کوانٹائی میکانیات

ایک تعارف

خالد خان یوسفزئی

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

عنوان

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 و طالبات 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 کیے 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 ۵

متماثل ذرات

۵.۱ دوذروی نظام

ایک ذرے کے لیے (فی الحال چکر کو نظر انداز کرتے ہوئے) $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ فضائی محدد، $\boldsymbol{r}$، اور وقت t، کا تفاعل ہو گا۔ دوذروی نظام کا حال پہلے ذرے کے محدد، $(\boldsymbol{r}_1)$، دوسرے ذرے کے محدد، $(\boldsymbol{r}_2)$، اور وقت کا تابع ہو گا۔

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, t) \tag{۵.۱}$$

یہ وقت کے لحاظ سے (ہمیشہ کی طرح) مساوات شروڈنگر

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi \tag{۵.۲}$$

کے تحت ارتقا کرے گا، جہاں H مکمل نظام کا ہیملٹنی ہے۔

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, t) \tag{۵.۳}$$

(ذرہ 1 اور ذرہ 2 کے محدد کے لحاظ سے تفرقات کو، ∇ کے زیر نوشت میں، بالترتیب 1 اور 2 سے ظاہر کیا گیا ہے۔) ذرہ 1 کا حجم $\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r}_1$ اور ذرہ 2 کا حجم $\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r}_2$ میں پائے جانے کا احتمال درج ذیل ہو گا:

$$\left|\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, t)\right|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2 \tag{۵.۴}$$

جہاں شماریاتی مفہوم معمول کے مطابق کارآمد ہو گا۔ ظاہر ہے کہ ψ کی معمول زنی درج ذیل کے تحت کرنی ہو گی۔

$$\int \left|\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, t)\right|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2 = 1 \tag{۵.۵}$$

غیر تابع وقت مخفیہ کے لیے علیحدگی متغیرات سے حلوں کا مکمل سلسلہ:

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, t) = \psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)e^{-iEt/\hbar} \tag{۵.۶}$$

حاصل ہو گا جہاں فضائی تفاعل موج (ψ) غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر:

$$-\frac{\hbar}{2m_1}\nabla_1^2\psi - \frac{\hbar}{2m_2}\nabla_2^2\psi + V\psi = E\psi \tag{۵.۷}$$

کو مطمئن کرتا ہے جس میں E نظام کی کل توانائی ہے۔

سوال ۵.۱: عام طور پر باہم عمل مخفیہ کا انحصار صرف دو ذرات کے بیچ سمتیہ $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ پر ہو گا۔ ایسی صورت میں متغیرات $\boldsymbol{r}_1$ اور $\boldsymbol{r}_2$ کی جگہ نئے متغیرات $\boldsymbol{r}$ اور (مرکز کمیت) $\boldsymbol{R} \equiv \frac{(m_1\boldsymbol{r}_1+m_2\boldsymbol{r}_2)}{m_1+m_2}$ کے استعمال سے مساوات شروڈنگر دو حصوں میں علیحدہ ہو گی۔

ا. درج ذیل دکھائیں

$$\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{R} + \frac{\mu}{m_1}\boldsymbol{r}, \qquad \boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{R} - \frac{\mu}{m_2}\boldsymbol{r}$$
$$\nabla_1 = \frac{\mu}{m_2}\nabla_R + \nabla_r, \qquad \nabla_2 = \frac{\mu}{m_1}\nabla_R - \nabla_r$$

جہاں

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{۵.۸}$$

نظام کی **تخفیف شدہ کمیت**[1] ہے۔

ب. دکھائیں کہ (غیر تابع وقت) مساوات شروڈنگر درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1+m_2)}\nabla_R^2\psi - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_r^2\psi + V(\boldsymbol{r})\psi = E\psi$$

ج. متغیرات کو $\psi(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}) = \psi_R(\boldsymbol{R})\psi_r(\boldsymbol{r})$ لیتے ہوئے علیحدہ کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ ψ_R یک ذروی مساوات شروڈنگر، جس میں کمیت m کی بجائے کل کمیت $(m_1 + m_2)$، مخفیہ صفر ہو اور نظام کی توانائی E_R ہو، کو مطمئن کرتا ہے، جبکہ ψ_r یک ذروی مساوات شروڈنگر، جس میں کمیت m کی بجائے تخفیف شدہ کمیت، مخفیہ $V(\boldsymbol{r})$ اور توانائی E_r ہو، کو مطمئن کرتا ہے۔ کل توانائی ان کا مجموعہ: $E = E_R + E_r$ ہو گا۔ اس سے ہمیں یہ معلوم ہوتا ہے کہ مرکز کمیت ایک آزاد ذرہ کی مانند حرکت کرتا ہے اور (ذرہ 1 کے لحاظ سے ذرہ 2 کی) نسبتی حرکت ایسی ہو گی جیسا مخفیہ V میں تخفیف شدہ کمیت کا ایک ذرہ کرتا ہے۔ کلاسیکی میکانیات میں بالکل یہی تحلیل ہو گی، جو دو جسمی مسئلہ کو معادل یک جسمی مسئلہ میں تبدیل کرتی ہے۔

---

[1] reduced mass

سوال ۵.۲: یوں ہائیڈروجن کے مرکزہ کی حرکت کو درست کرنے کے لیے ہم الیکٹران کی کمیت کی جگہ تخفیف شدہ کمیت استعمال کرتے ہیں (سوال ۵.۱)۔

ا. ہائیڈروجن کی بندشی توانائی (مساوات ۴.۷۷) جاننے کی خاطر μ کی جگہ m استعمال کرنے سے پیدا فی صد سہو، (دو بامعنی ہندسوں تک) تلاش کریں۔

ب. ہائیڈروجن اور ڈیوٹریم کے لیے سرخ بالمر لکیروں $(n = 3 \to n = 2)$ کے طول موج کے بیچ فاصلہ (فرق) تلاش کریں۔

ج. **پازیٹرانیم**[2] کی بندشی توانائی تلاش کریں۔ پروٹان کی جگہ ضد الیکٹران رکھنے سے پازیٹرانیم پیدا ہو گا۔ ضد الیکٹران کی کمیت الیکٹران کی کمیت کے برابر جبکہ اس کا بار الیکٹران کے بار کے مخالف ہے۔

د. فرض کریں آپ **میونی ہائیڈروجن**[3] (جس میں الیکٹران کی جگہ ایک میون ہو گا) کی وجودیت کی تصدیق کرنا چاہتے ہیں۔ میون کا بار الیکٹران کے بار کے برابر ہے، تاہم اس کی کمیت الیکٹران سے 206.77 گنا زیادہ ہے۔ آپ "لیمان α" لکیر $(n = 2 \to n = 1)$ کے لیے کس طول موج پر نظر رکھیں گے؟

سوال ۵.۳: کلورین کے دو قدرتی ہم جا Cl^{35} اور Cl^{37} پائے جاتے ہیں۔ دکھائیں کہ HCl کا لرزشی طیف قریب قریب جوڑیوں پر مشتمل ہو گا جن میں فاصلہ $\Delta\nu = 7.51 \times 10^{-4}\nu$ ہو گا جہاں ν خارجی نوریہ کا تعدد ہے۔ (اشارہ: اس کو ایک ہارمونی مرتعش تصور کریں جہاں $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ ہو گا، جہاں μ تخفیف شدہ کمیت (مساوات ۵.۸) ہے، جبکہ دونوں ہم جا کا k ایک جیسا تصور کریں۔)

۵.۱.۱ بوسن اور فرمیان

فرض کریں ذرہ 1 (یک ذروی) حال $\psi_a(\boldsymbol{r})$ اور ذرہ 2 حال $\psi_b(\boldsymbol{r})$ میں پائے جاتے ہیں۔ (یاد رہے، میں یہاں چکر کو نظر انداز کر رہا ہوں۔) ایسی صورت میں $\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ سادہ حاصل ضرب ہو گا۔[4]

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi_a(\boldsymbol{r}_1)\psi_b(\boldsymbol{r}_2) \tag{۵.۹}$$

ہم یہاں فرض کر رہے ہیں ان ذرات کو علیحدہ علیحدہ پہچانا جا سکتا ہے؛ ورنہ یہ کہنا کہ ذرہ 1 حال ψ_a اور ذرہ 2 حال ψ_b میں ہے، بے معنی ہو گا؛ ہم صرف اتنا کہہ پاتے کہ ایک ذرہ حال ψ_a اور دوسرا ذرہ حال ψ_b میں پایا جاتا ہے، تاہم ہم نہیں جان پاتے کہ کونسا ذرہ کس حال میں ہے۔ کلاسیکی میکانیات میں یہ ایک بے

---

[2] positronium

[3] muonic hydrogen

[4] در حقیقت، ضروری نہیں کہ ہر دو ذروی تفاعل موج دو ایک ذروی تفاعلات موج کا حاصل ضرب ہو۔ ایسے حال جنہیں **ہمبستہ حال** (entangled states) کہتے ہیں کو اس طرح دو حصوں میں علیحدہ نہیں کیا جا سکتا ہے۔ تاہم اگر ذرہ 1 حال a اور ذرہ 2 حال b میں ہوں، تب دو ذروی حال حاصل ضرب ہو گا۔ میں جانتا ہوں، آپ سوچ رہے ہیں: "ذرہ 1 کیسے کسی حال میں اور ذرہ 2 کسی دوسرے حال میں نہیں ہوں گے؟" اس کی کلاسیکی مثال یک تا چکری تشاکل ہے (مساوات ۴.۱۷۸)؛ میں آپ کو اکیلے ذرہ 1 کا حال نہیں بتا سکتا ہوں، چونکہ یہ ذرہ 2 کے حال کے ساتھ ہمبستہ ہے۔ اگر 2 کی پیمائش کی جائے اور نتیجہ ہم میدان چکر ہو تب 1 ہم میدان چکر اور 2 مخالف میدان چکر ہو گا۔

وقوفانہ اعتراض ہو گا: اصولاً ایک ذرے کو سرخ رنگ اور دوسرے کو نیلا رنگ دے کر آپ انہیں ہر وقت پہچان سکتے ہیں۔ کوانٹائی میکانیات میں صورتحال بنیادی طور پر مختلف ہے: آپ کسی الیکٹران کو سرخ رنگ نہیں دے سکتے اور نہ ہی اس پر کوئی پرچی چسپاں کر سکتے ہیں۔ حقیقت یہ ہے کہ تمام الیکٹران بالکل متماثل ہوتے ہیں جبکہ کلاسیکی اشیاء میں اتنی یکسانیت کبھی نہیں ہوتی۔ ایسا نہیں ہے کہ ہم الیکٹرانوں کو پہچاننے سے قاصر ہیں بلکہ حقیقت یہ ہے کہ "یہ" الیکٹران اور "وہ" الیکٹران کہنا کوانٹائی میکانیات میں بے معنی ہیں؛ ہم صرف "ایک" الیکٹران کی بات کر سکتے ہیں۔

ایسے ذرات کی موجودگی کو، جو اصولاً غیر ممیز ہوتے ہیں، کوانٹائی میکانیات خوش اسلوبی سے سموتی ہے: ہم ایسا غیر مشروط تفاعل موج تیار کرتے ہیں جو یہ بات نہیں کرتا کہ کونسا ذرہ کس حال میں ہے۔ ایسا درج ذیل دو طریقوں سے کرنا ممکن ہے۔

$$\psi_{\pm}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = A[\psi_a(\boldsymbol{r}_1)\psi_b(\boldsymbol{r}_2) \pm \psi_b(\boldsymbol{r}_1)\psi_a(\boldsymbol{r}_2)] \tag{۵.۱۰}$$

یوں یہ ذرہ دو اقسام کے متماثل ذرات کا حامل ہو گا: **بوسن**[۵] جن کے لئے ہم مثبت علامت استعمال کرتے ہیں اور **فرمیان**[۶] جن کے لئے ہم منفی علامت استعمال کرتے ہیں۔ بوسن کی مثالیں نوریہ اور میزون ہیں جبکہ فرمیان کی مثالیں پروٹان اور الیکٹران ہیں۔ ایسا ہے کہ

(۵.۱۱)
عدد صحیح چکر کے تمام ذرات بوسن جبکہ
نصف عدد صحیح چکر کے تمام ذرات فرمیان ہوں گے۔

چکر اور **شماریات** کے مابین یہ تعلق (جیسا کہ ہم دیکھیں گے، فرمیان اور بوسن کے شماریاتی خواص ایک دوسرے سے بہت مختلف ہوتے ہیں) کو اضافی کوانٹائی میکانیات میں ثابت کیا جا سکتا ہے؛ غیر اضافی نظریہ میں اس کو ایک مسلمہ لیا جاتا ہے۔[۷]

اس سے بالخصوص ہم اخذ کر سکتے ہیں کہ دو متماثل فرمیان (مثلاً دو الیکٹران) ایک ہی حال کے مکین نہیں ہو سکتے۔ اگر $\psi_a = \psi_b$ ہو تب

$$\psi_{-}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = A[\psi_a(\boldsymbol{r}_1)\psi_a(\boldsymbol{r}_2) - \psi_a(\boldsymbol{r}_1)\psi_a(\boldsymbol{r}_2)] = 0$$

کی بنا پر کوئی تفاعل موج[۸] نہیں ہو گا۔ یہ مشہور نتیجہ **پالی اصول مناعت**[۹] کہلاتا ہے۔ یہ کوئی عجیب مفروضہ نہیں جو صرف الیکٹران پر لاگو ہوتا ہو، بلکہ یہ دو ذروی تفاعلات موج کی تیاری کے قواعد کا ایک نتیجہ ہے، جس کا اطلاق تمام متماثل فرمیان پر ہو گا۔

---

[۵] bosons
[۶] fermions
[۷] اضافیت کے اثرات یہاں پائے جانا عجیب سی بات ہے۔
[۸] یاد رہے کہ میں چکر کو نظر انداز کر رہا ہوں؛ اگر آپ کو اس سے الجھن ہو (کیوں کہ بغیر چکر فرمیان خود ایک تضاد ہے)، فرض کریں تمام الیکٹران کے چکر ایک جیسے ہیں۔ میں جلد چکر کو بھی شامل کروں گا۔
[۹] Pauli exclusion principle

میں نے دلائل پیش کرنے کے نقطہ نظر سے فرض کیا تھا کہ ایک ذرہ حال ψ_a اور دوسرا حال ψ_b میں پایا جاتا ہے، تاہم اس مسئلہ کو زیادہ عمومی (اور زیادہ نفیس) طریقے سے وضع کیا جا سکتا ہے۔ ہم **عامل مبادلہ**[۱۰]، P، متعارف کرتے ہیں جو دو ذرات کا باہمی مبادلہ کرتا ہے۔

$$Pf(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = f(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) \tag{۵.۱۲}$$

صاف ظاہر ہے کہ $P^2 = 1$ ہو گا لہٰذا (تصدیق کریں کہ) P کی امتیازی اقدار ± 1 ہوں گی۔ اب اگر یہ دونوں ذرات متماثل ہوں، تب لازماً ہیملٹنی ان کے ساتھ ایک جیسا رویہ برتے گا: ($m_1 = m_2$ اور $V(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = V(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1)$)۔ اس طرح P اور H ہم آہنگ قابل مشاہدہ ہوں گے:

$$[P, H] = 0 \tag{۵.۱۳}$$

لہٰذا ہم دونوں کے بیک وقت امتیازی حالات کے تفاعلوں کا مکمل سلسلہ معلوم کر سکتے ہیں۔ دوسرے لفظوں میں ہم زیر مبادلہ، مساوات شروڈنگر کے ایسے حل تلاش کر سکتے ہیں جو یا تشاکلی (امتیازی قدر $+1$) یا غیر تشاکلی (امتیازی قدر -1) ہوں۔

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \pm\psi(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) \tag{۵.۱۴}$$

مزید، ایک نظام جو اس طرح کے حال سے آغاز کرے، اسی حال میں برقرار رہتا ہے۔ متماثل ذرات کا نیا قاعدہ (جس کو میں **ضرورت تشاکلیت**[۱۱] کہتا ہوں) کے تحت تفاعل موج کو مساوات ۵.۱۴ پر صرف پورا اترنے کی اجازت نہیں بلکہ اس پر لازم ہے کہ وہ اس مساوات کو مطمئن کرتا ہو؛ بوسن کے لئے مثبت علامت اور فرمیان کے لئے منفی علامت ہو گی۔[۱۲] یہ ایک عمومی فقرہ ہے جس کی ایک مخصوص صورت مساوات ۵.۱۰ ہے۔

مثال ۵.۱: فرض کریں ایک لامتناہی چوکور کنویں (حصہ ۲.۲) میں کمیت m کے باہم غیر متعامل دو ذرات (جو ایک دوسرے کے اندر سے گزر سکتے ہوں) پائے جاتے ہیں؛ آپکو فکر کرنے کی ضرورت نہیں کہ عملاً ایسا کیسے کیا جا سکتا ہے! ایک ذروی حالات درج ذیل ہوں گے (جہاں اپنی سہولت کے لئے ہم $K \equiv \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ لیتے ہیں)۔

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\tfrac{n\pi}{a}x), \quad E_n = n^2K$$

---

[۱۰] exchange operator

[۱۱] symmetrization requirement

[۱۲] بعض اوقات اشارہ دیا جاتا ہے کہ P اور H کے باہمی مقلوبی ہونا ضرورت تشاکلیت (مساوات ۵.۱۴) کی پشت پر ہے۔ یہ بالکل غلط ہے: ہم دو قابل ممیز ذرات (مثلاً ایک الیکٹران اور ایک ضد الیکٹران) کا ایسا نظام تصور کر سکتے ہیں جس کا ہیملٹنی تشاکلی ہو، جس کے باوجود تفاعل موج کا تشاکلی (یا غیر تشاکلی) ہونے کی ضرورت نہیں پائی جاتی۔ اس کے برعکس متماثل ذرات کو لازماً تشاکلی یا غیر تشاکلی حالات کا مکین ہونا ہو گا، اور یہ ایک بالکل نیا بنیادی قاعدہ ہے؛ جو مساوات شروڈنگر اور شماریاتی مفہوم جتنی اہمیت کا حامل ہے۔ اب، ایسا ضروری نہیں تھا کہ متماثل ذرات پائے جاتے؛ ایسا ہو سکتا تھا کہ ہر دو ذروں کے بیچ تمیز کرنا ممکن ہوتا۔ کوانٹائی میکانیات متماثل ذرات کے امکان کی اجازت دیتی ہے، اور قدرت نے اس موقع کو ہاتھ سے جانے نہیں دیا۔ (مجھے کوئی شکوہ نہیں ہے چونکہ اس سے چیزیں نہایت آسان ہو جاتی ہیں!)

قابل ممیز ذرات کی صورت میں، جب ذرہ 1 حال n_1 میں اور ذرہ 2 حال n_2 میں ہو، مرکب تفاعل موج سادہ حاصل ضرب:

$$\psi_{n_1n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2), \quad E_{n_1n_2} = (n_1^2 + n_2^2)K.$$

ہوگا۔ مثال کے طور پر زمینی حال:

$$\psi_{11} = \frac{2}{a}\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right), \quad E_{11} = 2K$$

ہوگا، اور پہلا ہیجان حال دوچند انحطاطی:

$$\psi_{12} = \frac{2}{a}\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right), \quad E_{12} = 5K,$$
$$\psi_{21} = \frac{2}{a}\sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right), \quad E_{21} = 5K$$

ہوگا، وغیرہ، وغیرہ۔ دونوں ذرات متماثل بوسن ہونے کی صورت میں زمینی حال تبدیل نہیں ہوگا، تاہم پہلا ہیجان حال:

$$\frac{\sqrt{2}}{a}\left[\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right)\right]$$

(جس کی توانائی اب بھی $5K$ ہوگی) غیر انحطاطی ہوگا۔ اور اگر ذرات متماثل فرمیان ہوں، تب $2K$ توانائی کا کوئی بھی حال نہیں ہوگا؛ زمینی حال جس کی توانائی $5K$ ہوگی درج ذیل ہوگا۔

$$\frac{\sqrt{2}}{a}\left[\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right) - \sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right)\sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right)\right],$$

□

سوال ۵.۴:

ا. اگر ψ_a اور ψ_b عمودی ہو اور دونوں معمول شدہ ہوں، تب مساوات ۵.۱۰ میں مستقل A کیا ہوگا؟

ب. اگر $\psi_a = \psi_b$ ہو (اور یہ معمول شدہ ہوں)، تب A کیا ہوگا؟ (یہ صورت صرف بوسن کیلئے ممکن ہے۔)

سوال ۵.۵:

ا. لامتناہی چوکور کنویں میں باہم غیر متعامل دو متماثل ذرات کا ہیملٹنی لکھیں۔ تصدیق کریں کہ مثال ۵.۱ میں دیے گئے فرمیان کے زمینی حال H کا مناسب امتیازی قدر والا امتیازی تفاعل ہوگا۔

ب. مثال ۵.۱ میں دیے گئے ہیجان حالات سے اگلے دو تفاعل موج اور توانائیاں، تینوں صورتوں (قابل ممیز، متماثل بوسن، متماثل فرمیان) میں ہر ایک کے لئے حاصل کریں۔

۵.۱.۲ قوت مبادلہ

میں ایک سادہ یک بُعدی مثال کے ذریعہ آپ کو ضرورت تشاکلیت کی وضاحت کرنا چاہتا ہوں۔ فرض کریں ایک ذرہ حال $\psi_a(x)$ میں اور دوسرا حال $\psi_b(x)$ میں ہے، اور یہ دونوں حالات عمودی اور معمول شدہ ہیں۔ اگر دونوں ذرات قابل ممیز ہوں، اور ذرہ 1 حال ψ_a میں ہو تب ان کا مجموعی تفاعل موج

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_a(x_1)\psi_b(x_2) \tag{۵.۱۵}$$

ہو گا؛ اگر یہ متماثل بوسن ہوں تب ان کا مرکب تفاعل موج (معمول زنی کے لئے سوال ۵.۴ دیکھیں) درج ذیل ہو گا

$$\psi_+(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) + \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)] \tag{۵.۱۶}$$

اور اگر یہ متماثل فرمیان ہوں تب درج ذیل ہو گا۔

$$\psi_-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)] \tag{۵.۱۷}$$

آئیں ان ذرات کے بیچ فاصلہ علیحدگی کے مربع کی توقعاتی قیمت معلوم کریں۔

$$\langle(x_1 - x_2)^2\rangle = \langle x_1^2\rangle + \langle x_2^2\rangle - 2\langle x_1 x_2\rangle \tag{۵.۱۸}$$

صورت اول: قابل ممیز ذرات۔ مساوات ۵.۱۵ میں دیے گئے تفاعل موج کے لئے

$$\langle x_1^2\rangle = \int x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 \,\mathrm{d}x_1 \int |\psi_b(x_2)|^2 \,\mathrm{d}x_2 = \langle x^2\rangle_a$$

(یک ذروی حال ψ_a میں x^2 کی توقعاتی قیمت)،

$$\langle x_2^2\rangle = \int |\psi_a(x_1)|^2 \,\mathrm{d}x_1 \int x_2^2 |\psi_b(x_2)|^2 \,\mathrm{d}x_2 = \langle x^2\rangle_b$$

اور

$$\langle x_1 x_2\rangle = \int x_1 |\psi_a(x_1)|^2 \,\mathrm{d}x_1 \int x_2 |\psi_b(x_2)|^2 \,\mathrm{d}x_2 = \langle x\rangle_a \langle x\rangle_b$$

ہوں گی۔ یوں اس صورت درج ذیل ہو گا۔

$$\langle(x_1 - x_2)^2\rangle_d = \langle x^2\rangle_a + \langle x^2\rangle_b - 2\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b \tag{۵.۱۹}$$

(اتفاقاً یہی جواب ذرہ 1 حال ψ_b میں اور ذرہ 2 حال ψ_a میں ہونے کی صورت میں بھی حاصل ہوتا ہے۔)

صورت دوم: **متماثل ذرات**۔ مساوات ۵.۱۶ اور مساوات ۵.۱۷ کے تفاعلات موج کے لئے

$$\begin{aligned}
\langle x_1^2\rangle =&\frac{1}{2}\Big[\int x_1^2\big|\psi_a(x_1)\big|^2\,\mathrm{d}x_1\int\big|\psi_b(x_2)\big|^2\,\mathrm{d}x_2\\
&+\int x_1^2\big|\psi_b(x_1)\big|^2\,\mathrm{d}x_1\int\big|\psi_a(x_2)\big|^2\,\mathrm{d}x_2\\
&\pm\int x_1^2\psi_a(x_1)^*\psi_b(x_1)\,\mathrm{d}x_1\int\psi_b(x_2)^*\psi_a(x_2)\,\mathrm{d}x_2\\
&\pm\int x_1^2\psi_b(x_1)^*\psi_a(x_1)\,\mathrm{d}x_1\int\psi_a(x_2)^*\psi_b(x_2)\,\mathrm{d}x_2\Big]\\
=&\frac{1}{2}\left[\langle x^2\rangle_a+\langle x^2\rangle_b\pm 0\pm 0\right]=\frac{1}{2}\left(\langle x^2\rangle_a+\langle x^2\rangle_b\right)
\end{aligned}$$

اور بالکل اسی طرح درج ذیل ہو گا۔

$$\langle x_2^2\rangle=\frac{1}{2}\left(\langle x^2\rangle_b+\langle x^2\rangle_a\right)$$

(ظاہر ہے $\langle x_1^2\rangle=\langle x_2^2\rangle$ ہو گا کیونکہ آپ ان میں تمیز نہیں کر سکتے۔) تاہم

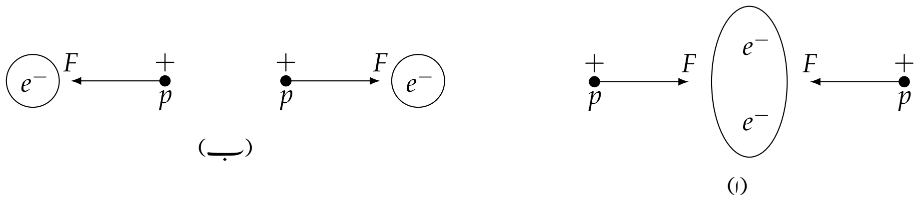
$$\begin{aligned}
\langle x_1x_2\rangle =&\frac{1}{2}\Big[\int x_1\big|\psi_a(x_1)\big|^2\,\mathrm{d}x_1\int x_2\big|\psi_b(x_2)\big|^2\,\mathrm{d}x_2\\
&+\int x_1\big|\psi_b(x_1)\big|^2\,\mathrm{d}x_1\int x_2\big|\psi_a(x_2)\big|^2\,\mathrm{d}x_2\\
&\pm\int x_1\psi_a(x_1)^*\psi_b(x_1)\,\mathrm{d}x_1\int x_2\psi_b(x_2)^*\psi_a(x_2)\,\mathrm{d}x_2\\
&\pm\int x_1\psi_b(x_1)^*\psi_a(x_1)\,\mathrm{d}x_1\int x_2\psi_a(x_2)^*\psi_b(x_2)\,\mathrm{d}x_2\Big]\\
=&\frac{1}{2}\left(\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b+\langle x\rangle_b\langle x\rangle_a\pm\langle x\rangle_{ab}\langle x\rangle_{ba}\pm\langle x\rangle_{ba}\langle x\rangle_{ab}\right)\\
=&\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b\pm\big|\langle x\rangle_{ab}\big|^2
\end{aligned}$$

جہاں درج ذیل ہے۔

$$\langle x\rangle_{ab}\equiv\int x\psi_a(x)^*\psi_b(x)\,\mathrm{d}x \tag{۵.۲۰}$$

ظاہر ہے کہ درج ذیل ہو گا۔

$$\langle(x_1-x_2)^2\rangle_\pm=\langle x^2\rangle_a+\langle x^2\rangle_b-2\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b\mp 2\big|\langle x\rangle_{ab}\big|^2 \tag{۵.۲۱}$$



شکل ۵.۱: شریک گرفتی بندھ کی نقشہ کشی: (ا) تشاکلی تشکیل قوت کشش پیدا کرتی ہے، (ب) خلاف تشاکلی تشکیل دافع قوت پیدا کرتی ہے۔

مساوات ۵.۱۹ اور مساوات ۵.۲۱ کا موازنہ کرتے ہوئے ہم دیکھ سکتے ہیں کہ فرق صرف آخری جزو میں پایا جاتا ہے۔

$$\underbrace{\langle(\Delta x)^2\rangle_\pm}_{\text{متماثل}} = \underbrace{\langle(\Delta x)^2\rangle_d}_{\text{قابل ممیز}} \underbrace{\mp 2\left|\langle x\rangle_{ab}\right|^2}_{\text{فرق}} \tag{۵.۲۲}$$

قابل ممیز ذرات کے لحاظ سے متماثل بوسن (بالائی علامتیں) ایک دوسرے کے نسبتاً قریب جبکہ متماثل فرمیان (زیریں علامتیں) ایک دوسرے سے نسبتاً دور ہوں گے (جہاں ذرات ایک جیسے دو حالات میں ہوں)۔ دھیان رہے کہ جب تک یہ دو تفاعلات موج ایک دوسرے پر منطبق نہ ہوں، $\langle x\rangle_{ab}$ صفر ہوگا (غیر صفر $\psi_b(x)$ کی صورت میں جب بھی $\psi_a(x)$ صفر ہو تب مساوات ۵.۲۰ میں تکمل کی قیمت صفر ہوگی)۔ یوں اگر کراچی میں ایک جوہر کے اندر الیکٹران کو ψ_a سے ظاہر کیا گیا ہو، جبکہ صوابی (میرے آبائی ضلع) میں ایک جوہر کے اندر الیکٹران کو ψ_b سے ظاہر کیا گیا ہو، تب تفاعل موج کو غیر تشاکلی بنانے یا نہ بنانے سے کوئی فرق نہیں پڑے گا۔ یوں عملی نقطہ نظر سے ایسے الیکٹران جن کے تفاعلات موج غیر منطبق ہوں، ان کو آپ قابل ممیز تصور کرنے کا ڈھونگ رچا سکتے ہیں۔ (یقیناً اسی کی بنا پر ماہر طبیعیات اور کیمیا دان آگے بڑھ سکتے ہیں چونکہ اصولاً کائنات میں ہر ایک الیکٹران باقی تمام کے ساتھ، ان کے تفاعلات موج کی عدم تشاکلیت کے ذریعہ، جڑا ہے اور اگر یہ واقعی اہمیت کا حامل ہوتا تب تمام کائنات کے الیکٹرانوں کی بات کیے بغیر ہم کسی ایک الیکٹران کی بات کرنے سے قاصر ہوتے!)

دلچسپ صورت تب پیدا ہوتی ہے جب انکے تفاعلات موج جزوی منطبق ہوں۔ ایسی صورت میں نظام کا رویہ کچھ یوں ہوگا جیسے متماثل بوسن کے بیچ "قوت کشش" پائی جاتی ہو، جو انہیں قریب کھینچتی ہے، اور متماثل فرمیان کے بیچ "دافع قوت" پائی جاتی ہو، جو انہیں ایک دوسرے سے دور دھکا دیتی ہے (یاد رہے کہ ہم فی الحال چکر کو نظر انداز کر رہے ہیں)۔ ہم اس کو **قوت مبادلہ**[۱۳] کہتے ہیں اگرچہ یہ حقیقتاً ایک قوت نہیں ہے؛ کوئی بھی چیز ان ذرات کو دھکیل نہیں رہی ہے؛ یہ صرف ضرورت تشاکلیت کا ہندسی نتیجہ ہے۔ ساتھ ہی یہ کوانٹائی میکانی مظہر ہے جس کا کلاسیکی میکانیات میں کوئی مماثل نہیں پایا جاتا۔ بہر حال اس کے دور رس نتائج پائے جاتے ہیں۔ مثلاً، ہائیڈروجن سالمہ (H_2) پر غور کریں۔ اندازاً بات کرتے ہوئے، جوہری زمینی حال (مساوات ۴.۸۰) جس کا مرکز مرکزہ 1 پر واقع ہے، میں ایک الیکٹران اور جوہری زمینی حال جس کا مرکز مرکزہ 2

[۱۳] exchange force

پر واقع ہے، میں ایک الیکٹران پر زمینی حال مشتمل ہوگا۔ اگر الیکٹران بوسن ہوتے تب ضرورت تشاکلیت (یا "قوت مبادلہ"، اگر آپ اسے پسند کرتے ہیں) کوشش کرتی ہے کہ دونوں پروٹان کے بیچ الیکٹرانوں کو جمع کرے (شکل ۱.۵-۱)، نتیجتاً منفی بار کا انبار دونوں پروٹان کو اندر کی طرف ایک دوسرے کی جانب کھینچتا ہے، جو **شریک گرفتی بندھ**[14] کا سبب بنتا۔[15] بدقسمتی سے الیکٹران درحقیقت فرمیان ہیں نہ کہ بوسن جس کی بنا پر منفی بار اطراف پر انبار ہوگا (شکل ۱.۵-ب) جو سالمہ کو ٹکڑے ٹکڑے کر دے گا!

ذرا رکیے گا! ہم اب تک چکر کو نظر انداز کرتے رہے ہیں۔ الیکٹران کا مقامی تفاعل موج اور چکردار (جو الیکٹران کے چکر کی سمت بندی کو بیان کرتا ہے) مل کر اس کا (درج ذیل) مکمل حال دیں گے۔[16]

$$\psi(\boldsymbol{r})\chi(s) \tag{۵.۲۳}$$

دو الیکٹرانی حال مرتب کرتے ہوئے ہمیں مبادلہ کے لحاظ سے صرف فضائی جزو کو عدم تشاکلی نہیں بلکہ مکمل حال کو عدم تشاکلی بنانا ہوگا۔ مرکب چکری حالات (مساوات ۴.۱۷۷ اور مساوات ۴.۱۷۸) پر نظر ڈالتے ہوئے ہم دیکھتے ہیں کہ یک تاملاپ خلاف تشاکل ہے (لہٰذا اس کو تشاکل فضائی تفاعل کے ساتھ جوڑنا ہوگا) جبکہ تینوں سہ تا حالات تشاکلی ہیں (لہٰذا انہیں خلاف تشاکل فضائی تفاعل کے ساتھ منسلک کرنا ہوگا)۔ ظاہر ہے کہ یوں یک تاحال بندھ پیدا کرے گا جبکہ سہ تاحال خلاف بندھ ہوگا۔ یقیناً کیمیادان ہمیں بتاتے ہیں کہ شریک گرفتی بندھ کے لئے ضروری ہے کہ دونوں الیکٹران یک تاحال کے مکین ہوں اور ان کا کل چکر صفر ہو۔[17]

سوال ۵.۶: لامتناہی چوکور کنویں میں دو غیر متعامل ذرات، جن میں سے ہر ایک کی کمیت m ہے، پائے جاتے ہیں۔ ان میں سے ایک حال ψ_n (مساوات ۲.۲۸) اور دوسرا حال ψ_ℓ $(\ell \neq n)$ میں ہے۔ آپ کو $\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle$ کا حساب اس صورت کرنا ہے جب (الف) ذرات غیر قابل ممیز ہوں، (ب) ذرات متماثل بوسن ہوں اور (ج) ذرات متماثل فرمیان ہوں۔

سوال ۵.۷: فرض کریں آپ کے پاس تین ذرات ہیں، جن میں سے ایک حال ψ_a، دوسرا حال ψ_b، اور تیسرا حال ψ_c میں پایا جاتا ہے۔ حالات ψ_a، ψ_b، اور ψ_c کو معیاری عمودی تصور کرتے ہوئے (مساوات ۵.۱۵، ۵.۱۶ اور ۵.۱۷ کی طرز پر) تین ذروی حالات تیار کریں جو (الف) قابل ممیز ذرات، (ب) متماثل بوسن اور (ج) متماثل فرمیان کو ظاہر کرتے ہوں۔ یاد رہے کہ کسی بھی دو ذرات کی جوڑی کے باہمی مبادلہ کے لحاظ سے (ب) کو مکمل طور پر تشاکلی ہونا ہوگا، جبکہ (ج) کو مکمل طور پر خلاف تشاکلی ہونا ہوگا۔ تبصرہ: مکمل طور پر خلاف تشاکلی تفاعلات موج تیار کرنے کا ایک بہترین طریقہ پایا جاتا ہے: **مقطع سلیٹر**[18] تیار کریں جس کی پہلی صف

---

[14] covalent bond

[15] مراکزہ کے بیچ شراکتی الیکٹران جمع ہو کر جوہروں کو قریب کھینچ کر شریک گرفتی بند پیدا کرتے ہیں۔ اس کے لئے دو عدد الیکٹران لازمی نہیں۔ ہم حصہ ۷.۳ میں صرف ایک الیکٹران پر مبنی شریک گرفتی بند دیکھیں گے۔

[16] چکر اور مقام کے بیچ عدم ارتباط کی صورت میں ہم فرض کر سکتے ہیں کہ چکر اور فضائی محدد میں حال کو علیحدہ کرنا ممکن ہے۔ اس سے مراد یہ ہے کہ ہم میدان چکر حاصل کرنے کا احتمال، ذرے کے مقام پر منحصر نہیں ہوگا۔ ارتباط کی موجودگی میں عمومی حال، سوال ۴.۵۵ کی طرز پر، خطی ملاپ $\psi_+(\boldsymbol{r})\chi_+ + \psi_-(\boldsymbol{r})\chi_-$ کا روپ اختیار کرے گا۔

[17] بے احتیاطی میں ہم عموماً کہتے ہیں کہ الیکٹران ایک دوسرے کے مخالف صف بند ہیں (ایک ہم میدان اور دوسرا خلاف میدان)۔ یہ ضرورت سے زیادہ سادہ صورت ہوگی چونکہ یہی کچھ $m = 0$ سہ تاحال کے بارے میں بھی کہا جا سکتا ہے۔ درست فقرہ یہ ہوگا: "وہ یک تا تشکیل میں ہیں"۔

[18] Slater determinant

$\psi_a(x_1)$ ، $\psi_b(x_1)$ ، $\psi_c(x_1)$ ، وغیرہ ہو گی، اس کی دوسری صف $\psi_a(x_2)$ ، $\psi_b(x_2)$ ، $\psi_c(x_2)$ ، وغیرہ ہو گی اور اسی طرح اس کی باقی صفیں ہوں گی (یہ طریقہ کسی بھی تعداد کے ذرات کیلئے کارآمد ہے)۔

۵.۲ جوہر

ایک معادل جوہر جس کا جوہری عدد Z ہو، ایک بھاری مرکزہ جس کا بار Ze ہو اور جس کو Z الیکٹران (کمیت m، بار $-e$) گھیرتے ہوں، پر مشتمل ہو گا۔ اس نظام کی ہیملٹنی درج ذیل ہو گی۔[۱۹]

$$H = \sum_{j=1}^{Z}\Big\{-\frac{h^2}{2m}\nabla_j^2 - \Big(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\Big)\frac{Ze^2}{r_j}\Big\} + \frac{1}{2}\Big(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\Big)\sum_{j\neq k}^{Z}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_k|} \tag{۵.۲۴}$$

لہریا قوسین میں بند جزو، مرکزہ کے برقی میدان میں j ویں الیکٹران کی حرکی توانائی جمع مخفی توانائی کو ظاہر کرتا ہے؛ دوسرا مجموعہ (جو ماسوائے $j = k$، تمام j اور k پر لیا گیا ہے) الیکٹرانوں کی باہمی دافع قوت سے وابستہ مخفی توانائی کو ظاہر کرتا ہے (جہاں $\frac{1}{2}$ اس حقیقت کو درست کرتا ہے کہ مجموعہ لیتے ہوئے ہر جوڑی کو دو مرتبہ گنا گیا ہے)۔ ہمیں تفاعل موج $\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots\boldsymbol{r}_Z)$ کیلئے درج ذیل مساوات شروڈنگر:

$$H\psi = E\psi \tag{۵.۲۵}$$

حل کرنا ہو گی۔ البتہ الیکٹران متماثل فرمیان ہیں، لہٰذا، تمام حل قابل قبول نہیں ہوں گے: صرف وہ حل قابل قبول ہوں گے جن میں مکمل حال (مقام اور چکر):

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\ldots,\boldsymbol{r}_z)\chi(\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_2,\cdots,\boldsymbol{s}_Z), \tag{۵.۲۶}$$

کسی بھی دو الیکٹران کے باہمی مبادلہ کے لحاظ سے خلاف تشاکلی ہو۔ بالخصوص کوئی بھی دو الیکٹران ایک ہی حال کے مکین نہیں ہو سکتے۔

بدقسمتی سے مساوات شروڈنگر کو مساوات ۵.۲۴ میں دی گئی ہیملٹنی کے لئے، ماسوائے سادہ ترین صورت $Z = 1$ (ہائیڈروجن)، ٹھیک حل نہیں کیا جا سکتا (کم از کم آج تک کوئی بھی ایسا نہیں کر پایا)۔ عملاً ہمیں پیچیدہ تخمینی تراکیب استعمال کرنے ہوں گے۔ ان میں سے چند ایک تراکیب پر اگلے ابواب میں غور کیا جائے گا؛ ابھی میں الیکٹران کی دافع قوت کو مکمل نظرانداز کرتے ہوئے حلوں کا کیفی تجزیہ پیش کرنا چاہوں گا۔ حصہ ۵.۲.۱ میں ہم ہیلیم کے زمینی حال اور ہیجان حالات پر غور کریں گے جبکہ حصہ ۵.۲.۲ میں ہم زیادہ بڑے جوہر کے زمینی حالات پر غور کریں گے۔

---

[۱۹] مرکزہ کو ساکن تصور کیا گیا ہے۔ مرکزہ کی حرکت کو تخفیف شدہ کمیت (سوال ۵.۱) کے ذریعہ شامل کرنا صرف دو جسمی نظام کے لئے ممکن ہے؛ خوش قسمتی سے مرکزہ کی کمیت الیکٹران کی کمیت سے اتنی زیادہ ہوتی ہے کہ درکار درستگی، ہائیڈروجن کے لئے بھی، نظرانداز کی جا سکتی ہے (سوال ۵.۲-الف دیکھیں)، اور زیادہ بھاری جوہروں کے لئے یہ مزید کم ہو گی۔ مرکزہ کی متناہی جسامت، اضافیتی تصحیح اور الیکٹران چکر کے ساتھ وابستہ مقناطیسی باہم عمل کے زیادہ دلچسپ اثرات پائے جاتے ہیں۔ ان پر آنے والے ابواب میں غور کیا جائے گا، تاہم یہ تمام "خالص کولب" جوہر، جسے مساوات ۵.۲۴ بیان کرتی ہے، میں انتہائی چھوٹی درستگیاں ہیں۔

سوال ۵.۸: فرض کریں مساوات ۵.۲۴ میں دی گئی ہیملٹنی کے لیے آپ مساوات شروڈنگر (مساوات ۵.۲۵) کا حل $(\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \ldots \boldsymbol{r}_Z))$ حاصل کر سکتے ہیں۔ آپ اس سے ایک ایسا مکمل تشاکلی تفاعل اور ایک مکمل خلاف تشاکلی تفاعل کس طرح بنا پائیں گے جو مساوات شروڈنگر کو اسی توانائی کیلئے مطمئن کرتا ہو؟

۵.۲.۱ ہیلیم

ہائیڈروجن کے بعد سب سے سادہ جوہر ہیلیم $(Z = 2)$ ہے۔اس کی ہیملٹنی

(۵.۲۷)
$$H = \left\{-\frac{h^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2e^2}{r_1}\right\} + \left\{-\frac{h^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2e^2}{r_2}\right\} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|}$$

(بار $2e$ مرکزہ کے) دو ہائیڈروجنی ہیملٹنی، ایک الیکٹران 1 اور ایک الیکٹران 2 ، کے ساتھ دو الیکٹران کے بیچ دافع توانائی پر مشتمل ہو گا۔ یہ آخری جزو ہمارے لئے پریشانی کا سبب بنتا ہے۔ اس کو نظرانداز کرتے ہوئے مساوات شروڈنگر قابل علیحدگی ہو گی، اور اس کے حلوں کو نصف بوہر رداس (مساوات ۴.۷۲) اور چار گنا بوہر توانائیوں (مساوات ۴.۷۰) [وجہ سمجھ نہ آنے کی صورت میں سوال ۴.۱۶ پر دوبارہ نظر ڈالیں] کے ہائیڈروجن تفاعلات موج کے حاصل ضرب:

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi_{n\ell m}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{n'\ell' m'}(\boldsymbol{r}_2) \tag{۵.۲۸}$$

کی صورت میں لکھا جا سکتا ہے۔ کل توانائی درج ذیل ہو گی، جہاں $E_n = -13.6/n^2\,\text{eV}$ ہو گا۔

$$E = 4(E_n + E_{n'}) \tag{۵.۲۹}$$

بالخصوص زمینی حال

$$\psi_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi_{100}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{100}(\boldsymbol{r}_2) = \frac{8}{\pi a^3}e^{-2(r_1+r_2)/a} \tag{۵.۳۰}$$

ہو گا (مساوات ۴.۸۰ دیکھیں) اور اس کی توانائی درج ذیل ہو گی۔

$$E_0 = 8(-13.6\,\text{eV}) = -109\,\text{eV} \tag{۵.۳۱}$$

چونکہ ψ_0 تشاکلی تفاعل ہے، لہٰذا چکری حال کو خلاف تشاکلی ہونا ہو گا اور یوں ہیلیم کا زمینی حال یک تا تشکیل میں ہو گا، جس میں چکر ایک دوسرے کے "مخالف صف بند" ہوں گے۔ یقیناً حقیقت میں ہیلیم کا زمینی حال یک تا ہی ہے، تاہم اس کی تجرباتی حاصل توانائی $-78.975\,\text{eV}$ ہے جو مساوات ۵.۳۱ سے کافی مختلف ہے۔ یہ زیادہ حیرت کی بات نہیں ہے: ہم نے الیکٹران کی دافع توانائی کو مکمل طور پر نظرانداز کیا جو کہ چھوٹی

مقدار نہیں ہے۔ یہ ایک مثبت مقدار (مساوات ۵.۲۷ دیکھیں) ہے جس کو شامل کرتے ہوئے کل توانائی کم ہو کر $-109\,\mathrm{eV}$ کی بجائے $-79\,\mathrm{eV}$ ہو جائے گی (سوال ۵.۱۱ دیکھیں)۔

ہیلیم کے ہیجان حالات:

$$\psi_{n\ell m}\psi_{100} \tag{۵.۳۲}$$

ہائیڈروجنی زمینی حال میں ایک الیکٹران اور ہیجان حال میں دوسرے الیکٹران، پر مشتمل ہو گا۔[دونوں الیکٹران کو ہیجان حالات میں ڈالنے سے ایک الیکٹران فوراً زمینی حال میں واپس گر کر توانائی خارج کرتا ہے، جو دوسرے الیکٹران کو جوہر سے باہر استمراریہ $(E > 0)$ میں دھکیلتا ہے، اور یوں ایک آزاد الیکٹران اور ہیلیم باردار یہ (He^+) حاصل ہو گا۔ یہ بذات خود ایک دلچسپ نظام ہے جس پر ہم یہاں بات نہیں کر رہے؛ سوال ۵.۹ دیکھیں] ہم ہمیشہ کی طرح تشاکلی اور خلاف تشاکلی ملاپ تیار کر سکتے ہیں (مساوات ۵.۱۰)؛ اول الذکر خلاف تشاکلی چکر تشکیل (یک تا) کے ساتھ جائے گا، جنہیں **نزد ہیلیم**[20] کہتے ہیں، جبکہ موخر الذکر کو تشاکلی چکر تشکیل (سہ تا) درکار ہو گی اور انہیں **ہیلیم پرست**[21] کہتے ہیں۔ زمینی حال لازماً نزد ہیلیم ہو گا؛ جبکہ ہیجان حالات دونوں روپ میں پائے جاتے ہیں۔ جیسا ہم نے حصہ ۵.۱.۲ میں دریافت کیا، تشاکلی فضائی حال الیکٹرانوں کو قریب لاتا ہے، جس کی بنا پر ہم توقع کرتے ہیں کہ نزد ہیلیم کی باہم متعامل توانائی زیادہ ہو گی، اور یقیناً تجربات سے تصدیق ہوتی ہے کہ ہیلیم پرست کے لحاظ سے نزد ہیلیم حالات کی توانائی زیادہ ہے (شکل ۵.۲ دیکھیں)۔

سوال ۵.۹:

ا. فرض کریں کہ آپ ہیلیم جوہر کے دونوں الیکٹران کو $n = 2$ حال میں رکھتے ہیں؛ خارجی الیکٹران کی توانائی کیا ہو گی؟

ب. ہیلیم باردار یہ He^+ کے طیف پر (مقداری) تجزیہ کریں۔

سوال ۵.۱۰: ہیلیم توانائی سطحوں پر درج ذیل صورت میں (کیفی) تجزیہ کریں۔ (ا) اگر الیکٹران متماثل بوسن ہوتے، (ب) اگر الیکٹران قابل ممیز ذرات ہوتے (لیکن ان کی کمیت اور بار ایک جیسے ہوں)۔ فرض کریں کہ الیکٹران کا چکر اب بھی $\frac{1}{2}$ ہے، لہٰذا چکری تشکیلات یک تا اور سہ تا ہوں گی۔

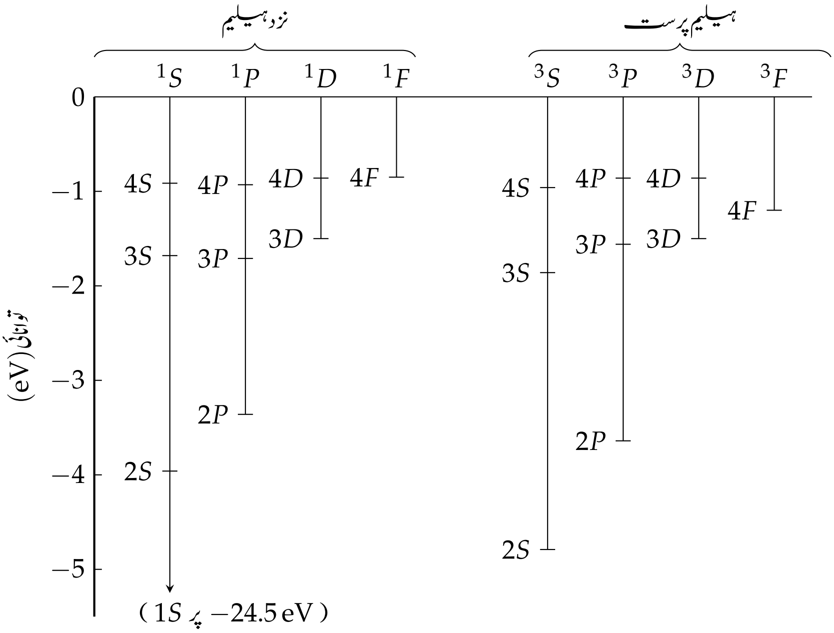
سوال ۵.۱۱:

ا. مساوات ۵.۳۰ میں دیے گئے حال ψ_0 کیلئے $\langle(1/|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|)\rangle$ کا حساب لگائیں۔ اشارہ: کروی محدد استعمال کرتے ہوئے قطبی محور کو $\boldsymbol{r}_1$ پر رکھیں تاکہ

$$|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos\theta_2}.$$

ہو۔ پہلے $\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2$ کا تکمل حل کریں۔ زاویہ θ_2 کے لحاظ سے تکمل آسان ہے، بس مثبت جذر لینا یاد رکھیں۔ آپ کو r_2 تکمل دو ٹکڑوں میں تقسیم کرنا ہو گا؛ پہلا 0 سے r_1 تک اور دوسرا r_1 سے ∞ تک۔ جواب: $\frac{5}{4a}$

[20] parahelium
[21] orthohelium



شکل ۵.۲: ہیلیم کی توانائیوں کی سطحیں (علامتیت کی وضاحت حصہ ۵.۲.۲ کی گئی ہے)۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ نزدہیلیم کی توانائیاں مطابقتی ہیلیم پرست سے زیادہ ہیں۔ انتصابی پیمانہ بار دارہ ہیلیم کے زمینی حال ($He^+ \; : \; 4 \times (-13.6)\,\text{eV} \; = \; -54.4\,\text{eV}$) کے لحاظ سے ہیں۔؛ کسی بھی حال کی کل توانائی جاننے کی خاطر $54.4\,\text{eV}$ منفی کریں۔

ب. جزو-الف کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے ہیلیم کے زمینی حال میں الیکٹران کی باہمی متعامل توانائی کا اندازہ لگائیں۔ اپنے جواب کو الیکٹران وولٹ کی صورت میں پیش کریں اور اس کو E_0 (مساوات ۵.۳۱) کے ساتھ جمع کر کے زمینی حال توانائی کی بہتر تخمین حاصل کریں۔ اس کا موازنہ تجرباتی قیمت کے ساتھ کریں۔ (دھیان رہے کہ اب بھی آپ تخمینی تفاعل موج کے ساتھ کام کر رہے ہیں، لہٰذا آپ کا جواب ٹھیک تجرباتی جواب نہیں ہو گا۔)

۵.۲.۲ دوری جدول

بھاری جوہروں کے زمینی حال الیکٹرانی تشکیل تقریباً اسی طرح جوڑ کر حاصل کیے جاتے ہیں۔ پہلی تخمین میں (انکی باہمی دافع توانائی کو مکمل نظر انداز کرتے ہوئے) بار Z_e کے مرکزہ کے کولمب مخفیہ میں یک ذروی ہائیڈروجنی حالات (n, ℓ, m)، جنہیں **مدارچے**[۲۲] کہتے ہیں، کے انفرادی الیکٹران مکین ہوں گے۔ اگر الیکٹران بوسن (یا قابل ممیز ذرات) ہوتے تب یہ زمینی حال $(1, 0, 0)$ میں گر جاتے اور کیمیا اتنا دلچسپ نہ ہوتا۔ حقیقت میں الیکٹران متماثل فرمیان ہیں، جن پر پالی اصول مناعت لاگو ہوتا ہے، لہٰذا کسی ایک مدارچہ کے صرف دو الیکٹران مکین ہو سکتے ہیں (ایک ہم میدان اور ایک خلاف میدان؛ بلکہ یہ کہنا زیادہ بہتر ہو گا، کہ یک تا تشکیل حال میں)۔ کسی بھی n کی قیمت کے لئے n^2 ہائیڈروجنی تفاعلات موج پائے جاتے ہیں (جن میں سے ہر ایک کی توانائی E_n ہو گی)، یوں $n = 1$ **خول**[۲۳] میں دو الیکٹرانوں کی جگہ ہو گی، $n = 2$ خول میں آٹھ، $n = 3$ میں اٹھارہ، اور n ویں خول میں $2n^2$ الیکٹرانوں کی جگہ ہو گی۔ کیفی طور پر بات کرتے ہوئے **دوری جدول**[۲۴] کے افقی صف، ہر ایک انفرادی خول کو بھرنے کے مترادف ہے (اگرچہ یہ پوری کہانی نہیں ہے؛ اگر ایسا ہوتا، انکی لمبائیاں 2، 8، 18، 32، 50، وغیرہ ہوتیں نہ کہ 2، 8، 8، 18، 18، وغیرہ؛ ہم جلد دیکھیں گے کہ الیکٹران کا باہمی دفع اس شمار کو کس طرح خراب کرتا ہے)۔

ہیلیم میں، $n = 1$ خول بھرا ہو گا، لہٰذا اگلے جوہر لتھیم $(Z = 3)$ کو $n = 2$ خول میں ایک الیکٹران رکھنا ہو گا۔ اب $n = 2$ کے لئے $\ell = 0$ یا $\ell = 1$ ہو سکتا ہے؛ تیسرا الیکٹران ان میں سے کسی ایک کا انتخاب کرے گا؟ (چونکہ بوہر توانائی n پر منحصر ہوتی ہے نہ کہ ℓ پر) لہٰذا الیکٹران کا باہمی عمل نہ ہونے کی صورت میں ان دونوں کی توانائی ایک جیسی ہو گی۔ تاہم درج ذیل وجہ کی بنا پر الیکٹران کی دافع توانائی ℓ کی کم سے کم قیمت کی طرف داری کرتی ہے۔ زاویائی معیار حرکت الیکٹران کو بیرونی رخ دھکیلنے کی کوشش کرتا ہے اور الیکٹران جتنا زیادہ مرکزہ سے دور ہو گا اتنا مرکزہ، اندرونی الیکٹرانوں کے زیادہ **پس پردہ**[۲۵] ہو کر اوجھل ہو گا۔ (اندازاً بات کرتے ہوئے ہم کہہ سکتے ہیں کہ اندرونی الیکٹران کو مرکزہ کا پورا بار Ze "نظر" آتا ہے جب کہ بیرونی الیکٹران کو مشکل سے e سے کچھ زیادہ بار نظر آتا ہے۔) یوں کسی بھی ایک خول میں کم سے کم توانائی کا حال (یعنی دوسرے لفظوں میں سب سے سخت مقید الیکٹران) $\ell = 0$ ہو گا، اور بڑھتے ℓ کے ساتھ توانائی بڑھے گی۔ اس طرح لتھیم میں تیسرا الیکٹران مدارچہ $(2, 0, 0)$ کا مکین ہو گا۔ اگلا جوہر (بیریلیم جس کا $Z = 4$ ہے) بھی اسی حال میں ہو گا (پس اس کا چکر "الٹ رخ" ہو گا) لیکن بوران $(Z = 5)$

---

[۲۲] orbitals
[۲۳] shell
[۲۴] periodic table
[۲۵] screened

کو $\ell = 1$ استعمال کرنا ہو گا۔

اسی طرح چلتے ہوئے ہم نیون $(Z = 10)$ کو پہنچتے ہیں جہاں $n = 2$ خول مکمل بھرا ہو گا اور ہم دوری جدول کی اگلی صف کو پہنچ کر $n = 3$ خول کو بھرنا شروع کرتے ہیں۔ اس صف کے آغاز میں دو جوہر (سوڈیم اور مگنیشیم) کا $\ell = 0$ ہے اور اس کے بعد (سلور[۲۶] سے آرگن تک) چھ ایسے جوہر ہیں جن کا $\ell = 1$ ہو گا۔ آرگن کے بعد ہم "توقع" کرتے ہیں کہ دس ایسے جوہر پائے جائیں گے جن کے لیے $n = 3$ اور $\ell = 2$ ہو گا؛ البتہ یہاں پہنچ کر اندرونی الیکٹران کا مرکزہ کو پس پردہ کرنے کا اثر اتنا زور پکڑتا ہے کہ اگلا خول بھی اس کے نظر ہو جاتا ہے (یعنی یہ خول بھی اوجھل ہو جاتا ہے) لہٰذا پوٹاشیم $(Z = 19)$ اور کلشیم $(Z = 20)$، $n = 3$، $\ell = 2$ کی بجائے $n = 4$، $\ell = 0$ منتخب کرتے ہیں۔ اس کے بعد ہم دوبارہ نیچے اتر کر $n = 3$ اور $\ell = 2$ (اسکینڈیم تا جست)، اور اس کے بعد $n = 4$، $\ell = 1$ (گیلیم تا کرپٹان) اٹھاتے ہیں، اور یہاں پہنچ کر ہم دوبارہ قبل از وقت اگلی صف $(n = 5)$ میں چھلانگ لگا کر بعد میں $n = 4$ خول کے $\ell = 2$ اور $\ell = 3$ بھرتے ہیں۔

یہاں جوہری حالات کے تسمیہ جس کو تمام کیمیا دان اور ماہر طبیعیات استعمال کرتے ہیں، پر تبصرہ کرنا ضروری ہو گا۔ اس کی وجہ شاید صرف انیسویں صدی کے طیف پیمائی کاروں کو معلوم ہو گی کہ $\ell = 0$ کو کیوں s کہتے ہیں، $\ell = 1$ کو p، $\ell = 2$ کو d، اور $\ell = 3$ کو کیوں f کہتے ہیں؛ میرے خیال سے اس کے بعد وہ سیدھی راہ پر آ گئے اور انہوں نے لاطینی حروف تہجی کے تحت (g، h، i، اور j کو نظر انداز کرتے ہوئے، k، ℓ، وغیرہ)[۲۷] نام دیے۔ کسی ایک الیکٹران کے حال کو $n\ell$ کی جوڑی ظاہر کرتی ہے، جہاں (عدد) n حال کو اور (حرف) ℓ مداری زاویائی معیار حرکت کو ظاہر کرتا ہے؛ کوانٹائی عدد m کا ذکر نہیں کیا جاتا لیکن قوت نما میں حال کے مکین الیکٹرانوں کی تعداد لکھی جاتی ہے۔ یوں درج ذیل تشکیل

$$(1s)^2(2s)^2(2p)^2 \tag{۵.۳۳}$$

کہتی ہے کہ مدار چہ $(1,0,0)$ میں دو الیکٹران، مدار چہ $(2,0,0)$ میں دو الیکٹران جبکہ مدار چے $(2,1,1)$، $(2,1,0)$ اور $(2,1,-1)$ کے کسی ملاپ میں دو الیکٹران پائے جاتے ہیں۔ یہ در حقیقت کاربن کا زمینی حال ہے۔

اس مثال میں دو الیکٹران ایسے ہیں جن کا مداری زاویائی معیار حرکت کوانٹائی عدد ایک (1) ہے، لہٰذا کل مداری زاویائی معیار حرکت کوانٹائی عدد L (چھوٹے ℓ کی بجائے بڑا L جو انفرادی ذرہ کا نہیں بلکہ کل کو ظاہر کرتا ہے) 2، 1، یا 0 ہو سکتا ہے۔ ساتھ ہی، $(1s)$ کے دو الیکٹران ایک دوسرے کے ساتھ یکتا حال بندھن میں ہیں اور ان کا کل چکر صفر ہو گا؛ یہی کچھ $(2s)$ کے دو الیکٹران کے لئے بھی ہو گا، لیکن $(2p)$ کے دو الیکٹران یا تو یکتا نظام اور یا سہ تا نظام میں ہوں گے۔ یوں کل چکر کوانٹائی عدد S (کل کو ظاہر کرنے کے لئے یہاں بھی بڑا حرف استعمال ہو گا) 1 یا 0 ہو سکتا ہے۔ ظاہر ہے کہ میزان کل (مداری جمع چکر) J کی قیمت 3، 2، 1، یا 0 ہو سکتی ہے۔ کسی ایک جوہر کے لئے ان کل قیمتوں کو **قواعد ہنڈ**[۲۸] (سوال ۵.۱۳ دیکھیں) سے حاصل کیا جا سکتا ہے۔ نتیجہ کو درج ذیل علامتی

---

[۲۶] aluminium

[۲۷] خول $n = 1$ کا نام K، $n = 2$ کا نام L، $n = 3$ کا نام M، وغیرہ رکھے گئے۔ خولوں کے نام M سے شروع ہو کر لاطینی حروف تہجی کے ترتیب سے ہیں۔

[۲۸] Hund's Rules

روپ میں لکھا جا سکتا ہے

$$^{2S+1}L_J \tag{۵.۳۴}$$

(جہاں S اور J اعداد جبکہ L (جو کل کو ظاہر کرتا ہے) بڑا حرف ہو گا۔ کاربن کا زمینی حال $^3P_0$ ہے؛ اس کا کل چکر 1 ہے (جس کی بنا پر 3 لکھا گیا ہے)، کل مداری زاویائی معیار حرکت 1 ہے (لہٰذا P لکھا گیا ہے) اور میزان کل زاویائی معیار حرکت صفر ہے (لہٰذا 0 لکھا گیا ہے)۔ جدول ۵.۱ میں دوری جدول کی ابتدائی چار صفوں کے لئے انفرادی تشکیلات اور کل زاویائی معیار حرکت مساوات ۵.۳۴ کی روپ میں پیش کئے گئے ہیں۔ [۲۹]

سوال ۵.۱۲:

ا. دوری جدول کی ابتدائی دو صفوں (نیون تک) کے لئے مساوات ۵.۳۳ کے روپ میں الیکٹران تشکیلات پیش کر کے ان کی تصدیق جدول ۵.۱ کے ساتھ کریں۔

ب. ابتدائی چار عناصر کے لئے مساوات ۵.۳۴ کے روپ میں مطابقتی کل زاویائی معیار حرکت تلاش کریں۔ بوران، کاربن اور نائیٹروجن کے لئے تمام ممکنات پیش کریں۔

سوال ۵.۱۳:

ا. **ہنڈ کا پہلا قاعدہ**[۳۰] کہتا ہے کہ باقی چیزیں ایک جیسی ہونے کی صورت میں وہ حال جس کا کل چکر S زیادہ سے زیادہ ہو، کی توانائی کم سے کم ہو گی۔ ہیلیم کے ہیجان حالات کے لیے یہ کیا پیشگوئی کرتا ہے۔

ب. **ہنڈ کا دوسرا قاعدہ**[۳۱] کہتا ہے کہ کسی ایک چکر کی صورت میں مجموعی طور پر خلاف تشاکلیت پر پورا اترتا ہوا وہ حال جس کا زیادہ سے زیادہ کل مداری زاویائی معیار حرکت L ہو، کی توانائی کم سے کم ہو گی۔ کاربن کے لئے $L = 2$ کیوں نہیں ہے؟ اشارہ: یاد رہے کہ "سیڑھی کا بالائی سر" $(M_L = L)$ تشاکلی ہے۔

ج. **ہنڈ کا تیسرا قاعدہ**[۳۲] کہتا ہے کہ اگر ایک ذیلی خول (n, ℓ) نصف سے زیادہ بھرا نہ ہو، تب کم سے کم توانائی کی سطح کے لئے $J = |L - S|$ ہو گا؛ اگر یہ نصف سے زیادہ بھرا ہو تب $J = L + S$ کی توانائی کم سے کم ہو گی۔ اس حقیقت کو استعمال کرتے ہوئے سوال ۵.۱۲-ب میں بوران کے مسئلہ سے شک دور کریں۔

د. قواعد ہنڈ کے ساتھ یہ حقیقت استعمال کرتے ہوئے کہ تشاکلی چکری حال کے ساتھ خلاف تشاکل مقام حال (اور خلاف تشاکل مقام حال کے ساتھ تشاکلی چکری حال) استعمال ہو گا، سوال ۵.۱۲-ب میں کاربن اور نائیٹروجن میں درپیش مشکلات سے چھٹکارا حاصل کریں۔ اشارہ: کسی بھی حال کی تشاکلی جاننے کی خاطر "سیڑھی کے بالائی سر" کو دیکھیں۔

سوال ۵.۱۴: (دوری جدول کی چھٹے صف میں عنصر 66) ڈسپروزیم کا زمینی حال $^5I_8$ ہے۔ اس کے کل چکر، کل مدار چے، اور میزان کل زاویائی معیار حرکت کے کوانٹائی اعداد کیا ہوں گے؟ ڈسپروزیم کے الیکٹران تشکیل کا خاکہ تجویز کریں۔

---

[۲۹] کرپٹان، عنصر 36 کے بعد، صورت حال زیادہ پیچیدہ ہو جاتی ہے (حالات کے ترتیب میں مہین ساخت زیادہ بڑا کردار ادا کرنے لگتا ہے) لہٰذا یہ صفحہ پر جگہ کی کمی نہیں تھی جس کی وجہ سے جدول کو یہاں اختتام پذیر کیا گیا۔

[۳۰] Hund's first rule

[۳۱] Hund's second rule

[۳۲] Hund's third rule

جدول ۵.۱: دوری جدول کی اولین چار قطاروں کی الیکٹران تشکیلات

Z	عنصر	تشکیل	
1	H	$(1s)$	$^2S_{1/2}$
2	He	$(1s)^2$	$^1S_0$
3	Li	$(\mathrm{He})(2s)$	$^2S_{1/2}$
4	Be	$(\mathrm{He})(2s)^2$	$^1S_0$
5	B	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)$	$^2P_{1/2}$
6	C	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^2$	$^3P_0$
7	N	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^3$	$^4S_{3/2}$
8	O	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^4$	$^3P_2$
9	F	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^5$	$^2P_{3/2}$
10	Ne	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^6$	$^1S_0$
11	Na	$(\mathrm{Ne})(3s)$	$^2S_{1/2}$
12	Mg	$(\mathrm{Ne})(3s)^2$	$^1S_0$
13	Al	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)$	$^2P_{1/2}$
14	Si	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^2$	$^3P_0$
15	P	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^3$	$^4S_{3/2}$
16	S	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^4$	$^3P_2$
17	Cl	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^5$	$^2P_{3/2}$
18	Ar	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^6$	$^1S_0$
19	K	$(\mathrm{Ar})(4s)$	$^2S_{1/2}$
20	Ca	$(\mathrm{Ar})(4s)^2$	$^1S_0$
21	Sc	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)$	$^2D_{3/2}$
22	Ti	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^2$	$^3F_2$
23	V	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^3$	$^4F_{3/2}$
24	Cr	$(\mathrm{Ar})(4s)(3d)^5$	$^7S_3$
25	Mn	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^5$	$^6S_{5/2}$
26	Fe	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^6$	$^5D_4$
27	Co	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^7$	$^4F_{9/2}$
28	Ni	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^8$	$^3F_4$
29	Cu	$(\mathrm{Ar})(4s)(3d)^{10}$	$^2S_{1/2}$
30	Zn	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}$	$^1S_0$
31	Ga	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)$	$^2P_{1/2}$
32	Ge	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^2$	$^3P_0$
33	As	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^3$	$^4S_{3/2}$
34	Se	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^4$	$^3P_2$
35	Br	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^5$	$^2P_{3/2}$
36	Kr	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^6$	$^1S_0$

۵.۳ ٹھوس اجسام

ٹھوس حال میں ہر جوہر کے بیرونی ڈھیلے مقید گرفتی[۳۳] الیکٹران میں سے چند ایک علیحدہ ہو کر، کسی مخصوص "موروثی" مرکزہ کے کولمب میدان سے آزاد، تمام قلمی جال کے مخفیہ کے زیر اثر، حرکت کرتے ہیں۔ اس حصہ میں ہم دو انتہائی سادہ نمونوں پر غور کریں گے: پہلا نمونہ سمرفلڈ کا الیکٹران گیس نظریہ ہے جس میں (سرحد کے علاوہ) باقی تمام قوتوں کو نظرانداز کیا جاتا ہے اور ان الیکٹران کو (لامتناہی چوکور کنویں کے تین ابعادی مماثل کی طرح) ڈبے میں آزاد ذرات تصور کیا جاتا ہے؛ اور دوسرا نمونہ نظریہ بلوخ ہے جو الیکٹران کے باہمی دفع کو نظرانداز کرتے ہوئے باقاعدگی سے ایک جتنے فاصلے پر مثبت بار کے مرکزہ کی قوت کشش کو دوری مخفیہ سے ظاہر کرتا ہے۔ یہ نمونے ٹھوس اجسام کی کوانٹائی نظریہ کی طرف پہلے لڑکھڑاتے قدم ہیں، لیکن اس کے باوجود یہ "جمود" کے حصول میں پالی حصول مناعت کے گہرے کردار پر اور موصل، غیر موصل، اور نیم موصل کی حیرت کن برقی خواص پر روشنی ڈالنے میں مدد دیتے ہیں۔

۵.۳.۱ آزاد الیکٹران گیس

فرض کریں، ایک ٹھوس جسم مستطیل شکل کا ہے جس کے اضلاع ℓ_x ، ℓ_y اور ℓ_z ہیں، اور اس جسم کے اندر الیکٹران پر کوئی قوت اثرانداز نہیں ہوتی، ماسوائے ناقابل گزر دیواروں کے۔

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & 0 < x < \ell_x, \quad 0 < y < \ell_y, \quad 0 < z < \ell_z \\ \infty & \text{دیگر صورت} \end{cases} \tag{۵.۳۵}$$

مساوات شروڈنگر،

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi$$

کارتیسی محدد میں علیحدہ ہوتی ہے: $\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z)$ جہاں

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 X}{\mathrm{d}x^2} = E_x X; \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 Y}{\mathrm{d}y^2} = E_y Y; \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 Z}{\mathrm{d}z^2} = E_z Z$$

اور $E = E_x + E_y + E_z$ ہوں گے۔ اب

$$k_x \equiv \frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}, \quad k_y \equiv \frac{\sqrt{2mE_y}}{\hbar}, \quad k_z \equiv \frac{\sqrt{2mE_z}}{\hbar}$$

---

[۳۳] valence

لکھ کر درج ذیل عمومی حل حاصل ہوں گے۔

$$X(x) = A_x \sin(k_x x) + B_x \cos(k_x x), \quad Y(y) = A_y \sin(k_y y) + B_y \cos(k_y y),$$
$$Z(z) = A_z \sin(k_z z) + B_z \cos(k_z z)$$

سرحدی شرائط کے تحت $X(0) = Y(0) = Z(0) = 0$ لہٰذا $B_x = B_y = B_z = 0$ اور $X(\ell_x) = Y(\ell_y) = Z(\ell_z) = 0$ ہوں گے اور یوں

$$k_x \ell_x = n_x \pi, \quad k_y \ell_y = n_y \pi, \quad k_z \ell_z = n_z \pi \tag{۵.۳۶}$$

ہوں گے جہاں ہر n ایک مثبت عدد صحیح ہو گا۔

$$n_x = 1, 2, 3, \ldots, \quad n_y = 1, 2, 3, \ldots, \quad n_z = 1, 2, 3, \ldots \tag{۵.۳۷}$$

(معمول شدہ) تفاعلات موج:

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{8}{\ell_x \ell_y \ell_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{\ell_x} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{\ell_y} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{\ell_z} z\right) \tag{۵.۳۸}$$

ہوں گے اور اجازتی توانائیاں:

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{\ell_x^2} + \frac{n_y^2}{\ell_y^2} + \frac{n_z^2}{\ell_z^2}\right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{۵.۳۹}$$

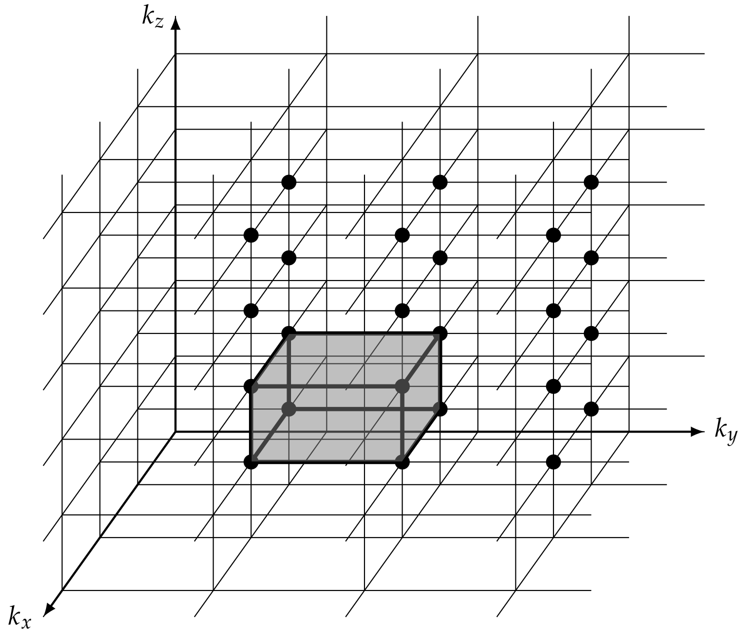
ہوں گی، جہاں **سمتیہ موج**[۳۴]، $\boldsymbol{k} \equiv (k_x, k_y, k_z)$ کی مقدار k ہے۔

ایک تین ابعادی فضا جس کے محور k_x ، k_y ، k_z ہوں کا تصور کریں جس میں

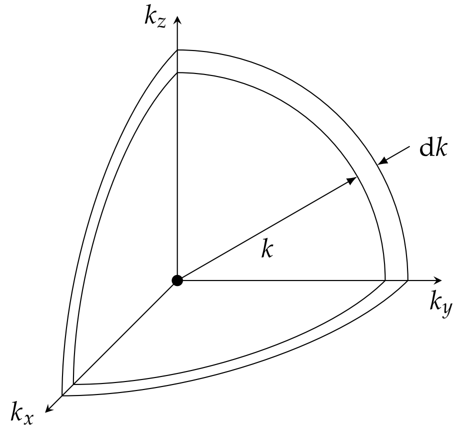
$$k_x = \frac{\pi}{\ell_x}, \frac{2\pi}{\ell_x}, \frac{3\pi}{\ell_x}, \ldots$$
$$k_y = \frac{\pi}{\ell_y}, \frac{2\pi}{\ell_y}, \frac{3\pi}{\ell_y}, \ldots$$
$$k_z = \frac{\pi}{\ell_z}, \frac{2\pi}{\ell_z}, \frac{3\pi}{\ell_z}, \ldots$$

---

[۳۴] wave vector



شکل ۵.۳: آزاد الیکٹران گیس۔ جال کا ہر نقطہ تقاطع ایک ساکن حال کو ظاہر کرتا ہے۔ ایک "ڈبے" کو سیاہ دکھایا گیا ہے۔ ایک ڈبے کے لئے ایک حال پایا جاتا ہے۔



شکل ۵.۴: کروی خول کا k فضا میں ایک مثمن۔

پر سیدھی سطحیں پائی جاتی ہوں؛ اس فضا میں ہر انفرادی نقطہ تقاطع، منفرد یک ذروی ساکن حال دیگا (شکل ۵.۳)۔ اس جال کا ہر خانہ، اور یوں ہر حال، k فضا میں درج ذیل حجم گھیرے گا، جہاں پورے جسم کا حجم $V \equiv \ell_x \ell_y \ell_z$ ہے۔

$$\frac{\pi^3}{\ell_x \ell_y \ell_z} = \frac{\pi^3}{V} \tag{5.40}$$

فرض کریں مادہ کے ایک ٹکڑا میں N جوہر پائے جاتے ہوں اور ہر جوہر اپنے حصہ کے q آزاد الیکٹران دیتا ہو۔ (عملاً، کسی بھی کلاں بین جسامت کی چیز کے لئے N کی قیمت بہت بڑی ہو گی، جس کی گنتی ایوگادرو عدد میں کی جائے گی؛ جبکہ q ایک چھوٹا عدد مثلاً 1 یا 2 ہو گا۔) اگر الیکٹران بوسن (یا قابل ممیز ذرات) ہوتے تب وہ زمینی حال ψ_{111} میں سکونت[35] اختیار کرتے ہیں۔ لیکن، حقیقت میں الیکٹران متماثل فرمیان ہیں جن پر پالی اصول مناعت کا اطلاق ہوتا ہے، لہٰذا کسی بھی حال کے صرف دو الیکٹران مکین ہو سکتے ہیں۔ یوں یہ الیکٹران k فضا میں رداس k_F کے کرہ کا ایک مثمن[36] بھرتے ہیں؛ اس رداس کا تعین اس حقیقت سے کیا جا سکتا ہے کہ الیکٹران کے ہر ایک جوڑے کو $\frac{\pi^3}{V}$ حجم درکار ہو گا (مساوات ۵.۴۰)۔

---

[35] میں یہاں فرض کر رہا ہوں کہ ایسا کوئی حراری یا دیگر اضطراب نہیں پایا جاتا جو ٹھوس جسم کو مجموعی زمینی حال سے اٹھاتا ہو۔ میں "ٹھنڈے" ٹھوس جسم کی بات کر رہا ہوں، اگرچہ جیسا آپ سوال ۵.۱۶-ج میں دیکھیں گے، ٹھوس اجسام، رہائشی درجہ حرارت سے بہت زیادہ درجہ حرارت پر بھی موجودہ نقطہ نظر سے "ٹھنڈے" ہوتے ہیں۔

[36] کیونکہ، N بہت بڑا عدد ہے لہٰذا ہمیں جال کی اصل دندانی سطح اور کرہ کی اس ہموار سطح میں فرق کرنے کی ضرورت نہیں جو اس کو تخمیناً ظاہر کرتی ہے۔

$$\frac{1}{8}\left(\frac{4}{3}\pi k_F^3\right) = \frac{Nq}{2}\left(\frac{\pi^3}{V}\right)$$

یوں

$$k_F = (3\rho\pi^2)^{\frac{1}{3}} \tag{۵.۴۱}$$

ہو گا جہاں

$$\rho \equiv \frac{Nq}{V} \tag{۵.۴۲}$$

کثافت آزاد الیکٹران[۳۷] (اکائی حجم میں آزاد الیکٹران کی تعداد) ہے۔

k فضا میں آباد حالات (الیکٹران ان کے مکین ہیں) اور غیر آباد حالات (الیکٹران ان کے مکین نہیں ہیں) کی سرحد کو **فرمی سطح**[۳۸] کہتے ہیں (جس کی بنا پر زیر نوشت میں F لکھا گیا ہے)۔ اس سطح پر طاقتی توانائی کو **فرمی توانائی**[۳۹]، E_F کہتے ہیں، آزاد الیکٹران گیس کے لئے درج ذیل ہو گا۔

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\rho\pi^2)^{\frac{2}{3}} \tag{۵.۴۳}$$

الیکٹران گیس کی کل توانائی کو درج ذیل طریقے سے حاصل کیا جا سکتا ہے: ایک خول جس کی موٹائی $\mathrm{d}k$ ہو (شکل ۵.۴) کا حجم

$$\frac{1}{8}(4\pi k^2)\,\mathrm{d}k$$

ہو گا، لہٰذا اس خول میں الیکٹران حالات کی تعداد درج ذیل ہو گی۔

$$\frac{2[(1/2)\pi k^2\,\mathrm{d}k]}{(\pi^3/V)} = \frac{V}{\pi^2}k^2\,\mathrm{d}k$$

ان میں سے ہر ایک حال کی توانائی $\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ (مساوات ۵.۳۹) ہے، لہٰذا خول کی توانائی

$$\mathrm{d}E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\frac{V}{\pi^2}k^2\,\mathrm{d}k \tag{۵.۴۴}$$

---

[۳۷] free electron density
[۳۸] Fermi surface
[۳۹] Fermi energy

اور کل توانائی درج ذیل ہو گی۔

$$E_{\text{کل}} = \frac{\hbar^2 V}{2\pi^2 m}\int_0^{k_F} k^4\,\mathrm{d}k = \frac{\hbar^2 k_F^5 V}{10\pi^2 m} = \frac{\hbar^2(3\pi^2 Nq)^{5/3}}{10\pi^2 m}V^{-2/3} \tag{۵.۴۵}$$

کوانٹائی میکانی توانائی کا کردار کچھ ایسا ہی ہے جیسے سادہ گیس میں اندرونی حراری توانائی (U) کا ہوتا ہے۔ بالخصوص یہ دیواروں پر ایک دباو پیدا کرتا ہے اور اگر ڈبے کے حجم میں $\mathrm{d}V$ کا اضافہ ہو تب کل توانائی میں درج ذیل کمی رونما ہو گی

$$\mathrm{d}E_{\text{کل}} = -\frac{2}{3}\frac{\hbar^2(3\pi^2 Nq)^{5/3}}{10\pi^2 m}V^{-5/3}\,\mathrm{d}V = -\frac{2}{3}E_{\text{کل}}\frac{\mathrm{d}V}{V}$$

جو کوانٹائی دباو P کا کیا ہوا بیرونی کام $(\mathrm{d}W = P\,\mathrm{d}V)$ ہو گا۔ ظاہر ہے کہ درج ذیل ہو گا۔

$$P = \frac{2}{3}\frac{E_{\text{کل}}}{V} = \frac{2}{3}\frac{\hbar^2 k_F^5}{10\pi^2 m} = \frac{(3\pi^2)^{2/3}\hbar^2}{5m}\rho^{5/3} \tag{۵.۴۶}$$

یہ اس سوال کا جزوی جواب ہے کہ ایک ٹھنڈا ٹھوس جسم اندر کی طرف منہدم کیوں نہیں ہو جاتا: ایک اندرونی کوانٹائی میکانی دباو توازن برقرار رکھتا ہے جس کا الیکٹران کے باہمی دفع (جنہیں ہم نظر انداز کر چکے ہیں) یا حراری حرکت (جس کو ہم خارج کر چکے ہیں) کے ساتھ کوئی تعلق نہیں، بلکہ جو متماثل فرمیان کی ضرورت خلاف تشاکلیت سے پیدا ہوتا ہے۔ اس کو بعض اوقات **انحطاطی دباو**[40] کہتے ہیں، اگرچہ "مناعتی دباو" بہتر اصطلاح ہو گی۔[41]

سوال ۵.۱۵: ایک آزاد الیکٹران کی اوسط توانائی $\frac{E_{\text{کل}}}{Nq}$ کو فرمی توانائی کی نسبت کی صورت میں لکھیں۔ جواب: $\frac{3}{5}E_F$

سوال ۵.۱۶: تانبے کی کثافت $8.96\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$ ہے جبکہ اس کا جوہری وزن $63.5\,\mathrm{g\,mol^{-1}}$ ہے۔

ا. مساوات ۵.۴۳ استعمال کرکے $q = 1$ لیتے ہوئے تانبے کی فرمی توانائی کا حساب لگا کر نتیجہ کو الیکٹران وولٹ کی صورت میں لکھیں۔

ب. الیکٹران کی مطابقتی سمتی رفتار کیا ہو گی؟ اشارہ: $E_F = (\frac{1}{2})mv^2$ لیں۔ کیا تانبے میں الیکٹران کو غیر اضافیتی تصور کرنا خطرے سے باہر ہو گا؟

ج. تانبا کے لئے کس درجہ حرارت پر امتیازی حراری توانائی ($k_B T$ جہاں k_B بولٹزمن مستقل اور T کیلون حرارت ہے)، فرمی توانائی کے برابر ہو گی؟ تبصرہ: اس کو **فرمی درجہ حرارت**[42] کہتے ہیں۔ جب تک اصل درجہ حرارت فرمی درجہ حرارت سے کافی کم ہو مادہ کو "ٹھنڈا" تصور کیا جا سکتا ہے اور اس میں الیکٹران نچلے ترین قابل پہنچ حال میں ہوں گے۔ کیونکہ تانبا $1356\,\mathrm{K}$ پر پگھلتا ہے لہٰذا ٹھوس تانبا ہر صورت ٹھنڈا ہو گا۔

---

[40] degeneracy pressure

[41] ہم نے مساوات ۵.۴۱، مساوات ۵.۴۳، مساوات ۵.۴۵، اور مساوات ۵.۴۶ لامتناہی مستطیل جسم کے لئے اخذ کیے، تاہم یہ کسی بھی شکل کے ہر اس جسم کے لئے درست ہیں جس میں ذرات کی تعداد بہت زیادہ ہو۔

[42] Fermi temperature

د. الیکٹران گیس نمونہ میں تانبا کے لئے انحطاطی دباو (مساوات ۵.۴۶) کا حساب لگائیں۔

سوال ۵.۱۷: کسی جسم پر دباو میں معمولی کمی اور نتیجتاً حجم میں نسبتی اضافہ کے تناسب کو **جسیم مقیاس**[43] کہتے ہیں۔

$$B = -V\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}V}$$

دکھائیں کہ آزاد الیکٹران نمونہ میں $B = \frac{5}{3}P$ ہو گا اور سوال ۵.۱۶-د کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے تانبے کے لئے جسیم مقیاس کی اندازاً قیمت تلاش کریں۔ تبصرہ: تجربہ سے حاصل قیمت $13.4 \times 10^{10}\,\mathrm{N\,m^{-2}}$ ہے؛ مکمل درست جواب کی توقع نہ کریں، کیونکہ ہم نے الیکٹران مرکزہ اور الیکٹران الیکٹران قوتوں کو نظر انداز کیا ہے! حقیقت میں یہ حیرانی کی بات ہے کہ حساب سے حاصل نتیجہ حقیقت کے اتنا قریب ہے۔

۵.۳.۲ پٹی دار ساخت

ہم آزاد الیکٹران نمونہ میں منظم فاصلوں پر ساکن مثبت بار کے مراکزہ کی الیکٹرانوں پر قوت کو شامل کر کے بہتر نمونہ حاصل کرتے ہیں۔ ٹھوس اجسام کا رویہ نمایاں حد تک اس حقیقت پر مبنی ہے کہ اس کا مخفیہ دوری ہوتا ہے۔ مخفیہ کی حقیقی شکل مادہ کی تفصیلی رویہ میں کردار ادا کرتی ہے۔ یہ عمل دیکھنے کی خاطر میں سادہ ترین نمونہ تیار کرتا ہوں جسے یک بُعدی **ڈیراک کنگھی**[44] کہتے ہیں اور جو برابر فاصلوں پر ڈیلٹا تفاعل سوزنات پر مشتمل ہوتا ہے (شکل ۵.۵)۔[45] لیکن اس سے پہلے میں ایک طاقتور مسئلہ پیش کرتا ہوں جو دوری مخفیہ کے مسائل کا حل نہایت آسان بناتا ہے۔

دوری مخفیہ سے مراد ایسا مخفیہ ہے جو کسی مستقل فاصلہ a کے بعد اپنے آپ کو دہراتا ہو۔

$$V(x+a) = V(x) \tag{۵.۴۷}$$

مسئلہ بلوخ[46] کہتا ہے کہ دوری مخفیہ کے لئے مساوات شروڈنگر،

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi = E\psi \tag{۵.۴۸}$$

کے حل سے مراد وہ تفاعل لیا جا سکتا ہے جو درج ذیل شرط کو مطمئن کرتا ہو

$$\psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x) \tag{۵.۴۹}$$

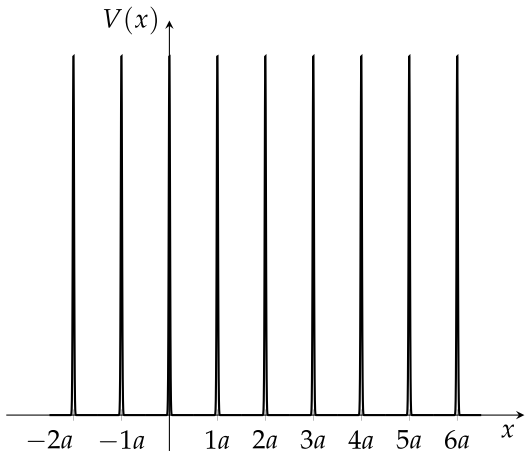
---

[43] bulk modulus

[44] Dirac comb

[45] ڈیلٹا تفاعلات کو نیچے رخ رکھنا زیادہ ٹھیک ہوتا، جو مراکزہ کے قوت کشش کو ظاہر کرتے؛ تاہم، ایسا کرنے سے مثبت توانائی حل کے ساتھ ساتھ منفی توانائی حل بھی حاصل ہوتے ہیں جس کی بنا پر حساب کرنا زیادہ مشکل ہو جاتا ہے (سوال ۵.۲۰ دیکھیں)۔ ہم یہاں مخفیہ کی دوریت کے اثرات میں دلچسپی رکھتے ہیں؛ بظاہر کم معقول شکل منتخب کر کے مسئلے کا حل آسان ہوتا ہے؛ آپ تصور کر سکتے ہیں کہ مراکزہ $\pm a/2$ ، $\pm 3a/2$ ، $\pm 5a/2$ ، وغیرہ پر پائے جاتے ہیں۔

[46] Bloch's theorem



شکل ۵.۵: ڈیراک کنگھی (مساوات ۵.۵۷)۔

جہاں K ایک مستقل ہے (یہاں "مستقل" سے مراد ایسا تفاعل ہے جو x کا تابع نہیں ہے؛ اگرچہ یہ E کا تابع ہو سکتا ہے)۔

ثبوت: مان لیں کہ D ایک "ہٹاو" عامل ہے:

$$Df(x) = f(x+a) \tag{۵.۵۰}$$

دوری مخفیہ مساوات ۵.۴۷ کی صورت میں D ہیملٹنی کا مقلوبی ہو گا:

$$[D, H] = 0 \tag{۵.۵۱}$$

لہٰذا ہم H کے ایسے امتیازی تفاعلات چن سکتے ہیں جو بیک وقت D کے امتیازی تفاعلات بھی ہوں: $D\psi = \lambda\psi$ یا درج ذیل۔

$$\psi(x+a) = \lambda\psi(x) \tag{۵.۵۲}$$

یہاں λ کسی صورت صفر نہیں ہو سکتا (اگر ایسا ہو تب چونکہ مساوات ۵.۵۲ تمام x کے لئے مطمئن ہو گا لہٰذا ہمیں $\psi(x) = 0$ ملے گا جو قابل قبول امتیازی تفاعل نہیں ہے)؛ کسی بھی غیر صفر مخلوط عدد کی طرح، اس کو قوت نمائی روپ میں لکھا جا سکتا ہے:

$$\lambda = e^{iKa} \tag{۵.۵۳}$$

جہاں K ایک مستقل ہو گا۔

□

اس مقام پر مساوات ۵.۵۳ امتیازی قدر λ لکھنے کا ایک انوکھا طریقہ ہے، لیکن ہم جلد دیکھیں گے کہ K "حقیقی" ہے اور یوں اگرچہ $\psi(x)$ خود غیر دوری ہے $\left|\psi(x)\right|^2$:

$$\left|\psi(x+a)\right|^2 = \left|\psi(x)\right|^2 \tag{۵.۵۴}$$

دوری ہو گا، جیسا کہ ہم توقع کرتے آئے ہیں۔[۴۷]

اب ظاہر ہے کہ کوئی بھی ٹھوس جسم ہمیشہ کے لئے چلتا نہیں جائے گا بلکہ کہیں نہ کہیں اس کی سرحد پائی جائے گی جو $V(x)$ کی دوریت کو ختم کرتے ہوئے مسئلہ بلوخ کو ناکارہ بنا دے گی۔ تاہم کسی بھی کلاں بین قلم میں کئی ایوگادرو عدد کے برابر جوہر پائے جائیں گے، اور ہم فرض کر سکتے ہیں کہ ٹھوس جسم کی سطح سے بہت دور، الیکٹران پر سطحی اثر قابل نظر انداز ہو گا۔ ہم مسئلہ بلوخ کو کارآمد رکھنے کی خاطر x کو ایک دائرے پر رکھتے ہیں تا کہ اس کا سر، بہت بڑی تعداد $N \approx 10^{23}$ دوری فاصلوں کے بعد، اس کے دم پر پایا جاتا ہو؛ باضابطہ طور پر ہم درج ذیل سرحدی شرط عائد کرتے ہیں۔

$$\psi(x+Na) = \psi(x) \tag{۵.۵۵}$$

یوں (مساوات ۵.۴۹ کے تحت) درج ذیل ہو گا

$$e^{iNKa}\psi(x) = \psi(x)$$

لہٰذا $e^{iNKa} = 1$ یا $NKa = 2\pi n$ ہو گا جس کے تحت درج ذیل ہو گا۔

$$K = \frac{2\pi n}{Na}, \qquad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \tag{۵.۵۶}$$

(درج بالا مساوات میں حقیقتاً $n = 0, 1, 2, \cdots, N-1$ ہو گا؛ تفصیل کے لئے مساوات ۵.۶۶ کے نیچے پیراگراف پڑھیں۔) موجودہ صورت میں K لازماً حقیقی ہو گا۔ مسئلہ بلوخ کی افادیت یہ ہے کہ ہمیں صرف ایک خانہ (مثلاً $(0 \le x < a)$ کے وقفہ) پر مسئلہ شروڈنگر حل کرنا ہو گا؛ مساوات ۵.۴۹ کی بار بار اطلاق سے باقی تمام جگہوں کے لئے حل حاصل ہو گا۔

اب فرض کریں کہ مخفیہ در حقیقت (درج ذیل) نوکیلی ڈیلٹا تفاعل سوزنات (ڈیراک کنگھی) پر مشتمل ہو۔

$$V(x) = \alpha \sum_{j=0}^{N-1} \delta(x - ja) \tag{۵.۵۷}$$

(شکل ۵.۵ میں آپ تصور کریں گے کہ محور x کو یوں دائروی شکل میں لپیٹا گیا ہے کہ N ویں سوزن در حقیقت نقطہ $x = -a$ پر پائی جاتی ہے۔) اگرچہ یہ حقیقت پسند نمونہ نہیں ہے، لیکن یاد رہے، ہمیں دوریت کے اثرات

[۴۷] یقیناً، آپ دلیل کو الٹ کر کے مساوات ۵.۵۴ سے آغاز کرتے ہوئے مسئلہ بلوخ ثابت کرنا چاہیں گے۔ ایسا کرنا ممکن نہیں ہے، کیونکہ مساوات ۵.۴۹ کے پیچھے جزو ضربی کو x کا تفاعل ہونے کی اجازت صرف مساوات ۵.۵۴ دیتی ہے۔

میں صرف دلچسپی ہے؛ کلاسیکی **کرانگ وپینی نمونہ**[۴۸] میں دہراتا ہوا مستطیل مخفیہ استعمال کیا گیا، جواب بھی بہت سے مصنفین کا پسندیدہ مخفیہ ہے۔ خطہ $(0 < x < a)$ میں مخفیہ صفر ہو گا لہٰذا

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi,$$

یا

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -k^2\psi,$$

ہو گا جہاں ہمیشہ کی طرح درج ذیل ہو گا۔

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \tag{۵.۵۸}$$

اس کا عمومی حل درج ذیل ہے۔

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx), \qquad (0 < x < a). \tag{۵.۵۹}$$

مسئلہ بلوخ کے تحت مبدا کے بائیں جانب پہلے خانہ میں تفاعل موج درج ذیل ہو گا۔

$$\psi(x) = e^{-iKa}[A\sin k(x+a) + B\cos k(x+a)], \qquad (-a < x < 0). \tag{۵.۶۰}$$

نقطہ $x = 0$ پر ψ لازماً استمراری ہو گا لہٰذا

$$B = e^{-iKa}[A\sin(ka) + B\cos(ka)] \tag{۵.۶۱}$$

ہو گا؛ اس کے تفرق میں ڈیلٹا تفاعل کی زور کے براہ راست متناسب عدم استمرار پایا جائے گا (مساوات ۲.۱۲۵، جس میں α کی علامت اُلٹ ہو گی، چونکہ یہاں کنووں کی بجائے سوزنات پائے جاتے ہیں):

$$kA - e^{-iKa}k[A\cos(ka) - B\sin(ka)] = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}B \tag{۵.۶۲}$$

مساوات ۵.۶۱ کو $A\sin(ka)$ کے لئے حل کرتے ہیں۔

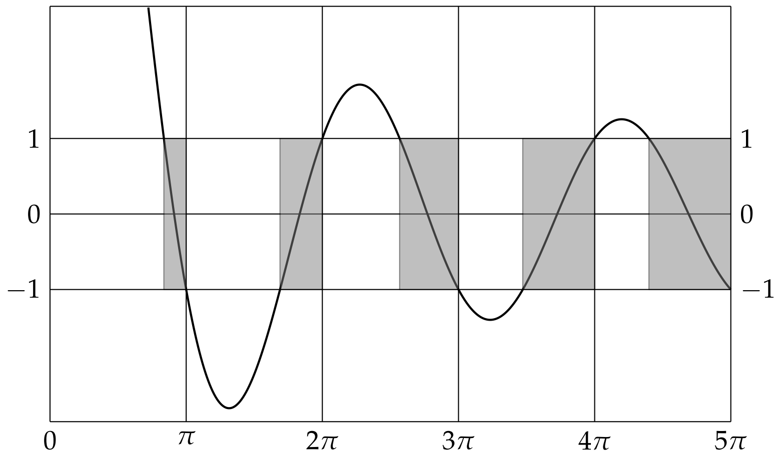
$$A\sin(ka) = [e^{iKa} - \cos(ka)]B \tag{۵.۶۳}$$

اس کو مساوات ۵.۶۲ میں پُر کر کے اور k_B کو منسوخ کرتے ہوئے

$$[e^{iKa} - \cos(ka)][1 - e^{-iKa}\cos(ka)] + e^{-iKa}\sin^2(ka) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2 k}\sin(ka)$$

---

[۴۸] Kronig-Penny model



شکل ۵.۶: تفاعل $f(z)$ (مساوات ۵.۶۶) کو $\beta = 10$ کے لئے ترسیم کر کے اجازتی پٹیاں (سایہ دار) دکھائی گئی ہیں جن کے بیچ ممنوعہ درز (جہاں $|f(z)| > 1$ ہو گا) پائے جاتے ہیں۔

حاصل ہو گا جس سے درج ذیل سادہ روپ حاصل ہوتا ہے۔

$$\cos(Ka) = \cos(ka) + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\sin(ka) \tag{۵.۶۴}$$

یہ وہ بنیادی نتیجہ ہے جس سے باقی سب کچھ اخذ ہوتا ہے۔ کرانگ و پینی مخفیہ کے لئے کلیہ زیادہ پیچیدہ ہو گا، لیکن جو خدوخال ہم دیکھنے جا رہے ہیں، وہی اس میں بھی پائے جاتے ہیں۔

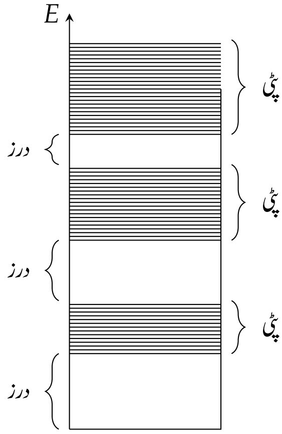
مساوات ۵.۶۴ متغیر k کی ممکنہ قیمتیں، لہٰذا اجازتی توانائیاں تعین کرتی ہے۔ علامتیت کو سادہ بنانے کی غرض سے ہم درج ذیل لکھتے ہیں

$$z \equiv ka, \quad \beta \equiv \frac{m\alpha a}{\hbar^2} \tag{۵.۶۵}$$

جس سے مساوات ۵.۶۴ کا دایاں ہاتھ درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$f(z) \equiv \cos(z) + \beta\frac{\sin(z)}{z} \tag{۵.۶۶}$$

مستقل β، ڈیلٹا تفاعل کے "زور" کا، بے بُعدی ناپ ہے۔ شکل ۵.۶ میں میں نے $\beta = 10$ کے لئے $f(z)$ کو ترسیم کیا ہے۔ یہاں دیکھنے کی اہم بات یہ ہے کہ $f(z)$ سعت $(-1,+1)$ سے باہر بھٹکتا ہے، اور چونکہ $|\cos(Ka)|$ کی قیمت کسی صورت بھی 1 سے تجاوز نہیں کر سکتی ہے، لہٰذا ایسے خطوں میں مساوات ۵.۶۴



شکل ۵.۷: دوری مخفیہ کی اجازتی توانائیاں بنیادی طور پر استمراری پٹیاں پیدا کرتی ہیں۔

کا حل نہیں پایا جائے گا۔ یہ **درز**[۴۹] ممنوع توانائیوں کو ظاہر کرتی ہیں؛ انکے بیچ اجازتی توانائیوں کی **پٹیاں**[۵۰] پائی جاتی ہیں۔ مساوات ۵.۵۶ کے تحت، $Ka = \frac{2\pi n}{N}$ ہو گا، جہاں N ایک بہت بڑا عدد ہے، لہٰذا n کوئی بھی عدد صحیح ہو سکتا ہے۔ یوں کسی ایک پٹی میں تقریباً ہر توانائی اجازتی ہو گی۔ آپ تصور میں شکل ۵.۶ پر $\cos(\frac{2\pi n}{N})$ قیمت کے فاصلوں پر $+1$ (یعنی $n = 0$) سے لے کر نیچے -1 (یعنی $n = \frac{N}{2}$) تک اور واپس تقریباً $+1$ (یعنی $n = N - 1$) تک (جہاں بلوخ جزو ضربی e^{iKa} دوبارہ چکر شروع کرتا ہے لہٰذا n کو مزید بڑھانے سے کوئی نیا حل حاصل نہیں ہو گا) لکیریں کھینچ کر دیکھ سکتے ہیں۔ ہر لکیر کا $f(z)$ کے ساتھ تقاطع، ایک اجازتی توانائی دیگا۔ ظاہر ہے کہ ہر پٹی میں N حالات پائے جاتے ہیں، جو ایک دوسرے کے اتنے قریب قریب ہیں کہ عموماً مقاصد کے لئے ہم فرض کر سکتے ہیں کہ یہ ایک استمراریہ پیدا کرتے ہیں (شکل ۵.۷)۔ (یوں مساوات ۵.۵۶ میں $n = 0, \pm1, \cdots$ کی بجائے $n = 0, 1, \cdots, N - 1$ ہو گا۔)

اب تک ہم نے اپنے مخفیہ میں صرف ایک الیکٹران رکھا ہے۔ حقیقت میں N_q الیکٹران ہوں گے، جہاں ہر ایک جوہر q تعداد کے آزاد الیکٹران مہیا کرے گا۔ پالی اصول مناعت کے بنا پر صرف دو الیکٹران کسی ایک فضائی حال کے مکین ہو سکتے ہیں، یوں $q = 1$ کی صورت میں یہ زمینی حال میں پہلی پٹی کو آدھا بھریں گے، اگر $q = 2$ ہو تب یہ پہلی پٹی کو مکمل بھریں گے، اگر $q = 3$ ہو تب یہ دوسری پٹی کو آدھا بھریں گے، وغیرہ وغیرہ۔ (تین ابعاد میں، اور زیادہ حقیقی مخفیہ کی صورت میں، پٹیوں کی ساخت زیادہ پیچیدہ ہو سکتی ہے، لیکن اجازتی پٹیاں جن کے بیچ ممنوع درز پائے جاتے ہوں، تب بھی ہو گا؛ دوری مخفیہ کی نشانی ہی پٹی دار ساخت ہے۔)

اب اگر ایک پٹی مکمل طور پر بھری ہوئی ہو، ممنوع خطہ سے گزر کر اگلی پٹی تک چھلانگ کے لئے ایک الیکٹران کو

[۴۹] gaps
[۵۰] bands

نسبتاً زیادہ توانائی درکار ہو گی؛ ایسا مادہ برقی طور پر **غیر موصل**[۵۱] ہو گا۔ اس کے برعکس اگر ایک پٹی پوری طرح بھری نہ ہو تب ایک الیکٹران کو ہیجان[۵۲] کرنے کے لئے بہت کم توانائی درکار ہو گی؛ اس طرح کا مادہ عموماً **موصل**[۵۳] ہو گا۔ ایک غیر موصل میں، زیادہ یا کم q والے، چند جوہر کی **ملاوٹ**[۵۴] سے، اگلی بالا پٹی میں چند اضافی الیکٹران آ جاتے ہیں یا سابقہ بھری پٹی میں چند **خول**[۵۵] پیدا ہو جاتے ہیں؛ ان دونوں صورتوں میں ایک کمزور برقی رو گزر سکتا ہے؛ ایسے اشیاء **نیم موصل**[۵۶] کہلاتے ہیں۔ آزاد الیکٹران نمونہ میں تمام ٹھوس اجسام کو لازماً اچھا موصل ہونا ہو گا چونکہ انکے اجازتی توانائیوں کے طیف میں کوئی بڑا وقفہ نہیں پایا جاتا ہے۔ قدرت میں پائے جانے والے ٹھوس اجسام کی برقی موصلیت میں اتنا زیادہ فرق صرف پٹی دار نظریہ کی مدد سے سمجھا سکتا ہے۔

سوال ۵.۱۸:

ا. مساوات ۵.۵۹ اور مساوات ۵.۶۳ استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ دوری ڈیلٹا تفاعل مخفیہ میں ایک ذرے کا تفاعل موج درج ذیل روپ میں لکھا جا سکتا ہے۔

$$\psi(x) = C[\sin(kx) + e^{-iKa}\sin k(a-x)], (0 \leq x \leq a).$$

(معمول زنی مستقل C تعین کرنے کی ضرورت نہیں ہے۔)

ب. البتہ پٹی کے بالائی سر پر جہاں z مستقل π کا عدد صحیح مضرب ہو گا (شکل ۵.۶) سے (الف) $\psi(x) = 0$ حاصل ہو گا۔ ایسی صورت میں درست تفاعل موج تلاش کریں۔ دیکھیں کہ ہر ایک ڈیلٹا تفاعل پر ψ کو کیا ہوتا ہے؟

سوال ۵.۱۹: پہلی اجازتی پٹی کی تہہ پر، $\beta = 10$ کی صورت میں توانائی کی قیمت، تین بامعنی ہندسوں تک، تلاش کریں۔ دلائل پیش کرتے ہوئے $\frac{\alpha}{a} = 1\,\text{eV}$ تصور کریں۔

سوال ۵.۲۰: فرض کریں ہم ڈیلٹا تفاعل سوزنات کے بجائے ڈیلٹا تفاعل کنوؤں پر غور کر رہے ہیں (یعنی مساوات ۵.۵۷ میں α کی علامت الٹ ہے)۔ ایسی صورت میں شکل ۵.۶ اور شکل ۵.۷ طرز کے اشکال بنا کر تجزیہ کریں۔ مثبت توانائی حلوں کے لئے آپ کو کوئی نیا حساب کرنے کی ضرورت نہیں ہے (بس مساوات ۵.۶۶ میں موزوں تبدیلیاں لائیں)، لیکن منفی توانائی حلوں کے لئے آپ کو کام کرنا ہو گا؛ اور انہیں ترسیم پر شامل کرنا مت بھولیں (جواب منفی z تک وسیع ہو گا)۔ پہلی اجازتی پٹی میں کتنے حالات ہونگے؟

سوال ۵.۲۱: دکھائیں کہ مساوات ۵.۶۴ سے متعین زیادہ تر توانائیاں دوہری انحطاطی ہیں۔ کونسی توانائیاں ایسی نہیں ہیں؟ اشارہ: $N = 1, 2, 3, 4, \ldots$ لیتے ہوئے دیکھیں کیا ہوتا ہے۔ ایسی ہر صورت میں $\cos(Ka)$ کی کیا ممکنہ قیمتیں ہوں گی؟

---

[۵۱] insulator
[۵۲] غیر مکمل بھری پٹی میں الیکٹران کی موجودہ توانائی سے معمولی زیادہ توانائی والا حال دستیاب ہو گا جس میں الیکٹران ہیجان ہو کر داخل ہو سکتا ہے۔
[۵۳] conductor
[۵۴] dope
[۵۵] hole
[۵۶] semiconductors

۵.۴ کوانٹائی شماریاتی میکانیات

مطلق صفر حرارت پر ایک طبعی نظام اپنی کم سے کم اجازتی توانائی تشکیل کا مکین ہوگا۔ درجہ حرارت بڑھانے سے بلا منصوبہ حراری سرگرمیوں کی بنا پر ہیجانی حالات بھرنے شروع ہونگے، جس سے درج ذیل سوال پیدا ہوتا ہے: اگر درجہ حرارت T پر، حراری توازن میں ایک بڑی تعداد N ذرات پائے جاتے ہوں، تب اس کا کیا احتمال ہوگا کہ ایک ذرہ جس کو بلا منصوبہ منتخب کیا گیا ہو، کی توانائی بالخصوص E_j ہوگی؟ دھیان رہے کہ اس "احتمال" کا کوانٹائی عدم تعیینیت کے ساتھ کوئی تعلق نہیں ہے؛ بالکل یہی سوال کلاسیکی شماریاتی میکانیات میں بھی کھڑا ہوتا ہے۔ ہمیں احتمالی جواب اس لئے منظور ہوگا کہ جن ذرات کی ہم بات کر رہے ہیں انکی تعداد اتنی زیادہ ہوگی کہ کسی بھی صورت میں ہر ایک پر علیحدہ علیحدہ نظر رکھنا ممکن نہیں ہوگا، چاہے مستمل میکانیات تعیینی ہو یا نہ ہو۔

شماریاتی میکانیات کا بنیادی مفروضہ یہ ہے کہ **حراری توازن**[57] میں ایک جیسی کل توانائی، E، والا ہر منفرد حال ایک جتنا محتمل ہوگا۔ بلا واسطہ حراری حرکت کی بنا پر توانائی ایک ذرہ سے دوسرے ذرہ، اور ایک روپ (حرکی، گردشی، لرزشی، وغیرہ) سے دوسری روپ میں مسلسل منتقل ہوگی لیکن (بیرونی مداخلت کی عدم موجودگی میں) بقا توانائی کی بنا پر کل مقررہ ہوگا۔ یہاں (بہت گہرا اور قابل سوچ) مفروضہ یہ ہے کہ توانائی کی مستمر تقسیم کسی مخصوص حال کو ترجیح نہیں دیتی۔ **درجہ حرارت**[58]، T، حراری توازن میں ایک نظام کی کل توانائی کی ایک پیمائش ہے۔ ان منفرد حالات کی گنتی میں کوانٹائی میکانیات ایک نئی پیچیدگی پیدا کرتی ہے (تاہم حالات غیر مسلسل ہوتے ہیں جس کی بنا پر یہ کلاسیکی نظریہ کی گنتی سے زیادہ آسان ہوگا)، اور گنتی کا انحصار اس بات پر ہوگا کہ آیا ذرات قابل ممیز، متماثل بوسن یا متماثل فرمیان ہیں۔ ان کے دلائل نسبتاً سیدھے لیکن ریاضی کافی گہری ہے لہٰذا میں ایک انتہائی سادہ مثال سے شروع کرتا ہوں تاکہ آپ بنیادی حقائق سمجھ سکیں۔

۵.۴.۱ ایک مثال

فرض کریں ہمارے پاس یک بُعدی لامتناہی چوکور کنویں (حصہ ۲.۲) میں، کمیت m والے، صرف تین باہم غیر متعامل ذرات پائے جاتے ہیں۔ کل توانائی درج ذیل ہوگی (مساوات ۲.۲۷ دیکھیں)

$$E = E_A + E_B + E_C = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_A^2 + n_B^2 + n_C^2) \tag{۵.۶۷}$$

جہاں n_A، n_B اور n_C مثبت عدد صحیح ہوں گے۔ ہم $E = 363\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right)$ یعنی

$$n_A^2 + n_B^2 + n_C^2 = 363 \tag{۵.۶۸}$$

لیتے ہوئے تبصرہ جاری رکھتے ہیں۔ جیسے آپ تصدیق کر سکتے ہیں، تین مثبت عدد صحیح اعداد کے تیرہ ایسے ملاپ پائے جاتے ہیں جن کے مربعوں کا مجموعہ 363 ہو: تینوں اعداد 11 ہو سکتے ہیں، دو اعداد 13 اور ایک 5 (جو تین مرتب اجتماعات میں پایا جائے گا)، ایک عدد 19 اور دو 1 (یہاں بھی تین مرتب اجتماعات

[57] thermal equilibrium
[58] temperature

ہوں گے)، یا ایک عدد 17، ایک 7 اور ایک 5 (چھ مرتب اجتماعات) ہو سکتے ہیں۔ یوں (n_A, n_B, n_C) درج ذیل میں سے ایک ہو گا۔

$$\begin{gathered}(11,11,11),\\(13,13,5),(13,5,13),(5,13,13),\\(1,1,19),(1,19,1),(19,1,1),\\(5,7,17),(5,17,7),(7,5,17),(7,17,5),(17,5,7),(17,7,5)\end{gathered}$$

اگر یہ ذرات قابل ممیز ہوں، تب ان میں سے ہر ایک کسی ایک منفرد کوانٹائی حال کو ظاہر کرے گا، اور شماریاتی میکانیات کے بنیادی مفروضے کے تحت، حراری توازن[۵۹] میں یہ سب برابر محتمل ہوں گے۔ لیکن میں اس میں دلچسپی نہیں رکھتا ہوں کہ کونسا ذرہ کس (یک ذروی) حال میں پایا جاتا ہے، بلکہ میں یہ جاننا چاہتا ہوں کہ ہر ایک حال میں کل کتنے ذرات پائے جاتے ہیں؛ جس کو حال ψ_n کی **تعداد مکین**[۶۰] N_n کہتے ہیں۔ ہم اس 3 ذروی حال کے تمام تعداد مکین کے اجتماع کو **تشکیل**[۶۱] کہتے ہیں۔ اگر تینوں حال ψ_{11} میں ہوں تب تشکیل درج ذیل ہو گا

$$(0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,3,0,0,0,0,0,0,0,0,\dots) \tag{۵.۶۹}$$

(یعنی $N_{11} = 3$ ہے اور باقی تمام صفر ہیں)۔ اگر دو حال ψ_{13} میں اور ایک ψ_5 میں ہو، تب تشکیل درج ذیل ہو گا

$$(0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,2,0,0,0,0,\dots) \tag{۵.۷۰}$$

(یعنی $N_5 = 1$ ، $N_{13} = 2$ ، اور باقی تمام صفر ہوں گے)۔ اگر دو ψ_1 میں اور ایک ψ_{19} میں ہو تب تشکیل درج ذیل ہو گا

$$(2,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,\dots) \tag{۵.۷۱}$$

(یعنی $N_1 = 2$ ، $N_{19} = 1$ اور باقی تمام صفر ہوں گے)۔ اور اگر ایک ذرہ ψ_5 میں، ایک ψ_7 میں اور ایک ψ_{17} میں ہو تب تشکیل درج ذیل ہو گا

$$(0,0,0,0,1,0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,0,\dots) \tag{۵.۷۲}$$

(یعنی $N_5 = N_7 = N_{17} = 1$ اور باقی صفر ہوں گے)۔ ان تمام میں، آخری تشکیل زیادہ محتمل ہو گی، چونکہ اس کو چھ مختلف طریقوں سے حاصل کیا جا سکتا ہے، جبکہ درمیانی دو کو تین طریقوں سے اور پہلی کو صرف ایک طریقے سے حاصل کیا جا سکتا ہے۔

---

[۵۹] غیر متعامل ذرات کس طرح حراری توازن برقرار رکھتے ہیں؟ میں اس کے بارے میں سوچنا نہیں چاہوں گا؛ حقیقتاً، توانائی کی مسترنئی تقسیم ذرات کے باہم عمل سے ہی ممکن ہو گی۔ ہم فرض کر سکتے ہیں کہ ذرات کا باہم عمل اتنا کمزور ہے کہ اگرچہ یہ (لمبے عرصے کی صورت میں) حراری توازن پیدا کرتا ہے، تاہم یہ اتنا کمزور ہے کہ نظام کے ساکن حالات اور اجازتی توانائیوں پر قابل دید اثر نہیں ڈالتا ہے۔

[۶۰] occupation number

[۶۱] configuration

میں اب دوبارہ اپنے اصل سوال پر آتا ہوں کہ بلاواسطہ تین ذرات منتخب کرتے ہوئے کوئی مخصوص (اجازتی) توانائی E_n حاصل کرنے کا احتمال (P_n) کیا ہوگا؟ توانائی E_1 صرف اس صورت حاصل ہوگی جب وہ تیسری تشکیل (مساوات ۵.۷۱) میں ہو؛ اس تشکیل میں نظام ہونے کا اتفاق 13 میں سے 3 ہے، اور اس تشکیل میں E_1 کے حصول کا احتمال $\frac{2}{3}$ ہے لہٰذا $P_1 = \frac{3}{13} \times \frac{2}{3} = \frac{2}{13}$ ہوگا۔ آپ E_5 کو تشکیل 2 (مساوات ۵.۷۰) سے 13 میں سے 3 امکان اور احتمال $\frac{1}{3}$ یا تشکیل 4 (مساوات ۵.۷۲) سے 13 میں سے 6 امکان اور احتمال $\frac{1}{3}$ کے ساتھ حاصل کر سکتے ہیں، لہٰذا $P_5 = \frac{3}{13} \times \frac{1}{3} + \frac{6}{13} \times \frac{1}{3} = \frac{3}{13}$ ہوگا۔ آپ E_7 کو صرف تشکیل 4 سے حاصل کر سکتے ہیں اور $P_7 = \frac{6}{13} \times \frac{1}{3} = \frac{2}{13}$ ہوگا۔ اسی طرح E_{11} صرف پہلی تشکیل (مساوات ۵.۶۹) سے 13 میں سے 1 امکان اور احتمال ایک (1) کے ساتھ حاصل ہوگا، لہٰذا $P_{11} = \frac{1}{13}$ ہوگا۔ اسی طرح $P_{13} = \frac{3}{13} \times \frac{2}{3} = \frac{2}{13}$، $P_{17} = \frac{6}{13} \times \frac{1}{3} = \frac{2}{13}$ اور $P_{19} = \frac{3}{13} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{13}$ ہوں گے۔ انکی تصدیق درج ذیل سے ہوگی۔

$$P_1 + P_5 + P_7 + P_{11} + P_{13} + P_{17} + P_{19} = \frac{2}{13} + \frac{3}{13} + \frac{2}{13} + \frac{1}{13} + \frac{2}{13} + \frac{2}{13} + \frac{1}{13} = 1$$

یہ قابل ممیز ذرات کے لئے تھا۔ اس کی بجائے اگر ذرات متماثل فرمیان ہوتے، ضرورت خلاف تشاکلیت (اپنی آسانی کے لئے چکر کو نظر انداز کرتے ہوئے، یا اگر آپ چاہیں تو، یہ تصور کرتے ہوئے کہ تمام ایک جیسے چکری حال میں ہیں) کی بنا پر پہلی تین تشکیلات (جو دو ذرات کو، یا اس سے بھی بری صورت میں تین ذرات کو، ایک ہی حال میں ڈالتے ہیں) ناممکن ہوں گی، اور چوتھی تشکیل میں صرف ایک حال ہوگا (سوال ۵.۲۲-الف دیکھیں)۔ متماثل فرمیان کے لئے $P_5 = P_7 = P_{17} = \frac{1}{3}$ ہوگا (اور اب بھی احتمالات کا مجموعہ ایک (1) ہے)۔ اس کے برعکس، اگر ذرات متماثل بوسن ہوتے تو ضرورت تشاکلیت ہر تشکیل میں ایک حال کی اجازت دیتا (سوال ۵.۲۲-ب دیکھیں)، لہٰذا $P_1 = \frac{1}{4} \times \frac{2}{3} = \frac{1}{6}$، $P_5 = \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} + \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{6}$، $P_7 = \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{12}$، $P_{11} = \frac{1}{4} \times 1 = \frac{1}{4}$، $P_{13} = \frac{1}{4} \times \frac{2}{3} = \frac{1}{6}$، $P_{17} = \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{12}$ اور $P_{19} = \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{12}$ ہوتا۔ ہمیشہ کی طرح احتمالات کا مجموعہ ایک (1) ہے۔

اس مثال کا مقصد آپ کو یہ دکھانا تھا کہ حالات کی شمار کس طرح ذرات کی قسم پر منحصر ہوتی ہے۔ ایک لحاظ سے حقیقی صورت، جہاں N ایک بہت بڑا عدد ہوگا، سے یہ مثال زیادہ پیچیدہ تھی۔ چونکہ N کی قیمت بڑھانے سے زیادہ محتمل تشکیل (جو قابل ممیز ذرات کے لئے اس مثال میں $N_5 = N_7 = N_{17} = 1$ ہے) پایا جانے کا امکان اتنا زیادہ ہو جائے گا کہ کسی بھی شماریاتی مقاصد کے لئے باقی تمام امکانات کو رد کیا جا سکتا ہے:[۱۲] توازن کی صورت میں انفرادی ذروی توانائیوں کی تقسیم، انکی زیادہ سے زیادہ محتمل تشکیل میں تقسیم ہے۔ (اگر $N = 3$ کے لئے یہ درست ہوتا، جو کہ یہ نہیں ہے، ہم قابل ممیز ذرات کے لئے $P_5 = P_7 = P_{17} = \frac{1}{3}$ اخذ کرتے۔) میں حصہ ۵.۴.۳ میں اس نقطہ پر دوبارہ آؤں گا لیکن اس سے پہلے گنتی کی ترکیب کو عمومیت دیتے ہیں۔

سوال ۵.۲۲:

ا. حال ψ_5 میں ایک، حال ψ_7 میں ایک، اور حال ψ_{17} میں ایک متماثل تین فرمیان کا مکمل خلاف تشاکلی تفاعل موج $\psi(x_A, x_B, x_C)$ تیار کریں۔

[۱۲] بڑے اعداد کی شماریات کا یہ ایک حیرت کن اور غیر متوقع حقیقت ہے۔

ب. تین متماثل بوسن کے لئے مکمل تشاکلی تفاعل موج $\psi(x_A, x_B, x_C)$ درج ذیل صورتوں میں تیار کریں (ا) تینوں حال ψ_{11} میں ہوں، (ب) اگر دو ψ_1 اور ایک ψ_{19} میں ہو، (ج) اگر ایک حال ψ_5 ایک حال ψ_7 اور ایک حال ψ_{17} میں ہو۔

سوال ۵.۲۳: فرض کریں یک بُعدی ہارمونی ارتعاشی مخفیہ میں آپ کے پاس تین باہم غیر متعامل ذرات، حراری توازن میں پائے جاتے ہوں، جن کی کل توانائی $E = \frac{9}{2}\hbar\omega$ ہے۔

ا. اگر یہ (ایک جیسی کمیت کے) قابل ممیز ذرات ہوں تب انکی تعداد ممکن کی کتنی تشکیلات ہوں گی اور ہر ایک کے لئے کتنے منفرد (تین ذروی) حالات ہوں گے؟ سب سے زیادہ محتمل تشکیل کیا ہو گی؟ اگر آپ ایک ذرہ بلا منصوبہ منتخب کر کے اسکی توانائی کی پیمائش کریں تو کیا قیمتیں متوقع ہوں گی اور ہر ایک کا احتمال کیا ہو گا؟ سب سے زیادہ محتمل توانائی کیا ہو گی؟

ب. یہی کچھ متماثل فرمیان کے لئے کریں (چکر کو نظر انداز کریں جیسا ہم نے حصہ ۵.۴.۱ میں کیا)۔

ج. یہی کچھ (چکر نظر انداز کرتے ہوئے) متماثل بوسن کے لئے کریں۔

۵.۴.۲ عمومی صورت

اب ایک ایسے اختیاری مخفیہ پر غور کرتے ہیں جس کی یک ذروی توانائیاں E_1 ، E_2 ، E_3 ، ... اور انحطاط d_1 ، d_2 ، d_3 ، ... ہوں (یعنی توانائی E_n کے d_n منفرد یک ذروی حالات ہیں)۔ فرض کریں ہم (ایک جیسی کمیت کے) N ذرات کو اس مخفیہ میں رکھتے ہیں؛ ہم تشکیل $(N_1, N_2, N_3, \ldots)$ میں دلچسپی رکھتے ہیں جس میں N_1 ذرات کی توانائی E_1 ، N_2 ذرات کی توانائی E_2 ، وغیرہ ہو گی۔ سوال: ایسا کتنے مختلف طریقوں سے کیا جا سکتا ہے (بلکہ یہ کہنا زیادہ درست ہو گا کہ اس مخصوص تشکیل کے مطابقتی کتنے منفرد حالات ہونگے)؟ اس کے جواب $Q(N_1, N_2, N_3, \ldots)$ کا انحصار اس بات پر ہو گا کہ آیا ذرات قابل ممیز، متماثل فرمیان، یا متماثل بوسن ہیں، لہٰذا ہم ان تین صورتوں پر علیحدہ علیحدہ غور کرتے ہیں۔

ہم پہلے یہ فرض کرتے ہیں کہ ذرات قابل ممیز ہیں۔ دستیاب کل N ذرات میں سے کتنے طریقوں سے N_1 منتخب کر کے پہلے "ٹوکرے" میں رکھے جا سکتے ہیں؟ جواب: **ثنائی عددی سر**[۴۳]:

$$\binom{N}{N_1} \equiv \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!} \tag{۵.۷۳}$$

N_1 کو N میں سے منتخب کرتا ہے۔ پہلا ذرہ N مختلف طریقوں سے منتخب کیا جا سکتا ہے، جس کے بعد $(N-1)$ ذرات رہ جاتے ہیں لہٰذا دوسرے ذرے کے انتخاب کے $N-1$ مختلف طریقے ہوں گے، وغیرہ۔

$$N(N-1)(N-2)\ldots(N-N_1+1) = \frac{N!}{(N-N_1)!}$$

[۴۳] binomial coefficient

لیکن یہ N_1 ذرات کے $N_1!$ مختلف مرتب اجتماعات کو علیحدہ علیحدہ گنتا ہے جبکہ ہمیں اس سے کوئی دلچسپی نہیں کے عدد 37 کو پہلے انتخاب میں یا 29 ویں انتخاب میں منتخب کیا گیا؛ لہٰذا ہم $N_1!$ سے تقسیم کرتے ہیں جس سے مساوات ۵.۷۳ حاصل ہوتا ہے۔ اب پہلے ٹوکرے کے اندر ان N_1 ذرات کو کتنے مختلف طریقوں سے رکھا جا سکتا ہے؟ چونکہ پہلے ٹوکرے میں d_1 حالات ہیں لہٰذا ہر ایک ذرے کو d_1 مختلف طریقوں سے چنا جا سکتا ہے؛ یوں کل ممکنات $(d_1)^{N_1}$ ہونگے۔ اس طرح ایک ٹوکرا، جس میں d_1 منفرد حق انتخاب ہوں، میں کل آبادی N میں سے N_1 ذرات منتخب کر کے رکھنے کی تعداد درج ذیل ہو گی۔

$$\frac{N!d_1^{N_1}}{N_1!(N-N_1)!}$$

دوسرے ٹوکرے میں صرف $(N-N_1)$ ذرات ہونے کے علاوہ بالکل ایسا ہی ہوگا:

$$\frac{(N-N_1)!d_2^{N_2}}{N_2!(N-N_1-N_2)!}$$

وغیرہ وغیرہ۔ اس طرح درج ذیل ہوگا

$$\begin{aligned}
Q(N_1,&N_2,N_3,\dots)\\
&=\frac{N!d_1^{N_1}}{N_1!(N-N_1)!}\frac{(N-N_1)!d_2^{N_2}}{N_2!(N-N_1-N_2)!}\frac{(N-N_1-N_2)!d_3^{N_3}}{N_3!(N-N_1-N_2-N_3)!}\cdots\\
&=N!\frac{d_1^{N_1}d_2^{N_2}d_3^{N_3}\cdots}{N_1!N_2!N_3!\dots}=N!\prod_{n=1}^{\infty}\frac{d_n^{N_n}}{N_n!}
\end{aligned}\tag{۵.۷۴}$$

(یہاں رک کر حصہ ۵.۴.۱ میں دیے گئے مثال کے لئے اس نتیجے کی تصدیق کریں۔ سوال ۵.۲۴ دیکھیں)

متماثل فرمیان کے لئے یہ مسئلہ نسبتاً بہت آسان ہے۔ چونکہ یہ غیر ممیز ہیں لہٰذا اس سے کوئی فرق نہیں پڑتا کہ کون سے ذرات کن حالات میں ہیں؛ ضرورت خلاف تشاکلیت کے تحت ایک مخصوص یک ذروی حالات کے سلسلہ کو بھرنے کے لئے صرف ایک N ذروی حال ہوگا۔ مزید واحد ایک ذرہ کسی ایک حال کو بھر سکتا ہے۔ لہٰذا n ویں ٹوکرا میں N_n بھرے حالات کو منتخب کرنے کے

$$\binom{d_n}{N_n}$$

طریقے[۶۴] ہونگے۔ اس طرح درج ذیل ہوگا

$$Q(N_1,N_2,N_3,\dots)=\prod_{n=1}^{\infty}\frac{d_n!}{N_n!(d_n-N_n)!}\tag{۵.۷۵}$$

[۶۴] ظاہر ہے کہ $N_n > d_n$ کی صورت میں یہ صفر ہوگا، جو منفی عدد صحیح کے عدد ضربیہ کو لامتناہی تصور کرنے سے ہوگا۔

(اس کی تصدیق حصہ ۵.۴.۱ میں دیے گئے مثال کے لئے کریں۔ سوال ۵.۲۴ دیکھیں)۔

متماثل بوسن کے لیے یہ حساب سب سے مشکل ہو گا۔ یہاں ضرورت تشاکلیت کے تحت ایک ذروی حالات کے ایک مخصوص سلسلہ کو بھرنے کا صرف ایک N ذروی حال ہو گا، تاہم اس مرتبہ ایک ذروی حال کو بھرنے کے لئے ذرات کی تعداد پر پابندی عائد نہیں ہو گی۔ یہاں n ویں ٹوکرے کیلئے سوال یہ ہو گا: ہم متماثل N_n ذرات کو d_n مختلف خانوں میں کس طرح رکھ سکتے ہیں؟ غیر مرتب اجتماعات کے اس سوال کو حل کرنے کے کئی طریقے ہیں۔ ایک دلچسپ طریقہ درج ذیل ہے: ہم ذرہ کو نقطہ اور خانوں کو صلیب سے ظاہر کرتے ہیں؛ یوں مثال کے طور پر، $d_n = 5$ اور $N_n = 7$ کی صورت میں

$$\bullet \quad \bullet \quad \times \quad \bullet \quad \times \quad \bullet \quad \bullet \quad \bullet \quad \times \quad \bullet \quad \times$$

یہ ظاہر کرے گا کہ پہلے حال میں دو ذرات، دوسرے حال میں ایک ذرہ، تیسرے میں تین، چوتھے میں ایک، اور پانچویں میں کوئی ذرہ نہیں پایا جاتا۔ دھیان رہے کہ نقطوں کی تعداد N_n اور صلیبوں کی تعداد $d_n - 1$ ہے (جو ان نقطوں کو d_n گروہ میں خانہ بند کرتے ہیں)۔ اگر ان انفرادی نقطوں اور صلیبوں کو نام دیے جاتے تب انہیں $(N_n + d_n - 1)!$ مختلف طریقوں سے رکھا جا سکتا تھا۔ تاہم ہمارے لئے تمام نقطے ایک جیسے ہیں؛ اور ان کو ($N_n!$ مختلف) مرتب اجتماعات کی صورت میں لکھنے سے حال تبدیل نہیں ہوتا۔ اسی طرح تمام صلیب معادل ہیں اور انہیں ($(d_n - 1)!$ مختلف) مرتب اجتماعات لکھنے سے کچھ بھی تبدیل نہیں ہو گا۔ یوں N ویں ٹوکرے میں d_n یک ذروی حالات کو N_n ذرات مختص کرنے کے درج ذیل منفرد طریقے ہوں گے

$$\frac{(N_n + d_n - 1)!}{N_n!(d_n - 1)!} = \binom{N_n + d_n - 1}{N_n} \tag{۵.۷۶}$$

جس کی بنا پر ہم درج ذیل اخذ کرتے ہیں۔

$$Q(N_1, N_2, N_3, \dots) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{(N_n + d_n - 1)!}{N_n!(d_n - 1)!} \tag{۵.۷۷}$$

(اس کی تصدیق حصہ ۵.۴.۱ میں دیے گئے مثال کے لئے کریں۔ سوال ۵.۲۴ دیکھیں)۔

سوال ۵.۲۴: حصہ ۵.۴.۱ میں دیے گئے مثال کے لئے مساوات ۵.۷۴، مساوات ۵.۷۵ اور مساوات ۵.۷۷ کی تصدیق کریں۔

سوال ۵.۲۵: مساوات ۵.۷۶ کو الکراجی ماخوذ کی مدد سے حاصل کریں۔ غیر مرتب اجتماعات کا سوال درج ذیل ہو گا: آپ d ٹوکریوں میں N متماثل گیندوں کو کتنے مختلف طریقوں سے رکھ سکتے ہیں (یہاں زیر نوشت میں n کو نظر انداز کریں)؟ آپ تمام کے تمام N کو تیسرے ٹوکرے میں رکھ سکتے تھے، یا ایک کو پانچویں اور باقیوں کو دوسرے ٹوکرے میں، یا دو کو پہلے اور تین کو تیسرے ٹوکرے میں اور باقی کو ساتویں ٹوکرے میں، وغیرہ، رکھ سکتے تھے۔ اس کو صریحاً $N = 1$، $N = 2$، $N = 3$، اور $N = 4$ کے لئے حاصل کریں؛ یہاں تک پہنچ کر آپ عمومی کلیہ اخذ کر پائیں گے۔

۵.۴.۳ سب سے زیادہ محتمل تشکیل

حراری توازن میں ہر وہ حال جس کی کل توانائی E اور ذروی عدد N ہو ایک جتنا محتمل ہو گا۔ یوں سب سے زیادہ محتمل تشکیل $N_1, N_2, N_3, \ldots$ وہ ہو گا جس کو سب سے زیادہ مختلف طریقوں سے حاصل کرنا ممکن ہو؛ یہ وہ مخصوص تشکیل ہو گی جو جس کے لئے

$$\sum_{n=1}^{\infty} N_n = N \tag{۵.۷۸}$$

اور

$$\sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n = E \tag{۵.۷۹}$$

پر پورا اترتے ہوئے $Q(N_1, N_2, N_3, \ldots)$ کی قیمت زیادہ سے زیادہ ہو۔

زیر شرائط $f_1(x_1, x_2, x_3, \ldots) = 0$ ، $f_2(x_1, x_2, x_3, \ldots) = 0$ ، وغیرہ، متعدد متغیرات کے ایک تفاعل $F(x_1, x_2, x_3, \ldots)$ کی زیادہ سے زیادہ قیمت **لگرانج مضرب**[۶۵] کی ترکیب سے با آسانی حاصل ہوتی ہے۔ ہم ایک نیا تفاعل

$$G(x_1, x_2, x_3, \ldots, \lambda_1, \lambda_2, \ldots) \equiv F + \lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2 + \cdots \tag{۵.۸۰}$$

متعارف کر کے اس کے تمام تفرقات کو صفر کے برابر رکھتے ہیں

$$\frac{\partial G}{\partial x_n} = 0; \quad \frac{\partial G}{\partial \lambda_n} = 0 \tag{۵.۸۱}$$

موجودہ صورت میں Q کی بجائے Q کے لوگارتھم کے ساتھ کام کرنا زیادہ آسان ثابت ہوتا ہے؛ جو حاصل ضرب کو مجموعہ میں تبدیل کرتا ہے۔ چونکہ لوگارتھم اپنے دلیل کا یکسر تفاعل ہے، لہٰذا Q کی زیادہ سے زیادہ قیمت اور $\ln(Q)$ کی زیادہ سے زیادہ قیمت ایک ہی نقطے پر پائی جائیں گی۔ لہٰذا تفاعل Q کے لئے ہم مساوات ۵.۸۰ میں Q کی بجائے $\ln(Q)$ لکھتے ہیں:

$$G \equiv \ln(Q) + \alpha\Big[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n\Big] + \beta\Big[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n\Big] \tag{۵.۸۲}$$

جہاں α اور β لگرانج مضرب (λ_1 اور λ_2) ہیں (اور چوکور قوسین مساوات ۵.۷۸ اور مساوات ۵.۷۹ میں دیے گئے شرط ہیں)۔ α اور β کے لحاظ سے تفرقات کو صفر کے برابر رکھنے سے محض (مساوات ۵.۷۸ اور مساوات ۵.۷۹ میں دی گئی) پابندیاں دوبارہ حاصل ہوتی ہیں؛ یوں N_n کے لحاظ سے تفرق کو صفر کے برابر رکھنا باقی ہے۔

[۶۵] Lagrange multiplier

اگر ذرات قابل ممیز ہوں، تب مساوات ۵.۷۴ ہمیں Q دے گی، لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$
\begin{aligned}
G = \ln(N!) + \sum_{n=1}^{\infty} [N_n \ln(d_n) - \ln(N_n!)] \\
+ \alpha \Big[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n\Big] + \beta \Big[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n\Big]
\end{aligned} \tag{۵.۸۳}
$$

ہم متعلقہ تعداد مکین (N_n) کو بہت بڑا تصور کرتے ہوئے **سٹرلنگ تخمین**:[۶۶]

$$
\ln(z!) \approx z\ln(z) - z \qquad z \ll 1 \tag{۵.۸۴}
$$

بروئے کار لاتے ہوئے[۶۷] درج ذیل لکھتے ہیں۔

$$
\begin{aligned}
G \approx \sum_{n=1}^{\infty} [N_n \ln(d_n) - N_n \ln(N_n) + N_n - \alpha N_n - \beta E_n N_n] \\
+ \ln(N!) + \alpha N + \beta E
\end{aligned} \tag{۵.۸۵}
$$

یوں درج ذیل ہو گا۔

$$
\frac{\partial G}{\partial N_n} = \ln(d_n) - \ln(N_n) - \alpha - \beta E_n \tag{۵.۸۶}
$$

اس کو صفر کے برابر رکھ کر N_n کے لیے حل کرتے ہوئے ہم قابل ممیز ذرات کی سب سے زیادہ محتمل تعداد مکین کی قیمتیں حاصل کرتے ہیں۔

$$
N_n = d_n e^{-(\alpha + \beta E_n)} \tag{۵.۸۷}
$$

اگر ذرات متماثل فرمیان ہوں تب Q کی قیمت مساوات ۵.۷۵ دیگی لہٰذا درج ذیل ہو گا

$$
\begin{aligned}
G = \sum_{n=1}^{\infty} \{\ln(d_n!) - \ln(N_n!) - \ln[(d_n - N_n)!]\} \\
+ \alpha \Big[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n\Big] + \beta \Big[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n\Big]
\end{aligned} \tag{۵.۸۸}
$$

---

[۶۶] Stirling's approximation

[۶۷] سٹرلنگ تسلسل کے مزید اجزاء شامل کرتے ہوئے سٹرلنگ تخمین کو مزید بہتر بنایا جا سکتا ہے، تاہم ہماری ضرورت اولین دو اجزاء لینے سے پوری ہو جاتی ہے۔ اگر حصہ ۵.۴.۱ کی طرح، متعلقہ تعداد مکین بہت زیادہ نہ ہوں، تب شماریاتی میکانیات کارآمد نہیں ہو گی۔ یہاں ہمارا مقصد یہی ہے کہ تعداد اتنی زیادہ ہو کہ شماریاتی پیش گوئی قابل اعتماد ہو۔ یقیناً ایسے یک ذروی حالات ضرور ہوں گے جن کی توانائی انتہائی زیادہ ہو گی اور جو بھرے نہیں ہوں گے؛ ہماری خوش قسمتی ہے کہ سٹرلنگ تخمین $z = 0$ کے لئے بھی کارآمد ہے۔ میں نے لفظ "متعلقہ" استعمال کرتے ہوئے ان غیر مطلوب حالات کو شامل نہیں کیا ہے جو حاشیہ پر رہتے ہوں اور جن کے لئے N_n نہ تو بہت زیادہ ہو اور نہ ہی صفر ہو۔

یہاں ہم N_n کی قیمت بہت بڑی تصور کرنے کے ساتھ ساتھ $N_n \gg d_n$ بھی[۶۸] فرض کرتے ہیں لہٰذا سٹرلنگ تخمین دونوں اجزاء کے لیے قابل استعمال ہو گی۔ ایسی صورت میں

$$G \approx \sum_{n=1}^{\infty} \Big[\ln(d_n!) - N_n \ln(N_n) + N_n - (d_n - N_n)\ln(d_n - N_n) + (d_n - N_n) - \alpha N_n - \beta E_n N_n \Big] + \alpha N + \beta E \tag{۵.۸۹}$$

اور درج ذیل ہو گا۔

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = -\ln(N_n) + \ln(d_n - N_n) - \alpha - \beta E_n \tag{۵.۹۰}$$

اس کو صفر کے برابر رکھتے ہوئے N_n کے لیے حل کر کے ہم متماثل فرمیان کی تعداد ممکنوں کی سب سے زیادہ محتمل تعداد ممکن N_n کی قیمتیں حاصل کرتے ہیں۔

$$N_n = \frac{d_n}{e^{(\alpha + \beta E_n)} + 1} \tag{۵.۹۱}$$

آخر میں اگر ذرات متماثل بوسن ہوں تب Q کی قیمت مساوات ۵.۷۷ دیگی اور درج ذیل ہو گا۔

$$G = \sum_{n=1}^{\infty} \{\ln[(d_n!)] - \ln(N_n!) - \ln[(d_n - N_n)!]\} + \alpha\Big[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n\Big] + \beta\Big[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n\Big] \tag{۵.۹۲}$$

یہاں بھی ہمیشہ کی طرح $1 \ll N_n$ فرض کرتے ہوئے سٹرلنگ تخمین استعمال کرتے ہوئے

$$G \approx \sum_{n=1}^{\infty} \{(N_n + d_n - 1)\ln(N_n + d_n - 1) - (N_n + d_n - 1) - N_n \ln(N_n) + N_n - \ln[(d_n - 1)!] - \alpha N_n - \beta E_n N_n\} + \alpha N + \beta E \tag{۵.۹۳}$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = \ln(N_n + d_n - 1) - \ln(N_n) - \alpha - \beta E_n \tag{۵.۹۴}$$

---

[۶۸] ایک بُعد میں توانائیاں غیر انحطاطی ہوں گی (سوال ۵.۴۵ دیکھیں)، لیکن تین ابعاد میں n بڑھنے سے d_n عموماً بہت تیزی سے بڑھتا ہے (مثلاً، ہائیڈروجن کے لئے $d_n = n^2$ ہے)۔ یوں زیادہ تر بھرے حالات کے لئے $d_n \gg 1$ فرض کرنا غیر معقول نہیں ہو گا۔ اس کے برعکس، مطلق صفر درجہ حرارت کے قریب، d_n کی قیمت کسی صورت بھی N_n سے بہت زیادہ نہیں ہو گی، فرمی سطح تک تمام حالات بھرے ہوں گے لہٰذا $d_n = N_n$ ہو گا۔ یہاں بھی ہمیں یہ حقیقت مدد کرتی ہے کہ سٹرلنگ کلیہ $z = 0$ کے لئے کارآمد ہے۔

اس کو صفر کے برابر رکھ کر N_n کے لئے حل کرتے ہوئے ہم متماثل بوسن کی تعداد مکینوں کی سب سے زیادہ محتمل قیمتیں تلاش کرتے ہیں۔

$$N_n = \frac{d_n - 1}{e^{(\alpha+\beta E_n)} - 1} \tag{۵.۹۵}$$

(فرمیان کے لئے مستعمل تخمین کے ساتھ ثبات کی خاطر شمار کنندہ میں 1 کو نظر انداز کیا جا سکتا ہے؛ میں یہاں سے آگے ایسا ہی کروں گا۔)

سوال ۵.۲۶: ترخیم $(x/a)^2 + (y/b)^2 = 1$ کے اندر سب سے بڑے رقبے کا ایسا مستطیل جس کے اضلاع محور کے متوازی ہوں، لگرانج مضروب کی ترکیب سے تلاش کریں۔ یہ زیادہ سے زیادہ رقبہ کتنا ہو گا؟

سوال ۵.۲۷:

ا. $z = 10$ کے لیے سٹرلنگ تخمین میں فی صد سہو کتنی ہو گی؟

ب. سہو کو ایک فی صد سے کم رکھنے کیلئے عدد صحیح z کی کم سے کم قیمت کیا ہو گی؟

۵.۴.۴ α اور β کی طبعی اہمیت

لگرانج مضروب کی کہانی میں ذرات کی کل تعداد اور کل توانائی سے بالترتیب منسلک مقدار معلوم α اور β پائے گئے۔ ریاضیاتی طور پر تعداد مکین (مساوات ۵.۸۷، مساوات ۵.۹۱، اور مساوات ۵.۹۵) کو واپس مطلق شرائط (مساوات ۵.۷۸ اور مساوات ۵.۷۹) میں پر کرتے ہوئے انہیں تعین کیا جاتا ہے۔ البتہ کسی مخفیہ کے لیے مجموعہ کے حصول کے لئے ہمیں اجازتی توانائیاں (E_n) اور ان کی انحطاط (d_n) کا معلوم ہونا ضروری ہے۔ میں سہ ابعادی لامتناہی چوکور کنویں میں ایک جتنی کمیت کی بہت بڑی تعداد کے باہم غیر متعامل ذرات کی **کامل گیس**[۶۹] کی مثال لیتے ہوئے آپ کو اس ترکیب سے متعارف کرتا ہوں۔ اس سے ہم پر α اور α کی طبعی مفہوم عیاں ہو گی۔

ہم نے حصہ ۵.۳.۱ میں اجازتی توانائیاں (مساوات ۵.۳۹):

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \tag{۵.۹۶}$$

اخذ کیں جہاں درج ذیل تھا۔

$$\boldsymbol{k} = \left(\frac{\pi n_x}{\ell_x}, \frac{\pi n_y}{\ell_y}, \frac{\pi n_z}{\ell_z}\right)$$

پہلے کی طرح، یہاں بھی ہم مجموعہ کو تکمل میں بدلتے ہیں، جہاں $\boldsymbol{k}$ ایک استمراری متغیر ہے، اور جہاں k فضا کے π^3/V حجم میں ایک حال (یا، چکر s کی صورت میں، $2s + 1$ حالات) پائے جاتے ہیں۔ مثمن اول

[۶۹] ideal gas

میں کروی خولوں کو "ٹوکریاں" تصور کرتے ہوئے (شکل ۵.۴ دیکھیں) "انحطاط" (یعنی ہر ٹوکرے میں حالات کی تعداد) درج ذیل ہو گی۔

$$d_k = \frac{1}{8}\,\frac{4\pi k^2\,\mathrm{d}k}{8(\pi^3/V)} = \frac{V}{2\pi^2}k^2\,\mathrm{d}k \tag{۵.۹۷}$$

قابل ممیز ذرات (مساوات ۵.۸۷) کیلئے پہلی عائد پابندی (مساوات ۵.۷۸) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$N = \frac{V}{2\pi^2}e^{-\alpha}\int_0^\infty e^{-\beta\hbar^2k^2/2m}k^2\,\mathrm{d}k = Ve^{-\alpha}\Big(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\Big)^{3/2}$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$e^{-\alpha} = \frac{N}{V}\Big(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m}\Big)^{3/2} \tag{۵.۹۸}$$

دوسری عائد شرط (مساوات ۵.۷۹) درج ذیل کہتی ہے

$$E = \frac{V}{2\pi^2}e^{-\alpha}\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty e^{-\beta\hbar^2k^2/2m}k^4\,\mathrm{d}k = \frac{3V}{2\beta}e^{-\alpha}\Big(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\Big)^{3/2}$$

جس میں مساوات ۵.۹۸ سے $e^{-\alpha}$ پر کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$E = \frac{3N}{2\beta} \tag{۵.۹۹}$$

(اگر آپ مساوات ۵.۹۷ میں چکری جزو ضربی، $2s + 1$، شامل کرتے تو وہ یہاں پہنچ کر حذف ہو جاتا ہے، لہٰذا مساوات ۵.۹۹ تمام چکر کے لیے درست ہو گی۔)

یہ نتیجہ (مساوات ۵.۹۹) ہمیں درجہ حرارت T پر ایک جوہر کی اوسط حرکی توانائی کے کلاسیکی کلیہ:

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{2}k_BT \tag{۵.۱۰۰}$$

کی یاد دلاتی ہے، جہاں k_B بولٹزمن مستقل ہے۔ یہ ہمیں β اور حرارت کے درمیان درج ذیل تعلق پر آمادہ کرتا ہے۔

$$\beta = \frac{1}{k_BT} \tag{۵.۱۰۱}$$

یہ ثابت کرنے کے لیے کہ یہ تعلق صرف تین ابعادی لامتناہی چوکور کنویں میں موجود ممیز ذرات کے لئے نہیں بلکہ عمومی نتیجہ ہے ہمیں دکھانا ہو گا کہ، مختلف اشیاء کے لئے، جو ایک دوسرے کے ساتھ حراری توازن میں ہوں، β کی قیمت ایک جیسی ہے۔ یہ دلیل کئی کتابوں میں پیش کی گئی ہے، جس کو میں یہاں پیش نہیں کروں گا؛ بلکہ میں مساوات ۵.۱۰۱ کو T کی تعریف مان لیتا ہوں۔

روایتی طور پر α (جو مساوات ۵.۹۸ کی خصوصی صورت سے ظاہر ہے کہ T کا تفاعل ہے) کی جگہ **کیمیاوی مخفیہ**[۷۰]:

$$\mu(T) \equiv -\alpha k_B T \tag{۵.۱۰۲}$$

استعمال کر کے مساوات ۵.۸۷، مساوات ۵.۹۱، اور مساوات ۵.۹۵ کو دوبارہ یوں لکھا جاتا ہے کہ یہ توانائی ϵ کے کسی ایک مخصوص (یک ذروی) حال میں ذرات کی سب سے زیادہ محتمل عدد دے (کسی ایک توانائی کے حامل ذرات کی تعداد سے اس توانائی کے حامل کسی مخصوص حال میں ذرات کی تعداد حاصل کرنے کے خاطر صرف اس حال کے انحطاط سے تقسیم کرنا ہو گا)۔

$$n(\epsilon) = \begin{cases} e^{-(\epsilon-\mu)/k_B T} & \text{میکسویل و بولٹزمن} \\ \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T}+1} & \text{فرمی و ڈیراک} \\ \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T}-1} & \text{بوس و آئنشٹائن} \end{cases} \tag{۵.۱۰۳}$$

قابل ممیز ذرات پر **میکسویل و بولٹزمن تقسیم**[۷۱]، متماثل فرمیان پر **فرمی و ڈیراک تقسیم**[۷۲] اور متماثل بوسن پر **بوس و آئنشٹائن تقسیم**[۷۳] کا اطلاق ہو گا۔

فرمی و ڈیراک تقسیم $T \to 0$ کے لئے خصوصی طور پر سادہ رویہ رکھتی ہے:

$$e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} \to \begin{cases} 0, & \epsilon < \mu(0) \\ \infty, & \epsilon > \mu(0) \end{cases}$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$n(\epsilon) \to \begin{cases} 1, & \epsilon < \mu(0) \\ 0, & \epsilon > \mu(0) \end{cases} \tag{۵.۱۰۴}$$

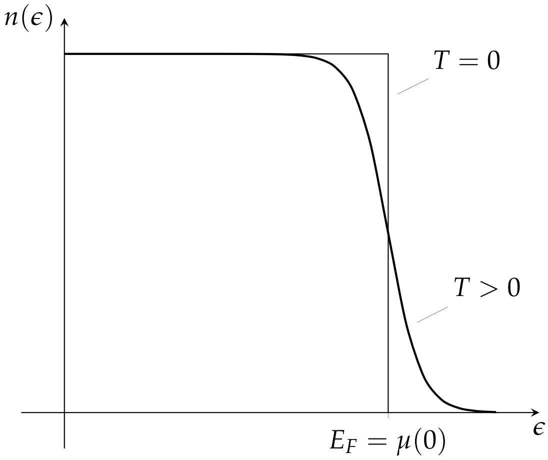
توانائی $\mu(0)$ تک تمام حالات بھرے ہوں گے جبکہ اس سے زیادہ توانائی کے تمام حالات خالی ہوں گے (شکل ۵.۸)۔ ظاہر ہے کہ مطلق صفر حرارت پر کیمیاوی مخفیہ عین فرمی توانائی ہو گی۔

$$\mu(0) = E_F \tag{۵.۱۰۵}$$

درجہ حرارت بڑھنے سے بھرے حالات اور خالی حالات کے بیچ غیر استمراری سرحد کو فرمی ڈیراک تقسیم استمراری بناتا ہے، جو شکل ۵.۸ میں دائری منحنی سے ظاہر ہے۔

---

[۷۰] chemical potential
[۷۱] Maxwell–Boltzmann distribution
[۷۲] Fermi–Dirac distribution
[۷۳] Bose–Einstein distribution



شکل ۵.۸: فرمی و ڈیراک تقسیم برائے $T=0$ اور صفر سے کچھ زیادہ T کے لئے۔

ہم قابل ممیز ذرات کی کامل گیس کی مثال پر دوبارہ لوٹتے ہیں جہاں ہم نے دیکھا کہ حرارت T پر کل توانائی (مساوات ۵.۹۹) درج ذیل ہو گی

$$E=\frac{3}{2}Nk_BT \tag{۵.۱۰۶}$$

جبکہ (مساوات ۵.۹۸ کے تحت) کیمیاوی مخفیہ درج ذیل ہو گا۔

$$\mu(T)=k_BT\Big[\ln\Big(\frac{N}{V}\Big)+\frac{3}{2}\ln\Big(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_BT}\Big)\Big] \tag{۵.۱۰۷}$$

میں مساوات ۵.۸۷ کی بجائے مساوات ۵.۹۱ اور مساوات ۵.۹۵ استعمال کرتے ہوئے متماثل فرمیان اور متماثل بوسن کے کامل گیس کے لئے مطابقتی کلیات حاصل کرنا چاہوں گا۔ پہلی عائد پابندی (مساوات ۵.۷۸) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$N=\frac{V}{2\pi^2}\int_0^\infty\frac{k^2}{e^{[(h^2k^2/2m)-\mu]/k_BT}\pm1}\,\mathrm{d}k \tag{۵.۱۰۸}$$

جہاں مثبت علامت فرمیان کو اور منفی علامت بوسن کو ظاہر کرتی ہے دوسری عائد پابندی (مساوات ۵.۷۹) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$E=\frac{V}{2\pi^2}\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty\frac{k^4}{e^{[(h^2k^2/2m)-\mu]/k_BT}\pm1}\,\mathrm{d}k \tag{۵.۱۰۹}$$

ان میں سے پہلی $\mu(T)$ اور دوسری $E(T)$ تعین کرتی ہے (موخر الذکر سے، مثلاً، ہم مخصوص حراری استعداد $C = \partial E/\partial T$ حاصل کرتے ہیں)۔ بدقسمتی سے ان تکملات کو بنیادی تفاعلات کی صورت میں حل کرنا ممکن نہیں ہے اور میں انہیں آپ کے لئے غور کرنے کے لئے چھوڑتا ہوں (سوال ۵.۲۸ اور سوال ۵.۲۹ دیکھیں)۔

سوال ۵.۲۸: مطلق صفر درجہ حرارت پر متماثل فرمیان کے لیے ان تکملات (مساوات ۵.۱۰۸ اور مساوات ۵.۱۰۹) کی قیمتیں حاصل کریں۔ اپنے نتائج کا موازنہ مساوات ۵.۴۳ اور مساوات ۵.۴۵ کے ساتھ کریں۔ (دھیان رہے کہ مساوات ۵.۱۰۸ اور مساوات ۵.۱۰۹ میں الیکٹرانوں کے لیے 2 کا اضافی جزو ضربی پایا جاتا ہے جو چکری انحطاط کو ظاہر کرتا ہے۔)

سوال ۵.۲۹:

ا. بوسن کے لیے دکھائیں کے کیمیاوی مخفیہ ہر صورت میں کم سے کم اجازتی توانائی سے کم ہوگا۔ اشارہ: $n(\epsilon)$ منفی نہیں ہو سکتا ہے۔

ب. بالخصوص تمام T کے لیے، کامل بوس گیس کے لیے $\mu(T) < 0$ ہوگا۔ ایسی صورت میں N اور V کو مستقل تصور کرتے ہوئے دکھائیں کے T کم کرنے سے $\mu(T)$ یکسر بڑھے گا۔ اشارہ: منفی علامت لیتے ہوئے مساوات ۵.۱۰۸ پر غور کریں۔

ج. حرارت T کم کرتے ہوئے اس وقت ایک بحران (جسے **بوس انجماد**[۷۴] کہتے ہیں) پیدا ہوتا ہے جب $\mu(T)$ صفر کو پہنچتا ہے۔ تکمل کی قیمت، $\mu = 0$ کے لیے، حاصل کرتے ہوئے اس فاصل حرارت کا کلیہ اخذ کریں جس پر ایسا ہوگا۔ اس فاصل حرارت سے نیچے ذرات زمینی حال میں جمع ہو جائیں گے لہٰذا غیر مسلسل مجموعے (مساوات ۵.۷۸) کی جگہ استمراری تکمل (مساوات ۵.۱۰۸) کا استعمال بے معنی ہو جائے گا۔ اشارہ:

$$\int_0^\infty \frac{x^{s-1}}{e^x - 1}\,\mathrm{d}x = \Gamma(s)\zeta(s) \tag{۵.۱۱۰}$$

جہاں Γ کو یولر کا **گیما تفاعل**[۷۵] اور ζ کو **ریمان زیٹا تفاعل**[۷۶] کہتے ہیں۔ ان کی موزوں اعدادی قیمتیں جدول سے دیکھیں۔

د. ہیلیم $^4\mathrm{He}$ کی حرارت فاصل تلاش کریں۔ اس درج حرارت پر اس کی کثافت $0.15\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$ ہوگی۔ تبصرہ: ہیلیم کی تجرباتی حاصل حرارت فاصل کی قیمت $2.17\,\mathrm{K}$ ہے۔

۵.۴.۵ سیاہ جسمی طیف

نوریہ (برقناطیسی میدان کے کوانٹا) چکر 1 کے متماثل بوسن ہیں، تاہم یہ بے کمیت ذرات لہٰذا خلقی طور پر اضافیتی ہیں۔ ہم درج ذیل چار دعوے، جو غیر اضافیتی کوانٹائی میکانیات کا حصہ نہیں ہیں، قبول کر کے انہیں یہاں شامل کر سکتے ہیں۔

---

[۷۴] Bose condensation
[۷۵] gamma function
[۷۶] Riemann zeta function

۱. نوریے کی تعدد اور توانائی کا تعلق کلیہ پلانک $E = h\nu = \hbar\omega$ دیتا ہے۔

۲. عدد موج k اور تعدد کا تعلق $k = 2\pi/\lambda = \omega/c$ ہے جہاں c روشنی کی رفتار ہے۔

۳. صرف دو چکری حالات ہو سکتے ہیں (کوانٹائی عدد m کی قیمت $+1$ یا -1 ہو سکتی ہے، تاہم یہ 0 نہیں ہو سکتی۔

۴. نوریوں کی تعداد بقائی مقدار نہیں ہے؛ درجہ حرارت بڑھانے سے (فی اکائی حجم) نوریوں کی تعداد بڑھتی ہے۔

جزو 4 کی موجودگی میں، پہلی عائد پابندی (مساوات ۵.۷۸) کا اطلاق نہیں ہوگا۔ ہم مساوات ۵.۸۲ اور اس کے بعد آنے والی مساواتوں میں $\alpha \to 0$ لے کر اس شرط کو ختم کر سکتے ہیں۔ یوں نوریے کے لیے سب سے زیادہ محتمل تعداد مکین (مساوات ۵.۹۵) درج ذیل ہوگی۔

$$N_\omega = \frac{d_k}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \tag{۵.۱۱۱}$$

ایک ڈبہ جس کا حجم V ہو، میں آزاد نوریوں کے لیے d_k کی قیمت، مساوات ۵.۹۷ کو[۷۷] چکر (جزو 3) کی بنا پر 2 سے ضرب دے کر حاصل ہوگی، جس کو k (جزو 2) کی بجائے ω کی صورت میں لکھتے ہیں۔

$$d_k = \frac{V}{\pi^2 c^3}\omega^3 \,\mathrm{d}\omega \tag{۵.۱۱۲}$$

یوں تعددی سعت $\mathrm{d}\omega$ میں کثافت توانائی $N_\omega \hbar\omega/V$ کی قیمت $\rho(\omega)\,\mathrm{d}\omega$ ہوگی جہاں $\rho\omega$ درج ذیل ہے۔

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)} \tag{۵.۱۱۳}$$

یہ **سیاہ جسمی طیف**[۷۸] کے لئے پلانک کا مشہور کلیہ ہے جو برقناطیسی میدان کی، حرارت T پر توازن کی صورت میں، فی اکائی حجم فی اکائی تعدد، توانائی دیتا ہے۔ اس کو تین مختلف حرارتوں پر شکل ۵.۹ میں ترسیم کیا گیا ہے۔

سوال ۵.۳۰:

ا. مساوات ۵.۱۱۳ استعمال کرتے ہوئے طول موج کی سعت $\mathrm{d}\lambda$ میں کثافت توانائی تعین کریں۔ اشارہ: $\rho(\omega)\,\mathrm{d}\omega = \bar{\rho}(\lambda)\,\mathrm{d}\lambda$ لے کر $\bar{\rho}(\lambda)$ کے لیے حل کریں۔

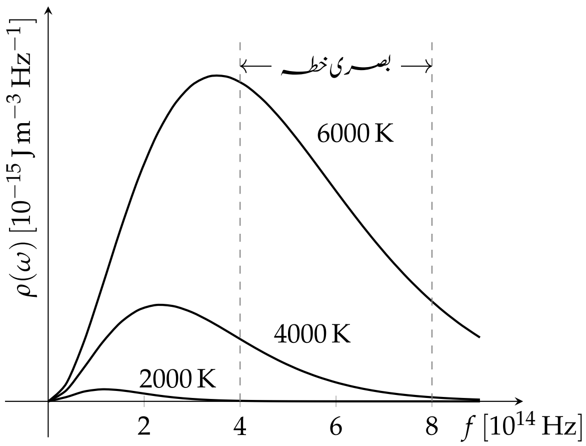
ب. اس طول موج کے لئے، جس پر سیاہ جسمی کثافت توانائی زیادہ سے زیادہ ہو، **وائن قانون ہٹاؤ**:[۷۹]

$$\lambda_{\text{بلند تر}} = \frac{2.90 \times 10^{-3}\,\mathrm{mK}}{T} \tag{۵.۱۱۴}$$

[۷۷] درحقیقت ہمیں اس کلیہ سے کچھ لینا دینا نہیں چونکہ یہ (غیر اضافیتی) مساوات شروڈنگر سے حاصل ہوا؛ خوش قسمتی سے اضافیتی صورت میں بھی انحطاط ٹھیک یہی ہے۔

[۷۸] blackbody spectrum

[۷۹] Wien displacement law



شکل ۵.۹: سیاہ جسمی اخراج کے لئے کلیہ پلانک، مساوات ۵.۱۱۳۔

اخذ کریں۔ اشارہ: آپ کو کیلکولیٹر یا کمپیوٹر کی استعمال سے مساوات $5e^{-x} = (5 - x)$ حل کر تین بامعنی ہندسوں تک اعدادی جواب حاصل کرنا ہو گا۔

سوال ۵.۳۱: سیاہ جسمی اخراج میں کل کثافت توانائی کا **سٹیفن وبولٹزمن کلیہ**:[۸۰]

$$\frac{E}{V} = \left(\frac{\pi^2 k_B^4}{15\hbar^3 c^3}\right) T^4 = (7.57 \times 10^{-16}\,\mathrm{Jm^{-3}K^{-4}}) T^4 \tag{۵.۱۱۵}$$

اخذ کریں۔ اشارہ: مساوات ۵.۱۱۰ استعمال کرتے ہوئے تکمل کی قیمت تلاش کریں۔ یاد رہے کہ $\zeta(4) = \pi^4/90$ ہو گا۔

اضافی سوالات برائے باب ۵

سوال ۵.۳۲: فرض کریں یک بُعدی ہارمونی ارتعاشی مخفیہ (مساوات ۲.۴۳) میں کمیت m کے دو غیر متعامل ذرات پائے جاتے ہیں۔ فرض کریں ان میں سے ایک زمینی حال اور دوسرا پہلے ہیجان حال میں پایا جاتا ہے۔ درج ذیل صورتوں میں $\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle$ کا حساب کریں۔ (الف) ذرات قابل ممیز ہیں، (ب) یہ متماثل بوسن ہیں، (ج) یہ متماثل فرمیان ہیں۔ چکر کو نظر انداز کریں (اگر آپ ایسا نہیں کرنا چاہتے تو دونوں کو ایک ہی چکری حال میں تصور کریں)۔

سوال ۵.۳۳: فرض کریں آپ کے پاس تین ذرات اور تین منفرد یک ذروی حالات ($\psi_a(x)$ ، $\psi_b(x)$ ، اور $\psi_c(x)$) دستیاب ہیں۔ درج ذیل صورتوں میں کتنے (مختلف) تین ذروی حالات تیار کیے جا سکتے ہیں؟ (الف)

---

[۸۰] Stefan-Boltzmann formula

ذرات قابل ممیز ہیں، (ب) یہ متماثل بوسن ہیں، (ج) یہ متماثل فرمیان ہیں۔ (ضروری نہیں کہ ذرات مختلف حالات میں ہوں؛ قابل ممیز ذرات کی صورت میں $\psi_a(x_1)\psi_a(x_2)\psi_a(x_3)$ ایک ممکن صورت ہو سکتا ہے۔)

سوال ۵.۳۴: دو ابعادی لامتناہی چوکور کنویں میں غیر متعامل الیکٹرانوں کی فرمی توانائی کا حساب کریں۔ فی اکائی رقبہ آزاد الیکٹرانوں کی تعداد σ لیں۔

سوال ۵.۳۵: ایک مخصوص قسم کے سرد ستارے (جنہیں **سفید بونا**[81] کہتے ہیں) کو تجاذبی انہدام سے الیکٹرانوں کی انحطاطی دباو (مساوات ۵.۴۶) روکتا ہے۔ مستقل کثافت فرض کرتے ہوئے، ایسے جسم کا رداس R درج ذیل طریقہ سے دریافت کیا جا سکتا ہے۔

ا. کل الیکٹران توانائی (مساوات ۵.۴۵) کو رداس، مرکزویہ (پروٹان جمع نیوٹران) کی تعداد N، فی مرکزویہ الیکٹران کی تعداد q، اور الیکٹران کی کمیت m کی صورت میں لکھیں۔

ب. یکساں کثافت کے کرہ کی تجاذبی توانائی تلاش کریں۔ اپنے جواب کو (عالمگیر تجاذبی مستقل) G، R، N، اور (ایک مرکزویہ کی کمیت) M کی صورت میں لکھیں۔ یاد رہے کہ تجاذبی توانائی منفی ہے۔

ج. وہ رداس معلوم کریں جس پر جزو-الف اور جزو-ب کی مجموعی توانائی کم سے کم ہو۔ جواب:

$$R = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3}\frac{\hbar^2 q^{5/3}}{GmM^2N^{1/3}}$$

(کل کمیت بڑھنے سے رداس گھٹتا ہے!) ماسوائے N کے، تمام مستقلات کی قیمتیں پر کریں اور $q = 1/2$ لیں (حقیقت میں، جوہری عدد بڑھنے سے q کی قیمت معمولی کم ہوتی ہے، لیکن ہمارے مقاصد کے لئے یہ کافی ٹھیک ہے)۔ جواب: $R = 7.6\times10^{25}N^{-1/3}$

د. سورج کے برابر کمیت کے سفید بونا کا رداس، کلومیٹروں میں، دریافت کریں۔

ھ. الیکٹران کی ساکن توانائی کے ساتھ، جزو-د میں سفید بونا کی فرمی توانائی (الیکٹران وولٹ میں تعین کرتے ہوئے) کا موازنہ کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ یہ نظام اضافیت کے بہت قریب ہے (سوال ۵.۳۶ دیکھیں)۔

سوال ۵.۳۶: ہم کلاسیکی حرکی توانائی $E = p^2/2m$ میں اضافیتی کلیہ $E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} - m_0^2c^2$ پر کرتے ہوئے آزاد الیکٹران گیس نظریہ (حصہ ۵.۳.۱) کو اضافیتی دائرہ کار تک وسعت دے سکتے ہیں۔ معیار حرکت اور سمتیہ موج کا تعلق ہمیشہ کی طرح $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$ ہوگا۔ بالخصوص انتہائی اضافیتی حد میں $E \approx pc = \hbar ck$ ہوگا۔

ا. مساوات ۵.۴۴ میں $\hbar^2k^2/2m$ کی جگہ بالائے اضافیتی فقرہ، $\hbar ck$، پر کر کے $E_{کل}$ حاصل کریں۔

ب. بالائے اضافیتی الیکٹران گیس کی صورت میں سوال ۵.۳۵ کے جزو-الف اور جزو-ب کو دوبارہ حل کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ، R سے قطع نظر، کوئی مستحکم کم سے کم قیمت نہیں پائی جاتی؛ اگر کل توانائی مثبت ہو تب انحطاطی

[81] white dwarf

قوتیں تجاذبی قوتوں سے تجاوز کرتی ہیں، جس کی بنا پر ستارہ پھولے گا، اس کے برعکس اگر کل توانائی منفی ہو تب تجاذبی قوتیں جیتی ہیں، جس کی بنا پر ستارہ منہدم ہو گا۔ مرکزویہ کی وہ فاصل تعداد، N_c، معلوم کریں جس کے لیے $N > N_c$ پر تجاذبی انہدام واقع ہو گا۔ اس کو **چندر شیکھر حد**[۸۲] کہتے ہیں۔ جواب: 2.4×10^{57}۔ مطابقتی ستارہ کی کمیت کیا ہو گی (اپنے جواب کو سورج کی کمیت کے مضرب کے صورت میں لکھیں)۔ اس سے بھاری ستارے سفید بونا نہیں بنتے، بلکہ مزید منہدم ہو کر (اگر حالات درست ہوں) **نیوٹران ستارے**[۸۳] بنتے ہیں۔

ج. انتہائی زیادہ کثافت پر، **مخالف بیٹا تحلیل**[۸۴]، $e^- + p^+ \rightarrow n + v$، تقریباً تمام پروٹان اور الیکٹران کو نیوٹران میں بدلتا ہے (جس کی بنا پر نیوٹرینو خارج ہوتے ہیں جو ساتھ توانائی لے کر جاتے ہیں)۔ آخر کار نیوٹران انحطاطی دباو انہدام کو روکتا ہے، جیسا کہ سفید بونا میں الیکٹران انحطاطی قوتیں کرتی ہیں (سوال ۵.۳۵ دیکھیں)۔ سورج کے برابر کمیت کے نیوٹران ستارہ کا رداس تلاش کریں۔ ساتھ ہی (نیوٹران) فرمی توانائی کا حساب کر کے، اس کا ساکن نیوٹران کی توانائی کے ساتھ موازنہ کریں۔ کیا نیوٹران ستارہ کو غیر اضافیتی تصور کیا جا سکتا ہے؟

سوال ۵.۳۷:

ا. تین ابعادی ہارمونی ارتعاشی مخفیہ (سوال ۴.۳۸) میں قابل ممیز ذرات کا کیمیاوی مخفیہ اور کل توانائی تلاش کریں۔ اشارہ: یہاں مساوات ۵.۷۸ اور مساوات ۵.۷۹ میں دیے گئے مجموعوں کی قیمتیں ٹھیک ٹھیک حاصل کی جا سکتی ہیں؛ ہمیں لامتناہی چوکور کنویں کی مثال میں تکمل کی تخمینی قیمت پر ہمیں گزارہ کرنا پڑا تھا؛ یہاں ایسا کرنے کی ضرورت نہیں۔ **ہندسی تسلسل**[۸۵]

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \tag{۵.۱۱۶}$$

کا تفرق لینے سے

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{x}{1-x}\right) = \sum_{n=1}^{\infty}(n+1)x^n$$

حاصل ہو گا۔ اسی طرح بلند تفرقات حاصل کیے جا سکتے ہیں۔ جواب:

$$E = \frac{3}{2}N\hbar\omega\left(\frac{1+e^{-\hbar\omega/k_BT}}{1-e^{-\hbar\omega/k_BT}}\right) \tag{۵.۱۱۷}$$

ب. تحدیدی حد $k_BT \ll \hbar\omega$ پر تبصرہ کریں۔

---

[۸۲] Chandrasekhar limit
[۸۳] neutron star
[۸۴] inverse beta decay
[۸۵] geometric series

ج. **مسئلہ مساوی خانہ بندی**[86] کی روشنی میں کلاسیکی حد $\hbar\omega \ll k_B T$ پر تبصرہ کریں۔ تین ابعادی ہارمونی مرتعش میں ایک ذرے کے **درجات آزادی**[87] کتنے ہوں گے؟

[86] equipartition theorem
[87] degrees of freedom

جوابات

فرهنگ