کوانٹم میکانیات

خالد خان یوسفزئی

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

۱۰ اگست ۲۰۲۱

عنوان

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

خالد خان یوسفزئی

28 اکتوبر 2011ء

باب ۵

متماثل ذرات

۵.۱ دوزراتی نظام

ایک زرہ کے لیے فلحال چکر کو نظر انداز کرتے ہوئے $\psi(r, t)$ فضائی مہدت r اور وقت t کا تفعال ہو گا۔ دو زراتی نظام کا حال پہلے زرے کے محناطر (r_1) دوسرے زرے کے محناطر (r_2) اور وقت کا طابع ہو گا۔

$$\psi(r_1, r_2, t) \tag{۵.۱}$$

ہمیشہ کی طرح یہ وقت کے لحاظ سے shrodinger مساوات

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

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

$$H = -\frac{\hbar}{2m_1}v_1{}^2 - \frac{\hbar}{2m_2}v_2{}^2 + v(r_1, r_2, t) \tag{۵.۳}$$

زرہ ایک یا زرہ دو کے محددوں کے لحاظ سے تفرقات لینے کو Δ زیرنوشت میں ایک یا دو سے ظاہر کیا گیا ہے۔ زرہ ایک کا حجم d^3r_1 اور زرہ دو کا حجم d^3r_2 پائے جانے کا احتمال درج ذیل ہو گا۔

$$|\psi(r_1, r_2, t)|^2 d^3r_1 d^3r_2 \tag{۵.۴}$$

ظاہر ہے کہ ψ کو درج ذیل کے لحاظ سے معمول پر لانا ہو گا۔

$$\int |\psi(r_1, r_2, t)|^2 d^3r_1 d^3r_2 = 1 \tag{۵.۵}$$

غیر تابع وقت مخفی توانائی کے لیے علیحدگی متغیرات سے حلوں کا مکمل سلسلہ حاصل ہوتا ہے۔

$$\psi(r_1, r_2, t) = \psi(r_1, r_2)e^{\frac{-iEt}{h}} \tag{۵.۶}$$

جہاں فضائی تفعال معاج ψ غیر تابع وقت shroudinger مساوات

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

جس میں E پورے نظام کی قل توانائی ہے۔

سوال ۵.۱: عام طور پر باہمی مخفی توانائی انحصار صرف 2 ذرات کے بیچ سمتیہ $r = r_1 - r_2$ پر ہوگا۔ ایسی صورت میں متغیرات r_1 اور r_2 کی جگہ نے متغیرات اور مرکز کمیت $R = \frac{(m_1r_1+m_2r_2)}{m_1+m_2}$ مساوات shroudinger ہوتی ہے۔

(الف)۔ دکھائیں کہ $r_1 = R + (\frac{\mu}{m_1})r, r_2 = R - (\frac{\mu}{m_2})r$ اور $\nabla_1 = (\frac{\mu}{m_2})\nabla_R + \nabla_r, \nabla_2 =$ $(\frac{\mu}{m_1})\nabla_R - \nabla_r$ جہاں

$$\mu = \frac{m_1m_2}{m_1 + m_2} \tag{۵.۸}$$

نظام کی تشخیص شدہ کمیت ہے۔

(ب)۔ دکھائیں کہ غیر تابع وقت shroudinger مساوات درج ذیل رعب اختیار کرتی ہے۔

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

(ج)۔ متغیرات کو $\psi(R, r) = \psi_r(R)\psi_r(r)$ لیتے ہوئے علیحدہ کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ ψ_r ایک ذرہ کی shroudinger مساوات جہاں کمیت $(m_1 + m_2)$ مخفی توانائی صفر ہو اور نظام کی توانائی E_R کو مطمئن کرتا ہے۔ جبکہ ψ_r ایک ذرے کی shroudinger مساوات جہاں تخفیف شدہ کمیت ہو۔ مخفی توانائی V(r) ہو، کو مطمئن کرتا ہے۔ قل توانائی اور ان کا مجموعہ $E = E_R + E_r$ ہوگا۔ اس سے ہمیں یہ معلوم ہوتا ہے کہ مرکزی کمیت ایک آزاد ذرہ کی طرح حرکت کرتا ہے جبکہ ذرہ ایک کے لحاظ سے ذرہ دو کی نصبطی حرکت ایسے ہی ہو گی جیسا مخفی توانائی V میں تخفیف شدہ کمیت کا ایک ذرہ کرتی ہے classical mechanics میں بھی بلکل یہی تحلیل ہو گی جو 2 اجسام مسلے کو محاصل ایک جسم مسلہ میں تبدیل کرتی ہے۔

سوال ۵.۲: یوں Hydrogen کے مرکزہ کی حرکت کو درست کرنے کے لیے ہم electron کی کمیت کی جگہ تخفیف شدہ کمیت استعمال کریں گے

(الف)۔ hydrogen کی بندشش کی توانائی (مساوات 4،77) جاننے کی خاطر μ کی جگہ m استعمال کرنے سے دو بمعنی ہندسوں تک فیصد خلل کتنا ہوگا۔

(ب)۔hydrogenاورDueteriumکے لیے$(n = 2) > (n = 3)$سرخ بالمر لکیروں کے بیچ تفعال معاج میں فرق تلاش کریں۔

(ج)۔Positroniumکی بندشی توانائی تلاش کریں۔protonکی جگہpositronرکھنے سےpositroniumپیدا ہوگا۔positronکی کمیتelectronکی کمیت کے برابر ہوگا جبکہ اس کی علامتElectronکی علامت کے مخالف ہے۔

(د)۔فرض کریں آپhydrogenmuonicجس میںelectronکی جگہ ایکmuonکی موجودگی کی تصدیق کرنا چاہتے ہوں۔muonکاelectron barکےbarکے برابر ہے۔ جبکہ یہ electron سے 206٫77 گنا زیادہ کمیت رکھتا ہے۔ آپ α Lyman لکیر$n = 2$تا$n = 1$کے لیے کس طور معاج پر نظر رکھیں گے۔

سوال ۵.۳: کلورین کے قدرتی دو ہم جا$Cl^35andCl^37$پائے جاتے ہیں۔ دکھائیں کہHCLکی لرزشی طیف قریب قریب جوڑیوں پر مشتمل ہوگا۔ جن میں فرق$7.51x10^-4v = \Delta_v$جہاںvخرجیphotonکی تعدد ہے۔ (اشارہ: اس کو ایکHarmoniumمرتعیش تصور کریں جہاں$\omega = sqrt\frac{k}{mu}$ہوگا۔ جہاں$\mu$تخفیف شدہ کمیت (مساوات 5٫8) ہے۔ جبکہkدونوں ہمجا کے لیے ایک جیسا ہے۔

۵.۱.۱ بوزان اور فرمیون

فرض کریں ذرہ ایک یک ذرہ حال $\psi_a(r)$ اور ذرہ دو حال $\psi_b(r)$ میں پایا جاتا ہے۔ یاد رہے کہ یہاں میں چکر کو نظرانداز کر رہا ہوں ایسی صورت میں $\psi(r_1, r_2)$ سادہ حاصل ضرب ہوگا

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_a(r_1)\psi_b(r_2) \tag{۵.۹}$$

ایسا کہتے ہوئے ہم یہ فرض کر رہے ہیں کہ ہم ان ذرات کو علیحدہ علیحدہ پہچان سکتے ہیں ورنہ یہ کہنا کہ ذرہ ایک حال ψ_a میں اور ذرہ دو حال ψ_b میں ہے بیمانی ہوتا اور ہم بغیر جانے کے کونسا ذرہ ایک اور کونسا ذرہ دو ہے یہ کہتے کہ ایک ذرہ ψ_a میں اور دوسرا ذرہ ψ_b میں پایا جاتا ہے۔ کلاسیکی میکانیات میں یہ ایک بیوقفانہ اعتراض ہوتا۔ اصولاً ایک ذرے کو سرخ رنگ اور دوسرے کو نیلا رنگ دیکر آپ انہیں ہر وقت پہچان سکتے ہیں۔ کوانٹم میکانیات میں صورتِ حال بنیادی طور پر مختلف ہے۔ آپ کسی الیکٹران کو سرخ رنگ نہیں دے سکتے اور نہ ہی اس پر کوئی پرچی چسپاں کر سکتے ہیں حقیقت یہ ہے کہ تمام الیکٹران بلکل یکساں ہوتے ہیں جبکہ کلاسیکی اشیاء اتنی یکسانیت کبھی نہیں رکھ سکتے ہیں۔ ایسا نہیں ہے کہ ہم الیکٹرانوں کو پہچاننے سے قاصر ہیں بلکہ حقیقت یہ ہے کہ یہ الیکٹران اور وہ الیٹران کوانٹم میکانیات مین بے معنی ہیں ہم صرف ایک الیکٹران کی بات کر سکتے ہیں۔ اصولی طور پر غیر ممیہز ذرات کی موجودگی کو کوانٹم میکانیات خوش اسلوبی سے سموتی ہے۔ ہم ایک ایسا غیر مشرود تفاعل وج تیار کرتے ہیں جب اس کیبات نہیں کرتا کہ کون ذرہ کس حال میں ہے ایسا دو طریقوں سے کیا جا سکتا ہے۔

$$\psi \pm (r_1, r_2) = A[\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) \pm \psi_b(r_1)\psi_a(r_2)] \tag{۵.۱۰}$$

یوں یہ ذرہ دو اقسام کے یکساں ذرات کا حامل ہوگا بوزان جن کے لیئے ہم مثبت علامت استعال کرتے ہیں اور فرمیون جن کے لیئے ہم منفی علامت استعال کرتے ہیں۔ بوزان کی مثال فوٹان اور میزون ہے جبکہ فرمیون کی مثال

پروٹان اور ایلکٹران ہے ایسے ہے کہ

$$\begin{cases} \text{عدد صحیح چکر کے تمام ذرات بوزان جبکہ} \\ \text{نصف عدد صحیح چکر کے تمام ذرات فرمیون ہوں گے} \end{cases} \tag{۵.۱۱}$$

چکر اور شماریات کے مابین یہ تعلق جیسا ہم دیکھیں گے فرمیونز اور بوزانز کی شماریاتی خواص ایک دوسرے سے بہت مختلف ہتے ہیں کو اضافی کوانٹم میکانیات میں ثابت کیا جا سکتا ہے۔ غیر اضافی نظریہ میں اس کو ایک مسلمہ لیا جاتا ہے۔

اس سے بلخصوص اب یہ اخذ کر سکتے ہیں کہ دو یکساں فرمیونز مثلاً سو الیکٹران ایک ہی حال کے مکین نہیں ہو سکتے ہیں۔ اگر $\psi_a = \psi_b$ ہو تب

$$\psi_-(r_1, r_2) = A[\psi_a(r_1)\psi_a(r_2) - \psi_a(r_1)\psi_a(r_2)] = 0$$

کی بنا کوئی موج تفاعل نہیں ہوگا۔ یہ مشہور نتیجہ پولی کا اخراجی اصول کہلاتا ہے۔ یہ کوئی عجیب مفروضہ نہیں ہے جو صرف الیکٹران پر لاگو ہوتا ہے بلکہ یہ دو ذراتی تفاعلی امواج کی تیاری کے قواعد کا ایک نتیجہ ہے جسکا اطلاق تمام یکساں فرمیونز پر ہوگا۔

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

$$Pf(r_1, r_2) = f(r_2, r_1) \tag{۵.۱۲}$$

صاف ظاہر ہے کہ $P^2 = 1$ ہوگا لحاظہ تصدیق کیجیے گا کہ P کے امتیازی اقدار ± 1 ہوں گے۔ اب اگر دو ذرات یکساں ہوں تب لازمی ہے کہ ہیملٹونی ان کے ساتھ ایک جیسا رویہ برتے گا $m_1 = m_2$ اور $V(r_1, r_2) = V(r_2, r_1)$ اس طرح P اور H ہم آہنگ مشود ہوں گے

$$[P, H] = 0 \tag{۵.۱۳}$$

لحاظہ ہم دونوں کے بیک وقت امتیازی حالات کے تفاعلوں کا مکمل سلسلہ معلوم کر سکتے ہیں۔ دوسرے لفظوں میں ہم زیرِ مبادلہ

$$\psi(r_1, r_2) = \pm\psi(r_2, r_1) \tag{۵.۱۴}$$

مساوات شروڈنگر کے ایسے حل تلاش کر سکتے ہیں جو یا تشاکلی امتیازی قدر $+1$ یا غیر تشاکلی امتیازی قدر -1 ہوں۔ مزید ایک نظام جو اس حال سے آغاز کرے اس یحال میں برقرار رہتا ہے یکساں ذرات کا ایک نیا فائدہ جس کو میں ضرورت تشاکل کہتا ہوں کے تحت تفاعل موج کو مساوات 5.14 پر صرف پورا اُترنے کی ضرورت نہیں بلکہ اس پر لاظم ہے کہ وہ اس مساوات کو متمعن کرتا ہو۔ یہاں بوزون کے لیئے مثبت علامت اور فرمیونز کے لیئے منفی علامت استعمال ہوگا۔ یہ ایک عمومی فقرہ ہے جس کی مساوات 5.10 ایک مخصوص صورت ہے۔

مثال ۵.۱: فرض کریں ایک لامتناہی چکور کنواں میں کمیت M کے باہم غیر متعمل دو ذرات جو ایک دوسرے کے اندر سے گزر سکتے ہیں پائے جاتے ہیں۔ آپکو فکر کرنے کی ضرورت نہیں کہ عملا کیسے کیا جا سکتا ہے۔ یک ذرہ حالات درج ذیل ہوں گے۔ جہاں $K = \frac{(\pi)^2(\hbar)^2}{2m(a)^2}$ ہے۔

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

یہ ذرات قابل ممیز ہونے کی صورت میں جہاں ذرہ 1 حال n_1 میں اور ذرہ 2 حال n_2 میں ہو مرکب تفاعل موج سادہ حاصل ضرب ہوگا۔

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

مثال کے طور پر زمینی حال

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

پہلا ہیجان حال دوچند انحطاطی

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

ہوگا وغیرہ وغیرہ۔ دونوں ذرات یکساں بوزان ہونے کی صورت میں زمینی حال تبدیل نہیں ہوگا۔ تاہم پہلا ہیجان حال جسکی توانائی اب بھی 5K ہوگی غیر انحطاطی ہوگا۔

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

اور اگر ذرات یکساں فرمیون ہوں تب کوئی حال بھی 2K توانائی کا نہیں ہوگا۔ جبکہ زمینی حال جسکی توانائی 5K ہوگی۔ درج ذیل ہوگا۔

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

□

سوال ۵.۴:

(جزو الف) اگر Ψ_a اور Ψ_b عمودی ہوں اور دونوں معمول شدہ ہوں تب مساوات 10.5 میں مستقل 'A' کیا ہوگا؟

(جزو ب) اگر $\Psi_b = \Psi_a$ ہوں اور یہ معمول شدہ ہوں تب 'A' کیا ہوگا؟ (یہ صورت صرف بوزون کیلئے ممکن ہے۔)

سوال ۵.۵:

(جزو الف) لامتناہی چکور کنواں میں باہم غیر متعمل دو یکساں ذرات کا ہملٹنی لکھیں۔ تصدیق کیجیے کہ مثال 1.5 میں دیا گیا فرمیون کا زمینی حال 'H' کا مناسب امتیازی قدر والا امتیازی تفاعل ہوگا۔

(جزو ب) مثال 1.5 میں دیئے گئے بجان حالات سے اگلے دو حالات تفاعل موج اور توانائیاں تینوں صورتوں میں قابل ممیز یکساں موزوں، یکساں فرمیون حاصل کریں۔

سوال ۵.۶: لامتناہی چکور کنواں میں دو باہم غیر متعامل ذرات جن میں سے ہر ایک کی کمیت M ہے پائے جاتے ہیں۔ ان میں سے ایک حال Ψ_n مساوات 28.2 اور دوسرا حال Ψ_l۔ $n \neq l$ میں ہے۔ $(x_1 - x_2)^2$ کا حساب اس صورت لگائیں کہ (الف) یہ غیر قابل ممیز ہوں۔ (ب) یہ یکساں بوزون ہوں اور (ج) یہ یکساں فرمیونز ہوں۔

سوال ۵.۷: فرض کریں آپ کے پاس تین ذرات ہیں جن میں سے ایک حال Ψ_a دوسرا حال Ψ_b اور تیسرا حال Ψ_c میں پائے جاتے ہیں۔ حالات Ψ_a ، Ψ_b اور Ψ_c کو معیاری عمودی تصور کرتے ہوئے مساوات 15.5، 16.5 اور 17.5 کی طرز پر تین ذرہ حالات تیار کریں جو (الف) قابل ممیز ذرات کو (ب) یکساں بوزون کو اور (ج) یکساں فرمیونز کو ظاہر کرتے ہوں۔ یاد رہے کہ کسی بھی دو ذرات کی جوڑی کے باہمی مبادلہ کے لحاظ سے (ب) کو مکمل طور پر تشاکلی ہوتا ہوگا۔ جبکہ (ج) کو مکمل طور پر خلاف تشاکلی ہونا ہوگا۔ تبصرہ: مکمل طور پر خلاف تشاکل تفاعل امواج تیار کرنے کا ایک بہترین طریقہ پایا جاتا ہے۔ سلیٹر نقطہ تیار کریں جس کی پہلی صف $\Psi_a(x_1)$، $\Psi_b(x_1)$، $\Psi_c(x_1)$ وغیرہ پر مشتمل ہو۔ اس کی دوسری صف $\Psi_a(x_2)$، $\Psi_b(x_2)$، $\Psi_c(x_2)$ وغیرہ پر مشتمل ہوگی اور اسی طرح اس کے بقایا صف ہوں گے۔ یہ نقطہ کسی بھی تعداد کے ذرات کیلئے کارآمد ہوگا۔

۵.۲ جوہر

ایک مادل جوہر جس کا جوہری عدد Z ہو ایک بھاری مرکزہ جس کا بار Ze ہو اور جس کی کمیت M اور بار e کے Z الیکٹران گھیرتے ہوں پر مشتمل ہوگا۔

$$H = \sum_{j=1}^{z} -\frac{h^2 \triangle_j^2}{2m} - \left(\frac{1}{4\Pi\epsilon_0}\right)\frac{Ze^2}{r_j} + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{4\Pi\epsilon_0}\right)\sum_{j\neq 1}^{z}\frac{e^2}{|r_j - r_k|}. \tag{۵.۱۵}$$

ہر یہ قوسین میں بند جزو مرکزہ کے برقی میدان میں j الیکٹران کی حرکی توانائی جمع مخفی توانائی کو ظاہر کرتا ہے۔ دوسرا جزو جو ماسوائے $j = k$ تمام j اور k مجموعہ پر ہے۔ الیکٹرانز میں باہمی قوت دفاع کی بنا مخفی توانائی کو ظاہر کرتا ہے۔ جہاں $\frac{1}{2}$ اس حقیقت کو درست کرتا ہے کہ مجموعہ لیتے ہوئے ہر جوڑی کو دو بار گنا جاتا ہے۔ ہمیں تفاعل

موج $\Psi(r_1, r_2, ...r_z)$ کیلئے درج ذیل شروڈنگر مساوات حل کرنی ہوگی:

$$H\Psi = E\Psi \tag{۵.۱۶}$$

چونکہ الیکٹران یکساں فرمیون ہیں لہٰذا تمام حل قابل قبول نہیں ہوں گے۔ صرف وہ حل قابل قبول ہوں گے جن کا مکمل حال، مقام اور چکر

$$\Psi(r_1, r_2, ..., r_z)\chi(s_1, s_2, ..., s_z), \tag{۵.۱۷}$$

کسی بھی دو الیکٹران کے باہمی مبادلہ کے لحاظ سے خلاف تشاکل ہو۔ بالخصوص کوئی بھی دو الیکٹران ایک ہی حال کے مکین نہیں ہو سکتے ہیں۔ بدقسمتی سے ماسوائے سادہ ترین صورت $z = 1$ ہائیڈروجن کیلئے مساوات 24.5 میں دی گئی ہملٹنی کی شروڈنگر مساوات ٹھیک حل نہیں کی جا سکتی ہے۔ کم از کم آج تک کوئی بھی ایسا نہیں کر پایا ہے۔ عملاً ہمیں پیچیدہ تخمینی تراکیب استعمال کرنے ہوں گے۔ ان میں سے چند ایک تراکیب پر اگلے بابوں میں غور کیا جائے گا۔ ابھی میں الیکٹران کی قوت دفاع کو مکمل طور پر نظر انداز کرتے ہوئے حلوں کا کیفی تجزیہ پیش کرنا چاہوں گا۔ حصہ 1.2.5 میں ہم ہلیم کی زمینی حال اور ہیجان حالات پر غور کریں گے۔ جبکہ حصہ 2.2.5 میں ہم بالا جواہر کے زمینی حالات پر غور کریں گے۔

سوال ۵.۸: فرض کریں مساوات 24.5 میں دی گئی ہملٹنی کے لیئے آپ شروڈنگر مساوات 25.5 کا حل $\Psi(r_1, r_2, r_3, ...r_z)$ حصل کر پائیں۔ آپ اس سے ایک ایسا مکمل تشاکل تفاعل ایک مکمل خلاف تشاکل تفاعل کس طرح بنا پائیں گے جو شروڈنگر مساواتکو کسی توانائی کیلئے مطمئن کرتا ہو۔

۵.۲.۱ ہیلیم

ہائیڈروجن کے بعد سب سے زیادہ جوہر ہلیم $Z = 2$ ہے۔ اس کا ہملٹنی

$$H = -\frac{h^2\ \triangle_1^2}{2m} - \frac{1}{4\Pi\epsilon_0}\frac{2e^2}{r_1} + -\frac{h^2\ \triangle_2^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2e^2}{r_2} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{|r_1 - r_2|}, \tag{۵.۱۸}$$

بار Ze کے مرکزہ کے دو ہائیڈروجن نما ہملٹنی الیکٹران 1 اور دوسرا الیکٹران 2 کے ساتھ دو الیکٹران کے بیچ توانائی دفاع پر مشتمل ہوگا۔ یہ آخری جزو ہماری پریشانیوں کا سبب بنتا ہے۔ اس کو نظر انداز کرتے ہوئے مساوات شروڈنگر قابل علیحدگی ہوگا۔ اور اس کے حلوں کو نصف بوہر رداس مساوات 72.4 اور چار گنا بوہر توانائیوں مساوات 70.4 کے وجہ نہ سمجھنے کی صورت میں سوال 16.4 پر دوبارہ نظر ڈالیں کہ ہائیڈروجن تفاعلات موج کے حاصل ضرب

$$\Psi(r_1, r_2) = \Psi_{nlm}(r_1)\Psi_{n'l'm'}(r_2), \quad [5.28]$$

کی صورت میں لکھا جا سکتا ہے۔ کل توانائی درج ذیل ہوگی جہاں $E_n = -13.6/n^2 eV$ ہوگا۔

$$E = 4(E_n + E_{n'}), \quad [5.29]$$

بالخصوص زمینی حال درج ذیل ہو گا۔

$$\Psi_0(r_1, r_2) = \Psi_{100}(r_1)\Psi_{100}(r_2) = \frac{8e^-2(r_1 + r_2)/a}{\pi a^3}, \tag{۵.۱۹}$$

مساوات 80.4 دیکھیں اور اس طرح کی توانائی درج ذیل ہو گی۔

$$E_0 = 8(-13.6eV) = -109eV. \quad [5.31]$$

چونکہ ψ_0 تشاکل تفاعل ہے لہذا چکر حال کو خلاف تشاکل ہونا ہو گا اور یوں ہلیم کے زمینی حال کا تنظیم یکتا ہو گا۔ جس میں چکر ایک دوسرے کے مخالف صف بند ہوں گے۔ حقیقت میں ہلیم کا زمینی حال یقینا یکتا ہے۔ لیکن اس کی توانائی تجرباتی طور پر $78.975eV-$ حاصل ہوتی ہے۔ جو مساوات 31.5 سے کافی مختلف ہے۔ یہ حیرت کی بات نہیں ہے کہ ہم نے الیکٹران کی توانائی دفاع کو مکمل طور پر نظر انداز کیا جو چھوٹی مقدار نہیں ہے۔ یہ ایک مثبت مقدار ہے۔ مساوات 27.5 دیکھیں۔ جس کو شامل کرتے ہوئے کل توانائی 109- کی بجائے 79eV- ہو گی۔ سوال 11.5 دیکھیں۔ ہلیم ہیجان حالات

$$\Psi_{nlm}\Psi_{100}. \quad [5.32]$$

ہائیڈروجن زمینی حال میں ایک الیکٹران اور داسرا ہیجان حال پر مشتمل ہو گا۔ دانوں الیکٹران کو ہیجان حالات میں لے جاتے ہی ایک فوراز مینی حال میں واپس گر کر توانائی خارج کرتا ہے جو دوسرے الیکٹران کو جوہر سے باہر پھینکتا ہے۔ $(E > 0)$۔ یوں ایک آزاد الیکٹران اور ہلیم باردار یہ (He^+) حصل ہو گا۔ یہ باذات خود ایک دلچسپ نظام ہے جس پر ہم یہاں بات نہیں کر رہے ہیں۔ سوال 9.5 دیکھیں۔ ہم ہمیشہ کی طرح تشاکل اور خلاف تشاکل حالات تیار کر سکتے ہیں۔ مساوات 10.5; اول الفکر خلاف تشاکل چکر تنظیم یکتا کے ساتھ جائے گا۔ جنہیں پیراہلیم کہتے ہیں۔ جبکہ مؤخر ذکر کو تشاکل چکر تنظیم سہتا درکار ہو گی اور انہیں اور تھوہلیم کہتے ہیں۔ زمینی حال لازما پیراہلیم ہو گا جبکہ ہیجان حالات دونوں روپ میں پائے جاتے ہیں۔ جیسا ہم نے حصہ 2.1.5 میں دریافت کیا۔ تشاکل فضائی حال الیکٹرانز کو قریب لاتا ہے۔ جس کی بنا ہم توقع کرتے ہیں کہ پیراہلیم کی باہم متعامل توانائی زیادہ ہو گی۔ یقینا تجربات سے تصدیق ہوتی ہے کہ اور تھوہلیم کے لحاظ سے پیراہلیم حالات کی توانائی زیادہ ہے۔ شکل 2.5 دیکھیں۔

سوال 9.5

جزو الف   فرض کریں کہ آپ ہلیم ایٹم کے دونوں الیکٹرانز کو $n = 2$ حال میں رکھتے ہیں۔ خارج الیکٹران کی توانائی کیا ہو گی۔

جزو ب   ہلیم باردار یہ He^+ کی تیف پر مقداری تجزیہ کریں۔

سوال 10.5   ہلیم کی توانائیوں کی سطح پر درج ذیل صورت میں کیفی تجزیہ کریں۔ (الف) اگر الیکٹران یکساں بوزون ہوتے۔ (ب) اگر الیکاتران قابل ممیز ہوتے۔ جبکہ ان کی کمیت اور بار نہ ہوتا۔ فرض کریں کہ الیکٹران کا چکر اب بھی $\frac{1}{2}$ ہے اور ان کی تنظیم چکر یکتا اور سہتا ہے۔

سوال 11.5

(جزو الف) مساوات 30.5 میں دی گئی حال Ψ_0 کیلئے $\left(\frac{1}{|r_1 - r_2|}\right)$ کا حساب لگائیں۔ اشارہ: کروی محدد استعمال کرتے ہوئے قطبی محور کو r_1 پر رکھتے ہوئے تا کہ

$$|r_1 - r_2| = \sqrt{(r_1)^2 + (r_2)^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_2}. \tag{۵.۲۰}$$

ہو۔ پہلے d^3r_2 کا تکمل حل کریں۔ زاویہ θ_2 کے لحاظ سے تکمل آسان ہے۔ بس اتنا یاد رکھیں کہ آپ کو مثبت جزو لینا ہو گا۔ آپ کو r_2 تکمل دو ٹکڑوں میں تقسیم کرنا ہو گا۔ پہلا صفر سے r_1 تک اور دوسرا r_1 سے ∞ تک۔ جواب: $\frac{5}{4a}$۔

جزو ب جزو الف کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے ہلیم کی زمینی حال میں الیکٹران کا باہمی متعامل توانائی کا اندازہ لگائیں۔ اپنے جواب کو الیکٹران وولٹ کی صورت میں پیش کریں۔ اور اس کو E_0 مساوات 31.5 کے ساتھ جمع کر کے زمینی حال توانائی کی بہتر تخمینہ حاصل کریں۔ اس کا موازنہ تجرباتی قیمت کے ساتھ کریں۔ دھیان رہے کہ اب بھی آپ تخمینی تفاعل موج کے ساتھ کام کر رہے ہیں۔ لہٰذا آپ کا جواب ٹھیک تجرباتی جواب نہیں ہو گا۔

۵.۲.۲ دوری جدول

بھاری جوہروں کے زمینی حال الیکٹرانی تنظیم اسی طرح جوڑ کر حاصل کی جاتی ہے۔ پہلی تخمین کی حد میں انکی باہمی توانائی دفع کو مکمل طور پر نظر انداز کرتے ہوئے بار Z_e کے مرکزہ کے کولمب مخفیہ میں یک ذرہ ہائڈروجن حالات (n, l, m) جنہیں مدارچے کہتے ہیں کہ انفرادی الیکٹران مکین ہوں گے۔ اگر الیکٹران بوزان یا قابلِ ممیز ذرات ہوتے تب یہ زمینی حال $(1, 0, 0)$ گر جاتے اور کیمیا اتنی دلچسپ نہ ہوتی۔ حقیقت میں الیکٹران یکساں فرمیان ہے جن پر پولی اصول منافت لاگو ہوتا ہے لحاظہ کسی ایک مدارچہ میں صرف دو الیکٹران رہ سکتے ہیں ایک ہم میدان اور ایک خلاف میدان بلکہ یہ کہنا زیادہ درست کہ یکتا تنظیم میں الیکٹران رہ سکتے ہیں۔ کسی بھی n کی قیمت کے لیئے n^2 ہائڈروجینی تفاعلات موج پائے جاتے ہیں جن میں سے ہر ایک کی توانائی E_n ہو گی یوں $n = 1$ خول میں دو الیکٹرانوں کی جگہ $n = 2$ خول میں آٹھ $n = 3$ میں اٹھارہ اور n ویں خول میں $2n^2$ الیکٹرانوں کی جگہ ہو گی۔ کیفی طور پر بات کرتے ہئے دوری جدول کے اُفقی صف انفرادی خول کو بھرنے کے مترادف ہے اگر شہ یہ پوری کہانی نہیں ہے چونکہ ایسا ہونے کی صورت میں انکی لمبائیاں $2, 8, 18, 32, 50,$ وغیرہ ہوتی نا کہ $2, 8, 8, 18, 18$ وغیرہ ہم جلد دیکھیں گے کہ الیکٹرانوں کی باہمی توانائی دفع اس شمار کو کس طرح خراب کرتا ہے۔

ہیلیم کا $n = 1$ خول مکمل طور پر بھرا ہو گا لحاظہ اگلا جوہر لیتھیم $Z = 3$ کو ایک الیکٹران $n = 2$ خول میں رکھنا ہو گا۔ اب $n = 2$ کی صورت میں $l = 0$ یا $l = 1$ ہو سکتا ہے۔ تیسا الیکٹران ان میں سے کس ایک کا انتخاب کرے گا؟ چونکہ بوہر توانائی n پر منحصر ہوتی ہے نا کہ l پر لحاظہ الیکٹران کا باہمی عمل نہ ہونے کی صورت میں ان دونوں کی توانائی ایک دوسرے جیسی ہو گی۔ تاہم درج ذیل وجہ کی بنا الیکٹران کی توانائی دفا l کی کم سے کم قیمت کی طرف داری کرتی ہے۔ زاویائی معیار حرکت الیکٹران کو بے رونی روح دھکیلنے کی کوشش کرتا ہے اور الیکٹران جتنا

مرکزا سے دور ہوتا ہے اتنا ہی یہ مرکزا بہتر چھپاتا ہے۔ ہم کہہ سکتے ہیں کہ اندرونی الیکٹران کو مرکزا کا پورا Ze نظر آتا ہے جب کہ بیرونی الیکٹران کو مشکل سے e سے زیادہ موثر نظر آتا ہے۔ یوں کسی بھی ایک ہول میں کم سے کم توانائی کا حال یعنی دوسرے لفظوں میں سب سے سخت مقید الیکٹران $l = 0$ ہوگا۔ اور بڑھتے l کے ساتھ توانائی بڑھے گی اس طرح لتیم میں تیسرا الیکٹران مدارچہ $(2,0,0)$ کا مقید ہوگا۔ اگلا جوہر بیریلیم جس کا $Z = 4$ ہے اسی حال میں ہوگا لیکن اس کا چکر مخالف رخ ہوگا لیکن بوران $Z = 5$ کو $l = 1$ استعمال کرنا ہوگا۔ اسی طرح چلتے ہوئے ہم نیین $Z = 10$ تک پہنچتے ہیں جہاں $n = 2$ ہول مکمل بھرا ہوگا اور ہم دوری جدول کی اگلی صف کو پہنچ کر $n = 3$ ہول کو بھرنا شروع کرتے ہیں۔ آغاز میں دو جوہر سوڈیم اور میگنیشیم ہیں جنکا $l = 0$ ہے اور اس کے بعد المینیم سے آرگان تک چھ ایسے جوہر ہیں جن کے لیے $L = 1$ ہوگا۔ آرگان کے بعد ہم توقع کرتے ہیں کہ دس ایسے جوہر پائے جائینگے جن کے لیے $n = 3$ اور $l = 2$ ہوگا البتہ یہاں پہنچ کر اندرونی الیکٹران مرکزا کو اتنی خوش اسلوبی کے ساتھ پردہ کرتے ہیں کہ یہ اگلے ہول کو بھی ڈنگتا ہے لہذا پوٹیشیم $(Z = 19)$ اور کیلشیم $(Z = 20)$، $(l = 2)$, $(n = 3)$ کی بجائے $(L = 0)$, $(n = 4)$ منتخب کرتے ہیں۔ اس کے بعد ہم نیچے اتر کر سکینڈیم سے زنک تک کے جوہر اٹھاتے ہیں جن کے لیے $n = 3$ اور $l = 2$ ہوگا۔ اس کے بعد گیلیم سے کرپٹان تک $n = 4l = 1$ ہوگا جس کے آخر میں ہم دوبارہ قبل از وقت اگلی صف $n = 5$ کو چھلانگ لگاتے ہیں اور بعد میں واپس اتر کر $n = 4$ ہول کے۔ وہ مدارچے جن کے لیے $l = 2l = 3$ ہوں پر کرتے ہیں۔ یہاں جوہری حالات کی قدیم نام جنہیں تمام ماہر کیمیات اور تبیات کے زیادہ تر ماہرین استعمال کرتے ہیں پر تبصرہ کرنا ضروری ہوگا اس کی وجہ شاید صرف انیسویں صدی کے تیز پیمائی کاروں کو معلوم ہوگا کہ $l = 0$ کو s کہتے ہیں $l = 1$ کو p کہتے ہیں، $l = 2$ کو d کہتے ہیں اور $l = 3$ کو f کہتے ہیں۔ میرے خیال سے اس کے بعد وہ سیدھی راس پر آگئے اور انہوں نے عروف تہجی کے تحت $(g, h, i, , k, l)$ وغیرہ نام دینا شروع کیا۔ انہوں نے ہماری ناک میں دم کرنے کی خاطر j کو نظر انداز کیا۔ کسی ایک الیکٹران کے حال کو (n, l) کی جوڑی ظاہر کرتی ہے جہاں عدد n حال کو اور حرف l مدارجی زاویائی معار حرکت کو ظاہر کرتا ہے۔ کوانٹم عدد m کا ذکر نہیں کیا جاتا لیکن قوت نما میں حال کے مقین الیکٹرانوں کی تعداد لکھی جاتی ہے۔ یوں درج ذیل تنظیم

$$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$$

کہتی ہے کہ مدارچہ $(1,0,0)$ میں 2 الیکٹران، مدارچہ $(2,0,0)$ میں 2 جبکہ مدارچے $(2,1,1)$، $(2,1,0)$ اور $(2,1,-1)$ کے کسی ملاپ میں 2 الیکٹران پائے جاتے ہیں۔ یہ درحقیقت کاربن کا زمینی حال ہے۔

اس مثال میں 2 الیکٹران ایسے پائے جاتے ہیں جن کے مدارجی زاویائی معارے ہرکت کوانٹم عدد ایک ہے لہذا مدارچی زاویائی معیار حرکت کوانٹم عدد ایک ہے لہذا کل مدارچی زاویائی معیار حرکت کوانٹم نمبر l کسی ایک ذرہ کی جبکہ L کل قیمت کو ظاہر کرتا ہے۔ ایک، دو یا صفر ہو سکتا ہے۔ جبکہ $(1s)$ کے دو الیکڑان ایک دوسرے کے ساتھ یکتا حال میں بندھے ہیں اور ان کا کل چکر صفر ہوگا۔ یہی کچھ $(2S)$ کے دو الیکڑانوں کے لئے بھی ہوگا لیکن $(2p)$ کے دو الیکڑان یا تو یکتا نظام اور یا سہتا نظام میں ہوں گے۔ یوں کل چکر کوانٹم عدد S کل کو ظاہر کرنے کے لئے بڑا حرف استعمال ہوگا۔ جس کی قیمت ایک یا صفر ہو سکتی ہے۔ ظاہر ہے میزان کل مدارچی جمع چکر J کی قیمت تین، دو، ایک یا صفر ہو سکتی ہے۔ کسی ایک جوہر کے لئے ان کل قیمتوں کو ہن قواعد (سوال 1.5 دیکھیں) سے حاصل کیا جا سکتا ہے ۔ نتیجہ کو درجہ ذیل روپ میں لکھا جا سکتا ہے.

$${}^{2s+1}L_J$$

جہاں J اور S اعداد جبکہ L ایک حرف ہو گا اور چونکہ ہم کل کی بات کر رہے ہیں لہذا یہ بڑا حرف ہو گا کاربن کا زمینی حال 3D ہے جس کا کل چکّر ایک ہے جس کی بنا 3 لکھا گیا ہے کل مدارچی زاویائی معیار حرکت ایک ہے لہذا $1p$ لکھا گیا ہے اور میزان کل زاویائی معیار حرکت صفر ہے لہذا صفر لکھا گیا ہے۔ جدول 1.5 میں دوری جدول کے ابتدائی چار صفحوں کے لئے انفرادی تنظیم اور کل زاویائی معیار حرکت مساوات 34.5 کی روپ میں پیش کئے گئے ہیں۔

سوال 12.5

جز الف: دوری جدول کے ابتدائی دو صفحوں کے لئے نیوون تک مساوات 33.5 کی روپ میں تنظیم الیکٹران پیش کر کے ان کی تصدیق جدول 1.5 کے ساتھ کریں۔

جز ب: ابتدائی چار عناصر کے لئے مساوات 34.5 کی روپ میں ان کا مطابقتی کل زاویائی معیار حرکت تلاش کریں۔ بوران، کاربن اور نائٹروجن کے لئے تمام ممکنات پیش کریں۔

سوال 13.5

جز الف: ہن کا پہلا قاعدہ کہتا ہے کہ باقی چیزیں ایک جیسا ہونے کے لیے صورت میں وہ حال جس کا کل چکری زیادہ سے زیادہ ہو گی کم سے کم توانائی ہو گی۔ ہیلیم کے ہیجان حالات کے لیے یہ کیا پیشگوئی کرتا ہے۔

جز ب: ہن کا دوسرا قاعدہ کہتا ہے کہ کسی ایک چکر کی صورت میں مجموعی طور پر خلاف تشاکلیت پر پورا اترتا ہو۔ وہ حال جس کی مدارچی زاویائی معیار حرکت L زیادہ سے زیادہ ہو گی توانائی کم سے کم ہو گی۔ کاربن کے لئے L=2 کیوں نہیں ہو گا؟ اشارہ سیڑھی کا بالائی سر $(M_L = L)$ تشاکلی ہے۔

جز ج: ہن کا تیسرا قاعدہ کہتا ہے کہ اگر ایک ذیلی خول (n, l) نصف سے زیادہ بھرا ناہو تب کم سے کم توانائی کی سطح کے لئے $J = |L - S|$ ہو گا۔ اگر یہ نصف سے زیادہ بھرا ہو تب $J = L + S$ کی توانائی کم سے کم ہو گی۔ اس حقیقت کو استعمال کرتے ہوئے سوال 12.5 ب میں بوران کے مسائلہ سے شک دور کرے۔

جز د: قواعد ہن کے ساتھ یہ حقیقت استعمال کرتے ہوئے کہ تشاکلی چکری حال کے ساتھ خلاف تشاکلی موزہ حال کے ساتھ خلاف تشاکل چکر حال استعمال ہو گا۔ سوال 12.5 ب میں کاربن اور نائٹروجن میں درپیش مشکلات سے چھٹکارا حاصل کریں۔ اشارہ کسی بھی حال کی تشاکلی جاننے کی خاطر سیڑھی کے بالائی سر سے آغاز کریں۔

سوال 14.5

دوری جدول کے چھٹے صف میں عنصر چار ساٹھ ڈسپروسیم کا زمینی حال $^5I_8$ ہے۔ اس کے کل چکر کل مدارچے اور میزان کل زاویائی معیار حرکت کوانٹم کل حالات کیا ہوں گے۔ ڈسپروسیم کے الیکٹران کی تنظیم کا خاکہ کیا ہو سکتا ہے۔

حصہ 3.5

ٹھوس حال میں ہر جوہر کے بیرونی ڈیلے مقید گرفتی الیکٹرانوں میں سے چند ایک علیحدہ ہو کر کسی مخصوص موروثی مرکزا کے کولوم میدان سے آزاد، تمام قلمی جال کے مخفیا کے زیرِ اثر حرکت کرنا شروع کرتے ہے اس حصہ میں ہم تو بہت سادے نمونوں پے غور کرے گے۔ پہلا نمونہ الیکٹرون گیس نظریہ ہے جو سمرفیل نے پیش کیا اس نمونے میں سرحد کے اثرات کے علاوہ باقی تمام قوتوں کو نظرانداز کیا جاتا ہے اور الیکٹرانوں کو لامتناہی چاکور کنواں کے تین آبادی مماثل کی طرح ڈبے میں آزاد ذرات تصویر کیا جاتا ہے۔ دوسرا نمونہ بلخ نظریہ کہلایا جاتا ہے الیکٹرون کی بھی دفاع کو نظرانداز کرتے ہوئے باقاعدگی سے ایک جیسے فاصلے پر مثبت بار کے مرکزہ کو دوری مخفیہ سے ظاہر کرتا ہے، یہ نمونے ٹھوس اجسام کی کوانٹم نظریے کی طرف پہلے لڑکھڑاتے

قدم ہیں۔ اس کے باوجود یہ پولی حصولنات کا جموت میں گہرا کردار اور موصال، غیر موصل اور نیم موصل کی حیرت کن برقی خواص پر روشنی ڈالنے میں مدد دیتی ہے۔
جز حصہ 1.3.5

آزاد الیکٹرون گیس
، فرض کرے ایک ٹھوس جسم مستطیل چکل کا ہے جس کے اصلا l_x، l_y اور l_z ہے اور فرض کرے کے اِس کے اندر الیکٹرون پر کوئی قوت اثرانداز نہیں ہوسکی ماسوائے ناقابلِ گزر دیواروں کے۔

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & 0 < x < l_x, \quad 0 < y < l_y, \quad 0 < z < l_z \\ \infty & otherwise \end{cases} \tag{۵.۲۱}$$

شرودنگر مساوات

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi$$
$$\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z)$$
$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2 X}{dx^2} = E_x X; \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2 Y}{dy^2} = E_y Y; \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2 Z}{dz^2} = E_z Z$$

اور

$$E = E_x + E_y + E_z$$

درج ذیل لیتے ہوئے،

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

ہم عمومی حل حاصل کرتے ہے۔

$$X(x) = A_x \sin(K_x x) + B_x \cos(K_x x) \quad Y(y) = A_y \sin(K_y y) + B_y \cos(K_y y) Z(z) = A_z \sin(K_z z) + B_z \cos \tag{۵.۲۲}$$

سرحدی شرائط کے تحت

$$X(0) = Y(0) = Z(0), B_x = B_y = B_z = 0, X(l_x) = Y(l_y) = Z(l_z) = 0$$

ہوگا۔ لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$k_x l_x = n_x \pi, k_y l_y = n_y \pi, k_z l_z = n_z \pi$$

جہاں ہر n ایک مثبت عدد صحیح ہے۔

$$n_x = 1,2,3,\ldots \quad n_y = 1,2,3,\ldots \quad n_z = 1,2,3,\ldots$$

معمول شدہ تفلات موج درج ذیل ہونگے۔

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{8}{l_x l_y l_z}} \sin\left(\frac{n_x\pi}{l_x}x\right) \sin\left(\frac{n_y\pi}{l_y}y\right) \sin\left(\frac{n_z\pi}{l_z}z\right)$$

اور احازاتی توانائیاں درج ذیل ہونگی۔

$$E_{n_xn_yn_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\Big(\frac{n_x^2}{l_x^2}+\frac{n_y^2}{l_y^2}+\frac{n_z^2}{l_z^2}\Big) = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

جہاں سمتیاں موج، $k \equiv (k_x, k_y, k_z)$ کی مطلق قیمت K ہو گی۔ اگر آپ ایک تین آبادی فضا کا تصویر کرے جس کے محور $k_xk_yk_z$ ہو اور جس پر $k_x = (\pi/l_x)(2\pi/l_x)(3\pi/l_x)\ldots$ اور $k_y = (\pi/l_y)(2\pi/l_y)(3\pi/l_y)\ldots$ اور $k_z = (\pi/l_z)(2\pi/l_z)(3\pi/l_z)\ldots$ پر سیدھے سطوت پائے جاتے ہوتب ہر انفرادی نقطہ تکاتے ایک منفرد یک ذراسا کن حال دیگا۔
اس حال میں ہر ایک خانہ لہذا ہر ایک حال کی فضا میں درج ذیل حجم گھیرے گا، جہاں پورے جسم کا حجم ہے۔

$$\frac{\pi^3}{l_xl_yl_z} = \frac{\pi^3}{V}$$

فرض کریں مادہ کے ایک ٹکڑا میں N جوہر پائے جاتے ہوں اور ہر جوہر اپنے حصے کے q آزاد الیکٹرون دیتا ہو۔ عملاً کسی بھی کلاں بنی جسامت کے چیز کے لیئے N کی قیمت بہت بڑی ہو گی جو ایوگادرو عدد میں گنی جائے گی جبکہ q ایک چھوٹا عدد مثلاً 1 یا 2 ہو گا۔ اگر الیکٹرون بوزان یا قابلِ ممیز ذرات ہوتے تب وہ زمینی حال ψ_{111} میں سکونیت اختیار کرتے حقیقتاً الیکٹروں یکساں فرمیونز ہیں جن پر پالی اصول منات کا اطلاق ہوتا ہے لحاظہ کسی بھی حل کی مکین صرف دو الیکٹرون ہو سکتے ہیں۔ یہ k فضا میں ایک کرہ کا ایک ثمن رداس k_F تک بھرے گی جس کو اس حقیقت سے تعین کیا جا سکتا ہے کہ الیکٹران کی ہر ایک جوڑی کو $\frac{\pi^3}{V}$ حجم درکار ہو گا مساوات 5.40:

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

یوں

$$k_F = (3\rho\pi^2)^{\frac{1}{3}} \tag{۵.۲۳}$$

جہاں

$$\rho \equiv \frac{Nq}{V} \tag{۵.۲۴}$$

آزاد الیکٹران کثافت ہے (آزاد حجم میں الیکٹرانوں کی تعداد)۔

k فضا میں مکین اور غیر مکین حالات کی سرحد کو **فرمی سطح** کہتے ہیں (اسی کی بنا زیر نوشت میں F لکھا گیا)۔ اس سطح پر طاقتی توانائی کو **فرمی توانائی** E_F کہتے ہیں۔ آزاد الیکٹران گیس کے لیئے درج ذیل ہو گا۔

$$E_F = \frac{h^2}{2m}(3\rho\pi^2)^{\frac{2}{3}} \tag{۵.۲۵}$$

الیکٹران گیس کی کل توانائی کو درج ذیل طریقے سے حل کیا جا سکتا ہے. ایک خول جس کی موٹائی dk شکل 5.4 ہو کا حجم

$$\frac{1}{8}(4\pi k^2)dk$$

لحاظہ اس خول میں الیکٹرون حالات کی تعداد درج ذیل ہو گی

$$\frac{2[(\frac{1}{2})\pi k^2 dk]}{\frac{\pi^3}{V}} = \frac{V}{\pi^2}k^2 dk$$

ان میں سی ہر ایک حال کی توانائی $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ مساوات 5.39 لحاظہ خول کی توانائی

$$dE = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\frac{V}{\pi^2}k^2 dk \tag{۵.۲۶}$$

اور کل توانائی درج ذیل ہو گی

$$E_{tot} = \frac{\hbar^2 V}{2\pi^2 m}\int_0^{k_F} k^4 dk = \frac{\hbar^2 k_F^5 V}{10\pi^2 m} = \frac{\hbar^2(3\pi^2 Nq)^{\frac{5}{3}}}{10\pi^2 m}V^{\frac{-2}{3}} \tag{۵.۲۷}$$

کوانٹم میکانی توانائی کا کردار کچھ ایسا ہی ہے جیسا سادہ گیس میں اندرونی حراری توانائی U کا ہوتا ہے۔ بل خصوص یہ دیواروں پر ایک دباؤ پیدا کرتا ہے اور اگر ڈبے کے حجم میں dV کا اضافہ ہو تب کل توانائی میں درج ذیل کمی رونما ہو گی

$$dE_{tot} = -\frac{2}{3}\frac{\hbar^2(3\pi^2 Nq)^{\frac{5}{3}}}{10\pi^2 m}V^{\frac{5}{3}}dV = -\frac{2}{3}E_{tot}\frac{dV}{V}$$

جو بیرون پر کوانٹم دباؤ P کا کیا ہوا کام $dW = PdV$ نظر آتا ہے

$$P = \frac{2}{3}\frac{E_{tot}}{V} = \frac{2}{3}\frac{\hbar^2 k_F^5}{10\pi^2 m} = \frac{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}}\hbar^2}{5m}\rho^{\frac{5}{3}} \tag{۵.۲۸}$$

یہ اس سوال کا جزوی جواب ہے کہ ایک ٹھنڈا ٹھوس شہ اندر کی طرف منہدن کیوں نہیں ہو جاتا۔ ایک اندرونی کوانٹم میکانی دباؤ توازن برقرار رکھتی ہے جس کا الیکٹرون کے باہمی دفع جنہیں ہم نظر انداز کر چکے ہیں یا حراری حرکت جس کو ہم خارج کر چکے ہیں کے ساتھ کوئی تعلق نہیں ہے۔ بلکہ جو یکساں فرمیان کی ضرورت خلاف تشاکلیت سے پیدا ہوتا ہے۔ اس کو بعض اوقات انحطاطی دباؤ کہتے ہیں اگرچہ مناتی دباؤ بہتر اصطلاح ہو گی۔

سوال ۵.۹: ایک آزاد الیکٹرون کی اوسط توانائی $\frac{E_{tot}}{Nq}$ کو فرمی توانائی کے قصر کی صورت میں لکھیں۔

جواب: $\frac{3}{5}E_F$

سوال ۵.۱۰: تانبا کی کثافت $8.96\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$ ہے جبکہ اس کا جوہری وزن $63.5\,\mathrm{g\,mol^{-1}}$ ہے۔

(الف) مساوات 5.43 استعمال کرتے ہوئے $q = 1$ لیتے ہوئے تانبے کی فرمی توانائی کا حساب لگا کر نتیجہ کو الیکٹرون وولٹ کی صورت میں لکھیں۔

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

(ج) تانبہ کے لیئے کس درجہ حرارت پر امتیازی حراری توانائی $k_B T$ جہاں k_B بولٹزمن مستقل اور T کیلون حرارت ہے فرمی توانائی کے برابر ہو گا؟ تبصرہ: اس کو فرمی حرارت کہتے ہیں۔ جب تک حقیقی حرارت فرمی حرارت سے کفی کم ہو مادہ کو ٹھنڈہ تصور کیا جا سکتا ہے اور اس میں الیکٹرون نچلے ترین قابلِ پہنچ حال میں ہوں گے۔ چونکہ تانبے $1356\,\mathrm{K}$ پر گلتا ہے لحاظہ ٹھوس تانبہ ہر صورت ٹھنڈہ ہو گا۔

(د) الیکٹران گیس نمونہ میں تانبہ کے لیئے انحطاطی دباؤ مساوات 5.46 کا حساب لگائیں۔

سوال ۵.۱۱: کسی جسم پر دباؤ میں معمولی کمی اور نتیجتاً حجم میں نصبتی اظافہ کے تناسب کو جسم مقیاس کہتے ہیں۔

$$B = -V\frac{dP}{dV}$$

دیکھائیں کہ آزاد الیکٹران نمونہ میں $B = \frac{5}{3}P$ ہو گا اور سوال (د) 5.16 کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے تانباہ کے لیئے جسیم مقیاس کی اندازاً قیمت تلاش کریں۔ تبصرہ: تجربہ سے حاصل قیمت $13.4 \times 10^{10}\,\mathrm{N\,m^{-2}}$ ہے مکمل درست جواب کی توقع نہ کریں چونکہ ہم نے الیکٹران مرکزہ اور الیکٹران الیکٹران قوتوں کو نظرانداز کیا ہے! حقیقت میں یہ ایک حیرن کن نتیجہ ہے کہ حساب سے حاصل نتیجہ حقیقت کے اتنا قریب ہے۔

۵.۲.۳ سخت پٹی

ہم آزاد الیکٹران نمونہ میں منظم فاصلوں پر ساکن مثبت بار کے مرکزہ کی الیکٹرانوں پر قوت کو شامل کر کے بہتر نمونہ حاصل کرتے ہیں۔ ٹھوس اجسام کا رویہ نمایاں حد تک اس حقیقت پر مبنی ہے کہ اس کا مخفیہ دوری ہوتا ہے۔ مخفیہ کی حقیقی شکل وصورت مادہ کی تفصیلی رویہ میں کردار ادا کرتی ہے۔ یہ عمل دیکھنے کی خاطر میں سادہ ترین نمونہ تیار کرتا ہوں جس سے یک بُعدی ڈیراک کنگھی کہتے ہیں اور جو ایک جتنے برابر فاصلوں پر نوکیلی ڈیلٹا تفاعلوں پر مشتمل ہوتا ہے شکل 5.5۔ لیکن اس سے پہلے میں ایک طاقتور مسئلہ پیش کرتا ہوں جو دوری مخفیہ کے مسائل کا حل نہایت سادہ بناتا ہے۔

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

$$V(x+a) = V(x) \tag{۵.۲۹}$$

مسئلہ بلوخ کہتا ہے کہ دوری مخفیہ کے لیئے مساوات شرودنگر،

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi \tag{۵.۳۰}$$

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

$$\psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x) \tag{۵.۳۱}$$

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

ثبوت: مان لیں کے D ایک ہٹاؤ عامل ہے:

$$Df(x) = f(x+a) \tag{۵.۳۲}$$

دوری مخفیہ مساوات 5.47 کی صورت میں D ہیملٹنی کا قابلِ تبادل ہو گا:

$$[D, H] = 0 \tag{۵.۳۳}$$

لحاظہ ہم H کے ایسے امتیازی تفاعلات چھنڈ سکتے ہیں جو بیک وقت D کے امتیازی تفاعلات بھی ہوں: $D\psi = \lambda\psi$ یا

$$\psi(x+a) = \lambda\psi(x) \tag{۵.۳۴}$$

یہاں λ کسی صورت صفر نہیں ہو سکتا اگر یہ صفر ہو تب چونکہ مساوات 5.52 تمام x کے لیئے مطمئن ہو گا لحاظہ ہمیں $\psi(x) = 0$ ملے گا جو قابلِ قبول امتیازی تفاعل نہیں ہے۔ کسی بھی غیر مخلوط عدد کی طرح اس کو قوتِ نمائی روپ میں لکھا جا سکتا ہے:

$$\lambda = e^{iKa} \tag{۵.۳۵}$$

جہاں K ایک مستقل ہو گا۔

اس مقام پر مساوات 5.53 امتیازی قدر λ لکھنے کا ایک انوکھا طریقہ ہے لیکن ہم جلد دیکھیں گے کہ K حقیقی ہے اور یوں اگرچہ $\psi(x)$ از خود غیر دوری ہے $|\psi(x)|^2$ جو درج ذیل ہے۔

$$\left|\psi(x+a)\right|^2 = \left|\psi(x)\right|^2 \tag{۵.۳۶}$$

دوری ہو گا جیسا کہ ہم توقع کرتے ہیں۔

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

$$\psi(x+Na) = \psi(x) \tag{۵.۳۷}$$

یوں مساوات 5.49 کے تحت درج ذیل ہو گا

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

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

$$K = \frac{2\pi n}{Na}, (n = 0, \pm1, \pm2, \dots) \tag{۵.۳۸}$$

یہاں K لازماً حقیقی ہو گا مسئلہ بلوخ کی عفادیت یہ ہے کہ ہمیں صرف ایک خانہ مثلاً $(0 \leq x < a)$ کے وقفہ پر مسئلہ شروڈنگر حل کرنا ہو گا مساوات 5.49 کی بار بار اطلاق سے ہر جگہ کے حالات حاصل ہوں گے۔

اب فرض کریں کے مخفیہ درحقیقت نوکیلی ڈیلٹا تفاعلات ڈیراک کنگھی پر مشتمل ہو:

$$V(x) = \alpha \sum_{j=0}^{N-1} \delta(x - ja) \tag{۵.۳۹}$$

شکل 5.5 میں آپ تصور کریں گے کہ محور x کو یوں دائروی شکل میں گھومایا گیا ہے کہ N ویں نوکیلی تفاعل درحقیقت نقطہ $x = -a$ پر پایا جاتا ہے۔ اگرچہ یہ حقیقت پسند نمونہ نہیں ہے لیکن یاد رہے ہمیں دوریت سے دلچسپی ہے۔ کلاسیکی طور پر دہراتا ہوا مستطیلی مخفیہ استعمال کیا گیا جو اب بھی بہت سے مصنفین کا پسندیدہ مخفیہ ہے خطہ $(0 < x < a)$ میں مخفیہ صفر ہو گا لحاظہ

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

یا

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

ہو گا۔

جہاں ہمیشہ کہ طرح درج ذیل ہو گا

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \tag{۵.۴۰}$$

اس کا عمومی حل درج ذیل ہے

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx), (0 < x < a). \tag{۵.۴۱}$$

مسئلہ بلوخ کے تحت مبدا کے بلکل بائیں ہاتھ پہلے خانہ میں تفاعل موج درج ذیل ہو گا

$$\psi(x) = e^{-iKa}[A\sin k(x+a) + B\cos k(x+a)], (-a < x < 0). \tag{۵.۴۲}$$

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

$$B = e^{-iKa}[A\sin(ka) + B\cos(ka)]; \tag{۵.۴۳}$$

اس کے تفرق میں ڈیلٹا تفاعل کی زور کے براہراست متناسب عدم استمرار پائے جائے گی مساوات 2.125 جس میں α کی علامت اُلٹ ہوگی چونکہ یہاں کنواں کی بجائے نوکیلی تفاعل پایا جاتا ہے

$$kA - e^{-iKa}k[A\cos(ka) - B\sin(ka)] = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}B \tag{۵.۴۴}$$

مساوات 5.61 کو $A\sin(ka)$ کے لیئے حل کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہو گا

$$A\sin(ka) = [e^{iKa} - \cos(ka)]B \tag{۵.۴۵}$$

اس کو مساوات 5.62 میں پُر کرتے ہوئے اور k_B کو منسوخ کرتے ہوئے

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

حاصل ہو گا۔

جس سے درج ذیل سادہ روپ حاصل ہوتا ہے

$$\cos(ka) = \cos(ka) + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\sin(ka) \tag{۵.۴۶}$$

یہ ایک بنیادی نتیجہ ہے جس سے باقی سب کچھ اخذ ہوتا ہے۔ کرونیگ پنی مخفیہ حاشیہ 18 دیکھیں کے لیئے کلیہ زیادہ پیچیدہ ہو گا لیکن جو خدوخال ہم دیکھنے جا رہے ہیں وہی اس میں بھی پائے جاتے ہیں۔

مساوات 5.64 k کی ممکنات قیمتیں لحاظہ اجازتی توانائیاں تعین کرتی ہیں۔ علامتیت کو سادہ بنانے کی نقطہ نظر سے ہم درج ذیل لکھتے ہیں

$$z \equiv ka, \text{ and} \beta \equiv \frac{m\alpha a}{\hbar^2} \tag{۵.۴۷}$$

جس سے مساوات 5.64 کا دائیاں ہاتھ درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے

$$f(z) \equiv \cos(z) + \beta\frac{\sin(z)}{z} \tag{۵.۴۸}$$

مستقل β بُعدی ہے جو ڈیلٹا تفاعل کی زور کی ناپ ہے شکل 5.6 میں میں نے $\beta = 10$ کے لیئے $f(z)$ کو ترسیم کیا ہے۔ یہاں دیکھنے کی اہم بات یہ ہے کے $f(z)$ ساتھ $(-1, +1)$ سے باہر بھٹکتا ہے اور چونکہ $|\cos(Ka)|$ کی قیمت کسی صورت ایک سے تجاوز نہیں کر سکتی ہے لحاظہ ایسی خطوں میں مساوات 5.64 کا حل نہیں

پایا جائے گا۔ یہ درز ممنوع توانائیوں کو ظاہر کرتی ہے انکے بیچ اجازتی توانائیوں کی پٹیاں پائی جاتی ہیں مساوات 5.56 کے تحت $Ka = \frac{2\pi n}{N}$ ہے جہاں N ایک بہت بڑا عدد ہے لحاظہ n کوئی بھی عدد صحیح ہو سکتا ہے۔ یوں کسی ایک پٹی میں تقریباً ہر توانائی اجازتی ہوگی۔ آپ تصور میں شکل 5.6 پر $\cos(\frac{2\pi n}{N})$ قیمت کے فاصلوں پر $+1(n = 0)$ سے لے کر نیچے $-1(n = \frac{N}{2})$ تک اور واپس تقریباً $+1(n = N - 1)$ تک جہاں بلوخ جزو ضربی e^{iKa} دوبارہ چکر شروع کرتا ہے لحاظہ n کو مزید بڑھانے سے کوئی نیا حل حاصل نہیں ہوگا لکیریں کھینچ کر دیکھ سکتے ہیں۔ ان لکیروں میں ہر ایک کا $f(z)$ کے ساتھ تقاطع ایک اجازتی توانائی دیگا۔ ظاہر ہے کہ ہر پٹی میں N حالات پائے جاتے ہیں جو ایک دوسرے کے اتنے قریب ہیں کہ کسی بھی نقطہ نظر سے انہیں ایک مسلسل خطہ تصور کیا جا سکتا ہے شکل 5.7۔

ہم نے ابھی تک اپنے مخفیہ میں ایک الیکٹران رکھا ہے۔ حقیقت میں Nq الیکٹران ہونگے جہاں ہر ایک جوہر q تعداد کے آزاد الیکٹران مہیہ کرے گا۔ پالی اصولِ منافرت کے بنا صرف دو الیکٹران کسی ایک فضائی حال کے مکین ہو سکتے ہیں۔ یوں $q = 1$ کی صورت میں یہ زمینی حال میں پہلی پٹی کو آدھا بھریں گے اگر $q = 2$ ہو تب یہ پہلی پٹی کو مکمل کریں گے اگر $q = 3$ ہو یہ دوسری پٹی کو آدھا بھریں گے وغیرہ وغیرہ. تین ابعاد میں اور زیادہ حقیقی مخفیہ کی صورت میں پٹیوں کی ساخت زیادہ پیچیدہ ہو سکتی ہے لیکن اجازتی پٹیاں جنکے بیچ ممنوع درز پائے جاتے ہوں تب بھی ہوگا۔ دوری مخفیہ کی نشانی بھی پٹی ہے۔

اب اگر ایک پٹی مکمل طور پر بھری ہوئی ہو ممنوع خطہ سے گزرتے ہوئے اگلی پٹی تک چھلانگ کے لیئے ایک الیکٹران کو نصبتاً زیادہ توانائی درکار ہوگی ایسا مادہ برقی طور پر غیر موئثل ہوگا۔ اس کے بر عکس اگر ایک پٹی پوری طرح بھری ہوئی نہیں ہے تب ایک الیکتران کو بہت معمولی توانائی درکار ہوگی کہ وہ ہیجان ہو سکے اس طرح کا مادہ عموماً موئثل ہوگا۔ ایک غیر موئثل میں بڑے یا کم q کے چند جوہر کی ملاوٹ سے اگلی بلند پٹی میں چند اظافی الیکٹران رکھ دیئے جاتے ہیں پہلے سے مکمل پُر پٹی میں خول پیدا کیئے جاتے ہیں۔ ان دونوں صورتوں میں ایک کمزور برقی رو گزر سکتا ہے اور ایسے اشیاء نیم موئثل کہلاتے ہیں۔ آزاد الیکٹران نمونہ میں تمام ٹھوس اجام کو لازماً بہت اچھا موئثل ہونا چاہیئے تھا چونکہ انکے اجازتی توانائیوں کے طیف میں کوئی بڑا وقفہ نہیں پایا جاتا ہے۔ قدرت میں پائے جانے والے ٹھوس اجام کی برقی موصلیت میں اتنا زیادہ فرق صرف نظریہ پٹی کی مدد سے سمجھا سکتا ہے۔

سوال ۵.۱۲:

(الف) مساوات 5.59 اور مساوات 5.63 استعمال کرتے ہوئے دیکھائیں کہ دوری ڈیلٹا تفاعل مخفیہ میں ایک ذرے کی تفاعل موج درج ذیل روپ میں لکھی جا سکتی ہے

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

معمولزنی مستقل C تعین کرنے کی ضرورت نہیں ہے۔

(ب) البتہ پٹی کے بالائی سر پر جہاں z، π کا عدد صحیح مضرب ہوگا شکل 5.6 (الف) سے $\psi(x) = 0$ حاصل ہوگا ایسی صورت میں درست تفاعل موج تلاش کریں دیکھیئے گا کہ ہر ایک ڈیلٹا تفاعل پر ψ کو کیا ہوتا ہے؟

سوال ۵.۱۳: پہلی اجازتی پٹی کے نچلے نقطہ پر $10 = \beta$ کی صورت میں توانائی کی قیمت تین بامعنی ہندسوں تک تلاش کریں۔ دلائل پیش کرتے ہوئے آپ فرض کر سکتے ہیں کہ $\frac{\alpha}{a} = 1\,\text{eV}$ ہوگا۔

سوال ۵.۱۴: فرض کریں ہم ڈیلٹا تفاعل سولن کے بجائے ڈیلٹا تفاعل کنواں پر غور کر رہے ہیں یعنی مساوات 5.57 میں α کی علامت تبدیل کریں۔ ایسی صورت میں شکل 5.6 اور 5.7 کی طرح کے شکال بنائیں۔ مثبت توانائی حلوں کے لیئے آپ کو کوئی نیا حساب کرنے کی ضرورت نہیں ہے بس مساوات 5.66 میں موضوع تبدیلیاں لائیں لیکن منفی توانائی حلوں کے لیئے آپ کو کام کرنا ہوگا اور انہیں ترسیم پر شامل کرنا مت بھولیئے گا جو اب $z-$ تک وسیع ہوگا۔ پہلی اجازتی پٹی میں اب کتنے حالات ہونگے؟

سوال ۵.۱۵: دیکھائیں کہ مساوات 5.64 میں حاصل زیادہ تر توانائیاں دوہری انحطاطی ہے۔ کن صورتوں میں ایسا نہیں ہے؟ اشارہ: $(N = 1, 2, 3, 4, \ldots)$ لیتے ہوئے دیکھیئے گا کیا ہوتا ہے۔ ایسی ہر صورت میں $\cos(Ka)$ کی کیا ممکنا قیمتیں ہوں گی؟

۵.۳ کوانٹم شماریاتی میکانیات

مطلق صفر حرارت پر ایک طبعی نظام اپنے کم سے کم اجازتی توانائی تنظیم کا مکین ہوگا۔ درجہ حرارت بڑھاتے ہوئے بلا منصوبہ حراری سرگرمیوں کے بنا ہیجانی حالات ابھرنے شروع ہونگے جس سے درج ذیل سوال پیدا ہوتا ہے: اگر T درجہ حرارت پر حراری توازن میں ایک بڑی تعداد N کے ذرات پائے جاتے ہوں تب اس کا کیا احتمال ہے کہ ایک ذرہ جس کو بلا منصوبہ منتخب کیا گیا ہو کی مخصوص توانائی E_j ؟ ہوگی دیہان رہے کہ اس احتمال کا کوانٹم عدم تعیین کے ساتھ کوئی تعلق نہیں ہے بلکل یہی سوال کلاسیکی شماریاتی میکانیات میں بھی کھڑا ہوتا ہے۔ ہمیں احتمالی جواب اس لیئے منظور ہوگا کہ جن ذرات کی ہم بات کر رہے ہیں انکی تعداد اتنی بڑی ہوگی کہ یہ کسی صورت ممکن نہیں ہوگا کہ ہم ہر ایک پر علیحدہ علیحدہ نظر رکھ سکیں چاہے یہ قابلِ تعین ہو یا نہ ہوں۔

شماریاتی میکانیات کا بنیادی مفروضہ یہ ہے کہ حراری توازن میں ہر وہ منفرد حال جس کی ایک جیسی کل توانائی E ہو ایک جتنا محتمل ہوگا۔ بلاواسطہ حراری حرکتوں کی بنا مستقل طور پر توانائی ایک ذرہ سے دوسرا ذرہ ایک روپ حرکی، گردشی، گھومتی وغیرہ سے دوسری روپ میں منتقل ہوگی لیکن بیرونی مداخلت کی عدم موجودگی میں بقاء توانائی کی بنا کل مقررہ ہوگا۔ یہاں مفروضہ یہ ہے کہ توانائی کی لگاتار نئی تقسیم کسی مخصوص حال کو ترجیح نہیں دیتا ہے۔ یہ ایک گہرا مفروضہ ہے جو سوچنے کے قابل ہے درجہ حرارت T حراری توازن میں ایک نظام کی کل توانائی کی بس پیمائش ہے۔ ان منفرد حالات کی گنتی میں کوانٹم میکانیات ایک نئی پیچیدگی پیدا کرتی ہے لیکن چونکہ حالات غیر مسلسل ہیں لحاظہ یہ کلاسیکی نظریہ سے زیادہ آسان ہے اور اس کا فیصلہ کن انحصار اس بات پر ہوگا کہ یہ ذرات قابلِ ممیز، یکساں بوزان یا یکساں فرمیون ہیں۔ ان کے دلائل نسبتاً سیدھے لیکن ریاضی کافی گہری ہے لحاظہ میں ایک انتہائی سادہ مثال سے شروع کروں گا تاکہ آپ بنیادی حقائق سمجھ سکیں۔

۵.۳.۱ ایک مثال

فرض کریں ہمارے پاس یک بعدی لامتناہی چکور کنواں حصہ 2.2 میں کمیت m کے صرف تین باہم غیر متعمل ذرات پائے جاتے ہیں۔ ان کی کل توانائی درج ذیل ہو گی مساوات 2.27 دیکھیں

$$E = E_A + E_B + E_C = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_A^2 + n_B^2 + n_C^2) \tag{۵.۴۹}$$

جہاں n_A، n_B اور n_C مثبت عدد صحیح ہوں گے۔ اب تبصرہ جاری رکھنے کی خاطر فرض کریں کہ $E = 363\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right)$ یعنی درج ذیل

$$n_A^2 + n_B^2 + n_C^2 = 363. \tag{۵.۵۰}$$

جیسے آپ تصدیق کر سکتے ہیں ہمارے پاس تین مثبت عدد صحیح اعداد کے تیرہ ایسے ملاپ پائے جاتے ہیں جن کے مربعوں کا مجموعہ 363 ہو گا: تینوں اعداد گیارہ ہو سکتے ہیں دو اعداد تیرہ اور ایک پانچ جو تین مرتب اجتماعات میں ہو گا ایک عدد انّیس اور دو ایک یہاں بھی تین مرتب اجتماعات میں یا ایک عدد سترہ ایک ساٹھ اعر ایک پانچ چھ مرتب اجتماعات میں ہو سکتے ہیں۔ یوں n_A, n_B, n_C درج ذیل میں سے ایک ہو گا:

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

اگر یہ ذرات قابلِ ممیز ہوں تب ان میں سے ہر ایک کسی ایک منفرد کوانٹم حال کو ظاہر کرے گا اور شماریاتی میکانیات کے بنیادی مفروضہ کے تحت حراری توزن میں یہ سب برابر محتمل ہوں گے۔ لیکن میں اس میں دلچسپی نہیں رکھتا ہوں کہ کونسا ذرہ کس یک ذرہ حال میں پایا جاتا ہے بلکہ میں یہ جاننا چاہتا ہوں کہ ہر ایک حال میں کل کتنے ذرات پائے جاتے ہیں حال ψ_n کی تعداد مکین N_n۔ ہم اس دن ذرہ حال کے تمام تعدادِ مکین کے اجتماع کو تنظیم کہتے ہیں۔ اگر تینوں حال ψ_{11} میں ہوں تب تنظیم درج ذیل ہو گا

$$(0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,3,0,0,0,0,0,0,0,\dots) \tag{۵.۵۱}$$

یعنی $N_{11} = 3$ باقی تمام صفر اگر دو حال ψ_{13} میں اور ایک ψ_5 میں ہو تب تنظیم درج ذیل ہو گا

$$(0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,2,0,0,0,0,\dots) \tag{۵.۵۲}$$

یعنی $N_5 = 1, N_{13} = 2$ باقی تمام صفر اگر دو ψ_1 میں ایک ψ_{19} میں تب تنظیم درج ذیل ہو گا

$$(2,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,\dots) \tag{۵.۵۳}$$

یعنی $N_1 = 2, N_{19} = 1$ باقی تمام صفر اور اگر ایک ذرہ ψ_5 میں ایک ψ_7 میں اور ایک ψ_{17} میں تب تنظیم درج ذیل ہو گا

$$(0,0,0,0,1,0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,0,\ldots) \tag{۵.۵۴}$$

یعنی باقی تمام صفر $N_5 = N_7 = N_{17} = 1,$ ان تمام میں آخری تنظیم زیادہ سے زیادہ محتمل ہو گی چونکہ اسکو چھ مختلف طریقوں سے حاصل کیا جا سکتا ہے جبکہ درمیانی دو کو تین طریقوں سے اور پہلی کو صرف ایک طریقہ سے حاصل کیا جا سکتا ہے۔

میں اب دوبارہ اپنے اصل سوال پر آتا ہوں کہ بلا واسطہ تین ذرات منتخب کرتے ہوئے کوئی مخصوص اجازتی توانائی E_n حاصل کرنے کا احتمال P_n کیا ہو گا؟ توانائی E_1 صرف اس صورت حاصل ہو گا جب ذرہ تیسری تنظیم مساوات 5.71 میں ہو اس تنظیم میں نظام ہونے کا اتفاق تیرہ میں سے تین ہے اور اس تنظیم میں E_1 کے حصول کا احتمال $\frac{2}{3}$ لحاظ $P_1 = \left(\frac{3}{13}\right) \times \left(\frac{2}{3}\right) = \frac{2}{13}$۔ آپ E_5 کو تنظیم دو مساوات 5.70 تیرہ میں سے تین کا امکان جس کا احتمال $\frac{1}{3}$ یا تنظیم چار مساوات 5.72 تیرہ میں سے چھ امکان اور احتمال $\frac{1}{3}$ لحاظ $P_5 = \left(\frac{3}{13}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) + \left(\frac{6}{13}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{3}{13}$۔ آپ E_7 کو صرف چار سے حاصل کر سکتے ہیں لحاظ $P_7 = \left(\frac{6}{13}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{2}{13}$۔ اسی طرح E_{11} صرف پہلی تنظیم سے مساوات 5.69 سے تیرہ میں سے ایک امکان اور احتمال ایک کے ساتھ حاصل ہو گا لحاظ $P_{11} = \left(\frac{1}{13}\right)$ ہو گا۔ اسی طرح $P_{13} = \left(\frac{3}{13}\right) \times \left(\frac{2}{3}\right) = \frac{2}{13}$، $P_{17} = \left(\frac{6}{13}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{2}{13}$ اور $P_{19} = \left(\frac{3}{13}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{1}{13}$ ہو گا۔ انکی تصدیق درج ذیل سے ہو گی

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

یہ قابلِ ممیز ذرات کے لیئے تھا۔ اس کی بجائے اگر ذرات یکساں فرمیان ہوتے اپنی آسانی کے لیئے چکر کو نظر انداز کرتے ہوئے یا اگر آپ چاہیں تو یہ تصور کرتے ہوئے کہ تمام ایک جیسے چکر حال میں ہیں ضرورت خلاف تشاکلیت کی بنا پہلی تین تنظیم جو دویا اس سے بھی برا تین ذرات کو ایک ہی حال میں ڈالتے ہیں خارج امکان ہوں گے لحاظ چوتھی تنظیم میں صرف ایک حال ہو گا سوال 5.22 الف دیکھیں۔ یکساں فرمیونز کے لیئے $P_5 = P_7 = P_{17} = \frac{1}{3}$ ہو گا اور اب بھی احتمالات کا مجموعہ ایک ہے اس کے برعکس اگر ذرات یکساں بوزان ہوتے تب ضرورت تشاکلیت ہر تنظیم میں صرف ایک حال کی اجازت دیتا سوال 5.22 ب دیکھیں۔ لحاظ $P_1 = \left(\frac{1}{4}\right) \times \left(\frac{2}{3}\right) = \frac{1}{6}$، $P_5 = \left(\frac{1}{4}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) + \left(\frac{1}{4}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{1}{6}$، $P_7 = \left(\frac{1}{4}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{1}{12}$، $P_{11} = \left(\frac{1}{4}\right) \times (1) = \frac{1}{4}$، $P_{13} = \left(\frac{1}{4}\right) \times \left(\frac{2}{3}\right) = \frac{1}{6}$، $P_{17} = \left(\frac{1}{4}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{1}{12}$ اور $P_{19} = \left(\frac{1}{4}\right) \times \left(\frac{1}{3}\right) = \frac{1}{12}$ ہوتا۔ ہمیشہ کی طرح احتمالات کا مجموعہ ایک ہے۔

اس مثال کا مقصد آپ کو یہ دیکھانا تھا کہ ذرات کی قسم پر حالات کی شمار کس طرح منحصر ہے۔ ایک لحاظ سے ایک حقیقی صورتحال سے جہاں N ایک بہت بڑا عدد ہو گا سے یہ مثال زیادہ پیچیدہ تھا۔ چونکہ N کی قیمت بڑھانے سے زیادہ محتمل تقسیم جو قابلِ ممیز ذرات کے لیئے اس مثال میں $N_5 = N_7 = N_{17} = 1$ ہے پائے جانے کا امکان اتنا زیادہ ہو جائے گا کہ کسی بھی شماریاتی نقطہ نظر سے باقی

تمام امکانات کو رد کیا جا سکتا ہے۔ توازن کی صورت میں انفرادی ذرہ توانائیوں کی تقسیم درحقیقت انکی زیادہ سے زیادہ محتمل تنظیم میں تقسیم ہے۔ اگر یہ $N = 3$ کے لیئے درست ہو تا جو کہ یہ نہیں ہے ہم قابلِ ممیز ذرات کے لیئے $N = 3$ کی صورت میں اخذ کرتے $P_5 = P_7 = P_{17} = \frac{1}{3}$ میں حصہ 3.4.5 میں اس نقطہ پر دوبارہ آؤں گا لیکن اس سے پہلے گنتی کی ترکیب کو عمومیت دیتے ہیں۔

سوال ۵.۱۶:

(الف) حال ψ_5 میں ایک حال ψ_7 میں ایک اور حال ψ_{17} میں ایک یکساں تین فرمیون کا مکمل خلاف تشاکل تفاعل موج $\psi(x_A, x_B, x_C)$ تیار کریں۔

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

سوال ۵.۱۷: فرض کریں یک بُعدی حارمونی ارتعاشی مخفیہ میں آپ کے پاس تین باہم غیر متعمل ذرات ہیں جو حراری توازن میں پائے جاتے ہیں جن کی کل توانائی $E = \left(\frac{9}{2}\right)\hbar\omega$ ہے۔

(الف) اگر یہ تمام ایک جیسی کمیت کے قابلِ ممیز ذرات ہوں تب انکی کتنی عدد ممکن تنظیمات ہوں گے اور ہر ایک کے لیئے کتنے منفرد تین ذرہ حالات ہوں گے؟ سب سے زیادہ محتمل تنظیم کیا ہو گی؟ اگر آپ ایک ذرہ بلا منصوبہ منتخب کریں اور اسکی توانائی کی پیمائش کریں تب کیا قیمتیں متوقع ہوں گی؟ اور ہر ایک کا احتمال کیا ہو گا؟ سب سے زیادہ محتمل توانائی کیا ہو گی؟

(ب) یہی کچھ یکساں فرمیونز کے لیئے کریں چکر کو نظر انداز کریں جیسا ہم نے حصہ 1.4.5 میں کیا۔

(ج) یہی کچھ یکساں بوزان کے لیئے کریں چکر کو نظر انداز کریں۔

جوابات

فرهنگ