کوانٹم میکانیات

خالد خان یوسفزئی

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

۲۴ر نومبر ۲۰۲۱

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 وطالبات تک پہنچانے میں مدد دیں اور انہیں جہاں اس کتاب میں غلطی نظر آئے وہ اس کی نشاندہی میری ای-میل پر کریں۔ میں ان کا نہایت شکر گزار ہوں گا۔

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

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

خالد خان یوسفزئی

28 اکتوبر 2011ء

باب ۲

غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات

۲.۱ ساکن حالات

باب اول میں ہم نے تفاعل موج پر بات کی جہاں اس کا استعمال کرتے ہوئے دلچسپی کے مختلف مقداروں کا حساب کیا گیا۔ اب وقت آن پہنچا ہے کہ ہم کسی مخصوص مخفیہ[1] $V(x,t)$ کی لئے شروڈنگر مساوات

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+V\Psi \tag{۲.۱}$$

حل کرتے ہوئے $\Psi(x,t)$ حاصل کرنا سیکھیں۔ اس باب میں (بلکہ کتاب کے بیشتر حصے میں) ہم فرض کرتے ہیں کہ V وقت t کا تابع نہیں ہے۔ ایسی صورت میں مساوات شروڈنگر کو **علیحدگی متغیرات**[2] کے طریقے سے حل کیا جا سکتا ہے، جو ماہر طبیعیات کا پسندیدہ طریقہ ہے۔ ہم ایسے حل تلاش کرتے ہیں جنہیں حاصل ضرب

$$\Psi(x,t)=\psi(x)\varphi(t) \tag{۲.۲}$$

کی صورت میں لکھنا ممکن ہو جہاں ψ صرف x اور φ صرف t کا تفاعل ہے۔ ظاہری طور پر حل پر ایسی شرط مسلط کرنا درست قدم نظر نہیں آتا ہے لیکن حقیقت میں یوں حاصل کردہ حل بہت کار آمد ثابت ہوتے ہیں۔ مزید (جیسا کہ علیحدگی متغیرات کیلئے عموماً ہوتا ہے) ہم علیحدگی متغیرات سے حاصل حلوں کو

[1] بار بار "مخفی توانائی تفاعل" کہنا انسان کو تھکا دیتا ہے، لہذا لوگ V کو صرف "مخفیہ" پکارتے ہیں، اگرچہ ایسا کرنے سے برقی مخفیہ کے ساتھ غلطی پیدا ہو سکتی ہے جو دراصل فی اکائی بار مخفی توانائی ہوتی ہے۔
[2] separation of variables

یوں آپس میں جوڑ سکتے ہیں کہ ان سے عمومی حل حاصل کرنا ممکن ہو۔ قابل علیحدگی حلوں کیلئے درج ذیل ہوگا

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \psi \frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{\mathrm{d}^2\,\Psi}{\mathrm{d}x^2}\varphi$$

جو سادہ تفرقی مساوات ہیں۔ ان کی مدد سے مساوات شروڈنگر درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$i\hbar\psi\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi}{\mathrm{d}x^2}\varphi + V\psi\varphi$$

دونوں اطراف کو $\psi\varphi$ سے تقسیم کرتے ہیں۔

$$i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi}{\mathrm{d}x^2} + V \tag{۲.۳}$$

اب بائیں ہاتھ تفاعل صرف t کا تابع ہے جبکہ دایاں ہاتھ تفاعل صرف x کا تابع[۳] ہے۔ یاد رہے اگر V از خود x اور t دونوں پر منحصر ہو تب ایسا نہیں ہوگا۔ صرف t تبدیل ہونے سے دایاں ہاتھ کسی صورت تبدیل نہیں ہو سکتا ہے جبکہ بایاں ہاتھ اور دایاں ہاتھ لازمی طور پر ایک دوسرے کے برابر ہیں لہٰذا t تبدیل کرنے سے بایاں ہاتھ بھی تبدیل نہیں ہوگا۔ اسی طرح صرف x تبدیل کرنے سے بایاں ہاتھ تبدیل نہیں ہو سکتا ہے اور چونکہ دونوں اطراف لازماً ایک دوسرے کے برابر ہیں لہٰذا x تبدیل کرنے سے دایاں ہاتھ بھی تبدیل نہیں ہوگا۔ ہم کہہ سکتے ہیں کہ دونوں اطراف ایک مستقل کے برابر ہوں گے۔ (یہاں تسلی کر لیں کہ آپ کو یہ دلائل سمجھ آ گئے ہیں۔) اس مستقل کو ہم علیحدگی مستقل کہتے ہیں جس کو ہم E سے ظاہر کرتے ہیں۔ یوں مساوات ۲.۳ درج ذیل لکھی جا سکتی ہے۔

$$i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = E$$

یا

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = -\frac{iE}{\hbar}\varphi \tag{۲.۴}$$

اور

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi}{\mathrm{d}x^2} + V = E$$

یا

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi}{\mathrm{d}x^2} + V\psi = E\psi \tag{۲.۵}$$

علیحدگی متغیرات نے ایک جزوی تفرقی مساوات کو دو سادہ تفرقی مساوات (مساوات ۲.۴ اور ۲.۴) میں علیحدہ کیا۔ ان میں سے پہلی (مساوات ۲.۴) کو حل کرنا بہت آسان ہے۔ دونوں اطراف کو $\mathrm{d}t$ سے ضرب دیتے ہوئے تکمل لیں۔ یوں عمومی حل $Ce^{-iEt/\hbar}$ حاصل ہوگا۔ چونکہ ہم حاصل ضرب $\psi\varphi$ میں دلچسپی رکھتے ہیں لہٰذا اہم مستقل C کو ψ میں ضم کر سکتے ہیں۔ یوں مساوات ۲.۴ کا حل درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar} \tag{۲.۶}$$

---

[۳] دھیان رہے کہ اگر V خود x کے ساتھ ساتھ t کا بھی تفاعل ہو تا تب ایسا ممکن نہ ہوتا۔

دوسری (مساوات ۲.۵) کو **غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات**[4] کہتے ہیں۔ پوری طرح مخفی توانائی V جانے بغیر ہم آگے نہیں بڑھ سکتے ہیں۔

اس باب کے باقی حصے میں ہم مختلف سادہ خفی توانائی کیلئے غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات حل کریں گے۔ ایسا کرنے سے پہلے آپ پوچھ سکتے ہیں کہ علیحدگی متغیرات کی کیا خاص بات ہے؟ بہر حال تابع وقت شروڈنگر مساوات کے زیادہ تر حل $\psi(x)\varphi(t)$ کی صورت میں نہیں لکھے جا سکتے۔ میں اس کے تین جوابات دیتا ہوں۔ ان میں سے دو طبعی اور ایک ریاضیاتی ہو گا۔

1) یہ **ساکن حالات** ہیں۔ اگرچہ تفاعل موج ازخود

$$\Psi(x,t)=\psi(x)e^{-iEt/\hbar} \tag{۲.۷}$$

وقت t کا تابع ہے، کثافت احتمال

$$\left|\Psi(x,t)\right|^2=\Psi^*\Psi=\psi^*e^{+iEt/\hbar}\psi e^{-iEt/\hbar}=\left|\psi(x)\right|^2 \tag{۲.۸}$$

وقت کا تابع نہیں ہے؛ تابعیت وقت کٹ جاتی[5] ہے۔ یہی کچھ کسی بھی حرکی متغیر کی توقعاتی قیمت کے حساب میں ہو گا۔ مساوات ۱.۳۶ تخفیف کے بعد درج ذیل صورت اختیار کرتی ہے۔

$$\langle Q(x,p)\rangle=\int\psi^*Q\left(x,\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\psi\,\mathrm{d}x \tag{۲.۹}$$

ہر توقعاتی قیمت وقت میں مستقل ہو گی؛ یہاں تک کہ ہم $\varphi(t)$ کو رد کر کے Ψ کی جگہ ψ استعمال کر کے وہی نتائج حاصل کر سکتے ہیں۔ اگرچہ بعض اوقات ψ کو ہی تفاعل موج پکارا جاتا ہے، لیکن ایسا کرنا حقیقتاً غلط ہے جس سے مسئلے کھڑے ہو سکتے ہیں۔ یہ ضروری ہے کہ آپ یاد رکھیں کہ اصل تفاعل موج ہر صورت تابع وقت ہو گا۔ بالخصوص $\langle x\rangle$ مستقل ہو گا لہٰذا (مساوات ۱.۳۳ کے تحت) $\langle p\rangle=0$ ہو گا۔ ساکن حال میں کبھی بھی کچھ نہیں ہوتا ہے۔

2) یہ غیر مبہم کل توانائی کے حالات ہوں گے۔ کلاسیکی میکانیات میں کل توانائی (حرکی جمع خفی) کو **ہیملٹنی**[6] کہتے ہیں جس کو H سے ظاہر کیا جاتا ہے۔

$$H(x,p)=\frac{p^2}{2m}+V(x) \tag{۲.۱۰}$$

اس کا مطابقتی ہیملٹنی عامل، قواعد و ضوابط کے تحت $p\to(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ پر کر کے درج ذیل[7] حاصل ہو گا۔

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x) \tag{۲.۱۱}$$

---

[4] time-independent Schrodinger align
[5] معمول پر لانے کے قابل حل کے لئے لازم ہے کہ E حقیقی ہو (سوال ۱.۲-ا دیکھیں)۔
[6] Hamiltonian
[7] جہاں غلط فہمی پیدا ہونے کی گنجائش ہو وہاں میں عامل پر ٹوپی (^) کا نشان ڈال کر اس کو اس تغیر پذیر متغیر سے علیحدہ رکھوں گا جس کو یہ ظاہر کرتا ہے۔

یوں غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات ۲.۵ درج ذیل روپ اختیار کریگی

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{۲.۱۲}$$

جس کے کل توانائی کی توقعاتی قیمت درج ذیل ہو گی۔

$$\langle H \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi \, \mathrm{d}x = E \int |\psi|^2 \, \mathrm{d}x = E \int |\Psi|^2 \, \mathrm{d}x = E \tag{۲.۱۳}$$

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ Ψ کی معمول زنی ψ کی معمول زنی کے مترادف ہے۔ مزید درج ذیل

$$\hat{H}^2\psi = \hat{H}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(E\psi) = E(\hat{H}\psi) = E^2\psi$$

کی بنا درج ذیل ہو گا۔

$$\langle H^2 \rangle = \int \psi^* \hat{H}^2 \psi \, \mathrm{d}x = E^2 \int |\psi|^2 \, \mathrm{d}x = E^2$$

یوں H کی تغیریت درج ذیل ہو گی۔

$$\sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0 \tag{۲.۱۴}$$

یاد رہے کہ $\sigma = 0$ کی صورت میں تمام ارکان کی قیمت ایک دوسری جیسی ہو گی (تقسیم کا پھیلاؤ صفر ہو گا)۔ نتیجتاً قابل علیحدگی حل کی ایک خاصیت یہ ہے کہ کل توانائی کی ہر پیمائش یقیناً E قیمت دے گی۔ (اسی کی بنا علیحدگی مستقل کو E سے ظاہر کیا گیا۔)

3) عمومی حل قابل علیحدگی حلوں کا **خطی جوڑ**[۸] ہو گا۔ جیسا ہم جلد دیکھیں گے، غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات (مساوات ۲.۵) لامتناہی تعداد کے حل $(\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \cdots)$ دے گا جہاں ہر ایک حل کے ساتھ ایک علیحدگی مستقل $(E_1, E_2, E_3, \cdots)$ منسلک ہو گا لہٰذا ہر **اجازتی توانائی**[۹] کا ایک منفرد تفاعل موج پایا جائے گا۔

$$\Psi_1(x,t) = \psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar}, \quad \Psi_2(x,t) = \psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}, \cdots$$

اب (جیسا کہ آپ خود تصدیق کر سکتے ہیں) تابع وقت شروڈنگر مساوات (مساوات ۲.۱) کی ایک خاصیت یہ ہے کہ اس کے حلوں کا ہر خطی جوڑ[۱۰] از خود ایک حل ہو گا۔ ایک بار قابل علیحدگی حل تلاش کرنے کے بعد ہم

---

[۸] linear combination

[۹] allowed energy

[۱۰] تفاعلات $f_1(z)$ ، $f_2(z)$ ، وغیرہ کے خطی جوڑ سے مراد درج ذیل روپ کا فقرہ ہے جہاں c_1 ، c_2 ، وغیرہ کوئی بھی (مخلوط) مستقل ہو سکتے ہیں۔

$$f(z) = c_1 f_1(z) + c_2 f_2(z) + \cdots$$

زیادہ عمومی حل درج ذیل روپ میں تیار کر سکتے ہیں۔

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \tag{۲.۱۵}$$

حقیقتاً تابع وقت شروڈنگر مساوات کا ہر حل درج بالا روپ میں لکھا جا سکتا ہے۔ ایسا کرنے کی خاطر ہمیں وہ مخصوص مستقل $(c_1, c_2, \cdots)$ تلاش کرنے ہوں گے جن کو استعمال کرتے ہوئے درج بالا حل (مساوات ۲.۱۵) ابتدائی شرائط مطمئن کرتا ہو۔ آپ آنے والے حصوں میں دیکھیں گے کہ ہم کس طرح یہ سب کچھ کر پائیں گے۔ باب ۳ میں ہم اس کو زیادہ مضبوط بنیادوں پر کھڑا کر پائیں گے۔ بنیادی نقطہ یہ ہے کہ ایک بار غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات حل کرنے کے بعد آپ کے مسائل ختم ہو جاتے ہیں۔ یہاں سے تابع وقت شروڈنگر مساوات کا عمومی حل حاصل کرنا آسان کام ہے۔

گزشتہ چار صفحات میں ہم بہت کچھ کہہ چکا ہے۔ میں ان کو مختصراً اور مختلف نقطہ نظر سے دوبارہ پیش کرتا ہوں۔ زیر غور عمومی مسئلہ کا غیر تابع وقت خفی توانائی $V(x)$ اور ابتدائی تفاعل موج $\Psi(x,0)$ دیے گئے ہوں گے۔ آپ کو مستقبل کے تمام t کیلئے $\Psi(x,t)$ تلاش کرنا ہو گا۔ ایسا کرنے کی خاطر آپ تابع وقت شروڈنگر مساوات (مساوات ۲.۱) حل کریں گے۔ پہلی قدم[11] میں آپ غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات (مساوات ۲.۵) حل کر کے لامتناہی تعداد کے حلوں کا سلسلہ $(\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \cdots)$ حاصل کریں گے جہاں ہر ایک کی منفرد توانائی $(E_1, E_2, E_3, \cdots)$ ہو گی۔ ٹھیک ٹھیک $\Psi(x,0)$ پر بیٹھنے کی خاطر آپ ان حلوں کا خطی جوڑ لیں گے۔

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \tag{۲.۱۶}$$

یہاں کمال کی بات یہ ہے کہ کسی بھی ابتدائی حال کے لئے آپ ہر صورت مستقل $c_1, c_2, c_3, \cdots$ دریافت کر پائیں گے۔ تفاعل موج $\Psi(x,t)$ تیار کرنے کی خاطر آپ ہر جزو کے ساتھ مختص تابعیت وقت $e^{-iE_n t/\hbar}$ چسپاں کریں گے۔

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \Psi_n(x,t) \tag{۲.۱۷}$$

چونکہ قابل علیحدگی حل

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} \tag{۲.۱۸}$$

کے تمام احتمال اور توقعاتی قیمتیں غیر تابع وقت ہوں گی لہٰذا یہ از خود ساکن حالات ہوں گے، تاہم عمومی حل (مساوات ۲.۱۷) یہ خاصیت نہیں رکھتا ہے؛ انفرادی ساکن حالات کی توانائیاں ایک دوسرے سے مختلف ہونے کی بنا $|\Psi|^2$ کا حساب کرتے ہوئے قوت نمائی ایک دوسرے کو حذف نہیں کرتی ہیں۔

[11] بعض اوقات آپ تابع وقت شروڈنگر مساوات کو بغیر علیحدگی متغیرات حل کر سکیں گے (سوال ۲.۴۹ اور سوال ۲.۵۰ دیکھیں)۔ تاہم ایسی صورتیں بہت کم پائی جاتی ہیں۔

مثال ۱.۲: فرض کریں ایک ذرہ ابتدائی طور پر دو ساکن حالات کا خطی جوڑ ہو:

$$\Psi(x,0) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)$$

(چیزوں کو سادہ رکھنے کی خاطر میں فرض کرتا ہوں کے مستقل c_n اور حالات $\psi_n(x)$ حقیقی ہیں۔) مستقبل وقت t کیلئے تفاعل موج $\Psi(x,t)$ کیا ہو گا؟ کثافت احتمال تلاش کریں اور ذرے کی حرکت بیان کریں۔

حل: اس کا پہلا حصہ آسان ہے

$$\Psi(x,t) = c_1\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$$

جہاں E_1 اور E_2 بالترتیب تفاعل ψ_1 اور ψ_2 کی مطابقتی توانائیاں ہیں۔ یوں درج ذیل ہو گا۔

$$\begin{aligned}\left|\Psi(x,t)\right|^2 &= \left(c_1\psi_1e^{iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2e^{iE_2t/\hbar}\right)\left(c_1\psi_1e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2e^{-iE_2t/\hbar}\right)\\ &= c_1^2\psi_1^2 + c_2^2\psi_2^2 + 2c_1c_2\psi_1\psi_2\cos[(E_2-E_1)t/\hbar]\end{aligned}$$

(میں نے نتیجہ کی سادہ صورت حاصل کرنے کی خاطر کلیہ یولر $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ استعمال کیا۔) ظاہری طور پر کثافت احتمال زاویائی تعدد $\left(\frac{E_2-E_1}{\hbar}\right)$ سے سائن نما ارتعاش کرتا ہے لہٰذا یہ ہر گز ساکن حال نہیں ہو گا۔ لیکن دھیان رہے کہ (ایک دوسرے سے مختلف) توانائیوں کے تفاعلات کے خطی جوڑ نے حرکت پیدا کیا۔ □

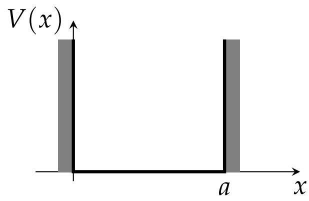
سوال ۱.۲: درج ذیل تین مسائل کا ثبوت پیش کریں۔

ا. قابل علیحدگی حلوں کے لئے علیحدگی مستقل E لازماً حقیقی ہو گا۔ اشارہ: مساوات ۷.۲ میں E کو $E_0 + i\Gamma$ لکھ کر (جہاں E اور Γ حقیقی ہیں)، دکھائیں کہ تمام t کے لئے مساوات ۲۰.۱ اس صورت کارآمد ہو گا جب Γ صفر ہو۔

ب. غیر تابع وقت تفاعل موج $\psi(x)$ ہر موقع پر حقیقی لیا جا سکتا ہے (جبکہ تفاعل موج $\Psi(x,t)$ لازماً مخلوط ہوتا ہے)۔ اس کا ہر گز یہ مطلب نہیں ہے کہ غیر تابع شروڈنگر مساوات کا ہر حل حقیقی ہو گا؛ بلکہ غیر حقیقی حل پائے جانے کی صورت میں اس حل کو ہمیشہ، ساکن حالات کا (اتنی ہی توانائی کا) خطی جوڑ لکھنا ممکن ہو گا۔ یوں بہتر ہو گا کہ آپ صرف حقیقی ψ ہی استعمال کریں۔ اشارہ: اگر کسی مخصوص E کے لئے $\psi(x)$ مساوات ۵.۲ کو مطمئن کرتا ہو تب اس کا مخلوط خطی جوڑ بھی اس مساوات کو مطمئن کرے گا اور یوں ان کے خطی جوڑ $(\psi + \psi^*)$ اور $i(\psi - \psi^*)$ بھی اس مساوات کو مطمئن کریں گے۔

ج. اگر $V(x)$ **جفت تفاعل** ہو یعنی $V(-x) = V(x)$ تب $\psi(x)$ کو ہمیشہ جفت یا طاق لیا جا سکتے ہو۔ اشارہ: اگر کسی مخصوص E کے لئے $\psi(x)$ مساوات ۵.۲ کو مطمئن کرتا ہو تب $\psi(-x)$ بھی اس مساوات کو مطمئن کرے گا اور یوں ان کے جفت اور طاق خطی جوڑ $\psi(x) \pm \psi(-x)$ بھی اس مساوات کو مطمئن کریں گے۔

سوال ۲.۲: دکھائیں کہ غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات کے ہر اس حل کے لئے، جس کو معمول پر لایا جا سکتا ہو، E کی قیمت لازماً $V(x)$ کی کم سے کم قیمت سے زیادہ ہو گی۔ اس کا کلاسیکی مماثل کیا ہو گا؟ اشارہ: مساوات ۵.۲ کو درج



شکل ۲.۱: لامتناہی چکور کنواں مخفیہ (مساوات ۲.۱۹)

ذیل روپ میں لکھ کر

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi$$

دکھائیں کہ $E < V_{\text{کمتر}}$ کی صورت میں ψ اور اس کے دو گنا تفرق کی علامتیں لازماً ایک دوسری جیسی ہوں گی؛ اب دلیل پیش کریں کہ ایسا تفاعل معمول پر لانے کے قابل نہیں ہو گا۔

۲.۲ لامتناہی چکور کنواں

درج ذیل فرض کریں (شکل ۲.۱)۔

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{دیگر صورت} \end{cases} \tag{۲.۱۹}$$

اس مخفی توانائی میں ایک ذرہ مکمل آزاد ہو گا، ماسوائے دونوں سروں یعنی $x = 0$ اور $x = a$ پر، جہاں ایک لامتناہی قوت اس کو فرار ہونے سے روکتی ہے۔ اس کا کلاسیکی نمونہ ایک کنواں میں ایک لامتناہی لچکدار گیند ہو سکتا ہے جو ہمیشہ کے لئے دیواروں سے ٹکرا کر دائیں سے بائیں اور بائیں سے دائیں حرکت کرتا رہتا ہو۔ (اگرچہ یہ ایک فرضی مخفی توانائی ہے، آپ اس کو اہمیت دیں۔ اگرچہ یہ بہت سادہ نظر آتا ہے البتہ اس کی سادگی کی بنا ہی یہ بہت ساری معلومات فراہم کرنے کے قابل ہے۔ ہم اس سے بار بار رجوع کریں گے۔)

کنواں سے باہر $\psi(x) = 0$ ہو گا (لہٰذا یہاں ذرہ پایا جانے کا احتمال صفر ہو گا)۔ کنواں کے اندر، جہاں $V = 0$ ہے، غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات (مساوات ۲.۵) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi \tag{۲.۲۰}$$

یا

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -k^2\psi, \qquad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{۲.۲۱}$$

(اس کو یوں لکھتے ہوئے میں خاموشی سے فرض کرتا ہوں کہ $E \geq 0$ ہو گا۔ ہم سوال ۲.۲ سے جانتے ہیں کہ $E < 0$ سے بات نہیں بنے گی۔) مساوات ۲.۲۱ کلاسیکی **سادہ ہارمونی مرتعش**[۱۲] کی مساوات ہے جس کا عمومی حل درج ذیل ہو گا

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \tag{۲.۲۲}$$

جہاں A اور B اختیاری مستقل ہیں۔ ان مستقلات کو مسئلہ کے **سرحدی شرائط**[۱۳] تعین کرتے ہیں۔ $\psi(x)$ کے موزوں سرحدی شرائط کیا ہونگے؟ عموماً ψ اور $\frac{d\psi}{dx}$ دونوں استمراری ہونگے، لیکن جہاں مخفیہ لامتناہی کو پہنچتا ہو وہاں صرف اول الذکر کا اطلاق ہو گا۔ (میں حصہ ۲.۵ میں ان سرحدی شرائط کو ثابت کروں گا اور $V = \infty$ کی صورت حال کو بھی دیکھوں گا۔ فی الحال مجھ پر یقین کرتے ہوئے میری کہی ہوئی بات مان لیں۔)

تفاعل $\psi(x)$ کے استمرار کی بنا درج ذیل ہو گا

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \tag{۲.۲۳}$$

تا کہ کنواں کے باہر اور کنواں کے اندر حل ایک دوسرے کے ساتھ جڑ سکیں۔ یہ ہمیں A اور B کے بارے میں کیا معلومات فراہم کرتی ہے؟ چونکہ

$$\psi(0) = A\sin 0 + B\cos 0 = B$$

ہے لہٰذا $B = 0$ اور درج ذیل ہو گا۔

$$\psi(x) = A\sin kx \tag{۲.۲۴}$$

یوں $\psi(a) = A\sin ka$ کی بنا یا $A = 0$ ہو گا (ایسی صورت میں ہمیں غیر اہم حل $\psi(x) = 0$ ملتا ہے جو معمول پر لانے کے قابل نہیں ہے) یا $\sin ka = 0$ ہو گا جس کے تحت درج ذیل ہو گا۔

$$ka = 0, \pm\pi, \pm 2\pi, \pm 3\pi, \cdots \tag{۲.۲۵}$$

اب $k = 0$ (بھی $\psi(x) = 0$ دیتا ہے جس) میں ہم دلچسپی نہیں رکھتے اور $\sin(-\theta) = -\sin(\theta)$ کی بنا k کی منفی قیمتیں کوئی نیا حل نہیں دیتی ہیں لہٰذا ہم منفی کی علامت کو A میں ضم کر سکتے ہیں۔ یوں منفرد حل درج ذیل ہوں گے۔

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{۲.۲۶}$$

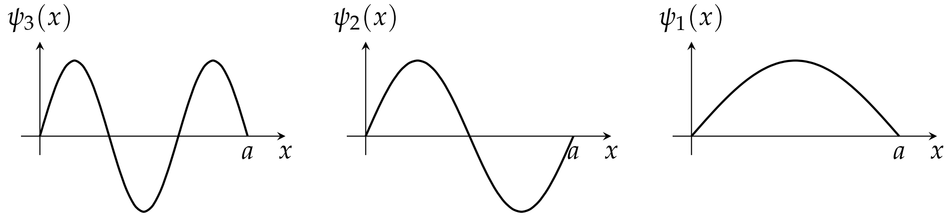
دلچسپ بات یہ ہے کہ $x = a$ پر سرحدی شرط مستقل A تعین نہیں کرتا ہے بلکہ اس کی بجائے مستقل k تعین کرتے ہوئے E کی اجازتی قیمتیں تعین کرتا ہے:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{۲.۲۷}$$

---

[۱۲] simple harmonic oscillator

[۱۳] boundary conditions



شکل ۲.۲: لامتناہی چکور کنواں کے ابتدائی تین ساکن حالات (مساوات ۲.۲۸)۔

کلاسیکی صورت کے برعکس لامتناہی چکور کنواں میں کوانٹم ذرہ ہر ایک توانائی کا حامل نہیں ہو سکتا ہے بلکہ اس کی توانائی کی قیمت کو درج بالا مخصوص **اجازتی**[14] قیمتوں[15] میں سے ہونا ہوگا۔ مستقل A کی قیمت حاصل کرنے کے لئے ψ کو معمول پر لانا ہوگا:

$$\int_0^a |A|^2 \sin^2(kx)\,\mathrm{d}x = |A|^2 \frac{a}{2} = 1, \quad \implies \quad |A|^2 = \frac{2}{a}$$

یہ A کی صرف مقدار دیتی ہے، تاہم مثبت حقیقی جذر $A = \sqrt{2/a}$ منتخب کرنا بہتر ہوگا (کیونکہ A کا زاویہ کوئی طبعی معنی نہیں رکھتا ہے)۔ اس طرح کنواں کے اندر شروڈنگر مساوات کے حل درج ذیل ہوں گے۔

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{۲.۲۸}$$

میرے قول کو پورا کرتے ہوئے، (ہر مثبت عدد صحیح n کے عوض ایک حل دے کر) غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات نے حلوں کا ایک لامتناہی سلسلہ دیا ہے۔ ان میں سے اولین چند کو شکل ۲.۲ میں ترسیم کیا گیا ہے جو لمبائی a کے دھاگے پر ساکن امواج کی طرح نظر آتے ہیں۔ تفاعل ψ_1 جو **زمینی حال**[16] کہلاتا ہے کی توانائی کم سے کم ہے۔ باقی حالات جن کی توانائیاں n^2 کے براہ راست بڑھتی ہیں **ہیجانی حالات**[17] کہلاتے ہیں۔ تفاعلات $\psi_n(x)$ چند اہم اور دلچسپ خواص رکھتے ہیں:

۱. کنواں کے وسط کے لحاظ سے یہ تفاعلات باری باری **جفت** اور **طاق** ہیں۔ ψ_1 جفت ہے، ψ_2 طاق ہے، ψ_3 جفت ہے، وغیرہ وغیرہ۔[18]

---

[14] allowed

[15] دھیان رہے کہ غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات کو حل کرتے ہوئے سرحدی شرائط مسلط کرنے سے اجازتی توانائیوں کی کوانٹازنی شرط محض تکنیکی وجوہات کی بنا ابھرتا ہے۔

[16] ground state

[17] excited states

[18] اس تشاکلی کو زیادہ وضاحت سے پیش کرنے کی خاطر بعض مصنفین کنواں کے مرکز کو مبدا پر رکھتے ہیں (یوں کنواں $-a$ تا $+a$ رکھا جاتا ہے)۔ تب جفت تفاعلات کوسائن جبکہ طاق تفاعلات سائن ہوں گے۔ سوال ۲.۳۶ دیکھیں۔

ب. توانائی بڑھاتے ہوئے ہر اگلے حال کے عقدوں[19] (عبور صفر) کی تعداد میں ایک (1) کا اضافہ ہو گا۔ (چونکہ آخری نقاط کے صفر کو نہیں گنا جاتا ہے لہٰذا) ψ_1 میں کوئی عقدہ نہیں پایا جاتا ہے، ψ_2 میں ایک پایا جاتا ہے، ψ_3 میں دو پائے جاتے ہیں، وغیرہ وغیرہ۔

ج. یہ تمام درج ذیل نقطہ نظر سے باہمی عمودی[20] ہیں جہاں $m \neq n$ ہے۔

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\,\mathrm{d}x = 0 \tag{۲.۲۹}$$

ثبوت:

$$\begin{aligned}
\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\,\mathrm{d}x &= \frac{2}{a}\int_0^a \sin\Big(\frac{m\pi}{a}x\Big)\sin\Big(\frac{n\pi}{a}x\Big)\,\mathrm{d}x\\
&= \frac{1}{a}\int_0^a \Big[\cos\Big(\frac{m-n}{a}\pi x\Big) - \cos\Big(\frac{m+n}{a}\pi x\Big)\Big]\,\mathrm{d}x\\
&= \Big\{\frac{1}{(m-n)\pi}\sin\Big(\frac{m-n}{a}\pi x\Big) - \frac{1}{(m+n)\pi}\sin\Big(\frac{m+n}{a}\pi x\Big)\Big\}\Big|_0^a\\
&= \frac{1}{\pi}\Big\{\frac{\sin[(m-n)\pi]}{(m-n)} - \frac{\sin[(m+n)\pi]}{(m+n)}\Big\} = 0
\end{aligned}$$

دھیان رہے کہ $m = n$ کی صورت میں درج بالا دلیل درست نہیں ہو گا؛ (کیا آپ بتا سکتے ہیں کہ ایسی صورت میں دلیل کیوں ناقابل قبول ہو گا۔) ایسی صورت میں معمول پر لانے کا عمل ہمیں بتاتا ہے کہ تکمل کی قیمت 1 ہے۔ در حقیقت، عمودیت اور معمول زنی کو ایک فقرے میں سمویا جا سکتا ہے:[21]

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\,\mathrm{d}x = \delta_{mn} \tag{۲.۳۰}$$

جہاں δ_{mn} **کرونیکر ڈیلٹا**[22] کہلاتا ہے جس کی تعریف درج ذیل ہے۔

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0 & m \neq n\\ 1 & m = n\end{cases} \tag{۲.۳۱}$$

ہم کہتے ہیں کہ مذکورہ بالا (تمام) ψ **معیاری عمودی**[23] ہیں۔

د. یہ **مکمل**[24] ہیں، جس سے مراد ہے کہ کسی بھی دوسرے تفاعل $f(x)$ کو ان کا خطی جوڑ لکھا جا سکتا ہے:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\Big(\frac{n\pi}{a}x\Big) \tag{۲.۳۲}$$

---

[19] nodes
[20] orthogonal
[21] یہاں تمام ψ حقیقی ہیں لہٰذا ψ_m پر $*$ ڈالنے کی ضرورت نہیں ہے، لیکن مستقبل میں استعمال کے نقطہ نظر سے ایسا کرنا ایک اچھی عادت ہے۔
[22] Kronecker delta
[23] orthonormal
[24] complete

میں تفاعلات $\sin \frac{n\pi x}{a}$ کی مکملیت کو یہاں ثابت نہیں کروں گا، البتہ اعلیٰ علم الاحصاء کے ساتھ واقفیت کی صورت میں آپ مساوات ۲.۳۲ کو $f(x)$ کا **فوریئر تسلسل**[۲۵] پہچان پائیں گے۔ یہ حقیقت، کہ ہر تفاعل کو فوریئر تسلسل کی صورت میں پھیلا کر لکھا جا سکتا ہے، بعض اوقات **مسئلہ ڈرشلے**[۲۶] کہلاتا ہے۔[۲۷]

کسی بھی دیے گئے تفاعل $f(x)$ کے لئے عددی سروں c_n کو $\{\psi_n\}$ کی معیاری عمودیت کی مدد سے حاصل کیا جاتا ہے۔ مساوات ۲.۳۲ کے دونوں اطراف کو $\psi_m(x)$ سے ضرب دے کر تکمل لیں:

$$\int \psi_m(x)^* f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{mn} = c_m \tag{۲.۳۳}$$

(آپ دیکھ سکتے ہیں کہ کرونیکر ڈیلٹا مجموعے میں تمام اجزاء کو ختم کر دیتا ہے ماسوائے اس جزو کو جس کے لئے $n = m$ ہو۔) یوں تفاعل $f(x)$ کے پھیلاو کے n ویں جزو کا عددی سر درج ذیل ہو گا۔[۲۸]

$$c_n = \int \psi_n(x)^* f(x)\,\mathrm{d}x \tag{۲.۳۴}$$

درج بالا چار خواص انتہائی طاقتور ہیں جو صرف لامتناہی چکور کنواں کے لیے مخصوص نہیں ہیں۔ پہلا خواص ہر اس صورت میں کارآمد ہو گا جب مخفیہ تشاکلی ہو؛ دوسرا، مخفیہ کی شکل و صورت سے قطع نظر، ایک عالمگیر خواص ہے۔ عمودیت بھی کافی عمومی خاصیت ہے، جس کا ثبوت میں باب ۳ میں پیش کروں گا۔ ان تمام مخفیہ کے لئے جن کو آپ کا (ممکنہ) سامنا ہو سکتا ہے کے لئے مکملیت کارآمد ہو گی، لیکن اس کا ثبوت کافی لمبا اور پیچیدہ ہے؛ جس کی بنا عموماً ماہر طبیعیات یہ ثبوت دیکھے بغیر، اس کو مان لیتے ہیں۔

لامتناہی چکور کنواں کے ساکن حال (مساوات ۲.۱۸) درج ذیل ہوں گے۔

$$\Psi_n(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t} \tag{۲.۳۵}$$

میں نے دعویٰ کیا (مساوات ۲.۱۷) کہ تابع وقت شروڈنگر مساوات کا عمومی ترین حل، ساکن حالات کا خطی جوڑ ہو گا۔

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t} \tag{۲.۳۶}$$

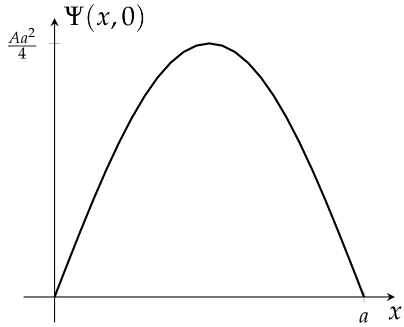
---

[۲۵] Fourier series

[۲۶] Dirichlet's theorem

[۲۷] تفاعل $f(x)$ میں متناہی تعداد کے عدم استمرار (چھلانگ) پائے جا سکتے ہیں۔

[۲۸] آپ یہاں نقلی متغیر کے لئے m یا n یا کوئی تیسرا حرف استعمال کر سکتے ہیں (بس اتنا خیال رکھیں کہ مساوات کی دونوں اطراف ایک ہی حرف استعمال کیا جائے)، اور ہاں یاد رہے کہ یہ حرف "کسی مثبت عدد صحیح" کو ظاہر کرتا ہے۔



شکل ۲.۳: ابتدائی تفاعل موج برائے مثال ۲.۲۔

(اگر آپ کو اس حل پر شک ہو تو اس کی تصدیق ضرور کیجیے گا۔) مجھے صرف اتنا دکھانا ہو گا کہ کسی بھی ابتدائی تفاعل موج $\psi(x,0)$ پر اس حل کو بٹھانے کے لیے موزوں عددی سر c_n درکار ہوں گے:

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n(x)$$

تفاعلات ψ کی مکملیت (جس کی تصدیق یہاں مسئلہ ڈرشلے کرتی ہے) اس کی ضمانت دیتی ہے کہ میں ہر $\psi(x,0)$ کو ہر صورت یوں بیان کر سکتا ہوں، اور ان کی معیاری عمودیت کی بنا c_n کو فوریئر تسلسل سے حاصل کیا جا سکتا ہے:

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\Psi(x,0)\,\mathrm{d}x \tag{۲.۳۷}$$

آپ نے دیکھا: دی گئی ابتدائی تفاعل موج $\Psi(x,0)$ کے لئے ہم سب سے پہلے پھیلاو کے عددی سروں c_n کو مساوات ۲.۳۷ سے حاصل کرتے ہیں۔ اس کے بعد انہیں مساوات ۲.۳۶ میں پر کر $\Psi(x,t)$ حاصل کرتے ہیں۔ تفاعل موج جانتے ہوئے دلچسپی کی کسی بھی حرکی مقدار کا حساب، باب ۱ میں مستعمل تراکیب استعمال کرتے ہوئے، کیا جا سکتا ہے۔ یہی ترکیب کسی بھی مخفیہ کے لیے کارآمد ہو گا؛ صرف ψ کی قیمتیں اور اجازتی توانائیاں یہاں سے مختلف ہوں گی۔

مثال ۲.۲: لامتناہی چکور کنواں میں ایک ذرے کا ابتدائی تفاعل موج درج ذیل ہے جہاں A ایک مستقل ہے (شکل ۲.۳)۔

$$\Psi(x,0) = Ax(a-x), \qquad (0 \leq x \leq a)$$

کنواں سے باہر $\psi = 0$ ہے۔ $\Psi(x,t)$ تلاش کریں۔

حل: ہم پہلے $\Psi(x,0)$ کو معمول پر لاتے ہوئے

$$1 = \int_0^a \left|\Psi(x,0)\right|^2 \mathrm{d}x = |A|^2\int_0^a x^2(a-x)^2\,\mathrm{d}x = |A|^2\,\frac{a^5}{30}$$

A تعین کرتے ہیں:

$$A = \sqrt{\frac{30}{a^5}}$$

مساوات ۲.۳۷ کے تحت n واں عددی سر درج ذیل ہو گا۔

$$\begin{aligned}
c_n &= \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sqrt{\frac{30}{a^5}} x(a-x)\,\mathrm{d}x \\
&= \frac{2\sqrt{15}}{a^3}\left[a\int_0^a x\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x - \int_0^a x^2 \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x\right] \\
&= \frac{2\sqrt{15}}{a^3}\Bigg\{a\left[\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) - \frac{ax}{n\pi}\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right]\Bigg|_0^a \\
&\quad - \left[2\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 x\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) - \frac{(n\pi x/a)^2 - 2}{(n\pi/a)^3}\cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right]\Bigg|_0^a\Bigg\} \\
&= \frac{2\sqrt{15}}{a^3}\left[-\frac{a^3}{n\pi}\cos(n\pi) + a^3\frac{(n\pi)^2-2}{(n\pi)^3}\cos(n\pi) + a^3\frac{2}{(n\pi)^3}\cos(0)\right] \\
&= \frac{4\sqrt{15}}{(n\pi)^3}[\cos(0) - \cos(n\pi)] \\
&= \begin{cases} 0 & n \text{ جفت} \\ 8\sqrt{15}/(n\pi)^3 & n \text{ طاق} \end{cases}
\end{aligned}$$

یوں درج ذیل ہو گا (مساوات ۲.۳۶)۔

$$\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{30}{a}}\left(\frac{2}{\pi}\right)^3 \sum_{n=1,3,5\cdots} \frac{1}{n^3}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)e^{-in^2\pi^2\hbar t/2ma^2}$$

□

غیر محتاط بات چیت میں ہم کہتے ہیں کہ Ψ میں ψ_n کی مقدار کو c_n ظاہر کرتا ہے۔ بعض اوقات ہم کہتے ہیں کہ n ویں ساکن حال میں ایک ذرہ پائے جانے کا احتمال $|c_n|^2$ ہے جو درست نہیں چونکہ ذرہ حال Ψ میں نا کہ حال ψ_n میں پایا جاتا ہے؛ مزید تجربہ گاہ میں آپ کسی ایک ذرہ کو کسی ایک مخصوص حال میں نہیں دیکھ پاتے بلکہ آپ کسی مشہود کی پیمائش کرتے ہو جس کا جواب ایک عدد کی صورت میں سامنے آتا ہے۔ جیسا آپ باب ۳ میں دیکھیں گے، توانائی کی پیمائش سے E_n قیمت حاصل ہونے کا احتمال $|c_n|^2$ ہو گا۔ (کوئی بھی پیمائش، "اجازتی" قیمتوں میں سے کوئی ایک دے گی، اسی لئے انہیں اجازتی قیمتیں کہتے ہیں، اور کوئی مخصوص قیمت E_n حاصل ہونے کا احتمال $|c_n|^2$ ہو گا۔)

یقیناً ان تمام احتمالات کا مجموعہ 1 ہو گا

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1 \tag{۲.۳۸}$$

جس کا ثبوت Ψ کی عمود زنی سے حاصل ہو گا (چونکہ تمام c_n غیر تابع وقت ہیں لہٰذا میں $t = 0$ پر ثبوت پیش کرتا ہوں۔ آپ با آسانی اس ثبوت کو عمومیت دے کر کسی بھی t کے لئے ثبوت پیش کر سکتے ہیں)۔

$$\begin{aligned}
1 = \int \left|\Psi(x,0)\right|^2 \mathrm{d}x &= \int \Big(\sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m(x) \Big)^* \Big(\sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \Big) \,\mathrm{d}x \\
&= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} c_m^* c_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) \,\mathrm{d}x \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_m^* c_n \delta_{mn} = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2
\end{aligned}$$

(یہاں بھی m پر مجموعہ لینے میں کرونیکر ڈیلٹا جزو $m = n$ کو چنتا ہے۔)

مزید، توانائی کی توقعاتی قیمت لازماً درج ذیل ہو گی

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n \tag{۲.۳۹}$$

جس کی بلاواسطہ تصدیق کی جا سکتی ہے: غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات کہتی ہے

$$H\psi_n = E_n \psi_n \tag{۲.۴۰}$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\begin{aligned}
\langle H \rangle = \int \Psi^* H \Psi \,\mathrm{d}x &= \int \Big(\sum c_m \psi_m \Big)^* H \Big(\sum c_n \psi_n \Big) \,\mathrm{d}x \\
&= \sum \sum c_m^* c_n E_n \int \psi_m^* \psi_n \,\mathrm{d}x = \sum |c_n|^2 E_n
\end{aligned}$$

دھیان رہے کہ کسی ایک مخصوص توانائی کے حصول کا احتمال غیر تابع وقت ہو گا اور یوں H کی توقعاتی قیمت بھی غیر تابع وقت ہو گی۔ کوانٹم میکانیات میں **بقا توانائی**[۲۹] کی یہ ایک مثال ہے۔

مثال ۲.۳: ہم نے دیکھا کہ مثال ۲.۲ میں ابتدائی تفاعل موج (شکل ۲.۳) زمینی حال ψ_1 (شکل ۲.۲) کے ساتھ قریبی مشابہت رکھتا ہے۔ یوں ہم توقع کرتے ہیں کہ $|c_1|^2$ غالب ہو گا۔ یقیناً ایسا ہی ہے۔

$$|c_1|^2 = \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \right)^2 = 0.998555\cdots$$

---

[۲۹] conservation of energy

باقی تمام عددی سر مل کر فرق دیتے ہیں:[۳۰]

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = \left(\frac{8\sqrt{15}}{\pi^3}\right)^2 \sum_{n=1,3,5,\ldots}^{\infty} \frac{1}{n^6} = 1$$

اس مثال میں توانائی کی توقعاتی قیمت ہماری توقعات کے عین مطابق درج ذیل ہے۔

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1,3,5,\ldots}^{\infty} \left(\frac{8\sqrt{15}}{n^3\pi^3}\right)^2 \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \frac{480\hbar^2}{\pi^4 ma^2} \sum_{n=1,3,5,\ldots}^{\infty} \frac{1}{n^4} = \frac{5\hbar^2}{ma^2}$$

یہ $E_1 = \pi^2\hbar^2/2ma^2$ کے بہت قریب، ہیجان حل حالتوں کی شمول کی بنا معمولی زیادہ ہے۔ □

سوال ۲.۳: دکھائیں کہ لامتناہی چکور کنواں کے لئے $E = 0$ یا $E < 0$ کی صورت میں غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات کا کوئی بھی قابل قبول حل نہیں پایا جاتا ہے۔ (یہ سوال ۲.۲ میں دیے گئے عمومی مسئلے کی ایک خصوصی صورت ہے، لیکن اس بار شروڈنگر مساوات کو صریحاً حل کرتے ہوئے دکھائیں کہ آپ سرحدی شرائط پر پورا نہیں اتر سکتے ہیں۔)

سوال ۲.۴: لامتناہی چکور کنواں کے n ویں ساکن حال کیلئے $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle p^2 \rangle$ ، σ_x اور σ_p تلاش کریں۔ تصدیق کریں کہ اصول عدم یقینیت مطمئن ہوتا ہے۔ کونسا حال عدم یقینیت کی حد کے قریب ترین ہوگا؟

سوال ۲.۵: لامتناہی چکور کنواں میں ایک ذرے کا ابتدائی تفاعل موج اولین دو ساکن حالات کے برابر حصوں کا مرکب ہے۔

$$\Psi(x,0) = A[\psi_1(x) + \psi_2(x)]$$

ا. $\Psi(x,0)$ کو معمول پر لائیں۔ (یعنی A تلاش کریں۔ آپ ψ_1 اور ψ_2 کی معیاری عمودیت بروئے کار لاتے ہوئے با آسانی ایسا کر سکتے ہیں۔ یاد رہے کہ $t = 0$ پر Ψ کو معمول پر لانے کے بعد آپ یقین رکھ سکتے ہیں کہ یہ معمول شدہ ہی رہے گا۔ اگر آپ کو شک ہے، جزو-ب کا نتیجہ حاصل کرنے کے بعد اس کی صریحاً تصدیق کریں۔)

ب. $\Psi(x,t)$ اور $\left|\Psi(x,t)\right|^2$ تلاش کریں۔ موخر الذکر کو وقت کے سائن نما تفاعل کی صورت میں لکھیں، جیسا مثال ۲.۱ میں کیا گیا۔ نتائج کو سادہ صورت میں لکھنے کی خاطر $\omega \equiv \frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}$ لیں۔

ج. $\langle x \rangle$ تلاش کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ یہ وقت کے ساتھ ارتعاش کرتا ہے۔ اس ارتعاش کی زاویائی تعدد کتنی ہوگی؟ ارتعاش کا حیطہ کیا ہوگا؟ (اگر آپ کا حیطہ $\frac{a}{2}$ سے زیادہ ہو تب آپ کو جیل بھیجنے کی ضرورت ہوگی۔)

---

[۳۰] آپ درج ذیل تسلسل کسی ریاضی کی کتاب سے دیکھ سکتے ہیں۔

$$\frac{1}{1^6} + \frac{1}{3^6} + \frac{1}{5^6} + \cdots = \frac{\pi^6}{960}$$
$$\frac{1}{1^4} + \frac{1}{3^4} + \frac{1}{5^4} + \cdots = \frac{\pi^4}{96}$$

د. $\langle p \rangle$ تلاش کریں (اور اس پہ زیادہ وقت صرف نہ کریں)۔

ھ. اس ذرے کی توانائی کی پیمائش سے کون کون سی قیمتیں متوقع ہیں؟ اور ہر ایک قیمت کا احتمال کتنا ہو گا؟ H کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔ اس کی قیمت کا موازنہ E_1 اور E_2 کے ساتھ کریں؟

سوال ۲.۶: اگرچہ تفاعل موج کا مجموعی زاویائی مستقل کسی با معنی طبعی اہمیت کا حامل نہیں ہے (چونکہ یہ کسی بھی قابل پیمائش مقدار میں کٹ جاتا ہے) لیکن مساوات ۲.۱۷ میں عددی سروں کے اضافی زاویائی مستقل اہمیت کے حامل ہیں۔ مثال کے طور پر ہم سوال ۲.۵ میں ψ_1 اور ψ_2 کے اضافی زاویائی مستقل تبدیل کرتے ہیں:

$$\Psi(x,0) = A[\psi_1(x) + e^{i\phi}\psi_2(x)]$$

جہاں ϕ کوئی مستقل ہے۔ $\Psi(x,t)$، $\left|\Psi(x,t)\right|^2$ اور $\langle x \rangle$ تلاش کر کے ان کا موازنہ پہلے حاصل شدہ نتائج کے ساتھ کریں۔ بالخصوص $\phi = \pi/2$ اور $\phi = \pi$ کی صورتوں پر غور کریں۔

سوال ۲.۷: لامتناہی چکور کنواں میں ایک ذرے کا ابتدائی تفاعل موج درج ذیل ہے۔[۳۱]

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} Ax, & 0 \le x \le a/2 \\ A(a-x), & a/2 \le x \le a \end{cases}$$

ا. $\Psi(x,0)$ کا خاکہ کھینچیں اور مستقل A کی قیمت تلاش کریں۔

ب. $\Psi(x,t)$ تلاش کریں۔

ج. توانائی کی پیمائش کا نتیجہ E_1 ہونے کا احتمال کتنا ہو گا؟

د. توانائی کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔

سوال ۲.۸: ایک لامتناہی چکور کنواں، جس کی چوڑائی a ہے، میں کمیت m کا ایک ذرہ کنواں کے بائیں حصے سے ابتدا ہوتا ہے اور یہ $t = 0$ پر بائیں نصف حصے کے کسی بھی نقطے پر ہو سکتا ہے۔

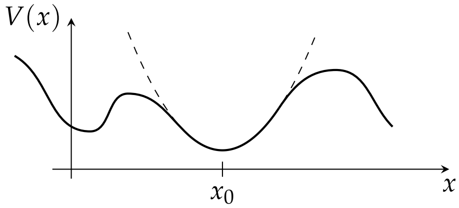
ا. اس کی ابتدائی تفاعل موج $\Psi(x,0)$ تلاش کریں۔ (فرض کریں کہ یہ حقیقی ہے اور اسے معمول پر لانا نا بھولیے گا۔)

ب. پیمائش توانائی کا نتیجہ $\pi^2\hbar^2/2ma^2$ ہونے کا احتمال کیا ہو گا؟

سوال ۲.۹: لمحہ $t = 0$ پر مثال ۲.۲ کے تفاعل موج کیلئے H کی توقعاتی قیمت تکمل کے ذریعہ حاصل کریں۔

$$\langle H \rangle = \int \Psi(x,0)^* \hat{H}\, \Psi(x,0)\, \mathrm{d}x$$

[۳۱] اصولی طور پر ابتدائی تفاعل موج کی شکل و صورت پر کوئی پابندی عائد نہیں ہے، تاہم لازم ہے کہ یہ معمول پر لانے کے قابل ہو۔ بالخصوص، ضروری نہیں کہ $\Psi(x,0)$ کا استمراری تفرق پایا جاتا ہو؛ بلکہ تفاعل کا از خود استمراری ہونا بھی ضروری نہیں ہے۔ ہاں، $\Psi(x,0)$ کے دوم تفرق کی عدم وضاحت کی بنا، ایسی صورتوں میں $\int \Psi(x,0)^* H \Psi(x,0)\,\mathrm{d}x$ سے $\langle H \rangle$ کی قیمت کے حصول میں آپ کو تکنیکی مسائل در پیش ہو سکتے ہیں۔ سوال ۲.۹ میں ایسا کرنا اس لئے ممکن ہوا کہ عدم استمرار آخری سروں پر پائے گئے جہاں تفاعل از خود صفر ہے۔ سوال ۲.۷ طرح کے مسائل کو حل کرنا آپ سوال ۲.۴۸ میں دیکھیں گے۔



شکل ۲.۴: اختیاری مخفیہ کے مقامی کم سے کم قیمت نقطہ کی پڑوس میں قطع مکافی تخمین (نقطہ دار ترسیم)۔

مثال ۲.۳ میں مساوات ۲.۳۹ کی مدد سے حاصل کردہ نتیجے کے ساتھ موازنہ کریں۔ دھیان رہے کیونکہ H غیر تابع وقت ہے لہٰذا $t = 0$ لینے سے نتیجے پر کوئی اثر نہیں ہو گا۔

۲.۳ ہارمونی مسر تعش

کلاسیکی ہارمونی مسر تعش ایک لچک دار اسپرنگ جس کا مقیاس لچک k ہو اور کمیت m پر مشتمل ہوتا ہے۔ کمیت کی حرکت **قانون ہک**[۳۲]

$$F = -kx = m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}$$

کے تحت ہو گی جہاں رگڑ کو نظر انداز کیا گیا ہے۔ اس کا حل

$$x(t) = A\sin(\omega t) + B\cos(\omega t)$$

ہو گا جہاں

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{۲.۴۱}$$

ارتعاش کا (زاویائی) تعدد ہے۔ مخفی توانائی

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \tag{۲.۴۲}$$

ہو گی جس کی ترسیم قطع مکافی ہے۔

حقیقت میں کامل ہارمونی مسر تعش نہیں پایا جاتا ہے۔ اگر آپ اسپرنگ کو زیادہ کھینچیں تو وہ ٹوٹ جائے گا اور قانون ہک اس سے بہت پہلے غیر کارآمد ہو چکا ہو گا۔ تاہم عملاً کوئی بھی مخفیہ، مقامی کم سے کم نقطہ کی پڑوس میں تخمیناً قطع مکافی ہو گا (شکل ۲.۴)۔ مخفی توانائی $V(x)$ کے کم سے کم نقطہ x_0 کے لحاظ سے $V(x)$ کو **ٹیلر تسلسل**[۳۳] کے لحاظ

[۳۲] Hooke's law
[۳۳] Taylor series

سے پھیلا کر

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \cdots$$

اس سے $V(x_0)$ منفی کر کے (ہم $V(x)$ سے کوئی بھی مستقل بغیر خطرہ و فکر منفی کر سکتے ہیں کیونکہ ایسا کرنے سے قوت تبدیل نہیں ہو گا) اور یہ جانتے ہوئے کہ $V'(x_0) = 0$ ہو گا (چونکہ x_0 کم سے کم نقطہ ہے)، ہم تسلسل کے بلند رتبی ارکان رد کرتے ہوئے (جو $(x - x_0)$ کی قیمت کم ہونے کی صورت میں قابل نظر انداز ہونگے) درج ذیل حاصل کرتے ہیں

$$V(x) \cong \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2$$

جو نقطہ x_0 پر ایک ایسی سادہ ہارمونی ارتعاش بیان کرتا ہے جس کا موثر مقیاس لچک $k = V''(x_0)$ ہو۔[34] یہی وہ وجہ ہے جس کی بنا سادہ ہارمونی مرتعش اتنا اہم ہے: تقریباً ہر وہ ارتعاشی حرکت جس کا حیطہ کم ہو تخمیناً سادہ ہارمونی ہو گا۔

کوانٹم میکانیات میں ہمیں مخفیہ

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{۲.۴۳}$$

کے لیے شروڈنگر مساوات حل کرنی ہو گی (جہاں روایتی طور پر مقیاس لچک کی جگہ کلاسیکی تعدد (مساوات ۲.۴۱) استعمال کی جاتی ہے)۔ جیسا کہ ہم دیکھ چکے ہیں، اتنا کافی ہو گا کہ ہم غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi \tag{۲.۴۴}$$

حل کریں۔ اس مسئلے کو حل کرنے کے لیے دو بالکل مختلف طریقے اپنائے جاتے ہیں۔ پہلی میں تفرقی مساوات کو "طاقت کے بل بوتے پر" **طاقتی تسلسل**[35] کے ذریعہ حل کرنے کی ترکیب استعمال کی جاتی ہے، جو دیگر مخفیہ کے لیے بھی کارآمد ثابت ہوتا ہے (اور جسے استعمال کرتے ہوئے ہم باب ۴ میں کولمب مخفیہ کے لیے حل تلاش کریں گے)۔ دوسری ترکیب ایک شیطانی الجبرائی تکنیک ہے جس میں **عاملین سیڑھی** استعمال ہوتے ہیں۔ میں آپ کی واقفیت پہلے الجبرائی تکنیک کے ساتھ پیدا کرتا ہوں جو زیادہ سادہ، زیادہ دلچسپ (اور جلد حل دیتا) ہے۔ اگر آپ طاقتی تسلسل کی ترکیب یہاں استعمال نہ کرنا چاہیں تو آپ ایسا کر سکتے ہیں لیکن کہیں نہ کہیں آپکو یہ ترکیب سیکھنی ہو گی۔

---

[34] چونکہ ہم فرض کر رہے ہیں کہ x_0 کم سے کم نقطہ ہے لہٰذا $V''(x_0) \geq 0$ ہو گا۔ صرف اس نایاب صورت میں ارتعاش تخمینی طور پر بھی سادہ ہارمونی نہیں ہو گا جب $V''(x_0) = 0$ ہو۔

[35] power series

۲.۳.۱ الجبرائی ترکیب

ہم مساوات ۲.۴۴ کو زیادہ معنی خیز روپ میں لکھ کر ابتدا کرتے ہیں

$$\frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2]\psi = E\psi \tag{۲.۴۵}$$

جہاں $p \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ معیار حرکت کا عامل ہے۔ بنیادی طور پر ہیملٹنی

$$H = \frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2] \tag{۲.۴۶}$$

کو کو اجزائے ضربی لکھنے کی ضرورت ہے۔ اگر یہ اعداد ہوتے تب ہم یوں لکھ سکتے تھے۔

$$u^2 + v^2 = (iu + v)(-iu + v)$$

البتہ یہاں بات اتنی سادہ نہیں ہے چونکہ p اور x عاملین ہیں اور عاملین عموماً **مقلوب** نہیں ہوتے ہیں (یعنی آپ xp سے مراد px نہیں لے سکتے ہیں)۔ اس کے باوجود یہ ہمیں درج ذیل مقداروں پر غور کرنے پر آمادہ کرتا ہے

$$a\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp ip + m\omega x) \tag{۲.۴۷}$$

(جہاں قوسین کے باہر جزو ضربی لگانے سے آخری نتیجہ خوبصورت نظر آئے گا)۔

آئیں دیکھیں حاصل ضرب a_-a_+ کیا ہو گا؟

$$\begin{aligned} a_-a_+ &= \frac{1}{2\hbar m\omega}(ip + m\omega x)(-ip + m\omega x) \\ &= \frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2 + (m\omega x)^2 - im\omega(xp - px)] \end{aligned}$$

اس میں متوقع اضافی جزو $(xp - px)$ پایا جاتا ہے جس کو ہم x اور p کا **مقلب**[۳۶] کہتے ہیں اور جو ان کی آپس میں مقلوب نہ ہونے کی پیمائش ہے۔ عمومی طور پر عامل A اور عامل B کا مقلب (جسے چکور قوسین میں لکھا ہے) درج ذیل ہو گا۔

$$[A, B] \equiv AB - BA \tag{۲.۴۸}$$

اس علامتیت کے تحت درج ذیل ہو گا۔

$$a_-a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2 + (m\omega x)^2] - \frac{i}{2\hbar}[x, p] \tag{۲.۴۹}$$

---

[۳۶] commutator

ہمیں x اور عددی p کا مقلب دریافت کرنا ہو گا۔ انتباہ: عاملین پر ذہنی کام کرنا عموماً غلطی کا سبب بنتا ہے۔ بہتر ہو گا کہ عاملین پرکھنے کے لیے آپ انہیں تفاعل $f(x)$ عمل کرنے کے لئے پیش کریں۔ آخر میں اس پرکھی تفاعل کو رد کر کے آپ صرف عاملین پر مبنی مساوات حاصل کر سکتے ہیں۔ موجودہ صورت میں درج ذیل ہو گا۔

$$[x,p]f(x) = \left[x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{\mathrm{d}x}(f) - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{\mathrm{d}x}(xf)\right] = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} - x\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} - f\right) = -i\hbar f(x) \tag{۲.۵۰}$$

پرکھی تفاعل (جو اپنا کام کر چکا) کو رد کرتے ہوئے درج ذیل ہو گا۔

$$[x,p] = i\hbar \tag{۲.۵۱}$$

یہ خوبصورت نتیجہ جو بار بار سامنے آتا ہے **باضابطہ مقلبیت رشتہ**[۳۷] کہلاتا ہے۔

اسے کے استعمال سے مساوات ۲.۴۹ درج ذیل روپ

$$a_-a_+ = \frac{1}{\hbar\omega}H + \frac{1}{2} \tag{۲.۵۲}$$

یا

$$H = \hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2}\right) \tag{۲.۵۳}$$

اختیار کرتی ہے۔ آپ نے دیکھا کہ ہیملٹنی کو ٹھیک اجزائے ضربی کی صورت میں نہیں لکھا جا سکتا اور دائیں ہاتھ اضافی $-\frac{1}{2}$ ہو گا۔ یاد رہے گا یہاں a_+ اور a_- کی ترتیب بہت اہم ہے۔ اگر آپ a_+ کو بائیں طرف رکھیں تو درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$a_+a_- = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2} \tag{۲.۵۴}$$

بالخصوص درج ذیل ہو گا۔

$$[a_-,a_+] = 1 \tag{۲.۵۵}$$

یوں ہیملٹنی کو درج ذیل بھی لکھا جا سکتا ہے۔

$$H = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right) \tag{۲.۵۶}$$

ہارمونی مرتعش کی شروڈنگر مساوات کو $a_\pm$ کی صورت میں درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\hbar\omega\left(a_\pm a_\mp \pm \frac{1}{2}\right) = E\psi \tag{۲.۵۷}$$

---

[۳۷] canonical commutation relation

(اسی طرح کی مساوات میں آپ بالائی علامتیں ایک ساتھ پڑھتے ہو یا زیریں علامتیں ایک ساتھ پڑھتے ہو۔)

ہم ایک اہم موڑ پر ہیں۔ میں دعویٰ کرتا ہوں اگر توانائی E کی شروڈنگر مساوات کو ψ مطمئن کرتا ہو $(H\psi = E\psi)$ تب توانائی $(E + \hbar\omega)$ کی شروڈنگر مساوات کو $a_+\psi$ مطمئن کرے گا: $H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$

ثبوت:

$$
\begin{aligned}
H(a_+\psi) &= \hbar\omega(a_+a_- + \frac{1}{2})(a_+\psi) = \hbar\omega(a_+a_-a_+ + \frac{1}{2}a_+)\psi \\
&= \hbar\omega a_+(a_-a_+ + \tfrac{1}{2})\psi = a_+\left[\hbar\omega(a_+a_- + 1 + \tfrac{1}{2})\psi\right] \\
&= a_+(H + \hbar\omega)\psi = a_+(E + \hbar\omega)\psi = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)
\end{aligned}
$$

(میں نے دوسری لکیر میں مساوات ۲.۵۵ استعمال کرتے ہوئے a_-a_+ کی جگہ $a_+a_- + 1$ استعمال کیا ہے۔ دھیان رہے اگرچہ a_+ اور a_- کی ترتیب اہمیت کا حامل ہے، $a\pm$ اور کسی بھی مستقل، مثلاً $\hbar$ ، ω اور E، کی ترتیب اہم نہیں ہے۔ ایک عامل ہر مستقل کے ساتھ مقلوب ہو گا۔)

اسی طرح حل $a_-\psi$ کی توانائی $(E - \hbar\omega)$ ہو گی۔

$$
\begin{aligned}
H(a_-\psi) &= \hbar\omega(a_-a_+ - \tfrac{1}{2})(a_-\psi) = \hbar\omega a_-\,(a_+a_- - \tfrac{1}{2})\psi \\
&= a_-\left[\hbar\omega(a_-a_+ - 1 - \tfrac{1}{2})\psi\right] = a_-(H - \hbar\omega)\psi = a_-(E - \hbar\omega)\psi \\
&= (E - \hbar\omega)(a_-\psi)
\end{aligned}
$$

یوں ہم نے ایک ایسی خودکار ترکیب دریافت کر لی ہے جس سے، کسی ایک حل کو جانتے ہوئے، بالائی اور زیریں توانائی کے نئے حل دریافت کیے جا سکتے ہیں۔ چونکہ $a\pm$ کے ذریعے ہم توانائی میں اوپر چڑھ یا نیچے اتر سکتے ہیں لہٰذا انہیں ہم **عاملین سیڑھی**[۳۸] پکارتے ہیں: a_+ **عامل رفعت**[۳۹] اور a_- **عامل تقلیل**[۴۰] ہے۔ حالات کی "سیڑھی" کو شکل ۲.۵ میں دکھایا گیا ہے۔

ذرا رکیے! عامل تقلیل کے بار بار استعمال سے آخر کار ایسا حل حاصل ہو گا جس کی توانائی صفر سے کم ہو گی (جو سوال ۲.۲ میں پیش عمومی مسئلہ کے تحت ناممکن ہے۔) نئے حالات حاصل کرنے کی خودکار ترکیب کسی نہ کسی نقطہ پر لازماً ناکامی کا شکار ہو گی۔ ایسا کیوں کر ہو گا؟ ہم جانتے ہیں کہ $a_-\psi$ شروڈنگر مساوات کا ایک نیا حل ہو گا، تاہم اس کی ضمانت نہیں دی جا سکتی ہے کہ یہ معمول پر لانے کے قابل بھی ہو گا؛ یہ صفر ہو سکتا ہے یا اس کا مربع تکمل لامتناہی ہو سکتا ہے۔ عملاً اول الذکر ہو گا: سیڑھی کے سب سے نچلے پایہ (جس کو ہم ψ_0 کہتے ہیں) پر درج ذیل ہو گا۔

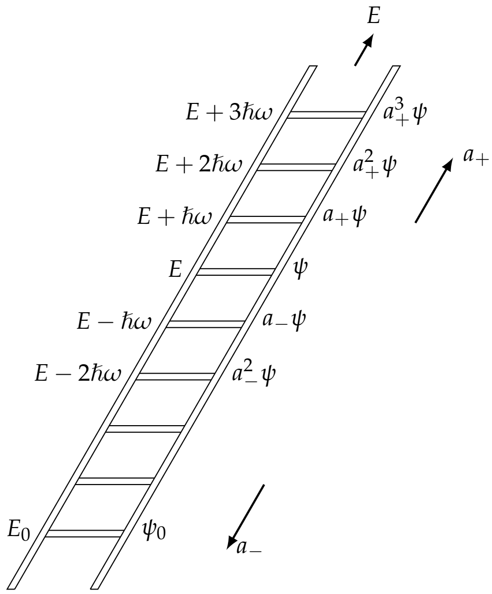
$$a_-\psi_0 = 0 \tag{۲.۵۸}$$

---

[۳۸] ladder operators

[۳۹] raising operator

[۴۰] lowering operator



شکل ۲.۵: ہارمونی مرتعش کے حالات کی "سیڑھی"۔

اس کو استعمال کرتے ہوئے ہم $\psi_0(x)$ تعین کر سکتے ہیں:

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + m\omega x)\psi_0 = 0$$

سے تفرقی مساوات

$$\frac{\mathrm{d}\psi_0}{\mathrm{d}x} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0$$

لکھی جا سکتی ہے جسے با آسانی حل کیا جا سکتا ہے:

$$\int \frac{\mathrm{d}\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}\int x\,\mathrm{d}x \implies \ln\psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 + C$$

(C مستقل ہے۔) لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\psi_0(x) = Ae^{\frac{-m\omega}{2\hbar}x^2}$$

ہم اس کو یہیں معمول پر لاتے ہیں:

$$1 = |A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\omega x^2/\hbar}\,\mathrm{d}x = |A|^2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

لہٰذا $A^2=\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}$ اور درج ذیل ہو گا۔

$$\psi_0(x)=\Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{1/4}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{۲.۵۹}$$

اس حال کی توانائی دریافت کرنے کی خاطر ہم اس کو (مساوات ۲.۵۷ روپ کی) شروڈنگر مساوات میں پر کر کے

$$\hbar\omega(a_+a_-+\tfrac{1}{2})\psi_0=E_0\psi_0$$

یہ جانتے ہوئے کہ $a_-\psi_0=0$ ہو گا درج ذیل حاصل کرتے ہیں۔

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega \tag{۲.۶۰}$$

سیڑھی کے نچلا پایہ (جو کوانٹم مرتعش کا زمینی حال ہے) پر پیر رکھ کر، بار بار عامل رفعت استعمال کر کے ہیجان حالات دریافت کیے جا سکتے ہیں[۱۴] جہاں ہر قدم پر توانائی میں $\hbar\omega$ کا اضافہ ہو گا۔

$$\psi_n(x)=A_n(a_+)^n\psi_0(x),\qquad E_n=(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega \tag{۲.۶۱}$$

یہاں A_n مستقل معمول زنی ہے۔ یوں ψ_0 پر عامل رفعت بار بار استعمال کرتے ہوئے ہم (اصولاً) ہارمونی مرتعش کے تمام ساکن حالات دریافت کر سکتے ہیں۔ صریحاً ایسا کیے بغیر ہم تمام اجازتی توانائیاں تعین کر پائے ہیں۔

مثال ۲.۴: ہارمونی مرتعش کا پہلا ہیجان حال تلاش کریں۔

حل: ہم مساوات ۲.۶۱ استعمال کرتے ہیں۔

$$\begin{aligned}\psi_1(x)&=A_1a_+\psi_0=\frac{A_1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\Big(-\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+m\omega x\Big)\Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{1/4}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\\&=A_1\Big(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\Big)^{1/4}\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}xe^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\end{aligned} \tag{۲.۶۲}$$

ہم اس کو قلم و کاغذ کے ساتھ معمول پر لاتے ہیں۔

$$\int|\psi_1|^2\,\mathrm{d}x=|A_1|^2\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\Big(\frac{2m\omega}{\hbar}\Big)\int_{-\infty}^{\infty}x^2e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\,\mathrm{d}x=|A_1|^2$$

جیسا آپ دیکھ سکتے ہیں $A_1=1$ ہو گا۔

---

[۱۴] ہارمونی مرتعش کی صورت میں روایتی طور پر، عمومی طریقہ کار سے ہٹ کر، حالات کی شمار $n=1$ کی بجائے $n=0$ سے شروع کی جاتی ہے۔ ظاہر ہے ایسی صورت میں مساوات ۲.۱۷ طرز کی مساواتوں میں مجموعہ کی زیریں حد کو بھی تبدیل کیا جائے گا۔

اگرچہ میں یہاں اس مرتبہ عامل رفعت استعمال کر کے $\psi_5 0$ حاصل نہیں کرنا چاہوں گا، اصولی طور پر، معمول زنی کے علاوہ، مساوات ۲.۶۱ اپنا کام خوش اسلوبی سے کرتی ہے۔ □

آپ الجبرائی طریقے سے ہیجان حالات کو معمول پر بھی لا سکتے ہیں لیکن اس کے لیے بہت محتاط چلنا ہو گا لہٰذا دھیان رکھیے گا۔ ہم جانتے ہیں کہ $a \pm \psi_n$ اور $\psi_{n\pm 1}$ ایک دوسرے کے راست متناسب ہیں۔

$$a_+\psi_n = c_n\psi_{n+1}, \qquad a_-\psi_n = d_n\psi_{n-1} \tag{۲.۶۳}$$

تناسبی مستقل c_n اور d_n کیا ہوں گے؟ پہلے جان لیں کہ کسی بھی تفاعلات $f(x)$ اور $g(x)$ کے لیے درج ذیل ہو گا۔ (ظاہر ہے کہ تکملات کا موجود ہونا لازمی ہے، جس کا مطلب ہے کہ $\pm\infty$ پر $f(x)$ اور $g(x)$ کو لازماً صفر پہنچنا ہو گا۔)

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_\pm g)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} (a_\mp f)^* g\,\mathrm{d}x \tag{۲.۶۴}$$

(خطی الجبرا کی زبان میں $a\mp$ اور $a\pm$ ایک دوسرے کے **ہرمشی جوڑی دار**[۴۲] ہیں۔)

ثبوت:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_\pm g)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\int_{-\infty}^{\infty} f^*\Big(\mp\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + m\omega x\Big)g\,\mathrm{d}x$$

تکمل بالحصص کے ذریعے $\int f^*\big(\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}\big)\,\mathrm{d}x$ سے $-\int\big(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\big)^* g\,\mathrm{d}x$ حاصل ہو گا (جہاں $\pm\infty$ پر $f(x)$ اور $g(x)$ کی قیمتیں صفر تک پہنچنے کی بنا سرحدی اجزاء صفر ہوں گے) لہٰذا

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_\pm g)\,\mathrm{d}x &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\int_{-\infty}^{\infty}\Big[\Big(\pm\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + m\omega x\Big)f\Big]^* g\,\mathrm{d}x\\
&= \int_{-\infty}^{\infty}(a_\mp f)^* g\,\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

اور بالخصوص درج ذیل ہو گا۔

$$\int_{-\infty}^{\infty}(a_\pm\psi_n)^*(a_\pm\psi_n)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty}(a_\mp a_\pm\psi_n)^*\psi_n\,\mathrm{d}x$$

مساوات ۲.۵۷ اور مساوات ۲.۶۱ استعمال کرتے ہوئے

$$a_+a_-\psi_n = n\psi_n, \qquad a_-a_+\psi_n = (n+1)\psi_n \tag{۲.۶۵}$$

ہو گا لہٰذا درج ذیل ہوں گے۔

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty}(a_+\psi_n)^*(a_+\psi_n)\,\mathrm{d}x &= |c_n|^2\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_{n+1}|^2\,\mathrm{d}x = (n+1)\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n|^2\,\mathrm{d}x\\
\int_{-\infty}^{\infty}(a_-\psi_n)^*(a_-\psi_n)\,\mathrm{d}x &= |d_n|^2\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_{n-1}|^2\,\mathrm{d}x = n\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n|^2\,\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

[۴۲] Hermitian conjugate

چونکہ ψ_n اور $\psi_{n\pm1}$ معمول شدہ ہیں، لہٰذا $|c_n|^2 = n+1$ اور $|d_n|^2 = n$ ہوں گے۔ یوں درج ذیل ہو گا۔

$$a_+\psi_n = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}, \qquad a_-\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1} \tag{۲.۶۶}$$

اسی طرح درج ذیل ہوں گے۔

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= a_+\psi_0, \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}a_+\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_+)^2\psi_0,\\
\psi_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}}a_+\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3\cdot 2}}(a_+)^3\psi_0, \quad \psi_4 = \frac{1}{\sqrt{4}}a_+\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{4\cdot 3\cdot 2}}(a_+)^4\psi_0,
\end{aligned}$$

دیگر تفاعلات بھی اسی طرح حاصل کیے جا سکتے ہیں۔ صاف ظاہر ہے کہ درج ذیل ہو گا۔

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a_+)^n\psi_0 \tag{۲.۶۷}$$

اس کے تحت مساوات ۲.۶۱ میں مستقل معمول زنی $A_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}$ ہو گا۔ (بالخصوص $A_1 = 1$ ہو گا جو مثال ۲.۴ میں ہمارے نتیجے کی تصدیق کرتا ہے۔)

لامتناہی چکور کنواں کے ساکن حالات کی طرح ہارمونی مسر تعش کے ساکن حالات ایک دوسرے کے عمودی ہیں۔

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\psi_n\,\mathrm{d}x = \delta_{mn} \tag{۲.۶۸}$$

ہم ایک بار مساوات ۲.۶۵ اور دو بار مساوات ۲.۶۴ استعمال کر کے پہلے a_+ اور بعد میں a_- اپنی جگہ سے ہلا کر اس کا ثبوت پیش کر سکتے ہیں۔

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*(a_+a_-)\psi_n\,\mathrm{d}x &= n\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\psi_n\,\mathrm{d}x\\
&= \int_{-\infty}^{\infty}(a_-\psi_m)^*(a_-\psi_n)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty}(a_+a_-\psi_m)^*\psi_n\,\mathrm{d}x\\
&= m\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\psi_n\,\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

جب تک $m = n$ نہ ہو $\int\psi_m^*\psi_n\,\mathrm{d}x$ لازماً صفر ہو گا۔ معیاری عمودی ہونے کا مطلب ہے کہ ہم $\psi(x,0)$ کو ساکن حالات کا خطی جوڑ (مساوات ۲.۱۶) لکھ کر خطی جوڑ کے عددی سر مساوات ۲.۳۴ سے حاصل کر سکتے ہیں اور پیمائش سے توانائی کی قیمت E_n حاصل ہونے کا احتمال $|c_n|^2$ ہو گا۔

مثال ۲.۵: ہارمونی مسر تعش کے n ویں حال کی مخفی توانائی کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔

حل:

$$\langle V\rangle = \left\langle\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*x^2\psi_n\,\mathrm{d}x$$

اس قسم کے تکملات جن میں x یا p کے طاقت پائے جاتے ہوں کے حصول کے لیے یہ ایک بہترین طریقہ کار ہے: متغیرات x اور p کو مساوات ۲.۴۷ میں پیش کی گئی تعریفات استعمال کرتے ہوئے عاملین رفعت اور تقلیل کی روپ میں لکھیں:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a_+ + a_-); \qquad p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(a_+ - a_-) \tag{۲.۶۹}$$

اس مثال میں ہم x^2 میں دلچسپی رکھتے ہیں:

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}[(a_+)^2 + (a_+a_-) + (a_-a_+) + (a_-)^2]$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\langle V\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}\int \psi_n^*\Big[(a_+)^2 + (a_+a_-) + (a_-a_+) + (a_-)^2\Big]\psi_n \,\mathrm{d}x$$

اب (ماسوائے معمول زنی کے) $(a_+)^2\psi_n$ تفاعل ψ_{n+2} کو ظاہر کرتا ہے جو ψ_n کو عمودی ہے۔ یہی کچھ $(a_-)^2\psi_n$ کے بارے میں بھی کہا جا سکتا ہے جو ψ_{n-2} کا راست متناسب ہے۔ یوں یہ اجزاء خارج ہو جاتے ہیں، اور ہم مساوات ۲.۶۵ استعمال کر کے باقی دو کی قیمتیں حاصل کر سکتے ہیں:

$$\langle V\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}(n+n+1) = \frac{1}{2}\hbar\omega\Big(n+\frac{1}{2}\Big)$$

جیسا آپ نے دیکھا مخفی توانائی کی توقعاتی قیمت کل توانائی کی بالکل نصف ہے (باقی نصف حصہ یقیناً حر کی توانائی ہے)۔ جیسا ہم بعد میں دیکھیں گے یہ ہارمونی مرتعش کی ایک مخصوص خاصیت ہے۔ □

سوال ۲.۱۰:

ا. $\psi_2(x)$ تیار کریں۔

ب. ψ_0 ، ψ_1 ، ψ_2 کا خاکہ کھینچیں۔

ج. ψ_0 ، ψ_1 ، ψ_2 کی عمودیت کی تصدیق تکمل لے کر صریحاً کریں۔ اشارہ: تفاعلات کی جفت پن اور طاق پن کو بروئے کار لاتے ہوئے حقیقتاً صرف ایک تکمل حل کرنا ہو گا۔

سوال ۲.۱۱:

ا. حالات ψ_0 (مساوات ۲.۵۹) اور ψ_1 (مساوات ۲.۶۲) کے لئے صریح تکملات لے کر $\langle x\rangle$ ، $\langle p\rangle$ ، $\langle x^2\rangle$ ، اور $\langle p^2\rangle$ کی قیمتیں دریافت کریں۔ تبصرہ: ہارمونی مرتعش کے مسائل میں متغیر $\xi \equiv \sqrt{m\omega/\hbar}x$ اور مستقل $\alpha \equiv (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$ متعارف کرتے ہوئے مسئلہ سادہ صورت اختیار کرتا ہے۔

ب. عدم یقینیت کے حصول کو ان حالات کے لئے پر کھیں۔

ج. ان حالات کے لیے اوسط حرکی توانائی $\langle T\rangle$ اور اوسط مخفی توانائی $\langle V\rangle$ کی قیمتیں حاصل کریں۔(آپکو نیا تکمل حل کرنے کی اجازت نہیں ہے!) کیا ان کا مجموعہ آپ کی توقع کے مطابق ہے؟

سوال ۲.۱۲: ہارمونی مرتعش کے n ویں ساکن حال کے لئے مثال ۲.۵ کی ترکیب استعمال کرتے ہوئے $\langle x\rangle$ ، $\langle p\rangle$ ، $\langle x^2\rangle$ ، $\langle p^2\rangle$ اور $\langle T\rangle$ تلاش کریں۔تصدیق کریں کہ اصول عدم یقینیت مطمئن ہوتا ہے۔

سوال ۲.۱۳: ہارمونی مرتعش مخفی قوہ میں ایک ذرہ درج ذیل حال سے ابتداء کرتا ہے۔

$$\Psi(x,0) = A[3\psi_0(x) + 4\psi_1(x)]$$

ا. A تلاش کریں۔

ب. $\Psi(x,t)$ اور $\left|\Psi(x,t)\right|^2$ تیار کریں۔

ج. $\langle x\rangle$ اور $\langle p\rangle$ تلاش کریں۔ان کے کلاسیکی تعدد پر ارتعاش پذیر ہونے پر حیران مت ہوں: اگر میں $\psi_1(x)$ کی بجائے $\psi_2(x)$ دیتا تب جواب کیا ہوتا؟ تصدیق کریں کہ اس تفاعل موج کے لیے مسئلہ اہرنفسٹ (مساوات ۱.۳۸) مطمئن ہوتا ہے؟

د. اس ذرے کی توانائی کی پیمائش میں کون کون سی قیمتیں متوقع ہیں اور ان کا احتمال کیا ہوں گے؟

سوال ۲.۱۴: ہارمونی مرتعش کے زمینی حال میں ایک ذرہ کلاسیکی تعدد ω پر ارتعاش پذیر ہے۔ ایک دم مقیاس لچک 4 گنا ہو جاتا ہے لہٰذا $\omega' = 2\omega$ ہو گا جبکہ ابتدائی تفاعل موج تبدیل نہیں ہو گا (یقیناً ہیملٹنی تبدیل ہونے کے بنا Ψ اب مختلف انداز سے ارتقا پائے گا)۔ اس کا احتمال کتنا ہے کہ توانائی کی پیمائش اب بھی $\hbar\omega/2$ قیمت دے؟ پیمائشی نتیجہ $\hbar\omega$ حاصل ہونے کا احتمال کیا ہو گا؟

۲.۳.۲ تحلیلی ترکیب

ہم اب ہارمونی مرتعش کی شروڈنگر مساوات کو دوبارہ لوٹ کر

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi \tag{۲.۷۰}$$

اور اس تو تسلسل کی ترکیب سے بلا واسطہ حل کرتے ہیں۔درج ذیل غیر بعدی متغیر متعارف کرنے سے چیزیں کچھ صاف نظر آتی ہیں۔

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \tag{۲.۷۱}$$

شروڈنگر مساوات اب درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} = (\xi^2 - K)\psi \tag{۲.۷۲}$$

جہاں K توانائی ہے جس کی اکائی $\frac{1}{2}\hbar\omega$ ہے۔

$$K \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \tag{۲.۷۳}$$

ہم نے مساوات ۲.۷۲ کو حل کرنا ہو گا۔ ایسا کرتے ہوئے ہمیں K اور (یوں E) کی "اجازتی" قیمتیں بھی حاصل ہوں گی۔ ہم اس صورت سے شروع کرتے ہیں جہاں ξ کی قیمت (یعنی x کی قیمت) بہت بڑی ہو۔ ایسی صورت میں ξ^2 کی قیمت K کی قیمت سے بہت زیادہ ہو گی لہٰذا مساوات ۲.۷۲ درج ذیل روپ اختیار کرے گی

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} \approx \xi^2\psi \tag{۲.۷۴}$$

جس کا تخمینی حل درج ذیل ہے (اس کی تصدیق کیجیے گا)۔

$$\psi(\xi) \approx Ae^{-\xi^2/2} + Be^{+\xi^2/2} \tag{۲.۷۵}$$

اس میں B کا جزو معمول پر لانے کے قابل نہیں ہے (چونکہ $|x| \to \infty$ کرنے سے اس کی قیمت بے قابو بڑھتی ہے)۔ طبعی طور پر قابل قبول حل درج ذیل متقارب صورت کا ہو گا۔

$$\psi(\xi) \to (\quad)e^{-\xi^2/2} \qquad (\text{کی بڑی قیمت کے لئے } \xi) \tag{۲.۷۶}$$

اس سے ہمیں خیال آتا ہے کہ ہمیں قوت نما حصہ کو "چھیلنا" چاہیے،

$$\psi(\xi) = h(\xi)e^{-\xi^2/2} \tag{۲.۷۷}$$

اور توقع کرنی چاہیے کہ جو کچھ باقی رہ جائے، $h(\xi)$، اس کی صورت $\psi(\xi)$ سے سادہ ہو۔[۴۳] ہم مساوات ۲.۷۷ کے تفرقات

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}\xi} = \Big(\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}\xi} - \xi h\Big)e^{-\xi^2/2}$$

اور

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} = \Big(\frac{\mathrm{d}^2h}{\mathrm{d}\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}\xi} + (\xi^2 - 1)h\Big)e^{-\xi^2/2}$$

[۴۳] اگرچہ ہم نے مساوات ۲.۷۷ لکھتے ہوئے تخمین سے کام لیا، اس کے بعد باقی تمام بالکل ٹھیک ٹھیک ہے۔ تفرقی مساوات کے طاقتی تسلسل حل میں متقاربی جزو کا چھیلنا عموماً پہلا قدم ہوتا ہے۔

لیتے ہیں لہٰذا شروڈنگر مساوات (مساوات ۲.۷۲) درج ذیل صورت اختیار کرتی ہے۔

$$\frac{\mathrm{d}^2 h}{\mathrm{d}\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}\xi} + (K-1)h = 0 \tag{۲.۷۸}$$

ہم ترکیب فروبنیوس[۴۴] استعمال کرتے ہوئے مساوات ۲.۷۸ کا حل ξ کے طاقتی تسلسل کی صورت میں حاصل کرتے ہیں۔

$$h(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty} a_j\xi^j \tag{۲.۷۹}$$

اس تسلسل کے جزو در جزو تفرقات

$$\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}\xi} = a_1 + 2a_2\xi + 3a_3\xi^2 + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty} ja_j\xi^{j-1}$$

اور

$$\frac{\mathrm{d}^2 h}{\mathrm{d}\xi^2} = 2a_2 + 2\cdot 3a_3\xi + 3\cdot 4a_4\xi^2 + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty}(j+1)(j+2)a_{j+2}\xi^j$$

لیتے ہیں۔ انہیں مساوات ۲.۷۸ میں پر کر کہ درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\sum_{j=0}^{\infty}[(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j]\xi^j = 0 \tag{۲.۸۰}$$

طاقتی تسلسل پھیلاو کے یکتائی کی بنا ξ کے ہر طاقت کا عددی سر صفر ہو گا:

$$(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j = 0$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$a_{j+2} = \frac{(2j+1-K)}{(j+1)(j+2)}a_j \tag{۲.۸۱}$$

یہ **کلیہ توالی**[۴۵] شروڈنگر مساوات کا مکمل مبدل ہے جو a_0 سے ابتداء کرتے ہوئے تمام جفت عددی سر

$$a_2 = \frac{(1-K)}{2}a_0, \quad a_4 = \frac{(5-K)}{12}a_2 = \frac{(5-K)(1-K)}{24}a_0, \cdots$$

---

[۴۴] Frobenius method

[۴۵] recursion formula

اور a_1 سے شروع کر کے تمام طاق عددی سر پیدا کرتا ہے۔

$$a_3 = \frac{(3-K)}{6}a_1, \quad a_5 = \frac{(7-K)}{20}a_3 = \frac{(7-K)(3-K)}{120}a_1, \cdots$$

ہم مکمل حل کو درج ذیل لکھتے ہیں

$$h(\xi) = h_{\text{جفت}}(\xi) + h_{\text{طاق}}(\xi) \tag{۲.۸۲}$$

جہاں

$$h_{\text{جفت}}(\xi) = a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + \cdots$$

متغیر ξ کا جفت تفاعل ہے جو از خود a_0 پر منحصر ہے اور

$$h_{\text{طاق}}(\xi) = a_1\xi + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \cdots$$

طاق تفاعل ہے جو a_1 پر منحصر ہے۔ مساوات ۲.۸۱ دو اختیاری مستقلات a_0 اور a_1 کی صورت میں ξ تعین کرتی ہے، جیسا ہم دو درجی تفرقی مساوات کے حل سے توقع کرتے ہیں۔

البتہ اس طرح حاصل حلوں میں سے کئی معمول پر لانے کے قابل نہیں ہوں گے۔ اس کی وجہ یہ ہے کہ j کی بہت بڑی قیمت کے لئے کلیہ توالی (تخمیناً) درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے

$$a_{j+2} \approx \frac{2}{j}a_j$$

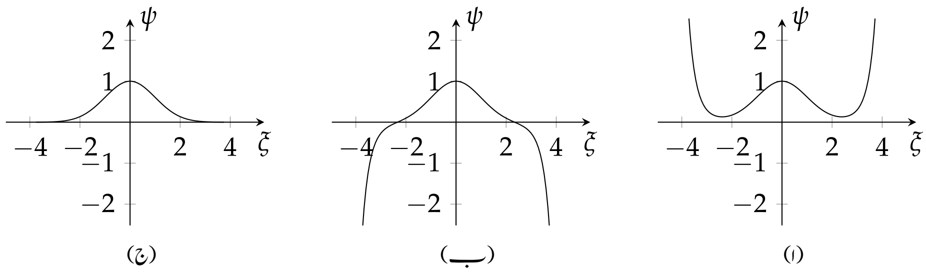
جس کا تخمینی حل

$$a_j \approx \frac{C}{(j/2)!}$$

ہو گا جہاں C ایک مستقل ہے اور اس سے (بڑی ξ کے لیے جہاں بڑی طاقتیں غالب ہوں گی) درج ذیل حاصل ہو گا،

$$h(\xi) \approx C\sum\frac{1}{(j/2)!}\xi^j \approx C\sum\frac{1}{j!}\xi^{2j} \approx Ce^{\xi^2}$$

اور اب اگر h کی قیمت e^{ξ^2} کے لحاظ سے بڑھے تب ψ (جس کو ہم حاصل کرنا چاہتے ہیں) $e^{\xi^2/2}$ (مساوات ۲.۷۷) کے لحاظ سے بڑھے گا جو وہی متقاربی روپ ہے جو ہم نہیں چاہتے۔ اس مشکل سے نکلنے کا ایک ہی طریقہ ہے۔ معمول پر لانے کے قابل حل کے لئے لازم ہے کہ اس کا طاقتی تسلسل اختتام پذیر ہو۔ لازمی طور پر j کی ایک ایسی بلند ترین قیمت، n، پائی جائے گی جو $a_{n+2} = 0$ دیتی ہو (یوں $h_{\text{جفت}}$ تسلسل یا $h_{\text{طاق}}$ تسلسل اختتام پذیر ہو گا؛ جبکہ دوسرا لازماً



شکل ۲.۶: مساوات شروڈنگر کی (ا) $E = 0.49\hbar\omega$، (ب) $E = 0.51\hbar\omega$ اور (ج) $E = \hbar\omega$ صورت میں حل۔

ابتداء سے ہی صفر ہو گا؛ جفت n کی صورت میں $a_1 = 0$ ہو گا جبکہ طاق n کی صورت میں $a_0 = 0$ ہو گا)۔ یوں قابل قبول طبعی حل کے لیے مساوات ۲.۸۱ کے تحت درج ذیل ہو گا

$$K = 2n + 1$$

جہاں n کوئی غیر منفی عدد صحیح ہو گا، یعنی ہم کہنا چاہتے ہیں کہ (مساوات ۲.۷۳ کو دیکھیے) توانائی ہر صورت درج ذیل ہو گی۔

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2 \cdots \tag{۲.۸۳}$$

یوں ہم ایک مختلف طریقہ کار سے مساوات ۲.۶۱ میں الجبرائی طریقہ سے حاصل کردہ بنیادی کوانٹازنی شرط دوبارہ حاصل کرتے ہیں۔ ابتدائی طور پر یہ حیرانی کی بات نظر آتی ہے کہ توانائی کی کوانٹازنی، شروڈنگر مساوات کے طاقتی تسلسل حل کے ایک تکنیکی نقطہ سے حاصل ہوتی ہے۔ آئیں اسے ایک مختلف نقطہ نظر سے دیکھتے ہیں۔ یقیناً E کے کسی بھی قیمت کے لئے مساوات ۲.۷۰ کے حل ممکن ہیں (درحقیقت ہر E کے لیے اس کے دو خطی غیر تابع حل پائے جاتے ہیں)۔ تاہم ان میں سے زیادہ تر حل، بڑی x پر، بے قابو قوت نمائی بڑھتے ہیں جس کی بنا یہ معمول پر لانے کے قابل نہیں رہتے۔ مثال کے طور پر فرض کریں ہم E کی کسی ایک اجازتی قیمت سے معمولی کم قیمت (مثلاً $0.49\hbar\omega$) لے کر حل کو ترسیم کرتے ہیں (شکل ۲.۶-ا)؛ اس کی دم لامتناہی کی طرف بڑھے گی۔ اب E کی قیمت کسی ایک اجازتی قیمت سے معمولی زیادہ (مثلاً $0.51\hbar\omega$) تصور کر کے حل کو ترسیم کرتے ہیں؛ اب حل کی دم دوسری سمت میں لامتناہی کی طرف بڑھے گی (شکل ۲.۶-ب)۔ اگر ہم اس مقدار معلوم کی قیمت 0.49 اور 0.51 کے بیچ چھوٹے چھوٹے قدم لے کر تبدیل کریں تو ہر مرتبہ 0.50 سے گزرتے ہوئے حل کی دم الٹ (مخالف) طرف لامتناہی کی طرف بڑھے گی۔ ٹھیک 0.50 پر اس کی دم صفر کو پہنچ کر معمول زنی کے قابل حل دے گی (شکل ۲.۶-ج)۔

کلیہ توالی K کی اجازتی قیمتوں کے لیے درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$a_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+1)(j+2)} a_j \tag{۲.۸۴}$$

جدول ۲.۱: ابتدائی چند ہرمائٹ کثیر رکنیاں $H_n(\xi)$

$$\begin{aligned}
H_0 &= 1\\
H_1 &= 2\xi\\
H_2 &= 4\xi^2 - 2\\
H_3 &= 8\xi^3 - 12\xi\\
H_4 &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12\\
H_5 &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi
\end{aligned}$$

اگر $n = 0$ ہو تب تسلسل میں ایک جزو پایا جائے گا (ہمیں $a_1 = 0$ لینا ہو گا تاکہ $h_{\text{طاق}}$ خارج ہوں، اور مساوات ۲.۸۴ میں $j = 0$ سے $a_2 = 0$ حاصل ہوتا ہے):

$$h_0(\xi) = a_0$$

لہٰذا

$$\psi_0(\xi) = a_0 e^{-\xi^2/2}$$

(جو ماسوائے معمول زنی، مساوات ۲.۵۹ دوبارہ دیتی ہے)۔ اسی طرح ہم $n = 1$ کے لیے $a_0 = 0$ لیں گے[۳۶]، اور مساوات ۲.۸۴ میں $j = 1$ سے $a_3 = 0$ حاصل ہو گا، لہٰذا

$$h_1(\xi) = a_1(\xi)$$

اور

$$\psi_1(\xi) = a_1 \xi e^{-\xi^2/2}$$

ہو گا (جو مساوات ۲.۶۲ کی تصدیق کرتی ہے)۔ ہم $n = 2$ کے لیے $j = 0$ لے کر $a_2 = -2a_0$ اور $j = 2$ لے کر $a_4 = 0$ حاصل کرتے ہیں۔ یوں

$$h_2(\xi) = a_0(1 - 2\xi^2)$$

اور

$$\psi_2(\xi) = a_0(1 - 2\xi^2)e^{-\xi^2/2}$$

ہوں گے، وغیرہ وغیرہ۔ (سوال ۲.۱۰ کے ساتھ موازنہ کریں جہاں یہ آخری نتیجہ الجبرائی ترکیب سے حاصل کیا گیا۔) عمومی طور پر $h_n(\xi)$ متغیر ξ کا n درجی کثیر رکنی ہو گا، جو جفت عدد صحیح n کی صورت میں جفت طاقتوں کا اور طاق عدد صحیح n کی صورت میں طاق طاقتوں کا کثیر رکنی ہو گا۔ جزو ضربی a_0 اور a_1

[۳۶] دھیان رہے کہ n کی ہر ایک قیمت کے لئے عددی سروں a_j کا ایک منفرد سلسلہ پایا جاتا ہے۔

کے عسلاوہ سیہ عسین **ہرمائٹ کثیر رکنی**[47] $H_n(\xi)$ ہیں[48]۔ جدول ۲.۱ مسیں اسس کے چسند ابتدائی ارکان پیشس کیے گئے ہیں۔ روایتی طور پر اختیاری جسز وضربی یوں منتخب کیا حباتا ہے کہ ξ کے بلند تر طاقت کا عددی سر 2^n ہو۔ اسس روایت کے تحت ہارمونی مسر تعش کے معمول شدہ[49] ساکن حالات درج ذیل ہوں گے

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n(\xi)e^{-\xi^2/2} \tag{۲.۸۵}$$

جو (یقیناً) مساوات ۲.۶۷ مسیں الجبرائی طسریقے سے حاصل نتائج کے متماثل ہیں۔

شکل ۲.۷-ا اور ب مسیں چسند ابتدائی n کے لیے $\psi_n(x)$ اور $|\psi_n(x)|^2$ ترسیم کیے گئے ہیں۔ کوانٹم مسر تعش حیسران کن حد تک کلاسیکی مسر تعش سے مختلف ہے۔ نہ صرف اسس کی توانائیاں کوانٹا شدہ ہیں بلکہ اسس کی موضعی تقسیم کے بھی عجیب خواص پائے جاتے ہیں۔ مثلاً کلاسیکی طور پر احبازتی سعت کے باہر (یعنی توانائی کے کلاسیکی حیطہ سے زیادہ x پر) ذرہ پایا جانے کا احتمال غیسر صفسر ہے (سوال ۲.۱۵ دیکھیں) اور تمام طاق حالات مسیں عسین وسط پر ذرہ پائے جانے کا احتمال صفسر ہے۔ کلاسیکی اور کوانٹائی صورتوں مسیں مشابہت صرف n کی بڑی قیمتوں پر پائی جاتی ہے۔ مسیں نے شکل ۲.۷-ج مسیں کلاسیکی موضعی تقسیم کو $n = 10$ کے کوانٹائی موضعی تقسیم پر ترسیم کیا ہے۔ انہیں ہموار کرنے سے سیہ ایک دوسرے پر اچھی طسرح بیٹھتے ہیں (البتہ کلاسیکی صورت مسیں ہم ایک ارتعاش مسیں وقت کے لحاظ سے مقام کی تقسیم کی بات کرتے ہیں جبکہ کوانٹائی صورت مسیں ہم یکساں تیار کردہ حالات کے ایک سگراکی تقسیم کی بات کرتے ہیں)۔[50]

سوال ۲.۱۵: ہارمونی مسر تعش کے زمینی حال مسیں کلاسیکی احبازتی خطہ کے باہر ایک ذرہ کی موجودگی کا احتمال (تین بامعنی ہندسوں تک) تلاشس کریں۔ اشارہ: کلاسیکی طور پر ایک مسر تعش کی توانائی $E = (1/2)ka^2 = (1/2)m\omega^2a^2$ ہو گی جہاں a حیطہ ہے۔ یوں توانائی E کے مسر تعش کا "کلاسیکی احبازتی خطا" $-\sqrt{2E/m\omega^2}$ تا $+\sqrt{2E/m\omega^2}$ ہو گا۔ تکمل کی قیمت "عمومی تقسیم" یا "تفاعل خلل" کی جدول سے دیکھیں۔

سوال ۲.۱۶: کلیہ توالی (مساوات ۲.۸۴) استعمال کرکے $H_5(\xi)$ اور $H_6(\xi)$ تلاشس کریں۔ مجموعی مستقل تعین کرنے کی خاطر ξ کی بلند تر طاقت کا عددی سر روایت کے تحت 2^n لیں۔

سوال ۲.۱۷: اسس سوال مسیں ہم ہرمائٹ کثیسر رکنی کے چسند اہم مسائل، جن کا ثبوت پیشس نہیں کیا جائے گا، پر غور کرتے ہیں۔

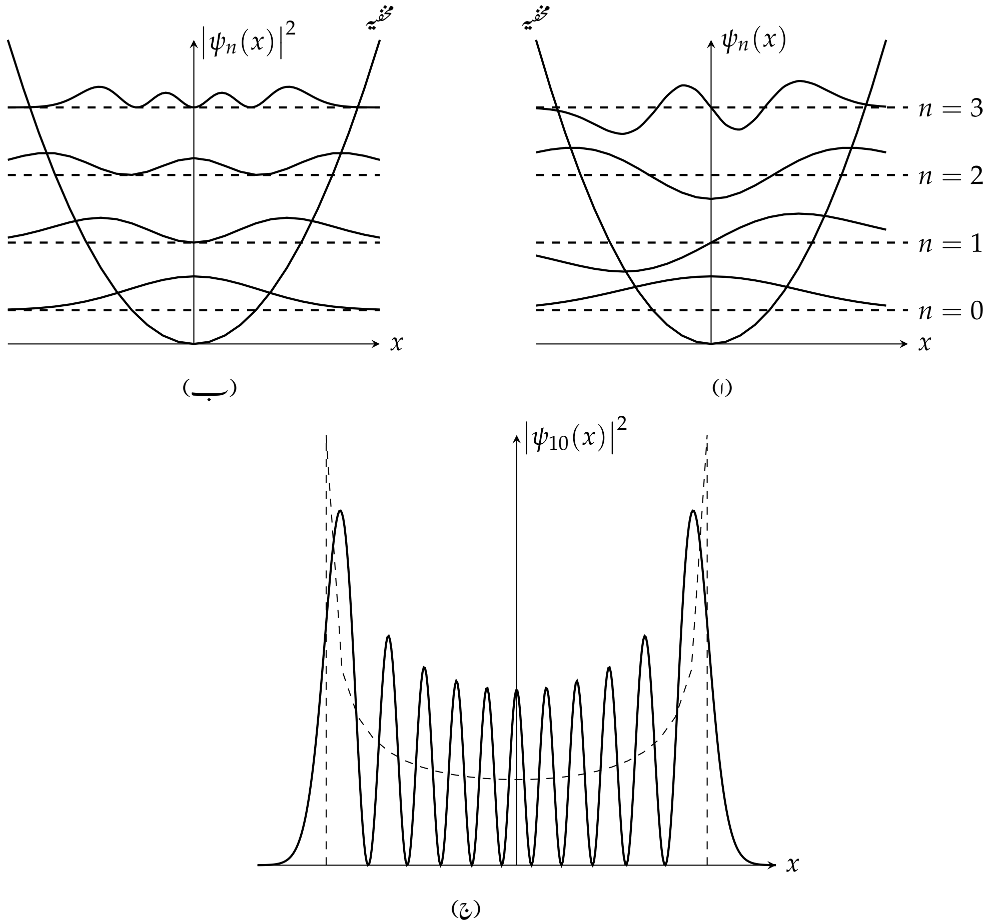
---

[47] Hermite polynomials

[48] ہرمائٹ کثیسر رکنیوں پر سوال ۲.۱۷ مسیں مسزید غور کیا گیا ہے۔

[49] مسیں یہاں معمول زنی مستقلات حاصل نہیں کروں گا۔

[50] کلاسیکی تقسیم کو ایک جیسی توانائی کے متعدد مسر تعشات، جن کے نقاط آغاز بلا منصوبہ ہوں، کا سگرا تصور کرتے ہوئے سیہ مماثل زیادہ بہتر ہو گا۔



شکل ۲.۷: ہارمونی مرتعش کے ابتدائی چار ساکن حالات۔

ا. **کلیہ روڈریگیس**[۵۱] درج ذیل کہتا ہے۔

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n} e^{-\xi^2} \tag{۲.۸۶}$$

اس کو استعمال کر کے H_3 اور H_4 اخذ کریں۔

ب. درج ذیل کلیہ توالی گزشتہ دو ہرمائٹ کثیر رکنیوں کی صورت میں H_{n+1} دیتا ہے۔

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi) \tag{۲.۸۷}$$

اس کو جزو-ا کے نتائج کے ساتھ استعمال کر کے H_5 اور H_6 تلاش کریں۔

ج. اگر آپ n رتبی کثیر رکنی کا تفرق لیں تو آپ کو $n-1$ رتبی کثیر رکنی حاصل ہو گی۔ ہرمائٹ کثیر رکنیوں کے لیے درج ذیل ہو گا

$$\frac{\mathrm{d}H_n}{\mathrm{d}\xi} = 2nH_{n-1}(\xi) \tag{۲.۸۸}$$

جس کی تصدیق ہرمائٹ کثیر رکنی H_5 اور H_6 کے لئے کریں۔

د. **پیداکار تفاعل**[۵۲] $e^{-z^2+2z\xi}$ کا $z = 0$ پر n واں تفرق $H_n(\xi)$ ہو گا، یا دوسرے لفظوں میں، درج ذیل تفاعل کے ٹیلر پھیلاو میں یہ $z^n/n!$ کا عددی سر ہو گا۔

$$e^{-z^2+2z\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(\xi) \tag{۲.۸۹}$$

اس کو استعمال کر کے H_0 ، H_1 اور H_2 دوبارہ اخذ کریں۔

۲.۴ آزاد ذرہ

ہم اب آزاد ذرہ (جس کے لیے ہر جگہ $V(x) = 0$ ہو گا) پر غور کرتے ہیں جس سادہ ترین صورت ہونی چاہیے تھی۔ کلاسیکی طور پر اس سے مراد مستقل سمتی رفتار ہو گی، لیکن کوانٹم میکانیات میں یہ مسئلہ حیران کن حد تک پیچیدہ اور پر اسرار ثابت ہوتا ہے۔ غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات ذیل

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi \tag{۲.۹۰}$$

---

[۵۱] Rodrigues formula
[۵۲] generating function

یا ذیل ہے۔

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \qquad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{۲.۹۱}$$

یہاں تک یہ لامتناہی چکور کنواں (مساوات ۲.۲۱) کی مانند ہے جہاں (بھی) مخفی قوہ صفر ہے؛ البتہ اس بار، میں عمومی مساوات کو قوت نما (نا کہ سائن اور کوسائن) کی صورت میں لکھنا چاہوں گا، جس کی وجہ آپ پر جلد عیاں ہو گی۔

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{۲.۹۲}$$

لامتناہی چکور کنواں کے برعکس، یہاں کوئی سرحدی شرائط نہیں پائے جاتے ہیں جو k (اور یوں E) کی ممکنہ قیمتوں پر کسی قسم کی پابندی عائد کرتے ہوں؛ لہٰذا آزاد ذرہ کسی بھی (مثبت) توانائی کا حامل ہو سکتا ہے۔ اس کے ساتھ تابعیت وقت $e^{-iEt/\hbar}$ جوڑتے ہوئے ذیل حاصل ہو گا۔

$$\Psi(x,t) = Ae^{ik(x-\frac{\hbar k}{2m}t)} + Be^{-ik(x+\frac{\hbar k}{2m}t)} \tag{۲.۹۳}$$

ایسا کوئی بھی تفاعل جو x اور t متغیرات کی مخصوص جوڑ $(x \pm vt)$ کا تابع ہو (جہاں v مستقل ہے)، غیر تغیر شکل و صورت کی ایسی موج کو ظاہر کرے گا جو v رفتار سے $\mp x$ رخ حرکت کرتی ہے۔ اس موج پر ایک اٹل نقطہ (مثلاً کم سے کم یا زیادہ سے زیادہ قیمت کا نقطہ) تفاعل کے **دلیل**[۵۳] کی ایک اٹل قیمت کا یوں مطابقتی ہو گا کہ درج ذیل ہو۔

$$x \pm vt = \text{مستقل} \quad \text{یا} \quad x = \mp vt + \text{مستقل}$$

چونکہ موج پر تمام نقاط ایک جیسی سمتی رفتار سے حرکت کرتے ہیں لہٰذا موج کی شکل و صورت حرکت کے ساتھ تبدیل نہیں ہو گی۔ یوں مساوات ۲.۹۳ کا پہلا جزو دائیں رخ حرکت کرتی موج کو ظاہر کرتا ہے جبکہ اس کا دوسرا جزو بائیں رخ حرکت کرتی (اتنی ہی توانائی کی) موج کو ظاہر کرتا ہے۔ چونکہ ان میں فرق صرف k کی علامت کا ہے لہٰذا انہیں درج ذیل بھی لکھا جا سکتا ہے

$$\Psi_k(x,t) = Ae^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)} \tag{۲.۹۴}$$

جہاں k کی قیمت منفی لینے سے بائیں رخ حرکت کرتی موج حاصل ہو گی۔

$$k \equiv \pm\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \begin{cases} k > 0 \Rightarrow \text{دائیں رخ حرکت} \\ k < 0 \Rightarrow \text{بائیں رخ حرکت} \end{cases} \tag{۲.۹۵}$$

صاف ظاہر ہے کہ آزاد ذرے کے "ساکن حالات" حرکت کرتی امواج کو ظاہر کرتے ہیں، جن کی طول موج $\lambda = 2\pi/|k|$ ہو گا، اور کلیہ ڈی بروگلی (مساوات ۱.۳۹) کے تحت ان کا معیار حرکت درج ذیل ہو گا۔

$$p = \hbar k \tag{۲.۹۶}$$

---

[۵۳] argument

ان امواج کی رفتار (یعنی t کا عددی سر تقسیم x کا عددی سر) درج ذیل ہو گا۔

$$v_{\text{کوانٹائی}} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}} \tag{۲.۹۷}$$

اس کے برعکس ایک آزاد ذرہ جس کی توانائی E ہو (جو خالصتاً حرکی ہو گی چونکہ $V = 0$ ہے) کی کلاسیکی رفتار $E = (1/2)mv^2$ سے حاصل کی جا سکتی ہے۔

$$v_{\text{کلاسیکی}} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{\text{کوانٹائی}} \tag{۲.۹۸}$$

ظاہری طور پر کوانٹم میکانی تفاعل موج اس ذرے کی نصف رفتار سے حرکت کرتا ہے جس کو یہ ظاہر کرتا ہے۔ اس تضاد پر ہم کچھ دیر میں غور کریں گے۔ اس سے پہلے ایک زیادہ سنگین مسئلہ پر غور کرنا ضروری ہے۔ درج ذیل کے تحت یہ تفاعل موج معمول پر لانے کے قابل نہیں ہے۔

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^* \Psi_k \, \mathrm{d}x = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x = |A|^2 \, (\infty) \tag{۲.۹۹}$$

یوں آزاد ذرے کی صورت میں قابل علیحدگی حل طبعی طور پر قابل قبول حالات کو ظاہر نہیں کرتے ہیں۔ ایک آزاد ذرہ ساکن حال میں نہیں پایا جا سکتا ہے؛ دوسرے لفظوں میں، غیر مبہم توانائی کے ایک آزاد ذرے کا تصور بے معنی ہے۔

اس کا ہرگز یہ مطلب نہیں کہ قابل علیحدگی حل ہمارے کسی کام کے نہیں ہیں، کیونکہ یہ طبعی مفہوم سے آزاد، ریاضیاتی کردار ادا کرتے ہیں۔ تابع وقت شروڈنگر مساوات کا عمومی حل اب بھی قابل علیحدگی حلوں کا خطی جوڑ ہو گا (صرف اتنا ہے کہ غیر مسلسل اشاریہ n پر مجموعہ کی بجائے اب یہ استمراری متغیر k کے لحاظ سے تکمل ہو گا)۔

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} \, \mathrm{d}k \tag{۲.۱۰۰}$$

(ہم $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ کو اپنی آسانی کیلئے تکمل کے باہر نکالتے ہیں؛ مساوات ۲.۱۷ میں عددی سر c_n کی جگہ یہاں $(1/\sqrt{2\pi})\phi(k)\,\mathrm{d}k$ کردار ادا کرتا ہے۔) اب اس تفاعل موج کو (موزوں $\phi(k)$ کیلئے) معمول پر لایا جا سکتا ہے۔ تاہم اس میں k کی قیمتوں کی سعت پائی جائے گی، لہٰذا توانائیوں اور رفتاروں کی بھی سعت پائی جائیں گی۔ ہم اس کو **موجی اکٹھ**[۵۴] کہتے ہیں۔[۵۵]

---

[۵۴] wave packet

[۵۵] سائن نما امواج کی وسعت لامتناہی تک پہنچتی ہے اور یہ معمول پر لانے کے قابل نہیں ہوتی ہیں۔ تاہم ایسی امواج کا خطی میل تباہ کن مداخلت پیدا کرتا ہے، جس کی بنا مقام بندی اور معمول زنی ممکن ہوتی ہے۔

عمومی کوانٹم مسئلہ میں ہمیں $\Psi(x,0)$ فراہم کر کے $\Psi(x,t)$ تلاش کرنے کو کہا جاتا ہے۔ آزاد ذرے کیلئے اس کا حل مساوات ۲.۱۰۰ کی صورت اختیار کرتا ہے۔ اب سوال یہ پیدا ہوتا ہے کہ ابتدائی تفاعل موج

$$\Psi(x,0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(k)e^{ikx}\,\mathrm{d}k \tag{۲.۱۰۱}$$

پر پورا اترتا ہوا $\phi(k)$ کیسے تعین کیا جائے؟ یہ فوریئر تجزیہ کا کلاسیکی مسئلہ ہے جس کا جواب **مسئلہ پلانشرال**[۵۶]:

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}F(k)e^{ikx}\,\mathrm{d}k \Leftrightarrow F(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}f(x)e^{-ikx}\,\mathrm{d}x \tag{۲.۱۰۲}$$

پیش کرتا ہے (سوال ۲.۲۰ دیکھیں)۔ $F(k)$ کو $f(x)$ کا **فوریئر بدل**[۵۷] کہا جاتا ہے جبکہ $f(x)$ کو $F(k)$ کا **الٹ فوریئر بدل**[۵۸] کہتے ہیں (ان دونوں میں صرف قوت نما کی علامت کا فرق پایا جاتا ہے)۔ ہاں، اجازتی تفاعل پر کچھ پابندی ضرور عائد ہے: تکمل کا موجود[۵۹] ہونا لازم ہے۔ ہمارے مقاصد کے لئے، تفاعل $\Psi(x,0)$ پر بذات خود معمول شدہ ہونے کی طبعی شرط مسلط کرنا اس کی ضمانت دے گا۔ یوں آزاد ذرے کے عمومی کوانٹم مسئلہ کا حل مساوات ۲.۱۰۰ ہوگا جہاں $\phi(k)$ درج ذیل ہوگا۔

$$\phi(k)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x,0)e^{-ikx}\,\mathrm{d}x \tag{۲.۱۰۳}$$

مثال ۲.۶: ایک آزاد ذرہ جو ابتدائی طور پر خطہ $-a\leq x\leq a$ میں رہنے کا پابند ہو کو وقت $t=0$ پر چھوڑ دیا جاتا ہے:

$$\Psi(x,0)=\begin{cases}A, & -a<x<a,\\ 0, & \text{دیگر صورت}\end{cases}$$

جہاں A اور a مثبت حقیقی مستقل ہیں۔ $\Psi(x,t)$ تلاش کریں۔

حل: ہم پہلے $\Psi(x,0)$ کو معمول پر لاتے ہیں۔

$$1=\int_{-\infty}^{\infty}\left|\Psi(x,0)\right|^2\mathrm{d}x=|A|^2\int_{-a}^{a}\mathrm{d}x=2a\,|A|^2\Rightarrow A=\frac{1}{\sqrt{2a}}$$

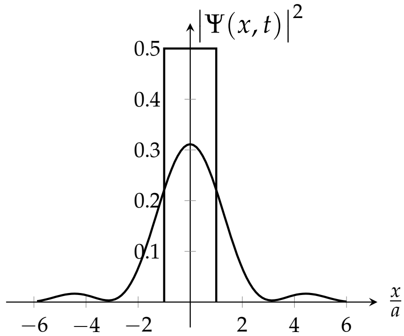
---

[۵۶] Plancherel's theorem

[۵۷] Fourier transform

[۵۸] inverse Fourier transform

[۵۹] تفاعل $f(x)$ پر عائد لازم اور کافی پابندی یہ ہے کہ $\int_{-\infty}^{\infty}|f(x)|^2\,\mathrm{d}x$ متناہی ہو۔ (ایسی صورت میں $\int_{-\infty}^{\infty}|F(k)|^2\,\mathrm{d}k$ بھی متناہی ہوگا، اور حقیقتاً ان دونوں تکملات کی قیمتیں ایک دوسرے جتنی ہوں گی۔ Arfken کے حصہ 5.15 میں حاشیہ 24 دیکھیں۔)



شکل ۲.۸: تفاعل $\left|\Psi(x,t)\right|^2$ کی لمحہ $t = 0$ پر مستطیل اور $t = ma^2/\hbar$ پر قوسی ترسیم (مساوات ۲.۱۰۴)۔

اس کے بعد مساوات ۲.۱۰۳ استعمال کرتے ہوئے $\psi(k)$ تلاش کرتے ہیں۔

$$\begin{aligned}\phi(k) =& \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{2a}}\int_{-a}^{a} e^{-ikx}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2\sqrt{\pi a}}\left.\frac{e^{-ikx}}{-ik}\right|_{-a}^{a}\\ =& \frac{1}{k\sqrt{\pi a}}\left(\frac{e^{ikx}-e^{-ikx}}{2i}\right) = \frac{1}{\sqrt{\pi a}}\frac{\sin(ka)}{k}\end{aligned}$$

آخر میں ہم اس کو دوبارہ مساوات ۲.۱۰۰ میں پر کرتے ہیں۔

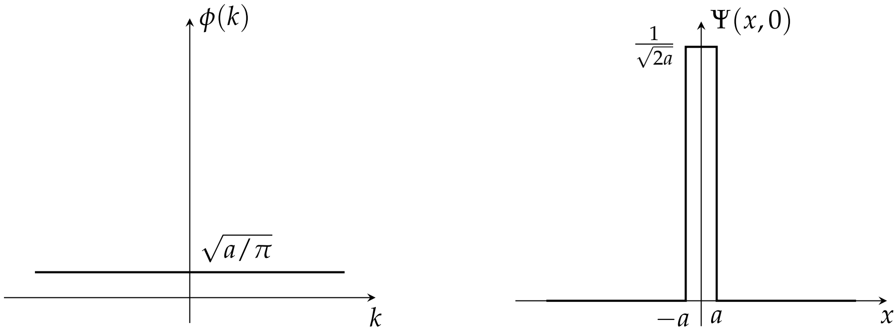
$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\pi\sqrt{2a}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin(ka)}{k}e^{i(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t)}\,\mathrm{d}k \tag{۲.۱۰۴}$$

بد قسمتی سے اس تکمل کو بنیادی تفاعل کی صورت میں حل کرنا ممکن نہیں ہے، تاہم اس کی قیمت کو اعدادی تراکیب سے حاصل کیا جا سکتا ہے (شکل ۲.۸)۔ (ایسی بہت کم صورتیں حقیقتاً پائی جاتی ہیں جن کے لئے $\Psi(x,t)$ کا تکمل (مساوات ۲.۱۰۰) صریحاً حل کرنا ممکن ہو۔ سوال ۲.۲۲ میں ایسی ایک بالخصوص خوبصورت مثال پیش کی گئی ہے۔)

آئیں ایک تحدیدی صورت پر غور کریں۔ اگر a کی قیمت بہت کم ہو تب ابتدائی تفاعل موج خوبصورت مقامی نوکیلی صورت اختیار کرتی ہے (شکل ۲.۹-ا)۔ ایسی صورت میں ہم چھوٹے زاویوں کے لئے تخمیناً $\sin ka \approx ka$ لکھ کر درج ذیل حاصل کرتے ہیں

$$\phi(k) \approx \sqrt{\frac{a}{\pi}}$$

جو k کی مختلف قیمتوں کا آپس میں کٹ جانے کی بنا افقی ہے (شکل ۲.۹-ب)۔ یہ مثال ہے اصول عدم یقینیت کی: اگر ذرے کے مقام میں پھیلاو کم ہو، تب اس کی معیار حرکت (لہٰذا k، مساوات ۲.۹۶ دیکھیں) کا



(ب) (ا)

شکل ۲.۹: چھوٹے a کے لئے مثال ۲.۶۔(ا) $\Psi(x,0)$ کی ترسیم؛ (ب) $\phi(k)$ کی ترسیم۔

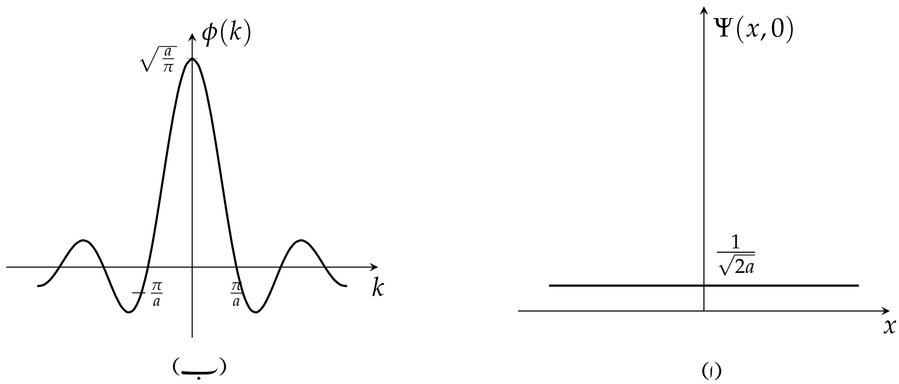
پھیلاو لازماً زیادہ ہو گا۔ اس کی دوسری انتہا (بڑی a) کی صورت میں مقام کا پھیلاو زیادہ ہو گا (شکل ۲.۱۰) لہذا درج ذیل ہو گا۔

$$\phi(k) = \sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\sin ka}{ka}$$

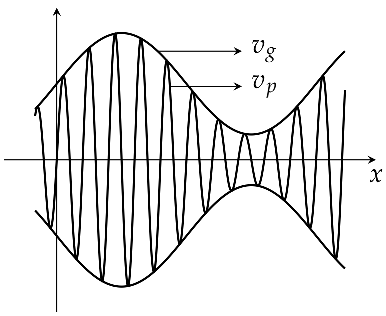
اب $\sin z/z$ کی زیادہ سے زیادہ قیمت $z = 0$ پر پائی جاتی ہے جو گھٹ کر $z = \pm\pi$ (جو یہاں $k = \pm\pi/a$ کو ظاہر کرتا ہے) پر صفر ہوتی ہے۔ یوں بڑی a کیلئے $k = 0$ پر $\phi(k)$ نوکیلی صورت اختیار کرے گا (شکل ۲.۱۰)۔ اس بار ذرے کی معیار حرکت اچھی طرح معین ہے جبکہ اس کا مقام صحیح طور پر معلوم نہیں ہے۔ □

آئیں اب اس تضاد پر دوبارہ بات کریں جس کا ذکر ہم پہلے کر چکے: جہاں مساوات ۲.۹۴ میں دیا گیا علیحدگی حل $\Psi_k(x,t)$، ٹھیک اس ذرہ کی رفتار سے حرکت نہیں کرتی ہے جس کو یہ بظاہر ظاہر کرتی ہے۔ حقیقتاً یہ مسئلہ وہیں پر ختم ہو گیا تھا جب ہم جان چکے کہ Ψ_k طبعی طور پر قابل حصول حل نہیں ہے۔ بحر حال آزاد ذرے کی تفاعل موج (مساوات ۲.۱۰۰) میں سموئی سمتی رفتار کی معلومات پر غور کرنا دلچسپی کا باعث ہے۔ بنیادی تصور کچھ یوں ہے: سائن نما تفاعلات کا خطی میل جس کے حیطہ کو ϕ ترمیم کرتا ہو (شکل ۲.۱۱) موجی اکٹھ ہو گا؛ یہ "غلاف" میں ڈھانکے ہوئے "لہروں" پر مشتمل ہو گا۔ انفرادی لہر کی رفتار، جس کو **دوری سمتی رفتار**[۶۰] (v_p) کہتے ہیں، ہر گز ذرے کی سمتی رفتار کو ظاہر نہیں کرتی ہے بلکہ غلاف کی رفتار، جس کو **گروہی سمتی رفتار**[۶۱] (v_g) کہتے ہیں، ذرے کی رفتار ہو گی۔ غلاف کی سمتی رفتار لہروں کی فطرت پر منحصر ہو گی؛ یہ لہروں کی سمتی رفتار سے زیادہ، کم یا اس کے برابر ہو سکتی ہے۔ ایک دھاگے پر امواج کی گروہی سمتی رفتار اور دوری سمتی رفتار ایک دوسرے کے برابر ہوتی ہیں۔ پانی کی امواج کیلئے یہ دوری سمتی رفتار کی نصف ہو گی، جیسا آپ نے جھیل میں پتھر پھینک کر

[۶۰] phase velocity
[۶۱] group velocity



شکل ۲.۱۰: بڑی a کے لئے (ا) $\Psi(x,0)$ کی ترسیم، (ب) $\phi(k)$ کی ترسیم (مثال ۲.۶)۔



شکل ۲.۱۱: موجی اکٹھ۔ "غلاف" گروہی سمتی رفتار جبکہ لہر دوری سمتی رفتار سے حرکت کرتی ہے۔

دیکھا ہو گا (اگر آپ پانی کی ایک مخصوص لہر پر نظر جمائے رکھیں تو آپ دیکھیں گے کہ، پیچھے سے آگے کی طرف بڑھتے ہوئے، آغاز میں اس لہر کا حیطہ بڑھتا ہے جبکہ آخر میں آگے پہنچ کر اس کا حیطہ گھٹ کر صفر ہو جاتا ہے؛ اس دوران یہ تمام بطور ایک مجموعہ نصف رفتار سے حرکت کرتا ہے۔) یہاں میں نے دکھانا ہو گا کہ کوانٹم میکانیات میں آزاد ذرے کے تفاعل موج کی گروہی سمتی رفتار اس کی دوری سمتی رفتار سے دگنی ہے، جو عین ذرے کی کلاسیکی رفتار ہے۔

ہمیں درج ذیل عمومی صورت کے موجی اکٹھ کی گروہی سمتی رفتار تلاش کرنی ہو گی۔

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(k)e^{i(kx-\omega t)}\,\mathrm{d}k$$

(یہاں $\omega = (\hbar k^2/2m)$ ہے، لیکن جو کچھ میں کہنے جا رہا ہوں وہ کسی بھی موجی اکٹھ کیلئے، اس کے **انتشاری رشتہ**[۶۲]

[۶۲] dispersion relation

(ω کا متغیر k کے لحاظ سے کلیہ) سے قطع نظر، درست ہو گا۔) ہم فرض کرتے ہیں کہ کسی مخصوص قیمتی k_0 پر $\phi(k)$ نوکیلی صورت اختیار کرتا ہے۔ (ہم زیادہ وسعت کا k بھی لے سکتے ہیں لیکن ایسے موجی اکٹھ کے مختلف اجزاء مختلف رفتار سے حرکت کرتے ہیں جس کی بنا پر موجی اکٹھ بہت تیزی سے اپنی شکل و صورت تبدیل کرتا ہے اور کسی مخصوص سمتی رفتار پر حرکت کرتے ہوئے ایک مجموعہ کا تصور بے معنی ہو جاتا ہے۔) چونکہ k_0 سے دور متکمل قابل نظر انداز ہے لہٰذا ہم تفاعل $\omega(k)$ کو اس نقطہ کے گرد ٹیلر تسلسل سے پھیلا کر صرف ابتدائی اجزاء لیتے ہیں:

$$\omega(k) \cong \omega_0 + \omega_0'(k-k_0)$$

جہاں نقطہ k_0 پر k کے لحاظ سے ω کا تفرق ω_0' ہے۔

(تکمل کے وسط کو k_0 پر منتقل کرنے کے غرض سے) ہم متغیر k کی جگہ متغیر $s = k - k_0$ استعمال کرتے ہیں۔ یوں درج ذیل ہو گا۔

$$\Psi(x,t) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0+s) e^{i[(k_0+s)x-(\omega_0+\omega_0's)t]}\,\mathrm{d}s$$

وقت $t=0$ پر

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0+s) e^{i(k_0+s)x}\,\mathrm{d}s$$

جبکہ بعد کے وقت پر درج ذیل ہو گا۔

$$\Psi(x,t) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(-\omega_0 t + k_0\omega_0' t)} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0+s) e^{i(k_0+s)(x-\omega_0' t)}\,\mathrm{d}s$$

ماسوائے x کو $(x-\omega_0't)$ منتقل کرنے کے یہ $\Psi(x,0)$ میں پایا جانے والا تکمل ہے۔ یوں درج ذیل ہو گا۔

$$\Psi(x,t) \cong e^{-i(\omega_0-k_0\omega_0')t}\,\Psi(x-\omega_0't,0) \tag{۲.۱۰۵}$$

ماسوائے دوری جزو ضرب کے (جو کسی بھی صورت میں $|\Psi|^2$ کی قیمت پر اثر انداز نہیں ہو گا) یہ موجی اکٹھ بظاہر سمتی رفتار ω_0' سے حرکت کرے گا:

$$v_{\text{گروہی}} = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} \tag{۲.۱۰۶}$$

(جس کی قیمت کا حساب $k = k_0$ پر کیا جائے گا)۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ یہ دوری رفتار سے مختلف ہے جسے درج ذیل مساوات پیش کرتی ہے۔

$$v_{\text{دوری}} = \frac{\omega}{k} \tag{۲.۱۰۷}$$

یہاں $(\hbar k^2/2m)\;=\;\omega$ یعنی $(\hbar k/2m)\;=\;\omega/k$ ہے جبکہ $(\hbar k/m)\;=\;\mathrm{d}\omega/\mathrm{d}k$ ہے جو دگنا ہے۔ یہ اس بات کی تصدیق کرتا ہے کہ موجی اکٹھ کی گروہی سمتی رفتار نا کہ ساکن حالات کی دوری سمتی رفتار کلاسیکی ذرے کی رفتار دے گی۔

$$v_{\text{کلاسیکی}} = v_{\text{گروہی}} = 2v_{\text{دوری}} \tag{۲.۱۰۸}$$

سوال ۲.۱۸: دکھائیں کہ متغیر x کے کسی بھی تفاعل کو لکھنے کے دو معادل طریقے $[Ae^{ikx}\;+\;Be^{-ikx}]$ اور $[C\cos kx\;+\;D\sin kx]$ ہیں۔ مستقلات C اور D کو مستقلات A اور B کی صورت میں لکھیں۔ اسی طرح مستقلات A اور B کو مستقلات C اور D کی صورت میں لکھیں۔ تبصرہ: کوانٹم میکانیات میں جب $V\;=\;0$ ہو، قوت نمائی تفاعل حرکت کرتے امواج کو ظاہر کرتی ہے اور انہیں استعمال کرتے ہوئے آزاد ذرے پر تبصرہ کرنا زیادہ آسان ہوتا ہے، جبکہ $\sin$ اور $\cos$ ساکن امواج کو ظاہر کرتی ہے جو لامتناہی چکور کنواں میں پائی جاتی ہے۔

سوال ۲.۱۹: مساوات ۲.۹۴ میں دی گئی آزاد ذرے کے تفاعل موج کا احتمال رو J تلاش کریں (سوال 14.1 دیکھیں)۔ احتمال رو کے بہاو کا رخ کیا ہو گا؟

سوال ۲.۲۰: اس سوال میں آپ کو مسئلہ پلانشرال کا ثبوت حاصل کرنے میں مدد دیا جائے گا۔ آپ متناہی وقفہ کے فوریئر تسلسل سے آغاز کر کے اس وقفہ کو وسعت دیتے ہوئے لامتناہی تک بڑھاتے گے۔

ا. مسئلہ ڈرشلے کہتا ہے کہ وقفہ $[-a,+a]$ پر کسی بھی تفاعل $f(x)$ کو فوریئر تسلسل کے پھیلاو سے ظاہر کیا جا سکتا ہے:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty}[a_n\sin(n\pi x/a) + b_n\cos(n\pi x/a)]$$

دکھائیں کہ اس کو درج ذیل معادل روپ میں بھی لکھا جا سکتا ہے۔

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\pi x/a}$$

a_n اور b_n کی صورت میں c_n کیا ہو گا؟

ب. فوریئر تسلسل کے عددی سروں کے حصول کی مساواتوں سے درج ذیل اخذ کریں۔

$$c_n = \frac{1}{2a}\int_{-a}^{+a} f(x)e^{-in\pi x/a}\,\mathrm{d}x$$

ج. n اور c_n کی جگہ نئے متغیرات $k\;=\;\left(\frac{n\pi}{a}\right)$ اور $F(k)\;=\;\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,ac_n$ استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ جزو-ا اور جزو-ب درج ذیل روپ اختیار کرتے ہیں

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n=-\infty}^{\infty}F(k)e^{ikx}\Delta k; \qquad F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-a}^{+a} f(x)e^{-ikx}\,\mathrm{d}x,$$

جہاں ایک n سے اگلی n تک k میں تبدیلی Δk ہے۔

د. حد $a \to \infty$ لیتے ہوئے مسئلہ پلانشرال حاصل کریں۔ تبصرہ: $F(k)$ کی صورت میں $f(x)$ اور $f(x)$ کی صورت میں $F(k)$ کے کلیات کے آغاز دو بالکل مختلف جگہوں ہوئیں۔ اس کے باوجود حد $a \to \infty$ کی صورت میں ان دونوں کی ساخت ایک دوسرے کے ساتھ مشابہت رکھتی ہیں۔

سوال ۲.۲۱: ایک آزاد ذرے کا ابتدائی تفاعل موج درج ذیل ہے

$$\Psi(x,0) = Ae^{-a|x|}$$

جہاں A اور a مثبت حقیقی مستقل ہیں۔

ا. $\Psi(x,0)$ کو معمول پر لائیں۔

ب. $\phi(k)$ تلاش کریں۔

ج. $\Psi(x,t)$ کو تکمل کی صورت میں تیار کریں۔

د. تحدیدی صورتوں پر (جہاں a بہت بڑا ہو، اور جہاں a بہت چھوٹا ہو) پر تبصرہ کریں۔

سوال ۲.۲۲: **گاوسی موجی اکٹھ** ایک آزاد ذرے کا ابتدائی تفاعل موج درج ذیل ہے

$$\Psi(x,0) = Ae^{-ax^2}$$

جہاں A اور a مستقلات ہیں (a حقیقی اور مثبت ہے)۔

ا. $\Psi(x,0)$ کو معمول پر لائیں۔

ب. $\Psi(x,t)$ تلاش کریں۔ اشارہ: "مربع مکمل کرتے ہوئے" درج ذیل روپ کے تکمل با آسانی حل ہوتے ہیں۔

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(ax^2+bx)}\,\mathrm{d}x$$

مان لیں $y \equiv \sqrt{a}[x+(b/2a)]$ ہے۔ یوں $(ax^2+bx) = y^2-(b^2/4a)$ ہوگا۔ جواب:

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \frac{e^{-ax^2/[1+(2i\hbar at/m)]}}{\sqrt{1+(2i\hbar at/m)}}$$

ج. $|\Psi(x,t)|^2$ تلاش کریں۔ اپنا جواب درج ذیل مقدار کی صورت میں لکھیں۔

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{a}{1+(2\hbar at/m)^2}}$$

وقت $t = 0$ پر $|\Psi|^2$ کا خاکہ (بطور x کا تفاعل) بنائیں۔ کسی بڑے t پر دوبارہ خاکہ کھینچیں۔ وقت گزرنے کے ساتھ ساتھ $|\Psi|^2$ کو کیا ہوگا؟

د. توقعاتی قیمتیں $\langle x \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ اور $\langle p^2 \rangle$ ؛ اور احتمالات σ_x اور σ_p تلاش کریں۔ جزوی جواب: $\langle p^2 \rangle = a\hbar^2$ ، تاہم جواب کو اس سادہ روپ میں لانے کیلئے آپ کو کافی الجبرا کرنا ہو گا۔

ھ. کیا عدم یقینیت کا اصول یہاں کار آمد ہے؟ کس لمحہ t پر یہ نظام عدم یقینیت کی حد کے قریب تر ہو گا؟

۲.۵ ڈیلٹا تفاعل مخفیہ

۲.۵.۱ مقید حالات اور بکھراو حالات

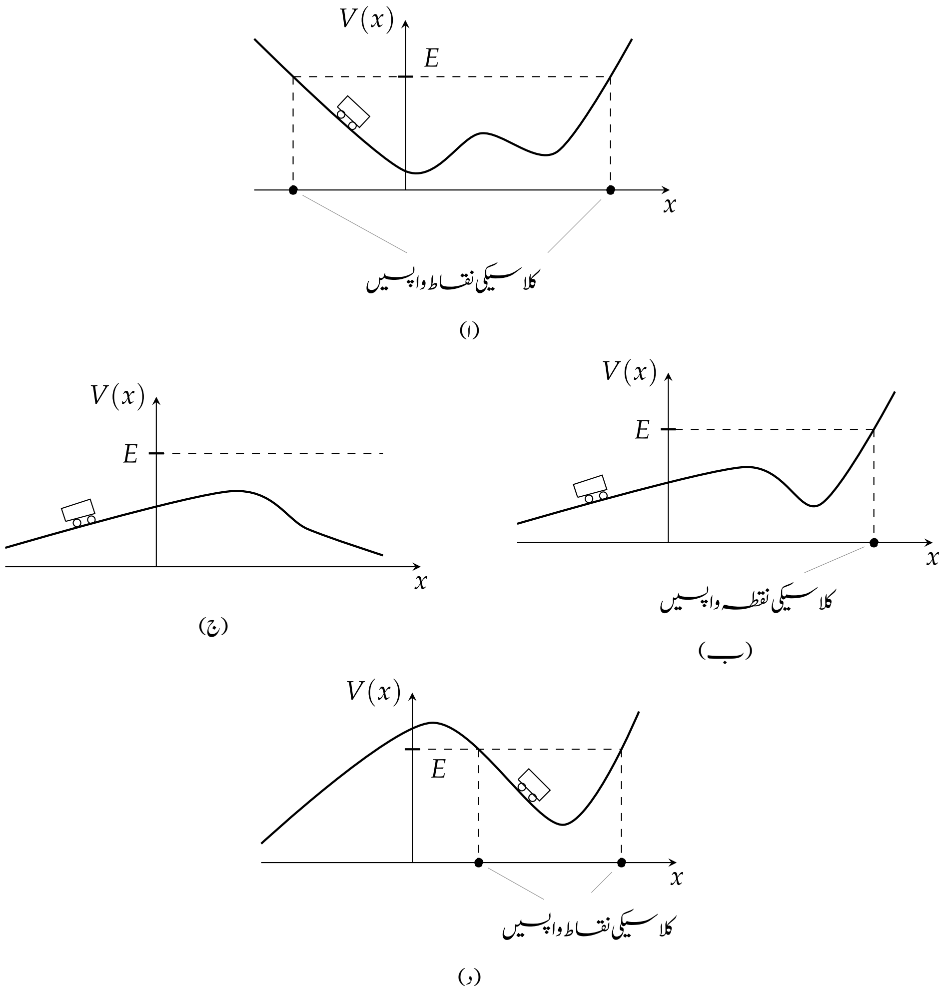
ہم غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات کے دو مختلف حل دیکھ چکے ہیں: لامتناہی چکور کنواں اور ہارمونی مرتعش کے حل معمول پر لانے کے قابل تھے اور انہیں غیر مسلسل اعشاریہ n کے لحاظ سے نام دیا جاتا ہے؛ آزاد ذرے کے لیے یہ معمول پر لانے کے قابل نہیں ہیں اور انہیں استمراری متغیر k کے لحاظ سے نام دیا جاتا ہے۔ اول الذکر بذات خود طبعی طور پر قابل حصول حل کو ظاہر کرتے ہیں جبکہ موخر الذکر ایسا نہیں کرتے ہیں؛ تاہم دونوں صورتوں میں تابع وقت شروڈنگر مساوات کے عمومی حل ساکن حالات کا خطی جوڑ ہو گا۔ پہلی قسم میں یہ جوڑ (n پر لیا گیا) مجموعہ ہو گا، جبکہ دوسرے میں یہ (k پر) تکمل ہو گا۔ اس امتیاز کی طبعی اہمیت کیا ہے؟

کلاسیکی میکانیات میں یک بعدی غیر تابع وقت مخفیہ دو مکمل طور پر مختلف حرکات پیدا کر سکتی ہے۔ اگر $V(x)$ ذرے کی کل توانائی E سے دونوں جانب زیادہ بلند ہو (شکل ۲.۱۲-۱) تب یہ ذرہ اس مخفی توانائی کے کنواں میں "پھنسا" رہے گا: یہ **واپسی نقاط**[۶۳] کے بیچ آگے پیچھے حرکت کرتا رہے گا اور کنواں سے باہر نہیں نکل سکے گا (ماسوائے اس صورت میں کہ آپ اسے اضافی توانائی فراہم کریں جس کی ابھی ہم بات نہیں کر رہے ہیں)۔ ہم اسے **مقید حال**[۶۴] کہتے ہیں۔ اس کے برعکس اگر E ایک (یا دونوں) جانب $V(x)$ سے تجاوز کرے تب، لامتناہی سے آتے ہوئے، مخفی توانائی کے زیر اثر ذرہ اپنی رفتار کم یا زیادہ کرے گا اور اس کے بعد واپس لامتناہی کو لوٹے گا (شکل ۲.۱۲-ب اور ج)۔ (یہ ذرہ مخفی توانائی میں پھنس نہیں سکتا ہے، ماسوائے اس صورت کہ اس کی توانائی (مثلاً رگڑ کی بنا) گھٹے، لیکن ہم یہاں بھی ایسی صورت کی بات نہیں کر رہے ہیں۔) ہم اسے **بکھراو حال**[۶۵] کہتے ہیں۔ بعض مخفی توانائیاں صرف مقید حال پیدا کرتی ہیں (مثلاً ہارمونی مرتعش)؛ بعض صرف بکھراو حال پیدا کرتی ہیں (مثلاً پہاڑ مخفیہ جو کہیں پر بھی نیچے نہ جھکتا ہو)؛ اور بعض، ذرہ کی توانائی پر منحصر، دونوں اقسام کے حال پیدا کرتی ہیں۔

شروڈنگر مساوات کے حلوں کے دو اقسام ٹھیک انہیں مقید اور بکھراو حال کو ظاہر کرتی ہیں۔ کوانٹم کے دائرہ کار میں یہ فرق اس سے بھی زیادہ واضح ہے جہاں **سرنگ زنی**[۶۶] (جس پر ہم کچھ دیر میں بات کریں گے) ایک ذرے کو

---

[۶۳] turning points
[۶۴] bound state
[۶۵] scattering state
[۶۶] tunneling



شکل ۲.۱۲: (ا) مقید حال، (ب، ج) بکھراو حالات، (د) کلاسیکی مقید حال، لیکن کوانٹائی بکھراو حال۔

کسی بھی متناہی مخفیہ رکاوٹ کے اندر سے گزرنے دیتی ہے، لہٰذا مخفیہ کی قیمت صرف لامتناہی پر اہم ہو گی (شکل ۲.۱۲-د)۔

$$\begin{cases} E < [V(-\infty) \text{ اور } V(+\infty)] \Rightarrow \text{مقید حال} \\ E > [V(-\infty) \text{ یا } V(+\infty)] \Rightarrow \text{بکھراو حال} \end{cases} \tag{۲.۱۰۹}$$

"روزمرہ زندگی" میں لامتناہی پر عموماً مخفیہ صفر کو پہنچتی ہیں۔ ایسی صورت میں مسلمہ معیار مزید سادہ صورت اختیار کرتی ہے:

$$\begin{cases} E < 0 \Rightarrow \text{مقید حال} \\ E > 0 \Rightarrow \text{بکھراو حال} \end{cases} \tag{۲.۱۱۰}$$

چونکہ $x \rightarrow \pm\infty$ پر لامتناہی چکور کنواں اور ہارمونی مرتعش کی مخفی توانائیاں لامتناہی کو پہنچتی ہیں لہٰذا یہ صرف مقید حالات پیدا کرتی ہیں جبکہ آزاد ذرے کی مخفی توانائی ہر مقام پر صفر ہوتی ہے لہٰذا یہ صرف بکھراو حال[۶۷] پیدا کرتی ہے۔ اس حصہ میں (اور اگلے حصہ میں) ہم ایسی مخفی توانائیوں پر غور کریں گے جو دونوں اقسام کے حالات پیدا کرتی ہیں۔

۲.۵.۲ ڈیلٹا تفاعل کنواں

مبدا پر لامتناہی کم چوڑائی اور لامتناہی بلند ایسا نوکیلا تفاعل جس کا رقبہ اکائی ہو (شکل 13.2) **ڈیلٹا تفاعل**[۶۸] کہلاتا ہے۔

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases} \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = 1 \tag{۲.۱۱۱}$$

نقطہ $x = 0$ پر یہ تفاعل متناہی نہیں ہے لہٰذا تکنیکی طور پر اس کو تفاعل کہنا غلط ہو گا (ریاضی دان اسے **متعمم تفاعل**[۶۹] یا **متعمم تقسیم**[۷۰] کہتے ہیں)۔[۷۱] تاہم اس کا تصور نظریہ طبیعیات میں اہم کردار ادا کرتا ہے۔ (مثال کے طور پر، برقی حرکیات کے میدان میں نقطی بار کی کثافت بار ایک ڈیلٹا تفاعل ہو گا۔) آپ دیکھ سکتے ہیں کہ $\delta(x-a)$ نقطہ a پر اکائی رقبہ کا نوکیلی تفاعل ہو گا۔ چونکہ $\delta(x-a)$ اور ایک سادہ تفاعل $f(x)$ کا حاصل ضرب نقطہ a کے علاوہ ہر مقام پر صفر ہو گا لہٰذا $\delta(x-a)$ کو $f(x)$ سے ضرب دینا، اسے $f(a)$ سے ضرب دینے کے مترادف ہے:

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a) \tag{۲.۱۱۲}$$

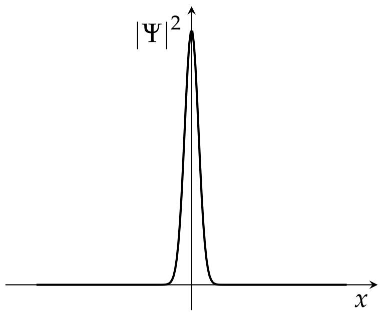
[۶۷] آپ کو یہاں پریشانی کا سامنا ہو سکتا ہے کیونکہ عمومی مسئلہ جس کے لئے $E > V_{کم تر}$ درکار ہے (سوال ۲.۲)، بکھراو حال، جو معمول پر لانے کے قابل نہیں ہیں، پر لاگو نہیں ہو گا۔ اگر آپ اس سے مطمئن نہیں ہیں تب $E \leq 0$ کے لئے مساوات شروڈنگر کو آزاد ذرہ کے لئے حل کر کے دیکھیں کہ اس کے خطی جوڑ بھی معمول پر لانے کے قابل نہیں ہیں۔ صرف مثبت مخفی توانائی حل مکمل سلسلہ دیں گے۔

[۶۸] Dirac delta function

[۶۹] generalized function

[۷۰] generalized distribution

[۷۱] ڈیلٹا تفاعل کو ایسے مستطیل (یا مثلث) کی تحدیدی صورت تصور کیا جا سکتا ہے جس کی چوڑائی بتدریج کم اور قد بتدریج بڑھتا ہو۔



شکل ۲.۱۳: ڈیراک ڈیلٹا تفاعل (مساوات ۲.۱۱۱)

بالخصوص درج ذیل لکھا جا سکتا ہے جو ڈیلٹا تفاعل کی اہم ترین خاصیت ہے۔

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a)\,\mathrm{d}x = f(a)\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-a)\,\mathrm{d}x = f(a) \tag{۲.۱۱۳}$$

تکمل کی علامت کے اندر یہ نقطہ a پر تفاعل $f(x)$ کی قیمت "اٹھاتا" ہے۔ (لازمی نہیں کہ تکمل $-\infty$ تا $+\infty$ ہو، صرف اتنا ضروری ہے کہ تکمل کے دائرہ کار میں نقطہ a شامل ہو لہٰذا $a-\epsilon$ تا $a+\epsilon$ تکمل لینا کافی ہو گا جہاں $\epsilon > 0$ ہے۔)

آئیں درج ذیل روپ کے مخفیہ پر غور کریں جہاں α ایک مثبت مستقل ہے۔[۴۲]

$$V(x) = -\alpha\delta(x) \tag{۲.۱۱۴}$$

یہ جان لینا ضروری ہے کہ (لامتناہی چکور کنواں کی مخفیہ کی طرح) یہ ایک مصنوعی مخفیہ ہے، تاہم اس کے ساتھ کام کرنا نہایت آسان ہے، اور جو کم سے کم تحلیلی پریشانیاں پیدا کیے بغیر، بنیادی نظریہ پر روشنی ڈالنے میں مددگار ثابت ہوتا ہے۔ ڈیلٹا تفاعل کنواں کے لیے شروڈنگر مساوات درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} - \alpha\delta(x)\psi = E\psi \tag{۲.۱۱۵}$$

جو مقید حالات $(E<0)$ اور بکھراو حالات $(E>0)$ دونوں پیدا کرتی ہے۔

ہم پہلے مقید حالات پر غور کرتے ہیں۔ خطہ $x<0$ میں $V(x)=0$ ہو گا لہٰذا

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = k^2\psi \tag{۲.۱۱۶}$$

[۴۲] ڈیلٹا تفاعل کی اکائی ایک بٹا لمبائی ہے (مساوات ۲.۱۱۱ دیکھیں) لہٰذا α کا بعد توانائی ضرب لمبائی ہو گا۔

لکھا جا سکتا ہے جہاں k درج ذیل ہے (مقید حال کے لئے E منفی ہو گا لہٰذا k حقیقی اور مثبت ہے۔)

$$k \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \tag{۲.۱۱۷}$$

مساوات ۲.۱۱۶ کا عمومی حل

$$\psi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx} \tag{۲.۱۱۸}$$

ہو گا جہاں $-\infty \leftarrow x$ پر پہلا جزو لامتناہی کی طرف بڑھتا ہے لہٰذا ہمیں $A = 0$ منتخب کرنا ہو گا:

$$\psi(x) = Be^{kx}, \qquad (x < 0) \tag{۲.۱۱۹}$$

خطہ $x > 0$ میں بھی $V(x)$ صفر ہے اور عمومی حل $Fe^{-kx} + Ge^{kx}$ ہو گا؛ اب $+\infty \leftarrow x$ پر دوسرا جزو لامتناہی کی طرف بڑھتا ہے لہٰذا $G = 0$ منتخب کرتے ہوئے درج ذیل لیا جائے گا۔

$$\psi(x) = Fe^{-kx}, \qquad (x > 0) \tag{۲.۱۲۰}$$

ہمیں نقطہ $x = 0$ پر سرحدی شرائط استعمال کرتے ہوئے ان دونوں تفاعل کو ایک دوسرے کے ساتھ جوڑنا ہو گا۔ میں ψ کے معیاری سرحدی شرائط پہلے بیان کر چکا ہوں

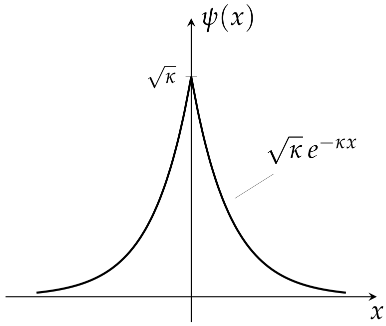
$$\begin{cases} 1. \quad \psi & \text{لازماً استمراری} \\ 2. \quad \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} & \text{استمراری، ماسوائے ان نقاط پر جہاں مخفیہ لامتناہی ہو} \end{cases} \tag{۲.۱۲۱}$$

یہاں اول سرحدی شرط کے تحت $F = B$ ہو گا لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{kx}, & (x \le 0) \\ Be^{-kx}, & (x \ge 0) \end{cases} \tag{۲.۱۲۲}$$

تفاعل $\psi(x)$ کو شکل ۲.۱۴ میں ترسیم کیا گیا ہے۔ دوم سرحدی شرط ہمیں ایسا کچھ نہیں بتاتی ہے؛ (لامتناہی چکور کنواں کی طرح) جوڑ پر مخفیہ لامتناہی ہے اور تفاعل کی ترسیل سے واضح ہے کہ $x = 0$ پر اس میں بل پایا جاتا ہے۔ مزید اب تک کی کہانی میں ڈیلٹا تفاعل کا کوئی کردار نہیں پایا گیا۔ ظاہر ہے کہ $x = 0$ پر ψ کے تفرق میں عدم استمرار یہی ڈیلٹا تفاعل تعین کرے گا۔ میں یہ عمل آپ کو کر کے دکھاتا ہوں جہاں آپ یہ بھی دیکھ پائیں گے کہ کیوں $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ عموماً استمراری ہوتا ہے۔

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi}{\mathrm{d}x^2}\,\mathrm{d}x + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon}V(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x = E\int_{-\epsilon}^{+\epsilon}\psi(x)\,\mathrm{d}x \tag{۲.۱۲۳}$$



شکل ۲.۱۴: ڈیلٹا تفاعل مخفیہ (مساوات ۲.۱۲۲) کے لئے مقید حال تفاعل موج۔

پہلا تکمل درحقیقت دونوں آخری نقاط پر $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ کی قیمتیں ہوں گی؛ آخری تکمل اس پٹی کا رقبہ ہو گا، جس کا قد متناہی، اور $\epsilon \to 0$ کی تحدیدی صورت میں، چوڑائی صفر کو پہنچتی ہو، لہٰذا یہ تکمل صفر ہو گا۔ یوں درج ذیل ہو گا۔

$$\Delta\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right) \equiv \left.\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|_{+\epsilon} - \left.\frac{\partial\psi}{\partial x}\right|_{-\epsilon} = \frac{2m}{\hbar^2}\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x \tag{۲.۱۲۴}$$

عمومی طور پر دائیں ہاتھ پر حد صفر کے برابر ہو گا لہٰذا $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ عموماً استمراری ہو گا۔ لیکن جب سرحد پر $V(x)$ لامتناہی ہو تب یہ دلیل قابل قبول نہیں ہو گی۔ بالخصوص $V(x) = -\alpha\delta(x)$ کی صورت میں مساوات ۲.۱۱۳ درج ذیل دے گی:

$$\Delta\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(0) \tag{۲.۱۲۵}$$

یہاں درج ذیل ہو گا (مساوات ۲.۱۲۲):

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} = -Bke^{-kx}, \quad (x>0) \quad \implies \left.\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|_{+} = -Bk \\ \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} = +Bke^{+kx}, \quad (x<0) \quad \implies \left.\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|_{-} = +Bk \end{cases}$$

لہٰذا $\Delta(\mathrm{d}\psi/\,\mathrm{d}x) = -2Bk$ ہو گا۔ ساتھ ہی $\psi(0) = B$ ہے۔ اس طرح مساوات ۲.۱۲۵ درج ذیل کہتی ہے:

$$k = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \tag{۲.۱۲۶}$$

اور اجازتی توانائیاں درج ذیل ہوں گی (مساوات ۲.۱۱۷)۔

$$E = -\frac{\hbar^2k^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \tag{۲.۱۲۷}$$

آخر میں ψ کو معمول پر لاتے ہوئے

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi(x)\right|^2 \mathrm{d}x = 2|B|^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx}\,\mathrm{d}x = \frac{|B|^2}{k} = 1$$

(اپنی آسانی کے لیے مثبت حقیقی جذر کا انتخاب کر کے) درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$B = \sqrt{k} = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} \tag{۲.۱۲۸}$$

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ ڈیلٹا تفاعل، کی "زور" α کے قطع نظر، ٹھیک ایک مقید حال دیتا ہے۔

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}; \qquad E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \tag{۲.۱۲۹}$$

ہم $E > 0$ کی صورت میں بکھراو حالات کے بارے میں کیا کہہ سکتے ہیں؟ شروڈنگر مساوات $x < 0$ کے لئے درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

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

جہاں

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{۲.۱۳۰}$$

حقیقی اور مثبت ہے۔ اس کا عمومی حل درج ذیل ہے

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{۲.۱۳۱}$$

جہاں کوئی بھی جزو بے قابو نہیں بڑھتا ہے لہٰذا انہیں رد نہیں کیا جا سکتا ہے۔ اسی طرح $x > 0$ کے لئے درج ذیل ہو گا۔

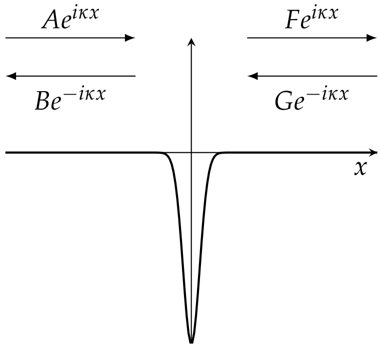
$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \tag{۲.۱۳۲}$$

نقطہ $x = 0$ پر $\psi(x)$ کے استمرار کی بنا درج ذیل ہو گا۔

$$F + G = A + B \tag{۲.۱۳۳}$$

تفرقات درج ذیل ہوں گے۔

$$\begin{cases} \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} = ik(Fe^{ikx} - Ge^{-ikx}), \quad (x>0), \implies \left.\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|_+ = ik(F-G) \\ \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} = ik(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}), \quad (x<0), \implies \left.\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}\right|_- = ik(A-B) \end{cases}$$



شکل ۲.۱۵: ڈیلٹا تفاعل کنواں سے بکھراو۔

لہٰذا $\Delta(\mathrm{d}\psi/\mathrm{d}x) = ik(F - G - A + B)$ ہو گا۔ ساتھ ہی $\psi(0) = (A + B)$ ہو گا لہٰذا دوسری سرحدی شرط (مساوات ۲.۱۲۵) کہتی ہے

$$ik(F - G - A + B) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + B) \tag{۲.۱۳۴}$$

یا مختصراً:

$$F - G = A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta), \qquad \beta \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \tag{۲.۱۳۵}$$

دونوں سرحدی شرائط مسلط کرنے کے بعد ہمارے پاس دو مساوات (مساوات ۲.۱۳۳ اور ۲.۱۳۵) جبکہ چار نامعلوم مستقلات A ، B ، C اور D بلکہ k شامل کرتے ہوئے پانچ نامعلوم مستقل ہوں گے۔ یہ معمول پر لانے کے قابل حال نہیں ہے لہٰذا معمول پر لانا مددگار ثابت نہیں ہو گا۔ بہتر ہو گا کہ ہم رک کر ان مستقلات کی انفرادی طبعی اہمیت پر غور کریں۔ آپ کو یاد ہو گا کہ e^{ikx} (کے ساتھ تابع وقت جزو ضربی $e^{-iEt/\hbar}$ منسلک کرنے سے) دائیں رخ حرکت کرتا ہوا تفاعل موج پیدا ہوتا ہے۔ اسی طرح e^{-ikx} بائیں رخ حرکت کرتا ہوا موج دیتا ہے۔ یوں مساوات ۲.۱۳۱ میں مستقل A بائیں سے آمدی موج کا حیطہ ہے، B بائیں رخ واپس لوٹتے ہوئے موج کا حیطہ ہے، F (مساوات ۲.۱۳۲) دائیں رخ نکل کر چلتے ہوئے موج کا حیطہ جبکہ H دائیں سے آمدی موج کا حیطہ ہے (شکل ۲.۱۵ دیکھیں)۔ بکھراو کے عمومی تجربہ میں عموماً ایک رخ (مثلاً بائیں) سے ذرات پھینکے جاتے ہیں۔ ایسی صورت میں دائیں جانب سے آمدی موج کا حیطہ صفر ہو گا:

$$G = 0, \quad \text{بائیں سے بکھراو} \tag{۲.۱۳۶}$$

آمدی موج[۴۳] کا حیطہ A ، **منعکس موج**[۴۴] کا حیطہ B جبکہ **ترسیلی موج**[۴۵] کا حیطہ F ہو گا۔ مساوات ۲.۱۳۳ اور ۲.۱۳۵ کو B اور F

[۴۳] incident wave
[۴۴] reflected wave
[۴۵] transmitted wave

کے لیے حل کر کے درج ذیل حاصل ہوں گے۔

$$B = \frac{i\beta}{1 - i\beta}A, \quad F = \frac{1}{1 - i\beta}A \tag{۲.۱۳۷}$$

(اگر آپ دائیں سے بکھراو کا مطالعہ کرنا چاہیں تب $A = 0$ ہوگا؛ G آمدی حیطہ، F منعکس حیطہ، اور B ترسیلی حیطہ ہوں گے۔)

چونکہ کسی مخصوص مقام پر ذرے کی موجودگی کا احتمال $|\psi|$ ہوتا ہے لہٰذا آمدی ذرہ کے انعکاس کا تناسبی[۷۶] احتمال درج ذیل ہوگا

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} \tag{۲.۱۳۸}$$

جہاں R کو **شرح انعکاس**[۷۷] کہتے ہیں۔ (اگر آپ کے پاس ذرات کی ایک شعاع ہو تو R آپ کو بتائے گا کہ ٹکرانے کے بعد ان میں سے کتنے ذرات واپس لوٹ کر آئیں گے۔) ترسیل کا احتمال درج ذیل ہوگا جسے **شرح ترسیل**[۷۸] کہتے ہیں۔

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \beta^2} \tag{۲.۱۳۹}$$

ظاہر ہے ان احتمال کا مجموعہ ایک (1) ہوگا۔

$$R + T = 1 \tag{۲.۱۴۰}$$

دھیان رہے کہ R اور T متغیر β کے اور لہٰذا (مساوات ۲.۱۳۰ اور ۲.۱۳۵) E کے تفاعل ہوں گے۔

$$R = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{m\alpha^2}}, \qquad T = \frac{1}{1 + \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E}} \tag{۲.۱۴۱}$$

توانائی جتنی زیادہ ہو، ترسیل کا احتمال اتنا ہی زیادہ ہوگا (جیسا کہ ظاہری طور پر ہونا چاہیے)۔

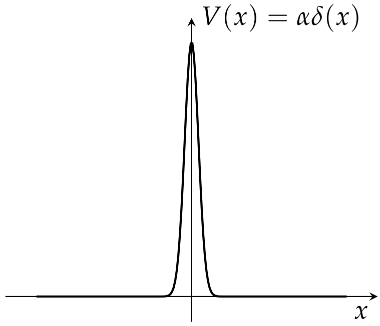
یہاں تک باقی سب ٹھیک ہے تاہم ایک اصولی مسئلہ باقی ہے جسے ہم نظر انداز نہیں کر سکتے ہیں۔ چونکہ بکھراو موج کے تفاعل معمول پر لانے کے قابل نہیں ہیں لہٰذا یہ کسی صورت بھی حقیقی ذرے کے حال کو ظاہر نہیں کر سکتے ہیں۔ تاہم ہم اس مسئلے کا حل جانتے ہیں۔ جیسا ہم نے آزاد ذرہ کے لیے کیا تھا، ہمیں ساکن حالات کے ایسے خطی جوڑ تیار کرنے ہوں گے جو معمول پر لائے جانے کے قابل ہوں۔ حقیقی طبعی ذرات کو یوں تیار کردہ موجی اکٹھ ظاہر کرے گا۔ یہ ظاہری طور پر سیدھا سادہ اصول ہے جو عملی استعمال میں پیچیدہ ثابت ہوتا ہے لہٰذا یہاں سے آگے مسئلے کو کمپیوٹر کی مدد

---

[۷۶] یہ معمول پر لانے کے قابل تفاعل نہیں ہے لہٰذا کسی ایک مخصوص نقطہ پر ذرہ پایا جانے کا احتمال بے معنی ہوگا؛ بہر حال آمدی اور منعکس امواج کے احتمالات کا تناسب معنی خیز ہے۔ اگلے پیراگراف میں اس پر مزید بات کی جائے گی۔

[۷۷] reflection coefficient

[۷۸] transmission coefficient



شکل ۲.۱۶: ڈیلٹا تفاعل رکاوٹ۔

سے حل کرنا بہتر ہو گا۔[79] چونکہ توانائی کی قیمتوں کا پورا سلسلہ استعمال کیے بغیر آزاد ذرے کے تفاعل موج کو معمول پر نہیں لایا جا سکتا ہے لہٰذا R اور T کو (بالترتیب) E کے قریب ذرات کی تخمینی شرح انعکاس اور شرح ترسیل سمجھنا چاہیے۔

یہ ایک عجیب بات ہے کہ ہم لب لباب وقت کے تابع مسئلہ (جہاں ایک آمدی ذرہ مخفیہ سے بکھر کر لامتناہی کی طرف رواں ہوتا ہے) پر غور، ساکن حالات استعمال کرتے ہوئے کر پاتے ہیں۔ آخر کار (مساوات ۲.۱۳۱ اور ۲.۱۳۲ میں) ψ ایک مخلوط، غیر تابع وقت، سائن نما تفاعل ہے جو (مستقل حیطہ کے ساتھ) دونوں اطراف لامتناہی تک پھیلا ہوا ہے۔ اس کے باوجود اس تفاعل پر موزوں سرحدی شرائط مسلط کر کے ہم ایک ذرہ (جسے مقامی موجی اکٹھ سے ظاہر کیا گیا ہو) کی مخفیہ سے انعکاس یا ترسیل کا احتمال تعین کر پاتے ہیں۔ اس ریاضیاتی کرامت کی وجہ میرے خیال میں یہ حقیقت ہے کہ ہم پوری فضا میں پھیلے ہوئے تفاعل موج، جن کی تابعیت وقت نہ ہونے کے برابر ہو، کے خطی جوڑ لے کر ایک (حرکت پذیر) نقطہ کے گرد ایسا تفاعل موج تیار کر سکتے ہیں جس پر وقت کے لحاظ سے تفصیلاً غور کیا جا سکتا ہے (سوال ۲.۴۳)

متعلقہ مساوات جانتے ہوئے آئیں ڈیلٹا تفاعل رکاوٹ (شکل ۲.۱۶) کے مسئلہ پر غور کریں۔ ہمیں صرف α کی علامت تبدیل کرنی ہو گی۔ ظاہر ہے یہ تحدیدی حال کو ختم کرے گا (سوال ۲.۲)۔ دوسری جانب، شرح انعکاس اور شرح ترسیل جو α^2 پر منحصر ہیں تبدیل نہیں ہوں گے۔ کتنی عجیب بات ہے کہ ذرہ ایک رکاوٹ کے اندر سے یا ایک کنواں کے اوپر سے ایک جیسی آسانی کے ساتھ گزرتا ہے۔ کلاسیکی طور پر جیسا کہ آپ جانتے ہیں، ایک ذرہ کبھی بھی لامتناہی قد کے رکاوٹ کو عبور نہیں کر سکتا، چاہے اس کی توانائی کتنی ہی کیوں نہ ہو۔ حقیقتاً کلاسیکی مسائل بکھراو غیر دلچسپ ہوتے ہیں: اگر $E > V_{\text{بلند تر}}$ ہو تب $R = 0$ اور $T = 1$ ہو گا اور ذرہ ہر صورت رکاوٹ عبور کر پائے گا؛ اگر $E < V_{\text{بلند تر}}$ ہو تب $T = 0$ اور $R = 1$ ہو گا اور ذرہ پہاڑی پر وہاں تک چڑھے گا جہاں تک اس میں دم ہو اور اس کے بعد اسی راستے واپس لوٹے گا۔ کوانٹائی بکھراو زیادہ دلچسپ ہوتے ہیں: اگر $E < V_{\text{بلند تر}}$ ہو تب بھی ایک ذرے کا مخفیہ عبور کرنے کا احتمال غیر صفر ہو گا۔ اس مظہر کو **سرنگ زنی**[80] کہتے

[79] کنواں اور رکاوٹوں سے موجی اکٹھ کے بکھراو کے اعدادی مطالعہ دلچسپ معلومات فراہم کرتے ہیں۔

[80] tunneling

ہیں جس پر جدید برقیات کا بیشتر حصہ منحصر ہے اور جو خوردبین میں حیرت انگیز ترقی کا سبب بنا ہے۔ اس کے برعکس بلند تر $E > V$ کی صورت میں بھی ذرے کے انعکاس کا احتمال غیر صفر ہو گا؛ اگرچہ میں آپ کو کبھی بھی مشورہ نہیں دوں گا کہ چھت سے نیچے کود یں اور توقع رکھیں کہ کوانٹم میکانیات آپ کی جان بچا پائے گی (سوال ۲.۳۵ دیکھیے گا)۔

سوال ۲.۲۳: درج ذیل تکملات کی قیمتیں تلاش کریں۔

ا. $\int_{-3}^{+1}(x^3-3x^2+2x-1)\delta(x+2)\,\mathrm{d}x$

ب. $\int_{0}^{\infty}[\cos(3x)+2]\delta(x-\pi)\,\mathrm{d}x$

ج. $\int_{-1}^{+1}e^{(|x|+3)}\delta(x-2)\,\mathrm{d}x$

سوال ۲.۲۴: ڈیلٹا تفاعلات زیر علامت تکمل رہتے ہیں اور دو فقرے $D_1(x)$ اور $D_2(x)$ جو ڈیلٹا تفاعل پر مبنی ہیں صرف درج صورت میں ایک دوسرے کے برابر ہوں گے

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)D_1(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)D_2(x)\,\mathrm{d}x$$

جہاں $f(x)$ کوئی بھی سادہ تفاعل ہو سکتا ہے۔

ا. درج ذیل دکھائیں

$$\delta(cx)=\frac{1}{|c|}\delta(x) \tag{۲.۱۴۲}$$

جہاں c ایک حقیقی مستقل ہے۔ (منفی c کی صورت میں بھی تصدیق کریں۔)

ب. **سیڑھی تفاعل**[۸۱] $\theta(x)$ درج ذیل ہے۔

$$\theta(x)=\begin{cases}1 & x>0\\ 0 & x<0\end{cases} \tag{۲.۱۴۳}$$

(اس نایاب صورت میں جہاں اس کی ضرورت پیش آتی ہو، ہم $\theta(0)$ کی تعریف $\frac{1}{2}$ کرتے ہیں۔) دکھائیں کہ $\mathrm{d}\theta/\mathrm{d}x=\delta(x)$ ہو گا۔

سوال ۲.۲۵: عدم یقینیت کے اصول کو ۲.۱۲۹ کے تفاعل موج کے لئے پرکھیں۔ اشارہ چونکہ ψ کے تفرق کا $x=0$ پر عدم استمرار پایا جاتا ہے لہٰذا $\langle p^2\rangle$ کا حساب پیچیدہ ہو گا۔ سوال ۲.۲۴-ب کا نتیجہ استعمال کریں۔ جزوی جواب: $\langle p^2\rangle=(m\alpha/\hbar)^2$

سوال ۲.۲۶: تفاعل $\delta(x)$ کا فوریئر تبادل کیا ہو گا؟ مسئلہ پلانشرل استعمال کر کے درج ذیل دکھائیں۔

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ikx}\,\mathrm{d}k \tag{۲.۱۴۴}$$

---

[۸۱] step function

تبصرہ: اس کلیہ دیکھ کر ایک عزت مند ریاضی دان پریشان ضرور ہو گا۔ اگرچہ $x = 0$ کے لئے یہ تکمل لامتناہی ہے اور $x \neq 0$ کی صورت میں چونکہ متکمل ہمیشہ کے لئے ارتعاش پذیر رہتا ہے لہٰذا یہ (صفر یا کسی دوسرے عدد کو) مرکوز نہیں ہوتا ہے۔ اس کی پیوند کاری کے طریقے پائے جاتے ہیں (مثلاً، ہم $-L$ تا $+L$ تکمل لے کر، مساوات ۲.۱۴۴ کو، $L \to \infty$ کرتے ہوئے متناہی تکمل کی اوسط قیمت تصور کر سکتے ہیں)۔ یہاں دشواری کا سبب یہ ہے کہ مسئلہ پلانشرل کے (مربع متکاملیت) کی بنیادی شرط کو ڈیلٹا تفاعل مطمئن نہیں کرتا ہے (صفحہ ۶۲ پر مربع متکاملیت کی شرط حاشیہ میں پیش کی گئی ہے)۔ اس کے باوجود مساوات ۲.۱۴۴ نہایت مددگار ثابت ہو سکتا ہے اگر اس کو احتیاط سے استعمال کیا جائے۔

سوال ۲.۲۷: درج ذیل جڑواں ڈیلٹا تفاعل مخفیہ پر غور کریں جہاں α اور a مثبت مستقل ہیں۔

$$V(x) = -\alpha[\delta(x+a) + \delta(x-a)]$$

ا. اس مخفیہ کا خاکہ کھینچیں۔

ب. یہ کتنی مقید حالات پیدا کرتا ہے؟ $\alpha = \hbar^2/ma$ اور $\alpha = \hbar^2/4ma$ کیلئے اجازتی توانائیاں تلاش کریں اور تفاعلات موج کا خاکہ کھینچیں۔

سوال ۲.۲۸: جڑواں ڈیلٹا تفاعل کے مخفیہ (سوال ۲.۲۷) کے لئے شرح ترسیل تلاش کریں۔

۲.۶ متناہی چکور کنواں

ہم آخری مثال کے طور پر متناہی چکور کنواں کا مخفیہ

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & -a < x < a \\ 0 & |x| > a \end{cases} \tag{۲.۱۴۵}$$

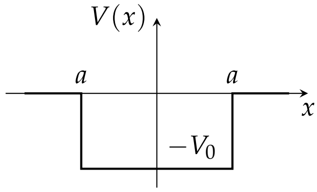
لیتے ہیں جہاں V_0 ایک (مثبت) مستقل ہے (شکل ۲.۱۷)۔ ڈیلٹا تفاعل کنواں کی طرح یہ مخفیہ مقید حالات (جہاں $E < 0$ ہو گا) کے ساتھ ساتھ بکھراو حالات (جہاں $E > 0$ ہو گا) بھی پیدا کرتا ہے۔ ہم پہلے مقید حالات پر غور کرتے ہیں۔

خطہ $x < -a$ میں جہاں مخفیہ صفر ہے، شروڈنگر مساوات درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi \quad \text{یا} \quad \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = \kappa^2\psi$$

جہاں

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \tag{۲.۱۴۶}$$



شکل ۲.۱۷: متناہی چکور کنواں (مساوات ۲.۱۴۵)۔

حقیقی اور مثبت ہے۔ اس کا عمومی حل $\Psi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx}$ ہے لیکن $x \to -\infty$ کی صورت میں اس کا پہلا جزو بے قابو بڑھتا ہے لہٰذا (ہمیشہ طرح؛ مساوات ۲.۱۱۹ دیکھیں) طبعی طور پر قابل قبول حل درج ذیل ہو گا۔

$$\psi(x) = Be^{kx}, \qquad x < -a \tag{۲.۱۴۷}$$

خطہ $-a < x < a$ میں جہاں $V(x) = -V_0$ ہے مساوات شروڈنگر درج ذیل روپ اختیار کرے گی

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -l^2\psi \quad \text{یا} \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -V_0\psi$$

جہاں l درج ذیل ہے۔

$$l \equiv \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} \tag{۲.۱۴۸}$$

اگرچہ مقید حالات کے لئے E منفی ہے تاہم $E > V_{\text{کمتر}}$ کی بنا (سوال ۲.۲ دیکھیں) اس کو $-V_0$ سے بڑا ہونا ہو گا؛ لہٰذا l بھی حقیقی اور مثبت ہو گا۔ اس کا عمومی حل درج ذیل ہو گا[۸۲]

$$\psi(x) = C\sin(lx) + D\cos(lx), \qquad -a < x < a \tag{۲.۱۴۹}$$

جہاں C اور D اختیاری مستقلات ہیں۔ آخر میں، خطہ $a < x$ جہاں ایک بار پھر مخفیہ صفر ہے؛ عمومی حل $\psi(x) = Fe^{-\kappa x} + Ge^{\kappa x}$ ہو گا تاہم $x \to \infty$ کی صورت میں دوسرا جزو بے قابو بڑھتا ہے لہٰذا قابل قبول حل درج ذیل ہو گا۔

$$\psi(x) = Fe^{-\kappa x}, \qquad x > a \tag{۲.۱۵۰}$$

اگلے قدم میں ہمیں سرحدی شرائط مسلط کرنے ہوں گے: ψ اور $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ نقاط $-a$ اور $+a$ پر استمراری ہیں۔ یہ جانتے ہوئے کہ دیا گیا مخفیہ جفت تفاعل ہے، ہم کچھ وقت بچا سکتے ہیں اور فرض کر سکتے ہیں کہ حل مثبت یا طاق

[۸۲] آپ چاہیں تو عمومی حل کو قوت نمائی روپ $(C'e^{ilx} + D'e^{-ilx})$ میں لکھ سکتے ہیں۔ اس سے بھی وہی اختتامی نتائج حاصل ہوں گے، تاہم تشاکلی مخفیہ کی بنا ہم جانتے ہیں کہ حل جفت یا طاق ہوں گے، اور sin اور cos کا استعمال اس حقیقت کو بلاواسطہ بروئے کار لا سکتا ہے۔

ہوں گے (سوال ۱.۲-ج)۔ اس کا فائدہ یہ ہے کہ ہمیں صرف ایک جانب (مثلاً $+a$) پر سرحدی شرائط مسلط کرنی ہوں گی؛ چونکہ $\psi(-x) = \pm\psi(x)$ ہے لہٰذا دوسری جانب کا حل ہمیں خود بخود حاصل ہو گا۔ میں جفت حل حاصل کرتا ہوں جبکہ آپ کو سوال ۲.۲۹ میں طاق حل تلاش کرنے کو کہا گیا ہے۔ $\cos$ جفت ہے (جبکہ $\sin$ طاق ہے) لہٰذا میں درج ذیل روپ کے حلوں کی تلاش میں ہوں۔

$$\psi(x) = \begin{cases} Fe^{-\kappa x} & x > a \\ D\cos(lx) & 0 < x < a \\ \psi(-x) & x < 0 \end{cases} \tag{۲.۱۵۱}$$

نقطہ $x = a$ پر $\psi(x)$ کی استمرار درج ذیل کہتی ہے

$$Fe^{-\kappa a} = D\cos(la) \tag{۲.۱۵۲}$$

جبکہ $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ کی استمرار درج ذیل کہتی ہے۔

$$-\kappa Fe^{-\kappa a} = -lD\sin(la) \tag{۲.۱۵۳}$$

مساوات ۲.۱۵۳ کو مساوات ۲.۱۵۲ سے تقسیم کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\kappa = l\tan(la) \tag{۲.۱۵۴}$$

چونکہ κ اور l دونوں E کے تفاعل ہیں لہٰذا اس کلیہ سے اجازتی توانائیاں حاصل کی جا سکتی ہیں۔ اجازتی توانائی E کے لئے حل کرنے سے پہلے ہم درج ذیل بہتر علامتیں متعارف کرتے ہیں۔

$$z \equiv la \quad \text{اور} \quad z_0 \equiv \frac{a}{\hbar}\sqrt{2mV_0} \tag{۲.۱۵۵}$$

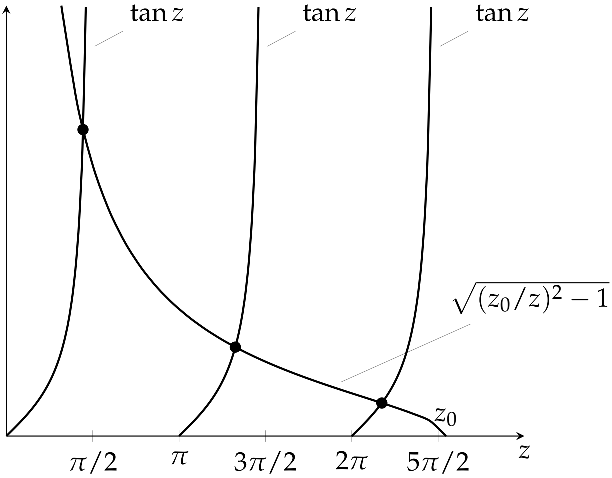
مساوات ۲.۱۴۶ اور ۲.۱۴۸ کے تحت $(\kappa^2 + l^2) = 2mV_0/\hbar^2$ ہو گا لہٰذا $\kappa a = \sqrt{z_0^2 - z^2}$ ہو گا اور مساوات ۲.۱۵۴ درج ذیل روپ اختیار کرے گی۔

$$\tan z = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1} \tag{۲.۱۵۶}$$

یہ z (لہٰذا E) کی ماورائی مساوات ہے جس کا متغیر z_0 ہے (جو کنواں کی "جسامت" کی ناپ ہے)۔ اس کو اعدادی طریقہ سے کمپیوٹر کے ذریعے حل کیا جا سکتا یا $\tan z$ اور $\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$ کو ایک ساتھ ترسیم کر کے ان کے نقاط تقاطع لیتے ہوئے حل کیا جا سکتا ہے (شکل ۲.۱۸)۔ دو تحدیدی صورتیں زیادہ دلچسپی کے حامل ہیں۔

۱. **چوڑا اور گہرا کنواں۔** بہت بڑی z_0 کی صورت میں طاق n کے لئے نقاط تقاطع $z_n = n\pi/2$ سے معمولی نیچے ہوں گے؛ یوں درج ذیل ہو گا۔

$$E_n + V_0 \cong \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2} \tag{۲.۱۵۷}$$



شکل ۲.۱۸: ترسیمی حل برائے مساوات ۲.۱۵۶ جہاں $z_0 = 8$ لیا گیا ہے (جفت حالات)۔

اب $V_0 + E$ کنواں کی تہہ سے زیادہ توانائی کو ظاہر کرتی ہے اور مساوات کا دایاں ہاتھ ہمیں $2a$ چوڑائی کے لامتناہی چکور کنواں کی توانائیاں دیتا ہے (مساوات ۲.۲۷ دیکھیں)؛ بلکہ n یہاں طاق ہے لہٰذا توانائیوں کی نصف تعداد حاصل ہو گی۔ (جیسا آپ سوال ۲.۲۹ میں دیکھیں گے کل توانائیوں کی باقی نصف تعداد طاق تفاعل موج سے حاصل ہو گی۔) یوں $V_0 \to \infty$ کرنے سے متناہی چکور کنواں سے لامتناہی چکور کنواں حاصل ہو گا؛ تاہم کسی بھی متناہی V_0 کی صورت میں مقید حالات کی تعداد متناہی ہو گی۔

ب. **کم گہرا، کم چوڑا کنواں** جیسے جیسے z_0 کی قیمت کم کی جاتی ہے مقید حالات کی تعداد کم ہوتی جاتی ہے حتیٰ کہ آخر کار ($z_0 < \pi/2$) کیلئے جہاں کم ترین طاق حال بھی نہیں پایا جاتا) صرف ایک مقید حال رہ جائے گا۔ دلچسپ بات یہ ہے، کنواں جتنا بھی "کمزور" کیوں نہ ہو، ایک عدد مقید حال ضرور پایا جائے گا۔

اگر آپ ψ (مساوات ۲.۱۵۱) کو معمول پر لانے میں دلچسپی رکھتے ہیں (سوال ۲.۳۰) تو ایسا ضرور کریں جبکہ میں اب بکھراو حالات ($E > 0$) کی طرف بڑھنا چاہوں گا۔ بائیں ہاتھ جہاں $V(x) = 0$ ہے درج ذیل ہو گا

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad (x < -a) \tag{۲.۱۵۸}$$

جہاں ہمیشہ کی طرح درج ذیل ہو گا۔

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{۲.۱۵۹}$$

کنواں کے اندر جہاں $V(x) = -V_0$ ہے درج ذیل ہو گا

$$\psi(x) = C\sin(lx) + D\cos(lx) \qquad (-a < x < a) \tag{۲.۱۶۰}$$

جہاں پہلے کی طرح درج ذیل ہو گا۔

$$l \equiv \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar} \tag{۲.۱۶۱}$$

دائیں جانب، جہاں ہم فرض کرتے ہیں کہ کوئی آمدی موج نہیں پائی جاتی، درج ذیل ہو گا۔

$$\psi(x) = Fe^{ikx} \tag{۲.۱۶۲}$$

یہاں آمدی حیطہ A، انعکاسی حیطہ B اور ترسیلی حیطہ F ہے۔[۸۳]

یہاں چار سرحدی شرائط پائے جاتے ہیں: نقطہ $-a$ پر $\psi(x)$ کے استمرار کے تحت درج ذیل ہو گا

$$Ae^{-ika} + Be^{ika} = -C\sin(la) + D\cos(la) \tag{۲.۱۶۳}$$

نقطہ $-a$ پر $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ کا استمرار درج ذیل دے گا

$$ik[Ae^{-ika} - Be^{ika}] = l[C\cos(la) + D\sin(la)] \tag{۲.۱۶۴}$$

نقطہ $+a$ پر $\psi(x)$ کا استمرار درج ذیل دے گا

$$C\sin(la) + D\cos(la)] = Fe^{ika} \tag{۲.۱۶۵}$$

اور $+a$ پر $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ کا استمرار درج ذیل دے گا۔

$$l[C\cos(la) - D\sin(la)] = ikFe^{ika} \tag{۲.۱۶۶}$$

ہم ان میں سے دو کو استعمال کرتے ہوئے C اور D خارج کر کے باقی دو کو B اور F کے لئے حل کر سکتے ہیں (سوال ۲.۳۲ دیکھیے گا)۔

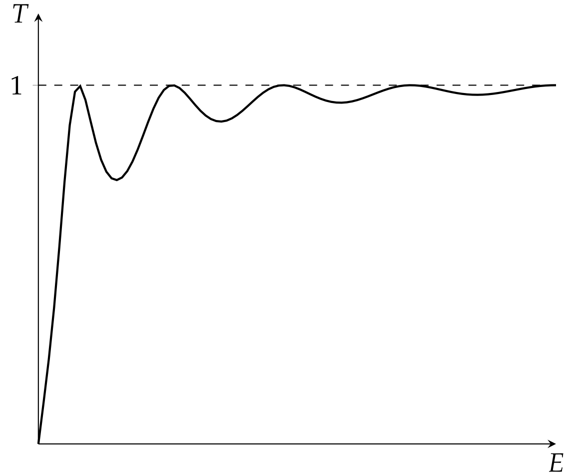
$$B = i\frac{\sin(2la)}{2kl}(l^2 - k^2)F \tag{۲.۱۶۷}$$

$$F = \frac{e^{-2ika}A}{\cos(2la) - i\frac{(k^2+l^2)}{2kl}\sin(2la)} \tag{۲.۱۶۸}$$

شرح ترسیل $(T = |F|^2 / |A|^2)$ کو اصل متغیرات کی صورت میں لکھتے ہوئے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)}\sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}\right) \tag{۲.۱۶۹}$$

[۸۳] مقید حالات کی صورت میں ہم نے طاق اور جفت تفاعلات تلاش کیے۔ ہم یہاں بھی ایسا کر سکتے ہیں، تاہم مسئلہ بکھراو میں امواج صرف ایک رخ سے آتے ہیں لہٰذا یہ مسئلہ ذاتی طور پر غیر تشاکلی ہے اور سیاق و سباق کے لحاظ سے (حرکت پذیر امواج کے اظہار کے لئے) قوت نمائی علامت کا استعمال زیادہ موثر ہے۔



شکل ۲.۱۹: ترسیلی مستقل بطور توانائی کا تفاعل (مساوات ۲.۱۶۹)۔

دھیان رہے کہ جہاں بھی سائن کی قیمت صفر ہو، یعنی درج ذیل نقطوں پر جہاں n عدد صحیح ہے

$$\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(E_n + V_0)} = n\pi \tag{۲.۱۷۰}$$

وہاں $T = 1$ (اور کنواں "مکمل شفاف") ہو گا۔ یوں مکمل ترسیل کے لیے درکار توانائیاں درج ذیل ہوں گی

$$E_n + V_0 = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2} \tag{۲.۱۷۱}$$

جو عین لامتناہی چکور کنواں کی اجازتی توانائیاں ہیں۔ شکل ۲.۱۹ میں توانائی کے لحاظ سے T ترسیم کیا گیا ہے۔

سوال ۲.۲۹: متناہی چکور کنواں کے طاق مقید حال کے تفاعل موج کا تجزیہ کریں۔ اجازتی توانائیوں کی ماورائی مساوات اخذ کر کے اسے ترسیمی طور پر حل کریں۔ اس کے دونوں تحدیدی صورتوں پر غور کریں۔ کیا ہر صورت ایک طاق مقید حال پایا جائے گا؟

سوال ۲.۳۰: مساوات ۲.۱۵۱ میں دیا گیا $\psi(x)$ معمول پر لا کر مستقل D اور F تعین کریں۔

سوال ۲.۳۱: ڈیراک ڈیلٹا تفاعل کو ایک ایسی مستطیل کی تحدیدی صورت تصور کیا جا سکتا ہے، جس کا رقبہ اکائی (1) رکھتے ہوئے اس کی چوڑائی صفر تک اور قد لامتناہی تک پہنچائی جائے۔ دکھائیں کہ ڈیلٹا تفاعل کنواں (مساوات ۲.۱۱۴) لامتناہی گہرا ہونے کے باوجود $z_0 \to 0$ کی بنا ایک "کمزور" مخفیہ ہے۔ ڈیلٹا تفاعل مخفیہ کو متناہی چکور کنواں کی تحدیدی صورت لیتے ہوئے اس کی مقید حال کی توانائی تعین کریں۔ تصدیق کریں کہ آپ کا جواب مساوات ۲.۱۲۹ کے مطابق ہے۔ دکھائیں کہ موزوں حد کی صورت میں مساوات ۲.۱۶۹ کی تخفیف مساوات ۲.۱۴۱ دے گی۔

سوال ۲.۳۲: مساوات ۲.۱۶۷ اور ۲.۱۶۸ اخذ کریں۔ اشارہ: مساوات ۲.۱۶۵ اور ۲.۱۶۶ سے C اور D کو F کی صورت میں حاصل کر کے

$$C = [\sin(la) + i\frac{k}{l}\cos(la)]e^{ika}F; \qquad D = [\cos(la) - i\frac{k}{l}\sin(la)]e^{ika}F$$

انہیں واپس مساوات ۲.۱۶۳ اور ۲.۱۶۴ میں پر کریں۔ شرح ترسیل حاصل کر کے مساوات ۲.۱۲۹ کی تصدیق کریں۔

سوال ۲.۳۳: مستطیلی رکاوٹ (جسے خطہ $-a < x < a$ میں $V(x) = +V_0 > 0$ لیجئے سے مساوات ۲.۱۴۵ دیتی ہے) کے لئے شرح ترسیل تعین کریں۔ تین صورتوں $E < V_0$ ، $E = V_0$ اور $E > v_0$ کو علیحدہ علیحدہ حل کریں۔ (آپ دیکھیں گے کہ رکاوٹ کے اندر تینوں صورتوں میں تفاعل موج ایک دوسرے سے مختلف ہوں گے۔) جزوی جواب: $E < V_0$ کے لئے درج ذیل ہو گا۔[۸۴]

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)}\sinh^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right)$$

سوال ۲.۳۴: درج ذیل سیڑھی مخفیہ پر غور کریں۔

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

ا. شرح انعکاس $E < V_0$ صورت کیلئے حاصل کر کے جواب پر تبصرہ کریں۔

ب. شرح انعکاس $E > V_0$ صورت کے لئے حاصل کریں۔

ج. ایسے مخفیہ کے لئے جو رکاوٹ کے دائیں جانب واپس صفر نہیں ہو جاتا، ترسیلی موج کی رفتار مختلف ہو گی لہٰذا شرح ترسیل $|F|^2 / |A|^2$ نہیں ہو گی (جہاں A آمدی حیطہ اور F ترسیلی حیطہ ہے)۔ دکھائیں کہ $E > V_0$ کے لئے درج ذیل ہو گا۔

$$T = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}}\frac{|F|^2}{|A|^2} \tag{۲.۱۷۲}$$

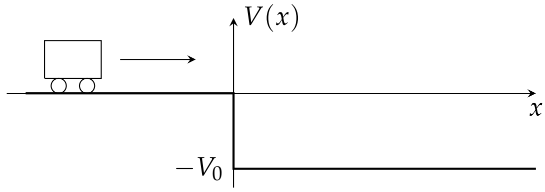
اشارہ: آپ اسے مساوات ۲.۹۸ سے حاصل کر سکتے ہیں؛ یا زیادہ خوبصورتی لیکن کم معلومات کے ساتھ احتمال رو (سوال ۲.۱۹) سے حاصل کر سکتے ہیں۔ $E < V_0$ کی صورت میں T کیا ہو گا؟

د. صورت $E > V_0$ کے لیے سیڑھی مخفیہ کے لئے شرح ترسیل تلاش کر کے $T + R = 1$ کی تصدیق کریں۔

سوال ۲.۳۵: ایک ذرہ جس کی کمیت m اور حرکی توانائی $E > 0$ ہو مخفیہ کی ایک اچانک گہرائی (شکل ۲.۲۰) کی طرف بڑھتا ہے۔

---

[۸۴] یہ سرنگ زنی کی ایک اچھی مثال ہے۔ کلاسیکی طور پر ذرہ رکاوٹ سے ٹکرانے کے بعد واپس لوٹے گا۔



شکل ۲.۲۰: عمودی چٹان سے بکھراو (سوال ۲.۳۵)۔

ا. صورت $E = V_0/3$ میں اس کے انعکاس کا احتمال کیا ہو گا؟ اشارہ: یہ بالکل سوال ۲.۳۴ کی طرح ہے، بس یہاں سیڑھی اوپر کی بجائے نیچے کو ہے۔

ب. میں نے مخفیہ کی شکل و صورت یوں پیش کی ہے گویا ایک گاڑی افقی چٹان سے نیچے گرنے والی ہے تاہم ایسی کھائی سے گاڑی کا ٹکرا کر واپس لوٹنے کا احتمال جز و-ا کے نتیجہ سے بہت کم ہو گا۔ یہ مخفیہ کیوں ایک افقی چٹان کی صحیح ترجمانی نہیں کرتا ہے؟ اشارہ: شکل ۲.۲۰ میں جیسے ہی گاڑی نقطہ $x = 0$ پر سے گزرتی ہے، اس کی توانائی عدم استمرار کے ساتھ گر کر $-V_0$ ہو جاتی ہے؛ کیا یہ نیچے گرتے ہوئی گاڑی کے لیے درست ہو گا؟

ج. ایک نیوٹران مرکزہ میں داخل ہوتے ہوئے مخفیہ میں اچانک کمی محسوس کرتا ہے۔ باہر $V = 0$ جبکہ مرکزہ کے اندر $V = -12\,\text{MeV}$ ہوتا ہے۔ فرض کریں بذریعہ انشقاق خارج ایک نیوٹران جس کی حرکی توانائی $4\,\text{MeV}$ ہو ایک ایسے مرکزہ کو ٹکراتا ہے۔ اس نیوٹران کا جذب ہو کر دوسرا انشقاق پیدا کرنے کا احتمال کیا ہو گا؟ اشارہ: آپ نے جز و-ا میں انعکاس کا احتمال تلاش کیا؛ کلیہ $T = 1 - R$ استعمال کر کے سطح سے ترسیل کا احتمال حاصل کریں۔

مزید سوالات برائے باب ۲

سوال ۲.۳۶: عین مبدا پر $-a < x < +a$ کے بیچ لامتناہی چوکور کنواں کے اندر $V(x) = 0$ اور اس کے باہر $V(x) = \infty$ ہے۔ غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات پر موزوں سرحدی شرائط مسلط کر کے اسے حل کریں۔ تصدیق کریں کہ آپ کی توانائیاں عین میری حاصل کردہ توانائیوں (مساوات ۲.۲۷) کے مطابق ہیں اور تصدیق کریں کہ میری ψ (مساوات ۲.۲۸) میں $x \to (x + a)/2$ پر کر کے، موزوں معمول زنی سے آپ کی تمام ψ حاصل ہوتی ہیں۔ اپنے اولین تین حل ترسیم کریں اور ان کا موازنہ شکل ۲.۲ سے کریں۔ دھیان رہے کہ یہاں کنواں کی چوڑائی $2a$ ہے۔

سوال ۲.۳۷: لامتناہی چوکور کنواں (مساوات ۲.۱۹) میں ایک ذرے کا ابتدائی تفاعل موج درج ذیل ہے۔

$$\Psi(x, 0) = A \sin^3(\pi x/a) \qquad (0 \leq x \leq a)$$

مستقل A اور $\Psi(x, t)$ تلاش کر کے وقت کے لحاظ سے $\langle x \rangle$ کا حساب لگائیں۔ توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہو گی؟ اشارہ: $\sin^n \theta$ اور $\cos^n \theta$ کو تخفیف کے بعد $\sin(m\theta)$ اور $\cos(m\theta)$ کے خطی جوڑ لکھا جا سکتا ہے جہاں $m = 0, 1, 2, \ldots, n$ ہو گا۔

سوال ۲.۳۸: کمیت m کا ایک ذرہ لامتناہی چکور کنواں (مساوات ۲.۱۹) میں زمینی حال میں ہے۔ اچانک کنویں کا دایاں دیوار a سے $2a$ منتقل ہوتا ہے جس سے کنواں کی چوڑائی دگنی ہو جاتی ہے۔ لمحاتی طور پر اس عمل سے تفاعل موج اثر انداز نہیں ہوتا۔ اس ذرہ کی توانائی کی پیمائش اب کی جاتی ہے۔

ا. کونا نتیجہ سب سے زیادہ امکان رکھتا ہے؟ اس نتیجے کے حصول کا احتمال کیا ہو گا؟

ب. کونا نتیجہ اس کے بعد زیادہ امکان رکھتا ہے اور اس کا احتمال کیا ہو گا؟

ج. توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہو گی؟ اشارہ: اگر آپ کو لامتناہی تسلسل کا سامنا ہو تب کوئی دوسری ترکیب استعمال کریں۔

سوال ۲.۳۹:

ا. دکھائیں کہ لامتناہی چکور کنواں میں ایک ذرہ کا تفاعل موج کوانٹائی **تجدیدی عرصہ**[۸۵] $T = 4ma^2/\pi\hbar$ کے بعد دوبارہ اپنے اصل روپ میں واپس آتا ہے۔ یعنی (نہ صرف ساکن حال) بلکہ کسی بھی حال کے لئے $\Psi(x,T) = \Psi(x,0)$ ہوتا ہے۔

ب. دیواروں سے ٹکرا کر دائیں سے بائیں اور بائیں سے دائیں حرکت کرتے ہوئے ایک ذرہ جس کی توانائی E ہو کا کلاسیکی تجدیدی عرصہ کیا ہو گا؟

ج. کس توانائی کیلئے یہ تجدیدی عرصے ایک دوسرے کے برابر ہوں گے؟

سوال ۲.۴۰: ایک ذرہ جس کی کمیت m ہے درج ذیل مخفی کو میں پایا جاتا ہے۔

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ -32\hbar^2/ma^2 & (0 \le x \le a) \\ 0 & (x > a) \end{cases}$$

ا. اس کے مقید حلوں کی تعداد کیا ہو گی؟

ب. مقید حال میں سب سے زیادہ توانائی کی صورت میں کنواں کے باہر ($x > a$) ذرہ پائے جانے کا احتمال کیا ہو گا؟
جواب: 0.542، اگرچہ یہ کنواں میں مقید ہے، تاہم اس کا کنواں سے باہر پائے جانے کا امکان زیادہ ہے۔

سوال ۲.۴۱: ایک ذرہ جس کی کمیت m ہے ہارمونی مرتعش کی مخفیہ (مساوات ۲.۴۳) میں درج ذیل حال سے آغاز کرتا ہے جہاں A کوئی مستقل ہے۔

$$\Psi(x,0) = A\left(1 - 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right)^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

ا. توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہے؟

[۸۵] revival time

ب. مستقبل کے لمحہ T پر تفاعل موج درج ذیل ہو گا

$$\Psi(x,T) = B\left(1 + 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right)^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

جہاں B کوئی مستقل ہے۔ لمحہ T کی کم سے کم ممکنہ قیمت کیا ہو گی؟

سوال ۲.۴۲: درج ذیل نصف ہارمونی مرتعش کی اجازتی توانائیاں تلاش کریں۔

$$V(x) = \begin{cases} (1/2)m\omega^2x^2 & x > 0 \\ \infty & x < 0 \end{cases}$$

(مثلاً ایک ایسا اسپرنگ جس کو کھینچا تو جا سکتا ہے لیکن دبایا نہیں جا سکتا ہے۔) اشارہ: اس کو حل کرنے کے لئے آپ کو ایک بار اچھی طرح مغز ماری کرنی ہو گی جبکہ حقیقی حساب بہت کم درکار ہو گی۔

سوال ۲.۴۳: آپ نے سوال ۲.۲۲ میں ساکن گاؤسی آزاد ذرہ موجی اکٹھ کا تجزیہ کیا۔ اب ابتدائی تفاعل موج

$$\Psi(x,0) = Ae^{-ax^2}e^{ilx}$$

جہاں l ایک حقیقی مستقل ہے سے آغاز کرتے ہوئے متحرک گاؤسی موجی اکٹھ کے لیے یہی مسئلہ دوبارہ حل کریں۔

سوال ۲.۴۴: مبدا پر لامتناہی چکور کنواں، جس کے وسط پر درج ذیل ڈیلٹا تفاعل رکاوٹ ہو، کے لیے غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات حل کریں۔

$$V(x) = \begin{cases} \alpha\delta(x) & -a < x < +a \\ \infty & |x| \geq a \end{cases}$$

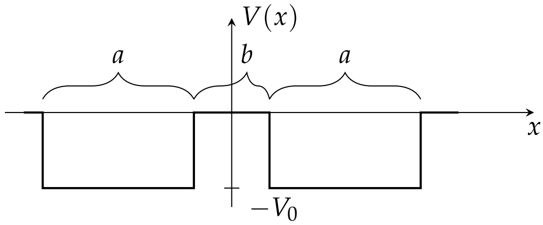
جفت اور طاق تفاعل امواج کو علیحدہ علیحدہ حل کریں۔ انہیں معمول پر لانے کی ضرورت نہیں ہے۔ اجازتی توانائیوں کو (اگر ضرورت پیش آئے) ترسیمی طور پر تلاش کریں۔ ان کا موازنہ ڈیلٹا تفاعل کی غیر موجودگی میں مطابقتی توانائیوں کے ساتھ کریں۔ طاق حلوں پر ڈیلٹا تفاعل کا کوئی اثر نہ ہونے پر تبصرہ کریں۔ تحدیدی صورتیں $a \to 0$ اور $a \to \infty$ پر تبصرہ کریں۔

سوال ۲.۴۵: ایسے دو یا دو سے زیادہ غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات کے منفرد[86] حل جن کی توانائی E ایک دوسرے جیسی ہو کو **انحطاطی**[87] کہتے ہیں۔ مثال کے طور پر آزاد ذرہ کے حال دوہری انحطاطی ہیں۔ ان میں سے ایک حل دائیں رخ اور دوسرا بائیں رخ حرکت کو ظاہر کرتا ہے۔ تاہم ہم نے ایسے کوئی انحطاطی حل نہیں دیکھے جو معمول پر لانے کے قابل ہوں اور یہ محض ایک اتفاق نہیں ہے۔ درج ذیل مسئلہ ثابت کریں: یک بعدی مقید انحطاطی حال نہیں پائے

---

[86] ایسے دو حل جن میں صرف جزو ضربی کا فرق پایا جاتا ہو (جن میں ایک مرتبہ معمول پر لانے کے بعد صرف دوری جزو $e^{i\phi}$ کا فرق پایا جاتا ہو) در حقیقت ایک ہی حل کو ظاہر کرتے ہیں لہٰذا انہیں یہاں منفرد نہیں کہا جا سکتا ہے۔ یہاں "منفرد" سے مراد "خطی طور پر غیر تابع" ہے۔

[87] degenerate



شکل ۲.۲۱: دوہرا چکور کنواں (سوال ۲.۴۷)۔

جاتے ہیں۔[88] اشارہ: فرض کریں ψ_1 اور ψ_2 ایسے دو حل ہوں جن کی توانائی، E، ایک دوسری جیسی ہو۔ حل ψ_1 کی شروڈنگر مساوات کو ψ_2 سے ضرب دیں اور اس سے ψ_2 کی شروڈنگر مساوات کو ψ_1 سے ضرب دے کر منفی کر کے دکھائیں کہ $\psi_2 \,\mathrm{d}\psi_1 / \mathrm{d}x - \psi_1 \,\mathrm{d}\psi_2 / \mathrm{d}x$ ایک مستقل ہو گا۔ اب $\pm\infty$ پر معمول پر لائے جانے کے قابل ہر حل $\psi \to 0$ ہو گا۔ اس حقیقت کو استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ یہ مستقل در حقیقت صفر ہو گا جس سے آپ نتیجہ اخذ کر سکتے ہیں کہ ψ_2 دراصل ψ_1 کا مضرب ہے لہٰذا یہ حل دو الگ الگ حل نہیں ہو سکتے ہیں۔

سوال ۲.۴۶: فرض کریں کمیت m کا ایک موتی ایک دائری چھلا پر بے رگڑ حرکت کرتا ہے۔ چھلے کا محیط L ہے۔ (یہ ایک آزاد ذرہ کی مانند ہے تاہم یہاں $\psi(x + L) = \psi(x)$ ہو گا۔) اس کے ساکن حال تلاش کر کے انہیں معمول پر لائیں اور ان کی مطابقتی اجازتی توانائیاں دریافت کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ ہر ایک توانائی E_n کے لئے دو آپس میں غیر تابع حل پائے جائیں گے جن میں سے ایک گھڑی وار اور دوسرا اخلاف گھڑی حرکت کے لیے ہو گا، جنہیں آپ $\psi_n^+(x)$ اور $\psi_n^-(x)$ کہہ سکتے ہیں۔ سوال ۲.۴۵ کے مسئلہ کو مد نظر رکھتے ہوئے آپ اس انحطاط کے بارے میں کیا کہیں گے (اور یہ مسئلہ یہاں کار آمد کیوں نہیں ہے)؟

سوال ۲.۴۷: آپ کو صرف کیفی تجزیہ کی اجازت ہے حساب کر کے نتیجہ اخذ کرنے کی اجازت نہیں ہے۔ شکل ۲.۲۱ میں دکھائے گئے "دوہرا چکور کنواں" پر غور کریں جہاں گہرائی V_0 اور چوڑائی a مقررہ ہیں جو اتنے بڑے ضرور ہیں کہ کئی مقید حال ممکن ہوں۔

ا. زمینی تفاعل موج ψ_1 اور پہلا ہیجان حال ψ_2 کا خاکہ درج ذیل صورت میں کھینچیں۔

ا. $b = 0$،

۲. $b \approx a$،

۳. $b \gg a$

---

[88] جیسا ہم باب ۴ میں دیکھیں گے، بلند ابعاد میں ایسی انحطاط عام پائی جاتی ہیں۔ فرض کریں کہ مخفیہ علیحدہ علیحدہ حصوں پر مشتمل نہیں ہے جن کے بیچ خطہ میں $V = \infty$ ہو۔ مثلاً دو تنہا لامتناہی کنویں مقید انحطاطی حال دیں گے جہاں ذرہ ایک یا دوسرے کنواں میں پایا جائے گا۔

ب. b کی قیمت صفر سے لامتناہی تک بڑھتے ہوئے توانائیاں (E_1 اور E_2) کس طرح تبدیل ہوتی ہیں، اس کا کیفی جواب دیں۔ $E_1(b)$ اور $E_2(b)$ کو ایک ساتھ ترسیم کریں۔

ج. دو جوہری سالمہ میں الیکٹران پر اثر انداز مخفی توانائی کا تاریخی یک دوری نمونہ دوہرا کنواں پیش کرتا ہے (مرکزوں کی قوت کشش کو دو کنویں ظاہر کرتی ہیں)۔ اگر مرکزے آزادی سے حرکت کر سکتے ہوں تب یہ کم سے کم توانائی کی تنظیم اختیار کریں گے۔ جزو-(ب میں حاصل نتائج کے تحت کیا الیکٹران ان مرکزوں کو ایک دوسرے کے قریب کھینچے گا یا انہیں ایک دوسرے سے دور رہنے پر مجبور کرے گا۔ (اگرچہ دو مرکزوں کے بیچ قوت دفع بھی پایا جاتا ہے تاہم اس کی بات یہاں نہیں کی جا رہی ہے۔)

سوال ۲.۴۸: آپ نے مساوات ۲.۳۹ کے تسلسل کا مجموعہ لیتے ہوئے سوال ۲.۷-د میں توانائی کی توقعاتی قیمت تلاش کی جہاں حاشیہ میں آپ کو میں نے آگاہ کیا کہ اس کو $\langle H\rangle = \int \psi(x,0)^* H\psi(x,0)\,\mathrm{d}x$ کے پرانے طریقہ سے حاصل نہ کریں چونکہ $\psi(x,0)$ کے پہلے تفرق میں عدم استمرار دوسرے تفرق کو پریشان کن بناتا ہے۔ حقیقت میں آپ تکمل بالحصص کے ذریعے اسے حل کر سکتے تھے لیکن ڈیراک ڈیلٹا تفاعل اس طرح کے انوکھا مسائل حل کرنے کا ایک بہترین طریقہ فراہم کرتا ہے۔

ا. آپ سوال ۲.۷ میں $\psi(x,0)$ کا پہلا تفرق حاصل کر کے اس کو سیڑھی تفاعل $\theta(x - a/2)$ کی صورت میں لکھیں جسے مساوات ۲.۱۴۳ میں پیش کیا گیا ہے۔ (آخری سروں کی فکر نہ کریں، صرف اندرونی خطہ $0 < x < a$ کے لیے لکھیں۔)

ب. ابتدائی موجی تفاعل $\psi(x,0)$ کے دوہرا تفرق کو سوال ۲.۲۴-ب کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے ڈیلٹا تفاعل کی صورت میں لکھیں۔

ج. تکمل $\int \psi(x,0)^* H\psi(x,0)\,\mathrm{d}x$ کو حل کر کے اس کی قیمت حاصل کر کے تصدیق کریں کہ یہ وہی نتیجہ ہے جو آپ پہلے حاصل کر چکے ہیں۔

سوال ۲.۴۹:

ا. دکھائیں کہ ہارمونی مرتعش کی مخفی توانائی (مساوات ۲.۴۳) کے لئے

$$\psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x^2+\frac{a^2}{2}(1+e^{-2i\omega t})+\frac{i\hbar t}{m}-2axe^{-i\omega t}\right)}$$

تابع وقت شروڈنگر مساوات پر پورا اترتا ہے جہاں a ایک حقیقی مستقل ہے جس کا بُعد لمبائی ہے۔

ب. $\left|\psi(x,t)\right|^2$ تلاش کریں اور موجی اکٹھ کی حرکت پر تبصرہ کریں۔

ج. $\langle x\rangle$ اور $\langle p\rangle$ کا حساب لگائیں اور دیکھیں آیا مسئلہ اہرنفسٹ (مساوات ۱.۳۸) پر یہ پورا اترتے ہیں۔

سوال ۲.۵۰: درج ذیل حرکت کرتے ہوئے ڈیلٹا تفاعل کنواں پر غور کریں

$$V(x,t) = -\alpha\delta(x - vt)$$

جہاں کنواں کی (غیر تغیر) سمتی رفتار کو v ظاہر کرتا ہے۔

ا. دکھائیں کہ تابع وقت شروڈنگر مساوات کا حل درج ذیل ہے

$$\psi(x,t)=\frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}e^{-m\alpha|x-vt|/\hbar^2}e^{-i[(E+(1/2)mv^2)t-mvx]/\hbar}$$

جہاں $E=-m\alpha^2/2\hbar^2$ ساکن ڈیلٹا تفاعل کے مقید حال کی توانائی ہے۔ اشارہ: اس حل کو شروڈنگر مساوات میں پُر کر کے آپ تصدیق کر سکتے ہیں۔ سوال ۲.۲۴-ب کا نتیجہ استعمال کریں۔

ب. اس حال میں ہیملٹنی کی توقعاتی قیمت تلاش کر کے نتیجے پر تبصرہ کریں۔

سوال ۲.۵۱: درج ذیل مخفیہ پر غور کریں

$$V(x)=-\frac{\hbar^2a^2}{m}\operatorname{sech}^2(ax)$$

جہاں a ایک مثبت مستقل ہے۔

ا. اس مخفیہ کو ترسیم کریں۔

ب. تصدیق کریں کہ اس مخفیہ کا زمینی حال درج ذیل ہے

$$\psi_0(x)=A\operatorname{sech}(ax)$$

اور اسکی توانائی تلاش کریں۔ ψ_0 کو معمول پر لا کر اس کی ترسیم کا خاکہ بنائیں۔

ج. دکھائیں کہ درج ذیل تفاعل کسی بھی (مثبت) توانائی E کے لیے شروڈنگر مساوات کو حل کرتا ہے (جہاں ہمیشہ کی طرح $k\equiv\sqrt{2mE}/\hbar$ ہے)۔

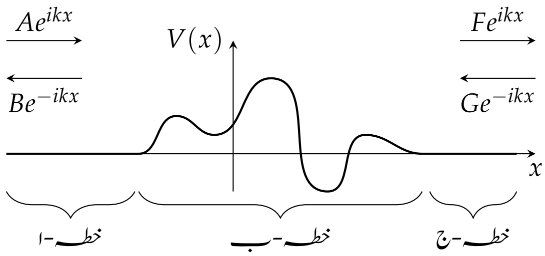
$$\psi_k(x)=A\left(\frac{ik-a\tanh(ax)}{ik+a}\right)e^{ikx}$$

چونکہ $z\to-\infty$ کرنے سے $\tanh z\to-1$ ہوگا لہٰذا x کی بہت بڑی منفی قیمتوں کے لیے درج ذیل ہوگا

$$\psi_k(x)\approx Ae^{ikx}\quad \text{بڑی منفی } x \text{ کے لیے}$$

جو e^{-ikx} کی عدم موجودگی کی بنا، بائیں سے آمد ایک موج کو ظاہر کرتا ہے جس میں کوئی انعکاسی موج نہیں پائی جاتی ہے۔ x کی بڑی مثبت قیمتوں کے لیے $\psi_k(x)$ کی متقاربی روپ کیا ہوگی؟ اس مخفیہ کے لیے R اور T کیا ہوں گے؟ تبصرہ: یہ **بلا انعکاس مخفیہ**[۸۹] کی ایک بہت مشہور مثال ہے؛ ہر ذرہ، اس سے قطع نظر کہ اس کی توانائی کتنی ہے، اس مخفیہ سے سیدھا گزرتا ہے۔

[۸۹] reflectionless potential



شکل ۲.۲۲: مقامی اختیاری مخفیہ (جو خطہ-2 کے علاوہ $V(x) = 0$ ہے) سے بکھراو (سوال ۲.۵۲)۔

سوال ۲.۵۲: **قالب بکھراو**[۹۰] مقامی مخفیہ کے لیے بکھراو کا نظریہ ایک عمومی صورت اختیار کرتا ہے (شکل ۲.۲۲)۔ بائیں ہاتھ خطہ-ا میں $V(x) = 0$ ہے لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \qquad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{۲.۱۷۳}$$
جہاں

دائیں ہاتھ خطہ-ج میں بھی $V(x) = 0$ ہے لہٰذا یہاں درج ذیل ہو گا

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \tag{۲.۱۷۴}$$

ان دونوں کے بیچ خطہ-ب میں مخفیہ جانے بغیر میں آپ کو ψ کے بارے میں کچھ نہیں بتا سکتا، تاہم چونکہ شروڈنگر مساوات خطی اور دورتبی تفرقی ہے لہٰذا اس کا عمومی حل لازماً درج ذیل روپ کا ہو گا

$$\psi(x) = Cf(x) + Dg(x)$$

جہاں $f(x)$ اور $g(x)$ دو خطی غیر تابع مخصوص حل ہیں۔ یہاں چار عدد سرحدی شرائط ہوں گے جن میں سے دو خطہ-ا اور ب کو جوڑیں گے اور باقی دو خطہ-ب اور ج کو جوڑیں گے۔ ان میں سے دو کو استعمال کر کے C اور D کو خارج کرتے ہوئے باقی دو کو حل کر کے A اور G کی صورت میں B اور F تلاش کیے جا سکتے ہیں:

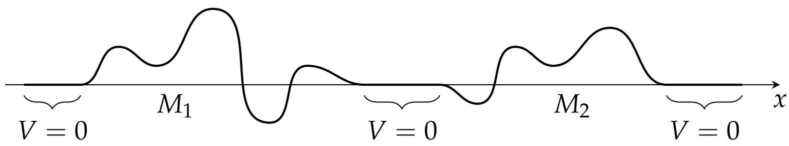
$$B = S_{11}A + S_{12}G, \qquad F = S_{21}A + S_{22}G$$

یہ چار عددی سر S_{ij} جو k (لہٰذا E) پر منحصر ہیں 2×2 قالب S دیتے ہیں جس کو **قالب بکھراو**[۹۱] یا مختصراً **قالب** S [۹۲] کہتے ہیں۔ قالب S آپ کو آمدی حیطوں (A اور G) کی صورت میں رخصتی حیطوں (B اور F) کی قیمت دیتا ہے:

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} \tag{۲.۱۷۵}$$

---

[۹۰] scattering matrix
[۹۱] scattering matrix
[۹۲] S-matrix



شکل ۲.۲۳: دو تنہا حصوں پر مبنی مخفیہ (سوال ۲.۵۳)۔

بائیں سے بکھراو کی صورت میں $G = 0$ ہو گا لہٰذا انعکاسی اور ترسیلی شرح درج ذیل ہوں گی۔

$$R_l = \frac{|B|^2}{|A|^2}\bigg|_{G=0} = |S_{11}|^2, \qquad T_l = \frac{|F|^2}{|A|^2}\bigg|_{G=0} = |S_{21}|^2 \tag{۲.۱۷۶}$$

دائیں سے بکھراو کی صورت میں $A = 0$ ہو گا لہٰذا درج ذیل ہوں گے۔

$$R_r = \frac{|F|^2}{|G|^2}\bigg|_{A=0} = |S_{22}|^2, \qquad T_r = \frac{|B|^2}{|G|^2}\bigg|_{A=0} = |S_{12}|^2 \tag{۲.۱۷۷}$$

ا. ڈیلٹا تفاعل کنواں (مساوات ۲.۱۱۴) کے لیے بکھراو کا قالب S تیار کریں۔

ب. لامتناہی چکور کنواں (مساوات ۲.۱۴۵) کے لیے قالب S تیار کریں۔ اشارہ: مسئلہ کی تشاکلی پن بروئے کار لائیں۔ نئے کام کی ضرورت نہیں ہو گی۔

سوال ۲.۵۳: **قالب ترسیل۔**[۹۳] قالب S (سوال ۲.۵۲) آپ کو رخصتی حیطوں (B اور F) کو آمدی حیطوں (A اور G) کی صورت میں پیش کرتا ہے (مساوات ۲.۱۷۵)۔ بعض اوقات ترسیلی قالب M کے ساتھ کام کرنا زیادہ آسان ثابت ہوتا ہے جو مخفیہ کے دائیں جانب حیطوں (F اور G) کو بائیں جانب حیطوں (A اور B) کی صورت میں پیش کرتا ہے:

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ m_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} \tag{۲.۱۷۸}$$

ا. قالب S کے اجزاء کی صورت میں قالب M کے چار اجزاء تلاش کریں۔ اسی طرح قالب M کے چار اجزاء کی صورت میں قالب S کے اجزاء تلاش کریں۔ مساوات ۲.۱۷۶ اور مساوات ۲.۱۷۷ میں دیے گئے R_l, T_l, R_r اور T_r کو M قالب کے ارکان کی صورت میں لکھیں۔

ب. فرض کریں آپ کے پاس ایک ایسا مخفیہ ہو جو دو تنہا ٹکڑوں پر مشتمل ہو (شکل ۲.۲۳)۔ دکھائیں کہ اس پورے نظام کا M قالب ان دو حصوں کے انفرادی M قالب کا حاصل ضرب ہو گا۔

$$M = M_2 M_1 \tag{۲.۱۷۹}$$

[۹۳] transfer matrix

(ظاہر ہے کہ آپ دو سے زیادہ عدد انفرادی مخفیہ بھی استعمال کر سکتے تھے۔ یہی M قالب کی اہمیت کا سبب ہے۔)

ج. نقطہ a پر (درج ذیل) واحد ایک ڈیلٹا تفاعل مخفیہ سے بکھراو کا M قالب تلاش کریں۔

$$V(x) = -\alpha\delta(x-a)$$

د. جزو-ب کا طریقہ استعمال کرتے ہوئے دوہرا ڈیلٹا تفاعل

$$V(x) = -\alpha[\delta(x+a)+\delta(x-a)]$$

کے لیے M قالب تلاش کریں۔ اس مخفیہ کی ترسیلی شرح کیا ہو گی؟

سوال ۲.۵۴: **دم ہلانے کی ترکیب** سے ہارمونی مرتعش کی زمینی حال توانائیوں کو پانچ معنی خیز ہندسوں تک تلاش کریں۔ یعنی K کو تبدیل کرتے ہوئے مساوات ۲.۷۲ کو اعدادی طریقہ سے یوں حل کریں کہ ξ کی بڑی قیمت کے لیے حاصل تفاعل موج صفر تک پہنچنے کی کوشش کرے۔ ماتھیمٹیکا میں درج ذیل پُر کرنے سے ایسا ہو گا

$$\text{Plot}\big[\text{Evaluate}[u[x]\,/\,.\text{NDSolve}[u''[x]-(x^2-K)^*u[x]==0, u[0]==1, u'[0]==0,$$
$$u[x], x, 10^{-8}, 10, \text{MaxSteps}->10\,000]], x, a, b, \text{PlotRange}->c, d]$$

یہاں a, b ترسیم کی افقی سعت ہے (ابتدا $a = 0$، $b = 10$، $c = -10$ اور $d = 10$ سے کریں)۔ ہم جانتے ہیں کہ اس کا درست جواب $K = 1$ ہے لہٰذا آپ $K = 0.9$ سے شروع کر سکتے ہیں۔ تفاعل موج کی "دم" پر نظر رکھیں۔ اب $K = 1.1$ لیں، آپ دیکھیں گے کہ دم دوسری طرف پلٹ جائے گی۔ ان دونوں کے بیچ کہیں درست حل موجود ہے۔ K کی قیمت کو درست قیمت کے دونوں اطراف قریب سے قریب لانے سے درست جواب حاصل ہو گا۔

سوال ۲.۵۵: دم ہلانے کا طریقہ (سوال ۲.۵۴) استعمال کرتے ہوئے ہارمونی مرتعش کے ہیجان کے ہیجان حال توانائی کو پانچ بامعنی ہندسوں تک تلاش کریں۔ پہلی اور تیسری ہیجان حال کے لیے آپ کو $u[0] == 0$ اور $u'[0] == 1$ لینا ہو گا۔

سوال ۲.۵۶: دم ہلانے کی ترکیب سے لامتناہی چکور کنواں کی اولین چار توانائیوں کی قیمتیں پانچ بامعنی ہندسوں تک تلاش کریں۔ اشارہ: سوال ۲.۵۴ کی تفرقی مساوات میں درکار تبدیلیاں لائیں۔ اس بار آپ کو $u(1) = 0$ چاہتے ہیں۔

جوابات

فرہنگ