

کوانٹم میکانیٹ

خالد خان یوسفزئی

جامعہ کامیٹ، اسلام آباد

khalidyousafzai@comsats.edu.pk

عنوان

v	میری پہلی کتاب کا دیباچہ
1	1 تقابل موج
1	1.1 شروع نگر مساوات
2	1.2 شماراتی مفہوم
4	1.3 احتمال
4	1.3.1 غیر مسلسل متغیرات
7	1.3.2 استمراری متغیرات
10	1.4 معمول زنی
12	1.5 معیار حرکت
15	1.6 اصول عدم یقینیت
19	2 غیر تابع وقت شروع نگر مساوات
19	2.1 ساکن حالات
25	2.2 لامتناہی چکور کنواں
34	2.3 ہارمونی مرتعش
35	2.3.1 الجبرائی ترکیب
44	2.3.2 تحلیلی طریقہ کار
50	2.4 آزاد ذرہ
58	2.5 ڈیلٹا تقابل مخفیہ
58	2.5.1 مقید حالات اور یکجہراو حالات
59	2.5.2 ڈیلٹا تقابل کنواں
65	3 قواعد و ضوابط
71	4 تین ابعادی کوانٹم میکانیات
71	4.1 کروی محدود میں مساوات شروع نگر
73	4.1.1 علیحدگی متغیرات

75	4.1.2 زاویائی مساوات
89	5 متناثر ذرات
91	6 غیر تابع وقت نظریہ اضطراب
93	7 تغیری اصول
95	8 وکب تخمین
97	9 تابع وقت نظریہ اضطراب
99	10 حرارت نا گزر تخمین
101	11 بکھراؤ
103	12 پس نوشت
105	جوابات

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

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

پاکستان میں اعلیٰ تعلیم کا نظام انگریزی زبان میں رائج ہے۔ دنیا میں تحقیقی کام کا بیشتر حصہ انگریزی زبان میں ہی چھپتا ہے۔ انگریزی زبان میں ہر موضوع پر لاتعداد کتابیں پائی جاتی ہیں جن سے 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 ذہن 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 چٹائی کے وقت اس بات کا دہان رکھا گیا کہ ان کا استعمال دیگر مضامین میں بھی ممکن ہو۔

کتاب میں بین الاقوامی نظام اکائی استعمال کی گئی ہے۔ اہم متغیرات کی علامتیں وہی رکھی گئی ہیں جو موجودہ نظام تعلیم کی نصابی کتابوں میں رائج ہیں۔ یوں اردو میں لکھی اس کتاب اور انگریزی میں اسی مضمون پر لکھی کتاب پڑھنے والے 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 انجینئرنگ کی نصابی کتاب کے طور پر استعمال کی جائے گی۔ اردو زبان میں برقی انجینئرنگ کی مکمل نصاب کی طرف یہ پہلا قدم ہے۔

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

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

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

خالد خان یوسفزئی

28 اکتوبر 2011

باب 1

تفاعل موج

1.1 شروع و نگر مساوات

فرض کریں کمیت m کا ذرہ، جو x محور پر رہنے کا پابند ہو، پر قوت $F(x, t)$ عمل کرتی ہے۔ کلاسیکی میکانیٹ 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۔ (بقائے نظام جو خوش قسمتی سے خوردبینی سطح پر واحد نظام ہے، میں قوت کو خفی توانائی¹ پر تفرق لکھا جاسکتا ہے $F = -\frac{\partial V}{\partial x}$ ، لہذا نیوٹن کا قانون $m \frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}$ 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 میکانیٹ اس مسئلے کو بالکل مختلف انداز سے دیکھتی ہے۔ اب ہم ذرے کی تفاعل موج² جس کی علامت $\Psi(x, t)$ ہے کو شروع و نگر مساوات³ حل کر کے حاصل کرتے ہیں

$$(1.1) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$

¹ متناطیسی قوتوں کے لئے ایسا نہیں ہوگا 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:

$$(1.2) \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054572 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

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 میکانات میں تمام مستقبل اوقات کے لئے قاعدہ نیوٹن $x(t)$ تعین کرتا ہے۔

1.2 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 مفہوم⁴ 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 روپ⁵ درج ذیل ہے۔

$$(1.3) \quad \int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = \begin{cases} \text{لمحہ } t \text{ پر } a \text{ اور } b \text{ کے } \Psi \text{ کے} \\ \text{ایک ذرہ کے پائے جانے کا احتمال} \end{cases}$$

احتمال $|\Psi|^2$ کی ترمیم کے نیچے رقبہ کے برابر ہو گا۔ شکل 1.2 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 میکانات ہمیں تمام ممکنہ نتائج کے صرف شماریاتی معلومات فراہم کر سکتی ہے۔ یوں کوانٹم میکانات میں عدم تعین⁶ کا عنصر پایا جائے گا۔ کوانٹم میکانات 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 میکاناتی نظریہ میں کمی کا نتیجہ۔

فرض کریں کہ ہم ایک تجربہ کر کے معلوم کرتے ہیں کہ ایک ذرہ مقام C پر پایا⁷ جاتا ہے۔ اب سوال پیدا ہوتا ہے کہ بینائش 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) حقیقتی پند⁸ 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 میکانات ایک نامکمل نظریہ ہو گا کیونکہ ذرہ دراصل نقطہ C پر ہی تھا اور کوانٹم میکانات ہمیں یہ معلومات فراہم کرنے سے قاصر

⁴ statistical interpretation

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

⁶ indeterminacy

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

⁸ realist

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 متغیرات⁹ کی صورت میں) مزید معلومات درکار ہوں گی۔

(2) **تقلید پسند**¹⁰ سوچ: ذرہ حقیقت میں کہیں پر بھی نہیں تھا۔ پینائٹی 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 پینائٹی میں خلل پیدا کرتا ہے، یہ پینائٹی نتیجہ بھی پیدا کرتا ہے۔ پینائٹی 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 کوہنہ ہیکل¹¹ 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 پینائٹی عمل ایک انوکھی عمل ہے جو نصف صدی سے زائد عرصہ کی بحث و مباحثوں کے بعد بھی پراسراری کا شکار ہے۔

(3) **انکار**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 لہذا اس کے بارے میں بات کرنا بے معنی ہے۔

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 جاسکتا ہے۔ اس پر کتاب کے آخر میں بات کی جائے گی جب آپ کی علمی سوچ اتنی ہلچلی 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 درستی کی تصدیق کرتے ہیں¹³۔ 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۔ پینائٹی عمل ذرے کو ایک مخصوص عدد اختیار کرنے پر مجبور کرتے ہوئے ایک مخصوص نتیجہ پیدا کرتی ہے۔ یہ نتیجہ تقابل موج کی مسلط کردہ شماراتی وزن کی پابندی کرتا ہے۔

کیا ایک پینائٹی کے فوراً بعد دوسری پینائٹی 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 پینائٹی ہر صورت C قیمت دے گی؟ ظاہری طور پر پہلی پینائٹی تقابل موج میں ایسی بنیادی تبدیلی پیدا کرتی ہے کہ تقابل موج C پر نوکیلی صورت اختیار کرتی ہے جیسا شکل 1.3 میں دکھایا گیا ہے۔ ہم کہتے ہیں کہ پینائٹی کا عمل تقابل موج کو نقطہ C پر گر کر¹⁴ نوکیلی صورت اختیار کرنے پر مجبور کرتی ہے (جس کے

hidden variables⁹

orthodox¹⁰

Copenhagen interpretation¹¹

agnostic¹²

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 تھیماٹ مشائعتہ و دنیا تفریح جوان تینوں سوچ کے ساتھ مطابقت نہیں رکھتے ہیں۔ ہر حال، اب کے لئے بہتر ہے کہ ہم کو انہم نظریہ کی بنیاد سیکھیں اور بعد میں اس طرح کی مسائل کے بارے میں فکر کریں۔

collapses¹⁴

بعد تفاعل موج شروڈنگر مساوات کے تحت جلد پھیل جائے گی لہذا 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۔

1.3 احتمال

1.3.1 غیر مسلسل متغیرات

چونکہ کوانٹم میکانیات کی شریاتی تشریح کی جاتی ہے لہذا 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۔

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

$$\begin{aligned} N(14) &= 1 \\ N(15) &= 1 \\ N(16) &= 3 \\ N(22) &= 2 \\ N(24) &= 2 \\ N(25) &= 5 \end{aligned}$$

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

$$(1.4) \quad N = \sum_{j=0}^{\infty} N(j)$$

(اس مثال میں ظاہر ہے کہ $N = 14$ ہو گا۔) شکل 1.4 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 لہذا 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۔

$$(1.5) \quad P(j) = \frac{N(j)}{N}$$

دھیان رہے کہ چودہ یا پندرہ سال عمر کا شخص کے انتخاب کا احتمال ان دونوں کی انفرادی احتمال کا مجموعہ یعنی $\frac{1}{14}$ 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۔

$$(1.6) \quad \sum_{j=0}^{\infty} P(j) = 1$$

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 وسطانیہ¹⁵ عمر کیا ہے؟ جواب: چونکہ 7 لوگوں کی عمر 23 سے کم اور 7 لوگوں کی عمر 23 سے زیادہ ہے۔ لہذا 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 اوسط¹⁶ 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۔

$$(1.7) \quad \langle j \rangle = \frac{\sum jN(j)}{N} = \sum_{j=0}^{\infty} jP(j)$$

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 میکانیٹ میں ہم عموماً اوسط قیمت میں دلچسپی رکھتے ہیں جس کو توقعاتی قیمت¹⁷ کا نام دیا گیا ہے۔

median¹⁵
mean¹⁶
expectation value¹⁷

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۔

$$(1.8) \quad \langle j^2 \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} j^2 P(j)$$

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

$$(1.9) \quad \langle f(j) \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} f(j) P(j)$$

(مساوات 1.6، 1.7 اور 1.8 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 جنکی عمریں 1 اور 3 ہو تب $\langle x^2 \rangle = 5$ جبکہ $\langle x \rangle^2 = 4$ ہو گا۔

شکل 1.5 کی شکل و صورتوں میں واضح فرق پایا جاتا ہے اگرچہ ان کی اوسط قیمت، وسطانیہ، بلندتر قیمت احتمال اور اجزاء کی تعداد ایک جیسے ہیں۔ ان میں پہلی شکل اوسط کے قریب نویکی 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 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 پھیلاؤ، 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

$$(1.10) \quad \Delta j = j - \langle j \rangle$$

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۔

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

(چونکہ $\langle j \rangle$ مستقل ہے لہذا اس کو مجموعہ کی علامت سے باہر لے جایا جاسکتا 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۔

$$(1.11) \quad \sigma^2 \equiv \langle (\Delta j)^2 \rangle$$

اس قیمت کو تقسیم کی تغیریت¹⁸ کہتے ہیں جبکہ تغیریت کا جذر σ کو معیار انحراف¹⁹ کہتے ہیں۔ روایتی طور پر σ کو اوسط $\langle j \rangle$ کے گرد پھیلاؤ کی پیمائش مانا جاتا ہے۔

¹⁸ variance
¹⁹ standard deviation

ہم تعریف کا ایک چھوٹا مسئلہ پیش کرتے ہیں۔

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

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

$$(1.12) \quad \sigma = \sqrt{\langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2}$$

عملی استعمال میں σ اس یکے سے بہت جلد حاصل ہو گا۔ آپ $\langle j^2 \rangle$ اور $\langle j \rangle^2$ معلوم کر کہ ان کے فرق کا جذر لیں گے۔ جیسا آپ کو 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 1.11 سے دیکھ سکتے ہیں σ^2 غیر منفی ہو گا لہذا مساوات 1.12 کے تحت درج ذیل ہو گا

$$(1.13) \quad \langle j^2 \rangle \geq \langle j \rangle^2$$

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

1.3.2 استمراری متغیرات

اب تک ہم غیر مسلسل متغیرات کی بات کرتے آ رہے ہیں جن کی قیمتیں الگ تھلک ہوتی ہیں۔ (گزشتہ مثال میں ہم نے افراد کی عمروں کی بات کی جن کو سالوں میں ناپا جاتا ہے لہذا j عدد صحیح تھا۔) تاہم اس کو آسانی سے استمراری تقسیم تک وسعت دی جاسکتی 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 دورانیہ کا وقفہ لیں گے۔ تکنیکی طور پر ہم لامتناہی چھوٹے وقفے کی بات کر رہے ہیں۔) اس طرح درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(1.14) \quad \rho(x)dx = \begin{cases} \text{بلا منصوبہ منتخب کئے گئے رکن کا } x \text{ اور} \\ (x + dx) \text{ کے بیچ پائے جانے کا احتمال} \end{cases}$$

اس مساوات میں تناسبی مستقل $\rho(x)$ کثافت احتمال²⁰ کہلاتا ہے۔ متناہی وقفہ a تا b کے بیچ x پایا جانے کا احتمال $\rho(x)$ کا مکمل دے گا:

$$P_{ab} = \int_a^b \rho(x) dx \quad (1.15)$$

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

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx, \quad (1.16)$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \rho(x) dx, \quad (1.17)$$

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \rho(x) dx, \quad (1.18)$$

$$\sigma^2 \equiv \langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \quad (1.19)$$

مثال 1.1: 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 لہذا 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 dt میں تصویر کھینچنے کا احتمال $\frac{dt}{T}$ ہو گا۔ یوں اس کا احتمال کہ ایک تصویر مطابقتی سعت dx میں فاصلہ دے درج ذیل ہو گا:

$$\frac{dt}{T} = \frac{dx}{gt} \sqrt{\frac{g}{2h}} = \frac{1}{2\sqrt{hx}} dx$$

ظاہر ہے کہ کثافت احتمال (مساوات 1.14) درج ذیل ہو گا۔

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

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

ہم مساوات 1.16 استعمال کر کے اس نتیجے کی تصدیق کر سکتے ہیں۔

$$\int_0^h \frac{1}{2\sqrt{hx}} dx = \frac{1}{2\sqrt{h}} (2x^{\frac{1}{2}}) \Big|_0^h = 1$$

مساوات 1.17 سے اوسط فاصلہ تلاش کرتے ہیں

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

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

شکل 1.6 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 کتل) لازمًا متناہی (بلکہ 1 یا 1 سے کم ہو گا)۔

□

سوال 1.1: حصہ 1.3.1 میں اشخاص کی عمروں کی تقسیم کے لیے درج ذیل کریں۔

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

ب. ہر j کے لیے Δj دریافت کریں اور مساوات 1.11 استعمال کرتے ہوئے معیاری انحراف دریافت کریں۔

ج. جزو اور ب کے نتائج استعمال کرتے ہوئے مساوات 1.12 کی تصدیق کریں۔

سوال 1.2:

ا. مثال 1.1 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 1.3: 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 مکمل کسی جدول سے دیکھ سکتے ہیں۔)

ا. مساوات 1.16 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۔

1.4 معمول زنی

ہم تفاعل موج کے شریاتی مفہوم (مساوات 1.3) پر دوبارہ غور کرتے ہیں، جس کے تحت لمحہ t پر ایک ذرے کا نقطہ x پر پائے جانے کی کثافت احتمال $|\Psi(x, t)|^2$ ہوگی۔ یوں (مساوات 1.16) کے تحت $|\Psi|^2$ کا مکمل 1 کے برابر ہو گا (چونکہ ذرہ کہیں نہ کہیں تو ضرور پایا جائے گا)۔

$$(1.20) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1$$

اس حقیقت کے بغیر شریاتی مفہوم بے معنی ہوگی۔

البتہ یہ شرط آپ کے لیے پریشانی کا سبب ہونا چاہیے۔ تفاعل موج کو مساوات شرودنگر 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 1.1 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 1.20 مطمئن ہو۔ اس عمل کو تفاعل موج کی معمول زنی²¹ کہتے ہیں۔ ہم کہتے ہیں کہ تفاعل موج کو معمول پر لایا گیا ہے۔ مساوات شرودنگر کے بعض حلوں کا مکمل لاتنا ہی 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 لہذا اس کو رد کیا جاتا ہے۔ طبعی طور پر پائے جانے والے حالات، شرودنگر مساوات کے قابل تفاعل موج²² 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 نہ کہ ایک مستقل، اور $A\Psi$ شرودنگر مساوات کا حل نہیں رہے گا)۔ خوش قسمتی سے مساوات شرودنگر کی یہ ایک خاصیت ہے کہ یہ تفاعل موج کی معمول شدہ صورت برقرار رکھتی ہے۔ اس خاصیت کے بغیر مساوات شرودنگر اور شریاتی مفہوم غیر ہم آہنگ ہونگے اور کوانٹم نظریہ بے معنی ہو گا۔

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

$$(1.21) \quad \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 dx$$

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

$$(1.22) \quad \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi$$

normalization²¹
square-integrable²²

²³ ظاہر ہے کہ $|x| \rightarrow \infty$ 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۔

اب مساوات شروع کر کہتی ہے کہ

$$(1.23) \quad \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V\Psi$$

ہو گا اور ساتھ ہی (مساوات 1.23 کا مخلوط جوڑی دار لیتے ہوئے)

$$(1.24) \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V\Psi^*$$

ہو گا لہذا درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(1.25) \quad \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right]$$

مساوات 1.21 میں مکمل کی قیمت صریحاً معلوم کی جاسکتی ہے:

$$(1.26) \quad \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \Big|_{-\infty}^{+\infty}$$

یاد رہے کہ معمول پر لانے کے قابل ہونے کے لئے ضروری ہے کہ $x \rightarrow \pm\infty$ کرتے ہوئے $\Psi(x, t)$ صفر²⁴ کو پہنچتی ہو۔ یوں درج ذیل ہو گا

$$(1.27) \quad \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 0$$

لہذا مکمل (وقت کا غیر تابع) مستقل ہو گا؛ لہذا $t = 0$ پر معمول شدہ تعامل موج ہمیشہ کے لئے معمول شدہ رہے گا۔

سوال 1.4: لہذا $t = 0$ پر ایک ذرہ کو درج ذیل تعامل موج ظاہر کرتی ہے جہاں A ، a اور b مستقلات ہیں۔

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

ا. تعامل 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. لہذا $t = 0$ پر کس نقطہ پر ذرہ پایا جانے کا احتمال زیادہ سے زیادہ ہو گا؟

²⁴ طبیعیات کی میدان میں لامتناہی پر تعامل موج ہر صورت صفر کو پہنچتی ہے۔

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۔

ه. متغیر x کی توقعاتی قیمت کیا ہوگی؟

سوال 1.5: 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 2 میں دیکھیں گے کہ کس طرح کا مخفی V^{25} 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۔

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 ہوگی۔ اس سعت سے باہر ذرہ پایا جانے کا احتمال کتنا ہوگا؟

1.5 معیار حرکت

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

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (1.28)$$

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 $\int x |\Psi|^2 dx$ حاصل ہوگی۔ 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 ہوگا۔ حقیقت میں $\langle x \rangle$ ان ذرات کی پیمائشوں کی اوسط ہوگی 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 سگرا²⁶ کو ایک ہی حال Ψ میں لاکر تمام کے مقام کی پیمائش کریں گے۔ ان نتائج کا اوسط $\langle x \rangle$ ہوگا۔ (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

potential²⁵
ensemble²⁶

ذره 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 $\langle x \rangle$ ہوگی۔ (چونکہ ہم متناہی تعداد کے ذرات پر تجربہ کر رہے ہیں لہذا یہ توقع نہیں کیا جاسکتا 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 سکرا پر کیے جانے والے تجربات کی اوسط قیمت ہوگی نہ کہ کسی ایک ذرہ پر بار بار تجربات کی نتائج کی اوسط قیمت۔

چونکہ Ψ وقت اور مقام کا تابع ہے لہذا وقت گزرنے کا ساتھ ساتھ $\langle x \rangle$ تبدیل ہوگا۔ ہمیں اس کی سمتی رفتار جاننے میں دلچسپی ہو سکتی ہے۔ مساوات 1.25 اور 1.28 سے درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(1.29) \quad \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int x \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \int x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx$$

مکمل بالخصص کی مدد سے اس فقرے کی سادہ صورت حاصل کرتے ہیں۔

$$(1.30) \quad \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m} \int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx$$

(میں نے یہاں $\frac{\partial x}{\partial x} = 1$ استعمال کیا اور سرحدی جزو کو اس بنا رد کیا کہ (\pm) لا متناہی پر Ψ کی قیمت 0 ہوگی۔ دوسرے جزو پر دوبارہ مکمل بالخصص لاگو کرتے ہیں۔

$$(1.31) \quad \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

اس نتیجے سے ہم کیا مطلب حاصل کر سکتے ہیں؟ یہ x کی توقعاتی قیمت کی سمتی رفتار ہے ناکہ ذرہ کی سمتی رفتار۔ ابھی تک ہم جو کچھ دیکھ چکے ہیں اس سے ذرہ کی سمتی رفتار دریافت نہیں کی جاسکتی ہے۔ کوانٹم میکانات میں ذرہ کی سمتی رفتار کا مفہوم واضح نہیں ہے۔ اگر پیمائش سے قبل ایک ذرے کا مقام غیر تعین ہو تب اس کی سمتی رفتار بھی غیر تعین ہوگی۔ 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 3 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 ہوگا۔

$$(1.32) \quad \langle v \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt}$$

مساوات 1.31 ہمیں Ψ سے بلا واسطہ $\langle v \rangle$ دیتی ہے۔

روایتی طور پر ہم سمتی رفتار کی بجائے معیار حرکت²⁷ $p = mv$ کے ساتھ کام کرتے ہیں۔

$$(1.33) \quad \langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -i\hbar \int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx$$

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

$$(1.34) \quad \langle x \rangle = \int \Psi^*(x) \Psi dx$$

$$(1.35) \quad \langle p \rangle = \int \Psi^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx$$

کوانٹم میکانیٹ میں مقام کو عامل x اور معیار حرکت کو عامل $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ ظاہر کرتے ہیں۔ کسی بھی توقعاتی قیمت کے حصول کی خاطر ہم موزوں عامل کو Ψ^* اور Ψ کے سچ لکھ کر مکمل 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 جاسکتا ہے۔ مثال کے طور پر حرکی توانائی کو

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

اور زاویائی معیار حرکت کو

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

لکھا جاسکتا 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 $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ پر کر کے حاصل عامل کو Ψ^* اور Ψ کے سچ لپیٹ کر درج ذیل مکمل حاصل کرتے ہیں۔

$$(1.36) \quad \langle Q(x, p) \rangle = \int \Psi^* Q \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx$$

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

$$(1.37) \quad \langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} dx$$

حال Ψ میں ایک ذرہ کی کسی بھی حرکی مقدار کی توقعاتی قیمت مساوات 1.36 سے حاصل ہو گی۔ مساوات 1.34 اور 1.35 اس کی دو مخصوص صورتیں ہیں۔ میں نے کوشش کی ہے کہ جناب بوہر کی شماراتی تشریح کو مد نظر رکھتے ہوئے مساوات 1.36 قابل قبول نظر آئے، اگرچہ، حقیقتاً یہ کلاسیکی میکانیٹ 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 1.6: آپ کیوں مساوات 1.29 کے وسطی فقرہ پر مکمل بالخصوص 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 $\frac{d\langle x \rangle}{dt} = 0$ ہو گا؟

سوال 1.7: $\frac{d\langle p \rangle}{dt}$ کا حساب کریں۔ جواب:

$$(1.38) \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

مساوات 1.32 (مساوات 1.33 کا پہلا حصہ) اور 1.38 مسئلہ اہر نفیسے²⁹ کی مخصوص صورتیں ہیں، جو کہتا ہے کہ توقعاتی قیمتیں کلاسیکی قواعد کو مطمئن کرتے ہیں۔

سوال 1.8: 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 $e^{-iV_i/\hbar}$ ضرب کرتا ہے جو وقت کا تابع جزو ہے۔ اس کا کسی حرکی متغیر کی توقعاتی قیمت پر کیا اثر ہو گا؟

1.6 اصول عدم یقینیت

فرض کریں آپ ایک لمبی رسی کا ایک سر اوپر نیچے ہلا کر موج پیدا کرتے ہیں (شکل 1.7)۔ اب اگر پوچھا جائے کہ یہ موج ٹھیک کہاں پائی جاتی ہے تو آپ غالباً اس کا جواب دینے سے قاصر ہو گئے۔ موج کسی ایک جگہ نہیں بلکہ کئی میٹر لمبائی پر پائی جاتی ہے۔ اس کی بجائے اگر طول موج³⁰ 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 1.8)۔ یہ موج دوری نہیں ہے لہذا 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 بچ 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۔ فوریز تجربہ 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 ڈیے بروگلے³¹

$$(1.39) \quad p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$$

پیش کرتا ہے۔ یوں طول موج میں پھیلاؤ معیار حرکت میں پھیلاؤ 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:

$$(1.40) \quad \sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

Ehrenfest's theorem²⁹
wavelength³⁰
De Broglie formula³¹

جہاں σ_x اور σ_p بالترتیب x اور p کے معیاری انحراف ہیں۔ یہ جناب ہیزنبرگ کا مشہور اصول عدم یقینیت³² ہے۔ (اس کا ثبوت باب 3 میں پیش کیا جائے گا۔ میں نے اس کو یہاں اس لئے متعارف کیا کہ آپ باب 2 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 "پھیلاؤ" 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 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 نہ ہی معیار حرکت ٹھیک سے معلوم ہو۔ مساوات 1.40 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 بلداری لکیر بنا کر، جس میں بہت سارے ابھار اور گڑھے پائے جاتے ہوں اور جس میں کوئی توازن نہ پایا جاتا ہو، σ_x اور σ_p کی قیمتیں جتنی چاہیں بڑھا سکتے ہیں۔

سوال 1.9: ایک ذرہ جس کی کیت 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 شرودنگر 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 1.10: مستقل π کے ہندسی پھیلاؤ کے اولین 25 ہندسوں (3, 1, 4, 1, 5, 9, 0, 0, 0) 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 1.11: گاڑی کی رفتار پیا کی خراب سوئی آزادانہ طور پر حرکت کرتی ہے۔ ہر چھٹکا کے بعد یہ اطراف سے ٹکرا کر 0 اور π زاویوں کے بیچ آکر رک جاتی ہے۔

ا. کثافت احتمال $\rho(\theta)$ کیا ہو گا؟ اشارہ: زاویہ θ اور $(\theta + d\theta)$ کے بیچ سوئی رکنے کا احتمال $\rho(\theta) d\theta$ 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 2

غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات

2.1 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

$$(2.1) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$

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 متغیرات¹ کے طریقے سے حل کیا جاسکتا ہے، جو ماہر طبیعیات کا پسندیدہ طریقہ ہے۔ ہم ایسے حل تلاش کرتے ہیں جنہیں حاصل ضرب

$$(2.2) \quad \Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$$

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 کارآمد ثابت ہوتے ہیں۔ مزید (جیسا کہ علیحدگی متغیرات کیلئے عموماً ہوتا ہے) ہم

separation of variables¹

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

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

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

$$i\hbar \psi \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} \varphi + V\psi \varphi$$

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

$$(2.3) \quad i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V$$

اب بائیں ہاتھ تعامل صرف t کا تابع ہے جبکہ دایاں ہاتھ تعامل 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 بائیں ہاتھ اور دایاں ہاتھ لازمی طور پر ایک دوسرے کے برابر ہیں لہذا t تبدیل کرنے سے بائیں ہاتھ بھی تبدیل نہیں ہو گا۔ اسی طرح صرف x تبدیل کرنے سے بائیں ہاتھ تبدیل نہیں ہو سکتا ہے اور چونکہ دونوں اطراف لازماً ایک دوسرے کے برابر ہیں لہذا 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۔ یو مساوات 2.3 درج ذیل لکھی جاسکتی ہے۔

$$(2.4) \quad i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = E$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar} \varphi \quad \text{یا}$$

اور

$$(2.5) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + V = E$$

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

علیحدگی متغیرات نے ایک جزوی تفرقی مساوات کو دو سادہ تفرقی مساوات (مساوات 2.4 اور 2.4) میں علیحدہ کیا۔ ان میں سے پہلی (مساوات 2.4) کو حل کرنا بہت آسان ہے۔ دونوں اطراف کو dt سے ضرب دیتے ہوئے عمل لیں۔ یوں عمومی حل $Ce^{-iEt/\hbar}$ حاصل ہو گا۔ چونکہ ہم حاصل ضرب $\psi \varphi$ میں دلچسپی رکھتے ہیں لہذا ہم مستقل C کو ψ میں ضم کر سکتے ہیں۔ یوں مساوات 2.4 کا حل درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(2.6) \quad \varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

دوسری (مساوات 2.5) کو غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات² کہتے ہیں۔ پوری طرح مخفی توانائی V جانے بغیر ہم آگے نہیں بڑھ سکتے ہیں۔

اس باب کے باقی حصے میں ہم مختلف سادہ مخفی 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 از خود

$$(2.7) \quad \Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

وقت t کا تابع ہے، کشاف احتمال

$$(2.8) \quad |\Psi(x, t)|^2 = \Psi^*\Psi = \psi^*e^{+iEt/\hbar}\psi e^{-iEt/\hbar} = |\psi(x)|^2$$

وقت کا تابع نہیں ہے؛ تابعت وقت کٹ جاتی ہے۔ یہی کچھ کسی بھی حرکی متغیر کی توقعاتی قیمت کے حساب میں ہو گا۔ مساوات 1.36 تخفیف کے بعد درج ذیل صورت اختیار کرتی ہے۔

$$(2.9) \quad \langle Q(x, p) \rangle = \int \psi^* Q \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right) \psi dx$$

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 مسئلہ 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 لہذا (مساوات 1.33 کے تحت) $\langle p \rangle = 0$ ہو گا۔ ساکن حال میں کبھی بھی کچھ نہیں ہوتا ہے۔

(2) یہ غیر مبہم کل توانائی کے حالات ہوں گے۔ کلاسیکی میکانات میں کل توانائی (حرکی جمع مخفی) کو ہیملٹین³ کہتے ہیں جس کو H سے ظاہر کیا جاتا ہے۔

$$(2.10) \quad H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

اس کا مطابق ہیملٹنی عامل، قواعد و ضوابط کے تحت $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ پر کر کے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$(2.11) \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

یوں غیر تابع وقت شرودنگر مساوات 2.5 درج ذیل روپ اختیار کریگی

$$(2.12) \quad \hat{H}\psi = E\psi$$

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

$$(2.13) \quad \langle H \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi dx = E \int |\psi|^2 dx = E \int |\Psi|^2 dx = E$$

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۔

$$\langle H^2 \rangle = \int \psi^* \hat{H}^2 \psi dx = E^2 \int |\psi|^2 dx = E^2$$

یوں H کی تعمیریت درج ذیل ہو گی۔

$$(2.14) \quad \sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0$$

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 ہو 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 جوڑ⁴ ہو گا۔ جیسا ہم جلد دیکھیں گے، غیر تابع وقت شرودنگر مساوات (مساوات 2.5) لامتناہی تعداد کے حل $(\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots)$ دے گا جہاں ہر ایک حل کے ساتھ ایک علیحدگی مستقل (E_1, E_2, E_3, \dots) منسلک ہو گا لہذا ہر اجازتہ توانائی⁵ کا ایک منفرد تفاعل موج پایا جائے گا۔

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

اب (جیسا کہ آپ خود تصدیق کر سکتے ہیں) تابع وقت شرودنگر مساوات (مساوات 2.1) 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۔

$$(2.15) \quad \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

linear combination⁴
allowed energy⁵

حقیقتاً تابع وقت شروڈنگر مساوات کا ہر حل درج بالا روپ میں لکھا جاسکتا ہے۔ ایسا کرنے کی خاطر ہمیں وہ مخصوص مستقل (c_1, c_2, \dots) تلاش کرنے ہوں گے جن کو استعمال کرتے ہوئے درج بالا حل (مساوات 2.15) ابتدائی شرائط مطمئن کرتا ہو۔ آپ آنے والے حصوں میں دیکھیں گے کہ ہم کس طرح یہ سب کچھ کر پائیں گے۔ باب 3 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 تعامل 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 2.1) حل کریں گے۔ پہلی قدم میں آپ غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات (مساوات 2.5) حل کر کے لا متناہی تعداد کے حلوں کا سلسلہ $(\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots)$ حاصل کریں گے جہاں ہر ایک کی منفرد توانائی (E_1, E_2, E_3, \dots) ہو گی۔ ٹھیک ٹھیک $\Psi(x, 0)$ پر بیٹھنے کی خاطر آپ ان حلوں کا خطی جوڑ لیں گے۔

$$(2.16) \quad \Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

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

$$(2.17) \quad \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t)$$

چونکہ قابل علیحدگی حل

$$(2.18) \quad \Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

کے تمام احتمال اور توقعاتی قیمتیں غیر تابع وقت ہوں گی لہذا یہ از خود ساکن حالات ہوں گے، تاہم عمومی حل (مساوات 2.17) 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 2.1: 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 کہ مستقل c_n اور حالات $\psi_n(x)$ حقیقی ہیں۔) مستقبل وقت t کیلئے تعامل موج $\Psi(x, t)$ کیا ہو گا؟ کثافت احتمال تلاش کریں اور ذرے کی حرکت بیان کریں۔

حل: اس کا پہلا حصہ آسان ہے

$$\Psi(x, t) = c_1 \psi_1(x) e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2(x) e^{-iE_2 t/\hbar}$$

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

$$|\Psi(x, t)|^2 = \left(c_1 \psi_1 e^{iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2 e^{iE_2 t/\hbar} \right) \left(c_1 \psi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2 \psi_2 e^{-iE_2 t/\hbar} \right) \\ = c_1^2 \psi_1^2 + c_2^2 \psi_2^2 + 2c_1 c_2 \psi_1 \psi_2 \cos[(E_2 - E_1)t/\hbar]$$

(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 کشافیت احتمال زاویائی تعدد $\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar} \right)$ سے سائن نمائندگی کرتا ہے لہذا یہ ہرگز ساکن حال نہیں ہو گا۔ لیکن دھیان رہے کہ (ایک دوسرے سے مختلف) توانائیوں کے تفاعلات کے خطی جوڑ نے حرکت پیدا کیا۔ □

سوال 2.1: درج ذیل تین مسائل کا ثبوت پیش کریں۔

ا. قابل علیحدگی حلوں کے لئے علیحدگی مستقل E لازماً حقیقی ہو گا۔ اشارہ: مساوات 2.7 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 جاسکتا ہے (جبکہ تفاعل موج $\Psi(x, t)$ لازماً مخلوط ہوتا ہے)۔ اس کا ہر گز یہ مطلب نہیں ہے کہ غیر تابع شرودنگر مساوات کا ہر حل حقیقی ہو گا؛ بلکہ غیر حقیقی حل پائے جانے کی صورت میں اس حل کو ہمیشہ، ساکن حالات کا (یعنی 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 2.5 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 $V(x)$ بجھے تفاعل ہو یعنی $V(-x) = V(x)$ تب $\psi(x)$ کو ہمیشہ جفت یا طاق لیا جاسکتے ہو۔ اشارہ: اگر کسی مخصوص E کے لئے $\psi(x)$ مساوات 2.5 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 2.2: دکھائیں کہ غیر تابع وقت شرودنگر مساوات کے ہر اس حل کے لئے، جس کو معمول پر لایا جاسکتا 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 2.5 کو درج ذیل روپ میں لکھ کر

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

دکھائیں کہ $E < V_{\text{میر}}$ 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۔

2.2 لامتناہی چکور کنواں

درج ذیل فرض کریں (شکل 2.1)۔

$$(2.19) \quad V(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

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 پلندار 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 (لہذا یہاں ذرہ پایا جانے کا احتمال صفر ہو گا)۔ کنواں کے اندر، جہاں $V = 0$ ہے، غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات (مساوات 2.5) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$(2.20) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E\psi$$

یا

$$(2.21) \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -k^2 \psi, \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

(اس کو یوں لکھتے ہوئے میں خاموشی سے فرض کرتا ہوں کہ $E \geq 0$ ہو گا۔ ہم سوال 2.2 سے جانتے ہیں کہ $E < 0$ سے بات نہیں بنے گی۔) مساوات 2.21 کلاسیکی سادہ ہارمونک مرتعش⁶ کی مساوات ہے جس کا عمومی حل درج ذیل ہو گا

$$(2.22) \quad \psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

جہاں A اور B اختیاری مستقل ہیں۔ ان مستقالات کو مسئلہ کے سرحدی شرائط⁷ تعین کرتے ہیں۔ $\psi(x)$ کے موزوں سرحدی شرائط کیا ہونگے؟ عموماً ψ اور $\frac{d\psi}{dx}$ دونوں استمراری ہونگے، لیکن جہاں مخفی لامتناہی کو پہنچتا ہو وہاں صرف اول الذکر کا اطلاق ہو گا۔ (میں حصہ 2.5 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 کبی ہوئی بات مان لیں۔)

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

$$(2.23) \quad \psi(0) = \psi(a) = 0$$

تاکہ 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 لہذا $B = 0$ اور درج ذیل ہو گا۔

$$(2.24) \quad \psi(x) = A \sin kx$$

یوں $\psi(a) = A \sin ka$ کی بنا پر $A = 0$ 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۔

$$(2.25) \quad ka = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, \dots$$

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

$$(2.26) \quad k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

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:

$$(2.27) \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

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 اجازتی⁸ قیمتوں میں سے ہونا ہو گا۔ مستقل A کی قیمت حاصل کرنے کے لئے ψ کو معمول پر لانا ہو گا:

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

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 شرودنگر مساوات کے حل درج ذیل ہوں گے۔

$$(2.28) \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

میرے قول کو پورا کرتے ہوئے، (ہر مثبت عدد صحیح n کے عوض ایک حل دے کر) غیر تابع وقت شرودنگر 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 حالت⁹ کہلاتا ہے کی توانائی کم سے کم ہے۔ باقی حالات جن کی توانائیاں n^2 کے براہ راست بڑھتی ہیں بیجا¹⁰ حالات کہلاتے ہیں۔ تفاعلات $\psi_n(x)$ چند اہم اور دلچسپ خواص رکھتے ہیں:

allowed⁸
ground state⁹
excited states¹⁰

1. کنواں کے وسط کے لحاظ سے یہ تقاطعات باری باری ہفت اور طاق ہیں۔ ψ_1 ہفت ہے، ψ_2 طاق ہے، ψ_3 ہفت ہے، وغیرہ وغیرہ۔

2. توانائی بڑھاتے ہوئے ہر اگلے حال کے عقدوں¹¹ (عبور صفر) کی تعداد میں ایک (1) کا اضافہ ہو گا۔ (چونکہ آخری نقاط کے صفر کو نہیں گنا جاتا ہے لہذا) 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۔

3. یہ تمام درج ذیل نقطہ نظر سے باہمی عمودوں¹² ہیں جہاں $m \neq n$ ہے۔

$$(2.29) \quad \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = 0$$

ثبوت:

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

دھیان رہے کہ $m = n$ کی صورت میں درج بالا دلیل درست نہیں ہو گا: (کیا آپ بتا سکتے ہیں کہ ایسی صورت میں دلیل کیوں ناقابل قبول ہو گا۔) ایسی صورت میں معمول پر لانے کا عمل ہمیں بتاتا ہے کہ مکمل کی قیمت 1 ہے۔ درحقیقت، عمودیت اور معمول زنی کو ایک فقرے میں سمویا جاسکتا ہے:¹³

$$(2.30) \quad \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \delta_{mn}$$

جہاں δ_{mn} کرونیگر ڈیلٹا¹⁴ کہلاتا ہے ہیں جس کی تعریف درج ذیل ہے۔

$$(2.31) \quad \delta_{mn} = \begin{cases} 0 & m \neq n \\ 1 & m = n \end{cases}$$

ہم کہتے ہیں کہ مذکورہ بالا (تمام) ψ معیاری عمودوں¹⁵ ہیں۔

¹¹ nodes

¹² orthogonal

¹³ یہاں تمام ψ حقیقی ہیں لہذا ψ_m^* پر ڈالنے کی ضرورت نہیں ہے، لیکن مستقل کی استعمال کے نقطہ نظر سے ایسا کرنا ایک اچھی عادت ہے۔

¹⁴ Kronecker delta

¹⁵ orthonormal

4. یہ مکمل¹⁶ ہیں، جس سے مراد ہے کہ کسی بھی دوسرے تفاعل $f(x)$ کو ان کا خطی جوڑ لکھا جاسکتا ہے:

$$(2.32) \quad f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

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 2.32 کو $f(x)$ کا فوریر تسلسل¹⁷ پہچان پائیں گے۔ یہ حقیقت، کہ ہر تفاعل کو فوریر تسلسل کی صورت میں پھیلا کر لکھا جاسکتا ہے، بعض اوقات مسئلہ ڈرشل¹⁸ کہلاتا ہے۔¹⁹

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 2.32 کے دونوں اطراف کو $\psi_m(x)$ سے ضرب دے کر مکمل لیں:

$$(2.33) \quad \int \psi_m(x)^* f(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{mn} = c_m$$

(آپ دیکھ سکتے ہیں کہ کروٹیکر 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 پھیلاؤ کے n ویں جزو کا عددی سر درج ذیل ہو گا۔²⁰

$$(2.34) \quad c_n = \int \psi_n(x)^* f(x) dx$$

درج بالا چار خواص انتہائی طاقتور ہیں جو صرف لامتناہی چکور کنواں کے لیے مخصوص نہیں ہیں۔ پہلا خواص ہر اس صورت میں کارآمد ہو گا جب مخفیہ تشاکلی ہو؛ دوسرا، مخفیہ کی شکل و صورت سے قطع نظر، ایک عالمگیر خواص ہے۔ عمودیت بھی کافی عمومی خاصیت ہے، جس کا ثبوت میں باب 3 میں پیش کروں گا۔ ان تمام مخفیہ کے لئے جن کو آپ کا (مکمل) سامنا ہو سکتا ہے کے لئے مکملیت کارآمد ہو گی، لیکن اس کا ثبوت کافی لمبا اور پیچیدہ ہے؛ جس کی بنا عموماً ماہر طبیعیات یہ ثبوت دیکھے بغیر، اس کو مان لیتے ہیں۔

لامتناہی چکور کنواں کے ساکن حال (مساوات 2.18) درج ذیل ہوں گے۔

$$(2.35) \quad \Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t}$$

¹⁶complete

¹⁷Fourier series

¹⁸Dirichlet's theorem

¹⁹تفاعل $f(x)$ میں متناہی تعداد کی عدم استمرار (چھلانگ) پائے جاسکتی ہیں۔

²⁰آپ یہاں نقلی متغیر کو m یا n یا کوئی تیسرا حرف لے سکتے ہیں (بس انتہائی 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۔

میں نے دعویٰ کیا (مساوات 2.17) کہ تابع وقت شرودنگر مساوات کا عمومی ترین حل، ساکن حالات کا خطی جوڑ ہو گا۔

$$(2.36) \quad \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t}$$

(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 فوریزر تسلسل سے حاصل کیا جاسکتا ہے:

$$(2.37) \quad c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \Psi(x, 0) dx$$

آپ نے دیکھا: دی گئی ابتدائی تفاعل موج $\Psi(x, 0)$ کے لئے ہم سب سے پہلے پھیلاؤ کے عددی سروں c_n کو مساوات 2.37 سے حاصل کرتے ہیں۔ اس کے بعد انہیں مساوات 2.36 میں پر کر $\Psi(x, t)$ حاصل کرتے ہیں۔ تفاعل موج جانتے ہوئے دلچسپی کی کسی بھی حرکی مقدار کا حساب، باب 1 میں مستقل تراکیب استعمال کرتے ہوئے، کیا جاسکتا ہے۔ یہی ترکیب کسی بھی مخفیہ کے لیے کارآمد ہو گا؛ صرف ψ کی قیمتیں اور اجازتی توانائیاں یہاں سے مختلف ہوں گی۔

مثال 2.2: لامتناہی چکور کنواں میں ایک ذرے کا ابتدائی تفاعل موج درج ذیل ہے جہاں A ایک مستقل ہے (شکل 2.3)۔

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

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

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

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

A تعین کرتے ہیں:

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

مساوات 2.37 کے تحت n والے عددی سر درج ذیل ہو گا۔

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

یوں درج ذیل ہو گا (مساوات 2.36)۔

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

□

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 ناکہ 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 3 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

$$(2.38) \quad \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1$$

جس کا ثبوت Ψ کی عمود زنی سے حاصل ہو گا (چونکہ تمام c_n غیر تابع وقت ہیں لہذا 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)۔

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

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

مزید، توانائی کی توقعاتی قیمت لازماً درج ذیل ہو گی

$$(2.39) \quad \langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n$$

جس کی بلا واسطہ تصدیق کی جاسکتی ہے: غیر تابع وقت شرڈنگر مساوات کہتی ہے

$$(2.40) \quad H\psi_n = E_n\psi_n$$

لہذا درج ذیل ہو گا۔

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \int \Psi^* H \Psi dx = \int \left(\sum c_m \psi_m \right)^* H \left(\sum c_n \psi_n \right) dx \\ &= \sum \sum c_m^* c_n E_n \int \psi_m^* \psi_n dx = \sum |c_n|^2 E_n \end{aligned}$$

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 میکانیٹ میں **بہا توانائی**²¹ کی یہ ایک مثال ہے۔

مثال 2.3: ہم نے دیکھا کہ مثال 2.2 میں ابتدائی تفاعل موج (شکل 2.3) زمینی حال ψ_1 (شکل 2.2) کے ساتھ قریبی مشابہت رکھتا ہے۔ یوں ہم توقع کرتے گے کہ $|c_1|^2$ غالب ہو گا۔ یقیناً ایسا ہی ہے۔

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

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 2.3: دکھائیں کہ لامتناہی چکور کنواں کے لئے $E = 0$ یا $E < 0$ کی صورت میں غیر تابلع وقت شرودنگر 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 شرودنگر مساوات کو صریحاً حل کرتے ہوئے دکھائیں کہ آپ سرحدی شرائط پر پورا نہیں اتر سکتے ہیں۔)

سوال 2.4: لامتناہی چکور کنواں کے n وی 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 غیر یقینیت مطمئن ہوتا ہے۔ کونسا حال غیر یقینیت کی حد کے قریب ترین ہو گا؟

سوال 2.5: 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 2.1 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 ہو گی؟ ارتعاش کا جیٹ کیا ہو گا؟ (اگر آپ کا جیٹ $\frac{a}{2}$ سے زیادہ ہو تب آپ کو جیل بھیجنے کی ضرورت ہو گی۔)

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

ہ۔ 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 2.6: 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 2.17 میں عددی سروں کے اضافی زاویائی مستقل اہمیت کے حامل ہیں۔ مثال کے طور پر ہم سوال 2.5 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۔ $\Psi(x, t)$ ، $|\Psi(x, t)|^2$ 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 2.7: 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 2.8: 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 2.9: لمحہ $t = 0$ پر مثال 2.2 کے تفاعل موج کیلئے H کی توقعاتی قیمت مکمل کے ذریعہ حاصل کریں۔

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

مثال 2.3 میں مساوات 2.39 کی مدد سے حاصل کردہ نتیجے کے ساتھ موازنہ کریں۔ دھیان رہے کیونکہ H غیر تابع وقت ہے لہذا $t = 0$ لینے سے نتیجے پر کوئی اثر نہیں ہو گا۔

2.3 ہارمونی مرتعش

کلاسیکی ہارمونی مرتعش ایک پلک دار اسپرنگ جس کا مقیاس پلک k ہو اور کیت m پر مشتمل ہوتا ہے۔ کیت کی حرکت قانون 22

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

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

$$(2.41) \quad \omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}$$

ارتعاش کا (زاویائی) تعدد ہے۔ مخفی توانائی

$$(2.42) \quad V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

ہو گی جس کی ترسیم قطع مکانی 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 مختف، مقامی کم سے کم نقطہ کی پڑوس میں تخمیناً قطع مکانی ہو گا (شکل 2.4)۔ مخفی توانائی $V(x)$ کے کم سے کم نقطہ x_0 کے لحاظ سے $V(x)$ کو ٹیلر تسلسل 23 کے لحاظ سے پھیلا کر

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

اس سے $V(x_0)$ مخفی کر کے ہم $V(x)$ سے کوئی بھی مستقل بغیر خطر و فکر مخفی 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 ہو گئے) درج ذیل حاصل کرتے ہیں

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

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

Hooke's law²²
Taylor series²³

کوانٹم میکانیٹ میں ہمیں محفّیہ

$$(2.43) \quad V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

کے لیے شرودنگر مساوات حل کرنی ہوگی (جہاں روایتی طور پر مقیاس پک کی جگہ کلاسیکی تعدد (مساوات 2.41) استعمال کی جاتی ہے)۔ جیسا کہ ہم دیکھ چکے ہیں، اتنا کافی ہو گا کہ ہم غیر متابع وقت شرودنگر مساوات

$$(2.44) \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi$$

حل کریں۔ اس مسئلے کو حل کرنے کے لیے دو بالکل مختلف طریقے اپنائے جاتے ہیں۔ پہلی میں تفرقی مساوات کو "طاقت کے بل بوتے پر" طاقتی تسلسل²⁴ کے ذریعہ حل کرنے کی ترکیب استعمال کی جاتی ہے، جو دیگر محفّیہ کے لیے بھی کارآمد ثابت ہوتا ہے (اور جسے استعمال کرتے ہوئے ہم باب 4 میں کولمب محفّیہ کے لیے حل تلاش کریں گے)۔ دوسری ترکیب ایک شیطانی الجبرائی تکنیک ہے جس میں عاملیہ سیریز 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 آپ کو یہ ترکیب سیکھنی ہوگی۔

2.3.1 الجبرائی ترکیب

ہم مساوات 2.44 کو زیادہ معنی خیز روپ میں لکھ کر ابتدا کرتے ہیں

$$(2.45) \quad \frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2]\psi = E\psi$$

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

$$(2.46) \quad H = \frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2]$$

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

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

البتہ یہاں بات اتنی سادہ نہیں ہے چونکہ p اور x عاملین ہیں اور عاملین عموماً قابل تبادلہ 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

$$(2.47) \quad a_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp ip + m\omega x)$$

(جہاں توسین 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 تبادلہ کار²⁵ کہتے ہیں اور جو ان کی آپس میں قابل تبادل نہ ہونے کی پیمائش ہے۔ عمومی طور پر عامل A اور عامل B کا تبادلہ کار (جسے چکوری قوسین میں لکھا ہے) درج ذیل ہو گا۔

$$(2.48) \quad [A, B] \equiv AB - BA$$

اس علاقیت کے تحت درج ذیل ہو گا۔

$$(2.49) \quad a_- a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} [p^2 + (m\omega x)^2] - \frac{i}{2\hbar} [x, p]$$

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

$$(2.50) \quad [x, p]f(x) = \left[x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (f) - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} (xf) \right] = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{df}{dx} - x \frac{df}{dx} - f \right) = -i\hbar f(x)$$

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

$$(2.51) \quad [x, p] = i\hbar$$

یہ خوبصورت نتیجہ جو بار بار سامنے آتا ہے باضابطہ تبادلہ رشتہ²⁶ کہلاتا ہے۔

اسے استعمال سے مساوات 2.49 درج ذیل روپ

$$(2.52) \quad a_- a_+ = \frac{1}{\hbar\omega} H + \frac{1}{2}$$

یا

$$(2.53) \quad H = \hbar\omega \left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \right)$$

²⁵commutator
²⁶canonical commutation relation

اختیار کرتی ہے۔ آپ نے دیکھا کہ ہیمیلٹنی کو ٹھیک اجزائے ضربی کی صورت میں نہیں لکھا جاسکتا 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۔

$$(2.54) \quad a_+ a_- = \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2}$$

بالخصوص درج ذیل ہو گا۔

$$(2.55) \quad [a_-, a_+] = 1$$

یوں ہیمیلٹنی کو درج ذیل بھی لکھا جاسکتا ہے۔

$$(2.56) \quad H = \hbar\omega \left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \right)$$

ہارمونی مرتعش کی شرودنگر مساوات کو a_{\pm} کی صورت میں درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(2.57) \quad \hbar\omega \left(a_{\pm} a_{\mp} \pm \frac{1}{2} \right) = E\psi$$

(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 شرودنگر مساوات کو ψ مطمئن کرتا ہو ($H\psi = E\psi$) تب توانائی $H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$ کی شرودنگر مساوات کو $a_+\psi$ مطمئن کرے گا:

ثبوت:

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

(میں نے دوسری لکیر میں مساوات 2.55 استعمال کرتے ہوئے $a_- a_+ + 1$ 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۔

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

یوں ہم نے ایک ایسی خودکار ترکیب دریافت کر لی ہے جس سے، کسی ایک حل کو جانتے ہوئے، بالائی اور زیریں توانائی کے نئے حل دریافت کیے جاسکتے ہیں۔ چونکہ a_{\pm} کے ذریعے ہم توانائی میں اوپر چڑھ یا نیچے اتر سکتے ہیں لہذا انہیں ہم **عاملین سیدھی**²⁷ پکارتے ہیں: a_+ **عامل**

رفع²⁸ اور a_- عامل تقلیل²⁹ ہے۔ حالات کی "سیڑھی" کو شکل 2.5 میں دکھایا گیا ہے۔

ذرا کیے! 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 جاسکتی ہے کہ یہ معمول پر لانے کے قابل بھی ہو گا؛ یہ صفر ہو سکتا ہے یا اس کا مربعی عمل لاتناہی ہو سکتا ہے۔ عملاً اول الذکر ہو گا: سیڑھی کے سب سے نچلے پائے (جس کو ہم ψ_0 کہتے ہیں) پر درج ذیل ہو گا۔

$$(2.58) \quad a_- \psi_0 = 0$$

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

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

سے تفرقی مساوات

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

لکھی جاسکتی ہے جسے باآسانی حل کیا جاسکتا ہے:

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

(C مستقل ہے۔) لہذا درج ذیل ہو گا۔

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

ہم اس کو یں معمول پر لاتے ہیں:

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

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

$$(2.59) \quad \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

raising operator²⁸
lowering operator²⁹

اس حال کی توانائی دریافت کرنے کی خاطر ہم اس کو (مساوات 2.57 روپ کی) شروڈنگر مساوات میں پر کر کے

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

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

$$(2.60) \quad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

سیڑھی کے نیچلا پایہ (جو کوانٹم مرتعش کا زمینی حال ہے) پر پیر رکھ کر، بار بار عامل رفعت استعمال کر کے ہیجان حالات دریافت کیے جاسکتے ہیں³⁰ جہاں ہر قدم پر توانائی میں $\hbar\omega$ کا اضافہ ہو گا۔

$$(2.61) \quad \psi_n(x) = A_n(a_+)^n\psi_0(x), \quad E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

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

مثال 2.4: ہارمونی مرتعش کا پہلا ہیجان حال تلاش کریں۔

حل: ہم مساوات 2.61 استعمال کرتے ہیں۔

$$(2.62) \quad \begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 a_+ \psi_0 = \frac{A_1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \\ &= A_1 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \end{aligned}$$

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

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

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 2.61 اپنا کام خوش اسلوبی سے کرتی ہے۔ □

³⁰ ہارمونی مرتعش کی صورت میں رواپتی 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 2.17 طرز کی مساواتوں میں مجموعہ کی زیریں حد کو بھی تبدیل کیا جائے گا۔

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

$$(2.63) \quad a_+ \psi_n = c_n \psi_{n+1}, \quad a_- \psi_n = d_n \psi_{n-1}$$

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

$$(2.64) \quad \int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_{\pm} g) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp} f)^* g dx$$

(خطی الجبرا کی زبان میں a_{\mp} اور a_{\pm} ایک دوسرے کے ہر مشق جوڑی دار³¹ ہیں۔)

ثبوت:

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

مکمل بالخصوص کے ذریعے $\int f^* \left(\frac{dg}{dx} \right) dx$ سے $-\int \left(\frac{df}{dx} \right)^* g dx$ حاصل ہو گا (جہاں $\pm \infty$ پر $f(x)$ اور $g(x)$ کی قیمتیں صفر تک پہنچنے کی بنا سرحدی اجزاء صفر ہوں گے) لہذا

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

اور بالخصوص درج ذیل ہو گا۔

$$\int_{-\infty}^{\infty} (a_{\pm} \psi_n)^* (a_{\pm} \psi_n) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp} a_{\pm} \psi_n)^* \psi_n dx$$

مساوات 2.57 اور مساوات 2.61 استعمال کرتے ہوئے

$$(2.65) \quad a_+ a_- \psi_n = n \psi_n, \quad a_- a_+ \psi_n = (n+1) \psi_n$$

ہو گا لہذا درج ذیل ہوں گے۔

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

³¹ Hermitian conjugate

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

$$(2.66) \quad a_+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}, \quad a_- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}$$

اس طرح درج ذیل ہوں گے۔

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

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

$$(2.67) \quad \psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a_+)^n \psi_0$$

اس کے تحت مساوات 2.61 میں مستقل معمول زنی $A_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}$ ہو گا۔ (بالخصوص $A_1 = 1$ ہو گا جو مثال 2.4 میں ہمارے نتیجے کی تصدیق کرتا ہے۔)

لائتناہی چکور کنواں کے ساکن حالات کی طرح ہارمونی مرتعش کے ساکن حالات ایک دوسرے کے عمودی ہیں۔

$$(2.68) \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}$$

ہم ایک بار مساوات 2.65 اور دو بار مساوات 2.64 استعمال کر کے پہلے a_+ اور بعد میں a_- اپنی جگہ سے ہلا کر اس کا ثبوت پیش کر سکتے ہیں۔

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

جب تک $m = n$ نہ ہو $\int \psi_m^* \psi_n dx$ لازماً صفر ہو گا۔ معیاری عمودی ہونے کا مطلب ہے کہ ہم $\psi(x, 0)$ کو ساکن حالات کا خطی جوڑ (مساوات 2.16) لکھ کر خطی جوڑ کے عددی سر مساوات 2.34 سے حاصل کر سکتے ہیں اور پیمائش سے توانائی کی قیمت E_n حاصل ہونے کا احتمال $|c_n|^2$ ہو گا۔

مثال 2.5: ہارمونی مرتعش کے n ویں حال کی مخفی توانائی کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔

حل:

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

اس قسم کے کملات 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 2.47 میں پیش کی گئی تعریفات استعمال کرتے ہوئے عاملین رفعت اور تقلیل کی روپ میں لکھیں:

$$(2.69) \quad x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_+ + a_-); \quad p = i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (a_+ - a_-)$$

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

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

لہذا درج ذیل ہو گا۔

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

اب (مساوے معمول زنی کے) $(a_+)^2 \psi_n$ تقابل ψ_{n+2} کو ظاہر کرتا ہے جو ψ_n کو عمودی ہے۔ یہی کچھ $(a_-)^2 \psi_n$ کے بارے میں بھی کہا جاسکتا ہے جو ψ_{n-2} کا راست متناسب ہے۔ یوں یہ اجزاء خارج ہو جاتے ہیں، اور ہم مساوات 2.65 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 حرکی توانائی ہے)۔ جیسا ہم بعد میں دیکھیں گے یہ ہارمونی مرتعش کی ایک مخصوص خاصیت ہے۔ □

سوال 2.10:

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 مکمل لے کر صریحاً کریں۔ اشارہ: تفاعلات کی جفت پن اور طاق پن کو بروئے کار لاتے ہوئے حقیقتاً صرف ایک مکمل حل کرنا ہو گا۔

سوال 2.11:

ا. حالات ψ_0 (مساوات 2.59) اور ψ_1 (مساوات 2.62) کے لئے صریح کھلات لے کر $\langle x \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ اور $\langle p^2 \rangle$ کی قیمتیں دریافت کریں۔ تبصرہ: ہارمونی مرتعش کے مسائل میں متغیر $\xi \equiv \sqrt{m\omega/\hbar}x$ اور مستقل $\alpha \equiv (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$ متعارف کرتے ہوئے مسئلہ سادہ صورت اختیار کرتا ہے۔

ب. عدم یقینیت کے حصول کو ان حالات کے لئے پرکھیں۔

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

سوال 2.12: ہارمونی مرتعش کے n ویں ساکن حال کے لئے مثال 2.5 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 2.13: ہارمونی مرتعش مخفی قوہ میں ایک ذرہ درج ذیل حال سے ابتداء کرتا ہے۔

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

ا. A تلاش کریں۔

ب. $\Psi(x, t)$ اور $|\Psi(x, t)|^2$ 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 اہرنفست (مساوات 1.38) 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 2.14: ہارمونی مرتعش کے زمینی حال میں ایک ذرہ کلاسیکی تعدد ω پر ارتعاش پذیر ہے۔ ایک دم مقیاس پلک 4 گنا ہو جاتا ہے لہذا $\omega' = 2\omega$ 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؟

2.3.2 تحلیلی طریقہ کار

ہم اب ہارمونی مرتعش کی شرودنگر مساوات کو دوبارہ لوٹ کر

$$(2.70) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi = E \psi$$

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

$$(2.71) \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

شرودنگر مساوات اب درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$(2.72) \quad \frac{d^2 \psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K) \psi$$

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

$$(2.73) \quad K \equiv \frac{2E}{\hbar \omega}$$

ہم نے مساوات 2.72 کو حل کرنا ہو گا۔ ایسا کرتے ہوئے ہمیں K اور 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 لہذا مساوات 2.72 درج ذیل روپ اختیار کرے گی

$$(2.74) \quad \frac{d^2 \psi}{d\xi^2} \approx \xi^2 \psi$$

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

$$(2.75) \quad \psi(\xi) \approx A e^{-\xi^2/2} + B e^{+\xi^2/2}$$

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

$$(2.76) \quad \psi(\xi) \rightarrow () e^{-\xi^2/2} \quad (\xi \text{ کی بڑی قیمت کے لئے})$$

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

$$(2.77) \quad \psi(\xi) = h(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

اور توقع کرنی چاہیے کہ جو کچھ باقی رہ جائے، $h(\xi)$ ، اس کی صورت $\psi(\xi)$ سے سادہ ہو۔³² ہم مساوات 2.77 کے تفرقات

$$\frac{d\psi}{d\xi} = \left(\frac{dh}{d\xi} - \xi h \right) e^{-\xi^2/2}$$

اور

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = \left(\frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dh}{d\xi} + (\xi^2 - 1)h \right) e^{-\xi^2/2}$$

لیتے ہیں لہذا شروڈنگر مساوات (مساوات 2.72) درج ذیل صورت اختیار کرتی ہے۔

$$(2.78) \quad \frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dh}{d\xi} + (K - 1)h = 0$$

ہم ترکیبے فروبنیوس³³ استعمال کرتے ہوئے مساوات 2.78 کا حل ξ کے طاقتی تسلسل کی صورت میں حاصل کرتے ہیں۔

$$(2.79) \quad h(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j$$

اس تسلسل کے جزو در جزو تفرقات

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

اور

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

لیتے ہیں۔ انہیں مساوات 2.78 میں پر کر کہ درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$(2.80) \quad \sum_{j=0}^{\infty} [(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (K-1)a_j]\xi^j = 0$$

طاقتی تسلسل پھیلاؤ کے یکسانی کی بنا پر ξ کے ہر طاقت کا عددی سر صفر ہو گا:

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

³² اگرچہ ہم نے مساوات 2.77 لکھتے ہوئے تینوں سے کام لیا، اس کے بعد باقی تمام بالکل ٹھیک ٹھیک ہے۔ تفرقی مساوات کے طاقتی تسلسل حل میں متقاربی جزو کا پھیلنا عموماً پہلا قدم ہوتا ہے۔
Frobenius method³³

لذا درج ذیل ہو گا۔

$$(2.81) \quad a_{j+2} = \frac{(2j+1-K)}{(j+1)(j+2)} a_j$$

یہ کلیہ ³⁴توالی شروع ونگر مساوات کا مکمل مبدل ہے جو a_0 سے ابتداء کرتے ہوئے تمام جفت عددی سر

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

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

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

ہم مکمل حل کو درج ذیل لکھتے ہیں

$$(2.82) \quad h(\xi) = h_{\text{جفت}}(\xi) + h_{\text{طاق}}(\xi)$$

جہاں

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

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

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

طاق تقابل ہے جو a_1 پر منحصر ہے۔ مساوات 2.81 دو اختیاری مستقلات a_0 اور a_1 کی صورت میں ξ تعین کرتی ہے، جیسا ہم دو درجی تفرقی مساوات کے حل سے توقع کرتے ہیں۔

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

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

جس کا تخمینی حل

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

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

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

اور اب اگر h کی قیمت $e^{\xi^2/2}$ کے لحاظ سے بڑھے تب ψ (جس کو ہم حاصل کرنا چاہتے ہیں) $e^{\xi^2/2}$ (مساوات 2.77) کے لحاظ سے بڑھے گا جو وہی متقاربہ روپ ہے جو ہم نہیں چاہتے۔ اس مشکل سے نکلنے کا ایک ہی طریقہ ہے۔ معمول پر لانے کے قابل حل کے لیے 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 جفت h تسلسل یا طاق h 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 2.81 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 2.73 کو دیکھیے) توانائی ہر صورت درج ذیل ہو گی۔

$$(2.83) \quad E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

یوں ہم ایک مختلف طریقہ کار سے مساوات 2.61 میں الجبرائی طریقہ سے حاصل کردہ بنیادی کوانٹائی شرط دوبارہ حاصل کرتے ہیں۔ ابتدائی طور پر یہ حیرانی کی بات نظر آتی ہے کہ توانائی کی کوانٹائی، 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 لیے مساوات 2.70 کے حل ممکن ہیں (درحقیقت ہر E کے لیے اس کے دو خطی غیر تابع حل پائے جاتے ہیں)۔ تاہم ان میں سے زیادہ تر حل، بڑی x پر، بے قابو قوت نمائی بڑھتے ہیں جس کی بنا یہ معمول پر لانے کے قابل نہیں رہتے۔ مثال کے طور پر فرض کریں ہم E کی کسی ایک اجازتی قیمت سے معمولی کم قیمت (مثلاً $0.49 \hbar \omega$) لے کر حل کو ترسیم کرتے ہیں (شکل 2.6a) اس کی دم لانتناہی 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 لانتناہی کی طرف بڑھے گی (شکل 2.6b) 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 لانتناہی کی طرف بڑھے گی۔ ٹھیک 0.50 پر اس کی دم صفر کو پہنچ کر معمول زنی کے قابل حل دے گی۔

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

$$(2.84) \quad a_{j+2} = \frac{-2(n-j)}{(j+1)(j+2)} a_j$$

اگر $n = 0$ ہو تب تسلسل میں ایک جزو پایا جائے گا (ہمیں $a_1 = 0$ لینا ہو گا تاکہ طاق h خارج ہوں، اور مساوات 2.84 میں $a_2 = 0$ سے $j = 0$ حاصل ہوتا ہے)۔

$$h_0(\xi) = a_0$$

لہذا

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

جدول 2.1: ابتدائی چند ہرمانٹ کثیر رکنیاں $H_n(\xi)$

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

(جو ماسوائے معمول زنی، مساوات 2.59 دوبارہ دیتی ہے)۔ اسی طرح ہم $n = 1$ کے لیے $a_0 = 0$ لیں گے³⁵، اور مساوات 2.84 میں $j = 1$ سے $a_3 = 0$ حاصل ہو گا، لہذا

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

اور

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

ہو گا (جو مساوات 2.62 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 2.10 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 ہرمانٹ کثیر رکنی³⁶ $H_n(\xi)$ ہیں³⁷۔ جدول 2.1 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 شدہ³⁸ ساکن حالات درج ذیل ہوں گے

$$(2.85) \quad \psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

جو (یقیناً) مساوات 2.67 میں الجبرائی طریقے سے حاصل نتائج کے متماثل ہیں۔

³⁵ دھیان رہے کہ n کی ہر ایک قیمت کے لئے عددی سروں a_j کا ایک منفرد سلسلہ پایا جاتا ہے۔

³⁶ Hermite polynomials

³⁷ ہرمانٹ کثیر رکنیوں پر سوال 2.17 میں مزید غور کیا گیا ہے۔

³⁸ میں یہاں معمول زنی مستطالات حاصل نہیں کروں گا۔

شکل 2.7 (a) میں چند ابتدائی n کے لیے $\psi_n(x)$ ترسیم کیے گئے ہیں۔ کوانٹم مرتعش حیران کن حد تک کلاسیکی مرتعش سے مختلف ہے۔ نہ صرف اس کی توانائیاں کوانٹائزڈ ہیں بلکہ اس کی موضعی تقسیم کے بھی عجیب خواص پائے جاتے ہیں۔ مثلاً کلاسیکی طور پر اجازتی سعت کے باہر (یعنی توانائی کے کلاسیکی حیطہ سے زیادہ x) ذرہ پایا جانے کا احتمال غیر صفر ہے (سوال 2.15 دیکھیں) اور تمام طاق حالات میں عین وسط پر ذرہ پائے جانے کا احتمال صفر ہے۔ کلاسیکی اور کوانٹائی صورتوں میں مشابہت صرف n کی بڑی قیمتوں پر پائی جاتی ہے۔ میں نے شکل 2.7b میں کلاسیکی موضعی تقسیم کو $n = 100$ کے کوانٹائی موضعی تقسیم پر ترسیم کیا ہے۔ انہیں ہموار کرنے سے یہ ایک دوسرے پر اچھی طرح میٹھتے ہیں (البتہ کلاسیکی صورت میں ہم ایک ارتعاش میں وقت کے لحاظ سے مقام کی تقسیم کی بات کرتے ہیں جبکہ کوانٹائی صورت میں ہم یکساں تیار کردہ حالات کے ایک سکرا کی تقسیم کی بات کرتے ہیں)۔³⁹

سوال 2.15: ہارمونی مرتعش کے زمینی حال میں کلاسیکی اجازتی خطے کے باہر ایک ذرہ کی موجودگی کا احتمال (تین یا معنی ہندسوں تک) تلاش کریں۔ اشارہ: کلاسیکی طور پر ایک مرتعش کی توانائی $E = (1/2)ka^2 = (1/2)m\omega^2a^2$ ہوگی جہاں a حیطہ ہے۔ یوں توانائی E کے مرتعش کا "کلاسیکی اجازتی خطہ" $-\sqrt{2E/m\omega^2}$ تا $+\sqrt{2E/m\omega^2}$ ہوگا۔ مکمل کی قیمت "عمومی تقسیم" یا "تفاعل خلل" کی جدول سے دیکھیں۔

سوال 2.16: کلیہ تولی (مساوات 2.84) استعمال کر کے $H_5(\xi)$ 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 2.17: اس سوال میں ہم ہرمانٹ کثیر رکنی کے چند اہم مسائل، جن کا ثبوت پیش نہیں کیا جائے گا، پر غور کرتے ہیں۔

ا. کلیہ روڈریگیز⁴⁰ درج ذیل کہتا ہے۔

$$(2.86) \quad H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

اس کو استعمال کر کے H_3 اور H_4 اخذ کریں۔

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

$$(2.87) \quad H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi)$$

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

ج. اگر آپ n رتبہ کثیر رکنی کا تفرق لیں تو آپکو $n - 1$ رتبہ کثیر رکنی حاصل ہوگی۔ ہرمانٹ کثیر رکنیوں کے لیے درج ذیل ہوگا

$$(2.88) \quad \frac{dH_n}{d\xi} = 2n H_{n-1}(\xi)$$

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

³⁹ کلاسیکی تقسیم کو ایک جیسی توانائی کے متعدد مرتعشات، جن کے نقاط آغاز بلا منصوبہ ہوں، کا مگر تصور کرتے ہوئے یہ مماثل زیادہ بہتر ہوگا۔

⁴⁰ Rodrigues formula

د. پیدا کار تفاعل⁴¹ $e^{-z^2+2z\xi}$ کا $z = 0$ پر n واں تفرق $H_n(\xi)$ ہو گا، یا دوسرے لفظوں میں، درج ذیل تفاعل کے ٹیلر پھیلاؤ میں یہ $z^n/n!$ کا عددی سر ہو گا۔

$$(2.89) \quad e^{-z^2+2z\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(\xi)$$

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

2.4 آزاد ذرہ

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

$$(2.90) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E \psi$$

یا ذیل ہے۔

$$(2.91) \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -k^2 \psi \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

یہاں تک یہ لامتناہی چکور کنواں (مساوات 2.21) کی مانند ہے جہاں (بھی) مخفی قوہ صفر ہے؛ البتہ اس بار، میں عمومی مساوات کو قوت نما (ناکہ) سائن اور کوسائن کی صورت میں لکھنا چاہوں گا، جس کی وجہ آپ پر جلد عیاں ہو گی۔

$$(2.92) \quad \psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

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؛ لہذا 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۔

$$(2.93) \quad \Psi(x, t) = A e^{ik(x - \frac{\hbar k}{2m} t)} + B e^{-ik(x + \frac{\hbar k}{2m} t)}$$

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 دلیل⁴² کی ایک اٹل قیمت کا یوں مطابقتی ہو گا کہ درج ذیل ہو۔

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

generating function⁴¹
argument⁴²

چونکہ موج پر تمام نقاط ایک جیسی سمتی رفتار سے حرکت کرتے ہیں لہذا موج کی شکل و صورت حرکت کے ساتھ تبدیل نہیں ہوگی۔ یوں مساوات 2.93 کا پہلا جزو دائیں رخ حرکت کرتی موج کو ظاہر کرتا ہے جبکہ اس کا دوسرا جزو بائیں رخ حرکت کرتی (یعنی ہی توانائی کی) موج کو ظاہر کرتا ہے۔ چونکہ ان میں فرق صرف k کی علامت کا ہے لہذا انہیں درج ذیل بھی لکھا جاسکتا ہے

$$(2.94) \quad \Psi_k(x, t) = A e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)}$$

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

$$(2.95) \quad k \equiv \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \begin{cases} k > 0 \Rightarrow \text{دائیں رخ حرکت} \\ k < 0 \Rightarrow \text{بائیں رخ حرکت} \end{cases}$$

صاف ظاہر ہے کہ آزاد ذرے کے "ساکن حالات" حرکت کرتی امواج کو ظاہر کرتے ہیں، جن کی طول موج $\lambda = 2\pi/|k|$ ہوگا، اور کلیہ ڈی بروگلی (مساوات 1.39) کے تحت ان کا معیار حرکت درج ذیل ہوگا۔

$$(2.96) \quad p = \hbar k$$

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

$$(2.97) \quad v_{\text{کوانٹی}} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$$

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

$$(2.98) \quad v_{\text{کلاسیکی}} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{\text{کوانٹی}}$$

ظاہری طور پر کوانٹم میکانی تعامل 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 تعامل موج معمول پر لانے کے قابل نہیں ہے۔

$$(2.99) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^* \Psi_k dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = |A|^2 (\infty)$$

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 جاسکتا 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 شرودنگر مساوات کا عمومی حل اب بھی قابل قابل علیحدگی حلوں کا خطی جوڑ ہوگا (صرف اتنا ہے کہ غیر مسلسل اشاریہ n پر مجموعہ کی بجائے اب یہ استمراری متغیر k کے لحاظ سے مکمل ہوگا)۔

$$(2.100) \quad \Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t)} dk$$

(نم $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ کو اپنی آسانی کیلئے مکمل کے باہر نکالنے ہیں؛ مساوات 2.17 میں عددی سر c_n کی جگہ یہاں $(1/\sqrt{2\pi})\phi(k) dk$ کر دیا کرتا ہے۔) اب اس تفاعل موج کو (موزوں $\phi(k)$ کیلئے) معمول پر لایا جاسکتا ہے۔ تاہم اس میں k کی قیمتوں کی سعت پائی جائے گی، لہذا توانائیوں اور رفتاروں کی بھی سعت پائی جائیں گی۔ ہم اس کو موج اکٹھ⁴³ 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 2.100 کی صورت اختیار کرتا ہے۔ اب سوال یہ پیدا ہوتا ہے کہ ابتدائی تفاعل موج

$$(2.101) \quad \Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk$$

پر پورا اترتا ہوا $\psi(k)$ کیسے تعین کیا جائے؟ یہ فوریر تجزیہ کا کلاسیکی مسئلہ ہے جس کا جواب مسئلہ پلانشرال⁴⁵:

$$(2.102) \quad f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} dk \Leftrightarrow F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

پیش کرتا ہے (سوال 2.20 دیکھیں)۔ $F(k)$ کو $f(x)$ کا فوریر بدل⁴⁶ کہا جاتا ہے جبکہ $f(x)$ کو $F(k)$ کا الٹے فوریر بدل⁴⁷ کہتے ہیں (ان دونوں میں صرف قوت نما کی علامت کا فرق پایا جاتا ہے)۔ ہاں، اجازتی تفاعل پر کچھ پابندی ضرور عائد ہے: مکمل کا موجود⁴⁸ ہونا لازم ہے۔ ہمارے مقاصد کے لئے، تفاعل $\Psi(x, 0)$ پر بذات خود معمول شدہ ہونے کی طبعی شرط مسلط کرنا اس کی ضمانت دے گا۔ یوں آزاد ذرے کے عمومی کوانٹم مسئلہ کا حل مساوات 2.100 ہو گا جہاں $\phi(k)$ درج ذیل ہو گا۔

$$(2.103) \quad \phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx$$

مثال 2.6: ایک آزاد ذرہ جو ابتدائی طور پر خطہ $-a \leq x \leq a$ میں رہنے کا پابند ہو کہ 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۔

⁴³ wave packet

⁴⁴ سائن نما موج 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 بنیاد پر ہندی 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 $\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx$ متناہی ہو۔ (ایسی صورت میں $\int_{-\infty}^{+\infty} |F(k)|^2 dk$ بھی متناہی ہوگا، اور حقیقتاً ان دونوں کمالات کی قیمتیں ایک دوسری بنتی ہیں گی۔ Arfken کے حصہ 15.5 میں حاشیہ 24 دیکھیں۔)

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

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

اس کے بعد مساوات 2.103 استعمال کرتے ہوئے $\psi(k)$ تلاش کرتے ہیں۔

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

آخر میں ہم اس کو دوبارہ مساوات 2.100 میں پر کرتے ہیں۔

$$(2.104) \quad \Psi(x, t) = \frac{1}{\pi\sqrt{2a}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(ka)}{k} e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} dk$$

بد قسمتی سے اس مکمل کو بنیادی تفاعل کی صورت میں حل کرنا ممکن نہیں ہے، تاہم اس کی قیمت کو اعدادی ترکیب سے حاصل کیا جاسکتا ہے (شکل 2.8)۔ (ایسی بہت کم صورتیں حقیقتاً پائی جاتی ہیں جن کے لئے $\Psi(x, t)$ کا مکمل (مساوات 2.100) صریحاً حل کرنا ممکن ہو۔ سوال 2.22 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 2.9)۔ 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 2.9)۔ یہ مثال ہے اصول عدم یقینیت کی: اگر ذرے کے مقام میں پھیلاؤ کم ہو، تب اس کی معیار حرکت (لہذا k ، مساوات 2.96 دیکھیں) کا پھیلاؤ لازماً زیادہ ہو گا۔ اس کی دوسری انتہا (بڑی a) کی صورت میں مقام کا پھیلاؤ زیادہ ہو گا (شکل 2.10)۔ لہذا درج ذیل ہو گا۔

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

اب $\sin z/z$ کی زیادہ سے زیادہ قیمت $z = 0$ پر پائی جاتی ہے جو گھٹ کر $z = \pm\pi$ (جو یہاں $k = \pm\pi/a$ کو ظاہر کرتا ہے) پر صفر ہوتی ہے۔ یوں بڑی a کیلئے $k = 0$ پر $\phi(k)$ نوکیلی صورت اختیار کرے گا (شکل 2.10)۔ 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 2.94 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 2.100) میں سموی سمتی رفتار کی معلومات پر غور کرنا دلچسپی کا باعث ہے۔ بنیادی تصور کچھ یوں ہے: سائن نما تفاعلات کا خطی میل جس کے حیظہ کو ϕ ترمیم کرتا ہو (شکل 2.11) موجی اکٹھ ہو گا؛ یہ "غلاف" میں ڈھانکے ہوئے "لہروں" پر مشتمل ہو گا۔ انفرادی لہر کی رفتار، جس کو **دوری سمتی رفتار**⁴⁹ کہتے ہیں، ہر گز ذرے کی سمتی رفتار کو ظاہر نہیں کرتی ہے بلکہ غلاف کی رفتار، جس کو **گروہی سمتی رفتار**⁵⁰ 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 دھلاگے 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 ہمائے رکھیں تو آپ دیکھیں گے کہ، پیچھے سے آگے کی طرف بڑھتے ہوئے، آغاز میں اس لہر کا حیظہ بڑھتا ہے جبکہ آخر میں آگے پہنچ کر اس کا حیظہ 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 گنی ہے، جو عین ذرے کی کلاسیکی رفتار ہے۔

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

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

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**⁵¹ ω کا متغیر k کے لحاظ سے کلیہ سے قطع نظر، درست ہو گا۔ ہم فرض کرتے ہیں کہ کسی مخصوص قیمتی k_0 پر $\phi(k)$ نوکیلی صورت اختیار کرتا ہے۔ (ہم زیادہ وسعت کا k بھی لے سکتے ہیں لیکن ایسے موجی اکٹھ کے مختلف اجزاء مختلف رفتار سے حرکت کرتے ہیں جس کی بنا یہ 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 مکمل قابل نظر انداز ہے لہذا 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۔

(کمل 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۔

$$\Psi(x, t) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i[(k_0 + s)x - (\omega_0 + \omega'_0 s)t]} ds$$

phase velocity⁴⁹
group velocity⁵⁰
dispersion relation⁵¹

وقت $t = 0$ پر

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

جبکہ بعد کے وقت پر درج ذیل ہو گا۔

$$\Psi(x, t) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(-\omega_0 t + k_0 \omega'_0 t)} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i(k_0 + s)(x - \omega'_0 t)} ds$$

ماسوائے x کو $(x - \omega'_0 t)$ منتقل کرنے کے یہ $\Psi(x, 0)$ میں پایا جانے والا تکمیل ہے۔ یوں درج ذیل ہو گا۔

$$(2.105) \quad \Psi(x, t) \cong e^{-i(\omega_0 - k_0 \omega'_0)t} \Psi(x - \omega'_0 t, 0)$$

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:

$$(2.106) \quad v_{\text{گروہی}} = \frac{d\omega}{dk}$$

(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۔

$$(2.107) \quad v_{\text{دوری}} = \frac{\omega}{k}$$

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

$$(2.108) \quad v_{\text{کلاسیکی}} = v_{\text{گروہی}} = 2v_{\text{دوری}}$$

سوال 2.18: دکھائیں کہ متغیر x کے کسی بھی تفاعل کو لکھنے کے دو معادل طریقے $[C \cos kx + D \sin kx]$ اور $[A e^{ikx} + B e^{-ikx}]$ اسی طرح مستقلات A اور B کو مستقلات C اور D کی صورت میں لکھیں۔ متغیر x کی صورت میں لکھیں۔ اسی طرح مستقلات A اور B کو مستقلات C اور D کی صورت میں لکھیں۔ تبصرہ: کوانٹم میکینکس 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 2.19: مساوات 2.94 میں دی گئی آزاد ذرے کے تفاعل موج کا احتمال J تلاش کریں (سوال 1.14 دیکھیں)۔ احتمال رو کے بہاؤ کا رخ کیا ہو گا؟

سوال 2.20: اس سوال میں آپ کو مسئلہ پلانشرال کا ثبوت حاصل کرنے میں مدد دیا جائے گا۔ آپ متناہی وقفہ کے فوریز تسلسل سے آغاز کر کے اس وقفہ کو وسعت دیتے ہوئے لامتناہی تک بڑھاتے گے۔

1. مسئلہ ڈرشلے کہتا ہے کہ وقفہ $[-a, +a]$ پر کسی بھی تفاعل $f(x)$ کو فوریز تسلسل کے پھیلاؤ سے ظاہر کیا جاسکتا 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 جاسکتا 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 ہوگا؟

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

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

ج. n اور c_n کی جگہ نئے متغیرات $k = (\frac{n\pi}{a})$ اور $F(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} a c_n$ استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ جزو-1 اور جزو-ب درج ذیل روپ اختیار کرتے ہیں

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

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

د. حد $a \rightarrow \infty$ 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 ہوں گی۔ اس کے باوجود حد $a \rightarrow \infty$ کی صورت میں ان دونوں کی ساخت ایک دوسرے کے ساتھ مشابہت رکھتی ہیں۔

سوال 2.21: ایک آزاد ذرے کا ابتدائی تفاعل موج درج ذیل ہے

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

جہاں A اور a مثبت حقیقی مستقل ہیں۔

1. $\Psi(x, 0)$ کو معمول پر لائیں۔

ب. $\phi(k)$ تلاش کریں۔

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

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

سوال 2.22: گاؤس موجی اکٹھے ایک آزاد ذرے کا ابتدائی تفاعل موج درجہ 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" درجہ ذیل روپ کے مکمل با آسانی حل ہوتے ہیں۔

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(ax^2+bx)} dx$$

مان لیں $y \equiv \sqrt{a}[x + (b/2a)]$ ہے۔ یں $y^2 - (b^2/4a) = (ax^2 + bx)$ 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. $|\Psi(x, t)|^2$ تلاش کریں۔ اپنا جواب درجہ 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۔

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

2.5 ڈیٹا متاعل مخفیہ

2.5.1 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 استراری 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) مکمل ہو گا۔ اس امتیاز کی طبعی اہمیت کیا ہے؟

کلاسیکی میکانیات میں ایک 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 2.12) تب یہ ذرہ اس مخفی توانائی کے کنواں میں "پھنسا" رہے گا: یہ **والپس نقاط**⁵² کے بیچ 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 بات نہیں کر رہے ہیں)۔ ہم اسے **مقید حال**⁵³ 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 2.12)۔ (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**⁵⁴ 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**⁵⁵ (جس پر ہم کچھ دیر میں بات کریں گے) ایک ذرے کو کسی بھی متناہی مخفیہ رکاوٹ کے اندر سے گزرنے دیتی ہے، لہذا مخفیہ کی قیمت صرف لامتناہی پر اہم ہو گی (شکل 2.12 c)۔

$$(2.109) \quad \begin{cases} E < [V(-\infty) \text{ اور } V(+\infty)] \Rightarrow \text{مقید حال} \\ E > [V(-\infty) \text{ یا } V(+\infty)] \Rightarrow \text{بکھراو حال} \end{cases}$$

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

$$(2.110) \quad \begin{cases} E < 0 \Rightarrow \text{مقید حال} \\ E > 0 \Rightarrow \text{بکھراو حال} \end{cases}$$

turning points⁵²bound state⁵³scattering state⁵⁴tunneling⁵⁵

چونکہ $x \rightarrow \pm\infty$ پر لامتناہی چکور کنواں اور ہارمونی مرتعش کی محض توانائیاں لامتناہی کو پہنچتی ہیں لہذا یہ صرف مفید حالات پیدا کرتی ہیں جبکہ آزاد ذرے کی محض توانائی ہر مقام پر صفر ہوتی ہے لہذا یہ صرف بکھراوا حال⁵⁶ پیدا کرتی ہے۔ اس حصہ میں (اور اگلے حصہ میں) ہم ایسی محض توانائیوں پر غور کریں گے جو دونوں اقسام کے حالات پیدا کرتی ہیں۔

2.5.2 ڈیلٹا تفاعل کنواں

مبدأ پر لامتناہی کم چوڑائی اور لامتناہی بلند ایسا نوکیلا تفاعل جس کا رقبہ اکائی ہو (شکل (2.13) ڈیلٹا تفاعل⁵⁷ کہلاتا ہے۔

$$(2.111) \quad \delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1$$

نقطہ $x = 0$ پر یہ تفاعل متناہی نہیں ہے لہذا تکنیکی طور پر اس کو تفاعل کہنا غلط ہو گا (ریاضی دان اسے متعمم تفاعل⁵⁸ یا متعمم تقسیم⁵⁹ کہتے ہیں)۔⁶⁰ 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 a کے علاوہ ہر مقام پر صفر ہو گا لہذا $\delta(x - a)$ کو $f(x)$ سے ضرب دینا، اسے $f(a)$ سے ضرب دینے کے مترادف ہے:

$$(2.112) \quad f(x)\delta(x - a) = f(a)\delta(x - a)$$

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

$$(2.113) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - a) dx = f(a) \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a) dx = f(a)$$

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 لہذا $a - \epsilon$ تا $a + \epsilon$ تکمل لینا کافی ہو گا جہاں $\epsilon > 0$ ہے۔)

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

$$(2.114) \quad V(x) = -\alpha\delta(x)$$

⁵⁶ آپ کو یہاں پریشانی کا سامنا ہو سکتا ہے کیونکہ عمومی مسئلہ جس کے لئے $V > E$ درکار ہے (سوال 2.3)، بکھراوا 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 شرڈنگر کو آزاد ذرہ کے لئے حل کر کے دیکھیں کہ اس کے خطی جوڑ بھی معمول پر لانے کے قابل نہیں ہیں۔ صرف مثبت محضی توانائی حل مکمل سلسلہ دیں گے۔

Dirac delta function⁵⁷

generalized function⁵⁸

generalized distribution⁵⁹

⁶⁰ ڈیلٹا تفاعل کو ایسے مستطیل (پاشٹل) کی تحدیدی صورت تصور کیا جاسکتا ہے جس کی چوڑائی بتدریج کم اور قد بتدریج بڑھتا ہو۔

⁶¹ ڈیلٹا تفاعل کی اکائی ایک بالہائی ہے (مساوات 2.111 دیکھیں) لہذا α کا بعد توانائی ضرب بالہائی ہو گا۔

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

$$(2.115) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} - \alpha \delta(x) \psi = E \psi$$

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

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

$$(2.116) \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi = k^2 \psi$$

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

$$(2.117) \quad k \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

مساوات 2.116 کا عمومی حل

$$(2.118) \quad \psi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx}$$

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

$$(2.119) \quad \psi(x) = Be^{kx}, \quad (x < 0)$$

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

$$(2.120) \quad \psi(x) = Fe^{-kx}, \quad (x > 0)$$

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

$$(2.121) \quad \begin{cases} 1. \psi & \text{لازمًا استمراری} \\ 2. \frac{d\psi}{dx} & \text{استمراری، ماسوائے ان نقاط پر جہاں محفّیہ لامتناہی ہو} \end{cases}$$

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

$$(2.122) \quad \psi(x) = \begin{cases} Be^{kx}, & (x \leq 0) \\ Be^{-kx}, & (x \geq 0) \end{cases}$$

تفاعل $\psi(x)$ کو شکل 2.14 میں ترسیم کیا گیا ہے۔ دوم سرحدی شرط ہمیں ایسا کچھ نہیں بتاتی ہے؛ (لا متناہی چکور کنواں کی طرح) جوڑ پر منفیہ لا متناہی ہے اور تفاعل کی تریل 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 استمراری یہی ڈیلٹا تفاعل تعین کرے گا۔ میں یہ عمل آپ کو کر کے دکھاتا ہوں جہاں آپ یہ بھی دیکھ پائیں گے کہ کیوں $\frac{d\psi}{dx}$ عموماً استمراری ہوتا ہے۔

$$(2.123) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \frac{d^2\psi}{dx^2} dx + \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x) dx = E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \psi(x) dx$$

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

$$(2.124) \quad \Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) \equiv \frac{\partial\psi}{\partial x}\Big|_{+\epsilon} - \frac{\partial\psi}{\partial x}\Big|_{-\epsilon} = \frac{2m}{\hbar^2} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} V(x)\psi(x) dx$$

عمومی طور پر دائیں ہاتھ پر حد صفر کے برابر ہو گا لہذا $\frac{d\psi}{dx}$ عموماً استمراری ہو گا۔ لیکن جب سرحد پر $V(x)$ لا متناہی ہو تب یہ دلیل قابل قبول نہیں ہو گی۔ بالخصوص $V(x) = -\alpha\delta(x)$ کی صورت میں مساوات 2.113 درج ذیل دے گی:

$$(2.125) \quad \Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0)$$

یہاں درج ذیل ہو گا (مساوات 2.122):

$$(2.126) \quad \begin{cases} \frac{d\psi}{dx} = -Bke^{-kx}, & (x > 0) \implies \frac{d\psi}{dx}\Big|_+ = -Bk \\ \frac{d\psi}{dx} = +Bke^{+kx}, & (x < 0) \implies \frac{d\psi}{dx}\Big|_- = +Bk \end{cases}$$

لہذا $\Delta(d\psi/dx) = -2Bk$ ہو گا۔ ساتھ ہی $\psi(0) = B$ ہے۔ اس طرح مساوات 2.126 درج ذیل کہتی ہے:

$$(2.127) \quad k = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

اور اجازتی توانائیاں درج ذیل ہوں گی (مساوات 2.117)۔

$$(2.128) \quad E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

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۔

$$(2.129) \quad B = \sqrt{k} = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}$$

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

$$(2.130) \quad \psi(x) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2}; \quad E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

ہم $E > 0$ کی صورت میں بکھراؤ حالات کے بارے میں کیا کہہ سکتے ہیں؟ شرودنگر 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

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

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

$$(2.131) \quad \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

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

$$(2.132) \quad \psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}$$

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

$$(2.133) \quad F + G = A + B$$

تفرقات درج ذیل ہوں گے۔

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

لہذا $\Delta(d\psi/dx) = ik(F - G - A + B)$ ہو گا۔ ساتھ ہی $\psi(0) = (A + B)$ ہو گا لہذا دوسری سرحدی شرط (مساوات 2.125) کہتی ہے

$$(2.134) \quad ik(F - G - A + B) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + B)$$

یا مختصراً:

$$(2.135) \quad F - G = A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta), \quad \beta \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}$$

دونوں سرحدی شرائط مسلط کرنے کے بعد ہمارے پاس دو مساوات (مساوات 2.133 اور 2.135) جبکہ چار نا معلوم مستقلات A ، B ، C اور D بلکہ k شامل کرتے ہوئے پانچ نا معلوم مستقل ہوں گے۔ یہ معمول پر لانے کے قابل حال نہیں ہے لہذا 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 2.131 میں مستقل A بائیں سے آمدی موج کا حیثہ ہے، B بائیں رخ واپس لوٹتے ہوئے موج کا حیثہ ہے، F (مساوات 2.132) دائیں رخ نکل کر چلتے ہوئے موج کا حیثہ جبکہ H دائیں سے آمدی موج کا حیثہ ہے (شکل 2.15 دیکھیں)۔ بکھراؤ کے عمومی تجربہ میں عموماً ایک رخ (مثلاً بائیں) سے ذرات پھینکے جاتے ہیں۔ ایسی صورت میں دائیں جانب سے آمدی موج کا حیثہ صفر ہو گا:

$$(2.136) \quad G = 0, \quad \text{بائیں سے بکھراؤ}$$

آمدی موج⁶² کا حیثہ A ، منعکس موج⁶³ کا حیثہ B جبکہ ترسیل موج⁶⁴ کا حیثہ F ہو گا۔ مساوات 2.133 اور 2.135 کو B اور F کے لیے حل کر کے درج ذیل حاصل ہوں گے۔

$$(2.137) \quad B = \frac{i\beta}{1 - i\beta} A, \quad F = \frac{1}{1 - i\beta} A$$

(اگر آپ دائیں سے بکھراؤ کا مطالعہ کرنا چاہیں تب $A = 0$ ہو گا؛ G آمدی حیثہ، F منعکس حیثہ، اور B ترسیلی حیثہ ہوں گے۔)

incident wave⁶²
reflected wave⁶³
transmitted wave⁶⁴

باب 3

قواعد و ضوابط

سوال 3.1: توانائی اور وقت کی عدم یقینیت کے اصول کی ایک دلچسپ روپ $\Delta t = \tau / \pi$ ہے جہاں ابتدائی حال $\Psi(x, 0)$ کے عمومی حال تک ارتقا کے لیے درکار وقت τ ہے۔ دو معیاری عمومی ساکن حالات کے دو برابر حصوں پر مشتمل اختیاری مخفی تو $\Psi(x, 0) = 1/\sqrt{2}[\psi_1(x) + \psi_2(x)]$ کا انتقال موج استعمال کرتے ہوئے اس کی چانچ پڑتال کریں۔

سوال 3.2: ہارمونی مرتعش کی ساکن حالات کی معیاری عمومی اساس مساوات 2.67 میں $\langle n|x|n' \rangle$ اور $\langle n|p|n' \rangle$ تلاش کریں۔ آپ سوال 2.12 میں $n = n'$ تلاش کر چکے ہیں۔ وہی ترقیب موجودہ عمومی مسئلے میں استعمال کریں۔ مکانیکی لامتناہی X اور P تلاش کریں۔ دکھائیں کہ اس اساس میں $H = (1/2m)p^2 + (m\omega^2/2)x^2$ 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 3.3: ایک ہارمونی مرتعش ایسی حال میں ہے کہ اس کی توانائی کو پینائش $(1/2)\hbar\omega$ 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 ہوگی۔ اگر لہ $t = 0$ پر اس کی $\langle p \rangle$ کی زیادہ سے زیادہ ممکنہ قیمت ہو تو $\Psi(x, t)$ کیا ہوگا۔

سوال 3.4: 35-3

ہارمونی مرتعش کے منطقی حالات۔

ہارمونی مرتعش کے ساکن حالات $|n\rangle = \psi_n(x)$ مساوات 2.67 میں صرف $n = 0$ عین عدم یقینیت کی حد $\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$ پر پیشہا ہے جیسا آپ سوال 3.12 میں معلوم کر چکے ہیں عمومی طور پر $\sigma_x \sigma_p = (2n + 1)\hbar/2$ 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 س تکمیل کے امتیازی تقال ہوتے ہیں۔

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

جہاں امتیازی α کوئی بھی مخلوط عود ہو سکتا ہے۔

جز الف

حال $|\alpha\rangle$ میں $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$ اور $\langle p^2 \rangle$ دریافت کریں۔ مثال 2.5 کی ترتیب استعمال کریں۔ اور یاد رکھیں کہ a_- منفی کا پر مش جوڑی دار a_+ ہے ساتھ ہی یہ فرض نہ کریں کہ α حقیقی ہے۔

جز (ب)

$\sigma_x \sigma_p$ اور $\sigma_p \sigma_x$ تلاش کریں۔ دکھائیں کہ $\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$ ہوگا۔

جز (ج)

کسی بھی دوسرے تقال موج کی طرح منطقی حال کو توانائی امتیازی حالات کی صورت میں پھیلا یا جاسکتا ہے۔

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

رکھائیں کہ پھیلاؤ کے عددی سر درج ذیل ہوں گے۔

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

جز (د)

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

جز (ح)

اس کے ساتھ وقت کی تابعت

$$|n\rangle \rightarrow e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle$$

منسلک کر کے دکھائیں کہ $|\alpha(t)\rangle$ اب بھی a_- کا امتیازی حال ہوگا لیکن وقت کے ساتھ امتیازی قیمت ارتقا پر ہوگا

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

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 $|n=0\rangle$ از خود منطقی حال ہے اگر ایسا ہو تب امتیازی قدر کیا ہوگا

سوال 3.5: 3.36

مقصود عدم یقینیت کا اصول:

عمومی عدم یقینیت کا اصول مساوات 3.62 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 مضحکم کرتے ہوئے درجہ ذیل روٹ میں لکھا جاسکتا ہے

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

جہاں $\hat{D} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} + 2\langle A \rangle \langle B \rangle$ ہوگا

اشارہ: مساوات 3.60 میں $\text{Re}(z)$ اجزاء لیں

(ب)

مساوات 3.99 کو $A=B$ کے لئے جانچیں چونکہ اس صورت میں $C=0$ ہے لہذا معیاری عدم یقینیت غیر اہم ہوگا بد قسمتی سے مقصود عدم یقینیت کا اصول بھی زیادہ مددگار ثابت نہیں ہوتا

سوال 3.6: 3.37:

ایک نظام جو 3 صدی ہے کہ ہیلٹونین کو درجہ ذیل کا الف ظاہر کرتی ہے

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

جہاں c اور a, b حقیقی اعداد ہیں۔

(ا) اگر اس نظام کا ابتدائی حال درجہ ذیل ہو

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

تب $\delta(t)$ کیا ہوگا؟

(ب) اگر اس نظام کا ابتدائی حال درجہ ذیل ہو

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

تب δt کیا ہوگا؟

سوال 3.7: 3.38: ایک نظام جو 3 صدی ہے کہ ہیلوین کو درجہ ذیل کا الف ظاہر کرتی ہے:

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

دیگر دو مشہور B اور A کو درجہ 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 ω, λ, μ حقیقی مثبت اعداد ہیں۔
 A H 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 $|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$ ہے۔
 لمحہ $t=0$ پر B اور A کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔

ج) $\delta(s)$ کیا ہوگا؟ لمحہ t پر اس نظام کی توانائی کی پیمائش کیا قیمتیں دے سکتی ہے؟ اور ہر ایک کا انفرادی احتمال کیا ہوگا؟ اسی سوال کے جوابات B اور A کے لیے بھی تلاش کریں۔

سوال 3.8: 3.39: ایک تفاعل $f(x)$ جس کو Taylor تسلسل کی صورت میں پھیلا یا جاسکتا ہے کے لیے درجہ 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 حامل کی قوت نمائی کی قوتی تسلسلی پھیلاؤ کی تعریف درجہ 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 درجہ 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 ہیں۔
(ج) دکھائیں کہ لمحہ $t + t_0$ پر ہر کی متغیر Q کی توقعاتی قیمت کو درجہ ذیل لکھا جاسکتا ہے

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

اس کو استعمال کرتے ہوئے مساوات 3-71 حاصل کریں۔
اشارہ: $t_0 = dt$ لیتے ہوئے dt میں پہلے رستے تک پھیلائیں۔

سوال 3.9: 40-3:

- (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 آکٹ سوال 2-43 کے لیے $\Phi(p, 0)$ 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 کمالات حل کرتے ہوئے $\langle p \rangle$ اور $\langle p^2 \rangle$ تلاش کر کے سوال 2-43 کی حاصل کردہ جوابات کے ساتھ موازنہ کریں۔
(د) دکھائیں کہ $\langle H \rangle = \langle p \rangle^2/2m + \langle H \rangle_0$ ہوگا جہاں زیر نوہشت میں 0 ساکن گاسی کو ظاہر کرتا ہے اور اپنے نتیجے پر تبصرہ کریں۔

باب 4

تین ابعادی کوانٹم میکانیات

4.1 کروی محدود میں مساوات شرودنگر

تین ابعاد تک توسیع باآسانی کی جا سکتی ہے۔ مساوات شرودنگر درج ذیل کہتی ہے

$$(4.1) \quad i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi;$$

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

$$(4.2) \quad p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

ہیملٹنی¹ 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 4.2 کو مختصراً درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$(4.3) \quad p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$$

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

یوں درج ذیل ہوگا

$$(4.4) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi$$

جہاں

$$(4.5) \quad \nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

کارتیسی محدود میں لاپلاس² ہے۔

مخفی توانائی V اور تفاعل موج Ψ اب $\mathbf{r} = (x, y, z)$ اور t کے تفاعلات ہیں۔ لا متناہی چھوٹے حجم $d^3 \mathbf{r} = dx dy dz$ میں ایک ذرہ پایا جانے کا احتمال $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 \mathbf{r}$ ہوگا اور معمولی ذنی شرط درج ذیل ہوگی

$$(4.6) \quad \int |\Psi|^2 d^3 \mathbf{r} = 1$$

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

$$(4.7) \quad \Psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t / \hbar}$$

جہاں فضائی تفاعل موج ψ_n غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات

$$(4.8) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi$$

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

$$(4.9) \quad \Psi(\mathbf{r}, t) = \sum c_n \psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t / \hbar}$$

جہاں مستقلات c_n ہمیشہ کی طرح ابتدائی تفاعل موج $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ سے حاصل کیے جائیں گے۔ (اگر مخفی استمراریہ³ حالات دیتی ہو تب مساوات 4.9 میں مجموعہ کی بجائے مکمل ہوگا۔)

سوال 4.1:

ا. عاملین \mathbf{r} اور \mathbf{p} کے تمام باضابطہ تبادلیہ⁴ رشتے⁴: $[x, y]$ ، $[x, p_y]$ ، $[x, p_x]$ ، $[p_y, p_z]$ ، وغیرہ وغیرہ، حاصل کریں۔

جواب:

$$(4.10) \quad [r_i, p_j] = -[p_i, r_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad [r_i, r_j] = [p_i, p_j] = 0$$

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

² Laplacian
³ continuum
⁴ canonical commutation relations

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

$$(4.11) \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = \langle -\nabla V \rangle \quad \text{اور} \quad \frac{d}{dt} \langle r \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle$$

(ان میں سے ہر ایک درحقیقت تین مساوات کو ظاہر کرتی ہے۔ ایک مساوات ایک جزو کے لیے ہو گا۔) اشارہ: پہلے تصدیق کر لیں کہ مساوات 3.71 تین ابعاد کے لیے بھی کارآمد ہے۔

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

جواب:

$$(4.12) \quad \sigma_x \sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \sigma_y \sigma_{p_y} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \sigma_z \sigma_{p_z} \geq \frac{\hbar}{2}$$

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

4.1.1 علیحدگی متغیرات

عموماً محقق صرف مبداء سے فاصلہ کا تفاعل ہو گا۔ ایسی صورت میں کروہ محدود⁵ (r, θ, ϕ) کا استعمال بہتر ثابت ہو گا (شکل 4-1)۔ کروی محدود میں لاپلاسی درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$(4.13) \quad \nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

یوں کروی محدود میں تابع وقت شرودنگر مساوات درج ذیل ہو گی۔

$$(4.14) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) \right] + V\psi = E\psi$$

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

$$(4.15) \quad \psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

اس کو مساوات 4.14 میں پر کر کے

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

spherical coordinates⁵

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

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

پہلی خمدار توسیع میں جزو صرف r کا تابع ہے جبکہ باقی حصہ صرف θ اور ϕ کا تابع ہے؛ لہذا 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 ہوگی۔⁶

$$(4.16) \quad \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] = l(l+1)$$

$$(4.17) \quad \frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right\} = -l(l+1)$$

سوال 4.2: کارتیسی محدود میں علیحدگی متغیرات استعمال کرتے ہوئے لاقنای مرلبی کنواں (یا ڈبہ میں ایک ذرہ):

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

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: ایک بعدی صورت میں انحطاطی مقید حالات نہیں پائے جاتے ہیں (سوال 2.45)، 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؟

⁶ ایسا کرنے سے ہم عموماً نہیں کہتے ہیں، چونکہ یہاں l کوئی بھی مخلوط عدد ہو سکتا ہے۔ بعد میں ہم دیکھیں گے کہ l کو لازماً عدد صحیح ہونا ہوگا۔ اسی نتیجہ کو ڈہن میں رکھتے ہوئے میں نے علیحدگی مستقل کو اس عجیب روپ میں لکھا ہے۔

4.1.2 زاویائی مساوات

مساوات 4.17 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۔

$$(4.18) \quad \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} = -l(l+1)Y \sin^2 \theta$$

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:

$$(4.19) \quad Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

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

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

پہلا جزو صرف θ کا تعلق ہے، جبکہ دوسرا صرف ϕ کا تعلق ہے، لہذا ہر ایک جزو ایک مستقل ہو گا۔ اس مرتبہ ہم علیحدگی مستقل⁷ کو m^2 لکھتے ہیں۔

$$(4.20) \quad \frac{1}{\Theta} \left[\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + l(l+1) \sin^2 \theta = m^2$$

$$(4.21) \quad \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2$$

متغیر ϕ کی مساوات زیادہ آسان ہے۔

$$(4.22) \quad \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2 \Phi \implies \Phi(\phi) = e^{im\phi}$$

[در حقیقت 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 جاسکتا ہے جسے ہم Θ میں ضم کرتے ہیں۔ چونکہ برقی محلی توانائی لازماً حقیقی ہو گی لہذا برقی حرکیات میں استقامتی 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) لہذا درج ذیل شرط⁸ مسلط کی جاسکتی ہے۔

$$(4.23) \quad \Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi)$$

⁷ یہاں بھی ہم عموماً متغیرات نہیں کھاتے ہیں، چونکہ m کوئی بھی مخلوط عدد ہو سکتا ہے؛ اگرچہ ہم جلد دیکھیں گے کہ m کو عدد صحیح ہونا ہو گا۔ 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 ہو گی۔

⁸ یہ ظاہر معصوم شرط اتنی معصوم نہیں ہے۔ یاد رہے کہ m کی قیمت سے قطع نظر، احتمال ثنائیت $(|\Phi|^2)$ یک قیمتی ہے۔ ہم حصہ 4.3 میں ایک مختلف طریقہ سے، زیادہ پر زور دہل پیش کر کے m پر مسلط شرط حاصل کریں گے۔

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

$$(4.24) \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

مساوات θ

$$(4.25) \quad \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + [l(l+1) \sin^2 \theta - m^2] \Theta = 0$$

اتنی سادہ نہیں ہے۔ اس کا حل درج ذیل ہے

$$(4.26) \quad \Theta(\theta) = A P_l^m(\cos \theta)$$

جہاں P_l^m شریک لیہمانڈر تفاعل⁹ ہے جس کی تعریف درج ذیل ہے

$$(4.27) \quad P_l^m(x) \equiv (1-x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} P_l(x)$$

اور l ویں لیہمانڈر کثیر رکنی کو $P_l(x)$ ظاہر کرتا ہے¹⁰ جس کی تعریف کلیہ روڈریگس¹¹

$$(4.28) \quad P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l$$

دیتا ہے۔ مثال کے طور پر درج ذیل ہونگے۔

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = \frac{1}{2} \frac{d}{dx} (x^2 - 1) = x,$$

$$P_2(x) = \frac{1}{4 \cdot 2} \left(\frac{d}{dx} \right)^2 (x^2 - 1)^2 = \frac{1}{2} (3x^2 - 1)$$

جدول 4.1 میں ابتدائی چند لیہمانڈر کثیر رکنیاں پیش کی گئی ہیں۔ جیسا کہ نام ہی ظاہر ہے، $P_l(x)$ متغیر x کی 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:

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

$$P_2^2(x) = (1-x^2) \left(\frac{d}{dx} \right)^2 \left[\frac{1}{2} (3x^2 - 1) \right] = 3(1-x^2),$$

وغیرہ وغیرہ۔ (اب ہمیں $P_l^m(\cos \theta)$ چاہیے اور چونکہ $\sqrt{1-\cos^2 \theta} = \sin \theta$ ہوتا ہے لہذا $P_l^m(\cos \theta)$ ہر صورت $\cos \theta$ کا کثیر رکنی ہو گا جسے طاق m کی صورت میں $\sin \theta$ ضرب کرے گا۔ جدول 4.2 میں $\cos \theta$ کے چند شریک لیہمانڈر تعلقات پیش کیے گئے ہیں۔)

⁹ associated Legendre function

¹⁰ دھیان رہے کہ $P_l^{-m} = P_l^m$ ہو گا۔

¹¹ Rodrigues formula

جدول 4.1: ابتدائی چند لیژنڈر کثیر رکنیاں۔

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

جدول 4.2: چند شریک لیژنڈر تفاعلات $P_l^m(\cos \theta)$

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

دھیان رہے کہ صرف غیر منفی عدد صحیح l کی صورت میں کلیہ روڈریگیس معنی خیز ہوگا؛ مزید $|m| > l$ کی صورت میں مساوات 4.27 کے تحت $P_l^m = 0$ ہوگا۔ یوں l کی کسی بھی مخصوص قیمت کے لئے m کی $(2l + 1)$ ممکنہ قیمتیں ہوں گی:

$$(4.29) \quad l = 0, 1, 2, \dots; \quad m = -l, -l + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l - 1, l.$$

لیکن رکیے مساوات 4.25 ایک رتبی تفرقی مساوات ہے جسکے l اور m کی کسی بھو قیمتوں کے لئے دو خطی غیر متابہ حل ہونگے۔ باقی حل کہا ہیں؟ جواب: یہ مساوات کی رعایتی حلوں کی صورت میں ضرور موجود ہیں لیکن یہ ٹیٹی بنیادوں پر ناقابل قبول ہیں چونکہ $\theta = 0$ اور $\theta = \pi$ پر یہ بے قابو بڑھتے ہیں (سوال 4.4 دیکھیں)۔ اب قروی محدود میں جھلی رکن درج ذیل ہوگا

$$(4.30) \quad d^3r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi.$$

لہذا معمول پر لانے کی شرط (مساوات 4.6) درج ذیل اختیار کرے گی

$$(4.31) \quad \int |\psi|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi - \int |R|^2 r^2 dr \int |Y|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1.$$

R اور Y کو علیحدہ علیحدہ طور پر معمول پر لانا زیادہ آسان صابط ہوتا ہے:

$$(4.32) \quad \int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = 1 \quad \text{and} \quad \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1$$

معمول شدہ دائریجی موجی دقاتوں کو قروی ہارمونیات کہتے ہیں :

$$(4.33) \quad Y_l^m(\theta, \phi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos\theta).$$

جہاں $\epsilon = (-1)^m$ کے لئے $m \geq 0$ اور $\epsilon = 1$ کے لئے $m \leq 0$ ہو گا۔ جیسا کہ ہم بعد میں ثابت کریں گے یہ از خود عمودی ہیں

$$(4.34) \quad \int_0^{2\pi} \int_0^\pi [Y_l^m(\theta, \phi)]^* [Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi)] \sin\theta d\theta d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

جو جدول 4.3 میں چند ابتدائی قروی ہارمونیات پیش کیے گئے ہیں۔ تاریخی وجوہات کی بنا L کو شمالی quanti عدد جسکے M کو مقناطیسی quanti عدد کہتے ہیں۔ سوال 4.3: مساوات 4.28, 4.27 اور 4.32 استعمال کرتے ہوئے Y_2^1 اور Y_0^0 تیار کریں۔ اسکی تصدیق کریں کہ یہ عمودی اور معمول شدہ ہیں۔ سوال 4.4: دیکھائیں کہ

$$(4.35) \quad \Theta(\theta) = A \ln[\tan(\theta/2)]$$

تمام $l = m = 0$ کے لئے مساوات θ (مساوات 4.25) کو مطمئن کرتا ہے۔ یہ وہ دوسرا ناقابل قبول حل ہے۔ اس میں کیا خرابی ہے؟ سوال 4.5: مساوات 4.32 کو استعمال کرتے ہوئے $Y_1^1(\theta, \phi)$ اور $Y_3^2(\theta, \phi)$ تیار کریں۔ آپ P_3^2 کو جو جدول 4.2 سے لے سکتے ہیں، جسکے P_1^1 کو مساوات 4.27, 4.28 کی مدد سے آپکو تیار کرنا ہو گا۔ تصدیق کیجئے کہ l اور m کی موضوعات قیمتوں کیلئے یہ زاویائی مساوات (مساوات 4.18)، کو مطمئن کرتے ہیں۔ سوال 4.6: قلیہ rodrigues سے ابتداء کرتے ہوئے legendre کثیر قنیوں کی معیاری امودیت کی شرط

$$(4.36) \quad \int_{-1}^1 P_l(x) P_{l'}(x) dx = \left(\frac{2}{2l+1} \right) \delta_{ll'}$$

اخذ کریں۔ (اشارہ: مکمل حصے استعمال کریں) حصہ 4.1.3 راداسی مساوات: دیہان رہے کہ قروی طور پر متشاقلی تمام مخفی توانائیوں کے لئے تفعال موج کا زاوی حصہ $Y(\theta, \phi)$ ایک جیسا ہو گا؛ مخفی توانائی $V(r)$ کی شکل و صورت تفعال موج کی صرف راداسی حصہ $R(r)$ پر اثر انداز ہو گا جسے مساوات 4.16 تعین کرے گا:

$$(4.37) \quad \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] R = l(l+1)R.$$

نیے متغیورات استعمال کرتے ہوئے اس مساوات کی سادہ روپ حاصل کی جاسکتی ہیں۔ درج ذیل فرض کریں

$$(4.38) \quad u(r) \equiv rR(r).$$

تاکہ $R = u/r, dR/dr = [r(du/dr) - u]/r^2, (d/dr)[r^2(dR/dr)] = rd^2u/dr^2$ درج ذیل ہو گا

$$(4.39) \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dr^2} + \left[V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u \right] = Eu$$

اسکو قدری مساوات کہتے ہیں۔ یہ شکل و صورت کے لہذا سے یقودی shrodinger مساوات 2.5 کی طرح ہے ماسوائے مؤثر مغنی توانائی

$$(4.40) \quad V_{eff} = V + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2}$$

کہ جس میں $[\hbar^2/2m][l(l+1)/r^2]$ کا اضافی جزو پایا جاتا ہے جسے مرکز گریز جزو کہتے ہیں۔ یہ کلاسیکی مکانیات کے مرکز گریز تغلی قوت کی طرح زرہ کو عمدہ سے دور دکھیلتا ہے اب معمول پر لانے کی شرط (مساوات 4.31) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$(4.41) \quad \int_0^\infty |u|^2 dr = 1$$

کوئی مخصوص مغنی توانائی $V(r)$ نہ جانتے ہوئے ہم صرف یہاں تک جاسکتے ہیں۔ مثال 4.1: درج ذیل لامتناہی قروی قواں پر غور کریں،

$$(4.42) \quad V(r) = \begin{cases} 0 & r \leq a \\ \infty & r > a \end{cases}$$

اسکی تفاعل موج اور اجازتی توانائیاں تلاش کریں۔ حل: قواں کے باہر تفاعل موج صفر ہے جبکہ قواں کے اندر راداسی مساوات درج ذیل کہتی ہے

$$(4.43) \quad \frac{d^2 u}{dr^2} = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - k^2 \right] u$$

جہاں ہمیشہ کی طرح درج ذیل ہو گا

$$(4.44) \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

ہم نے اس مساوات کو سرحدی شرط $u(a) = 0$ مسلط کرتے ہوئے حل کرنا ہے۔ سب سے آسان صورت $L=0$ کی ہے:

$$(4.45) \quad \frac{d^2 u}{dr^2} = -k^2 u \rightarrow u(r) = A \sin(kr) + B \cos(kr)$$

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

$$(4.46) \quad E_{\pi 0} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad (n = 1, 2, 3, \dots).$$

جو ہیں یقودی لامتناہی پکور قواں کی توانائیاں ہیں (مساوات 2.7) $u(r)$ کو معمول پر لانے سے $A = \sqrt{2/a}$ حاصل ہو گا۔ زاویائی جزو $Y_0^0(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi}$ ہونے کے بینا غیر اہم ہے کو ساتھ منسلک کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہو گا

$$(4.47) \quad \psi_{\pi 00} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{\sin(n\pi r/a)}{r}$$

[دیہان کیجیے گا کہ ساکن حالت کو تین quanti اعداد n, l, m سے نام دیے گئے ہیں: $\psi_{nml}(r, \theta, \phi)$ جبکہ توانائی، صرف n اور l پر منحصر ہوگی: Enl ۔ کسی بھی ایک اختیاری عدد سے l کے لئے مساوات 4.41 کا عمومی حل اتنا جانا پہچانا نہیں ہے

$$(4.48) \quad u(r) = Ar_{j_l}(kr) + Br_{n_l}(kr).$$

جہاں $j_l(x)$ رتبی قروی Bessel دفعال ہے اور $n_l(x)$ رتبی قروی Neumann دفعال l ہے انکی تعریفات درج ذیل ہیں

$$(4.49) \quad j_l(x) \equiv (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x} : \quad n_l(x) \equiv -(-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos x}{x}.$$

مثال کے طور پر،

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

$$(4.50) \quad = \frac{3 \sin x - 3x \cos x - x^2 \sin x}{x^3} :$$

جو جدول 4.4 میں ابتدائی چند قروی Bessel اور Neumann دفعال پیش کیے گئے ہیں متغیر x کی چھوٹی قیمت کے لئے (یہاں $\sin x = \cos x = 1 - x^2/2 + x^4/4! - \dots$)، اور $x - x^3/3! + x^5/5! - \dots$

$$(4.51) \quad j_0(x) \approx 1; \quad n_0(x) \approx -\frac{1}{x}; \quad j_1(x) \approx \frac{x}{3}; \quad j_2(x) \approx \frac{x^2}{15};$$

وغیرہ ہونگے۔ دیہان رہے ممد پر Bessel دفعال متناہی رہتے ہیں جبکہ Neumann دفعالات بے قابو بڑھتے ہیں یوں لازم ہے کہ ہم $B_l = 0$ منتخب کریں لہذا درج ذیل ہو گا

$$(4.52) \quad R(r) = A j_l(kr)$$

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

$$(4.53) \quad j_l(ka) = 0;$$

یعنی l رتبی قروی Bessel دفعال کا (ka) ایک صفر ہو گا اب ایک Bessel دفعالات استثنائی ہیں (شکل 4.2 دیکھیں)؛ ہر ایک کے لامتناہی تعداد کے صفر پائے جاتے ہیں، لیکن ہماری بد قسمتی ہے کہ یہ ایک جیسے فاصلوں پر نہیں پائے جاتے ہیں جیسا کہ نقطہ $n\pi$ وغیرہ پر۔ انہیں اعدادی طور پر حاصل کرنا ہو گا۔ بحر حال سرحدی شرط کے تحت درج ذیل ہو گا

$$(4.54) \quad k = \frac{1}{a} \beta_{nl}$$

جہاں β_{nl} قروی Bessel دفعال کا nth صفر lth ہو گا۔ یوں اجازتی توانائیاں درج ذیل ہوں گی

$$(4.55) \quad E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \beta_{nl}^2.$$

اور دفعال موج درج ذیل ہوں گے

$$(4.56) \quad \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = A_{nl} j_l(\beta_{nl} r/a) Y_l^m(\theta, \phi).$$

جہاں معمول زنی مستقل A_{nl} تعین کریں گے۔ چونکہ l کی ہر ایک قیمت کے لئے m کی $(2l+1)$ مختلف قیمتیں پائی جاتی ہیں لہذا توانائی کی ہر سہ $2l+1$ گناہ انتہائی ہو گا۔ سوال 4.7: جزو الف: $n_1(x)$ اور $n_2(x)$ کو (مساوات 4.46) میں پیش کی گئی تعریف سے تیار کریں۔ جزو ب: $sines$ اور $cosines$ کو پھیلا کر $n_1(x)$ اور $n_2(x)$ کی تخمینی قلبیات اخذ کریں جو $x \ll 1$ کے لئے کارآمد ہوں گے۔ تصدیق کریں کہ یہ مدعا پر بے قابو بڑھتے ہیں۔ سوال 4.8: جزو الف: تصدیق کریں کہ $V(r) = 0$ اور $l = 1$ کی صورت میں $Arj_1(kr)$ راداسی مساوات کو مطمئن کرتا ہے۔ جزو ب: لامتناہی قروی قواں کیلئے $l = L$ کی صورت میں اجازتی توانائیاں ترسیم کی مدد سے تعین کریں۔ دیکھائیں کہ n کی بڑی قیمت کے لئے $E_{n1} \approx (\hbar^2 \pi^2 / 2ma^2)(n + 1/2)^2$ ہو گا۔ (اشارہ: پہلے دیکھائیں کہ $j_1(x) = 0 \rightarrow x = \tan x$ اسکے بعد x اور $\tan x$ کو ایک ہی جگہ ترسیم کرتے ہوئے انکے نقاط تلاش کریں۔) سوال 4.9: ایک ذرہ جسکی قیمت m ہے کو متناہی قروی قواں:

$$(4.57) \quad V(r) = \begin{cases} -V_0 & r < a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

میں رکھا جاتا ہے اسکے زمینی حال کو $l=0$ لیتے ہوئے راداسی مساوات کے حل سے حاصل کریں۔ دیکھائیں کہ $V_0 a^2 < \pi^2 \hbar^2 / 8m$ کی صورت میں مقبیت حل نہیں پایا جاتا ہے۔ حصہ ۴.۲ ہائیڈروجن جوہر ایک بھاری پروٹان جس کو ساکن تصور کیا جاسکتا ہے اور جس کا بار e ہے کے گرد ایک حلقے الیکٹرون جس کا بار منفی e طواف کرتا ہے پر مشتمل ہوتا ہے ان دونوں کے مخالف بارو کے بیچ قوت کشش پائی جاتی ہے۔ شکل ۴.۳ کولوم کے قانون کے تحت مخفی توانائی درج ذیل ہوگی۔

$$(4.58) \quad V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

لہذا راداسی مساوات ۴.۳۷ درج ذیل روپ اختیار کرے گی۔

$$(4.59) \quad \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[\frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu$$

ہم نے اس مساوات کو $u(r)$ کے لئے حل کر کے اجازتی توانائیاں E تعین کرنی ہے۔ ہائیڈروجن جوہر کا حل اتنا اہم ہے کہ میں اس کو ہارمونی مرتبہ کے تسلیی حل کے طریقے سے قدم با قدم حل کر کے پیش کرتا ہوں، جس قدم میں آپ کو دشواری پیش آئے، حصہ ۴.۳ سے مدد لیں وہاں مکمل تفصیل پیش کی گئی ہے۔ کولوم مخفی توانائی مساوات ۴.۵۲ $E > 0$ استمراری حالات جو الیکٹران پروٹون ٹکراؤ کو ظاہر کرتے ہیں تسلیم کرنے کے ساتھ ساتھ غیر مسلسل مقید حالات جو ہائیڈروجن جوہر کو ظاہر کرتے ہیں بھی تسلیم کرتا ہے۔ ہماری دلچسپی موخر الذکر میں ہے۔

حصہ ۴.۲.۱ رداسی تفاعل موج، سب سے پہلے نئی علامتیں متعارف کرتے ہوئے مساوات کی صدا صورت حاصل کرتے ہیں درج ذیل لیتے ہوئے جہاں مقید حالات کے لئے e منفی ہونے کی وجہ سے k حقیقی ہو گا۔

$$(4.60) \quad k \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

مساوات ۴.۵۳ کو E سے تقسیم کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہو گا

$$(4.61) \quad \frac{1}{k^2} \frac{d^2 u}{dr^2} = \left[1 - \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 k} \frac{1}{(kr)} + \frac{l(l+1)}{(kr)^2} \right] u$$

اس کو دیکھ کر ہمیں خیال آتا ہے کہ ہم درج ذیل علامتیں متعارف کرائے

$$(4.62) \quad \rho \equiv kr \quad \rho_0 \equiv \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 k}$$

لہذا درج ذیل لکھا جائے گا۔

$$(4.63) \quad \frac{d^2 u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u$$

اس کے بعد ہم حل کی متاکاربی روپ پر غور کرتے ہیں۔ اب $\rho \rightarrow \infty$ کرنے سے قوسین کے اندر مستقل جزو غالب ہو گا لہذا تخمینہ طور پر درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(4.64) \quad \frac{d^2 u}{d\rho^2} = u$$

جس کا عمومی حل درج ذیل ہے۔

$$(4.65) \quad u(\rho) = Ae^{-\rho} + Be^{+\rho}$$

تاہم $\rho \rightarrow \infty$ کی صورت میں e^{ρ} بے قابو ہوتا ہے لہذا ہمیں بھی $B=0$ یوں ρ کی بڑی قیمتوں کے لیے درج ذیل ہو گا

$$(4.66) \quad u(\rho) \sim Ae^{-\rho}$$

اس کے برعکس $\rho \rightarrow 0$ کی صورت میں مرکز گریز جزو غالب ہو گا۔ لہذا تخمینہ طور پر درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(4.67) \quad \frac{d^2 u}{d\rho^2} = \frac{l(l+1)}{\rho^2} u$$

جس کا عمومی حل تصدیق کیجئے درج ذیل ہو گا۔

$$(4.68) \quad u(\rho) = C\rho^{l+1} + D\rho^{-l}$$

تاہم $(\rho \rightarrow \infty)$ کی صورت میں ρ^{-l} بے قابو بھڑکتا ہے لہذا $D=0$ ہو گا۔ ρ یوں کی چھوٹی قیمتوں کے لیے درج ذیل ہو گا۔

$$(4.69) \quad u(\rho) \sim C\rho^{l+1}$$

دوسری قدم پر ہمیں متاکاربی رویئے کو ہٹانا ہو گا اس کی خاطر ہم نیا تقالوی روا اس اُمید سے متعارف کرتے ہیں کہ یہ $u(\rho)$ روا سے زیادہ سادہ ہو گا۔

$$(4.70) \quad u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} x(\rho)$$

پہلے اشارے اچھے نظر نہیں آتے

اس طرح v رو کی صورت میں رداسی مساوات ۴.۵۶ درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$(4.71) \quad \rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2(1+l-\rho) \frac{dv}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)]v = 0$$

آخر میں ہم فرض کرتے ہیں کہ حل v رو کو رو کی طاقی تسلسل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(4.72) \quad v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j$$

اب ہمیں عددی سر (c_0, c_1, c_2, \dots) تعین کرنے ہے ہم جزو در جزو تفرق لیتے ہیں۔

$$(4.73) \quad \frac{dv}{d\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^{j-1} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} \rho^j$$

میں نے دوسرے مجموعے میں فرضی اشاریہ j کو $j \rightarrow j+1$ کہا ہے اگر آپ کو اس سے پریشانی ہو تو آپ اولین چند اجزاء صریحاً لکھ کر اس کی درستگی کی تصدیق کر سکتے ہیں۔ آپ سوال اٹھا سکتے ہیں کہ اب مجموعہ $j = -1$ شروع ہونا چاہئے لیکن $(j+1)$ کا جزو اس جزو کو ختم کرتا ہے لہذا ہم \bullet سے بھی شروع کر سکتے ہیں۔ دوبارہ تفرق لیتے ہیں

$$(4.74) \quad \frac{d^2 v}{d\rho^2} = \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) c_{j+1} \rho^{j-1}$$

مساوات ۴.۶۱ میں پر کرتے ہیں

$$(4.75) \quad \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) c_{j+1} \rho^j + 2(l+1) + \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} \rho^j$$

$$(4.76) \quad -2 \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^j + [\rho_0 - 2(l+1)] \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j = 0$$

ایک جیسی طاقتوں کے عددی سروں کو مساوی رکھتے ہوئے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$(4.77) \quad j(j+1)c_{j+1} + 2(l+1)(j+1)c_{j+1} - 2jc_j + [\rho_0 - 2(l+1)]c_j = 0$$

یا

$$(4.78) \quad c_{j+1} = \left\{ \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} \right\} c_j$$

یہ کلیہ تواری عددی سر تعین کرتے ہوئے تقابلی رو تعین کرتے ہیں۔ ہم c_0 سے شروع کر کے جو مجموعی مستقل کا روپ اختیار کرتا ہے جس کو آخر پہلے معمول پے لیتے ہوئے حاصل کیا جائے گا۔ مساوات ۴.۶۳ کی مدد سے c_1 حاصل کرتے ہیں جس کو واپس اسی مساوات میں پر کرتے ہوئے c_2 حاصل ہو گا وغیرہ وغیرہ آئے l کی بری قیمت کے لئے عددی سروں کی صورت دیکھیں۔ l کی بڑی قیمت ρ کی بڑی قیمت کو ظاہر کرتی ہے جہاں بلند طاقتیں غالب ہو گئی۔ اس صورت میں کلیہ تواری درج ذیل رہتی ہے۔

$$(4.79) \quad c_{j+1} \cong \frac{2j}{j(j+1)} c_j = \frac{2}{(j+1)} c_j$$

ایک لمحہ کے لیے فرض کرے کہ یہ بالکل ٹھیک رشتہ ہے تب درج ذیل ہو گا۔

$$(4.80) \quad c_j = \frac{2^j}{j!} c_0$$

جس کی بنا پر درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(4.81) \quad v(\rho) = c_0 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2^j}{j!} \rho^j = c_0 e^{2\rho}$$

لہذا درج ذیل ہو گا۔

$$(4.82) \quad u(\rho) = c_0 \rho^{l+1} e^{\rho}$$

جو ρ کی بڑی قیمتوں کے لیے پے قابو بڑھتا ہے۔ مثبت قوت نما وئی متاکربی رویا دیتا ہے جو ہمیں مساوات ۴.۵۷ میں نہیں چاہیے تھا۔ حقیقت میں متاکربی حل بھی رد اسی مساوات کے جائز حل ہے البتہ ہم ان میں دلچسپی نہیں رکھتے ہیں چونکہ یہ معمول پر نہیں لائے جاسکتے ہیں۔ اس علمیہ سے نجات کا صرف ایک ہی راستہ ہے، تسلسل کو کہیں نہ کہیں ختم ہونا ہو گا لازمی طور پر ایسا زیادہ سے زیادہ عادت سے ہی l بلند تر پایا جائیگا جہاں درج ذیل ہو گا۔

$$(4.83) \quad c_{j_{\max}+1} = 0$$

یوں کلیہ تواری کے تحت باقی تمام عددی سر ۰ ہونگے ظاہر ہے مساوات ۴.۶۳ کے درج ذیل ہو گا

$$(4.84) \quad 2(j_{\max} + l + 1) - \rho_0 = 0$$

صدر کو انٹم

$$(4.85) \quad n \equiv j_{\max} + l + 1$$

متعارف کرتے ہوئے درج ذیل ہو گا۔

$$(4.86) \quad \rho_0 = 2n$$

اب E کو ρ_0 تعین کرتا ہے مساوات ۴.۵۳ اور ۴.۵۵

$$(4.87) \quad E = \frac{-\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{-me^4}{8\pi^2 \epsilon^2 \hbar^2 \rho^2}$$

الذاتی اجزائی توانائیاں درج ذیل ہونگی

$$(4.88) \quad E_n = - \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon} \right)^2 \right] \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

یہ مشہور زمانہ کلیہ بہر ہے جو غالباً پورے کوانٹم میکانیٹ میں سب سے اہم ترین نتیجہ ہے جناب بہر نے سن ۱۹۱۳ میں یہ کلیہ کوانٹم میکانیٹ سے قبل تقریبی اندازے سے اخذ کیا۔ شروڈنگر مساوات سن ۱۹۲۴ میں منظر پر آئی مساوات ۴.۵۵ اور ۴.۶۸ کو ملا کر درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$(4.89) \quad k = \left(\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \right) \frac{1}{n} = \frac{1}{an}$$

جہاں

$$(4.90) \quad a \equiv \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-10} \text{m}$$

رداس بہر کہلاتا ہے۔ یوں مساوات ۴.۵۵ کے تحت درج ذیل ہو گا۔

$$(4.91) \quad \rho = \frac{r}{an}$$

ہائیڈروجن جوہر لے فضائی تقابل امواج کو 3 کوانٹم اعداد M اور N سے نام دیا جاتا ہے

$$(4.92) \quad \psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$$

جہاں مساوات 4.36 اور 4.60 کو دیکھتے ہوئے

$$(4.93) \quad R_{n,l}(r) = \frac{1}{r} \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho)$$

ہو گا۔ جبکہ وی رو متغیر رو میں جے بلند تر $j_{max} = n - l - 1$ درجہ کا کثیر رکنی ہو گا جس کے عددی سر جتنے معمول پر لانا باقی ہو گا درجہ ذیل کلیہ تواری دے گا

$$(4.94) \quad c_{j+1} = \frac{2(j+l+1-n)}{(j+1)(j+2l+2)} c_j$$

کم سے کم توانائی کا حال جسے زمینی حال کہتے ہیں، کے لیے $n = 1$ ہو گا۔ تہی مستقلوں کی یہ قیمتیں پر کرتے ہوئے درجہ ذیل حاصل ہو گا

$$(4.95) \quad E_1 = - \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon} \right)^2 \right] = 13.6 \text{ eV}$$

اس سے ظاہر ہے کہ ہائیڈروجن کی توانائی بھندن 13.6 eV ہے۔ یہ وہ توانائی ہے جو زمینی حال میں الیکٹرون کو میا کرنے سے ایٹم بدارا بن جائے گا۔ مساوات 4.67 کے تحت $l=0$ لہذا $m=0$ ہو گا۔ مساوات 4.29 دیکھے یوں درجہ ذیل ہو گا

$$(4.96) \quad \psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r) Y_0^0(\theta, \phi)$$

کلیہ تواری پہلے جزو پر پشی رکھ جاتا ہے۔ $j=0$ کے لیے مساوات 4.76 سے $c_1 = 0$ حاصل ہو گا۔ یوں وی رو ایک مستقل c_0 ہو گا۔ لہذا درجہ ذیل ہو گا

$$(4.97) \quad R_{10}(r) = \frac{c_0}{a} e^{-r/a}$$

اس کو مساوات 4.31 کے تحت معمول پر لانے سے ..

$$(4.98) \quad \int_0^\infty |R_{10}|^2 r^2 dr = \frac{c_0^2}{a^2} \int_0^\infty e^{-2r/a} r^2 dr = |c_0|^2 \frac{a}{4} = 1$$

حاصل ہو گا۔ ساتھ ہی $c_0 = 2/\sqrt{a}$ لہذا ہائیڈروجن کا زمینی حال درجہ ذیل ہو گا

$$(4.99) \quad \psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$$

اسی طرح $n=2$ کے لئے توانائی درجہ ذیل ہو گی

$$(4.100) \quad E_2 = \frac{-13.6 \text{ eV}}{4} = -3.4 \text{ eV}$$

چونکہ $m = 2$ کے لئے یا $l = 0$ ہو گا جو $m = 0$ دیتا ہے یا $l = 1$ ہو گا جو $l = 0$ اور $M = 0, 1$ دیتا ہے لہذا چار مختلف حالات کی توانائی E_2 ہو گی۔ کلیہ تواری مساوات 4.76 کے لیے درجہ ذیل دے گا:

$$(4.101) \quad c_1 = -c_0(j=0) \quad c_2 = 0(j=1)$$

لہذا $v(\rho) = c_0(1 - \rho)$ اور درجہ ذیل ہو گئے

$$(4.102) \quad R_{20}(r) = \frac{c_0}{2a} \left(1 - \frac{r}{2a} \right) e^{-r/2a}$$

دیہان رہے کہ مختلف کوانٹم اعداد l اور N کے لئے پھیلاؤ کے عددی سر c_j مکمل طور پر مختلف ہونگے۔ کلیہ توانی $l = 1$ کی صورت میں پہلے جزو پر اختتام پذیر ہو گا۔ وی رو ایک مستقل ہو گا لہذا درجہ ذیل حاصل ہو گا۔

$$(4.103) \quad R_{21}(r) = \frac{c_0}{4a^2} r e^{-r/2a}$$

ہر ایک صورت میں معمول پر لانے سے c_0 تعین ہو گا۔ سوال 4.11 دیکھیے۔ کسی بھی n کے لئے مساوات 4.67 کی بلا تضاد L کی ممکنہ قیمتیں درجہ ذیل ہوں گی

$$(4.104) \quad 0, 1, 2, \dots, n-1$$

جبکہ ہر l کے لئے m کی ممکنہ قیمتوں کی تعداد $2l+1$ ہوگی (مساوات 4.29)۔ لہذا E_n سطح کی توانائی کے لئے کل انحطاطیت درجہ ذیل ہوگی۔

$$(4.105) \quad d(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

کثیر رکنی وی رو جو مساوات 4-76 سے حاصل ہوگی ایک ایسا تفاعل ہے جس سے عملی ریاضی دان بخوبی واقف ہیں۔ ماسوائے معمول زنی کے اسے تجزیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(4.106) \quad v(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho)$$

جہاں

$$(4.107) \quad L_{q-p}^p(x) \equiv (-1)^p \left(\frac{d}{dx} \right)^p L_q(x)$$

ایک شریک لاگت کثیر رکنی ہے جبکہ

$$(4.108) \quad L_q(x) \equiv e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^q)$$

لاگت کثیر رکنی ہے۔ جدول 4.5 میں چند ابتدائی لاگت کثور رکنیا پیش کی گئی ہیں۔ جبکہ جدول 4.6 میں چند شریک لاگت کثیر رکنیا پیش کئے گئے ہیں۔ جدول 4.7 میں چند ابتدائی رداسی تفاعل امواج پیش کئے گئے ہیں جنہیں شکل 4.4 میں ترسیم کیا گیا ہے۔ ہائیڈروجن کے معمول شدہ تفاعل امواج درجہ ذیل ہیں۔

$$(4.109) \quad \psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na^3} \right) \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+1)!]^3}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na} \right)^l [L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na)] Y_l^m(\theta, \phi)$$

یہ تفاعل کچھ خوفناک ہیں، لیکن شکوہ نہ کیجیے گا۔ یہ اُن چند حقیقی نظاموں میں سے ایک ہے جن کا مکمل حل حاصل کرنا ممکن ہے۔ دیہان رہے کہ اگرچہ تفاعل امواج تینوں کوانٹم اعداد پر منحصر ہے جبکہ توانائیاں مساوات 4.70 کو صرف n تعین کرتا ہے۔ یہ کوولومب (coulomb) توانائی

کی ایک خاصیت ہے۔ آپ کو یاد ہو گا کہ کروی کنواں کی صورت میں توانائیاں L پر منحصر تھیں (مساوات 4.50)۔ تفاعل موج باہمی امودی ہوں گے۔

$$(4.110) \quad \int \psi_{nlm}^* \psi_{nlm} r^2 \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

یہ کروی ہارمونک کی امودیت مساوات 4.33 کی بنا اور $n \neq n'$ کی صورت میں تفاعلات موج کا H کی الگ تگ امتیازی اعقدار کے امتیازی تفاعل ہونے کی بنا ہے۔ پائیزروجن تفاعلات موج کی تصویر کشی آسان کام نہیں ہے۔ ماحرکیہ کسافنی اشکال بناتے ہیں جہاں چک $|\psi|^2$ کا راست متناسب ہوتا ہے (شکل 4.5)۔ ان سے زیادہ معلومات مستقل کسافت کے اشکال کی سطحوں کے اشکال دیتی ہے جنہیں پڑھنا نسبتاً مشکل ہو گا۔ (شکل 4.6)۔

باب 5

متمثال ذرات

باب 6

غیر تابع وقت نظریہ اضطراب

باب 7

تغیری اصول

باب 8

وڪب تخمين

باب 9

تابع وقت نظریہ اضطراب

باب 10

حرارت ناگزیر تخمین

باب 11

بکھراو

باب 12

پس نوشت

جوابات

