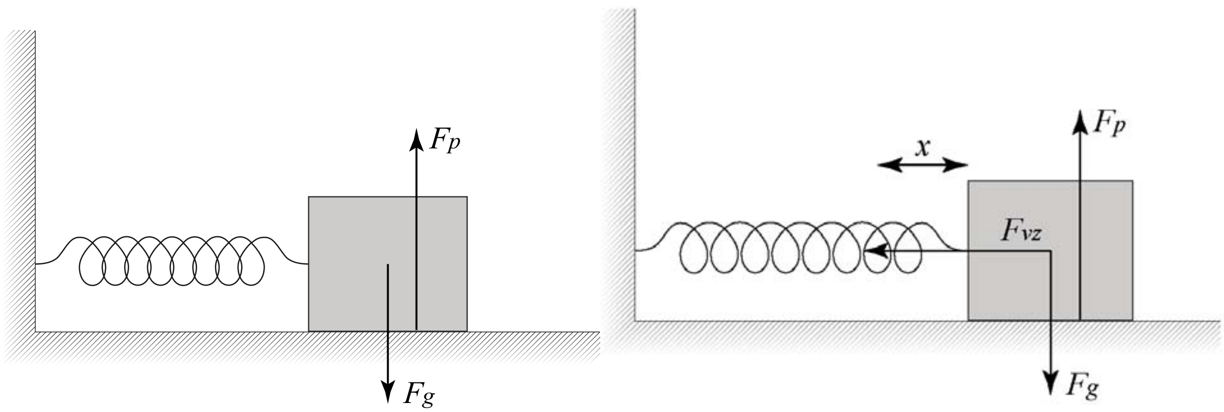
Kvantno nihalo - kvantni harmonski oscilator

Imejmo sedaj delec z maso m pritrjen na vzmet s konstanto k, ki je pritrjena na steno. Delec lahko prosto drsi po podlagi. Ko vzmet ni napeta, deluje na telo je sila teže in sila podlage v navpični smeri. Ti dve sili sta v ravnotežju, saj delec miruje. Ko pa delec izmaknemo, deluje nanj poleg omenjenih dveh sil še sila vzmeti v nasprotni smeri odmika iz mirovne lege. V tej izmaknjeni legi velja v navpični smeri zakon o ravnovesju sil in v vodoravni smeri drugi Newtonov zakon, ki pravi, da je rezultanta sil v tej smeri enaka produktu mase in komponente pospeška v tej smeri. To lahko zapišemo z enačbama kot

x: $-F_v = ma$

y: $F_p - F_g = 0$



Slika 1: Sile pri vzmetnem nihalu v mirovni in izmaknjeni legi.

Sedaj upoštevamo, da za silo vzmeti velja Hookov zakon, $F_v = kx$, ki pravi, da je sila vzmeti enaka produktu konstante vzmeti in raztezka, ter da je pospešek enak drugemu odvodu koordinate po času, $a = \frac{d^2x}{dt^2}$. Za gibanje v x smeri dobimo naslednje

$$-kx = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

Enačbo sedaj delimo z maso delca in uvedemo novo spremenljivko $\omega^2 = \frac{k}{m}$ in imamo

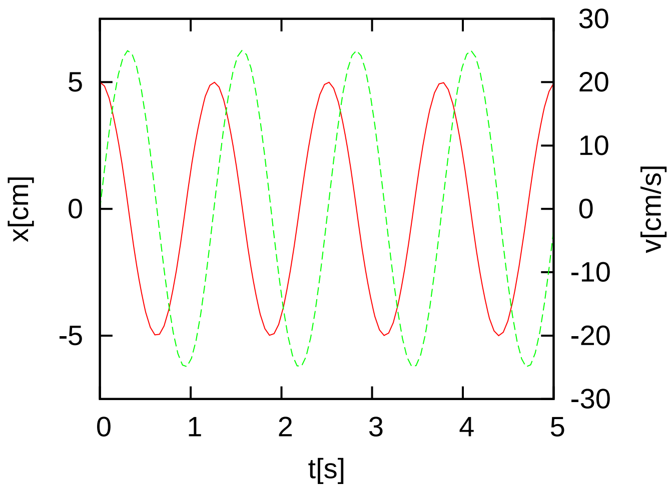
$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0$$

Tudi diferencialna drugega reda s konstantnimi koeficienti ima dve rešitvi, ki ju zapišemo kot

$$\mathrm{x(t)} = \mathrm{Asin}(\omega t) + \mathrm{Bcos}(\omega t)$$

Konstanti A in B določimo iz začetne hitrosti in začetnega odmika ($\mathrm{x}(0)$ in $\frac{\mathrm{dx}}{dt}(0)$). V primeru, ko delec izmaknemo za s_0 iz mirovne lege, je hitrost 0 in začetni odmik s_0 ($\mathrm{x}(0) = s_0$ in $\frac{\mathrm{dx}}{dt}(0) = 0$). Imamo

$$x(t) = s_0 \cos(\omega t)$$



Slika 2: Časovna odvisnost hitrosti (zelena črta) in položaja (rdeča črta) klasičnega harmonskega oscilatorja. Krožna frekvenca je 5/s in začetni odmik 5 cm.

Gibalna količina je enaka produktu mase in hitrosti. Položaj delca in njegovo gibalno količino v vsakem trenutku natančno poznamo. Spreminjanje hitrosti in položaja klasičnega delca je narisano na sliki 2. Odmik delca in s tem hkrati tudi energija delca lahko zavzameta poljubno vrednost. Odmik seveda ne sme biti prevelik, ker lahko preneha veljati Hookov zakon. Verjetnost $d\tau$, da najdemo delec na mestu x, je sorazmerna s časom, ki da delec preživi na omenjenem mestu. Ta čas, dt, pa izračunamo kot dolžino tega majhnega mesta deljeno s trenutno hitrostjo.

$$d\tau = Cdt = C\frac{dx}{v}$$

Sedaj moramo izraziti še trenutno hitrost s trenutnim odmikom. To naredimo s pomočjo energij. Ko je nihalo v skrajni legi ima le prožnostno energijo, ki je enaka

$$W_{pr0} = \frac{1}{2}kx_0^2$$

x_0 je tu največji odmik nihala. Pri nekem odmiku x pa je skupna energija enaka vsoti trenutne kinetične in prožnostne energije

$$W = W_k + W_{pr} = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2$$

Ker se pri gibanju energija ohranja, morata biti ta vsota in največja prožnostna energija enaki

$$\frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}kx_0^2$$

Iz te enačbe izrazimo kvadrat hitrost kot

$$v^2 = \frac{k}{m}x_0^2 - \frac{k}{m}x^2 = \frac{k}{m}(x_0^2 - x^2) = \omega^2(x_0^2 - x^2)$$

ter hitrost kot

$$v = \omega\sqrt{(x_0^2 - x^2)}$$

Za verjetnost $\mathrm{d}\tau$ dobimo tako

$$\mathrm{d}\tau = \mathrm{C}\frac{dx}{\omega\sqrt{(x_0^2 - x^2)}}$$

Konstanto C določimo tako, da je integral verjetnosti po vsem prostoru, kjer se lahko giba delec (od $-x_0$ do x_0), enak 1.

$$1 = \int \mathrm{d}\tau = \int_{-x_0}^{x_0} \mathrm{C}\frac{dx}{\omega\sqrt{(x_0^2 - x^2)}} = \frac{\mathrm{C}}{\omega}\arcsin\left(\frac{x}{x_0}\right)\Big|_{-x_0}^{x_0} = \frac{\mathrm{C}}{\omega}\left(\frac{\pi}{2} - \left(-\frac{\pi}{2}\right)\right) = \frac{\mathrm{C}\pi}{\omega}$$

Upoštevali smo, da je nedoločeni integral enak

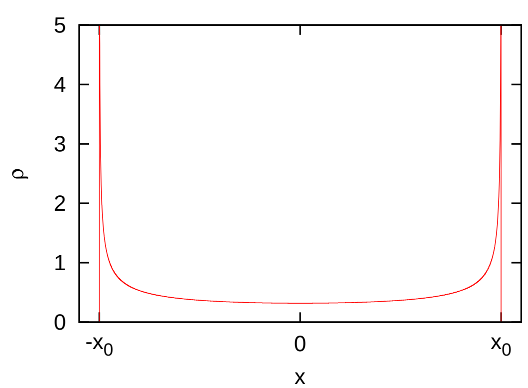
$$\int \frac{dx}{\sqrt{(b^2 - x^2)}} = \arcsin\left(\frac{x}{b}\right)$$

Za konstanto C tako dobimo, da je enaka

$$C = \frac{\omega}{\pi}$$

in verjetnostna gostota nahajanja delca

$$\rho = \frac{\mathrm{d}\tau}{dx} = \frac{1}{\pi\sqrt{(x_0^2 - x^2)}}$$



Slika 3: Verjetnostna gostota nahajanja delca v odvisnosti od položaja za klasični harmonski oscilator.

V tem primeru za opis kvantnega harmonskega oscilatorja potrebujemo najprej potencial, v katerem se giblje delec. To dobimo tako, da upoštevamo, da je sila negativni odvod potenciala po koordinati

$$-kx = -\frac{dV}{dx}$$

To potem integriramo in dobimo za potencial

$$V(x) = \tfrac{1}{2}kx^2$$

Sedaj, ko poznamo potencial, lahko dobimo opis stanja kvantnega nihala oziroma gibanje delca v paraboličnem potencialu z rešitvijo gibalne enačbe za kvantne delce, to je Schrödingerjeve enačbe, ki ima v časovni verziji obliko

$$\widehat{\mathrm{H}}\Psi(\mathrm{x},\mathrm{t}) = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi(\mathrm{x},\mathrm{t})}{\partial\mathrm{t}}$$

Najprej seveda rešimo stacionarno Schrödingerjevo enačbo

$$\widehat{\mathrm{H}}\psi(\mathrm{x}) = \mathrm{E}\psi(\mathrm{x})$$

da dobimo lastne funkcije in lastne vrednosti Hamiltonovega operatorja $\widehat{\mathrm{H}}$, ki ima za enodimenzionalno gibanje v paraboličnem potencialu naslednjo obliko

$$\widehat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{dx}^2} + \frac{1}{2}kx^2$$

Ko gre x proti neskončno in minus neskončno, postaja potencial neskončno velik. Na tem delu mora biti valovna funkcija zaradi razlogov, opisanih pri neskončni potencialni jami, enaka 0. Tako dobimo robna pogoja

$$\psi(\mathrm{x} \to -\infty) = \psi(\mathrm{x} \to \infty) = 0$$

Rešiti pa moramo diferencialno enačbo oblike

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{dx}^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi = \mathrm{E}\psi$$

Enačbo pomnožimo z $(-2m)$, delimo s $\hbar^2$ in dobimo

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{dx}^2} - \frac{\mathrm{m}k}{\hbar^2}x^2\psi + \frac{2\mathrm{mE}}{\hbar^2}\psi = 0$$

Sedaj uvedemo novi spremenljivki

$$\mathrm{y}^2 = \sqrt{\frac{\mathrm{m}k}{\hbar^2}}x^2$$

$$\frac{\mathrm{E}}{\hbar\omega} = e$$

in dobimo

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{dy}^2} - y^2\psi + 2\mathrm{e}\psi = 0$$

Uporabimo nastavek, ki ustreza robnim pogojem

$$\psi = \phi e^{-\alpha y^2}$$

kjer je α trenutno poljuben parameter. To sedaj vstavimo v diferencialno enačbo in imamo

$$e^{-\alpha y^2}\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{dy}^2} - 4\alpha y e^{-\alpha y^2}\frac{d\phi}{dy} - 2\alpha\phi e^{-\alpha y^2} + 4\alpha y^2\phi e^{-\alpha y^2} - y^2\phi e^{-\alpha y^2} + 2\mathrm{e}\phi e^{-\alpha y^2} = 0$$

Ko enačbo okrajšamo, dobimo

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{dy}^2} - 4\alpha y\frac{d\phi}{dy} + (2e + 4\alpha y^2 - 2\alpha - y^2)\phi = 0$$

Parameter α izberemo tako, da se znebimo y v zadnjem oklepaju. α ima vrednost $\frac{1}{2}$. Naša enačba se sedaj poenostavi na

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{dy}^2} - 2y\frac{d\phi}{dy} + (2e - 1)\phi = 0$$

Rešitev poiščemo s pomočjo vrst in sicer v obliki

$$\phi = \sum_{n=0}^{\infty} c_n y^n, \frac{\mathrm{d}\phi}{dy} = \sum_{n=1}^{\infty} n c_n y^{n-1}, \frac{\mathrm{d}^2\phi}{dy^2} = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)c_n y^{n-2}$$

S primerjavo koeficientov ob istih potencah dobimo naslednjo rekurzivno formulo

$$c_{n+2} = c_n\frac{2n + 1 - 2e}{(n+1)(n+2)}$$

in dve splošni rešitvi oblike

$$\phi_1 = c_0\left(1 + \frac{1-2e}{2!}y^2 + \frac{(1-2e)(5-2e)}{4!}y^4 + \frac{(1-2e)(5-2e)(9-2e)}{6!}y^6 + \cdots\right)$$

$$\phi_2 = c_1\left(y + \frac{3-2e}{3!}y^2 + \frac{(3-2e)(7-2e)}{5!}y^5 + \frac{(3-2e)(7-2e)(11-2e)}{7!}y^7 + \cdots\right)$$

Omenjeni funkciji naraščata hitreje kot $e^{-\frac{1}{2}y^2}$ pada, tako da je $\psi(\mathrm{x} \to -\infty) = \psi(\mathrm{x} \to \infty) \to 0$ lahko izpolnjeno le v primeru, če sta ϕ_1 in ϕ_2 končna polinoma. To je izpolnjeno v primeru, ko je števec v rekurzivni formuli enak 0.

$$2n + 1 - 2e = 0$$

Se pravi, ko je parameter e enak

$$e = n + \frac{1}{2}$$

n je element množice $n \in \{0,1,2,3 \dots\}$. V tem primeru imamo diferencialno enačbo

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi}{\mathrm{dy}^2} - 2y\frac{d\phi}{dy} + 2n\phi = 0$$

Rešitve so Hermitovi polinomi $H_n(\mathrm{y})$, za katere veljajo naslednje zveze

$$H_0(\mathrm{y}) = 1$$

$$H_1(\mathrm{y}) = 2y$$

$$H_2(\mathrm{y}) = 4y^2 - 2$$

$$H_{n+1}(\mathrm{y}) = 2yH_n(\mathrm{y}) - 2nH_{n-1}(\mathrm{y})$$

Valovna funkcija delca v paraboličnem potencialu je odvisna od kvantnega števila n in ima obliko

$$\psi_n(\mathrm{y}) = A_n H_n(\mathrm{y}) e^{-\frac{y^2}{2}}$$

A_n je normalizacijska konstanta, ki jo določimo tako, da je

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi_n(\mathrm{y})\right)^2 dx = 1$$

Velja še

$$\mathrm{y} = \sqrt[4]{\frac{\mathrm{m}k}{\hbar^2}}\,x = \sqrt[4]{\frac{\mathrm{mm}\omega^2}{\hbar^2}}\,x = \sqrt[2]{\frac{\mathrm{m}\omega}{\hbar}}\,x$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\psi_n(\mathrm{y}))^2 \sqrt[2]{\frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega}}\,dy = \sqrt[2]{\frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} A_n^2 H_n^2(\mathrm{y}) e^{-y^2} dy$$

Sedaj upoštevamo zvezo

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\mathrm{y}) H_m(\mathrm{y}) e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi} 2^n n!\, \delta_{nm}$$

In dobimo

$$\sqrt[2]{\frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega}}\int_{-\infty}^{\infty} A_n^2 H_n^2(\mathrm{y}) e^{-y^2} dy = A_n^2 \sqrt[2]{\frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega}}\sqrt{\pi} 2^n n!$$

Normalizacijska konstanta je tako enaka

$$\mathrm{A}_n = \sqrt{\frac{1}{\sqrt[2]{\frac{\pi\hbar}{\mathrm{m}\omega}} 2^n n!}} = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \sqrt[4]{\frac{\mathrm{m}\omega}{\pi\hbar}}$$

Energija n-tega stanja pa je

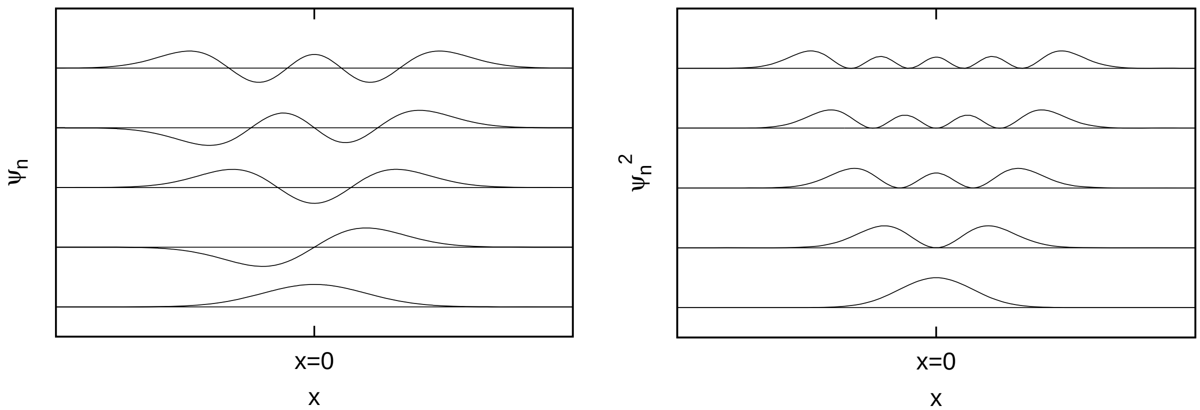
$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Vidimo, da z rešitvijo stacionarne Schrödingerjeve enačbe dobimo lastne vrednosti energije sistema $\mathrm{E_n}$ in lastne funkcije $\psi_\mathrm{n}(\mathrm{x})$ (glej tabelo 1). Energija lahko zavzame samo nekatere vrednosti za razliko od klasičnega sistema, kjer ima delec lahko katerokoli pozitivno energijo. Vsaki lastni funkciji ustreza verjetnostna gostota $\rho_\mathrm{n} = |\psi_\mathrm{n}|^2$ (glej sliko 4). Tudi tu lahko opazimo, da imajo stanja z višjimi kvantnimi števili verjetnostno gostoto podobne oblike kot jo ima klasični oscilator (Bohrov princip korespondence). Lastno stanje z najnižjo energijo (n=0) imenujemo osnovno stanje in lastna stanja z večjo energijo vzbujena stanja (n=1, prvo vzbujeno stanje, n=2, drugo vzbujeno stanje itd). Vidimo, da stanje sistema določa kvantno število n. Energije sistema lahko prikažemo na energijskem diagramu oziroma energijskem spektru, kjer na os y nanesemo celotno energijo in lastne vrednosti energije označimo z vodoravnimi črtami (glej sliko 5). Za kvantni harmonski oscilator je spekter diskreten. Zanimivo je, da so sosednja stanja v enakih energijskih razmikih po $\hbar\omega$. Rečemo, da so energijski nivoji ekvidistantni. Iz odvisnosti gostote in valovne funkcije ugotovimo, da ima stanje s kvantnim številom n n ničel. Osnovno stanje je sodo stanje, saj je valovna funkcija soda funkcija ($f(-x) = f(x)$), naslednje stanje je liho, saj je valovna funkcija liha ($f(-x) = -f(x)$), potem spet sodo itd.

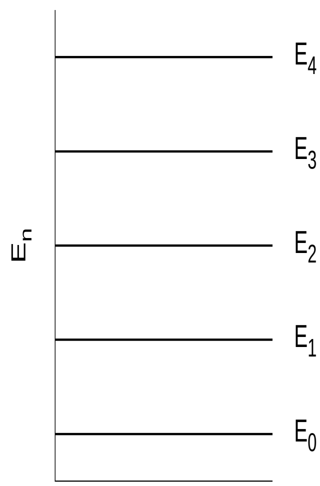
Tabela 1: Prvih 5 energij in valovnih funkcij. $y = \sqrt[2]{\frac{\mathrm{m}\omega}{\hbar}} x$

n	E_n	$\psi_n(\mathrm{y})$
0	$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$	$\sqrt[4]{\frac{\mathrm{m}\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{y^2}{2}}$
1	$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$	$\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt[4]{\frac{\mathrm{m}\omega}{\pi\hbar}} 2y e^{-\frac{y^2}{2}}$
2	$E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$	$\frac{1}{\sqrt{8}}\sqrt[4]{\frac{\mathrm{m}\omega}{\pi\hbar}} (4y^2 - 2) e^{-\frac{y^2}{2}}$
3	$E_3 = \frac{7}{2}\hbar\omega$	$\frac{1}{\sqrt{48}}\sqrt[4]{\frac{\mathrm{m}\omega}{\pi\hbar}} (8y^3 - 12y) e^{-\frac{y^2}{2}}$

4	$E_4 = \frac{9}{2}\hbar\omega$	$\frac{1}{\sqrt{384}}\sqrt[4]{\frac{\mathrm{m}\omega}{\pi\hbar}}(16y^4 - 48y^2 + 12)e^{-\frac{y^2}{2}}$



Slika 4: Krajevna odvisnost valovne funkcije in verjetnostne gostote za prvih pet lastnih funkcij.



Slika 5: Energijski spekter za kvantni harmonski oscilator. Spodnja črta je energija 0.

Osnovno stanje delca ima energijo večjo od nič. Se pravi, da se energija sistema ne nahaja v minimumu potenciala, temveč je za $\frac{1}{2}\hbar\omega$ višja. To imenujemo ničelna energija. Ta ugotovitev pomeni, da kvantni harmonski oscilator ne more mirovati. Če bi miroval, bi hkrati poznali njegov položaj in njegovo gibalno količino, to pa je v nasprotju s Heisenbergovim principom nedoločljivosti. Nihanja se tako nikoli ne ustavijo, tudi če sistem ohladimo na absolutno ničlo. V osnovnem stanju je verjetnostna gostota največja v okolici mirovne lege, kar pričakujemo takrat, ko ima delec malo energije. Pri vzbujenih stanji pa je gostota največja v skrajnih legah, kjer nihalo preživi največ časa, ker ima tu najmanjšo hitrost.

Poglejmo sedaj, kakšna je pričakovana vrednost koordinate delca.

$$\langle\hat{x}\rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n{}^* \hat{x} \psi_n \mathrm{dx} = \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_n{}^2 \mathrm{dx} = \int_{-\infty}^{\infty} A_n H_n(\mathrm{y}) e^{-\frac{y^2}{2}} x A_n H_n(\mathrm{y}) e^{-\frac{y^2}{2}} \mathrm{dx}$$

$$= A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\mathrm{y}) \sqrt[2]{\frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega}} y H_n(\mathrm{y}) e^{-y^2} \sqrt[2]{\frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega}} dy = A_n^2 \frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\mathrm{y}) y H_n(\mathrm{y}) e^{-y^2} dy$$

Sedaj upoštevamo naslednjo zvezo med Hermitovimi polinomi

$$y H_n(\mathrm{y}) = n H_{n-1}(\mathrm{y}) + \tfrac{1}{2} H_{n+1}(\mathrm{y})$$

in dobimo

$$\langle\hat{x}\rangle_n = A_n^2 \frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\mathrm{y}) (n H_{n-1}(\mathrm{y}) + \tfrac{1}{2} H_{n+1}(\mathrm{y})) e^{-y^2} dy = 0$$

Ta integral je enak 0, ker so Hermitovi polinomi med seboj ortogonalni. Da je pričakovana verjetnost koordinate enaka 0, bi lahko ugotovili tudi zaradi simetrije. Še en način, kako lahko ugotovimo, da je ta integral enak 0, je s pomočjo sodih in lihih funkcij. Kvadrat valovne funkcije je soda funkcija, x pa liha, njun produkt pa prav tako liha. Integral lihe funkcije po vsej realni osi pa je enak 0. Izračunajmo še pričakovano verjetnost gibalne količine delca

$$\langle\widehat{p_x}\rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n{}^* \widehat{p_x} \psi_n \mathrm{dx} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n{}^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi_n \mathrm{dx} = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n{}^* \left(\frac{\partial \psi_n}{\partial x}\right) \mathrm{dx} = 0$$

Ta integral je enak 0 iz istega razloga, kot smo videli pri delcu v neskončni potencialni jami. V naslednjem koraku si poglejmo še kvadrat koordinate

$$\langle\hat{x}^2\rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n{}^* \hat{x}^2 \psi_n \mathrm{dx} = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \psi_n{}^2 \mathrm{dx} = \int_{-\infty}^{\infty} A_n H_n(\mathrm{y}) e^{-\frac{y^2}{2}} x^2 A_n H_n(\mathrm{y}) e^{-\frac{y^2}{2}} \mathrm{dx}$$

$$= A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\mathrm{y}) \frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega} y^2 H_n(\mathrm{y}) e^{-y^2} \sqrt[2]{\frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega}} dy = A_n^2 \frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega} \sqrt[2]{\frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\mathrm{y}) y^2 H_n(\mathrm{y}) e^{-y^2} dy$$

Tu upoštevamo naslednjo zvezo med Hermitovimi polinomi

$$y^2 H_n(\mathrm{y}) = n(n-1) H_{n-2}(\mathrm{y}) + (n + \tfrac{1}{2}) H_n(\mathrm{y}) + \tfrac{1}{4} H_{n+2}(\mathrm{y})$$

in imamo

$$\langle\hat{x}^2\rangle_n = A_n^2 \frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega} \sqrt[2]{\frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\mathrm{y}) (n(n-1) H_{n-2}(\mathrm{y}) + (n + \tfrac{1}{2}) H_n(\mathrm{y}) + \tfrac{1}{4} H_{n+2}(\mathrm{y})) e^{-y^2} dy$$

Od nič različen je le del, ko imamo isti Hermitov polinom

$$\langle \hat{x}^2 \rangle_n = A_n^2 \frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega} \sqrt[2]{\frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\mathrm{y})(n+\tfrac{1}{2}) H_n(\mathrm{y}) e^{-y^2} dy = (n+\tfrac{1}{2}) \frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega}$$

Sedaj izračunamo nedoločenost položaja

$$\Delta x_n = \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle_n - \langle \hat{x} \rangle_n^2} = \sqrt{(n+\tfrac{1}{2}) \frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega}}$$

Ta nedoločenost koordinate postane 0, če bi bila Planckova konstanta proti nič, se pravi da nebi imeli kvantnih efektov, oziroma če imamo veliko maso, se pravi, ko imamo telesa iz klasične mehanike. Da bi izračunali produkt nedoločenosti, moramo najprej dobiti nedoločenost gibalne količine, se prej pa pričakovano vrednost kvadrata gibalne količine. To lahko izračunamo po definiciji

$$\langle \widehat{p_x}^2 \rangle_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n{}^* \widehat{p_x}^2 \psi_n \mathrm{dx}$$

ali pa tako, da izrazimo operator kvadrata gibalne količine iz Hamiltonovega operatorja

$$\widehat{p_x}^2 = 2m\hat{H} - mk\hat{x}^2$$

Pričakovano vrednost kvadrata lahko izračunamo

$$\langle \widehat{p_x}^2 \rangle_n = 2m\langle \hat{H} \rangle_n - mk\langle \hat{x}^2 \rangle_n = 2m\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) - mk\left(n+\tfrac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega} = m\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

Sedaj izračunamo nedoločenost položaja

$$\Delta p_{x_n} = \sqrt{\langle \widehat{p_x}^2 \rangle_n - \langle \widehat{p_x} \rangle_n^2} = \sqrt{m\hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right)}$$

Za produkt nedoločenosti dobimo

$$\Delta x_n \Delta p_{x_n} = \sqrt{m\hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right)(n+\tfrac{1}{2})\frac{\hbar}{\mathrm{m}\omega}} = \hbar\left(n+\tfrac{1}{2}\right) \geq \tfrac{1}{2}\hbar$$

Najmanjšo vrednost imamo, ko je harmonski oscilator v osnovnem stanju, takrat je ta produkt enak

$$\Delta x_0 \Delta p_{x_0} = \tfrac{1}{2}\hbar$$

To je hkrati najmanjša vrednost, ki jo lahko ima produkt nedoločenosti v kvantni mehaniki.

Kvantni harmonski oscilator je eden izmed najpomembnejših problemov kvantne mehanike. Kot smo videli je analitično rešljiv. Z njegovo pomočjo lahko pojasnimo nihanje dvoatomne molekule. Vsako potencialno funkcijo $V(x)$ lahko vedno razvijemo v Taylorjevo vrsto okoli točke (x_0), kjer ima minimum kot

$$V(x) = V(x_0) + (x-x_0)\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{x=x_0} + \frac{1}{2}(x-x_0)^2 \left.\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right|_{x=x_0} + \frac{1}{6}(x-x_0)^3 \left.\frac{\partial^3 V}{\partial x^3}\right|_{x=x_0} + \cdots$$

$V(x_0)$ je neka konstanta, ki pa jo vedno lahko postavimo na 0, ker je potencial nedoločen do konstante. Prvi odvod v minimumu je enak 0, tako da je tudi drugi člen v razvoju enak 0 in imamo šele kvadratni člen kot prvi od nič različen člen. Če sedaj predpostavimo, da so odmiki majhni, lahko višje člene zanemarimo in dobimo za potencialno funkcijo kar samo

$$V(x) = \frac{1}{2}(x - x_0)^2 \left.\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right|_{x=x_0}$$

$\left.\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right|_{x=x_0}$ je konstanta, ki jo lahko označimo s k, uvedemo še novo spremenljivko $z = x - x_0$ in dobimo znan potencial parabolične oblike, ki smo jo uporabili pri harmonskem oscilatorju

$$V(z) = \frac{1}{2}kz^2$$

Uporabnost rešitev za harmonski oscilator pa se ne konča z dvoatomnimi molekulami, z njim lahko pojasnimo tudi vibracije večatomnih molekul, gibanje molekul v kristalih, razložimo toplotno kapaciteto snovi. Pri realnih sistemi so nivoji ekvidistantni samo pri nizkih energijah. Pri višjih energijah pa odstopanje od paraboličnega potenciala oziroma anharmoničnost narašča in nivoji niso več ekvidistantni. Pri višjih energijah se presledki med nivoji zmanjšajo.