کوانٹم میکانیات

خالد خان یوسفزئی

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

۲۹ جولائی ۲۰۲۱

عنوان

میری پہلی کتاب کا دیباچہ vii

۱ تفاعل موج ۱
۱.۱ شروڈنگر مساوات ۱
۱.۲ شماریاتی مفہوم ۲
۱.۳ احتمال ۵
۱.۳.۱ غیر مسلسل متغیرات ۵
۱.۳.۲ استمراری متغیرات ۹
۱.۴ معمول زنی ۱۲
۱.۵ معیار حرکت ۱۵
۱.۶ اصول عدم یقینیت ۱۸

۲ غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات ۲۱
۲.۱ ساکن حالات ۲۱
۲.۲ لامتناہی چکور کنواں ۲۷
۲.۳ ہارمونی مرتعش ۳۶
۲.۳.۱ الجبرائی ترکیب ۳۸
۲.۳.۲ تحلیلی ترکیب ۴۷
۲.۴ آزاد ذرہ ۵۵
۲.۵ ڈیلٹا تفاعل مخفیہ ۶۴
۲.۵.۱ مقید حالات اور بکھراو حالات ۶۴
۲.۵.۲ ڈیلٹا تفاعل کنواں ۶۶
۲.۶ متناہی چکور کنواں ۷۵

۳ قواعد وضوابط ۸۵
۳.۱ ہرمشی عامل کے امتیازی تفاعل ۸۵
۳.۱.۱ غیر مسلسل طیف ۸۵
۳.۱.۲ استمراری طیف ۸۷

۳.۲ متعمم شماریاتی مفہوم ۹۱
۳.۳ اصول عدم یقینیت ۹۴
۳.۳.۱ اصول عدم یقینیت کا ثبوت ۹۵
۳.۳.۲ کم سے کم عدم یقینیت کا موجی اکٹھ ۹۸
۳.۳.۳ توانائی و وقت اصول عدم یقینیت ۹۹
۳.۴ ڈیراک علامتیت ۱۰۳

۴ تین ابعادی کوانٹم میکانیات ۱۱۷
۴.۱ کروی محدد میں مساوات شروڈنگر ۱۱۷
۴.۱.۱ علیحدگی متغیرات ۱۱۹
۴.۱.۲ زاویائی مساوات ۱۲۰
۴.۱.۳ رداسی مساوات ۱۲۵
۴.۲ ہائیڈروجن جوہر ۱۲۹
۴.۲.۱ رداسی تفاعل موج ۱۳۰
۴.۲.۲ ہائیڈروجن کا طیف ۱۴۰
۴.۳ زاویائی معیار حرکت ۱۴۲
۴.۳.۱ امتیازی اقدار ۱۴۳

۵ متماثل ذرات ۱۴۷

۶ غیر تابع وقت نظریہ اضطراب ۱۴۹
۶.۱ غیر انحطاطی نظریہ اضطراب ۱۴۹
۶.۱.۱ عمومی ضابطہ بندی ۱۴۹
۶.۱.۲ اول رتبی نظریہ ۱۵۰
۶.۱.۳ دوم رتبی توانائیاں ۱۵۴
۶.۲ انحطاطی نظریہ اضطراب ۱۵۵
۶.۲.۱ دوپڑتا انحطاط ۱۵۵

۷ تغیری اصول ۱۵۳

۸ وکب تخمین ۱۵۵

۹ تابع وقت نظریہ اضطراب ۱۵۷

۱۰ حرارت ناگزر تخمین ۱۵۹

۱۱ بکھراو ۱۶۱

۱۲ پس نوشت ۱۶۳

جوابات ۱۶۵

ا خطی الجبرا ۱۶۷
۱.۱ سمتیات ۱۶۷
۲.۱ اندرونی ضرب ۱۶۷
۳.۱ قالب ۱۶۷
۴.۱ تبدیلی اساس ۱۶۷
۵.۱ امتیازی تفاعلات اور امتیازی اقدار ۱۶۷
۶.۱ ہرمشی تبادلے ۱۶۷

فرہنگ ۱۶۹

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

گزشتہ چند برسوں سے حکومتِ پاکستان اعلیٰ تعلیم کی طرف توجہ دے رہی ہے جس سے ملک کی تاریخ میں پہلی مرتبہ اعلیٰ تعلیمی اداروں میں تحقیق کا رجحان پیدا ہوا ہے۔ امید کی جاتی ہے کہ یہ سلسلہ جاری رہے گا۔

پاکستان میں اعلیٰ تعلیم کا نظام انگریزی زبان میں رائج ہے۔ دنیا میں تحقیقی کام کا بیشتر حصہ انگریزی زبان میں ہی چھپتا ہے۔ انگریزی زبان میں ہر موضوع پر لاتعداد کتابیں پائی جاتی ہیں جن سے طلبہ و طالبات استفادہ کرتے ہیں۔

ہمارے ملک میں طلبہ و طالبات کی ایک بہت بڑی تعداد بنیادی تعلیم اردو زبان میں حاصل کرتی ہے۔ ان کے لئے انگریزی زبان میں موجود مواد سے استفادہ کرنا تو ایک طرف، انگریزی زبان از خود ایک رکاوٹ کے طور پر ان کے سامنے آتی ہے۔ یہ طلبہ و طالبات ذہین ہونے کے باوجود آگے بڑھنے اور قوم و ملک کی بھرپور خدمت کرنے کے قابل نہیں رہتے۔ ایسے طلبہ و طالبات کو اردو زبان میں نصاب کی اچھی کتابیں درکار ہیں۔ ہم نے قومی سطح پر ایسا کرنے کی کوئی خاطر خواہ کوشش نہیں کی۔

میں برسوں تک اس صورت حال کی وجہ سے پریشانی کا شکار رہا۔ کچھ کرنے کی نیت رکھنے کے باوجود کچھ نہ کر سکتا تھا۔ میرے لئے اردو میں ایک صفحہ بھی لکھنا ناممکن تھا۔ آخر کار ایک دن میں نے اپنی اس کمزوری کو کتاب نہ لکھنے کا جواز بنانے سے انکار کر دیا اور یوں یہ کتاب وجود میں آئی۔

یہ کتاب اردو زبان میں تعلیم حاصل کرنے والے طلبہ و طالبات کے لئے نہایت آسان اردو میں لکھی گئی ہے۔ کوشش کی گئی ہے کہ اسکول کی سطح پر نصاب میں استعمال ہونے والے تکنیکی الفاظ ہی استعمال کئے جائیں۔ جہاں ایسے الفاظ موجود نہ تھے وہاں روزمرہ میں استعمال ہونے والے الفاظ چنے گئے۔ تکنیکی الفاظ کی چنائی کے وقت اس بات کا دہان رکھا گیا کہ ان کا استعمال دیگر مضامین میں بھی ممکن ہو۔

کتاب میں بین الاقوامی نظامِ اکائی استعمال کی گئی ہے۔ اہم متغیرات کی علامتیں وہی رکھی گئی ہیں جو موجودہ نظامِ تعلیم کی نصابی کتابوں میں رائج ہیں۔ یوں اردو میں لکھی اس کتاب اور انگریزی میں اسی مضمون پر لکھی کتاب پڑھنے والے طلبہ و طالبات کو ساتھ کام کرنے میں دشواری نہیں ہو گی۔

امید کی جاتی ہے کہ یہ کتاب ایک دن خالصتاً اردو زبان میں انجنیئرنگ کی نصابی کتاب کے طور پر استعمال کی جائے گی۔ اردو زبان میں برقی انجنیئرنگ کی مکمل نصاب کی طرف یہ پہلا قدم ہے۔

اس کتاب کے پڑھنے والوں سے گزارش کی جاتی ہے کہ اسے زیادہ سے زیادہ طلبہ وطالبات تک پہنچانے میں مدد دیں اور انہیں جہاں اس کتاب میں غلطی نظر آئے وہ اس کی نشاندہی میری ای-میل پر کریں۔ میں ان کا نہایت شکر گزار ہوں گا۔

اس کتاب میں تمام غلطیاں مجھ سے ہی سر زد ہوئی ہیں البتہ انہیں درست کرنے میں بہت لوگوں کا ہاتھ ہے۔ میں ان سب کا شکریہ ادا کرتا ہوں۔ یہ سلسلہ ابھی جاری ہے اور مکمل ہونے پر ان حضرات کے تاثرات یہاں شامل کئے جائیں گے۔

میں یہاں کامسیٹ یونیورسٹی اور ہائر ایجوکیشن کمیشن کا شکریہ ادا کرنا چاہتا ہوں جن کی وجہ سے ایسی سرگرمیاں ممکن ہوئیں۔

خالد خان یوسفزئی

28 اکتوبر 2011ء

باب ۶

غیر تابع وقت نظریہ اضطراب

۶.۱ غیر انحطاطی نظریہ اضطراب

۶.۱.۱ عمومی ضابطہ بندی

فرض کریں ہم کسی مخفیہ (مثلاً یک بعدی لامتناہی چکور کنواں) کے لئے غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات:

$$H^0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0 \tag{۶.۱}$$

حل کر کے معیاری عمودی امتیازی تفاعلات ψ_n^0 کا مکمل سلسلہ

$$\langle\psi_n^0|\psi_m^0\rangle = \delta_{nm} \tag{۶.۲}$$

اور ان کی مطابقتی امتیازی اقدار E_n^0 حاصل کرتے ہیں۔ اب ہم مخفیہ میں معمولی اضطراب پیدا کرتے ہیں (مثلاً کنواں کی تہہ میں ایک چھوٹا موڑا ڈال کر؛ شکل 6-1) ہم نئے امتیازی تفاعلات اور امتیازی اقدار جاننا چاہیں گے:

$$H\psi_n = E_n\psi_n \tag{۶.۳}$$

تاہم انتہائی خوش قسمتی کے علاوہ کوئی وجہ نہیں پائی جاتی کہ ہم اس پیچیدہ مخفیہ کے لیے مساوات شروڈنگر کو بالکل ٹھیک ٹھیک حل کر پائیں گے۔ **نظریہ اضطراب** کو غیر مضطرب صورت کے معلوم ٹھیک ٹھیک حلوں کو لے کر قدم بقدم چلتے ہوئے مضطرب مسئلے کے تخمینی حل دیتا ہے ہم نئے ہیملٹنی کو دو اجزاء کا مجموعہ لکھ کر آغاز کرتے ہیں

$$H = H^0 + \lambda H' \tag{۶.۴}$$

جہاں H' اضطراب ہے زیر بالا میں 0 ہمیشہ غیر مضطرب مقدار کو ظاہر کرتا ہے ہم یہاں λ کو ایک چھوٹا عدد تصور کرتے ہیں بعد میں اس کی قیمت کو بڑھا کر ایک (1) کر دی جائے گی اور H اصل ہیملٹنی ہو گا اس کے بعد ہم ψ_n اور E_n کو λ کی طاقتی تسلسل کے صورت میں لکھتے ہیں

$$\psi_n = \psi_n^0 + \lambda\psi_n^1 + \lambda^2\psi_n^2 + \cdots \tag{۶.۵}$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots \tag{۶.۶}$$

یہاں n ویں امتیازی قدر کی قیمت میں **اول رتبی تصحیح** کو E_n^1 ظاہر کرتا ہے جبکہ n ویں امتیازی تفاعل میں **اول رتبی تصحیح** کو ψ_n^1 ظاہر کرتا ہے اسی طرح E_n^2 اور ψ_n^2 دوم رتبی تصحیح ہوں گے وغیرہ وغیرہ مساوات ۶.۵ اور مساوات ۶.۶ کو مساوات ۶.۳ میں پر کر کے

$$(H^0 + \lambda H')[\psi_n^0 + \lambda\psi_n^1 + \lambda^2\psi_n^2 + \cdots] \\ = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots)[\psi_n^0 + \lambda\psi_n^1 + \lambda^2\psi_n^2 + \cdots]$$

یا λ کے ایک جیسے طاقتوں کو اکٹھا لکھ کر درج ذیل لکھا جا سکتا ہے

$$H^0\psi_n^0 + \lambda(H^0\psi_n^1 + H'\psi_n^0) + \lambda^2(H^0\psi_n^2 + H'\psi_n^1) + \cdots \\ = E_n^0\psi_n^0 + \lambda(E_n^0\psi_n^1 + E_n^1\psi_n^0) + \lambda^2(E_n^0\psi_n^2 + E_n^1\psi_n^1 + E_n^2\psi_n^0) + \cdots$$

کمتر رتبہ λ^0 کی صورت میں اس سے $H^0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0$ حاصل ہوتا ہے جو کوئی نئی مساوات نہیں ہے (مساوات ۶.۱)رتبہ اول (λ^1) تک درج ذیل ہو گا

$$H^0\psi_n^1 + H'\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^1 + E_n^1\psi_n^0 \tag{۶.۷}$$

رتبہ دوم (λ^2) تک درج ذیل ہو گا

$$H^0\psi_n^2 + H'\psi_n^1 = E_n^0\psi_n^2 + E_n^1\psi_n^1 + E_n^2\psi_n^0 \tag{۶.۸}$$

وغیرہ وغیرہ (رتبہ پر نظر رکھنے کی غرض سے ہم نے λ استعمال کیا اب اس کی ضرورت نہیں رہی لہٰذا اس کی قیمت ایک، 1 ، کر دیں)

۶.۱.۲ اول رتبی نظریہ

مساوات ۶.۷ کا ψ_n^0 کے ساتھ اندرونی ضرب لیتے ہیں یعنی $(\psi_n^0)^*$ سے ضرب دے کر تکمل لیتے ہیں

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^1\rangle + \langle\psi_n^0|H'\psi_n^0\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle$$

تاہم H^0 ہرمشی ہے لہٰذا

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^1\rangle = \langle H^0\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle$$

ہو گا جو دائیں ہاتھ کے پہلے جزو کو حذف کرے گا مزید $\langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = 1$ کی بنا درج ذیل ہو گا

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle \tag{۶.۹}$$

یہ رتبہ اول نظریہ اضطراب کا بنیادی نتیجہ ہے بلکہ عملاً یہ پوری کوانٹم میکانیات میں غالباً سب سے اہم مساوات ہے یہ کہتی ہے کہ غیر مضطرب حال میں اضطراب کی توقعاتی قیمت توانائی کی اول رتبی تصحیح ہو گی

مثال ۶.۱: لامتناہی چوکور کنواں کی غیر مضطرب تفاعلات موج مساوات 28.2 درج ذیل ہیں

$$\psi_n^0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$$

فرض کریں ہم کنواں کی تہہ کو مستقل مقدار V_0 اوپر اٹھاتے ہوئے اس نظام کو مضطرب کرتے ہیں شکل 2.6 توانائیوں میں رتبہ اول تصحیح تلاش کریں

حل: یہاں $H' = V_0$ ہو گا لہذا n ویں حال کی توانائی میں رتبہ اول تصحیح درج ذیل ہو گی

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | V_0 | \psi_n^0 \rangle = V_0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = V_0$$

یوں تصحیح شدہ توانائیوں کی سطحیں $E_n \cong E_n^0 + V_0$ ہونگے جی ہاں تمام کی تمام V_0 مقدار سے اوپر اٹھتی ہیں یہاں حیرانگی کی بات یہ ہے کہ رتبہ اول نظریہ بالکل ٹھیک جواب دیتا ہے یوں ظاہر ہے کہ مستقل اضطراب کی صورت میں تمام بلند رتبی تصحیح صفر ہوں گی[1] اس کے برعکس کنواں کی نصف چوڑائی تک اضطراب کی وسعت کی صورت میں شکل 3.6 ہو گا۔

$$E_n^1 = \frac{2V_0}{a} \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \mathrm{d}x = \frac{V_0}{2}$$

اب توانائی کی ہر سطح $\frac{V_0}{2}$ اوپر اٹھتی ہے یہ غالباً بالکل ٹھیک نتیجہ نہیں ہے لیکن اول رتبہ تخمین کی نقطہ نظر سے معقول جواب ہے۔ □

مساوات 9.6 ہمیں توانائی کی اول رتبی تصحیح دیتی ہے تفاعل موج کے لئے اول رتبی تصحیح حاصل کرنے کی غرض سے ہم مساوات 7.6 کو درج ذیل روپ میں لکھتے ہے

$$(H^0 - E_n^0)\psi_n^1 = -(H' - E_n^1)\psi_n^0 \tag{۶.۱۰}$$

[1] یہاں کوئی سی چیز لامتناہی چوکور کنواں کی خصوصیات پر منحصر نہیں ہے لہذا یہی کچھ کسی بھی مخفیہ کے لیے مستقل اضطراب کی صورت میں درست ہو گا

چونکہ اس کا دایاں ہاتھ ایک معلوم تفاعل ہے لہٰذا یہ ψ_n^1 میں ایک غیر متجانس تفرقی مساوات ہے اب غیر مضطرب تفاعلات موج ایک مکمل سلسلہ دیتے ہیں لہٰذا کسی بھی تفاعل کی طرح ψ_n^1 کو ان کا خطی جوڑ لکھا جا سکتا ہے

$$\psi_n^1 = \sum_{m \neq n} c_m^{(n)} \psi_m^0 \tag{۶.۱۱}$$

اگر psi_n^1 / مساوات 10.6 کو مطمئن کرتا ہوں تب کسی بھی مستقل α کے لیے $(\psi_n^1 + \alpha\psi_n^0)$ بھی اس مساوات کو مطمئن کرے گا لہٰذا ہم جزو ψ_n^0 کو منفی کر سکتے ہیں ایسے ہی کرتے ہوئے مساوات 11.6 کے مجموعہ میں $m = n$ شامل نہیں کیا گیا عددی سر $c_m^{(n)}$ تعین کر کے ہم مسئلہ حل کر سکتے ہیں ہم مساوات 10.6 میں مساوات 11.6 پر کرتے ہوئے یہ جانتے ہوئے کہ غیر مضطرب شروڈنگر مساوات مساوات 1.6 کو ψ_m^0 مطمئن کرتے ہیں درج ذیل حاصل کرتے ہیں

$$\sum_{m \neq n} (E_m^0 - E_n^0) c_m^{(n)} \psi_m^0 = -(H' - E_n^1)\psi_n^0$$

اس کا ψ_l^0 کے ساتھ اندرونی ضرب لیتے ہیں

$$\sum_{m \neq n} (E_m^0 - E_n^0) c_m^{(n)} \langle \psi_l^0 | \psi_m^0 \rangle = -\langle \psi_l^0 | H' | \psi_n^0 \rangle + E_n^1 \langle \psi_l^0 | \psi_n^0 \rangle$$

اگر $l = n$ ہو تب بایاں ہاتھ صفر ہو گا اور ہمیں دوبارہ مساوات 9.6 ملے گی اگر $l \neq n$ ہو تو درج ذیل ہو گا

$$(E_l^0 - E_n^0) c_l^{(n)} = -\langle \psi_l^0 | H' | \psi_n^0 \rangle$$

یا

$$c_m^{(n)} = \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \tag{۶.۱۲}$$

لہٰذا درج ذیل حاصل ہو گا

$$\psi_n^1 = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle}{(E_n^0 - E_m^0)} \psi_m^0 \tag{۶.۱۳}$$

جب تک غیر مضطرب توانائی طیف غیر انحطاطی ہو نسب نما کوئی ی مسئلہ کھڑا نہیں کرے گا (چونکہ کسی بھی عددی سر کے لئے $m = n$ نہیں ہوتا) ہاں اس صورت میں جب دو غیر مضطرب حالات کی توانائیاں ایک دوسرے جتنی ہو تب مساوات 12.6 میں نسب نما میں صفر پایا جائے گا جو ہمیں مصیبت میں ڈالے گا ایسی صورت میں انحطاطی نظریہ اضطراب کی ضرورت پیش آئے گی جس پر حصہ 2.6 میں غور کیا جائے گا یوں اول رتبی نظریہ اضطراب مکمل ہوتا ہے توانائی کی اول رتبی تصحیح E_n^1 مساوات 9.6 دیتی ہے جبکہ

تفاعل موج کی اول رتبی تصحیح ψ_n^1 مساوات 13.6 دیتی ہے میں آپ کو یہاں یہ ضرور بتانا چاہوں گا کہ اگرچہ نظریہ اضطراب عموماً توانائیوں کی بہت درست قیمتیں دیتا ہے یعنی $E_n^1 + E_n^0$ اصل قیمت E_n کے بہت قریب ہے اس سے حاصل تفاعلات موج عموماً افسوس کن ہوتے ہیں

سوال ۶.۱: فرض کرے ہم لامتناہی چکور کنواں کے وسط میں δ تفاعلی موڑا ڈالتے ہیں

$$H' = \alpha\delta(x - \frac{a}{2})$$

جہاں α ایک مستقل ہے

ا. اجازتی توانائیوں کی اول رتبی تصحیح تلاش کریں بتائیں کہ جفت n کی صورت میں توانائیاں مضطرب کیوں نہیں ہونگی

ب. زمینی حال کی تصحیح ψ_1^1 کی مساوات مساوات 13.6 کی پھیلاو میں ابتدائی تین غیر صفر اجزاء تلاش کریں

سوال ۶.۲: ہارمونی مرتعش $[V(x) = \frac{1}{2}kx^2]$ کی اجازتی توانائیاں درج ذیل ہیں

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

جہاں $\omega = \sqrt{k/m}$ کلاسیکی تعدد ہے اب فرض کرے مقیاس لچک میں معمولی تبدیلی رونما ہوتی ہے $k \to (1+\epsilon)k$

ا. (الف) نہیں توانائیوں کی بالکل ٹھیک ٹھیک قیمتیں حاصل کرے آپ نے کل سیہ کو دوم رتبہ تک ϵ کی طاقتیں تسلسل میں پھیلائیں

ب. اب مساوات 9.6 استعمال کرتے ہوئے توانائی میں اول رتبی اضطراب کا حساب لگائیں یہاں H' کیا ہو گا اپنے نتیجے کا جزو(الف) کے ساتھ موازنہ کرے اشارہ: نئے تکمل کی قیمت کے حصول کی ناضرورت اور نہ اجازت ہے

سوال ۶.۳: ایک لامتناہی چکور کنواں مساوات 19.2 میں دو یکساں بوسن رکھے جاتے ہیں یہ مخفیہ

$$V(x_1, x_2) = -aV_0\delta(x_1 - x_2)$$

جہاں V_0 ایک مستقل ہے جس کا بعد توانائی ہے اور a کنواں کی چوڑائی ہے کے ذریعے ایک دوسرے پر بہت معمولی اثر انداز ہوتے ہیں

ا. پہلی قدم میں ذرات کے باہمی اثر کو نظر انداز کرتے ہوئے زمینی حال اور پہلے ہیجان حال کے تفاعلات موج اور مطابقتی توانائیاں تلاش کریں

ب. اول رتبی نظریہ اضطراب استعمال کرتے ہوئے زمینی حال اور پہلے ہیجان حال کے توانائیوں پر ذرات کے باہمی اثر کا تخمین اول رتبی نظریہ اضطراب سے دریافت کریں

۶.۱.۳ دوم رتبی توانائیاں

یہاں بھی اسی طرح بڑھتے ہوئے ہم ψ_n^0 اور دور تبی مساوات مساوات 8.6 کا اندرونی ضرب لیتے ہیں

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^2\rangle + \langle\psi_n^0|H'\psi_n^1\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^2\rangle + E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^2\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle$$

یہاں بھی ہم H^0 کی ہرمشی پن کو بروئے کار لاتے ہیں

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^2\rangle = \langle H^0\psi_n^0|\psi_n^2\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^2\rangle$$

لہٰذا بائیں ہاتھ کا پہلا جزو دائیں ہاتھ کے پہلے جزو کے ساتھ کٹ جائے گا ساتھ ہی $\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle = 1$ ہو گا لہٰذا ہمارے پاس E_n^2 کا درج ذیل کلیہ رہ جاتا ہے

$$E_n^2 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^1\rangle - E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle \tag{۶.۱۴}$$

تاہم مجموعہ میں $m = n$ شامل نہیں اور باقی تمام عمودی ہیں لہٰذا

$$\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} c_m^{(n)}\langle\psi_n^0|\psi_m^0\rangle = 0$$

ہو گا جس کی بنا

$$E_n^2 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} c_m^{(n)}\langle\psi_n^0|H'|\psi_m^0\rangle = \sum m \neq n\frac{\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle\langle\psi_n^0|H'|\psi_m^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

یا آخر کار

$$E_n^2 = \sum_{m\neq n}\frac{\left|\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\right|^2}{E_n^0 - E_m^0} \tag{۶.۱۵}$$

ہو گا جو دور تبی نظریہ اضطراب کا بنیادی نتیجہ ہے۔

اگرچہ ہم اسی طرح آگے بڑھتے ہوئے تفاعل موج کی دوم رتبی تصحیح ψ_n^2 توانائی کی سوم رتبی تصحیح وغیرہ وغیرہ حاصل کر سکتے ہیں لیکن عملاً اس ترکیب کو صرف مساوات 15.6 تک استعمال کرنا سود مند ہو گا۔ سوال ۶.۴:

ا. توانائیوں کی دوم رتبی درستگی (E_n^2) سوال 1.6 کی مخفیہ کے لیے تلاش کریں۔ تبصرہ: آپ تسلسل کا مجموعہ صریحاً حاصل کر کے طاق n کیلئے $-2m(\alpha/\pi\hbar n)^2$ حاصل کر سکتے ہیں۔

ب. زمینی حال توانائی کے لئے دوم رتبی تصحیح E_n^2 سوال 2.6 کے مخفیہ کے لیے تلاش کریں۔ تصدیق کیجیے گا کہ آپ کا نتیجہ بالکل درست نتیجہ کے مطابق ہے۔

سوال ۶.۵: ایک ایسے باردار ذرہ پر غور کریں جو یک بعدی ہارمونی ارتعاشی مخفیہ میں پایا جاتا ہو۔ فرض کریں ہم ایک کمزور برقی میدان (E) چالو کرتے ہیں جس کی بنا مخفی توانائی میں $H' = qEx$ مقدار کی تبدیلی پیدا ہوتی ہے۔

ا. دکھائیں کہ توانائیوں کی دو سطحوں میں کوئی اول رتبی تبدیلی پیدا نہیں ہو گی۔ دو رتبی تصحیح تلاش کریں۔ اشارہ: سوال 33.3 دیکھیں۔

ب. تبدیلی متغیرات $x' \equiv x - (qE/m\omega^2)$ استعمال کرتے ہوئے موجودہ صورت میں شروڈنگر مساوات کو بلا واسطہ حل کیا جا سکتا ہے۔ ایسا کرتے ہوئے ٹھیک ٹھیک توانائیاں تلاش کر کے دکھائیں کہ یہ نظریہ اضطراب کی تخمین کے مطابق ہے۔

۶.۲ انحطاطی نظریہ اضطراب

اگر غیر مضطرب حالات انحطاطی ہوں یعنی دو یا دو سے زیادہ منفرد حالات ψ_a^0 اور ψ_b^0 کی توانائیاں ایک دوسرے جیسی ہوں تب سادہ نظریہ اضطراب غیر کارآمد ہو گا چونکہ $c_a^{(b)}$ مساوات 12.6 اور E_a^2 مساوات 15.6 بے قابو بڑھتے ہیں شاید ماسوائے اس صورت جب شمار کنندہ صفر ہو $\langle \psi_a^0 | H' | \psi_b^0 \rangle = 0$ اور جس کو ہم بعد میں استعمال کریں گے۔ یوں انحطاط صورت میں ہمیں توانائیوں کی اول

رتبی تصحیح مساوات 9.6 پر بھی یقین نہیں کرنا چاہیے اور ہمیں مسئلے کا کوئی دوسرا حل ڈھونڈنا ہو گا۔

۶.۲.۱ دوپڑتا انحطاط

درج ذیل فرض کریں جہاں ψ_a^0 اور ψ_b^0 معمول شدہ ہیں۔

$$H^0\psi_a^0 = E^0\psi_a^0, \quad H^0\psi_b^0 = E^0\psi_b^0, \quad \langle \psi_a^0 | \psi_b^0 \rangle = 0 \tag{۶.۱۶}$$

دھیان رہے کہ ان حالات کا ہر خطی جوڑ

$$\psi^0 = \alpha\psi_a^0 + \beta\psi_b^0 \tag{۶.۱۷}$$

بھی H^0 کا امتیازی حال ہو گا جس کا امتیازی قدر E^0 بھی وہی ہو گا

$$H^0\psi^0 = E^0\psi^0 \tag{۶.۱۸}$$

عام طور پر اضطراب (H') انحطاط کو "توڑے" (یا "منسوخ" کرے) گا جیسے جیسے ہم $lambda/$ کی قیمت صفر سے ایک کی طرف بڑھاتے ہیں مشترک غیر مضطرب توانائی E^0 دو ٹکڑوں میں تقسیم ہو گا شکل 4.6 مخالف چلتے ہوئے اگر ہم اضطراب کو بند یعنی صفر کر دیں تب بالائی حال کا تخفیف ψ_a^0 اور ψ_b^0 کے ایک خطی جوڑ میں ہو گا جبکہ زیریں حال کا تخفیف کسی دوسرے عمودی خطی جوڑ میں ہو گا تاہم ہم قبل از وقت نہیں جان سکتے ہیں کہ یہ موزوں خطی جوڑ کیا ہوں گے چونکہ ہم غیر مضطرب حالات نہیں جانتے ہیں لہٰذا یہی وجہ ہے کہ ہم اول رتبی توانائیاں مساوات 9.6 کا حساب نہیں کر سکتے ہیں

اسی لیے ہم ان موزوں غیر مضطرب حالات کو فی الحال عمومی روپ مساوات 17.6 میں لکھتے ہیں جہاں α اور β قابل تغیر ہوں گے ہم مساوات شروڈنگر

$$H\psi = E\psi \tag{۶.۱۹}$$

کو $H = H^0 + \lambda H'$ اور

$$E = E^0 + \lambda E^1 + \lambda^2 E^2 + \cdots, \quad \psi = \psi^0 + \lambda\psi^1 + \lambda^2\psi^2 + \cdots \tag{۶.۲۰}$$

کیلئے حل کرنا چاہتے ہیں انہیں مساوات 19.6 میں پر کر کے پہلے کی طرح λ کی ایک جیسی طاقتوں کو اکٹھا کر کے درج ذیل حاصل ہو گا

$$H^0\psi^0 + \lambda(H'\psi^0 + H^0\psi^1) + \cdots = E^0\psi^0 + \lambda(E^1\psi^0 + E^0\psi^1) + \cdots$$

اب $H^0\psi^0 = E^0\psi^0$ مساوات 18.6 کی بنا اولین اجزاء ایک دوسرے کے ساتھ کٹ جائیں گے جبکہ λ^1 رتبہ کے لیے درج ذیل ہو گا

$$H^0\psi^1 + H'\psi^0 = E^0\psi^1 + E^1\psi^0 \tag{۶.۲۱}$$

اس کا ψ_a^0 کے ساتھ اندرونی ضرب لیتے ہیں

$$\langle\psi_a^0|H^0\psi^1\rangle + \langle\psi_a^0|H'\psi^0\rangle = E^0\langle\psi_a^0|\psi^1\rangle + E^1\langle\psi_a^0|\psi^0\rangle$$

چونکہ H^0 ہرمشی ہے لہٰذا بائیں ہاتھ پہلا جزو دائیں ہاتھ کے پہلے جزو کے ساتھ کٹ جائے گا مساوات 17.6 کو استعمال کرتے ہوئے اور معیاری عمودیت کی شرط مساوات 17.6 کو بروئے کار لاتے ہوئے

$$\alpha\langle\psi_a^0|H'|\psi_a^0\rangle + \beta\langle\psi_a^0|H'|\psi_b^0\rangle = \alpha E^1$$

یا مختصراً

$$\alpha W_{aa} + \beta W_{ab} = \alpha E^1 \tag{۶.۲۲}$$

حاصل ہو گا جہاں درج ذیل ہو گا

$$W_{ij} \equiv \langle\psi_i^0|H'|\psi_j^0\rangle, \quad (i, j = a, b) \tag{۶.۲۳}$$

اسی طرح ψ_b^0 کے ساتھ اندرونی ضرب درج ذیل دے گا

$$\alpha W_{ba} + \beta W_{bb} = \beta E^1 \tag{۶.۲۴}$$

دھیان رہے کہ اصولاً ہمیں تمام W معلوم ہے چونکہ یہ غیر مضطرب تفاعلات موج ψ_a^0 اور ψ_b^0 کے لحاظ سے H' کے ارکان قالب ہیں مساوات 24.6 کو W_{ab} سے ضرب دے کر مساوات 22.6 استعمال کر کے βW_{ab} کو خارج کر کے درج ذیل حاصل ہو گا

$$\alpha[W_{ab}W_{ba} - (E^1 - W_{aa})(E^1 - W_{bb})] = 0 \tag{۶.۲۵}$$

غیر صفر α کی صورت میں مساوات 25.6 ہمیں E^1 کی مساوات دیگی

$$(E^1)^2 - E^1(W_{aa} + W_{bb}) + (W_{aa} + W_{bb} - W_{ab}W_{ba}) = 0 \tag{۶.۲۶}$$

دو درجی کلیہ استعمال کرتے ہوئے اور مساوات 23.6 سے یہ جانتے ہوئے $W_{ba} = W_{ab}^*$ ہم درج ذیل اخذ کرتے ہیں

$$E^1_{\mp} = \frac{1}{2}\left[W_{aa} + W_{bb} \mp \sqrt{(W_{aa} - W_{bb})^2 + 4|W_{ab}|^2}\right] \tag{۶.۲۷}$$

یہ انحطاطی نظریہ اضطراب کا بنیادی نتیجہ ہے جہاں دو جذر دو مضطرب توانائیوں سے مطابقت رکھتے ہیں لیکن صفر α کی صورت میں کیا ہوگا ایسی صورت میں $1 \quad = \quad \beta$ ہوگا لہٰذا مساوات 22.6 کے تحت $W_{ab} = 0$ اور مساوات 24.6 کے تحت $E^1 = W_{bb}$ ہوگا یہ درحقیقت مساوات 27.6 کے عمومی نتیجہ میں منفی علامت کے ذریعے شامل ہے مثبت علامت $\alpha = 1$ ، $\beta = 0$ کی صورت میں ہوگا۔ اس کے علاوہ ہمارے جوابات

$$E^1_+ = W_{aa} = \langle\psi_a^0|H'|\psi_a^0\rangle, \quad E^1_- = W_{bb} = \langle\psi_b^0|H'|\psi_b^0\rangle$$

ٹھیک وہی ہیں جو ہم غیر انحطاطی نظریہ اضطراب سے حاصل کرتے ہیں مساوات 9.6 یہ محض ہماری خوش قسمتی ہے حالات ψ_a^0 اور ψ_b^0 پہلے سے موزوں خطی جوڑ تھے کیا اچھی بات ہوتی اگر ہم آغاز سے موزوں حالات جان پاتے ایسی صورت میں ہم غیر انحطاطی نظریہ اضطراب استعمال کر پاتے حقیقت میں درج ذیل مسئلہ کے تحت ہم عموماً ایسا کر پاتے ہیں

مسئلہ ۶.۱: فرض کریں A ایک ایسا ہرمشی عامل ہے جو H^0 اور H' کے ساتھ قابل تبادل ہے اگر H^0 کے انحطاطی امتیازی تفاعلات ψ_a^0 اور ψ_b^0 عامل A کے بھی امتیازی تفاعلات ہوں جن کے منفرد امتیازی اقدار ہوں

$$\mu \neq \nu \quad \text{اور} \quad A\psi_a^0 = \mu\psi_a^0, \quad A\psi_b^0 = \nu\psi_b^0$$

تب $W_{ab} = 0$ ہوگا لہٰذا ψ_a^0 اور ψ_b^0 نظریہ اضطراب میں قابل استعمال موزوں حالات ہوں گے

ثبوت: ہم فرض کر چکے ہیں کہ $[A, H'] = 0$ ہوگا جس کے تحت درج ذیل ہوگا

$$\begin{aligned}
\langle\psi_a^0|[A, H']\psi_b^0\rangle = 0 \\
&= \langle\psi_a^0|AH'\psi_b^0\rangle - \langle\psi_a^0|H'A\psi_b^0\rangle \\
&= \langle A\psi_a^0|H'\psi_b^0\rangle - \langle\psi_a^0|H'\nu\psi_b^0\rangle \\
&= (\mu - \nu)\langle\psi_a^0|H'\psi_b^0\rangle = (\mu - \nu)W_{ab}
\end{aligned}$$

اب $\mu \neq \nu$ ہے لہٰذا $W_{ab} = 0$ ہوگا

سبق اگر آپ کا سامنا انحطاطی حالات سے ہو ایسا ہرمشی عامل A تلاش کرنے کی کوشش کریں جو H^0 اور H' کے ساتھ قابل تبادل ہو H^0 اور A کے بیک وقت امتیازی تفاعلات کو اپنے غیر مضطرب حالات

منتخب کر کے سادہ اول رتبی نظریہ اضطراب بروئے کار لائے ایسا عامل تلاش نہ کرنے کی صورت میں آپ کو مساوات 27.6 استعمال کرنا ہو گا جس کی ضرورت عملاً کم ہی پڑتی ہے

□

سوال ۶.۶: فرض کریں دو موزوں غیر مضطرب حالات

$$\psi^0_\mp = \alpha_\mp \psi^0_a + \beta_\mp \psi^0_b$$

جہاں $\alpha_\mp$ اور $\beta_\mp$ کو معمول شدگی تک مساوات 22.6 یا مساوات 24.6 تعین کرتے ہیں صریحاً درج ذیل دکھائیں

ا. $\psi^0_\mp$ عمودی ہے $(\langle\psi^0_+|\psi^0_-\rangle = 0)$

ب. $\langle\psi^0_+|H'|\psi^0_-\rangle = 0$

ج. $\langle^0_\mp|H'|\psi^0_\mp\rangle = E^1_\mp$ جہاں E^1 کی قیمت مساوات 27.6 دیتی ہے

سوال ۷.۶: فرض کرے ایک ذرہ جس کی کمیت m ہے اپنے آپ پر بند یک بعدی خطہ جس کی لمبائی L ہے پر آزادی سے حرکت کرتا ہے

ا. دکھائیں کے ساکن حالات کو درج ذیل روپ میں لکھا جا سکتا ہے

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{2\pi i n x/L}, \qquad (-L/2 < x < L/2)$$

جہاں $n = 0, \mp1, \mp2, \dots$ اور اجازتی توانائیاں درج ذیل ہیں

$$E_n = \frac{2}{m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2$$

دھیان رہے کہ زمینی حال $n = 0$ کے علاوہ تمام حالات دوہرا انحطاطی ہے

ب. فرض کریں ہم اب اضطراب

$$H' = -V_0 e^{-x^2/a^2}$$

متعارف کرتے ہیں جہاں $L \ll a$ ہو یہ $x = 0$ پر مخفیہ میں معمولی جھکاوٹ پیدا کرتا گویا تار کو یہاں مروڑا گیا ہوں مساوات 27.6 استعمال کرتے ہوئے E_n کی اول رتبی درستگی تلاش کریں اشارہ: چونکہ H' خطہ $-a < x < a$ کے باہر تقریباً صفر ہے اور $L \gg a$ ہے لہذا تکمل کی قیمت حاصل کرتے وقت تکمل کی حدوں کو $\mp L/2$ کی بجائے $\mp\infty$ رکھیں

ج. اس مسئلہ کے لئے ψ_n اور ψ_{-n} کی موزوں خطی جوڑ کیا ہوں گے دکھائے کہ ان حالات کے ساتھ آپ کو مساوات 9.6 استعمال کرتے ہوئے اول رتبی درستگی حاصل ہو گی

د. ایسا ہرمشی عامل A تلاش کریں جو مسئلہ کے شرائط پر پورا اترتا ہو دکھائیں کہ H^0 اور A کے بیک وقت امتیازی حالات ٹھیک وہی ہے جو آپ نے جزو ج میں استعمال کیے

جوابات

فرهنگ

allowed
26energies,
51argument,

Bessel
99function,spherical
107energy,binding
Bohr
106radius,
106formula,Bohr
25conditions,boundary

98term,centrifugal
83states,coherent
4collapses,
commutation
36relation,canonical
90relations,canonical
36commutator,
28complete,
77continuous,
90continuum,
coordinates
91spherical,
3interpretation,Copenhagen

75degenerate,
delta
28Kronecker,
Dirac
80orthonormality,
77discrete,
dispersion
54relation,

energy
22allowed,
31conservation,
13ensemble,
expectation
6value,

formula
16Broglie,De
Fourier
52transform,inverse
52transform,
Frobenius
45method,
function
59delta,Dirac

generalized
59distribution,
59function,
generating
50function,
generator
86space,intranslation
86time,intranslation
Gram-Schmidt
79process,orthogonalization

21Hamiltonian,
harmonic
25oscillator,

113Helium,
Hermitian
40conjugate,
3variables,hidden

2indeterminacy,

ladder
38operators,
Laguerre
108polynomial,associated
108polynomial,
90Laplacian,
law
34Hooke,
Legendre
94associated,
linear
22combination,
113Lithium,

6mean,
6median,
14momentum,

Neumann
99function,spherical
27node,
10normalization,

14operator,
38lowering,
38raising,
27orthogonal,
28orthonormal,

Planck's
113formula,
polynomial
48Hermite,
position
3agnostic,
3orthodox,
3realist,
12potential,
97effective,
probability
8density,

quantum
105number,principle
numberquantum
96azimuthal,
96magnetic,
99numbers,quantum

97equation,radial
recursion
46formula,
reflection
64coefficient,
73time,revival
Rodrigues
49formula,
94formula,Rodrigues
Rydberg
113constant,
113formula,

Schrodinger
20time-independent,
1align,Schrodinger
series
113Balmer,
28Fourier,
113Lyman,
113Paschen,
35power,
34Taylor,
spherical
96harmonics,
11square-integrable,
7deviation,standard
state
58bound,

27excited,
107,27ground,
58scattering,
statistical
2interpretation,
66function,step
theorem
28Dirichlet's,
15Ehrenfest,
52Plancherel,
112transition,
transmission
64coefficient,
65,58tunneling,
58points,turning
16principle,uncertainty
variables
19of,separation
7variance,
velocity
54group,
54phase,
wave
64incident,
52packet,
64reflected,
64transmitted,
1function,wave
16wavelength,

اتفاقی
حالات، 83
اجازتی
توانائیاں، 26
استمراری، 77
استمراریہ، 90
اصول
عدم یقینیت، 16
انتشاری
رشتہ، 54
انحطاطی، 75
انعکاس
شرح، 64
اوسط، 6
بقا
توانائی، 31
بندشی توانائی، 107
بوہر
رداس، 106
کلیہ، 106
بیسل
کروی تفاعل، 99
پلانک
کلیہ، 113
پیداکار
فضا میں انتقال کا، 86
وقت میں انتقال، 86
پیداکار
تفاعل، 50
تبادلی
باضابطہ رشتہ، 36
باضابطہ رشتے، 90
تبادل کار، 36
تجدیدی عرصہ، 73
ترسیل
شرح، 64
تسلسل
بالمر، 113
پاشن، 113

ٹیلر، 34
طاقتی، 35
فوریئر، 28
لیمان، 113
تغیریت، 7
تفاعل
ڈیلٹا، 59
تفاعل موج، 1
توالی
کلیہ، 46
توانائی
اجازتی، 22
توقعاتی
قیمت، 6

جفت
تفاعل، 24

حال
بکھراو، 58
زمینی، 27، 107
مقید، 58
ہیجان، 27

خطی جوڑ، 22
خفیہ متغیرات، 3

دلیل، 51

ڈیراک
معیاری عمودیت، 80
ڈیلٹا
کرونیکر، 28

رداسی مساوات، 97
رڈبرگ، 113
کلیہ، 113
رفتار
دوری سمتی، 54
گروہی سمتی، 54
روڈریگیس
کلیہ، 94

ساکن
حالات، 21
سرحدی شرائط، 25
سرنگ زنی، 58، 65
سگرا، 13
سوچ
انکاری، 3
تقلید پسند، 3
حقیقت پسند، 3
سیڑھی
عاملین، 38
سیڑھی تفاعل، 66

شروڈنگر
غیر تابع وقت، 20
شروڈنگر تصویر کشی، 86
شروڈنگر مساوات، 1
شماریاتی مفہوم، 2

طول موج، 16، 113

عامل، 14
تقلیل، 38
رفعت، 38
عبور، 112
عدم تعین، 2
عدم یقینیت اصول، 16
عقدہ، 27
علیحدگی متغیرات، 19
عمودی، 27
معیاری، 28

غیر مسلسل، 77

فروبنیوس
ترکیب، 45
فوریئر
الٹ بدل، 52
بدل، 52

قابل تکامل مربع، 11
قانون

ہک، 34

کثافت
احتمال، 8
کثیر رکنی
ہرمائٹ، 48
کروی
ہارمونیات، 96
کلیہ
ڈی بروگ لی، 16
روڈریگیس، 49
کوانٹم
صدر عدد، 105
کوانٹائی اعداد، 99
کوانٹائی عدد
اسمتی، 96
مقناطیسی، 96
کوپن ہیگن مفہوم، 3

گرام شمد
ترکیب عمودیت، 79
گرکر، 4

لاپلاسی، 90
لاگیغ
شریک کثیر رکنی، 108
کثیر رکنی، 108
لتھیم، 113
لیژانڈر
شریک، 94

متعمم
تفاعل، 59
تقسیم، 59
محدد
کروی، 91
مخفیہ، 12
موثر، 97
مرتعش
ہارمونی، 25

مرکز گریز جزو، 98
مسئلہ
اہرنفسٹ، 15
پلانشرال، 52
ڈرشلے، 28
معمول زنی، 10
معیار حرکت، 14
معیار عمودی، 28
معیاری انحراف، 7
مکمل، 28
موج
آمدی، 64
ترسیلی، 64
منعکس، 64
موجی اکٹھ، 52

نیومن
کروی تفاعل، 99

واپسی نقاط، 58
وسطانیہ، 6

ہارمونی
مرتعش، 25
ہرمشی
جوڑی دار، 40
ہیزنبرگ تصویر کشی، 86
ہیلیم، 113
ہیملٹنی، 21