Kvantmehaanika

Sissejuhatus

Kvantmehaanika puhul öeldakse sageli, et ainel on nii lainelised, kui ka osakestele iseloomulikud omadused. See on katse seletada olukorda tuttavate mõistete abil. Eeskätt kujutab iga osake kvantmehaanikas siiski lainet ning selgub, et ka need jooned, mis oleks nagu osakesele viitavad, tulenevad tegelikult lainelisest olemusest. Üritagem siis asjaga tutvust teha. Väiksemas kirjast toodud teksti võib esimesel lugemisel vahele jätta, suure osa RFO ülesannete lahendamiseks pole vastavad teadmised hädavajalikud.

Lainefunktsioon

Klassikalise mehaanika puhul saab sisemiste vabadusastmeteta (milleks võiks olla nt pöörlemine ümber oma telje) *osakese olekut täielikult kirjeldada tema **impulsi ja koordinaadi** abil*; *kvantmehaanika puhul tuleb osakese oleku täielikuks kirjeldamiseks anda tema nn **lainefunktsioon*** Ψ, mis on üldjuhul kompleksarvuline ning mida võib esitada näiteks sõltuvuses koordinaadist ja ajast, $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$. Tõenäosus leida osake ajahetkel t punktist koordinaatidega x, y ja z on võrdeline lainefunktsiooni mooduli ruuduga, $|\Psi|^2 = \Psi(x, y, z, t)\Psi^*(x, y, z, t)$, kus Ψ^* on Ψ kaaskompleksarv. Küsimuse juurde, mida tähendab "osakese leidmine" teatud ruumipunktis, tuleme veidi hiljem tagasi; lühidalt tähendab see seda, et korraldatakse asukoha mõõtmine ning saadakse teatud mõõtmistulemus (x, y, z).

Lainefunktsioonist aitab ehk paremini aru saada footoni juhtum, mil lainefunktsiooni reaalosana toimib elektrivälja vektor ja imaginaarosana magnetvälja vektor (väide kehtib Gaussi mõõtühikute süsteemis; SI süsteemis tuleb imaginaarosaks võtta magnetilise induktsiooni ja valguskiiruse korrutis). Footoni leidmise tõenäosus teatud punktis on võrdeline sealse elektromagnetilise energiatihedusega (valguse intensiivsusega).

Võrreldes elektroni ja footonit märkigem, et footoni kirjeldamiseks vajame vektoriaalset lainefunktsiooni, elektroni jaoks aga kasutatakse skalaarset. See erinevus on tingitud asjaolust, et footoni impulsimoment teatud massikeset läbiva telje suhtes võib omada kolme erinevat väärtust (vastab lineaarselt polariseeritud ning päripäeva- ja vastupäeva ringpolariseeritud valgusele). Antud aspekti lähem vaatlus väljub käesoleva õppematerjali raamest.

Energia ja impulss kvantmehhaanikas

Kvantmehaanikas on oluline roll nn *statsionaarsetel olekutel*, mil osakese energia omab üheselt määratud väärtust E (nn omaväärtust).

Siin on vähemalt kaks põhjust. Esiteks, kvantmehaanilise süsteemi iga olek on esitatav statsionaarsete olekute superpositsioonina (täpselt samamoodi, nagu seotud ostsillaatorite suvaline liikumine on esitatav omavõnkumiste superpositsioonina). Teiseks, üldjuhul omandavad tasakaalust välja viidud kvantmehaanilised süsteemid kiiresti sellise madalaima energiaga oleku, mis pole ühegi jäävusseadusega vastuolus; madalaim energia on mh ka üheselt määratud energia.

Selgub (täpsemalt: tuleneb Schroedingeri võrrandist, mida omakorda võib vaadelda kvantmehaanika postulaadina), et ühese energiaga E olekus $\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z)e^{-iEt/\hbar}$, st lainefunktsioon võngub ringsagedusega ω, mida seob energiaga valem

$$E = \hbar\omega = h\nu. \qquad (1)$$

Sagedus $\nu = \omega/2\pi$; nii suurust h kui ka suurust $\hbar = h/2\pi$ nimetatakse Plancki konstandiks.

Pöörakem tähelepanu sellele, et avaldises (1) figureeriv energia on kvantmehaanilise süsteemi (nt osakese) koguenergia (kineetiline pluss potentsiaalne), kusjuures potentsiaalse energia nullnivoo võib olla suvaliselt valitud. Tõepoolest, nullnivoo muutus teatud väärtuse U võrra tähendab lainefunktsiooni korrutamist teguriga $e^{iUt/\hbar}$ (see väide kehtib ka mitte-statsionaarsete olekute jaoks), mis aga ei muuda mingilgi määral füüsikaliselt tajutavat suurust, osakese leidmise tõenäosust, sest antud teguri moodul on samaselt üks. Praktilised järeldused on järgmised:

(a) mitte-relativistliku eletroni või neutroni liikumisel (põrkumisel jne) kasutame mitte-relativistlikku kineetilise energia avaldist $p^2/2m$, sest osake ei kao kuhugi ja kineetilist energiat tasub mõõta paigaloleku suhtes (st relativistlikku seisuenergiat pole vaja arvestada);

(b) footoni neeldumisel ja kiirgumisel on loomulik kasutada tema relativistlikku energia avaldist $E = mc^2$;

(c) potentsiaalse energia nullnivoo võib valida lähtudes kirjapaneku mugavusest.

Energia jäävuse seadust võib kvantmehaanikas vaadelda kui resonantsi tingimust. Tõepoolest, olgu meil süsteem, millel on kaks energianivood $E_1 < E_2$. Mingu see süsteem üle madalamalt nivoolt kõrgemale sellise osakese (konkreetsuse mõttes footoni) neelamise teel, mille energia on E_3. Energia jäävuse seaduse põhjal $E_2 = E_1 + E_3$, mille võib ringsageduste abil kirja panna kujul $\omega_2 - \omega_1 = \omega_3$. Vasakul pool võrdusmärki on süsteemi kirjeldava lainefunktsiooni sagedus siis, kui energia nullnivooks valida algse statsionaarse oleku energia E_1, paremal pool aga footoni sagedus. Niisiis saab interaktsioon (footoni neeldumine) toimuda siis, kui on täidetud resonantsi tingimus: elektromagnetlaine sagedus võrdub süsteemi statsionaarsete olekute sageduste vahega.

Vaatleme kvantmehaanilist ostsillaatorit: osakest, mis liigub paraboolses potentsiaaliaugus. Olgu selle osakese klassikaline ringsagedus ω_0. Selline ostsillaator võib minna ühelt kvantmehaaniliselt energianivoolt (E_i) teisele (E_j, mis vastab suurema amplituudga võnkumisele) teatud arvu ($n = 1, 2, 3\ldots$) footonite neelamise teel. Viimased kujutavad endast elektromagnetlainet, mis peab olema resonantsis ostsillaatoriga, st elektromagnetlaine sagedus peab võrduma omavõnkesagedusega ω_0. Energia jäävuse seadusest $E_j - E_i = \hbar n\omega_0$ pole raske järeldada, et ostsillaatori energianivood peavad olema esitatavad kujul

$$E_n = \hbar n\omega_0 + C.$$

Schroedingeri võrrandi lahendamine näitab, et kui potentsiaalse energia nullnivooks võtta potentsiaali miinimum, siis konstant $C = \hbar\omega_0/2$.

Saadud tulemus on kergesti üldistatav m vabadusastmega ostsillaatoritele. Klassikalisest mehaanikast teame, et sellisel puhul on süsteemil m omavõnkesagedust ω_j, $j = 1, 2, \ldots m$. j-ndat omavõnkumist saab ergastada, kui on täidetud resonantsi tingimus, st elektromagnetlaine sagedus on ω_j. Niisiis tuleb ostsilaatori statsionaarsete enrgianivoode kirjeldamiseks kasutada m erinevat täisarvu n_j:

$$E = \sum_{j=1}^{m} \hbar\omega_j n_j + C.$$

Saadud energia avaldis on selline, justkui oleks meil eri tüüpi osakesi — energiatega ω_j, $j = 1, 2, \ldots m$ — ning täisarvud n_j kirjeldavad nende osakeste arvusid. Kristallvõre elastsete omavõnkumiste (seisulainete) puhul nimetatakse neid nn *kvaasiosakesi* (st mitte päris reaalseid osakesi) *foononiteks*.

Niisiis on ostsillaatori energia *kvanditud*, st see võib omada vaid teatud kindlaid, diskreetseid väärtusi.

Statsionaarses olekus on lainefunktsiooni ajaline sõltuvus teada ning seega taandub küsimus sellele, milline on tema ruumiline sõltuvus $\psi(x, y, z)$. Selgub (täpsemalt: tuleneb Schroedingeri võrrandist), et olekus, kus osakese impulss $\vec{p}$ on üheselt määratud, on lainefunktsiooniks sinusoidaalne tasalaine, $\psi = e^{i\vec{k}\vec{r}}$, kus lainevektor $\vec{k}$ on seotud impulsiga valemi

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \qquad (2)$$

abil. Lainevektor on laine levimissihiline vektor, mille moodul $k = 2\pi/\lambda$, kus λ on lainepikkus. Funktsiooni $\psi = e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar}$ nimetatakse impulsi *omafunktsiooniks*.

Paneme tähele, et osakese puhul võrdub lainefunktsiooni kui laine grupikiirus selle osakese klassikalise kiirusega. Tõepoolest, $\hbar\omega = p^2/2m = (\hbar k)^2/2m + U$, millest diferentseerimise tulemusel saame $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \hbar k/m = p/m = v$. Sama kehtib ka footoni jaoks: $\hbar\omega = mc^2 = pc = \hbar kc$, millest $v_g = \frac{d\omega}{dk} = c$.

Lainefunktsioon kui funktsioon impulsist

Niisiis on kindla (määratud) impulsiga osakese lainefunktsiooniks sinusoidaalne tasalaine, mis täidab kogu ruumi, st osakese asukoht pole mingilgi määral teada.

Lainefunktsiooni mooduli ruut $|\psi(\vec{r})|^2 \equiv \psi(x, y, z)|^2$ annab tõenäosuse leida osake antud punktis. Seda väidet tuleb võtta kui katsete põhjal formuleeritud postulaati. Küsimuse juurde, mida tähendab "leida osakest", tuleme tagasi mõnevõrra hiljem. Hetkel on kiireloomulisemaks asjaoluks see, et lainefunktsiooni võib esitada mitte ainult sõltuvuses koordinaadist $\vec{r}$, vaid ka impulsist $\vec{p} \equiv (p_x, p_y, p_z)$, st $\psi = \psi(\vec{p}) \equiv \psi_{\vec{p}}$. Tegemist on matemaatilise nipiga (nimega “Fourier’ analüüs’)’, kus lainefunktsioon esitatakse kindla impulsiga olekute $\psi_{\vec{p}} e^{i\vec{p}\vec{r}/\hbar}$ summana. Sellise esituse puhul annab iga komponendi amplituudi mooduli ruut $|\psi_{\vec{p}}|^2$ tõenäosuse leida vastava impulsiga osake (üldjuhul kujutab siin amplituud $\psi_{\vec{p}}$ endast kompleksarvu, mille argument võrdub vastava komponentlaine faasinihkega).

Vaatleme asja matemaatilisemalt. Fourier’ analüüs õpetab, et iga funktsiooni $f(x)$ võib esitada sinusoidaalsete funktsioonide summana, $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f_k e^{ikx} dk$, kus lainevektorist k sõltuvat suurust $f_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} f_k e^{-ikx} dk$ nimetatakse funktsiooni $f(x)$ Fourier’ komponendiks (või Fourier’ teisenduseks). Tehes muutujavahetuse $k \to p/\hbar$, võime antud integraali kirjutada lainefunktsiooni jaoks kujul

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p e^{ipx/\hbar} dp, \tag{3}$$

kus kordaja

$$\psi_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ipx/\hbar} dx. \tag{4}$$

Valemid (3,4) pole antud hetkel mitte pähe õppimiseks, vaid andmaks konkreetsem kuju väitele: iga lainefunktsiooni saab esitada selliste olekute (lainefunktsioonide $\psi = e^{ipx/\hbar}$) superpositsioonina, kus impulss omab kindlat ja ühest väärtust p; nende olekute amplituude ψ_p võib vaadelda, kui antud lainefunktsiooni esitust sõltuvusena impulsist.

Võrdlusmomendi saamise huvides vaadelgem sellist olekut, kus ruumikoordinaat omab kindlat ja ühest koordinaadi väärtust x_0; selleks on lainefunktsioon $\psi = \delta(x - x_0)$. Funktsiooni $\delta(x)$ nimetatakse Dirack’i delta-funktsiooniks (selle graafikualune pindala on 1 ja see omab nullist erinevat väärtust vaid punktis $x = 0$). Nüüd võime me avaldada suvalise lainefunktsiooni $\psi(x)$ sellise superpositsioonina, kus iga komponent omab ühest koordinaadi väärtust:

$$\psi(x) = \int \psi(x_0)\delta(x - x_0) dx_0.$$

Paneme tähele, et paremal pool võrdusmärki, kindla koordinaadiga oleku $\delta(x - x_0)$ kordajaks on esialgne funktsioon $\psi(x)$ kohal $x = x_0$, mille mooduli ruut võrdub tõenäosusega leida osake punktis x_0. Seetõttu ei tohiks olla üllatav, et esituses (3) annab kindla impulsiga oleku $e^{ipx/\hbar}$ kordaja mooduli ruut (st $|\psi_p|^2$) tõenäosuse leida osake impulsiga p.

Üleminekut funktsioonilt $\psi(x)$ fuktsioonile ψ_p võib vaadelda kui ruumipööret funktsioonide (*Hilberti*) ruumis (kus funktsioon ψ on vektoriks), sest nii, nagu harilike ruumipöörete valemite puhulgi, avalduvad vektori uued koordinaadid ψ_p vanade koordinaatide $\psi(x)$ lineaarkombinatsioonina. Ainsaks erinevuseks on see, et harilike ruumide puhul on koordinaate lõplik arv, sestap kirjutatakse lineaarkombinatsioon summa abil; Hilberti ruumis on aga koordinaatide hulk loendumatu (kontiinum), niisiis asendab summat integraal. Kui harilikus ruumis tähistatakse koordinaadistikust sõltumatut vektorit noolekesega sümboli peal, siis Hilberti ruumis kasutatakse harilikult kuju $|\psi\rangle$. Seega $|\psi\rangle$ tähistab lainefunktsiooni, mille puhul pole otsustatud või oluline, kas me vaatleme teda sõltuvuses koordinaadist x, impulsist p või muust füüsikalisest suurusest.

Eelpooltoodud valemid eeldavad ühe-dimensionaalset liikumist, mis on kirjeldatav ühe koordinaadi x ning impulsi p abil. Kolme-dimensionaalsel puhul asendub ühekordne integreerimine kolmekordsega (üle x, y ja z või üle p_x, p_y ja p_z), korrutis px skalaarkorrutisega $\vec{p} \cdot \vec{r}$ ning tegur $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$ teguriga $(2\pi\hbar)^{-3/2}$.

Määramatusprintsiip

Määramatusprintsiip on puhtalt matemaatiline teoreem, mis tuleneb seosest lainefunktsiooni esituste vahel koordinaatide ja impulsi ruumis (valemid 3,4). On võimalik tõestada, et kui defineerida koordinaadi ja impulsi määramatused δx ja δp ruutkeskmiste hälvetena vastavatest keskväärtustest $\bar{x}$ ja $\bar{p}$, siis kehtib võrratus

$$\delta x \cdot \delta p \geq \hbar/2. \tag{5}$$

Matemaatiliselt võib antud definitsioonid kirja panna kujul

$$\bar{x} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 x dx, \quad \bar{p} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_p|^2 p dp,$$

$$\delta x \equiv \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 (x - \bar{x})^2 dx},$$

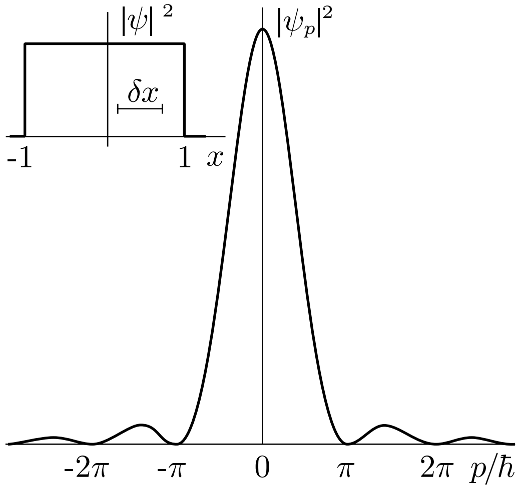
$$\delta p \equiv \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_p|^2 (p - \bar{p})^2 dp}.$$

Võrratuses (5) kehtib võrdus siis, kui lainefunktsiooniks on Gaussi kõver, $\psi(x) = \pi^{1/4}(\delta x)^{-1/2} e^{-x^2/4(\delta x)^2}$; kõigil teistel puhkudel on tegemist range võrratusega.

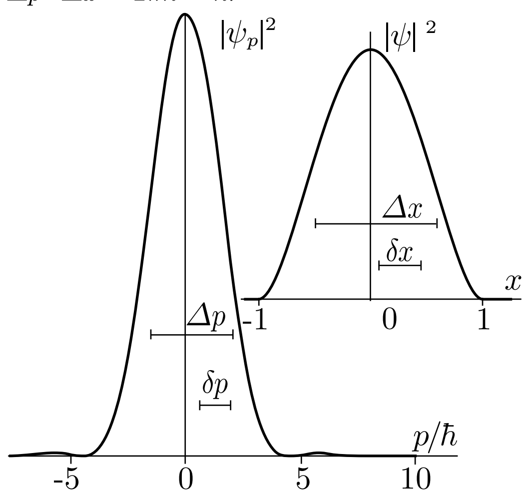
Määramatusprintsiipi kasutatakse sageli kvantmehaanilistes hinnangutes, asendades võrratusmärgi ligikaudse võrduse märgiga ning ruutkeskmised hälbed vahemike karakteersete laiustega Δx ja Δp. Millisel kujul saaks siis tõele lähedasema hinnangu, kas seose

$$\Delta x \cdot \Delta p \sim h, \tag{6}$$

$\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar$ või $\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar/2$ abil? Vastused võivad erineda kuni $4\pi \approx 13$ korda ning nii suurt viga oleks tark isegi hinnangute puhul vältida (kuigi hinnangute puhul ei saa päris valeks lugeda isegi sellist tulemust, mis erineb täpsest vastusest nt teguri $(2\pi)^3 \approx 248$ võrra, on hoolika läbimõtlemise korral võimalik harilikult saavutada see, et erinevus oleks väiksem kui kahekordne). Uurime seda küsimust lähemalt kahe konkreetse näite abil, valides kaks erinevat lainefunktsiooni, vt joonised.



Esimene joonis vastab olukorrale, kus osakese tõenäosus asuda x-teljel vahemikus $-1 \leq x \leq 1$ on võrdtõenäone, väljaspool vahemiku aga ta asuda ei saa. Täpselt selline jaotus tekib üksiku pilu läbimisel footoni, elektroni vms poolt; tõenäosuse jaotumine impulsi järgi $|\psi_p|^2$ ongi siis täpselt selline, nagu intensiivsuse jaotumine difraktsioonipildil (ekraanil). Karakteerseks difraktsioonimaksimumi laiuseks loetakse sellisel puhul harilikult suurust $\Delta p = \pi\hbar$ (see võrdub ligikaudu piigi laiusega poolkõrgusel). Tõenäosus $|\psi_p|^2$ ostsilleerub ning võnkumiste amplituud kahaneb pöördvõrdeliselt impulsi ruuduga (vt joonis); seetõttu pole ruutkeskmine hälve lõplik, $\delta p = \infty$. Koordinaadi määramatus tuleb ülaltoodud integraali abil arvutatuna $\delta x = 1/\sqrt{3}$, mis on pilu laiusest $\Delta = 2$ umbes 3,5 korda väiksem. Niisiis saame $\delta p \cdot \delta x = \infty$ ja $\Delta p \cdot \Delta x = 2\pi\hbar \equiv h$.



Teisel joonisel on toodud olukord, kus osakese tõenäosusjaotus on antud valemiga $|\psi(x)|^2 = (1 - x^2)^2$, kui $|x| \leq 1$ ning $|\psi(x)|^2 = 0$, kui $|x| \geq 1$. Sellisel juhul ei ole lainefunktsioonil $\psi(x)$ katkevusi ning seetõttu on impulsi järgi jaotumine tugevamalt lokaliseeritud, kui pilu puhul ning impulsi ruutkeskmine hälve tuleb lõplik: $\delta p \approx 1{,}34$. Integraali võtmise teel pole raske leida ka $\delta x = 1/\sqrt{7}$, st $\delta x \cdot \delta p \approx 0{,}507\hbar$ (niisiis on tulemus väga lähedane absoluutsele miinimumile $\hbar/2$). Arvutused näitavad, et piikide laiused poolkõrguse juures on $\Delta p \approx 3{,}6\hbar$ ning $\Delta x \approx 1{,}1$. Seega $\Delta x \cdot \Delta p \approx 4\hbar \approx 0{,}63h$.

Toodud näidetest võib järeldada, et hinnang (6) on asjakohane, kui määramatusteks Δp ja Δx võtta vahemiku karakteerne laius; seos (5) kehtib ruutkeskmiste hälvete jaoks (va siis, kui lokaliseerumine on nõrk ning ruutkeskmine hälve tuleb lõpmatu). Kui Δp ja Δx defineerida vahemike poollaiustena, siis oleks ilmselt hea kasutada hinnangut $\Delta x \cdot \Delta p \approx \hbar$ (teise näite puhul oleks tulemus väga täpne).

Määramatusprintsiip paari p_x ja x jaoks kehtib seetõttu, et kindla p_x väärtusega oleku lainefunktsioon on sinusoidaalne funktsioon x-st (ning iga oleku saab jagada erinevate p_x väärtustega sinusoidide superpositsiooniks). Loomulikult kehtib eelpoolöeldu ka paaride p_y ja y ning p_z ja z jaoks, aga valemit (1) silmas pidades ka paari E ja t jaoks (samuti impulsimomendi ja pöördenurga jaoks). Kõige tüüpilisemalt on see rakendatav aatomi või molekuli ergastatud oleku puhul: kui teoreetiliselt oleks statsionaarse eneriganivoo väärtus E_n, siis ebastabiilsuse, põrgete vms tõttu ei suuda aatom või molekul püsida selles olekus kauem, kui teatud karakteerse ajavahemiku τ. Selletõttu ei pruugi tema energia ergastatud olekus olla enam täpselt E_n, vaid võib paikneda selle keskväärtuse ümber vahemikus laiusega Γ, kus

$$\Gamma \cdot \tau \sim h. \tag{7}$$

Suurust Γ nimetatakse energianivoo laiuseks ja ajavahemikku τ — ergastatud oleku elueaks.

Kvaasi-klassikaline lähendus

Statsionaarsete olekute ja neile vastavate energianivoode täpseks leidmiseks tuleb üldjuhul lahendada Schroedingeri võrrand. Tõele lähedasi ning mõnikord isegi täpseid tulemusi annab aga ka nn kvaasi-klassikaline lähendus. Sellisel juhul vaadeldakse teatavas potentsiaalse energia väljas liikuvat osakest esmalt kui klassikalist osakest ning leitakse tema impulsi p sõltuvus koordinaadist x. Seejärel öeldakse, et osakese lainefunktsioon on peaaegu sama, mis muutuva lainevektoriga sinusoid: $\psi(x) \approx \exp[\frac{i}{\hbar}\int p(x)dx]$. Tegemist on ligikaudse meetodiga, range võrdus kehtib vaid vaba osakese korral (kui impulss on konstantne). Ometigi on võrdus üsna täpne, kui impulsi suhteline muutus ühe lainepikkuse jooksul on väike [st $|p(x) - p(x + \hbar/p)| \ll p(x)$]. Kujutlegem nüüd niisugust muutuva lainepikkusega lainet, mis levib kas x-telje sihis või mööda ringi-kujulist trajektoori (nt aatomituuma ümber tiirleva elektroni puhul). Kui osake liigub nii sügavas potentsiaaliaugus, et augu seinad peegeldavad ta tagasi, siis peegeldub ka laine ning hakkab perioodiliselt edsi-tagasi liikuma. Lainepilt on statsionaarne, kui täisperioodi sisse mahub täisarv lainepikkusi (siis moodustub seisulaine). Näiteks juhul, kui on tegemist püstseintega ja horisontaalse põhjaga potentsiaaliauguga pikkusega L, siis on augu sees impulss konstantne ning seisulaine tingimuseks saame $2Lp = nh$, millest $p = nh/2L$ ning n-nda energianivoo väärtuseks leiame $E_n = p^2/2m = n^2h^2/8L^2m$.

Vesinikusarnase aatomi puhul tiirleb elektron massiga m ümber tuuma tsentraalsümmetrilises potentsiaaliaugus $U = -kZe^2/r$ (kus $k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$). Ringorbiidil liikuva elektroni kineetiline energia $p^2/2m = -U/2$, seega $p^2r = kmZe^2$. Seisulaine moodustumise tingimuse paneme kirja kujul $2\pi rp = 2\pi\hbar n$ (kus n on seisulainete arv), st $rp = n\hbar$.

Viimane seos näitab, et impulsimoment rp on kvanditud; selgub, et tulemus on üldisem ega ole piiratud ringorbiidiga: impulsimoment fikseeritud telje suhtes saab olla vaid konstandi $\hbar$ täisarvkordne (erandiks on nn *Fermi-osakeste*, nt elektronide isiklik impulsimoment, nn *spinn*, mis on pooltäisarvkordne, elektroni puhul alati $\pm\hbar/2$).

Kombineerides kahte viimast valemit leiame $p = kmZe^2/n\hbar$ ning seega koguenergia

$$E_n = U/2 = -p^2/2m = -\frac{m}{2}(kZe^2/n\hbar)^2.$$

Tunnelefekt

Tunnelefekti puhul suudab osake energiaga E läbida lühikese potentsiaalse energia barjääri $U > E$ sel teel, et omandab barjääri all negatiivse kineetilise energia $p^2/2m = E - U$. Negtiivne kineetiline energia tähendab imaginaarset impulssi ja lainevektorit $k = i\sqrt{2m(U-E)}$, st lainefunktsiooniks pole mitte sinusoid, vaid kahanev eksponentfunktsioon: $\psi(x) = e^{-x\sqrt{2m(U-E)}/\hbar}$. Seega, kui barjääri laius L on suur, $L\sqrt{2m(U-E)} \gg \hbar$, siis kahaneb lainefunktsioon barjääri all eksponentsiaalselt väikseks, st osake ei pääse läbi; kui aga $L\sqrt{2m(U-E)} \sim \hbar$, siis lainefunktsioon küll kahaneb (osake peegeldub teatud tõenäosusega tagasi), kuid mitte palju, st *tunneleerumise* tõenäosus on märkimisväärne.

Kvantmehaanilised mõõtmised

Klassikalise, nn Kopenhaageni interpretatsiooni kohaselt toimub kvantmehaaniliste mõõtmiste käigus lainefunktsiooni *reduktsiooon*. Oletagem näiteks, et mõõdetakse osakese impulssi. Enne mõõtmist kujutas osakese lainefunktsioon kindla impulsiga olekute superpositsiooni, $\psi = \int \psi_p e^{ipx/\hbar}dp$; mõõtmisel saadakse aga teatud tulemus p_m, st mõõtmise käigus omandas osake kindla impulsiga oleku — olekust $\int \psi_p e^{ipx/\hbar}dp$ sai olek $\psi_{p_m} e^{ip_m x/\hbar}$. Sellist oleku muutust, kus enne mõõtmist kujutab lainefunktsioon endast mõõdetava füüsikalise suuruse *omafunktsioonide* superpositsiooni ning mõõtmise käigus kaovad superpositsioonist kõik liidetavad peale ühe — saadud mõõtmistulemusele vastava omafunktsiooni, nimetataksegi lainefunktsiooni reduktsiooniks. Meenutagem, et füüsikalise suuruse omafunktsiooniks nimetatakse sellist lainefunktsiooni, mille puhul see suurus omab teatud kindlat väärtust. Iga mõõtmistulemuse realiseerumise tõenäosus on võrdeline temale vastava omafunktsiooni amplituudiga esialgses superpositsioonis. Oluliseks järelduseks on, et iga mõõtmine muudab süsteemi olekut.

Selline interpretatsioon töötab praktikas suurepäraselt, aga teoreetilis-filosoofilises plaanis pole siiski päris rahuldav. Asi on selles, et osakese interaktsiooni makroskoopilise süsteemiga — mõõteriistaga vaadeldakse teisiti, kui osakeste eneste vahelisi interaktsioone. Viimasel puhul nimelt ei toimu mingeid reduktsioone. Vaatleme konkreetsuse mõttes kahe osakese, nt elektroni interaktsiooni. Kui ühte osakest kirjeldab lainefunktsioon, mis ruumilise esituse korral on funktsioon kolmest ruumikoordinaadist ja ajast, $\psi(\vec{r}, t)$, siis kahe interakteeruva osakese jaoks on see juba funktsioon kuuest koordinaadist: $\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$, kus $\vec{r}_1$ ja $\vec{r}_2$ on vastavalt esimese ja teise osakese kohavektorid. Juhul, kui osakesed ei interakteeru, siis taandub antud seitsme-muutuja funktsioon kahe nelja-muutuja funktsiooni korrutiseks, $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) = \psi_1(\vec{r}_1, t)\psi_2(\vec{r}_2, t)$ (samal moel, nagu kahe sõltumatu sündmuse koostoimumise tõenäosus taandub kahe tõenäosuse korrutiseks); interaktsiooni puhul pole aga selline nn muutujate eraldamine võimalik: lahendada tuleb Schroedingeri võrrand seitsme-muutuja funktsiooni jaoks. Analoogselt vaadeldakse enama kui kahe osakese interaktsiooni, n osakese puhul on tegemist $3n + 1$ muutujast sõltuva lainefunktsiooniga. Ometigi pole lainefunktsiooni reduktsioonist jälgegi. Mil viisil/kust kohast tuleb siis mängu reduktsioon? Klassikaline interpretatsioon jätab sellele küsimusele vastamata. Makroskoopilise ja mikroskoopilise maailma segasest vahekorrast tulenevad mitmed paradoksid, nt Schroedingeri kassi paradoks ja teleportatsiooni (Einstein-Podolsky-Rosen'i) paradoks.

Lainefunktsiooni reduktsiooni suudab põhjendada ning mainitud paradokse seletada kvantmehaanika alternatiivne, nn *mitme-maailma interpretatsioon*, mille praktilised järeldused on valdavas osas samad, mis klassikalise interpretatsiooni puhul. Mitme-maailma tõlgenduse täiendavaks eeliseks on see, et tõenäosuse sidumine lainefunktsiooni amplituudi ruuduga ei toimu mitte postulatiivselt, vaid matemaatilise tuletamise teel. Selle interpretatsiooni puhul postuleeritakse, et füüsikaliseks reaalsuseks on Universumi lainefunktsioon Ψ, mis on funktsioon kõigi osakeste koordinaatidest (hõlmates ka kõikide elusolendite koostisosakesi); see areneb kogu aeg vastavalt Schroedingeri võrrandile ning tegelikult ei toimu tema ühegi osa reduktsiooni. Seega hõlmab Universumi lainefunktsioon iga mõõtmise kõikvõimalikke mõõtmistulemusi. Vaatleme lihtsuse mõttes süsteemi mõõtja+osake lainefunktsiooni ning eeldame, et mõõtmisel võib olla vaid kaks erinevat tulemust '1' ja '2'. Enne ja pärast mõõtmist puudub osakese ja mõõtja vaheline interaktsioon, sestap saab muutujaid eraldada ning süsteemi algolek esitub korrutisena $|M_0\rangle\,|O_0\rangle$, kus $|M_0\rangle$ on mõõtja algoloek ja osakese algolek on kahe oleku superpositsioon, $|O_0\rangle = \alpha\,|O_1\rangle + \beta\,|O_2\rangle$; siinjuures $|O_1\rangle$ ja $|O_2\rangle$ on osakese olekud, kus mõõdetav suurus omab kindlat väärtust. Peale mõõtmist esitub süsteemi lainefunktsioon kujul $\alpha\,|M_1\rangle\,|O_1\rangle + \beta\,|M_2\rangle\,|O_2\rangle$, kus $|M_j\rangle$ on mõõtja, kes teab mõõtmistulemuse olevat 'j'. Et ühel konkreetsel mõõtjal saab olla asjast siiski vaid üks arvamus, siis võib öelda, et toimus maailmade lahknemine: ühes maailmas on mõõtja $|M_1\rangle$, teises aga $|M_2\rangle$. Kummas maailmas mõõtja konkreetne "mina" avastab enda olevat, on täiesti juhuslik sündmus; mõlemas maailmas näib, nagu toimunuks osakese lainefunktsiooni reduktsioon (nt $|M_1\rangle$ näeb osakest olevat puhtas olekus $|O_1\rangle$). Lahknemise protsessist aitab ehk aimu saada mõtteline eksperiment, kus Jukust tehakse narkoosi all kloon reprodutseerides tema aju hetkeolek; Jukule lüüakse peale tempel "A", kloonile aga "B". Kui klooni mina hakkab mõtlema, et miks mina olen "B" ja kas ma võinuks olla "A", siis vastus on, et "mina" seisukohast oli sündmus juhuslik, originaal mõistatab parasjagu, miks tema on "A".

Maailmade lahknemine ei toimu mitte ainult mõõtmiste puhul, vaid iga kord, kui toimub energia dissipeerumine (pöördumatu protsess); pöördumatuse tõttu ei saa kord lahknenud maailmad enam ühineda. Võib öelda, et kõik kvantmehaanilised võimalused realiseeruvad kusagil teises maailmas, aga meie siin oleme tunnistajaks vaid ühele realisatsioonile (nt võib olla olemas maailm, kus dinosaurused ei surnudki välja).