

کوانٹم میکانیٹ

ایک تعارف

خالد حسان یوسفزئی

جامعہ کامیٹ، اسلام آباد

khalidyou safzai@comsats.edu.pk

عنوان

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

ix

۱	۱	تفاسل موج
۱	۱.۱	۱. مساوات شروڈنگر
۲	۱.۲	۲. شماراتی مفہوم
۵	۱.۳	۳. احتمال
۵	۱.۳.۱	۱. غیر مسلسل متغیرات
۹	۱.۳.۲	۲. استمراری متغیرات
۱۲	۱.۴	۴. معمول زنی
۱۵	۱.۵	۵. معیار حرکت
۱۸	۱.۶	۶. اصول عدم یقینیت
۲۵	۲	غیر متایج وقت مساوات شروڈنگر
۲۵	۲.۱	۱. ساکن حالات
۳۱	۲.۲	۲. لامتناہی چوکور کنواں
۴۲	۲.۳	۳. ہارمونی سر تقش
۴۴	۲.۳.۱	۱. الجبرائی ترکیب
۵۳	۲.۳.۲	۲. تحلیلی ترکیب
۶۰	۲.۴	۴. آزاد ذرہ
۷۰	۲.۵	۵. ڈیلٹا تفاسل محفہ
۷۰	۲.۵.۱	۱. مقید حالات اور بجھراو حالات
۷۲	۲.۵.۲	۲. ڈیلٹا تفاسل کنواں
۸۱	۲.۶	۶. مستناہی چوکور کنواں
۹۷	۳	قواعد وضوابط
۹۷	۳.۱	۱. ہسٹ فضا
۱۰۱	۳.۲	۲. قابل مشاہدہ
۱۰۱	۳.۲.۱	۱. ہر مشی عاملین

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

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

۳۵۶	۹.۳	خود با خود احسراج
۳۵۶	۹.۳.۱	آمنطائن A اور B عددی سر
۳۵۸	۹.۳.۲	ہیجان حال کا عرصہ حیات
۳۶۱	۹.۳.۳	قواعد انتخاب
۳۷۱	۱۰	حرارت ناگزیر تخمین
۳۷۱	۱۰.۱	مسئلہ حرارت ناگزیر
۳۷۱	۱۰.۱.۱	حرارت ناگزیر عمل
۳۷۴	۱۰.۱.۲	مسئلہ حرارت نہ گزر کا ثبوت
۳۷۹	۱۰.۲	ہیت بیری
۳۷۹	۱۰.۲.۱	گرگئی عمل
۳۸۱	۱۰.۲.۲	ہندی ہیت
۳۸۶	۱۰.۲.۳	اہارو نوو پو ہم اثر
۳۹۵	۱۱	بکھراؤ
۳۹۵	۱۱.۱	تعارف
۳۹۵	۱۱.۱.۱	کلاسیکی نظریہ بکھراؤ
۳۹۹	۱۱.۱.۲	کوانٹم نظریہ بکھراؤ
۴۰۰	۱۱.۲	حبزوی موج تجزیہ
۴۰۰	۱۱.۲.۱	اصول و ضوابط
۴۰۳	۱۱.۲.۲	الایا عمل
۴۰۶	۱۱.۳	میتقلات حیط
۴۰۹	۱۱.۴	بارن تخمین
۴۰۹	۱۱.۴.۱	مساوات شرودنگر کی تکمیلی روپ
۴۱۳	۱۱.۴.۲	بارن تخمین اول
۴۱۸	۱۱.۴.۳	شکل بارن
۴۲۱	۱۲	پس نوشت
۴۲۲	۱۲.۱	آمنطائن پوڈ لکیوروزن تضاد
۴۲۳	۱۲.۲	مسئلہ بل
۴۲۸	۱۲.۳	مسئلہ کلیہ
۴۲۹	۱۲.۴	شرودنگر کی ہلی
۴۳۰	۱۲.۵	کوانٹم زینو تضاد
۴۳۳		جوابات
۴۳۵	۱	خطی الجبرا
۴۳۵	۱.۱	سمتیات
۴۳۵	۲.۱	اندرونی ضرب
۴۳۶	۳.۱	قتالب

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

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

گزشتہ چند برسوں سے حکومت پاکستان اعلیٰ تعلیم کی طرف توجہ دے رہی ہے جس سے ملک کی تاریخ میں پہلی مرتبہ اعلیٰ تعلیمی اداروں میں تحقیق کا رجحان پیدا ہوا ہے۔ امید کی جاتی ہے کہ یہ سلسلہ جاری رہے گا۔ پاکستان میں اعلیٰ تعلیم کا نظام انگریزی زبان میں رائج ہے۔ دنیا میں تحقیقی کام کا بیشتر حصہ انگریزی زبان میں ہی چھپتا ہے۔ انگریزی زبان میں ہر موضوع پر لاتعداد کتابیں پائی جاتی ہیں جن سے طلب و طالبات استفادہ کرتے ہیں۔

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

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

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

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

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

اس کتاب کے پڑھنے والوں سے گزارش کی جاتی ہے کہ اسے زیادہ سے زیادہ طلب و 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۔

حنالد خان یوسفزئی

28 اکتوبر 2011ء

باب ۷

تغیری اصول

۷.۱ نظریہ

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

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

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

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

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

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

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

variational principle^۱

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

گی۔

باب ۷. تغیری اصول

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

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

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

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

ہم یہی ثابت کرنا چاہتے تھے۔

□

مثال ۷.۱: فرض کریں ہم ایک بعدی ہارمونی سرکش:

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

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

$$(۷.۲) \quad \psi(x) = A e^{-bx^2}$$

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

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

تعیین کرتی ہے۔ اب

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

ہے، جبکہ یہاں

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

اور

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

لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

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

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

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

مثال ۷.۲: فرض کرے ہم ڈیلٹا تفاعل مخفیہ:

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

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

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

ظاہر ہے

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

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

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

لہذا

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

□

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

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

مثال ۷.۳: آزمائشی ”سکونی“ تنفع عمل موج (شکل ۷.۱):

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

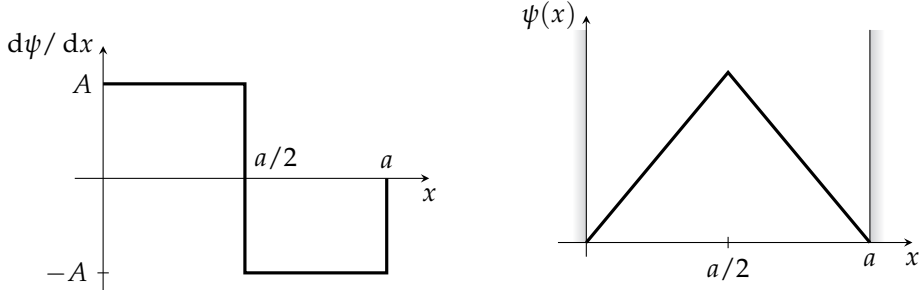
استعمال کرتے ہوئے ایک بعدی لامستثنائی چوکور کنویں کی زمینی حال توانائی کی بالائی حد بندی تلاش کریں، جہاں A معمولی زنی سے تعین کیا جائے گا۔

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

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

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

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



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

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

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

لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

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

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

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

$$V(x) = \alpha x^4 \quad \text{چو طاق ت مخفیہ}$$

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

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

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

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

سوال ۷.۴:

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

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

ب. آزمائشی تفاعل:

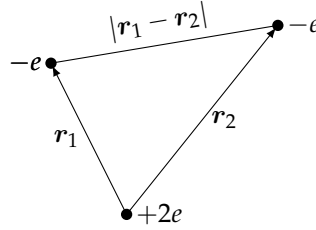
$$\psi(x) = A x e^{-bx^2}$$

استعمال کرتے ہوئے ایک بعدی ہارمونی مرتعش کے پہلے ہیجان حال کی بہترین بالائی حد بندی تلاش کریں۔

سوال ۷.۵:

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

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



شکل ۷.۳: ہیلیم جوہر۔

۷.۲ ہیلیم کا زمینی حال

ہیلیم جوہر (شکل ۷.۳) کے مرکزہ میں دو پروٹان اور دو نیوٹران جن کا یہاں کوئی کردار نہیں ہوگا پائے جاتے ہیں اور مرکزہ کے گرد مدار میں دو الیکٹران حرکت کرتے ہیں۔ مہین ساخت اور باریک طرز ہی کو نظر انداز کرتے ہوئے اس نظام کا ہیملٹنی درج ذیل ہوگا

$$(۷.۱۴) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\right)$$

ہم نے زمینی حال توانائی E_{gs} کا حساب کرنا ہوگا۔ طبعی طور پر یہ دونوں الیکٹران اکٹھا کرنے کے لیے درکار توانائی کو ظاہر کرتا ہے۔ E_{gs} جانتے ہوئے ہم ایک الیکٹران اکٹھا کرنے کے لیے درکار توانائی برداری عمل معلوم کر سکتے ہیں۔ سوال 6-7 دیکھیں۔ تجربہ گاہ میں ہیلیم کی زمینی حل توانائی کی قیمت کو انتہائی زیادہ درستگی تک پیمائش کیا گیا ہے۔

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

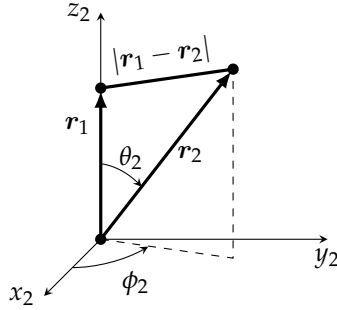
ہم نظریہ سے اسی عدد کو حاصل کرنا چاہیں گے۔ یہ تجسس کی بات ہے کہ ابھی تک اتنی سادہ اور اہم مسئلہ کا ٹھیک حل نہیں ڈھونڈا جاسکا ہے۔ مسئلہ الیکٹران الیکٹران دفع

$$(۷.۱۶) \quad V_{ee} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

پیدا کرتا ہے۔ اس جزو کو نظر انداز کرنے سے H ہائیڈروجن ہیملٹنی میں علیحدہ گاہو جاتا ہے جہاں مرکزہ بار e کی بجائے $2e$ ہوگا۔ اس کا ٹھیک ٹھیک حل ہائیڈروجن دفن لاج مانج کا حاصل ضرب ہوگا۔

$$(۷.۱۷) \quad \psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv \psi_{100}(\vec{r}_1)\psi_{100}(\vec{r}_2) = \frac{8}{\pi a^3} e^{-2(r_1+r_2)/a}$$

اور توانائی $8E_1 = -109 \text{ eV}$ الیکٹران دولٹ مساوات 5-31 ہوگی۔ یہ قیمت -79 eV الیکٹران دولٹ سے بہت دور ہے۔ تاہم یہ صرف آغاز ہے۔ ہم فائین ٹاٹ کو بھر کیا افعال موج لیتے ہوئے E_{gs} کی بہتر تخمینہ کو



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

اصول تغیریت سے حاصل کرتے ہیں چونکہ یہ زیادہ تر ہیملٹنی کا امتیازی تفاعل ہے لہذا یہ خصوصی طور پر بہتر انتخاب ہے۔

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

یوں درج ذیل ہوگا۔

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

جہاں درج ذیل ہے

$$(۷.۲۰) \quad \langle V_{ee} \rangle = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{8}{\pi a^3} \right)^2 \int \frac{e^{-4(r_1+r_2)/a}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$$

میں r_2 مکمل کو پہلے حل کرتا ہوں۔ یوں r_1 کو مستقل تصور کیا جائے گا۔ ہم r_2 کے محدودی نظام کو یوں رکھتے ہیں کہ اس کا قطبی محور r_1 پر پایا جاتا ہو (شکل ۷.۴)۔ متانوں کو سائن کے تحت

$$(۷.۲۱) \quad |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_2}$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۷.۲۲) \quad I_2 \equiv \int \frac{e^{-4r^2/a}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d^3r_2 = \int \frac{e^{-4r^2/a}}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_2}} r_2^2 \sin \theta_2 dr_2 d\theta_2 d\phi_2$$

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

$$\int_0^\pi \frac{\sin \theta_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_2}} d\theta_2 = \frac{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_2}}{r_1r_2} \Big|_0^\pi$$

$$= \frac{1}{r_1 r_2} (\sqrt{r_1^2 + r_2^2 + 2r_1 r_2} - \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2})$$

$$= \frac{1}{r_1 r_2} [(r_1 + r_2) - |r_1 - r_2|] = \begin{cases} 2/r_1 & r_2 < r_1 \\ 2/r_2 & r_2 > r_1 \end{cases}$$

یوں درج ذیل ہوگا

$$I_2 = 4\pi \left(\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} e^{-4r_2/a} r_2^2 dr_2 + \int_{r_1}^{\infty} e^{-4r_2/a} r_2 dr_2 \right)$$

$$= \frac{\pi a^3}{8r_1} [1 - (1 + \frac{2r_1}{a})e^{-4r_1/a}]$$

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

$$(۷.۲۲) \quad \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{8}{\pi a^3} \right) \int [1 - (1 + \frac{2r_1}{a})e^{-4r_1/a}] e^{-4r_1/a} r_1 \sin \theta_1 dr_1 d\theta_1 d\phi_1$$

ظوایائی کمالات 4π دینے کے جبکہ r_1 کا مکمل درج ذیل ہوگا

$$(۷.۲۳) \quad \int_0^{\infty} [re^{-4r/a} - (r + \frac{2r^2}{a})e^{-8r/a}] dr = \frac{5a^2}{128}$$

آخر میں اس طرح درج ذیل ہوگا

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

جس کی بنا پر درج ذیل ہوگا

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

یہ جواب زیادہ برا نہیں ہے۔ یاد رہے کہ تجرباتی قیمت 79-ایسکٹران وولٹ ہے۔ تاہم ہم اس سے بھی بہتر کر سکتے ہیں۔ ہم ψ_0 جو دو ایسکٹرانوں کو یوں تصور کرتا ہے جیسا ایک دوسرے پر اثر انداز نہیں ہوتے ہیں۔ سے بہتر زیادہ حقیقت پسند یہ پھر کیا تفاسل کا سوچ سکتے ہیں۔ ایک ایسکٹران کا دوسرے ایسکٹران پر اثر کو مکمل طور پر نظر انداز کرنے کی بجائے ہم کہتے ہیں کہ ایک ایسکٹران قواسطن منفی بار کی بطل کی طرح ہوگا جو مرکزہ کو جزوی طور پر سپر کرتا ہے جس کی بنا پر دوسرے ایسکٹران کو موثر مرکزہ کی بار Z کی قیمت 2 سے کچھ کم نظر آئے گی۔ اس سے ہمیں خیال آتا ہے کہ ہم درج ذیل روپ کا برقی تفاسل استعمال کریں۔

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

ہم Z کو تغیریت کا مقدار معلوم تصور کر کہ اس کی وہ تمام قیمت منتخب کر کے جس سے H کی کم سے کم قیمت حاصل ہو۔ دھیان رہے کہ فضول تغیریت کی ترکیب کبھی بھی ہیملٹنی کو تبدیل نہیں کرتا ہے۔ ہیلیم کا ہیملٹنی اب بھی مساوات 14.7 دی گئی البتہ تصور میں ہیملٹنی کی تخمینی قیمت کے بارے میں سوچ کے بہتر بلکيا تفاعلات موج حاصل کیا جاسکتا ہے۔ یہ تفاعلات موج اس غیر مضطرب ہیملٹنی جو الیکٹران کی دفع کو نظر انداز کرتا ہو جس میں coulomb میں دو کی جگہ Z پایا جاتا ہو کا امتیازی حال ہوگا۔ اس کو ذہن میں رکھتے ہوئے ہم $H_{14.7}$ کو روپ میں لکھتے ہیں

(۷.۲۸)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2}\right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{(Z-2)}{r_1} + \frac{(Z-2)}{r_2} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\right)$$

ظاہر ہے کہ H کی تحقیقاتی قیمت درج ذیل ہوگی

(۷.۲۹)

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

یہاں $\langle 1/r \rangle$ سی مساوی ایک ظرہ ہائیڈروجن زمینی حال سائے 100 جس میں مرکز دی ہار Z ہو میں $1/r$ کی تحقیقاتی قیمت ہے۔ یوں مساوات 55.6 کے تحت درج ذیل ہوگا

(۷.۳۰)

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{a}$$

یہاں بھی V_{ee} کی توقعاتی قیمت وہی ہوگی جو پہلے تھی۔ مساوات 65.7 لیکن اب ہم $Z=2$ کی بجائے اختیار Z استعمال کریں گے لہذا ہم a کو $2/Z$ سے ضرب کرتے ہیں

(۷.۳۱)

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

ان تمام کو اکٹھے کر کہ درج ذیل حاصل ہوگا

(۷.۳۲)

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

اصول تغیریت کے تحت Z کی کسی قیمت کے لیے یہ مقدار E_{gs} سے تجاوز کرے گی۔ بالائی حد بندی کی کم سے کم قیمت وہاں پائی جانے گی جب $\langle H \rangle$ کی قیمت کن سے کم ہو۔

(۷.۳۳)

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

جس سے درج ذیل حاصل ہوگا۔

(۷.۳۴)

$$Z = \frac{27}{16} = 1.69$$

یہ ایک معقول نتیجہ نظر آتا ہے جو کہتا ہے دوسرا الیکٹران مرکزہ کو سپر کرتا ہے جس کی بنا پر اس کی موثر بار 2 کی بجائے 69.1 نظر آتی ہے۔ اس قیمت کو z میں پر کر کہ درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$\langle H \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} \right)^6 E_1 = -77.5 \text{ eV} \quad (۷.۳۵)$$

قبلہ تقدیر مع معلوم کی تعداد بڑھا کر زیادہ پیچیدہ آزمائشی تفاسلات موج لے کر ہیلیم کی زمینی حال توانائی کو اسی ترکیب سے انتہائی زیادہ درستگی تک حاصل کیا گیا ہے ہم ٹھیک جواب کے دو فیصد متعریب ہیں لہذا اس کو ہمیں پر چھوڑتے ہیں۔ سوال ۷.۶: 6.7

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

سوال ۷.۷:

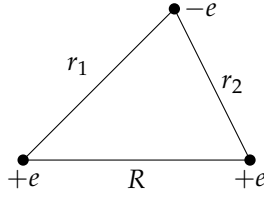
اس حصہ میں ملتمل ترکیبات کا اطلاق H^- اور Li^+ باردار یہ جن میں ہلیم کی طرح دو الیکٹران پائے جاتے ہیں اور جن کی مرکزوی بار با ترتیب $z=3, z=1$ ہیں کریں۔ پار یک ایک ایک باردار یہ کے لیے کاموثر جزوی سپر شدہ مرکزوی بار تلاش کر کہ E_{gs} کی بہترین بالائی حقیندی متعین کریں۔ باردار یہ H^- کی صورت میں آپ دیکھیں گے کہ $\langle H \rangle > -13.6 \text{ eV}$ ہوگا جس کے تحت کوئی مقید حال نہیں ہوگا۔ توانائی کی نقطہ نظر سے زیادہ بہتر صورتحال یہ ہوگی کہ الیکٹران درست ہو کر پیچھے مدرل ہائیڈروجن جوہر چھوڑے۔ یہ زیادہ حیرانگی کی بات نہیں ہے چونکہ ہیلیم کے لحاظ سے یہاں الیکٹران اور مرکزہ کے بیچ قوت کشش کم ہے۔ جبکہ الیکٹرانوں کے بیچ قوت دفع زیادہ ہے۔ جو اس جوہر کے توڑے گا حقیقت میں یہ نتیجہ درست نہیں ہے۔ زیادہ نفیس برقی تفاسلات موج ساتھ 18.7 دیکھیں منتخب کر کے دکھایا جاسکتا ہے کہ $E_{gs} < -13.6 \text{ eV}$ ہوگا لہذا مقید حال موجود ہوگا۔ البتہ یہ نامشکل مقید ہوگا اور کوئی جہانی مقید حالات نہیں پائے جاتے ہیں پوں H^- کا غنیر مسلسل طیف نہیں پایا جاتا ہے۔ تمام عبور از تسمیرا یا کو اور ان کے بیچ فاصلہ R ہے۔ اگر چہ اس حساب کا ایک دلچسپ ذیلی نتیجہ R کی اصل اگر چہ سورج کی سطح پر ان کی کشیر تعداد پائی جاتی ہے۔

۳. ہائیڈروجن سالمہ باردار یہ

اصول تغیریت کی ایک اور پلاسی کی استعمال۔ ہائیڈروجن سالمہ باردار یہ H_2^+ کا معائنہ ہے۔ ہائیڈروجن سالمہ باردار یہ دو پروٹان کی کولمب میدان میں ایک الیکٹران پر مشتمل ہے (شکل ۷.۵)۔ میں فی الوقت فرض کرتا ہوں کہ دونوں پروٹان ساکن ہیں اور ان کے بیچ فاصلہ R ہے۔ اگر چہ اس حساب کا ایک دلچسپ ذیلی نتیجہ R کی اصل قیمت ہوگی۔ ہم ملٹی درج ذیل ہوگا۔

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \quad (۷.۳۶)$$

جہاں r_1 اور r_2 الیکٹران سے متعلق پروٹان تک فاصلہ ہے۔ ہمیشہ کی طرح ہم کو شش کریں گے کہ ایک ایسا پھر کی تفاسل موج کا انتخاب کریں جس کو استعمال کرتے ہوئے زمینی حال توانائی کی حد بندی اصول تغیریت



شکل ۷.۵: ہائیڈروجن سال باردار H_2^+

سے حاصل ہو۔ درحقیقت ہم صرف انتخابنا چاہتے ہیں کہ آیا اس نظام میں بند پیدا ہوگا یعنی آیا ایک معادل ہائیڈروجن جوہر اور ایک آزاد پروٹان سے کیا اس نظام کی توانائی کم ہوگی۔ اگر ہماری پھر کی تفاعل موج دکھائے کہ ایک مفید حال پایا جاتا ہے۔ اس سے زیادہ بہتر پھر کی تفاعل اس بند کو مزید طاقتور بنائے گا۔

پھر کی تفاعل موج تیار کرنے کی خاطر فرض کریں زمینی حال مہوار 80.4

$$(۷.۳۷) \quad \psi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a}$$

میں ایک ہائیڈروجن جوہر کے متعریب لامتناہی دوسرا پروٹان متعریب لاکر فاصلہ R پر رکھ کر باردار پیدا کیا جاتا ہے۔ اگر رداس بھر سے r کافی بڑا ہو تب الیکٹران کی تفاعل موج غلبہ زیادہ تبدیل نہیں ہوگا۔ تاہم ہمیں دونوں پروٹان کو ایک نظر سے دیکھنا ہوگا۔ لہذا کسی ایک کے ساتھ الیکٹران کی وابستگی کا احتمال ایک جیسا ہوگا۔ اس سے ہمیں خیال آتا ہے کہ ہم درج ذیل روپ کے پھر کی تفاعل

$$(۷.۳۸) \quad \psi = A[\psi_0(r_1) + \psi_0(r_2)]$$

پر غور کریں۔ ماہر کو انٹیم کیا اس ترکیب کو جوہری مدارچوں کا خطی جوڑ کہتے ہیں۔ سب سے پہلا کام پھر کی تفاعل کی معمول زنی ہے۔

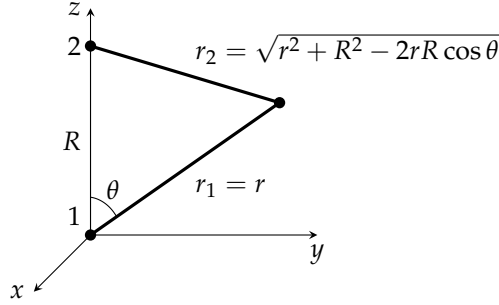
$$(۷.۳۹) \quad 1 = \int |\psi|^2 d^3r = |A|^2 \left[\int |\psi_0(r_1)|^2 d^3r + \int |\psi_0(r_2)|^2 d^3r + 2 \int \psi_0(r_1)\psi_0(r_2) d^3r \right]$$

پہلے دو عملیات کا نتیجہ ایک ہے۔ چونکہ ψ_0 خود معمول شدہ ہے۔ تیسرا زیادہ پیچیدہ ہے۔ درج ذیل فرض کریں۔

$$(۷.۴۰) \quad I \equiv \langle \psi_0(r_1) | \psi_0(r_2) \rangle = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-(r_1+r_2)/a} d^3r$$

ایسا معتدی نظام کھڑا کریں جس کہ نقطہ پر پروٹان 1 پایا جاتا ہو جبکہ Z محور پر فاصلہ R پر پروٹان 2 پایا جاتا ہو (شکل ۷.۶)۔ یوں درج ذیل ہوگا۔

$$(۷.۴۱) \quad r_1 = r \quad r_2 = \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta}$$



شکل ۷.۶: مقدار I کے حساب کی خاطر محدود (مساوات 39.7)۔

لہذا درجہ ہوگا۔

$$(۷.۴۲) \quad I = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-r/a} e^{-\sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta}/a} r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi$$

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

$$(۷.۴۳) \quad y \equiv \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta}$$

لہذا

$$(۷.۴۴) \quad d(y^2) = 2y \, dy = 2rR \sin \theta \, d\theta$$

ہوگا۔ تب درجہ ذیل ہوگا۔

(۷.۴۵)

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

اب مکمل r با آسانی حل ہوگا۔

(۷.۴۶)

$$I = \frac{2}{a^2 R} [-e^{-R/a} \int_0^\infty (r+R+a) e^{-2r/a} r \, dr + e^{-R/a} \int_0^R (R-r+a) r \, dr + e^{R/a} \int_R^\infty (r-R+a) e^{-2r/a} r \, dr]$$

ان عملیات کی قیمتیں حاصل کرنے کے بعد کچھ الجبرائی تفصیل کے بعد درجہ ذیل حاصل ہوگا۔

(۷.۴۷)

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

باب ۷. تغیری اصول

۷.۴۸) I کو مکمل ڈمب کہتے ہیں جو $\psi_0(r_1)$ کا $\psi_0(r_2)$ پر چپڑھنے کی مقدار کی پیمائش ہے۔ دھیان رہے کہ $R \rightarrow 0$ کی صورت میں یہ ایک پہنچتا ہے۔ جبکہ $R \rightarrow \infty$ کی صورت میں یہ صفر کو پہنچتا ہے۔ مکمل ڈمب i میں حبزوزربی معمول زنی مساوات 38.7 در جب ذیل ہوگا۔

$$(۷.۴۸) \quad |A|^2 = \frac{1}{2(l+1)}$$

اس کے بعد ہمیں پھر کی حال ψ میں H کی توقعاتی قیمت کا حساب کرنا ہوگا۔ در جب ذیل۔

$$(۷.۴۹) \quad \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} \right) \psi_0(r_1) = E_1 \psi_0(r_1)$$

جہاں $E_1 = -13.6 \text{ eV}$ جو ہری ہائیڈروجن کی زمینی حال توانائی ہے اور r_1 کی جگہ r_2 کے لئے بھی یہی کچھ کے بنا پر در جب ذیل ہوگا۔

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

یوں H کی توقعاتی قیمت در جب ذیل ہوگی۔

$$(۷.۵۰) \quad \langle H \rangle = E_1 - 2|A|^2 \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left[\langle \psi_0(r_1) | \frac{1}{r_2} | \psi_0(r_1) \rangle + \langle \psi_0(r_1) | \frac{1}{r_1} | \psi_0(r_2) \rangle \right]$$

میں آپ کے لئے باقی دو مقدار جو بلا واسطہ مکمل

$$(۷.۵۱) \quad D \equiv a \langle \psi_0(r_1) | \frac{1}{r_2} | \psi_0(r_1) \rangle$$

اور مبادلہ مکمل

$$(۷.۵۲) \quad X \equiv a \langle \psi_0(r_1) | \frac{1}{r_1} | \psi_0(r_2) \rangle$$

کہلاتا ہے۔ حل کرنے کے لئے چھوڑتا ہوں۔ بلا واسطہ مکمل کا نتیجہ در جب ذیل

$$(۷.۵۳) \quad D = \frac{a}{R} - \left(1 + \frac{a}{R} \right) e^{-2R/a}$$

اور مبادلہ مکمل کا نتیجہ در جب ذیل ہے۔

$$(۷.۵۴) \quad X = \left(1 + \frac{R}{a} \right) e^{-R/a}$$

ان تمام نتائج کو اکٹھے کرتے ہوئے اور یاد رکھتے ہوئے مساوات 70.4 اور 72.4 کہ $E_1 = -(e^2/4\pi\epsilon_0)(1/2a)$ ہے۔ ہم درج ذیل اخذ کرتے ہیں۔

$$(۷.۵۵) \quad \langle H \rangle = \left[a + 2 \frac{(D + X)}{(1 + L)} \right] E_1$$

اصول تغیریت کے تحت زمینی حال توانائی $\langle H \rangle$ سے کم گی۔ یقیناً یہ صرف الیکٹران کی توانائی ہے۔ اس کے ساتھ پروٹان پروٹان دفع سے وابستہ مخفی توانائی بھی پائی جائے گی۔

$$(۷.۵۶) \quad V_{pp} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R} = -\frac{2a}{R} E_1$$

یوں نظام کی کل توانائی مائیس E_1 کی اکائیوں میں $x \equiv R/a$ کا تناسب لکھتے ہوئے درج ذیل سے کم ہوگا۔

$$(۷.۵۷) \quad F(x) = -1 + \frac{2}{X} \left\{ \frac{(1 - (2/3)x^2)e^{-x} + (1 + x)e^{-2x}}{1 + (1 + x + (1/3)x^2)e^{-x}} \right\}$$

اس تناسب کو شکل ۷.۷ میں ترسیم کیا گیا ہے۔ اس ترسیم کا کچھ حصہ منفی ایک سے نیچے ہے۔ جہاں معادل جو ہر جمع ایک آزاد پروٹان کی توانائی مائیس 6.13 الیکٹران وولٹ سے توانائی کم ہے۔ لہذا اس نظام میں بند پیدا ہوگا۔ یہ ایک شریک گرفتاری بند ہوگا، جہاں دونوں پروٹان کا الیکٹران میں ایک دوسرے کے برابر حصہ ہوگا۔ پروٹان کے بیچ توازنی فاصلہ تقریباً 4.2 ردا اس بوہر یعنی 3.1 ڈگسٹر روم ہے۔ جس کی تجرباتی قیمت 06.1 ڈگسٹر روم ہے۔ توانائی بندش کی حساب سے حاصل قیمت 8.1 الیکٹران وولٹ جبکہ پیشہ نشی قیمت 8.2 الیکٹران وولٹ ہے۔ چونکہ اصول تغیریت ہر صورت زمینی حال توانائی سے تجاوز کرتا ہے لہذا یہ بندش کی طاقت کی قیمت کم دے گا۔ بسر حال اس کی منکر نہ کریں۔ یہاں اہم نقطہ یہ ہے کہ بندش پایا جاتا ہے۔ ایک بہتر تغیراتی تناسب اس مخفیہ کو مزید گہرا کرے گا۔

سوال ۷.۸: 8.7

بلا واسطہ عمل D اور مبادلہ مکمل X مساوات 45.7 اور 46.7 کی قیمتیں تلاش کریں۔ اپنے جوابات کا موازنہ مساوات 47.7 اور 48.7 کے ساتھ کریں۔

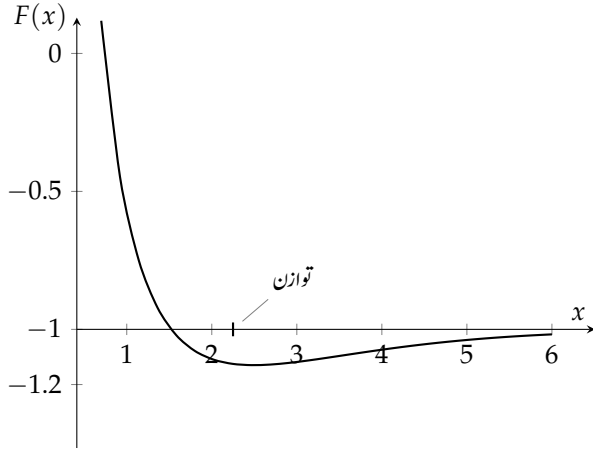
سوال ۷.۹: 9.7

فرض کریں ہم نے پھر کی تناسب عمل موج مساوات 37.7 میں منفی علامت استعمال کی ہوئی۔

$$(۷.۵۸) \quad \psi = A[\psi_0(r_1) - \psi_0(r_2)]$$

کوئی نیا مکمل حل کیے بغیر مساوات 51.7 کا مشاغل $F(x)$ معلوم کر کے ترسیم کریں۔ دکھائیں کہ ایسی صورت میں بند پیدا نہیں ہوگا۔ چونکہ اصول تغیریت صرف بالائی حد بندی دیتا ہے لہذا اس سے یہ ثابت نہیں ہوگا کہ ایسے حال میں بند نہیں پایا جائے گا۔ تاہم اس سے زیادہ امید بھی نہیں کرنی چاہیے۔ تبصرہ در حقیقت درج ذیل روپ کا کوئی تناسب

$$(۷.۵۹) \quad \psi = A[\psi_0(r_1) + e^{i\phi}\psi_0(r_2)]$$



شکل ۷.۷: تفاعل $F(x)$ (مساوات 51.7) کی ترسیم مقید حال کی موجودگی دکھاتی ہے (بوبر داس کی اکائیوں میں x دو پروٹان کے بیچ فاصلہ ہے)۔

کی ایک خاصیت یہ ہے کہ الیکٹران دونوں پروٹان کے ساتھ برابر کا وابستگی رکھتا ہے۔ تاہم چونکہ باہمی اول بدل $r_1 \leftrightarrow r_2$ کی صورت میں ہیملٹنی مساوات 35.7 غیر متغیر ہے۔ لہذا اس کے امتیازی تفاعل کو بیک وقت P کے امتیازی تفاعل چنا جاسکتا ہے۔ امتیازی فتر $+1$ کے ساتھ مثبت علامت۔ مساوات 37.7 اور امتیازی فتر منفی 1 کے ساتھ منفی علامت مساوات 52.7 ہوگا۔ زیادہ عمومی صورت مساوات 53.7 کا استعمال مزید فائدہ نہیں دے گا۔ اگرچہ آپ چاہیں تو اسے استعمال کر کے دیکھ سکتے ہیں۔

سوال ۷.۱۰: 10.7

نقطہ توازن پر $F(x)$ کی دوہرا تفرق سے ہائیڈروجن سالہ بارداریہ حصہ 3.2 میں دونوں پروٹان کی ارتعاش کی فترتی تعدد او میکہ کی انداز قیمت تلاش کی جاسکتی ہے۔ اگر اس موردیش کی زمینی حال توانائی $\hbar\omega/2$ نظام کی بندشی توانائی سے زیادہ ہو تب نظام بکھر کر ٹوٹ جائے گا۔ دکھائیں کہ حقیقت میں موردیش توانائی اتنی کم ہے کہ ایسا کبھی بھی نہیں ہوگا۔ ساتھ ہی مقید لرزشی سطحوں کی انداز تعدد دریافت کریں۔ تبصرہ آپ دہلیلی طور پر کم سے کم نقطہ یا اس نقطہ پر دوہرا تفرق حاصل نہیں کر پائیں گے۔ اعدادی طریقہ یا کمپیوٹر کی مدد سے ایسا کیجئے گا۔

سوال ۷.۱۱: 11.7

الف) درج ذیل روپ کاربئی تفاعل موج

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos(\pi x/a) & (-a/2 < x < a/2) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (7.20)$$

دیگر صورت اس کا استعمال کرتے ہوئے ایک بعدی ہارمونی مرتعش کی زمینی حال توانائی کی حد بندی تلاش کریں۔ a کی بہترین قیمت کیا ہوگی۔ H کمترین کموازنہ ٹھیک توانائی سے کریں۔ تبصرہ: بربئی تفاعل میں $\pm a/2$ پر ایک بل پایا جاتا ہے ایک غیر استمراری تفرق کیا آپ تو اس سے نمٹن ہوگا جیسے مجھے مثال 3.7 میں نمٹن پڑا۔

ب) وقفہ $\psi(x) = B \sin(\pi x/a)$ پر $(-a, a)$ استعمال آتے ہوئے پہلے حال کی حد بندی تلاش کریں۔ اپنے جواب کا ٹھیک ٹھیک جواب کے ساتھ موازنہ کریں۔

سوال ۷.۱۲: 12.7
الف) درج ذیل برقی تقا عمل موج

$$\psi(x) = \frac{A}{(x^2 + b^2)^n} \quad (۷.۶۱)$$

جہاں n اختیاری مستقل ہے استعمال کرتے ہوئے سوال 2.7 کو عمومیت دیں مقدار معلوم b کی بہترین قیمت درج ذیل دے گا۔

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left[\frac{n(4n-1)(4n-3)}{2(2n+1)} \right]^{1/2} \quad (۷.۶۲)$$

ب) ہارمونی مرتعش کی پہلی ہیجان حال تو بالائی حد بندی کی کم سے کم قیمت درج ذیل برقی تقا عمل استعمال کرتے ہوئے معلوم کریں۔

$$\psi(x) = \frac{Bx}{(x^2 + b^2)^n} \quad (۷.۶۳)$$

جسزوی جواب مقدار معلوم b کی بہترین قیمت درج ذیل دے گا۔

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left[\frac{n(4n-5)(4n-3)}{2(2n+1)} \right]^{1/2} \quad (۷.۶۴)$$

ج) آپ دیکھیں گے کہ $n \rightarrow \infty$ حد بندی بالکل ٹھیک تو انیوں تک پہنچتی ہے۔ ایسا کیوں ہے؟ اشارہ: برقی تقا عملات امواج کو $n = 2, n = 3$ اور $n = 4$ کے لیے ترسیم کرتے ہوئے ان کا موازنہ اصل تقا عملات موج مساوات 59.2 اور 62.2 کے ساتھ کریں۔ تحلیلی طور پر ایسا کرنے کی حنا طر درج ذیل مثال سے آغاز کریں۔

$$e^z = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{z}{n} \right)^n \quad (۷.۶۵)$$

سوال ۷.۱۳: 13.1
ہائیڈروجن کی زمینی حال کی کم سے کم حد بندی گاوسی برقی موج تقا عمل

$$\psi(r) = Ae^{-br^2} \quad (۷.۶۶)$$

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

سوال ۷.۱۴: 14.7
اگر نوریہ کی کیت غیر صفر ($m_\gamma \neq 0$) ہوتی تب مخفیہ کی جگہ یو کو احتیا

$$V(r) = \frac{-e^2}{3\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad (۷.۶۷)$$

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

سوال ۷.۱۵: فرض کریں آپکو ایک ایسا کو انٹم نظام دیا جاتا ہے جس کا ہیملٹنی H_0 صرف دو امتیازی حالات کا حامل ہو ψ_a جس کی توانائی E_a اور ψ_b جس کی توانائی E_b ہو۔ یہ عمومی معمول شدہ اور غیر انتہائی ہے۔ مزید فرض کریں کہ $E_a < E_b$ ہے۔ اب ہم اضطراب H' چالو کرتے ہیں۔ جس کے متعلق ارکان درج ذیل ہیں۔

$$(۷.۶۸) \quad \langle \psi_a | H' | \psi_a \rangle = \langle \psi_b | H' | \psi_b \rangle = 0 \quad \langle \psi_a | H' | \psi_b \rangle = \langle \psi_b | H' | \psi_a \rangle = h$$

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

$$(۷.۶۹) \quad \psi = (\cos \phi) \psi_a + (\sin \phi) \psi_b$$

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

سوال ۷.۱۶: ہم سوال ۷-15 میں تیار کی گئی ترکیب مشال کے طور پر یکساں مقناطیسی میدان $\vec{B} = B_z \hat{k}$ میں ایک ساکن الیکٹران پر غور کرتے ہیں۔ جس کا ہیملٹنی مساوات 4-158 درج ذیل ہوگا

$$(۷.۷۰) \quad H_0 = \frac{eB_z}{m} S_z$$

امتیازی چکر کار x_a اور x_b ان کی مطابقتی توانائیاں E_a اور E_b مساوات 161.7 میں دی گئی ہیں۔ اب ہم X درج ذیل روپ کے یکساں میدان

$$(۷.۷۱) \quad H' = \frac{eB_x}{m} S_x$$

کے اضطراب کو چالو کرتے ہیں۔ الف) اضطراب H' کے متعلق ارکان تلاش کر کہ تصدیق کریں کہ ان کا ساخت مساوات 55.7 تو طرح ہے یہاں H کیا ہوگا؟ ب) دوم رتبہ نظریہ اضطراب میں نئی زمینی حال توانائی کو سوال 15.7 (ب) استعمال کرتے ہوئے تلاش کریں۔ ج) زمینی حال توانائی کی حد بندی سوال 15.7 (ج) کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے اصول تغیریت سے حاصل کریں

سوال ۷.۱۷: 17.7 اگر چہ ہیلیم کے لیے مساوات شرودنگر کو ٹھیک ٹھیک حل نہیں کیا جاسکتا ہے مگر ہیلیم کے ایسے نظام پائے جاتے ہیں جن کے ٹھیک ٹھیک حل معلوم کیے جاسکتے ہیں۔ اس کی ایک سادہ مثال ربڑی پٹی ہیلیم ہے جس میں کوئوں کی بجائے قانون ہک کی درج ذیل قوتیں استعمال ہوگی

$$(۷.۷۲) \quad H = \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{2} m \omega^2 (r_1^2 + r_2^2) - \frac{\lambda}{4} m \omega^2 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^2$$

(الف) دکھائیں کہ متغیرات \vec{r}_1, \vec{r}_2 کی بجائے متغیرات

$$(۷.۷۳) \quad \vec{u} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \quad \vec{v} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

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

$$(۷.۷۴) \quad H = \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_\mu^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \mu^2 \right] + \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_\nu^2 + \frac{1}{2} (1 - \lambda) m \omega^2 \nu^2 \right]$$

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

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

سوال ۷.۱۸: 18.7

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

$$(۷.۷۵) \quad \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \equiv A[\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) + \psi_2(r_1)\psi_1(r_2)]$$

جہاں درج ذیل ہے

$$(۷.۷۶) \quad \psi_1(r) \equiv \sqrt{\frac{z_1^3}{\pi a^3}} e^{-z_1 r/a} \quad \psi_2(r) \equiv \sqrt{\frac{z_2^3}{\pi a^3}} e^{-z_2 r/a}$$

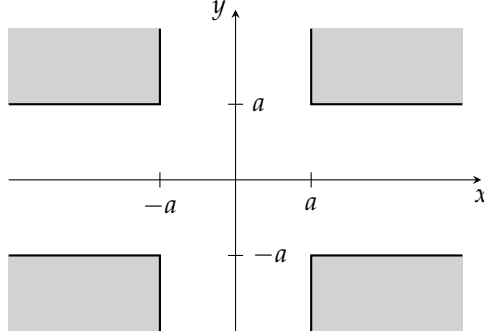
یعنی انہوں نے دو مختلف سپر اجزائے ضربی کی اجازت دی ایک الیکٹران کو مرکزہ کے متفریب اور دوسرے کو مرکزہ سے دور تصور کیا گیا۔ چونکہ الیکٹران متبادل ذرہ ہے لہذا افصائی تقاضا عمل موج کو باہمی مبادلہ کے لحاظ سے لازماً تشاکلی بنانا ہوگا چکر حال جس کا موجودہ حساب میں کوئی کردار نہیں پایا احباب احلاف تشاکلی ہے۔ دکھائیں کہ متبادل تبدیل مقدار معلوم Z_1 اور Z_2 کی قیمتوں کو سوچ کہ منتخب کرنے سے $\langle H \rangle$ کی قیمت -13.6eV سے کم حاصل کی جا سکتی ہے۔ جواب:

$$(۷.۷۷) \quad \langle H \rangle = \frac{E_1}{x^6 + y^6} (-x^8 + 2x^7 + \frac{1}{2}x^6y^2 - \frac{1}{2}x^5y^2 - \frac{1}{8}x^3y^4 + \frac{11}{8}xy^6 - \frac{1}{2}y^8)$$

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

سوال ۷.۱۹: 19.7

جو بری برکن کو برقرار رکھنے میں بنیادی مسئلہ دو ذرات مثلاً دو ڈیوٹران کو ایک دوسرے کے اتنا متفریب لانا ہے



شکل ۸.۷: صلیبی خطہ برائے سوال 20.7

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

سوال 20.7: ۷.۲۰: ۷.۸ میں دکھائے گئے صلیبی خطہ پر دو ابعاد میں حرکت کرنے کا پابند بنایا جائے صلیبی ہاتھ لامتناہی تک پہنچتے ہیں۔ سلیب کے اندر مخفی ضرر ہے جو کہ اس کے باہر لامتناہی ہے۔ حیرانی کی بات ہے کہ یہ تفصیل مثبت توانائی مقید حال کا حامی ہے۔

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

$$E_{\text{threshold}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}; \quad (7.48)$$

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

$$\psi(x,y) = A \begin{cases} (1 - |xy|/a^2)e^{-\alpha} & |x| \leq a, |y| \leq a \\ (1 - |x|/a)e^{-\alpha|y|/a} & |x| \leq a, |y| > a \\ (1 - |y|/a)e^{-\alpha|x|/a} & |x| > a, |y| \leq a \\ 0 & \end{cases} \quad (7.49)$$

اس کو معمول پر لا کر A تعین کریں۔ اور H کی توقعاتی قیمت کا حساب لگائیں۔ جواب:

$$\langle H \rangle = \frac{3\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{\alpha^2 + 2\alpha + 3}{6 + 11\alpha} \right) \quad (۷.۸۰)$$

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

جوابات