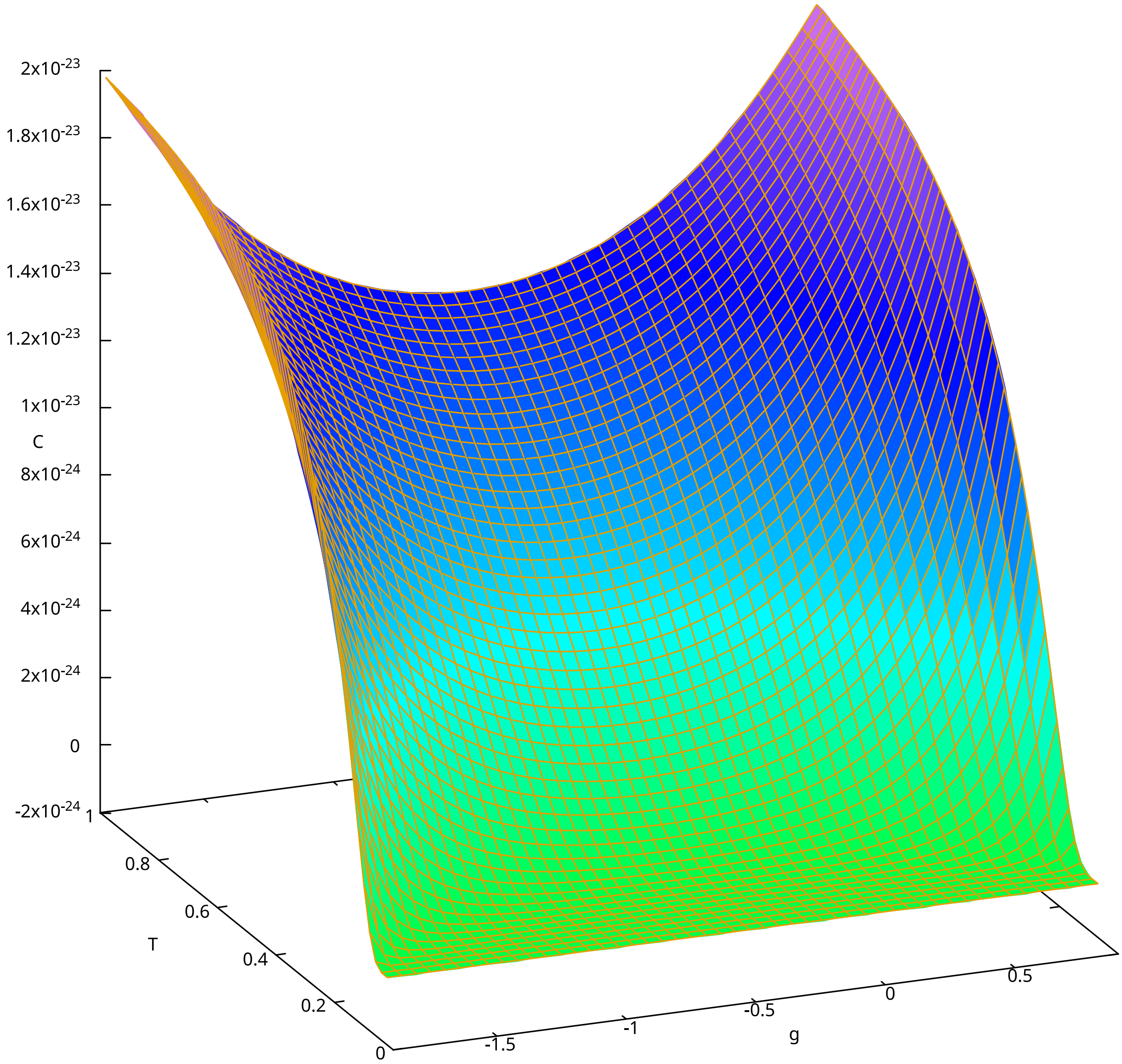
Joonis 3. Soojusmahtuvuse sõltuvus gravitatsiooniväljast ja temperatuurist.
Allikas: Autori erakogu.



Joonis 4. Soojusmahtuvuse sõltuvus gravitatsiooniväljast ja temperatuurist.
Allikas: Autori erakogu.



Joonis 5. Soojusmahtuvuse sõltuvus gravitatsiooniväljast ja temperatuurist.
Allikas: Autori erakogu.



Joonis 6. Soojusmahtuvuse sõltuvus gravitatsiooniväljast ja temperatuurist.
Allikas: Autori erakogu.

2.2 Tükiti paraboolne potentsiaal

$$\frac{\sqrt{m}\left(\sqrt{2}g^2m^2+2^{\frac{5}{2}}\,E_n a\right)\arcsin\left(\frac{\sqrt{g^2\,m^2+4E_n a}\sqrt{g^2\,m^4+4E_n a\,m^2}}{g^2\,m^3+4E_n am}\right)}{4a^{\frac{3}{2}}}=\pi\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar \tag{41}$$

2.3 Häiritusega harmooniline ostsillaator

Siin osas vaadeltakse harmoonilist ostsillaatorit, millele on lisatud kuuphäiritus, gravitatsiooniväljas.

2.3.1 Harmooniline ostsillaator gravitatsiooniväljas

Selleks, et leida häirituse mõju süsteemile lahendatakse kõigepealt omaväärtusprobleem harmoonilise ostsillatori jaoks gravitatsiooniväljas. Sellele vastav hamiltoonian on

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

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

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

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

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

Tahetakse leida omaväärtused järgmisele võrrandile:

$$\mathcal{H}|\varepsilon\rangle=\varepsilon|\varepsilon\rangle. \tag{45}$$

Kehtivad järgnevad kasulikud omadused:

$$\left[A,A^\dagger\right]=1, \tag{46}$$

$$[A,\mathcal{H}]=A, \tag{47}$$

$$\left[A^\dagger,\mathcal{H}\right]=-A^\dagger. \tag{48}$$

Operaatorid A ja $A^\dagger$ on kasulikud kuna need genereerivad uusi omaseisundeid. Kuna

$$\begin{aligned}\mathcal{H}A|\varepsilon\rangle &= (A\mathcal{H} - [A,\mathcal{H}])\,|\varepsilon\rangle \\ &= (A\mathcal{H} - A)|\varepsilon\rangle \\ &= (\varepsilon - 1)A|\varepsilon\rangle, \end{aligned} \tag{49}$$

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

$$A|\varepsilon\rangle = C_\varepsilon|\varepsilon - 1\rangle, \tag{50}$$

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

$$\begin{aligned}\mathcal{H}A^\dagger|\varepsilon\rangle &= \left(A^\dagger\mathcal{H} - [A^\dagger,\mathcal{H}]\right)|\varepsilon\rangle \\ &= (A^\dagger\mathcal{H} + A^\dagger)|\varepsilon\rangle \\ &= (\varepsilon + 1)A^\dagger|\varepsilon\rangle, \end{aligned} \tag{51}$$

nii et

$$A^\dagger|\varepsilon\rangle = C_{\varepsilon+1}|\varepsilon + 1\rangle. \tag{52}$$

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

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

Korrutades võrrandi (53) läbi operaatoriga $A^\dagger$ saadakse, et

$$A^\dagger A|\varepsilon_0\rangle = 0. \tag{54}$$

Võrranditest (44) ja (54) saadakse, et

$$\left(\mathcal{H} - 1/2 + \frac{k_1}{\hbar\omega}\right)|\varepsilon_0\rangle = 0 \tag{55}$$

või

$$\mathcal{H}|\varepsilon_0\rangle = \left(\frac{1}{2} - \frac{k_1}{\hbar\omega}\right)|\varepsilon_0\rangle \tag{56}$$

või

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2} - \frac{k_1}{\hbar\omega}. \tag{57}$$

Kasutades operaatorit $A^\dagger$ korduvalt saab suurendada seisundit $|\varepsilon_0\rangle$ lõputult. Seega avalduvad ostsillatori energiatasemed järgnevalt:[5]

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{k_1}{\hbar\omega}, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{58}$$

[5]Kuna ühes dimensioonis pole kidumist, siis on ainsad energiatasemed (Shankar 1994: 176-177).

või

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - k_1, \qquad n = 0, 1, 2, \dots \tag{59}$$

Nüüd tahetakse leida võrranditest (50) ja (52) konstandid C_ε ja $C_{\varepsilon+1}$. Kuna $\varepsilon = n + 1/2 - k_1/\hbar\omega$, tähistame kette täisarvuga n. Tahetakse leida konstant C_n järgmisest võrrandist:

$$A|n\rangle = C_n|n-1\rangle. \tag{60}$$

Võrrandi (60) kaasvõrrand on

$$\langle n|A^\dagger = \langle n-1|C_n^*. \tag{61}$$

Kombineerides võrrandid (60) ja (61) saadakse, et

$$\langle n|A^\dagger A|n\rangle = \langle n-1|C_n^* C_n|n-1\rangle \tag{62}$$

$$\langle n|\mathcal{H} - \tfrac{1}{2} + \tfrac{k_1}{\hbar\omega}|n\rangle = C_n^* C_n \tag{63}$$

$$\langle n|n|n\rangle = |C_n|^2 \tag{64}$$

$$|C_n|^2 = n \tag{65}$$

$$C_n = \sqrt{n}e^{i\phi}. \tag{66}$$

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

$$A|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \tag{67}$$

Analoogselt saab näidata, et

$$A^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \tag{68}$$

2.3.2 Häiritusega harmoolinine ostsillaator gravitatsiooniväljas

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

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1, \tag{69}$$

kus

$$\hat{H}^1 = \lambda\hat{x}^3 = \lambda\left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(A^\dagger + A) - \frac{g}{\omega^2}\right]^3 = \lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}(A^\dagger + A - k_2)^3, \tag{70}$$

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

$$E_n^1 = \langle n|\hat{H}^1|n\rangle = \lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}\langle n|(A^\dagger + A - k_2)^3|n\rangle \tag{71}$$

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 (71) nullist erinevad liikmed ainult üksliikmed $-k_2^3$, $-3k_2A^\dagger A$ ja $-3k_2AA^\dagger$. Järelikult

$$\begin{aligned} E_n^1 &= \lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}\langle n| - k_2^3 - 3k_2A^\dagger A - 3k_2AA^\dagger|n\rangle \\ &= -\lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}(k_2^3 + 3k_2\sqrt{n}\sqrt{n} + 3k_2\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}) \\ &= -\lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}[k_2^3 + 3k_2(2n+1)] \end{aligned} \tag{72}$$

Võrranditest (59) ja (72) saadakse, et

$$E_n \approx \left(n + \frac{1}{2}\right) - k_1 - \lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}[k_2^3 + 3k_2(2n+1)] \tag{73}$$

Võrranditest (11) ja (73) saadakse, et statistiline summa on

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty}\exp\left(-\beta\left(\left(n+\frac{1}{2}\right) - k_1 - \lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}(k_2^3 + 3k_2(2n+1))\right)\right). \tag{74}$$

Tegu on geomeetrilise rea summaga. See koondub järgmisel tingimusel:

$$\frac{3}{\sqrt{2}}k_2\lambda\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} < 1 \tag{75}$$

või

$$3\lambda\hbar g < m\omega^3 \tag{76}$$

Selle eelduse kehtimisel on

$$Z = \frac{\exp\left(\beta\left(\lambda(k_2^3 + 3k_2)\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} + k_1 - \frac{1}{2}\right)\right)}{1 - \exp\left(\beta\left(6k_2\lambda\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{\frac{3}{2}} - 1\right)\right)} \tag{77}$$

Kokkuvõte

Kasutatud materjalid

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)

Problems of the 1st International Physics Olympiad (1967). Loetud: `http://ipho.org/problems-and-solutions/1967/1st_IPhO_1967.pdf`, 18.11.2018

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], [
    zlabel, "C"], [gnuplot_pm3d,true]);
```

Abstract

Resüimee

Kinnitusleht

Kinnitan, et

- koostasin uurimistöö iseseisvalt. Kõigile töös kasutatud teiste autorite töödele ja andmeallikatele on viidatud;
- olen teadlik, et uurimistööd ei edastata teistele tulu teenimise eesmärgil ega jagata teadlikult plagieerimiseks.

. . . .

kuupäev / nimi / allkiri

Tunnistan uurimistöö kaitsmisvalmiks.

Juhendajad

. . . .

kuupäev / nimi / allkiri

. . . .

kuupäev / nimi / allkiri