

کوانٹم میکینیات

خالد حنان یوسفزئی

جامعہ کامیٹ، اسلام آباد

khalidyou safzai@comsats.edu.pk

۲۰/ اپریل ۲۰۲۱

عنوان

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

v

۱	تفاسل موج	۱
۱	۱.۱ شرو وڈنگر مساوات	۱
۲	۱.۲ شماراتی مفہوم	۲
۴	۱.۳ احتمال	۴
۴	۱.۳.۱ غیر مسلسل متغیرات	۴
۸	۱.۳.۲ استمراری متغیرات	۸
۱۰	۱.۴ معمولی زنی	۱۰
۱۳	۱.۵ معیار حرکت	۱۳
۱۶	۱.۶ اصول عدم یقینیت	۱۶
۱۹	۲ غیر متابع وقت شرو وڈنگر مساوات	۱۹
۱۹	۲.۱ ساکن حالات	۱۹
۲۵	۲.۲ لامستثنائی چپکور کنواں	۲۵
۳۴	۲.۳ ہارمونی سر نقش	۳۴
۳۵	۲.۳.۱ الجبرائی ترکیب	۳۵
۴۴	۲.۳.۲ تحلیلی ترکیب	۴۴
۵۰	۲.۴ آزاد ذرہ	۵۰
۵۸	۲.۵ ڈیلٹا تفاسل محفہ	۵۸
۵۸	۲.۵.۱ مقید حالات اور بکھراؤ حالات	۵۸
۵۹	۲.۵.۲ ڈیلٹا تفاسل کنواں	۵۹
۶۷	۲.۶ مستثنائی چپکور کنواں	۶۷
۷۷	۳ قواعد و ضوابط	۷۷
۷۷	۳.۱ ہر مشی عامل کے امتیازی تفاسل	۷۷
۷۷	۳.۱.۱ غیر مسلسل طیف	۷۷
۷۹	۳.۱.۲ استمراری طیف	۷۹

۸۹	۴	تین البیادی کو انٹیم میکانیات
۸۹	۴.۱	کروی محدود میں مساوات شروڈنگر
۹۱	۴.۱.۱	علیحدگی متغیرات
۹۲	۴.۱.۲	زاویائی مساوات
۹۷	۴.۱.۳	ردای مساوات
۱۰۱	۴.۲	ہائیڈروجن جوہر
۱۰۲	۴.۲.۱	ردای تفاعل موج
۱۱۲	۴.۲.۲	ہائیڈروجن کاپٹیف
۱۱۴	۴.۳	زاویائی معیار حرکت
۱۱۵	۴.۳.۱	امتیازی اقدار
۱۱۷	۵	مثال ذرات
۱۱۹	۶	غیر تابع وقت نظریہ اضطراب
۱۲۱	۷	تغیری اصول
۱۲۳	۸	وکب تخمین
۱۲۵	۹	تابع وقت نظریہ اضطراب
۱۲۷	۱۰	حرارت ناگزیر تخمین
۱۲۹	۱۱	بکھراؤ
۱۳۱	۱۲	پس نوشت
۱۳۳		جوابات

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

حنالد حنان یوسفزئی

28 اکتوبر 2011

باب ۱

تفاعل موج

۱.۱ شرودنگر مساوات

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

کوانٹم میکانیات اس مسئلے کو بالکل مختلف انداز سے دیکھتی ہے۔ اب ہم ذرے کی تفاعل موج^۲ جس کی علامت $\Psi(x, t)$ ہے کو شرودنگر مساوات^۳ حل کر کے حاصل کرتے ہیں

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

^۱ معتد ظہنی قوتوں کے لئے ایسا نہیں ہوگا لیکن یہاں ہم ان کی بات نہیں کر رہے ہیں۔ دیگر، اس کتاب میں ہم رفتار کو غیر اضافی $c \ll v$ تصور کریں گے۔

^۲ wave function
^۳ Schrodinger align

جہاں i منفی ایک (-1) کا جذور اور \hbar پلانک مستقل، بلکہ اصل پلانک مستقل تقسیم 2π ہوگا:

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

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

۱.۲ شماریاتی مفہوم

تفاعل موج حقیقت میں کیا ہوتا ہے اور یہ جانتے ہوئے آپ حقیقت میں کیا کر سکتے ہیں، ایک ذرے کی خاصیت ہے کہ وہ ایک نقطہ پر پایا جاتا ہو لیکن ایک تفاعل موج جیسا کہ اس کے نام سے ظاہر ہے فضا میں پھیلا ہوا پایا جاتا ہے۔ کسی بھی لمحے t پر یہ x کا تفاعل ہوگا۔ ایک تفاعل ایک ذرے کی حالت کو کس طرح بیان کر پائے گا، اس کا جواب تفاعل موج کے شماریاتی مفہوم^۱ پیش کر کے جناب بارن نے دیا جس کے تحت لمحے t پر نقطہ x پر ایک ذرہ پائے جانے کا احتمال $|\Psi(x, t)|^2$ دیگا، بلکہ اس کا زیادہ درست روپ^۵ درج ذیل ہے۔

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

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

شماریاتی مفہوم کی بنا اس نظریہ سے ذرہ کے بارے میں تمام متبادل حصول معلومات، یعنی اس کا تفاعل موج، جانتے ہوئے بھی ہم کوئی سادہ تجربہ کر کے ذرے کا مقام یا کوئی دیگر متغیر ٹھیک ٹھیک معلوم کرنے سے متاصر رہتے ہیں۔ کوانٹم میکانیات ہمیں تمام ممکنہ نتائج کے صرف شماریاتی معلومات فراہم کر سکتی ہے۔ یوں کوانٹم میکانیات میں عدم تعین^۶ کا عنصر پایا جائے گا۔ کوانٹم میکانیات میں عدم تعین کا عنصر، طبیعیات اور فلسفہ کے ماہرین کے لیے مشکلات کا سبب بنتا رہا ہے جو انہیں اس سوچ میں مبتلا کرتی ہے کہ آیا یہ کائنات کی ایک حقیقت ہے یا کوانٹم میکانیکی نظریہ میں کمی کا نتیجہ۔

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

^۱ statistical interpretation
تفاعل موج از خود مخلوط ہے لیکن $|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi$ (جہاں Ψ^* تفاعل موج Ψ کا محلول جوڑی دار ہے) حقیقی اور غیر منفی ہے، جیسا کہ ہونا بھی چاہیے۔

^۵ indeterminacy
مطلب یہ ہے کوئی بھی پیمائش آلہ کامل نہیں ہو سکتا ہے؛ میں صرف اتنا کہتا ہوں کہ پیمائش خنسل کے اندر رہتے ہوئے یہ ذرہ نقطہ C کے قریب پایا گیا۔

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

(1) **حقیقت**۔ پسند^۸ سوچ: ذرہ مقام C پر تھا۔ یہ ایک معقول جواب ہے جس کی آئن سٹائن بھی وکالت کرتے تھے۔ اگر یہ درست ہو تب کو انٹیم میکانیات ایک نامکمل نظریہ ہوگا کیونکہ ذرہ دراصل نقطہ C پر ہی تھا اور کو انٹیم میکانیات ہمیں یہ معلومات فراہم کرنے سے متاصر رہی۔ حقیقت پسند سوچ رکھنے والوں کے مطابق عدم تعین پن و تدریج میں نہیں پایا جاتا بلکہ یہ ہماری لاعلمی کا نتیجہ ہے۔ ان کے تحت کسی بھی لمحے پر ذرے کا مقام غیر معین نہیں تھا بلکہ یہ صرف تجربہ کرنے والے کو معلوم نہیں تھا۔ یوں Ψ مکمل کہانی بیان نہیں کرتا ہے اور ذرے کو مکمل طور پر بیان کرنے کے لئے (نفیہ متغیرات سے) ضرورت میں) مزید معلومات درکار ہوں گی۔

(2) **تقلید**۔ پسند^۹ سوچ: ذرہ حقیقت میں کہیں پر بھی نہیں تھا۔ پیمائشی عمل ذرے کو مجبور کرتی ہے کہ وہ ایک مقام پر ”کھڑا ہو جائے“ (وہ مقام C کو کیوں منتخب کرتا ہے، اس بارے میں ہمیں سوال کرنے کی اجازت نہیں ہے)۔ مشاہدہ وہ عمل ہے جو نہ صرف پیمائش میں خلل پیدا کرتا ہے، یہ پیمائشی نتیجہ بھی پیدا کرتا ہے۔ پیمائشی عمل ذرے کو مجبور کرتا ہے کہ وہ کسی مخصوص مقام کو اختیار کرے۔ ہم ذرہ کو کسی ایک مقام کو منتخب کرنے پر مجبور کرتے ہیں۔ ”یہ تصور جو کوپن ہیگن مفہوم“^{۱۰} کا راجا جانتا ہے جناب بوہر اور ان کے ساتھیوں سے منسوب ہے۔ ماہر طبیعیات میں یہ تصور سب سے زیادہ مقبول ہے۔ اگر یہ سوچ درست ہو تب پیمائشی عمل ایک انوکھی عمل ہے جو نصف صدی سے زائد عرصہ کی بحث و مباحثوں کے بعد بھی پراسراری کا شکار ہے۔

(3) **انکار**^{۱۱} سوچ: جواب دینے سے گریز کریں۔ یہ سوچ اتنی بیوقوفانہ نہیں جتنی نظر آتی ہے۔ چونکہ کسی ذرے کا مقام جاننے کے لیے آپ کو ایک تجربہ کرنا ہوگا اور تجربہ بے کے نتائج آنے تک وہ لمحہ ماضی بن چکا ہوگا۔ چونکہ کوئی بھی تجربہ ماضی کا حال نہیں بتا پاتا لہذا اس کے بارے میں بات کرنا بے معنی ہے۔

سے 1964 تک تینوں طبقے سوچ کے حامی پائے جاتے تھے البتہ اس سال جناب جان بل نے ثابت کیا کہ تجربہ سے قبل ذرہ کا مقام ٹھیک ہونے یا نہ ہونے کا تجربہ پر قابل مشاہدہ اثر پایا جاتا ہے (ظاہر ہے کہ ہمیں یہ مقام معلوم نہیں ہوگا)۔ اس ثبوت نے انکاری سوچ کو عذاب ثابت کیا۔ اب حقیقت پسند اور تقلید پسند سوچ کے بیچ فیصلہ کرنا باقی ہے جو تجربہ کر کے کیا جاسکتا ہے۔ اس پر کتاب کے آخر میں بات کی جائے گی جب آپ کی علمی سوچ اتنی بڑھ چکی ہوگی کہ آپ کو جناب جان بل کی دلیل سمجھ آ سکے گی۔ یہاں اثبات ناکافی ہوگا کہ تجربہ بات جان بل کی تقلید پسند سوچ کی درستگی کی تصدیق کرتے ہیں^{۱۲}۔ جیسا جمیل میں موج ایک نقطہ پر نہیں پائی جاتی، یوں قبل از تجربہ ایک ذرہ ٹھیک کسی ایک مقام پر نہیں پایا جاتا ہے۔ پیمائشی عمل ذرے کو ایک

realist^۸hidden variables^۹orthodox^{۱۰}Copenhagen interpretation^{۱۱}agnostic^{۱۲}

^{۱۳} یہ فہرہ کچھ زیادہ سخت ہے۔ چند نظریاتی اور تجرباتی مسائل باقی ہیں جن میں سے چند پر میں بعد میں تبصرہ کروں گا۔ ایسے غیر معیاری خفیہ متغیرات کے نظریات اور دیگر تھیاریات مثلاً متعدد دنیا تشریح جو ان تینوں سوچ کے ساتھ مطابقت نہیں رکھتے ہیں۔ بہر حال، اب کے لئے بہتر ہے کہ ہم کو انٹیم نظریہ کی بنیاد سیکھیں اور بعد میں اس طرح کی مسائل کے بارے میں فکر کریں۔

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

کیا ایک پیمائش کے فوراً بعد دوسری پیمائش وہی مقام C دے گی یا نیا مقام حاصل ہوگا؟ اس کے جواب پر سب متفق ہیں۔ ایک تجربے کے فوراً بعد (اسی ذرہ پر) دوسرا تجربہ لازماً وہی مقام دوبارہ دے گا۔ حقیقت میں اگر دوسرا تجربہ مقام C کی تصدیق نہ کرے تب یہ ثابت کرنا نہایت مشکل ہوگا کہ پہلے تجربہ میں مقام C ہی حاصل ہوا تھا۔ تقلید پسند اس کو کس طرح دیکھتا ہے کہ دوسری پیمائش ہر صورت C قیامت دے گی؟ ظاہری طور پر پہلی پیمائش تفاعل موج میں ایسی بنیادی تبدیلی پیدا کرتی ہے کہ تفاعل موج C پر نوکیلی صورت اختیار کرتی ہے جیسا شکل 3.1 میں دکھایا گیا ہے۔ ہم کہتے ہیں کہ پیمائش کا عمل تفاعل موج کو نقطہ C پر گر کر 10^{12} نوکیلی صورت اختیار کرنے پر مجبور کرتی ہے (جس کے بعد تفاعل موج شرودنگر مساوات کے تحت جلد پھیل جائے گی لہذا دوسری پیمائش جلد کرنی ضروری ہے)۔ اس طرح دو بہت مختلف طبعی اعمال پائے جاتے ہیں۔ پہلی میں تفاعل موج وقت کے ساتھ شرودنگر مساوات کے تحت ارتقاپاتا ہے، اور دوسری جس میں پیمائش Ψ کو فوراً ایک جگہ غیر استمراری طور پر گرنے پر مجبور کرتی ہے۔

۱.۳ احتمال

۱.۳.۱ غیر مسلسل متغیرات

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

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

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

$$N(14) = 1$$

$$N(15) = 1$$

$$N(16) = 3$$

$$N(22) = 2$$

$$N(24) = 2$$

$$N(25) = 5$$

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

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

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

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

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

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

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

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

سوال 3 وسطانیہ^{۱۵} عمر کیا ہے؟ جواب: چونکہ 7 لوگوں کی عمر 23 سے کم اور 7 لوگوں کی عمر 23 سے زیادہ ہے۔ لہذا جواب 23 ہوگا۔ (عمومی طور پر وسطانیہ^{۱۶} z کی وہ قیمت ہوگی جس سے زیادہ اور جس سے کم قیمت کے نتائج کے احتمال ایک دوسرے جیسے ہوں۔)

سوال 4 ان کی اوسط^{۱۷} عمر کتنی ہے؟ جواب:

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

عمومی طور پر z کی اوسط قیمت جس کو ہم $\langle z \rangle$ لکھتے ہیں، درج ذیل ہوگی۔

$$(1.4) \quad \langle j \rangle = \frac{\sum jN(j)}{N} = \sum_{j=0}^{\infty} jP(j)$$

دھیان رہے کہ عین ممکن ہے کہ گروہ میں کسی کی بھی عمر گروہ کی اوسط یا وسطانیہ کے برابر نہ ہو۔ مثال کے طور پر، اس مثال میں کسی کی عمر بھی 21 یا 23 سال نہیں ہے۔ کوانٹم میکانیات میں ہم عموماً اوسط قیمت میں دلچسپی رکھتے ہیں جس کو **توقعاتی قیمت**^{۱۸} کا نام دیا گیا ہے۔

سوال 5 عمروں کے مربعوں کا اوسط کیا ہوگا؟ جواب: آپ $\frac{1}{14}$ احتمال سے $14^2 = 196$ حاصل کر سکتے ہیں، یا $\frac{1}{14}$ احتمال سے $22^2 = 484$ ، یا $\frac{3}{14}$ احتمال سے $25^2 = 625$ حاصل کر سکتے ہیں، وغیرہ وغیرہ۔ یوں ان کے مربعوں کا اوسط درج ذیل ہوگا۔

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

عمومی طور پر z کے کسی بھی تناسل کی اوسط قیمت درج ذیل ہوگی۔

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

(مساوات 1.6، 1.7 اور 1.8 اس کی خصوصی صورتیں ہیں۔) دھیان رہے کہ مربع کا اوسط $\langle j^2 \rangle$ عموماً اوسط کے مربع $\langle j \rangle^2$ کے برابر نہیں ہوگا۔ مثال کے طور پر اگر ایک کمرہ میں صرف دو بچے ہوں جنکی عمریں 1 اور 3 ہو تب $\langle x^2 \rangle = 5$ جبکہ $\langle x \rangle^2 = 4$ ہوگا۔

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

median^{۱۵}
mean^{۱۶}
expectation value^{۱۸}

مانند ہوگی جبکہ دھاتی علامتہ میں ایک ہی کسرہ پر مبنی مکتبہ میں بچوں کی تعداد دوسری شکل ظاہر کرے گی۔ ہمیں اوسط قیمت کے لحاظ سے، کسی بھی مقدار کے تقسیم کا پھیلاؤ، عددی صورت میں درکار ہوگا۔ اس کا ایک سیدھا طریقہ یہ ہو سکتا ہے کہ ہم ہر انفرادی حبز کی قیمت اور اوسط قیمت کا فرق

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

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

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

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

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

اس قیمت کو تقسیم کی تغیریت^{۱۸} کہتے ہیں جبکہ تغیریت کا جذر σ کو معیاری انحراف^{۱۹} کہتے ہیں۔ روایتی طور پر σ کو اوسط $\langle j \rangle$ کے گرد پھیلاؤ کی پیمائش مانا جاتا ہے۔ ہم تغیریت کا ایک چھوٹا مسئلہ پیش کرتے ہیں۔

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

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

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

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

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

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

۱.۳.۲ استمراری متغیرات

اب تک ہم غیر مسلسل متغیرات کی بات کرتے آ رہے ہیں جن کی قیمتیں الگ تھلگ ہوتی ہیں۔ (گزشتہ مثال میں ہم نے امیراد کی عمروں کی بات کی جن کو سالوں میں ناپا جاتا ہے لہذا Δ عدد صحیح بھتا) تاہم اس کو آسانی سے استمراری تقسیم تک وسعت دی جاسکتی ہے۔ اگر میں گلی میں بلا منصوب ایک شخص کا انتخاب کر کے اس کی عمر پوچھوں تو اس کا احتمال صفر ہوگا کہ اس کی عمر ٹھیک 16 سال 4 گھنٹے، 27 منٹ اور 3.37524 سیکنڈ ہو۔ یہاں اس کی عمر کا 16 اور 17 سال کے بیچ ہونے کے احتمال کی بات کرنا مقول ہوگا۔ بہت کم وقفے کی صورت میں احتمال وقفے کی لمبائی کے راستہ مستاسب ہوگا۔ مثال کے طور پر 16 سال اور 16 سال جمع دونوں کے بیچ عمر کا احتمال 16 سال اور 16 سال جمع ایک دن کے بیچ عمر کے احتمال کا دگن ہوگا۔ (ماسوائے ایسی صورت میں جب 16 سال قبل عین اسی دن کسی وجہ سے بہت زیادہ بچے پیدا ہوئے ہوں۔ ایسی صورت میں اس واقعہ کی اطلاق کی نقطہ نظر سے ایک یا دو دن کا وقفہ بہت لمبا وقفہ ہے۔ اگر زیادہ بچوں کی پیدائش کا دورانیہ چھ گھنٹے پر مشتمل ہو تب ہم ایک سیکنڈ یا زیادہ محفوظ طور پر رہنے کی حنا طر، اس سے بھی کم دورانیے کا وقفہ لیں گے۔ تکنیکی طور پر ہم لامتناہی چھوٹے وقفے کی بات کر رہے ہیں۔) اس طرح درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$\rho(x)dx = \begin{cases} \text{بلا منصوب منتخب کئے گئے رکن کا } x \\ \text{اور } (x + dx) \text{ کے بیچ پائے جانے} \\ \text{کا احتمال} \end{cases} \quad (1.13)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

اس کی سمتی رفتار $\frac{dx}{dt} = gt$ ہوگی اور پرواز کا دورانیہ $T = \sqrt{2h/g}$ ہوگا۔ وقفہ dt میں تصویر کھینچنے کا احتمال $\frac{dt}{T}$ ہوگا۔ یوں اس کا احتمال کہ ایک تصویر مطابقتی سرعت dx میں فاصلہ دے درج ذیل ہوگا:

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

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

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

(اس وقفہ کے باہر کثافت احتمال صفر ہوگا۔)

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

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

مساوات ۱.۱۷ سے اوسط فاصلہ تلاش کرتے ہیں

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

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

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

سوال ۱.۱: حصہ ۱.۳ میں اشخاص کی عمروں کی تقسیم کے لیے درج ذیل کریں۔

۱. اوسط کا مربع $\langle z^2 \rangle$ اور مربع کا اوسط $\langle z \rangle^2$ تلاش کریں۔

ب. ہر j کے لیے Δj دریافت کریں اور مساوات ۱۱.۱۱ استعمال کرتے ہوئے معیاری انحراف دریافت کریں۔

ج. حبز ۱۱ اور ب کے نتائج استعمال کرتے ہوئے مساوات ۱۱.۱۲ کی تصدیق کریں۔
سوال ۱.۲:

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

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

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

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

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

۱. مساوات ۱۱.۱۶ استعمال کرتے ہوئے A کی قیمت تعین کریں۔

ب. اوسط $\langle x \rangle$ ، مربعی اوسط $\langle x^2 \rangle$ اور معیاری انحراف σ تلاش کریں۔
ج. $\rho(x)$ کی ترسیم کا خاکہ بنائیں۔

۱.۴ معمولی زنی

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

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

اس حقیقت کے بغیر شماریاتی مفہوم بے معنی ہوگی۔

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

^{۲۱}normalization

لایا گیا ہے۔ مساوات شرودنگر کے بعض حلوں کا مکمل لامتناہی ہوگا؛ ایسی صورت میں کوئی بھی ضربی مستقل اس کو 1 کے برابر نہیں کر سکتا ہے۔ یہی کچھ غیر اہم حل $\Psi = 0$ کے لیے بھی درست ہے۔ ایسا تفاعل موج جو معمول پر لانے کے قابل نہ ہو کسی صورت ایک ذرے کو ظاہر نہیں کر سکتا ہے لہذا اس کو رد کیا جاتا ہے۔ طبعی طور پر پائے جانے والے حالات، شرودنگر مساوات کے قابل تکامل مرحلے^{۲۲} حل ہونگے۔^{۲۳}

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

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

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

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

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

اب مساوات شرودنگر کہتی ہے کہ

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

ہوگا اور ساتھ ہی (مساوات ۱.۲۳ کا محلول جو ڈی دار لیتے ہوئے)

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

ہوگا لہذا درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

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

square-integrable^{۲۴}

نصاب رہے کہ $|x| \rightarrow \infty$ کی صورت میں $\Psi(x, t)$ کو $1/\sqrt{|x|}$ سے زیادہ تیز صفر تک پہنچنا ہوگا۔ معمولی زنی صرف محلول عدد کے معیار کو درست کرتی ہے جبکہ اس کا پتہ غیر معین رہتا ہے۔ تاہم جیسا ہم جلد دیکھیں گے، موخر الذکر کی کوئی طبعی اہمیت نہیں پائی جاتی ہے۔

مسوات ۱.۲۱ میں مکمل کی قیمت صریحاً معلوم کی جا سکتی ہے:

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

یاد رہے کہ معمول پر لانے کے قابل ہونے کے لئے ضروری ہے کہ $x \rightarrow \pm \infty$ کرتے ہوئے $\Psi(x, t)$ صفر^{۲۴} کو پہنچتی ہو۔ یوں درج ذیل ہوگا

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

لہذا مکمل (وقت کا غیر متاثر) مستقل ہوگا؛ لہذا $t = 0$ پر معمول شدہ تفاعل موج ہمیشہ کے لئے معمول شدہ رہے گا۔ سوال ۱.۴: لہذا $t = 0$ پر ایک ذرہ کو درج ذیل تفاعل موج ظاہر کرتی ہے جہاں A ، a اور b مستقلات ہیں۔

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

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

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

ج. لہذا $t = 0$ پر کس نقطہ پر ذرہ پایا جانے کا احتمال زیادہ سے زیادہ ہوگا؟

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

ه. متغیر x کی توقعاتی قیمت کیا ہوگی؟

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

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

(ہم باب ۲ میں دیکھیں گے کہ کس طرح کا محقق^{۲۵} V ایسا تفاعل موج پیدا کرتا ہے۔)

۱. تفاعل موج Ψ کو معمول پر لائیں۔

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

^{۲۴} طبیعیات کی میدان میں لامتناہی پر تفاعل موج ہر صورت صفر کو پہنچتی ہے۔
^{۲۵} potential

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

۱.۵ معیار حرکت

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

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

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

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

$$(۱.۲۹) \quad \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int x \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \int x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx$$

کامل بالخص کی مدد سے اس فقرے کی سادہ صورت حاصل کرتے ہیں۔

$$(۱.۳۰) \quad \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m} \int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

یہ سب بہت اچھا ہے لیکن دیگر متداریوں کا کیا ہوگا؟ حقیقت یہ ہے کہ تمام کلاسیکی متغیرات کو مقام اور معیار حرکت کی صورت میں لکھا جاسکتا ہے۔ مثال کے طور پر حرکی توانائی کو

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

اور زاویائی معیار حرکت کو

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

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

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

مثال کے طور پر حرکت کی توانائی کی توقعاتی قیمت درج ذیل ہوگی۔

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

حال Ψ میں ایک ذرہ کی کسی بھی حرکت کی مقدار کی توقعاتی قیمت مساوات ۱.۳۶ سے حاصل ہوگی۔ مساوات ۱.۳۲ اور ۱.۳۵ اس کی دو مخصوص صورتیں ہیں۔ میں نے کوشش کی ہے کہ جناب بوجہ کی شماریاتی تشریح کو مد نظر رکھتے ہوئے مساوات ۱.۳۶ و مثال قبول نظر آئے، اگرچہ، حقیقتاً یہ کلاسیکی میکانیات سے بہت مختلف انداز ہے کام کرنے کا۔ ہم باب 3 میں اس کو زیادہ مضبوط نظریاتی بنیادوں پر کھڑا کریں گے، جب تک آپ اس کے استعمال کی مشق کریں۔ فی الحال آپ اس کو ایک مسلمہ تصور کر سکتے ہیں۔

سوال ۱.۶: آپ کیوں مساوات ۱.۲۹ کے وسطی فقرہ پر عمل بالخصوص کرتے ہوئے، وقتی تفرق کو x کے اوپر سے گزار کر، یہ جاننے ہوئے کہ $\frac{\partial x}{\partial t} = 0$ ہے، فیصلہ نہیں کر سکتے ہیں کہ $\frac{d\langle x \rangle}{dt} = 0$ ہوگا؟
سوال ۱.۷: $\frac{d\langle p \rangle}{dt}$ کا حساب کریں۔ جواب:

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

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

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

۱.۶ اصول عدم یقینیت

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

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

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

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

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

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

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

wavelength^{۳۰}
De Broglie formula^{۳۱}
uncertainty principle^{۳۲}

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

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

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

جہاں A اور a مثبت حقیقی مستقل ہیں۔

۱. مستقل A تلاش کریں۔

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

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

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

سوال ۱.۱۰: مستقل π کے ہندسی پھیلاؤ کے اولین 25 ہندسوں (3, 1, 4, 1, 5, 9, ۰۰۰) پر غور کریں۔

۱. اس گروہ سے بلا منصوبہ ایک ہندسہ منتخب کیا جاتا ہے۔ صفر تا نو ہندسہ کے انتخاب کا احتمال کیا ہوگا؟

ب. کسی ہندسے کے انتخاب کا احتمال سب سے زیادہ ہوگا؟ وسطانیہ ہندسہ کونسا ہوگا؟ اوسط قیمت کیا ہوگی؟

ج. اس تقسیم کا معیاری انحراف کیا ہوگا؟

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

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

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

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

باب ۲

غیر تابع وقت 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 تاج 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 تاجع وقت شرودنگر مساوات حل کریں گے۔ ایسا کرنے سے پہلے آپ پوچھ سکتے ہیں کہ علیحدگی متغیرات کی کیا خاص بات ہے؟ بہر حال تاجع وقت شرودنگر مساوات کے زیادہ تر حل $\psi(x)\phi(t)$ 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 تاجع 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 تاجع نہیں ہے؛ تابعیت وقت کرتے جاتی ہے۔ یہی کچھ کسی بھی حسی 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 $\phi(t)$ 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 تاجع وقت ہو گا۔ بالخصوص $\langle x \rangle$ منتقل ہو گا لہذا (مساوات ۱.۳۳ کے تحت) $\langle p \rangle = 0$ ہو گا۔ ساکن حال میں کبھی بھی کچھ نہیں ہوتا ہے۔

(2) یہ غیر مبہم کل توانائی کے حالات ہوں گے۔ کلاسیکی میکانیات میں کل توانائی (حسی 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 تاجع 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۔

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

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ ψ کی 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۔

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

یاد رہے کہ $\sigma = 0$ کی صورت میں تمام امکان کی قیمت ایک دوسری جیسی ہوگی (تقسیم کا پھیلاؤ صفر ہوگا)۔ نتیجتاً متبادل علیحدگی حل کی ایک خاصیت یہ ہے کہ کل توانائی کی ہر پیمائش یقیناً ایک ہی قیمت E دے گی۔ (اسی کی بنا علیحدگی مستقل کو E سے ظاہر کیا گیا۔)

(3) عمومی حل 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۔

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

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^۵
allowed energy

باب ۳ میں ہم اس کو زیادہ مضبوط بنیادوں پر کھڑا کر پائیں گے۔ بنیادی نقطہ یہ ہے کہ ایک بار غیر تابع وقت 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 20.1 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 دو گنا تفرق کی علامتیں لازماً ایک دوسری جیسی ہوں گی؛ اب دلیل پیش کریں کہ ایسا تفاعل معمول پر لانے کے متبادل نہیں ہوگا۔

۲.۲ لامتناہی چکور کنواں

درج ذیل مندرجہ ذیل کریں (شکل 1.2)۔

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

اس مخفی توانائی میں ایک ذرہ مکمل آزاد ہوگا، ماسوائے دونوں سروں یعنی $x = 0$ اور $x = a$ پر، جہاں ایک لامتناہی قوت اس کو مضرب ہونے سے روکتی ہے۔ اس کا کلاسیکی نمونہ ایک کنواں میں ایک لامتناہی چکور کنواں 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 ذیل کرنے کے قابل ہے۔ ہم اس سے بار بار رجوع کریں گے۔)

کنواں سے باہر $\psi(x) = 0$ ہوگا (لہذا یہاں ذرہ پایا جانے کا احتمال صفر ہوگا)۔ کنواں کے اندر، جہاں $V = 0$ ہے، غیر متابع 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 کلاسیکی مادہ ہارمونک ارتعاش 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 ہوں گے؟ عموماً ψ اور $\frac{d\psi}{dx}$ دونوں استمراری ہوں گے، لیکن جہاں مخفی لامتناہی کو پہنچتا ہو وہاں صرف اول الذکر کا اطلاق ہوگا۔ (میں حصہ 5.2 میں ان سرحدی شرائط کو ثابت کروں گا اور $V = \infty$ کی صورت حال کو بھی دیکھوں گا۔ فی الحال مجھ پر یقین کرتے ہوئے میری کہی ہوئی بات مان لیں۔)

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

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

باب ۲. غیر تابع وقت شرودنگر مساوات

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۔

$$(۲.۲۳) \quad \psi(x) = A \sin kx$$

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

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

اب $k = 0$ (بھی $\psi(x) = 0$ دیتا ہے جس) میں ہم دلچسپی نہیں رکھتے اور $\sin(-\theta) = -\sin(\theta)$ کی بنا 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۔

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

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

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

کلاسیکی صورت کے برعکس لامتناہی چکور کنواں میں کو انٹیم 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:

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

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 لامتناہی سلسلہ دیا ہے۔ ان میں سے اولین چند کو شکل 2.2 میں ترسیم کیا گیا ہے جو لمبائی a کے دھاگے پر ساکن امواج کی طرح نظر آتے ہیں۔ تفاعل ψ_1 جو زمینی حالت^۹ کہلاتا ہے کی توانائی کم سے کم ہے۔ باقی حالات جن کی توانائیاں n^2 کے براہ راست بڑھتی ہیں **مجازی حالات**^{۱۰} 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**^{۱۱} (عبور صفر) کی تعداد میں ایک (1) کا اضافہ ہوگا۔ (چونکہ آخری نقاط کے صفر کو نہیں گنا جاتا ہے لہذا) ψ_1 میں کوئی عقدہ نہیں پایا جاتا ہے، ψ_2 میں ایک پایا جاتا ہے، ψ_3 میں دو پائے جاتے ہیں، وغیرہ وغیرہ۔

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

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

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 نامقابل 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 فقرے میں سوایا جاسکتا ہے:^{۱۳}

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

ground state^۹

excited states^{۱۰}

nodes^{۱۱}

orthogonal^{۱۲}

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

باب ۲. غیر تابع وقت شرودنگر مساوات

جہاں δ_{mn} کرونیکر ڈیلٹا^{۱۷} 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 (قسم) ψ معیاری عمودی^{۱۵} ہیں۔

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

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

میں تفاعلات $\sin \frac{n\pi x}{a}$ 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 تفاعل کو فوریر تسلسل کی صورت میں پھیلا کر لکھا جاسکتا ہے، بعض اوقات مسئلہ ڈرشلے^{۱۸} کہلاتا ہے۔^{۱۹}

کسی بھی دیے گئے تفاعل $f(x)$ کے لئے عددی سروں c_n کو $\{\psi_n\}$ کی معیاری عمودیت کی مدد سے حاصل کیا جاتا ہے۔ مساوات ۲.۳۲ کے دونوں اطراف کو $\psi_m(x)$ سے ضرب دے کر مکمل 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 چار خواص انتہائی طاقتور ہیں جو صرف لامتناہی چکور کنواں کے لیے مخصوص نہیں ہیں۔ پہلا خواص ہر اس صورت میں کارآمد ہوگا جب مخفی تشاکلی ہو؛ دوسرا، مخفی کی شکل و صورت سے قطع نظر، ایک عامل گیر خواص ہے۔

^{۱۷} Kronecker delta

^{۱۵} orthonormal

^{۱۶} complete

^{۱۷} Fourier series

^{۱۸} Dirichlet's theorem

^{۱۹} تفاعل $f(x)$ میں متناہی تعداد کی عدم استمرار (چھلانگ) پائے جاسکتی ہیں۔

^{۲۰} آپ یہاں نقلی متغیر کو m یا n یا کوئی تیسرا حرف لے سکتے ہیں (بس اتنا خیال رکھیں کہ مساوات کی دونوں اطراف ایک

ہی حرف استعمال کریں)، اور ہاں یاد رہے کہ یہ حرف ”کسی مثبت عدد صحیح“ کو ظاہر کرتا ہے۔

عمودیت بھی کافی عمومی خاصیت ہے، جس کا ثبوت میں باب ۳ میں پیش کروں گا۔ ان تمام مخفیہ کے لئے جن کو آپ کا (مکمل) سامن ہو سکتا ہے کے لئے مکملیت کارآمد ہوگی، لیکن اس کا ثبوت کافی لمبا اور پیچیدہ ہے؛ جس کی بنا عموماً ماہر طبیعیات یہ ثبوت دیکھے بغیر، اس کو مان لیتے ہیں۔

لامتناہی چکور کنواں کے ساکن حال (مساوات 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 مکملیت (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 فوریرسز قسمل سے حاصل 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 حصر کی مقدار کا حاسب، باب ۱ میں مستعمل تراکیب استعمال کرتے ہوئے، کیا جاسکتا ہے۔ یہی ترکیب کسی بھی مخفیہ کے لیے کارآمد ہوگا؛ صرف ψ کی قیمتیں اور احبازاتی 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 شکل 3.2)۔

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

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

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

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

A تعین کرتے ہیں:

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

مساوات 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 (مساوات 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، ”اجزائی“ قیمتوں میں سے کوئی ایک دے گی، اسی لئے انہیں اجزائی قیمتیں کہتے ہیں، اور کوئی مخصوص قیمت E_n حاصل ہونے کا احتمال $|c_n|^2$ ہوگا۔)

یقیناً ان تمام احتمالات کا مجموعہ 1 ہوگا

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

جس کا ثبوت Ψ کی عمود زنی سے حاصل ہوگا (چونکہ تمام c_n غیر متابع وقت ہیں لہذا میں $t = 0$ پر ثبوت پیش کرتا ہوں۔ آپ باآسانی اس ثبوت کو عموماً 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 کرونیکر ڈیلٹا جزو $m = n$ کو چھتا 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 بلا واسطہ تصدیق کی جاسکتی ہے: غیر متابع وقت شرودنگر 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 متابع وقت ہوگا اور یوں H کی توقعاتی قیمت بھی غیر متابع وقت ہوگی۔ کوانٹم میکانیات میں بتا توانائی^۱ کی یہ ایک مثال ہے۔

^۱conservation of energy

باب ۲. غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات

مثال ۲.۳: ہم نے دیکھا کہ مثال 2.2 میں ابتدائی تفاعل موج (شکل 3.2) زمینی حال ψ_1 (شکل 2.2) کے ساتھ 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 منقذ دیتے ہیں:

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

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

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

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

سوال ۲.۳: دکھائیں کہ لامتناہی چکور کنواں کے لئے $E = 0$ یا $E < 0$ کی صورت میں غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات کا کوئی بھی حل قبول حل نہیں پایا جاتا ہے۔ (یہ سوال 2.2 میں دیے گئے عمومی مسئلے کی ایک خصوصی صورت ہے، لیکن اس بار شرودنگر مساوات کو صریحاً حل کرتے ہوئے دکھائیں کہ آپ سرحدی شرائط پر پورا نہیں اتر سکتے ہیں۔)

سوال ۲.۴: لامتناہی چکور کنواں کے n ویں ساکن حال کیلئے $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle p^2 \rangle$ اور σ_x اور σ_p تلاش کریں۔ تصدیق کریں کہ اصول غیر یقینیت مطمئن ہوتا ہے۔ کونسا حال غیر یقینیت کی حد کے متربی ترین ہوگا؟

سوال ۲.۵: لامتناہی چکور کنواں میں ایک ذرے کا ابتدائی تفاعل موج اولین دوساکن 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۔ مومنر الذکر کو وقت کے سائن تفاعل عمل کی صورت میں لکھیں، جیسا مثال 1.2 میں کیا گیا۔ نتائج کو سادہ صورت میں لکھنے کی خاطر $\omega \equiv \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ 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 محیط کیا ہوگا؟ (اگر آپ کا محیط $\frac{a}{2}$ سے زیادہ ہو تب آپ کو جیل بھیجنے کی ضرورت ہوگی۔)

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

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: اگر چہ تعامل موج کا مجموعی زاویائی مستقل کسی با معنی طبعی اہیت کا حاصل نہیں ہے (چونکہ یہ کسی بھی متبادل پیمائش مقدار میں کٹ جاتا ہے) لیکن مساوات ۲.۱۷ میں عددی سروں کے اضافی زاویائی مستقل اہیت کے حاصل ہیں۔ مثال کے طور پر ہم سوال ۲.۵ میں ψ_1 اور ψ_2 کے اضافی زاویائی مستقل تبدیل کرتے ہیں:

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

جہاں ϕ کوئی مستقل ہے۔ $\Psi(x, t)$ ، $|\Psi(x, t)|^2$ 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: لامستناہی چکور کنواں میں ایک ذرے کا ابتدائی تعامل 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 لامستناہی چکور کنواں، جس کی چوڑائی a ہے، میں کمیت m کا ایک ذرہ کنواں کے بائیں حصے سے ابتدا ہوتا ہے اور یہ $t = 0$ پر بائیں نصف حصے کے کسی بھی نقطے پر ہو سکتا ہے۔

ا. اس کی ابتدائی تعامل موج $\Psi(x, 0)$ تلاش کریں۔ (فرض 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 2.2 کے تعامل موج کیلئے H کی توقعاتی قیمت تکمیل کے ذریعہ حاصل کریں۔

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

مثال ۲.۳ میں مساوات 39.2 کی مدد سے حاصل کردہ نتیجے کے ساتھ موازنہ کریں۔ دھیان رہے کیونکہ H غیر تاحق وقت ہے لہذا $t = 0$ لینے سے نتیجے پر کوئی اثر نہیں ہوگا۔

۲.۳ ہارمونی مرتش

کلاسیکی ہارمونی مرتش ایک پکدار اسپرنگ جس کا مقیاس پک k ہو اور کیت m پر مشتمل ہوتا ہے۔ کیت کی حرکت قانون ہکے^{۲۲}

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

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

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

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 مرتش نہیں پایا جاتا ہے۔ اگر آپ اسپرنگ کو زیادہ کھینچیں تو وہ ٹوٹ جائے گا اور فانون ہک اس سے بہت پہلے غیر کارآمد ہو چکا ہوگا۔ تاہم عملاً کوئی بھی مخفی، معتمی کم سے کم نقطہ کی پڑوس میں تخمیناً قطع مکانی ہوگا (شکل 4.2)۔ مخفی توانائی $V(x)$ کے کم سے کم نقطہ x_0 کے لحاظ سے $V(x)$ کو ٹیلر تسلسل^{۲۳} کے لحاظ سے پھیلا کر

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

اس سے $V(x_0)$ منفی کر کے (ہم $V(x)$ سے کوئی بھی مستقل بغیر خطرو منکر منفی 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 بلندر تہی ارکان رد کرتے ہوئے (جو $(x - x_0)$ کی قیمت کم ہونے کی صورت میں متابل نظر انداز ہو گئے) درج ذیل حاصل کرتے ہیں

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

^{۲۲} Hooke's law
^{۲۳} Taylor series

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

کو انٹرمیکانیات میں ہمیں مخفیہ

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

کے لیے شروڈنگر 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 تاج وقت شروڈنگر مساوات

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

حل کریں۔ اس مسئلے کو حل کرنے کے لیے دو بالکل مختلف طریقے اپنائے جاتے ہیں۔ پہلی میں تفرقی مساوات کو ”طاققت کے بل بوتے پر“ **تسلسلہ** ^{۲۴} کے ذریعہ حل کرنے کی ترکیب استعمال کی جاتی ہے، جو دیگر مخفیہ کے لیے بھی کارآمد ثابت ہوتا ہے (اور جسے استعمال کرتے ہوئے ہم باب ۴ میں کولمب مخفیہ کے لیے حل تلاش کریں گے)۔ دوسری ترکیب ایک شیطانی الجبرائی تکنیک ہے جس میں **عالمین** ^{۲۵} سیدھی استعمال ہوتے ہیں۔ میں آپ کی واقعیت پہلے الجبرائی تکنیک کے ساتھ پیدا کرتا ہوں جو زیادہ سادہ، زیادہ دلچسپ (اور جلد حل دیتا) ہے۔ اگر آپ طاققتی 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 ہیملٹنی

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

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

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

باب ۲. غیر تاج وقت شرودنجر مساوات

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 متعارفوں پر غور کرنے پر آمادہ کرتا ہے

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

(جہاں قوسین کے باہر جزو ضربی لگانے سے آخری 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 نہ ہونے کی پیدائش ہے۔ عمومی طور پر عامل A اور عامل B کا تبادلہ کار (جسے چکرو قوسین میں لکھا ہے) درج ذیل ہوگا۔

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

اس علامت 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 تفاعل $f(x)$ عمل کرنے کے لئے پیش کریں۔ آخر میں اس پر کھی تفاعل کو رد کر کے آپ صرف عاملین پر مبنی مساوات حاصل کر سکتے ہیں۔ موجودہ صورت میں درج ذیل ہوگا۔

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

پر کھی تفاعل (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 روپے

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

یا

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

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۔

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

بالخصوص درج ذیل ہوگا۔

$$(۲.۵۵) \quad [a_-, a_+] = 1$$

یوں ہیمیلٹنی کو درج ذیل بھی لکھا جاسکتا ہے۔

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

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

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

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

ہم ایک اہم موڑ پر ہیں۔ میں دعویٰ کرتا ہوں اگر توانائی E کی شرودنگر مساوات کو ψ مطمئن کرتا ہو ($H\psi = E\psi$) تب توانائی $(E + \hbar\omega)$ 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 $a_- a_+ + 1$ کی جگہ $a_- a_+$ استعمال کیا ہے۔ دھیان رہے اگرچہ a_+ اور a_- کی ترتیب اہمیت کا حامل ہے، اور کسی بھی مستقل، مثلاً \hbar ، ω اور E کی ترتیب اہم نہیں ہے۔ ایک عامل ہر مستقل کے ساتھ متبادل تبدیل ہوگا۔) اسی طرح حل ψ کی توانائی $(E - \hbar\omega)$ ہوگی۔

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

یوں ہم نے ایک ایسی خود کار ترکیب دریافت کر لی ہے جس سے، کسی ایک حل کو جاننے ہوئے، بالائی اور زریں 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** سیزھی^{۲۷} پکارتے ہیں: a_+ **عامل رفعی**^{۲۸} اور a_- **عامل تقلیل**^{۲۹} ہے۔ حالات کی ”سیزھی“ کو شکل 5.2 میں دکھایا گیا ہے۔

ذرا کیے عامل تقلیل کے بار بار استعمال سے آخر کار ایسا حل حاصل ہوگا جس کی توانائی صفر سے کم ہوگی (جو سوال 2.2 میں پیش عمومی مسئلہ کے تحت ناممکن ہے)۔ نئے حالات حاصل کرنے کی خود کار ترکیب کسی نہ کسی نقطہ پر لازماً ناکامی کا شکار ہوگی۔ ایسا کیوں کر ہوگا؟ ہم جاننے 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 متبادل بھی ہوگا: یہ صفر ہو سکتا ہے یا اس کا سر بھی مکمل لامتناہی ہو سکتا ہے۔ عملاً اول الذکر ہوگا: سیزھی کے سب سے نچلے پایہ (جس کو ہم ψ_0 کہتے ہیں) پر درج ذیل ہوگا۔

$$a_- \psi_0 = 0 \quad (۲.۵۸)$$

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

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

سے تفرقی مساوات

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

لکھی جاسکتی ہے جسے باآسانی حل کیا جاسکتا ہے:

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

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

(C) مستقل ہے۔ لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

ہم اس کو یہیں معمول پر لاتے ہیں:

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

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 خپلا پایہ (جو کوانٹم سر تعش کا زمینی حال ہے) پر پیر رکھ کر، بار بار عامل رفعت استعمال کر کے ہیجان حالات دریافت کیے جاسکتے ہیں۔ جہاں ہر قدم پر توانائی میں $\hbar\omega$ کا اضافہ ہوگا۔

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

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 ممکن 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 ہیجان حال تلاش کریں۔

حل: ہم مساوات ۲.۶۱ استعمال کرتے ہیں۔

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

۲۰. ہارمونی سر تعش 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 ۲.۱۷ طرز کی مساواتوں میں مجموعہ کی زیریں حد کو بھی تبدیل کیا جائے گا۔

ہم اس کو قسمل وکائند 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 چپاس مرتبہ عامل رفعت استعمال کر کے ψ_{50} حاصل نہیں کرنا چاہوں گا، اصولی طور پر، معمول زنی کے علاوہ، مساوات ۲.۶۱ اپنا کام خوش اسلوبی سے کرتی ہے۔ □

آپ الجبرائی طریقے سے ہیجان حالات کو معمول پر بھی لا سکتے ہیں لیکن اس کے لیے بہت محنت چلنا ہوگا لہذا دھیان رکھیے کہ ہم جاننے ہیں کہ $a \pm \psi_n$ اور $\psi_{n\pm 1}$ 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 عملیات کا موجود ہونا لازمی ہے، جس کا مطلب ہے کہ $\pm\infty$ 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 ہیں۔)

ثبوت:

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

تکمل بالخصوص 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 پر حدی 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 تفاعلات 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۔)

لامتناہی چیکور کنواں کے ساکن حالات کی طرح ہارمونی سر تقش 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 ہٹا کر اس کا ثبوت پیش کر سکتے ہیں۔

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

باب ۲. غیر تابع وقت شرودنگر مساوات

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 کن حالات کا خطی جوڑ (مساوات ۲.۱۶) لکھ کر خطی جوڑ کے عمودی سر 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 سر تعش 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 تعریفیات استعمال کرتے ہوئے عاملین رفعت اور تنقلیل کی روپ میں لکھیں:

$$(۲.۴۹) \quad x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_+ + a_-); \quad p = i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (a_+ - a_-)$$

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

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

لہذا 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) $(a_+)^2 \psi_n$ تفاعل ψ_{n+2} کو ظاہر کرتا ہے جو ψ_n کو عمودی ہے۔ یہی کچھ $(a_-)^2 \psi_n$ کے بارے میں بھی کہا 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 دیکھ مخفی توانائی کی توقعاتی قیمت کل توانائی کی بالکل نصف ہے (باقی نصف حصہ یقیناً حسر کی توانائی ہے)۔
□ جیسا ہم بعد میں دیکھیں گے یہ ہارمونی سر تعش کی ایک مخصوص خاصیت ہے۔

سوال ۲.۱۰:

۱. $\psi_2(x)$ تیار کریں۔

ب. ψ_0, ψ_1, ψ_2 کا خن کہ کھنچن۔

ج. ψ_0, ψ_1, ψ_2 کی عمودیت کی تصدیق کمل لے کر صریح کریں۔ اشارہ: تفاعلات کی جنفت پن اور طاق پن کو بروئے کار لاتے ہوئے حقیقت آصرف ایک کمل حل کرنا ہوگا۔

سوال ۲.۱۱:

ا. حالات ψ_0 (مساوات ۲.۵۹) اور ψ_1 (مساوات ۲.۶۲) کے لئے صریح کملات لے کر $\langle x \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ ، اور $\langle p^2 \rangle$ کی قیمتیں دریافت کریں۔ تبصرہ: ہارمونی سر تقش کے مائل میں متغیر $\sqrt{m\omega/\hbar}x \equiv \xi$ اور مستقل $\alpha \equiv (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$ متعارف کرتے ہوئے مسئلہ سادہ صورت اختیار کرتا ہے۔

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

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

سوال ۲.۱۲: ہارمونی سر تقش کے n ویں ساکن حال کے لئے مثال ۲.۵ کی ترکیب استعمال کرتے ہوئے $\langle x \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ ، اور $\langle p^2 \rangle$ تلاش کریں۔ تصدیق کریں کہ اصول عدم یقینیت مطمئن ہوتا ہے۔

سوال ۲.۱۳: ہارمونی سر تقش مخفی قوہ میں ایک ذرہ درج ذیل حال سے ابتداء کرتا ہے۔

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

ا. A تلاش کریں۔

ب. $\Psi(x, t)$ اور $|\Psi(x, t)|^2$ تیار کریں۔

ج. $\langle x \rangle$ اور $\langle p \rangle$ تلاش کریں۔ ان کے کلاسیکی تعدد پر ارتعاش پذیر ہونے پر حیران مت ہوں: اگر میں $\psi_1(x)$ کی بجائے $\psi_2(x)$ دیستاب 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 سر تقش کے زمینی حال میں ایک ذرہ کلاسیکی تعدد ω پر ارتعاش پذیر ہے۔ ایک دم مقیاس لک 4 گنا ہو جاتا ہے لہذا $\omega' = 2\omega$ ہوگا جبکہ ابتدائی تفاعل موج تبدیل نہیں ہوگا (یقیناً ہمیشگی تبدیل ہونے کے بن Ψ اب مختلف انداز سے ارتقاپائے 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 ہوگا؟

۲.۳.۲ تحلیلی ترکیب

ہم اب ہارمونی سر تقش کی شرودنگر مساوات کو دوبارہ لوٹ کر

$$(۲.۴۰) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi = E \psi$$

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۔

$$(۲.۴۱) \quad \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

شرودنگر مساوات اب درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$(۲.۴۲) \quad \frac{d^2 \psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K) \psi$$

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

$$(۲.۴۳) \quad K \equiv \frac{2E}{\hbar \omega}$$

ہم نے مساوات ۲.۴۲ کو حل کرنا ہوگا۔ 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 ۲.۴۲ درج ذیل روپ اختیار کرے گی

$$(۲.۴۴) \quad \frac{d^2 \psi}{d\xi^2} \approx \xi^2 \psi$$

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

$$(۲.۴۵) \quad \psi(\xi) \approx A e^{-\xi^2/2} + B e^{+\xi^2/2}$$

اس میں B کا جنر و معمول پر لانے کے قابل نہیں ہے (چونکہ $\infty \rightarrow |x|$ کرنے سے اس کی قیمت بے فتا بڑھتی ہے)۔ طبعی طور پر فتا بل مقبول حل درج ذیل متعارف صورت کا ہوگا۔

$$(۲.۴۶) \quad \psi(\xi) \rightarrow () e^{-\xi^2/2} \quad (\xi \text{ کی بڑی قیمت کے لئے})$$

اس سے ہمیں خیال آتا ہے کہ ہمیں قوت نہا حصہ کو ”پھیلنا“ چاہیے،

$$(۲.۴۷) \quad \psi(\xi) = h(\xi) e^{-\xi^2/2}$$

اور توقع کرنی چاہیے کہ جو کچھ باقی رہ جائے، $h(\xi)$ ، اس کی صورت $\psi(\xi)$ سے سادہ ہو۔^{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۔

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

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

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

اس تسلسل کے جزو در جزو 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

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

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

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

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

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

^{۳۲} اگرچہ ہم نے مساوات ۲.۷۷ لکھتے ہوئے تخمینے سے کام لیا، اس کے بعد باقی تمام بالکل ٹھیک ٹھیک ہے۔ تفصیلی مساوات کے طاقتی تسلسل حل میں متعارفی جزو کا چھیلنا معمولاً پس انداز ہوتا ہے۔

^{۳۳} Frobenius method

لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

یہ کلیہ **توالی** ^{۳۴} شروع و نگر 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 تناسب عمل 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 تناسب عمل ہے جو a_1 پر منحصر ہے۔ مساوات ۲.۸۱ دو اختیاری مستقلات a_0 اور a_1 کی صورت میں ξ تعین کرتی ہے، جیسا ہم دو درجی تفرقی مساوات کے حل سے توقع کرتے ہیں۔

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

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

جس کا تخمینی حل

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

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 مستقل ψ روپ ہے جو ہم نہیں چاہتے۔ اس مشکل سے نکلنے کا ایک ہی طریقہ ہے۔ معمول پر لانے کے متبادل حل کے لئے لازم ہے کہ اس کا طاقتی تسلسل اختتام پذیر ہو۔ لازمی طور پر j کی ایک ایسی بلند ترین قیمت، n پائی جائے گی جو $a_{n+2} = 0$ دیتی ہو (یوں جفت h تسلسل یا طاق h تسلسل اختتام پذیر ہوگا؛ جبکہ دوسرا لازماً ابتداء سے ہی صفر ہوگا؛ جفت n کی صورت میں $a_1 = 0$ ہوگا جبکہ طاق n کی صورت میں $a_0 = 0$ ہوگا۔ یوں متبادل 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 طاقتی تسلسل حل کے ایک تکنیکی نقطہ سے حاصل ہوتی ہے۔ آئیں اسے ایک مختلف نقطہ نظر سے دیکھتے ہیں۔ یقیناً E کے کسی بھی قیمت کے لئے مساوات ۲.۷۰ کے حل ممکن ہیں (درحقیقت ہر E کے لیے اس کے دو خطی غیر متابع حل پائے جاتے ہیں)۔ تاہم ان میں سے زیادہ تر حل، بڑی x پر، بے قیامت بڑھتے ہیں جس کی بنیاد معمول پر لانے کے متبادل 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 ترسیم کرتے ہیں؛ اب حل کی دم دوسری سمت میں لامتناہی کی طرف بڑھے گی (شکل 6b.2)۔ اگر ہم اس مقدار معلوم کی قیمت 0.49 اور 0.51 کے بیچ چھوٹے چھوٹے قدم لے کر تبدیل کریں تو ہر مرتبہ 0.50 سے گزرتے ہوئے حل کی دم دوسری طرف لامتناہی کی طرف بڑھے گی۔ ٹھیک 0.50 پر اس کی دم صفر کو پہنچ کر معمول زنی کے متبادل حل دے گی۔

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

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

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

$$h_0(\xi) = a_0$$

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

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

لہذا

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

(جو مساوائے معمول زنی، مساوات ۲.۵۹ دوبارہ دیتی ہے)۔ اسی طرح ہم $n = 1$ کے لیے $a_0 = 0$ لیں گے^{۳۵}، اور مساوات ۲.۸۴ میں $j = 1$ سے $a_3 = 0$ حاصل 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۔ یوں

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

اور

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

ہوں گے، وغیرہ وغیرہ۔ (سوال ۲.۱۰ کے ساتھ موازنہ کریں جہاں یہ آخیری منتخب الجبرائی ترکیب سے حاصل کیا گیا۔) عمومی طور پر $h_n(\xi)$ متغیر ξ کا n درجی کشیر رکھتی ہوگا، جو جفت عدد صحیح n کی صورت میں جفت طاقتوں کا اور طاق عدد صحیح n کی صورت میں طاق طاقتوں کا کشیر رکھتی ہوگا۔ جزو ضربی a_0 اور a_1 کے علاوہ یہ عین ہرمانٹے کثیر رکھنے^{۳۶} $H_n(\xi)$ ہیں^{۳۷}۔ جدول ۲.۱ میں اس کے چند ابتدائی ارکان پیش کیے گئے ہیں۔ روایتی طور پر اختیاری جزو ضربیوں منتخب کیا جاتا ہے کہ ξ کے بلند تر طاقت کا عددی سر 2^n ہو۔ اس روایت کے تحت ہارمونی سر نقش کے معمول شدہ^{۳۸} اس کن حالات درج ذیل ہوں گے

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

^{۳۵} دھیان رہے کہ n ہر ایک قیمت کے لئے عددی سر a_j کا ایک مندرجہ سلسلہ پایا جاتا ہے۔
Hermite polynomials^{۳۶}

^{۳۷} ہرمانٹ کشیر کنیوں پر سوال ۲.۱۷ میں مزید غور کیا گیا ہے۔
^{۳۸} میں یہاں معمول زنی مستقالات حاصل نہیں کروں گا۔

جو (بقیہ) 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۔ کوانٹم مرتعش حیران کن حد تک کلاسیکی مرتعش سے مختلف ہے۔ نہ صرف اس کی توانائیاں کوانٹا شدہ ہیں بلکہ اس کی موضعی تقسیم کے بھی عجیب خواص پائے جاتے ہیں۔ مثلاً کلاسیکی طور پر احبازتی سعت کے باہر (یعنی توانائی کے کلاسیکی 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 معتم کی تقسیم کی بات کرتے ہیں جبکہ کوانٹائی صورت میں ہم یکساں تیار کردہ حالات کے ایک سگرا کی تقسیم کی بات کرتے ہیں)۔^{۳۹}

سوال ۲.۱۵: ہارمونی مرتعش 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 مرتعش کی توانائی $E = (1/2)ka^2 = (1/2)m\omega^2 a^2$ ہوگی جہاں a حیطہ ہے۔ یوں توانائی E کے مرتعش کا ”کلاسیکی احبازتی خطہ“ $\sqrt{2E/m\omega^2} - تا + \sqrt{2E/m\omega^2}$ ہوگا۔ مکمل کی قیمت ”عمومی تقسیم“ یا ”تفاضل حل“ 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 خاطر ξ کی بلند تر طاقت کا عددی سرروایت کے تحت 2^n لیں۔

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

۱. کلیہ روڈریگیوز^{۴۰} درج ذیل کہتا ہے۔

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

اس کو استعمال کر کے H_3 اور H_4 اخذ کریں۔

ب. درج ذیل کلیہ توانائی گزشتہ دوہر مائٹ کثیررکنیوں کی صورت میں H_{n+1} دیتا ہے۔

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

اس کو جزو-۱ کے نتائج کے ساتھ استعمال کر کے H_5 اور H_6 تلاش کریں۔

^{۳۹} کلاسیکی تقسیم کو ایک جینی توانائی کے متعدد مرتعشات، جن کے نقاط آف از بلا منصوبہ ہوں، کا سگرا تصور کرتے ہوئے یہ مثال زیادہ بہتر ہوگا۔

^{۴۰} Rodrigues formula

باب ۲. غیر تابع وقت شرودنگر مساوات

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

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

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

د. پیدا کار تفاعل $e^{-z^2+2z\xi}$ کا $z = 0$ پر n واں تفرق $H_n(\xi)$ ہوگا، یاد 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 پر جگہ $V(x) = 0$ ہوگا) پر غور کرتے ہیں جس سادہ ترین صورت ہونی چاہیے تھی۔ کلاسیکی طور پر اس سے مراد مستقل سمتی رفتار ہوگی، لیکن کوانٹم میکانیات میں یہ مسئلہ حیران کن حد تک پیچیدہ اور پراسرار ثابت ہوتا ہے۔ غیر تابع وقت شرودنگر مساوات ذیل

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

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 کوانٹا (مساوات ۲.۲۱) کی مانند ہے جہاں (بھی) مخفی قوت صفر ہے؛ البتہ اس بار، میں عمومی مساوات کو قوت نہ (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 کوانٹا 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 حاصل ہو سکتا ہے۔ اس کے ساتھ تابعیت 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^۲ کی ایک اٹل قیمت کا یوں مطابقتی ہو گا 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 (اقتی ہی توانائی کی) موج کو ظاہر کرتا ہے۔ چونکہ ان میں منفرق 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 ذی پروگلی (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 حاصت حرکت کی ہوگی چونکہ $V = 0$ ہے) 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 متابل علیحدگی حل طبعی طور پر متابل مقبول 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 متابل علیحدگی حل ہمارے کسی کام کے نہیں ہیں، کیونکہ یہ طبعی مفہوم سے آزاد، ریاضیاتی کردار ادا کرتے ہیں۔ تابع وقت شرودنگر مساوات کا عمومی حل اب بھی متابل متابل 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 عمل ہوگا)۔

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

(نم) $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ کو اپنی آسانی کیلئے نکل کے باہر نکالتے ہیں؛ مساوات ۲.۱۷ میں عددی سر c_n کی جگہ یہاں $\phi(k) dk$ (۱/√2π) کردار ادا کرتا ہے۔ اب اس تعامل موج کو (موزوں $\phi(k)$ کیلئے) معمول پر لایا جاسکتا ہے۔ تاہم اس میں k کی قیمتوں کی سخت پائی جائے گی، لہذا توانائیوں اور رفتاروں کی بھی سخت پائی جائے گی۔ ہم اس کو موج اکٹھے کہتے ہیں۔^{۴۳}

عمومی کو انہم مسئلہ میں ہمیں $\Psi(x, 0)$ منراہم 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 تعامل موج

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

پر پورا اترتا ہوا $\psi(k)$ کیسے تعین کیا جائے؟ یہ فوراً سر تجزیہ کا کلاسیکی مسئلہ ہے جس کا جواب مسئلہ پلانشرال^{۴۵} :

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

پیش کرتا ہے (سوال 20.2 دیکھیں)۔ $F(k)$ کو $f(x)$ کا فوریر بدل^{۴۶} کہا جاتا ہے جبکہ $f(x)$ کو $F(k)$ کا الٹے فوریر بدل^{۴۷} کہتے ہیں (ان دونوں میں صرف قوت نسائی علامت کا منرق پایا جاتا ہے)۔ ہاں، احبازتی تعامل پر کچھ پابندی ضرور عائد ہے: مکمل کا موجود^{۴۸} ہونا لازم ہے۔ ہمارے مقاصد کے لئے، تعامل $\Psi(x, 0)$ پر بذات خود

wave packet^{۴۹}

سائنس فضا امواج کی وسعت لامتناہی تک پہنچتی ہے اور یہ معمول پر لانے کے متابل نہیں ہوتی ہیں۔ تاہم ایسی امواج کا خطی میل تباہ کن مداخلت پیدا کرتا ہے، جس کی بنا مقام ہندی اور معمول زنی ممکن ہوتی ہے۔

Plancherel's theorem^{۵۰}

Fourier transform^{۵۱}

inverse Fourier transform^{۵۲}

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

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

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

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

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

جہاں A اور a مثبت حقیقی مستقل ہیں۔ $\Psi(x, t)$ تلاش کریں۔
حل: ہم پہلے $\Psi(x, 0)$ کو معمول پر لاتے ہیں۔

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

اس کے بعد مساوات ۱۲.۱۰۳ استعمال کرتے ہوئے $\psi(k)$ تلاش کرتے ہیں۔

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

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

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

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

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

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

جو k کی مختلف قیمتوں کا آپس میں کٹ جانے کی بنا افقی ہے (شکل 9.2)۔ یہ مثال ہے اصول عدم یقینیت کی: اگر ذرے کے مقام میں 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 منفر ہوتی ہے۔ یوں بڑی a کیلئے $k = 0$ پر $\phi(k)$ نوکیلی صورت اختیار کرے گا (شکل 10.2)۔ اس بار ذرے کی معیار حرکت اچھی طرح معین ہے جبکہ اس کا مقام صحیح طور پر معلوم نہیں ہے۔ □

آئیں اب اس تضاد پر دوبارہ بات کریں جس کا ذکر ہم پہلے کر چکے: جہاں مساوات 94.2 میں دیا گیا علیحدگی حل $\Psi_k(x, t)$ ، ٹھیک اس ذرہ کی رفتار سے حرکت نہیں کرتی ہے جس کو یہ بظاہر ظاہر کرتی ہے۔ حقیقتاً یہ مسئلہ وہیں پر ختم ہو گیا تھا جب ہم جان چکے کہ Ψ_k طبعی طور پر قابل حصول حل نہیں ہے۔ بحر حال آزاد ذرے کی تعامل موج (مساوات 100.2) میں سموی سمتی رفتار کی معلومات پر غور کرنا دلچسپی کا باعث ہے۔ بنیادی تصور کچھ یوں ہے: سائن متفاعلات کا خطی میل جس کے محیط کو ϕ ترمیم کرتا ہو (شکل 11.2) موجی اکٹھ ہوگا؛ یہ ”عنائف“ میں ڈھانکے ہوئے ”لہروں“ پر مشتمل ہوگا۔ انفرادی لہر کی رفتار، جس کو دوری سمتی رفتار^۹ کہتے ہیں، ہر گز ذرے کی سمتی رفتار کو ظاہر نہیں کرتی ہے بلکہ عنائف کی رفتار، جس کو گروہی سمتی رفتار^{۱۰} کہتے ہیں، ذرے کی رفتار ہوگی۔ عنائف 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 دھاگے پر امواج کی گروہی سمتی رفتار اور دوری سمتی رفتار ایک دوسرے کے برابر ہوتی ہیں۔ پانی کی امواج کیلئے یہ دوری سمتی رفتار کی نصف ہوگی، جیسا آپ نے جمیل 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 محیط بڑھتا ہے جبکہ آخر میں آگے پہنچ کر اس کا محیط گھٹ کر منفر ہو جاتا ہے؛ اس دوران یہ تمام بطور ایک مجموعہ نصف رفتار سے حرکت کرتا ہے۔) یہاں میں نے دکھانا ہو گا کہ کوانٹم میکانیات میں آزاد ذرے کے تعامل 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 جبار ہوں وہ کسی بھی موجی اکٹھ کیلئے، اس کے انتشاری رشتہ^{۱۱} ω کا متغیر k کے لحاظ سے کلیہ سے قطع نظر، درست ہوگا۔ ہم مندرجہ ذیل ہیں کہ کسی مخصوص قیمتی k_0 پر $\phi(k)$

phase velocity^۹
group velocity^{۱۰}
dispersion relation^{۱۱}

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 $\omega(k)$ کو اس نقطہ کے گرد ٹیلر تسلسل سے پھیلانا صرف ابتدائی اجزاء لیتے ہیں:

$$\omega(k) \cong \omega_0 + \omega'_0(k - k_0)$$

جہاں نقطہ k_0 پر k کے لحاظ سے ω کا تفرق ω'_0 ہے۔

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

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

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 تکمل ہے۔ یوں درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

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

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

باب ۲. غیر تابع وقت شرودنجر مساوات

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

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

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: کو انٹیمیکانیات میں جب $V = 0$ ہو، قوت نمائی تفاعل حرکت کرتے امواج کو ظاہر کرتی ہے اور انہیں استعمال کرتے ہوئے آزاد ذرے پر تبصرہ کرنا زیادہ آسان ہوتا ہے، جبکہ \sin اور \cos ساکن امواج کو ظاہر کرتی ہے جو لامستناہی چکور کنواں میں پائی جاتی ہے۔

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

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

۱. مسئلہ ڈرشلے کہتا ہے کہ وقفہ $[-a, +a]$ پر کسی بھی تفاعل $f(x)$ کو فورسٹر تسلسل کے پھیلاوے 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. فورسٹر 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 $k = (n\pi/a)$ 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 گے۔ 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

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

جہاں A اور a مثبت حقیقی مستقل ہیں۔

ا. $\Psi(x, 0)$ کو معمول پر لائیں۔

ب. $\phi(k)$ تلاش کریں۔

ج. $\Psi(x, t)$ کو 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: گاؤس موج اکٹھا ایک آزاد ذرے کا ابتدائی تفاعل موج درج ذیل ہے

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

جہاں A اور a مستقلات ہیں (a حقیقی اور مثبت ہے)۔

ا. $\Psi(x, 0)$ کو معمول پر لائیں۔

ب. $\Psi(x, t)$ تلاش کریں۔ اشارہ: ”مربع مکمل کرتے ہوئے“ درج ذیل روپ کے عمل با آسانی حل ہوتے ہیں۔

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

مان لیں $y \equiv \sqrt{a}[x + (b/2a)]$ ۔ یوں $(ax^2 + bx) = y^2 - (b^2/4a)$ 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 درج ذیل مقدار کی صورت میں لکھیں۔

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{a}{1+(2\hbar at/m)^2}}$$

وقت $t = 0$ پر $|\Psi|^2$ کا حنا کہ (بطور x کا تفاعل) بنائیں۔ کسی بڑے t پر دوبارہ حنا کہ 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۔ جزوی جواب:

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

تاہم جواب کو اس سادہ روپ میں لانے کیلئے آپ کو کافی الجبرا کرنا ہوگا۔

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

۲.۵ ڈیلٹا فنکشن

۲.۵.۱ مقید حالات اور بکھراو حالات

ہم غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات کے دو مختلف حل دیکھ چکے ہیں: لامتناہی چکور کنواں اور ہارمونی سر تعش کے حل معمول پر لانے کے قابل تھے اور انہیں غیر مسلسل اعشاریہ n کے لحاظ سے نام دیا جاتا ہے؛ آزاد ذرے کے لیے یہ معمول پر لانے کے قابل نہیں ہیں اور انہیں استمراری متغیر k کے لحاظ سے نام دیا جاتا ہے۔ اول الذکر بذات خود طبعی طور پر قابل حصول حل کو ظاہر کرتے ہیں جبکہ موخر الذکر ایسا نہیں کرتے ہیں؛ تاہم دونوں صورتوں میں تاجع وقت شرودنگر مساوات کے عمومی حل ساکن حالات کا خطی جوڑ ہوگا۔ پہلی قسم میں یہ جوڑ (n پر لیا گیا) مجموعہ ہوگا، جبکہ دوسرے میں یہ (k پر) نکل ہوگا۔ 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 **والپیٹھ نقاط**^{۵۲} کے پیچ 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 والپس لامتناہی کو لوٹے گا (شکل 12.2)۔ (ب ذرہ مخفی توانائی میں پھنس نہیں سکتا ہے، ماسوائے اس صورت کہ اس کی توانائی (مثلاً گڑکی 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 سر تعش)؛ بعض صرف بکھراو حال پیدا کرتی ہیں (مثلاً پہاڑ مخفیہ جو کہیں پر بھی نیچے نہ جھکتا ہو)؛ اور بعض، ذرہ کی توانائی پر منحصر، دونوں اقسام کے حال پیدا کرتی ہیں۔

شرودنگر مساوات کے حلوں کے دو اقسام ٹھیک انہیں مقید اور بکھراو حال کو ظاہر کرتی ہیں۔ کوانٹم کے دائرہ کار میں یہ فرق اس سے بھی زیادہ واضح ہے جہاں **سرنگے زنی**^{۵۵} (جس پر ہم کچھ دیر میں بات کریں گے) ایک ذرے کو

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

کسی بھی مستثنائی مخفیہ ر کاوٹ کے اندر سے گزرنے دیتی ہے، لہذا مخفیہ کی قیمت صرف لامستثنائی پر اہم ہوگی (شکل 12.2c)۔

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

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

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

چونکہ $\pm\infty \rightarrow x$ پر لامستثنائی چکور کنواں اور ہارمونی سر تقش کی مخفی توانائیاں لامستثنائی 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 بھراو حال^{۵۶} پیدا کرتی ہے۔ اس حصہ میں (اور اگلے حصہ میں) ہم ایسی مخفی توانائیوں پر غور کریں گے جو دونوں اقسام کے حالات پیدا کرتی ہیں۔

۲.۵.۲ ڈیلٹا تفاعل کنواں

مبداء پر لامستثنائی کم چوڑائی اور لامستثنائی بلند ایسا نوکیلا تفاعل جس کا رقبہ اکائی ہو (شکل 13.2) ڈیلٹا تفاعل^{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 تفاعل مستثنائی نہیں ہے لہذا تکنیکی طور پر اس کو تفاعل کہنا غلط ہوگا (ریاضی دان اسے متعمم تفاعل^{۵۸} یا متعمم تقیم^{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 تفاعل ہوگا)۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ $\delta(x - a)$ نقطہ a پر اکائی رقبہ کا نوکیلی تفاعل ہوگا۔ چونکہ $\delta(x - a)$ اور ایک سادہ تفاعل $f(x)$ 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:

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

^{۵۶} آپ کو یہاں پریشانی کا سامنا ہو سکتا ہے کیونکہ عمومی مسئلہ جس کے لئے $V > E$ درکار ہے (سوال 3.2)، بھراو حال، جو معمول پر لانے کے قابل نہیں ہیں، پر لاگو نہیں ہوگا۔ اگر آپ اس سے مطمئن نہیں ہیں تب $E \leq 0$ کے لئے مساوات شروع کر کے آزاد ذرہ کے لئے حل کر کے دیکھیں کہ اس کے خطی جوڑ بھی معمول پر لانے کے قابل نہیں ہیں۔ صرف مثبت مخفی توانائی حل مکمل سلسلہ دیں گے۔

^{۵۷} Dirac delta function

^{۵۸} generalized function

^{۵۹} generalized distribution

^{۶۰} ڈیلٹا تفاعل کو ایسے مستطیل (یا شائے) کی تصدیق صورت تصور کیا جاسکتا ہے جس کی چوڑائی بہت درجہ کم اور فاصلہ بہت بڑھتا ہو۔

بالخصوص درج ذیل لکھا جاسکتا ہے جو ڈیلٹا انتفاع عمل 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 انتفاع عمل $f(x)$ 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 $\epsilon > 0$ ہے۔)

آئیں درج ذیل روپ کے مخفیہ پر غور کریں جہاں α ایک مثبت مستقل ہے۔^{۱۱}

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

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

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

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 لامستناہی کی طرف بڑھتا ہے لہذا ہمیں $A = 0$ منتخب کرنا ہوگا:

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

^{۱۱} ڈیلٹا انتفاع عمل کی اکائی ایک بس لیبائی ہے (مساوات ۲.۱۱۱ دیکھیں) لہذا α کا بعد توانائی ضرب بس لیبائی ہوگا۔

خط $x > 0$ 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 فنکشن کو ایک دوسرے کے ساتھ جوڑنا ہو
 گا۔ میں ψ کے معیاری سرحدی شرائط پہلے بیان کر چکا ہوں

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

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

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

فنکشن $\psi(x)$ کو شکل 14.2 میں ترسیم کیا گیا ہے۔ دوم سرحدی شرط ہمیں ایسا کچھ نہیں بتاتی ہے؛ (لا
 متناہی چکور کٹواں کی طرح) جوڑ پر مخفی لامتناہی ہے اور فنکشن کی ترسیل سے واضح ہے کہ $x = 0$ پر اس میں بل
 پایا جاتا ہے۔ مزید اب تک کی کہانی میں ڈیلٹا فنکشن کا کوئی کردار نہیں پایا گیا۔ ظاہر ہے کہ $x = 0$ پر ψ
 کے تفرق میں عدم استمراری ڈیلٹا فنکشن 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 مکمل درحقیقت دونوں آخری فنکشن پر $\frac{d\psi}{dx}$ کی قیمتیں ہوں گی؛ آخری مکمل اس پٹی کا رقبہ ہوگا، جس کا قدمتناہی،
 اور $\epsilon \rightarrow 0$ کی تحدیدی صورت میں، چوڑائی صفر کو پہنچتی ہو، لہذا یہ مکمل 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 سرحد پر $V(x)$
 لامتناہی ہو تب یہ دلیل متبادل مقبول 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 ۲.۱۲۳):

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

لہذا $\Delta(d\psi/dx) = -2Bk$ ہوگا۔ 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 جذور کا انتخاب کر کے) درج ذیل حاصل ہوگا۔

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

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ ڈیلٹا فنکشن، 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 وقت اب 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 بنی درج ذیل ہوگا۔

$$(۲.۱۳۳) \quad F + G = A + B$$

تفرقات درج ذیل ہوں گے۔

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

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 مطابقت کرنے کے بعد ہمارے پاس دو مساوات (مساوات ۲.۱۳۳ اور ۲.۱۳۵) جبکہ چار نامعلوم متقلات A ، B ، C اور D بلکہ k شامل کرتے ہوئے پانچ نامعلوم متقل 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 متقلات کی انفرادی طبعی اہمیت پر غور کریں۔ آپ کو یاد ہوگا کہ e^{ikx} (کے ساتھ تایع وقت جزو ضربی $e^{-iEt/\hbar}$ منسلک کرنے سے) دائیں رخ حرکت کرتا ہوا انتقال عمل موج پیدا ہوتا ہے۔ اسی طرح e^{-ikx} بائیں رخ حرکت کرتا ہوا موج دیتا ہے۔ یوں مساوات ۲.۱۳۱ میں متقل A بائیں سے آمدی موج کا چیط ہے، B بائیں رخ واپس لوٹنے ہوئے موج کا چیط ہے، F (مساوات ۲.۱۳۲) دائیں رخ نکل کر چلتے ہوئے موج کا چیط جبکہ H دائیں سے آمدی موج کا چیط 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 چیط صفر ہوگا:

$$(۲.۱۳۶) \quad G = 0, \quad \text{بائیں سے بکھراؤ}$$

باب ۲. غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات

آمدی موج^{۱۲} کا حیط A ، منعکس موج^{۱۳} کا حیط B جبکہ ترسیل موج^{۱۴} کا حیط F ہوگا۔ مساوات ۲.۱۳۳ اور ۲.۱۳۵ کو B اور F کے لیے حل کر کے درج ذیل حاصل ہوں گے۔

$$(۲.۱۳۷) \quad B = \frac{i\beta}{1 - i\beta} A, \quad F = \frac{1}{1 - i\beta} A$$

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

چونکہ کسی مخصوص مقام پر ذرے کی موجودگی کا احتمال $|\psi|$ ہوتا ہے لہذا آمدی ذرہ کے انعکاس کا تناسبی^{۱۵} احتمال درج ذیل ہوگا

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

جہاں R کو شرح انعکاس^{۱۶} کہتے ہیں۔ (اگر آپ کے پاس ذرات کی ایک شعاع ہو تو R آپ کو بتائے گا کہ ٹکرائے کے بعد ان میں سے کتنے ذرات واپس لوٹ کر آئیں گے۔) ترسیل کا احتمال درج ذیل ہوگا جسے شرح ترسیل^{۱۷} کہتے ہیں۔

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

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

$$(۲.۱۴۰) \quad R + T = 1$$

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

$$(۲.۱۴۱) \quad R = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{m\alpha^2}}, \quad T = \frac{1}{1 + \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E}}$$

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 متبادل نہیں ہیں لہذا یہ کسی صورت بھی حقیقی ذرے کے حال کو ظاہر نہیں کر سکتے ہیں،

incident wave^{۱۲}

reflected wave^{۱۳}

transmitted wave^{۱۴}

^{۱۵} یہ معمول پر لانے کے متبادل تفاعل نہیں ہے لہذا کسی ایک مخصوص نقطہ پر ذرہ پایا جانے کا احتمال بے معنی ہوگا؛ بہر حال آمدی اور منعکس امواج کے احتمالات کا تناسب معنی خیز ہے۔ اگلے پیارا گراف میں اس پر مسزید بات کی جائے گی۔

reflection coefficient^{۱۶}

transmission coefficient^{۱۷}

لیکن ہم اس مسئلے کا حل جانتے ہیں۔ ہمیں ساکن حالات کے ایسے خطی جوڑ تیار کرنے ہونگے جو معمول پر لائے جانے کے قابل ہوں، جیسا ہم نے آزاد ذرہ کے لیے کیا تھا۔ حقیقی طبعی ذرات کو یوں تیار کر دہ موجی اکٹھ 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 تعامل موج کو معمول پر نہیں لایا جاسکتا ہے لہذا R اور T کو (بالترتیب) E کے قریب ذرات کی تخمینی شرح انکاس اور شرح ترسیل سمجھنا چاہیے۔

یہ ایک عجیب بات ہے کہ ہم اب اسباب 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 تعامل ہے جو (مستقل جٹ کے ساتھ) دونوں اطراف لامتناہی تک پھیلا ہوا ہے۔ اس کے باوجود اس تعامل پر موزوں سرحدی شرائط مسلط کر کے ہم ایک ذرہ (جسے مقامی موجی اکٹھ سے ظاہر کیا گیا ہو) کی مخفیہ سے انکاس یا ترسیل کا احتمال تعیین کر پاتے ہیں۔ اس ریاضیاتی کرامت کی وجہ میرے خیال میں یہ حقیقت ہے کہ ہم پوری فضا میں پھیلے ہوئے تعامل موج، جن کی تابعیت وقت نہ ہونے کے برابر ہو، کے خطی جوڑ لے کر ایک (حرکت پذیر) نقطہ کے گرد یا تعامل 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 تعامل 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 حتمی 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۔ حقیقتاً کلاسیکی مسائل بکھراؤ غیر دلچسپ ہوتے ہیں: اگر $E > V$ تب $R = 0$ اور $T = 1$ ہوگا اور ذرہ ہر صورت رکاوٹ عبور کر پائے گا؛ اگر $E < V$ تب $E = 0$ اور $T = 1$ ہوگا اور ذرہ پہاڑی پر وہاں تک چڑھے گا جہاں تک اس میں دم ہو اور اس کے بعد اسی راستے واپس لوٹے گا۔ کوانٹائی بکھراؤ زیادہ دلچسپ ہوتے ہیں: اگر $E < V$ تب بھی ایک ذرے کا مخفیہ عبور کرنے کا احتمال غیر صفر ہوگا۔ اس منظر 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 $E > V$ کی صورت میں بھی ذرے کے انکاس 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 میکانیات آپ کی جان بچا پائے گی (سوال 35.2 دیکھئے گا)۔

سوال ۲.۲۳: درج ذیل کمالات کی قیمتیں تلاش کریں۔

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

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

^{۶۸} کنواں اور رکاوٹوں سے موجی اکٹھ کے بکھراؤ کے اعدادی مطالعہ دلچسپ معلومات فراہم کرتے ہیں۔
tunneling^{۶۹}

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

سوال ۲.۲۳: ڈیلٹا انتفاعلات زیر علامت مکمل رہتے ہیں اور دو فکٹرے $D_1(x)$ اور $D_2(x)$ جو ڈیلٹا انتفاعل پر مسببتی 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 انتفاعل ہو سکتا ہے۔

۱. درج ذیل دکھائیں

$$\delta(cx) = \frac{1}{|c|} \delta(x) \quad (۲.۱۲۲)$$

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

ب. سیرٹھ تفاعل $\theta(x)$ درج ذیل ہے۔

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \quad (۲.۱۲۳)$$

(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 استمرار پایا جاتا ہے لہذا $\langle p^2 \rangle$ کا حساب پیچیدہ ہوگا۔ سوال ۲.۲۴۔ ب کا نتیجہ استعمال کریں۔ جزوی جواب: $\langle p^2 \rangle = (ma/\hbar)^2$

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

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk \quad (۲.۱۲۴)$$

تبصرہ: یہ کلیہ دیکھ کر ایک عزت مند ریاضی دان پریشان ضرور ہوگا۔ اگرچہ $x = 0$ کے لئے یہ عمل لامتناہی ہے اور $x \neq 0$ کی صورت میں چونکہ مکمل ہمیشہ کے لئے ارتعاش پذیر رہتا ہے لہذا یہ (ضمناً کسی دوسرے عدد کو) مرکوز نہیں ہوتا ہے۔ اس کی پیوند کاری کے طریقے پائے جاتے ہیں (مثلاً، ہم $-L$ تا $+L$ تکمل لے کر، مساوات ۲.۱۲۴ 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 انتفاعل عمل مطمئن نہیں کرتا ہے (صفحہ ۵۲ مربع عملیت کی شرط حاشیہ میں پیش کی گئی ہے)۔ اس کے باوجود مساوات ۲.۱۲۴ نہایت مددگار ثابت ہو سکتا ہے اگر اس کو احتیاط سے استعمال کیا جائے۔

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

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

ا. اس مخفیہ کا حنا کہ کھینچیں۔

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

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

۲.۶ مستنہی چکور کنواں

ہم آخری مثال کے طور پر مستنہی 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 نکھر احوالات (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 بڑھتا ہے لہذا ہمیشہ طرح: مساوات 119.2 دیکھیں) طبعی طور پر متابل قبول 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 شرودنگر 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۔

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

اگر چہ مقید حالات کے لئے E منفی ہے تاہم $E > V_0$ کی بنا (سوال 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، خطہ $x > a$ جہاں ایک بار پھر مخفیہ صفحہ ہے، عمومی حل $\psi(x) = Fe^{-\kappa x} + Ge^{\kappa x}$ ہوگا لیکن یہاں $x \rightarrow \infty$ کی صورت میں دوسرا جزو بے انتاب بڑھتا ہے لہذا قابل قبول حل درج ذیل ہوگا۔

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

اگلے قدم میں ہمیں سرحدی شرائط مسلط کرنے ہوں گے: ψ اور $\frac{d\psi}{dx}$ نقاط $-a$ اور $+a$ پر استمراری ہیں۔ یہ جاننے ہوئے کہ دیالک مخفیہ جھفت تقاضا 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 مسلط کرنی ہوں گی؛ چونکہ $\psi(-x) = \pm \psi(x)$ ہے لہذا دوسری جانب کا حل ہمیں خود بخود حاصل ہوگا۔ میں جھفت حل حاصل کرتا ہوں جبکہ آپ کو سوال 2.29 میں طاق حل تلاش کرنے ہوں گے۔ \cos جھفت ہے (جبکہ \sin طاق ہے) لہذا میں درج ذیل روپ کے حلوں کی تلاش میں ہوں۔

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

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

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

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

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

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

^۱ آپ چاہیں تو عمومی حل کو قوت نسائی روپ میں لکھ سکتے ہیں۔ اس سے بھی وقتی اختتامی نتائج حاصل ہوں گے، تاہم تشاکلی مخفیہ کی بنیاد پر جاننے ہیں کہ حل جھفت یا طاق ہوں گے، اور \sin اور \cos کا استعمال اس حقیقت کو بلا واسطہ بروئے کار لا سکتا ہے۔

$$\kappa = l \tan(la) \quad (۲.۱۵۴)$$

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

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

سوات ۲.۱۴۶ اور ۲.۱۴۸ کے تحت $(\kappa^2 + l^2) = 2mV_0/\hbar^2$ اور ہوگا لہذا $\sqrt{z_0^2 - z^2}$ کا κa ہوگا اور سوات ۲.۱۵۴ درج ذیل روپ اختیار کرے گی۔

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

یہ z (لہذا E) کی ماورائی سوات ہے جس کا متغیر z_0 ہے (جو کنواں کی ”جامت“ کی ناپ ہے)۔ اس کو اعدادی طریقہ سے کمپیوٹر کے ذریعے حل کیا جاسکتا یا $\tan z = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$ کو ایک ساتھ ترسیم کر کے ان کے تقاطع نقطہ 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۔

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

اب $E + V_0$ کنواں کی تہ کے اوپر توانائی کو ظاہر کرتی ہے اور سوات کا دایاں ہاتھ ہمیں $2a$ چوڑائی کے لامستثنائی چکور کنواں کی توانائیاں دیتا ہے (سوات 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 تعلق 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 (سوات ۲.۱۵۱) کو معمول پر لانے میں دلچسپی رکھتے ہیں (سوال 30.2) تو ایسا ضرور کریں جبکہ میں اب بھروسہ حالات $E > 0$ کی طرف بڑھنا چاہوں گا۔ ہوں بائیں ہاتھ جہاں $V(x) = 0$ ہے درج ذیل ہوگا

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

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 فرض کرتے ہیں کہ کوئی آمدی موج نہیں پائی جاتی درج ذیل ہوگا۔

$$(۲.۱۶۲) \quad \psi(x) = Fe^{ikx}$$

یہاں آمدی جیٹ A ، انعکاسی جیٹ B اور ترسیلی جیٹ F ہے۔^{۷۲}

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

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

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

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

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

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

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

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

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)۔

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

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

^{۷۲} مفید حالات کی صورت میں ہم نے طاق اور جفت تفاسلات تلاش کیے۔ ہم یہاں بھی ایسا کر سکتے ہیں، تاہم مسئلہ بچھراؤ میں امواج صرف ایک رخ سے آتے ہیں لہذا یہ مسئلہ ذاتی طور پر غیر تشکیلی ہے اور سیاق و سباق کے لحاظ سے (حرکت پذیر امواج کے اظہار کے لئے) قوت نسبی علمات کا استعمال زیادہ موثر ہے۔

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

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

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

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

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

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

جو عین لامستثنائی چپکور کنواں کی اجازتی توانائیاں ہیں۔ شکل 19.2 میں توانائی کے لحاظ سے T ترسیم کیا گیا ہے۔

سوال ۲.۲۹: مستثنائی چپکور کنواں کے طاق مقید حال کے تفاعل موج کا تجزیہ کریں۔ اجازتی توانائیوں کی ماورائی مساوات اخذ کر کے اسے ترسیبی طور پر حل کریں۔ اس کے دونوں تحدیدی صورتوں پر غور کریں۔ کیا ہر صورت ایک طاق مقید حال پایا جائے گا؟

سوال ۲.۳۰: مساوات ۲.۱۵۱ میں دیا گیا $\psi(x)$ معمول پر لا کر مستقل D اور F تعین کریں۔

سوال ۲.۳۱: ڈائی راک 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 چپکور 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 ۲.۱۳۱ 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 راکاوٹ (جسے خطہ $-a < x < a$ میں $+V_0 > 0$ $V(x)$ لینے سے مساوات ۲.۱۳۵ دیتی ہے) کے لئے شرح ترسیل تعین کریں۔ تین صورتوں $E < V_0$ ، $E = V_0$ اور

$v_0 > E$ کو علیحدہ علیحدہ حل کریں۔ (آپ دیکھیں گے کہ رکاوٹ کے اندر تینوں صورتوں میں تفسار عمل موج ایک دوسرے سے مختلف ہوں گے۔) جزوی جواب: $V_0 < E$ کے لئے درج ذیل ہوگا۔^{۴۳}

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

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 حیطہ اور F ترسیلی حیطہ ہے)۔ دکھائیں کہ $E > V_0$ کے لئے درج ذیل ہوگا۔

$$T = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}} \frac{|F|^2}{|A|^2} \quad (۲.۱۷۲)$$

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 سیڑھی مخفیہ کے لئے شرح ترسیل تلاش کر کے $T + R = 1$ کی تصدیق کریں۔

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

ا. صورت $E = V_0/3$ میں اس کے انعکاس کا احتمال کیا ہوگا؟ اشارہ: یہ بالکل سوال ۲.۳۴ کی طرح ہے، بس یہاں سیڑھی اوپر کی بجائے نیچے کو ہے۔

ب. میں نے مخفیہ کی شکل و صورت یوں پیش کی ہے گویا ایک گاڑی افقی چٹان سے نیچے گرنے والی ہے تاہم ایسی کھائی سے گاڑی کا ٹکراؤ 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

^{۴۳} یہ سرنگ زنی کی ایک اچھی مثال ہے۔ کلاسیکی طور پر ذرہ رکاوٹ سے ٹکرانے کے بعد واپس لوٹے گا۔

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-امیں انکاس 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 لامستثنائی چکور کنواں کے اندر $V(x) = 0$ اور اس کے باہر $V(x) = \infty$ ہے۔ غیر تاجع وقت شروع ٹکرمادات پر موزوں سرحدی شرائط مسلط کر کے اسے حل کریں۔ تصدیق کریں کہ آپ کی توانائیاں عین میری حاصل کردہ توانائیوں (مادات ۲.۲۷) کے مطابق ہیں اور تصدیق کریں کہ میری ψ (مادات ۲.۲۸) میں $(x+a)/2 \rightarrow x$ 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: لامستثنائی چکور کنواں (مادات 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 لامستثنائی چکور کنواں (مادات 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۔ لہجاتی طور پر اس عمل سے تفاعل موج اثر انداز نہیں ہوتا۔ اس ذرہ کی توانائی کی پیمائش اب کی جاتی ہے۔

۱. 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 چکور کنواں میں ایک ذرہ کا تفاعل 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 دائیں سے بائیں 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 مسیں 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، اگر چہ 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 سر تعش کی مخفی (مساوات 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 تفاعل 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 کھینچ تو جاسکتا ہے لیکن اسے دبایا 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 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 لامستثنائی چکور کنواں، جس کے وسط پر درج ذیل ڈیلٹا تفاعل رکاوٹ ہو، کے لیے غیر تابع 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۔ احبازی توانائیوں کو (اگر ضرورت پیش آئے) ترمیمی طور پر تلاش کریں۔ ان کا موازنہ ڈیلٹا تفاعل کی غیر موجودگی میں مطابق 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 تابع وقت شرودنگر مساوات کے منفرد حل جن کی توانائی E ایک دوسرے جیسی ہو کو **اخطا**^{۷۶} کہتے ہیں۔ مثال کے طور پر آزاد ذرہ کے حال دوہری اخطا ملی ہیں۔ ان میں سے ایک حل دائیں رخ اور دوسرا بائیں رخ حرکت کو ظاہر کرتا ہے۔ تاہم ہم نے ایسے کوئی اخطا ملی حل نہیں دیکھے جو معمول پر لانے کے متبادل ہوں اور یہ محض ایک اتفاق نہیں ہے۔ درج ذیل مسئلہ ثابت کریں: ایک بعدی مقید اخطا ملی حال نہیں پائے جاتے ہیں۔^{۷۷} 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 متبادل ہر حل $\psi \rightarrow 0$ ہوگا۔ اس حقیقت کو استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ یہ مستقل درحقیقت صفر ہوگا جس 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: مندرجہ ذیل کی صورت m کا ایک موتی ایک دائری چملا پر بے رگڑ حرکت کرتا ہے۔ چملا 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 مطابق احبازی توانائیاں دریافت کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ ہر ایک توانائی E_n کے لئے دو آپس میں غیر تابع حل پائے جاتے ہیں 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 اخطا ط کے بارے میں کیا کہیں گے (اور یہ مسئلہ یہاں کارآمد کیوں نہیں ہے)؟

^{۷۶} ایسے دو حل جن میں صرف جبوز ضربی کا منفرق پایا جاتا ہو (جن میں ایک مرتب معمول پر لانے کے بعد صرف دوری جبوز ϕ کا منفرق پایا جاتا ہو) درحقیقت ایک ہی حل کو ظاہر کرتے ہیں لہذا انہیں یہاں منفرج نہیں کہا جاسکتا ہے۔ یہاں ”منفرج“ سے مراد ”خطی طور پر غیر تابع“ ہے۔
degenerate^{۷۷}

^{۷۷} جب ہم باب ۳ میں دیکھیں گے، بلند ابعاد میں ایسی اخطا ط عام پائی جاتی ہیں۔ مندرجہ ذیل کی محفہ علیحدہ علیحدہ حصوں پر مشتمل نہیں ہے جن کے پچھلے حصے میں $V = \infty$ ہو۔ مثلاً دو تہی لامستثنائی کنویں مقید اخطا طی حال دیں گے جہاں ذرہ ایک یا دو سرے کنواں میں پایا جائے گا۔

باب ۳

قواعد و ضوابط

۳.۱ ہر مثنیٰ عامل کے امتیازی تفاعل

یوں ہم ہر مثنیٰ عاملین کے امتیازی تفاعل کی طرف متوجہ ہوتے ہیں (جو طبی طور پر متابل مشاہدہ کے تعین حالات ہوں گے)۔ ان کے دو اقسام ہیں: اگر طیف غیر مسلسل^۱ ہو (یعنی امتیازی افتدار الگ الگ ہوں) تب امتیازی تفاعلات ہلبرٹ فضا میں پائے جائیں گے اور یہ طبی طور پر متابل حصول حالات ہوں گے۔ اگر طیف استمراری^۲ ہو (یعنی امتیازی افتدار ایک پوری سعت کو بھرتے ہوں) تب امتیازی تفاعلات معمول پر لانے کے متابل نہیں ہوں گے اور یہ کسی بھی ممکنہ تفاعل موج کو ظاہر نہیں کر سکتے ہیں (اگرچہ ان کے خطی جوڑ، جن میں لازماً امتیازی افتدار کی ایک وسعت موجود ہوگی، معمول پر لانے کے متابل ہو سکتے ہیں)۔ کچھ عاملین کا صرف غیر مسلسل طیف ہوگا (مثلاً ہارمونی مرتعش کی ہیملٹنی)، کچھ کا صرف استمراری طیف ہوگا (مثلاً آزاد ذرہ کی ہیملٹنی)، اور کچھ کا ایک حصہ غیر مسلسل اور دوسرا حصہ استمراری ہوگا (مثلاً مستثنیٰ چپکور کنواں کی ہیملٹنی)۔ ان میں غیر مسلسل صورت نہایت زیادہ آسان ہے چونکہ ان کے متعلقہ اندرونی ضرب لازماً موجود ہوں گے؛ درحقیقت یہ مستثنیٰ الہادی نظریہ سے بہت مشابہت رکھتا ہے (ہر مثنیٰ عامل کے امتیازی سمتیت)۔ میں پہلے غیر مسلسل صورت کو اور اس کے بعد استمراری صورت کو دیکھوں گا۔

۳.۱.۱ غیر مسلسل طیف

ریاضیاتی طور پر ہر مثنیٰ عامل کے معمول پر لانے کے متابل امتیازی تفاعل کی دو اہم خصوصیات پائے جاتے ہیں: مسئلہ ۳.۱: ان کے امتیازی افتدار حقیقی ہوں گے۔

^۱ discrete
^۲ continuous

ثبوت: مندرجہ کریں

$$\hat{Q}f = qf$$

ہو (یعنی \hat{Q} کا امتیازی تفاعل f اور امتیازی مقدار q ہو) اور ^۲

$$\langle f | \hat{Q}f \rangle = \langle \hat{Q}f | f \rangle$$

ہو (\hat{Q} ہر مشی ہے)۔ تب درج ذیل ہوگا۔

$$q \langle f | f \rangle = q^* \langle f | f \rangle$$

(چونکہ q ایک عدد ہے لہذا اس کو مکمل سے باہر نکالا جاسکتا ہے، اور چونکہ اندرونی ضرب میں پہلا تفاعل مخلوط جوڑی دار ہے (ساوات 6.3) لہذا دائیں طرف q بھی جوڑی دار ہوگا)۔ تاہم $\langle f | f \rangle$ صفر نہیں ہو سکتا ہے (قوانین کے تحت $f(x) = 0$ امتیازی تفاعل نہیں ہو سکتا ہے) لہذا $q = q^*$ یعنی q حقیقی ہوگا۔

□

یہ باعث اطمینان ہے: تعیین حال میں ایک ذرہ کی متابل مشاہدہ کی پیشکش ایک حقیقی عدد دے گی۔

مسئلہ ۳.۲: انفرادی امتیازی مقدار کے متعلقہ امتیازی تفاعلات عمودی ہوں گے۔

ثبوت: درج ذیل کے ساتھ ساتھ مندرجہ کریں \hat{Q} ہر مشی ہے۔

$$\hat{Q}f = qf \quad \text{اور} \quad \hat{Q}g = q'g$$

تب $\langle f | \hat{Q}g \rangle = \langle \hat{Q}f | g \rangle$ ہوگا لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$q' \langle f | g \rangle = q^* \langle f | g \rangle$$

(یہاں بھی چونکہ ہم نے مندرجہ کیا ہے کہ امتیازی تفاعلات ہلبرٹ فضا میں پائے جاتے ہیں لہذا ان کے اندرونی ضرب موجود ہوں گے)۔ اب (مسئلہ ۳.۱ کے تحت) q حقیقی ہے، لہذا $q' \neq q$ کی صورت میں $\langle f | g \rangle = 0$ ہوگا۔

□

یہی وجہ ہے کہ لامستثنائی چپکور کنواں یا مثال کے طور پر ہارمونی سر تعش کے امتیازی حالات عمودی ہیں؛ یہ منفرد امتیازی مقدار والے ہیملٹنی کے امتیازی تفاعلات ہیں۔ تاہم یہ خاصیت صرف انہیں یا ہیملٹنی کے لئے مخصوص نہیں بلکہ کسی بھی متابل مشاہدہ کے تعیین حالات کی بھی ہوگی۔

^۲ یہ وہ موقع ہے جہاں ہم مندرجہ کرتے ہیں کہ امتیازی تفاعلات ہلبرٹ فضا میں پائے جاتے ہیں۔ دیگر صورت اندرونی ضرب غیر موجود ہو سکتا ہے۔

بد قسمتی سے مسئلہ ۲.۳ ہمیں انخطاطی حالات ($q' = q$) کے بارے میں کوئی معلومات فراہم نہیں کرتا۔ تاہم، اگر دو (یا دو سے زیادہ) امتیازی حالات ایک ہی (ایک دوسرے جیسا) امتیازی فتر رکھتے ہوں، تب ان کا ہر خطی جوڑ بھی اسی امتیازی فتر والا امتیازی حال ہوگا (سوال 7a.3) اور ہم گرام شد ترکیبے عمودیت^۴ (سوال A4) استعمال کرتے ہوئے ہر ایک انخطاطی ذیلی فضا میں عمودی امتیازی تفاعلات تشکیل دے سکتے ہیں۔ اصولی طور پر ایسا کرنا ہر صورت ممکن ہوگا، تاہم (شکر اللہ کا) ہمیں عموماً ایسا کرنے کی ضرورت پیش نہیں آئے گی۔ یوں انخطاط کی صورت میں بھی ہم عمودی امتیازی تفاعلات منتخب کر سکتے ہیں، اور کو انٹرمیکانیات کے ضوابط طے کرتے ہوئے ہم فرض کریں گے کہ ہم ایسا کر چکے ہیں۔ یوں ہم فوریت سے ترکیب استعمال کر سکتے ہیں جو اساس تفاعلات کی معیاری عمودیت پر مبنی ہے۔

مستثنای بعدی سمتی فضا میں ہر مشی فاعل کے امتیازی سمتیات تیسری بنیادی خاصیت بھی رکھتے ہیں۔ یہ فضا کو احاطہ کرتے ہیں (یعنی ہر سمتیہ کو ان کا خطی جوڑ لکھا جاسکتا ہے)۔ بد قسمتی سے اس کے ثبوت کو لامستثنای بعدی فضاوں تک وسعت نہیں دی جاسکتی ہے۔ تاہم یہ خاصیت کو انٹرمیکانیات کی اندرونی ہم آہنگی کیلئے لازم ہے لہذا (ذراک کی طرح) ہم اسے ایک مسلمہ (بلکہ متبادل مشاہدہ کو ظاہر کرنے والے ہر مشی عاملین پر اس کو مسلط شرط) لیتے ہیں۔

مسلمہ: متبادل مشاہدہ کے امتیازی تفاعلات مکمل ہوں گے: (ہلبرٹ فضا میں) ہر تفاعل کو ان کا خطی جوڑ لکھا جاسکتا ہے۔^۵

سوال ۳.۱:

۱. فرض کریں کہ عامل \hat{Q} کے دو امتیازی تفاعلات $f(x)$ اور $g(x)$ ہیں اور ان دونوں کا امتیازی فتر q ہے۔ دکھائیں کہ f اور g کا ہر خطی جوڑ از خود \hat{Q} کا امتیازی تفاعل ہوگا اور اس کا امتیازی فتر q ہوگا۔

ب. تصدیق کریں کہ $f(x) = e^x$ اور $g(x) = e^{-x}$ عامل d^2/dx^2 کے امتیازی تفاعل ہیں اور ان کا امتیازی اقدار ایک دوسرے جیسا ہے۔ تفاعل f اور g کے ایسے دو خطی جوڑ تشکیل دیں جو وقفہ $(-1, 1)$ پر عمودی امتیازی تفاعلات ہوں۔

سوال ۳.۲:

۱. تصدیق کریں کہ مثال 1.3 میں ہر مشی عامل کے امتیازی اقدار حقیقی ہیں۔ دکھائیں کہ (منفرد امتیازی اقدار کے) امتیازی تفاعلات عمودی ہیں۔

ب. یہی کچھ سوال 6.3 کے عامل کے لیے کریں۔

۳.۱.۲ استمراری طیف

ہر مشی عامل کا طیف استمراری ہونے کی صورت میں عین ممکن ہے کہ ان کے اندرونی ضرب غیر موجود ہوں، لہذا مسئلہ ۳.۱ اور مسئلہ ۳.۲ کے ثبوت کارآمد نہیں ہوں گے اور امتیازی تفاعلات معمول پر لانے کے متبادل نہیں ہوں گے۔

^۴Gram-Schmidt orthogonalization process

^۵چند مخصوص صورتوں میں مکملیت کو ثابت کیا جاسکتا ہے (مثلاً ہم جانتے ہیں کہ مسئلہ ڈرشلے کے تحت، لامستثنای چکور کواں کے ساکن حالات مکمل ہیں)۔ چند صورتوں میں متبادل ثبوت پہلو کو مسلمہ کہنا درست نظر نہیں آتا لیکن مجھے اس سے بہتر اصطلاح نہیں ملی۔

اس کے باوجود ایک لحاظ سے تین لازم خصوصیات (حقیقی ہونا، عمودیت اور مکلیت) اب بھی کارآمد ہوں گے۔ اس پر اسرار صورت کو ایک مخصوص مثال کی مدد سے سمجھنا بہتر ہوگا۔

مثال ۳.۱: معیار حرکت عامل کے امتیازی تفاعلات اور امتیازی اوتار تلاش کریں۔

حل: فرض کریں کہ p امتیازی وتر اور $f_p(x)$ امتیازی تفاعل ہے۔

$$(۳.۱) \quad \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} f_p(x) = p f_p(x)$$

اس کا عمومی حل درج ذیل ہوگا۔

$$f_p(x) = A e^{ipx/\hbar}$$

چونکہ p کی کسی بھی (مخلوط) قیمت کے لیے یہ متابل یکا مل مربع نہیں ہے؛ معیار حرکت عامل کے ہلبرٹ فضا میں کوئی امتیازی تفاعلات نہیں پائے جاتے ہیں۔ اس کے باوجود، اگر ہم حقیقی امتیازی اوتار تک اپنے آپ کو محدود رکھیں، ہمیں متبادل ”معیاری عمودیت“ حاصل ہوتی ہے۔ سوال ۲.۲۳-الف اور ۲.۲۶ کو دیکھ کر درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۲) \quad \int_{-\infty}^{\infty} f_{p'}^*(x) f_p(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx = |A|^2 2\pi\hbar \delta(p-p')$$

اگر ہم $A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$ لیں تب

$$(۳.۳) \quad f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

لہذا

$$(۳.۴) \quad \langle f_{p'} | f_p \rangle = \delta(p-p')$$

ہوگا جو حقیقی معیاری عمودیت (مساوات 10.3) یاد دلاتی ہے؛ یہاں اشاریہ استمراری متغیرات ہیں، اور کروئیکر ڈیلٹا کی جگہ ڈیراک ڈیلٹا پایا جاتا ہے؛ تاہم ان کے علاوہ یہ ایک دوسرے جیسے نظر آتے ہیں۔ مساوات ۳.۴ کو ڈیراک معیاری عمودیت کہوں گا۔

سب سے اہم بات یہ ہے کہ یہ امتیازی تفاعلات مکمل ہیں اور ان کے مجموعہ (مساوات 11.3) کی جگہ اب مکمل استعمال ہوتا ہے: کسی بھی (متابل یکا مل مربع) تفاعل $f(x)$ کو درج ذیل روپ میں لکھا جاسکتا ہے۔

$$(۳.۵) \quad f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) f_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) e^{ipx/\hbar} dp$$

پھیلاؤ عددی سر (جواب تفاعل $c(p)$ ہوگا) کو فورسیر ترکیب سے حاصل کیا جاسکتا ہے۔

$$(۳.۶) \quad \langle f_{p'} | f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \langle f_{p'} | f \rangle dp = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \delta(p - p') dp = c(p')$$

چونکہ یہ پھیلاؤ (مساوات ۳.۵) درحقیقت ایک فورسیر تبادل ہے لہذا انہیں مسئلہ پلانشرال (مساوات ۲.۱۰۲) سے بھی حاصل کیا جاسکتا ہے۔ □

معیار حرکت کے امتیازی تفاعلات (مساوات ۳.۳) سائن نمائیں جن کی طول موج درج ذیل ہے۔

$$(۳.۷) \quad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

یہ وہ ڈی بروگلی کلیہ (مساوات ۱.۳۹) ہے جس کا ثبوت موزوں وقت پر پیش کرنے کا وعدہ میں نے کیا تھا۔ یہ کلیہ ڈی بروگلی کے تصور سے زیادہ پراسرار ہے، چونکہ ہم اب جانتے ہیں کہ حقیقت میں ایسا کوئی ذرہ نہیں پایا جاتا جس کا معیار حرکت تعین ہو۔ ہاں، ہم تنگ سعت کی معیار حرکت کا ایسا موجی اکٹھ تفکیک دے سکتے ہیں جو معمول پر لانے کے قابل ہو اور جس پر ڈی بروگلی کا تعلق لاگو ہوگا۔

ہم مثال ۳.۱ سے کیا مطلب لیں؟ اگرچہ \hat{p} کا کوئی بھی امتیازی تفاعل ہلبرٹ فضا میں نہیں رہتا، ان کا ایک مخصوص کنب (جن کے امتیازی افتدار حقیقی ہوں گے) تدریجی ”مضافات“ میں رہتے ہیں اور یہ ہلبرٹ فضا میں معمول پر لانے کے متبادل ہیں۔ یہ طبعی طور پر ممکنہ حالات کو ظاہر نہیں کرتے لیکن اس کے باوجود کارآمد ثابت ہوتے ہیں (جیسا کہ بعد میں پتہ چلے گا)۔

مثال ۳.۲: عامل مقام کے امتیازی افتدار اور امتیازی تفاعلات تلاش کریں۔

حل: فرض کریں کہ y امتیازی تدر اور $g_y(x)$ امتیازی تفاعل ہے۔

$$(۳.۸) \quad x g_y(x) = y g_y(x)$$

یہاں (کسی بھی ایک امتیازی تفاعل کے لیے) y ایک مقررہ عدد، جبکہ x استمراری متغیر ہے۔ متغیر x کا ایسا کون سا تفاعل ہوگا جس کی خاصیت یہ ہو کہ اسے x سے ضرب دینا، اس کو y سے ضرب دینے کے مترادف ہو؟ ظاہر ہے کہ ماسوائے نقطہ $x = y$ کے ایسی خاصیت والا تفاعل صفر ہی ہوگا؛ درحقیقت یہ ڈیراک ڈیلٹا تفاعل ہوگا۔

$$g_y(x) = A\delta(x - y)$$

غیر حقیقی امتیازی افتدار والے امتیازی تفاعلات کے بارے میں کیا کہا جاسکتا ہے؟ یہ ناصرف معمول پر لانے کے متبادل نہیں بلکہ $\pm\infty$ پر بے فتابوڑ ہوتے ہیں۔ اس خطہ میں، جس کو میں ”مضافات“ کہہ چکا ہوں، اگرچہ تفاعلات کا اپنا (مستثنیٰ) اندرونی ضرب نہیں پایا جاتا، تاہم یہ ہلبرٹ فضا میں تمام ارکان کے ساتھ اندرونی ضرب دیتے ہیں۔ ایسا \hat{p} کے ان امتیازی تفاعلات کے لئے درست نہیں ہوگا جن کے امتیازی افتدار غیر حقیقی ہوں۔ بالخصوص، میں دکھا چکا ہوں کہ ہلبرٹ فضا میں تفاعلات کے لئے معیار حرکت عامل ہر مثنیٰ ہوگا، اگرچہ اس کا دلیل پیش کرتے ہوئے (مساوات 9.3 میں) سرحدی حیزو کو رد کیا گیا۔ (جب تک f ہلبرٹ فضا میں پایا جاتا ہو) یہ رکن تب بھی صفر ہوگا جب \hat{p} کا امتیازی تفاعل g ہو جس کا امتیازی تدر حقیقی ہو، تاہم امتیازی تدر کا خیالی حصہ ہونے کی صورت میں ایسا نہیں ہوگا۔ اس نقطہ نظر سے ہر مخلوط عدد، عامل \hat{p} کا امتیازی تدر ہوگا، تاہم صرف حقیقی اعداد ہر مثنیٰ عامل \hat{p} کے امتیازی افتدار ہوں گے؛ باقی اعداد اس خطہ سے باہر پائے جاتے ہیں جس میں \hat{p} ہر مثنیٰ ہو۔

اس مرتبہ امتیازی قدر کو لازماً حقیقی ہونا ہوگا: امتیازی تفاعلات متبادل یکا مثل مربع نہیں ہیں، تاہم اب بھی یہ ڈیراک معیاری عمودیت پر پورا اترتے ہیں۔

$$(۳.۹) \quad \int_{-\infty}^{\infty} g_y^* g_y(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y') \delta(x - y) dx = |A|^2 \delta(y - y')$$

اگر ہم $A = 1$ لیں تاکہ

$$(۳.۱۰) \quad g_y(x) = \delta(x - y)$$

ہو تب درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۱۱) \quad \langle g_{y'} | g_y \rangle = \delta(y - y')$$

یہ امتیازی تفاعلات بھی مکمل ہیں:

$$(۳.۱۲) \quad f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(y) g_y(x) dy = \int_{-\infty}^{\infty} c(y) \delta(x - y) dy,$$

جہاں درج ذیل ہوگا

$$(۳.۱۳) \quad c(y) = f(y)$$

(جس کا حصول اس مثال میں نہایت آسان تھا، تاہم آپ اس کو ترکیب فوریر سے بھی حاصل کر سکتے ہیں)۔ □

اگر ایک ہر مٹی عامل کا طیف استمراری ہو (لہذا اس کے امتیازی اقدار کو استمراری متغیر p یا یہاں پیش مثالوں میں y ، اور بعد ازاں عموماً z سے نام دیا جائے)، امتیازی تفاعلات معمول پر لانے کے متبادل نہیں ہوں گے، یہ ہلبرٹ فضا میں نہیں پائے جاتے اور یہ کسی بھی ممکنہ طبعی حالات کو ظاہر نہیں کرتے ہیں؛ ہاں حقیقی امتیازی اقدار والے امتیازی تفاعلات ڈیراک معیاری عمودیت پر پورا اترتے اور مکمل ہوں گے (جہاں مجموعہ کی جگہ اب مکمل ہوگا)۔ خوش قسمتی سے ہمیں صرف اتنا ہی چاہیے تھا۔ سوال ۳.۳:

ا. باب ۲ سے (ہارمونی سر تعش کے علاوہ) ایک ایسے ہیملٹنی کی نشاندہی کریں جس کا طیف صرف غیر مسلسل ہو۔

ب. باب ۲ سے (آزاد ذرہ کے علاوہ) ایک ایسے ہیملٹنی کی نشاندہی کریں جس کا طیف صرف استمراری ہو۔

ج. باب ۲ سے (مستثنیٰ چکور کنواں کے علاوہ) ایک ایسے ہیملٹنی کی نشاندہی کریں جس کے طیف کا کچھ حصہ غیر مسلسل اور کچھ استمراری ہو۔

سوال ۳.۴: کیا لامتناہی چکور کنواں کا زمینی حال معیار حرکت کا امتیازی تفاعل ہے؟ اگر ایسا ہے تب اس کا معیار حرکت کیا ہوگا؟ اگر ایسا نہیں ہے تب ایسا کیوں نہیں ہے؟

سوال ۳.۵: توانائی و وقت کی عدم یقینیت کے اصول کا ایک دلچسپ روپ $\Delta t = \tau / \pi$ ہے جہاں ابتدائی حال $\Psi(x, 0)$ کے عمودی حال تک $\Psi(x, t)$ کی ارتقا کے لیے درکار وقت τ ہے۔ دو (معیاری عمودی) ساکن حالات کے برابر حصوں پر مشتمل (اختیاری) مخفیہ کا تفاعل عمل موج $\Psi(x, 0) = 1/\sqrt{2}[\psi_1(x) + \psi_2(x)]$ استعمال کرتے ہوئے اس کی چانچ پڑتال کریں۔

سوال ۳.۶: ہارمونی مرتعش کے ساکن حالات کی (معیاری عمودی) اساس (مساوات ۲.۶۷) میں متالپی ارکان $\langle n|x|n' \rangle$ اور $\langle n|p|n' \rangle$ تلاش کریں۔ آپ سوال ۲.۱۲ میں متالپی وتری رکن $n = n'$ دریافت کر چکے ہیں؛ وہی ترکیب موجودہ عمومی مسئلے میں استعمال کریں۔ متعلقہ (لامتناہی) متالپ X اور P تشکیل دیں۔ دکھائیں کہ اساس میں $H = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{m\omega^2}{2}X^2$ وتری ہوگا۔ کیا اس کے وتری ارکان آپ کے توقع کے مطابق ہیں؟ حبزوی جواب:

$$\langle n|x|n' \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n'}\delta_{n,n'-1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1}) \quad (3.14)$$

سوال ۳.۷: ایک ہارمونی مرتعش ایسے حال میں ہے کہ اس کی توانائی کی پیمائش، ایک دوسرے جتنے احتمال کے ساتھ، $\hbar\omega/2$ یا $(3/2)\hbar\omega$ دے گی۔ اس حال میں $\langle p \rangle$ کی زیادہ سے زیادہ ممکن قیمت کیا ہو گی؟ اگر لمحہ $t = 0$ پر اس کی قیمت (یہی زیادہ سے زیادہ قیمت) ہو تب $\Psi(x, t)$ کیا ہوگا؟

سوال ۳.۸: 35-3 ہارمونی مرتعش کے اتساقی حالات۔ ہارمونی مرتعش کے ساکن حالات $\psi_n(x) = |n\rangle$ ، (مساوات ۲.۶۷) میں صرف $n = 0$ عین عدم یقینیت کی حد $\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$ پر ٹیختا ہے؛ جیسا آپ سوال ۲.۱۲ میں معلوم کر چکے ہیں عمومی طور پر $\sigma_x \sigma_p = (2n+1)\hbar/2$ ہوگا۔ تاہم چند خطی جوز (جنہیں اتساقی حالات^۹ کہتے ہیں) بھی عدم یقینیت کے حاصل ضرب کو کم سے کم بناتے ہیں۔ ہم دیکھتے ہیں کہ یہ عامل تشکیل^۹ کے امتیازی تفاعل ہوں گے

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

(جہاں امتیازی وتر α کوئی بھی مخلوط عدد ہو سکتا ہے)۔

۱. حال $|\alpha\rangle$ میں $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle p^2 \rangle$ دریافت کریں۔ اشارہ: مثال ۲.۵ کی ترکیب استعمال کریں اور یاد رکھیں کہ a_- کا ہر مثنیٰ جوزی دار a_+ ہے۔ مندرض نہ کریں کہ α حقیقی ہوگا۔

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

^۹coherent states

عامل رفعت کے ایسے امتیازی حالات جنہیں معمول پر لانا ممکن ہو نہیں پائے جاتے ہیں۔

ج. کسی بھی دوسرے تفاعل موج کی طرح، اتقاقی حال کو توانائی امتیازی حالات کا پھیلاؤ

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

لکھا جاسکتا ہے۔ دکھائیں کہ پھیلاؤ کے عددی سر درج ذیل ہونگے۔

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

د. $|\alpha\rangle$ کو معمول پر لاتے ہوئے c_0 تعین کریں۔ جواب: $e^{-|\alpha|^2/2}$

ه. اس کے ساتھ تالیت وقت

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

شمل کر کے دکھائیں کہ $|\alpha(t)\rangle$ اب بھی a کا امتیازی حال ہوگا، تاہم وقت کے ساتھ امتیازی قدر ارتقا پذیر ہوگا۔

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

یوں اتقاقی حال ہمیشہ اتقاقی حال ہی رہے گا اور عدم یقینیت کے حاصل ضرب کو کم سے کم کرتا رہے گا۔

و. کی ز مین حال $|n=0\rangle$ از خود اتقاقی حال ہوگا؟ اگر ایسا ہو تب امتیازی قدر کیا ہوگا۔

سوال ۳.۹: عدم یقینیت کا مبوط اصول۔ عدم یقینیت کا متعمم اصول (مساوات 62.3) درج ذیل کہتا ہے

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

جہاں $\hat{C} \equiv -i[\hat{A}, \hat{B}]$ ہے۔

ا. دکھائے کہ اس کو زیادہ مستحکم بن کر درج ذیل روپ میں لکھا جاسکتا ہے

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \frac{1}{4} (\langle C \rangle^2 + \langle D \rangle^2) \quad (3.15)$$

جہاں $\hat{D} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} - 2\langle A \rangle \langle B \rangle$ ہوگا۔ اشارہ: مساوات 60.3 میں z کا حقیقی جزو $\text{Re}(z)$ جزو لیں۔

ب. مساوات ۳.۱۵ کو $A = B$ صورت کے لئے جانچیں (چونکہ اس صورت میں $C = 0$ ہے لہذا معیاری عدم یقینیت اصول غیر اہم ہوگا؛ بد قسمتی سے عدم یقینیت کا مبوط اصول بھی زیادہ مددگار ثابت نہیں ہوتا ہے)۔

سوال ۱۰.۳: ایک نظام جو تین سطحی ہے کا ہیملٹنی درج ذیل متابل دیتا ہے

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

جہاں a ، b اور c حقیقی اعداد ہیں۔

ا. اگر اس نظام کا ابتدائی حال درج ذیل ہو تب $|s(t)\rangle$ کیا ہوگا؟

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

ب. اگر اس نظام کا ابتدائی حال درج ذیل ہو تب $|s(t)\rangle$ کیا ہوگا؟

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

سوال ۱۱.۳: ایک تین سطحی نظام کا ہیملٹنی درج ذیل متالب ظاہر کرتا ہے۔

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

باقی دو متابل مشاہدہ A اور B کو درج ذیل متالب ظاہر کرتے ہیں

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

جہاں ω ، λ اور μ حقیقی مثبت اعداد ہیں۔

ا. \mathbf{H} ، \mathbf{A} اور \mathbf{B} کے امتیازی افتدار اور (معمول پر لائے گئے) امتیازی سمتیات تلاش کریں۔

ب. یہ نظام عمومی حال

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

سے آغاز کرتا ہے جہاں $|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$ ہے۔ لمحہ $t=0$ پر A ، H اور B کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔

ج. لمحہ t پر $|s(t)\rangle$ کیا ہوگا؟ لمحہ t پر اس نظام کی توانائی کی پیمائش کیا قیمتیں دے سکتی ہے، اور ہر ایک قیمت کا انفرادی احتمال کیا ہوگا؟ انہیں سوالات کے جوابات B اور A کے لیے بھی تلاش دیں۔

سوال ۱۲. ۳:

۱. ایک تفاعل $f(x)$ جس کو ٹیلر تسلسل کی صورت میں پھیلا یا جا سکتا ہے کے لیے درج ذیل دکھائیں

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

(جہاں x_0 کوئی بھی مستقل فاصلہ ہو سکتا ہے)۔ اسی کی بن \hat{p}/\hbar کو فضا میں انتقال کا پیدا کار^{۱۰} کہتے ہیں۔ تبصرہ: عامل کی قوت نم کی تعریف درج ذیل طاقتی تسلسل پھیلاؤ دیتا ہے۔

$$e^{\hat{Q}} \equiv 1 + \hat{Q} + (1/2)\hat{Q}^2 + (1/3!)\hat{Q}^3 + \dots$$

ب. اگر (تابع وقت) شرودنگر مساوات کو $\Psi(x, t)$ مطمئن کرتا ہو تب درج ذیل دکھائیں

$$\Psi(x, t + t_0) = e^{-i\hat{H}t_0/\hbar} \Psi(x, t) \quad (۳.۱۶)$$

(جہاں t_0 کوئی بھی مستقل وقت ہو سکتا ہے)؛ اسی بن \hat{H}/\hbar کو وقت میں انتقال کا پیدا کار^{۱۱} کہتے ہیں۔

ج. دکھائیں لمحہ $t + t_0$ پر حرکی متغیر $Q(x, p, t)$ کی توقعاتی قیمت درج ذیل لکھی جا سکتی ہے۔^{۱۲}

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

اس کو استعمال کرتے ہوئے مساوات 3-71 حاصل کریں۔ اشارہ: t_0 کے لیے dt میں پہلے رتب تک پھیلائیں۔

^{۱۰} generator of translation in space

^{۱۱} generator of translation in time

^{۱۲} بالخصوص $t = 0$ کے لیے، t_0 کی زیرنوشت میں صفر لکھے بغیر

$$\langle Q(t) \rangle = \langle \Psi(x, t) | \hat{Q} | \Psi(x, t) \rangle = \langle \Psi(x, 0) | \hat{U}^{-1} \hat{Q} \hat{U} | \Psi(x, 0) \rangle$$

ہوگا جہاں $\hat{U} \equiv e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ ہے۔ یوں Q کی توقعاتی قیمت کا حساب کرتے ہوئے آپ \hat{Q} کو $\Psi(x, t)^*$ اور $\Psi(x, t)$ میں پھیلتے کر (تاہمیت

وقت کو تفسیر عمل موج کا حصہ بن کر) لکھ سکتے ہیں، جیسا ہم کرتے رہے ہیں، یا $\hat{U}^{-1} \hat{Q} \hat{U}$ کو $\Psi(x, 0)^*$ اور $\Psi(x, 0)$ میں پھیلتے کر (تاہمیت

وقت کو عامل کا حصہ بن کر) لکھ سکتے ہیں۔ اول الذکر کو شرودنگر تصویر کشی جبکہ موخر الذکر کو ہیبرنرگ تصویر کشی کہتے ہیں۔

سوال ۱۳.۳:

۱. ایک آزاد ذرہ کے لیے تابع وقت شرودنگر مساوات کو معیار حرکت فضا میں لکھ کر حل کریں۔ جواب:

$$(e^{-ip^2 t/2m\hbar} \Phi(p, 0))$$

ب. متحرک گاوسی موجی اکٹھ (سوال ۲.۴۳) کے لئے $\Phi(p, 0)$ تلاش کر کے اس صورت کے لئے $\Phi(p, t)$ تشکیل دیں۔ ساتھ ہی $|\Phi(p, t)|^2$ تشکیل دیں جو تابع وقت نہیں ہوگا۔

ج. Φ پر مبنی موزوں کمالات حل کرتے ہوئے $\langle p \rangle$ اور $\langle p^2 \rangle$ کی قیمتیں تلاش کر کے سوال ۲.۴۳ کی جوابات کے ساتھ موازنہ کریں۔

د. دکھائیں $\langle H \rangle = \langle p \rangle^2 / 2m + \langle H \rangle_0$ ہوگا (جہاں زیر نوشتہ میں 0 ساکن گاوسی ظاہر کرتا ہے) اور اپنے نتیجے پر تبصرہ کریں۔

باب ۴

تین ابعادی کوانٹم میکانیات

۴.۱ کروی محدود میں مساوات شرودنگر

تین ابعادی تک توسیع با آسانی کی جاسکتی ہے۔ مساوات شرودنگر درج ذیل کہتی ہے

$$(۴.۱) \quad i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = H\Psi;$$

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

$$(۴.۲) \quad p_x \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$$

ہیملٹنی اعمال H کو کلاسیکی توانائی

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

سے حاصل کیا جاتا ہے۔ مساوات ۴.۲ کو مختصر درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(۴.۳) \quad p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \nabla$$

یوں درج ذیل ہوگا

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

اچھاں کلاسیکی مشہور اور اعمال میں مشرق کرنا دشوار ہو، وہاں میں اعمال پر ”ٹوٹی“ کا نشان بنانا ہوں۔ اس باب میں ایسا کوئی موقع نہیں پایا جاتا جہاں ان کی پہچان مشکل ہو لہذا ایسا سے عاملین پر ”ٹوٹی“ کا نشان نہیں ڈالا جائے گا۔

جہاں

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (۴.۵)$$

کارٹیزی محدود میں لاپلاچ ہے۔

خفی تو انائی V اور تفاعل موج Ψ اب (x, y, z) اور t کے تفاعلات ہیں۔ لامتناہی چھوٹے حجم $d^3 r = dx dy dz$ میں ایک ذرہ پایا جانے کا احتمال $|\Psi(r, t)|^2 d^3 r$ ہوگا اور معمول زنی شرط درج ذیل ہوگی

$$\int |\Psi|^2 d^3 r = 1 \quad (۴.۶)$$

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

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

جہاں فنکشن تفاعل موج ψ_n غیر تابع وقت شرودنگر مساوات

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

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

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

جہاں مستقامت c_n ہمیشہ کی طرح ابتدائی تفاعل موج $\Psi(r, 0)$ سے حاصل کیے جائیں گے۔ (اگر مخفیہ استمراریہ حالات دیتی ہو تب مساوات ۴.۹ میں مجموعہ کی بجائے مکمل ہوگا۔)

سوال ۴.۱:

۱. عاملین r اور p کے تمام باضابطہ متبادلہ رشتے: $[x, y]$ ، $[x, p_y]$ ، $[x, p_x]$ ، $[p_y, p_z]$ ، وغیرہ وغیرہ، حاصل کریں۔

جواب:

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

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

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

$$(۳.۱۱) \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = \langle -\nabla V \rangle \quad \text{اور} \quad \frac{d}{dt} \langle r \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle$$

(ان میں سے ہر ایک درحقیقت تین مساوات کو ظاہر کرتی ہے۔ ایک مساوات ایک جسم کے لیے ہوگا۔) اشارہ: پہلے تصدیق کر لیں کہ مساوات 71.3 تین ابعاد کے لیے بھی کارآمد ہے۔

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

جواب:

$$(۳.۱۲) \quad \sigma_x \sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \sigma_y \sigma_{p_y} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \sigma_z \sigma_{p_z} \geq \frac{\hbar}{2}$$

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

۳.۱.۱ علیحدگی متغیرات

عموماً مخفی صرف مبداء سے فاصلہ کا تعلق ہوگا۔ ایسی صورت میں **کروی** محدودہ (r, θ, ϕ) کا استعمال بہتر ثابت ہوگا (شکل 4-1)۔ کروی محدودہ میں لاپلاسی درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$(۳.۱۳) \quad \nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

یوں کروی محدودہ میں تابع وقت شرودنگر مساوات درج ذیل ہوگی۔

$$(۳.۱۴) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) \right] + V\psi = E\psi$$

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

$$(۳.۱۵) \quad \psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

اس کو مساوات ۳.۱۴ میں پر کر کے

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

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

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

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

$$(۴.۱۶) \quad \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] = l(l+1)$$

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

سوال ۴.۲: کارٹیزی محدد میں علیحدگی مستغیرات استعمال کرتے ہوئے لامتناہی سرجمی کنواں (یا ڈب میں ایک ذرہ):

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

حل کریں۔

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

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

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

۴.۱.۲ زاویائی مساوات

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

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

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

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

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi) \quad (۴.۱۹)$$

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

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

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

$$\frac{1}{\Theta} \left[\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) \right] + l(l+1) \sin^2 \theta = m^2 \quad (۴.۲۰)$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2 \quad (۴.۲۱)$$

متغیر ϕ کی مساوات زیادہ آسان ہے۔

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

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

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi) \quad (۴.۲۳)$$

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

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (۴.۲۴)$$

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

^۸ یہ بظاہر معصوم شرط اتنی معصوم نہیں ہے۔ یاد رہے کہ m کی قیمت سے قطع نظر، احتمال $(|\Phi|^2)$ ایک قیمتی ہے۔ ہم حصہ 3.4 میں ایک مختلف طریقے سے، زیادہ پر زور دلیل پیش کر کے m پر مسلط شرط حاصل کریں گے۔

جدول ۴.۱: ابتدائی چند لیژانڈر کشیر رکنیاں۔

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

مساوات θ

$$(۴.۲۵) \quad \sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + [l(l+1) \sin^2 \theta - m^2] \Theta = 0$$

اتنی سادہ نہیں ہے۔ اس کا حل درج ذیل ہے

$$(۴.۲۶) \quad \Theta(\theta) = AP_l^m(\cos \theta)$$

جہاں P_l^m شریکے لیژانڈر تفاعل^۹ ہے جس کی تعریف درج ذیل ہے

$$(۴.۲۷) \quad P_l^m(x) \equiv (1-x^2)^{|m|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m|} P_l(x)$$

اور l ویں لیژانڈر کشیر رکنی کو $P_l(x)$ ظاہر کرتا ہے^{۱۰} جس کی تعریف کلیہ روڈریگیٹس^{۱۱}

$$(۴.۲۸) \quad P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2 - 1)^l$$

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

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1, \quad P_1(x) = \frac{1}{2} \frac{d}{dx} (x^2 - 1) = x, \\ P_2(x) &= \frac{1}{4 \cdot 2} \left(\frac{d}{dx} \right)^2 (x^2 - 1)^2 = \frac{1}{2} (3x^2 - 1) \end{aligned}$$

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

^۹ associated Legendre function
^{۱۰} دھیان رہے کہ $P_l^{-m} = P_l^m$ ہو گا۔
^{۱۱} Rodrigues formula

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

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

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

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

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

دھیان رہے کہ صرف غیر منفی عدد صحیح l کی صورت میں کلیہ روڈریگیس معنی خیز ہوگا؛ مزید $|m| > l$ کی صورت میں مساوات ۴.۲ کے تحت $P_l^m = 0$ ہوگا۔ یوں l کی کسی بھی مخصوص قیمت کے لئے m کی $(2l+1)$ ممکنہ قیمتیں ہوں گی:

$$(۴.۲۹) \quad l = 0, 1, 2, \dots; \quad m = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l$$

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

کروئی محدود میں جمعی رکن درج ذیل ہوگا

$$(۴.۳۰) \quad d^3 r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

لہذا معمولی شرط (مساوات ۴.۶) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$\int |\psi|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \int |R|^2 r^2 dr \int |Y|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1$$

مساوات θ (مساوات ۴.۲۵) کو مطمئن کرتی ہے۔ یہ (وہ) نامتناہل مقبول دوسرا حل ہے؛ اس میں کیا حیرانی ہے؟

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

سوال ۴.۶: کلیہ روڈریگیس سے ابتدا کر کے لیٹمانڈر کنشیرر کنیوں کی معیاری عمودیت کی شرط:

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

اخذ کریں۔ (اشارہ: کھل بالخص استعمال کریں۔)

۴.۱.۳ رداسی مساوات

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

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

نئے متغیرات استعمال کرتے ہوئے اس مساوات کی سادہ روپ حاصل کی جاسکتی ہے: درج ذیل لیئے

$$u(r) \equiv rR(r) \quad (۴.۳۶)$$

لہذا $(d/dr)[r^2(dR/dr)] = r d^2 u / dr^2$ ، $dR/dr = [r(du/dr) - u]/r^2$ ، $R = u/r$ درج ذیل ہوگا۔

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

اس کو رداسی مساوات^{۱۶} کہتے ہیں^{۱۷} جو شکل و صورت کے لحاظ سے یک بعدی شرودنگر مساوات (مساوات ۲.۵) کی طرح ہے، تاہم یہاں موثر مخفیہ^{۱۸} درج ذیل ہے

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

^{۱۶} radial equation

^{۱۷} یہاں m کمیت کو ظاہر کرتی ہے؛ رداسی مساوات میں علیحدگی مستقل m نہیں پایا جاتا ہے۔

^{۱۸} effective potential

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

$$\int_0^\infty |u|^2 dr = 1 \quad (۴.۳۹)$$

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

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

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

اس کے تفاعلات موج اور احبازتی توانائیاں تلاش کریں۔

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

$$\frac{d^2 u}{dr^2} = \left[\frac{l(l+1)}{r^2} - k^2 \right] u \quad (۴.۴۱)$$

جہاں ہمیشہ کی طرح درج ذیل ہوگا۔

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (۴.۴۲)$$

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

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

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

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

centrifugal term^{۱۹}

^{۱۹} دور حقیقت۔ ہم صرف انہی چاہتے ہیں کہ تفاعل موج معمول پر لانے کے قابل ہو؛ یہ ضروری نہیں کہ یہ مستحالی ہو؛ مساوات ۴.۳۱ میں $R(r) \sim 1/r$ معمول پر لانے کے قابل ہے۔

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

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

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

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

$$u(r) = Arj_l(kr) + Brn_l(kr). \quad (۴.۴۵)$$

بہت جانا پہچانا نہیں ہے جہاں $j_l(x)$ رتبہ l کا کروئی بیل ٹیٹل تفاعل^{۲۲} ہے اور $n_l(x)$ رتبہ l کا کروئی نیومن تفاعل^{۲۳} ہے جن کی تعریضات درج ذیل ہیں۔

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

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

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

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

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

ہوں گے، درج ذیل ہوں گے، وغیرہ وغیرہ۔

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

quantum numbers^{۲۱}

spherical Bessel function^{۲۲}

spherical Neumann function^{۲۳}

باب ۴. تین ابعادی کو انٹیم میکا نیات

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

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

دھیان رہے کہ مبدا پر بیل تفاعلات مستثنی ہیں جبکہ مبدا پر نیومن تفاعلات بے فتا بڑھتے ہیں۔ یوں ہمیں لازماً $B_l = 0$ منتخب کرنا ہوگا لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۴.۴۷) \quad R(r) = A j_l(kr)$$

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

$$(۴.۴۸) \quad j_l(ka) = 0$$

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

$$(۴.۴۹) \quad k = \frac{1}{a} \beta_{nl}$$

جہاں β_{nl} رتبہ l کروی بیل تفاعل کا n واں صفر ہوگا۔ یوں اجبازتی توانائیاں

$$(۴.۵۰) \quad E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \beta_{nl}^2.$$

اور تفاعلات موج درج ذیل ہوں گے

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

جہاں مستقل A_{nl} کا تعین معمولی ذنی سے کیا جاتا ہے۔ چونکہ l کی ہر ایک قیمت کے لئے m کی $(2l+1)$ مختلف قیمتیں پائی جاتی ہیں لہذا توانائی کی ہر سطح $(2l+1)$ گنا انحطاطی ہوگی (مساوات ۴.۲۹ دیکھیں)۔ □

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

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

سوال ۴.۸:

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

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

سوال ۴.۹: ایک ذرہ جس کی کیت m ہے کو مستناہی کروئی کٹواں:

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

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

۴.۲ ہائیڈروجن جوہر

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

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

لہذا رداسی مساوات ۴.۳ درج ذیل روپ اختیار کرے گی۔

$$(۴.۵۳) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu$$

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

باب ۴. تین ابعادی کوانٹم میکانیات

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

۴.۲.۱ رداسی تفاعل موج

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

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (۴.۵۴)$$

مساوات ۴.۵۳ کو E سے تقسیم کرنے سے

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

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

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

لہذا درج ذیل لکھا جائے گا۔

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u \quad (۴.۵۶)$$

اس کے بعد ہم حالات کی مفت تاربی رویہ پر غور کرتے ہیں۔ اب $\rho \rightarrow \infty$ کرنے سے قوسین کے اندر مستقل جزو غالب ہوگا لہذا (تخمیناً) درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

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

اس کا عمومی حل درج ذیل ہے

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

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

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

اس کے برعکس $0 \rightarrow \rho$ کی صورت میں مرکز گریز جزو غالب ہوگا؛^{۲۴} لہذا تخمیناً درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

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

جس کا عمومی حل (تصدیق کیجیے) درج ذیل ہوگا

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

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

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

اگلے قدم پر مفت رابی رویہ کو چھیلنے کی خاطر یہ افت عمل $v(\rho)$:

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

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

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

اور

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

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

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

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

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

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

ہمیں عددی سر (c_0 ، c_1 ، c_2 ، وغیرہ) تلاش کرنے ہوں گے۔ جبزودر جبزوتفرق لیتے ہیں۔

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

[میں نے دوسرے مجموعے میں ”مضریٰ اشاریہ“ j کو $j+1$ کہا ہے۔ اگر آپ کو یقین نہ ہو تو اولین چند اجزاء صریحاً لکھ کر تصدیق کر لیں۔ آپ سوال اٹھا سکتے ہیں کہ کیا مجموعہ $j = -1$ سے کیوں شروع نہیں کیا گیا؛ تاہم جبزومضریٰ $(j+1)$ اس جبزو کو ختم کرتا ہے لہذا ہم مضمر سے بھی شروع کر سکتے ہیں۔] دوبارہ تفرق لیتے ہیں۔

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

انہیں مساوات ۴.۶۱ میں پر کرتے ہیں۔

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

ایک جیسی طاقتوں کے عددی سروں کو مساوی رکھتے ہوئے

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

یا

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

ہوگا۔ یہ کلیہ تواری عددی سر تعین کرتے ہوئے تفاعل $v(\rho)$ تعین کرتا ہے۔ ہم c_0 سے شروع کر کے (جو مجموعی منتقل کاروب اختیار کرتا ہے جسے آخر میں معمول زنی سے حاصل کیا جائے گا)، مساوات ۴.۶۳ سے c_1 تعین کرتے ہیں؛ جس کو واپس اسی مساوات میں پر کر کے c_2 تعین ہوگا، وغیرہ، وغیرہ۔^{۲۵}

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

آئے j کی بڑی قیمت (جو ρ کی بڑی قیمت کے مطابقتی ہوں گے جہاں بلند طاقتیں غالب ہوں گی) کے لئے عددی سروں کی صورت دیکھے۔ یہاں کلیہ تواری درج ذیل کہتا ہے۔^{۲۶}

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

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

$$c_j = \frac{2^j}{j!} c_0 \quad (۴.۶۴)$$

لہذا

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

اور یوں درج ذیل ہوگا

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

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

$$c_{(j_{\text{بلند}}+1)} = 0 \quad (۴.۶۶)$$

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

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

صدر کو انٹیم عدد^{۲۷}

$$n \equiv j_{\text{بلند}} + l + 1 \quad (۴.۶۷)$$

^{۲۶} آپ پوچھ سکتے ہیں: شمار کنندہ میں $\rho_0 - 2(l+1)$ اور نمب نمب میں $2l+2$ رد کرنے کی طرح $j+1$ میں 1 کیوں رد نہیں کیا جاتا؟ اس تین میں ایک جاسکتا ہے، تاہم اسے رد نہ کرنے سے دلیل زیادہ واضح ہوگا۔ آپ 1 کو رد کر کے دیکھ سکتے ہیں کہ میں کیا کہتا چاہتا ہوں۔

^{۲۷} principal quantum number

باب ۴. تین ابعادی کوانٹم میکانیات

متعارف کرتے ہوئے درج ذیل ہوگا۔

$$\rho_0 = 2n \quad (۴.۶۸)$$

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

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

لہذا احبازتی توانائیاں درج ذیل ہوں گی۔

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

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

مساوات ۴.۵۵ اور ۴.۶۸ کو ملا کر درج ذیل حاصل ہوگا

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

جہاں

$$a \equiv \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (۴.۷۲)$$

رداء بوہر^{۲۹} کہلاتا ہے۔ یوں (مساوات ۴.۵۵ دوبارہ استعمال کرتے ہوئے) درج ذیل ہوگا۔

$$\rho = \frac{r}{an} \quad (۴.۷۳)$$

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

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

جہاں مساوات ۴.۳۶ اور ۴.۶۰ کو دیکھتے ہوئے

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

^{۲۸} Bohr formula

^{۲۹} Bohr radius

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

ہوگا جبکہ $v(\rho)$ متغیر ρ میں درجہ $n - l - 1$ = بندہ z کا کشیدہ رکھی ہوگا، جس کے عددی سر درجہ ذیل کلیہ توالی دے گا (اور پورے تق عمل کو معمول پر لانا باقی ہے)۔

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

زمینی حالت^{۳۱} (یعنی کم سے کم توانائی کے حال) کے لیے $n = 1$ ہوگا؛ طبعی مستقامت کی قیمتیں پر کرتے ہوئے درجہ ذیل حاصل ہوگا۔

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

ظاہر ہوا کہ ہائیڈروجن کی بندہ z توانائی^{۳۲} (زمینی حال میں الیکٹران کو درکار توانائی کی وہ مقدار جو جوہر کو بار بار دہرنا ہے) 13.6 eV ہے۔ مساوات ۴.۷۷ کے تحت $l = 0$ لہذا $m = 0$ ہوگا (مساوات ۴.۲۹ دیکھیے) یوں درجہ ذیل ہو گا۔

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

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

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

اس کو مساوات ۴.۳۱ کے تحت معمول پر لانے سے

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

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

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

اسی طرح $n = 2$ کے لئے توانائی

$$E_2 = \frac{-13.6 \text{ eV}}{4} = -3.4 \text{ eV} \quad (۴.۸۱)$$

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

ground state^{۳۱}
binding energy^{۳۲}

باب ۴. تین ابعادی کوانٹم میکانیات

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

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

[دھیان رہے کہ مختلف کوانٹم اعداد l اور n کے لئے پھیلاؤ عددی سر $\{c_j\}$ مکمل طور پر مختلف ہونگے۔] کلیہ
تو $l = 1$ کی صورت میں پہلے جب زو پر تسلسل کو اختتام پذیر کرتا ہے؛ $v(\rho)$ ایک مستقل ہوگا لہذا درج ذیل
حاصل ہوگا۔

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

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

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

$$(۴.۸۴) \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

جبکہ ہر l کے لئے m کی ممکنہ قیمتوں کی تعداد $(2l + 1)$ ہوگی (ساوات ۴.۲۹)، لہذا E_n سطح توانائی کی کل
انحطاطیت درج ذیل ہوگی۔

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

کشیر رکنی $v(\rho)$ (جو ساوات ۴.۷۶ کے کلیہ توانی سے حاصل ہوگی) ایک ایسا تفاعل ہے جس سے عملی
ریاضی دان بخوبی واقف ہیں؛ ماسوائے معمول زنی کے، اسے درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(۴.۸۶) \quad v(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho)$$

جہاں

$$(۴.۸۷) \quad L_{q-p}^p(x) \equiv (-1)^p \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_q(x)$$

ایک شریکے لاگنچر کثیر رکنی^{۳۳} ہے جبکہ

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

q ویں لاگنچر کثیر رکنی^{۳۴} ہے۔^{۳۵} (جدول ۴.۵ میں چند ابتدائی لاگنچر کثیر رکنیاں پیش کی گئی ہیں؛ جدول ۴.۶ میں

^{۳۳} associated Laguerre polynomial

جدول ۴.۵: ابتدائی چند لاگنج کشیر رکنیاں، $L_q(x)$

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

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

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

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

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

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

$$(۴.۸۹) \quad \psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l [L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na)] Y_l^m(\theta, \phi)$$

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

$$(۴.۹۰) \quad \int \psi_{nlm}^* \psi_{n'l'm'} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

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

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

سوال ۴.۱۰: کلیہ توانائی (مساوات ۴.۷۶) استعمال کرتے ہوئے تفاعل موج R_{30} ، R_{31} اور R_{32} حاصل کریں۔ انہیں معمول پر لانے کی ضرورت نہیں۔

سوال ۴.۱۱:

ا. مساوات ۴.۸۲ میں دیے گئے R_{20} کو معمول پر لا کر ψ_{200} تیار کریں۔

ب. مساوات ۴.۸۳ میں دیے گئے R_{21} کو معمول پر لا کر ψ_{211} ، ψ_{210} اور ψ_{21-1} تیار کریں۔

سوال ۴.۱۲:

ا. مساوات ۴.۸۸ استعمال کرتے ہوئے ابتدائی چار لائیج کشیر رکنیاں حاصل کریں۔

ب. مساوات ۴.۸۶، ۴.۸۷ اور ۴.۸۸ استعمال کرتے ہوئے $n = 5$ ، $l = 2$ کی صورت میں $v(\rho)$ تلاش کریں۔

ج. کلیہ توانائی (مساوات ۴.۷۶) استعمال کرتے ہوئے $n = 5$ ، $l = 2$ کی صورت میں $v(\rho)$ تلاش کریں۔

سوال ۴.۱۳:

Laguerre polynomial^{۴۴}

^{۴۵} دیگر علامتوں کی طرح ان کے لئے بھی کئی علامتیں استعمال کی جاتی ہیں۔ میں نے سب سے زیادہ مقبول علامتیں استعمال کی ہیں۔

باب ۴. تین ابعادی کوانٹم میکانیات

۱. ہائیڈروجن جوہر کے زمینی حال میں الیکٹران کے لیے $\langle r \rangle$ اور $\langle r^2 \rangle$ تلاش کریں۔ اپنے جواب کو رداس جوہر کی صورت میں لکھیں۔

ب. ہائیڈروجن جوہر کے زمینی حال میں الیکٹران کے لیے $\langle x \rangle$ اور $\langle x^2 \rangle$ تلاش کریں۔ اشارہ: آپکو کوئی نیا مکمل حاصل کرنے کی ضرورت نہیں۔ دھیان رہے کہ $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ ہوگا، اور از زمینی حال میں تشکلی کو بروئے کار لائیں۔

ج. حال $m = 1, l = 1, n = 2$ کے لیے $\langle x^2 \rangle$ تلاش کریں۔ انتباہ: یہ حال x, y, z کے لحاظ سے تشکلی نہیں ہے۔ یہاں $x = r \sin \theta \cos \phi$ استعمال کرنا ہوگا۔

سوال ۴.۱۴: ہائیڈروجن کے زمینی حال میں r کی کون سی قیمت زیادہ محتمل ہوگی۔ (اس کا جواب صفر نہیں ہے!) اشارہ: آپکو پہلے معلوم کرنا ہوگا کہ r اور $r + dr$ کے بیچ الیکٹران پائے جانے کا احتمال کیا ہوگا۔

سوال ۴.۱۵: ہائیڈروجن جوہر ساکن حال $m = 1, l = 1, n = 2$ اور $m = -1, l = 1, n = 2$ کے درج ذیل خطی جوڑے ابتداء کرتا ہے۔

$$\Psi(r, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{211} + \psi_{21-1})$$

۱. حال $\Psi(r, t)$ تیار کریں۔ اس کی سادہ ترین صورت حاصل کریں۔

ب. مخفی توانائی کی توقعاتی قیمت $\langle V \rangle$ تلاش کریں۔ (کیا یہ t کی تابع ہوگی؟) اصل کلیہ اور عددی جواب کو الیکٹران وولٹ تو صورت میں پیش کریں۔

۴.۲.۲ ہائیڈروجن کا طیف

اصولی طور پر ایک ہائیڈروجن جوہر جو ساکن حال ψ_{nlm} میں پایا جاتا ہو ہمیشہ کے لیے اسی حال میں رہے گا۔ تاہم اس کو (دوسرے جوہر کے ساتھ ٹکرا کر یا اس پر روشنی ڈال کر) چھیڑنے سے الیکٹران کسی دوسرے ساکن حال میں عبور کر سکتا ہے۔ یہ توانائی جذب کر کے زیادہ توانائی حال منتقل ہو سکتا ہے یا (عموماً برقی طبعی فوٹان کے احراج سے) توانائی خارج کر کے کم توانائی حال منتقل ہو سکتا ہے۔^{۳۷} عملاً ایسی چھیڑ خانیاں ہر وقت پائی جاتیں گی لہذا عبور (جنہیں ”کوانٹم چھلانگ“ کہتے ہیں) منتقل طور پر ہوتے رہیں گے، جن کی بنا ہائیڈروجن سے ہر وقت روشنی (فوٹان) خارج ہوگی جس کی توانائی ابتدائی اور اختتامی حالات کی توانائیوں کے فرق

$$E_\gamma = E_i - E_f = -13.6 \text{ eV} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \quad (۴.۹۱)$$

کے برابر ہوگا۔

^{۳۶}transition
۳۷فطر۱، اس میں تابع وقت باہم عمل پایا جائے گا جس کی تفصیل باب ۹ میں پیش کی جائے گی۔ یہاں اصل عمل جاننا ضروری نہیں ہے۔

اب کلیہ پلانک^{۳۸} کے تحت فوٹان کی توانائی اس کے تعدد کے راست تناسب ہوگی:

$$E_{\gamma} = h\nu \quad (۴.۹۲)$$

جبکہ طول موج $\lambda = c/\nu$ ہے لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (۴.۹۳)$$

جہاں

$$R \equiv \frac{m}{4\pi c \hbar^3} \left(\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \right)^2 = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \quad (۴.۹۴)$$

رڈبرگ^{۳۹} مستقل^{۴۰} کہلاتا ہے۔ مساوات ۴.۹۳ ہائیڈروجن کے طیف کا کلیہ رڈبرگ^{۴۱} ہے۔ یہ کلیہ انیسویں صدی میں تجرباتی طور پر اخذ کیا گیا۔ نظریہ بوہر کی سب سے بڑی فتح اس کلیے کا حصول ہے جو فطرت کے بنیادی مستقالات کی صورت میں R کی قیمت دیتا ہے۔ زمینی حال ($n_f = 1$) میں عبور، بالائے بصری خطہ میں پائے جاتے ہیں جنہیں طیف پیمانی کارلیماخ^{۴۲} تسلسل^{۴۳} کہتے ہیں۔ پہلی ہیجان حال ($n_f = 2$) میں عبور، دکھائی دینے والے خطہ میں روشنی پیدا کرتے ہیں جسے بالمر^{۴۴} تسلسل^{۴۵} کہتے ہیں۔ اسی طرح $n_f = 3$ میں عبور، پاشن^{۴۶} تسلسل^{۴۷} دیتے ہیں جو زیر بصری شعاع ہے، وغیرہ وغیرہ (شکل 7.4 دیکھیں)۔ (رہائشی حرارت پر زیادہ تر ہائیڈروجن جوہر زمینی حال میں ہونگے؛ اخراجی طیف حاصل کرنے کی خاطر آپکو پہلے مختلف ہیجان حالات میں الیکٹران آباد کرنے ہوں گے؛ ایسا عموماً گیس میں برقی شعلہ پیدا کر کے کیا جاتا ہے)۔ سوال ۳.۱۶: ہائیڈروجن جوہر Z پروٹان کے مرکزہ کے گرد طواف کرتے ہوئے ایک الیکٹران پر مشتمل ہے۔ (از خود ہائیڈروجن میں $Z = 1$ جبکہ باردارہ ہیلیم^{۴۸} میں $Z = 2$ اور دہری باردارہ لتیم^{۴۹} میں $Z = 3$ ہوگا، وغیرہ وغیرہ)۔ ہائیڈروجن جوہر کی بوہر توانائیاں $E_n(Z)$ ، بندشی توانائی $E_1(Z)$ ، رداس بوہر $a(Z)$ ، اور رڈبرگ مستقل $R(Z)$ تعیین کریں۔ (اپنے جوابات کو ہائیڈروجن کی متعلقہ قیمتوں کے لحاظ سے پیش کریں)۔ برقی طیفی طیف کے کس خطہ میں

Planck's formula^{۳۸}

^{۳۹} فوٹان در حقیقت برقی طیفی اخراج کا ایک کوانٹم ہے۔ یہ ایک اضافیتی چیز ہے جس پر غیر اضافی کوانٹم میکانیات متماثل استعمال نہیں ہے۔ اگرچہ ہم چند مواقع پر فوٹان کی بات کرتے ہوئے کلیہ پلانک سے اس کی توانائی حاصل کریں گے، یاد رہے کہ اس کا اس نظریہ سے کوئی تعلق نہیں جس پر ہم بات کر رہے ہیں۔

Rydberg constant^{۴۰}

Rydberg formula^{۴۱}

Lyman series^{۴۲}

Balmer series^{۴۳}

Paschen series^{۴۴}

Helium^{۴۵}

Lithium^{۴۶}

باب ۴. تین ابعادی کوانٹم میکانیات

$Z = 2$ اور $Z = 3$ کی صورت میں لیمن تسلسل پائے جائیں گے؟ اشارہ: کسی نے حساب کی ضرورت نہیں ہے؛ مخفیہ (مساوات ۴.۵۲) میں $e^2 \rightarrow Ze^2$ ہوگا لہذا تمام نتائج میں بھی یہی کچھ پر کرنا ہوگا۔

سوال ۴.۱: زمین اور سورج کو ہائیڈروجن جوہر کا متبادل تذبذبی نظام تصور کریں۔

۱. مساوات ۴.۵۲ کی جگہ مخفی توانائی تفاعل کیا ہوگا؟ (زمین کی کمیت m جبکہ سورج کی کمیت M لیں۔)

ب. اس نظام کا ”رداس بوجر“ a_g کیا ہوگا؟ اس کی عددی قیمت تلاش کریں۔

ج. تذبذبی کلیہ بوجر لکھ کر رداس r_0 کے مدار میں سیارہ کے کلاسیکی توانائی کو E_n کے برابر رکھ کر دکھائیں کہ $n = \sqrt{r_0/a_g}$ ہوگا۔ اس سے زمین کے کوانٹائی عدد n کی انداز قیمت تلاش کریں۔

د. فرض کریں زمین اگلی نچلی سطح $(n-1)$ میں عبور کرتی ہے۔ کتنی توانائی کا احسراج ہوگا؟ جواب حوالہ میں دیں۔
- حسراج فوٹان (یا زیادہ ممکنہ طور پر گریوٹاؤن) کا طول موج کیا ہوگا؟ (اپنے جواب کو نوری سالوں میں پیش کریں۔ کیا یہ حیرت انگیز نتیجہ محض ایک اتفاق ہے۔)

۴.۳ زاویائی معیار حرکت

ہم دیکھ چکے ہیں کہ ہائیڈروجن جوہر کے ساکن حالات کو تین کوانٹائی اعداد n ، l اور m کے لحاظ سے نام دیا جاتا ہے۔ صدر کوانٹم عدد (n) حال کی توانائی تعیین کرتا ہے (مساوات ۴.۷۰)؛ ہم دیکھیں گے کہ l اور m مداری زاویائی معیار حرکت سے تعلق رکھتے ہیں۔ کلاسیکی نظریہ میں وسطی قوتیں، توانائی اور معیار حرکت بنیادی بقائی مقداریں ہیں، اور یہ حیرت کی بات نہیں کہ کوانٹم میکانیات میں زاویائی معیار حرکت (اس سے بھی زیادہ اہمیت رکھتا ہے۔

کلاسیکی طور پر (مبادا کے لحاظ سے) ایک ذرہ کی زاویائی معیار حرکت درج ذیل کلیہ دیتا ہے

$$L = r \times p \quad (۴.۹۵)$$

جس کے تحت درج ذیل ہوگا۔

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x \quad (۴.۹۶)$$

ان کے متعلقہ کوانٹم عاملین معیاری نسخہ $p_x \rightarrow -i\hbar\partial/\partial x$ ، $p_y \rightarrow -i\hbar\partial/\partial y$ ، $p_z \rightarrow -i\hbar\partial/\partial z$ سے حاصل ہوں گے۔ باب ۲ میں ہم نے ہارمونی مرتعش کے احبازتی توانائیوں کو خالص الجبرائی ترکیب سے حاصل کیا۔ اگلے حصہ میں الجبرائی ترکیب استعمال کرتے ہوئے زاویائی معیار حرکت عاملین کے امتیازی اقدار حاصل کیے جائیں گے۔ یہ ترکیب، عاملین کے تبادلی تعلقات پر مبنی ہے۔ اس کے بعد ہم امتیازی تفاعلات حاصل کریں گے جو زیادہ دشوار کام ہے۔

۴.۳.۱ امتیازی افتدار

عملین L_x اور L_y آپس میں نامتبادل تبادیل ہیں۔ درحقیقت درج ذیل ہوگا۔

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ (۴.۹۷) \quad &= [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z] \end{aligned}$$

باب ۵

متمثال ذرات

باب ۶

غیر تابع وقت نظریہ اضطراب

باب ۷

تغییری اصول

باب ۸

و ک ب تخمین

باب ۹

تابع وقت نظریہ اضطراب

باب ۱۰

حرارت ناگزرتخمین

باب ۱۱

بجھراو

باب ۱۲

پس نوشت

جوابات

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

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

- اتفاق
حالات، 83
اجزائی
توانائیاں، 26
استمراری، 77
استمراریہ، 90
اصول
عدم یقینیت، 16
انتشاری
رشتہ، 54
انخطاطی، 75
انعکاس
شرح، 64
اوسط، 6
بقا
توانائی، 31
بندشی توانائی، 107
بوہر
رداس، 106
کلیہ، 106
بیل
کروی تقاعل، 99
پلائنگ
کلیہ، 113
پیداکار
فضا میں انتقال، 86
وقت میں انتقال، 86
پیداکار
تفاعل، 50
تبادلہ
باضابطہ رشتہ، 36
باضابطہ رشتہ، 90
تبادلہ کار، 36
تجدیدی عرصہ، 73
ترسیل
شرح، 64
تسل
بالہ، 113
پاشن، 113
excited, 27
ground, 27, 107
scattering, 58
statistical
interpretation, 2
step function, 66
theorem
Dirichlet's, 28
Ehrenfest, 15
Plancherel, 52
transition, 112
transmission
coefficient, 64
tunneling, 58, 65
turning points, 58
uncertainty principle, 16
variables
separation of, 19
variance, 7
velocity
group, 54
phase, 54
wave
incident, 64
packet, 52
reflected, 64
transmitted, 64
wave function, 1
wavelength, 16

- 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
عندروہ، 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
- ٹیلر، 34
طامتی، 35
فوریسر، 28
لیمان، 113
تغییریت، 7
تفاعل
ڈیلٹا، 59
تفاعل موج، 1
توالی
کلیہ، 46
توانائی
اجزائی، 22
توقعاتی
قیمت، 6
جفت
تفاعل، 24
حال
بھراؤ، 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

- 34، ہا
- کثافت
- احتمال، 8
- کشیر رکنی
- ہرمانٹ، 48
- کروی
- ہارمونیات، 96
- کلیہ
- ڈی پروگ، 16
- روڈریگیس، 49
- کوانٹم
- صدر عدد، 105
- کوانٹائی اعداد، 99
- کوانٹائی عدد
- استمیت، 96
- مقتطیسی، 96
- کوپن ہیگن مفہوم، 3
- گرام شمہ
- ترکیب عمودیت، 79
- گر کر، 4
- لاپلاسی، 90
- لاگ
- شریک کشیر رکنی، 108
- کشیر رکنی، 108
- لتصیم، 113
- لیڈانڈر
- شریک، 94
- متعمم
- تفاعیل، 59
- تقسیم، 59
- محمد
- کروی، 91
- مخفیہ، 12
- موثر، 97
- مشرقی
- ہارمونی، 25
- مسرکز 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 تفاعل، 99
- واپسی نقطہ، 58
- وسطانیہ، 6
- ہارمونی
- مشرقی، 25
- ہر مشی
- جوڑی دار، 40
- ہیزنبرگ تصویر کشی، 86
- ہیلیم، 113
- ہیملٹنی، 21end