

کوانٹائی میکانیات

ایک تعارف

خالد حسان یوسفزئی

جامعہ کامیٹ، اسلام آباد

khalidyou safzai@comsats.edu.pk

عنوان

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

ix

۱	تفاسل موج	۱
۱	۱.۱ مساوات شروع و نگر	۱
۲	۱.۲ شماراتی مفہوم	۲
۵	۱.۳ احتمال	۵
۵	۱.۳.۱ غیر مسلسل متغیرات	۵
۹	۱.۳.۲ استمراری متغیرات	۹
۱۲	۱.۴ معمول زنی	۱۲
۱۵	۱.۵ معیار حرکت	۱۵
۱۸	۱.۶ اصول عدم یقینیت	۱۸
۲۵	۲ غیر متنازع وقت مساوات شروع و نگر	۲۵
۲۵	۲.۱ ساکن حالات	۲۵
۳۱	۲.۲ لامتناہی چوکور کٹواں	۳۱
۴۲	۲.۳ ہارمونی سر تقش	۴۲
۴۴	۲.۳.۱ الجبرائی ترکیب	۴۴
۵۳	۲.۳.۲ تحلیلی ترکیب	۵۳
۶۰	۲.۴ آزاد ذرہ	۶۰
۷۰	۲.۵ ڈیلٹا تفاسل محفہ	۷۰
۷۰	۲.۵.۱ مقید حالات اور بکھراؤ حالات	۷۰
۷۲	۲.۵.۲ ڈیلٹا تفاسل کٹواں	۷۲
۸۱	۲.۶ مستناہی چوکور کٹواں	۸۱
۹۷	۳ قواعد و ضوابط	۹۷
۹۷	۳.۱ ہسٹ فضا	۹۷
۱۰۱	۳.۲ قابل مشاہدہ	۱۰۱
۱۰۱	۳.۲.۱ ہر مشی عاملین	۱۰۱

۱۰۳	تعیین حال	۳.۲.۲
۱۰۵	ہر مثنیٰ عمل کے امتیازی تفاسل	۳.۳
۱۰۶	غیر مسلسل طیف	۳.۳.۱
۱۰۸	استمراری طیف	۳.۳.۲
۱۱۱	مستعمل شماریاتی مفہوم	۳.۴
۱۱۵	اصول عدم یقینیت	۳.۵
۱۱۵	اصول عدم یقینیت کا ثبوت	۳.۵.۱
۱۱۸	کم سے کم عدم یقینیت کا مجموعی اکتھ	۳.۵.۲
۱۱۹	توانائی و وقت اصول عدم یقینیت	۳.۵.۳
۱۲۳	ڈیراک علاقیت	۳.۶
۱۳۷	تین البادی کوانٹائی میکانیات	۴
۱۳۷	کروی محدود میں مساوات شروع و نگر	۴.۱
۱۳۹	علیحدگی متغیرات	۴.۱.۱
۱۴۱	زاویائی مساوات	۴.۱.۲
۱۴۶	ردای مساوات	۴.۱.۳
۱۵۰	ہائیڈروجن جوہر	۴.۲
۱۵۱	ردای تفاسل موج	۴.۲.۱
۱۶۱	ہائیڈروجن کا طیف	۴.۲.۲
۱۶۴	زاویائی معیار حرکت	۴.۳
۱۶۴	امتیازی اقتدار	۴.۳.۱
۱۷۰	امتیازی تفاسلات	۴.۳.۲
۱۷۳	چکر	۴.۴
۱۸۱	مقناطیسی میدان میں ایک الیکٹران	۴.۴.۱
۱۸۷	زاویائی معیار حرکت کا مجموعہ	۴.۴.۲
۲۰۵	متنائل ذرات	۵
۲۰۵	دو ذروی نظام	۵.۱
۲۰۷	بوسن اور فرمیان	۵.۱.۱
۲۱۱	قوت مبادلہ	۵.۱.۲
۲۱۵	جوہر	۵.۲
۲۱۶	ہیلیم	۵.۲.۱
۲۱۹	دوری جدول	۵.۲.۲
۲۲۳	ٹھوس اجسام	۵.۳
۲۲۳	آزاد الیکٹران گیس	۵.۳.۱
۲۲۹	پٹی دار ساخت	۵.۳.۲
۲۳۶	کوانٹائی شماریاتی میکانیات	۵.۴
۲۳۶	ایک مثال	۵.۴.۱
۲۳۹	عمومی صورت	۵.۴.۲

۲۴۲	سب سے زیادہ محتمل تشکیل	۵.۴.۳
۲۴۵	α اور β کی طبیعی اہمیت	۵.۴.۴
۲۴۹	سیاہ جسی طیف	۵.۴.۵
۲۵۵	غیر تابع وقت نظریہ اضطراب	۶
۲۵۵	غیر انخطاطی نظریہ اضطراب	۶.۱
۲۵۵	عمومی ضابطہ بندی	۶.۱.۱
۲۵۷	اول رتی نظریہ	۶.۱.۲
۲۶۱	دوم رتی توانائیاں	۶.۱.۳
۲۶۲	انخطاطی نظریہ اضطراب	۶.۲
۲۶۲	دوپڑتا انخطاط	۶.۲.۱
۲۶۷	بلند رتی انخطاط	۶.۲.۲
۲۷۲	ہائیڈروجن کا مہین ساخت	۶.۳
۲۷۳	اضافیتی تصحیح	۶.۳.۱
۲۷۶	چکر و مدار ربط	۶.۳.۲
۲۸۳	زیمان اثر	۶.۴
۲۸۳	کمزور میدان زیمان اثر	۶.۴.۱
۲۸۵	طاقتور میدان زیمان اثر	۶.۴.۲
۲۸۷	درمیانہ میدان زیمان اثر	۶.۴.۳
۲۸۹	نہایت مہین ہوا را	۶.۴.۴
۲۹۹	تغیری اصول	۷
۲۹۹	نظریہ	۷.۱
۳۰۵	ہیلمی کا زمینی حال	۷.۲
۳۱۰	ہائیڈروجن سال باردار	۷.۳
۳۲۱	ونزل و کرامرز و برلوان تخمین	۸
۳۲۲	کلاسیکی خطہ	۸.۱
۳۲۷	سرنگرنی	۸.۲
۳۳۰	کلیات پیوند	۸.۳
۳۴۳	تابع وقت نظریہ اضطراب	۹
۳۴۳	دو سطحی نظام	۹.۱
۳۴۴	مضطرب نظام	۹.۱.۱
۳۴۷	تابع وقت نظریہ اضطراب	۹.۱.۲
۳۴۹	سائنس اضطراب	۹.۱.۳
۳۵۲	اشعاعی احسراج اور انجذاب	۹.۲
۳۵۲	برقن طیلی امواج	۹.۲.۱
۳۵۳	انجذاب، تحرق شدہ احسراج اور خود بخود احسراج	۹.۲.۲
۳۵۴	غیر اتقاقی اضطراب	۹.۲.۳

۳۵۶	خود با خود احسراج	۹.۳
۳۵۶	آمنشائن A اور B عددی سر	۹.۳.۱
۳۵۸	ہیجان حال کا عرصہ حیات	۹.۳.۲
۳۶۱	قواعد انتخاب	۹.۳.۳
۳۷۱	حرارت ناگزیر تخمین	۱۰
۳۷۱	مسئلہ حرارت ناگزیر	۱۰.۱
۳۷۱	حرارت ناگزیر عمل	۱۰.۱.۱
۳۷۴	مسئلہ حرارت ناگزیر کا ثبوت	۱۰.۱.۲
۳۷۹	ہیت بیری	۱۰.۲
۳۷۹	گرگی عمل	۱۰.۲.۱
۳۸۱	ہندی ہیت	۱۰.۲.۲
۳۸۶	اہارو نوو یو ہم اثر	۱۰.۲.۳
۳۹۵	بکھراؤ	۱۱
۳۹۵	تعارف	۱۱.۱
۳۹۵	کلاسیکی نظریہ بکھراؤ	۱۱.۱.۱
۳۹۹	کوانٹائی نظریہ بکھراؤ	۱۱.۱.۲
۴۰۰	جبروی موج تجزیہ	۱۱.۲
۴۰۰	اصول و ضوابط	۱۱.۲.۱
۴۰۳	الایا عمل	۱۱.۲.۲
۴۰۶	میتقلات حیط	۱۱.۳
۴۰۹	بارن تخمین	۱۱.۴
۴۰۹	مساوات شرودنگر کی عملی روپ	۱۱.۴.۱
۴۱۳	بارن تخمین اول	۱۱.۴.۲
۴۱۷	تسل بارن	۱۱.۴.۳
۴۲۱	پس نوشت	۱۲
۴۲۲	آمنشائن پوڈ لکیو روزن تضاد	۱۲.۱
۴۲۳	مسئلہ بل	۱۲.۲
۴۲۸	مسئلہ کلیہ	۱۲.۳
۴۲۹	شرودنگر کی ملی	۱۲.۴
۴۳۰	کوانٹائی زینو تضاد	۱۲.۵
۴۳۳	جوابات	
۴۳۵	خطی الجبرا	۱
۴۳۵	سمتیات	۱.۱
۴۳۵	اندرونی ضرب	۲.۱
۴۳۶	قتالب	۳.۱

۴۳۶	تبدیلی اساس	۴.۱
۴۳۶	امتیازی تفاعلات اور امتیازی اقتدار	۵.۱
۴۳۶	هر مشی تبادلے	۶.۱

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

گزشتہ چند برسوں سے حکومت 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 طلب و طالبات استفادہ کرتے ہیں۔

ہمارے ملک میں طلب 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 طلب و طالبات ذہین ہونے کے باوجود آگے بڑھنے اور قوم و ملک کی بھرپور خدمت کرنے کے قابل نہیں رہتے۔ ایسے طلب 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 طلب 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 چٹائی کے وقت اس بات کا دہان رکھا گیا کہ ان کا استعمال دیگر مضامین میں بھی ممکن ہو۔

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

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

اس کتاب کے پڑھنے والوں سے گزارش کی جاتی ہے کہ اسے زیادہ سے زیادہ طلب و مطالبات 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 سرزد ہوئی ہیں البتہ انہیں درست کرنے میں بہت لوگوں کا ہاتھ ہے۔ میں ان سب کا شکریہ ادا کرتا ہوں۔ یہ سلسلہ ابھی جاری ہے اور مکمل ہونے پر ان حضرات کے تاثرات یہاں شامل کئے جائیں گے۔

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

حنالد حنان یوسفزئی

28 اکتوبر 2011ء

باب ۷

تغیری اصول

۷.۱ نظریہ

فرض کریں آپ ایک نظام، جسے ہیملٹنی H بیان کرتی ہو، کی زمینی حال توانائی E_{gs} کا حساب کرنا چاہتے ہیں لیکن آپ (غیر تابع وقت) مساوات شروڈنگر حل نہیں کر پاتے۔ اصول تغیرتے آپ کو E_{gs} کی بالائی حد بندی دیتا ہے، اور بعض اوقات آپ کو صرف اسی سے عرض ہوگا، اور عموماً، ہوشیاری سے کام لیتے ہوئے آپ بالکل ٹھیک قیمت کے متریب قیمت حاصل کر سکیں گے۔ آئیں اس کا استعمال دیکھیں: کوئی ایک معمول شدہ تفاعل ψ لیں۔ میں درج ذیل دعویٰ کرتا ہوں:

$$(۷.۱) \quad E_{gs} \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \equiv \langle H \rangle$$

یعنی کسی بھی (مکمل طور پر غلط) حال ψ میں H کی توقعاتی قیمت کی تخمین، زمینی حال توانائی سے زیادہ ہوگی۔ یقیناً، اگر ψ اتفاقیہ جان حالات میں سے ایک ہو، تب $\langle H \rangle$ کی قیمت E_{gs} سے تجاوز کرے گی؛ (جبانے والا) اصل نقطہ یہ ہے کہ کسی بھی تفاعل ψ کے لیے یہ درست ہوگا۔

ثبوت: چونکہ H کے (نامعلوم) امتیازی تفاعلات مکمل سلسلہ دیتے ہیں، لہذا ہم ψ کو ان کا خطی جوڑ:

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad \text{جہاں} \quad \psi = \sum_n c_n \psi_n$$

ہے لکھ سکتے ہیں۔ چونکہ ψ معمول شدہ ہے، لہذا درج ذیل ہوگا

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m \left| \sum_n c_n \psi_n \right. \right\rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n |c_n|^2$$

variational principle^۱

^۲ اگر ہیملٹنی متغیر حالات کے ساتھ بخیر حالات کا بھی حاصل ہو، تب ہمیں مجموعہ کے ساتھ عمل بھی درکار ہوگا، تاہم باقی دلیل یہی رہی

گی۔

باب ۷. تغیری اصول

(جہاں فرض کیا گیا ہے کہ امتیازی تفاعلات معیاری عمود شدہ ہیں: $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}$)۔ ساتھ ہی درج ذیل ہوگا۔

$$\langle H \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m \middle| H \sum_n c_n \psi_n \right\rangle = \sum_m \sum_n c_m^* E_n c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2$$

لیکن تعریف کی رو سے، زمینی حال توانائی کم سے کم امتیازی قیمت ہوگی، لہذا $E_{gs} \leq E_n$ ہوگا، جس کے تحت درج ذیل ہوگا۔

$$\langle H \rangle \geq E_{gs} \sum_n |c_n|^2 = E_{gs}$$

ہم یہی ثابت کرنا چاہتے تھے۔

□

مثال ۷.۱: فرض کریں ہم ایک بُعدی ہارمونی مرتعش:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

کی زمینی حال توانائی جاننا چاہتے ہیں۔ یقیناً، ہم اس کا ٹھیک ٹھیک جواب جانتے ہیں (مساوات ۲.۶): $E_{gs} = (1/2) \hbar \omega$ ؛ جس سے اس ترکیب کو پرکھ جاسکتا ہے۔ ہم گاوسی تفاعل:

$$(۷.۲) \quad \psi(x) = A e^{-bx^2}$$

کو اپنا ”آزمائشی“ تفاعل موج منتخب کرتے ہیں، جہاں b ایک مستقل ہے، اور A کو معمول زنی

$$(۷.۳) \quad 1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2bx^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2b}} \Rightarrow A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4}$$

تعیین کرتی ہے۔ اب

$$(۷.۴) \quad \langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$$

ہے، جبکہ یہاں

$$(۷.۵) \quad \langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx^2} \frac{d^2}{dx^2} (e^{-bx^2}) dx = \frac{\hbar^2 b}{2m}$$

اور

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2bx^2} x^2 dx = \frac{m \omega^2}{8b}$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۷.۶) \quad \langle H \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m \omega^2}{8b}$$

مساوات ۷.۱ کے تحت کسی بھی b کے لئے یہ E_{gs} سے تجاویز کرے گا؛ تخت سے سخت حد بندی کی خاطر ہم $\langle H \rangle$ کی کم سے کم قیمت تلاش کرتے ہیں:

$$\frac{d}{db} \langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m \omega^2}{8b^2} = 0 \Rightarrow b = \frac{m \omega}{2\hbar}$$

اس کو واپس $\langle H \rangle$ میں پر کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$(۷.۷) \quad \langle H \rangle_{\text{نثر}} = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

یہاں ہم بالکل ٹھیک زمینی حال توانائی حاصل کر پائے ہیں، جو حیرانی کی بات نہیں، چونکہ میں نے (انتفا) ایسا آزمائشی تفاعل منتخب کیا جس کا روپ ٹھیک اصل زمینی حال (مساوات ۲.۵۹) کی طرح ہے۔ تاہم، گاوسی کے ساتھ کام کرنا انتہائی آسان ثابت ہوتا ہے، لہذا یہ ایک مقبول آزمائشی تفاعل ہے، اور وہاں بھی استعمال کیا جاتا ہے جہاں اصل زمینی حال کے ساتھ اس کی کوئی مشابہت نہ ہو۔ □

مثال ۷.۲: فرض کرے ہم ڈیلٹا تفاعل مخفیہ:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \alpha \delta(x)$$

کی زمینی حال توانائی جاننا چاہتے ہیں۔ ہمیں ٹھیک جواب (مساوات ۲.۱۲۹): $E_{gs} = -m\alpha^2/2\hbar^2$ بھی معلوم ہے۔ پہلے کی طرح، ہم گاوسی آزمائشی تفاعل (مساوات ۷.۲) کا انتخاب کرتے ہیں۔ ہم معمول زنی کر چکے ہیں، اور $\langle T \rangle$ کا حساب کر چکے ہیں؛ ہمیں صرف درج ذیل درکار ہے۔

$$\langle V \rangle = -\alpha |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2bx^2} \delta(x) dx = -\alpha \sqrt{\frac{2b}{\pi}}$$

ظاہر ہے

$$(۷.۸) \quad \langle H \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} - \alpha \sqrt{\frac{2b}{\pi}}$$

اور ہم جانتے ہیں کہ یہ تمام b کے لیے E_{gs} سے تجاوز کرے گا۔ اس کی کم سے کم قیمت تلاش کرتے ہیں

$$\frac{d}{db} \langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi b}} = 0 \Rightarrow b = \frac{2m^2 \alpha^2}{\pi \hbar^4}$$

لہذا

$$(۷.۹) \quad \langle H \rangle_{\text{کمتر}} = -\frac{m\alpha^2}{\pi \hbar^2}$$

□

ہوگا، جو یقیناً E_{gs} سے معمولی زیادہ ہے (چونکہ $\pi > 2$ ہے)۔

میں نے کہا آپ کسی بھی (معمول شدہ) آزمائشی تفعل ψ کا انتخاب کر سکتے ہیں، جو ایک لحاظ سے درست ہے۔ البتہ، غیر استمراری تفعلات کے دہرائے تفرق (جو $\langle T \rangle$ کی قیمت حاصل کرنے کے لیے درکار ہوگا) کو معنی خیز مطلب مختص کرنے کے لیے انوکھے چال چلتا ہوگا۔ ہاں، اگر آپ محتاط رہیں تو، استمراری تفعلات جن میں بل پائے جاتے ہوں کا استعمال نبٹا آسان ہے۔ اگلی مثال میں ان سے نمٹنا دکھایا گیا ہے۔^۳

مثال ۷.۳: آزمائشی ”مکونی“ تفعل موج (شکل ۷.۱):

$$(۷.۱۰) \quad \psi(x) = \begin{cases} Ax & 0 \leq x \leq a/2 \\ A(a-x) & a/2 \leq x \leq a \\ 0 & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

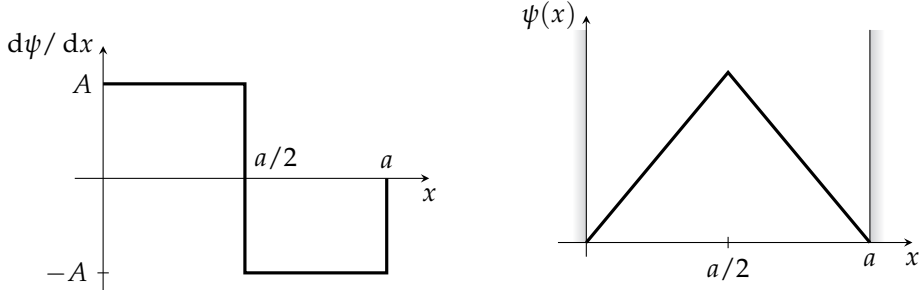
استعمال کرتے ہوئے ایک بُعدی لامتناہی چوکور کنویں کی زمینی حال توانائی کی بالائی حد بندی تلاش کریں، جہاں A معمولی زنی سے تعین کیا جائے گا۔

$$(۷.۱۱) \quad 1 = |A|^2 \left[\int_0^{a/2} x^2 dx + \int_{a/2}^a (a-x)^2 dx \right] = |A|^2 \frac{a^3}{12} \Rightarrow A = \frac{2}{a} \sqrt{\frac{3}{a}}$$

جیسا کہ شکل ۷.۲ میں دکھایا گیا ہے یہاں درج ذیل ہوگا۔

$$\frac{d\psi}{dx} = \begin{cases} A & 0 < x < a/2 \\ -A & a/2 < x < a \\ 0 & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

^۳ ایسا تفعل (مثلاً گاوسی) جو کنویں سے باہر سرکنا ہوا استعمال کرنا بے مقصد ہے، چونکہ آپ $\langle V \rangle$ حاصل کرتے ہیں اور مساوات ۷.۱۱ کچھ نہیں بتاتی۔



شکل ۱.۷: لامستناہی چوکور کنواں کے لئے آزمائشی ٹکونی
تف عمل موج (مساوات ۷.۱۰)۔

سیدھی تف عمل کا تفرق ایک ڈیلٹا تف عمل ہے (سوال ۲.۲۴-ب دیکھیں):

$$(۷.۱۲) \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = A\delta(x) - 2A\delta(x - a/2) + A\delta(x - a)$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۷.۱۳) \quad \begin{aligned} \langle H \rangle &= -\frac{\hbar^2 A}{2m} \int [\delta(x) - 2\delta(x - a/2) + \delta(x - a)] \psi(x) dx \\ &= -\frac{\hbar^2 A}{2m} [\psi(0) - 2\psi(a/2) + \psi(a)] = \frac{\hbar^2 A^2 a}{2m} = \frac{12\hbar^2}{2ma^2} \end{aligned}$$

ٹھیک زمینی حال توانائی $E_{gs} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ (مساوات ۲.۲۷) ہے، لہذا یہ مسئلہ کارآمد ہے ($12 > \pi^2$)۔ □

اصول تغیریت انتہائی طاقتور اور استعمال کے نقطہ نظر سے شرمناک حد تک آسان ہے۔ کسی پیچیدہ سالہ کی زمینی حال توانائی جاننے کے لئے ماہر کیمیا متعدد مقدار معلوم والا آزمائشی تف عمل موج منتخب کر کے ان مقدار معلوم کی قیمتیں تبدیل کرتے ہوئے $\langle H \rangle$ کی سب سے کم ممکن قیمت تلاش کرتا ہے۔ اصل تف عمل موج کے ساتھ ψ کی کوئی مشابہت نہ ہونے کی صورت میں بھی آپ کو E_{gs} کی حیرت کن حد تک درست قیمت حاصل ہوگی۔ ظاہر ہے، اگر آپ ψ کو اصل تف عمل کے جتنا زیادہ متعرب منتخب کر پائیں، اتنا بہتر ہوگا۔ اس ترکیب کے ساتھ صرف ایک مسئلہ ہے: آپ کبھی بھی نہیں جان سکتے کہ آپ ہدف کے کتنے متعرب ہیں؛ آپ صرف بالائی حدودی جان پاتے ہو۔^۴ مزید، اس روپ میں یہ ترکیب صرف زمینی حال کے لیے کارآمد ہے (البتہ سوال ۷.۴ دیکھیں)۔

^۴ عملاً یہ بہت بڑا مسئلہ نہیں اور بعض اوقات درستگی کا اندازہ لگایا جاسکتا ہے۔ زمینی حال ہیلم کوئی یا معنی ہندسوں تک اس طرح حل کیا گیا ہے۔

سوال ۷.۱: درجہ ذیل مخفیہ کی زمینی حال توانائی جاننے کے لئے گاوسی آزمائشی تفاعل (مساوات ۷.۲) کی سب سے کم بالائی حد بندی تلاش کریں۔

$$V(x) = \alpha |x| \quad ; \quad \text{خطی مخفیہ}$$

$$V(x) = \alpha x^4 \quad \text{چوطاقت مخفیہ}$$

سوال ۷.۲: ایک بُعدی ہارمونی سر تعش کے E_{gs} کی بہترین حد بندی درج ذیل روپ کا آزمائشی تفاعل موج

$$\psi(x) = \frac{A}{x^2 + b^2}$$

استعمال کر کے تلاش کریں، جہاں A معمول زنی سے تعین ہوگا اور b قابل تبدیل مقدار معلوم ہے۔

سوال ۷.۳: ڈیلٹا تفاعل مخفیہ $V(x) = -\alpha \delta(x)$ کی E_{gs} کی بہترین بالائی حد بندی کو ٹکونی آزمائشی تفاعل (مساوات ۷.۱۰، لیکن جس کا وسط مبداء پر ہو) استعمال کر کے تلاش کریں۔ یہاں a قابل تبدیل مقدار معلوم ہے۔

سوال ۷.۴:

۱. اصول تغیریت کا درجہ ذیل ضمنی نتیجہ ثابت کریں: اگر $\langle \psi | \psi_{gs} \rangle = 0$ ہو، تب $\langle H \rangle \geq E_{fe}$ ہوگا، جہاں پہلے ہیجان حال کی توانائی E_{fe} ہے۔

یوں، اگر ہم کسی طرح ایسا آزمائشی تفاعل تلاش کر سکیں جو اصل زمینی حال کو عمودی ہو، تب ہم پہلے ہیجان حال کی بالائی حد بندی جان سکیں گے۔ چونکہ ہم زمینی حال تفاعل ψ_{gs} (غالباً) نہیں جانتے، لہذا عموماً یہ کہنا مشکل ہوگا کہ ψ ہمارے آزمائشی تفاعل ψ_{gs} کو عمودی ہوگا۔ ہاں، اگر x کے لحاظ سے مخفیہ $V(x)$ جفت تفاعل ہو، تب زمینی حال بھی جفت ہوگا، اور یوں کوئی بھی طاق آزمائشی تفاعل خود بخود اس ضمنی نتیجہ کے شرط پر پورا اترے گا۔

ب. آزمائشی تفاعل:

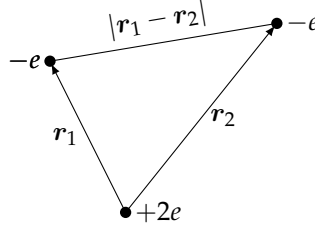
$$\psi(x) = A x e^{-bx^2}$$

استعمال کرتے ہوئے ایک بُعدی ہارمونی سر تعش کے پہلے ہیجان حال کی بہترین بالائی حد بندی تلاش کریں۔

سوال ۷.۵:

۱. اصول تغیریت استعمال کر کے ثابت کریں کہ رتبہ اول غیر انخطاطی نظریہ اضطراب ہر صورت زمینی حال توانائی کی قیمت سے تجاوز کرے گا (یا کم از کم کبھی بھی اس سے کم قیمت نہیں دے گا)۔

ب. آپ حبزو-الف جانتے ہوئے توقع کریں گے کہ زمینی حال کی دو تہی تصحیح لازماً منفی ہوگی۔ مساوات ۶.۱۵ کا معائنہ کرتے ہوئے تصدیق کریں کہ ایسا ہی ہوگا۔



شکل ۷.۳: ہیلیم جوہر۔

۷.۲ ہیلیم کا زمینی حال

ہیلیم جوہر (شکل ۷.۳) کے مرکزہ میں دو پروٹان (اور دو نیوٹران جو ہمارے مقصد سے غیر متعلقہ ہیں) پائے جاتے ہیں اور مرکزہ کے گرد مدار میں دو الیکٹران حرکت کرتے ہیں۔ (مہین ساخت اور باریک تصحیح نظر انداز کرتے ہوئے) اس نظام کی ہیملٹنی درج ذیل ہوگی۔

$$(۷.۱۴) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{|r_1 - r_2|}\right)$$

ہم نے زمینی حال توانائی E_{gs} کا حساب کرنا ہے۔ طبعی طور پر یہ دونوں الیکٹران اکٹھا کرنے کے لیے درکار توانائی کو ظاہر کرتی ہے۔ (E_{gs} جاننے ہوئے، ہم ایک الیکٹران اکٹھا کرنے کے لیے درکار ”بارداریتی توانائی“ معلوم کر سکتے ہیں (سوال ۷.۶ دیکھیں)۔ تجربہ گاہ میں ہیلیم کی زمینی حل توانائی کی قیمت کی پیمائش انتہائی زیادہ درستگی تک کی گئی ہے۔

$$(۷.۱۵) \quad E_{gs} = -78.975 \text{ eV} \quad (\text{تجرباتی})$$

ہم نظریہ سے اس عدد کو حاصل کرنا چاہیں گے۔

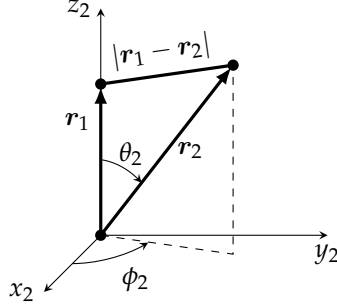
یہ تجسس کی بات ہے کہ ابھی تک اتنے سادہ اور اہم مسئلے کا ٹھیک حل نہیں ڈھونڈا جا سکا ہے۔^۵ الیکٹران دفع:

$$(۷.۱۶) \quad V_{ee} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_1 - r_2|}$$

مسئلہ پیدا کرتا ہے۔ اس جزو کو نظر انداز کرنے سے H دو ہائیڈروجن ہیملٹنیوں میں علیحدہ علیحدہ ہوتا ہے (تاہم مرکزہ بار e کی بجائے $2e$ ہوگا)؛ ٹھیک ٹھیک حل ہائیڈروجنی تفاعلات موج کا حاصل ضرب:

$$(۷.۱۷) \quad \psi_0(r_1, r_2) \equiv \psi_{100}(r_1)\psi_{100}(r_2) = \frac{8}{\pi a^3} e^{-2(r_1+r_2)/a}$$

^۵ہیلیم کے کئی خرد و خال والے، ایسے تین جسمی مسئلے پائے جاتے ہیں جن کا ٹھیک ٹھیک حل حاصل کیا جا سکتا ہے، تاہم ان میں مجھے غیر کولب ہیں (سوال ۷.۱۷ دیکھیں)۔



شکل ۷.۴: محدود کا انتخاب برائے r_2 مکمل (مساوات 20.7)۔

ہوگا، اور توانائی $8E_1 = -109 \text{ eV}$ الیکٹران وولٹ (مساوات ۵.۳۱) ہوگی۔^۱ یہ -79 eV سے بہت مختلف ہے، تاہم یہ ابھی ابتدائے ہے۔

ہم ψ_0 کو آزمائشی تفاعل موج لے کر E_{gs} کی بہتر تخمین اصول تغیریت سے حاصل کرتے ہیں۔ چونکہ یہ ہیملٹنی کے زیادہ تر حصے کا امتیازی تفاعل ہے:

$$H\psi_0 = (8E_1 + V_{ee})\psi_0 \quad (۷.۱۸)$$

لہذا یہ بہت بہتر انتخاب ہے۔ یوں درج ذیل ہوگا

$$\langle H \rangle = 8E_1 + \langle V_{ee} \rangle \quad (۷.۱۹)$$

جہاں درج ذیل ہے۔^۲

$$\langle V_{ee} \rangle = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{8}{\pi a^3} \right)^2 \int \frac{e^{-4(r_1+r_2)/a}}{|r_1 - r_2|} d^3r_1 d^3r_2 \quad (۷.۲۰)$$

میں r_2 مکمل پہلے حل کرتا ہوں؛ اس مقصد کے لئے r_1 مقررہ ہوگا، اور ہم r_2 محدودی نظام کو یوں رکھتے ہیں کہ اس کا قطبی محور r_1 پر پایا جاتا ہو (شکل ۷.۴)۔ وٹانوں کو سائن کے تحت

$$|r_1 - r_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_2} \quad (۷.۲۱)$$

^۱ یہاں a سادہ داس یو ہے اور n ویں یوہر توانائی $E_n = -13.6/n^2 \text{ eV}$ ہے؛ یاد رہے کہ ایک مرکزہ جس کا جوہری عدد Z ہو، کے لئے $E_n \rightarrow Z^2 E_n$ اور $a \rightarrow a/Z$ ہوں گے (سوال ۴.۱۶)۔ مساوات ۷.۱۷ کے ساتھ وابستہ چپکری تشکیل غیر تاشکی (یک تاشکی) ہوگی۔
^۲ آپ $V_{ee} = H'$ لیتے ہوئے مساوات ۷.۲۰ کا مفہوم اول رتبہ نظریہ اضطراب لے سکتے ہیں۔ میں اس کو اس ترکیب کا غلط استعمال سمجھتا ہوں، چونکہ یہاں اضطراب اور غیر مضطرب ہیملٹنی ہم پلہ ہیں۔ اس وجہ سے میں اس کو تغیریتی حساب تصور کرتا ہوں، جس میں ہم E_{gs} کی بالائی حدود کی تلاش کرتے ہیں۔

ابھذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۷.۲۲) \quad I_2 \equiv \int \frac{e^{-4r^2/a}}{|r_1 - r_2|} d^3 r_2 = \int \frac{e^{-4r^2/a}}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_2}} r_2^2 \sin \theta_2 dr_2 d\theta_2 d\phi_2$$

متغیر ϕ_2 کا (نسایت آسان) مکمل 2π دے گا؛ متغیر θ_2 کا مکمل درج ذیل ہوگا۔

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \frac{\sin \theta_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_2}} d\theta_2 &= \left. \frac{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_2}}{r_1 r_2} \right|_0^\pi \\ &= \frac{1}{r_1 r_2} \left(\sqrt{r_1^2 + r_2^2 + 2r_1 r_2} - \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2} \right) \\ (۷.۲۳) \quad &= \frac{1}{r_1 r_2} [(r_1 + r_2) - |r_1 - r_2|] = \begin{cases} 2/r_1 & r_2 < r_1 \\ 2/r_2 & r_2 > r_1 \end{cases} \end{aligned}$$

یوں درج ذیل ہوگا۔

$$\begin{aligned} I_2 &= 4\pi \left(\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} e^{-4r_2/a} r_2^2 dr_2 + \int_{r_1}^\infty e^{-4r_2/a} r_2 dr_2 \right) \\ (۷.۲۴) \quad &= \frac{\pi a^3}{8r_1} \left[1 - \left(1 + \frac{2r_1}{a} \right) e^{-4r_1/a} \right] \end{aligned}$$

اس طرح $\langle V_{ee} \rangle$ درج ذیل ہوگا۔

$$\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{8}{\pi a^3} \right) \int \left[1 - \left(1 + \frac{2r_1}{a} \right) e^{-4r_1/a} \right] e^{-4r_1/a} r_1 \sin \theta_1 dr_1 d\theta_1 d\phi_1$$

زاویائی کمالات 4π دیں گے، جبکہ r_1 مکمل درج ذیل ہوگا۔

$$\int_0^\infty \left[r e^{-4r/a} - \left(r + \frac{2r^2}{a} \right) e^{-8r/a} \right] dr = \frac{5a^2}{128}$$

یوں، آخر کار

$$(۷.۲۵) \quad \langle V_{ee} \rangle = \frac{5}{4a} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) = -\frac{5}{2} E_1 = 34 \text{ eV}$$

جس کی بنا پر درج ذیل ہوگا۔

$$(۷.۲۶) \quad \langle H \rangle = -109 \text{ eV} + 34 \text{ eV} = -75 \text{ eV}$$

یہ جواب زیادہ برا نہیں ہے (یاد رہے، تجرباتی قیمت 79 eV - ہے)۔ تاہم ہم اس سے بہتر جواب حاصل کر سکتے ہیں۔

ہم ψ_0 (جو دو الیکٹرانوں کو یوں تصور کرتا ہے جیسے یہ ایک دوسرے پر بالکل اثر انداز نہیں ہوتے) سے بہتر زیادہ حقیقت پسند آزمائشی تفاعل سوچ سکتے ہیں۔ ایک الیکٹران کے دوسرے الیکٹران پر اثر کو مکمل نظر انداز کرنے کی بجائے، ہم ایک الیکٹران کو اوسط منفی بار کا بادل تصور کرتے ہیں، جو مرکزہ کو جزوی طور پر سپر (پناہ) کرتا ہے، جس کی بنا پر دوسرے الیکٹران کو موثر مرکزہ بار (Z) کی قیمت 2 سے کچھ کم نظر آتی ہے۔ یہ تصور ہمیں آمادہ کرتی ہے کہ ہم درج ذیل روپ کا آزمائشی تفاعل استعمال کریں۔

$$\psi_1(r_1, r_2) = \frac{Z^3}{\pi a^3} e^{-Z(r_1+r_2)/a} \quad (۷.۲۷)$$

ہم Z کو تغیری قیمتدار معلوم تصور کر کے اس کی وہ قیمت منتخب کرتے ہیں جو H کی قیمت کم تر بناتی ہو (دھیان رہے کہ تغیریت ترکیب میں کبھی بھی ہیملٹنی تبدیل نہیں کی جاتی؛ ہیلمی کی ہیملٹنی مساوات ۷.۱۳ دیتی ہے اور دیتی رہے گی۔ البتہ ہیملٹنی کی تخمینی قیمت کے بارے میں سوچ کر بہتر آزمائشی تفاعل موج حاصل کرنا چاہنا ہے)۔

یہ تفاعل موج اس ”غیر مضطرب“ ہیملٹنی (الیکٹران دفع نظر انداز کیا گیا ہے) کا امتیازی حال ہے جس کے کولمب اجزاء میں 2 کی بجائے Z ہے۔ اس کو ذہن میں رکھتے ہوئے، ہم H (مساوات ۷.۱۳) کو درج ذیل روپ میں لکھتے ہیں۔

$$\begin{aligned} (۷.۲۸) \quad H = & -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2} \right) \\ & + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{(Z-2)}{r_1} + \frac{(Z-2)}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|} \right) \end{aligned}$$

نفاہر ہے کہ H کی تحقیقاتی قیمت درج ذیل ہوگی۔

$$(۷.۲۹) \quad \langle H \rangle = 2Z^2 E_1 + 2(Z-2) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + \langle V_{ee} \rangle$$

یہاں $\langle 1/r \rangle$ سے مراد (یک ذروی) ہائیڈروجنی زمینی حال ψ_{100} (جس میں مرکزہ بار Z ہو) میں $1/r$ کی توقعاتی قیمت ہے؛ مساوات ۶.۵۵ کے تحت درج ذیل ہوگا۔

$$(۷.۳۰) \quad \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{a}$$

یہاں بھی V_{ee} کی توقعاتی قیمت وہی ہوگی جو پہلے تھی (مساوات ۷.۲۵)، لیکن اب ہم $Z = 2$ کی بجائے اختیاری Z استعمال کرنا چاہتے ہیں؛ لہذا ہم a کو $2/Z$ سے ضرب دیتے ہیں۔

$$(۷.۳۱) \quad \langle V_{ee} \rangle = \frac{5Z}{8a} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) = -\frac{5Z}{4} E_1$$

ان تمام کو اکٹھے کر کے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$(۷.۳۲) \quad \langle H \rangle = [2Z^2 - 4Z(Z - 2) - (5/4)Z] E_1 = [-2Z^2 + (27/4)Z] E_1$$

اصول تغیریت کے تحت Z کی کسی بھی قیمت کے لیے یہ مقدار E_{gs} سے تجاوز کرے گی۔ بالائی حد بندی کی سب سے کم قیمت تب پائی جائے گی جب $\langle H \rangle$ کی قیمت کم تر ہو:

$$\frac{d}{dZ} \langle H \rangle = [-4Z + (27/4)] E_1 = 0$$

جس سے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$(۷.۳۳) \quad Z = \frac{27}{16} = 1.69$$

یہ ایک معقول منتخب نظر آتا ہے؛ جو کہتا ہے دوسرا الیکٹران مرکزہ کو سپر کرتا ہے جس کی بنا پر مرکزہ کا موثر بار 2 کی بجائے 1.69 نظر آتا ہے۔ اس قیمت کو Z لیتے ہوئے درج ذیل ہوگا۔

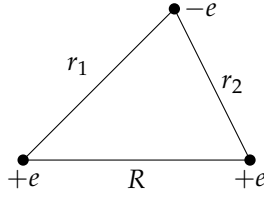
$$(۷.۳۴) \quad \langle H \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} \right)^6 E_1 = -77.5 \text{ eV}$$

متبادل تبدیل مقدار معلوم کی تعداد بڑھا کر، زیادہ پیچیدہ آزمائشی تفاعل موج استعمال کرتے ہوئے، ہیلیم کی زمینی حال توانائی کو اس طرح انتہائی زیادہ درستگی تک حاصل کیا گیا ہے۔ ہم اصل جواب کے دو فی صد سے بھی کم قریب ہیں، لہذا اس کو یابی پر چھوڑتے ہیں۔^۸

سوال ۷.۶: ہیلیم کی زمینی حال توانائی $E_{gs} = -79 \text{ eV}$ لیتے ہوئے باردار پتی توانائی (صرف ایک الیکٹران اکھاڑنے کے لیے درکار توانائی) کا حساب کریں۔ اشارہ: پہلے ہیلیم باردار He^+ ، جس کے مرکزہ کے گرد صرف ایک الیکٹران مدار میں حرکت کرتا ہے، کی زمینی حال توانائی تلاش کریں؛ اس کے بعد دونوں توانائیوں کا فرق لیں۔

سوال ۷.۷: اس حصے میں متحمل ترکیبات کا اطلاق H^- اور Li^+ باردار پر کریں (جن میں ہیلیم کی طرح دو الیکٹران پائے جاتے ہیں، لیکن مرکزہ کی بار بالستریب $Z = 1$ اور $Z = 3$ ہیں)۔ ایک ایک باردار پر کا موثر (جزوی سپر شدہ) مرکزہ کی بار تلاش کر کے، E_{gs} کی بہترین بالائی حد بندی تعین کریں۔ تبصرہ: باردار H_2^- کی صورت میں آپ دیکھیں گے کہ $\langle H \rangle > -13.6 \text{ eV}$ ہے، جس کے تحت مفید حال نہیں ہوگا، چونکہ توانائی کے نقطہ نظر سے زیادہ بہتر صورتحال یہ ہوگی کہ ایک الیکٹران نکل کر اڑ جائے اور پیچھے معادل ہائیڈروجن جو ہر چھوڑے۔ یہ حیرت کی بات نہیں چونکہ ہیلیم کے لحاظ سے مرکزہ کے ساتھ الیکٹران کی قوت کشش کم ہے، اور الیکٹران کی باہم قوت دفع جو ہر کو توڑنا چاہتی ہے۔ البتہ، حقیقت میں یہ سب غلط ہے۔ زیادہ نفیس آزمائشی تفاعل (سوال ۷.۲۰ دیکھیں) استعمال کرتے ہوئے دکھایا جاسکتا ہے کہ $E_{gs} < -13.6 \text{ eV}$ ہے، لہذا مفید

^۸ ایسا آزمائشی تفاعل، جو زمینی حال کو عموماً ہی ہو، منتخب کر کے ہیلیم کا پہلا ایجنان حال اسی طرح حاصل کیا جاسکتا ہے۔



شکل ۷.۵: ہائیڈروجن سالمہ بارداریہ، H_2^+

حال موجود ہو گا۔ تاہم، یہ بمشکل مقید ہے، اور ہیجان حال نہیں پائے جاتے، اور یوں H^- کا کوئی غیر مسلسل طیف نہیں پایا جاتا (تمام استمراریہ سے اور استمراریہ میں ہوں گے)۔ نتیجتاً، تجربہ گاہ میں اس کا مطالعہ کرنا دشوار ہوتا ہے، اگرچہ سورج کی سطح پر یہ وافر مقدار میں پائے جاتے ہیں۔

۷.۳ ہائیڈروجن سالمہ بارداریہ

اصول تغیریت کا ایک اور کلاسیکی استعمال ہائیڈروجن سالمہ بارداریہ، H_2^+ ، جو دو پروٹان کے کولمب میدان میں ایک الیکٹران پر مشتمل ہے، کا معائنہ ہے (شکل ۷.۵)۔ میں فی الوقت فرض کرتا ہوں کہ دونوں پروٹان کا مقام مقصورہ، اور ان کے بیچ فاصلہ R ہے، اگرچہ اس حساب کا ایک دلچسپ ذیلی نتیجہ R کی اصل قیمت ہوگی۔ ہیملٹنی درج ذیل ہے

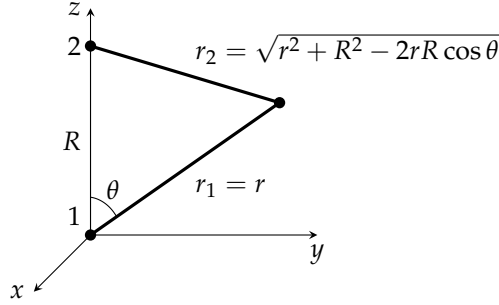
$$(۷.۳۵) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right)$$

جہاں الیکٹران سے متعلقہ پروٹان تک فاصلے r_1 اور r_2 ہیں۔ ہمیشہ کی طرح ہم کوشش کریں گے کہ ایک معقول آزمائشی تفاعل موج منتخب کر کے زمینی حال توانائی کی حد بندی اصول تغیریت سے دریافت کریں۔ (در حقیقت، ہماری دلچسپی یہ جاننے میں ہے کہ آیا اس نظام میں بندھن پیدا ہوگی؛ یعنی کیا ایک معادل ہائیڈروجن جوہر جمع ایک آزاد پروٹان سے اس نظام کی توانائی کم ہوگی۔ اگر ہمارا آزمائشی تفاعل موج دکھائے کہ مقید حال پایا جاتا ہے، اس سے بہتر آزمائشی تفاعل اس بندھ کو صرف زیادہ طاقتور بنا سکتا ہے۔)

آزمائشی تفاعل موج تیار کرنے کی حنا طرہ فرض کریں کہ زمینی حال (مساوات ۴.۸۰)

$$(۷.۳۶) \quad \psi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$$

میں ہائیڈروجن جوہر کے متضرب فاصلہ R پر، دوسرا پروٹان ”لامتناہی“ سے لاکر رکھتے ہوئے بارداریہ پیدا کیا جاتا ہے۔ اگر داس بوجہ سے R کافی زیادہ ہو تب الیکٹران کا تفاعل موج غالباً زیادہ تبدیل نہیں ہوگا۔ تاہم ہم دونوں پروٹان کو ایک نظر سے دیکھنا چاہیں گے، لہذا دونوں کے ساتھ الیکٹران کی وابستگی کا احتمال ایک جیسا ہوگا۔ یوں ہم



شکل ۷.۶: مقدار I کے حساب کی خاطر محدود (مساوات ۷.۳۹)۔

آمادہ ہوتے ہیں کہ درجہ ذیل روپ کا آزمائشی تنفس عمل استعمال کریں۔

$$(۷.۳۷) \quad \psi = A[\psi_0(r_1) + \psi_0(r_2)]$$

(چونکہ ہم سالماتی تنفس عمل موج کو جوہری مدار چوں کا خطی جوڑ لکھتے ہیں لہذا ماہر کو انسانی کیب اس کو جوہری مدار چوں کے خطی جوڑ ترکیب^۹ کہتے ہیں۔)

پہلا کام آزمائشی تنفس عمل کی معمول زنی ہے۔

$$(۷.۳۸) \quad 1 = \int |\psi|^2 d^3 r = |A|^2 \left[\int |\psi_0(r_1)|^2 d^3 r + \int |\psi_0(r_2)|^2 d^3 r + 2 \int \psi_0(r_1) \psi_0(r_2) d^3 r \right]$$

پہلے دو نکلات 1 ہیں (چونکہ ψ_0 معمول شدہ ہے): تیسرا زیادہ پیچیدہ ہے۔ درجہ ذیل لیں۔

$$(۷.۳۹) \quad I \equiv \langle \psi_0(r_1) | \psi_0(r_2) \rangle = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-(r_1+r_2)/a} d^3 r$$

ایسا مدی نظام کھڑا کر کے، جس کے مدار پر پروٹان 1 اور z محور پر R فاصلے پر پروٹان 2 ہو (شکل ۷.۶)،

$$(۷.۴۰) \quad r_1 = r \quad \text{اور} \quad r_2 = \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta}$$

ہوں گے لہذا اور جہ ہوگا۔

$$(۷.۴۱) \quad I = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-r/a} e^{-\frac{\sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta}}{a}} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

متغیر ϕ کا (نہایت آسان) مکمل 2π دے گا۔ متغیر θ کا مکمل کرنے کی خاطر درج ذیل لیں۔

$$y \equiv \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta} \Rightarrow d(y^2) = 2y dy = 2rR \sin \theta d\theta$$

تب درج ذیل ہوگا۔

$$\begin{aligned} \int_0^\pi e^{-\frac{\sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta}}{a}} \sin \theta d\theta &= \frac{1}{rR} \int_{|r-R|}^{r+R} e^{-y/a} y dy \\ &= -\frac{a}{rR} \left[e^{-(r+R)/a} (r+R+a) - e^{-|r-R|/a} (|r-R|+a) \right] \end{aligned}$$

اب مکمل r با آسانی حل ہوگا۔

$$\begin{aligned} I &= \frac{2}{a^2 R} \left[-e^{-R/a} \int_0^\infty (r+R+a) e^{-2r/a} r dr + e^{-R/a} \int_0^R (R-r+a) r dr \right. \\ &\quad \left. + e^{R/a} \int_R^\infty (r-R+a) e^{-2r/a} r dr \right] \end{aligned}$$

ان عملیات کی قیمتوں کے حساب کے بعد الجبرائی تسہیل سے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$(۷.۴۲) \quad I = e^{-R/a} \left[1 + \left(\frac{R}{a} \right) + \frac{1}{3} \left(\frac{R}{a} \right)^2 \right]$$

ہم I کو ڈھانپائی مکمل کہتے ہیں؛ جو $\psi_0(r_1)$ کے $\psi_0(r_2)$ پر چپڑھنے کی مقدار کی پیشکش ہے (دھیان رہے کہ $R \rightarrow 0$ کی صورت میں یہ 1 کو، اور $R \rightarrow \infty$ کی صورت 0 کو پہنچاتا ہے) ڈھانپائی مکمل I کی صورت میں مستقل معمول زنی (مساوات ۷.۳۸) درج ذیل ہوگا۔

$$(۷.۴۳) \quad |A|^2 = \frac{1}{2(1+I)}$$

اس کے بعد ہمیں آزمائشی حال ψ میں H کی توقعاتی قیمت کا حساب کرنا ہوگا۔ یاد رہے کہ

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right) \psi_0(r_1) = E_1 \psi_0(r_1)$$

ہوگا (جہاں $E_1 = -13.6 \text{ eV}$ جوہری ہائیڈروجن کی زمینی حال توانائی ہے)؛ اور r_1 کی جگہ r_2 کے لئے بھی ایسا ہی ہو گا؛ لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$\begin{aligned} H\psi &= A \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \right] [\psi_0(r_1) + \psi_0(r_2)] \\ &= E_1 \psi - A \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left[\frac{1}{r_2} \psi_0(r_1) + \frac{1}{r_1} \psi_0(r_2) \right] \end{aligned}$$

یوں H کی توقعاتی قیمت درجہ ذیل ہوگی۔

$$(۷.۴۴) \quad \langle H \rangle = E_1 - 2|A|^2 \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left[\langle \psi_0(r_1) \left| \frac{1}{r_2} \right| \psi_0(r_1) \rangle + \langle \psi_0(r_1) \left| \frac{1}{r_1} \right| \psi_0(r_2) \rangle \right]$$

میں آپ کے لئے باقی دو مقدار جو بلا واسطہ تکمل:"

$$(۷.۴۵) \quad D \equiv a \langle \psi_0(r_1) \left| \frac{1}{r_2} \right| \psi_0(r_1) \rangle$$

اور مبادلہ تکمل:"

$$(۷.۴۶) \quad X \equiv a \langle \psi_0(r_1) \left| \frac{1}{r_1} \right| \psi_0(r_2) \rangle$$

کہلاتے ہیں، حل کرنے کے لئے چھوڑتا ہوں۔ بلا واسطہ تکمل کا نتیجہ:

$$(۷.۴۷) \quad D = \frac{a}{R} - \left(1 + \frac{a}{R} \right) e^{-2R/a}$$

اور مبادلہ تکمل کا نتیجہ درجہ ذیل ہے (سوال ۷.۸ دیکھیں)۔

$$(۷.۴۸) \quad X = \left(1 + \frac{R}{a} \right) e^{-R/a}$$

ان تمام نتائج کو اکٹھے کرتے ہوئے اور (مساوات ۷.۴۰ اور مساوات ۷.۴۲) یاد کرتے ہوئے کہ $E_1 = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2a}$ ہے، ہم درجہ ذیل اخذ کرتے ہیں۔

$$(۷.۴۹) \quad \langle H \rangle = \left[1 + 2 \frac{(D + X)}{(1 + I)} \right] E_1$$

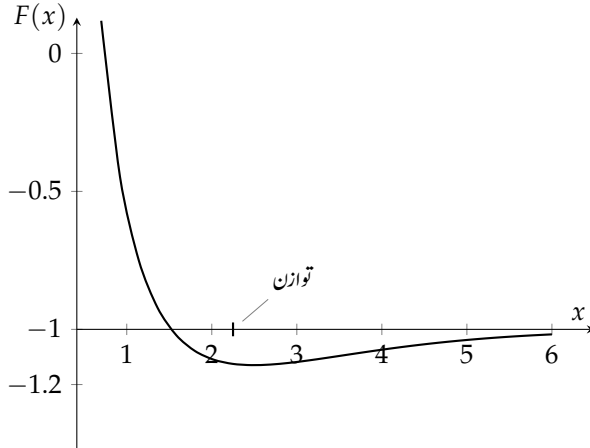
اصول تغیریت کے تحت، زمینی حال توانائی $\langle H \rangle$ سے کم ہوگی۔ یقیناً، یہ صرف الیکٹران کی توانائی ہے؛ اس کے علاوہ پروٹان پروٹان دفع سے وابستہ مخفی توانائی:

$$(۷.۵۰) \quad V_{pp} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R} = -\frac{2a}{R} E_1$$

بھی پائی جاتی ہے۔ یوں نظام کی کل توانائی ($-E_1$ کی اکائیوں میں)، $x \equiv R/a$ کا تناسب لکھتے ہوئے، درجہ ذیل سے کم ہوگی۔

$$(۷.۵۱) \quad F(x) = -1 + \frac{2}{x} \left\{ \frac{(1 - (2/3)x^2)e^{-x} + (1 + x)e^{-2x}}{1 + (1 + x + (1/3)x^2)e^{-x}} \right\}$$

direct integral^{۱۱}
exchange integral^{۱۲}



شکل ۷.۷: تفاعل $F(x)$ (مساوات ۷.۵۱) کی ترسیم مقید حال کی موجودگی دکھاتی ہے (بوہر رداس کی اکائیوں میں x دو پروٹان کے بیچ فاصلہ ہے)۔

اس تفاعل کو شکل ۷.۷ میں ترسیم کیا گیا ہے۔ اس ترسیم کا کچھ حصہ -1 سے نیچے ہے، جہاں معادل جوہر جمع ایک آزاد پروٹان کی توانائی (-13.6 eV) سے کم ہے، لہذا اس نظام میں بندہ پیدا ہوگا۔ یہ ایک شریک گرضتی بندہ ہوگا، جہاں الیکٹران دونوں پروٹان کا برابر شریک ہوگا۔ پروٹان کے بیچ توازنی فاصلہ تقریباً 2.4 رداس بوہر، یعنی 0.13 nm ہے (تجرباتی قیمت 0.106 nm ہے)۔ بندشی توانائی کے حساب سے حاصل قیمت 1.8 eV ، جبکہ پیشانی قیمت 2.8 eV ہے (اصول تغیریت ہمیشہ زمین سی حال توانائی سے تجاوز کرتا ہے، لہذا یہ طاقت بندہ کی کم قیمت دے گا؛ بہر حال اس کی فنکشن کریں: یہاں اہم نقطہ یہ ہے کہ بندہ پایا جاتا ہے؛ بہتر تغیری تفاعل اس مخفیہ کو مزید گہرا بنائے گا۔

سوال ۷.۸: بلا واسطہ مکمل D اور مبادلہ مکمل X مساوات ۷.۴۵ اور مساوات ۷.۴۶ کی قیمتیں تلاش کریں۔ اپنے جوابات کا موازنہ مساوات ۷.۴۷ اور مساوات ۷.۴۸ کے ساتھ کریں۔

سوال ۷.۹: فرض کریں ہم نے آزمائشی تفاعل موج (مساوات ۷.۳۷) میں منفی علامت استعمال کی ہوئی۔

$$\psi = A[\psi_0(r_1) - \psi_0(r_2)] \quad (7.52)$$

کوئی نیا مکمل حل کے بغیر (مساوات ۷.۵۱ کا مکمل) $F(x)$ معلوم کر کے ترسیم کریں۔ دکھائیں کہ ایسی صورت میں بندہ پیدا ہونے کا کوئی ثبوت نہیں ملتا۔^۳ (چونکہ اصول تغیریت صرف بالائی حد بندی دیتا ہے، لہذا اس سے یہ ثابت نہیں ہوگا کہ ایسے حال میں بندہ نہیں پایا جائے گا، تاہم اس سے زیادہ امید بھی نہیں کرنی

^۳ بندہ اس صورت پیدا ہوتا ہے جب دو پروٹان کے بیچ رہنے کو الیکٹران ترجیح دیتا ہو، اور ان کے بیچ کر یہ دونوں پروٹان کو اندر جانب کھینچتا ہے۔ لیکن طاق خطی جوڑ (مساوات ۷.۵۲) کا وسط میں عقدہ پایا جاتا ہے، لہذا حیرانی کی بات نہیں کہ یہ تشکیل پروٹان کو ایک دوسرے سے دور کرتی ہے۔

چاہیے۔) تبصرہ: درحقیقت درجب ذیل روپ کے ہر تفاعل

$$\psi = A[\psi_0(r_1) + e^{i\phi}\psi_0(r_2)] \quad (۷.۵۳)$$

کی خاصیت یہ ہے کہ الیکٹران دونوں پروٹان کے ساتھ برابر کا وابستگی رکھتا ہے۔ تاہم، چونکہ باہمی اول بدل $P : r_1 \leftrightarrow r_2$ کی صورت میں ہیملٹنی (مساوات ۷.۳۵) غیر متغیر ہے، لہذا اس کے امتیازی تفاعلات کو یک وقت P کے امتیازی تفاعلات چنا جاسکتا ہے۔ امتیازی قدر $+1$ کے ساتھ مثبت علامت (مساوات ۷.۳۷) اور امتیازی قدر -1 کے ساتھ منفی علامت (مساوات ۷.۵۲) ہوگی۔ زیادہ عمومی صورت (مساوات ۷.۵۳) کے استعمال سے مزید فائدہ نہیں ہوگا؛ آپ چاہیں تو اسے استعمال کر کے دیکھ سکتے ہیں۔

سوال ۷.۱۰: نقطہ توازن پر $F(x)$ کے دوہرا تفرق سے ہائیڈروجن سالمہ باردار یہ (حصہ ۲.۳ دیکھیں) میں دونوں پروٹان کے ارتعاش کی قدرتی تعدد (ω) کی اندازاً قیمت تلاش کی جاسکتی ہے۔ اگر اس مرتعش کی زمینی حال توانائی $(\hbar\omega/2)$ نظام کی بندشی توانائی سے زیادہ ہو، تب نظام بکھر کر ٹوٹ جائے گا۔ دکھائیں کہ حقیقت میں مرتعش توانائی اتنی کم ہے کہ ایسا کبھی بھی نہیں ہوگا، اور ساتھ ہی مقید لرزشی سطحوں کی اندازاً تعداد دریافت کریں۔ تبصرہ: آپ تحلیلی طور پر کم سے کم نقطہ، یا اس نقطہ پر دوہرا تفرق حاصل نہیں کر پائیں گے۔ اعدادی طریقہ یا کمپیوٹر کی مدد سے ایسا کریں۔

اضافی سوالات برائے باب ۷

سوال ۷.۱۱:

۱. درج ذیل روپ کا آزمائشی تفاعل موج

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos(\pi x/a) & -a/2 < x < a/2 \\ 0 & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

استعمال کرتے ہوئے ایک بُدی ہارمونی مرتعش کی زمینی حال توانائی کی حد بندی تلاش کریں۔ متغیر a کی ”بہترین“ قیمت کیا ہوگی؟ سمجھ $\langle H \rangle$ کا موازنہ اصل توانائی سے کریں۔ تبصرہ: آزمائشی تفاعل میں $\pm a/2$ پر ایک ”بل“ (غیر استمراری تفرق) پایا جاتا ہے؛ کیا آپ کو اس سے نمٹنا ہوگا، جیسا مجھے مثال ۷.۳ میں کرنا پڑا؟

ب. وقفہ $(-a, a)$ پر $\psi(x) = B \sin(\pi x/a)$ استعمال کرتے ہوئے پہلے ہجبان حال کی حد بندی تلاش کریں۔ اپنے جواب کا اصل جواب سے موازنہ کریں۔

سوال ۷.۱۲:

۱. درج ذیل آزمائشی تفاعل موج

$$\psi(x) = \frac{A}{(x^2 + b^2)^n}$$

باب ۷. تغیری اصول

جہاں n اختیاری مستقل ہے، استعمال کرتے ہوئے سوال ۷.۲ کو عمومیت دیں۔ جبزوی جواب: مقدار معلوم b کی بہترین قیمت درج ذیل دے گی۔

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left[\frac{n(4n-1)(4n-3)}{2(2n+1)} \right]^{1/2}$$

ب. ہارمونی سرعش کے پہلے ہیجان حال کی بالائی حد بندی کی سب سے کم قیمت درج ذیل آزمائشی تفاعل استعمال کرتے ہوئے معلوم کریں۔

$$\psi(x) = \frac{Bx}{(x^2 + b^2)^n}$$

جبزوی جواب: مقدار معلوم b کی بہترین قیمت درج ذیل دے گی۔

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left[\frac{n(4n-5)(4n-3)}{2(2n+1)} \right]^{1/2}$$

ج. آپ دیکھیں گے کہ $n \rightarrow \infty$ سے حد بندیاں بالکل ٹھیک توانائیوں تک پہنچتی ہیں۔ ایسا کیوں ہے؟ اشارہ: آزمائشی تفاعلات موج کو $n = 2$ ، $n = 3$ اور $n = 4$ کے لیے ترسیم کرتے ہوئے ان کا موازنہ اصل تفاعلات موج (مساوات ۱۲.۵۹ اور مساوات ۲.۶۲) کے ساتھ کریں۔ تحلیلی طور پر ایسا کرنے کی خاطر درج ذیل مثال سے آغاز کریں۔

$$e^z = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{z}{n} \right)^n$$

سوال ۷.۱۳: ہائیڈروجن کے زمینی حال کی سب سے کم حد بندی، گاوسی آزمائشی موج تفاعل:

$$\psi(r) = Ae^{-br^2}$$

استعمال کرتے ہوئے تلاش کریں، جہاں A معمول زنی سے تعین ہوگا، جبکہ b متبادل تبدیل مقدار معلوم ہے۔ جواب: -11.5 eV

سوال ۷.۱۴: اگر نوریہ کی کیفیت غیر صفر ($m_\gamma \neq 0$) ہوتی تب مخفیہ کی جگہ یوکاوا مخفیہ:^{۱۴}

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad (۷.۵۴)$$

استعمال ہوتا، جہاں $\mu = m_\gamma c / \hbar$ ہے۔ اپنی مرضی کا آزمائشی تفاعل موج استعمال کرتے ہوئے اس مخفیہ کے ”ہائیڈروجن“ جوہر کی بندی توانائی کی اندازہ قیمت معلوم کریں۔ آپ $1 \ll \mu a$ لیں اور اپنے جواب کو $(\mu a)^2$ رتبہ درستگی تک لکھیں۔

سوال ۱۵.۷: فرض کریں آپکو ایک ایسا کوانٹائی نظام دیا جاتا ہے جس کا ہیملٹنی H_0 صرف دو امتیازی حالات کا حامل ہو ψ_a جس کی توانائی E_a اور ψ_b جس کی توانائی E_b ہو۔ یہ عمومی معمول شدہ اور غیر انتہائی ہے۔ مزید فرض کریں کہ $E_a < E_b$ ہے۔ اب ہم اضطراب H' چالو کرتے ہیں۔ جس کے متعلق ارکان درج ذیل ہیں۔

$$(۷.۵۵) \quad \langle \psi_a | H' | \psi_a \rangle = \langle \psi_b | H' | \psi_b \rangle = 0 \quad \langle \psi_a | H' | \psi_b \rangle = \langle \psi_b | H' | \psi_a \rangle = h$$

جہاں h کوئی مخصوص مستقل ہے۔ الف) مضطرب ہیملٹنی کی امتیازی افتدار کی ٹھیک ٹھیک قیمتیں تلاش کریں۔ ب) رتبہ دوم نظریہ اضطراب استعمال کرتے ہوئے مضطرب نظام کی توانائیوں کی اندازی قیمت معلوم کریں۔ ج) مضطرب نظام کی زمینی حال کی توانائی کی اندازی قیمت درج ذیل روپ کارتی تفسا عمل

$$(۷.۵۶) \quad \psi = (\cos \phi) \psi_a + (\sin \phi) \psi_b$$

استعمال کر کے اصول تغیریت سے حاصل کریں۔ جہاں ϕ متابل تبدیل مقدار معلوم ہے۔ تبصرہ: اضطراب کا خطی جوڑ لازمًا معمول شدہ دے گا۔ د) اپنے جوابات کا حبزو الف، ب، اور ج کے ساتھ موازنہ کریں۔ یہاں اصول تغیریت اتنا زیادہ درست کیوں ہے؟

سوال ۱۶.۷: ہم سوال ۱۵.۷ میں تیار کی گئی ترکیب مثال کے طور پر یکساں مقناطیسی میدان $B_z \hat{k} = B$ میں ایک ساکن الیکٹران پر غور کرتے ہیں۔ جس کا ہیملٹنی مساوات ۱۵۸-۴ درج ذیل ہوگا

$$(۷.۵۷) \quad H_0 = \frac{eB_z}{m} S_z$$

امتیازی چکر x_a اور x_b ان کی مطابقتی توانائیاں E_a اور E_b مساوات ۱۶۱.۷ میں دی گئی ہیں۔ اب ہم X رخ درج ذیل روپ کے یکساں میدان

$$(۷.۵۸) \quad H' = \frac{eB_x}{m} S_x$$

کے اضطراب کو چالو کرتے ہیں۔ الف) اضطراب H' کے متعلق ارکان تلاش کر کے تصدیق کریں کہ ان کا ساخت مساوات ۱۵۷.۷ تو طرح ہے یہاں H کیا ہوگا؟ ب) دوم رتبہ نظریہ اضطراب میں نئی زمینی حال توانائی کو سوال ۱۵.۷ (ب) استعمال کرتے ہوئے تلاش کریں۔ ج) زمینی حال توانائی کی حب بندی سوال ۱۵.۷ (ج) کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے اصول تغیریت سے حاصل کریں

سوال ۱۷.۷: ۱۷.۷ اگر چہ ہیلیم کے لیے مساوات شرودنگر کو ٹھیک ٹھیک حل نہیں کیا جاسکتا ہے مگر ہیلیم کے ایسے نظام پائے جاتے ہیں جن کے ٹھیک ٹھیک حل معلوم کیے جاسکتے ہیں۔ اس کی ایک سادہ مثال ربڑی پٹی ہیلیم ہے جس میں کو توں کی جبائے فونون ہک کی درج ذیل قوتیں استعمال ہوگی

$$(۷.۵۹) \quad H = \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{2} m \omega^2 (r_1^2 + r_2^2) - \frac{\lambda}{4} m \omega^2 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2$$

الف) دکھائیں کہ متغیرات r_1, r_2 کی بجائے متغیرات

$$(۷.۶۰) \quad u \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(r_1 + r_2) \quad v \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(r_1 - r_2)$$

استعمال کرنے سے ہیملٹنی دو علیحدہ علیحدہ تین آبادی ہارمونی مرتعشات میں تقسیم ہوگا۔

$$(۷.۶۱) \quad H = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_\mu^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \mu^2 \right] + \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_\nu^2 + \frac{1}{2} (1 - \lambda) m \omega^2 \nu^2 \right]$$

ب) اس نظام کی ٹھیک زمیخی حال توانائی کیا ہوگی؟ (ج) ٹھیک ٹھیک حل نہ جاننے تو صورت میں ہم ہیملٹنی کی اصل صورت مساوات 59.7 پر حصہ 2.7 کی ترکیب استعمال کرنا چاہیں گے۔ سپر کرنے کو نظر انداز کرتے ہوئے حساب کیجیے گا۔ اپنے جواب کا ٹھیک ٹھیک جواب کے ساتھ موازنہ کریں۔ جواب:

$$\langle H \rangle = 3\hbar\omega(1 - \lambda/4)$$

سوال ۷.۱۸: 18.7
ہم نے سوال 7.7 میں دیکھا کہ سپر شدہ برقی تقا عمل موج، مساوات 27.7 جو بیلیم کے لیے مفید ثابت ہوا منفی ہائیڈروجن باردار یہ میں مقید حال میں موجودگی کی تصدیق کرنے کے لیے کافی نہیں ہے۔ چندر شیکر نے درج ذیل کا برقی تقا عمل موج استعمال کیا

$$(۷.۶۲) \quad \psi(r_1, r_2) \equiv A[\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) + \psi_2(r_1)\psi_1(r_2)]$$

جہاں درج ذیل ہے

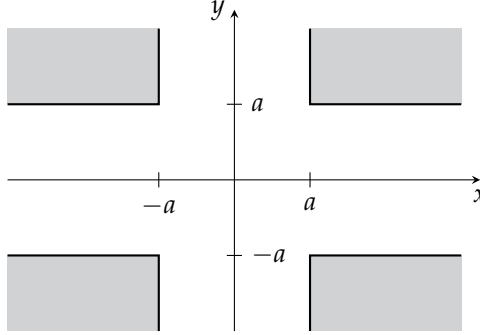
$$(۷.۶۳) \quad \psi_1(r) \equiv \sqrt{\frac{z_1^3}{\pi a^3}} e^{-z_1 r/a} \quad \psi_2(r) \equiv \sqrt{\frac{z_2^3}{\pi a^3}} e^{-z_2 r/a}$$

یعنی انہوں نے دو مختلف سپر اجزائے ضربی کی اجازت دی ایک الیکٹران کو مسرکزہ کے متعریب اور دوسرے کو مسرکزہ سے دور تصور کیا گیا۔ چونکہ الیکٹران متقابل ذرہ ہے لہذا افصائی تقا عمل موج کو باہمی مبادلہ کے لحاظ سے لازماً تشاکلی بنانا ہوگا چکر حال جس کا موجودہ حساب میں کوئی کردار نہیں پایا اجبا تا اختلاف تشاکلی ہے۔ دکھائیں کہ متابل تبدیل مقدار معلوم Z_1 اور Z_2 کی قیمتوں کو موج کہ منتخب کرنے سے $\langle H \rangle$ کی قیمت -13.6eV سے کم حاصل کی جاسکتی ہے۔ جواب:

$$(۷.۶۴) \quad \langle H \rangle = \frac{E_1}{x^6 + y^6} (-x^8 + 2x^7 + \frac{1}{2}x^6y^2 - \frac{1}{2}x^5y^2 - \frac{1}{8}x^3y^4 + \frac{11}{8}xy^6 - \frac{1}{2}y^8)$$

جہاں $x \equiv Z_1 + Z_2$ اور $y \equiv 2\sqrt{Z_1 Z_2}$ ہیں۔ چندر شیکر نے $Z_1 = 1.039$ چونکہ یہ ایک سے بڑا ہے لہذا اس کو موثر مسرکزی بار تصور نہیں کیا جاسکتا ہے۔ تاہم اس کے باوجود اس کو برقی تقا عمل موج مقبول کیا جاسکتا ہے۔ اور $Z_2 = 0.283$ استعمال کیا

سوال ۷.۱۹: 19-7
جو بری برکن کو برقرار رکھنے میں بنیادی مسئلہ دو ذرات مثلاً دو ڈیوٹرون کو ایک دوسرے کے اتنا متعریب لانا ہے



شکل ۸.۷: صلیبی خطہ برائے سوال 20.7

کہ کولمب قوت دفع پر ان کے بیچ کششی تاہم اثر متضرب مرکزی قوتیں سبقت لے جائیں ہم ذرات کو شاندار درجہ حرارت تک گرم کر کے ان کو بلا منصوب تصادم کے ذریعے انہیں ایک دوسرے کے متضرب زبردستی لاسکتے ہیں۔ دوسری تجویز میون عمل انگیز کا استعمال ہے جس میں ہم ہائیڈروجن سالمہ باردار پر اٹان کی جگہ ڈیوٹران اور الیکٹران کی جگہ میون رکھ کر تیار کرتے ہیں۔ اس ساخت میں ڈیوٹران کے بیچ توازنی فاصلہ کی پیش گوئی کریں اور سمجھائیں کہ اس مقصد کی خاطر کیوں الیکٹران سے میون بہتر ثابت ہوگا۔

سوال 20.7: ۷.۲۰

کوآئنٹی نقطے فرض کریں ایک ذرہ تو شکل ۸.۷ میں دکھائے گئے صلیبی خطہ پر دو ابعاد میں حرکت کرنے کا پابند بنایا جائے صلیبی ہاتھ لامتناہی تک پہنچتے ہیں۔ سلیب کے اندر مخفی صفر ہے جو کہ اس کے باہر لامتناہی ہے۔ حیرانی کی بات ہے کہ یہ تشکیل مثبت توانائی مقید حال کا حامی ہے۔

الف) دکھائیں کہ کم سے کم توانائی جو لامتناہی تک پہنچتی ہے درج ذیل ہے

$$E_{\text{threshold}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}; \quad (۷.۶۵)$$

اس سے کم توانائی کا ہر حل لامتناہی کا مقید ہوگا۔ اشارہ: ایک بازو پر $(x \gg a)$ مساوات شرودنگر کو علیحدگی متغیرات کو مدد سے حل کریں۔ اگر تفاعل موج لامتناہی تک پہنچتی ہے تب اس کا x پر انحصار $e^{ik_x x}$ جہاں $k_x > 0$ ہے کو روپ میں ہوگا۔ ب) اب اصول تغیریت استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ E سے کم توانائی زمینی حال کا ہوگا۔ درج ذیل برقی تفاعل موج استعمال کریں

$$\psi(x,y) = A \begin{cases} (1 - |xy|/a^2)e^{-\alpha} & |x| \leq a, |y| \leq a \\ (1 - |x|/a)e^{-\alpha|y|/a} & |x| \leq a, |y| > a \\ (1 - |y|/a)e^{-\alpha|x|/a} & |x| > a, |y| \leq a \\ 0 & \end{cases} \quad (۷.۶۶)$$

اس کی معمول زنی کر کے A تعین کریں۔ اور H کی توقعاتی قیمت کا حساب لگائیں۔ جواب:

$$\langle H \rangle = \frac{3\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{\alpha^2 + 2\alpha + 3}{6 + 11\alpha} \right) \quad (۷.۶۷)$$

اب α کے لحاظ سے کم سے کم قیمت تلاش کر کہ دکھائیں یہ نتیجہ E سے کم ہوگا۔ سلیب کی تشاکل سے پورا فائدہ اٹھائیں آپکو صرف خطہ $1/8$ پر عمل لینا ہوگا۔ باقی سات مکمل بھی یہی جواب دیں گے۔ البتہ دھیان رہے کہ اگرچہ برقی تعامل موج استمراری ہے اس کے تصرفات غیر استمراری ہیں۔ رکاوٹی لکیریں $x = 0, y = 0, x = \pm a$ اور $y = \pm a$ پر پائی جاتی ہیں۔ جہاں آپکو مثال 7-3 کی تکنیک بروئے کار لانی ہوگی۔

جوابات