

معادله موجی شرودینگر:

با توجه به رفتار موجی بارز ذرات بینهایت ریز، شرودینگر در سال 1925 معادله معروف خود را که عملاً یک اصل محسوب می‌شود، ارائه داد. همانطور که مکانیک کلاسیک بر پایه قوانین نیوتن و ذرات ماکروسکوپی مورد بحث قرار می‌گیرد، مکانیک کوانتیک¹ بر پایه معادله شرودینگر و پیگیران راه او، تأکید می‌کند.

شکل ریاضی نسبتاً پیچیده‌ای که معادله شرودینگر² و راه حل‌های آن دارد، هدف مستقیم ما نیست، ولی خوب است که به منظور تعمق در بررسیها از برخی نتایج و تعبیرهای مهم آن برای کسب تصور ساده‌ای از مفاهیم انرژی اوربیتالها و نفوذ آنها در یکدیگر استفاده شود. این مفاهیم نقش مهمی در توجیه معماها و ورود و خروج الکترونها در اتم و بویژه در عناصر واسطه d و f دارند.

معادله شرودینگر نوعی تابع موجی است. همانطور که می‌دانیم، حل معادله تابع موجی صوتی، تغییرات تراکم هوا را به صورت تابعی از زمان و فاصله به ما می‌دهد. همچنین جوابهای تابع موجی الکترومغناطیسی، تغییرات شدت میدان الکتریک و مغناطیسی را بر حسب زمان و فاصله نشان می‌دهد.

از حل معادله شرودینگر نیز به جوابهایی می‌رسیم. این توابع را که معمولاً با حروف یونانی

ψ, χ, ϕ, \dots نشان می‌دهند، سطوح انرژی و رفتار کلی الکترون را در اتم هیدروژن توجیه می‌کنند.

با استفاده از رابطه شرودینگر مطالعه دقیق تئوری از اتم هیدروژن شده و نتایج آن کاملاً مطابق نتایج حاصله از تجارب عملی است. بعلاوه این مطالعات صحت مکانیک موجی را ثابت کردند.

برای دریافتن روابط موجود بین خواص اتم و وضعیت قرار گرفتن اتمها در جدول تناوبی و شناختن

پیوندهای شیمیایی، لازم است بطور کامل وضع قرار گرفتن الکترون را در اتم هیدروژن دانست و بعد آن را عمومیت داده و وضع قرار گرفتن الکترونها را در اتم آنها تشخیص داد. در تئوری بوهلر لازم بود وجود اعداد کوانتیک را فرض کنیم ولی در مکانیک موجی مدرن اینطور نیست. فقط کافی است که رابطه شرودینگر را جهت اتم هیدروژن در نظر بگیریم، اعداد کوانتیک یا پیمانهای خودبخود مثل یک نتیجه ریاضی ظاهر می‌شوند. چهار عدد کوانتایی، انرژی و وضعیت الکترونی اتم را مشخص می‌کنند این اعداد بر طبق نظریه بوهلر مفاهیمی مخصوص به خود و تا اندازه‌ای نادرست دارند، مع ذلک در شناخت وضعیت قرار گرفتن الکترونها در اتم ما را کمک می‌نمایند، لذا آنها را همانطور که بوهلر در نظر گرفته، بیان و سپس با تشریح حل معادله شرودینگر همین اعداد خودبخود حاصل و آنها را در قیافه جدید و کاملاً درست دوباره خواهیم شناخت. قابل توجه است که اگر چه معادله شرودینگر در مورد حرکت موجی تمام ذرات مادی، اعتبار دارد، ولی حل آن فقط در مورد اتم هیدروژن و تا حدی یونهای هیدروژن - مانند نسبتاً ساده و عملی است. بدیهی است که در مورد یونهای هیدروژن - مانند باید بار هسته آنها و نیز برای دقت بیشتر، به جای جرم الکترون، جرم کاهش یافته سیستم را وارد کرد.

¹ مکانیک کوانتیک *quantum mechanics* را می‌توان رشته‌ای از فیزیک دانست که نظریات جدید مربوط

به اثرات تبادل میان ماده و تشعشعات را بررسی می‌کند. این دانش بر خلاف فیزیک کلاسیک، بیشتر روی پدیده‌های اتمی و

زیر اتمی مطالعه می‌کند.

² یک صورت مهم معادله شرودینگر را از نظر می‌گذرانیم:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0$$

ψ تابع موجی، (z, y, x) معرف موضع الکترون در فضا، m جرم الکترون، h ثابت پلانک، E انرژی کل (سینتیک

و پتانسیل)، V انرژی پتانسیل است.

