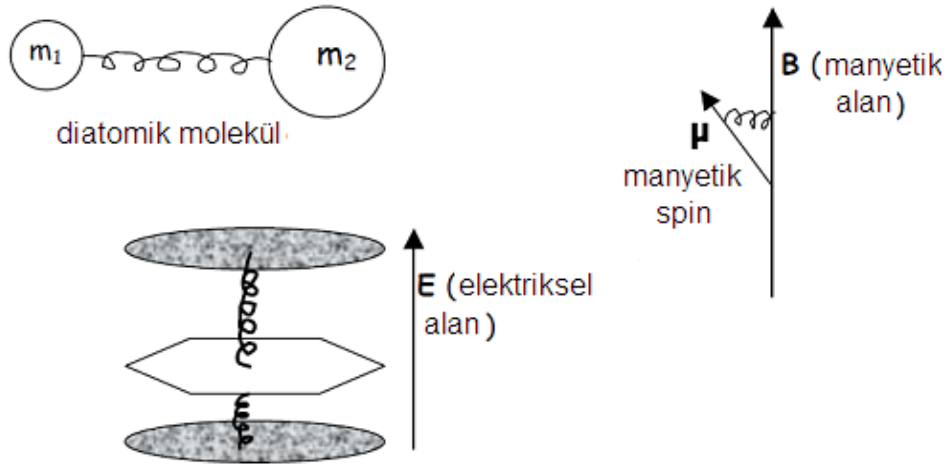


BÖLÜM 12 - 15

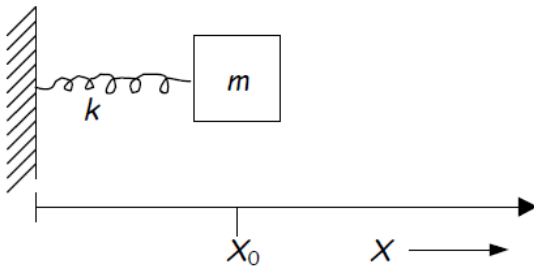
HARMONİK OSİLATÖR

- Hemen hemen her sistem, dengeye yaklaşırken bir harmonik osilatör gibi davranabilir.
- Kuantum mekaniğinde sadece sayılı bir kaç problem kesin olarak çözülebilmektedir.

Örnekler



Klasik Harmonik Osilatör



Hooke Kanunu: $f = -k(X - X_0) \equiv -kx$
(dengeleme kuvveti)

$$f = ma = m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2 x}{dt^2} + \left(\frac{k}{m} \right) x = 0$$

Diferansiyel denklem çözümü: Genel çözüm, sin ve kosinüs fonksiyonlarıdır.

$$x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t) \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

veya

$$x(t) = C \sin(\omega t + \phi) \quad \text{şeklinde de yazılabilir.}$$

Burada; A ve B veya C ve ϕ , başlangıç koşullarından tayin edilir.

Örneğin; $x(0) = x_0 \quad v(0) = 0$

Yay, x_0 konumuna gerdirilir ve $t = 0$ anında serbest bırakılır.

Sonra

$$x(0) = A \sin(0) + B \cos(0) = x_0 \quad \Rightarrow \quad B = x_0$$

$$v(0) = \left. \frac{dx}{dt} \right|_{t=0} = \omega \cos(0) - \omega \sin(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad A = 0$$

sonuç olarak

$$\boxed{x(t) = x_0 \cos(\omega t)}$$

Kütle ve yay, $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ frekansı ile ve $\cos(\omega t) = \pm 1$ olduğunda dengeden azamî x_0

mesafesinde salınır.

Harmonik Osilatör Enerjisi

Kinetik enerji $\equiv K$

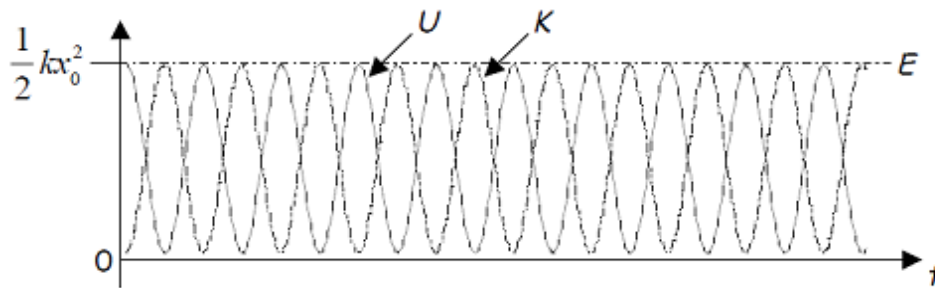
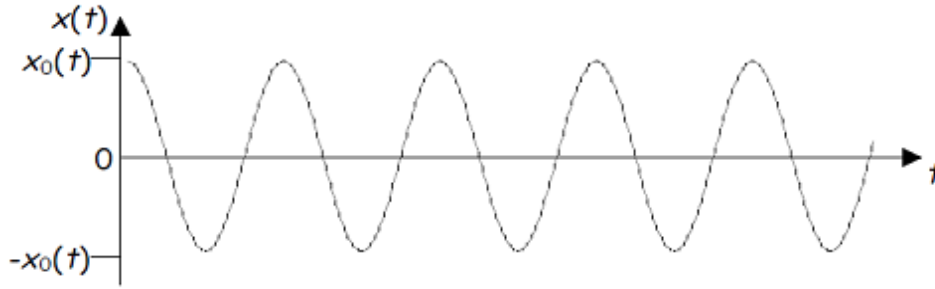
$$K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 = \frac{1}{2}m\left[-\omega x_0 \sin(\omega t)\right]^2 = \frac{1}{2}kx_0^2 \sin^2(\omega t)$$

Potansiyel enerji $\equiv U$

$$f(x) = -\frac{dU}{dx} \Rightarrow U = -\int f(x)dx = \int (kx)dx = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}kx_0^2 \cos^2(\omega t)$$

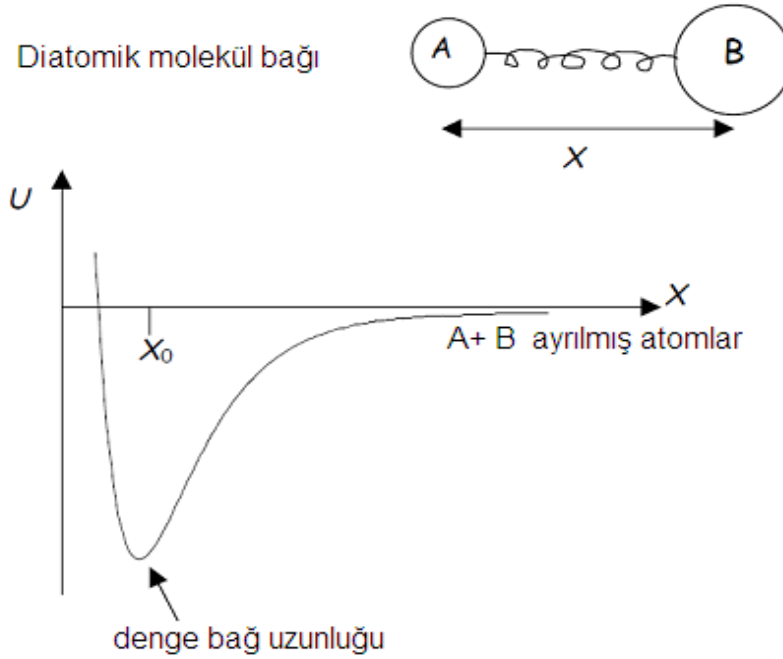
Toplam enerji $= K + U = E$

$$E = \frac{1}{2}kx_0^2 [\sin^2(\omega t) + \cos^2(\omega t)] \quad \boxed{E = \frac{1}{2}kx_0^2}$$



Gerçek sistemlerin çoğu dengeye yaklaşırken bir harmonik osilatör gibi davranabilir.

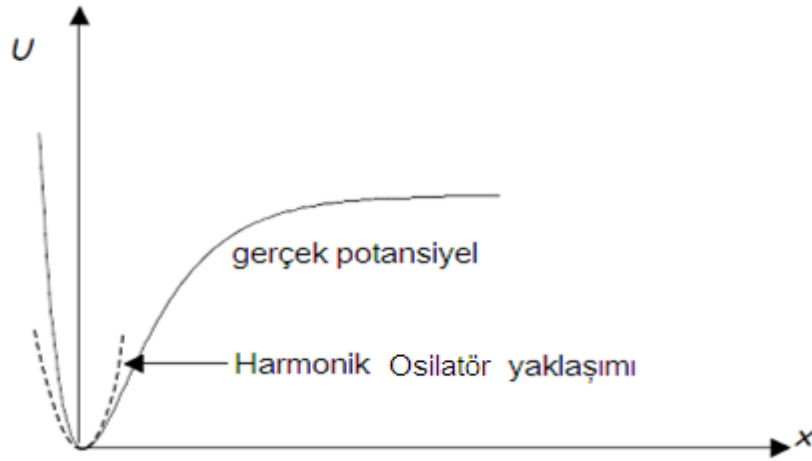
Örneğin;



$$U(X) = U(X_0) + \left. \frac{dU}{dX} \right|_{X=X_0} (X - X_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{dX^2} \right|_{X=X_0} (X - X_0)^2 + \frac{1}{3!} \left. \frac{d^3U}{dX^3} \right|_{X=X_0} (X - X_0)^3 + \dots$$

$x = X - X_0$ ve $U(X = X_0) = U(x = 0) = 0$ yeniden tanımlanır.

$$U(x) = \left. \frac{dU}{dx} \right|_{x=0} x + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{dx^2} \right|_{x=0} x^2 + \frac{1}{3!} \left. \frac{d^3U}{dx^3} \right|_{x=0} x^3 + \dots$$

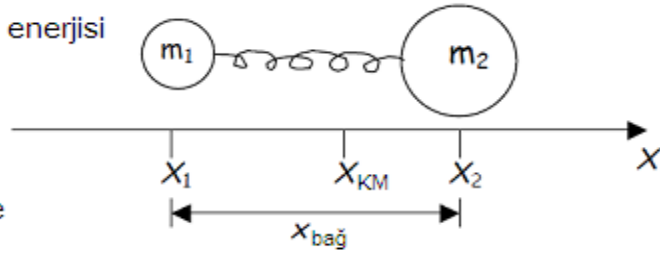


Dengede $\left. \frac{dU}{dx} \right|_{x=0} = 0$

Bağıntıdan küçük sapmalar için $x^3 \ll x^2$

$$\therefore U(x) \approx \frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{dx^2} \right|_{x=0} x^2 \equiv \frac{1}{2} kx^2$$

Molekülün tek boyutlu toplam enerjisi



$M = m_1 + m_2$ toplam kütle

$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ indirgenmiş kütle

$X_{COM} = \frac{m_1 X_1 + m_2 X_2}{m_1 + m_2}$ Kütle merkezi (KM) konumu

$x_{bağ} = X_2 - X_1 \equiv x$ bağıl konum

$$K = \frac{1}{2} m_1 \left(\frac{dX_1}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} m_2 \left(\frac{dX_2}{dt} \right)^2 = \frac{1}{2} M \left(\frac{dX_{KM}}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} \mu \left(\frac{dx}{dt} \right)^2$$

$$U = \frac{1}{2} kx^2$$

$$E = K + U = \frac{1}{2} M \left(\frac{dX_{KM}}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} \mu \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} kx^2$$

KM koordinatı, molekülün ötelenme hareketini tanımlar.

$$E_{\text{öte}} = \frac{1}{2} M \left(\frac{dX_{KM}}{dt} \right)^2$$

Kuantum Mekaniği tanımı, M kütleli serbest parçacık veya kutudaki parçacık için geçerli olurdu.

Şimdi de bağıl harekete (titreşimi tanımlar) bakalım.

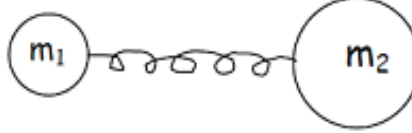
$$E_{\text{tit}} = \frac{1}{2} \mu \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} kx^2$$

ve bu problemi kuantum mekaniğe göre çözelim.

KUANTUM MEKANİKSEL HARMONİK OSİLATÖR

$$\hat{H}\psi(x) = \left[\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}}_K + \underbrace{\frac{1}{2} kx^2}_U \right] \psi(x) = E\psi(x)$$

Not: m yerine μ yazılır.



Amaç: Özdeğer (E_n) ve özfonksiyonları ($\psi_n(x)$) bulmak.

Fonksiyon aşağıdaki gibi yeniden yazılır:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \underbrace{\frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{1}{2} kx^2 \right]}_{\text{}} \psi(x) = 0$$

Bu, kutudaki parçacık için yazılan
bağıntıdaki gibi sabit değildir dolayısıyla
sin ve kosinüs fonksiyonları çalışmaz.

DENEME: $f(x) = e^{-\alpha x^2/2}$ (Gauss fonksiyonu)

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = -\alpha e^{-\alpha x^2/2} + \alpha^2 x^2 e^{-\alpha x^2/2} = -\alpha f(x) + \alpha^2 x^2 f(x)$$

veya yeniden yazılınca, $\frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \alpha f(x) - \alpha^2 x^2 f(x) = 0$ olur.

Bu eşitlikte

$$\alpha = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{ve} \quad \alpha^2 = \frac{mk}{\hbar^2}$$

$$\therefore \boxed{E = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k}{m}}}$$

ifadeleri kullanılırsa orijinal diferansiyel bağıntı elde edilir.

Bir özdeğer ve özfonksiyon bulunmuş oldu. Daha önce verilen ifadeler tekrar kullanılırsa

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \text{veya} \quad \nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$$

$$\therefore \boxed{E = \frac{1}{2} \hbar \omega = \frac{1}{2} h \nu}$$

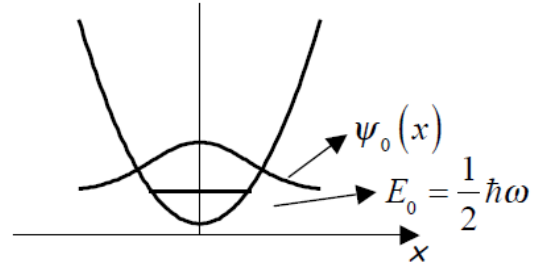
olur. Bu bizi en düşük enerji seviyesine ulaştırır : “temel” düzey

Dalga fonksiyonu için normalizasyona gerek vardır:

$$\psi(x) = Nf(x) = Ne^{-\alpha x^2/2} \quad \text{Burada } N, \text{ normalizasyon sabitidir.}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow N^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx}_{\sqrt{\pi/\alpha}} = 1 \Rightarrow N = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}$$

$$\therefore \boxed{\begin{aligned} \psi_0(x) &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} \\ E_0 &= \frac{1}{2} \hbar \omega = \frac{1}{2} h\nu \end{aligned}}$$



$\psi_0(x)$ simetrik olup çift fonksiyondur. $\psi_0(x) = \psi_0(-x)$

Düğüm yoktur ve osilatör değişimi için en olası değer, sıfırdır.

Şimdiye kadar sadece bir özdeğer ve öz durum bulundu. Peki diğerleri?

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} & E_0 &= \frac{1}{2} h\nu \\ \psi_1(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} (2\alpha^{1/2} x) e^{-\alpha x^2/2} & E_1 &= \frac{3}{2} h\nu \\ \psi_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{8}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} (4\alpha x^2 - 2) e^{-\alpha x^2/2} & E_2 &= \frac{5}{2} h\nu \\ \psi_3(x) &= \frac{1}{\sqrt{48}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} (8\alpha^{3/2} x^3 - 12\alpha^{1/2} x) e^{-\alpha x^2/2} & E_3 &= \frac{7}{2} h\nu \\ &\vdots & & \vdots \\ & & \alpha &= \left(\frac{km}{\hbar^2}\right)^{1/2} \end{aligned}$$

Genel bağıntı:

$$\psi_n(x) = \underbrace{\frac{1}{(2^n n!)^{1/2}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}}_{\text{Normalizasyon}} \underbrace{H_n(\alpha^{1/2} x)}_{\text{Hermit polinomu (İngilizce'de "air-MEET" diye söylenir")}} \underbrace{e^{-\alpha x^2/2}}_{\text{Gauss}} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$H_0(y) = 1 \quad \text{çift} \quad (n = 0)$$

$$H_1(y) = 2y \quad \text{tek} \quad (n = 1)$$

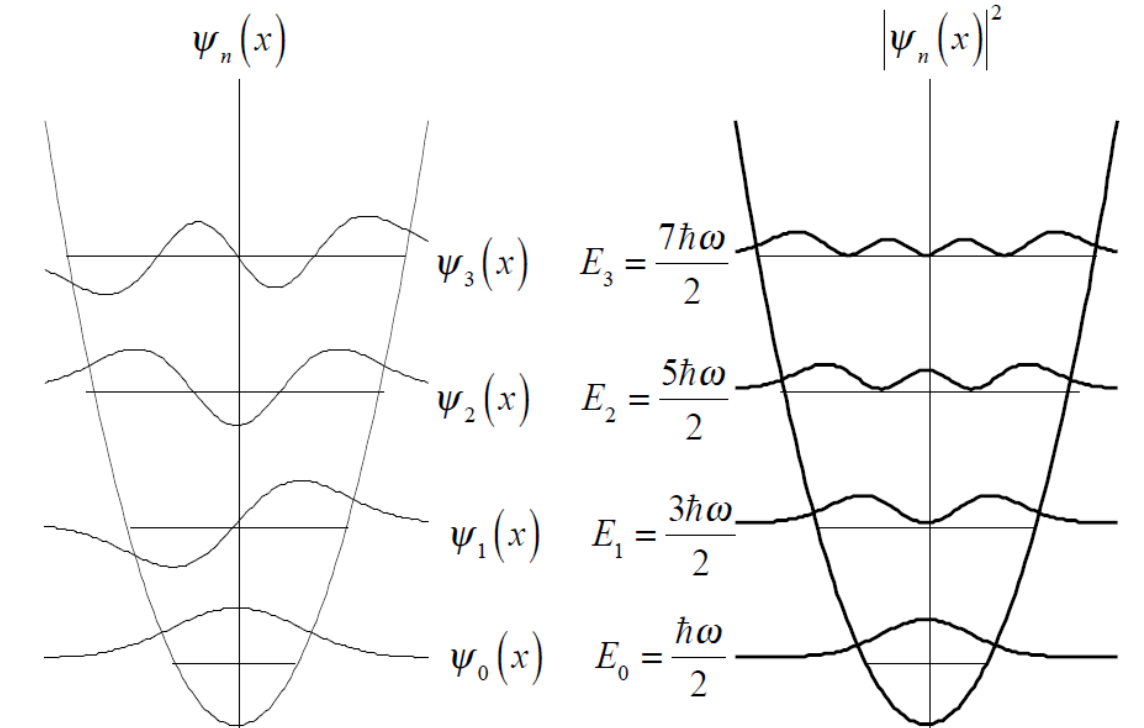
$$H_2(y) = 4y^2 - 2 \quad \text{çift} \quad (n = 2)$$

$$H_3(y) = 8y^3 - 12y \quad \text{tek} \quad (n = 3)$$

$$H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12 \quad \text{çift} \quad (n = 4)$$

$\vdots$

$\vdots$



Energiler,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) h\nu$$

dir.

E , n ile doğru orantılı olarak artmaktadır.

$\Rightarrow$ Enerji seviyeleri eşit aralıklıdır.

$$E_{n+1} - E_n = \left((n+1) + \frac{1}{2} \right) h\nu - \left(n + \frac{1}{2} \right) h\nu = h\nu \quad n' \text{ in değerine bakılmaksızın}$$

Bir “sıfır durum” enerjisi vardır. $E_0 = 1/2 h\nu$

Heisenberg Belirsizlik İlkesi’ne göre $E = 0$ olmaz.

ψ ’nin simetri özellikleri

$\psi_{0,2,4,6,\dots}$	çift fonksiyonlardır	$\psi(-x) = \psi(x)$
$\psi_{1,3,5,7,\dots}$	tek fonksiyonlardır	$\psi(-x) = -\psi(x)$

Yararlı özellikleri : (çift) . (çift) = çift

(tek) . (tek) = çift

(tek) . (çift) = tek

$$\begin{aligned} \frac{d(\text{tek})}{dx} &= (\text{çift}) & \frac{d(\text{çift})}{dx} &= (\text{tek}) \\ \int_{-\infty}^{\infty} (\text{tek}) dx &= 0 & \int_{-\infty}^{\infty} (\text{çift}) dx &= 2 \int_0^{\infty} (\text{çift}) dx \end{aligned}$$

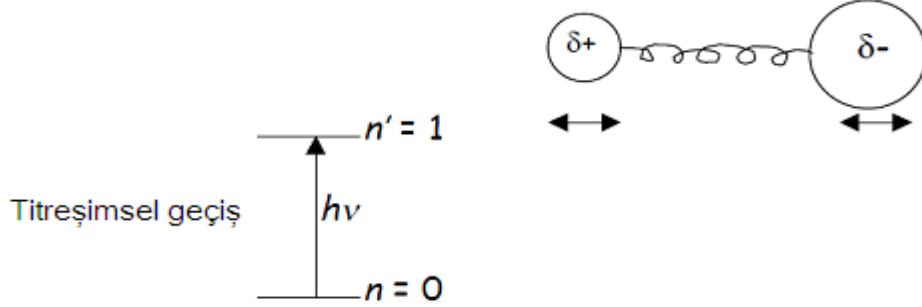
Sadece simetriden:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_n &= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\psi_n^*(x) x \psi_n(x)}_{\text{tek}} dx = 0 & \langle p \rangle_n &= \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\psi_n^* \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi_n(x)}_{\text{tek}} dx = 0 \end{aligned}$$

Ortalama deęiřim ve ortalama momentum = 0

IR Spektroskopi $\Rightarrow$ Harmonik Osilatör Seęimlilik Kuralları

Titreřim absorpsiyon özelliklerinin řiddeti



1) Molekölün dipol momenti, molekül titreřtięi için deęiřmelidir $\Rightarrow$
HCl, IR ışınmasını absorplayabilir ancak N_2 , O_2 , H_2 absorplayamaz.

2) Sadece $n' = n \pm 1$ geęişlere izin verilir (seęimlilik kuralı).

(Ödev : İspatlayınız)

řiddet
$$I_{nn'} \propto \left| \frac{d\mu}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x \psi_{n'} dx \right|^2$$

KUANTUM MEKANİKSEL HARMONİK OSİLATÖR ve TÜNELLEME

Klasik dönüm noktaları:

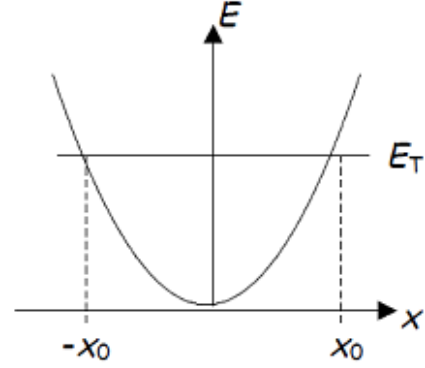
Klasik

Harmonik osilatör: Toplam enerji, $E_T = 1/2 kx_0^2$

K ile U arasında salınır.

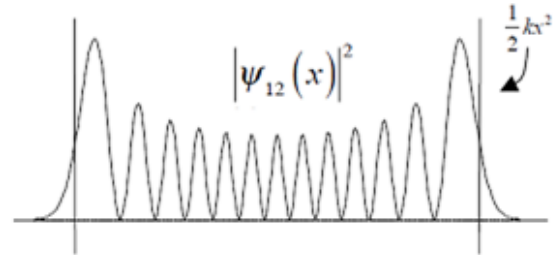
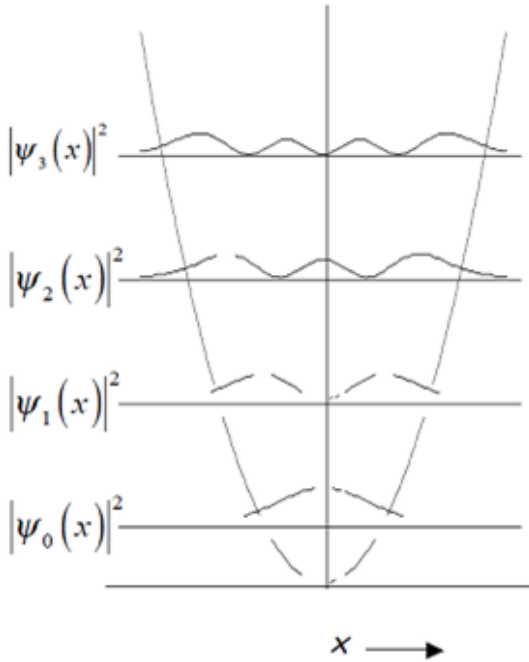
Bütün enerji, potansiyel enerji olduğunda azamî değişim (x_0) gerçekleşir.

$$x_0 = \sqrt{\frac{2E_T}{k}} \quad \text{"klasik dönüm noktası" dır.}$$

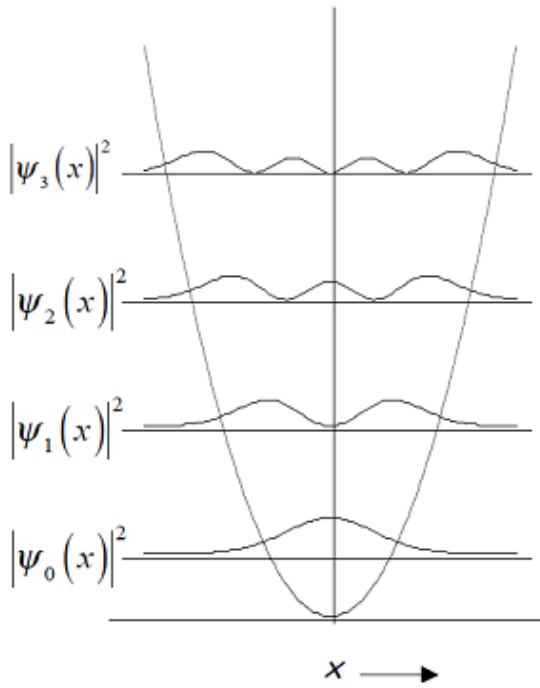


Osilasyon, toplam enerjiden daha büyük bir potansiyel enerjiyle yapılırsa, E_T enerjisine sahip klasik bir osilatör, bu değişimi asla aşamaz.

Kuantum Mekaniksel Harmonik Osilasyon



Yüksek n değerlerinde, olasılık yoğunluğu, dönüm noktalarında pik veren klasik bir görünümündedir.



$x > x_0$ da sıfırdan farklı olasılık!

$(x > x_0, x < -x_0)$ olasılığı:

$$2 \int_{\alpha^{-1/2}}^{\infty} |\psi_0^2(x)| dx = 2 \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/2} \int_{\alpha^{-1/2}}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx$$

$$= \frac{2}{\pi^{1/2}} \int_1^{\infty} e^{-y^2} dy = \text{hata fonk. (1)}$$

“Tamamlayıcı hata fonksiyonu”, sayısal olarak hesaplanmış veya çizelge olarak sunulmuştur.

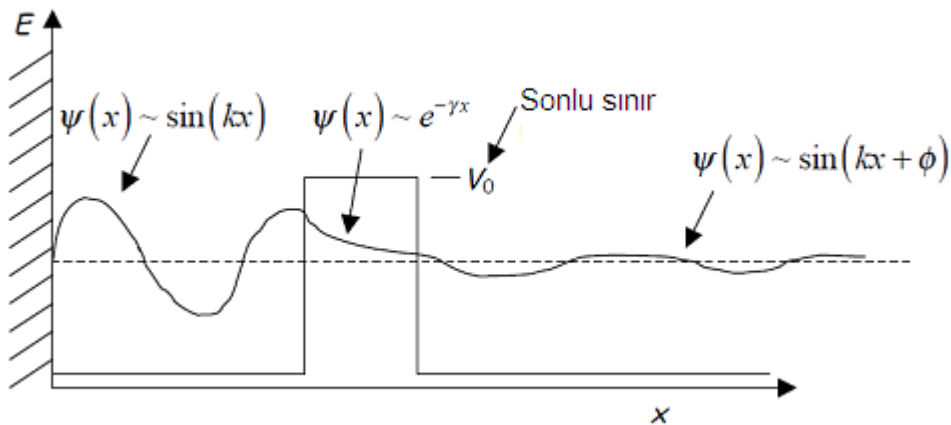
$$(x > x_0, x < -x_0) \text{ olasılığı} = \text{hata fonk. (1)}$$

$$= 0.16$$

Önemli olasılık!

Osilatör, klasik olarak yasaklanmış bölgeye yapılan bir tünellemedir. Bu, katıksız bir Kuantum Mekaniği olgusudur!

Tünelleme, Kuantum Mekaniği sistemlerinin, özellikle e^- ve H gibi çok düşük kütleye sahip sistemlerin genel bir özellığıdir



Enerji, sınır yüksekliğinden az olmasına rağmen dalga fonksiyonu, bu sınır dâhilinde sıfırdan farklıdır! Sonuçta, sol taraftaki bir parçacık, sağ tarafa kaçabilir veya “tünel” yapabilir.

Sınır dahilinde:
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right] \psi(x) = E\psi(x)$$

veya
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right] \psi(x) \equiv \gamma^2 \psi(x)$$

Çözümler, $\gamma = \left[\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \right]$ yazıldığında $\psi(x) = Be^{-\gamma x}$ olur.

Ayrıca $\gamma \propto (V_0 - E)^{1/2}$ ve $\gamma \propto m^{1/2}$ dir.

Sınır, enerjiden çok çok yüksek değilse ve kütle hafifse tünelleme önemli olur.

Protonlar için önemlidir (örneğin; H-bağı dalgalanmaları, tautomerleşme)

Elektronlar için önemlidir (örneğin; taramalı tünelleme mikroskopisi)

Kuantum Mekaniksel Harmonik Osilatörde durağan olmayan durumlar

Sistem, bir öz durumdan farklı bir durumda olabilir, örneğin;

$$|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1 \text{ ile } \psi = c_0\psi_0 + c_1\psi_1 \text{ 'un normalizasyonu, örneğin; } |c_0| = |c_1| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Tamamen zamana bağlı öz durumlar

$$\Psi_0(x, t) = \psi_0(x) e^{-i\omega_0 t} \quad \Psi_1(x, t) = \psi_1(x) e^{-i\omega_1 t}$$

şeklinde yazılabilir. Burada;

$$\hbar\omega_0 = E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_{\text{tit}} \Rightarrow \omega_0 = \frac{1}{2}\omega_{\text{tit}} \quad \hbar\omega_1 = E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega_{\text{tit}} \Rightarrow \omega_1 = \frac{3}{2}\omega_{\text{tit}} \text{ dir.}$$

Sistem, sonra zaman bağımlı hâle getirilir:

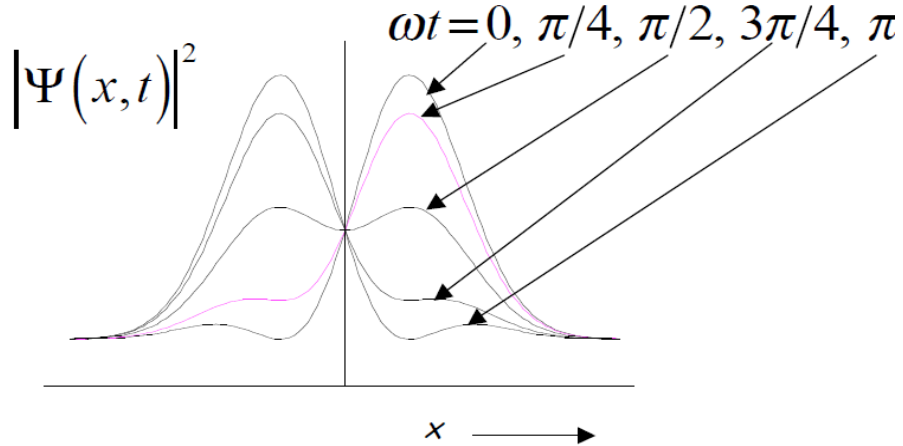
$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t} \psi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_1 t} \psi_1(x) = c_0(t) \psi_0(x) + c_1(t) \psi_1(x)$$

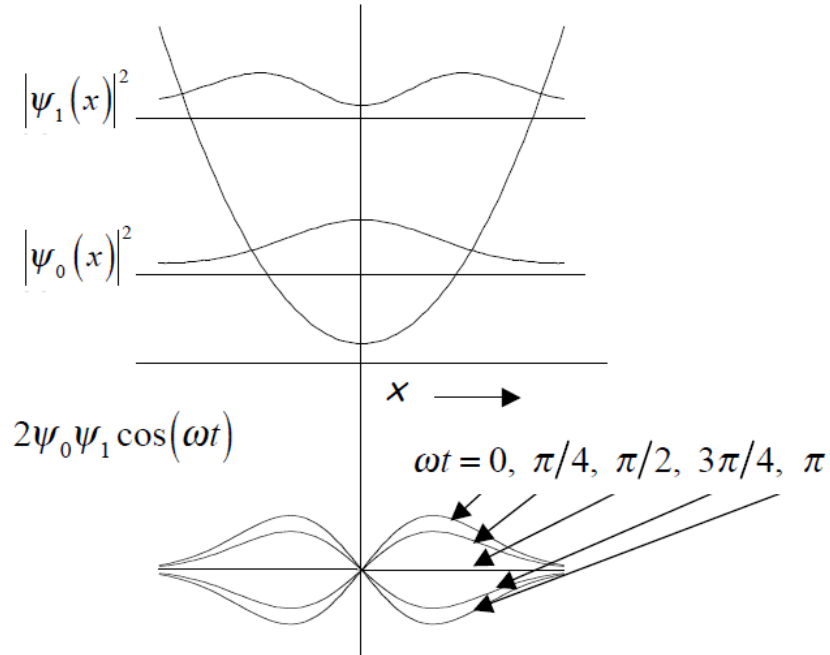
Burada $c_0(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_0 t}$ $c_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\omega_1 t}$ dir.

Olasılık yoğunluğu nedir?

$$\begin{aligned} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) &= \frac{1}{2} \left[\psi_0^*(x) e^{i\omega_0 t} + \psi_1^*(x) e^{i\omega_1 t} \right] \left[\psi_0(x) e^{-i\omega_0 t} + \psi_1(x) e^{-i\omega_1 t} \right] \\ &= \frac{1}{2} \left[\psi_0^* \psi_0 + \psi_1^* \psi_1 + \psi_1^* \psi_0 e^{i(\omega_1 - \omega_0)t} + \psi_0^* \psi_1 e^{-i(\omega_1 - \omega_0)t} \right] = \frac{1}{2} \left[\psi_0^2 + \psi_1^2 + 2\psi_0 \psi_1 \cos(\omega_{\text{tit}} t) \right] \end{aligned}$$

Olasılık yoğunluğu, titreşim frekansında osilasyon yapar!





Tahminî $\langle x \rangle$ değeri ne olur?

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x,t) \hat{x} \Psi(x,t) dx \\
 &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} [\psi_0^*(x) e^{i\omega_0 t} + \psi_1^*(x) e^{i\omega_1 t}] x [\psi_0(x) e^{-i\omega_0 t} + \psi_1(x) e^{-i\omega_1 t}] dx \\
 &= \frac{1}{2} \left[\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* x \psi_0 dx}_{\langle x \rangle_0 = 0} + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* x \psi_1 dx}_{\langle x \rangle_1 = 0} + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* x \psi_0 e^{i(\omega_1 - \omega_0)t} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* x \psi_1 e^{-i(\omega_1 - \omega_0)t} dx \right] \\
 &= \cos(\omega_{\text{tit}} t) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0 x \psi_1 dx
 \end{aligned}$$

$\langle x \rangle(t)$, tıpkı klasik harmonik osilatör gibi titreşim frekansında osilasyon yapar!

Titreşim genliği $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0 x \psi_1 dx$ tir.

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} \quad \psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} (2\alpha^{1/2} x) e^{-\alpha x^2/2}$$

$$\Rightarrow x \psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{1/4} x e^{-\alpha x^2/2} = (2\alpha)^{-1/2} \psi_1(x)$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0 x \psi_1 dx = (2\alpha)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2 dx = (2\alpha)^{-1/2} \boxed{\langle x \rangle(t) = (2\alpha)^{-1/2} \cos(\omega_{\text{tit}} t)}$$

Hermit polinomları arasındaki ilişki:

Harmonik osilatör dalga fonksiyonlarını tekrar hatırlayalım:

$$\psi_n(x) = \underbrace{\frac{1}{(2^n n!)^{1/2}}}_{\text{Normalizasyon}} \underbrace{\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}}_{\text{Hermit polinomu}} \underbrace{H_n(\alpha^{1/2} x) e^{-\alpha x^2/2}}_{\text{Gauss}} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$H_0(y) = 1$	çift	$(n = 0)$
$H_1(y) = 2y$	tek	$(n = 1)$
$H_2(y) = 4y^2 - 2$	çift	$(n = 2)$
$H_3(y) = 8y^3 - 12y$	tek	$(n = 3)$
$H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12$	çift	$(n = 4)$
$\vdots$		$\vdots$

Bütün H_n değerleri için genel formül:

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}$$

Kullanışlı bir türev formülü:

$$\frac{dH_n(y)}{dy} = (-1)^n 2ye^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} + (-1)^n e^{y^2} \frac{d^{n+1}}{dy^{n+1}} e^{-y^2} = 2yH_n(y) - H_{n+1}(y)$$

H_n ler arasında kurulan başka bir kullanışlı formül, iterasyon formülüdür:

$$H_{n+1}(y) - 2yH_n(y) + 2nH_{n-1}(y) = 0$$

Yukarıdaki formülde $2yH_n(y)$ yerine $2yH_n(y) = H_{n+1}(y) + 2nH_{n-1}(y)$ yerleştirilmesiyle

$$\frac{dH_n(y)}{dy} = 2nH_{n-1}(y) \quad \text{olur.}$$

Bu ifadeler, momentumun ($\langle p \rangle(t)$) çözümü için kullanılır:

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \hat{p} \Psi(x, t) dx \\
 &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\psi_0^*(x) e^{i\omega_0 t} + \psi_1^*(x) e^{i\omega_1 t} \right] \hat{p} \left[\psi_0(x) e^{-i\omega_0 t} + \psi_1(x) e^{-i\omega_1 t} \right] dx \\
 &= \frac{1}{2} \left[\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \hat{p} \psi_0 dx}_{\langle p \rangle_0 = 0} + \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \hat{p} \psi_1 dx}_{\langle p \rangle_1 = 0} + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \hat{p} \psi_0 e^{i(\omega_1 - \omega_0)t} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \hat{p} \psi_1 e^{-i(\omega_1 - \omega_0)t} dx \right]
 \end{aligned}$$

$$\frac{d}{dx} \psi_0(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} (-\alpha x) e^{-\alpha x^2/2} = -\left(\frac{\alpha}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \psi_1(x)$$

$$\therefore \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \hat{p} \psi_0 e^{i(\omega_1 - \omega_0)t} dx = i\hbar \left(\frac{\alpha}{2} \right)^{\frac{1}{2}} e^{i(\omega_1 - \omega_0)t} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^* \psi_1 dx = i\hbar \left(\frac{\alpha}{2} \right)^{\frac{1}{2}} e^{i\omega_{10} t}$$

H_n ' ler arasındaki ilişkiler kullanılarak

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \hat{p} \psi_1 e^{-i(\omega_1 - \omega_0)t} dx$$

integrali çözülür.

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dx} \psi_1(x) &= \frac{d}{dx} \left[N_1 H_1(\alpha^{1/2} x) e^{-\alpha x^2/2} \right] = \alpha^{1/2} N_1 \frac{d}{dy} \left[H_1(y) e^{-y^2/2} \right] \\
 y &\equiv \alpha^{1/2} x \quad dy = \alpha^{1/2} dx \quad dx = \alpha^{-1/2} dy \quad \frac{d}{dx} = \alpha^{1/2} \frac{d}{dy} \\
 \frac{d}{dx} \psi_1(x) &= \alpha^{1/2} N_1 \left[\frac{d}{dy} H_1(y) e^{-y^2/2} - y H_1(y) e^{-y^2/2} \right] \\
 \frac{d}{dy} H_1(y) &= 2n H_0(y) = 2 H_0(y) \\
 y H_1(y) &= \frac{1}{2} [2n H_0(y) + H_2(y)] = H_0(y) + \frac{1}{2} H_2(y)
 \end{aligned}$$

$$\frac{d}{dx}\psi_1(x) = \alpha^{1/2} N_1 \left[H_0(y) e^{-y^2/2} - \frac{1}{2} H_2(y) e^{-y^2/2} \right] = \alpha^{1/2} N_1 \left[\frac{1}{N_0} \psi_0(x) - \frac{1}{2N_2} \psi_2(x) \right]$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \hat{p} \psi_1 e^{-i(\omega_1 - \omega_0)t} dx &= e^{-i(\omega_1 - \omega_0)t} (-i\hbar) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \frac{d}{dx} \psi_1 dx \\ &= e^{-i(\omega_1 - \omega_0)t} (-i\hbar) \alpha^{1/2} N_1 \left[\frac{1}{N_0} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \psi_0 dx - \frac{1}{2N_2} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \psi_2 dx \right] \\ &= e^{-i(\omega_1 - \omega_0)t} (-i\hbar) \alpha^{1/2} \frac{N_1}{N_0} = -i\hbar \left(\frac{\alpha}{2} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-i\omega_{\text{tit}} t} \end{aligned}$$

Sonuç olarak

$$\langle p \rangle(t) = \frac{1}{2} \left[i\hbar \left(\frac{\alpha}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(e^{i\omega_{\text{tit}} t} - e^{-i\omega_{\text{tit}} t} \right) \right] = -\hbar \left(\frac{\alpha}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \sin(\omega_{\text{tit}} t) \quad \text{dir.}$$

Ortalama momentum da, titreşim frekansında osilasyon yapar.