CHEMIA KWANTOWA

Postulaty mechaniki kwantowej

Monika Musiał

- *Literatura*

- **Lucjan Piela,** *Idee chemii kwantowej*, **PWN, Warszawa 2003.**
- **Włodzimierz Kołos,** *Chemia kwantowa*, **PWN, Warszawa 1978.**
- **Alojzy Gołębiewski,** *Elementy mechaniki i chemii kwantowej*, **PWN, Warszawa 1982.**

Zamiana zmiennych przy całkowaniu:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x,y)dxdy \;=\; \int\limits_{0}^{2\pi}(\int\limits_{0}^{\infty} g(r,\varphi)rdr)d\varphi$$

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x,y,z)dxdydz \;=\; \int\limits_{0}^{\infty}\int\limits_{0}^{\pi}\int\limits_{0}^{2\pi} g(r,\vartheta,\varphi)r^2\sin\vartheta drd\vartheta d\varphi$$

- *Dygresja → całki i pochodne*

$$\begin{aligned} \int dx &= x \\ \int sinx dx &= -cosx \\ \int cosx dx &= sinx \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (x^a)' &= a x^{a-1} \\ (sinx)' &= cosx \\ (cosx)' &= -sinx \\ (e^x)' &= e^x \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \big(f(x)g(x)\big)' &= f'(x)g(x) + f(x)g'(x) \\ \Big(\frac{f(x)}{g(x)}\Big)' &= \frac{f'(x)g(x) - f(x)g'(x)}{g(x)^2} \end{aligned}$$

• *Dygresja → użyteczne całki*

$$\int_0^{+\infty} e^{-ax} dx = \frac{1}{a}$$

$$\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$$

- *Dygresja → wartości funkcji trygonometrycznych*

α	$0°$	$30°$	$45°$	$60°$	$90°$	$180°$
$sin\alpha$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	1	0
$cos\alpha$	1	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{1}{2}$	0	-1
$tg\alpha$	0	$\frac{\sqrt{3}}{3}$	1	$\sqrt{3}$	-	0
$ctg\alpha$	-	$\sqrt{3}$	1	$\frac{\sqrt{3}}{3}$	0	-

Aksjomatyczna konstrukcja mechaniki kwantowej: pięć aksjomatów zwanych postulatami

- **Postulat pierwszy**: Stan układu kwantowomechanicznego opisuje funkcja falowa $\Psi(r_1, r_2, ..., r_N, t)$ zwana także funkcją stanu taka, że kwadrat jej modułu: $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$ pomnożony przez element objętości $d\tau$ określa prawdopodobieństwo, że w chwili t cząstka znajduje się w elemencie objętości $d\tau$.

$$dW(r_1, r_2, ...; t) = |\Psi(r_1, r_2, ...; t)|^2 d\tau = \rho(r_1, r_2, ...; t) d\tau$$

gdzie: ρ oznacza gęstość prawdopodobieństwa $\rho = \frac{dW}{d\tau}$; r_i - współrzędne (x,y,z) i-tej cząstki; $d\tau = dV_1 dV_2 \cdots dV_N$.

- **Postulat drugi**: Każdej wielkości mechanicznej zapisanej jako funkcja F współrzędnych i pędów, $F(r_1, r_2, ..., p_1, p_2, ...)$ przypisujemy operator kwantowomechaniczny $\hat{\mathrm{F}}$ zgodnie z następującymi regułami (tzw. regułami Jordana):

$$p_{xi} \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}, \qquad p_{yi} \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial y_i}, \qquad p_{zi} \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial}{\partial z_i}$$

$$x_i \longrightarrow x_i\cdot, \qquad y_i \longrightarrow y_i\cdot, \qquad z_i \longrightarrow z_i\cdot$$

- **Postulat trzeci**: równanie Schrödingera zawierające czas:

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

określa zmianę funkcji falowej Ψ w czasie

Czyli, jeśli znany jest operator $\hat{H}$ i funkcja $\Psi(q_1, q_2, q_3, ..., q_f, t_o)$, tj. stan układu w pewnej chwili początkowej, t_o to powyższe równanie umożliwia wyznaczenie funkcji $\Psi(q_1, q_2, q_3, ..., q_f, t)$, czyli stanu układu w dowolnej chwili.

Równanie Schrödingera zawierające czas jest równanien ruchu obowiązyjącym w mechanice kwantowej.

- **Postulat czwarty**: Równanie stanu charakterystycznego wielkości F (zagadnienie własne operatora $\hat{\mathrm{F}}$): jeżeli spełnione jest równanie

$$\hat{F}\Phi_i = f_i\Phi_i$$

f_i wartość własna

Φ_i funkcja własna.

Wynikiem pomiaru wielkości F może być tylko jedna z wartości własnych operatora $\hat{F}$. Jeżeli Φ_i jest funkcją stanu układu to zmienna F ma w tym stanie dokładnie wartość f_i.

- **Postulat piąty**: o wartości średniej. Wartość spodziewana $\bar{f}$ wielkości mechanicznej F, której odpowiada operator $\hat{F}$ dana jest wyrażeniem:

$$\bar{f} = \int \Psi^* \hat{F} \Psi d\tau$$

Zakładamy, że funkcja falowa jest unormowana.

Z warunku normalizacji funkcji Ψ wynika, że:

$$\int \Psi^* \Psi d\tau = 1$$

Ogólny wzór na $\bar{f}$:

$$\bar{f} = \frac{\int \Psi^* \hat{F} \Psi d\tau}{\int \Psi^* \Psi d\tau}$$

- *Konsekwencje wynikające z postulatów*

Postulat I

Funkcja porządna: skończona, ciągła, jednoznaczna.

Funkcje klasy Q - całkowalne z kwadratem modułu.

Normalizacja funkcji falowej

Funkcja unormowana gdy:

$$\int |\Psi(r_1, r_2, ..., t)|^2 d\tau = 1$$

Jeżeli:

$$\int |\Psi(r_1, r_2, ..., t)|^2 d\tau = N$$

to

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N}}\Psi$$

• Unormować funkcję falową $\Psi(\varphi) = Ne^{im\varphi}$ określoną w przedziale [0,2π] przy czym m jest liczbą całkowitą:

$$N^2 \int_0^{2\pi} e^{-im\varphi}\, e^{im\varphi} d\varphi = N^2 \int_0^{2\pi} d\varphi = N^2 2\pi = 1$$

czyli $\quad N = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

Postać funkcji unormowanej: $\Psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}$

• Unormować funkcję falową $\Psi(r, \vartheta, \varphi) = Ne^{-ar}$ określoną w całej przestrzeni (*wskazówka: skorzystaj z wyniku* $\int_0^\infty r^n e^{-ar} dr = \frac{n!}{a^{n+1}}$):

$$N^2 (\int_0^\infty e^{-2ar} r^2 dr \int_0^\pi sin\vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi) = N^2 \frac{\pi}{a^3} = 1$$

czyli $\quad N = (\frac{a^3}{\pi})^{\frac{1}{2}}$

Postać funkcji unormowanej: $\Psi(r, \vartheta, \varphi) = (\frac{a^3}{\pi})^{\frac{1}{2}} e^{-ar}$

Postulat II

funkcja: $x \longrightarrow y$

operator: $f(x) \longrightarrow g(x)$

Przykłady operatorów:

- energia kinetyczna elektronu ($T = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$):
  $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle$
- energia oddziaływania elektronu z jądrem ($V = -\frac{Ze^2}{r}$): $\hat{V} = -\frac{Ze^2}{r}$
- energia całkowita (**hamiltonian**): $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$
- składowa x momentu pędu ($M_x = yp_z - zp_y$): ($\hat{M}_x = -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})$
- etc.

Operatory **liniowe**:

$$\hat{F}(\Psi_1 + \Psi_2) = \hat{F}\Psi_1 + \hat{F}\Psi_2$$
$$\hat{F}(c\Psi) = c\hat{F}\Psi$$

$$\hat{F}(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2) = c_1\hat{F}\Psi_1 + c_2\hat{F}\Psi_2$$

gdzie c_1, c_2 są stałymi (również zespolonymi)

Np. operatory różniczkowania, całkowania są operatorami liniowymi a np. operatory potęgowania, sprzężenia nie.

Operatory **hermitowskie** dla funkcji klasy Q:

$$\int \Psi_1^* \hat{F} \Psi_2 d\tau = \int \Psi_2 (\hat{F} \Psi_1)^* d\tau$$

• Sprawdzić czy operator $\hat{F} = 2i$ jest operatorem hermitowskim

$$\int \Psi_1^* 2i \Psi_2 d\tau = - \int \Psi_2 (2i \Psi_1)^* d\tau$$

Operator $\hat{F} = 2i$ nie jest operatorem hermitowskim.

• Sprawdzić czy operator $\hat{F} = 8$ jest operatorem hermitowskim

$$\int \Psi_1^* 8 \Psi_2 d\tau = \int \Psi_2 (8 \Psi_1)^* d\tau$$

Operator $\hat{F} = 8$ jest operatorem hermitowskim.

- Sprawdzić czy operator $\hat{F} = \frac{d}{dx}$ jest operatorem hermitowskim
  wskazówka: skorzystać z całkowania przez części
  $\int u(x)v'(x)dx = u(x)v(x) - \int v(x)u'(x)dx$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* \frac{d}{dx} \Psi_2 dx = \underbrace{\Psi_1^* \Psi_2 \ \Big|_{-\infty}^{+\infty}}_{0} - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \frac{d}{dx} \Psi_1^* dx =$$

$$= - \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 (\frac{d}{dx} \Psi_1)^* dx$$

Operator $\hat{F} = \frac{d}{dx}$ nie jest operatorem hermitowskim.

• Sprawdzić czy operator $\hat{F} = i\frac{d}{dx}$ jest operatorem hermitowskim
wskazówka: skorzystać z całkowania przez części
$\int u(x)v'(x)dx = u(x)v(x) - \int v(x)u'(x)dx$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^* i \frac{d}{dx} \Psi_2 dx = \underbrace{i\Psi_1^*\Psi_2 \Big|_{-\infty}^{+\infty}}_{0} - i \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 \frac{d}{dx} \Psi_1^* dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_2 (i\frac{d}{dx}\Psi_1)^* dx$$

Operator $\hat{F} = i\frac{d}{dx}$ jest operatorem hermitowskim.

Działania na operatorach:

suma: $(\hat{F} + \hat{G})\Psi = \hat{F}\Psi + \hat{G}\Psi$

iloczyn: $(\hat{F}\hat{G})\Psi = \hat{F}(\hat{G}\Psi)$

potęga: $\hat{F}^2\Psi = \hat{F}(\hat{F}\Psi)$

Komutator

Komutatorem operatorów $\hat{F}$ i $\hat{G}$ nazywamy operator:

$$\hat{K} = [\hat{F}, \hat{G}] \stackrel{df}{=} \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}$$

Gdy komutator sprowadza się do mnożenia przez 0, wówczas mówimy, że operatory $\hat{F}$ i $\hat{G}$ są przemienne, czyli komutują.

W celu sprawdzenia czemu równy jest komutator, działamy nim na jakąś dowolną funkcję.

Np. $\hat{F} = \frac{d}{dx}$ $\hat{G} = x$:

$$[\hat{F}, \hat{G}]f(x) = [\frac{d}{dx}, x]f(x) = \frac{d}{dx}(xf(x)) - x(\frac{d}{dx}f(x)) =$$

$$f(x) + x\frac{d}{dx}f(x) - x\frac{d}{dx}f(x) = f(x)$$

czyli $[\frac{d}{dx}, x] = 1$

Własności komutatorów:

- $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$
- $[\hat{A}, \hat{A}^n] = 0 \qquad n = 1, 2, 3, ...$
- $[k\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, k\hat{B}] = k[\hat{A}, \hat{B}] \qquad k-$ stała
- $[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$
- $[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]$
- $[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}$
- $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$

Ujęcie klasyczne:

Moment pędu jest iloczynem wektorowym: wektora promienia wodzącego $\mathbf{r}$ i wektora pędu $\mathbf{p}$:

$$\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

Moment pędu jest wektorem o składowych:

$$\begin{aligned} M_x &= yp_z - zp_y \\ M_y &= zp_x - xp_z \\ M_z &= xp_y - yp_x \end{aligned}$$

$$M^2 = M_x^2 + M_y^2 + M_z^2$$

Ujęcie kwantowe:

Konstrukcja operatorów dla składowych momentu pędu:

$$\begin{aligned}
\hat{M}_x &= -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) \\
\hat{M}_y &= -i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}) \\
\hat{M}_z &= -i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x})
\end{aligned}$$

• *Komutatory*

Własności komutacyjne operatorów momentu pędu:

$$
\begin{aligned}
[\hat{M}_x, \hat{M}_y] &= i\hbar \hat{M}_z \qquad & [\hat{M}_y, \hat{M}_x] &= -i\hbar \hat{M}_z \\
[\hat{M}_z, \hat{M}_x] &= i\hbar \hat{M}_y \qquad & [\hat{M}_x, \hat{M}_z] &= -i\hbar \hat{M}_y \\
[\hat{M}_y, \hat{M}_z] &= i\hbar \hat{M}_x \qquad & [\hat{M}_z, \hat{M}_y] &= -i\hbar \hat{M}_x
\end{aligned}
$$

$$[\hat{M}^2, \hat{M}_x] = [\hat{M}^2, \hat{M}_y] = [\hat{M}^2, \hat{M}_z] = 0$$

Z reguł komutacji wynika, iż:

Równocześnie ostro mierzalne są: kwadrat momentu pędu i jedna ze składowych.
Dwie dowolne składowe momentu pędu nie mogą być równocześnie dowolnie dokładnie zmierzone.

Oblicz komutator $[\hat{M}_y, \hat{M}_x]$

(skorzystaj z własności komutatorów oraz pochodnej iloczynu funkcji $(uv)' = u'v + uv'$)

$$
\begin{aligned}
[\hat{M}_y, \hat{M}_x] \; = \; & [-i\hbar(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}), -i\hbar(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})] = \\
& -\hbar^2((z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z})(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}) - (y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y})(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z})) = \\
& -\hbar^2(zy\frac{\partial^2}{\partial x\partial z} - z^2\frac{\partial^2}{\partial x\partial y} - xy\frac{\partial^2}{\partial z^2} + x\frac{\partial}{\partial y} + xz\frac{\partial^2}{\partial z\partial y} \\
& -y\frac{\partial}{\partial x} - yz\frac{\partial^2}{\partial z\partial x} + yx\frac{\partial^2}{\partial z^2} + z^2\frac{\partial^2}{\partial y\partial x} - zx\frac{\partial^2}{\partial y\partial z}) = \\
& -\hbar^2(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}) = -i\hbar\hat{M}_z
\end{aligned}
$$

Oblicz komutator $[\hat{M}^2, \hat{M}_x]$

(skorzystaj z własności komutatorów oraz własności komutacyjnych operatorów momentu pędu)

$$
\begin{aligned}
[\hat{M}^2, \hat{M}_x] \;=\; & [\hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2, \hat{M}_x] = \\
& [\hat{M}_x^2, \hat{M}_x] + [\hat{M}_y^2, \hat{M}_x] + [\hat{M}_z^2, \hat{M}_x] = \\
& [\hat{M}_y\hat{M}_y, \hat{M}_x] + [\hat{M}_z\hat{M}_z, \hat{M}_x] = \\
& \hat{M}_y[\hat{M}_y, \hat{M}_x] + [\hat{M}_y, \hat{M}_x]\hat{M}_y + \hat{M}_z[\hat{M}_z, \hat{M}_x] + [\hat{M}_z, \hat{M}_x]\hat{M}_z = \\
& \hat{M}_y(-i\hbar\hat{M}_z) - i\hbar\hat{M}_z\hat{M}_y + \hat{M}_z i\hbar\hat{M}_y + i\hbar\hat{M}_y\hat{M}_z = \\
& -i\hbar\hat{M}_y\hat{M}_z - i\hbar\hat{M}_z\hat{M}_y + i\hbar\hat{M}_z\hat{M}_y + i\hbar\hat{M}_y\hat{M}_z = 0
\end{aligned}
$$

Postulat III

Stany stacjonarne:

Hamiltonian nie zależy od czasu lub (równoważnie)

gęstość prawdopodobieństwa nie zależy od czasu

$$\tilde{\Psi}(r_1, r_2, ..., t) = \Psi(r_1, r_2, ..., r_N)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

E jest energią całkowitą układu.
Po podstawieniu do równania Schrödingera:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

Jest to równanie Schrödingera nie zawierające czasu.

Czyli, część bezczasowa funkcji falowej i ostro określone wartości energii układu wynikają z tzw. równania Schrödingera nie zawierającego czasu.

Tak więc w przypadku stanów stacjonarnych gęstość prawdopodobieństwa nie zależy od czasu jednakże niezależność od czasu gęstości prawdopodobieństwa bynajmniej nie oznacza, że od czasu nie zależy sama funkcja falowa.

Postulat IV

Założenie: $\hat{F}$ jest operatorem hermitowskim.

Teza: **wartości własne operatora $\hat{F}$ są rzeczywiste.**

$$\begin{aligned} \hat{F}\Phi_i &= f_i\Phi_i \\ \hat{F}^*\Phi_i^* &= f_i^*\Phi_i^* \end{aligned}$$

Mnożąc przez Φ_i^* i Φ_i :

$$\begin{aligned} \int \Phi_i^* F \Phi_i d\tau &= f_i \int \Phi_i^* \Phi_i d\tau \\ \int \Phi_i F^* \Phi_i^* d\tau &= f_i^* \int \Phi_i^* \Phi_i d\tau \end{aligned}$$

Lewe strony są równe więc $f_i = f_i^*$

• *Konsekwencje wynikające z postulatów*

Założenie: $\hat{F}$ jest operatorem hermitowskim

wartości własne f_i i f_j^* są różne

Teza: **funkcje własne są ortogonalne:**

$$\begin{aligned} \hat{F}\Phi_i &= f_i\Phi_i \\ \hat{F}^*\Phi_j^* &= f_j^*\Phi_j^* \end{aligned}$$

Mnożąc przez Φ_j^* i Φ_i :

$$\begin{aligned} \int \Phi_j^* F \Phi_i d\tau &= f_i \int \Phi_j^* \Phi_i d\tau \\ \int \Phi_i F^* \Phi_j^* d\tau &= f_j^* \int \Phi_i \Phi_j^* d\tau \end{aligned}$$

Lewe strony są równe więc

$$(f_i - f_j^*) \int \Phi_i \Phi_j^* d\tau = 0$$

i

$$\int \Phi_i \Phi_j^* d\tau = 0$$

Jednoczesna mierzalność wielkości fizycznych

Kiedy dwie wielkości fizyczne (obserwable), którym odpowiadają operatory $\hat{F}$ i $\hat{G}$ sa równocześnie dokładnie mierzalne ?

Z **postulatu IV** wynika, że ostro można określić wartość wielkości F, gdy funkcja stanu Ψ jest funkcją własną operatora $\hat{F}$. Zatem jeśli dwie wielkości F i G mają być równocześnie ostro mierzalne to funkcja Ψ winna być funkcją własną obu operatorów $\hat{F}$ i $\hat{G}$.

Zasada superpozycji stanów: zbiór funkcji własnych $\{\Phi_i\}$ dowolnego operatora kwantowomechanicznego F tworzy tzw. zbiór zupełny. Każdą funkcję porządną Ψ możemy rozwinąć:

$$\Psi = \sum_i c_i \Phi_i$$

a kwadrat współczynnika $|c_i|^2 = c_i^* c_i$ jest prawdopodobieństwem, że stan Ψ może mieć własności opisane przez Φ_i

Postulat V

Wynika pośrednio z zasady superpozycji. Jeżeli prawdopodobieństwo udziału funkcji Φ_i w funkcji opisującej stan układu, czyli prawdopodobieństwo wystąpienia wielkości f_i wynosi $|c_i|^2$ to **średnia wartość wielkości F** jest zgodnie z zasadami statystyki jako:

$$\bar{f} = \sum_i |c_i|^2 f_i$$

W oparciu o **postulat V** obliczymy:

$$\bar{f} = \int \Psi^* \hat{F} \Psi d\tau = \sum_{i,j} c_i^* c_j \int \Phi_i^* \hat{F} \Phi_j d\tau = \sum_i c_i^* c_i f_i$$

- Oblicz $\bar{p}_x$ jeśli funkcja jest postaci $\Psi = e^{ikx}$

$$\bar{p}_x = \frac{\int e^{-ikx}(-i\hbar\frac{d}{dx})e^{ikx}dx}{\int e^{-ikx}e^{ikx}dx} = \frac{-i\hbar\int e^{-ikx}\frac{d}{dx}e^{ikx}dx}{\int dx} = \hbar k$$

- Oblicz $\bar{p}_x^2$ jeśli funkcja jest postaci $\Psi = e^{ikx}$

$$\bar{p}_x^2 = \frac{\int e^{-ikx}(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2})e^{ikx}dx}{\int e^{-ikx}e^{ikx}dx} = \frac{-\hbar^2\int e^{-ikx}\frac{d^2}{dx^2}e^{ikx}dx}{\int dx} = \hbar^2 k^2$$

- Oblicz wartość spodziewaną

– energii kinetycznej
– energii potencjalnej
– energii całkowitej

w przypadku oscylatora harmonicznego w stanie podstawowym, gdzie

$$\Psi(x) = \left(\frac{\Pi}{a}\right)^{-\frac{1}{4}}e^{-\frac{1}{2}ax^2} \qquad a = \frac{m\omega}{\hbar}$$

Notacja Diraca:

$$\int \Phi_i^* \hat{F} \Phi_j d\tau \stackrel{df}{=} \langle \Phi_i | F | \Phi_j \rangle$$

$$\int \Phi_i^* \Phi_j d\tau = \int \Phi_i^* \hat{1} \Phi_j d\tau \stackrel{df}{=} \langle \Phi_i | 1 | \Phi_j \rangle = \langle \Phi_i | \Phi_j \rangle$$