کوانٹم میکانیات

خالد خان یوسفزئی

جامعہ کامسیٹ، اسلام آباد
khalidyousafzai@comsats.edu.pk

۱۷ اپریل ۲۰۲۱

عنوان

باب ۴

تین ابعادی کوانٹم میکانیات

۴.۱ کروی محدد میں مساوات شروڈنگر

تین ابعاد تک توسیع با آسانی کی جا سکتی ہے۔ مساوات شروڈنگر درج ذیل کہتی ہے

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}t} = H\Psi; \tag{۴.۱}$$

معیاری طریقہ کار کا اطلاق x کے ساتھ ساتھ y اور z پر کرکے:

$$p_x \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \tag{۴.۲}$$

ہیملٹنی عامل H کو کلاسیکی توانائی

$$\frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V$$

سے حاصل کیا جاتا ہے۔ مساوات ۴.۲ کو مختصراً درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$p \to \frac{\hbar}{i}\nabla \tag{۴.۳}$$

یوں درج ذیل ہو گا

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi \tag{۴.۴}$$

[۱] جہاں کلاسیکی مشہود اور عامل میں فرق کرنا دشوار ہو، وہاں میں عامل پر "ٹوپی" کا نشان بناتا ہوں۔ اس باب میں ایسا کوئی موقع نہیں پایا جاتا جہاں ان کی پہچان مشکل ہو لہٰذا یہاں سے عاملین پر "ٹوپی" کا نشان نہیں ڈالا جائے گا۔

جہاں

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{۴.۵}$$

کارتیسی محدد میں **لاپلاسی**[۲] ہے۔

مخفی توانائی V اور تفاعل موج Ψ اب $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ اور t کے تفاعلات ہیں۔ لامتناہی چھوٹے حجم $\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r} = \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$ میں ایک ذرہ پایا جانے کا احتمال $\left|\Psi(\boldsymbol{r}, t)\right|^2 \mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r}$ ہوگا اور معمول زنی شرط درج ذیل ہوگی

$$\int \left|\Psi\right|^2 \mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r} = 1 \tag{۴.۶}$$

جہاں تکمل کو پوری فضا پر لینا ہوگا۔ اگر مخفی توانائی وقت کی تابع نہ ہو تب ساکن حالات کا مکمل سلسلہ پایا جائے گا:

$$\Psi_n(\boldsymbol{r}, t) = \psi_n(\boldsymbol{r}) e^{-iE_n t/\hbar} \tag{۴.۷}$$

جہاں فضائی تفاعل موج ψ_n غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi \tag{۴.۸}$$

کو مطمئن کرتا ہے۔ تابع وقت شروڈنگر مساوات کا عمومی حل درج ذیل ہوگا۔

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \sum c_n \psi_n(\boldsymbol{r}) e^{-iE_n t/\hbar} \tag{۴.۹}$$

جہاں مستقلات c_n ہمیشہ کی طرح ابتدائی تفاعل موج $\Psi(\boldsymbol{r}, 0)$ سے حاصل کیے جائیں گے۔ (اگر مخفیہ **استمراریہ**[۳] حالات دیتی ہو تب مساوات ۴.۹ میں مجموعہ کی بجائے تکمل ہوگا۔)

سوال ۴.۱:

۱. عاملین $\boldsymbol{r}$ اور $\boldsymbol{p}$ کے تمام **باضابطہ تبادلی رشتے**[۴]: $[x, y]$، $[x, p_y]$، $[x, p_x]$، $[p_y, p_z]$، وغیرہ وغیرہ، حاصل کریں۔

جواب:

$$[r_i, p_j] = -[p_i, r_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [r_i, r_j] = [p_i, p_j] = 0 \tag{۴.۱۰}$$

جہاں اشاریہ x، y اور z کو ظاہر کرتے ہیں جبکہ $r_x = x$، $r_y = y$ اور $r_z = z$ ہیں۔

---

[۲] Laplacian
[۳] continuum
[۴] canonical commutation relations

ب. تین ابعاد کے لیے مسئلہ اہرنفسٹ کی تصدیق کریں:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \boldsymbol{p}\rangle = \langle -\nabla V\rangle \quad \text{اور} \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \boldsymbol{r}\rangle = \frac{1}{m}\langle \boldsymbol{p}\rangle \tag{۴.۱۱}$$

(ان میں سے ہر ایک در حقیقت تین مساوات کو ظاہر کرتی ہے۔ ایک مساوات ایک جزو کے لیے ہو گا۔) اشارہ: پہلے تصدیق کر لیں کہ مساوات 71.3 تین ابعاد کے لیے بھی کارآمد ہے۔

ج. ہیزنبرگ عدم یقینیت کے اصول کو تین ابعاد کے لیے بیان کریں۔

جواب:

$$\sigma_x\sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \sigma_y\sigma_{p_y} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \sigma_z\sigma_{p_z} \geq \frac{\hbar}{2} \tag{۴.۱۲}$$

تاہم (مثلاً) $\sigma_x\sigma_{p_y}$ پر کوئی پابندی عائد نہیں ہوتی۔

۴.۱.۱ علیحدگی متغیرات

عموماً مخفیہ صرف مبدا سے فاصلہ کا تفاعل ہو گا۔ ایسی صورت میں **کروی محدد**[۵] (r, θ, ϕ) کا استعمال بہتر ثابت ہو گا (شکل 4-1)۔ کروی محدد میں لاپلاسی درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \tag{۴.۱۳}$$

یوں کروی محدد میں تابع وقت شروڈنگر مساوات درج ذیل ہو گی۔

$$\begin{split} -\frac{\hbar^2}{2m}\Big[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\right)\Big] \\ + V\psi = E\psi \end{split} \tag{۴.۱۴}$$

ہم ایسے حل کی تلاش میں ہیں جن کو حاصل ضرب کی صورت میں علیحدہ علیحدہ لکھنا ممکن ہو:

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \tag{۴.۱۵}$$

اس کو مساوات ۴.۱۴ میں پر کرکے

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Big[\frac{Y}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right) + \frac{R}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{R}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\Big] + VRY = ERY$$

[۵] spherical coordinates

دونوں اطراف کو RY سے تقسیم کر کہ $-2mr^2/\hbar^2$ سے ضرب دیتے ہیں۔

$$\left\{\frac{1}{R}\frac{d}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}[V(r)-E]\right\}$$
$$+\frac{1}{Y}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right\}=0$$

پہلی خمدار قوسین میں جزو صرف r کا تابع ہے جبکہ باقی حصہ صرف θ اور ϕ کا تابع ہے؛ لہٰذا دونوں حصے انفرادی طور پر ایک مستقل کے برابر ہوں گے۔ اس علیحدگی مستقل کو ہم $l(l+1)$ روپ میں لکھتے ہیں جس کی وجہ کچھ دیر میں واضح ہو گی۔[6]

$$\frac{1}{R}\frac{d}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}[V(r)-E]=l(l+1) \tag{۴.۱۶}$$

$$\frac{1}{Y}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\right\}=-l(l+1) \tag{۴.۱۷}$$

سوال ۴.۲: کارتیسی محدد میں علیحدگی متغیرات استعمال کرتے ہوئے لامتناہی مربعی کنواں (یا ڈبہ میں ایک ذرہ):

$$V(x,y,z)=\begin{cases}0 & \text{اگر } x\text{،} y \text{ اور } z \text{ تینوں } 0 \text{ اور } a \text{ کے بیچ پائے جاتے ہوں}\\ \infty & \text{دیگر صورت}\end{cases}$$

حل کریں۔

ا. ساکن حالات اور ان کی مطابقتی توانائیاں دریافت کریں۔

ب. بڑھتی توانائی کے لحاظ سے انفرادی توانائیوں کو E_1، E_2، E_3، وغیرہ، وغیرہ سے ظاہر کر کے E_1 تا E_6 تلاش کریں۔ ان کی انحطاطیت (یعنی ایک ہی توانائی کے مختلف حلوں کی تعداد) معلوم کریں۔ تبصرہ: یک بعدی صورت میں انحطاطی مقید حالات نہیں پائے جاتے ہیں (سوال 45.2)، تاہم تین ابعادی صورت میں یہ کثرت سے پائے جاتے ہیں۔

ج. توانائی E_{14} کی انحطاطیت کیا ہے اور یہ صورت کیوں دلچسپ ہے؟

۴.۱.۲ زاویائی مساوات

مساوات ۴.۱۷ متغیرات θ اور ϕ پر ψ کی تابعیت تعین کرتی ہے۔ اس کو $Y\sin^2\theta$ سے ضرب دے کر درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\right)+\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}=-l(l+1)Y\sin^2\theta \tag{۴.۱۸}$$

[6] ایسا کرنے سے ہم عمومیت نہیں کھوتے ہیں، چونکہ یہاں l کوئی بھی مخلوط عدد ہو سکتا ہے۔ بعد میں ہم دیکھیں گے کہ l کو لازماً عدد صحیح ہونا ہو گا۔ اسی نتیجہ کو ذہن میں رکھتے ہوئے میں نے علیحدگی مستقل کو اس عجیب روپ میں لکھا ہے۔

ہو سکتا ہے آپ اس مساوات کو پہچانتے ہوں۔ یہ کلاسیکی برقی حرکیات میں مساوات لاپلاس کے حل میں پائی جاتی ہے۔ ہمیشہ کی طرح ہم علیحدگی متغیرات:

$$Y(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi) \tag{۴.۱۹}$$

استعمال کر کے دیکھنا چاہیں گے۔ اس کو پر کر کے $\Theta\Phi$ سے تقسیم کر کے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\left\{\frac{1}{\Theta}\Big[\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\Big(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\Big)\Big]+l(l+1)\sin^2\theta\right\}+\frac{1}{\Phi}\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\phi^2}=0$$

پہلا جزو صرف θ کا تفاعل ہے، جبکہ دوسرا صرف ϕ کا تفاعل ہے، لہٰذا ہر ایک جزو ایک مستقل ہو گا۔ اس مرتبہ ہم علیحدگی مستقل[7] کو m^2 لکھتے ہیں۔

$$\frac{1}{\Theta}\Big[\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\Big(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\Big)\Big]+l(l+1)\sin^2\theta=m^2 \tag{۴.۲۰}$$

$$\frac{1}{\Phi}\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\phi^2}=-m^2 \tag{۴.۲۱}$$

متغیر ϕ کی مساوات زیادہ آسان ہے۔

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\phi^2}=-m^2\Phi \implies \Phi(\phi)=e^{im\phi} \tag{۴.۲۲}$$

[درحقیقت دو حل پائے جاتے ہیں: $e^{im\phi}$ اور $e^{-im\phi}$، تاہم m کو منفی ہونے کی اجازت دے کر ہم موخر الذکر کو بھی درج بالا حل میں شامل کرتے ہیں۔ اس کے علاوہ حل میں جزو ضربی مستقل بھی پایا جا سکتا ہے جسے ہم Θ میں ضم کرتے ہیں۔ چونکہ برقی مخفی توانائی لازماً حقیقی ہو گی لہٰذا برقی حرکیات میں اسمتی تفاعل (Φ) کو سائن اور کوسائن کی صورت میں نہ کہ قوت نمائی صورت میں لکھا جاتا ہے۔ کوانٹم میکانیات میں ایسی کوئی پابندی نہیں پائی جاتی ہے اور قوت نمائی کے ساتھ کام کرنا زیادہ آسان ہوتا ہے۔] اب جب بھی ϕ کی قیمت میں 2π کا اضافہ آئے، ہم فضا میں واپس اسی نقطہ پر پہنچتے ہیں (شکل 4.1 دیکھیں) لہٰذا درج ذیل شرط[8] مسلط کی جا سکتی ہے۔

$$\Phi(\phi+2\pi)=\Phi(\phi) \tag{۴.۲۳}$$

دوسرے لفظوں میں $e^{im(\phi+2\pi)}=e^{im\phi}$ یا $e^{2\pi im}=1$ ہو گا جس کے تحت m لازماً عدد صحیح ہو گا۔

$$m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{۴.۲۴}$$

---

[7] یہاں بھی ہم عمومیت نہیں کھوتے ہیں، چونکہ m کوئی بھی مخلوط عدد ہو سکتا ہے؛ اگرچہ ہم جلد دیکھیں گے کہ m کو عدد صحیح ہونا ہو گا۔ انتباہ: اب حرف m دو مختلف چیزوں، کمیت اور علیحدگی مستقل، کو ظاہر کر رہا ہے۔ امید ہے کہ آپ کو درست معنی جاننے میں مشکل درپیش نہیں ہو گی۔

[8] یہ بظاہر معصوم شرط اتنی معصوم نہیں ہے۔ یاد رہے کہ m کی قیمت سے قطع نظر، احتمال کثافت $(|\Phi|^2)$ یک قیمتی ہے۔ ہم حصہ 3.4 میں ایک مختلف طریقہ سے، زیادہ پر زور دلیل پیش کر کے m پر مسلط شرط حاصل کریں گے۔

جدول ۴.۱: ابتدائی چند لیژانڈر کثیر رکنیاں۔

$$
\begin{aligned}
P_0 &= 1\\
P_1 &= x\\
P_2 &= \tfrac{1}{2}(3x^2-1)\\
P_3 &= \tfrac{1}{2}(5x^3-3x)\\
P_4 &= \tfrac{1}{8}(35x^4-30x^2+3)\\
P_5 &= \tfrac{1}{8}(63x^5-70x^3+15x)
\end{aligned}
$$

مساوات θ

$$\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\Big(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\Big)+[l(l+1)\sin^2\theta-m^2]\Theta=0 \tag{۴.۲۵}$$

اتنی سادہ نہیں ہے۔ اس کا حل درج ذیل ہے

$$\Theta(\theta)=AP_l^m(\cos\theta) \tag{۴.۲۶}$$

جہاں P_l^m **شریک لیژانڈر تفاعل**[9] ہے جس کی تعریف درج ذیل ہے

$$P_l^m(x)\equiv(1-x^2)^{|m|/2}\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)^{|m|}P_l(x) \tag{۴.۲۷}$$

اور l ویں لیژانڈر کثیر رکنی کو $P_l(x)$ ظاہر کرتا ہے[10] جس کی تعریف **کلیہ روڈریگیس**[11]

$$P_l(x)\equiv\frac{1}{2^l l!}\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)^l(x^2-1)^l \tag{۴.۲۸}$$

دیتا ہے۔ مثال کے طور پر درج ذیل ہوں گے۔

$$
\begin{aligned}
P_0(x)&=1,\quad P_1(x)=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(x^2-1)=x,\\
P_2(x)&=\frac{1}{4\cdot 2}\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)^2(x^2-1)^2=\frac{1}{2}(3x^2-1)
\end{aligned}
$$

جدول ۴.۱ میں ابتدائی چند لیژانڈر کثیر رکنیاں پیش کی گئی ہیں۔ جیسا کہ نام سے ظاہر ہے، $P_l(x)$ متغیر x کی

---

[9] associated Legendre function

[10] دھیان رہے کہ $P_l^{-m}=P_l^m$ ہو گا۔

[11] Rodrigues formula

جدول ۴.۲: چند شریک لیژانڈر تفاعلات $P_l^m(\cos\theta)$

$P_0^0 = 1$	$P_2^0 = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)$
$P_1^1 = \sin\theta$	$P_3^3 = 15\sin\theta(1-\cos^2\theta)$
$P_1^0 = \cos\theta$	$P_3^2 = 15\sin^2\theta\cos\theta$
$P_2^2 = 3\sin^2\theta$	$P_3^1 = \frac{3}{2}\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)$
$P_2^1 = 3\sin\theta\cos\theta$	$P_3^0 = \frac{1}{2}(5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$

درجہ l کثیر رکنی ہے، اور l کی قیمت طے کرتی ہے کہ آیا یہ جفت کا طاق ہو گی۔ تاہم $P_l^m(x)$ عموماً کثیر رکنی نہیں ہو گا؛ اور طاق m کی صورت میں اس میں $\sqrt{1-x^2}$ کا جزو ضربی پایا جائے گا:

$$P_2^0(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1), \quad P_2^1(x) = (1-x^2)^{1/2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big[\frac{1}{2}(3x^2-1)\Big] = 3x\sqrt{1-x^2},$$
$$P_2^2(x) = (1-x^2)\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)^2\Big[\frac{1}{2}(3x^2-1)\Big] = 3(1-x^2),$$

وغیرہ وغیرہ۔ (اب ہمیں $P_l^m(\cos\theta)$ چاہیے اور چونکہ $\sin\theta = \sqrt{1-\cos^2\theta}$ ہوتا ہے لہٰذا $P_l^m(\cos\theta)$ ہر صورت $\cos\theta$ کا کثیر رکنی ہو گا جسے طاق m کی صورت میں $\sin\theta$ ضرب کرے گا۔ جدول ۴.۲ میں $\cos\theta$ کے چند شریک لیژانڈر تفاعلات پیش کیے گئے ہیں۔)

دھیان رہے کہ صرف غیر منفی عدد صحیح l کی صورت میں کلیہ روڈریگیس معنی خیز ہو گا؛ مزید $|m| > l$ کی صورت میں مساوات ۴.۲۷ کے تحت $P_l^m = 0$ ہو گا۔ یوں l کی کسی بھی مخصوص قیمت کے لئے m کی $(2l+1)$ ممکنہ قیمتیں ہوں گی:

$$l = 0, 1, 2, \dots; \quad m = -l, -l+1, \dots -1, 0, 1, \dots l-1, l \tag{۴.۲۹}$$

ذرا رکیے! مساوات ۴.۲۵ دو رتبی تفرقی مساوات ہے: l اور m کی کسی بھی قیمتوں کے لئے اس کے دو خطی غیر تابع حل ہونگے۔ باقی حل کہاں ہیں؟ جواب: یقیناً تفرقی مساوات کے ریاضی حلوں کی صورت میں باقی حل ضرور موجود ہوں گے تاہم $\theta = 0$ اور (یا) $\theta = \pi$ پر ایسے حل بے قابو بڑھتے ہیں (سوال ۴.۴ دیکھیں) جس کی بنا یہ طبعی طور پر ناقابل قبول ہوں گے۔

کروی محدد میں حجمی رکن درج ذیل ہو گا

$$\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = r^2\sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi \tag{۴.۳۰}$$

لہٰذا معمول زنی شرط (مساوات ۴.۶) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$\int|\psi|^2 r^2\sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi = \int|R|^2 r^2\,\mathrm{d}r\int|Y|^2\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi = 1$$

جدول ۴.۳: ابتدائی چند کروی ہارمونیات، $Y_l^m(\theta,\phi)$

$Y_0^0 = (\frac{1}{4\pi})^{1/2}$	$Y_2^{\pm2} = (\frac{15}{32\pi})^{1/2} \sin^2\theta e^{\pm2i\phi}$
$Y_1^0 = (\frac{3}{4\pi})^{1/2} \cos\theta$	$Y_3^0 = (\frac{7}{16\pi})^{1/2}(5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$
$Y_1^{\pm1} = \mp(\frac{3}{8\pi})^{1/2} \sin\theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm1} = \mp(\frac{21}{64\pi})^{1/2} \sin\theta(5\cos^2\theta - 1)e^{\pm i\phi}$
$Y_2^0 = (\frac{5}{16\pi})^{1/2}(3\cos^2\theta - 1)$	$Y_3^{\pm2} = (\frac{105}{32\pi})^{1/2} \sin^2\theta\cos\theta e^{\pm2i\phi}$
$Y_2^{\pm1} = \mp(\frac{15}{8\pi})^{1/2} \sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm3} = \mp(\frac{35}{64\pi})^{1/2} \sin^3\theta e^{\pm3i\phi}$

یہاں R اور Y کو علیحدہ علیحدہ معمول پر لانا زیادہ آسان ثابت ہوتا ہے۔

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 \,\mathrm{d}r = 1 \quad \text{اور} \quad \int_0^{2\pi}\int_0^\pi |Y|^2 \sin\theta \,\mathrm{d}\theta \,\mathrm{d}\phi = 1 \tag{۴.۳۱}$$

معمول شدہ زاویائی موجی تفاعلات[۱۲] کو **کروی ہارمونیات**[۱۳] کہتے ہیں:

$$Y_l^m(\theta,\phi) = \epsilon\sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}e^{im\phi}P_l^m(\cos\theta \tag{۴.۳۲}$$

جہاں $m \geq 0$ کے لئے $\epsilon = (-1)^m$ اور $m \leq 0$ کے لئے $\epsilon = 1$ ہو گا۔ جیسا کہ ہم بعد میں ثابت کریں گے، کروی ہارمونیات عمودی ہیں لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\int_0^{2\pi}\int_0^\pi [Y_l^m(\theta,\phi)]^*[Y_{l'}^{m'}(\theta,\phi)] \sin\theta \,\mathrm{d}\theta \,\mathrm{d}\phi = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{۴.۳۳}$$

جدول ۴.۳ میں چند ابتدائی کروی ہارمونیات پیش کیے گئے ہیں۔ تاریخی وجوہات کی بنا l کو **اسمتی کوانٹائی عدد**[۱۴] جب کہ m کو **مقناطیسی کوانٹائی عدد**[۱۵] کہتے ہیں۔ سوال ۴.۳: مساوات ۴.۲۷، ۴.۲۸ اور ۴.۳۲ استعمال کرکے Y_0^0 اور Y_2^1 تیار کریں۔ تصدیق کریں کہ یہ معمول شدہ اور عمودی ہیں۔

سوال ۴.۴: دکھائیں کہ $l = m = 0$ کے لئے

$$\Theta(\theta) = A\ln[\tan(\theta/2)]$$

---

[۱۲] معمول زنی مستقل کو سوال 54.4 میں حاصل کیا گیا ہے؛ نظریہ زاویائی معیار حرکت میں مستعمل علامتیت کے ساتھ ہم آہنگی کی خاطر ϵ (جس کی قیمت 1 یا -1 ہو گی) کی علامت کا انتخاب کیا گیا ہے۔ دھیان رہے کہ $Y_l^{-m} = (-1)^m(Y_l^m)^*$ ہو گا۔

[۱۳] spherical harmonics

[۱۴] azimuthal quantum number

[۱۵] magnetic quantum number

مساوات θ (مساوات ۴.۲۵) کو مطمئن کرتی ہے۔ یہ (وہ) ناقابل قبول دوسرا حل ہے؛ اس میں کیا خرابی ہے؟

سوال ۴.۵: مساوات ۴.۳۲ استعمال کرکے $Y_l^l(\theta,\phi)$ اور $Y_3^2(\theta,\phi)$ تشکیل دیں۔(آپ P_3^2 کو جدول ۴.۲ سے دیکھ سکتے ہیں، جبکہ P_l^l آپ کو مساوات ۴.۲۷ اور ۴.۲۸ کی مدد سے تشکیل دینا ہوگا۔) تصدیق کیجیے کہ l اور m کی موزوں قیمتوں کیلئے یہ زاویائی مساوات (مساوات ۴.۱۸) کو مطمئن کرتے ہیں۔

سوال ۴.۶: کلیہ روڈریگیس سے ابتدا کرکے لیژانڈر کثیر رکنیوں کی معیاری عمودیت کی شرط:

$$\int_{-1}^{1} P_l(x)P_{l'}(x)\,\mathrm{d}x = \Big(\frac{2}{2l+1}\Big)\delta_{ll'} \tag{۴.۳۴}$$

اخذ کریں۔(اشارہ: تکمل بالحصص استعمال کریں۔)

۴.۱.۳ رداسی مساوات

دھیان رہے کہ تمام کروی تشاکلی مخفیہ کے لئے تفاعل موج کا زاویائی حصہ، $Y(\theta,\phi)$، ایک دوسرے جیسا ہوگا؛ مخفیہ $V(r)$ کی شکل وصورت تفاعل موج کے صرف رداسی حصہ، $R(r)$، پر اثر انداز ہوگی جسے مساوات ۴.۱۶ تعین کرتی ہے۔

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\Big(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\Big)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}[V(r)-E]R = l(l+1)R \tag{۴.۳۵}$$

نئے متغیرات استعمال کرتے ہوئے اس مساوات کی سادہ روپ حاصل کی جا سکتی ہے: درج ذیل لینے سے

$$u(r)\equiv rR(r) \tag{۴.۳۶}$$

$R=u/r$، $\mathrm{d}R/\mathrm{d}r=[r(\mathrm{d}u/\mathrm{d}r)-u]/r^2$، $(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)[r^2(\mathrm{d}R/\mathrm{d}r)] = r\,\mathrm{d}^2u/\mathrm{d}r^2$ لہٰذا درج ذیل ہوگا۔

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\Big[V+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\Big]u = Eu \tag{۴.۳۷}$$

اس کو **رداسی مساوات**[16] کہتے ہیں[17] جو شکل وصورت کے لحاظ سے یک بعدی شروڈنگر مساوات (مساوات ۲.۵) کی طرح ہے، تاہم یہاں **موثر مخفیہ**[18] درج ذیل ہے

$$V_{\text{موثر}} = V+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} \tag{۴.۳۸}$$

---

[16] radial equation

[17] یہاں m کمیت کو ظاہر کرتی ہے؛ رداسی مساوات میں علیحدگی مستقل m نہیں پایا جاتا ہے۔

[18] effective potential

جس میں $(\hbar^2/2m)[l(l+1)/r^2]$ اضافی جزو پایا جاتا ہے جو **مرکز گریز جزو**[19] کہلاتا ہے۔ یہ کلاسیکی میکانیات کے مرکز گریز (مجازی) قوت کی طرح، ذرہ کو (مبدا سے دور) باہر جانب دھکیلتا ہے۔ یہاں معمول زنی شرط (مساوات ۴.۳۱) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$\int_0^\infty |u|^2 \,\mathrm{d}r = 1 \tag{۴.۳۹}$$

کسی مخصوص مخفیہ $V(r)$ کے بغیر ہم آگے نہیں بڑھ سکتے ہیں۔

مثال ۴.۱: درج ذیل لامتناہی کروی کنواں پر غور کریں۔

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r \leq a \\ \infty & r > a \end{cases} \tag{۴.۴۰}$$

اس کے تفاعلات موج اور اجازتی توانائیاں تلاش کریں۔

حل: کنواں کے باہر تفاعل موج صفر ہے جبکہ کنواں کے اندر رداسی مساوات درج ذیل ہے

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2} = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - k^2\right] u \tag{۴.۴۱}$$

جہاں ہمیشہ کی طرح درج ذیل ہو گا۔

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{۴.۴۲}$$

ہم نے اس مساوات کو، سرحدی شرط $u(a) = 0$ مسلط کر کے، حل کرنا ہے۔ سب سے آسان صورت $l = 0$ کی ہے۔

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2} = -k^2 u \implies u(r) = A\sin(kr) + B\cos(kr)$$

یاد رہے، اصل رداسی تفاعل موج $R(r) = u(r)/r$ ہے اور $r \to 0$ کی صورت میں $[\cos(kr)]/r$ بے قابو بڑھتا ہے۔ یوں ہمیں $B = 0$ منتخب[20] کرنا ہو گا۔ اب سرحدی شرط پر پورا اترنے کے لئے ضروری ہے کہ $\sin(ka) = 0$ ہو لہٰذا $ka = n\pi$ ہو گا جہاں n عدد صحیح ہے۔ ظاہر ہے کہ اجازتی توانائیاں درج ذیل ہوں گی۔

$$E_{n0} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots). \tag{۴.۴۳}$$

---

[19] centrifugal term

[20] درحقیقت ہم صرف اتنا چاہتے ہیں کہ تفاعل موج معمول پر لانے کے قابل ہو؛ یہ ضروری نہیں کہ یہ متناہی ہو: مساوات ۴.۳۱ میں r^2 کی بنا مبدا پر $R(r) \sim 1/r$ معمول پر لانے کے قابل ہے۔

جو عین یک بعدی لامتناہی چوکور کنواں کی توانائیاں ہیں (مساوات ۲.۲۷)۔ $u(r)$ کو معمول پر لانے سے $A = \sqrt{2/a}$ حاصل ہوگا۔ زاویائی جزو (جو $Y_0^0(\theta,\phi) = 1/\sqrt{4\pi}$ کی بنا غیر اہم ہے) کو ساتھ منسلک کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$\psi_{n00} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\frac{\sin(n\pi r/a)}{r} \tag{۴.۴۴}$$

[دھیان کیجیے کہ ساکن حالات کے نام تین **کوانٹائی اعداد**[21] n، l اور m استعمال کر کے رکھے جاتے ہیں: $\psi_{nml}(r,\theta,\phi)$؛ جبکہ توانائی، E_{nl}، صرف n اور l پر منحصر ہوگی۔]

(ایک اختیاری عدد صحیح l کے لئے) مساوات ۴.۴۱ کا عمومی حل

$$u(r) = Arj_l(kr) + Brn_l(kr). \tag{۴.۴۵}$$

بہت جانا پہچانا نہیں ہے جہاں $j_l(x)$ رتبہ l کا **کروی بیسل تفاعل**[22] ہے اور $n_l(x)$ رتبہ l کا **کروی نیومن تفاعل**[23] ہے جن کی تعریفات درج ذیل ہیں۔

$$j_l(x) \equiv (-x)^l\Big(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)^l\frac{\sin x}{x}; \quad n_l(x) \equiv -(-x)^l\Big(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)^l\frac{\cos x}{x} \tag{۴.۴۶}$$

مثال کے طور پر درج ذیل ہوں گے، وغیرہ وغیرہ۔

$$\begin{aligned}
j_0(x) &= \frac{\sin x}{x}; \quad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x};\\
j_1(x) &= (-x)\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big(\frac{\sin x}{x}\Big) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x};\\
j_2(x) &= (-x)^2\Big(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)^2\frac{\sin x}{x} = x^2\Big(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)\frac{x\cos x - \sin x}{x^3}\\
&= \frac{3\sin x - 3x\cos x - x^2\sin x}{x^3}
\end{aligned}$$

جدول ۴.۴ میں ابتدائی چند کروی بیسل اور نیومن تفاعلات پیش کیے گئے ہیں۔ متغیر x کی چھوٹی قیمت کے لئے جہاں

$$\sin x \approx x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \cdots \quad \text{اور} \quad \cos x \approx 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \cdots$$

ہوں گے، درج ذیل ہوں گے، وغیرہ وغیرہ۔

$$j_0(x) \approx 1; \quad n_0(x) \approx -\frac{1}{x}; \quad j_1(x) \approx \frac{x}{3}; \quad j_2(x) \approx \frac{x^2}{15};$$

---

[21] quantum numbers
[22] spherical Bessel function
[23] spherical Neumann function

جدول ۴.۴: ابتدائی چند کروی بیسل اور نیومن تفاعلات، $j_n(x)$ اور $n_l(x)$؛ چھوٹی x کے لئے متقاربی روپ۔

$n_0 = -\frac{\cos x}{x}$	$j_0 = \frac{\sin x}{x}$
$n_1 = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}$	$j_1 = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$
$n_2 = -\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\cos x - \frac{3}{x^2}\sin x$	$j_2 = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\sin x - \frac{3}{x^2}\cos x$
$n_l \to -\frac{(2l)!}{2^l l!}\frac{1}{x^{l+1}}, \quad x \ll 1$	$j_l \to \frac{2^l l!}{(2l+1)!}x^l$

دھیان رہے کہ مبدا پر بیسل تفاعلات متناہی ہیں جبکہ مبدا پر نیومن تفاعلات بے قابو بڑھتے ہیں۔ یوں ہمیں لازماً $B_l = 0$ منتخب کرنا ہو گا لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$R(r) = Aj_l(kr) \tag{۴.۴۷}$$

اب سرحدی شرط $R(a) = 0$ کو مطمئن کرنا باقی ہے۔ ظاہر ہے کہ k کو درج ذیل کے تحت منتخب کرنا ہو گا

$$j_l(ka) = 0 \tag{۴.۴۸}$$

یعنی l رتبی کروی بیسل تفاعل کا (ka) ایک صفر ہو گا۔ اب بیسل تفاعلات ارتعاشی ہیں (شکل 2.4 دیکھیں)؛ ہر ایک کے لامتناہی تعداد صفر پائے جاتے ہیں۔ تاہم (ہماری بد قسمتی سے) یہ ایک جیسے فاصلوں پر نہیں پائے جاتے ہیں (جیسا کہ نقاط n یا نقاط $n\pi$، وغیرہ پر)؛ انہیں اعدادی تراکیب سے حاصل کرنا ہو گا۔ بہر حال سرحدی شرط کے تحت درج ذیل ہو گا

$$k = \frac{1}{a}\beta_{nl} \tag{۴.۴۹}$$

جہاں β_{nl} رتبہ l کروی بیسل تفاعل کا n واں صفر ہو گا۔ یوں اجازتی توانائیاں

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\beta_{nl}^2. \tag{۴.۵۰}$$

اور تفاعلات موج درج ذیل ہوں گے

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = A_{nl}j_l(\beta_{nl}r/a)Y_l^m(\theta,\phi). \tag{۴.۵۱}$$

جہاں مستقل A_{n1} کا تعین معمول زنی سے کیا جاتا ہے۔ چونکہ l کی ہر ایک قیمت کے لئے m کی $(2l+1)$ مختلف قیمتیں پائی جاتی ہیں لہٰذا توانائی کی ہر سطح $(2l+1)$ گنا انحطاطی ہو گی (مساوات ۴.۲۹ دیکھیں)۔ □

سوال ۴.۷:

ا. کروی نیومن تفاعلات $n_1(x)$ اور $n_2(x)$ کو (مساوات ۴.۴۶) میں پیش کی گئی تعریفات سے تیار کریں۔

ب. سائن اور کوسائن کو پھیلا کر $x \gg 1$ کے لئے کارآمد $n_1(x)$ اور $n_2(x)$ کے تخمینی کلیات اخذ کریں۔ تصدیق کریں کہ یہ مبدا پر بے قابو بڑھتے ہیں۔

سوال ۴.۸:

ا. تصدیق کریں کہ $V(r) = 0$ اور $l = 1$ کے لئے $Arj_l(kr)$ رداسی مساوات کو مطمئن کرتا ہے۔

ب. لامتناہی کروی کنواں کیلئے $l = 1$ کی صورت میں اجازتی توانائیاں ترسیم کی مدد سے تعین کریں۔ دکھائیں کہ n کی بڑی قیمت کے لئے $E_{n1} \approx (\hbar^2\pi^2/2ma^2)(n+1/2)^2$ ہو گا۔ (اشارہ: پہلے $j_1(x) = 0 \implies x = \tan x$ دکھائیں۔ اس کے بعد x اور $\tan x$ کو ایک ساتھ ترسیم کرتے ہوئے ان کے نقاط تقاطع تلاش کریں۔)

سوال ۴.۹: ایک ذرہ جس کی کمیت m ہے کو متناہی کروی کنواں:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r \le a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

میں رکھا جاتا ہے۔ اس کا زمینی حال، $l = 0$ کے لئے، رداسی مساوات کے حل سے حاصل کریں۔ دکھائیں کہ $V_0a^2 < \pi^2\hbar^2/8m$ کی صورت میں کوئی مقید حال نہیں پایا جائے گا۔

۴.۲ ہائیڈروجن جوہر

ہائیڈروجن جوہر بار e کے ایک بھاری پروٹان جس کے گرد بار $-e$ کا ایک ہلکا الیکٹران طواف کرتا ہو پر مشتمل ہوتا ہے۔ پروٹان بنیادی طور پر ساکن رہتا ہے (جسے ہم مبدا پر تصور کر سکتے ہیں)۔ ان دونوں کے مخالف بار کے بیچ قوت کشش پائی جاتی ہے جو انہیں اکٹھے رکھتی ہے (شکل 3.4 دیکھیں)۔ قانون کولمب کے تحت مخفی توانائی درج ذیل ہو گی

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} \tag{۴.۵۲}$$

لہٰذا رداسی مساوات ۴.۳۷ درج ذیل روپ اختیار کرے گی۔

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2} + \Big[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}\Big]u = Eu \tag{۴.۵۳}$$

ہم نے اس مساوات کو $u(r)$ کے لئے حل کر کے اجازتی توانائیاں E تعین کرنی ہیں۔ ہائیڈروجن جوہر کا حل نہایت اہم ہے لہٰذا میں اس کو، ہارمونی مرتعش کے تحلیلی حل کی ترکیب سے، قدم با قدم حل کر کے پیش کرتا ہوں۔ (جس قدم پر آپ کو دشواری پیش آئے، حصہ ۲.۳.۲ سے مدد لیں جہاں مکمل تفصیل پیش کی گئی ہے۔)

کولمب مخفیہ، مساوات ۴.۵۲، ($E > 0$ کے لئے) استمراری حالات، جو الیکٹران پروٹون بکھراو کو ظاہر کرتے ہیں، تسلیم کرنے کے ساتھ ساتھ غیر مسلسل مقید حالات، جو ہائیڈروجن جوہر کو ظاہر کرتے ہے، بھی تسلیم کرتا ہے۔ ہماری دلچسپی موخر الذکر میں ہے۔

۴.۲.۱ رداسی تفاعل موج

سب سے پہلے نئی علامتیں متعارف کرتے ہوئے مساوات کی بہتر (صاف) صورت حاصل کرتے ہیں۔ درج ذیل متعارف کرکے (جہاں مقید حالات کے لئے e منفی ہونے کی وجہ سے κ حقیقی ہوگا)

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \tag{۴.۵۴}$$

مساوات ۴.۵۳ کو E سے تقسیم کرنے سے

$$\frac{1}{\kappa^2}\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2} = \Big[1 - \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa}\frac{1}{(\kappa r)} + \frac{l(l+1)}{(\kappa r)^2}\Big]u$$

حاصل ہوگا جس کو دیکھ کر ہمیں خیال آتا ہے کہ ہم درج ذیل علامتیں متعارف کریں

$$\rho \equiv \kappa r, \quad \rho_0 \equiv \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa} \tag{۴.۵۵}$$

لہٰذا درج ذیل لکھا جائے گا۔

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\rho^2} = \Big[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2}\Big]u \tag{۴.۵۶}$$

اس کے بعد ہم حالات کی متقاربی روپ پر غور کرتے ہیں۔ اب $\rho \to \infty$ کرنے سے قوسین کے اندر مستقل جزو غالب ہوگا لہٰذا (تخمیناً) درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\rho^2} = u$$

اس کا عمومی حل درج ذیل ہے

$$u(\rho) = Ae^{-\rho} + Be^{\rho} \tag{۴.۵۷}$$

تاہم ($\rho \to \infty$ کی صورت میں) e^{ρ} بے قابو بڑھتا ہے لہٰذا ہمیں $B = 0$ لینا ہوگا۔ یوں ρ کی بڑی قیمتوں کے لیے درج ذیل ہوگا۔

$$u(\rho) \sim Ae^{-\rho} \tag{۴.۵۸}$$

اس کے بر عکس $\rho \to 0$ کی صورت میں مرکز گریز جزو غالب ہو گا؛[۲۴] لہٰذا تخمیناً درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\rho^2} = \frac{l(l+1)}{\rho^2}u$$

جس کا عمومی حل (تصدیق کیجیے) درج ذیل ہو گا

$$u(\rho) = C\rho^{l+1} + D\rho^{-l}$$

تاہم ($\rho \to 0$ کی صورت میں) ρ^{-l} بے قابو بڑھتا ہے لہٰذا $D = 0$ ہو گا۔ یوں ρ کی چھوٹی قیمتوں کے لیے درج ذیل ہو گا۔

$$u(\rho) \sim C\rho^{l+1} \tag{۴.۵۹}$$

اگلے قدم پر متقاربی رویہ کو چھیلنے کی خاطر نیا تفاعل $v(\rho)$:

$$u(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\rho}v(\rho) \tag{۴.۶۰}$$

اس امید سے متعارف کرتے ہے کہ $u(\rho)$ سے $v(\rho)$ زیادہ سادہ ہو گا۔ ابتدائی نتائج

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho} = \rho^l e^{-\rho}\Big[(l+1-\rho)v + \rho\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho}\Big]$$

اور

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}\rho^2} = \rho^l e^{-\rho}\Big\{\Big[-2l-2+\rho+\frac{l(l+1)}{\rho}\Big]v + 2(l+1-\rho)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + \rho\frac{\mathrm{d}^2 v}{\mathrm{d}\rho^2}\Big\}$$

خوش آئین نظر نہیں آتے ہیں۔ اس طرح $v(\rho)$ کی صورت میں رداسی مساوات (مساوات ۴.۵۶) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$\rho\frac{\mathrm{d}^2 v}{\mathrm{d}\rho^2} + 2(l+1-\rho)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)]v = 0 \tag{۴.۶۱}$$

آخر میں ہم فرض کرتے ہیں کہ حل، $v(\rho)$، کو ρ کا طاقتی تسلسل لکھا جا سکتا ہے۔

$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j\rho^j \tag{۴.۶۲}$$

[۲۴] یہ دلیل $l = 0$ کی صورت میں کارآمد نہیں ہو گی (اگرچہ مساوات ۴.۵۹ میں پیش نتیجہ اس صورت کے لئے بھی درست ہے)۔ بہر حال، میرا مقصد نئی علامتیت (مساوات ۴.۶۰) کے استعمال کے لئے راستہ ہموار کرنا ہے۔

ہمیں عددی سر (c_0 ، c_1 ، c_2 ، وغیرہ) تلاش کرنے ہوں گے۔ جزو در جزو تفرق لیتے ہیں۔

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} jc_j\rho^{j-1} = \sum_{j=0}^{\infty}(j+1)c_{j+1}\rho^j$$

[میں نے دوسرے مجموعہ میں "فرضی اشاریہ" j کو $j+1$ کہا ہے۔ اگر آپ کو یقین نہ ہو تو اولین چند اجزاء صریحاً لکھ کر تصدیق کر لیں۔ آپ سوال اٹھا سکتے ہیں کہ نیا مجموعہ $j = -1$ سے کیوں شروع نہیں کیا گیا؛ تاہم جزو ضربی $(j+1)$ اس جزو کو ختم کرتا ہے لہٰذا ہم صفر سے بھی شروع کر سکتے ہیں۔] دوبارہ تفرق لیتے ہیں۔

$$\frac{\mathrm{d}^2 v}{\mathrm{d}\rho^2} = \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1)c_{j+1}\rho^{j-1}$$

انہیں مساوات ۴.۶۱ میں پر کرتے ہیں۔

$$\sum_{j=0}^{\infty} j(j+1)c_{j+1}\rho^j + 2(l+1) + \sum_{j=0}^{\infty}(j+1)c_{j+1}\rho^j \\ -2\sum_{j=0}^{\infty} jc_j\rho^j + [\rho_0 - 2(l+1)]\sum_{j=0}^{\infty} c_j\rho^j = 0$$

ایک جیسی طاقتوں کے عددی سروں کو مساوی رکھتے ہوئے

$$j(j+1)c_{j+1} + 2(l+1)(j+1)c_{j+1} - 2jc_j + [\rho_0 - 2(l+1)]c_j = 0$$

یا

$$c_{j+1} = \left\{\frac{2(j+l+1)-\rho_0}{(j+1)(j+2l+2)}\right\}c_j \tag{۴.۶۳}$$

ہو گا۔ یہ کلیہ توالی عددی سر تعین کرتے ہوئے تفاعل $v(\rho)$ تعین کرتا ہے۔ ہم c_0 سے شروع کر کے (جو مجموعی مستقل کا روپ اختیار کرتا ہے جسے آخر میں معمول زنی سے حاصل کیا جائے گا)، مساوات ۴.۶۳ سے c_1 تعین کرتے ہے؛ جس کو واپس اسی مساوات میں پر کر کے c_2 تعین ہو گا، وغیرہ، وغیرہ۔[۲۵]

[۲۵] آپ پوچھ سکتے ہیں: طاقتی تسلسل کی ترکیب $u(\rho)$ پر ہی کیوں لاگو نہیں کی گئی؛ اس ترکیب کے اطلاق سے قبل متقاربی رویہ کو کیوں (جزو ضربی کی صورت میں) باہر نکالا گیا؟ در حقیقت اس کی وجہ نتائج کی خوبصورتی ہے۔ جزو ضربی ρ^{l+1} باہر نہ نکالنے سے تسلسل کے ابتدائی اجزاء صفر ہوں گے (پہلا غیر صفر عددی سر c_{l+1} ہو گا)؛ ρ^{l+1} باہر نکالنے سے تسلسل کا پہلا جزو ρ^0 حاصل ہو گا۔ اس کے برعکس جزو ضربی $e^{-\rho}$ باہر نکالنا زیادہ ضروری ہے؛ اسے باہر نہ نکالنے سے c_{j+2} ، c_{j+1} اور c_j پر مشتمل تین اجزائی کلیہ توالی حاصل ہوتا ہے (کر کے دیکھیں!) جس کے ساتھ کام کرنا زیادہ مشکل ثابت ہوتا ہے۔

آئے j کی بڑی قیمت (جو ρ کی بڑی قیمت کے مطابقتی ہوں گے جہاں بلند طاقتیں غالب ہوں گی) کے لئے عددی سروں کی صورت دیکھے۔ یہاں کلیہ توالی درج ذیل کہتا ہے۔[۲۶]

$$c_{j+1} \cong \frac{2j}{j(j+1)}c_j = \frac{2}{j+1}c_j$$

ایک لمحہ کے لیے فرض کرے کہ یہ بالکل ٹھیک رشتہ ہے۔ تب

$$c_j = \frac{2^j}{j!}c_0 \tag{۴.۶۴}$$

لہٰذا

$$v(\rho) = c_0 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2^j}{j!}\rho^j = c_0 e^{2\rho}$$

اور یوں درج ذیل ہوگا

$$u(\rho) = c_0 \rho^{l+1} e^{\rho} \tag{۴.۶۵}$$

جو ρ کی بڑی قیمتوں کے لیے بے قابو بڑھتا ہے۔ مثبت قوت نما وہی غیر پسندیدہ متقاربی رویہ دیتا ہے جو مساوات ۴.۵۷ میں پایا گیا۔ (درحقیقت متقاربی حل بھی رداسی مساوات کے جائز حل ہیں البتہ ہم ان میں دلچسپی نہیں رکھتے ہیں کیونکہ یہ معمول پر لانے کے قابل نہیں ہیں۔) اس المیہ سے نجات کا صرف ایک ہی راستہ ہے؛ تسلسل کو کہیں نہ کہیں اختتام پذیر ہونا ہوگا۔ لازمی طور پر ایک ایسا زیادہ سے زیادہ عدد صحیح، $j_{\text{بلندتر}}$، پایا جائے گا جس پر درج ذیل ہو۔

$$c_{(j_{\text{بلندتر}}+1)} = 0 \tag{۴.۶۶}$$

(یوں کلیہ توالی کے تحت باقی تمام (زیادہ بلند) عددی سر صفر ہوں گے۔) مساوات ۴.۶۳ سے ظاہر ہے کہ درج ذیل ہوگا۔

$$2(j_{\text{بلندتر}} + l + 1) - \rho_0 = 0$$

صدر کوانٹم عدد[۲۷]

$$n \equiv j_{\text{بلندتر}} + l + 1 \tag{۴.۶۷}$$

---

[۲۶] آپ پوچھ سکتے ہیں: شمار کنندہ میں $2(l+1) - \rho_0$ اور نسب نما میں $2l + 2$ رد کرنے کی طرح $j + 1$ میں 1 کیوں رد نہیں کیا جاتا؟ اس تخمین میں ایسا کیا جا سکتا ہے، تاہم اسے رد نہ کرنے سے دلیل زیادہ واضح ہوگا۔ آپ 1 کو رد کر کے دیکھ سکتے ہیں کہ میں کیا کہنا چاہتا ہوں۔

[۲۷] principal quantum number

متعارف کرتے ہوئے درج ذیل ہو گا۔

$$\rho_0 = 2n \tag{۴.۶۸}$$

اب E کو ρ_0 تعین کرتا ہے (مساوات ۴.۵۴ اور ۴.۵۵)

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{me^4}{8\pi^2\epsilon^2\hbar^2\rho^2} \tag{۴.۶۹}$$

لہٰذا اجازتی توانائیاں درج ذیل ہوں گی۔

$$E_n = -\left[\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon}\right)^2\right]\frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{۴.۷۰}$$

یہ مشہور زمانہ **کلیہ بوہر**[۲۸] ہے جو غالباً پورے کوانٹم میکانیات میں اہم ترین نتیجہ ہے۔ جناب بوہر نے 1913 میں، ناقابل استعمال کلاسیکی طبیعیات اور نیم کوانٹم میکانیات کے ذریعہ یہ کلیہ کو اخذ کیا۔ مساوات شروڈنگر 1924 میں منظر عام ہوئی۔)

مساوات ۴.۵۵ اور ۴.۶۸ کو ملا کر درج ذیل حاصل ہو گا

$$\kappa = \left(\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\right)\frac{1}{n} = \frac{1}{an} \tag{۴.۷۱}$$

جہاں

$$a \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-10}\,\mathrm{m} \tag{۴.۷۲}$$

رداس بوہر[۲۹] کہلاتا[۳۰] ہے۔ یوں (مساوات ۴.۵۵ دوبارہ استعمال کرتے ہوئے) درج ذیل ہو گا۔

$$\rho = \frac{r}{an} \tag{۴.۷۳}$$

ہائیڈروجن جوہر کے فضائی تفاعلات موج کے نام تین کوانٹائی اعداد (n ، l اور m) استعمال کر کے رکھے جاتے ہیں

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi) \tag{۴.۷۴}$$

جہاں مساوات ۴.۳۶ اور ۴.۶۰ کو دیکھتے ہوئے

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r}\rho^{l+1}e^{-\rho}v(\rho) \tag{۴.۷۵}$$

---

[۲۸] Bohr formula

[۲۹] Bohr radius

[۳۰] رداس بوہر کو روایتی طور پر زیر نوشت کے ساتھ لکھا جاتا ہے: a_0 ، تاہم یہ غیر ضروری ہے لہٰذا میں اس کو صرف a لکھوں گا۔

ہو گا جبکہ $v(\rho)$ متغیر ρ میں درجہ $j_{\text{بلند تر}} = n - l - 1$ کا کثیر رکنی ہو گا، جس کے عددی سر درج ذیل کلیہ توالی دے گا (اور پورے تفاعل کو معمول پر لانا باقی ہے)۔

$$c_{j+1} = \frac{2(j+l+1-n)}{(j+1)(j+2l+2)}c_j \tag{۴.۷۶}$$

زمینی حال[۳۱] (یعنی کم سے کم توانائی کے حال) کے لیے $n = 1$ ہو گا؛ طبعی مستقلات کی قیمتیں پر کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$E_1 = -\Big[\frac{m}{2\hbar^2}\Big(\frac{e^2}{4\pi\epsilon}\Big)^2\Big] = -13.6\,\text{eV} \tag{۴.۷۷}$$

ظاہر ہوا کہ ہائیڈروجن کی **بندشی توانائی**[۳۲] (زمینی حال میں الیکٹران کو درکار توانائی کی وہ مقدار جو جوہر کو باردارہ بنائے) $13.6\,\text{eV}$ ہے۔ مساوات ۴.۶۷ کے تحت $l = 0$ لہٰذا $m = 0$ ہو گا (مساوات ۴.۲۹ دیکھیے) یوں درج ذیل ہو گا۔

$$\psi_{100}(r,\theta,\phi) = R_{10}(r)Y_0^0(\theta,\phi) \tag{۴.۷۸}$$

کلیہ توالی پہلے جزو پر ہی اختتام پذیر ہوتا ہے (مساوات ۴.۷۶ سے $j = 0$ کے لئے $c_1 = 0$ حاصل ہوتا ہے)، لہٰذا $v(\rho)$ ایک مستقل (c_0) ہو گا اور یوں درج ذیل ہو گا۔

$$R_{10}(r) = \frac{c_0}{a}e^{-r/a} \tag{۴.۷۹}$$

اس کو مساوات ۴.۳۱ کے تحت معمول پر لانے سے

$$\int_0^\infty |R_{10}|^2\,r^2\,\mathrm{d}r = \frac{|c_0|^2}{a^2}\int_0^\infty e^{-2r/a}r^2\,\mathrm{d}r = |c_0|^2\,\frac{a}{4} = 1$$

یعنی $c_0 = 2/\sqrt{a}$ حاصل ہو گا۔ مزید $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ ہے لہٰذا ہائیڈروجن کا زمینی حال درج ذیل ہو گا۔

$$\psi_{100}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a} \tag{۴.۸۰}$$

اسی طرح $n = 2$ کے لئے توانائی

$$E_2 = \frac{-13.6\,\text{eV}}{4} = -3.4\,\text{eV} \tag{۴.۸۱}$$

ہو گی جو پہلی ہیجان حال، یا حالات کی بندشی توانائی ہے کیونکہ $l = 0$ ہو سکتا ہے (جس میں $m = 0$ ہو گا) یا $l = 1$ ہو سکتا ہے (جس کے لئے m کی قیمت -1، 0 یا $+1$ ہو گی)؛ یوں چار مختلف حالات کی یہی توانائی ہو گی۔ کلیہ توالی

[۳۱] ground state
[۳۲] binding energy

(مساوات ۴.۷۶) $l = 0$ کے لئے $j = 0$ استعمال کرتے ہوئے $c_1 = -c_0$ اور $j = 1$ استعمال کرتے ہوئے $c_2 = 0$ دے گا لہٰذا $v(\rho) = c_0(1 - \rho)$ اور درج ذیل ہو گا۔

$$R_{20}(r) = \frac{c_0}{2a}\left(1 - \frac{r}{2a}\right)e^{-r/2a} \tag{۴.۸۲}$$

[دھیان رہے کہ مختلف کوانٹم اعداد l اور n کے لئے پھیلاو عددی سر $\{c_j\}$ مکمل طور پر مختلف ہوں گے۔] کلیہ توالی $l = 1$ کی صورت میں پہلے جزو پر تسلسل کو اختتام پذیر کرتا ہے؛ $v(\rho)$ ایک مستقل ہو گا لہٰذا درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$R_{21}(r) = \frac{c_0}{4a^2} r e^{-r/2a} \tag{۴.۸۳}$$

(ہر منفرد صورت میں c_0 معمول زنی سے تعین ہو گا سوال 11.4 دیکھیں)۔

کسی بھی اختیاری n کے لئے (مساوات ۴.۶۷ سے ہم آہنگ) l کی ممکنہ قیمتیں درج ذیل ہوں گی

$$l = 0, 1, 2, \cdots, n - 1 \tag{۴.۸۴}$$

جبکہ ہر l کے لئے m کی ممکنہ قیمتوں کی تعداد $(2l + 1)$ ہو گی (مساوات ۴.۲۹)، لہٰذا E_n سطح توانائی کی کل انحطاطیت درج ذیل ہو گی۔

$$d(n) = \sum_{l=0}^{n-1}(2l + 1) = n^2 \tag{۴.۸۵}$$

کثیر رکنی $v(\rho)$ (جو مساوات ۴.۷۶ کے کلیہ توالی سے حاصل ہو گی) ایک ایسا تفاعل ہے جس سے عملی ریاضی دان بخوبی واقف ہیں؛ ماسوائے معمول زنی کے، اسے درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$v(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho) \tag{۴.۸۶}$$

جہاں

$$L_{q-p}^{p}(x) \equiv (-1)^p \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^p L_q(x) \tag{۴.۸۷}$$

ایک **شریک لاگیغ کثیر رکنی**[۳۳] ہے جبکہ

$$L_q(x) \equiv e^x \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^q (e^{-x} x^q) \tag{۴.۸۸}$$

q ویں **لاگیغ کثیر رکنی**[۳۴] ہے۔[۳۵] (جدول ۴.۵ میں چند ابتدائی لاگیغ کثیر رکنیاں پیش کی گئی ہیں؛ جدول ۴.۶ میں

[۳۳] associated Laguerre polynomial

جدول ۴.۵: ابتدائی چند لاگیغ کثیر رکنیاں، $L_q(x)$

$L_0 = 1$
$L_1 = -x + 1$
$L_2 = x^2 - 4x + 2$
$L_3 = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6$
$L_4 = x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24$
$L_5 = -x^5 + 25x^4 - 200x^3 + 600x^2 - 600x + 120$
$L_6 = x^6 - 36x^5 + 450x^4 - 2400x^3 + 5400x^2 - 4320x + 720$

جدول ۴.۶: ابتدائی چند شریک لاگیغ کثیر رکنیاں، $L_{q-p}^{p}(x)$

$L_0^2 = 2$	$L_0^0 = 1$
$L_1^2 = -6x + 18$	$L_1^0 = -x + 1$
$L_2^2 = 12x^2 - 96x + 144$	$L_2^0 = x^2 - 4x + 2$
$L_0^3 = 6$	$L_0^1 = 1$
$L_1^3 = -24x + 96$	$L_1^1 = -2x + 4$
$L_2^3 = 60x^2 - 600x + 1200$	$L_2^1 = 3x^2 - 18x + 18$

جدول ۷.۴: ہائیڈروجن کے ابتدائی چند رداسی تفاعلات، $R_{nl}(r)$

$R_{10} = 2a^{-3/2}e^{-r/a}$
$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{2}\frac{r}{a}\right)e^{-r/2a}$
$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}}a^{-3/2}\frac{r}{a}e^{-r/2a}$
$R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{2}{3}\frac{r}{a} + \frac{2}{27}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)e^{-r/3a}$
$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{6}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)e^{-r/3a}$
$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}}a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/3a}$
$R_{40} = \frac{1}{4}a^{-3/2}\left(1 - \frac{3}{4}\frac{r}{a} + \frac{1}{8}\left(\frac{r}{a}\right)^2 - \frac{1}{192}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right)e^{-r/4a}$
$R_{41} = \frac{\sqrt{5}}{16\sqrt{3}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{4}\frac{r}{a} + \frac{1}{80}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)\left(\frac{r}{a}\right)e^{-r/4a}$
$R_{42} = \frac{1}{64\sqrt{5}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{12}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/4a}$
$R_{43} = \frac{1}{768\sqrt{35}}a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^3 e^{-r/4a}$

چند ابتدائی شریک لاگیغ کثیر رکنیاں پیش کئے گئی ہیں؛ جدول ۴.۷ میں چند ابتدائی رداسی تفاعل امواج پیش کئے گئے ہیں جنہیں شکل 4.4 میں ترسیم کیا گیا ہے۔) ہائیڈروجن کے معمول شدہ تفاعلات موج درج ذیل ہیں۔

$$\psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}\, e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l [L^{2l+1}_{n-l-1}(2r/na)] Y^m_l(\theta,\phi) \tag{۴.۸۹}$$

یہ تفاعلات خوفناک نظر آتے ہیں لیکن شکوہ نہ کیجیے گا؛ یہ اُن چند حقیقی نظاموں میں سے ایک ہے جن کا بند روپ میں ٹھیک حل حاصل کرنا ممکن ہے۔ دھیان رہے، اگرچہ تفاعلات موج تینوں کوانٹائی اعداد کے تابع ہیں، توانائیوں (مساوات ۴.۷۰) کو صرف n تعین کرتا ہے۔ یہ کولمب توانائی کی ایک مخصوص خاصیت ہے؛ آپ کو یاد ہو گا کہ کروی کنواں میں توانائیاں l پر منحصر تھیں (مساوات ۴.۵۰)۔ تفاعلات موج باہمی عمودی

$$\int \psi^*_{nlm}\psi_{n'l'm'} r^2 \sin\theta \,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi = \delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{۴.۹۰}$$

ہیں۔ یہ کروی ہارمونیات کی عمودیت (مساوات ۴.۳۳) اور $(n \neq n')$ کی صورت میں H کی منفرد امتیازی اقدار کے امتیازی تفاعل ہونے کی بنا ہے۔

ہائیڈروجن تفاعلات موج کی تصویر کشی آسان کام نہیں ہے۔ ماہر کیمیا ان کے ایسے کثافتی اشکال بناتے ہیں جن کی چمک $|\psi|^2$ کا راست متناسب ہوتی ہے (شکل 5.4)۔ زیادہ معلومات مستقل کثافت احتمال کی سطحوں (شکل 6.4) کے اشکال دیتی ہیں (جنہیں پڑھنا نسبتاً مشکل ہو گا)۔

سوال ۴.۱۰: کلیہ توالی (مساوات ۴.۷۶) استعمال کرتے ہوئے تفاعل موج R_{30} ، R_{31} اور R_{32} حاصل کریں۔ انہیں معمول پر لانے کی ضرورت نہیں۔

سوال ۴.۱۱:

ا. مساوات ۴.۸۲ میں دیے گئے R_{20} کو معمول پر لا کر ψ_{200} تیار کریں۔

ب. مساوات ۴.۸۳ میں دیے گئے R_{21} کو معمول پر لا کر ψ_{211} ، ψ_{210} اور ψ_{21-1} تیار کریں۔

سوال ۴.۱۲:

ا. مساوات ۴.۸۸ استعمال کرتے ہوئے ابتدائی چار لاگیغ کثیر رکنیاں حاصل کریں۔

ب. مساوات ۴.۸۶، ۴.۸۷ اور ۴.۸۸ استعمال کرتے ہوئے $n = 5$ ، $l = 2$ کی صورت میں $v(\rho)$ تلاش کریں۔

ج. کلیہ توالی (مساوات ۴.۷۶) استعمال کرتے ہوئے $n = 5$ ، $l = 2$ کی صورت میں $v(\rho)$ تلاش کریں۔

سوال ۴.۱۳:

---

[۳۴] Laguerre polynomial

[۳۵] دیگر علامتوں کی طرح ان کے لئے بھی کئی علامتیں استعمال کی جاتی ہیں۔ میں نے سب سے زیادہ مقبول علامتیں استعمال کی ہیں۔

ا. ہائیڈروجن جوہر کے زمینی حال میں الیکٹران کے لیے $\langle r \rangle$ اور $\langle r^2 \rangle$ تلاش کریں۔ اپنے جواب کو رداس بوہر کی صورت میں لکھیں۔

ب. ہائیڈروجن جوہر کے زمینی حال میں الیکٹران کے لیے $\langle x \rangle$ اور $\langle x^2 \rangle$ تلاش کریں۔ اشارہ: آپکو کوئی نیا تکمل حاصل کرنے کی ضرورت نہیں۔ دھیان رہے کہ $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ ہوگا، اور زمینی حال میں تشاکلی کو بروئے کار لائیں۔

ج. حال $n = 2$، $l = 1$، $m = 1$ کے لیے $\langle x^2 \rangle$ تلاش کریں۔ انتباہ: یہ حال x، y اور z کے لحاظ سے تشاکلی نہیں ہے۔ یہاں $x = r\sin\theta\cos\phi$ استعمال کرنا ہوگا۔

سوال ۴.۱۴: ہائیڈروجن کے زمینی حال میں r کی کون سی قیمت زیادہ محتمل ہوگی۔ (اس کا جواب صفر نہیں ہے!) اشارہ: آپکو پہلے معلوم کرنا ہوگا کہ r اور $r + \mathrm{d}r$ کے بیچ الیکٹران پائے جانے کا احتمال کیا ہوگا۔

سوال ۴.۱۵: ہائیڈروجن جوہر ساکن حال $n = 2$، $l = 1$، $m = 1$ اور $n = 2$، $l = 1$، $m = -1$ کے درج ذیل خطی جوڑ سے ابتداء کرتا ہے۔

$$\Psi(\boldsymbol{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{211} + \psi_{21-1})$$

ا. حال $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ تیار کریں۔ اس کی سادہ ترین صورت حاصل کریں۔

ب. مخفی توانائی کی توقعاتی قیمت ی $\langle V \rangle$ تلاش کریں۔ (کیا یہ t کی تابع ہوگی؟) اصل کلیہ اور عددی جواب کو الیکٹران وولٹ تو صورت میں پیش کریں۔

۴.۲.۴ ہائیڈروجن کا طیف

اصولی طور پر ایک ہائیڈروجن جوہر جو ساکن حال ψ_{nlm} میں پایا جاتا ہو ہمیشہ کے لیے اسی حال میں رہے گا۔ تاہم اس کو (دوسرے جوہر کے ساتھ ٹکرا کر یا اس پر روشنی ڈال کر) چھیڑنے سے الیکٹران کسی دوسرے ساکن حال میں **عبور**[36] کر سکتا ہے۔ یہ توانائی جذب کر کے زیادہ توانائی حال منتقل ہو سکتا ہے یا (عموماً برقناطیسی فوٹان کے اخراج سے) توانائی خارج کر کے کم توانائی حال منتقل ہو سکتا ہے۔[37] عملاً ایسی چھیڑ خانیاں ہر وقت پائی جائیں گی لہٰذا عبور (جنہیں "کوانٹم چھلانگ" کہتے ہیں) مستقل طور پر ہوتے رہیں گے، جن کی بنا ہائیڈروجن سے ہر وقت روشنی (فوٹان) خارج ہوگی جس کی توانائی ابتدائی اور اختتامی حالات کی توانائیوں کے فرق

$$E_\gamma = E_i - E_f = -13.6\,\mathrm{eV}\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right) \tag{۴.۹۱}$$

کے برابر ہوگا۔

[36] transition

[37] فطرتاً، اس میں تابع وقت باہم عمل پایا جائے گا جس کی تفصیل باب ۹ میں پیش کی جائے گی۔ یہاں اصل عمل جاننا ضروری نہیں ہے۔

اب **کلیہ پلانک**[۳۸][۳۹] کے تحت فوٹان کی توانائی اس کے تعدد کے راست تناسب ہو گی:

$$E_\gamma = h\nu \tag{۴.۹۲}$$

جبکہ **طول موج** $\lambda = c/\nu$ ہے لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\frac{1}{\lambda} = R\Big(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\Big) \tag{۴.۹۳}$$

جہاں

$$R \equiv \frac{m}{4\pi c \hbar^3}\Big(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_o}\Big)^2 = 1.097 \times 10^7\,\mathrm{m}^{-1} \tag{۴.۹۴}$$

رڈبرگ مستقل[۴۰] کہلاتا ہے۔ مساوات ۴.۹۳ ہائیڈروجن کے طیف کا **کلیہ رڈبرگ**[۴۱] ہے۔ یہ کلیہ انیسویں صدی میں تجرباتی طور پر اخذ کیا گیا۔ نظریہ بوہر کی سب سے بڑی فتح اس کلیے کا حصول ہے جو قدرت کے بنیادی مستقلات کی صورت میں R کی قیمت دیتا ہے۔ زمینی حال $(n_f = 1)$ میں عبور، بالائے بصری خطہ میں پائے جاتے ہیں جنہیں طیف پیمائی کار **لیمان تسلسل**[۴۲] کہتے ہیں۔ پہلی ہیجان حال $(n_f = 2)$ میں عبور، دکھائی دینے والے خطہ میں روشنی پیدا کرتے ہیں جسے **بالمر تسلسل**[۴۳] کہتے ہیں۔ اسی طرح $n_f = 3$ میں عبور، **پاشن تسلسل**[۴۴] دیتے ہیں جو زیر بصری شعاع ہے، وغیرہ وغیرہ (شکل 7.4 دیکھیں)۔ (رہائشی حرارت پر زیادہ تر ہائیڈروجن جوہر زمینی حال میں ہونگے؛ اخراجی طیف حاصل کرنے کی خاطر آپکو پہلے مختلف ہیجان حالات میں الیکٹران آباد کرنے ہوں گے؛ ایسا عموماً گیس میں برقی شعلہ پیدا کر کے کیا جاتا ہے۔) سوال ۴.۱۶: ہائیڈروجن جوہر Z پروٹان کے مرکزہ کے گرد طواف کرتے ہوئے ایک الیکٹران پر مشتمل ہے۔ (از خود ہائیڈروجن میں $Z = 1$ جبکہ باردارہ **ہیلیم**[۴۵] میں $Z = 2$ اور دوہری باردارہ **لتھیم**[۴۶] میں $Z = 3$ ہو گا، وغیرہ وغیرہ۔) ہائیڈروجن جوہر کی بوہر توانائیاں $E_n(Z)$، بندشی توانائی $E_1(Z)$، رداس بوہر $a(Z)$، اور رڈبرگ مستقل $R(Z)$ تعین کریں۔ (اپنے جوابات کو ہائیڈروجن کی متعلقہ قیمتوں کے لحاظ سے پیش کریں۔) برقناطیسی طیف کے کس خطہ میں

[۳۸] Planck's formula

[۳۹] فوٹان درحقیقت برقناطیسی اخراج کا ایک کوانٹم ہے۔ یہ ایک اضافیتی چیز ہے جس پر غیر اضافی کوانٹم میکانیات قابل استعمال نہیں ہے۔ اگرچہ ہم چند مواقع پر فوٹان کی بات کرتے ہوئے کلیہ پلانک سے اس کی توانائی حاصل کریں گے، یاد رہے کہ اس کا اس نظریہ سے کوئی تعلق نہیں جس پر ہم بات کر رہے ہیں۔

[۴۰] Rydberg constant

[۴۱] Rydberg formula

[۴۲] Lyman series

[۴۳] Balmer series

[۴۴] Paschen series

[۴۵] Helium

[۴۶] Lithium

$Z = 2$ اور $Z = 3$ کی صورت میں لیمان تسلسل پائے جائیں گے؟ اشارہ: کسی نئے حساب کی ضرورت نہیں ہے؛ مخفیہ (مساوات ۴.۵۲) میں $e^2 \to Ze^2$ ہو گا لہٰذا تمام نتائج میں بھی یہی کچھ پر کرنا ہو گا۔

سوال ۴.۱۷: زمین اور سورج کو ہائیڈروجن جوہر کا متبادل تجاذبی نظام تصور کریں۔

ا. مساوات ۴.۵۲ کی جگہ مخفی توانائی تفاعل کیا ہو گا؟ (زمین کی کمیت m جبکہ سورج کی کمیت M لیں۔)

ب. اس نظام کا "رداس بوہر" a_g کیا ہو گا؟ اس کی عددی قیمت تلاش کریں۔

ج. تجاذبی کلیہ بوہر لکھ کر رداس r_0 کے مدار میں سیارہ کے کلاسیکی توانائی کو E_n کے برابر رکھ کر دکھائیں کہ $n = \sqrt{r_0/a_g}$ ہو گا۔ اس سے زمین کے کوانٹائی عدد n کی اندازاً قیمت تلاش کریں۔

د. فرض کریں زمین اگلی نچلی سطح $(n-1)$ میں عبور کرتی ہے۔ کتنی توانائی کا اخراج ہو گا؟ جواب جاول میں دیں۔ خارج فوٹان (یا زیادہ ممکنہ طور پر گریویٹان) کا طول موج کیا ہو گا؟ (اپنے جواب کو نوری سالوں میں پیش کریں۔ کیا یہ حیرت انگیز نتیجہ محض ایک اتفاق ہے۔)

۴.۳ زاویائی معیار حرکت

ہم دیکھ چکے ہیں کہ ہائیڈروجن جوہر کے ساکن حالات کو تین کوانٹائی اعداد n، l اور m کے لحاظ سے نام دیا جاتا ہے۔ صدر کوانٹم عدد (n) حال کی توانائی تعین کرتا ہے (مساوات ۴.۷۰)؛ ہم دیکھیں گے کہ l اور m مداری زاویائی معیار حرکت سے تعلق رکھتے ہیں۔ کلاسیکی نظریہ میں وسطی قوتیں، توانائی اور معیار حرکت بنیادی بقائی مقداریں ہیں، اور یہ حیرت کی بات نہیں کہ کوانٹم میکانیات میں زاویائی معیار حرکت (اس سے بھی زیادہ) اہمیت رکھتا ہے۔

کلاسیکی طور پر (مبدا کے لحاظ سے) ایک ذرہ کی زاویائی معیار حرکت درج ذیل کلیہ دیتا ہے

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} \tag{۴.۹۵}$$

جس کے تحت درج ذیل ہو گا۔

$$L_x = yp_z - zp_y, \qquad L_y = zp_x - xp_z, \qquad L_z = xp_y - yp_x \tag{۴.۹۶}$$

ان کے متعلقہ کوانٹم عاملین معیاری نسخہ $p_x \to -i\hbar\partial/\partial x$، $p_y \to -i\hbar\partial/\partial y$، $p_z \to -i\hbar\partial/\partial z$ سے حاصل ہوں گے۔ باب ۲ میں ہم نے ہارمونی مرتعش کے اجازتی توانائیوں کو خالص الجبرائی ترکیب سے حاصل کیا۔ اگلے حصہ میں الجبرائی ترکیب استعمال کرتے ہوئے زاویائی معیار حرکت عاملین کے امتیازی اقدار حاصل کیے جائیں گے۔ یہ ترکیب، عاملین کے تبادلی تعلقات پر مبنی ہے۔ اس کے بعد ہم امتیازی تفاعلات حاصل کریں گے جو زیادہ دشوار کام ہے۔

۴.۳.۱ امتیازی اقدار

عاملین L_x اور L_y آپس میں ناقابل تبادل ہیں۔ درحقیقت درج ذیل ہو گا۔

$$\begin{aligned}[L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z]\end{aligned} \tag{۴.۹۷}$$

جوابات