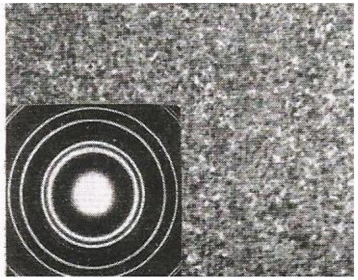
 

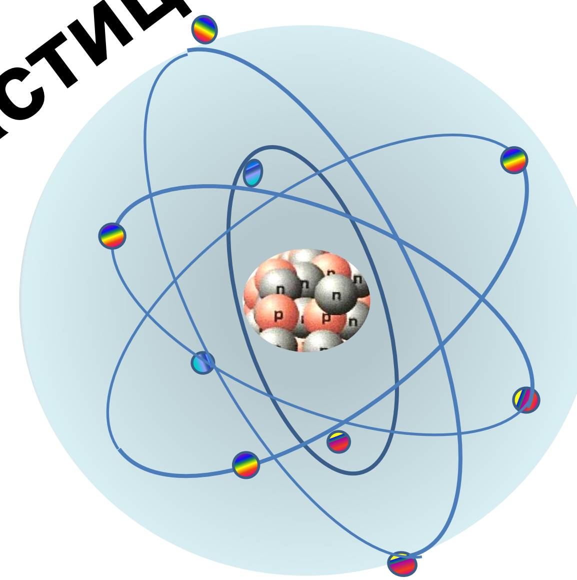
ИФПМ.
Кафедра обшей
физики.
Л.В.В.

Квантовая физика микрочастиц

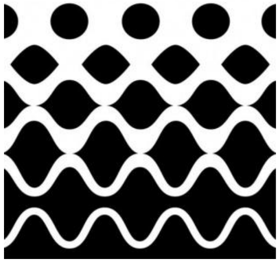
Дифракция электронов

Волновые свойства частиц

Понятие вероятности обнаружения частицы



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



Корпускулярно-волновой дуализм

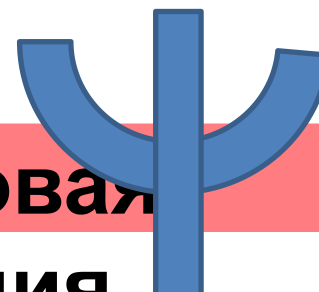
Корпускулярно-волновой дуализм электромагнитного излучения

Фотоны.

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

- Гипотеза Луи де Бройля о волновых свойствах микрочастиц

Дифракция микрочастиц



Волновая функция

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

Уравнение Шредингера

Ф о т о н

Свет и любое электромагнитное излучение – поток фотонов.

Корпускулярные свойства излучения:

1. *Энергия и импульс фотонов:* $\varepsilon = \hbar\omega$ $\quad \vec{p} = \hbar\vec{k}, \quad p = \dfrac{\hbar\omega}{c} = \dfrac{2\pi\hbar}{\lambda}$

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

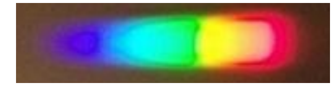
Фотон всегда движется со скоростью света $c = 3\cdot 10^8$ *м/с*

(в любой системе отсчета) и не может находиться в состоянии покоя.

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

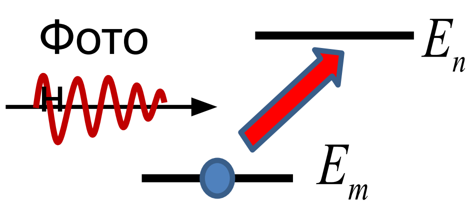
Частный случай релятивистского соотношения для частицы массы m_0: $E = \sqrt{p^2c^2 + (m_0c^2)^2}$

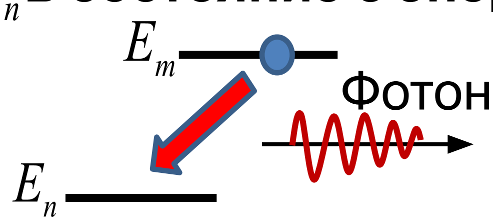
4. Фотон – стабильная элементарная частица, время жизни которой определяется взаимодействием с



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

Поглощение





Испускание

6. Интенсивность светового монохроматического пучка (средняя плотность потока энергии электромагнитного излучения)

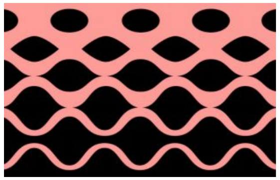
$$I_\omega = \langle w\rangle \cdot c = \hbar\omega\cdot\langle n_\Phi\rangle\cdot c = \hbar\omega\cdot j_\Phi$$

где $j_\Phi = \langle n_\Phi\rangle \cdot c$ - плотность потока фотонов

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

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

7. В квантовой физике отсутствует наглядный образ фотона.



Корпускулярно – волновой дуализм электромагнитного излучения

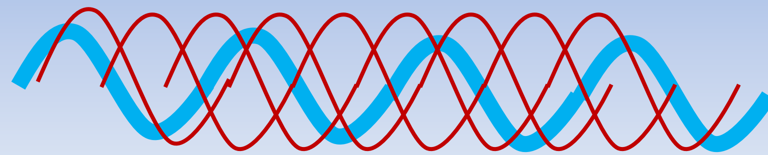
Такие явления, как **интерференция, дифракция, поляризация** света, были объяснены, исходя из представлений о **волновой природе света**: **свет – это распространяющиеся в пространстве электромагнитные волны.** Световая волна **не локализована** в пространстве. Объемная плотность энергии электромагнитной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

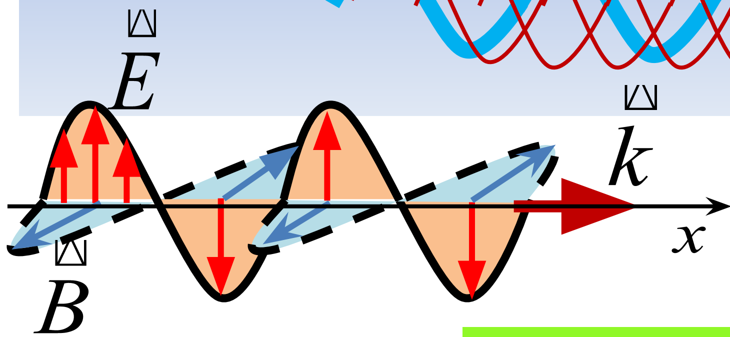
В явлениях взаимодействия с веществом свет ведет себя как **поток частиц – фотонов**, обладающих энергией $\varepsilon = \hbar\omega$ и импульсом $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, $p = 2\pi\hbar/\lambda$ (фотоэффект, тепловое равновесное излучение, эффект Комптона и др.).

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





Волн
ы

Волновые свойства: ω, λ

?

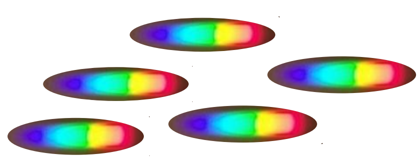
Л. де БРОЙЛЬ

Электро-магнитное излучение

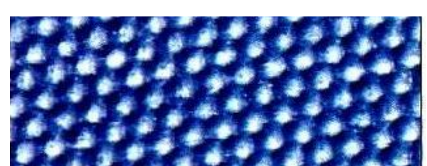
Частицы вещества:

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

**Корпускулярн
ые свойства:** $E, \vec{p}$



Фотон
ы



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 должны проявлять волновые свойства.

Свет с длиной волны λ и частотой ω ведет себя как поток частиц (фотонов)

с импульсом $p = 2\pi\hbar/\lambda$

и энергией $E = \hbar\omega$

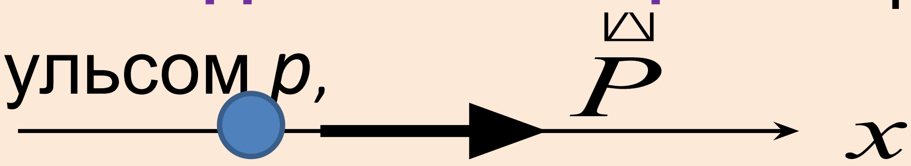
Частице с импульсом $\vec{p}$ и энергией E соответствует некий волновой процесс

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:**

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

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: $\mathrm{v}_{\text{гр}} = \partial\omega / \partial k$

Групповая скорость волны де Бройля:

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

Дифференцируя формулу связи между энергией ***E*** и импульсом ***p*** релятивистской частицы: $E^2 = p^2c^2 + (m_e c^2)^2$, получим $\mathrm{v}_{\text{гр}} = pc^2 / E$

Учитывая, что $E = m_e\gamma c^2$, где $p = m_e\gamma \mathrm{v}$, $\gamma = \dfrac{1}{\sqrt{1-\mathrm{v}^2/c^2}}$

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

Групповая скорость волны де Бройля равна скорости движения частицы v.

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

$$\lambda_Б = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

, где $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, $k = 2\pi/\lambda_Б$

Для частицы с кинетической энергией $E_K \ll mc^2$ или $E_K = p^2/2m$

длина волны де Бройля равна

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_K}}$$

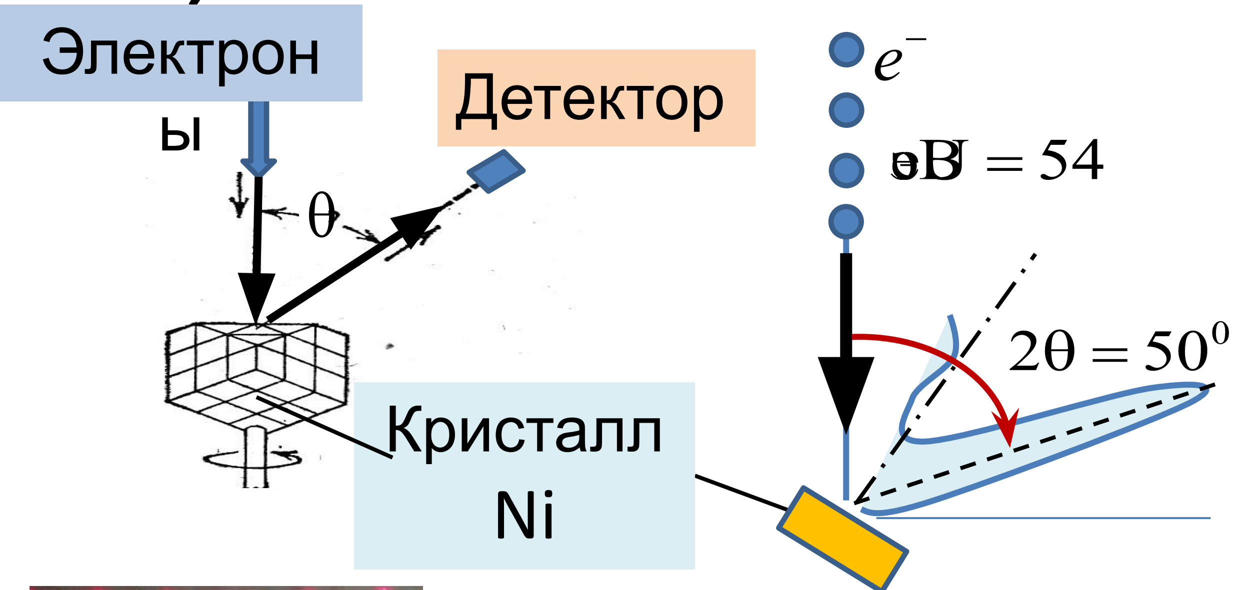
и

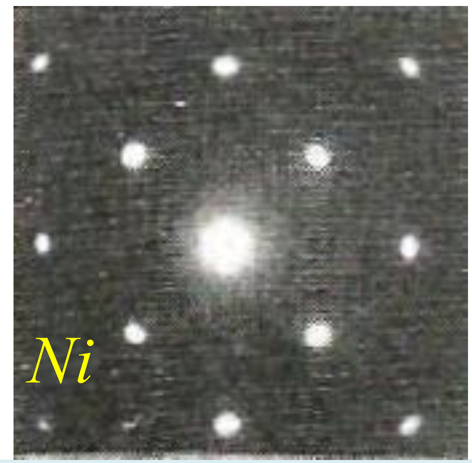
Для релятивистской частицы:

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

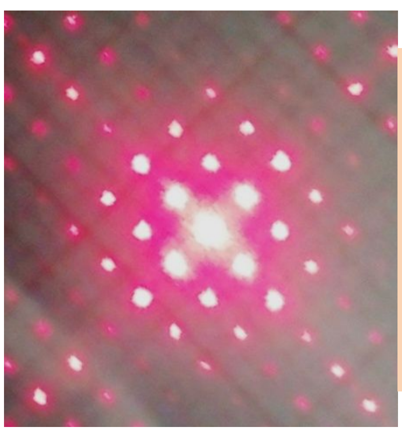
Эксперименты по дифракции микрочастиц

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





Картина дифракции электронов на монокристалле



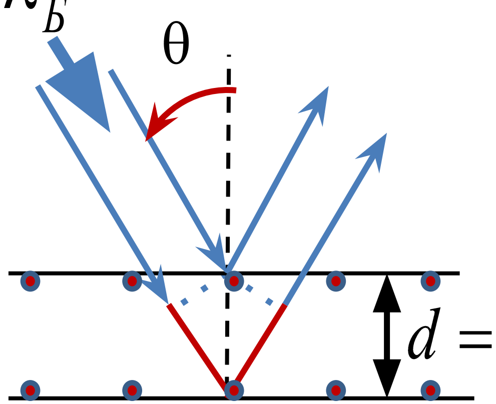
Дифракция лазерного света ($\lambda = 632,8\,нм$) на прямоугольной проволочной сетке *d* = 30 мкм

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.

$$2d\sin\theta = n\lambda$$

$\lambda_Б$

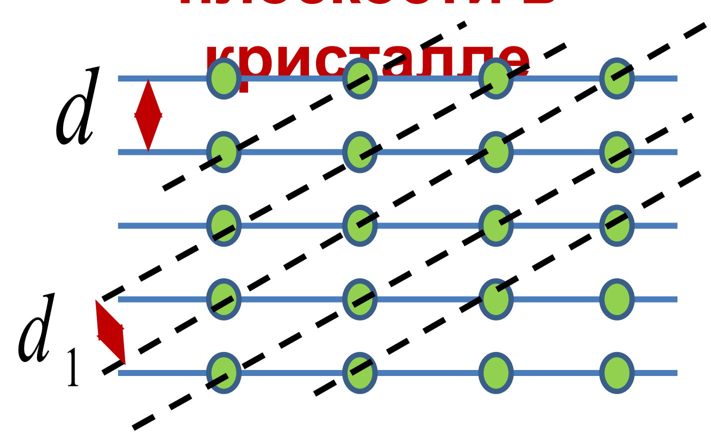


$$\lambda = 0{,}165 \text{ нм}$$

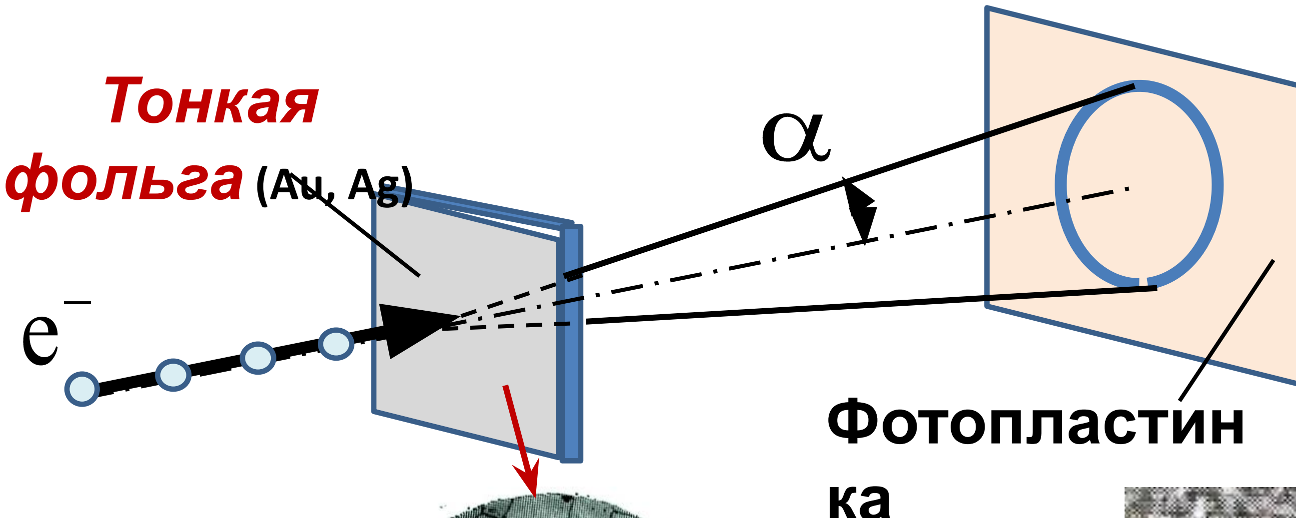
$$d = 0{,}091 \text{ нм}$$

$$\lambda_Б = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e eU}} = 0{,}166 \text{ нм}$$

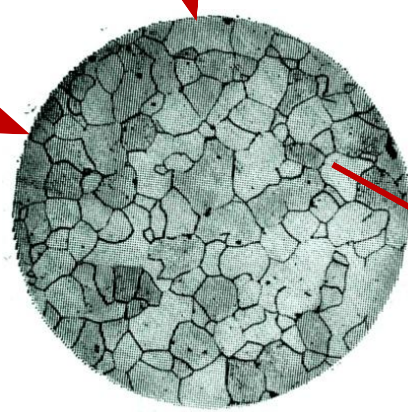
Атомные плоскости в кристалле

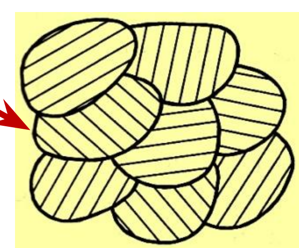


Опыты Дж.П. Томсона (Англия, 1927 г.); П.С. Тарковского (СССР, 1928 г.)

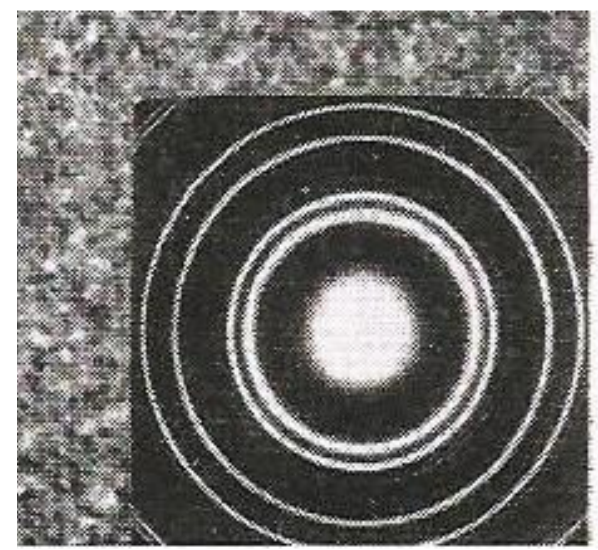


Поликристалл (Увеличено в 600 раз)





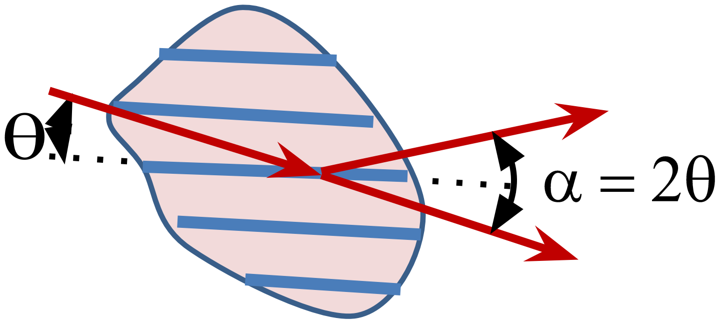
Кристаллические зерна в металле



Дифракционная картина

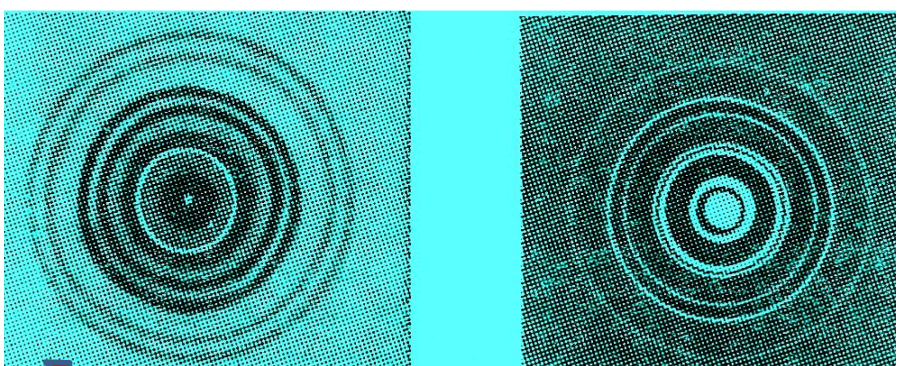
Дифракция электронов в поликристаллической фольге

В опытах 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 θ остается неизменным, образуется конус дифракции с углом раствора $\alpha = 2\theta$. Сечение этого конуса фотопластинкой представляет собой окружность.



Отражение от разных атомных плоскостей (разные *d*) при различных порядках *n* интерференции дает на фотопластинке систему колец.

Дифракция рентгеновского излучения

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

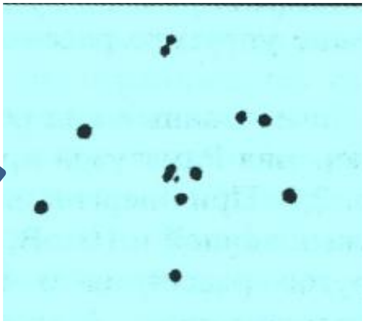
Волновые свойства присущи отдельному электрону.

«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

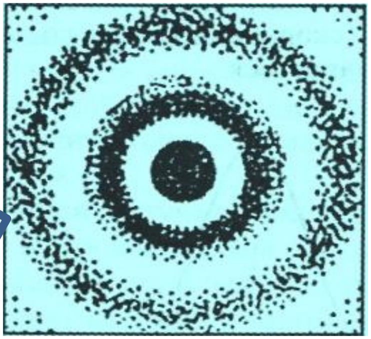
Объяснить результаты опытов по дифракции невозможно без понятия вероятности и волновых свойств электрона.

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

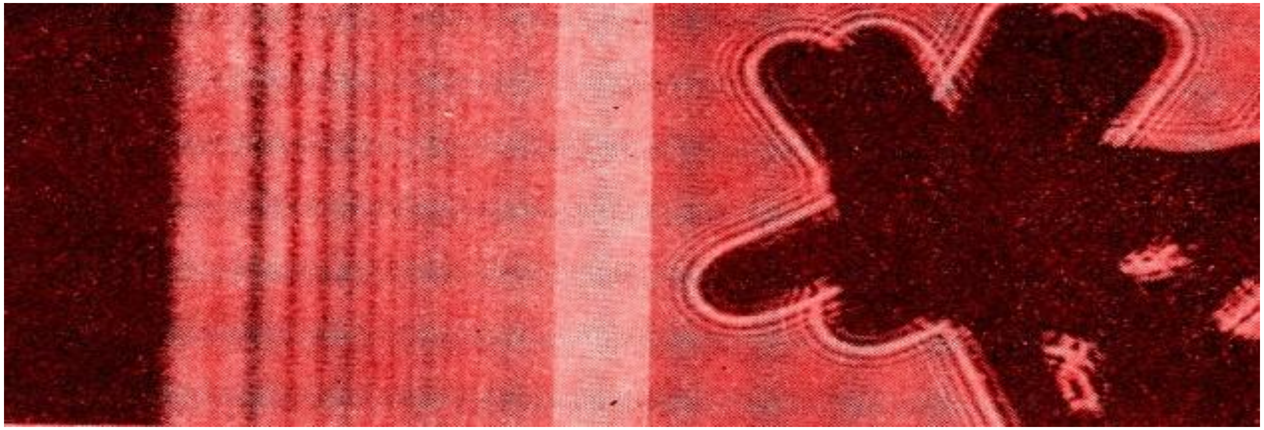


Можно говорить только о вероятности попадания отдельного электрона в какое-либо место *фотопластинки.*

Информацию о распределении этой вероятности дает дифракционная картина.

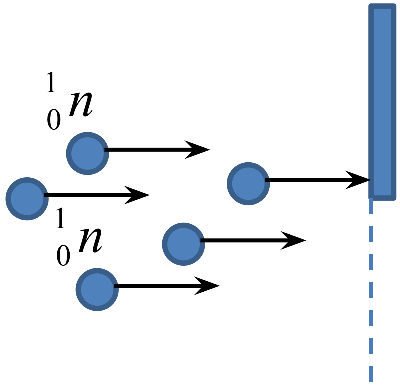


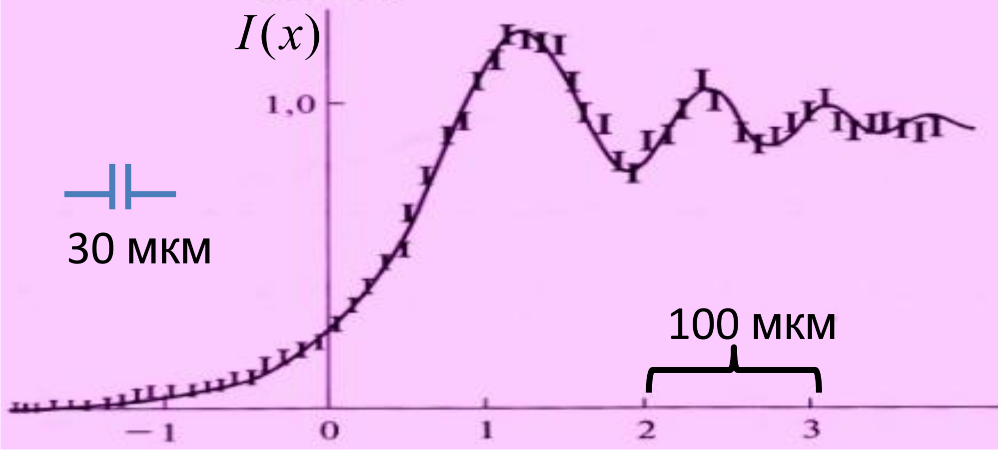
Эксперименты, похожие на опыты по оптической дифракции



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 $\Psi(\vec{r},t)$ и применил его к атому водорода, в котором единственный электрон находится в электрическом поле протона.

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

где

$$\nabla = \vec{e}_x\frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y\frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z\frac{\partial}{\partial z}$$

,

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

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**, каждая из которых может быть лучше определена только за счет уменьшения степени определенности другой.

Такими переменными являются: **импульс – координата**; **энергия – время**; **частица – волна**; **непрерывность – дискретность**;

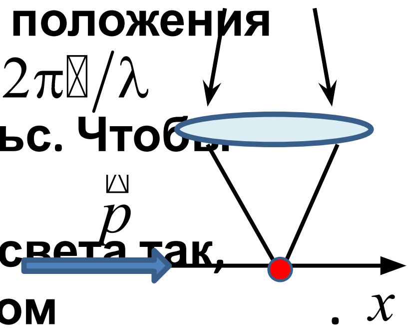
«Физическая картина явления» и его математическое описание дополнительны.

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

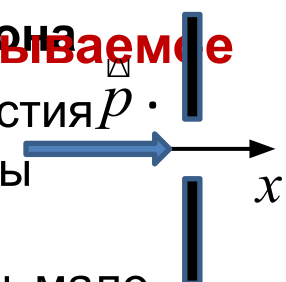
Соотношения неопределенностей.
Примеры мысленных экспериментов.

1 **Для определения положения электрона надо осветить его и посмотреть в микроскоп.** **В этом случае неопределенность в координате Δx порядка длины волны света λ, то есть $\Delta x \sim \lambda$. Для уточнения положения электрона надо уменьшать λ. Но свет передает электрону импульс. Чтобы уменьшить передаваемый импульс надо ослабить интенсивность света так, чтобы с электроном сталкивался один фотон с импульсом $p = 2\pi\hbar/\lambda$. Появляется неконтролируемое изменение импульса электрона $\Delta p_x \gtrsim p = 2\pi\hbar/\lambda$. Заменяя λ на Δx получаем**

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



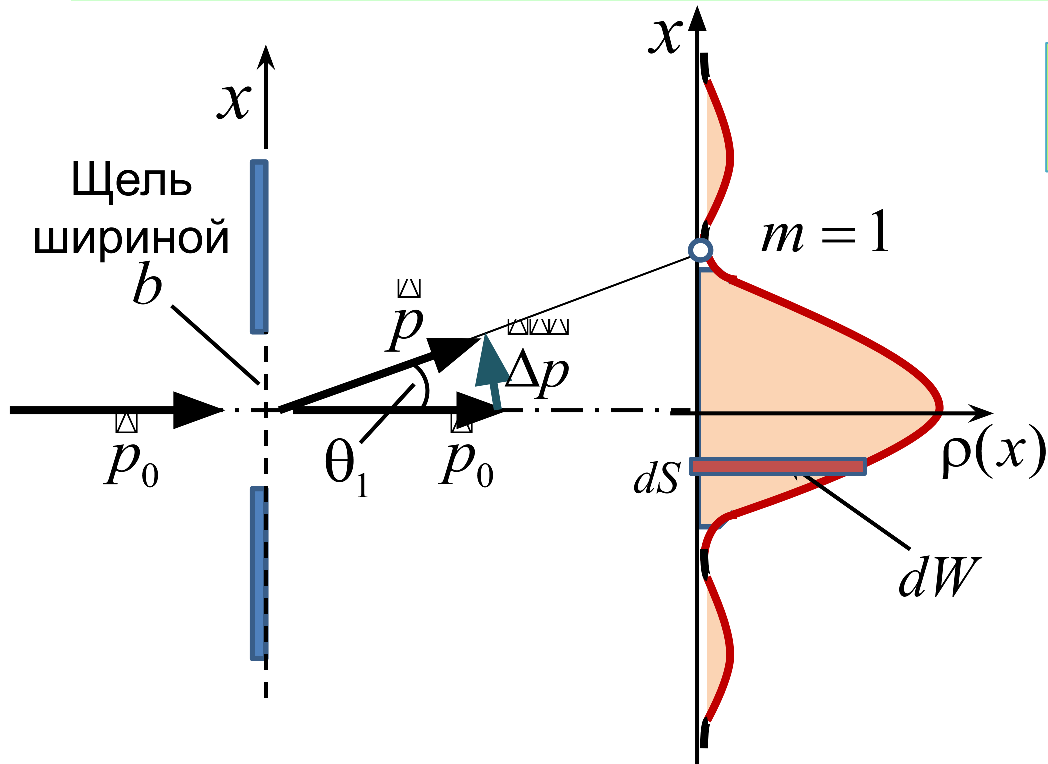
2 **Частица пролетает через отверстие в экране, открываемое на время τ.** Момент взаимодействия частицы с краями отверстия имеет неопределенность $\Delta t \sim \tau$. Неопределенность координаты частицы в направлении оси x равна $\Delta x = \mathrm{v} \cdot \Delta \mathrm{t}$, где v – скорость частицы. Предполагается, что скорость частицы мало изменилась при прохождении отверстия. Из соотношения неопределенностей $\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim 2\pi\hbar$ находим неопределенность в импульсе $\Delta p_x \gtrsim 2\pi\hbar/\Delta x = 2\pi\hbar/\mathrm{v}\Delta t$.



Учитывая, что $\Delta E = \Delta(m\mathrm{v}^2/2) \sim \mathrm{v}\Delta p_x$, получаем

$$\Delta E \cdot \Delta t \gtrsim 2\pi\hbar$$

Дифракция частиц на щели и соотношение неопределенностей



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

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

$$\sin\theta_1 = \lambda/b = \lambda_{Бр}/\Delta x$$
$$\lambda_{Бр} = 2\pi\hbar/p_0$$

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

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

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

Соотношения неопределенностей В. Гейзенберга

1) Координатная ось x в полученных соотношениях неопределенностей [...]м не в[...] они [...]ия осей y и z :

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \gtrsim 2\pi\hbar \qquad \Delta y \cdot \Delta p_y \gtrsim 2\pi\hbar \qquad \Delta z \cdot \Delta p_z \gtrsim 2\pi\hbar$$

При получении этих соотношений использовались некоторые упрощающие предположения и достаточно произвольные критерии для оценки неопределенностей. Поэтому их следует считать приближенными.

2) Есть **соотношения неопределенностей**, которые строго могут получены методами квантовой физики , исходя из того, что частица находится в определенном состоянии с волновой функцией Ψ, которая является решением **уравнения Шредингера**.

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

$$\Delta x_{кв} = \sqrt{\langle(\Delta x)^2\rangle} = \sqrt{\langle(x-\langle x\rangle)^2\rangle} \qquad \Delta p_{кв} = \sqrt{\langle(\Delta p_x)^2\rangle} = \sqrt{\langle(p_x-\langle p_x\rangle)^2\rangle}$$

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 неопределенностей

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

2 **Для микрочастиц теряется понятие траектории движения:**

$\Delta x = 0$ $\Delta p_x \to \infty$

например, если точно известна координата ( ), то .

Несмотря на отсутствие траектории, движение частиц происходит по определенному закону, который проявляется в неизменности результата при повторении опытов в одних и тех же условиях.

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

3 Микрочастица **не может находится в состоянии полного покоя**: если положение частицы ограничено областью , то .

$\Delta x = a$ $\Delta p_x \geq \hbar/2a$

Волновое уравнение

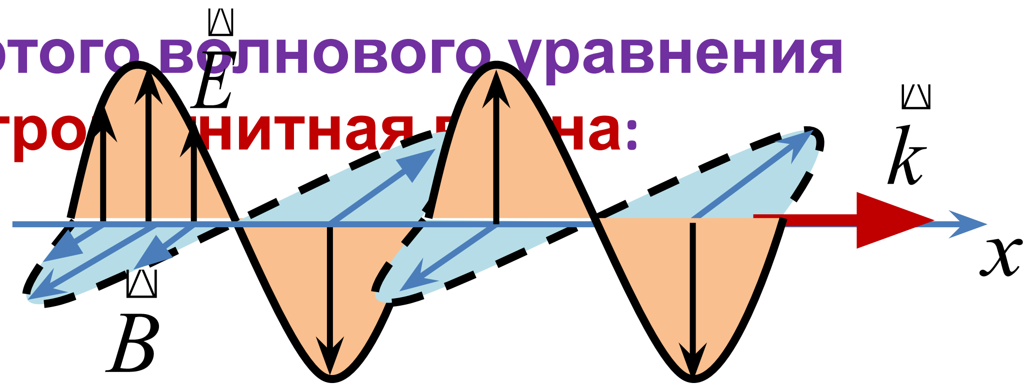
1 Волновое уравнение для электромагнитных волн в одномерном случае, когда напряженность электрического поля ***E*** зависит только от координаты ***x*** и времени ***t***, имеет вид:

$$\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2}, \qquad v = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \varepsilon \mu_0 \mu} = c/n,$$

где v - фазовая скорость волны, *n* – показатель преломления среды, $c = 1/\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}$ - скорость света в вакууме.

Частным решением этого волнового уравнения является плоская электромагнитная волна:

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



2

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 $\Psi=\Psi(x,y,z,t)$;

$$\nabla=\vec{e}_x\frac{\partial}{\partial x}+\vec{e}_y\frac{\partial}{\partial y}+\vec{e}_z\frac{\partial}{\partial z}$$

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

Вероятностный смысл $\Psi -$ функции

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

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** Ψ **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.

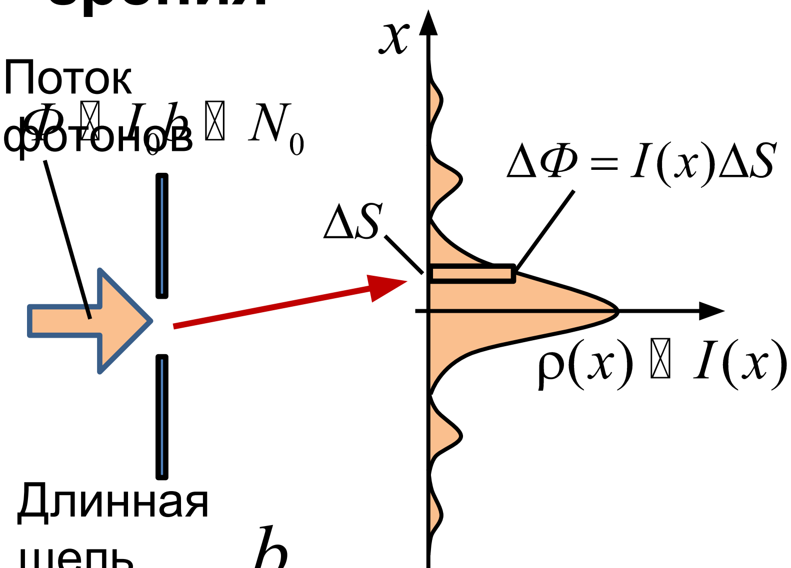
Нет смысла, например, говорить о локализации световой волны после дифракции на щели или траектории фотонов.

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 на единицу её длины, равно $N_0 \sim I_0 b$

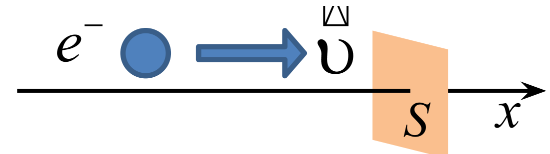
2. Это же число фотонов по закону сохранения энергии перераспределится вдоль дифракционной картины: $N_0 \sim \int_S I(x)\,dS$

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

4. Плотность вероятности: $\rho = \Delta W / \Delta S \sim I(x) \sim |E|^2$

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

О вероятности обнаружения электрона, который свободно движется в направлении оси *x*



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

или

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

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 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 $f(x)$ может быть сопоставлена другая функция $F(x)$.
Символически это правило записывается так: $F = \hat{D} f$, где оператор обозначен «шляпкой».

Пример. **Функции $f(x) = \sin ax$ сопоставим функцию $F(x) = a\cos ax$ с помощью оператора дифференцирования $\hat{D} = \partial/\partial x$:**

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

2. Уравнение Шредингера

- **Классический закон сохранения энергии :**

$$\frac{p^2}{2m} + U(x) = E$$

(кинетическая энергия + потенциальная энергия равна полной энергии частицы)

- **В соответствии с идеей М.Борна введем операторы, которые действуют на волновую функцию** Ψ **:**

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

- Тогда можно записать **квантовое уравнение** ***в символической форме***

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

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

.

Операторы импульса и энергии

Выясним вид операторов, используя плоскую волну де Бройля, которая является решением уравнения Шредингера в случае $U = 0$

$$\Psi(x,t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)}$$

Найдем производную этой функции по координате *x* :

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

$$\boxed{\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}}$$

Оператор импульса $\vec{p} = p_x \vec{e}_x + p_y \vec{e}_y + p_z \vec{e}_z$ **и квадрата импульса:**

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

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

где ∇ – градиент (оператор «набла»)

Дифференцируя волну де Бройля по времени, можно найти оператор $\hat{E}$ **полной энергии:**

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

При таких операторах квантовое уравнение в символической форме является уравнением Шредингера

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

где $\hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U\right)$ – **оператор Гамильтона** (оператор полной энергии).