Những kết quả thực nghiệm trên sóng điện từ và hạt vi mô không thể giải thích được bằng các định luật cơ học cổ điển, điều đó đòi hỏi phải xây dựng một môn cơ học mới cho các hạt vi mô. Năm 1926, Schrodinger đã xây dựng cơ học sóng, nó hợp nhất nguyên lí lượng tử do Planck đưa ra và nguyên lí lưỡng tính sóng hạt của De Broglie. Dựa trên nguyên lí lưỡng tính sóng hạt, chúng ta sẽ mô tả chuyển động của electron trong tinh thể bằng lí thuyết sóng. Lí thuyết sóng này được mô tả bởi phương trình sóng Schrodinger.

ở đây ψ(x,t)  là hàm sóng, V(x) là thế năng được giả sử là không phụ thuộc thời gian, m là khối lượng của hạt và j là một hằng số ảo bằng . Có một luận cứ lí thuyết để dẫn ra phương trình sóng Schrodinger, nhưng phương trình là một định đề cơ bản của cơ học lượng tử. Hàm sóng ψ(x,t) sẽ được dùng để mô tả hành vi của hệ và về mặt toán học ψ(x,t) là một hàm phức.

          Chúng ta có thể xác định phần phụ thuộc thời gian của hàm sóng và phần phụ thuộc tọa độ bằng cách dùng kĩ thuật tách biến. Giả sử rằng hàm sóng có thể được viết dưới dạng

Là hàm mật độ xác suất và không phụ thuộc thời gian. Một sự khác biệt lớn giữa cơ học cổ điển và cơ học lượng tử là trong cơ học cổ điển, vị trí của hạt có thể được xác định chính xác, trong khi đó trong cơ học lượng tử, vị trí của hạt được xác định theo xác suất. Chúng ta sẽ xác định hàm mật độ xác suất trong vài trường hợp, và bởi vì nó không phụ thuộc thời gian, nói chung, chúng ta sẽ chỉ quan tâm đến những phương trình sóng không phụ thuộc thời gian.

Xác suất tìm thấy hạt trong toàn không gian là tất nhiên. Phương trình (2.18) cho phép chúng ta chuẩn hóa hàm sóng và là điều kiện được dùng để xác định những hệ số trong hàm sóng.

          Điều kiện còn lại áp đặt cho hàm sóng và đạo hàm của nó. Tuy nhiên chúng ta phải phát biểu điều kiện biên và đưa ra lí lẽ biện minh tại sao chúng ta phải áp đặt những điều kiện ấy. Hàm sóng và đạo hàm bậc nhất của nó phải có tính chất sau nếu năng lượng toàn phần E và thế năng V(x) của nó xác định ở mọi nơi.

          Điều kiện 1: ψ(x) phải xác định, liên tục và đơn trị.

          Điều kiện 2:  phải xác định, liên tục và đơn trị.

          Bởi vì |ψ(x)|2 là mật độ xác suất nên ψ(x) phải xác định và đơn trị. Nếu mật độ xác suất không xác định tại điểm nào đó trong không gian thì xác suất tìm thấy hạt tại vị trí này sẽ là chắc chắn (100%) và nguyên lí bất định sẽ bị vi phạm. Nếu năng lượng toàn phần E và thế năng V(x) xác định ở mọi nơi thì từ phương trình (2.13), đạo hàm bậc II phải xác định, nghĩa là đạo hàm bậc I phải liên tục. Đạo hàm bậc I có liên quan đến động lượng hạt, là đại lượng xác định và đơn trị. Cuối cùng, đạo hàm bậc I xác định có nghĩa là chính hàm số đó phải liên tục. Trong một vài trường hợp đặc biệt mà chúng ta sẽ xem xét, hàm thế sẽ không xác định tại một vùng nào đó của không gian. Đối với trường hợp này, đạo hàm bậc nhất không  liên tục, nhưng điều kiện biên còn lại vẫn còn đúng.