

کوانٹم میکینکات

خالد حسان یوسفزئی

جامعہ کامپیٹ، اسلام آباد

khalidyou safzai@comsats.edu.pk

۲۰۲۱ جون ۲۱

عنوان

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

vii

۱	تفاسل موج	۱
۱	۱.۱ شرو وڈنگر مساوات	۱
۲	۱.۲ شماراتی مفہوم	۲
۵	۱.۳ احتمال	۵
۵	۱.۳.۱ غیر مسلسل تغیرات	۵
۹	۱.۳.۲ استمراری تغیرات	۹
۱۲	۱.۴ معمول زنی	۱۲
۱۵	۱.۵ معیار حرکت	۱۵
۱۸	۱.۶ اصول عدم یقینیت	۱۸
۲۱	۲ غیر متابع وقت شرو وڈنگر مساوات	۲۱
۲۱	۲.۱ ساکن حالات	۲۱
۲۷	۲.۲ لامستثنای چپکور کنواں	۲۷
۳۶	۲.۳ ہارمونی سر نقش	۳۶
۳۸	۲.۳.۱ الجبرائی ترکیب	۳۸
۴۷	۲.۳.۲ تحلیلی ترکیب	۴۷
۵۳	۲.۴ آزاد ذرہ	۵۳
۶۱	۲.۵ ڈیلٹا تفاسل محفہ	۶۱
۶۱	۲.۵.۱ مقید حالات اور بکھراؤ حالات	۶۱
۶۳	۲.۵.۲ ڈیلٹا تفاسل کنواں	۶۳
۷۰	۲.۶ مستثنای چپکور کنواں	۷۰
۷۹	۳ قواعد و ضوابط	۷۹
۷۹	۳.۱ ہر مشی عامل کے امتیازی تفاسل	۷۹
۷۹	۳.۱.۱ غیر مسلسل طیف	۷۹
۸۱	۳.۱.۲ استمراری طیف	۸۱

۳.۲	متعم شریاتی مفہوم	۸۵
۳.۳	اصول عدم یقینیت	۸۸
۳.۳.۱	اصول عدم یقینیت کا ثبوت	۸۹
۳.۳.۲	کم سے کم عدم یقینیت کا موجدی اکٹھ	۹۲
۳.۳.۳	توانائی و وقت اصول عدم یقینیت	۹۳
۳.۴	ڈیراک علامتیت	۹۷
۴	تین البادی کو انٹرمیکانیات	۱۱۱
۴.۱	کروی محدود میں مساوات شروڈنگر	۱۱۱
۴.۱.۱	علیحدگی متغیرات	۱۱۳
۴.۱.۲	زاویائی مساوات	۱۱۴
۴.۱.۳	ردای مساوات	۱۱۹
۴.۲	ہائیڈروجن جوہر	۱۲۳
۴.۲.۱	ردای تقاسم عمل موج	۱۲۴
۴.۲.۲	ہائیڈروجن کا طیف	۱۳۴
۴.۳	زاویائی معیار حرکت	۱۳۶
۴.۳.۱	امتیازی اقدار	۱۳۷
۵	متنازل ذرات	۱۴۱
۶	غیر تابع وقت نظریہ اضطراب	۱۴۳
۷	تغیری اصول	۱۴۵
۸	وکب تخمین	۱۴۷
۹	تابع وقت نظریہ اضطراب	۱۴۹
۱۰	حرارت ناگزیر تخمین	۱۵۱
۱۱	بکھراؤ	۱۵۳
۱۲	پس نوشت	۱۵۵
	جوابات	۱۵۷
۱	خطی الجبرا	۱۵۹
۱.۱	سمتیاریت	۱۵۹
۲.۱	اندرونی ضرب	۱۵۹
۳.۱	فتالب	۱۵۹
۴.۱	تبدیلی اساس	۱۵۹

۱۵۹	امتیازی تفاعلات اور امتیازی افتدار	۵.۱
۱۵۹	هر مشی تباله	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 مطالبات 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 حنان یوسفزئی

28 اکتوبر 2011ء

باب ۲

غیر تابع وقت شرودنگر مساوات

۲.۱ ساکن حالات

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

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

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

$$(۲.۲) \quad \Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t)$$

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

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

separation of variables¹

جودہ 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۔

$$(۲.۳) \quad i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V$$

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

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

$$(۲.۴) \quad \frac{d\varphi}{dt} = -\frac{iE}{\hbar} \varphi \quad \text{یا}$$

اور

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

$$(۲.۵) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi \quad \text{یا}$$

علیحدگی متغیرات نے ایک جزوی تفرقی مساوات کو دوسرا تفرقی مساوات (مساوات ۲.۴ اور ۲.۵) میں علیحدہ کیا۔ ان میں سے پہلی (مساوات ۲.۴) کو حل کرنا بہت آسان ہے۔ دونوں اطراف کو dt سے ضرب دیجئے ہوئے مکمل لیں۔ یوں عمومی حل $Ce^{-iEt/\hbar}$ حاصل ہوگا۔ چونکہ ہم حاصل ضرب $\psi\varphi$ میں دلچسپی رکھتے ہیں لہذا ہم مستقل C کو ψ میں ضم کر سکتے ہیں۔ یوں مساوات ۲.۴ کا حل درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

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

دوسری (مساوات ۲.۵) کو غیر متابع وقت شرودنگر مساوات^۲ کہتے ہیں۔ پوری طرح مخفی توانائی V جانے بغیر ہم آگے نہیں بڑھ سکتے ہیں۔

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

(1) یہ ساکن حالات ہیں۔ اگرچہ تعامل موج از خود

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

وقت t کا تابع ہے، کثافت احتمال

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

وقت کا تابع نہیں ہے؛ تابعیت وقت کٹ جاتی ہے۔ یہی کچھ کسی بھی حشر کی متغیر کی توقعاتی قیمت کے حساب میں ہوگا۔ مساوات ۱.۳۶ تخفیف کے بعد درج ذیل صورت اختیار کرتی ہے۔

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

ہر توقعاتی قیمت، وقت میں منتقل ہوگی؛ 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 تعامل 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 تعامل موج ہر صورت تابع وقت ہو گا۔ بالخصوص $\langle x \rangle$ منتقل ہو گا لہذا (مساوات ۱.۳۳ کے تحت) $\langle p \rangle = 0$ ہوگا۔ ساکن حال میں کبھی بھی کچھ نہیں ہوتا ہے۔

(2) یہ غیر مبہم کل توانائی کے حالات ہوں گے۔ کلاسیکی میکانیات میں کل توانائی (حشر کی جمع خفی) کو ہیملٹن^۲ کہتے ہیں جس کو H سے ظاہر کیا جاتا ہے۔

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

اس کا مطلب یقینی ہیملٹنی عامل، قواعد و ضوابط کے تحت $p \rightarrow (\hbar/i)(\partial/\partial x)$ پر کر کے درج ذیل حاصل ہوگا۔

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

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

$$(۲.۱۲) \quad \hat{H}\psi = E\psi$$

جس کے کل توانائی کی توقعاتی قیمت درج ذیل ہوگی۔

$$\langle H \rangle = \int \psi^* \hat{H} \psi dx = E \int |\psi|^2 dx = E \int |\Psi|^2 dx = E \quad (۲.۱۳)$$

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ ψ کی معمولی ψ کی معمولی ψ 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 ہوگا۔

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

یوں H کی تغیریت درج ذیل ہوگی۔

$$\sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0 \quad (۲.۱۴)$$

یاد رہے کہ $\sigma = 0$ کی صورت میں تمام امکان کی قیمت ایک دوسری جیسی ہوگی (تقسیم کا پھیلاؤ صفر ہوگا)۔ نتیجتاً متبادل علیحدگی حل کی ایک خاصیت یہ ہوے 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 متبادل علیحدگی حلوں کا خطہ جوڑا ہوگا۔ جیسا ہم جلد دیکھیں گے، غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات (مساوات ۲.۵) 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 ہوگا لہذا ہر اجازتی توانائی کا ایک منفرد تعلق عمل میں پایا جائے گا۔

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

اب (جیسا کہ آپ خود تصدیق کر سکتے ہیں) تاجع وقت شرودنگر مساوات (مساوات ۲.۱) کی ایک خاصیت یہ ہے کہ اس کے حلوں کا ہر خطی جوڑا خود ایک حل ہوگا۔ ایک بار متبادل علیحدگی حل تلاش کرنے کے بعد ہم زیادہ عمومی حل درج ذیل روپ میں تیار کر سکتے ہیں۔

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

حقیقتاً تاجع وقت شرودنگر 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 ۲.۱۵) ابتدائی شرائط مطمئن کرتا ہو۔ آپ آنے والے حصوں میں دیکھیں گے کہ ہم کس طرح یہ سب کچھ کر پائیں گے۔

linear combination^{*}
allowed energy^o

باب ۳ میں ہم اس کو زیادہ مضبوط بنیادوں پر کھڑا کر پائیں گے۔ بنیادی نقطہ یہ ہے کہ ایک بار غیر تابع وقت شرودنگر مساوات حل کرنے کے بعد آپ کے مسائل ختم ہو جاتے ہیں۔ یہاں سے تابع وقت شرودنگر مساوات کا عمومی حل حاصل کرنا آسان کام ہے۔

گزشتہ چار صفحات میں ہم بہت کچھ کہا چکا ہے۔ میں ان کو مختصر اور مختلف نقطہ نظر سے دوبارہ پیش کرتا ہوں۔ زیر غور عمومی مسئلہ کا غیر تابع وقت خفی توانائی $V(x)$ اور ابتدائی تفاعل موج $\Psi(x, 0)$ دیے گئے ہوں گے۔ آپ کو مستقبل کے تمام t کیلئے $\Psi(x, t)$ تلاش کرنا ہوگا۔ ایسا کرنے کی خاطر آپ تابع وقت شرودنگر مساوات (مساوات ۲.۱) حل کریں گے۔ پہلی قدم میں آپ غیر تابع وقت شرودنگر مساوات (مساوات ۲.۵) حل کر کے لامتناہی 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) ہوگی۔ ٹھیک ٹھیک $\Psi(x, 0)$ پر بیٹھنے کی خاطر آپ ان حلوں کا خطی جوڑ لیں گے۔

$$(۲.۱۲) \quad \Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

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۔ تفاعل موج $\Psi(x, t)$ تیار کرنے کی خاطر آپ ہر جزو کے ساتھ مختص تابعیت وقت $e^{-iE_n t/\hbar}$ چسپاں کریں گے۔

$$(۲.۱۴) \quad \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t)$$

چونکہ متابیل علیحدگی حل

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

کے تمام احتمال اور توقعاتی قیمتیں غیر تابع وقت ہوں گی لہذا یہ از خود ساکن حالات ہوں گے، تاہم عمومی حل (مساوات ۲.۱۴) یہ خاصیت نہیں رکھتا ہے؛ انفرادی ساکن حالات کی توانائیاں ایک دوسرے سے مختلف ہونے کی بنا پر $|\Psi|^2$ کا حساب کرتے ہوئے قوت نمائی ایک دوسرے کو حذف نہیں کرتی ہیں۔

مثال ۲.۱: فرض کریں ایک ذرہ ابتدائی طور پر دو ساکن حالات کا خطی جوڑ ہو:

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

(چیزوں کو سادہ رکھنے کی خاطر میں فرض کرتا ہوں کہ مستقل c_n اور حالات $\psi_n(x)$ حقیقی ہیں۔) مستقبل وقت کیلئے تفاعل موج $\Psi(x, t)$ کیا ہوگا؟ کشاف 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 ہوگا۔

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

(میں نے نتیجہ کی سادہ صورت حاصل کرنے کی خاطر کلیہ یور $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ استعمال کیا۔) ظاہری طور پر کثافت احتمال زاویائی تعدد $(\frac{E_2 - E_1}{\hbar})$ سے سائن نمائندگی کا تعاش کر تا ہے لہذا یہ ہرگز ساکن حال نہیں ہوگا۔ لیکن دھیان رہے کہ (ایک دوسرے سے مختلف) توانائیوں کے تفاعلات کے خطی جوڑنے حرکت پیدا کیا۔ □

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

۱. متبادل علیحدگی حلوں کے لئے علیحدگی مستقل E لازماً حقیقی ہوگا۔ اشارہ: مساوات ۲.۴ میں E کو $E_0 + i\Gamma$ لکھ کر (جہاں E اور Γ حقیقی ہیں)، دکھائیں کہ تمام t کے لئے مساوات ۱۱.۲۰ اس صورت کارآمد ہوگا جب Γ صفر ہو۔

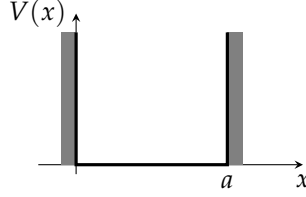
ب. غیر تاجع وقت تفاعل موج $\psi(x)$ ہر موقع پر حقیقی لیا جاسکتا ہے (جبکہ تفاعل موج $\Psi(x, t)$ لازماً مخلوط ہوتا ہے)۔ اس کا ہرگز یہ مطلب نہیں ہے کہ غیر تاجع شرودنگر مساوات کا ہر حل حقیقی ہوگا؛ بلکہ غیر حقیقی حل پائے جانے کی صورت میں اس حل کو ہمیشہ، ساکن حالات کا (تبی ہی توانائی کا) خطی جوڑ لکھنا ممکن ہو گا۔ یوں بہتر ہوگا کہ آپ صرف حقیقی ψ ہی استعمال کریں۔ اشارہ: اگر کسی مخصوص E کے لئے $\psi(x)$ مساوات ۲.۵ کو مطمئن کرتا ہو تب اس کا مخلوط خطی جوڑ بھی اس مساوات کو مطمئن کرے گا اور یوں ان کے خطی جوڑ $(\psi + \psi^*)$ اور $i(\psi - \psi^*)$ بھی اس مساوات کو مطمئن کریں گے۔

ج. اگر $V(x)$ جھٹے تفاعل ہو یعنی $V(-x) = V(x)$ تب $\psi(x)$ کو ہمیشہ جفت یا طاق لیا جاسکتا ہے۔ اشارہ: اگر کسی مخصوص E کے لئے $\psi(x)$ مساوات ۲.۵ کو مطمئن کرتا ہو تب $\psi(-x)$ بھی اس مساوات کو مطمئن کرے گا اور یوں ان کے جفت اور طاق خطی جوڑ $\psi(x) \pm \psi(-x)$ بھی اس مساوات کو مطمئن کریں گے۔

سوال ۲.۲: دکھائیں کہ غیر تاجع 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 ہوگی۔ اس کا کلاسیکی مشا کیسا ہوگا؟ اشارہ: مساوات ۲.۵ کو درج ذیل روپ میں لکھ کر

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

دکھائیں کہ $E < V$ کی صورت میں ψ اور اس کے دوگنا تفرق کی علامتیں لازماً ایک دوسری جیسی ہوں گی؛ اب دلیل پیش کریں کہ ایسا تفاعل معمول پر لانے کے متبادل نہیں ہوگا۔



شکل ۲.۱: لامستثنائی چپکور کنواں (مساوات ۲.۱۹)

۲.۲ لامستثنائی چپکور کنواں

درج ذیل مندرجہ کریں (شکل ۲.۱)۔

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

اس مخفی توانائی میں ایک ذرہ مکمل آزاد ہوگا، ماسوائے دونوں سروں یعنی $x = 0$ اور $x = a$ پر، جہاں ایک لامستثنائی قوت اس کو مندرار ہونے سے روکتی ہے۔ اس کا کلاسیکی نمونہ ایک کنواں میں ایک لامستثنائی لچکدار گیند ہو سکتا ہے جو ہمیشہ کے لئے دیواروں سے ٹکرا کر دائیں سے بائیں اور بائیں سے دائیں حرکت کرتا رہتا ہو۔ (اگرچہ یہ ایک مندرجہ 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 مندرجہ کرنے کے قابل ہے۔ ہم اس سے بار بار رجوع کریں گے۔)

کنواں سے باہر $\psi(x) = 0$ ہوگا (لہذا ایساں ذرہ پایا جانے کا احتمال صفر ہوگا)۔ کنواں کے اندر، جہاں $V = 0$ ہے، غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات (مساوات ۲.۵) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$(۲.۲۰) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E\psi$$

یا

$$(۲.۲۱) \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -k^2 \psi, \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

(اس کو یوں لکھتے ہوئے میں خاموشی سے مندرجہ کرتا ہوں کہ $E \geq 0$ ہوگا۔ ہم سوال ۲.۲ سے جانتے ہیں کہ $E < 0$ سے بات نہیں بنے گی۔) مساوات ۲.۲۱ کا کلاسیکی سادہ ہارمونک مرتعش^۱ کی مساوات ہے جس کا عمومی حل درج ذیل ہوگا

$$(۲.۲۲) \quad \psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

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

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

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \quad (۲.۲۳)$$

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 ہوگا۔

$$\psi(x) = A \sin kx \quad (۲.۲۴)$$

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

$$ka = 0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, \dots \quad (۲.۲۵)$$

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

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (۲.۲۶)$$

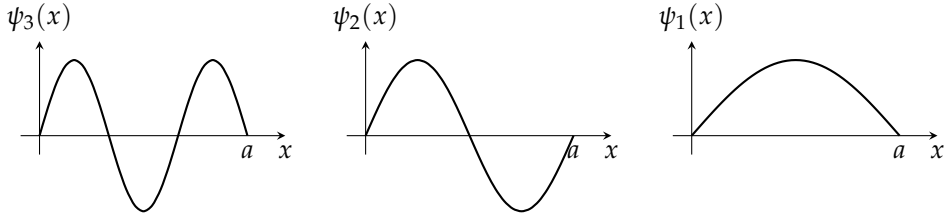
دلچسپ بات یہ ہے کہ $x = a$ پر سرحدی شرط مستقل A تعین نہیں کرتا ہے بلکہ اس کی بجائے مستقل k تعین کرتے ہوئے E کی اجازتی قیمتیں تعین کرتا ہے:

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

کلاسیکی صورت کے برعکس لامتناہی چکور کنواں میں کو انٹم ذرہ ہر ایک توانائی کا حامل نہیں ہو سکتا ہے بلکہ اس کی توانائی کی قیمت کو درج بالا مخصوص اجازت^۸ قیمتوں میں سے ہونا ہوگا۔ مستقل A کی قیمت حاصل کرنے کے لئے ψ کو معمول پر لانا ہوگا:

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

boundary conditions^۷
allowed^۸



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

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

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

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 لامستثنائی سلسلہ دیا ہے۔ ان میں سے اولین چند کو شکل ۲.۲ میں ترسیم کیا گیا ہے جو لمبائی a کے دھاگے پر ساکن امواج کی طرح نظر آتے ہیں۔ تفاعل ψ_1 جو زمینی حالت کہلاتا ہے کی توانائی کم سے کم ہے۔ باقی حالات جن کی توانائیاں n^2 کے براہ راست بڑھتی ہیں **پہچان** **حالات** کہلاتے ہیں۔ تفاعلات $\psi_n(x)$ چند اہم اور دلچسپ خواص رکھتے ہیں:

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

۲. توانائی بڑھاتے ہوئے ہر اگلے حال کے **عقدوں** (عبور صفر) کی تعداد میں ایک (1) کا اضافہ ہوگا۔ (چونکہ آخری نقطہ 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۔

۳. یہ تمام درج ذیل نقطہ نظر سے باہمی **عمودوں** ^{۱۲} ہیں جہاں $m \neq n$ ہے۔

$$(۲.۲۹) \quad \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = 0$$

ground state^۹
excited states^{۱۰}
nodes^{۱۱}
orthogonal^{۱۲}

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 ہوگا؛ (کیا آپ بتا سکتے ہیں کہ ایسی صورت میں دلیل کیوں ناقابل قبول ہوگا۔) ایسی صورت میں معمول پر لانے کا عمل ہمیں بتاتا ہے کہ مکمل کی قیمت 1 ہے۔ درحقیقت، عمودیت اور معمول زنی کو ایک فترے میں سویا جا سکتا ہے: ^{۱۳}

$$(۲.۳۰) \quad \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \delta_{mn}$$

جہاں δ_{mn} کرونیکر ڈیلٹا ^{۱۴} کہلاتا ہے جس کی تعریف درج ذیل ہے۔

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

ہم کہتے ہیں کہ مذکورہ بالا (تمام) ψ معیار عمودی ^{۱۵} ہیں۔

۴. یہ مکمل ^{۱۶} ہیں، جس سے مراد ہے کہ کسی بھی دوسرے تعامل $f(x)$ کو ان کا خطی جوڑ لکھا جا سکتا ہے:

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

میں تعاملات $\sin \frac{n\pi x}{a}$ کی مکملیت کو یہاں ثابت نہیں کروں گا، البتہ اعلیٰ علم الاحصاء کے ساتھ واقعیت کی صورت میں آپ مساوات ۲.۳۲ کو $f(x)$ کا فوریر تسلسل ^{۱۷} پہچان پائیں گے۔ یہ حقیقت، کہ ہر تعامل کو فوریر تسلسل کی صورت میں پھیلا کر لکھا جا سکتا ہے، بعض اوقات مسئلہ ڈرشل ^{۱۸} کہلاتا ہے۔ ^{۱۹}

^{۱۳} یہاں تمام ψ حقیقی ہیں لہذا $\psi_m^* = \psi_m$ پر * ڈالنے کی ضرورت نہیں ہے، لیکن مستقل کی استعمال کے نقطہ نظر سے ایسا کرنا ایک اچھی عادت ہے۔

Kronecker delta ^{۱۴}orthonormal ^{۱۵}complete ^{۱۶}Fourier series ^{۱۷}Dirichlet's theorem ^{۱۸}

^{۱۹} تعامل $f(x)$ میں متناہی تعداد کی عدم استمرار (چھلانگ) پائے جا سکتی ہیں۔

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

$$(۲.۳۳) \quad \int \psi_m(x)^* f(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x) dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{mn} = c_m$$

(آپ دیکھ سکتے ہیں کہ کرونیکر ڈیلٹا مجموعے میں تمام اجزاء کو ختم کر دیتا ہے ماسوائے اس جزو کو جس کے لئے $n = m$ ہو۔) یوں تفاعل $f(x)$ کے پھیلاؤ کے n ویں جزو کا عددی سر درج ذیل ہوگا۔^{۲۰}

$$(۲.۳۴) \quad c_n = \int \psi_n(x)^* f(x) dx$$

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

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

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

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

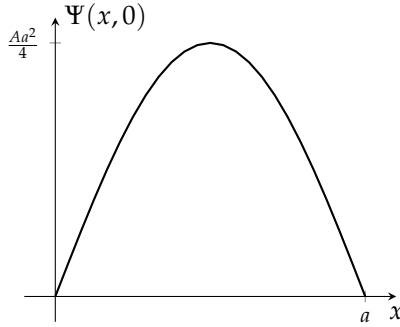
$$(۲.۳۶) \quad \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t}$$

(اگر آپ کو اس حل پر شق ہو تو اس کی تصدیق ضرور کیجیے گا۔) مجھے صرف اتنا دکھانا ہوگا 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 کمیت (جس کی تصدیق یہاں مسئلہ ڈرشل 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 فورسٹر تسلسل سے حاصل

^{۲۰} آپ یہاں فضلی تغیر کو m یا n کوئی تیسرا حرف لے سکتے ہیں (بس اتنا خیال رکھیں کہ مساوات کی دونوں اطراف ایک ہی حرف استعمال کریں)، اور ہاں یاد رہے کہ یہ حرف ”کسی مثبت عدد صحیح“ کو ظاہر کرتا ہے۔



شکل ۲.۳: ابتدائی تفاعل موج برائے مثال ۲.۲۔

کیا جاسکتا ہے:

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

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 ۲.۳۷ سے حاصل کرتے ہیں۔ اس کے بعد انہیں مساوات ۲.۳۶ میں پر کر $\Psi(x, t)$ حاصل کرتے ہیں۔ تفاعل موج جانتے ہوئے دلچسپی کی کسی بھی حرکت کی مقدار کا حساب، باب ۱ میں متعلقہ ترکیب استعمال کرتے ہوئے، کیا جاسکتا ہے۔ یہی ترکیب کسی بھی مخفیہ کے لیے کارآمد ہوگا؛ صرف ψ کی قیمتیں اور اجازتی توانائیاں یہاں سے مختلف ہوں گی۔

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

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

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:

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

مسوات ۲.۳۷ کے تحت n واں عددی سر درج ذیل ہوگا۔

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

یوں درج ذیل ہوگا (مسوات ۲.۳۶)۔

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

□

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 ۳ میں دیکھیں گے، توانائی کی پیمائش سے E_n قیمت حاصل ہونے کا احتمال $|c_n|^2$ ہوگا۔ (کوئی بھی پیمائش، ”احبازتی“ قیمتوں میں سے کوئی ایک دے گی، اسی لئے انہیں احبازتی قیمتیں کہتے ہیں، اور کوئی مخصوص قیمت E_n حاصل ہونے کا احتمال $|c_n|^2$ ہوگا۔)

یقیناً تمام احتمالات کا مجموعہ 1 ہوگا

$$(۲.۳۸) \quad \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1$$

باب ۲. غیر تابَع وقت شرودنجر مساوات

جس کا ثبوت Ψ کی عمود زنی سے حاصل ہوگا (چونکہ تمام c_n غیر تابَع وقت ہیں لہذا میں $t = 0$ پر ثبوت پیش کرتا ہوں۔ آپ باآسانی اس ثبوت کو عمومیّت 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 کرینیکر ڈیلٹا جب $m = n$ کو چنتا ہے۔)

مزید، توانائی کی توقعاتی قیمت لازماً درج ذیل ہوگی

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

جس کی بلاواسطہ تصدیق کی جاسکتی ہے: غیر تابَع وقت شرودنجر مساوات کہتی ہے

$$(۲.۴۰) \quad H\psi_n = E_n\psi_n$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

دھیان رہے کہ کسی ایک مخصوص توانائی کے حصول کا احتمال غیر تابَع وقت ہوگا اور یوں H کی توقعاتی قیمت بھی غیر تابَع وقت ہوگی۔ کوانٹم میکانیات میں بتا توانائی^{۲۱} کی یہ ایک مثال ہے۔

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

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

باقی تمام عددی سرسمل کر منرق دیئے ہیں:

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

^{۲۱} conservation of energy

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

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

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

سوال ۲.۳: دکھائیں کہ لامستثنائی چکور کنواں کے لئے $E = 0$ یا $E < 0$ کی صورت میں غیر تابع وقت شرودنگر مساوات کا کوئی بھی متابل قبول حل نہیں پایا جاتا ہے۔ (یہ سوال ۲.۲ میں دیے گئے عمومی مسئلہ 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 ۲.۴: لامستثنائی چکور کنواں کے n ویں ساکن حال کیلئے $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle p^2 \rangle$ اور 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 ہوگا؟

سوال ۲.۵: لامستثنائی 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۔ موحضہ الذکر کو وقت کے سائن تفاعل عمل کی صورت میں لکھیں، جیسا مثال ۲.۱ میں کیا گیا۔ نتائج کو سادہ صورت میں لکھنے کی خاطر $\omega \equiv \frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}$ لیں۔

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

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

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

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

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

باب ۲. غیر تابع وقت شرودنجر مساوات

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 ۲.۷: لامستثنیٰ 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 ہوگا؟

د. توانائی کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔

سوال ۲.۸: ایک لامستثنیٰ 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 نقطہ پر ہو سکتا ہے۔

ا. اس کی ابتدائی تفاعل موج $\Psi(x, 0)$ تلاش کریں۔ (مفروض کریں کہ یہ حقیقی ہے اور اسے معمول پر لانا بھولے گئے۔)

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

سوال ۲.۹: لمحہ $t = 0$ پر مثال ۲.۲ 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 ۲.۳ میں مساوات ۲.۳۹ 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 ہوگا۔

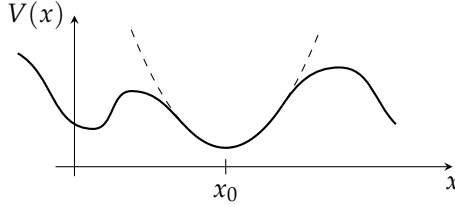
۲.۳ ہارمونی مرتعش

کلاسیکی ہارمونی مرتعش ایک پلک دار اسپرنگ جس کا مقیاس پلک k ہو اور کمیت m پر مشتمل ہوتا ہے۔ کمیت کی حرکت قانون ہکے^{۲۲}

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

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

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



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

ہوگا جہاں

$$(۲.۴۱) \quad \omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}$$

ارتعاش کا (زاویائی) تعدد ہے۔ مخفی توانائی

$$(۲.۴۲) \quad V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

ہوگی جس کی ترسیم قطع مکانی ہے۔

حقیقت میں کامل ہارمونی سر تعش نہیں پایا جاتا ہے۔ اگر آپ اسپرنگ کو زیادہ کھینچیں تو وہ ٹوٹ جائے گا اور قانون ہک اس سے بہت پہلے غیر کارآمد ہو چکا ہوگا۔ تاہم عملاً کوئی بھی مخفیہ، معنای کم سے کم نقطہ کی پڑوس میں تخمین قطع مکانی ہوگا (شکل ۲.۴)۔ مخفی توانائی $V(x)$ کے کم سے کم نقطہ x_0 کے لحاظ سے $V(x)$ کو ٹیلر تسلسل^{۲۳} کے لحاظ سے پھیلا کر

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

اس سے $V(x_0)$ مخفی کر کے (ہم $V(x)$ سے کوئی بھی مستقل بغیر خطرو منکر مخفی کر سکتے ہیں کیونکہ ایسا کرنے سے قوت تبدیل نہیں ہوگا) اور یہ جانتے ہوئے کہ $V'(x_0) = 0$ ہوگا (چونکہ x_0 کم سے کم نقطہ ہے)، ہم تسلسل کے بلند رتبہ ارکان رد کرتے ہوئے (جو $(x - x_0)$ کی قیمت کم ہونے کی صورت میں متابل نظر انداز ہونگے) درج ذیل حاصل کرتے ہیں

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

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

کوانٹم میکانیات میں ہمیں مخفیہ

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

کے لیے شرودنگر مساوات حل کرنی ہوگی (جہاں روایتی طور پر مقیاس پلک کی جگہ کلاسیکی تعدد (مساوات ۲.۴۱) استعمال کی جاتی ہے)۔ جیسا کہ ہم دیکھ چکے ہیں، اتنا کافی ہوگا کہ ہم غیر تاجز وقت شرودنگر مساوات

$$(۲.۴۴) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi$$

حل کریں۔ اس مسئلے کو حل کرنے کے لیے دو بالکل مختلف طریقے اپنائے جاتے ہیں۔ پہلی میں تفسیقی مساوات کو ”طاققت کے بل بوتے پر“ **طاققت تسلسل** کے ذریعہ حل کرنے کی ترکیب استعمال کی جاتی ہے، جو دیگر مخفیہ کے لیے بھی کارآمد ثابت ہوتا ہے (اور جسے استعمال کرتے ہوئے باب ۴ میں کولم مخفیہ کے لیے حل تلاش کریں گے)۔ دوسری ترکیب ایک شیطانی الجبرائی تکنیک ہے جس میں **حالیہ سیدھی** 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 طاققت تسلسل کی ترکیب یہاں استعمال نہ کرنا چاہیں تو آپ ایسا کر سکتے ہیں لیکن کہیں نہ کہیں آپ کو یہ ترکیب سیکھنی ہوگی۔

۲.۳.۱ الجبرائی ترکیب

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

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

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

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

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 معقد اروں پر غور کرنے پر آمادہ کرتا ہے

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

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

آئیں دیکھیں حاصل ضرب $a_- a_+$ کیا ہوگا؟

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

اس میں متوقع اضافی جزو $(xp - px)$ پایا جاتا ہے جس کو ہم x اور p کا تبادلہ کار^{۲۵} کہتے ہیں اور جو ان کی آپس میں متبادل تبدل نہ ہونے کی پیدائش ہے۔ عمومی طور پر عامل A اور عامل B کا تبادلہ کار (جسے چکور قوسین میں لکھا ہے) درج ذیل ہوگا۔

$$[A, B] \equiv AB - BA \quad (۲.۴۸)$$

اس علاقیت کے تحت درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

پر کھی تقاعس (جو اپنا کام کر چکا) کو رد کرتے ہوئے درج ذیل ہوگا۔

$$[x, p] = i\hbar \quad (۲.۵۱)$$

یہ خوبصورت نتیجہ جو بار بار سامنے آتا ہے باضابطہ تبادلہ رشتہ^{۲۶} کہلاتا ہے۔

اسے استعمال سے مساوات ۲.۴۹ درج ذیل روپ

$$a_- a_+ = \frac{1}{\hbar\omega} H + \frac{1}{2} \quad (۲.۵۲)$$

یا

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

باب ۲. غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات

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

$$a_+a_- = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2} \quad (۲.۵۴)$$

بالخصوص درج ذیل ہوگا۔

$$[a_-, a_+] = 1 \quad (۲.۵۵)$$

یوں ہیمیلٹنی کو درج ذیل بھی لکھا جاسکتا ہے۔

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

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

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

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

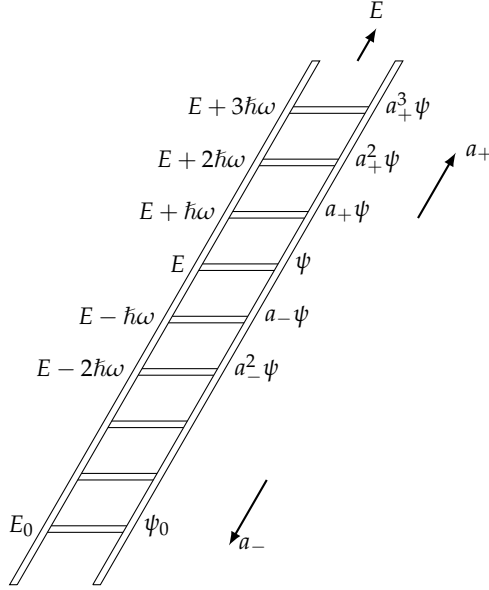
ہم ایک اہم موڑ پر ہیں۔ میں دعویٰ کرتا ہوں اگر توانائی E کی شرودنگر مساوات کو ψ مطمئن کرتا ہو ($H\psi = E\psi$) تب توانائی $(E + \hbar\omega)$ کی شرودنگر مساوات کو $a_+\psi$ مطمئن کرے گا: $H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$ ثبوت:

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

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

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

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



شکل ۲.۵: ہارمونی مسرتش کے حالات کی ”سیڑھی“۔

یوں ہم نے ایک ایسی خود کار ترکیب دریافت کر لی ہے جس سے، کسی ایک حل کو جانتے ہوئے، بالائی اور زیریں توانائی کے نئے حل دریافت کیے جاسکتے ہیں۔ چونکہ $a \pm$ کے ذریعے ہم توانائی میں اوپر چڑھ یا نیچے اتر سکتے ہیں لہذا انہیں ہم عاملین سیڑھی^{۲۷} پکارتے ہیں: a_+ عاملِ رُفعت^{۲۸} اور a_- عاملِ تَقْذیل^{۲۹} ہے۔ حالات کی ”سیڑھی“ کو شکل ۲.۵ میں دکھایا گیا ہے۔

ذرا کیے! عاملِ تَقْذیل کے بار بار استعمال سے آخر کار ایسا حل حاصل ہوگا جس کی توانائی صفر سے کم ہوگی (جو سوال ۲.۲ 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 ہوگی۔ ایسا کیوں کر ہوگا؟ ہم جانتے ہیں کہ $a_- \psi$ شرودنگر مساوات کا ایک نیا حل ہوگا، تاہم اس کی ضمانت نہیں دی جاسکتی ہے کہ یہ معمول پر لانے کے متاثر بھی ہوگا؛ یہ صفر ہو سکتا ہے یا اس کا مسر بھی مکمل لامتناہی ہو سکتا ہے۔ عملاً اول الذکر ہوگا: سیڑھی کے سب سے نچلے پایہ (ψ_0 جس کو ہم ψ_0 کہتے ہیں) پر درج ذیل ہوگا۔

$$a_- \psi_0 = 0 \quad (۲.۵۸)$$

ladder operators^{۲۷}
raising operator^{۲۸}
lowering operator^{۲۹}

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 ہوگا۔

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

ہم اس کو یہیں معمول پر لاتے ہیں:

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

لہذا $A^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi \hbar}}$ اور درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

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

$$(۲.۶۰) \quad E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$$

سیڑھی کے نچلا پایہ (جو کو انٹم مرتعش کا زمینی حال ہے) پر پیر رکھ کر، بار بار عامل رفعت استعمال کر کے ہیجان حالات دریافت کیے جاسکتے ہیں۔^{۲۰} جہاں ہر قدم پر توانائی میں $\hbar\omega$ کا اضافہ ہوگا۔

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

^{۲۰} ہارمونی مرتعش کی صورت میں روایتی طور پر، عمومی طریقہ کار سے بہت کر، حالات کی شمار $n = 1$ کی بجائے $n = 0$ سے شروع کی جاتی ہے۔ ظاہر ہے ایسی صورت میں مساوات ۲.۵۱ طرز کی مساواتوں میں مجموعہ کی زیریں حد کو بھی تبدیل کیا جائے گا۔

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

مثال ۲.۴: ہارمونی سر تعش کا پہلا ہیجبان حال تلاش کریں۔

حل: ہم مساوات ۱۲.۶۱ استعمال کرتے ہیں۔

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 a_+ \psi_0 = \frac{A_1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \\ (۲.۶۲) \quad &= A_1 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \end{aligned}$$

ہم اس کو قسّم 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 $A_1 = 1$ ہوگا۔

اگرچہ میں پچاس مرتبہ عامل رفعت استعمال کر کے ψ_5 حاصل نہیں کرنا چاہوں گا، اصولی طور پر، معمول زنی کے علاوہ، مساوات ۲.۶۱ اپنا کام خوش اسلوبی سے کرتی ہے۔ □

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

$$(۲.۶۳) \quad a_+ \psi_n = c_n \psi_{n+1}, \quad a_- \psi_n = d_n \psi_{n-1}$$

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

$$(۲.۶۴) \quad \int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_{\pm} g) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp} f)^* g dx$$

(خطی الجبر کی زبان میں $a \mp$ اور $a \pm$ ایک دوسرے کے ہر مشق جوڑی دار^{۳۱} ہیں۔)

ثبوت:

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

باب ۲. غیر تاجع وقت شرودنجر مساوات

کمل بالخص کے ذریعے $\int f^* \left(\frac{dg}{dx} \right) dx$ سے $-\int \left(\frac{df}{dx} \right)^* g dx$ حاصل ہوگا (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 ہوگا۔

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

مساوات ۲.۵۷ اور مساوات ۲.۶۱ استعمال کرتے ہوئے

$$(۲.۶۵) \quad a_+ a_- \psi_n = n \psi_n, \quad a_- a_+ \psi_n = (n+1) \psi_n$$

ہوگا لہذا درج ذیل ہوں گے۔

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

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 ہوگا۔

$$(۲.۶۶) \quad a_+ \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}, \quad a_- \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}$$

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 تفصیلات بھی اسی طرح حاصل کیے جاسکتے ہیں۔ صاف ظاہر ہے کہ درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

$$(۲.۶۸) \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

اہلہذا درج ذیل ہوگا۔

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

اب (ماسوائے معمول زنی کے) $\psi_n (a_+)^2$ تفاعل ψ_{n+2} کو ظاہر کرتا ہے جو ψ_n کو عمودی ہے۔ یہی کچھ $\psi_n (a_-)^2$ 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 ۲.۶۵ استعمال کر کے باقی دو کی قیمتیں حاصل کر سکتے ہیں:

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

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

سوال ۲.۱۰:

ا. $\psi_2(x)$ تیار کریں۔

ب. ψ_0, ψ_1, ψ_2 کا خاکہ کھینچیں۔

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

سوال ۲.۱۱:

ا. حالات ψ_0 (مساوات ۲.۵۹) اور ψ_1 (مساوات ۲.۶۲) کے لئے صریح کلمات 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 $\sqrt{m\omega/\hbar}x \equiv \xi$ اور متقل $\alpha \equiv (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$ 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 ۲.۱۲: ہارمونی مرتعش کے n ویں ساکن حال کے لئے مثال ۲.۵ کی ترکیب استعمال کرتے ہوئے $\langle x \rangle, \langle p \rangle, \langle x^2 \rangle, \langle p^2 \rangle$ اور $\langle T \rangle$ تلاش کریں۔ تصدیق کریں کہ اصول عدم یقینیت مطمئن ہوتا ہے۔

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

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

ا. 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 $\psi_2(x)$ دیے تابت جواب کیا ہوتا؟ تصدیق کریں کہ اس تفاعل موج کے لیے مسئلہ اہر نفٹ (مساوات ۱.۳۸) مطمئن ہوتا ہے؟

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

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

۲.۳.۲ تحلیلی ترکیب

ہم اب ہارمونی مرتعش کی شرودنگر مساوات کو دوبارہ لوٹ کر

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi = E \psi \quad (۲.۷۰)$$

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

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \quad (۲.۷۱)$$

شرودنگر مساوات اب درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

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

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

$$K \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (۲.۷۳)$$

ہم نے مساوات ۲.۷۲ کو حل کرنا ہو گا۔ ایسا کرتے ہوئے ہمیں K اور E کی ”اجبازتی“ 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 ہوگی لہذا مساوات ۲.۷۲ درج ذیل روپ اختیار کرے گی

$$\frac{d^2 \psi}{d\xi^2} \approx \xi^2 \psi \quad (۲.۷۴)$$

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

$$\psi(\xi) \approx A e^{-\xi^2/2} + B e^{+\xi^2/2} \quad (۲.۷۵)$$

باب ۲. غیر تابع وقت شرودنگر مساوات

اس میں B کا جزو معمول پر لانے کے متبادل نہیں ہے (چونکہ $\infty \rightarrow |x|$ کرنے سے اس کی قیمت بے متناہی بڑھتی ہے)۔ طبی طور پر متبادل قبول حل درج ذیل متغیرب صورت کا ہوگا۔

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

اس سے ہمیں خیال آتا ہے کہ ہمیں قوت مضام کو ”چھیلنا“ چاہیے،

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

اور توقع کرنی چاہیے کہ جو کچھ باقی رہ جائے، $h(\xi)$ ، اس کی صورت $\psi(\xi)$ سے سادہ ہو۔^{۳۲} ہم مساوات ۲.۷۷ کے تفصیلات

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

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 شرودنگر مساوات (مساوات ۲.۷۲) درج ذیل صورت اختیار کرتی ہے۔

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

ہم ترکیبے فروبنیوس^{۳۳} استعمال کرتے ہوئے مساوات ۲.۷۸ کا حل ξ کے طاقتی تسلسل کی صورت میں حاصل کرتے ہیں۔

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

اس تسلسل کے جزو در جزو تفصیلات

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

اور

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

^{۳۲} اگرچہ ہم نے مساوات ۲.۷۷ لکھتے ہوئے تخمین سے کام لیا، اس کے بعد باقی تمام بالکل ٹھیک ٹھیک ہے۔ تفصیلات مساوات کے طاقتی تسلسل حل میں متغیربانی جزو کا چھیلنا معمولاً پہلا قدم ہوتا ہے۔

^{۳۳} Frobenius method

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

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

طافتی تسلسل پھیلاؤ کے یکسانی کی بنا پر ہر طاقت کا عددی سر صفر ہوگا:

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

لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

یہ کلیہ توانی^{۳۴} شروع و گنگر 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

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

جہاں

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

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

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

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

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

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

جس کا تخمینہ حل

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

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

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

اور اب اگر h کی قیمت e^{ξ^2} کے لحاظ سے بڑھے تب ψ (جس کو ہم حاصل کرنا چاہتے ہیں) $e^{\xi^2/2}$ (مساوات ۲.۷۷) کے لحاظ سے بڑھے گا جو وہی متغیر ψ ہے جو ہم نہیں چاہتے۔ اس مشکل سے نکلنے کا ایک ہی طریقہ ہے۔ معمول پر لانے کے قابل حل کے لئے لازم ہے کہ اس کا طاق متعلق 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 قیمت h تسلسل یا طاق h تسلسل اختتام پذیر ہوگا؛ جبکہ دوسرا لازماً ابتداء سے ہی صفر ہوگا؛ قیمت n کی صورت میں $a_1 = 0$ ہوگا جبکہ طاق n کی صورت میں $a_0 = 0$ ہوگا)۔ یوں متقابل مقبول طبعی حل کے لیے مساوات ۲.۸۱ کے تحت درج ذیل ہوگا

$$K = 2n + 1$$

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

$$(۲.۸۳) \quad E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

یوں ہم ایک مختلف طریقہ کار سے مساوات ۲.۶۱ میں الجبرائی طریقہ سے حاصل کردہ بنیادی کوانٹائزیشن شرط دوبارہ حاصل کرتے ہیں۔ ابتدائی طور پر یہ حیرانی کی بات نظر آتی ہے کہ توانائی کی کوانٹائزیشن، شرودنگر مساوات کے طاق متعلق تسلسل حل کے ایک تکنیکی نقطہ سے حاصل ہوتی ہے۔ آئیں اسے ایک مختلف نقطہ نظر سے دیکھتے ہیں۔ یقیناً E کے کسی بھی قیمت کے لئے مساوات ۲.۷۰ کے حل ممکن ہیں (درحقیقت ہر E کے لیے اس کے دو خطی غیر متابع حل پائے جاتے ہیں)۔ تاہم ان میں سے زیادہ تر حل، بڑی x پر، بے متابو قوت نمائی بڑھتے ہیں جس کی بنیاد معمول پر لانے کے قابل نہیں رہتے۔ مثال کے طور پر فرض کریں ہم E کی کسی ایک اجبازتی قیمت سے معمولی کم قیمت (مثلاً $0.49 \hbar \omega$) لے کر حل کو ترسیم کرتے ہیں (شکل 6a.2)؛ اس کی دم لامتناہی کی طرف بڑھے گی۔ اب E کی قیمت کسی ایک اجبازتی قیمت سے معمولی زیادہ (مثلاً $0.51 \hbar \omega$) تصور کر کے حل کو ترسیم کرتے ہیں؛ اب حل کی دم دوسری سمت میں لامتناہی کی طرف بڑھے گی (شکل 6b.2)۔ اگر ہم اس مقدار معلوم کی قیمت 0.49 اور 0.51 کے چھ چھوٹے قدم لے کر تبدیل کریں تو ہر مرتبہ 0.50 سے گزرتے ہوئے حل کی دم الٹ (مخالف) طرف لامتناہی کی طرف بڑھے گی۔ ٹھیک 0.50 پر اس کی دم صفر کو پہنچ کر معمول زنی کے قابل حل دے گی۔

کلیہ توانائی K کی اجبازتی قیمتوں کے لیے درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

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

جدول ۲.۱: ابتدائی چند ہرمانٹ کشیر رکنیاں $H_n(\xi)$

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

اگر $n = 0$ ہو تب تسلسل میں ایک جبڑو پایا جائے گا (ہمیں $a_1 = 0$ لینا ہوگا تاکہ طبق h خارج ہوں، اور مساوات ۲.۸۳ میں $j = 0$ سے $a_2 = 0$ حاصل ہوتا ہے):

$$h_0(\xi) = a_0$$

لہذا

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

(جو ماسوائے معمول زنی، مساوات ۲.۵۹ دوبارہ دیتی ہے)۔ اسی طرح ہم $n = 1$ کے لیے $a_0 = 0$ لیں گے ۲.۵، اور مساوات ۲.۸۳ میں $j = 1$ سے $a_3 = 0$ حاصل ہوگا، لہذا

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

اور

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

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

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

اور

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

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

^{۲۵} دھیان رہے کہ n کی ہر ایک قیمت کے لئے عددی سروں a_j کا ایک مندرجہ سلسلہ پایا جاتا ہے۔

کے علاوہ یہ عین ہرمانٹ کثیر رکھنے $H_n(\xi)$ میں 3^4 ۔ جدول ۲.۱ 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 مرتبہ کے معمول شدہ 3^8 ساکن حالات درج ذیل ہوں گے

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

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

شکل 7.2 (a) میں چند ابتدائی n کے لیے $\psi_n(x)$ ترسیم کیے گئے ہیں۔ کو انم مرتبہ حیران کن حد تک کلاسیکی مرتبہ کے مختلف ہے۔ نہ صرف اس کی توانائیاں کوانٹا شدہ ہیں بلکہ اس کی موضعی تقسیم کے بھی عجیب خواص پائے جاتے ہیں۔ مثلاً کلاسیکی طور پر احبازتی سمت کے باہر (یعنی توانائی کے کلاسیکی حیطے سے زیادہ x پر) ذرہ پایا جانے کا احتمال غیر صفر ہے (سوال ۲.۱۵ 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 7b.2 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 بیٹھتے ہیں (البتہ کلاسیکی صورت میں ہم ایک ارتعاش میں وقت کے لحاظ سے معتام کی تقسیم کی بات کرتے ہیں جبکہ کوانٹائی صورت میں ہم یکاں تیار کردہ حالات کے ایک سگرا کی تقسیم کی بات کرتے ہیں)۔^{۳۹}

سوال ۲.۱۵: ہارمونی مرتبہ کے زمینی حال میں کلاسیکی احبازتی خطے کے باہر ایک ذرہ کی موجودگی کا احتمال (تین بامعنی ہندسوں تک) تلاش کریں۔ اشارہ: کلاسیکی طور پر ایک مرتبہ کی توانائی $E = (1/2)ka^2 = (1/2)m\omega^2 a^2$ ہوگی جہاں a حیطہ ہے۔ یوں توانائی E کے مرتبہ کا ”کلاسیکی احبازتی خطہ“ $\sqrt{2E/m\omega^2} - \sqrt{2E/m\omega^2} + \sqrt{2E/m\omega^2}$ تکمل کی قیمت ”عمومی تقسیم“ یا ”تفاعل حتمل“ کی جدول سے دیکھیں۔

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

سوال ۲.۱۷: اس سوال میں ہم ہرمانٹ کشیرر کئی کے چند اہم مسائل، جن کا ثبوت پیش نہیں کیا جائے گا، پر غور کرتے ہیں۔

Hermite polynomials^{۳۹}

^{۳۷} ہرمانٹ کشیرر کئیوں پر سوال ۲.۱۷ میں مزید غور کیا گیا ہے۔

^{۳۸} میں یہاں معمولی متقلات حاصل نہیں کروں گا۔

^{۳۹} کلاسیکی تقسیم کو ایک حبیبی توانائی کے متعدد مرتبہ، جن کے نفاذ آغز بلا منصوبہ ہوں، کا سگرا تصور کرتے ہوئے یہ مثال زیادہ بہتر ہوگا۔

ا. کلیہ روڈریگیس^{۴۰} درج ذیل کہتا ہے۔

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

اس کو استعمال کر کے H_3 اور H_4 اخذ کریں۔

ب. درج ذیل کلیہ توانی گزشتہ دو ہر مائٹ کشیر رکنیوں کی صورت میں H_{n+1} دیتا ہے۔

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

اس کو جب $n=1$ کے نتائج کے ساتھ استعمال کر کے H_5 اور H_6 تلاش کریں۔

ج. اگر آپ n رتبی کشیر رکنی کا تفرق لیں تو آپ کو $n-1$ رتبی کشیر رکنی حاصل ہوگی۔ ہر مائٹ کشیر رکنیوں کے لیے درج ذیل ہوگا

$$(۲.۸۸) \quad \frac{dH_n}{d\xi} = 2n H_{n-1}(\xi)$$

جس کی تصدیق ہر مائٹ کشیر رکنی H_5 اور H_6 کے لئے کریں۔

د. پیدا کار تفاعل^{۴۱} $e^{-z^2+2z\xi}$ کا $z=0$ پر n واں تفرق $H_n(\xi)$ ہوگا، یا دوسرے لفظوں میں، درج ذیل تفاعل کے ٹیلر پھیلاؤ میں یہ $z^n/n!$ کا عددی سر ہوگا۔

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

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

۲.۴ آزاد ذرہ

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

$$(۲.۹۰) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = E \psi$$

Rodrigues formula^{۴۰}
generating function^{۴۱}

یا ذیل ہے۔

$$(۲.۹۱) \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -k^2 \psi \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

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

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 تاہم وقت $e^{-iEt/\hbar}$ جوڑتے ہوئے ذیل حاصل ہوگا۔

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

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 دلیل^{۳۲} کی ایک اٹل قیمت کا یوں مطابقتی ہوگا کہ درج ذیل ہو۔

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

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

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

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

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

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 ۱.۳۹) کے تحت ان کا معیار حرکت درج ذیل ہوگا۔

$$(۲.۹۶) \quad p = \hbar k$$

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

$$(۲.۹۷) \quad v_{\text{گروائی}} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$$

اس کے برعکس ایک آزاد ذرہ جس کی توانائی E ہو (جو حتمی طور پر حرکت کر رہا ہو) کی کلاسیکی رفتار $E = (1/2)mv^2$ سے حاصل کی جاسکتی ہے۔

$$(۲.۹۸) \quad v_{\text{کلاسیکی}} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{\text{گروائی}}$$

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

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

یوں آزاد ذرے کی صورت میں متبادل علیحدگی حل طبعی طور پر متبادل 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 متبادل علیحدگی حل ہمارے کسی کام کے نہیں ہیں، کیونکہ یہ طبعی مفہوم سے آزاد، ریاضیاتی کردار ادا کرتے ہیں۔ تاہم وقت شروع و آخر مساوات کا عمومی حل اب بھی متبادل متبادل 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)۔

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

(ہم $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ کو اپنی آسانی کیلئے مکمل کے باہر نکالتے ہیں؛ مساوات ۲.۱۷ میں عددی سر c_n کی جگہ یہاں $\phi(k)$ (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 جائے گی۔ ہم اس کو موج اکٹھے کہتے ہیں۔^{۴۳}

wave packet^{۴۴}

سائنس امواج کی وسعت۔ لامتناہی تک پہنچتی ہے اور یہ معمول پر لانے کے قابل نہیں ہوتی ہیں۔ تاہم ایسی امواج کا خطی میل تباہ کن مداخلت پیدا کرتا ہے، جس کی بنیاد تمام ہندسی اور معمولی ماسک ہوتی ہے۔

باب ۲. غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات

عمومی کوانٹم مسئلہ میں ہمیں $\Psi(x, 0)$ مندرہم کر کے $\Psi(x, t)$ تلاش کرنے کو کہا جاتا ہے۔ آزاد ذرے کیلئے اس کا حل مساوات 100.2 کی صورت اختیار کرتا ہے۔ اب سوال یہ پیدا ہوتا ہے کہ ابتدائی تقاضا عمل موج

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

پر پورا اترتا ہوا $\psi(k)$ کیسے تعین کیا جائے؟ یہ فوریر سیر تجزیہ کا کلاسیکی مسئلہ ہے جس کا جواب مسئلہ پلانشرال^{۲۵} :

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} dk \Leftrightarrow F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (۲.۱۰۲)$$

پیش کرتا ہے (سوال 20.2 دیکھیں)۔ $F(k)$ کو $f(x)$ کا فوریر بدل^{۲۶} کہا جاتا ہے جبکہ $f(x)$ کو $F(k)$ کا الٹے فوریر بدل^{۲۷} کہتے ہیں (ان دونوں میں صرف قوت نہ کی علامت کا مندرق پایا جاتا ہے)۔ ہاں، اجازتی تقاضا عمل پر کچھ پابندی ضرور عائد ہے: مکمل کا موجود^{۲۸} ہونا لازم ہے۔ ہمارے مقاصد کے لئے، تقاضا عمل $\Psi(x, 0)$ 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 100.2 ہو گا جہاں $\phi(k)$ درج ذیل ہو گا۔

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

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

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

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

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

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

^{۲۵} Plancherel's theorem

^{۲۶} Fourier transform

^{۲۷} inverse Fourier transform

^{۲۸} تقاضا عمل $f(x)$ پر عائد لازم اور کافی پابندی یہ ہے کہ $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$ مستثنای ہو۔ (ایسی صورت میں $\int_{-\infty}^{\infty} |F(k)|^2 dk$ بھی مستثنای ہو گا، اور حقیقتاً ان دونوں تعلقات کی قیمتیں ایک دوسری پیشی ہوں گی۔ Arfken کے حصہ 5.15 میں حاشیہ 24 دیکھیں۔)

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

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

آخر میں ہم اس کو دوبارہ مساوات 100.2 میں پر کرتے ہیں۔

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

بد قسمتی سے اس عمل کو بنیادی تفاعل میں حل کرنا ممکن نہیں ہے، تاہم اس کی قیمت کو اعدادی تراکیب سے حاصل کیا جاسکتا ہے (شکل 8.2)۔ ایسی بہت کم صورتیں حقیقتاً پائی جاتی ہیں جن کے لئے $\Psi(x, t)$ کا مکمل (مساوات 100.2) صریحاً حل کرنا ممکن ہو۔ سوال ۲.۲۲ میں ایسی ایک بالخصوص خوبصورت مثال پیش کی گئی ہے۔

آئیں ایک تحدیدی صورت پر غور کریں۔ اگر a کی قیمت بہت کم ہو تب ابتدائی تفاعل موج خوبصورت معما کی نوکیلی صورت اختیار کرتی ہے (شکل 9.2)۔ ایسی صورت میں ہم چھوٹے زاویوں کے لئے تخمیناً $\sin ka \approx ka$ لکھ کر درج ذیل حاصل کرتے ہیں

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

جو k کی مختلف قیمتوں کا آپس میں کٹ جانے کی بنا اتفاقی ہے (شکل 9.2)۔ یہ مثال ہے اصول عدم یقینیت کی: اگر ذرے کے مقام میں پھیلاؤ کم ہو، تب اس کی معیار حرکت (لہذا k ، مساوات 96.2 دیکھیں) کا پھیلاؤ لازماً زیادہ ہوگا۔ اس کی دوسری انتہا (بڑی a) کی صورت میں مقام کا پھیلاؤ زیادہ ہوگا (شکل 10.2) لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

اب $\sin z/z$ کی زیادہ سے زیادہ قیمت $z = 0$ پر پائی جاتی ہے جو گھٹ کر $z = \pm\pi$ (جو یہاں $k = \pm\pi/a$ کو ظاہر کرتا ہے) پر صفر ہوتی ہے۔ یوں بڑی a کیلئے $k = 0$ پر $\phi(k)$ نوکیلی صورت اختیار کرے گا (شکل 10.2)۔ اس بار ذرے کی معیار حرکت اچھی طرح معین ہے جبکہ اس کا مقام صحیح طور پر معلوم نہیں ہے۔ □

آئیں اب اس تضاد پر دوبارہ بات کریں جس کا ذکر ہم پہلے کر چکے: جہاں مساوات 94.2 میں دیا گیا علیحدگی حل $\Psi_k(x, t)$ ، ٹھیک اس ذرہ کی رفتار سے حرکت نہیں کرتی ہے جس کو یہ بظاہر ظاہر کرتی ہے۔ حقیقتاً یہ مسئلہ وہیں پر ختم ہو گیا تھا جب ہم جان چکے کہ Ψ_k طبعی طور پر متبل حصول حل نہیں ہے۔ بحر حال

آزاد ذرے کی تفاعل موج (مساوات 100.2) میں سمونی سمتی رفتار کی معلومات پر غور کرنا دلچسپی کا باعث ہے۔ بنیادی تصور کچھ یوں ہے: سائن تفاعل علاقے کا خطی میل جس کے جیٹھ کو ϕ ترمیم کرتا ہو (شکل 11.2) موجی اکٹھ ہوگا؛ یہ ”علائف“ میں ڈھانکے ہوئے ”لہروں“ پر مشتمل ہوگا۔ انفرادی لہر کی رفتار، جس کو دوری سمتی رفتار^{۳۹} کہتے ہیں، ہر گز ذرے کی سمتی رفتار کو ظاہر نہیں کرتی ہے بلکہ علائف کی رفتار، جس کو گروہی سمتی رفتار^{۴۰} کہتے ہیں، ذرے کی رفتار ہوگی۔ علائف کی سمتی رفتار لہروں کی فطرت پر منحصر ہوگی؛ یہ لہروں کی سمتی رفتار سے زیادہ، کم یا اس کے برابر ہو سکتی ہے۔ ایک دھانگے 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 ہوگی، جیسا آپ نے جھیل میں پتھر پھینک کر دیکھا ہو گا (اگر آپ پانی کی ایک مخصوص لہر پر نظر جائے رکھیں تو آپ دیکھیں گے کہ، پیچھے سے آگے کی طرف بڑھتے ہوئے، آغاز میں اس لہر کا جیٹھ بڑھتا ہے جبکہ آخر میں آگے پیچ کر اس کا جیٹھ ٹھک 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 کو انٹرمیکانیات میں آزاد ذرے کے تفاعل موج کی گروہی سمتی رفتار اس کی دوری سمتی رفتار سے دگنی ہے، جو عین ذرے کی کلاسیکی رفتار ہے۔

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

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

(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^{۴۱} (ω کا متغیر k کے لحاظ سے کلیہ) سے قطع نظر، درست ہوگا۔) 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 بنیاد 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 متابل نظر انداز ہے لہذا ہم تفاعل عمل $\omega(k)$ 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۔

(کھل کے وسط کو k_0 پر منتقل کرنے کے عنصر سے) ہم متغیر k کی جگہ متغیر $s = k - k_0$ استعمال کرتے ہیں۔ یوں درج ذیل ہوگا۔

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

phase velocity^{۳۹}
group velocity^{۴۰}
dispersion relation^{۴۱}

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 ہوگا۔

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

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

$$(۲.۱۰۵) \quad \Psi(x, t) \cong e^{-i(\omega_0 - k_0 \omega'_0)t} \Psi(x - \omega'_0 t, 0)$$

ماسوائے دوری جبز و ضرب کے (جو کسی بھی صورت میں $|\Psi|^2$ کی قیمت پر اثر انداز نہیں ہوگا) یہ موجی اکٹھ بظاہر مستی رفتار ω'_0 سے حرکت کرے گا:

$$(۲.۱۰۶) \quad v_{\text{دوری}} = \frac{d\omega}{dk}$$

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

$$(۲.۱۰۷) \quad v_{\text{دوری}} = \frac{\omega}{k}$$

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 گروپی مستی رفتار نا کہ ساکن حالات کی دوری مستی رفتار کلاسیکی ذرے کی رفتار دے گی۔

$$(۲.۱۰۸) \quad v_{\text{دوری}} = 2v_{\text{سی}} = v_{\text{کلاسیکی}}$$

سوال ۲.۱۸: دکھائیں کہ متغیر x کے کسی بھی تفاعل کو لکھنے کے دو معادل طریقے $[Ae^{ikx} + Be^{-ikx}]$ اور $[C \cos kx + D \sin kx]$ ہیں۔ مستقالات C اور D کو مستقالات A اور B کی صورت میں لکھیں۔ اسی طرح مستقالات A اور B کو مستقالات C اور D کی صورت میں لکھیں۔ تبصرہ: کوانٹم میکانیات میں جب $V = 0$ ہو، قوت نہائی 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 لامستثنائی چسکور کواں میں پائی جاتی ہے۔

سوال ۲.۱۹: مساوات ۹۴.۲ میں دی گئی آزاد ذرے کے تفاعل موج کا احتمال J تلاش کریں (سوال ۱۴.۱ دیکھیں)۔ احتمال رو کے ہوا کار کیا ہوگا؟

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

باب ۲. غیر تاجع وقت شرودنکر مساوات

۱. مسئلہ ڈرشلے کہتا ہے کہ وقفہ $[-a, +a]$ پر کسی بھی تفاعل $f(x)$ کو فوریئر 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. فوریئر تسلسل کے عددی سروں کے حصول کی مساواتوں سے درج ذیل اخذ کریں۔

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

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 جبزو-۱ اور جبزو-۲ 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 اگلی 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 گیں۔ اس کے باوجود حد $a \rightarrow \infty$ کی صورت میں ان دونوں کی ساخت ایک دوسرے کے ساتھ مشابہت رکھتی ہیں۔

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

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

جہاں A اور a مثبت حقیقی مستقل ہیں۔

۱. $\Psi(x, 0)$ 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 ۲.۲۲: گاوسی موجی اکٹھا ایک آزاد ذرے کا ابتدائی فنکشن 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 $y \equiv \sqrt{a}[x + (b/2a)]$ ۔ یوں $y^2 - (b^2/4a) = (ax^2 + bx)$ ہوگا۔ جواب:

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

ج. $|\Psi(x, t)|^2$ تلاش کریں۔ اپنا جواب 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 فنکشن) بنائیں۔ کسی بڑے t پر دوبارہ خاکہ کھینچیں۔ وقت گزرنے کے ساتھ ساتھ $|\Psi|^2$ کو کیا ہوگا؟

د. توقعاتی قیمتیں $\langle x \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ اور $\langle p^2 \rangle$ ؛ اور احتمالات σ_x اور σ_p تلاش کریں۔ جبزی جواب:

$$\langle p^2 \rangle = a\hbar^2$$

ه. کیا عدم یقینیت کا اصول یہاں کارآمد ہے؟ کس لمحہ t پر یہ نظام عدم یقینیت کی حد کے متغیر ہوگا؟

۲.۵ ڈیلیٹا فنکشن

۲.۵.۱ مقید حالات اور بکھراو حالات

ہم غیر تابع وقت شرودنگر مساوات کے دو مختلف حل دیکھ چکے ہیں: لامستناہی چپکور کنواں اور ہارمونی مرتعش کے حل معمول پر لانے کے قابل تھے اور انہیں غیر مسلسل اشاریہ n کے لحاظ سے نام دیا جاتا ہے؛ آزاد ذرے کے لیے یہ معمول پر لانے کے قابل نہیں ہیں اور انہیں استمراری متغیر k کے لحاظ سے نام دیا جاتا ہے۔ اول الذکر بذات خود طبعی طور پر قابل حصول حل کو ظاہر کرتے ہیں جبکہ موخر الذکر ایسا نہیں کرتے ہیں؛ تاہم دونوں صورتوں میں تابع وقت شرودنگر

مساوات کے عمومی حل ساکن حالات کا خطی جوڑ ہو گا۔ پہلی قسم میں یہ جوڑ (n پر لیا گیا) مجموعہ ہو گا، جبکہ دوسرے میں یہ (k پر) نکل ہو گا۔ اس امتیاز کی طبعی اہمیت کیا ہے؟

کلاسیکی میکانیات میں ایک بعدی غیر تاجع وقت مخفیہ دو مکمل طور پر مختلف حرکات پیدا کر سکتی ہے۔ اگر $V(x)$ ذرے کی کل توانائی E سے دونوں جانب زیادہ بلند ہو (شکل 12.2) تب یہ ذرہ اس مخفی توانائی کے کنواں میں ”پھنسا“ رہے گا: یہ **والپیٹ نقاط**^{۵۲} کے بیچ آگے پیچھے حرکت کرتا رہے گا اور کنواں سے باہر نہیں نکل سکے گا (ماسوائے اس صورت میں کہ آپ اسے اضافی توانائی فراہم کریں جس کی ابھی ہم بات نہیں کر رہے ہیں)۔ ہم اسے **مقید حالت**^{۵۳} کہتے ہیں۔ اس کے برعکس اگر E ایک (یا دونوں) جانب $V(x)$ سے تجاوز کرے تب، لامتناہی سے آتے ہوئے، مخفی توانائی کے زیر اثر ذرہ اپنی رفتار کم یا زیادہ کرے گا اور اس کے بعد واپس لامتناہی کو لوٹے گا (شکل 12.2)۔ (یہ ذرہ مخفی توانائی میں پھنس نہیں سکتا ہے، ماسوائے اس صورت کہ اس کی توانائی (مثلاً رگڑ کی بنا) گھٹے، لیکن ہم یہاں بھی ایسی صورت کی بات نہیں کر رہے ہیں)۔ ہم اسے **بکھراو حالت**^{۵۴} کہتے ہیں۔ بعض مخفی توانائیاں صرف مقید حال پیدا کرتی ہیں (مثلاً ہارمونی مرتعش)؛ بعض صرف بکھراو حال پیدا کرتی ہیں (مثلاً پباز 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 **سرنگے زنی**^{۵۵} (جس پر ہم کچھ دیر میں بات کریں گے) ایک ذرے کو کسی بھی مستثنائی مخفیہ رکاوٹ کے اندر سے گزرنے دیتی ہے، لہذا مخفیہ کی قیمت صرف لامتناہی پر اہم ہو گی (شکل 12.2c)۔

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

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

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

چونکہ $\pm\infty \rightarrow x$ پر لامتناہی چپور کنواں اور ہارمونی مرتعش کی مخفی توانائیاں لامتناہی کو پہنچتی ہیں لہذا یہ صرف مقید حالات پیدا کرتی ہیں جبکہ آزاد ذرے کی مخفی توانائی ہر مقام پر صفر ہوتی ہے لہذا یہ صرف بکھراو حال^{۵۶} پیدا کرتی ہے۔ اس حصہ میں (اور اگلے حصہ میں) ہم ایسی مخفی توانائیوں پر غور کریں گے جو دونوں اقسام کے حالات پیدا کرتی ہیں۔

turning points^{۵۲}
bound state^{۵۳}
scattering state^{۵۴}
tunneling^{۵۵}

^{۵۲}آپ کو یہاں پر پریشانی کا سامنا ہو سکتا ہے کیونکہ عمومی مسئلہ جس کے لئے $E > V$ درکار ہے (سوال 3.2)، بکھراو حال، جو معمول پر لانے کے متبادل نہیں ہیں، پر لاگو نہیں ہو گا۔ اگر آپ اسے مطمئن نہیں ہیں تب $E \leq 0$ کے لئے مساوات شرودنگر کو آزاد ذرہ کے لئے حل کر کے دیکھیں کہ اس کے خطی جوڑ بھی معمول پر لانے کے متبادل نہیں ہیں۔ صرف مثبت مخفی توانائی حل مکمل سلمہ دیں گے۔

۲.۵.۲ ڈیلٹا فنکشن

مبدل لامتناہی کم چوڑائی اور لامتناہی بلند ایسا نوکیلا فنکشن جس کا رقبہ اکائی ہو (شکل 13.2) ڈیلٹا فنکشن^{۵۷} کہلاتا ہے۔

$$(۲.۱۱۱) \quad \delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1$$

نقطہ $x = 0$ پر یہ فنکشن مستناہی نہیں ہے لہذا تکنیکی طور پر اس کو فنکشن کہنا غلط ہوگا (ریاضی دان اسے متعمم فنکشن^{۵۸} یا متعمم تقسیم^{۵۹} کہتے ہیں)۔ 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 یا ایک ڈیلٹا فنکشن ہوگا)۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ $\delta(x - a)$ نقطہ a پر اکائی رقبہ کا نوکیلی فنکشن ہوگا۔ چونکہ $\delta(x - a)$ اور ایک سادہ فنکشن $f(x)$ کا حاصل ضرب نقطہ a کے علاوہ ہر مقام پر صفر ہوگا لہذا $\delta(x - a)$ کو $f(x)$ سے ضرب دینا، اسے $f(a)$ سے ضرب دینے کے مترادف ہے:

$$(۲.۱۱۲) \quad f(x)\delta(x - a) = f(a)\delta(x - a)$$

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

$$(۲.۱۱۳) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x - a) dx = f(a) \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - a) dx = f(a)$$

تکمل کی علامت کے اندر یہ نقطہ a پر فنکشن $f(x)$ 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 ہوگا جہاں $0 < \epsilon$ ہے۔)

آئیں درج ذیل روپ کے مخفیہ پر غور کریں جہاں α ایک مثبت مستقل ہے۔^{۶۱}

$$(۲.۱۱۴) \quad V(x) = -\alpha\delta(x)$$

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

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

^{۵۷} Dirac delta function

^{۵۸} generalized function

^{۵۹} generalized distribution

^{۶۰} ڈیلٹا فنکشن کو ایسے مستطیل (یا مثلث) کی تحدیدی صورت تصور کیا جاسکتا ہے جس کی چوڑائی بہت درج کم اور قد بہت درج بڑھتا ہو۔

^{۶۱} ڈیلٹا فنکشن کی اکائی ایک بٹا سبائی ہے (مساوات ۲.۱۱۱ دیکھیں) لہذا α کا بعد توانائی ضرب سبائی ہوگا۔

باب ۲. غیر تاجع وقت شروع و ختم مساوات

جو مقید حالات ($E < 0$) اور بکھراؤ حالات ($E > 0$) دونوں پیدا کرتی ہے۔
ہم پہلے مقید حالات پر غور کرتے ہیں۔ خطہ $x < 0$ میں $V(x) = 0$ ہوگا لہذا

$$(۲.۱۱۶) \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi = k^2 \psi$$

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

$$(۲.۱۱۷) \quad k \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

مساوات ۲.۱۱۶ کا عمومی حل

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

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

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

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

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

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

$$(۲.۱۲۱) \quad \begin{cases} 1. \quad \psi & \text{لازمًا استمراری} \\ 2. \quad \frac{d\psi}{dx} & \text{استمراری، ماسوائے ان نقاط پر جہاں مخفیہ لامتناہی ہو} \end{cases}$$

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

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

تفاعل $\psi(x)$ کو شکل 14.2 میں ترسیم کیا گیا ہے۔ دوم سرحدی شرط ہمیں ایسا کچھ نہیں بتاتی ہے؛ (لا متناہی چپ کو رکنا کی طرح) جوڑ پر مخفیہ لامتناہی ہے اور تفاعل کی ترسیل سے واضح ہے کہ $x = 0$ پر اس میں بل پایا جاتا ہے۔ مزید اب تک کی کہانی میں ڈیلٹا تفاعل کا کوئی کردار نہیں پایا گیا۔ ظاہر ہے کہ $x = 0$ پر ψ کے تفرق میں عدم استمراری بھی ڈیلٹا تفاعل تعیین 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۔

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

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

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

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

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

یہاں درج ذیل ہوگا (مساوات ۲.۱۲۲):

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

لہذا $\Delta(d\psi/dx) = -2Bk$ ساتھ ہی $\psi(0) = B$ ہے۔ اس طرح مساوات ۲.۱۲۵ درج ذیل کہتی ہے:

$$(۲.۱۲۶) \quad k = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

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

$$(۲.۱۲۷) \quad E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

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 ہوگا۔

$$(۲.۱۲۸) \quad B = \sqrt{k} = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}$$

باب ۲. غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات

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

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

ہم $E > 0$ کی صورت میں بھراؤ 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

$$(۲.۱۳۰) \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

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

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

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

نقطہ $x = 0$ پر $\psi(x)$ کے استمراری بننا درج ذیل ہوگا۔

$$(۲.۱۳۳) \quad F + G = A + B$$

تغیرات 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 $\Delta(d\psi/dx) = ik(F - G - A + B)$ ہوگا۔ ساتھ ہی $\psi(0) = (A + B)$ ہوگا لہذا دوسری سرحدی شرط (مساوات ۲.۱۲۵) کہتی ہے

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

یا مختصراً:

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

دونوں سرحدی شرائط مسلط کرنے کے بعد ہمارے پاس دو مساوات (مساوات ۲.۱۳۳ اور ۲.۱۳۵) جبکہ چار نامعلوم مستقلات A ، B ، C اور D بلکہ k شامل کرتے ہوئے پانچ نامعلوم مستقل ہوں گے۔ یہ معمول پر لانے کے قابل حال نہیں ہے لہذا معمول پر لانا مددگار ثابت نہیں ہوگا۔ بہتر ہوگا کہ ہم رک کر ان مستقلات کی انفرادی طبعی اہمیت پر غور کریں۔ آپ کو یاد ہوگا کہ e^{ikx} (کے ساتھ تائع وقت جبز و ضربی $e^{-iEt/\hbar}$ منسلک کرنے سے) دائیں رخ حرکت کرتا ہوا تعلق موج پیدا ہوتا ہے۔ اسی طرح e^{-ikx} بائیں رخ حرکت کرتا ہوا موج دیتا ہے۔ یوں مساوات ۲.۱۳۱ میں مستقل A بائیں سے آمدی موج کا جیٹ ہے، B بائیں رخ واپس لوٹتے ہوئے موج کا جیٹ ہے، F (مساوات ۲.۱۳۲) دائیں رخ نکل کر چلتے ہوئے موج کا جیٹ جبکہ H دائیں سے آمدی موج کا جیٹ ہے (شکل 15.2 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 جیٹ صفر ہوگا:

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

آمدی موج کا جیٹ A ، منعکس موج کا جیٹ B جبکہ ترسیل موج کا جیٹ F ہوگا۔ مساوات ۲.۱۳۳ اور ۲.۱۳۵ کو B اور F کے لیے حل کر کے درج ذیل حاصل ہوں گے۔

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

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

چونکہ کسی مخصوص مقام پر ذرے کی موجودگی کا احتمال $|\psi|^2$ ہوتا ہے لہذا آمدی ذرہ کے انعکاس کا تناسبی^{۶۵} احتمال درج ذیل ہوگا

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} \quad (2.138)$$

جہاں R کو شرح انعکاس^{۶۶} کہتے ہیں۔ (اگر آپ کے پاس ذرات کی ایک شعاع ہو تو R آپ کو بتائے گا کہ ٹکرانے کے بعد ان میں سے کتنے ذرات واپس لوٹ کر آئیں گے۔) ترسیل کا احتمال درج ذیل ہوگا جسے شرح ترسیل^{۶۷} کہتے ہیں۔

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \beta^2} \quad (2.139)$$

incident wave^{۶۲}

reflected wave^{۶۳}

transmitted wave^{۶۴}

^{۶۵} یہ معمول پر لانے کے قابل تعلق نہیں ہے لہذا کسی ایک مخصوص نقطہ پر ذرہ پانا جانے کا احتمال بے معنی ہوگا؛ بہر حال آمدی اور منعکس امواج کے احتمالات کا تناسب معنی خیز ہے۔ اگلے پیراگراف میں اس پر مزید بات کی جائے گی۔

reflection coefficient^{۶۱}

transmission coefficient^{۶۷}

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

(۲.۱۳۰)

$$R + T = 1$$

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

(۲.۱۳۱)

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

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

یہاں تک باقی سب ٹھیک ہے لیکن ایک اصولی مسئلہ باقی ہے جسے ہم نظر انداز نہیں کر سکتے ہیں۔ چونکہ بکھراؤ موج کے تفاعل معمول پر لانے کے قابل نہیں ہیں لہذا یہ کسی صورت بھی حقیقی ذرے کے حال کو ظاہر نہیں کر سکتے ہیں، لیکن ہم اس مسئلہ کا حل جانتے ہیں۔ ہمیں ساکن حالات کے ایسے خطی جوڑ تیار کرنے ہوں گے جو معمول پر لائے جانے کے قابل ہوں، جیسا ہم نے آزاد ذرہ کے لیے کیا تھا۔ حقیقی طبعی ذرات کو یوں تیار کردہ موجی اکٹھے ظاہر کرے گا۔ یہ ظاہری طور پر سیدھا اصول ہے جو عملی استعمال میں پیچیدہ ثابت ہوتا ہے لہذا یہاں سے آگے مسئلے کو کمپیوٹر کی مدد سے حل کرنا بہتر ہوگا۔^{۶۸} چونکہ توانائی کی قیمتوں کا پورا سلسلہ استعمال کیے بغیر آزاد ذرے کے تفاعل موج کو معمول پر نہیں لایا جاسکتا ہے لہذا R اور T کو (بالترتیب) E کے متدرج ذرات کی تخمینی شرح انکاس اور شرح ترسیل سمجھنا چاہیے۔

یہ ایک عجیب بات ہے کہ ہم لب لباب وقت کے تابع مسئلہ (جہاں ایک آمدی ذرہ مخفیہ سے بکھر کر لامتناہی کی طرف رواں ہوتا ہے) پر غور ساکن حالات استعمال کرتے ہوئے کر پاتے ہیں۔ آخر کار (مساوات ۲.۱۳۱ اور ۲.۱۳۲ میں) ψ ایک مخلوط، غیر تابع وقت، ساکن تفاعل ہے جو (مستقل جیل کے ساتھ) دونوں اطراف لامتناہی تک پھیلا ہوا ہے۔ اس کے باوجود اس تفاعل پر موزوں سرحدی شرائط مل کر کے ہم ایک ذرہ (جسے مقامی موجی اکٹھے سے ظاہر کیا گیا ہو) کی مخفیہ سے انکاس یا ترسیل کا احتمال تعین کر پاتے ہیں۔ اس ریاضیاتی کراہمت کی وجہ میرے خیال میں یہ حقیقت ہے کہ ہم پوری فضا میں پھیلے ہوئے تفاعل موج، جن کی تابعیت وقت نہ ہونے کے برابر ہو، کے خطی جوڑ لے کر ایک (حرکت پذیر) نقطہ کے گرد ایسا تفاعل موج تیار کر سکتے ہیں جس پر وقت کے لحاظ سے تفصیلاً غور کیا جاسکتا ہے (سوال 43.2)

متعلقہ مساوات جانتے ہوئے آئیں ڈیلٹا تفاعل رکاوٹ (شکل 16.2) کے مسئلہ پر غور کریں۔ ہمیں صرف α کی علامت تبدیل کرنی ہوگی۔ ظاہر ہے یہ تحدیدی حال کو ختم کرے گا (سوال 2.2)۔ دوسری جانب، شرح انکاس اور شرح ترسیل جو α^2 پر منحصر ہیں تبدیل نہیں ہوں گے۔ کتنی عجیب بات ہے کہ ایک ذرہ ایک رکاوٹ کے اندر سے یا ایک کنواں کے اوپر سے ایک جیسی آسانی کے ساتھ گزرتا ہے۔ کلاسیکی طور پر جیسا کہ آپ جانتے ہیں، ایک ذرہ کبھی بھی لامتناہی فضا کے رکاوٹ کو عبور نہیں کر سکتا، چاہے اس کی توانائی کتنی ہی کیوں نہ ہو۔ حقیقت آکاسیکی مسائل بکھراؤ غیر دلچسپ ہوتے ہیں: اگر $E > V$ ہو تب $R = 0$ اور $T = 1$ ہوگا اور ذرہ ہر صورت رکاوٹ عبور کر پائے گا؛ اگر $E < V$ ہو تب $T = 0$ اور $R = 1$ ہوگا اور ذرہ پہاڑی پر دہاں تک چڑھے گا جہاں تک اس میں دم ہو اور اس کے بعد اسی راستے واپس لوٹے گا۔ کوانٹائی بکھراؤ زیادہ دلچسپ ہوتے ہیں: اگر

^{۶۸} کنواں اور رکاوٹوں سے موجی اکٹھے کے بکھراؤ کے اعدادی مطالعہ دلچسپ معلومات فراہم کرتے ہیں۔

بند $E < V$ ہو تب بھی ایک ذرے کا مخفیہ عبور کرنے کا احتمال غیر صفر ہوگا۔ اس مظہر کو سرنگے زنی^{۶۹} کہتے ہیں جس پر جدید برقیات کا بیشتر حصہ منحصر ہے اور جو خوردبین میں حیرت انگیز ترقی کے پشت پر ہے۔ اس کے برعکس بند $E > V$ کی صورت میں بھی ذرے کے انعکاس کا احتمال غیر صفر ہوگا؛ اگرچہ میں آپ کو کبھی بھی مشورہ نہیں دوں گا کہ چھت سے نیچے کودیں اور توقع رکھیں کہ کوانٹم میکانیٹ آپ کی حبان بچا پائے گی (سوال 35.2 سوال دیکھیے)۔

سوال ۲.۲۳: درج ذیل کھلات کی قیمتیں تلاش کریں۔

$$۱. \int_{-3}^{+1} (x^3 - 3x^2 + 2x - 1) \delta(x + 2) dx$$

$$ب. \int_0^{\infty} [\cos(3x) + 2] \delta(x - \pi) dx$$

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

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

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

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

۱. درج ذیل دکھائیں

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

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

ب. سیدھ تفاعل^{۷۰} $\theta(x)$ درج ذیل ہے۔

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

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

سوال ۲.۲۵: عدم یقینیت کے اصول کو ۲.۱۲۹ کے تفاعل موج کے لئے پرکھیں۔ اشارہ چونکہ ψ کے تفرق کا $x = 0$ پر عدم استر اپایا جاتا ہے لہذا $\langle p^2 \rangle$ کا حاب پیچیدہ ہوگا۔ سوال ۲.۲۴-ب کا نتیجہ استعمال کریں۔ جزوی جواب: $\langle p^2 \rangle = (ma/\hbar)^2$

^{۶۹} tunneling
^{۷۰} step function

باب ۲. غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات

سوال ۲.۲۶: تفعل $\delta(x)$ کا فورسیر تبادل کیا ہوگا؟ مسئلہ پلانشرل استعمال کر کے درج ذیل دکھائیں۔

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk \quad (۲.۱۴۴)$$

تبصرہ: یہ کلیہ دیکھ کر ایک عزت مند ریاضی دان پریشان ضرور ہوگا۔ اگرچہ $x = 0$ کے لئے یہ مکمل لامتناہی ہے اور $x \neq 0$ کی صورت میں چونکہ مکمل ہمیشہ کے لئے ارتعاش پذیر رہتا ہے لہذا یہ (صفر یا کسی دوسرے عدد کو) مرکوز نہیں ہوتا ہے۔ اس کی پیوند کاری کے طریقے پائے جاتے ہیں (مثلاً، ہم $L -$ تا $L +$ مکمل لے کر، مساوات ۲.۱۴۴ کو، $L \rightarrow \infty$ کرتے ہوئے مستثنائی مکمل کی اوسط قیمت تصور کر سکتے ہیں)۔ یہاں دشواری کا سبب یہ ہے کہ مسئلہ پلانشرل کے (مربع عملیت) کی بنیادی شرط کو ڈیلٹا تفعل مطمئن نہیں کرتا ہے (صفحہ ۵۶ پر مربع عملیت کی شرط حاشیہ میں پیش کی گئی ہے)۔ اس کے باوجود مساوات ۲.۱۴۴ نہایت مددگار ثابت ہو سکتا ہے اگر اس کو احتیاط سے استعمال کیا جائے۔

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

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

ا. اس مخفیہ کاخ کا کھینچیں۔

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

سوال ۲.۲۸: حبڑواں ڈیلٹا تفعل عمل کے مخفیہ (سوال ۲.۲۷) کے لئے شرح ترسیل تلاش کریں۔

۲.۶ مستثنائی چکور کنواں

ہم آسنری مثال کے طور پر مستثنائی چکور کنواں کا مخفیہ

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

لیتے ہیں جہاں V_0 ایک (مثبت) مستقل ہے (شکل 17.2)۔ ڈیلٹا تفاعل کنواں کی طرح یہ مخفیہ مقید حالات (جہاں $E < 0$ ہوگا) کے ساتھ ساتھ بکھراو حالات (جہاں $E > 0$ ہوگا) بھی پیدا کرتا ہے۔ ہم پہلے مقید حالات پر غور کرتے ہیں۔

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

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

جہاں

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (۲.۱۴۶)$$

حقیقی اور مثبت ہے۔ اس کا عمومی حل $\Psi(x) = Ae^{-\kappa x} + Be^{\kappa x}$ ہے لیکن $x \rightarrow -\infty$ کے صورت میں اس کا پہلا جزو بے فتا بوڑھتا ہے لہذا ہمیشہ طرح؛ مساوات 2.2.119 دیکھیں) طبعی طور پر متبادل مقبول حل درج ذیل ہوگا۔

$$\psi(x) = Be^{\kappa x}, \quad x < -a \quad (۲.۱۴۷)$$

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

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

جہاں l درج ذیل ہے۔

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

اگرچہ مقید حالات کے لئے E منفی ہے تاہم کہ $E > V$ کی بنا (سوال 2.2.2 دیکھیں) اس کو $-V_0$ سے بڑا ہونا ہوگا؛ لہذا l بھی حقیقی اور مثبت ہوگا۔ اس کا عمومی حل^۱

$$\psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx), \quad -a < x < a \quad (۲.۱۴۹)$$

جہاں C اور D اختیاری مستقلات ہیں۔ آخر میں، خط $x > a$ جہاں ایک بار پھر مخفیہ صفر ہے، عمومی حل $\psi(x) = Fe^{-\kappa x} + Ge^{\kappa x}$ ہوگا لیکن یہاں $x \rightarrow \infty$ کی صورت میں دوسرا جزو بے فتا بوڑھتا ہے لہذا متبادل مقبول حل درج ذیل ہوگا۔

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

اگلے قدم میں ہمیں سرحدی شرائط ملانے ہوں گے: ψ اور $\frac{d\psi}{dx}$ نقاط $-a$ اور $+a$ پر استمراری ہیں۔ یہ جاننے ہوئے کہ دیا گیا مخفیہ جفت تفاعل ہے، ہم کچھ وقت بچا سکتے ہیں اور فرض کر سکتے ہیں کہ حل مثبت۔ یا طاق ہوں گے (سوال 1.2.ج)۔ اس کا فائدہ یہ ہے کہ ہمیں صرف ایک جانب (مثلاً $+a$) پر سرحدی شرائط ملانے کی ضرورت ہوگی؛ چونکہ $\psi(-x) = \pm \psi(x)$ ہے لہذا دوسری جانب کا حل ہمیں خود بخود حاصل ہوگا۔ میں جفت حل حاصل کرتا ہوں جبکہ آپ کو سوال 2.2.29 میں طاق حل تلاش کرنے ہوں گے۔ \cos جفت ہے (جبکہ \sin

^۱اے آپ جانتے ہیں تو عمومی حل کو قوت نہائی روپ میں لکھ سکتے ہیں۔ اس سے بھی وہی اختتامی نتائج حاصل ہوں گے، تاہم تشکیلی مخفیہ کی بنیاد ہم جانتے ہیں کہ حل جفت یا طاق ہوں گے، اور \sin اور \cos کا استعمال اس حقیقت کو یاد واسطہ بروئے کار لاسکتا ہے۔

طابق ہے) لہذا اس میں درج ذیل روپ کے حلوں کی تلاش میں ہوں۔

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

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

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

جبکہ $\frac{d\psi}{dx}$ کی استمرار درج ذیل کہتی ہے

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

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

$$(۲.۱۵۴) \quad \kappa = l \tan(la)$$

چونکہ κ اور l دونوں E کے تفاعل میں لہذا اس کلیہ سے اجبازتی توانائیاں حاصل کی جاسکتی ہیں۔ اجبازتی توانائی E کے لئے حل کرنے سے پہلے ہم درج ذیل بہتر علامتیں متعارف کرتے ہیں۔

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

مساوات ۲.۱۳۶ اور ۲.۱۳۸ کے تحت $(\kappa^2 + l^2) = 2mV_0/\hbar^2$ اور ہوگا لہذا $\sqrt{z_0^2 - z^2}$ ہوگا اور $\kappa a = \sqrt{z_0^2 - z^2}$ مساوات ۲.۱۵۳ درج ذیل روپ اختیار کرے گی۔

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

یہ z (لہذا E) کی ماورائی مساوات ہے جس کا متغیر z_0 ہے (جو کنواں کی ”جامت“ کی ناپ ہے)۔ اس کو اعدادی طریقے سے کمپیوٹر کے ذریعے حل کیا جاسکتا یا $\tan z$ اور $\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$ کو ایک ساتھ ترسیم کر کے ان کے نقاط تقاطع لیتے ہوئے حل کیا جاسکتا ہے (شکل 18.2)۔ دو تحدیدی صورتیں زیادہ دلچسپی کے حامل ہیں۔

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

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

اب $E + V_0$ کنواں کی تہہ کے اوپر توانائی کو ظاہر کرتی ہے اور مساوات کا دایاں ہاتھ ہمیں $2a$ چوڑائی کے لامستثنائی چکور کنواں کی توانائیاں دیتا ہے (مساوات ۲.۲۷ دیکھیں)؛ بلکہ n یہاں طاق ہے لہذا توانائیوں کی نصف تعداد حاصل ہوگی۔ (جیسا آپ سوال 29.2 میں دیکھیں گے کل توانائیوں کی باقی نصف تعداد طاق نصف عمل موج سے حاصل ہوگی۔) یوں $V_0 \rightarrow \infty$ کرنے سے مستثنائی چکور کنواں سے لامستثنائی چکور کنواں حاصل ہوگا؛ تاہم کسی بھی مستثنائی V_0 کی صورت میں مقید حالات کی تعداد مستثنائی ہوگی۔

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

اگر آپ ψ (مساوات ۲.۱۵۱) کو معمول پر لانے میں دلچسپی رکھتے ہیں (سوال 30.2) تو ایسا ضرور کریں جبکہ میں اب بکھراؤ حالات $E > 0$ کی طرف بڑھنا چاہوں گا۔ ہوں بائیں ہاتھ جہاں $V(x) = 0$ ہے درج ذیل ہوگا

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

جہاں ہمیشہ کی طرح درج ذیل ہوگا۔

$$(۲.۱۵۹) \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

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

$$(۲.۱۶۰) \quad \psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx) \quad (-a < x < a)$$

جہاں پہلے کی طرح درج ذیل ہوگا۔

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

دائیں جانب جہاں ہم منسوخ کرتے ہیں کہ کوئی آمدی موج نہیں پائی جاتی درج ذیل ہوگا۔

$$(۲.۱۶۲) \quad \psi(x) = Fe^{ikx}$$

یہاں آمدی حیطہ A ، انعکاسی حیطہ B اور ترسیلی حیطہ F ہے۔^{۴۲}

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

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

^{۴۲} مقید حالات کی صورت میں ہم نے طاق اور جفت تقاربات تلاش کیے۔ ہم یہاں بھی ایسا کر سکتے ہیں، تاہم مسئلہ بکھراؤ میں امواج صرف ایک رخ سے آتے ہیں لہذا یہ مسئلہ ذاتی طور پر غیر متشکل ہے اور سیاق و سباق کے لحاظ سے (حسرت پذیر امواج کے اظہار کے لئے) قیمت نہائی علامت کا استعمال زیادہ موثر ہے۔

باب ۲. غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

جو عین لامستثنیٰ چپ کو رکنواں کی احبازتی توانائیاں ہیں۔ شکل 19.2 میں توانائی کے لحاظ سے T ترسیم کیا گیا ہے۔

سوال ۲.۲۹: مستثنیٰ چپ کو رکنواں کے طاق مقید حال کے تفاع عمل موج کا تجزیہ کریں۔ احبازتی توانائیوں کی ماورائی مساوات اخذ کر کے اسے ترسیمی طور پر حل کریں۔ اس کے دونوں تحدیدی صورتوں پر غور کریں۔ کیا ہر صورت ایک طاق مقید حال پایا جائے گا؟

سوال ۲.۳۰: مساوات ۲.۱۵ میں دیا گیا $\psi(x)$ معمول پر لا کر مستقل D اور F تعین کریں۔

سوال ۲.۳۱: ڈائی رک ڈیٹا تفاعل کو ایک ایسی مستطیل کی تحدیدی صورت تصور کیا جاسکتا ہے، جس کا رقبہ اکائی (1) رکھتے ہوئے اس کی چوڑائی صفر تک اور فت لامستثنائی تک پہنچائی جائے۔ دکھائیں کہ ڈیٹا تفاعل کنواں (مساوات ۲.۱۱۳) لامستثنائی گہرا ہونے کے باوجود $0 \rightarrow z_0$ کی بنا ایک ”کمزور“ مخفیہ ہے۔ ڈیٹا تفاعل مخفیہ کو مستثنائی چکور کنواں کی تحدیدی صورت لیتے ہوئے اس کی مقید حال کی توانائی تعین کریں۔ تصدیق کریں کہ آپ کا جواب مساوات ۲.۱۲۹ کے مطابق ہے۔ دکھائیں کہ موزوں حد کی صورت میں مساوات ۲.۱۶۹ کی تخفیف مساوات ۲.۱۴۱ دے گی۔

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

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

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

سوال ۲.۳۳: مستطیل رکاوٹ (جسے خطہ $-a < x < a$ میں $+V_0 > 0$ لے لیں) سے مساوات ۲.۱۳۵ دیتی ہے) کے لئے شرح ترسیل تعین کریں۔ تین صورتوں $E < V_0$ ، $E = V_0$ اور $E > V_0$ کو علیحدہ علیحدہ حل کریں۔ (آپ دیکھیں گے کہ رکاوٹ کے اندر تینوں صورتوں میں تفاعل موج ایک دوسرے سے مختلف ہوں گے۔) جزوی جواب: $E < V_0$ کے لئے درج ذیل ہوگا۔^{۳۴}

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

سوال ۲.۳۴: درج ذیل سیڑھی مخفیہ پر غور کریں۔

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

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

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

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

$$T = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}} \frac{|F|^2}{|A|^2} \quad (۲.۱۴۲)$$

^{۳۴} یہ سرنگ زنی کی ایک اچھی مثال ہے۔ کلاسیکی طور پر ذرہ رکاوٹ سے ٹکرانے کے بعد واپس لوٹے گا۔

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

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

سوال ۲.۳۵: ایک ذرہ جس کی کمیت m اور حرکی توانائی $E > 0$ ہو مخفیہ کی ایک اچانک گہرائی (شکل 34.2) کی طرف بڑھتا ہے۔

ا. صورت $E = V_0/3$ میں اس کے انعکاس کا احتمال کیا ہوگا؟ اشارہ: یہ بالکل سوال ۲.۳۳ کی طرح ہے، بس یہاں سیدھی اوپر کی بجائے نیچے کو ہے۔

ب. میں نے مخفیہ کی شکل و صورت یوں پیش کی ہے گویا ایک گاڑی افقی چٹان سے نیچے گرنے والی ہے تاہم ایسی کھائی سے گاڑی کا ٹکرا کر واپس لوٹنے کا احتمال جزو-۱ کے نتیجے سے بہت کم ہوگا۔ یہ مخفیہ کیوں ایک افقی چٹان کی صحیح ترجمانی نہیں کرتا ہے؟ اشارہ: شکل 20.2 میں جیسے ہی گاڑی نقطہ $x = 0$ پر سے گزرتی ہے، اس کی توانائی عدم استمرار کے ساتھ گر کر $-V_0$ ہو جاتی ہے؛ کیا یہ نیچے گرتے ہوئے ایک گاڑی کے لیے درست ہوگا؟

ج. ایک نیوٹران مرکزہ میں داخل ہوتے ہوئے مخفیہ میں اچانک کمی محسوس کرتا ہے۔ باہر $V = 0$ جبکہ مرکزہ کے اندر $V = -12 \text{ MeV}$ ہوتا ہے۔ فرض کریں بذریعہ اشتقاق خارج ایک نیوٹران جس کی حرکی توانائی 4 MeV ہو ایک ایسے مرکزہ کو ٹکراتا ہے۔ اس نیوٹران کا جذب ہو کر دوسرا اشتقاق پیدا کرنے کا احتمال کیا ہوگا؟ اشارہ: آپ نے جزو-۱ میں انعکاس کا احتمال تلاش کیا؛ کلیہ $T = 1 - R$ استعمال کر کے سطح سے ترسیل کا احتمال حاصل کریں۔

سوال ۲.۳۶: عین مبداء پر $-a < x < +a$ کے بیچ لامتناہی چپکور کنواں کے اندر $V(x) = 0$ اور اس کے باہر $V(x) = \infty$ ہے۔ غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات پر موزوں سرحدی شرائط مل کر کے اے حل کریں۔ تصدیق کریں کہ آپ کی توانائیاں عین میری حاصل کردہ توانائیوں (مساوات ۲.۲۷) کے مطابق ہیں اور تصدیق کریں کہ میری ψ (مساوات ۲.۲۸) میں $(x+a)/2$ پر کر کے، موزوں معمول زنی سے آپ کی تمام ψ حاصل ہوتی ہیں۔ اپنے اولین تین حل ترسیم کریں اور ان کا موازنہ شکل 2.2 سے کریں۔ دھیان رہے کہ یہاں کنواں کی چوڑائی $2a$ ہے۔

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

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

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

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

ا. کونسا نتیجہ سب سے زیادہ امکان رکھتا ہے؟ اس نتیجے کے حصول کا احتمال کیا ہوگا؟

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

۳. توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہوگی؟ اشارہ: اگر آپ کو لامستثنائی تسلسل کا سامنا ہو تب کوئی دوسری ترکیب استعمال کریں۔

سوال ۲.۳۹:

۱. دکھائیں کہ لامستثنائی چپکوروکنواں میں ایک ذرہ کا تفسار عمل موج کو انشائی تجدیدی عرصہ $T = 4ma^2 / \pi \hbar$ کے بعد دوبارہ اپنے اصل روپ میں واپس آتا ہے۔ یعنی (نہ صرف ساکن حال) بلکہ کسی بھی حال کے لئے $\Psi(x, T) = \Psi(x, 0)$ ہوتا ہے۔

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

۳. کس توانائی کیلئے یہ تجدیدی عرصہ ایک دوسرے کے برابر ہوں گے؟

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

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

۱. اس کے مقید حلوں کی تعداد کیا ہوگی؟

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

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

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

۱. توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہے؟

۲. مستقبل کے لمحہ T پر تفسار عمل موج درج ذیل ہوگا

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

جہاں B کوئی مستقل ہے۔ لمحہ T کی کم سے کم ممکن قیمت کیا ہوگی؟

سوال ۲.۴۲: درج ذیل نصف ہارمونی سر تعش کی احبازتی توانائیاں تلاش کریں۔

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

(مثلاً ایک ایسا سپرنگ جس کو کھینچا تو جاسکتا ہے لیکن اسے دیا نہیں جاسکتا ہے۔) اشارہ: اس کو حل کرنے کے لئے آپ کو ایک بار اچھی طرح سوچنا ہوگا جبکہ حقیقی حساب بہت کم درکار ہوگی۔

سوال ۲.۴۳: آپ نے سوال ۲.۴۲ میں ساکن گاوسی آزاد ذرہ موجی اکٹھ کا تجزیہ کیا۔ اب ابتدائی تفاعل عمل موج

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

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

سوال ۲.۴۴: مبدأ پر لامتناہی چکور کٹوں، جس کے وسط پر درج ذیل ڈیلٹا تفاعل عمل رکاوٹ ہو، کے لیے غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات حل کریں۔

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

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

سوال ۲.۴۵: ایسے دو یا دو سے زیادہ غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات کے منفرد حل جن کی توانائی E ایک دوسرے جیسی ہو کہ **انحطاط**^۱ کہتے ہیں۔ مثال کے طور پر آزاد ذرہ کے حال دوہری انحطاطی ہیں۔ ان میں سے ایک حل دائیں رخ اور دوسرا بائیں رخ حرکت کو ظاہر کرتا ہے۔ تاہم ہم نے ایسے کوئی انحطاطی حل نہیں دیکھے جو معمول پر لانے کے قابل ہوں اور یہ محض ایک اتفاق نہیں ہے۔ درج ذیل مسئلہ ثابت کریں: یک بعدی مقید انحطاطی حال نہیں پائے جاتے ہیں۔^۲ اشارہ: مندرجہ ذیل ψ_1 اور ψ_2 ایسے دو حل ہوں جن کی توانائی، E ، ایک دوسری جیسی ہو۔ حل ψ_1 کی شرودنگر مساوات کو ψ_2 سے ضرب دیں اور اس سے ψ_2 کی شرودنگر مساوات کو ψ_1 سے ضرب دے کر منفی کر کے دکھائیں کہ $\psi_1 d\psi_2/dx - \psi_2 d\psi_1/dx$ ایک مستقل ہوگا۔ اب $\pm\infty$ پر معمول پر لائے جانے کے قابل ہر حل $0 \rightarrow \psi$ ہوگا۔ اس حقیقت کو استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ یہ مستقل درحقیقت صفر ہوگا جس

^۱ایسے دو حل جن میں صرف جبڑو ضربی کا مندرجہ پایا جاتا ہو (جن میں ایک مرتب معمول پر لانے کے بعد صرف دوری جبڑو ϕ کا مندرجہ پایا جاتا ہو) درحقیقت ایک ہی حل کو ظاہر کرتے ہیں لہذا انہیں یہاں منفرد نہیں کہا جاسکتا ہے۔ یہاں ”منفرد“ سے مراد ”خطی طور پر غیر تاجع“ ہے۔
degenerate^۱

^۲جیسا کہ باب ۳ میں دیکھیں گے، بلند ابعاد میں ایسی انحطاط عام پائی جاتی ہیں۔ مندرجہ ذیل کہ مخفی علیحدہ علیحدہ حصوں پر مشتمل نہیں ہے جن کے سچے نقطہ میں $V = \infty$ ہو۔ مثلاً دو تہی لامتناہی کنویں مقید انحطاطی حال دیں گے جہاں ذرہ ایک یا دوسرے کنواں میں پایا جائے گا۔

سے آپ نتیجہ اخذ کر سکتے ہیں کہ ψ_2 دراصل ψ_1 کا مضرب ہے لہذا یہ حل دو الگ الگ حل نہیں ہو سکتے ہیں۔

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

جوابات

ضمیمہ ۱

خطی الجبر ۱

۱.۱ سمتیات

۲.۱ اندرونی ضرب

۳.۱ قلاب

۴.۱ تبدیلی اساس

۵.۱ امتیازی تقاعلات اور امتیازی افتدار

۶.۱ ہر مشی تبادله

فهرست

54relation,	allowed
energy	26energies,
22allowed,	51 argument,
31conservation,	Bessel
13ensemble,	99function,spherical
expectation	107energy,binding
6value,	Bohr
formula	106radius,
16Broglie,De	106formula,Bohr
Fourier	25conditions,boundary
52transform,inverse	98term,centrifugal
52transform,	83states,coherent
Frobenius	4collapses,
45method,	commutation
function	36relation,canonical
59delta,Dirac	90relations,canonical
generalized	36commutator,
59distribution,	28complete,
59function,	77continuous,
generating	90continuum,
50function,	coordinates
generator	91spherical,
86space,intranslation	3interpretation,Copenhagen
86time,intranslation	75degenerate,
Gram-Schmidt	delta
79process,orthogonalization	28Kronecker,
21Hamiltonian,	Dirac
harmonic	80orthonormality,
25oscillator,	77discrete,
	dispersion

- 3realist,
- 12potential,
- 97effective,
- probability
- 8density,
- quantum
- 105number,principle
- numberquantum
- 96azimuthal,
- 96magnetic,
- 99numbers,quantum
- 97equation,radial
- recursion
- 46formula,
- reflection
- 64coefficient,
- 73time,revival
- Rodrigues
- 49formula,
- 94formula,Rodrigues
- Rydberg
- 113constant,
- 113formula,
- Schrodinger
- 20time-independent,
- 1align,Schrodinger
- series
- 113Balmer,
- 28Fourier,
- 113Lyman,
- 113Paschen,
- 35power,
- 34Taylor,
- spherical
- 96harmonics,
- 11square-integrable,
- 7deviation,standard
- state
- 58bound,
- 113Helium,
- Hermitian
- 40conjugate,
- 3variables,hidden
- 2indeterminacy,
- ladder
- 38operators,
- Laguerre
- 108polynomial,associated
- 108polynomial,
- 90Laplacian,
- law
- 34Hooke,
- Legendre
- 94associated,
- linear
- 22combination,
- 113Lithium,
- 6mean,
- 6median,
- 14momentum,
- Neumann
- 99function,spherical
- 27node,
- 10normalization,
- 14operator,
- 38lowering,
- 38raising,
- 27orthogonal,
- 28orthonormal,
- Planck's
- 113formula,
- polynomial
- 48Hermite,
- position
- 3agnostic,
- 3orthodox,

اتاقی
حالات، 83
اجزائی
توانائی، 26
استمراری، 77
استمراریہ، 90
اصول
عدم یقینیت، 16
انتشاری
رشتہ، 54
انخطائی، 75
انعکاس
شرح، 64
اوسط، 6
بقا
توانائی، 31
بندشی توانائی، 107
بوہر
رداس، 106
کلیہ، 106
بیل
کروی تقاعل، 99
پلانک
کلیہ، 113
پیداکار
فضا میں انتقال کا، 86
وقت میں انتقال، 86
پیداکار
تفاعل، 50
تبادل
باضابطہ رشتہ، 36
باضابطہ رشتہ، 90
تبادل کار، 36
تجدیدی عرصہ، 73
ترسیل
شرح، 64
تسل
المر، 113
پاشن، 113

27excited,
107,27ground,
58scattering,
statistical
2interpretation,
66function,step
theorem
28Dirichlet's,
15Ehrenfest,
52Plancherel,
112transition,
transmission
64coefficient,
65,58tunneling,
58points,turning
16principle,uncertainty
variables
19of,separation
7variance,
velocity
54group,
54phase,
wave
64incident,
52packet,
64reflected,
64transmitted,
1function,wave
16wavelength,

- ساکن
حالات، 21
سرحدی شرائط، 25
سرنگ زنی، 58، 65
سگرا، 13
سوچ
انکاری، 3
تقلید پسند، 3
حقیقت پسند، 3
سیڑھی
عاملین، 38
سیڑھی تفاعل، 66
شروڈنگر
غیر تابع وقت، 20
شروڈنگر تصویر کشی، 86
شروڈنگر مساوات، 1
شماریاتی مفہوم، 2
طول موج، 16، 113
عامل
تقلیل، 38
رفت، 38
عبور، 112
عدم تعین، 2
عدم یقینیت اصول، 16
عندرو، 27
علیحدگی متغیرات، 19
عمودی، 27
معیاری، 28
غیر مسلسل، 77
منرو وینوس
ترکیب، 45
فوریسر
الٹ بدل، 52
بدل، 52
قابل تکامل مربع، 11
قانون
- شیر، 34
طامتی، 35
فوریسر، 28
لیمان، 113
تغییریت، 7
تفاع
ڈیلٹا، 59
تفاعل موج، 1
توالی
کلیہ، 46
توانائی
اجزائی، 22
توقعاتی
قیمت، 6
جفت
تفاعل، 24
حال
بکھراؤ، 58
زمینی، 27، 107
مقید، 58
ہیجان، 27
خطی جوڑ، 22
خفیہ متغیرات، 3
دلیل، 51
ڈیراک
معیاری عمودیت، 80
ڈیلٹا
کرونیگر، 28
رداسی مساوات، 97
رڈبرگ، 113
کلیہ، 113
رفتار
دوری سستی، 54
گروہی سستی، 54
روڈریگیس
کلیہ، 94

سرگز گریز حبزو، 98
مسئلہ

اہر نفٹ، 15
پلائشرال، 52
ڈرٹلے، 28
معمول زنی، 10
معیار حرکت، 14
معیار عمودی، 28
معیاری انحراف، 7
مکمل، 28
موج

آمدی، 64
ترسیلی، 64
منعکس، 64
موجی اکھ، 52

نیومن
کروی تقاعسل، 99

واپسی نقاط، 58
وسطانیہ، 6

ہارمونی
سر تعش، 25
ہر مشی

جوڑی دار، 40
ہیزنبرگ تصویر کشی، 86
ہیلیم، 113
ہیملٹنی، 21

ہا، 34

کثافت

احتمال، 8
کشیر رکتی

ہرمانٹ، 48
کروی

ہارمونیات، 96
کلیہ

ڈی پروگٹی، 16
روڈریگیس، 49

کوانٹم

صدر عدد، 105
کوانٹائی اعداد، 99

کوانٹائی عدد
استمیت، 96

مقتناطیسی، 96
کوپن ہیگن مفہوم، 3

گرام شمد

ترکیب عمودیت، 79
گر کر، 4

لاپلاسی، 90

لاگ

شریک کشیر رکتی، 108
کشیر رکتی، 108

لتصیم، 113
لیڈانڈر

شریک، 94

متعمم

تفاعسل، 59
تقسیم، 59

محمد

کروی، 91
مخفیہ، 12

موثر، 97
سر تعش

ہارمونی، 25