

ИФПМ.  
Кафедра общей  
физики.  
Л.В.В.

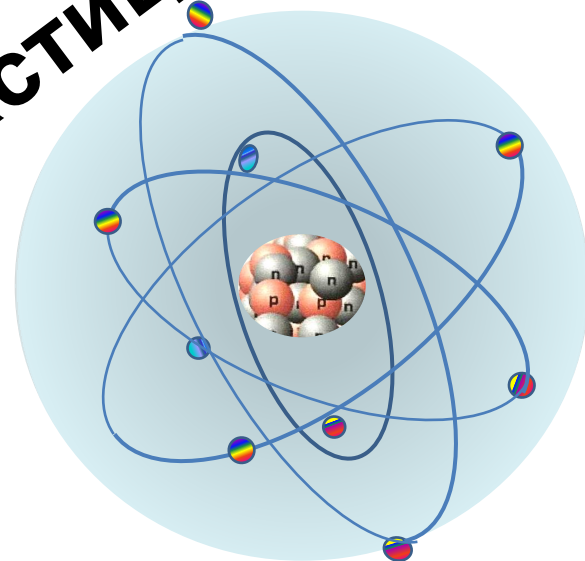
## Дифракция электронов

Волновые свойства

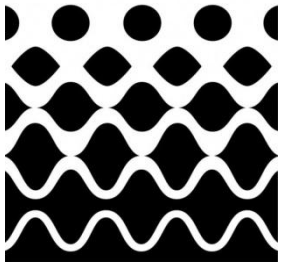
частиц  
Понятие

вероятности  
обнаружения  
частицы

**Квантовая физика микрочастиц**



Уравнение Шредингера  
для частиц, скорость  
движения  
которых мала по сравнению  
со скоростью света.



# Корпускулярно-волновой дуализм

Корпускулярно-волновой дуализм

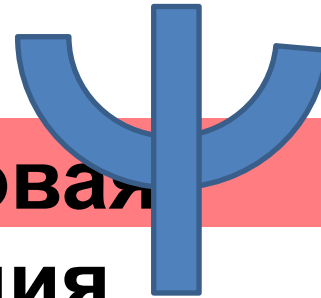
электромагнитного излучения

- Гипотеза Луи де Бройля о волновых свойствах микрочастиц

Дифракция микрочастиц

**Фотоны.**  
 $\vec{p} = \hbar \vec{k}, E = \hbar \omega$

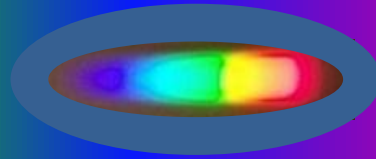
Волновая функция



Уравнение Шредингера

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

# Фотон



Свет и любое электромагнитное излучение – поток фотонов.

## Корпускулярные свойства излучения

1. Энергия и импульс фотонов  $E = \hbar \omega$ ,  $p = \hbar k$ ,  $p = \frac{\hbar \omega}{c} = \frac{2\pi \hbar}{\lambda}$

2. Собственная масса  $m_0 = 0$  (масса покоя).

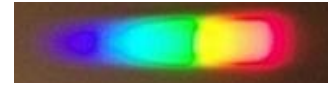
Фотон всегда движется со скоростью света  $3 \cdot 10^8$  м/с (в любой системе отсчета) и не может находиться в состоянии покоя.

3. Энергия и импульс связаны соотношением  $E = p \cdot c$

Частный случай релятивистского соотношения для частицы массы  $m_0$

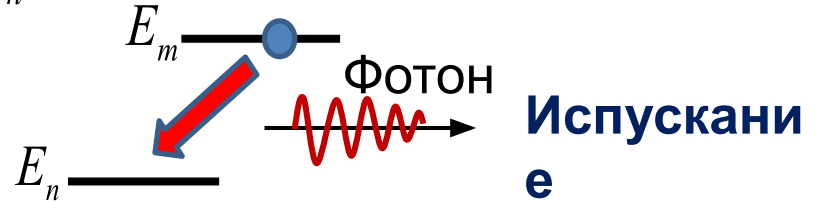
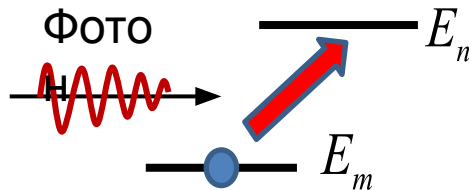
$$E = \sqrt{p^2 c^2 + (m_0 c^2)^2}$$

4. Фотон – стабильная элементарная частица, время жизни которой определяется взаимодействием с



**5. Фотон - неделимая частица.** Поглощается и испускается целиком в процессе квантового скачка из состояния  $E_m$  вещества с энергией  $E_m$  в состояние с энергией  $E_n$

• Поглощение



## 6. Интенсивность светового

**монохроматического пучка** (средняя плотность

потока энергии электромагнитного излучения)

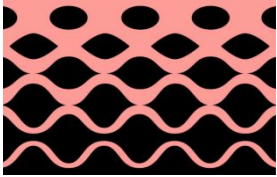
$$I_\omega = \langle w \rangle j c = \hbar \omega \cdot \langle n_\phi \rangle \cdot \Phi = \hbar \omega \cdot \Phi \quad \text{где } J_\phi = \langle n_\phi \rangle \cdot c -$$

плотность потока

$\langle w \rangle$  - средняя плотность энергии излучения : фотонов

$\langle n_\phi \rangle$  - среднее число фотонов в единице объема (концентрация);

**7. В квантовой физике отсутствует наглядный образ фотона.**



# Корпускулярно – волновой дуализм электромагнитного излучения

Такие явления, как **интерференция**, **дифракция**, **поляризация** света, были объяснены, исходя из представлений о **волновой природе света**: свет – это распространяющиеся в пространстве электромагнитные волны. Световая волна **не локализована** в пространстве. Объемная плотность энергии электромагнитной волны пропорциональна квадрату её амплитуды и изменяется **непрерывно**.

В явлениях взаимодействия с веществом свет ведет себя как **поток частиц – фотонов**, обладающих энергией  $\varepsilon = \hbar \omega$  и импульсом  $p = \hbar k$ ,  $p = 2\pi\hbar/\lambda$  (фотоэффект, тепловое равновесное излучение, эффект Комптона и др.).

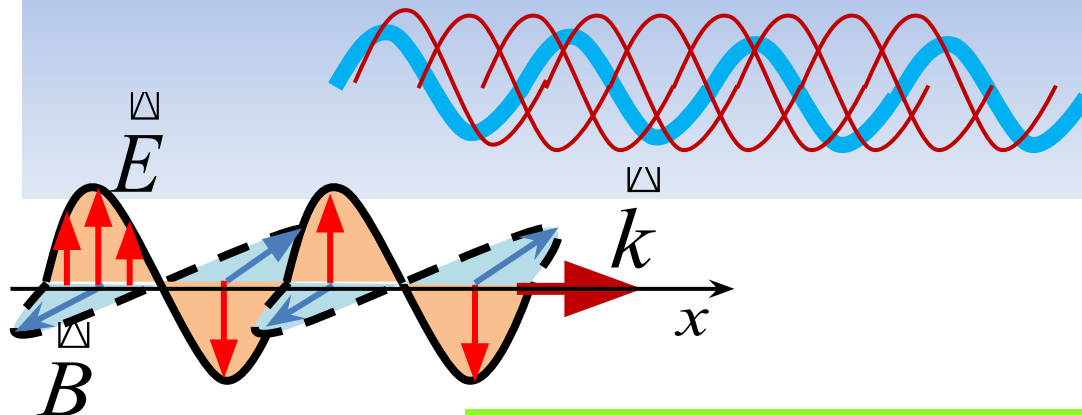
Световая энергия изменяется **не непрерывно**, а только **дискретно** в виде порций (квантов) энергии.

Электромагнитное излучение обладает двойственной природой, получившей название **«корпускулярно-волновой дуализм»**. Явления, в которых участвует свет, объясняются с учетом двух, дополняющих друг друга, понятий: **«волна – частица»**

# Гипотеза Луи де Бройля



Л. де БРОЙЛЬ



Волны

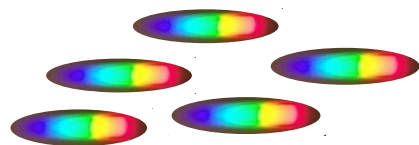
Волновые свойства:  $\omega, \lambda$

Электромагнитное излучение

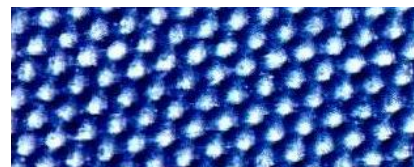
Частицы вещества:

$${}^0_{-1}e, {}^1_{+1}p, {}^1_0n, \dots$$

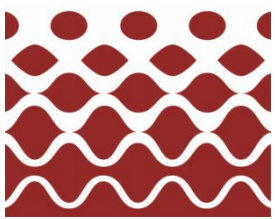
Корпускулярные свойства:  $E, p$



ФОТОНЫ



Изображение поверхности золота в туннельном микроскопе



# Гипотеза де Бройля

В **1923 г.** Французский физик Луи де Бройль выдвинул чрезвычайно смелую гипотезу: **Электромагнитное излучение**

**и вещество, состоящее из микрочастиц, равноправны** в отношении проявления **корпускулярно-волновых свойств.**

**Микрочастицы** **обязаны проявлять волновые свойства.** Свет с длиной волны  $\lambda$  и частотой  $\omega$  ведет себя как поток частиц (фотонов)

импульсом  $p = 2\pi\hbar/\lambda$

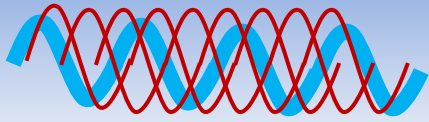
и энергией  $E = \hbar\omega$

**Частице с импульсом  $p$  и энергией  $E$  соответствует некий волновой процесс**

с длиной волны  $\lambda = 2\pi\hbar/p$

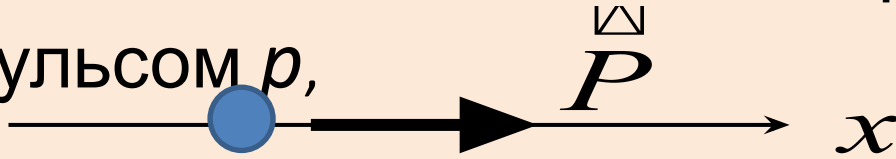
и частотой  $\omega = E/\hbar$





# Плоская волна де Бройля

Свободной частице с энергией  $E$  и импульсом  $p$ ,



движущейся вдоль оси  $x$ , соответствует

**плоская волна де Бройля:**

$$\Psi(x, t) = A \exp[-i(\omega t - kx)] = A \exp\left[i\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)\right]$$

где  $k = p/\hbar$  - волновое число,  $\omega = E/\hbar$  - частота.

Волна распространяется в том же направлении, что и частица, и описывает её волновые свойства.



# Групповая скорость волны де Бройля

**Групповая скорость световой волны:**  $v_{\text{гр}} = \partial\omega / \partial k$

**Групповая скорость волны де Бройля:**

$$v_{\text{гр}} = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{\partial(\hbar\omega)}{\partial(\hbar k)} = \frac{\partial E}{\partial p}$$

Дифференцируя формулу связи между энергией  $E$  и импульсом  $p$  релятивистской частицы:  $E^2 = p^2 c^2 + (m_e c^2)^2$

, получим  $v_{\text{гр}} = pc^2 / E$

$$E = m_e \gamma c^2 \quad \text{где } p = m_e \gamma v,$$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Учитывая, что

для групповой скорости  $v_{\text{гр}} = v$  находим

**Групповая скорость волны де Бройля равна скорости движения частицы.**

**Волна де Бройля не является волной, движущейся вместе с частицей.**

**Волна де Бройля и частица – это один и тот же объект !**

Понятие длины волны де Бройля характеризует этот объект с волновой точки зрения, а понятие импульса определяет свойства объекта как частицы, и эти два понятия связаны соотношением  $k = 2\pi/\lambda_B$   $\lambda_B = \frac{2\pi}{p}$

, где

$$E_K \ll mc^2 \quad E_K = p^2 / 2m$$

Для частицы с кинетической энергией  $\frac{2\pi}{p} = \frac{2\pi}{\sqrt{2mE_K}}$  и

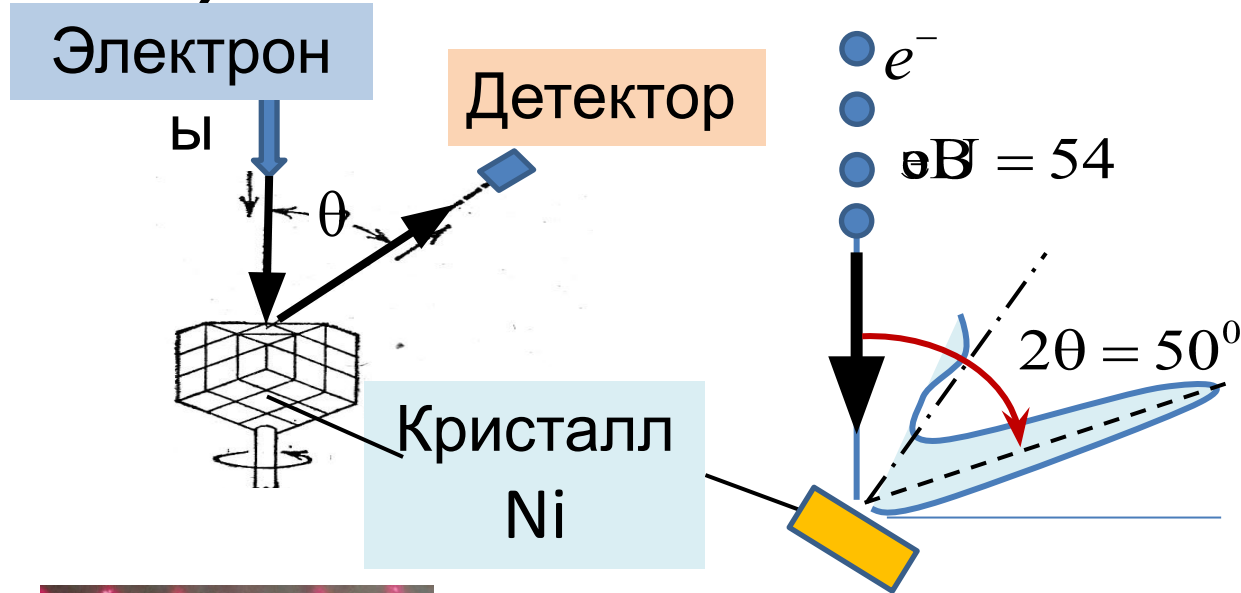
длина волны де Бройля равна

$$\lambda_B^* = \frac{2\pi}{\sqrt{2mE_K} \sqrt{1 + \frac{E_K}{2mc^2}}} = \frac{\lambda_B}{\sqrt{1 + \frac{E_K}{2mc^2}}}$$

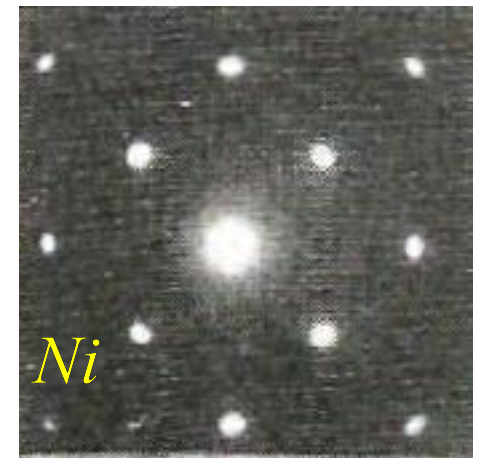
Для релятивистской частицы:

# Эксперименты по дифракции микрочастиц

Опыты К. Дэвиссона и Л. Джермера (Америка, 1927 г.)



Дифракция лазерного света ( $\lambda = 632,8 \text{ нм}$ ) на прямоугольной проволочной сетке  $d = 30 \text{ мкм}$

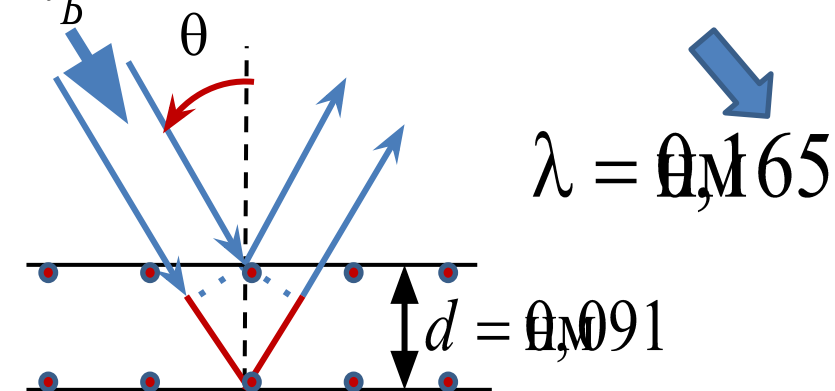


Картина дифракции электронов на монокристалле

## Отражение электронов от атомных плоскостей в кристалле.

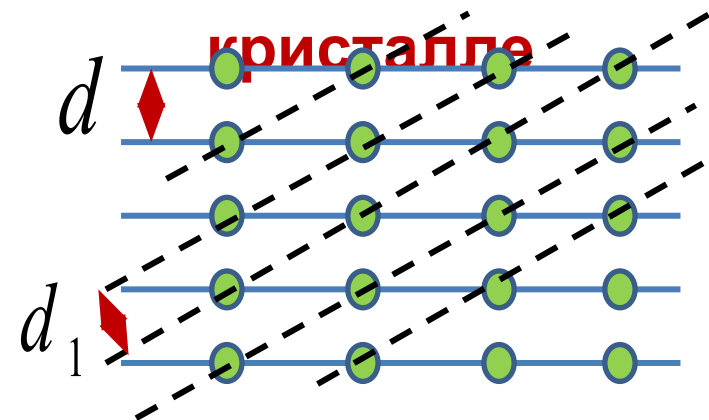
Атомная структура кристаллов была известна из опытов по дифракции рентгеновских волн. Еще в 1912 – 1913 гг. английские физики Г. Брэгг и Л. Брэгг (отец и сын) предложили вместо сложной дифракции от множества атомов рассматривать отражение волн от параллельных атомных плоскостей в кристалле и **интерференцию**

отраженных волн.  $2d \sin \theta = n\lambda$



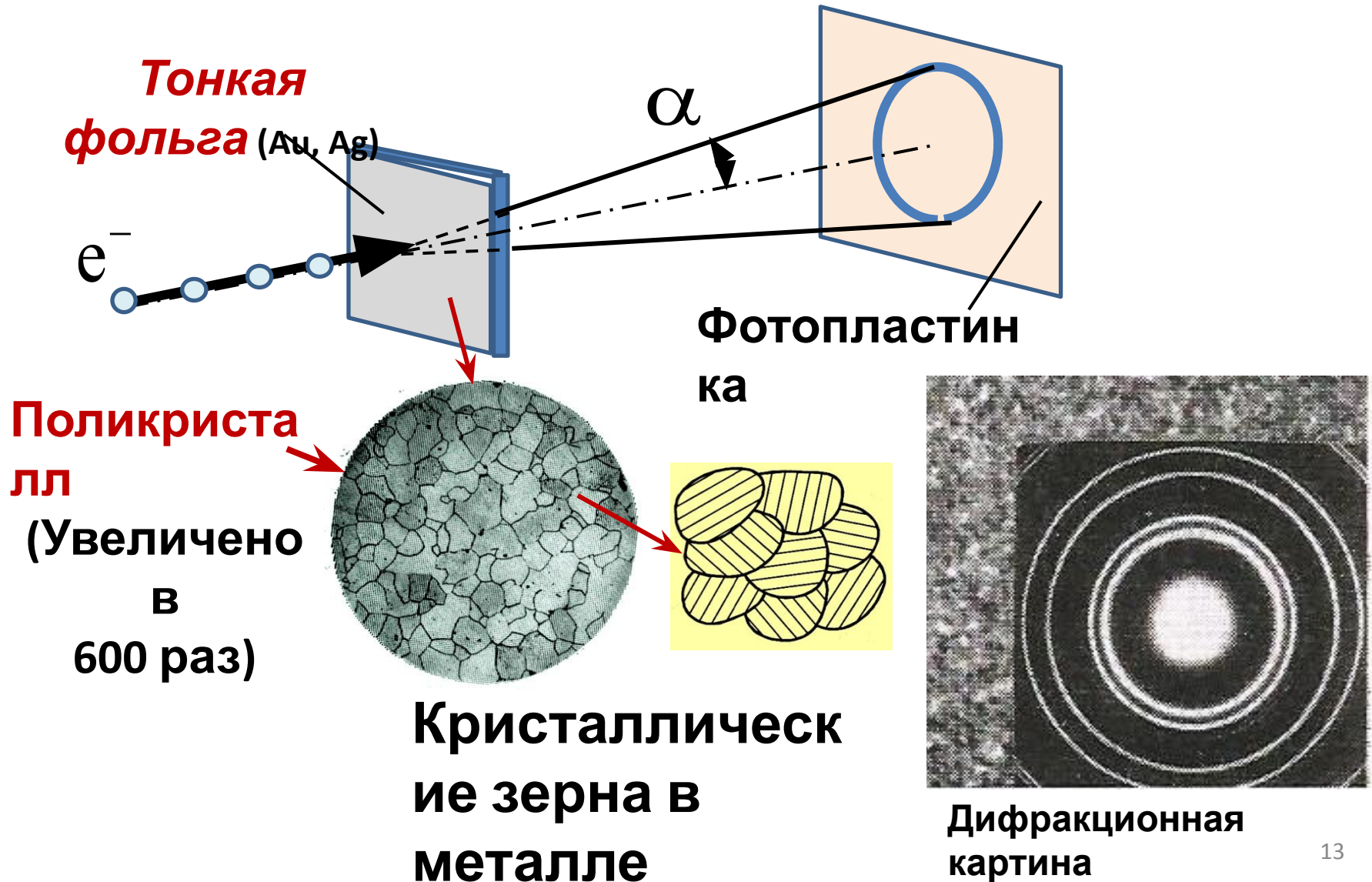
$$\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e eU}} = 0,166$$

**Атомные  
плоскости в  
кристалле**



Опыты Дж.П. Томсона (Англия, 1927 г.);

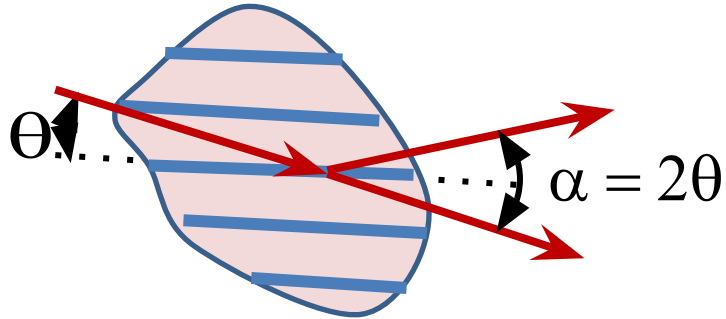
П.С. Тарковского (СССР, 1928 г.)





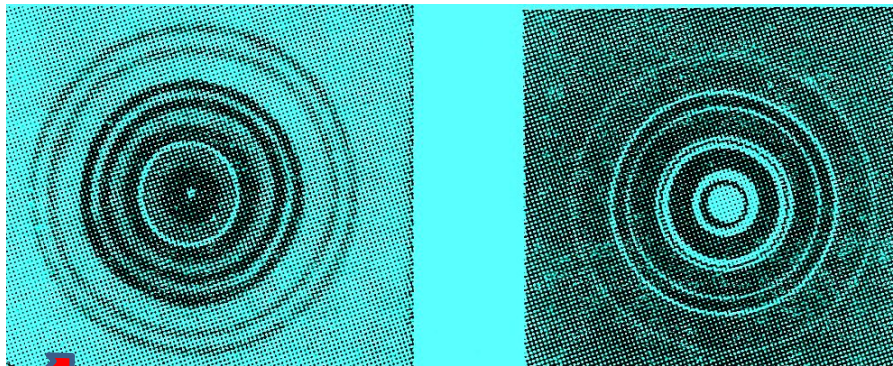
# Дифракция электронов в поликристаллической

Вольтаге использовались быстрые электроны с энергией от 17 кэВ до 57 кэВ



Кристаллит  
(«зерно»)

При отражении от атомных плоскостей кристаллитов, которые по разному повернуты относительно оси падающего электронного пучка, но угол остается неизменным, образуется конус дифракции с углом раскрытия  $2\theta$ . Сечение этого конуса фотопластинкой представляет собой окружность.



Дифракция  
рентгеновского  
излучения

Отражение от разных атомных плоскостей (разные  $d$ ) при различных порядках  $n$  интерференции дает на фотопластинке

систему колец.  
Дифракция  
электронов

# Дифракция одиночных электронов

Группа физиков во главе с В.А.Фабрикантом в СССР выполнила в 1949г **дифракционные исследования с очень слабым электронным пучком.**

В этих опытах интервал времени между двумя последовательными прохождениями электронов через поликристалл в 81 раз превышал время, затрачиваемое одним электроном на прохождение всего прибора. Таким образом, взаимодействие электронов друг с другом полностью исключалось, и электроны дифрагировали поодиночке.



*Дифракция  
одиночных  
электронов*

***Волновые свойства присущи  
отдельному электрону.***



«Некоторые исследователи приступили к выполнению опыта за который ещё несколько лет назад их бы посадили в психиатрическую больницу для наблюдения за их душевным состоянием. Но они добились успеха!»

**Эрвин Шредингер о**

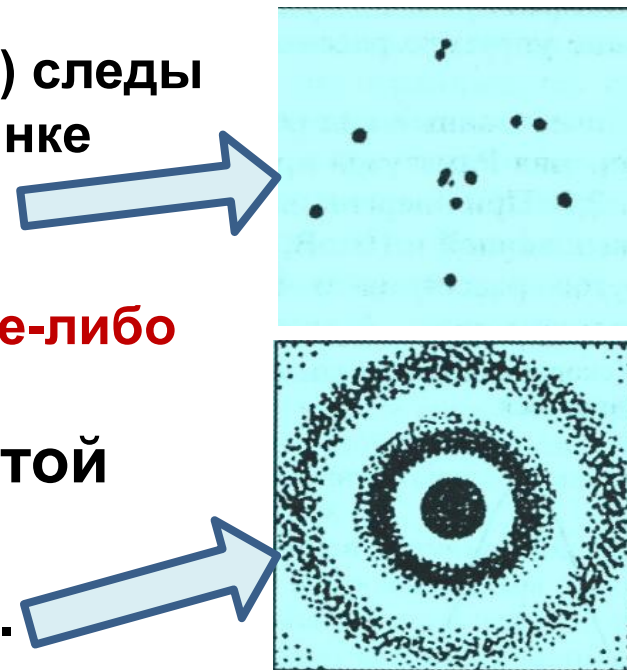
**первых  
опытах по дифракции  
электронов**

Объяснить результаты опытов по дифракции невозможно без понятия **вероятности** и **волновых свойств электрона**.

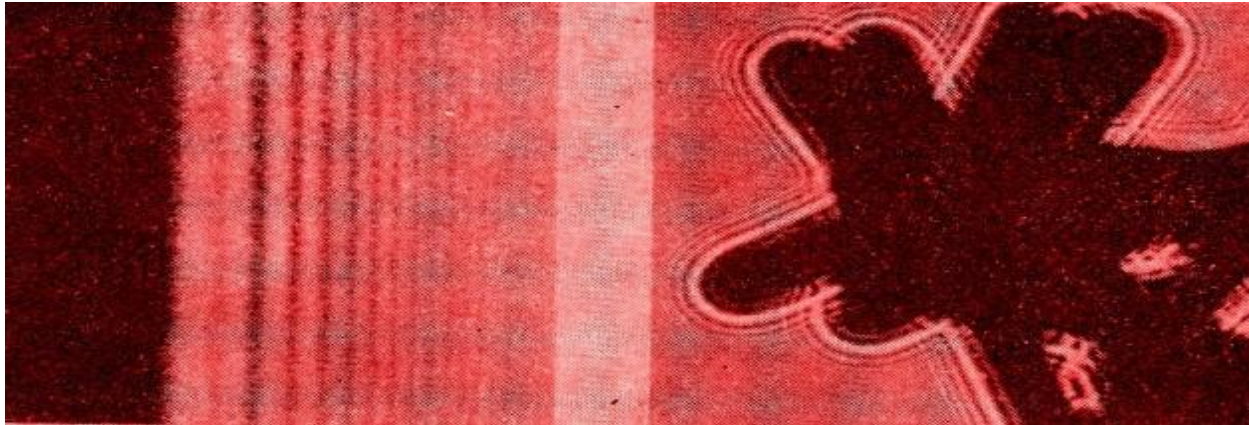
При небольшом числе электронов (при малой длительности эксперимента) следы от попадания электронов на фотопластинке распределены достаточно хаотично.

Можно говорить только о **вероятности** попадания отдельного электрона в какое-либо место **фотопластинки**.

Информацию о распределении этой вероятности дает дифракционная картина.

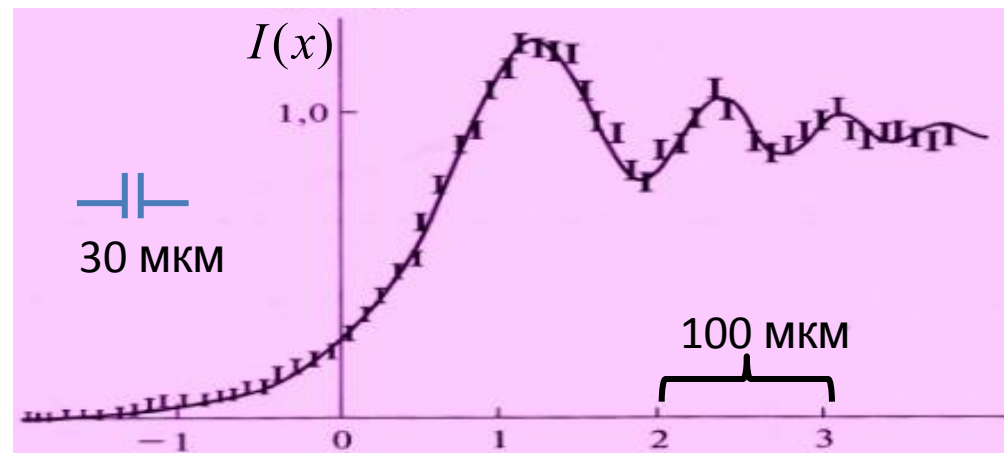
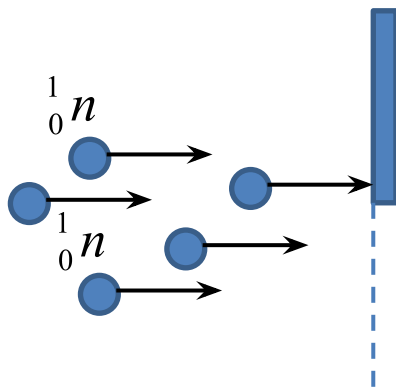


# Эксперименты, похожие на опыты по оптической дифракции



*Дифракция электронов на краю небольшого кристалла.*

Распределение интенсивности **нейтронов** в результате дифракции на краю поглощающего экрана.





## О новой механике движения микрочастиц – квантовой механике

На заре квантовой механики (1920-е годы) физики пытаются найти законы, определяющие движение микрочастицы (электрона) в различных условиях, не прибегая к моделям внутренней структуры.

Так например, **электрон** в дифракционных экспериментах с поликристаллической фольгой **с некоторой вероятностью меняет свое направление движения после фольги**, но фиксируется на фотопластинке как **точечная частица**.

**Задача:** Выяснить особенности физического и математического описания движения микрообъекта, совмещающего в себе каким-то образом корпускулярные и **волновые** свойства.

# Уравнение Шредингера

Еще до начала экспериментов по дифракции электронов физики-теоретики **Вернер Гейзенберг** в Германии и **Эрвин Шредингер** в Австрии начали разрабатывать **новую механику**, позволяющую рассчитывать волновое движение не только свободных микрочастиц, как это было у де Бройля, но и **частиц, находящихся во внешнем потенциальном поле.**

В 1926 г. Шредингер получил свое знаменитое уравнение для **волновой (пси-) функции** и применил его к атому водорода, в котором единственный электрон находится в электрическом поле протона.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(x, y, z) \Psi = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad \text{где} \quad \nabla = e_x \frac{\partial}{\partial x} + e_y \frac{\partial}{\partial y} + e_z \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\nabla^2 = \nabla \nabla \rightarrow \nabla^2 \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}$$

# Принцип дополнительности Н. Бора.

## Соотношения

### неопределенностей

1927г.

Нильс Бор в Дании сформулировал

**принцип дополнительности в квантовых явлениях,**

а мысленные эксперименты Вернера Гейзенберга в Германии привели к **соотношениям неопределенностей**, которые являются математическим воплощением общей идеи **дополнительности в квантовых явлениях.**

**Принцип дополнительности Бора:** В области квантовых явлений

наиболее общие физические свойства какой-либо системы описываются

с помощью **дополняющих друг друга пар независимых**

**переменных**

Таковыми переменными являются: **импульс – координата**; каждая из которых может быть лучше определена только за **энергия – время**; **частица – волна**; **непрерывность – дискретность** – **счет**

«Физическая картина явления и его математическое описание **дополнительны.**

Создание физической картины требует пренебрежения деталями и уводит от математической точности. И наоборот, попытка точного математического описания

# Соотношения неопределенностей.

## Примеры мысленных экспериментов.

**1** Для определения положения электрона надо осветить его и посмотреть

в микроскоп. В этом случае неопределенность в координате порядка  $\lambda$

длины волны света, то есть  $\Delta x \approx \lambda$ . Для уточнения положения электрона

надо уменьшать  $\lambda$ . Но свет передает электрону импульс. Чтобы уменьшить  $\lambda$ , надо

уменьшить передаваемый импульс надо ослабить интенсивность света так, чтобы с электроном сталкивался один фотон с импульсом

**2** Частица пролетает через отверстие в экране, открываемое на время  $\tau$ . Момент взаимодействия частицы с краями отверстия

имеет неопределенность  $\Delta t \approx \tau$ . Неопределенность координаты частицы в направлении осей

равна  $\Delta x = v \cdot \Delta t$ , где  $v$  – скорость частицы. Предполагается, что скорость частицы мало

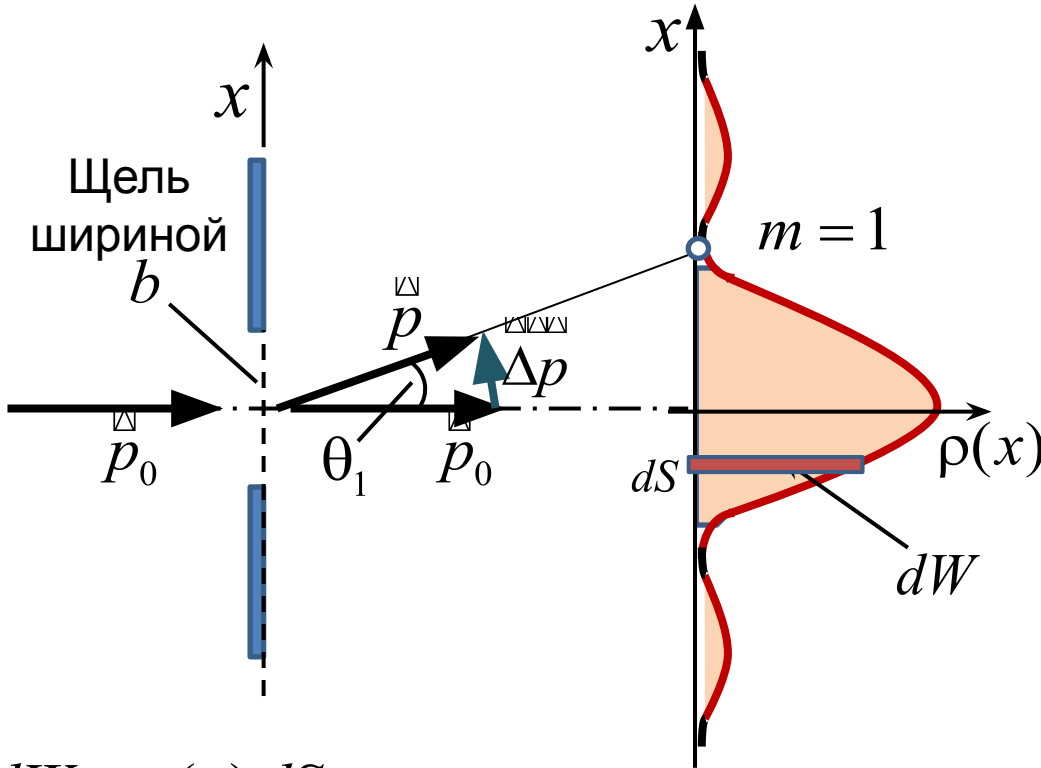
изменилась при прохождении отверстия. Из соотношения неопределенностей находим неопределенность импульсе

$$\Delta E = \Delta(mv^2/2) \approx v \Delta p_x \quad \Delta E \cdot \Delta t \gtrsim 2\pi\hbar$$

Учитывая, что, получаем



# Дифракция частиц на щели и соотношение неопределенностей



$dW = \rho(x) dS$  – вероятность обнаружить частицу на площадке  $dS$  экрана наблюдения

$$b \sin \theta_m = m\lambda, \quad m = 1$$

$$\Delta x = b, \quad \Delta p \approx \Delta p_x, \\ \Delta p_x \approx p_0 \sin \theta_1$$

$$\sin \theta_1 = \lambda/b = \lambda_{Бр}/\Delta x$$

$$\lambda_{Бр} = 2\pi\hbar/p_0$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \approx 2\pi\hbar$$

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim 2\pi\hbar$$



# Соотношения неопределенностей В.

## Гейзенберга



1) Координатная ось  $x$  в полученных соотношениях неопределенностей

:  $\Delta x \cdot \Delta p_{x\sim} > 2\pi\hbar$  м не в  $\Delta y \cdot \Delta p_{y\sim} > 2\pi\hbar$  / они  $\Delta z \cdot \Delta p_{z\sim} > 2\pi\hbar$  я осей  $y$   $z$  и

При получении этих соотношений использовались некоторые упрощающие предположения, и достаточно произвольные критерии для оценки



2) неопределенностей. Поэтому их следует считать приближенными, полученными методами квантовой физики, исходя из того, что частица

находится в определенном состоянии с волновой функцией  $\Psi$

которая является решением уравнения Шредингера.

**Пример.** Если под неопределенностями координаты и импульса понимать их среднеквадратичные отклонения от средних величин, то

$$\Delta x_{кв} \cdot \Delta p_{x,кв} \geq \hbar/2$$

Соотношения неопределенностей – частный случай и конкретное выражение принципа дополнительности Н. Бора.

# Следствия из соотношений

1 **неопределенностей**  
Координата и импульс не могут **одновременно** иметь определенные значения.

2 Для микрочастиц **теряется понятие траектории**

**движения:**  $\Delta x = 0$   $\Delta p_x \rightarrow \infty$   
например, если точно известна координата ( ), то

Несмотря на отсутствие траектории, движение частиц происходит

**по определенному закону, который проявляется в неизменности**  
Н.Бор часто вспоминал, как в 50-х годах к нему после лекции подошел студент и спросил: «Неужели действительно были такие **испытания, которые думали, что электрон в атоме вращается по орбите**»

3 Микрочастица не может находиться в состоянии полного покоя: если  $\Delta x = a$   $\Delta p_x \geq \hbar/2a$   
положение частицы ограничено областью , то

# Волновое уравнение

**1** Волновое уравнение для электромагнитных волн в одномерном случае, когда напряженность электрического поля  $\vec{E}$  зависит только от координаты  $x$  и времени  $t$ , имеет

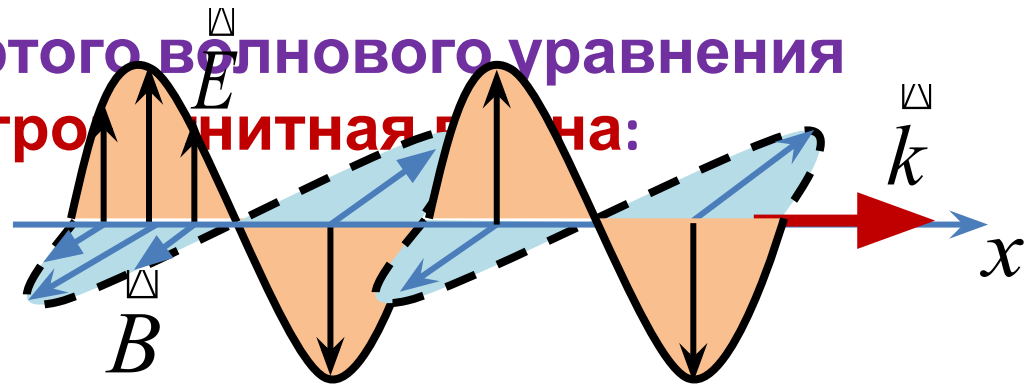
вид:

$$\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}, \quad v = 1/\sqrt{\epsilon_0 \epsilon \mu_0 \mu} = c/n,$$

где  $v$  - фазовая скорость волны,  $n$  - показатель преломления среды,  $c$  - скорость света в вакууме.

Частным решением этого волнового уравнения является плоская электромагнитная волна:

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i(kx - \omega t)}$$



# Волновое уравнение Шредингера

В 1926 г. австрийский физик-теоретик Эрвин Шредингер разработал теорию движения микрочастиц, в основу которой положил уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + U(x) \Psi = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Одномерное движение:  $\Psi = \Psi(x, t)$

**Движение в трехмерном**

**пространстве;**

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U(x, y, z) \Psi = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t},$$

где  $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$ ;

$$\nabla = e_x \frac{\partial}{\partial x} + e_y \frac{\partial}{\partial y} + e_z \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\nabla^2 = \nabla \nabla \rightarrow \nabla^2 \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}$$

# Вероятностный смысл $\Psi$ -функции

Почти вся теория Шредингера заключена в его волновом уравнении, если мы знаем, как интерпретировать волновую функцию .

В том же 1926 г. немецкий физик – теоретик Макс Борн предложил статистический (вероятностный) смысл  $\Psi$ -функции :

○  $dW = \Psi^* \Psi \cdot dV = |\Psi|^2 dV$  - вероятность  $dW$  обнаружения частицы в элементарном объёме  $dV$

○ Величина  $\rho = dW/dV = |\Psi|^2$  - плотность

вероятности

○ Функцию  $\Psi$  называют амплитудой вероятности

# Вероятность в классической физике

В классической физике статистические методы, использующие понятие вероятности, рассматриваются как **вспомогательные**, и применяются в тех случаях, когда **недостаточно знаний о подробностях того или иного события**.

Так обстоит дело, например, в **кинетической теории газов**, где предполагается, что каждая частица во всякий данный момент времени имеет определенное значение скорости.

Но частиц много, уследить за всеми невозможно, и **единственный реальный путь** заключается в том, чтобы **найти закономерности в этом хаотичном движении** многих частиц – вычислить вероятность распределения частиц по скоростям.

# Вероятность в квантовой физике

**В квантовой физике**, согласно М.Борну, ситуация совсем иная. Электронам, протонам, фотонам и другим частицам присущи волновые свойства.

Нет смысла, например, говорить о локализации световой волны после дифракции на щели или траектории фотонов.

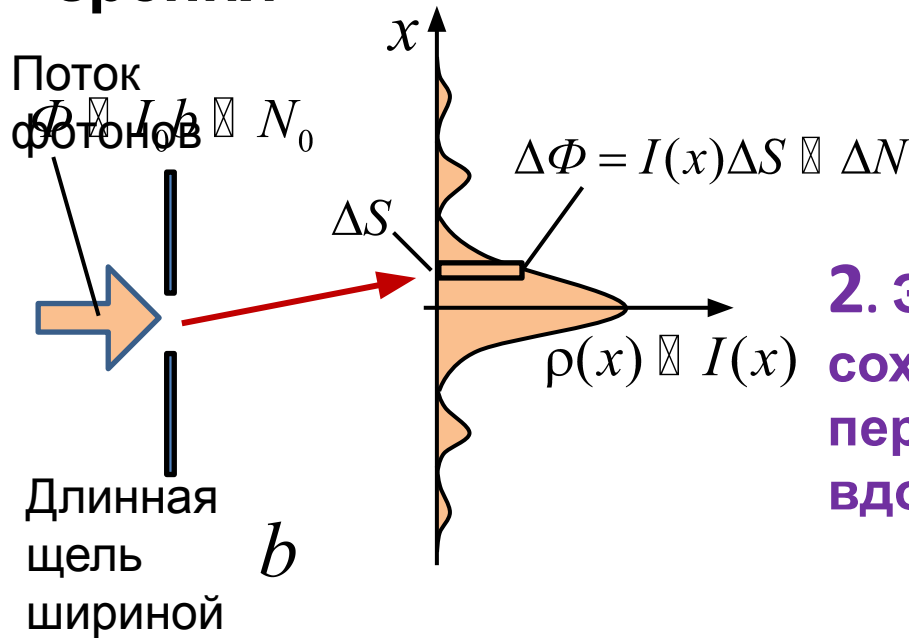
Фотон может попасть в любое место экрана наблюдения с той или иной вероятностью. Это касается и микрочастиц, для описания движения которой **понятие определенной и непрерывной траектории оказывается неприменимым.**

**При рассмотрении процессов, происходящих в микромире, неизбежно приходится использовать понятие**

**волны вероятности**



# Дифракция света на щели с корпускулярной точки зрения



1. Число фотонов, прошедших через щель в единицу времени в расчете  $N_0 \approx I_0 b$

2. Это же число фотонов по закону сохранения энергии перераспределится вдоль дифракционной картины:  
 $N_0 \approx \int_S I(x) \Delta S$

3. Вероятность  $\Delta W$  попадания числа фотонов  $\Delta N$  в область дифракционной картины определяется как  $\Delta W = \Delta N / N_0 \approx I(x) \Delta S / N_0$

4. Плотность

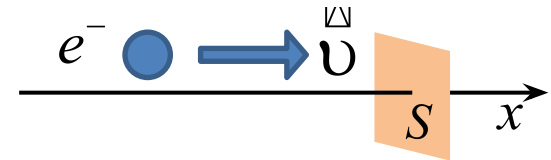
$$\rho = \Delta W / \Delta S \approx I(x) \approx |E|^2$$

вероятности:

5. Дифракция одного фотона ( $N_0 = 1$ ). Распределение плотности вероятности играет ту же роль, что и распределение интенсивности  $I(x) \approx |E|^2$

# О вероятности обнаружения электрона, который свободно движется в направлении

оси  $X$



$$\Psi(x,t) = A \left[ \cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t) \right],$$

$$\Psi(x,t) = A \cdot e^{i\left(\frac{p}{\hbar}x - \frac{E}{\hbar}t\right)} \rightarrow \rho = \Psi^* \Psi = |\Psi|^2 = |A|^2$$

**Почему нельзя представить плоскую волну де Бройля**

$$\Psi(x,t) = A \cos(kx - \omega t)$$

**в вещественной форме**  
В этом случае  $\rho = \Psi^2 = A^2 \cos^2(kx - \omega t)$ . Если

наблюдатель

$$\rho = 0$$

находится в любой из плоскостей, где  $\rho = 0$ , он никогда не

зафиксирует летящую навстречу ему частицу, что

# Уравнение Шредингера в символическом представлении

## 1. Об идее М. Борна и операторах в математике.

Макс Борн в том же 1926 году высказал идею, суть которой состояла в сопоставлении классической физической величине некоторого линейного оператора,

обладающего определенными свойствами.

В математике оператором называют правило, с помощью которого одной функции  $f(x)$  сопоставляется другая функция  $F(x)$ .

Символически это правило записывается так:

Пример. Пусть функция  $f(x) = \sin ax$ , где оператор обозначен «шляпкой». сопоставим функцию  $F(x) = a \cos ax$  с помощью оператора дифференцирования  $\hat{D} = \partial/\partial x$ .

$$F(x) = \hat{D}f(x) \rightarrow a \cos ax = \frac{\partial}{\partial x} \sin ax$$

## 2. Уравнение

### Шредингера

- Классический закон сохранения энергии :

$$\frac{p^2}{2m} + U(x) = E \quad (\text{кинетическая энергия} + \text{потенциальная энергия} = \text{полная энергия})$$

- В соответствии с идеей М. Борна введем операторы,  $\Psi$

которые действуют на волновую функцию  $\Psi$

$$p^2 \rightarrow \hat{p}^2 = \hat{p} \cdot \hat{p}; \quad U(x) \rightarrow U; \quad \frac{p^2}{2m} \Psi(x) + U \Psi(x) = E \Psi(x); \quad E \rightarrow \hat{E}$$

- Тогда можно записать квантовое уравнение

$$\frac{1}{2m} \hat{p}(\hat{p}\Psi) + U\Psi = \hat{E}\Psi,$$

где потенциальная энергия – функция координат, ей соответствует оператор умножения  $\hat{U}\Psi = U\Psi$

# Операторы импульса и энергии

Выясним вид операторов, соответствующих плоскую волну де Бройля, которая является решением уравнения Шредингера в случае  $\Psi(x, t) = Ae^{i(p_x x - Et)}$

Найдем производную этой функции по

координате  $x$  :  $\frac{\partial}{\partial x} \Psi = \frac{1}{i\hbar} p_x \Psi, \rightarrow \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi = p_x \Psi, \rightarrow \hat{p}_x \Psi = p_x \Psi \Rightarrow \hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

Оператор импульса  $\hat{p} = p_x \hat{e}_x + p_y \hat{e}_y + p_z \hat{e}_z$

и квадрата

импульса:  $\hat{p} = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \hat{e}_x + \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y}\right) \hat{e}_y + \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial z}\right) \hat{e}_z = -i\hbar \nabla$ ;

где  $\nabla$  – градиент (оператор «набла»)

$\hat{p}^2 = \hat{p}_x \hat{p}_x + \hat{p}_y \hat{p}_y + \hat{p}_z \hat{p}_z = -\hbar^2 \nabla^2$

Дифференцируя волну де Бройля по времени.

$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

При таких операторах квантовое уравнение в символической форме является уравнением Шредингера

$\hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U\right) -$

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

где

оператор Гамильтона (оператор полной энергии).