

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 نیوتون و ذرات ماکروسکوپی مورد بحث قرار می‌گیرد، مکانیک کوانتیک^۱ بر پایه معادله شرودینگر و پیگیران راه او، تأکید می‌کند.

شكل ریاضی نسبتاً پیچیده‌ای که معادله شرودینگر^۲ 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 γ ، q نشان می‌دهند، سطوح انرژی و رفتار کلی الکترون را در اتم ئیدروژن توجیه می‌کنند.

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

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

پیوندهای شیمیابی، لازم است بطور کامل وضع قرار گرفتن الکترون را در اتم هیدروژن دانست و بعد آن را عمومیت داده و وضع قرار گرفتن الکترونهای سایر عناصر را در اتم آنها تشخیص داد. در تئوری بوهر 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 کوانتائی، انرژی و وضعیت الکترونی اتم را مشخص می‌کنند این اعداد بر طبق نظریه بوهر مفاهیمی مخصوص به خود و تا اندازه‌ای نادرست دارند، مع ذلك در شناخت وضعیت قرار گرفتن الکترونها در اتم ما را کمک می‌نمایند، لذا آنها را همانطور که بوهر 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 دقیق‌تر، 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 برخلاف فیزیک کلاسیک، بیشتر روی پدیده‌های اتمی و زیر اتمی مطالعه می‌کند.

² یک صورت مهم معادله شرودینگر را از نظر می‌گذرانیم:

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

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.

