کوانٹم میکانیات

خالد خان یوسفزئی

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

۱۰ مارچ 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 وطالبات استفادہ کرتے ہیں۔

ہمارے ملک میں طلبہ وطالبات 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 ازخود ایک رکاوٹ کے طور پر ان کے سامنے آتی ہے۔ یہ طلبہ وطالبات ذہین ہونے کے باوجود آگے بڑھنے اور قوم وملک کی بھرپور خدمت کرنے کے قابل نہیں رہتے۔ ایسے طلبہ وطالبات 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 وطالبات 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 ہوگی۔

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

اس کتاب کے پڑھنے والوں سے گزارش کی جاتی ہے کہ اسے زیادہ سے زیادہ طلبہ و طالبات تک پہنچانے میں مدد دیں اور انہیں جہاں اس کتاب میں غلطی نظر آئے وہ اس کی نشاندہی میری ای-میل پر کریں۔ میں ان کا نہایت شکرگزار 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 2011

باب ۱

تفاعل موج

۱.۱ شروڈنگر مساوات

فرض کریں کمیت m کا ذرہ، جو x محور پر رہنے کا پابند ہو، پر قوت $F(x,t)$ عمل کرتی ہے۔ کلاسیکی میکانیات میں اس ذرے کا مقام $x(t)$ کسی بھی وقت t پر تعین کرنا درکار ہوتا ہے۔ ذرے کا مقام جاننے کے بعد ہم اس کی اسراع، سمتی رفتار $v = \frac{dx}{dt}$، معیار حرکت $p = mv$ یا حرکی توانائی $T = \frac{1}{2}mv^2$ یا کوئی اور حرکی متغیر جس میں ہم دلچسپی رکھتے ہوں تعین کر سکتے ہیں۔ سوال پیدا ہوتا ہے کہ ہم $x(t)$ کیسے تعین کریں گے۔ ہم نیوٹن کا دوسرا قانون $F = ma$ بروئے کار لاتے ہیں۔ (بقائی نظام جو خوش قسمتی سے خوردبینی سطح پر واحد نظام ہے، میں قوت کو خفی توانائی[1] پر تفرق لکھا جا سکتا ہے $F = -\frac{\partial V}{\partial x}$، لہذا نیوٹن کا قانون $m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}$ لکھا جائے گا۔) اس مساوات کے ساتھ ابتدائی معلومات، جو عموماً لمحہ $t = 0$ پر سمتی رفتار یا مقام ہوں گے، استعمال کرتے ہوئے ہم $x(t)$ دریافت کر سکتے ہیں۔

کوانٹم میکانیات اس مسئلے کو بالکل مختلف انداز سے دیکھتی ہے۔ اب ہم ذرے کی **تفاعل موج**[2] جس کی علامت $\Psi(x,t)$ ہے کو **شروڈنگر مساوات**[3] حل کر کے حاصل کرتے ہیں

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial\Psi^2}{\partial x^2} + V\Psi \tag{۱.۱}$$

[1] مقناطیسی قوتوں کے لئے ایسا نہیں ہو گا لیکن یہاں ہم ان کی بات نہیں کر رہے ہیں۔ دیگر، اس کتاب میں ہم رفتار کو غیر اضافی $c \ll v$ تصور کریں گے۔
[2] wave function
[3] Schrodinger align

جہاں i منفی ایک (-1) کا جذر اور $\hbar$ پلانک مستقل، بلکہ اصل پلانک مستقل تقسیم 2π ہو گا:

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054\,572 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s} \tag{۱.۲}$$

شروڈنگر مساوات نیوٹن کے دوسرے قانون کا مماثل کردار ادا کرتی ہے۔ دی گئی ابتدائی معلومات، جو عموماً $\Psi(x,0)$ ہو گا، استعمال کرتے ہوئے شروڈنگر مساوات، مستقبل کے تمام اوقات کے لئے، $\Psi(x,t)$ تعین کرتی ہے، جیسا کلاسیکی میکانیات میں تمام مستقبل اوقات کے لئے قاعدہ نیوٹن $x(t)$ تعین کرتا ہے۔

۱.۲ شماریاتی مفہوم

تفاعل موج حقیقت میں کیا ہوتا ہے اور یہ جانتے ہوئے آپ حقیقت میں کیا کر سکتے ہیں، ایک ذرے کی خاصیت ہے کہ وہ ایک نقطے پر پایا جاتا ہو لیکن ایک تفاعل موج جیسا کہ اس کے نام سے ظاہر ہے فضا میں پھیلا ہوا پایا جاتا ہے۔ کسی بھی لمحے t پر یہ x کا تفاعل ہو گا۔ ایک تفاعل ایک ذرے کی حالت کو کس طرح بیان کر پائے گا، اس کا جواب تفاعل موج کے **شماریاتی مفہوم**[4] پیش کر کے جناب بارن نے دیا جس کے تحت لمحہ t پر نقطہ x پر ایک ذرہ پائے جانے کا احتمال $|\Psi(x,t)|^2$ دیگا، بلکہ اس کا زیادہ درست روپ[5] درج ذیل ہے۔

$$\int_a^b \left|\Psi(x,t)\right|^2 \mathrm{d}x = \begin{cases} \text{لمحہ } t \text{ پر } a \text{ اور } b \text{ کے بیچ} \\ \text{ایک ذرہ کے پائے جانے کا} \\ \text{احتمال} \end{cases} \tag{۱.۳}$$

احتمال $|\Psi|^2$ کی ترسیم کے نیچے رقبہ کے برابر ہو گا۔ شکل 2.1 کی تفاعل موج کے لئے ذرہ غالباً نقطہ A پر پایا جائے گا جہاں $|\Psi|^2$ کی قیمت زیادہ سے زیادہ ہے جبکہ نقطہ B پر ذرہ غالباً نہیں پایا جائے گا۔

شماریاتی مفہوم کی بنا اس نظریہ سے ذرہ کے بارے میں تمام قابل حصول معلومات، یعنی اس کا تفاعل موج، جانتے ہوئے بھی ہم کوئی سادہ تجربہ کر کے ذرے کا مقام یا کوئی دیگر متغیر ٹھیک ٹھیک معلوم کرنے سے قاصر رہتے ہیں۔ کوانٹم میکانیات ہمیں تمام ممکنہ نتائج کے صرف شماریاتی معلومات فراہم کر سکتی ہے۔ یوں کوانٹم میکانیات میں **عدم تعین**[6] کا عنصر پایا جائے گا۔ کوانٹم میکانیات میں عدم تعین کا عنصر، طبیعیات اور فلسفہ کے ماہرین کے لیے مشکلات کا سبب بنتا رہا ہے جو انہیں اس سوچ میں مبتلا کرتی ہے کہ آیا یہ کائنات کی ایک حقیقت ہے یا کوانٹم میکانی نظریہ میں کمی کا نتیجہ۔

فرض کریں کہ ہم ایک تجربہ کر کے معلوم کرتے ہیں کہ ایک ذرہ مقام C پر پایا[7] جاتا ہے۔ اب سوال پیدا ہوتا

[4] statistical interpretation

[5] تفاعل موج از خود مخلوط ہے لیکن $|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi$ (جہاں Ψ^* تفاعل موج Ψ کا مخلوط جوڑی دار ہے) حقیقی اور غیر منفی ہے، جیسا کہ ہونا بھی چاہیے۔

[6] indeterminacy

[7] ظاہر ہے کوئی بھی پیمائشی آلہ کامل نہیں ہو سکتا ہے؛ میں صرف اتنا کہنا چاہتا ہوں کہ پیمائشی خلل کے اندر رہتے ہوئے یہ ذرہ نقطہ C کے قریب پایا گیا۔

ہے کہ پیمائش سے فوراً قبل یہ ذرہ کہاں ہوتا ہو گا؟ اس کے تین ممکنہ جوابات ہیں جن سے آپ کو کوانٹم عدم تعین کے بارے میں مختلف طبقہ سوچ کے بارے میں علم ہو گا۔

1) **حقیقت پسند**[8] سوچ: ذرہ مقام C پر تھا۔ یہ ایک معقول جواب ہے جس کی آئن شٹائن بھی وکالت کرتے تھے۔ اگر یہ درست ہو تب کوانٹم میکانیات ایک نامکمل نظریہ ہو گا کیونکہ ذرہ دراصل نقطہ C پر ہی تھا اور کوانٹم میکانیات ہمیں یہ معلومات فراہم کرنے سے قاصر رہی۔ حقیقت پسند سوچ رکھنے والوں کے مطابق عدم تعین پن قدرتی میں نہیں پایا جاتا بلکہ یہ ہماری لاعلمی کا نتیجہ ہے۔ ان کے تحت کسی بھی لمحے پر ذرے کا مقام غیر معین نہیں تھا بلکہ یہ صرف تجربہ کرنے والے کو معلوم نہیں تھا۔ یوں Ψ مکمل کہانی بیان نہیں کرتا ہے اور ذرے کو مکمل طور پر بیان کرنے کے لئے (**خفیہ متغیرات**[9] کی صورت میں) مزید معلومات درکار ہوں گی۔

2) **تقلید پسند**[10] سوچ: ذرہ حقیقت میں کہیں پر بھی نہیں تھا۔ پیمائشی عمل ذرے کو مجبور کرتی ہے کہ وہ ایک مقام پر "کھڑا ہو جائے" (وہ مقام C کو کیوں منتخب کرتا ہے، اس بارے میں ہمیں سوال کرنے کی اجازت نہیں ہے)۔ مشاہدہ وہ عمل ہے جو نہ صرف پیمائش میں خلل پیدا کرتا ہے، یہ پیمائشی نتیجہ بھی پیدا کرتا ہے۔ پیمائشی عمل ذرے کو مجبور کرتا ہے کہ وہ کسی مخصوص مقام کو اختیار کرے۔ ہم ذرہ کو کسی ایک مقام کو منتخب کرنے پر مجبور کرتے ہیں۔ "یہ تصور جو **کوپن ہیگن مفہوم**[11] پکارا جاتا ہے جناب بوہر اور ان کے ساتھیوں سے منسوب ہے۔ ماہر طبیعیات میں یہ تصور سب سے زیادہ مقبول ہے۔ اگر یہ سوچ درست ہو تب پیمائشی عمل ایک انوکھی عمل ہے جو نصف صدی سے زائد عرصہ کی بحث و مباحثوں کے بعد بھی پراسراری کا شکار ہے۔

3) **انکاری**[12] سوچ: جواب دینے سے گریز کریں۔ یہ سوچ اتنی بیوقوفانہ نہیں جتنی نظر آتی ہے۔ چونکہ کسی ذرے کا مقام جاننے کے لیے آپ کو ایک تجربہ کرنا ہو گا اور تجربے کے نتائج آنے تک وہ لمحہ ماضی بن چکا ہو گا۔ چونکہ کوئی بھی تجربہ ماضی کا حال نہیں بتا پاتا لہٰذا اس کے بارے میں بات کرنا بے معنی ہے۔

سنہ 1964 تک تینوں طبقہ سوچ کے حامی پائے جاتے تھے البتہ اس سال جناب جان بل نے ثابت کیا کہ تجربہ سے قبل ذرہ کا مقام ٹھیک ہونے یا نہ ہونے کا تجربہ پر قابل مشاہدہ اثر پایا جاتا ہے (ظاہر ہے کہ ہمیں یہ مقام معلوم نہیں ہو گا)۔ اس ثبوت نے انکاری سوچ کو غلط ثابت کیا۔ اب حقیقت پسند اور تقلید پسند سوچ کے بیچ فیصلہ کرنا باقی ہے جو تجربہ کر کے کیا جا سکتا ہے۔ اس پر کتاب کے آخر میں بات کی جائے گی جب آپ کی علمی سوچ اتنی بڑھ چکی ہو گی کہ آپ کو جناب جان بل کی دلیل سمجھ آ سکے گی۔ یہاں اتنا بتانا کافی ہو گا کہ تجربات جان بل کی تقلید پسند سوچ کی درستگی کی تصدیق کرتے ہیں[13]۔ جیسا جھیل میں موج ایک نقطہ پر نہیں پائی جاتی، یوں قبل از تجربہ ایک ذرہ ٹھیک کسی ایک مقام پر نہیں پایا جاتا ہے۔ پیمائشی عمل ذرے کو ایک

---

[8] realist

[9] hidden variables

[10] orthodox

[11] Copenhagen interpretation

[12] agnostic

[13] یہ فقرہ کچھ زیادہ سخت ہے۔ چند نظریاتی اور تجرباتی مسائل باقی ہیں جن میں سے چند پر میں بعد میں تبصرہ کروں گا۔ ایسے غیر مقامی خفیہ متغیرات کے نظریات اور دیگر تشکیلات مثلاً **متعدد دنیا** تشریح جو ان تینوں سوچ کے ساتھ مطابقت نہیں رکھتے ہیں۔ بہر حال، اب کے لئے بہتر ہے کہ ہم کوانٹم نظریہ کی بنیاد سیکھیں اور بعد میں اس طرح کی مسائل کے بارے میں فکر کریں۔

مخصوص عدد اختیار کرنے پر مجبور کرتے ہوئے ایک مخصوص نتیجہ پیدا کرتی ہے۔ یہ نتیجہ تفاعل موج کی مسلط کردہ شماریاتی وزن کی پابندی کرتا ہے۔

کیا ایک پیمائش کے فوراً بعد دوسری پیمائش وہی مقام C دے گی یا نیا مقام حاصل ہو گا؟ اس کے جواب پر سب متفق ہیں۔ ایک تجربے کے فوراً بعد (اسی ذرہ پر) دوسرا تجربہ لازماً وہی مقام دوبارہ دے گا۔ حقیقت میں اگر دوسرا تجربہ مقام C کی تصدیق نہ کرے تب یہ ثابت کرنا نہایت مشکل ہو گا کہ پہلے تجربہ میں مقام C ہی حاصل ہوا تھا۔ تقلید پسند اس کو کس طرح دیکھتا ہے کہ دوسری پیمائش ہر صورت C قیمت دے گی؟ ظاہری طور پر پہلی پیمائش تفاعل موج میں ایسی بنیادی تبدیلی پیدا کرتی ہے کہ تفاعل موج C پر نوکیلی صورت اختیار کرتی ہے جیسا شکل 3.1 میں دکھایا گیا ہے۔ ہم کہتے ہیں کہ پیمائش کا عمل تفاعل موج کو نقطہ C پر گر کر[۱۴] نوکیلی صورت اختیار کرنے پر مجبور کرتی ہے (جس کے بعد تفاعل موج شروڈنگر مساوات کے تحت جلد پھیل جائے گی لہٰذا دوسری پیمائش جلد کرنی ضروری ہے)۔ اس طرح دو بہت مختلف طبعی اعمال پائے جاتے ہیں۔ پہلی میں تفاعل موج وقت کے ساتھ شروڈنگر مساوات کے تحت ارتقا پاتا ہے، اور دوسری جس میں پیمائش Ψ کو فوراً ایک جگہ غیر استمراری طور پر گرنے پر مجبور کرتی ہے۔

۱.۳ احتمال

۱.۳.۱ غیر مسلسل متغیرات

چونکہ کوانٹم میکانیات کی شماریاتی تشریح کی جاتی ہے لہٰذا اس میں احتمال کلیدی کردار ادا کرتا ہے۔ اسی لیے میں اصل موضوع سے ہٹ کر نظریہ احتمال پر تبصرہ کرتا ہوں۔ ہمیں چند نئی علامتیں اور اصطلاحات سیکھنا ہو گا جنہیں میں ایک سادہ مثال کی مدد سے واضح کرتا ہوں۔ فرض کریں ایک کمرہ میں 14 حضرات موجود ہیں جن کی عمریں درج ذیل ہیں۔

- 14 سال عمر کا ایک شخص،
- 15 سال عمر کا ایک شخص،
- 16 سال عمر کے تین اشخاص،
- 22 سال عمر کے دو اشخاص،
- 24 سال عمر کے دو اشخاص،
- اور 25 سال عمر کے پانچ اشخاص۔

[۱۴] collapses

اگر j عمر کے لوگوں کی تعداد کو $N(j)$ لکھا جائے تب درج ذیل ہو گا۔

$$N(14) = 1$$
$$N(15) = 1$$
$$N(16) = 3$$
$$N(22) = 2$$
$$N(24) = 2$$
$$N(25) = 5$$

جبکہ $N(17)$، مثال کے طور پر، صفر ہو گا۔ کمرہ میں لوگوں کی کل تعداد درج ذیل ہو گی۔

$$N = \sum_{j=0}^{\infty} N(j) \tag{۱.۴}$$

(اس مثال میں ظاہر ہے کہ $N = 14$ ہو گا۔) شکل 4.1 میں اس مواد کی مستطیلی ترسیم دکھائی گئی ہے۔ اس تقسیم کے بارے میں درج ذیل چند ممکنہ سوالات ہیں۔

سوال 1 اگر ہم اس گروہ سے بلا منصوبہ ایک شخص منتخب کریں تو اس بات کا کیا **احتمال** ہو گا کہ اس شخص کی عمر 15 سال ہو؟ جواب: چودہ میں ایک امکان ہو گا کیونکہ کل 14 اشخاص ہیں اور ہر ایک شخص کی انتخاب کا امکان ایک جیسا ہے لہٰذا ایسا ہونے کا احتمال چودہ میں سے ایک ہو گا۔ اگر j عمر کا شخص کے انتخاب کا احتمال $P(j)$ ہو تب $P(14) = 1/14$، $P(15) = 1/14$، $P(16) = 3/14$، وغیرہ ہو گا۔ اس کا عمومی کلیہ درج ذیل ہو گا۔

$$P(j) = \frac{N(j)}{N} \tag{۱.۵}$$

دھیان رہے کی چودہ یا پندرہ سال عمر کا شخص کے انتخاب کا احتمال ان دونوں کی انفرادی احتمال کا مجموعہ یعنی $\frac{1}{7}$ ہو گا۔ بالخصوص تمام احتمال کا مجموعہ اکائی (1) کے برابر ہو گا چونکہ آپ کسی نہ کسی عمر کے شخص کو ضرور منتخب کر پائیں گے۔

$$\sum_{j=0}^{\infty} P(j) = 1 \tag{۱.۶}$$

سوال 2 کونسا عمر بلند تر احتمال رکھتا ہے؟ جواب: 25، چونکہ پانچ اشخاص اتنی عمر رکھتے ہیں جبکہ اس کے بعد ایک جیسی عمر کے لوگوں کی اگلی زیادہ تعداد تین ہے۔ عموماً سب سے زیادہ احتمال کا j وہی j ہو گا جس کے لئے $P(j)$ کی قیمت زیادہ سے زیادہ ہو۔

سوال 3 **وسطانیہ**[۱۵] عمر کیا ہے؟ جواب: چونکہ 7 لوگوں کی عمر 23 سے کم اور 7 لوگوں کی عمر 23 سے زیادہ ہے۔ لہٰذا جواب 23 ہو گا۔ (عمومی طور پر وسطانیہ j کی وہ قیمت ہو گی جس سے زیادہ اور جس سے کم قیمت کے نتائج کے احتمال ایک دوسرے جیسے ہوں۔)

سوال 4 ان کی **اوسط**[۱۶] عمر کتنی ہے؟ جواب:

$$\frac{(14)+(15)+3(16)+2(22)+2(24)+5(25)}{14}=\frac{294}{14}=21$$

عمومی طور پر j کی اوسط قیمت جس کو ہم $\langle j\rangle$ لکھتے ہیں، درج ذیل ہو گی۔

$$\langle j\rangle=\frac{\sum jN(j)}{N}=\sum_{j=0}^{\infty}jP(j) \tag{۱.۷}$$

دھیان رہے کہ عین ممکن ہے کہ گروہ میں کسی کی بھی عمر گروہ کی اوسط یا وسطانیہ کے برابر نہ ہو۔ مثال کے طور پر، اس مثال میں کسی کی عمر بھی 21 یا 23 سال نہیں ہے۔ کوانٹم میکانیات میں ہم عموماً اوسط قیمت میں دلچسپی رکھتے ہیں جس کو **توقعاتی قیمت**[۱۷] کا نام دیا گیا ہے۔

سوال 5 عمروں کے مربعوں کا اوسط کیا ہو گا؟ جواب: آپ $\frac{1}{14}$ احتمال سے $14^2=196$ حاصل کر سکتے ہیں، یا $\frac{1}{14}$ احتمال سے $15^2=225$، یا $\frac{3}{14}$ احتمال سے $16^2=256$ حاصل کر سکتے ہیں، وغیرہ وغیرہ۔ یوں ان کے مربعوں کا اوسط درج ذیل ہو گا۔

$$\langle j^2\rangle=\sum_{j=0}^{\infty}j^2P(j) \tag{۱.۸}$$

عمومی طور پر j کے کسی بھی تفاعل کی اوسط قیمت درج ذیل ہو گی۔

$$\langle f(j)\rangle=\sum_{j=0}^{\infty}f(j)P(j) \tag{۱.۹}$$

(مساوات ۱.۶، ۱.۷ اور ۱.۸ اس کی خصوصی صورتیں ہیں۔) دھیان رہے کہ مربع کا اوسط $\langle j^2\rangle$ عموماً اوسط کے مربع $\langle j\rangle^2$ کے برابر نہیں ہو گا۔ مثال کے طور پر اگر ایک کمرہ میں صرف دو بچے ہوں جن کی عمریں 1 اور 3 ہو تب $\langle x^2\rangle=5$ جبکہ $\langle x\rangle^2=4$ ہو گا۔

شکل 5.1 کی شکل و صورتوں میں واضح فرق پایا جاتا ہے اگرچہ ان کی اوسط قیمت، وسطانیہ، بلند تر قیمت احتمال اور اجزاء کی تعداد ایک جیسے ہیں۔ ان میں پہلی شکل اوسط کے قریب نوکیلی صورت رکھتی ہے جبکہ دوسری افقی چوڑی صورت رکھتی ہے۔ (مثال کے طور پر کسی بڑے شہر میں ایک جماعت میں طلبہ کی تعداد پہلی شکل

[۱۵] median
[۱۶] mean
[۱۷] expectation value

مانند ہو گی جبکہ دھاتی علاقہ میں ایک ہی کمرہ پر مبنی مکتب میں بچوں کی تعداد دوسری شکل ظاہر کرے گی۔) ہمیں اوسط قیمت کے لحاظ سے، کسی بھی مقدار کے تقسیم کا پھیلاو، عددی صورت میں درکار ہو گا۔ اس کا ایک سیدھا طریقہ یہ ہو سکتا ہے کہ ہم ہر انفرادی جزو کی قیمت اور اوسط قیمت کا فرق

$$\Delta j = j - \langle j \rangle \tag{1.10}$$

لے کر تمام Δj کی اوسط تلاش کریں۔ ایسا کرنے سے یہ مسئلہ پیش آتا ہے کہ ان کا جواب صفر ہو گا چونکہ اوسط کی تعریف کے تحت اوسط سے زیادہ اور اوسط سے کم قیمتیں ایک برابر ہوں گی۔

$$\begin{aligned}\langle \Delta j \rangle &= \sum \left(j - \langle j \rangle\right) P(j) = \sum jP(j) - \langle j \rangle \sum P(j)\\ &= \langle j \rangle - \langle j \rangle = 0\end{aligned}$$

(چونکہ $\langle j \rangle$ مستقل ہے لہٰذا اس کو مجموعہ کی علامت سے باہر لے جایا جا سکتا ہے۔) اس مسئلہ سے چھٹکارا حاصل کرنے کی خاطر آپ Δj کی مطلق قیمتوں کا اوسط لے سکتے ہیں لیکن Δj کی مطلق قیمتوں کے ساتھ کام کرنا مشکلات پیدا کرتا ہے۔ اس کی بجائے، منفی علامت سے نجات حاصل کرنے کی خاطر، ہم مربع لینے کے بعد اوسط حاصل کرتے ہیں۔

$$\sigma^2 \equiv \left\langle (\Delta j)^2 \right\rangle \tag{1.11}$$

اس قیمت کو تقسیم کی **تغیریت**[18] کہتے ہیں جبکہ تغیریت کا جذر σ کو **معیاری انحراف**[19] کہتے ہیں۔ روایتی طور پر σ کو اوسط $\langle j \rangle$ کے گرد پھیلاو کی پیمائش مانا جاتا ہے۔

ہم تغیریت کا ایک چھوٹا مسئلہ پیش کرتے ہیں۔

$$\begin{aligned}\sigma^2 = \langle (\Delta j)^2 \rangle &= \sum (\Delta j)^2 P(j) = \sum (j - \langle j \rangle)^2 P(j)\\ &= \sum (j^2 - 2j\langle j \rangle + \langle j \rangle^2) P(j)\\ &= \sum j^2 P(j) - 2\langle j \rangle \sum jP(j) + \langle j \rangle^2 \sum P(j)\\ &= \langle j^2 \rangle - 2\langle j \rangle \langle j \rangle + \langle j \rangle^2 = \langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2\end{aligned}$$

اس کا جذر لے کر ہم معیاری انحراف کو درج ذیل لکھ سکتے ہیں۔

$$\sigma = \sqrt{\langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2} \tag{1.12}$$

عملی استعمال میں σ اس کلیے سے بہت جلد حاصل ہو گا۔ آپ $\langle j^2 \rangle$ اور $\langle j \rangle^2$ معلوم کر کے ان کے فرق کا جذر لیں گے۔ جیسا آپکو یاد ہو گا میں نے ذکر کیا $\langle j^2 \rangle$ اور $\langle j \rangle^2$ عموماً ایک دوسرے کے برابر نہیں ہوں گے۔ جیسا آپ مساوات ۱.۱۱ سے دیکھ سکتے ہیں σ^2 غیر منفی ہو گا لہٰذا مساوات ۱.۱۲ کے تحت درج ذیل ہو گا

$$\langle j^2 \rangle \geq \langle j \rangle^2 \tag{1.13}$$

---

[18] variance
[19] standard deviation

اور یہ دونوں صرف اس صورت برابر ہو سکتے ہیں جب $\sigma = 0$ ہو، جو تب ممکن ہو گا جب تقسیم میں کوئی پھیلاو نہ پایا جاتا ہو یعنی ہر جز و ایک ہی قیمت کا ہو۔

۱.۳.۲ استمراری متغیرات

اب تک ہم غیر مسلسل متغیرات کی بات کرتے آ رہے ہیں جن کی قیمتیں الگ تھلگ ہوتی ہیں۔ (گزشتہ مثال میں ہم نے افراد کی عمروں کی بات کی جن کو سالوں میں ناپا جاتا ہے لہٰذا j عدد صحیح تھا۔) تاہم اس کو آسانی سے استمراری تقسیم تک وسعت دی جا سکتی ہے۔ اگر میں گلی میں بلا منصوبہ ایک شخص کا انتخاب کر کے اس کی عمر پوچھوں تو اس کا احتمال صفر ہو گا کہ اس کی عمر ٹھیک 16 سال 4 گھنٹے، 27 منٹ اور 3.37524 سیکنڈ ہو۔ یہاں اس کی عمر کا 16 اور 17 سال کے بیچ ہونے کے احتمال کی بات کرنا معقول ہو گا۔ بہت کم وقفے کی صورت میں احتمال وقفے کی لمبائی کے راست متناسب ہو گا۔ مثال کے طور پر 16 سال اور 16 سال جمع دو دنوں کے بیچ عمر کا احتمال 16 سال اور 16 سال جمع ایک دن کے بیچ عمر کے احتمال کا دگنا ہو گا۔ (ماسوائے ایسی صورت میں جب 16 سال قبل عین اسی دن کسی وجہ سے بہت زیادہ بچے پیدا ہوئے ہوں۔ ایسی صورت میں اس قاعدہ کی اطلاق کی نقطہ نظر سے ایک یا دو دن کا وقفہ بہت لمبا وقفہ ہے۔ اگر زیادہ بچوں کی پیدائش کا دورانیہ چھ گھنٹے پر مشتمل ہو تب ہم ایک سیکنڈ یا، زیادہ محفوظ طرف رہنے کی خاطر، اس سے بھی کم دورانیے کا وقفہ لیں گے۔ تکنیکی طور پر ہم لامتناہی چھوٹے وقفہ کی بات کر رہے ہیں۔) اس طرح درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\rho(x)dx = \begin{cases} \text{بلا منصوبہ منتخب کئے گئے رکن کا } x \\ \text{اور } (x + \mathrm{d}x) \text{ کے بیچ پائے جانے} \\ \text{کا احتمال} \end{cases} \tag{۱.۱۴}$$

اس مساوات میں تناسبی مستقل $\rho(x)$ **کثافت احتمال**[20] کہلاتا ہے۔ متناہی وقفہ a تا b کے بیچ x پایا جانے کا احتمال $\rho(x)$ کا تکمل دے گا:

$$P_{ab} = \int_a^b \rho(x)\,\mathrm{d}x \tag{۱.۱۵}$$

اور غیر مسلسل تقسیم کے لئے اخذ کردہ قواعد درج ذیل روپ اختیار کریں گے:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)\,\mathrm{d}x, \tag{۱.۱۶}$$

$$< x > = \int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x)\,\mathrm{d}x, \tag{۱.۱۷}$$

$$\langle f(x)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x, \tag{۱.۱۸}$$

$$\sigma^2 \equiv \langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 \tag{۱.۱۹}$$

[20] probability density

مثال ۱.۱: ایک چٹان جس کی اونچائی h ہو سے ایک پتھر کو نیچے گرنے دیا جاتا ہے۔ گرتے ہوئے پتھر کی بلا واسطہ وقتی فاصلوں پر دس لاکھ تصاویر کھینچے جاتے ہیں۔ ہر تصویر پر طے شدہ فاصلہ ناپا جاتا ہے۔ ان تمام فاصلوں کی اوسط قیمت کیا ہو گی؟ یعنی طے شدہ فاصلوں کا وقتی اوسط کیا ہو گا؟

حل: پتھر ساکن حال سے بتدریج بڑھتی ہوئی رفتار سے نیچے گرتا ہے۔ یہ چٹان کے بالائی سر کے قریب زیادہ وقت گزارتا ہے لہٰذا ہم توقع کرتے ہیں کہ فاصلہ $\frac{h}{2}$ سے کم ہو گا۔ ہوائی رگڑ کو نظر انداز کرتے ہوئے، لمحہ t پر فاصلہ x درج ذیل ہو گا۔

$$x(t) = \frac{1}{2}gt^2$$

اس کی سمتی رفتار $\frac{dx}{dt} = gt$ ہو گی اور پرواز کا دورانیہ $T = \sqrt{2h/g}$ ہو گا۔ وقفہ $\mathrm{d}t$ میں تصویر کھینچنے کا احتمال $\frac{\mathrm{d}t}{T}$ ہو گا۔ یوں اس کا احتمال کہ ایک تصویر مطابقتی سعت $\mathrm{d}x$ میں فاصلہ دے درج ذیل ہو گا:

$$\frac{\mathrm{d}t}{T} = \frac{\mathrm{d}x}{gt}\sqrt{\frac{g}{2h}} = \frac{1}{2\sqrt{hx}}\,\mathrm{d}x$$

ظاہر ہے کہ کثافت احتمال (مساوات ۱.۱۴) درج ذیل ہو گا۔

$$\rho(x) = \frac{1}{2\sqrt{hx}} \qquad (0 \le x \le h)$$

(اس وقفہ کے باہر کثافت احتمال صفر ہو گا۔)

ہم مساوات ۱.۱۶ استعمال کر کے اس نتیجہ کی تصدیق کر سکتے ہیں۔

$$\int_0^h \frac{1}{2\sqrt{hx}}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2\sqrt{h}}\,\left(2x^{\frac{1}{2}}\right)\Big|_0^h = 1$$

مساوات ۱.۱۷ سے اوسط فاصلہ تلاش کرتے ہیں

$$\langle x\rangle = \int_0^h x\frac{1}{2\sqrt{hx}}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2\sqrt{h}}\,\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}}\right)\Big|_0^h = \frac{h}{3}$$

جو $\frac{h}{2}$ سے کچھ کم ہے جیسا کہ ہم توقع کرتے ہیں۔

شکل 6.1 میں $\rho(x)$ کی ترسیم دکھائی گئی ہے۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ کثافت احتمال از خود لامتناہی ہو سکتا ہے جبکہ احتمال (یعنی ρ کا تکمل) لازماً متناہی (بلکہ 1 یا 1 سے کم ہو گا)۔ □

سوال ۱.۱: حصہ ۱.۳.۱ میں اشخاص کی عمروں کی تقسیم کے لیے درج ذیل کریں۔

ا. اوسط کا مربع $\langle i\rangle^2$ اور مربع کا اوسط $\langle j^2\rangle$ تلاش کریں۔

ب. ہر j کے لیے Δj دریافت کریں اور مساوات ۱.۱۱ استعمال کرتے ہوئے معیاری انحراف دریافت کریں۔

ج. جزو ا اور ب کے نتائج استعمال کرتے ہوئے مساوات ۱.۱۲ کی تصدیق کریں۔

سوال ۱.۲:

ا. مثال ۱.۱ کی تقسیم کے لیے معیاری انحراف تلاش کریں۔

ب. بلا واسطہ منتخب تصویر میں اوسط فاصلے سے، ایک معیاری انحراف کے برابر، دور فاصلہ x پائے جانے کا احتمال کیا ہو گا؟

سوال ۱.۳: درج ذیل گاوسی تقسیم پر غور کریں جہاں A ، a اور λ مستقل ہیں۔

$$\rho(x) = Ae^{-\lambda(x-a)^2}$$

(ضرورت کے پیش آپ تکمل کسی جدول سے دیکھ سکتے ہیں۔)

ا. مساوات ۱.۱۶ استعمال کرتے ہوئے A کی قیمت تعین کریں۔

ب. اوسط $\langle x \rangle$ ، مربعی اوسط $\langle x^2 \rangle$ اور معیاری انحراف σ تلاش کریں۔

ج. $\rho(x)$ کی ترسیم کا خاکہ بنائیں۔

۱.۴ معمول زنی

ہم تفاعل موج کے شماریاتی مفہوم (مساوات ۱.۳) پر دوبارہ غور کرتے ہیں، جس کے تحت لمحہ t پر ایک ذرے کا نقطہ x پر پائے جانے کی کثافت احتمال $\left|\Psi(x,t)\right|^2$ ہو گی۔ یوں (مساوات ۱.۱۶) کے تحت $|\Psi|^2$ کا تکمل 1 کے برابر ہو گا (چونکہ ذرہ کہیں نہ کہیں تو ضرور پایا جائے گا)۔

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\Psi(x,t)\right|^2 = 1 \tag{۱.۲۰}$$

اس حقیقت کے بغیر شماریاتی مفہوم بے معنی ہو گی۔

البتہ یہ شرط آپ کے لیے پریشانی کا سبب ہونا چاہیے۔ تفاعل موج کو مساوات شروڈنگر تعین کرتی ہے اور Ψ پر بیرونی شرائط مسلط کرنا صرف اس صورت جائز ہو گا جب ان دونوں کے بیچ اختلاف نہ پایا جاتا ہو۔ مساوات ۱.۱ پر نظر ڈالنے سے آپ دیکھ سکتے ہیں کہ اگر $\Psi(x,t)$ حل ہو تب $A\Psi(x,t)$ بھی حل ہو گا، جہاں A کوئی بھی (مخلوط) مستقل ہو سکتا ہے۔ اس طرح ہم یہ کر سکتے ہیں کہ نامعلوم ضربی مستقل کو یوں منتخب کریں کہ مساوات ۱.۲۰ مطمئن ہو۔ اس عمل کو تفاعل موج کی **معمول زنی**[۲۱] کہتے ہیں۔ ہم کہتے ہیں کہ تفاعل موج کو معمول پر

[۲۱] normalization

لایا گیا ہے۔ مساوات شروڈنگر کے بعض حلوں کا تکمل لامتناہی ہو گا؛ ایسی صورت میں کوئی بھی ضربی مستقل اس کو 1 کے برابر نہیں کر سکتا ہے۔ یہی کچھ غیر اہم حل $\Psi = 0$ کے لیے بھی درست ہے۔ ایسا تفاعل موج جو معمول پر لانے کے قابل نہ ہو کسی صورت ایک ذرے کو ظاہر نہیں کر سکتا ہے لہٰذا اس کو رد کیا جاتا ہے۔ طبعی طور پر پائے جانے والے حالات، شروڈنگر مساوات کے **قابل تکامل مربع**[22] حل ہونگے۔[23]

یہاں رک کر ذرا غور کریں! فرض کریں لمحہ $t = 0$ پر میں ایک تفاعل موج کو معمول پر لاتا ہوں۔ کیا وقت گزرنے کے ساتھ Ψ ارتقا پانے کے بعد بھی یہ معمول شدہ رہے گی؟ (آپ ایسا نہیں کر سکتے ہیں کہ لمحہ در لمحہ تفاعل موج کو معمول پر لائیں چونکہ ایسی صورت میں A وقت t کا تابع تفاعل ہو گا نا کہ ایک مستقل، اور $A\Psi$ شروڈنگر مساوات کا حل نہیں رہے گا۔) خوش قسمتی سے مساوات شروڈنگر کی یہ ایک خاصیت ہے کہ یہ تفاعل موج کی معمول شدہ صورت برقرار رکھتی ہے۔ اس خاصیت کے بغیر مساوات شروڈنگر اور شماریاتی مفہوم غیر ہم آہنگ ہونگے اور کوانٹم نظریہ بے معنی ہو گا۔

یہ ایک اہم نقطہ ہے لہٰذا ہم اس کے ثبوت کو غور سے دیکھتے ہیں۔ ہم درج ذیل مساوات سے شروع کرتے ہیں۔

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\Psi(x,t)\right|^2\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi(x,t)\right|^2\mathrm{d}x \tag{۱.۲۱}$$

(دھیان رہے کہ، مساوات کے بائیں ہاتھ، تکمل صرف t کا تفاعل ہے لہٰذا میں نے پہلے فقرہ میں کل تفرق $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}$ استعمال کیا ہے، جبکہ دائیں ہاتھ متکمل t اور x دونوں کا تفاعل ہے لہٰذا میں نے یہاں جزوی تفرق $\partial/\partial t$ استعمال کیا ہے۔ اصول ضرب کے تحت درج ذیل ہو گا۔

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi| = \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi \tag{۱.۲۲}$$

اب مساوات شروڈنگر کہتی ہے کہ

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V\Psi \tag{۱.۲۳}$$

ہو گا اور ساتھ ہی (مساوات ۲۳.۱ کا مخلوط جوڑی دار لیتے ہوئے)

$$\frac{\partial\Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V\Psi^* \tag{۱.۲۴}$$

ہو گا لہٰذا درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi^2\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\right] \tag{۱.۲۵}$$

---

[22] square-integrable

[23] ظاہر ہے کہ $|x| \to \infty$ کی صورت میں $\Psi(x,t)$ کو $1/\sqrt{|x|}$ سے زیادہ تیز صفر تک پہنچنا ہو گا۔ معمول زنی صرف مخلوط عدد کے معیار کو درست کرتی ہے جبکہ اس کا ہیئت غیر معین رہتا ہے۔ تاہم جیسا ہم جلد دیکھیں گے، موخر الذکر کی کوئی طبعی اہمیت نہیں پائی جاتی ہے۔

مساوات ۱.۲۱ میں تکمل کی قیمت صریحاً معلوم کی جا سکتی ہے:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\Psi(x,t)\right|^2 \mathrm{d}x = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\Big|_{-\infty}^{+\infty} \tag{۱.۲۶}$$

یاد رہے کہ معمول پر لانے کے قابل ہونے کے لئے ضروری ہے کہ $x \to \pm\infty$ کرتے ہوئے $\Psi(x,t)$ صفر[۲۴] کو پہنچتی ہو۔ یوں درج ذیل ہو گا

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\Psi(x,t)\right|^2 \mathrm{d}x = 0 \tag{۱.۲۷}$$

لہٰذا تکمل (وقت کا غیر تابع) مستقل ہو گا؛ لمحہ $t=0$ پر معمول شدہ تفاعل موج ہمیشہ کے لئے معمول شدہ رہے گا۔

سوال ۱.۴: لمحہ $t=0$ پر ایک ذرہ کو درج ذیل تفاعل موج ظاہر کرتی ہے جہاں A ، a اور b مستقلات ہیں۔

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

ا. تفاعل موج Ψ کو معمول پر لائیں (یعنی a اور b کی صورت میں A تلاش کریں)۔

ب. متغیر x کے لحاظ سے $\Psi(x,0)$ ترسیم کریں۔

ج. لمحہ $t=0$ پر کس نقطہ پر ذرہ پایا جانے کا احتمال زیادہ سے زیادہ ہو گا؟

د. نقطہ a کے بائیں جانب ذرہ پایا جانے کا احتمال کتنا ہے؟ اپنے جواب کی تصدیق $b=a$ اور $b=2a$ کی تحدیدی صورتوں میں کریں۔

ھ. متغیر x کی توقعاتی قیمت کیا ہو گی؟

سوال ۱.۵: درج ذیل تفاعل موج پر غور کریں جہاں A ، λ اور ω مثبت حقیقی مستقلات ہیں۔

$$\Psi(x,t)=Ae^{-\lambda|x|}e^{-i\omega t}$$

(ہم باب ۲ میں دیکھیں گے کہ کس طرح کا مخفیہ[۲۵] V ایسا تفاعل موج پیدا کرتا ہے۔)

ا. تفاعل موج Ψ کو معمول پر لائیں۔

ب. متغیرات x اور x^2 کی توقعاتی قیمتیں تلاش کریں۔

[۲۴] طبیعیات کی میدان میں لامتناہی پر تفاعل موج ہر صورت صفر کو پہنچتی ہے۔

[۲۵] potential

ج. متغیر x کا معیاری انحراف تلاش کریں۔ متغیر x کے لحاظ سے $|\Psi|^2$ ترسیم کر کے اس پر نقاط $(\langle x\rangle + \sigma)$ اور $(\langle x\rangle - \sigma)$ کی نشاندہی کریں جس سے x کی "پھیل" کو σ سے ظاہر کرنے کی وضاحت ہو گی۔ اس سعت سے باہر ذرہ پایا جانے کا احتمال کتنا ہو گا؟

۱.۵ معیار حرکت

حال Ψ میں پائے جانے والے ذرہ کے مقام x کی توقعاتی قیمت درج ذیل ہو گی۔

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\Psi(x,t)|^2\,\mathrm{d}x \tag{۱.۲۸}$$

اس کا مطلب کیا ہے؟ اس کا ہرگز یہ مطلب نہیں ہے کہ اگر آپ ایک ہی ذرے کا مقام جاننے کے لیے بار بار پیمائش کریں تو آپ کو نتائج کی اوسط قیمت $\int x|\Psi|^2\,\mathrm{d}x$ حاصل ہو گی۔ اس کے برعکس: پہلی پیمائش (جس کا نتیجہ غیر متعین ہے) تفاعل موج کو اس قیمت پر بیٹھنے پر مجبور کرے گا جو پیمائش سے حاصل ہوئی ہو، اس کے بعد (اگر جلد) دوسری پیمائش کی جائے تو وہی نتیجہ دوبارہ حاصل ہو گا۔ حقیقت میں $\langle x\rangle$ ان ذرات کی پیمائشوں کی اوسط ہو گی جو یکساں حال Ψ میں پائے جاتے ہوں۔ یوں یا تو آپ ہر پیمائش کے بعد کسی طرح اس ذرہ کو دوبارہ ابتدائی حال Ψ میں لائیں گے اور یا آپ متعدد ذرات کی **سگرا**[۲۶] کو ایک ہی حال Ψ میں لا کر تمام کے مقام کی پیمائش کریں گے۔ ان نتائج کا اوسط $\langle x\rangle$ ہو گا۔ (میں اس کی تصوراتی شکل یوں پیش کرتا ہوں کہ ایک الماری میں قطار پر شیشہ کی بوتلیں کھڑی ہیں اور ہر بوتل میں ایک ذرہ پایا جاتا ہے۔ تمام ذرات ایک جیسے (بوتل کے وسط کے لحاظ سے) حال Ψ میں پائے جاتے ہیں۔ ہر بوتل کے قریب ایک طالب علم کھڑا ہے جس کے ہاتھ میں ایک فیتا ہے۔ جب اشارہ دیا جائے تو تمام طلبہ اپنے اپنے ذرہ کا مقام ناپتے ہیں۔ ان نتائج کا مستطیلی ترسیم تقریباً $|\Psi|^2$ دیگا جبکہ ان کی اوسط قیمت تقریباً $\langle x\rangle$ ہو گی۔ (چونکہ ہم متناہی تعداد کے ذرات پر تجربہ کر رہے ہیں لہٰذا یہ توقع نہیں کیا جا سکتا ہے کہ جوابات بالکل حاصل ہوں گے لیکن بوتلوں کی تعداد بڑھانے سے نتائج نظریاتی جوابات کے زیادہ قریب حاصل ہوں گے۔)) مختصراً توقعاتی قیمت ذرات کے سگرا پر کیے جانے والے تجربات کی اوسط قیمت ہو گی نہ کہ کسی ایک ذرہ پر بار بار تجربات کی نتائج کی اوسط قیمت۔

چونکہ Ψ وقت اور مقام کا تابع ہے لہٰذا وقت گزرنے کا ساتھ ساتھ $\langle x\rangle$ تبدیل ہو گا۔ ہمیں اس کی سمتی رفتار جاننے میں دلچسپی ہو سکتی ہے۔ مساوات 25.1 اور 28.1 سے درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = \int x\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2\,\mathrm{d}x = \frac{i\hbar}{2m}\int x\frac{\partial}{\partial x}\Big(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\Big)\,\mathrm{d}x \tag{۱.۲۹}$$

تکمل بالحصص کی مدد سے اس فقرے کی سادہ صورت حاصل کرتے ہیں۔

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{i\hbar}{2m}\int\Big(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\Big)\,\mathrm{d}x \tag{۱.۳۰}$$

[۲۶] ensemble

(میں نے یہاں $\frac{\partial x}{\partial x} = 1$ استعمال کیا اور سرحدی جزو کو اس بنا رد کیا کہ ($\pm$) لامتناہی پر Ψ کی قیمت 0 ہو گی۔ دوسرے جزو پر دوبارہ تکمل بالحصص لاگو کرتے ہیں۔

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{i\hbar}{m}\int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x}\,\mathrm{d}x \tag{۱.۳۱}$$

اس نتیجے سے ہم کیا مطلب حاصل کر سکتے ہیں؟ یہ x کی توقعاتی قیمت کی سمتی رفتار ہے نا کہ ذرہ کی سمتی رفتار۔ ابھی تک ہم جو کچھ دیکھ چکے ہیں اس سے ذرہ کی سمتی رفتار دریافت نہیں کی جا سکتی ہے۔ کوانٹم میکانیات میں ذرہ کی سمتی رفتار کا مفہوم واضح نہیں ہے۔ اگر پیمائش سے قبل ایک ذرے کا مقام غیر تعیین ہو تب اس کی سمتی رفتار بھی غیر تعیین ہو گی۔ ہم ایک مخصوص قیمت کا نتیجہ حاصل کرنے کے احتمال کی صرف بات کر سکتے ہیں۔ ہم Ψ جانتے ہوئے کثافت احتمال کی بناوٹ کرنا باب ۳ میں دیکھیں گے۔ اب کے لیے صرف اتنا جاننا کافی ہے کہ سمتی رفتار کی توقعاتی قیمت ذرہ کے مقام کی توقعاتی قیمت کا تفرق ہو گا۔

$$\langle v\rangle = \frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} \tag{۱.۳۲}$$

مساوات ۱.۳۱ ہمیں Ψ سے بلاواسطہ $\langle v\rangle$ دیتی ہے۔

روایتی طور پر ہم سمتی رفتار کی بجائے **معیار حرکت**[۲۷] $p = mv$ کے ساتھ کام کرتے ہیں۔

$$\langle p\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = -i\hbar\int\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x \tag{۱.۳۳}$$

میں $\langle x\rangle$ اور $\langle p\rangle$ کو زیادہ معنی خیز طرز میں پیش کرتا ہوں۔

$$\langle x\rangle = \int \Psi^*(x)\Psi\,\mathrm{d}x \tag{۱.۳۴}$$

$$\langle p\rangle = \int \Psi^*\Big(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Big)\Psi\,\mathrm{d}x \tag{۱.۳۵}$$

کوانٹم میکانیات میں مقام کو **عامل**[۲۸] x اور معیار حرکت کو عامل $\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ ظاہر کرتے ہیں۔ کسی بھی توقعاتی قیمت کے حصول کی خاطر ہم موزوں عامل کو Ψ^* اور Ψ کے بیچ لکھ کر تکمل لیتے ہیں۔

یہ سب بہت اچھا ہے لیکن دیگر مقداروں کا کیا ہو گا؟ حقیقت یہ ہے کہ تمام کلاسیکی متغیرات کو مقام اور معیار حرکت کی صورت میں لکھا جا سکتا ہے۔ مثال کے طور پر حرکی توانائی کو

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

---

[۲۷] momentum

[۲۸] operator

اور زاویائی معیار حرکت کو

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times m\boldsymbol{v} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$$

لکھا جا سکتا ہے (جہاں یک بعدی حرکت کے لئے زاویائی معیار حرکت نہیں پایا جاتا ہے)۔ کسی بھی مقدار مثلاً $Q(x, p)$ کی توقعاتی قیمت حاصل کرنے کے لیے ہم ہر p کی جگہ $\frac{\hbar}{i}\frac{d}{\mathrm{d}x}$ پر کر کے حاصل عامل کو Ψ^* اور Ψ کے بیچ لپیٹ کر درج ذیل تکمل حاصل کرتے ہیں۔

$$\langle Q(x,p)\rangle = \int \Psi^* Q\Big(x, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Big)\Psi \,\mathrm{d}x \tag{۱.۳۶}$$

مثال کے طور پر حرکی توانائی کی توقعاتی قیمت درج ذیل ہو گی۔

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int \Psi^* \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\,\mathrm{d}x \tag{۱.۳۷}$$

حال Ψ میں ایک ذرہ کی کسی بھی حرکی مقدار کی توقعاتی قیمت مساوات ۱.۳۶ سے حاصل ہو گی۔ مساوات ۱.۳۴ اور ۱.۳۵ اس کی دو مخصوص صورتیں ہیں۔ میں نے کوشش کی ہے کہ جناب بوہر کی شماریاتی تشریح کو مد نظر رکھتے ہوئے مساوات ۱.۳۶ قابل قبول نظر آئے، اگرچہ، حقیقتاً یہ کلاسیکی میکانیات سے بہت مختلف انداز ہے کام کرنے کا۔ ہم باب 3 میں اس کو زیادہ مضبوط نظریاتی بنیادوں پر کھڑا کریں گے، جب تک آپ اس کے استعمال کی مشق کریں۔ فی الحال آپ اس کو ایک مسلمہ تصور کر سکتے ہیں۔

سوال ۱.۶: آپ کیوں مساوات ۱.۲۹ کے وسطی فقرہ پر تکمل بالحصص کرتے ہوئے، وقتی تفرق کو x کے اوپر سے گزار کر، یہ جانتے ہوئے کہ $\frac{\partial x}{\partial t} = 0$ ہے، فیصلہ نہیں کر سکتے ہیں کہ $\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = 0$ ہو گا؟

سوال ۱.۷: $\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t}$ کا حساب کریں۔ جواب:

$$\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t} = \Big\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\Big\rangle \tag{۱.۳۸}$$

مساوات ۱.۳۲ (مساوات ۱.۳۳ کا پہلا حصہ) اور ۱.۳۸ **مسئلہ اہرنفسٹ**[۲۹] کی مخصوص صورتیں ہیں، جو کہتا ہے کہ توقعاتی قیمتیں کلاسیکی قواعد کو مطمئن کرتے ہیں۔

سوال ۱.۸: فرض کریں آپ مخفی توانائی کے ساتھ ایک مستقل جمع کرتے ہیں (مستقل سے میرا مراد ایسا مستقل ہے جو x اور t کا تابع نہ ہو)۔ کلاسیکی میکانیات میں یہ کسی بھی چیز پر اثر انداز نہیں ہو گا البتہ کوانٹم میکانیات میں اس کے اثر پر غور کرنا باقی ہے۔ دکھائیں کہ تفاعل موج کو اب $e^{-iV_t/\hbar}$ ضرب کرتا ہے جو وقت کا تابع جزو ہے۔ اس کا کسی حرکی متغیر کی توقعاتی قیمت پر کیا اثر ہو گا؟

---

[۲۹] Ehrenfest's theorem

۱.۶ اصول عدم یقینیت

فرض کریں آپ ایک لمبی رسی کا ایک سر اوپر نیچے ہلا کر موج پیدا کرتے ہیں (شکل 7.1)۔ اب اگر پوچھا جائے کہ یہ موج ٹھیک کہاں پائی جاتی ہے تو آپ غالباً اس کا جواب دینے سے قاصر ہونگے۔ موج کسی ایک جگہ نہیں بلکہ کئی میٹر لمبائی پر پائی جاتی ہے۔ اس کی بجائے اگر **طول موج**[۳۰] پوچھی جائے تو آپ اس کا معقول جواب دے سکتے ہیں: اس کا طول موج تقریباً ایک میٹر ہے۔ اس کے برعکس اگر آپ رسی کو ایک جھٹکا دیں تو ایک نوکیلی موج پیدا ہو گی (شکل 8.1)۔ یہ موج دوری نہیں ہے لہٰذا اس کے طول موج کی بات کرنا بے معنی ہو گا۔ اب آپ طول موج بتانے سے قاصر ہوں گے جبکہ موج کا مقام بتانا ممکن ہو گا۔ اول الذکر میں موج کا مقام پوچھنا بے معنی سوال ہو گا جبکہ موخر الذکر میں طول موج جاننا بے معنی ہو گا۔ ہم ان دو صورتوں کے بیچ کے حالات بھی پیدا کر سکتے ہیں جن میں مقام موج اور طول موج خاصی حد تک قابل تعین ہوں۔ تاہم ان صورتوں میں طول موج بہتر سے بہتر جانتے ہوئے مقام موج کم سے کم بتانا ممکن ہو گا یا پھر مقام بہتر سے بہتر جانتے ہوئے طول موج کم سے کم قابل تعین ہو گا۔ فوریئر تجزیہ کا ایک مسئلہ ان حقائق کو مضبوط بنیادوں پر کھڑا کرتا ہے۔ فی الحال میں صرف کیفی دلائل پیش کرنا چاہتا ہوں۔

یہ حقائق ہر موجی مظہر، بشمول کوانٹم میکانی موج تفاعل، کے لیے درست ہیں۔ اب ایک ذرے کے Ψ کے طول موج اور معیار حرکت کا تعلق **کلیہ ڈی بروگلی**[۳۱]

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \tag{۱.۳۹}$$

پیش کرتا ہے۔ یوں طول موج میں پھیلاو معیار حرکت میں پھیلاو کے مترادف ہے اور اب ہمارا عمومی مشاہدہ یہ ہو گا کہ کسی ذرے کا مقام ٹھیک ٹھیک جانتے ہوئے ہم اس کی معیار حرکت کم سے کم جان سکتے ہیں۔ اس کو ریاضیاتی روپ میں لکھتے ہیں:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{۱.۴۰}$$

جہاں σ_x اور σ_p بالترتیب x اور p کے معیاری انحراف ہیں۔ یہ جناب ہیزنبرگ کا مشہور **اصول عدم یقینیت**[۳۲] ہے۔ (اس کا ثبوت باب ۳ میں پیش کیا جائے گا۔ میں نے اس کو یہاں اس لئے متعارف کیا کہ آپ باب ۲ کی مثالوں میں اس کا استعمال کرنا سیکھیں۔)

اس بات کی تسلی کر لیں کہ آپ کو اصول عدم یقینیت کا مطلب سمجھ آ گیا ہے۔ مقام کی پیمائش کی ٹھیک ٹھیک نتائج کی طرح معیار حرکت کی پیمائش بھی ٹھیک ٹھیک نتائج دے گی۔ یہاں "پھیلاو" سے مراد یہ ہے کہ یکساں تیار کردہ نظاموں پر پیمائشیں بالکل ایک جیسے نتائج نہیں دیں گی۔ آپ چاہیں تو (Ψ کو نوکیلی بنا کر) ایسا حال تیار کر سکتے ہیں جس پر مقام کی پیمائشیں قریب قریب نتائج دیں لیکن ایسی صورت میں معیار

---

[۳۰] wavelength
[۳۱] De Broglie formula
[۳۲] uncertainty principle

حرکت کی پیمائشوں کے نتائج ایک دوسرے سے بہت مختلف ہوں گی۔ اس طرح آپ چاہیں تو (Ψ کو ایک لمبی سائن نما موج بنا کر) ایسا حال تیار کر سکتے ہیں جس پر معیار حرکت کی پیمائشوں کے نتائج ایک دوسرے کے قریب قریب ہوں گے لیکن ایسی صورت میں ذرے کے مقام کی پیمائشوں کے نتائج ایک دوسرے سے بہت مختلف ہوں گے۔ اور ہاں آپ ایسا حال بھی تیار کر سکتے ہیں جس میں نہ تو مقام اور نا ہی معیار حرکت ٹھیک سے معلوم ہو۔ مساوات ۱.۴۰ درحقیقت ایک عدم مساوات ہے جس میں σ_x اور σ_p کی جسامت پر کوئی حد مقرر نہیں ہے۔ آپ Ψ کو ایک لمبی بلدار لکیر بنا کر، جس میں بہت سارے ابھار اور گڑھے پائے جاتے ہوں اور جس میں کوئی تواتر نہ پایا جاتا ہو، σ_x اور σ_p کی قیمتیں جتنی چاہیں بڑھا سکتے ہیں۔

سوال ۱.۹: ایک ذرہ جس کی کمیت m ہے درج ذیل حال میں پایا جاتا ہے

$$\Psi(x,t) = Ae^{-a[(mx^2/\hbar)+it]}$$

جہاں A اور a مثبت حقیقی مستقل ہیں۔

ا. مستقل A تلاش کریں۔

ب. کس مخفی توانائی تفاعل $V(x)$ کے لیے Ψ شروڈنگر مساوات کو مطمئن کرتا ہے؟

ج. x ، x^2 ، p اور p^2 کی توقعاتی قیمتیں تلاش کریں۔

د. σ_x اور σ_p کی قیمتیں تلاش کریں۔ کیا ان کا حاصل ضرب اصول عدم یقینیت پر پورا اترتے ہیں؟

سوال ۱.۱۰: مستقل π کے ہندسی پھیلاو کے اولین 25 ہندسوں $(3,1,4,1,5,9,\cdots)$ پر غور کریں۔

ا. اس گروہ سے بلا منصوبہ ایک ہندسہ منتخب کیا جاتا ہے۔ صفر تا نو ہر ہندسہ کے انتخاب کا احتمال کیا ہو گا؟

ب. کسی ہندسے کے انتخاب کا احتمال سب سے زیادہ ہو گا؟ وسطانیہ ہندسہ کونسا ہو گا؟ اوسط قیمت کیا ہو گی؟

ج. اس تقسیم کا معیاری انحراف کیا ہو گا؟

سوال ۱.۱۱: گاڑی کی رفتار پیما کی خراب سوئی آزادانہ طور پر حرکت کرتی ہے۔ ہر جھٹکا کے بعد یہ اطراف سے ٹکڑا کر 0 اور π زاویوں کے بیچ آ کر رک جاتی ہے۔

ا. کثافت احتمال $\rho(\theta)$ کیا ہو گا؟ اشارہ: زاویہ θ اور $(\theta + \mathrm{d}\theta)$ کے بیچ سوئی رکنے کا احتمال $\rho(\theta)\,\mathrm{d}\theta$ ہو گا۔ متغیر θ کے لحاظ سے $\rho(\theta)$ کو وقفہ $-\frac{\pi}{2}$ تا $\frac{3\pi}{2}$ ترسیم کریں (ظاہر ہے اس وقفے کا کچھ حصہ درکار نہیں ہے جہاں ρ صفر ہو گا)۔ دھیان رہے کہ کل احتمال 1 ہو گا۔

ب. اس تقسیم کے لیے $\langle\theta\rangle$ ، $\langle\theta^2\rangle$ اور σ تلاش کریں۔

ج. اسی طرح $\langle\sin\theta\rangle$ ، $\langle\cos\theta\rangle$ اور $\langle\cos^2\theta\rangle$ تلاش کریں۔

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 مخفی توانائی $V(x,t)$ 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**[1] 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 یوں آپس میں جوڑ سکتے ہیں کہ ان سے عمومی حل حاصل کرنا ممکن ہو۔ قابل علیحدگی حلوں کیلئے درج ذیل ہو گا

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

---

[1] separation of variables

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 ہے۔ یاد رہے اگر V از خود x اور t دونوں پر منحصر ہو تب ایسا نہیں ہو گا۔ 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 ہو گا۔ 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 ہو گا۔ 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 ۲.۵) 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 ہو گا۔ چونکہ ہم حاصل ضرب $\psi\varphi$ میں دلچسپی رکھتے ہیں لہٰذا ہم مستقل C کو ψ میں ضم کر سکتے ہیں۔ یوں مساوات ۲.۴ کا حل درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

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

دوسری (مساوات ۲.۵) کو **غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات**[۲] کہتے ہیں۔ پوری طرح مخفی توانائی V جانے بغیر ہم آگے نہیں بڑھ سکتے ہیں۔

[۲] time-independent Schrodinger align

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 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) $0 = \langle p\rangle$ 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**[۳] 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 $p \rightarrow (\hbar/i)(\partial/\partial x)$ پر کر کے درج ذیل حاصل ہو گا۔

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

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

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{۲.۱۲}$$

---
[۳] Hamiltonian

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 ایک ہی قیمت E دے گی۔ (اسی کی بنا علیحدگی مستقل کو E سے ظاہر کیا گیا۔)

3) عمومی حل قابل علیحدگی حلوں کا **خطی جوڑ**[۴] 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**[۵] کا ایک منفرد تفاعل موج پایا جائے گا۔

$$\Psi_1(x,t) = \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar}, \quad \Psi_2(x,t) = \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}, \ \cdots$$

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 از خود ایک حل ہو گا۔ ایک بار قابل علیحدگی حل تلاش کرنے کے بعد ہم 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۔

---

[۴] linear combination
[۵] allowed energy

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 کہا جا 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 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 مخصوص تابعیت وقت $e^{-iE_nt/\hbar}$ چسپاں کریں گے۔

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

چونکہ قابل علیحدگی حل

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

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۔

مثال ۲.۱: 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۔

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

(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 ہرگز ساکن حال نہیں ہو گا۔ لیکن دھیان رہے کہ (ایک دوسرے سے مختلف) توانائیوں کے تفاعلات کے خطی جوڑنے حرکت پیدا کیا۔ □

سوال ۲.۱: درج ذیل تین مسائل کا ثبوت پیش کریں۔

ا. قابل علیحدگی حلوں کے لئے علیحدگی مستقل E لازماً حقیقی ہو گا۔ اشارہ: مساوات ۲.۷ میں E کو $E_0 + i\Gamma$ لکھ کر (جہاں E اور Γ حقیقی ہیں)، دکھائیں کہ تمام t کے لئے مساوات 1.20 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 ہرگز 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 ۲.۵ 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 ۲.۵ 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 ۲.۵ کو درج 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 1.2)۔

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

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**[۱] 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**[۲] تعین کرتے ہیں۔ $\psi(x)$ کے موزوں سرحدی شرائط کیا ہونگے؟ عموماً ψ اور $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ دونوں استمراری ہونگے، لیکن جہاں مخفیہ لامتناہی کو پہنچتا ہو وہاں صرف اول الذکر کا اطلاق ہو گا۔ (میں حصہ 5.2 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

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \tag{۲.۲۳}$$

---

[۱] simple harmonic oscillator

[۲] boundary conditions

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:

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

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**[۸] قیمتوں میں سے ہونا ہو گا۔ مستقل A کی قیمت حاصل کرنے کے لئے ψ کو معمول پر لانا ہو گا:

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

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

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

---

[۸] allowed

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 2.2 میں ترسیم کیا گیا ہے جو لمبائی a کے دھاگے پر ساکن امواج کی طرح نظر آتے ہیں۔ تفاعل ψ_1 جو **زمینی حال**[9] کہلاتا ہے کی توانائی کم سے کم ہے۔ باقی حالات جن کی توانائیاں n^2 کے براہ راست بڑھتی ہیں **ہیجانی حالات**[10] 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۔

۲. توانائی بڑھاتے ہوئے ہر اگلے حال کے **عقدوں**[11] (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۔

۳. یہ تمام درج ذیل نقطہ نظر سے باہمی **عمودی**[12] ہیں جہاں $m \neq n$ ہے۔

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

ثبوت:

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

دھیان رہے کہ $n = m$ 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۔ درحقیقت، عمودیت اور معمول زنی کو ایک فقرے میں سمویا جا سکتا ہے:[13]

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

---

[9] ground state

[10] excited states

[11] nodes

[12] orthogonal

[13] یہاں تمام ψ حقیقی ہیں لہٰذا ψ_m پر $*$ ڈالنے کی ضرورت نہیں ہے، لیکن مستقبل کی استعمال کے نقطہ نظر سے ایسا کرنا ایک اچھی عادت ہے۔

جہاں δ_{mn} **کرونیکر ڈیلٹا**[۱۴] کہلاتا ہے ہیں 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**[۱۵] ہیں۔

۴. یہ **مکمل**[۱۶] ہیں، جس سے مراد ہے کہ کسی بھی دوسرے تفاعل $f(x)$ کو ان کا خطی جوڑ لکھا جا سکتا ہے:

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

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**[۱۷] پہچان پائیں گے۔ یہ حقیقت، کہ ہر تفاعل کو فوریئر تسلسل کی صورت میں پھیلا کر لکھا جا سکتا ہے، بعض اوقات **مسئلہ ڈرشلے**[۱۸] کہلاتا ہے۔[۱۹]

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۔[۲۰]

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

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۔

---

[۱۴] Kronecker delta

[۱۵] orthonormal

[۱۶] complete

[۱۷] Fourier series

[۱۸] Dirichlet's theorem

[۱۹] تفاعل $f(x)$ میں متناہی تعداد کی عدم استمرار (چھلانگ) پائے جا سکتی ہیں۔

[۲۰] آپ یہاں نقلی متغیر کو m یا n یا کوئی تیسرا حرف لے سکتے ہیں (بس اتنا خیال رکھیں کہ مساوات کی دونوں اطراف ایک ہی حرف استعمال کریں)، اور ہاں یاد رہے کہ یہ حرف "کسی مثبت عدد صحیح" کو ظاہر کرتا 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 سے 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 دعوی کیا (مساوات ۲.۱۷) کہ تابع وقت شروڈنگر مساوات کا عمومی ترین حل، ساکن حالات کا خطی جوڑ ہو گا۔

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

(اگر آپ کو اس حل پر شق 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 3.2)۔

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

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۔

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

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 عمودزنی سے حاصل ہو گا (چونکہ تمام c_n غیر تابع وقت ہیں لہٰذا میں $t = 0$ پر ثبوت پیش کرتا ہوں۔ آپ باآسانی 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**[۲۱] کی یہ ایک مثال ہے۔

---

[۲۱] conservation of energy

مثال ۲.۳: ہم نے دیکھا کہ مثال 2.2 میں ابتدائی تفاعل موج (شکل 3.2) زمینی حال ψ_1 (شکل 2.2) کے ساتھ قریبی مشابہت رکھتا ہے۔ یوں ہم توقع کرتے ہیں کہ $|c_1|^2$ غالب ہوگا۔ یقیناً ایسا ہی ہے۔

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

باقی تمام عددی سر مل کر فرق دیتے ہیں:

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

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

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

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 2.2 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 $|\Psi(x,t)|^2$ تلاش کریں۔ موخر الذکر کو وقت کے سائن نما تفاعل کی صورت میں لکھیں، جیسا مثال 1.2 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۔)

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۔

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

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 2.2 کے تفاعل موج کیلئے H کی توقعاتی قیمت تکمل کے ذریعہ حاصل کریں۔

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

مثال ۲.۳ میں مساوات 39.2 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 مرتعش

کلاسیکی ہارمونی مرتعش ایک لچک دار اسپرنگ جس کا مقیاس لچک k ہو اور کمیت m پر مشتمل ہوتا ہے۔ کمیت کی حرکت **قانون ہک**[۲۲]

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

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 مرتعش 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 4.2)۔ مخفی توانائی $V(x)$ کے کم سے کم نقطہ x_0 کے لحاظ سے $V(x)$ کو **ٹیلر تسلسل**[۲۳] کے لحاظ 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 خطر 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 ہوں گے) درج ذیل حاصل کرتے ہیں

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

[۲۲] Hooke's law
[۲۳] Taylor series

جو نقطہ x_0 پر ایک ایسی سادہ ہارمونی ارتعاش بیان کرتا ہے جس کا موثر مقیاس لچک $k = V''(x_0)$ ہو۔ 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

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

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

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

حل کریں۔ اس مسئلے کو حل کرنے کے لیے دو بالکل مختلف طریقے اپنائے جاتے ہیں۔ پہلی میں تفرقی مساوات کو "طاقتی تسلسل"[۲۴] 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۔

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

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

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

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

---

[۲۴] power series

البتہ یہاں بات اتنی سادہ نہیں ہے چونکہ p اور x عاملین ہیں اور عاملین عموماً **قابل تبادل** 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 **تبادل کار**[۲۵] کہتے ہیں اور جو ان کی آپس میں قابل تبادل نہ ہونے کی پیمائش ہے۔ عمومی طور پر عامل A اور عامل B کا تبادل کار (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۔

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

ہمیں x اور عددی p کا تبادل کار 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۔

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

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 تبادلی رشتہ**[۲۶] کہلاتا ہے۔

---

[۲۵] commutator

[۲۶] canonical commutation relation

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۔

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

(اس 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 قابل تبادل 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 خود کار 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**[27] پکارتے ہیں: a_+ **عامل رفعت**[28] اور a_- **عامل تقلیل**[29] ہے۔ حالات کی "سیڑھی" کو شکل 5.2 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 2.2 میں پیش عمومی مسئلہ کے تحت ناممکن ہے۔) نئے حالات حاصل کرنے کی خود کار ترکیب کسی نہ کسی نقطہ پر لازماً ناکامی کا شکار ہو گی۔ ایسا کیوں کر ہو گا؟ ہم جانتے ہیں کہ $a_-\psi$ شرودنگر 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۔

$$a_-\psi_0 = 0 \tag{۲.۵۸}$$

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

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

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:

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

[27] ladder operators
[28] raising operator
[29] lowering operator

(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 مسر تعش کا زمینی حال ہے) پر پیر رکھ کر، بار بار عامل رفعت استعمال کر کے ہیجان حالات دریافت کیے جا سکتے ہیں[۳۰] 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 مسر تعش کے تمام ساکن حالات دریافت کر سکتے ہیں۔ صریحاً ایسا کیے بغیر ہم تمام اجازتی توانائیاں تعین کر پائے ہیں۔

مثال ۲.۴: ہارمونی مسر تعش کا پہلا ہیجان حال تلاش کریں۔

حل: ہم مساوات ۲.۶۱ استعمال کرتے ہیں۔

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

---

[۳۰] ہارمونی مسر تعش 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۔

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

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

جیسا آپ دیکھ سکتے ہیں $A_1 = 1$ ہو گا۔

اگرچہ میں پچاس مرتبہ عامل رفعت استعمال کر کے ψ_{50} 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 $\psi_{n\pm1}$ 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**[۳۱] 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۔

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

---

[۳۱] Hermitian conjugate

مساوات ۲.۵۷ اور مساوات ۲.۶۱ استعمال کرتے ہوئے

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

ہوگا لہٰذا درج ذیل ہوں گے۔

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

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 ہوگا۔

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

اسی طرح درج ذیل ہوں گے۔

$$\begin{aligned}&\psi_1 = a_+\psi_0, \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}a_+\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_+)^2\psi_0,\\ &\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}a_+\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3\cdot2}}(a_+)^3\psi_0, \quad \psi_4 = \frac{1}{\sqrt{4}}a_+\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{4\cdot3\cdot2}}(a_+)^4\psi_0,\end{aligned}$$

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

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

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

لامتناہی چوکور کنواں کے ساکن حالات کی طرح ہارمونی مرتعش 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 کرکے 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 مرتعش کے n ویں حال کی مخفی توانائی کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔

حل:

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

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:

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

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 مسر تعش 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 پرکھیں۔

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 مسر تعش 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 مسر تعش 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 مسر تعش 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 بلاواسطہ 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۔[۳۲] 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

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

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**[۳۳] 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

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

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 کے 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:

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

---

[۳۲] 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۔

[۳۳] Frobenius method

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

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

یہ **کلیہ توالی**[۳۴] شروڈنگر مساوات کا مکمل مبدل ہے جو a_0 سے ابتداء کرتے ہوئے تمام جفت عددی سر

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

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

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

---

[۳۴] recursion formula

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 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۔

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

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 پہ 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 6a.2)؛ 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 ترسیم کرتے ہیں؛ اب حل کی دم دوسری سمت میں لامتناہی کی طرف بڑھے گی (شکل 6b.2)۔ 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 دوسری طرف لامتناہی کی طرف بڑھے گی۔ ٹھیک 0.50 پر اس کی دم صفر کو پہنچ کر معمول زنی کے قابل حل دے گی۔

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

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

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

$$h_0(\xi) = a_0$$

جدول ۱.۲: ابتدائی چند ہرمائٹ کثیر رکنیاں $H_n(\xi)$

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

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 [۳۵]، 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 کے علاوہ یہ عین **ہرمائٹ کثیر رکنی**[۳۶] $H_n(\xi)$ ہیں[۳۷]۔ جدول ۱.۲ میں اس کے چند ابتدائی ارکان پیش کیے گئے ہیں۔ روایتی طور پر اختیاری جزو ضربی یوں منتخب کیا جاتا ہے کہ ξ کے بلند تر طاقت کا عددی سر 2^n ہو۔ اس روایت کے تحت ہارمونی مرتعش کے معمول شدہ[۳۸] ساکن حالات درج ذیل ہوں گے

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

---

[۳۵] دھیان رہے کہ n کی ہر ایک قیمت کے لئے عددی سروں a_j کا ایک منفرد سلسلہ پایا جاتا ہے۔
[۳۶] Hermite polynomials
[۳۷] ہرمائٹ کثیر رکنیوں پر سوال ۲.۱۷ میں مزید غور کیا گیا ہے۔
[۳۸] میں یہاں معمول زنی مستقلات حاصل نہیں کروں گا۔

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

شکل 7.2(a) مسیں چند ابتدائی n کے لیے $\psi_n(x)$ ترسیم کیے گئے ہیں۔ کوانٹم مسر تعش حیران کن حد تک کلاسیکی مسر تعش سے مختلف ہے۔ نہ صرف اس کی توانائیاں کوانٹا شدہ ہیں بلکہ اس 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 غیر صفر ہے (سوال ۲.۱۵ دیکھیں) اور تمام طاق حالات مسیں عین وسط پر ذرہ پائے جانے کا احتمال صفر ہے۔ کلاسیکی اور کوانٹائی صورتوں مسیں مشابہت صرف n کی بڑی قیمتوں پر پائی جاتی ہے۔ مسیں نے شکل 7b.2 مسیں کلاسیکی موضعی تقسیم کو $n = 100$ کے کوانٹائی موضعی تقسیم پر ترسیم کیا ہے۔ انہیں ہموار کرنے سے یہ ایک دوسرے پر اچھی طرح 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 سگرا کی تقسیم کی بات کرتے ہیں)۔[۳۹]

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) تلاش کریں۔ اشارہ: کلاسیکی طور پر ایک مسر تعش کی توانائی $E = (1/2)ka^2 = (1/2)m\omega^2a^2$ ہوگی جہاں a حیطہ ہے۔ یوں توانائی E کے مسر تعش کا "کلاسیکی احبازتی خطہ" $-\sqrt{2E/m\omega^2}$ تا $+\sqrt{2E/m\omega^2}$ ہوگا۔ 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 $H_6(\xi)$ تلاش کریں۔ مجموعی مستقل تعین کرنے کی خاطر ξ کی بلند تر طاقت کا عددی سر روایت کے تحت 2^n لیں۔

سوال ۲.۱۷: اس سوال مسیں ہم ہرمائٹ کثیر رکنی کے چند اہم مسائل، جن کا ثبوت پیش نہیں کیا جائے گا، پر غور کرتے ہیں۔

ا. **کلیہ روڈریگیس**[۴۰] 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 کرکے H_3 اور H_4 اخذ کریں۔

ب. درج ذیل کلیہ توالی گزشتہ دو ہرمائٹ کثیر رکنیوں کی صورت مسیں 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 کرکے H_5 اور H_6 تلاش کریں۔

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

[۴۰] Rodrigues formula

ج. اگر آپ n رتبی کثیر رکنی کا تفرق لیں تو آپکو $n-1$ 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. **پیدا کار تفاعل**[۴۱] $e^{-z^2+2z\xi}$ 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 پر 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 پراسرار ثابت ہوتا ہے۔ غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات ذیل

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

یا ذیل ہے۔

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

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۔

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

[۴۱] generating function

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**[۴۲] کی ایک اٹل قیمت کا یوں مطابقتی ہو گا کہ درج ذیل ہو۔

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

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

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

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۔

$$p = \hbar k \tag{۲.۹۶}$$

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۔

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

---

[۴۲] argument

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**[43] کہتے ہیں۔[44]

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 100.2 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**[45]:

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

پیش کرتا ہے (سوال 20.2 دیکھیں)۔ $F(k)$ کو $f(x)$ کا **فوریئر بدل**[46] کہا جاتا ہے جبکہ $f(x)$ کو $F(k)$ کا **الٹ فوریئر بدل**[47] 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[48] ہونا لازم ہے۔ ہمارے مقاصد کے لئے، تفاعل $\Psi(x,0)$ پر بذات خود

---

[43] wave packet

[44] 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۔

[45] Plancherel's theorem

[46] Fourier transform

[47] inverse Fourier transform

[48] 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 ہو گا، اور حقیقتاً ان دونوں تکملات کی قیمتیں ایک دوسری جتنی ہوں گی۔ Arfken کے حصہ 5.15 میں حاشیہ 24 دیکھیں۔)

معمول شدہ ہونے کی طبعی شرط مسلط کرنا اس کی ضمانت دے گا۔ یوں آزاد ذرے کے عمومی کوانٹم مسئلہ کا حل مساوات 100.2 ہو گا جہاں $\phi(k)$ درج ذیل ہو گا۔

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

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۔

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

اس کے بعد مساوات ۲.۱۰۳ استعمال کرتے ہوئے $\phi(k)$ 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 100.2 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 8.2)۔ (ایسی بہت کم صورتیں حقیقتاً پائی جاتی ہیں جن کے لئے $\Psi(x,t)$ کا تکمل (مساوات 100.2) 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 9.2)۔ 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 9.2)۔ یہ مثال ہے اصول عدم یقینیت کی: اگر ذرے کے مقام میں پھیلاو کم ہو، تب اس کی معیار حرکت (لہٰذا k، مساوات 96.2 دیکھیں) کا پھیلاو لازماً زیادہ ہو گا۔ اس کی دوسری انتہا (بڑی a) کی صورت میں مقام کا پھیلاو زیادہ ہو گا (شکل 10.2) لہٰذا 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 10.2)۔ 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 94.2 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 100.2) میں 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 11.2) موجی اکٹھ ہو گا؛ یہ "غلاف" میں ڈھانکے ہوئے "لہروں" پر مشتمل ہو گا۔ انفرادی لہر کی رفتار، جس کو **دوری سمتی رفتار**[۴۹] کہتے ہیں، ہرگز ذرے کی سمتی رفتار کو ظاہر نہیں کرتی ہے بلکہ غلاف کی رفتار، جس کو **گروہی سمتی رفتار**[۵۰] 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 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**[۵۱] (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 $\phi(k)$

[۴۹] phase velocity
[۵۰] group velocity
[۵۱] dispersion relation

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 پہ 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 $\omega = (\hbar k^2/2m)$ یعنی $\omega/k = (\hbar k/2m)$ ہے جبکہ $\mathrm{d}\omega/\mathrm{d}k = (\hbar k/m)$ 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 94.2 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 $(ax^2+bx) = y^2 - (b^2/4a)$ ہو گا۔ 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. $\left|\Psi(x,t)\right|^2$ 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 ہو گا؟

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۔

ہ. 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 شرودنگر 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 شرودنگر 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 12.2) تب یہ ذرہ اس مخفی توانائی کے کنواں میں "پھنسا" رہے گا: یہ **واپسی نقاط**[۵۲] 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**[۵۳] 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 12.2)۔ (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**[۵۴] 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۔

شرودنگر 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**[۵۵] (جس پر ہم کچھ دیر میں بات کریں گے) ایک ذرے کو

---

[۵۲] turning points
[۵۳] bound state
[۵۴] scattering state
[۵۵] tunneling

کسی بھی متناہی مخفیہ رکاوٹ کے اندر سے گزرنے دیتی ہے، لہٰذا مخفیہ کی قیمت صرف لامتناہی پر اہم ہو گی (شکل 12.2c)۔

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

"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 $x \to \pm\infty$ 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[۵۶] 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**[۵۷] 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**[۵۸] یا **متعمم تقسیم**[۵۹] کہتے ہیں)۔[۶۰] 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:

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

---

[۵۶] آپ کو یہاں پریشانی کا سامنا ہو سکتا ہے کیونکہ عمومی مسئلہ جس کے لئے $E > V_{\text{کمتر}}$ درکار ہے (سوال 3.2)، 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۔

[۵۷] Dirac delta function

[۵۸] generalized function

[۵۹] generalized distribution

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

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 ہوگا جہاں $\epsilon > 0$ ہے۔)

آئیں درج ذیل روپ کے مخفیہ پر غور کریں جہاں α ایک مثبت مستقل ہے۔[61]

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

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 $V(x)=0$ ہوگا لہٰذا

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

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

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

مساوات ۲.۱۱۶ کا عمومی حل

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

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

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

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

خطہ $x > 0$ میں بھی $V(x)$ صفر ہے اور عمومی حل $Fe^{-kx} + Ge^{kx}$ ہو گا؛ اب $x \to +\infty$ 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۔

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

تفاعل $\psi(x)$ کو شکل 14.2 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 استمراریہی 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۔

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

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):

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

لہٰذا $\Delta(d\psi/dx) = -2Bk$ 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)۔

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

آخر میں ψ کو معمول پر لاتے ہوئے

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

(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

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

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۔

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

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 15.2 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[62] کا حیطہ A ، **منعکس موج**[63] کا حیطہ B جبکہ **ترسیلی موج**[64] کا حیطہ F ہو گا۔ مساوات ۲.۱۳۳ اور ۲.۱۳۵ کو B اور F 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 $A = 0$ ہو گا؛ 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[65] احتمال درج ذیل ہو گا

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

جہاں R کو **شرح انعکاس**[66] 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 ہو گا جسے **شرح ترسیل**[67] کہتے ہیں۔

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

ظاہر ہے ان احتمال کا مجموعہ ایک (1) ہو گا۔

$$R + T = 1 \tag{۲.۱۴۰}$$

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

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

زیادہ توانائی ترسیل کا احتمال بڑھاتی ہے جیسا کہ ظاہری طور پر ہونا چاہیے۔

یہاں تک باقی سب ٹھیک ہے لیکن 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،

[62] incident wave
[63] reflected wave
[64] transmitted wave
[65] یہ معمول پر لانے کے قابل تفاعل نہیں ہے لہٰذا کسی ایک مخصوص نقطہ پر ذرہ پایا جانے کا احتمال بے معنی ہو گا؛ بہر حال آمدی اور منعکس امواج کے احتمالات کا تناسب معنی خیز ہے۔ اگلے پیراگراف میں اس پر مزید بات کی جائے گی۔
[66] reflection coefficient
[67] transmission coefficient

لیکن ہم اس مسئلے کا حل جانتے ہیں۔ ہمیں ساکن حالات کے ایسے خطی جوڑ تیار کرنے ہونگے جو معمول پر لائے جانے کے قابل ہوں، جیسا ہم نے آزاد ذرہ کے لیے کیا تھا۔ 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 سے حل کرنا بہتر ہوگا۔[۶۸] 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 43.2)۔

متعلقہ مساوات جانتے ہوئے آئیں ڈیلٹا تفاعل رکاوٹ (شکل 16.2) کے مسئلہ پر غور کریں۔ ہمیں صرف α کی علامت تبدیل کرنی ہو گی۔ ظاہر ہے یہ تحدیدی حال کو ختم کرے گا (سوال 2.2)۔ دوسری جانب، شرح انعکاس اور شرح ترسیل جو α^2 پر منحصر ہیں تبدیل نہیں ہوں گے۔ کتنی عجیب بات ہے کہ ایک 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 $T = 1$ اور $R = 0$ ہوگا اور ذرہ ہر صورت رکاوٹ عبور کر پائے گا؛ اگر $E < V_{\text{بلند تر}}$ ہو تب $T = 0$ اور $R = 1$ ہوگا 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 ہوگا۔ اس مظہر کو **سرنگ زنی**[۶۹] کہتے ہیں جس پر جدید برقیات کا بیشتر حصہ منحصر ہے اور جو خوردبین میں حیرت انگیز ترقی کے پشت پر ہے۔ اس کے برعکس $E > V_{\text{بلند تر}}$ کی صورت میں بھی ذرے کے انعکاس کا احتمال غیر صفر ہوگا؛ 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 سوال 35.2 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. $\int_0^{\infty}[\cos(3x) + 2]\delta(x-\pi)\,\mathrm{d}x$

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

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**[70] $\theta(x)$ 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 $\mathrm{d}\theta/\,\mathrm{d}x = \delta(x)$ ہوگا۔

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 ہوگا۔ 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 ہوگا؟ مسئلہ پلانشرل استعمال کرکے درج ذیل دکھائیں۔

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

تبصرہ: یہ کلیہ دیکھ کر ایک عزت مند ریاضی دان پریشان ضرور ہوگا۔ اگرچہ $x = 0$ کے لئے یہ تکمل لامتناہی ہے اور $x \neq 0$ کی صورت میں چونکہ تکمل ہمیشہ کے لئے ارتعاش پذیر رہتا ہے لہٰذا یہ (صفر یا کسی دوسرے عدد کو) مرکوز نہیں ہوتا ہے۔ اس کی پیوندکاری 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 تکملیت) کی بنیادی شرط کو ڈیلٹا تفاعل مطمئن نہیں کرتا ہے (صفحہ ۵۲ پر مربع تکملیت 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۔

---

[70] step function

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 17.2)۔ ڈیلٹا تفاعل کنواں کی طرح یہ مخفیہ مقید حالات (جہاں $E < 0$ ہوگا) کے ساتھ ساتھ بکھراو حالات (جہاں $E > 0$ ہوگا) 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

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

جہاں

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

حقیقی اور مثبت ہے۔ اس کا عمومی حل $\Psi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx}$ ہے لیکن $x \to -\infty$ کے صورت میں اس کا پہلا جزو بے قابو بڑھتا ہے لہٰذا (ہمیشہ طرح؛ مساوات 119.2 دیکھیں) طبعی طور پر قابل قبول حل درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

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 کمتر $E > V$ کی بنا (سوال 2.2 دیکھیں) اس کو $-V_0$ سے بڑا ہونا ہوگا؛ لہٰذا l بھی حقیقی اور مثبت ہوگا۔ اس کا عمومی حل[۱]

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

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

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

اگلے قدم میں ہمیں سرحدی شرائط مسلط کرنے ہوں گے: ψ اور $\frac{d\psi}{dx}$ 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 ہوں گے (سوال 1.2ج)۔ 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 ہوگا۔ میں جفت حل حاصل کرتا ہوں جبکہ آپ کو سوال 29.2 میں طاق حل تلاش کرنے ہوں گے۔ 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 $\frac{d\psi}{dx}$ 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 ہوگا۔

---

[۱] آپ چاہیں تو عمومی حل کو قوت نمائی روپ 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 بلا واسطہ بروئے کار لا سکتا ہے۔

$$\kappa = l \tan(la) \tag{۲.۱۵۴}$$

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 $2mV_0/\hbar^2$ $= (\kappa^2 + l^2)$ اور 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 18.2)۔ دو تحدیدی صورتیں زیادہ دلچسپی کے حامل ہیں۔

ا. موٹا ایک 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۔

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

اب $E + V_0$ کنواں کی تہہ کے اوپر 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 29.2 میں دیکھیں گے کل توانائیوں کی باقی نصف تعداد طاق تفاعل موج سے حاصل ہو گی۔) یوں $V_0 \rightarrow \infty$ 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 سے کم ہوتی جاتی ہے حتٰی 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 30.2) تو ایسا ضرور کریں جبکہ میں اب بکھراو حالات $E > 0$ کی طرف بڑھنا چاہوں گا۔ ہوں 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۔[۴۷]

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 استعمال کرتے ہوئے C اور D خارج کر کے باقی دو حل کر کے B اور F تلاش کر سکتے ہیں (سوال 32.2 دیکھیے گا)۔

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

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

---

[۴۷] 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۔

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

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

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 "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 19.2 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: ڈائی رک 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 $z_0 \rightarrow 0$ 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 $V_(x) = +V_0 > 0$ لیتے ہے 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۔[43]

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

سوال ۲.۳۴: درج ذیل سیڑھی مخفیہ پر غور کریں۔

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

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 34.2) کی طرف بڑھتا ہے۔

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 جزو-ا کے نتیجہ سے بہت کم ہو گا۔ یہ مخفیہ کیوں ایک افقی چٹان کی صحیح ترجمانی نہیں کرتا ہے؟ اشارہ: شکل 20.2 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 ہوئے ایک 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

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

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 جزو-ا میں انعکاس کا احتمال تلاش کیا؛ کلیہ $T = 1 - R$ استعمال کرکے سطح سے ترسیل کا احتمال حاصل کریں۔

سوال ۲.۳۶: عین امکدہ پر $-a < x < +a$ کے بیچ لامتناہی چکور کنواں پایا جاتا ہے۔ جس کے اندر $V(x) = \infty$ اور جس کے باہر $V(x) = 0$ ہے۔ وقت کا غیر تابع شروڈنگر مساوات پر موزوں سرحدی شرائط مسلط کرکے اسے حل کریں۔ تصدیق کریں کہ آپ کی توانائیاں عین میری حاصل کردہ توانائیوں کے مطابق ہے مساوات مساوات 27.2 اور تصدیق کریں کہ میری ψ مساوات میں مساوات 28.2 کی جگہ $x \to (x+a)/2$ پر کرکے اور دوبارہ معمول پر لانے سے آپ کی سائی حاصل ہو گی۔ اپنے اولین تین حل ترسیم کریں اور ان کا موازنہ شکل شکل 2.2 سے کریں۔ دھیان رہے کہ یہاں کنواں کی چوڑائی $2a$ ہے۔

سوال ۲.۳۷: لامتناہی چکور کنواں مساوات مساوات 19.2 میں ایک ذرے کے ابتدائی تفاعل موج درج ذیل ہے

$$\psi(x,0) = A\sin^3(\pi x/a) \tag{۲.۱۷۳}$$

$(0 \leq x \leq a)$۔ مستقل A تعین کرکے $\psi(x,t)$ تلاش کریں اور $(0 \leq x \leq a)$ کے لحاظ سے وقت کا حساب لگائیں۔ توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہے؟ اشارہ۔ $\sin(m\theta)$ اور $\cos(m\theta)$ کو تخفیف کے بعد $\sin^n\theta$ اور $\cos^n\theta$ کے خطی جوڑ لکھا جا سکتا ہے جہاں n، $m = 0, 1, 2, \cdots$ ہو گا۔

سوال ۲.۳۸: کمیت m کا ایک ذرہ لامتناہی چکور کنواں میں مساوات مساوات 19.2 میں زمینی حال میں ہے۔ اچانک کنواں کا دایاں دیوار a سے حرکت کرتے ہوئے $2a$ منتقل ہوتا ہے جس سے کنواں کی چوڑائی دگنی ہو جاتی ہے۔ اس عمل سے لمحاتی طور پر تفاعل موج اثر انداز نہیں ہوتا۔ اس ذرہ کی توانائی کی پیمائش اب کی جاتی ہے۔

۱. کس نتیجے کا امکان سب سے زیادہ ہے؟ اس نتیجے کے حصول کا احتمال کیا ہو گا؟

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

۳. توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہو گی؟ اشارہ۔ اگر آپ دیکھیں کہ آپ کو لامتناہی تسلسل کا سامنا پڑ گیا ہے تب کوئی دوسری ترکیب استعمال کریں۔

سوال ۲.۳۹:

۱. دکھائیں کہ لامتناہی چکور کنواں میں ایک ذرے کی تفاعل موج کوانٹائی تجدیدی ٹائم $T = 4ma^2/\pi\hbar$ کے بعد دوبارہ اپنے اصل روپ میں واپس آتا ہے۔ یعنی کسی بھی حال کے لئے نہ صرف ساکن حال کیلئے $\psi(x,T) = \psi(x,0)$

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

۳. کس توانائی کیلئے یہ دو تجدیدی اوقات ایک دوسرے کے برابر ہیں؟

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

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ -32\hbar^2/ma^2 & (0 \le x \le a) \\ 0 & (x > a) \end{cases} \tag{۲.۱۷۴}$$

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

۲. مقید حال میں سب سے زیادہ توانائی کی صورت میں کنواں کے باہر یعنی $x > a$ پر ذرہ پائے جانے کا احتمال کیا ہو گا؟ جواب 0.542 اگرچہ یہ کنواں میں مقید ہے لیکن کنواں سے باہر اور کنواں کے اندر اس کی موجودگی کا امکان ایک جیسا ہے۔

سوال ۲.۴۱: ایک ذرہ جس کی کمیت m ہے ہارمونی مرتعش کی مخفی کو مساوات 43.2 میں درج ذیل حال سے ابتدا کرتا ہے

$$\psi(x,0) = A\left(1 - 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}x}\right)^2 e^{\frac{-m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{۲.۱۷۵}$$

جہاں A کوئی مستقل ہے۔

۱. توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہے؟

۲. مستقبل کے لمحہ پر تفاعل موج درج ذیل ہو گا

$$\psi(x,T) = B\left(1 + 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}x}\right)^2 e^{\frac{-m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{۲.۱۷۶}$$

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

$$V(x) = \begin{cases} (1/2)m\omega^2x^2 & x > 0 \\ \infty & x < 0 \end{cases} \tag{۲.۱۷۷}$$

مثلاً ایک ایسا سپرنگ جس کو کھینچا تو جا سکتا ہے لیکن اسے دبایا نہیں جا سکتا ہے۔ اشارہ۔ اس کو حل کرنے کے لئے آپ کو ایک بار اچھی طرح سوچنا پڑے گا جبکہ حقیقی حساب بہت کم درکار ہو گی۔

سوال ۲.۴۳: آپ نے سوال سوال 22.2 میں ساکن غوثی ذرہ پلندہ موج کا تجزیہ کیا۔ اب ابتدائی تفاعل موج

$$\psi(x,0) = Ae^{-ax^2}e^{ilx} \tag{۲.۱۷۸}$$

جہاں l ایک حقیقی مستقل ہے سے شروع کرتے ہوئے متحرک غوسی پلندہ موج کے لیے وہی مسئلہ دوبارہ حل کریں۔

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

$$v(x) = \begin{cases} \alpha\delta(x) & -a < x < +a \\ \infty |x| \geq a \end{cases} \tag{۲.۱۷۹}$$

جفت اور طاق تفاعل امواج کو علیحدہ علیحدہ حل کریں۔ انہیں معمول پر لانے کی ضرورت نہیں ہے۔ اجازتی توانائیوں کو اگر ضرورت ہو 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 صورت $a \to 0$ اور $a \to \infty$ تبصرہ کریں۔

سوال ۲.۴۵: ایسے دو یا دو سے زیادہ وقت کے غیر تابع شروڈنگر مساوات کے حل جن کی توانائی E ایک دوسرے جیسی ہو کو انحطاطی حال کہتے ہیں۔ مثال کے طور پر آزاد ذرہ حالات دوہری انحطاطی ہیں۔ ان میں سے ایک حل دائیں رخ اور دوسرا بائیں رخ حرکت کو ظاہر کرتا ہے۔ لیکن 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۔ ایک دور میں کوئی مقید انحطاطی حال بھی پائے جاتے ہیں۔ اشارہ۔ فرض کریں ψ_1 اور ψ_2 ایسے دو حل ہوں جن کی توانائی E ایک دوسرے جیسی ہو۔ حل ψ_1 کی شروڈنگر مساوات کو ψ_2 سے ضرب دیں اور اس سے ψ_2 کے شروڈنگر مساوات کو ψ_1 سے ضرب دے کر منفی کریں۔ یوں 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 $\psi \to 0$ پر معمول پر لانے کے قابل ہر حل $\pm\infty$ ہو گا اس حقیقت کو استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ یہ مستقل در حقیقت صفر ہو گا اس سے آپ یہ نتیجہ اخذ کر سکتے ہیں کہ ψ_2 دراصل ψ_1 کا مضرب ہو گا لہٰذا یہ دو حل الگ الگ نہیں ہو سکتے ہیں۔

سوال ۲.۴۶: فرض کریں کمیت m کا ایک معطی ایک دایری چھلا پر بے رگڑ حرکت کرتا ہے۔ چھلے کا محیط L ہے۔ یہ ایک آزاد ذرہ کی طرح ہے لیکن یہاں $\psi(x+L) = \psi(x)$ ہو گا۔ اس کے ساکن حال تلاش کریں اور انہیں معمول پر لائیں اور ان کے مطابقتی ایجادتی توانائیاں تلاش کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ ہر توانائی E_n کے لئے دو آپس میں غیر تابع حل پائے جائیں گے جن میں سے ایک گھڑی وار اور دوسرا خلاف گھڑی حرکت کے لیے ہو گا۔ جنہیں آپ $\psi_n^+(x)$ اور $\psi_n^-(x)$ کہہ سکتے ہیں۔ سوال 45.2 کے مسئلہ کو مدنظر رکھتے ہوئے آپ اس انحطاط کے بارے میں کیا کہیں گے یہ مسئلہ یہاں کارآمد کیوں نہیں ہے؟

باب ۳

قواعد وضوابط

سوال ۳.۱: توانائی اور وقت کی عدم یقینیت کے اصول کی ایک دلچسپ روپ $\Delta t = \tau/\pi$ ہے جہاں ابتدائی حال $\Psi(x,0)$ کے عمودی حال تک ارتقا کے لیے درکار وقت τ ہے۔ دو معیاری عمودی ساکن حالات کے دو برابر حصوں پر مشتمل اختیاری مخفی قوۃ $\Psi(x,0) = 1/\sqrt{2}[\psi_1(x) + \psi_2(x)]$ کا تفاعل موج استعمال کرتے ہوئے اس کی جانچ پڑتال کریں۔

سوال ۳.۲: ہارمونی مرتعش کی ساکن حالات کی معیاری عمودی اساس مساوات 67.2 میں $\langle n|x|n'\rangle$ اور $\langle n|p|n'\rangle$ تلاش کریں۔ آپ سوال 12.2 میں $n' = n$ تلاش کر چکے ہیں۔ وہی ترکیب موجودہ عمومی مسئلے میں استعمال کریں۔ متکافی لامتناہی X اور P تلاش کریں۔ دکھائیں کہ اس اساس میں $\mathrm{H} = (1/2m)\mathrm{P}^2 + (m\omega^2/2)\mathrm{X}^2$ وتری ہے۔ کیا اس کے وتری ارکان آپکے توقع کے مطابق ہیں۔ جزوی جواب

$$\langle n|x|n'\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n'}\delta_{n,n'-1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1})$$

سوال ۳.۳: ایک ہارمونی مرتعش ایسی حال میں ہے کہ اس کی توانائی کو پیمائش $(1/2)\hbar\omega$ یا $(3/2)\hbar\omega$ ایک دوسرے جیسے احتمال کے ساتھ دے گی۔ اس حال میں $\langle p\rangle$ کی زیادہ سے زیادہ ممکنہ قیمت کیا ہو گی۔ اگر لمحہ $t = 0$ پر اس کی $\langle p\rangle$ کی زیادہ سے زیادہ ممکنہ قیمت ہو تو $\Psi(x,t)$ کیا ہو گا۔

سوال ۳.۴: 35-3

ہارمونی مرتعش کے منطقی حالات۔

ہارمونی مرتعش کے ساکن حالات $\psi_n(x) = |n\rangle$ مساوات 67.2 میں صرف $n = 0$ عین

عدم یقینیت کی حد $\hbar/2$ $=$ $\sigma_x\sigma_p$ پر بیٹھتا ہے جیسا آپ سوال 12.3 میں معلوم کر چکے ہیں عمومی طور پر $\sigma_x\sigma_p \quad = \quad (2n\,+\,1)\hbar/2$ ہو گا۔ تاہم چند خطی جوڑ جنہیں منطقی حالات کہتے ہیں بھی عدم یقینیت کے حاصل ضرب تو کم سے کم کرتے ہیں جیسا ہم دیکھتے ہیں یہ عامل سس تکیل کے امتیازی تفاعل ہوتے ہیں۔

$$a_-|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

جہاں امتیازی α کوئی بھی مخلوط عود ہو سکتا ہے۔

جز الف

حال $\langle\alpha|$ میں $\langle x\rangle, \langle x^2\rangle, \langle p\rangle$ اور $\langle p^2\rangle$ دریافت کریں۔ مثال 5.2 کی ترقیب استعمال کیں۔ اور یاد رکھیں کہ a_- منفی کا پر مشں جوڑی دار a_+ ہے ساتھ ہی یہ فرض نہ کریں کہ α حقیقی ہے۔

جز (ب)

σ_x اور σ_p تلاش کریں۔ دکھائیں کہ $\sigma x\sigma p = \hbar/2$ ہو گا۔

جز (ج)

کسی بھی دوسرے تفاعل موج کی طرح منطقی حال کو توانائی امتیازی حالات کی صورت میں پھیلایا جا سکتا ہے۔

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} C_n|n\rangle$$

رکھائیں کہ پھیلاو کے عددی سر درج ذیل ہونگے۔

$$c_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}c_0$$

جر (د)

$\langle\alpha|$ کو معمول پر لاتے ہوئے c_0 تعین کریں۔ جواب $\exp(-|\alpha|^2\ /2)$

جز (ح)

اس کے ساتھ وقت کی تابعیت

$$|n\rangle \to e^{-iE_nt/\hbar}|n\rangle$$

منسلک کر کے دکھائیں کہ $\langle(t)\alpha|$ اب بھی $a-$ کا امتیازی حال ہو گا لیکن وقت کے ساتھ امتیازی قیمت ارتقا پزیر ہو گا

$$\alpha(t) = e^{-i\omega t}\alpha$$

یوں منطقی حال ہمیشہ منطقی حال ہی رہے گا اور عدم یقینیت کے حاصل ضرب کو تم سے کم برقرار رکھا ہے۔

جز (و) کیا زمینی حال $\langle 0\ =\ n|$ از خود منطقی حال ہے اگر ایسا ہو تب امتیازی قدر کیا ہو گا

سوال ۳.۵: 36.3

مقصود عدم یقینیت کا اصول:

عمومی عدم یقینیت کا اصول مساوات 62.3 درجہ ذیل کہتا ہے

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \frac{1}{4}\langle C^2\rangle$$

جہاں

$$\hat{C} \equiv i[\hat{A}, \hat{B}]$$

ہے
جز الف
دکھائے کہ اس کو زیادہ مستحکم کرتے ہوئے درج ذیل روٹ میں لکھا جا سکتا ہے

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \frac{1}{4}(\langle C\rangle^2 + \langle D\rangle^2)$$

جہاں $\hat{D} \equiv \hat{AB} + \hat{BA} + 2\langle A\rangle\langle B\rangle$ ہو گا
اشارہ: مساوات 60.3 میں $\mathrm{Re}(z)$ اجزاء لیں
ب)
مساوات 99.3 کو A=B کے لیئے جانچیں چونکہ اس صورت میں C=0 ہے لہذا معیاری عدم یقینیت غیر اہم ہو گا
بد قسمتی سے مقصود عدم یقینیت کا اصول بھی زیادہ مدد گار ثابت نہیں ہوتا

سوال ۳.۶: 37.3
ایک نظام جو 3 صدی ہے کہ ہیملٹونین کو درج ذیل کا الف ظاہر کرتی ہے

$$\mathrm{H} = \begin{pmatrix} a & 0 & b \\ 0 & c & 0 \\ b & 0 & a \end{pmatrix}$$

جہاں c اور ba, حقیقی اعداد ہیں۔
ا) اگر اس نظام کا ابتدائی حال درج ذیل ہو

$$|\delta(0)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

تب $\delta(t)$ کیا ہو گا؟
ب) اگر اس نظام کا ابتدائی حال درج ذیل ہو

$$|\delta(0)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

تب δt کیا ہو گا؟

سوال ۳.۷: 38.3:
ایک نظام جو 3 صدی ہے کہ ہیملٹونین کو درج ذیل کا الف ظاہر کرتی ہے:

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

دیگر دو مشہود B اور A کو درج ذیل کا الف ظاہر کرتی ہے

$$A = \lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, B = \mu \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

جہاں λ, ω اور μ حقیقی مثبت اعداد ہیں۔
،AH اور B کی امتیازی اقدار اور معمول پر لائے گئے امتیازی تفاعل تلاش کریں۔
ب) یہ نظام کسی عمومی حال

$$|\delta(0)\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

سے ابتداء کرتا ہے جہاں $1 = |c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2$ ہے۔
لمحہ t=0 پر B اور A, کی H توقعاتی قیمت تلاش کریں۔
ج) $\delta(s)$ کیا ہو گا؟ لمحہ t پر اس نظام کی توانائی کی پیمائش کیا قیمتیں دے سکتی ہے؟ اور ہر ایک کا انفرادی احتمال کیا ہو گا؟ اسی سوال کے جوابات B اور A کے لیے بھی تلاش کریں۔

سوال ۳.۸: 39.3: ا) ایک تفاعل $f(x)$ جس کو Taylor تسلسل کی صورت میں پھیلایا جا سکتا ہے کے لیے درج ذیل دکھائیں:

$$f(x + x_0) = e^{i\hat{p}x_0/\hbar} f(x)$$

جہاں x_0 کوئی بھی مستقل فاصلہ ہو سکتا ہے۔ اسی وجہ کے بنا $\hat{p}/\hbar$ کو فضا میں انتقال کا پیدا کار کہتے ہیں۔ یہاں دیہان رہے کہ ایک عامل کی قوت نمائی کی قوتی تسلسلی پھیلاؤ کی تعریف درج ذیل ہے
$$e^{\hat{Q}} = 1 + \hat{Q} + (1/2)\hat{Q}^2 + (1/3!)\hat{Q}^3 + \dots$$
ب) اگر $\Psi(x, t)$ وقت تابع schrodinger مساوات کو مطمئن کرتا ہو تب درج ذیل دکھائیں

$$\Psi(x, t + t_0) = e^{-i\hat{H}t_0/\hbar}\Psi(x, t)$$

جہاں t_0 کوئی بھی مستقل وقت ہوگا۔ اسی وجہ کی بنا $\hat{H}/\hbar$ — وقت میں انتقال کا پیدا کار کہتے ہے۔
ج) دکھائیں کے لمحہ $t+t_0$ پر ہر کی متغیر Q کی توقعاتی قیمت کو درج ذیل لکھا جا سکتا ہے

$$\langle Q\rangle_{t+t_0} = \langle\Psi(x,t)|e^{i\hat{H}t_0/\hbar}\hat{Q}(x,p,t+t_0e^{-i\hat{H}t_0/\hbar}|\Psi(x,t)\rangle$$

اس کو استعمال کرتے ہوئے مساوات 3-71 حاصل کریں۔
اشارہ: $t_0 = \mathrm{d}t$ لیتے ہوئے dt میں پہلے رتبے تک پھیلائیں۔

سوال ۳.۹: 3-40:
ا) ایک آزاد ذرہ کے لیے وقت تابع schrodinger مساوات کو معیار حرکت فضا میں لکھ کر حل کریں۔ جواب: $(\exp(-ip^2t/2m\hbar)\Phi(p,0$
ب) متحرک گاسی موجی اکٹھ سوال 2-43 کے لیئے $\Phi(p,0)$ تلاش کریں اور $\Phi(p,t)$ تیار کریں۔ ساتھ ہی $|\Phi(p,t)|^2$ تیار کریں۔ اب دیکھیں گے کہ یہ وقت کا تابع نہیں ہوگا۔
ج) Φ پر مبنی موضوع تکملات حل کرتے ہوے $\langle p\rangle$ اور $\langle p^2\rangle$ تلاش کر کے سوال 2-43 کی حاصل کردہ جوابات کے ساتھ موازنہ کریں۔
د) دکھائیں کے $\langle H\rangle = \langle p\rangle^2/2m + \langle H\rangle_0$ ہوگا جہاں زیر نوشت میں 0 ساکن گاسی کو ظاہر کرتا ہے اور اپنے نتیجے پہ تبصرہ کریں۔

باب ۴

تین ابعادی کوانٹم میکانیات

۴.۱ کروی محدد میں مساوات شروڈنگر

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

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

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

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

ہیملٹنی عامل H کو کلاسیکی توانائی

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

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

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

یوں درج ذیل ہو گا

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

---

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

جہاں

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

کارتیسی محدد میں **لاپلاسی**[۲] ہے۔

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

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

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

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

جہاں فضائی تفاعل موج ψ_n غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات

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

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

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

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

سوال ۴.۱:

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

جواب:

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

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

---

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

ب. تین ابعاد کے لیے مسئلہ اہر نفسٹ کی تصدیق کریں:

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

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

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

جواب:

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

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

۴.۱.۱ علیحدگی متغیرات

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

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

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

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

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

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

اس کو مساوات ۴.۱۴ میں پر کر کے

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

[۵] spherical coordinates

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

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

پہلی خمدار قوسین میں جزو صرف r کا تابع ہے جبکہ باقی حصہ صرف θ اور ϕ کا تابع ہے؛ لہٰذا دونوں حصے انفرادی طور پر ایک مستقل کے برابر ہوں گے۔ اس علیحدگی مستقل کو ہم $l(l+1)$ روپ میں لکھتے ہیں جس کی وجہ کچھ دیر میں واضح ہو گی۔[۶]

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

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

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

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

حل کریں۔

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

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

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

۴.۱.۲ زاویائی مساوات

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

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

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

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

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

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

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

پہلا جزو صرف θ کا تفاعل ہے، جبکہ دوسرا صرف ϕ کا تفاعل ہے، لہٰذا ہر ایک جزو ایک مستقل ہوگا۔ اس مرتبہ ہم علیحدگی مستقل[۷] کو m^2 لکھتے ہیں۔

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

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

متغیر ϕ کی مساوات زیادہ آسان ہے۔

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

[درحقیقت دو حل پائے جاتے ہیں: $e^{im\phi}$ اور $e^{-im\phi}$، تاہم m کو منفی ہونے کی اجازت دے کر ہم موخر الذکر کو بھی درج بالا حل میں شامل کرتے ہیں۔ اس کے علاوہ حل میں جزو ضربی مستقل بھی پایا جا سکتا ہے جسے ہم Θ میں ضم کرتے ہیں۔ چونکہ برقی مخفی توانائی لازماً حقیقی ہوگی لہٰذا برقی حرکیات میں اسّمتی تفاعل (Φ) کو سائن اور کوسائن کی صورت میں نہ کہ قوت نمائی صورت میں لکھا جاتا ہے۔ کوانٹم میکانیات میں ایسی کوئی پابندی نہیں پائی جاتی ہے اور قوت نمائی کے ساتھ کام کرنا زیادہ آسان ہوتا ہے۔] اب جب بھی ϕ کی قیمت میں 2π کا اضافہ آئے، ہے ہم فضا میں واپس اسی نقطہ پر پہنچتے ہیں (شکل 4-1 دیکھیں) لہٰذا درج ذیل شرط[۸] مسلط کی جا سکتی ہے۔

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

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

$$m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{۴.۲۴}$$

---

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

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

جدول ۴.۱: ابتدائی چند لیژانڈر کثیر رکنیاں۔

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

مساوات θ

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

اتنی سادہ نہیں ہے۔ اس کا حل درج ذیل ہے

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

جہاں P_l^m **شریک لیژانڈر تفاعل**[۹] ہے جس کی تعریف درج ذیل ہے

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

اور l ویں لیژانڈر کثیر رکنی کو $P_l(x)$ ظاہر کرتا ہے[۱۰] جس کی تعریف **کلیہ روڈریگیس**[۱۱]

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

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

$$
\begin{aligned}
P_0(x)&=1,\quad P_1(x)=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(x^2-1)=x,\\
P_2(x)&=\frac{1}{4\cdot2}\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)^2(x^2-1)^2=\frac{1}{2}(3x^2-1)
\end{aligned}
$$

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

---

[۹] associated Legendre function

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

[۱۱] Rodrigues formula

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

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

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

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

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

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

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

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

کروی محدد میں حجمی رکن درج ذیل ہو گا

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

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

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

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

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

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

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

معمول شدہ زاویائی موجی تفاعلات[12] کو **کروی ہارمونیات**[13] کہتے ہیں:

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

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

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

جدول ۴.۳ میں چند ابتدائی کروی ہارمونیات پیش کیے گئے ہیں۔ تاریخی وجوہات کی بنا l کو **اسمتی کوانٹائی عدد**[14] جب کہ m کو **مقناطیسی کوانٹائی عدد**[15] کہتے ہیں۔ سوال ۴.۳: مساوات ۴.۲۷، ۴.۲۸ اور ۴.۳۲ استعمال کر کے Y_0^0 اور Y_2^1 تیار کریں۔ تصدیق کریں کہ یہ معمول شدہ اور عمودی ہیں۔

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

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

---

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

[13] spherical harmonics

[14] azimuthal quantum number

[15] magnetic quantum number

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

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

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

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

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

۴.۱.۳ رداسی مساوات

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

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

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

$$u(r) \equiv rR(r) \tag{۴.۳۶}$$

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

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

اس کو **رداسی مساوات**[۱۶] کہتے ہیں[۱۷] جو شکل وصورت کے لحاظ سے یک بعدی شروڈنگر مساوات (مساوات ۲.۵) کی طرح ہے، تاہم یہاں **موثر مخفیہ**[۱۸] درج ذیل ہے

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

---

[۱۶] radial equation

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

[۱۸] effective potential

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

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

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

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

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

اس کے تفاعلات موج اور اجازتی توانائیاں تلاش کریں۔

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

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

جہاں ہمیشہ کی طرح درج ذیل ہو گا۔

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

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

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

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

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

---

[19] centrifugal term

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

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

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

[دھیان کیجیے کہ ساکن حالات کے نام تین **کوانٹائی اعداد**[۲۱] n، l اور m استعمال کر کے رکھے جاتے ہیں: $\psi_{nml}(r,\theta,\phi)$؛ جبکہ توانائی، E_{nl}، صرف n اور l پر منحصر ہو گی۔]

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

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

بہت جانا پہچانا نہیں ہے جہاں $j_l(x)$ رتبہ l کا **کروی بیسل تفاعل**[۲۲] ہے اور $n_l(x)$ رتبہ l کا **کروی نیومن تفاعل**[۲۳] ہے جن کی تعریفات درج ذیل ہیں۔

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

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

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

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

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

ہوں گے، درج ذیل ہوں گے، وغیرہ وغیرہ۔

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

---

[۲۱] quantum numbers
[۲۲] spherical Bessel function
[۲۳] spherical Neumann function

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

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

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

$$R(r) = Aj_l(kr) \tag{۴.۴۷}$$

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

$$j_l(ka) = 0 \tag{۴.۴۸}$$

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

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

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

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

اور تفاعلات موج درج ذیل ہوں گے

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

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

سوال ۴.۷:

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

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

سوال ۴.۸:

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

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

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

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

میں رکھا جاتا ہے۔ اس کا زمینی حال، $l = 0$ کے لئے، رداسی مساوات کے حل سے حاصل کریں۔ دکھائیں کہ $V_0 a^2 < \pi^2\hbar^2/8m$ کی صورت میں کوئی مقید حال نہیں پایا جائے گا۔

۴.۲ ہائیڈروجن جوہر

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

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

لہٰذا رداسی مساوات ۴.۳۷ درج ذیل روپ اختیار کرے گی۔

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

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

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

۴.۲.۱ رداسی تفاعل موج

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

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

مساوات ۴.۵۳ کو E سے تقسیم کرنے سے

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

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

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

لہٰذا درج ذیل لکھا جائے گا۔

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

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

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

اس کا عمومی حل درج ذیل ہے

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

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

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

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

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

جس کا عمومی حل (تصدیق کیجیے) درج ذیل ہوگا

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

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

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

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

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

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

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

اور

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

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

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

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

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

---

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

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

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

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

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

انہیں مساوات ۴.۶۱ میں پر کرتے ہیں۔

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

ایک جیسی طاقتوں کے عددی سروں کو مساوی رکھتے ہوئے

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

یا

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

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

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

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

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

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

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

لہٰذا

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

اور یوں درج ذیل ہو گا

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

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

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

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

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

صدر کوانٹم عدد[۲۷]

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

---

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

[۲۷] principal quantum number

متعارف کرتے ہوئے درج ذیل ہو گا۔

$$\rho_0 = 2n \tag{۴.۶۸}$$

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

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

لہٰذا اجازتی توانائیاں درج ذیل ہوں گی۔

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

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

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

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

جہاں

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

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

$$\rho = \frac{r}{an} \tag{۴.۷۳}$$

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

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

جہاں مساوات ۴.۳۶ اور ۴.۶۰ کو دیکھتے ہوئے

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

---

[۲۸] Bohr formula

[۲۹] Bohr radius

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

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

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

زمینی حال[31] (یعنی کم سے کم توانائی کے حال) کے لیے $n = 1$ ہوگا؛ طبعی مستقلات کی قیمتیں پر کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہوگا۔

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

ظاہر ہوا کہ ہائیڈروجن کی **بندشی توانائی**[32] (زمینی حال میں الیکٹران کو درکار توانائی کی وہ مقدار جو جوہر کو باردارہ بنائے) $13.6\,\text{eV}$ ہے۔ مساوات ۴.۶۷ کے تحت $l = 0$ لہذا $m = 0$ ہوگا (مساوات ۴.۲۹ دیکھیے) یوں درج ذیل ہو گا۔

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

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

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

اس کو مساوات ۴.۳۱ کے تحت معمول پر لانے سے

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

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

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

اسی طرح $n = 2$ کے لئے توانائی

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

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

[31] ground state
[32] binding energy

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

جہاں

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

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

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

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

[۳۳] associated Laguerre polynomial

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

---

[۳۴] Laguerre polynomial

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

باب ۵

متماثل ذرات

باب ٦

غیر تابع وقت نظریہ اضطراب

باب ۷

تغیری اصول

باب۸

وکب تخمین

باب ۹

تابع وقت نظریہ اضطراب

باب ۱۰

حرارت ناگزر تخمین

باب ۱۱

بکھراو

باب ۱۲

پس نوشت

جوابات