کوانٹائی میکانیات

ایک تعارف

خالد خان یوسفزئی

جامعہ کامسیٹ، اسلام آباد
khalidyousafzai@hotmail.com

عنوان

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

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

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

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

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

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

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

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

اس کتاب کے پڑھنے والوں سے گزارش کی جاتی ہے کہ اسے زیادہ سے زیادہ طلبہ 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 سر زد ہوئی ہیں البتہ انہیں درست کرنے میں بہت لوگوں کا ہاتھ ہے۔ میں ان سب کا شکریہ ادا کرتا ہوں۔ یہ سلسلہ ابھی جاری ہے اور مکمل ہونے پر ان حضرات کے تاثرات یہاں شامل کئے جائیں گے۔

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

خالد خان یوسفزئی

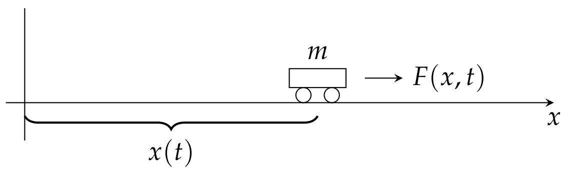
28 اکتوبر 2011

باب ۱

تفاعل موج

۱.۱ مساوات شروڈنگر

فرض کریں محور x پر رہنے کا پابند ایک ذرہ جس کی کمیت m ہو پر قوت $F(x,t)$ عمل کرتی ہے (شکل ۱.۱)۔ کلاسیکی میکانیات میں اس ذرے کا مقام $x(t)$ کسی بھی وقت t پر متعین کرنا درکار ہوتا ہے۔ ذرے کا مقام جاننے کے بعد ہم اس کا اسراع، سمتی رفتار $v = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$، معیار حرکت $p = mv$ یا حرکی توانائی $T = \frac{1}{2}mv^2$ یا کوئی اور حرکی متغیر جس میں ہم دلچسپی رکھتے ہوں، متعین کر سکتے ہیں۔ سوال پیدا ہوتا ہے کہ ہم $x(t)$ کیسے متعین 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 مخفی توانائی[1] پر تفرق لکھا جا سکتا ہے $F = -\frac{\partial V}{\partial x}$، لہٰذا نیوٹن کا قانون $m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}$ لکھا جائے گا۔) ابتدائی معلومات، جو عموماً لمحہ $t = 0$ پر سمتی رفتار یا مقام ہوں گے، استعمال کرتے ہوئے اس مساوات کے ذریعہ ہم $x(t)$ دریافت کر سکتے ہیں۔



شکل ۱.۱: ایک مخصوص قوت کے پیش نظر ایک "ذرہ" ایک بُعد پر رہتے ہوئے حرکت کرنے پر مجبور ہے۔

[1] مقناطیسی قوتوں کے لئے ایسا نہیں ہو گا لیکن یہاں ہم ان کا تذکرہ نہیں کر رہے ہیں۔ نیز، اس کتاب میں ہم رفتار کو غیر اضافی $(v \ll c)$ تصور کریں گے۔

کوانٹائی میکانیات اس مسئلے کو بالکل مختلف انداز سے دیکھتی ہے۔ اب ہم ذرے کے **تفاعل موج**[۲]، جس کی علامت $\Psi(x,t)$ ہے، کو **مساوات شروڈنگر**[۳]:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial\Psi^2}{\partial x^2} + V\Psi \tag{۱.۱}$$

حل کر کے حاصل کرتے ہیں جہاں i منفی ایک (-1) کا جذر اور $\hbar$ پلانک مستقل، بلکہ اصل پلانک مستقل تقسیم 2π ہوگا۔

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054\,572\times10^{-34}\,\mathrm{J\,s} \tag{۱.۲}$$

شروڈنگر مساوات نیوٹن کے دوسرے قانون کا مماثل کردار ادا کرتی ہے۔ دی گئی ابتدائی معلومات (عموماً $\Psi(x,0)$) استعمال کرتے ہوئے مساوات شروڈنگر، مستقبل کے تمام اوقات کے لئے، $\Psi(x,t)$ کا تعین کرتی ہے، جیسے کلاسیکی میکانیات میں تمام مستقبل اوقات کے لئے قاعدہ نیوٹن $x(t)$ متعین 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 نقطے پر پایا جاتا ہو لیکن ایک تفاعل موج (جیسا کہ اس کے نام سے ظاہر ہے) فضا میں پھیلا ہوا پایا جاتا ہے۔ کسی بھی لمحے t پر یہ x کا تفاعل ہوگا۔ ایک تفاعل ایک ذرے کی حالت کو کس طرح بیان کر پائے گا، اس کا جواب تفاعل موج کا **شماریاتی مفہوم**[۴] پیش کر کے جناب بارن نے دیا جس کے تحت لمحہ t پر نقطہ x پر ایک ذرہ پائے جانے کا احتمال $|\Psi(x,t)|^2$ ہوگا، بلکہ اس کا زیادہ درست روپ[۵] درج ذیل ہے۔

$$\int_a^b \left|\Psi(x,t)\right|^2 \mathrm{d}x = \begin{cases} \text{لمحہ } t \text{ پر } a \text{ اور } b \text{ کے بیچ} \\ \text{ایک ذرہ کے پائے جانے کا} \\ \text{احتمال} \end{cases} \tag{۱.۳}$$

احتمال $|\Psi|^2$ کی ترسیم کے نیچے رقبے کے برابر ہوگا۔ شکل ۱.۲ کی تفاعل موج کے لئے ذرہ غالباً نقطہ A پر پایا جائے گا جہاں $|\Psi|^2$ کی قیمت اعظم ہے جبکہ نقطہ B پر ذرہ غالباً نہیں پایا جائے گا۔

شماریاتی مفہوم کی بنا پر اس نظریے سے ذرے کے بارے میں تمام قابل حصول معلومات، یعنی اس کا تفاعل موج، جاننے کے باوجود ہم کوئی سادہ تجربہ کر کے ذرے کا مقام یا کوئی دیگر متغیر ٹھیک ٹھیک معلوم کرنے سے قاصر رہتے ہیں۔ کوانٹائی میکانیات ہمیں تمام ممکنہ نتائج کی صرف شماریاتی معلومات فراہم کر سکتی ہے۔

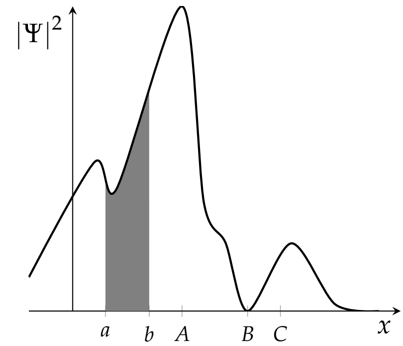
---

[۲] wavefunction

[۳] Schrodingeralign

[۴] statisticalinterpretation

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



شکل ۲.۱: ایک عمومی تفاعل موج۔ نقطہ a اور b کے بیچ ذرہ پایا جانے کا احتمال سایہ دار رقبہ دے گا۔ نقطہ A کے قریب ذرہ پایا جانے کا احتمال نسبتاً زیادہ ہو گا جبکہ B کے قریب ذرہ پایا جانے کا احتمال نہایت کم ہو گا۔

یوں کوانٹائی میکانیات میں **عدم تعین**[6] کا عنصر پایا جائے گا۔ کوانٹائی 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 کرتا ہے کہ آیا یہ کائنات کی ایک حقیقت ہے یا کوانٹائی میکانی نظریے میں کمی کا نتیجہ۔

فرض کریں کہ ہم ایک تجربہ کر کے معلوم کرتے ہیں کہ ایک ذرہ مقام C پر پایا[7] جاتا ہے۔ اب سوال پیدا ہوتا ہے کہ پیمائش سے فوراً قبل یہ ذرہ کہاں ہوتا ہو گا؟ اس کے تین ممکنہ جوابات ہیں جن سے آپ کو کوانٹائی عدم تعین کے بارے میں مختلف طبقات فکر کے بارے میں علم حاصل ہو گا۔

1) **حقیقت پسند**[8] سوچ: ذرہ مقام C پر تھا۔ یہ ایک معقول جواب ہے جس کی آئن شٹائن بھی وکالت کرتے تھے۔ اگر یہ درست ہو تب کوانٹائی میکانیات ایک نامکمل نظریہ ہو گی کیونکہ ذرہ دراصل نقطہ C پر ہی تھا اور کوانٹائی میکانیات ہمیں یہ معلومات فراہم کرنے سے قاصر رہی۔ حقیقت پسند سوچ رکھنے والوں کے مطابق عدم تعیّنیت فطرتاً نہیں پائی جاتی بلکہ یہ ہماری لاعلمی کا نتیجہ ہے۔ ان کے مطابق 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 اور ذرے کو مکمل طور پر بیان کرنے کے لئے (**خفیہ متغیرات**[9] کی صورت میں) مزید معلومات درکار ہوں گی۔

2) **تقلید پسند**[10] سوچ: ذرہ حقیقت میں کہیں پر بھی نہیں تھا۔ پیمائشی عمل ذرے کو مجبور کرتا ہے کہ وہ ایک مقام پر "ظاہر ہو جائے" (ہمیں اس بارے میں سوال کرنے کی اجازت نہیں کہ ذرہ مقام C کو کیوں منتخب کرتا ہے)۔ "مشاہدہ وہ عمل ہے جو نہ صرف پیمائش میں خلل ڈالتا ہے بلکہ یہ پیمائشی نتیجہ بھی پیدا کرتا ہے۔

[6] indeterminacy
[7] ظاہر ہے کوئی بھی پیمائشی آلہ کامل نہیں ہو سکتا ہے؛ میں صرف اتنا کہنا چاہتا ہوں کہ پیمائشی خلل کے اندر رہتے ہوئے یہ ذرہ نقطہ C کے قریب پایا گیا۔
[8] realist
[9] hiddenvariables
[10] orthodox

پیمائشی عمل ذرے کو مجبور کرتا ہے کہ وہ کسی مخصوص مقام کو اختیار کرے۔" ہم ذرے کو کسی ایک مقام کو منتخب کرنے پر مجبور کرتے ہیں۔ یہ تصور جو **کوپن ہیگن مفہوم**[۱۱] کہلاتا ہے جناب بوہر اور ان کے ساتھیوں سے منسوب ہے۔ ماہرین طبیعیات میں یہ تصور سب سے زیادہ مقبول ہے۔ اگر یہ تصور درست ہو تب پیمائشی عمل ایک انوکھا عمل ہے جو نصف صدی سے زائد عرصے کے بحث مباحثوں کے بعد بھی واضح نہیں۔

3) **انکاری**[۱۲] سوچ: جواب دینے سے گریز کریں۔ یہ سوچ اتنی بیوقوفانہ نہیں جتنی نظر آتی ہے۔ چونکہ کسی ذرے کا مقام جاننے کے لیے آپ کو ایک تجربہ کرنا ہو گا اور تجربے کے نتائج آنے تک وہ لمحہ ماضی بن چکا ہو گا۔ چونکہ کوئی بھی تجربہ ماضی کا حال نہیں بتا پاتا لہٰذا اس کے بارے میں بات کرنا بے معنی ہے۔

1964 تک تینوں طبقات فکر کے حامی پائے جاتے تھے البتہ اس سال جان بل نے ثابت کیا کہ تجربے سے قبل ذرے کا مقام ٹھیک ہونے یا نہ ہونے کا تجربے پر قابل مشاہدہ اثر پایا جاتا ہے (ظاہر ہے کہ ہمیں یہ مقام معلوم نہیں ہو گا)۔ اس ثبوت نے انکاری سوچ کو غلط ثابت کیا۔ اب حقیقت پسند اور تقلید پسند سوچ کے بیچ فیصلہ کرنا باقی ہے جو تجربہ کر کے کیا جا سکتا ہے۔ اس پر کتاب کے آخر میں بات کی جائے گی جب آپ کی علمی فکر اتنی بڑھ چکی ہو گی کہ آپ کو جان بل کی دلیل سمجھ میں آ سکے گی۔ یہاں اتنا بتانا کافی ہو گا کہ تجربات جان بل کی تقلید پسند سوچ کی درستگی کی تصدیق کرتے ہیں[۱۳]۔ جیسا جھیل میں موج ایک نقطے پر نہیں پائی جاتی، یوں قبل از تجربہ ایک ذرہ ٹھیک کسی ایک مقام پر نہیں پایا جاتا ہے۔ پیمائشی عمل ذرے کو ایک مخصوص عدد اختیار کرنے پر مجبور کرتے ہوئے ایک مخصوص نتیجہ پیدا کرتا ہے۔ یہ نتیجہ تفاعل موج کے عائد کردہ شماریاتی وزن کی پابندی کرتا ہے۔

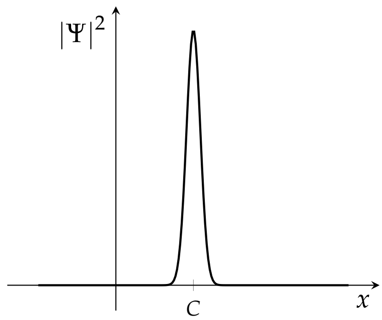
کیا ایک پیمائش کے فوراً بعد دوسری پیمائش وہی مقام C دے گی یا نیا مقام حاصل ہو گا؟ اس کے جواب پر سب متفق ہیں۔ ایک تجربے کے فوراً بعد (اسی ذرے پر) دوسرا تجربہ لازماً وہی مقام دوبارہ دے گا۔ حقیقت میں اگر دوسرا تجربہ مقام C کی تصدیق نہ کرے تب یہ ثابت کرنا نہایت مشکل ہو گا کہ پہلے تجربے میں مقام C ہی حاصل ہوا تھا۔ تقلید پسند اس کو کس طرح دیکھتا ہے کہ دوسری پیمائش ہر صورت C قیمت دے گی؟ ظاہری طور پر پہلی پیمائش تفاعل موج میں ایسی بنیادی تبدیلی پیدا کرتی ہے کہ تفاعل موج C پر نوکیلی صورت اختیار کرتا ہے جیسا کہ شکل ۱.۳ میں دکھایا گیا ہے۔ ہم کہتے ہیں کہ پیمائش کا عمل تفاعل موج کو نقطہ C پر **منہدم**[۱۴] کر کے اس کو سوزن بننے پر مجبور کرتا ہے (جس کے بعد تفاعل موج مساوات شروڈنگر کے تحت ارتقا پائے گا لہٰذا دوسری پیمائش جلد کرنا ضروری ہے)۔ اس طرح دو بہت مختلف طبیعی اعمال پائے جاتے ہیں: پہلے میں تفاعل موج وقت کے ساتھ مساوات شروڈنگر کے تحت

[۱۱] Copenhagen interpretation

[۱۲] agnostic

[۱۳] یہ فقرہ کچھ زیادہ مثالی ہے۔ چند نظریاتی اور تجرباتی مسائل باقی ہیں جن میں سے چند پر میں باب ۱۲ میں تبصرہ کروں گا۔ ایسے غیر مقامی خفیہ متغیر نظریات اور دیگر بناوٹیں مثلاً **متعدد دنیاوں جیسی** تشریح موجود ہیں جن کی تینوں سوچوں کے ساتھ مطابقت نہیں ہے۔ بہر حال، فی الحال بہتر ہے کہ ہم کوانٹائی نظریے کی بنیاد سیکھیں اور بعد میں اس طرح کے مسائل پر فکر کریں۔

[۱۴] collapses



شکل ۱.۳: تفاعل موج کا انہدام: اس لمحے کے فوراً بعد $|\Psi|^2$ کی ترسیم جب پیمائش سے ذرہ C پر پایا گیا ہو۔

ارتقا پاتا ہے، اور دوسرا جس میں پیمائش Ψ کو فوراً ایک جگہ غیر استمراری طور پر منہدم کرتی ہے[۱۵]۔

۱.۳ احتمال

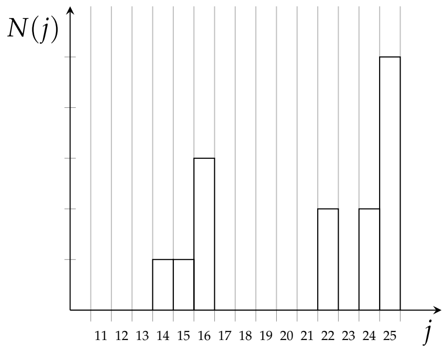
۱.۳.۱ غیر مسلسل متغیرات

چونکہ کوانٹائی میکانیات کی شماریاتی تشریح کی جاتی ہے لہٰذا 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 علامات اور اصطلاحات سیکھنی ہوں گی جنہیں میں ایک سادہ مثال کی مدد سے واضح کرتا ہوں۔

فرض کریں ایک کمرہ میں 14 افراد موجود ہیں جن کی عمریں درج ذیل ہیں۔

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

[۱۵] کوانٹائی میکانیات میں پیمائش کا کردار اتنا کلیدی اور حیران کن ہے کہ انسان سوچ میں پڑ جاتا ہے کہ پیمائش در حقیقت ہے کیا۔ کیا یہ خوردبینی (کوانٹائی) نظام اور کلاں بینی (کلاسیکی) پیمائشی آلات کے بیچ باہم عمل ہے (جیسے بوہر کہتے تھے)، یا اس کا تعلق مستقل نشانی چھوڑنے سے ہے (جیسے ہیزنبرگ مانتے تھے)، اور یا اس کا مدہوش "مشاہدہ کار" کی مداخلت سے تعلق ہے (جیسے وگنر نے تجویز کیا)؟ میں اس کٹھن مسئلہ پر دوبارہ باب ۱۲ میں بات کروں گا؛ ابھی کے لئے ہم سادہ سوچ لے کر چلتے ہیں: پیمائش سے مراد ایک ایسا عمل ہے جو سائنسدان تجربہ گاہ میں فیتا، گھڑی، وغیرہ استعمال کرتے ہوئے سرانجام دیتے ہیں۔)



شکل ۱.۴: مستطیلی ترسیم جس میں عمر j کے لحاظ سے تعداد $N(j)$ دکھائی گئی ہے۔

اگر j عمر کے لوگوں کی تعداد کو $N(j)$ لکھا جائے تو یوں لکھا جائے گا۔

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

جبکہ، مثال کے طور پر، $N(17)$ کی قیمت صفر ہو گی۔ کمرے میں افراد کی کل تعداد درج ذیل ہو گی۔

$$N = \sum_{j=0}^{\infty} N(j) \tag{۱.۴}$$

(اس مثال میں، ظاہر ہے کہ، $N = 14$ ہو گا۔) شکل ۱.۴ میں اس مواد کی مستطیلی ترسیم دکھائی گئی ہے۔ اس تقسیم کے بارے میں درج ذیل چند ممکنہ سوالات ابھرتے ہیں۔

سوال 1: اگر ہم اس گروہ سے بلا منصوبہ ایک فرد منتخب کریں تو اس بات کا کیا **احتمال** ہو گا کہ اس فرد کی عمر 15 سال ہو؟ جواب: چودہ میں ایک امکان ہو گا کیونکہ کل 14 افراد ہیں اور ہر ایک فرد کے انتخاب کا امکان ایک جیسا ہے لہٰذا ایسا ہونے کا احتمال چودہ میں سے ایک ہو گا۔ اگر j عمر کے فرد کے انتخاب کا احتمال $P(j)$ ہو تو $P(14) = 1/14$، $P(15) = 1/14$، $P(16) = 3/14$، وغیرہ ہو گا۔ اس کا عمومی کلیہ درج ذیل ہو گا۔

$$P(j) = \frac{N(j)}{N} \tag{۱.۵}$$

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

$$\sum_{j=0}^{\infty} P(j) = 1 \tag{۱.۶}$$

سوال 2: کونسی عمر سب سے **زیادہ محتمل**[۱۶] 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۔ عمومی طور پر سب سے زیادہ احتمال کا j وہی j ہو گا جس کے لئے $P(j)$ کی قیمت اعظم ہو۔

سوال 3: **وسطانیہ**[۱۷] عمر کیا ہے؟ جواب: چونکہ 7 لوگوں کی عمر 23 سے کم اور 7 لوگوں کی عمر 23 سے زیادہ ہے۔ لہٰذا جواب 23 ہو گا۔ (عمومی طور پر وسطانیہ j کی وہ قیمت ہو گی جس سے زیادہ اور جس سے کم قیمت کے نتائج کا احتمال ایک جیسا ہو۔)

سوال 4: ان کی **اوسط**[۱۸] عمر کتنی ہے؟ جواب:

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

عمومی طور پر j کی اوسط قیمت جس کو ہم $\langle j \rangle$ لکھتے ہیں، درج ذیل ہو گی۔

$$\langle j \rangle = \frac{\sum jN(j)}{N} = \sum_{j=0}^{\infty} jP(j) \tag{۱.۷}$$

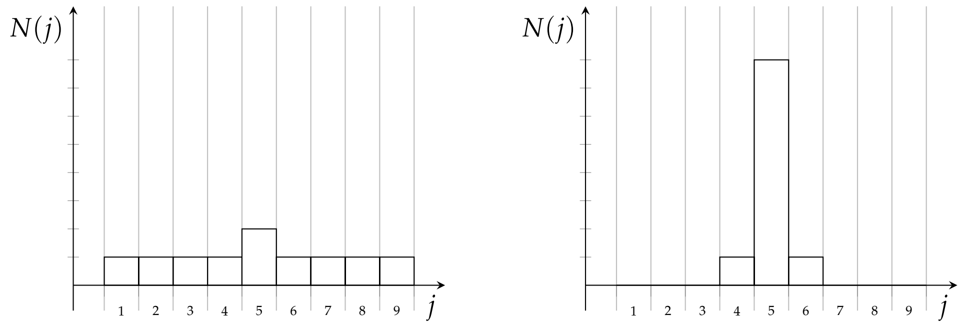
دھیان رہے کہ عین ممکن ہے کہ گروہ میں کسی کی بھی عمر گروہ کی اوسط یا وسطانیہ کے برابر نہ ہو۔ مثال کے طور پر، اس مثال میں کسی کی عمر بھی 21 یا 23 سال نہیں ہے۔ کوانٹائی میکانیات میں ہم عموماً اوسط قیمت میں دلچسپی رکھتے ہیں جس کو **توقعاتی قیمت**[۱۹] کا نام دیا گیا ہے۔

سوال 5: عمروں کے مربعوں کی اوسط کیا ہو گی؟ جواب: آپ $\frac{1}{14}$ احتمال سے $14^2 = 196$ حاصل کر سکتے ہیں، یا $\frac{1}{14}$ احتمال سے $15^2 = 225$، یا $\frac{3}{14}$ احتمال سے $16^2 = 256$، وغیرہ حاصل کر سکتے ہیں۔ یوں ان کے مربعوں کی اوسط درج ذیل ہو گی۔

$$\langle j^2 \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} j^2 P(j) \tag{۱.۸}$$

---

[۱۶] mostprobable
[۱۷] median
[۱۸] mean
[۱۹] expectationvalue



شکل ۱.۵: دونوں مستطیل ترسیمات میں وسطانیہ کی قیمت ایک جیسی ہے، اوسط کی قیمت ایک جیسی ہے اور سب سے زیادہ احتمال کی قیمت ایک جیسی ہے، تاہم ان ترسیمات میں معیاری انحراف مختلف ہیں۔

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

$$\langle f(j)\rangle = \sum_{j=0}^{\infty} f(j)P(j) \tag{۱.۹}$$

(مساوات ۱.۶، ۱.۷ اور ۱.۸ اس کی خصوصی صورتیں ہیں۔) یاد رہے کہ مربع کی اوسط $\langle j^2\rangle$ عموماً اوسط کے مربع $\langle j\rangle^2$ کے برابر نہیں ہو گی۔ مثال کے طور پر اگر ایک کمرے میں صرف دو بچے ہوں جن کی عمریں 1 اور 3 ہوں تب $\langle x^2\rangle = 5$ جبکہ $\langle x\rangle^2 = 4$ ہو گا۔

شکل ۱.۵ کی شکل و صورت میں واضح فرق پایا جاتا ہے اگرچہ ان کی اوسط کی قیمت ایک جیسی ہے، وسطانیہ کی قیمت ایک جیسی ہے، سب سے زیادہ احتمال کی قیمت ایک جیسی ہے اور اجزاء کی تعداد ایک جیسی ہے۔ ان میں پہلی شکل اوسط کے قریب نوکیلے ابھار جیسی ہے جبکہ دوسری شکل افقی چوڑی صورت رکھتی ہے۔ (مثال کے طور پر کسی بڑے شہر میں ایک جماعت میں طلبہ کی تعداد پہلی شکل کی مانند ہو گی جبکہ دیہاتی علاقے میں ایک ہی کمرے پر مبنی مکتب میں بچوں کی تعداد دوسری شکل سے ظاہر ہو گی۔) ہمیں اوسط قیمت کے لحاظ سے کسی بھی مقدار کی تقسیم کی "وسعت"، عددی صورت میں درکار ہو گی۔ اس کا ایک سیدھا طریقہ یہ ہو سکتا ہے کہ ہم ہر انفرادی جزو کی قیمت اور اوسط قیمت کا فرق

$$\Delta j = j - \langle j\rangle \tag{۱.۱۰}$$

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۔

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

(چونکہ $\langle j \rangle$ مستقل ہے لہٰذا اس کو مجموعے کی علامت سے باہر لے جایا جا سکتا ہے۔) اس مسئلے سے چھٹکارا حاصل کرنے کے لئے آپ Δj کی مطلق قیمتوں کی 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۔

$$\sigma^2 \equiv \langle (\Delta j)^2 \rangle \tag{۱.۱۱}$$

اس قیمت کو تقسیم کی **تغیریت**[۲۰] کہتے ہیں جبکہ تغیریت کے جذر σ کو **معیاری انحراف**[۲۱] کہتے ہیں۔ روایتی طور پر σ کو اوسط $\langle j \rangle$ کے گرد وسعت 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 یوں لکھ سکتے ہیں۔

$$\sigma = \sqrt{\langle j^2 \rangle - \langle j \rangle^2} \tag{۱.۱۲}$$

عملی استعمال میں σ اس کلیے سے بہت آسانی سے حاصل ہو گا۔ آپ $\langle j^2 \rangle$ اور $\langle j \rangle^2$ معلوم کر کے ان کے فرق کا جذر لے لیں۔ جیسا کہ میں ذکر کر چکا ہوں $\langle j^2 \rangle$ اور $\langle j \rangle^2$ عموماً ایک دوسرے کے برابر نہیں ہوں گے۔ جیسا کہ آپ مساوات ۱.۱۱ سے دیکھ سکتے ہیں σ^2 غیر منفی ہو گا، لہٰذا مساوات ۱.۱۲ سے مراد درج ذیل ہو گا

$$\langle j^2 \rangle \geq \langle j \rangle^2 \tag{۱.۱۳}$$

اور یہ دونوں صرف اس صورت میں برابر ہو سکتے ہیں جب $\sigma = 0$ ہو، جو تب ممکن ہو گا جب تقسیم میں کوئی وسعت نہ پائی جاتی ہو یعنی ہر جز و ایک ہی قیمت کا ہو۔

۱.۳.۲ استمراری متغیرات

اب تک ہم غیر مسلسل متغیرات کی بات کرتے آئے ہیں جن کی قیمتیں جداگانہ ہوتی ہیں (گزشتہ مثال میں ہم نے افراد کی عمروں کی بات کی جن کو سالوں میں ناپا جاتا ہے، لہٰذا j عدد صحیح تھا)۔ تاہم اس کو آسانی سے استمراری تقسیم تک وسعت دی جا سکتی ہے۔ اگر میں گلی میں بلا منصوبہ ایک شخص کا انتخاب کر کے

---

[۲۰] variance

[۲۱] standarddeviation

اس کی عمر پوچھوں تو اس کا احتمال صفر ہو گا کہ اس کی عمر ٹھیک 16 سال 4 گھنٹے، 27 منٹ اور 3.37524 سیکنڈ ہو۔ یہاں اس کی عمر کے 16 اور 17 سال کے بیچ ہونے کے احتمال کی بات کرنا معقول ہو گا۔ بہت کم وقفے کی صورت میں احتمال وقفے کی لمبائی کے راست متناسب ہو گا۔ مثال کے طور پر 16 سال اور 16 سال دو دن کے بیچ عمر کا احتمال، 16 سال اور 16 سال ایک دن کے بیچ عمر کے احتمال کا دگنا ہو گا۔ (سوائے ایسی صورت کے جب 16 سال قبل عین اسی دن کسی وجہ سے بہت زیادہ بچے پیدا ہوئے ہوں۔ ایسی صورت میں اس قاعدے کے اطلاق کے 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 رہنے کی خاطر، اس سے بھی کم دورانیے کا وقفہ لیں گے۔ تکنیکی طور پر ہم لامتناہی کم وقفے کی بات کر رہے ہیں۔) لہٰذا یوں لکھا جا سکتا ہے۔

$$\rho(x)\,\mathrm{d}x = \begin{cases} \text{بلا منصوبہ منتخب کیے گئے رکن کا } x \\ \text{اور } (x+\mathrm{d}x) \text{ کے بیچ پائے جانے} \\ \text{کا احتمال} \end{cases} \tag{۱.۱۴}$$

اس مساوات میں تناسبی مستقل $\rho(x)$ **کثافت احتمال**[۲۲] کہلاتا ہے۔ متناہی وقفہ a تا b کے بیچ x پائے جانے کا احتمال $\rho(x)$ کا تکمل دے گا:

$$P_{ab} = \int_a^b \rho(x)\,\mathrm{d}x \tag{۱.۱۵}$$

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

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)\,\mathrm{d}x, \tag{۱.۱۶}$$

$$< x > = \int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x)\,\mathrm{d}x, \tag{۱.۱۷}$$

$$\langle f(x)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x, \tag{۱.۱۸}$$

$$\sigma^2 \equiv \langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 \tag{۱.۱۹}$$

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 وقتی فاصلوں پر دس لاکھ تصاویر کھینچی جاتی ہیں۔ ہر تصویر پر طے شدہ فاصلہ ناپا جاتا ہے۔ ان تمام فاصلوں کی اوسط قیمت کیا ہو گی؟ یعنی طے شدہ فاصلوں کی وقتی اوسط کیا ہو گی؟[۲۳]

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

---

[۲۲] probabilitydensity

[۲۳] ایک ماہر شماریات کو شکوہ ہو گا کہ میں متناہی نمونے (جو یہاں دس لاکھ ہے) کی اوسط اور (پوری استمراریہ) پر "اصلی" اوسط میں فرق نہیں کر پا رہا۔ یہ تجربہ کرنے والے کے لئے مصیبت پیدا کر سکتا ہے، خصوصاً جب نمونی جسامت چھوٹی ہو، تاہم یہاں مجھے صرف اصل اوسط سے غرض ہے، اور نمونی اوسط اس کی اچھی تخمین ہے۔

درج ذیل ہو گا۔

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

اس کی سمتی رفتار $\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = gt$ ہو گی اور پرواز کا دورانیہ $T = \sqrt{2h/g}$ ہو گا۔ وقفہ $\mathrm{d}t$ میں تصویر کھینچنے کا احتمال $\frac{\mathrm{d}t}{T}$ ہو گا۔ یوں اس کا احتمال کہ ایک تصویر مطابقتی سعت $\mathrm{d}x$ میں فاصلہ دے درج ذیل ہو گا:

$$\frac{\mathrm{d}t}{T} = \frac{\mathrm{d}x}{gt}\sqrt{\frac{g}{2h}} = \frac{1}{2\sqrt{hx}}\,\mathrm{d}x$$

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

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

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

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

$$\int_0^h \frac{1}{2\sqrt{hx}}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2\sqrt{h}}\,\left(2x^{\frac{1}{2}}\right)\Big|_0^h = 1$$

مساوات ۱.۱۷ سے ہم اوسط فاصلہ تلاش کرتے ہیں

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

جو $\frac{h}{2}$ سے کچھ کم ہے، جیسے کہ ہمیں متوقع تھا۔

شکل ۱.۶ میں $\rho(x)$ کی ترسیم دکھائی گئی ہے۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ کثافت احتمال خود لامتناہی ہو سکتی ہے جبکہ احتمال (یعنی ρ کا تکمل) لازماً متناہی (بلکہ 1 یا 1 سے کم) ہو گا۔ □

سوال ۱.۱: حصہ ۱.۳.۱ میں اشخاص کی عمروں کی تقسیم کے لیے درج ذیل کریں۔

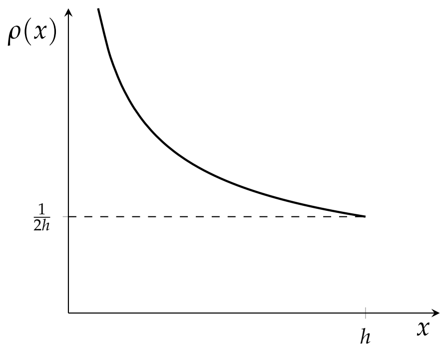
ا. اوسط کا مربع $\langle j \rangle^2$ اور مربعوں کا اوسط $\langle j^2 \rangle$ تلاش کریں۔

ب. ہر j کے لیے Δj دریافت کریں، اور مساوات ۱.۱۱ کو استعمال کر کے معیاری انحراف دریافت کریں۔

ج. جزو-الف اور جزو-ب کے نتائج استعمال کرتے ہوئے مساوات ۱.۱۲ کی تصدیق کریں۔

سوال ۱.۲:

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



شکل ۱.۶: کثافت احتمال برائے مثال ۱.۱: $\rho(x) = 1/(2\sqrt{hx})$

ب. بلاواسطہ منتخب کردہ تصویر میں، اوسط سے ایک معیاری انحراف (کے برابر فاصلہ) سے زیادہ دور، x پائے جانے کا احتمال کیا ہو گا؟

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

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

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

ا. مساوات ۱.۱۶ استعمال کرتے ہوئے A کی قیمت کا 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 معمول 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 $\left|\Psi(x,t)\right|^2$ ہو گی۔ یوں (مساوات ۱.۱۶) کے تحت $|\Psi|^2$ کا تکمل 1 کے برابر ہو گا (چونکہ ذرہ کہیں نہ کہیں تو ضرور پایا جائے گا)۔

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\Psi(x,t)\right|^2 \,\mathrm{d}x = 1 \tag{۱.۲۰}$$

اس حقیقت کے بغیر شماریاتی مفہوم بے معنی ہو گا۔

البتہ، یہ شرط آپ کے لیے پریشانی کا سبب ہونی چاہیے۔ تفاعل موج کا تعین مساوات شروڈنگر کرتی ہے اور Ψ پر بیرونی شرائط مسلط کرنا صرف اس صورت میں جائز ہوگا جب ان دونوں میں 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 نامعلوم ضربی مستقل کو یوں منتخب کر سکتے ہیں کہ مساوات ۱.۲۰ مطمئن ہو۔ اس عمل کو تفاعل موج کی **معمول زنی**[24] کہتے ہیں۔ ہم کہتے ہیں کہ تفاعل موج کی **معمول زنی** کریں۔ مساوات شروڈنگر کے بعض حلوں کا تکمل لامتناہی ہوگا؛ ایسی صورت میں کوئی بھی ضربی مستقل اس کو 1 کے برابر نہیں کر سکتا۔ یہی کچھ مہمل حل $\Psi = 0$ کے لیے بھی درست ہوگا۔ ایسا تفاعل موج جو **ناقابل معمول زنی**[25] ہو کسی صورت ایک ذرے کو ظاہر نہیں کر سکتا، لہٰذا اس کو رد کیا جاتا ہے۔ طبعی طور پر پائے جانے والے حالات، مساوات شروڈنگر کے **مربع متکامل**[26] حل ہونگے۔[27]

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

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

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\Psi(x,t)\right|^2\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi(x,t)\right|^2\mathrm{d}x \tag{۱.۲۱}$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\Psi \tag{۱.۲۲}$$

اب مساوات شروڈنگر کہتی ہے کہ

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V\Psi \tag{۱.۲۳}$$

---

[24] normalization
[25] non-normalizable
[26] square-integrable
[27] ظاہر ہے کہ $|x| \to \infty$ کی صورت میں $\Psi(x,t)$ کو $1/\sqrt{|x|}$ سے زیادہ تیز صفر تک پہنچنا ہوگا۔ معمول زنی صرف مخلوط عدد کے معیار کو درست کرتی ہے جبکہ اس کی ہیئت غیر معین رہتی ہے۔ تاہم جیسے ہم جلد دیکھیں گے، موخر الذکر کی کوئی طبعی اہمیت نہیں پائی جاتی۔

ہو گا اور ساتھ ہی (مساوات ۱.۲۳ کا مخلوط جوڑی دار لیتے ہوئے)

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V\Psi^* \tag{۱.۲۴}$$

ہو گا لہٰذا درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = \frac{i\hbar}{2m}\Big(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi^2\Big) = \frac{\partial}{\partial x}\Big[\frac{i\hbar}{2m}\Big(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\Big)\Big] \tag{۱.۲۵}$$

مساوات ۱.۲۱ میں تکمل کی قیمت اب صریحاً معلوم کی جا سکتی ہے۔

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}\big|\Psi(x,t)\big|^2\,\mathrm{d}x = \frac{i\hbar}{2m}\Big(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\Big)\Big|_{-\infty}^{+\infty} \tag{۱.۲۶}$$

یاد رہے کہ **قابل معمول زنی**[۲۸] ہونے کے لئے ضروری ہے کہ $x \to \pm\infty$ کرتے ہوئے $\Psi(x,t)$ صفر[۲۹] کو پہنچتا ہو۔ یوں درج ذیل ہو گا

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}\big|\Psi(x,t)\big|^2\,\mathrm{d}x = 0 \tag{۱.۲۷}$$

لہٰذا تکمل (وقت کا غیر تابع) مستقل ہو گا؛ لمحہ $t = 0$ پر معمول شدہ تفاعل موج ہمیشہ کے لئے معمول شدہ رہے گا۔

سوال ۱.۴: لمحہ $t = 0$ پر ایک ذرہ کو درج ذیل تفاعل موج ظاہر کرتا ہے جہاں A ، a اور b مستقلات ہیں۔

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

ا. تفاعل موج Ψ کی معمول زنی کریں (یعنی a اور b کی صورت میں A تلاش کریں)۔

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

ج. لمحہ $t = 0$ پر کس نقطے پر ذرہ پائے جانے کا احتمال سب سے زیادہ ہو گا؟

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

ہ. متغیر x کی توقعاتی قیمت کیا ہو گی؟

[۲۸] normalizable

[۲۹] ایک اچھا ریاضی دان آپ کو بہت سی گھمبیر مثالیں پیش کر سکتا ہے، تاہم طبیعیات کی میدان میں ایسے تفاعلات نہیں پائے جاتے؛ اور لامتناہی پر تفاعلات موج ہر صورت صفر کو پہنچتے ہیں۔

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

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

(ہم باب ۲ میں دیکھیں گے کہ کس طرح کا **مخفیہ**[30] V ایسا تفاعل موج پیدا کرتا ہے۔)

ا. تفاعل موج Ψ کی معمول زنی کریں۔

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

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

۱.۵ معیار حرکت

حال Ψ میں پائے جانے والے ذرے کے مقام x کی توقعاتی قیمت درج ذیل ہو گی۔

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

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 $\int x|\Psi|^2\,\mathrm{d}x$ حاصل ہو گی۔ اس کے برعکس: پہلی پیمائش (جس کا نتیجہ بلا تعیین ہے) اس قیمت پر تفاعل موج کو سوزن پر منہدم کرے گی جو پیمائش سے حاصل ہوئی ہو، اس کے بعد (اگر جلد) دوسری پیمائش کی جائے تو دوبارہ وہی نتیجہ حاصل ہو گا۔ حقیقت میں $\langle x\rangle$ ان ذرات کی پیمائشوں کا اوسط ہو گا جو یکساں حال Ψ میں پائے جاتے ہوں۔ یوں یا تو آپ ہر پیمائش کے بعد کسی طرح اس ذرے کو دوبارہ ابتدائی حال Ψ میں لائیں گے یا آپ متعدد ذرات کے **فرقہ**[31] کو ایک ہی حال Ψ میں لا کر تمام کے مقام کی پیمائش کریں گے۔ ان نتائج کا اوسط $\langle x\rangle$ ہو گا۔ (میں اس کی تصوراتی شکل یوں پیش کرتا ہوں کہ ایک الماری میں قطار میں 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 قریب ایک طالب علم کھڑا ہے جس کے ہاتھ میں ایک فیتہ ہے۔ جب اشارہ دیا جائے تو تمام طلبہ اپنے اپنے ذرے کا مقام ناپتے ہیں۔ ان نتائج کا مستطیلی ترسیم $|\Psi|^2$ کے لگ بھگ ہو گا، جبکہ ان کی اوسط قیمت تقریباً $\langle x\rangle$ ہو گی۔ (چونکہ ہم متناہی تعداد کے ذرات پر تجربہ کر رہے ہیں لہٰذا یہ توقع نہیں کی جا سکتی کہ جوابات عین درست حاصل ہوں گے، لیکن

[30] potential
[31] ensemble

بوتلوں کی تعداد بڑھانے سے نتائج نظریاتی جوابات کے زیادہ قریب حاصل ہوں گے۔)) مختصراً، توقعاتی قیمت ذرات کے فرق پر کیے جانے والے تجربات کی اوسط قیمت ہو گی نہ کہ کسی ایک ذرے پر بار بار تجربات کی نتائج کی اوسط قیمت۔

چونکہ Ψ وقت اور مقام کا تابع ہے لہٰذا وقت گزرنے کے ساتھ ساتھ $\langle x\rangle$ تبدیل ہو گا۔ ہمیں اس کی سمتی رفتار جاننے میں دلچسپی ہو سکتی ہے۔ مساوات ۱.۲۵ اور ۱.۲۸ سے درج ذیل[32] لکھا جا سکتا ہے۔

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = \int x\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2\,\mathrm{d}x = \frac{i\hbar}{2m}\int x\frac{\partial}{\partial x}\Big(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\Big)\,\mathrm{d}x \tag{۱.۲۹}$$

تکمل بالحصص[33] کی مدد سے اس فقرے کی سادہ صورت حاصل کرتے ہیں۔

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{i\hbar}{2m}\int\Big(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\Big)\,\mathrm{d}x \tag{۱.۳۰}$$

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

$$\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = -\frac{i\hbar}{m}\int\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\,\mathrm{d}x \tag{۱.۳۱}$$

اس نتیجے سے ہم کیا مطلب حاصل کر سکتے ہیں؟ یہ x کی توقعاتی قیمت کی سمتی رفتار ہے نہ کہ ذرے کی سمتی رفتار۔ ابھی تک ہم جو کچھ دیکھ چکے ہیں اس سے ذرے کی سمتی رفتار دریافت نہیں کی جا سکتی۔ کوانٹائی میکانیات میں ذرے کی سمتی رفتار کا مفہوم واضح نہیں ہے۔ اگر پیمائش سے قبل ایک ذرے کا مقام بلا تعیین ہو تب اس کی سمتی رفتار بھی بلا تعیین ہو گی۔ ہم ایک مخصوص قیمت کا نتیجہ حاصل کرنے کے احتمال کی صرف بات کر سکتے ہیں۔ ہم Ψ جانتے ہوئے کثافت احتمال کی بناوٹ باب ۳ میں دیکھیں گے۔ اب کے لیے صرف اتنا جاننا کافی ہے کہ سمتی رفتار کی توقعاتی قیمت ذرے کے مقام کی توقعاتی قیمت کا تفرق ہو گی۔

$$\langle v\rangle = \frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} \tag{۱.۳۲}$$

---

[32] چیزوں کو صاف صاف رکھنے کی خاطر میں تکمل کی حدود نہیں لکھ رہا ہوں۔
[33] قاعدہ ضرب کے تحت

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(fg) = f\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x} + \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}g$$

ہو گا، جس سے درج ذیل حاصل ہوتا ہے۔

$$\int_a^b f\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x = -\int_a^b\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}g\,\mathrm{d}x + fg\Big|_a^b$$

یوں تکمل کی علامت کے اندر، آپ حاصل ضرب میں کسی ایک جزو سے تفرق اتار کر دوسرے کے ساتھ چسپاں کر سکتے ہیں؛ اس کی قیمت آپ کو منفی علامت اور اضافی سرحدی جزو کی صورت میں ادا کرنی ہو گی۔

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

روایتی طور پر ہم سمتی رفتار کی بجائے **معیار حرکت**[۳۴] $p = mv$ کے ساتھ کام کرتے ہیں۔

$$\langle p\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = -i\hbar\int\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)\mathrm{d}x \tag{۱.۳۳}$$

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

$$\langle x\rangle = \int\Psi^*(x)\Psi\,\mathrm{d}x \tag{۱.۳۴}$$

$$\langle p\rangle = \int\Psi^*\Big(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Big)\Psi\,\mathrm{d}x \tag{۱.۳۵}$$

کوانٹائی میکانیات میں مقام کو **عامل**[۳۵] x "بیان" کرتا ہے اور معیار حرکت کو عامل $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ "بیان" کرتا[۳۶] ہے۔ کسی بھی توقعاتی قیمت کے حصول کی خاطر ہم موزوں عامل کو Ψ^* اور Ψ کے بیچ لکھ کر تکمل لیتے ہیں۔

یہ سب بہت اچھا ہے لیکن دیگر مقداروں کا کیا ہو گا؟ حقیقت یہ ہے کہ تمام کلاسیکی متغیرات کو مقام اور معیار حرکت کی صورت میں لکھا جا سکتا 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 جا سکتا ہے (جہاں یک بُعدی حرکت کے لئے زاویائی معیار حرکت نہیں پایا جاتا)۔ کسی بھی مقدار، مثلاً $Q(x,p)$، کی توقعاتی قیمت حاصل کرنے کے لیے ہم ہر p کی جگہ $\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$ پُر کر کے حاصل عامل کو Ψ^* اور Ψ کے بیچ لکھ کر درج ذیل تکمل حاصل کرتے ہیں۔

$$\langle Q(x,p)\rangle = \int\Psi^* Q\Big(x,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Big)\Psi\,\mathrm{d}x \tag{۱.۳۶}$$

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

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m}\int\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\,\mathrm{d}x \tag{۱.۳۷}$$

---

[۳۴] momentum

[۳۵] operator

[۳۶] ایک "عامل" آپ کو ہدایت دیتی ہے کہ عامل کے بعد آنے والے تفاعل کے ساتھ آپ کو کیا کرنا ہو گا۔ عامل مقام آپ سے کہتا ہے کہ آپ x سے ضرب دیں۔ عامل معیار حرکت کہتا ہے کہ x کے لحاظ سے تفرق لیں (اور نتیجہ کو $-i\hbar$ سے ضرب دیں)۔ اس کتاب میں تمام عاملین تفرقات ($\mathrm{d}/\mathrm{d}t$، $\mathrm{d}^2/\mathrm{d}t^2$، $\partial^2/\partial x\partial y$، وغیرہ) یا ضرب کار (2، i، x^2، وغیرہ)، اور یا ان دونوں کے ملاپ ہوں گے۔

حال Ψ میں ایک ذرے کی کسی بھی حرکی مقدار کی توقعاتی قیمت مساوات ۱.۳۶ سے حاصل ہو گی۔ مساوات ۱.۳۴ اور ۱.۳۵ اس کی دو مخصوص صورتیں ہیں۔ میں نے کوشش کی ہے کہ بوہر کی شماریاتی تشریح کو مد نظر رکھتے ہوئے، مساوات ۱.۳۶ قابل قبول نظر آئے، اگرچہ حقیقتاً یہ (کلاسیکی میکانیات کے لحاظ سے) کام کرنے کا اتنا نیا انداز ہے کہ بہتر ہو گا آپ اس کے استعمال کی مشق کریں؛ ہم (باب ۳ میں) اس کو زیادہ مضبوط نظریاتی بنیادوں پر قائم کریں گے۔ فی الحال آپ اس کو ایک مسلمہ تصور کر سکتے ہیں۔

سوال ۱.۶: آپ کیوں مساوات ۱.۲۹ کے وسطی فقرے پر تکمل بالحصص کرتے ہوئے، وقتی تفرق کو x کے اوپر سے گزار کر، یہ جانتے ہوئے کہ $\frac{\partial x}{\partial t} = 0$ ہے، فیصلہ نہیں کر سکتے کہ $\frac{\mathrm{d}\langle x\rangle}{\mathrm{d}t} = 0$ ہو گا؟

سوال ۱.۷: $\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t}$ حل کریں۔ جواب:

$$\frac{\mathrm{d}\langle p\rangle}{\mathrm{d}t} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle \tag{۱.۳۸}$$

مساوات ۱.۳۲ (مساوات ۱.۳۳ کا پہلا حصہ) اور ۱.۳۸ **مسئلہ اہرنفسٹ**[۳۷] کی مخصوص صورتیں ہیں، جو کہتا ہے کہ توقعاتی قیمتیں کلاسیکی قواعد کو مطمئن کرتی ہیں۔

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

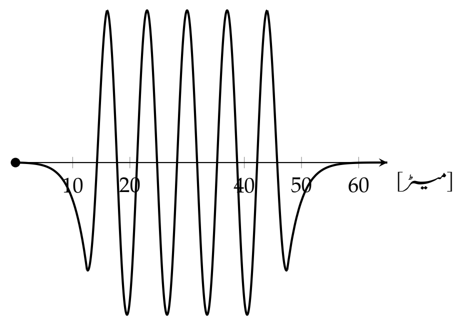
۱.۶ اصول عدم یقینیت

فرض کریں آپ ایک لمبی رسی کا بایاں سرا اوپر نیچے ہلا کر موج پیدا کرتے ہیں (شکل ۱.۷)۔ اب اگر پوچھا جائے کہ یہ موج عین کہاں پائی جاتی ہے، تو آپ غالباً اس کا جواب دینے سے قاصر ہونگے۔ موج کسی ایک جگہ نہیں بلکہ 60 میٹر لمبائی پر پائی جاتی ہے۔ اس کی بجائے اگر **طول موج**[۳۸] پوچھا جائے تو آپ اس کا معقول جواب دے سکتے ہیں: اس کا طول موج تقریباً 7 میٹر ہے۔ اس کے برعکس اگر آپ رسی کو ایک جھٹکا دیں تو ایک نوکیلی موج پیدا ہو گی (شکل ۱.۸)۔ یہ موج دوری نہیں ہے لہٰذا اس کے طول موج کی بات کرنا بے معنی ہو گا۔ اب آپ طول موج بتانے سے قاصر ہوں گے جبکہ موج کا مقام بتانا ممکن ہو گا۔ اول الذکر میں موج کا مقام پوچھنا بے معنی سوال ہو گا جبکہ موخر الذکر میں طول موج جاننا بے معنی ہو گا۔ ہم ان دو صورتوں کے بیچ کے حالات بھی پیدا کر سکتے ہیں جن میں مقام موج اور طول موج خاصی حد تک قابل تعین ہوں۔ تاہم ان صورتوں میں طول موج بہتر سے بہتر جانتے ہوئے مقام موج اقل بتانا ممکن ہو گا یا پھر مقام بہتر سے بہتر جانتے ہوئے طول موج قلیل قابل تعین ہو گا۔ فوریئر تجزیہ کا ایک مسئلہ ان حقائق کو مضبوط بنیادوں پر کھڑا کرتا ہے۔ فی الحال میں صرف کیفی دلائل پیش کرنا چاہتا ہوں۔

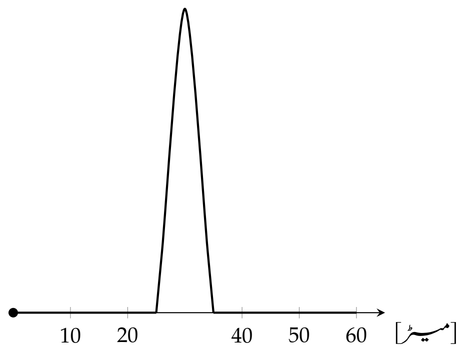
---

[۳۷] Ehrenfest's theorem

[۳۸] wavelength



شکل ١.٧: اس موج کا طول موج اچھی طرح معین جبکہ مقام بد معین ہے۔



شکل ١.٨: اس موج کا مقام اچھی طرح معین جبکہ طول موج بد معین ہے۔

یہ حقائق ہر موجی مظہر، بشمول کوانٹائی میکانی موج تفاعل، کے لیے درست ہیں۔ اب ایک ذرے کے Ψ کے طول موج اور معیار حرکت کا تعلق **کلیہ ڈی بروگلی**[۳۹]:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \tag{۱.۳۹}$$

پیش[۴۰] کرتا ہے۔ یوں طول موج میں وسعت معیار حرکت میں وسعت کے مترادف ہے اور اب ہمارا عمومی مشاہدہ یہ ہو گا کہ کسی ذرے کا مقام ٹھیک ٹھیک جانتے ہوئے ہم اس کا معیار حرکت درست نہیں جان سکتے۔ اس کو ریاضیاتی روپ میں لکھتے ہیں:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{۱.۴۰}$$

جہاں σ_x اور σ_p بالترتیب x اور p کے معیاری انحراف ہیں۔ یہ ہیزنبرگ کا مشہور **اصول عدم یقینیت**[۴۱] ہے۔ (اس کا ثبوت باب ۳ میں پیش کیا جائے گا۔ میں نے اس کا ذکر یہاں اس لئے کیا کہ آپ باب ۲ کی مثالوں میں اس کا استعمال سیکھ سکیں۔)

اس بات کی تسلی کر لیں کہ آپ اصول عدم یقینیت کا مطلب سمجھ گئے ہیں۔ مقام کی پیمائش کے ٹھیک ٹھیک نتائج کی طرح معیار حرکت کی پیمائش بھی ٹھیک ٹھیک نتائج دے گی۔ یہاں "وسعت" سے مراد یہ ہے کہ یکساں تیار کردہ نظاموں پر پیمائشیں بالکل ایک جیسے نتائج نہیں دیں گی۔ آپ چاہیں تو (Ψ کو سوزنی بنا کر)

---

[۳۹] DeBroglieformula

[۴۰] میں اس کا ثبوت جلد پیش کروں گا۔ بعض مصنفین کلیہ ڈی بروگلی کو ایک مسلمہ لے کر عامل $\frac{\hbar}{i}\partial/\partial x$ سے معیار حرکت کی شراکت اخذ کرتے ہیں۔ اگرچہ یہ تصور زیادہ خوش اسلوب ہے، تاہم میں اس راستے پر نہیں چلوں گا چونکہ اس میں پیچیدہ ریاضی درکار ہے جو اصل گفتگو سے توجہ ہٹاتی ہے۔

[۴۱] uncertaintyprinciple

ایسا حال تیار کر سکتے ہیں جس پر مقام کی پیمائشیں ایک دوسرے سے قریب نتائج دیں لیکن ایسی صورت میں معیار حرکت کی پیمائشوں کے نتائج ایک دوسرے سے بہت مختلف ہوں گے۔ اس طرح آپ چاہیں تو (Ψ کو ایک لمبی سائن نما موج بنا کر) ایسا حال تیار کر سکتے ہیں جس پر معیار حرکت کی پیمائشوں کے نتائج ایک دوسرے کے قریب ہوں گے لیکن ایسی صورت میں ذرے کے مقام کی پیمائشوں کے نتائج ایک دوسرے سے بہت مختلف ہوں گے۔ آپ ایسا حال بھی تیار کر سکتے ہیں جس میں نہ مقام نہ معیار حرکت ٹھیک سے معلوم ہو۔ مساوات ۱.۴۰ در حقیقت ایک عدم مساوات ہے جس میں σ_x اور σ_p کی جسامت کی کوئی حد مقرر نہیں۔ آپ Ψ کو لمبی ٹیڑھی میڑھی لکیر بنا کر، جس میں بہت سارے پیچ و خم ہوں اور جس میں کوئی تواتر نہ 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۔

ا. مستقل A تلاش کریں۔

ب. کس مخفی توانائی تفاعل $V(x)$ کے لیے Ψ مساوات شروڈنگر 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 اترتا ہے؟

اضافی سوالات برائے باب ۱

سوال ۱.۱۰: مستقل π کے ہندسی توسیع کے اولین 25 ہندسوں $(3,1,4,1,5,9,\cdots)$ پر غور کریں۔

ا. اس گروہ سے بلا منصوبہ ایک ہندسہ منتخب کیا جاتا ہے۔ صفر تا نو ہر ہندسے کے انتخاب کا احتمال کیا ہو گا؟

ب. کس ہندسے کے انتخاب کا احتمال سب سے زیادہ ہو گا؟ وسطانیہ ہندسہ کونسا ہو گا؟ اوسط قیمت کیا ہو گی؟

ج. اس تقسیم کا معیاری انحراف کیا ہو گا؟

سوال ۱.۱۱: گاڑی کے رفتار پیما کی خراب سوئی آزادانہ طور پر حرکت کرتی ہے۔ ہر جھٹکے کے بعد یہ اطراف سے ٹکرا کر 0 اور π زاویوں کے بیچ آ کر رک جاتی ہے۔

ا. کثافت احتمال $\rho(\theta)$ کیا ہو گی؟ اشارہ: زاویہ θ اور $(\theta + \mathrm{d}\theta)$ کے بیچ سوئی کے رکنے کا احتمال $\rho(\theta)\,\mathrm{d}\theta$ ہو گا۔ متغیر θ کے لحاظ سے $\rho(\theta)$ کو وقفہ $-\frac{\pi}{2}$ تا $\frac{3\pi}{2}$ ترسیم کریں (ظاہر ہے اس وقفے کا کچھ حصہ درکار نہیں ہے، لہٰذا ρ یہاں صفر ہو گا)۔ تصدیق کریں کہ کل احتمال 1 ہے۔

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۔

سوال ۱.۱۲: ہم گزشتہ سوال کے رفتار پیما کی سوئی پر دوبارہ بات کرتے ہیں تاہم اس مرتبہ ہم سوئی کے سر کے x محدد (یعنی افقی لکیر پر سوئی کے سائے) میں دلچسپی رکھتے ہیں۔

ا. $\rho(x)$ کی کثافت احتمال کیا ہو گی؟ x کے لحاظ سے $\rho(x)$ کو $-2r$ تا $+2r$ ترسیم کریں، جہاں r سوئی کی لمبائی ہے۔ ثابت کریں کہ کل احتمال 1 ہے۔ اشارہ: x اور $(x + \mathrm{d}x)$ کے بیچ ψ کی موجودگی کا احتمال $\rho(x)\,\mathrm{d}x$ ہے۔ آپ (سوال ۱.۱۱ سے) کو معلوم ہے کہ کسی مخصوص سمت میں θ کا احتمال کیا ہے؛ سوال یہ ہے کہ $\mathrm{d}\theta$ کا مطابقتی $\mathrm{d}x$ کیا ہو گا؟

ب. اس تقسیم کے لیے $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ اور σ تلاش کریں۔ آپ ان قیمتوں کو سوال ۱.۱۱ کے جزو-ج سے کس طرح حاصل کر سکتے ہیں؟

سوال ۱.۱۳: ایک کاغذ پر کچھ افقی لکیریں کھینچی جاتی ہیں جن کے درمیان فاصلہ L رکھا جاتا ہے۔ کچھ بلندی سے اس کاغذ پر L لمبائی کی ایک سوئی گرائی جاتی ہے۔ کیا احتمال ہو گا کہ یہ سوئی کسی لکیر کو کاٹ کر صفحے پر آن ٹھہرے۔ اشارہ: سوال ۱.۱۲ سے رجوع کریں۔

سوال ۱.۱۴: لمحہ t پر $(a < x < b)$ کے بیچ ایک ذرہ پائے جانے کا احتمال $P_{ab}(t)$ ہے۔

ا. درج ذیل دکھائیں

$$\frac{\mathrm{d}P_{ab}}{\mathrm{d}t} = J(a,t) - J(b,t)$$

جہاں

$$J(x,t) = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x} - \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)$$

ہے۔ $J(x,t)$ کی اکائی کیا ہو گی؟ تبصرہ: چونکہ J آپ کو بتاتا ہے کہ نقطہ x پر احتمال کس رفتار سے "گزرتا" ہے، لہٰذا J کو **رو احتمال**[۴۲] کہتے ہیں۔ اگر $P_{ab}(t)$ بڑھ رہا ہو تب خطے کے ایک سر میں احتمال کی آمد خطے کے دوسرے سر سے احتمال کے نکاس سے زیادہ ہو گی۔

ب. سوال ۱.۹ میں تفاعل موج کا احتمال ρ کیا ہو گا؟ (یہ بہت عمدہ مثال نہیں ہے؛ بہتر مثال جلد پیش کی جائے گی۔)

سوال ۱.۱۵: ایک **غیر متحکم ذرہ**[۴۳] فرض کریں، جس کا از خود ٹکڑے ٹکڑے ہونے کا "عرصہ حیات" τ ہے۔ ایسی صورت میں ذرے کے کہیں پائے جانے کا کل احتمال مستقل نہیں ہو گا، بلکہ وقت کے ساتھ (ممکنہ طور پر) قوت نمائی گھٹے گی۔

$$P(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \left|\Psi(x,t)\right|^2 \mathrm{d}x = e^{-t/\tau}$$

---

[۴۲] probabilitycurrent
[۴۳] unstableparticle

اس نتیجے کو (خام طریقے) سے حاصل کرتے ہیں۔ مساوات ۱.۲۴ میں ہم نے کہے بغیر فرض کیا کہ (مخفی توانائی) V ایک حقیقی مقدار ہے۔ یہ ایک معقول بات ہے، تاہم اس سے مساوات ۱.۲۷ میں دی گئی "احتمال کی بقا" پیدا ہوتی ہے۔ آئیں V کو مخلوط تصور کر کے دیکھیں:

$$V = V_0 - i\Gamma$$

جہاں V_0 حقیقی مخفی توانائی اور Γ مثبت حقیقی مستقل ہے۔

ا. یہ دکھائیں کہ اب (مساوات ۱.۲۷ کی جگہ) ہمیں درج ذیل ملتا ہے۔

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t} = -\frac{2\Gamma}{\hbar}p$$

ب. اس مساوات میں $P(t)$ تلاش کریں، اور ذرے کا عرصہ حیات Γ کی صورت میں حاصل کریں۔

سوال ۱.۱۶: مساوات شروڈنگر کے کسی بھی دو عدد (قابل معمول زنی) حل Ψ_1 ، Ψ_2 کے لئے درج ذیل ہو گا۔

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_1^*\Psi_2\,\mathrm{d}x = 0$$

سوال ۱.۱۷: ایک ذرے کو (لمحہ $t = 0$ پر) درج ذیل تفاعل موج ظاہر کرتا ہے۔

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} A(a^2 - x^2) & -a \leq x \leq +a \\ 0 & \text{بصورت دیگر} \end{cases}$$

ا. **معمول زنی مستقل**[۴۴] A تلاش کریں۔

ب. x کی توقعاتی قیمت (لمحہ $t = 0$ پر) تلاش کریں۔

ج. لمحہ $t = 0$ پر p کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔ یاد رہے، آپ اسے $P = m\,\mathrm{d}\langle x\rangle / \mathrm{d}t$ سے حاصل نہیں کر سکتے۔ ایسا کیوں ہے؟

د. x^2 کی توقعاتی قیمت دریافت کریں۔

ھ. p^2 کی توقعاتی قیمت دریافت کریں۔

و. $x(\sigma_x)$ میں عدم یقینیت دریافت کریں۔

ز. $p(\sigma_p)$ میں عدم یقینیت دریافت کریں۔

ح. تصدیق کریں کہ آپ کے نتائج اصول عدم یقینیت کے عین مطابق ہیں۔

---

[۴۴] normalization constant

سوال ۱.۱۸: عمومی طور پر کوانٹائی میکانیات اس وقت لاگو ہو گی جب ذرے کا ڈی بروگلی طول موج $(\hbar/p)$ نظام کی جسامت (d) سے زیادہ ہو۔ درجہ T (کیلون) پر حراری توازن میں ایک ذرے کی اوسط حر کی توانائی درج ذیل ہو گی

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{3}{2}k_b T$$

جہاں k_b بولٹزمن مستقل ہے، لہٰذا ڈی بروگلی طول موج درج ذیل ہو گا۔

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{3mk_B T}}$$

ہمیں معلوم کرنا ہے کہ کونسا نظام کوانٹائی میکانیات اور کونسا کلاسیکی میکانیات سے حل ہو گا۔

ا. **ٹھوس اجسام:** فاصلہ جال ٹھوس اجسام میں تقریباً $d = 0.3\,\text{nm}$ ہوتا ہے۔ وہ درجہ حرارت تلاش کریں جس پر ٹھوس جسم میں آزاد الیکٹران[45] کوانٹائی میکانی ہوں گے۔ نیز وہ درجہ حرارت تلاش کریں جس سے کم درجہ حرارت پر جوہری مراکزہ کوانٹائی میکانی ہوں گے۔ (**سوڈیم**[46] کی مثال لیں۔) سبق: ٹھوس اجسام میں آزاد الیکٹران ہر صورت کوانٹائی میکانی ہوں گے، جبکہ جوہری مراکزہ (تقریباً) کبھی بھی کوانٹائی میکانی نہیں ہوں گے۔ یہی کچھ مائع کے لیے بھی درست ہے (جہاں جوہروں کے بیچ فاصلہ اتنا ہی ہو گا) ماسوائے **ہیلیم**[47] کے جو $4\,\text{K}$ سے کم درجہ حرارت پر ہو۔

ب. **گیس:** میکانی دباو P پر کن درجات حرارت پر کامل گیس کے جوہر کوانٹائی میکانی ہوں گے۔ اشارہ: مثالی گیس قانون $(PV = Nk_B T)$ استعمال کر کے جوہروں کے درمیان فاصلہ دریافت کریں۔ جواب: $T < (1/k_B)(\hbar^2/3m)^{3/5}P^{2/5}$؛ ظاہر ہے ہم m کو چھوٹے سے چھوٹا اور P کو اتنا زیادہ چاہیں گے (کہ گیس کا رویہ کوانٹائی ہو)۔ زمینی ہوائی دباو پر ہیلیم کے اعداد استعمال کر کے نتیجہ حاصل کریں۔ کیا **بیرونی فضا**[48] میں (جہاں درجہ حرارت $3\,\text{K}$ اور جوہروں کے بیچ فاصلہ تقریباً $1\,\text{cm}$ ہے) ہائیڈروجن کوانٹائی میکانی ہو گا؟

---

[45] ٹھوس اجسام میں اندرونی الیکٹران کسی مخصوص مرکزے سے جڑے ہوتے ہیں، اور ان کے لئے موزوں فاصلہ، جوہر کا رداس ہو گا۔ اس کے برعکس، سب سے باہر کے الیکٹران کہیں نہیں جڑے ہوتے، اور ان کے لئے فاصلہ جال کو موزوں فاصلہ لیا جا سکتا ہے۔ یہ معاملہ سب سے باہر الیکٹران کے لئے ہے۔

[46] sodium

[47] helium

[48] outerspace

باب ۲

غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر

۲.۱ ساکن حالات

باب اول میں ہم نے تفاعل موج پر بات کی جہاں اس کا استعمال کرتے ہوئے دلچسپی کے مختلف مقداروں کا حساب کیا گیا۔ اب وقت آن پہنچا ہے کہ ہم کسی مخصوص مخفیہ[1] $V(x,t)$ کی لئے مساوات شروڈنگر:

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

حل کرتے ہوئے $\Psi(x,t)$ حاصل کرنا سیکھیں۔ اس باب میں (بلکہ کتاب کے بیشتر حصے میں) ہم فرض کرتے ہیں کہ V وقت t کا تابع نہیں ہے۔ ایسی صورت میں مساوات شروڈنگر کو **علیحدگی متغیرات**[2] کے طریقے سے حل کیا جا سکتا ہے، جو ماہرین طبیعیات کا پسندیدہ طریقہ ہے۔ ہم ایسے حل تلاش کرتے ہیں جنہیں حاصل ضرب:

$$\Psi(x,t)=\psi(x)\varphi(t) \tag{۲.۲}$$

کی صورت میں لکھنا ممکن ہو جہاں ψ صرف x اور φ صرف t کا تفاعل ہے۔ بظاہر، مساوات شروڈنگر کے کسی حل پر ایسی شرط مسلط کرنا درست نظر نہیں آتا ہے، تاہم حقیقت میں یوں حاصل کردہ حل بہت کار آمد ثابت ہوتے ہیں۔ مزید (جیسا کہ علیحدگی متغیرات کیلئے عموماً کیا جاتا ہے) ہم علیحدگی متغیرات سے

---

[1] بار بار "مخفی توانائی تفاعل" کہنا انسان کو تھکا دیتا ہے، لہٰذا لوگ V کو صرف "مخفیہ" پکارتے ہیں، اگرچہ ایسا کرنے سے برقی مخفیہ کے ساتھ غلطی پیدا ہو سکتی ہے جو دراصل فی اکائی بار مخفی توانائی ہوتی ہے۔

[2] separationofvariables

حاصل شدہ حلوں کو یوں آپس میں جوڑ سکتے ہیں کہ ان سے عمومی حل حاصل کرنا ممکن ہو۔ قابل علیحدگی حلوں کیلئے

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

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

$$i\hbar\psi\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi}{\mathrm{d}x^2}\varphi + V\psi\varphi$$

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

$$i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi}{\mathrm{d}x^2} + V \tag{۲.۳}$$

اب بایاں تفاعل صرف t کا تابع ہے جبکہ دایاں تفاعل صرف x کا تابع [۳] ہے۔ یاد رہے اگر V خود x اور t دونوں پر منحصر ہو تب ایسا نہیں ہو گا۔ صرف t تبدیل ہونے سے دایاں تفاعل کسی صورت تبدیل نہیں ہو سکتا ہے جبکہ بایاں اور دایاں تفاعل لازمی طور پر ایک دوسرے کے برابر ہیں، لہٰذا t تبدیل کرنے سے بایاں تفاعل بھی تبدیل نہیں ہو گا۔ اسی طرح صرف x تبدیل کرنے سے بایاں تفاعل تبدیل نہیں ہو سکتا ہے اور چونکہ دونوں اطراف لازماً ایک دوسرے کے برابر ہیں لہٰذا x تبدیل کرنے سے دایاں تفاعل بھی تبدیل نہیں ہو گا۔ ہم کہہ سکتے ہیں کہ دونوں اطراف ایک مستقل کے برابر ہوں گے۔ (یہاں تسلی کر لیں کہ آپ کو یہ دلائل سمجھ آ گئے ہیں۔) اس مستقل کو ہم **علیحدگی مستقل** [۴] کہتے ہیں جس کو ہم E سے ظاہر کرتے ہیں۔ یوں مساوات ۲.۳ کو

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

یا

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = -\frac{iE}{\hbar}\varphi \tag{۲.۴}$$

اور

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

یا

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\,\psi}{\mathrm{d}x^2} + V\psi = E\psi \tag{۲.۵}$$

لکھا جا سکتا ہے۔ علیحدگی متغیرات نے ایک جزوی تفرقی مساوات کو دو سادہ تفرقی مساوات (مساوات ۲.۴ اور ۲.۵) میں علیحدہ کر دیا۔ ان میں سے پہلی (مساوات ۲.۴) کو حل کرنا بہت آسان ہے:

---

[۳] دھیان رہے کہ اگر V خود x کے ساتھ ساتھ t کا بھی تفاعل ہو تا تب ایسا ممکن نہ ہوتا۔
[۴] separationconstant

دونوں اطراف کو $\mathrm{d}t$ سے ضرب دیتے ہوئے اس کا تکمل لیں۔ یوں عمومی حل $Ce^{-iEt/\hbar}$ حاصل ہو گا۔ چونکہ ہم حاصل ضرب $\psi\varphi$ میں دلچسپی رکھتے ہیں لہٰذا ہم مستقل C کو ψ میں ضم کر سکتے ہیں۔ یوں مساوات ۲.۴ کا حل درج ذیل ہو گا۔

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

دوسری (مساوات ۲.۵) کو **غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر**[5] کہتے ہیں۔ مخفی توانائی V کو پوری طرح جانے بغیر ہم آگے نہیں بڑھ سکتے ہیں۔

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

1) یہ **ساکن حالات**[6] ہیں۔ اگرچہ تفاعل موج خود:

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

وقت t کا تابع ہے لیکن کثافت احتمال:

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

وقت کا تابع نہیں ہے؛ تابعیت وقت مساوات میں سے ختم ہو جاتی[7] ہے۔ یہی کچھ کسی بھی حرکی متغیر کی توقعاتی قیمت کے حساب کرنے میں ہو گا۔ مساوات ۱.۳۶ تخفیف کے بعد درج ذیل صورت اختیار کر لے گی۔

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

ہر توقعاتی قیمت وقت میں مستقل ہو گی؛ ہم $\varphi(t)$ کو نکال کر Ψ کی جگہ ψ استعمال کر کے وہی نتائج حاصل کر سکتے ہیں۔ اگرچہ بعض اوقات ψ کو ہی تفاعل موج پکارا جاتا ہے، لیکن ایسا کرنا حقیقتاً غلط ہے جس سے مسائل پیدا ہو سکتے ہیں۔ ضروری ہے کہ آپ یاد رکھیں کہ اصل تفاعل موج ہر صورت میں تابع وقت ہو گا۔ بالخصوص $\langle x\rangle$ مستقل ہو گا، لہٰذا (مساوات ۱.۳۳ کے تحت) $\langle p\rangle = 0$ ہو گا۔ ساکن حال میں کبھی بھی کچھ نہیں ہوتا۔

2) یہ غیر مبہم کل توانائی سے متعلق حالات ہوں گے۔ کلاسیکی میکانیات میں کل توانائی (حرکی جمع مخفیہ) کو **ہیملٹنی**[8] کہتے ہیں جس کو H سے ظاہر کیا جاتا ہے۔

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

---

[5] time-independentSchrodingeralign

[6] stationarystates

[7] قابل معمول زنی حل کے لئے لازم ہے کہ E حقیقی ہو (سوال ۱.۲-ا دیکھیں)۔

[8] Hamiltonian

اس کا مطابقتی ہیملٹنی عامل، ضابطے کے تحت p کو $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ سے تبدیل کر کے $(p \to (\hbar/i)(\partial/\partial x))$، درج ذیل[9] حاصل ہو گا۔

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

یوں غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر ۲.۵ درج ذیل روپ اختیار کرے گی

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{۲.۱۲}$$

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

$$\langle H \rangle = \int \psi^* \hat{H}\psi \,\mathrm{d}x = E\int |\psi|^2 \,\mathrm{d}x = E\int |\Psi|^2 \,\mathrm{d}x = E \tag{۲.۱۳}$$

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ Ψ کی معمول زنی، ψ کی معمول زنی کے مترادف ہے۔ مزید

$$\hat{H}^2\psi = \hat{H}(\hat{H}\psi) = \hat{H}(E\psi) = E(\hat{H}\psi) = E^2\psi$$

کی بنا پر درج ذیل ہو گا۔

$$\langle H^2 \rangle = \int \psi^* \hat{H}^2\psi \,\mathrm{d}x = E^2\int |\psi|^2 \,\mathrm{d}x = E^2$$

یوں H کی تغیریت درج ذیل ہو گی۔

$$\sigma_H^2 = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = E^2 - E^2 = 0 \tag{۲.۱۴}$$

یاد رہے کہ $\sigma = 0$ کی صورت میں نمونہ کے تمام ارکان کی قیمت ایک جیسی ہو گی (تقسیم کی توسیع صفر ہو گی)۔ نتیجتاً قابل علیحدگی حل کی ایک خاصیت یہ ہے کہ کل توانائی کی ہر پیمائش یقیناً قیمت E دے گی۔ (اسی بنا پر ہم نے علیحدگی مستقل کو E سے ظاہر کیا تھا۔)

3) عمومی حل قابل علیحدگی حلوں کا **خطی جوڑ**[10] ہو گا۔ جیسا کہ ہم جلد دیکھیں گے، غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر (مساوات ۲.۵) لامتناہی تعداد کے حل $(\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \cdots)$ دے گی جہاں ہر ایک حل کے ساتھ ایک علیحدگی مستقل $(E_1, E_2, E_3, \cdots)$ منسلک ہو گا لہٰذا ہر **اجازتی توانائی**[11] کا ایک منفرد تفاعل موج پایا جائے گا۔

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

---

[9] جہاں غلط فہمی پیدا ہونے کی گنجائش ہو وہاں میں عامل پر ٹوپی (^) کا نشان ڈال کر اس کو اس تغیر پذیر متغیر سے علیحدہ رکھوں گا جس کو یہ ظاہر کرتا ہو۔

[10] linear combination

[11] allowed energy

اب (جیسا کہ آپ خود تصدیق کر سکتے ہیں) تابع وقت مساوات شروڈنگر (مساوات ۲.۱) کی ایک خاصیت یہ ہے کہ اس کے حلوں کا ہر خطی جوڑ[۱۲] خود ایک حل ہوتا ہے۔ ایک مرتبہ قابل علیحدگی حل تلاش کرنے کے بعد ہم زیادہ عمومی حل درج ذیل روپ میں تیار کر سکتے ہیں۔

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

حقیقتاً تابع وقت مساوات شروڈنگر کا ہر حل درج بالا روپ میں لکھا جا سکتا ہے۔ ایسا کرنے کی خاطر ہمیں وہ مخصوص مستقل $(c_1, c_2, \cdots)$ تلاش کرنے ہوں گے جن کو استعمال کرتے ہوئے درج بالا حل (مساوات ۲.۱۵) ابتدائی شرائط پوری کرتا ہو۔ آپ آنے والے حصوں میں دیکھیں گے کہ ہم کس طرح یہ سب کچھ کرتے ہیں۔ باب ۳ میں ہم اس کو زیادہ مضبوط بنیادوں پر کھڑا کر پائیں گے۔ بنیادی نقطہ یہ ہے کہ ایک مرتبہ غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر حل کرنے کے بعد آپ کے مسائل ختم ہو جاتے ہیں۔ یہاں سے تابع وقت مساوات شروڈنگر کا عمومی حل حاصل کرنا آسان کام ہے۔

گزشتہ چار صفحات میں بہت کچھ کہا جا چکا ہے۔ میں ان کو مختصراً اور مختلف نقطہ نظر سے دوبارہ پیش کرتا ہوں۔ میں آپ کے سامنے ایک عمومی مسئلہ رکھتا ہوں: آپ کو (غیر تابع وقت) مخفیہ $V(x)$ 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 مساوات شروڈنگر (مساوات ۲.۱) حل کریں گے۔ پہلا قدم[۱۳] یہ ہو گا کہ آپ غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر (مساوات ۲.۵) حل کر کے لامتناہی تعداد کے حلوں کا سلسلہ $(\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \cdots)$ حاصل کریں گے جہاں ہر ایک کی منفرد توانائی $(E_1, E_2, E_3, \cdots)$ ہو گی۔ تفاعل $\Psi(x,0)$ تیار کرنے کی خاطر آپ ان حلوں کا خطی جوڑ لیں گے۔

$$\Psi(x,0)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x) \tag{۲.۱۶}$$

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

$$\Psi(x,t)=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}=\sum_{n=0}^{\infty}c_n\Psi_n(x,t) \tag{۲.۱۷}$$

[۱۲] تفاعلات $f_1(z)$ ، $f_2(z)$ ، وغیرہ کے خطی جوڑ سے مراد درج ذیل روپ کا فقرہ ہے جہاں c_1 ، c_2 ، وغیرہ کوئی بھی (مخلوط) مستقل ہو سکتے ہیں۔

$$f(z)=c_1f_1(z)+c_2f_2(z)+\cdots$$

[۱۳] بعض اوقات آپ تابع وقت مساوات شروڈنگر کو بغیر علیحدگی متغیرات حل کر لیتے ہیں (سوال ۲.۴۹ اور سوال ۲.۵۰ دیکھیں)۔ تاہم ایسی صورتیں بہت کم پائی جاتی ہیں۔

چونکہ قابل علیحدگی حل

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

کے تمام احتمال اور توقعاتی قیمتیں غیر تابع وقت ہوں گی لہٰذا یہ خود ساکن حالات ہوں گے، تاہم عمومی حل (مساوات ۲.۱۷) یہ خاصیت نہیں رکھتا؛ انفرادی ساکن حالات کی توانائیوں کے ایک دوسرے سے مختلف ہونے کی بنا پر $|\Psi|^2$ کا حساب کرتے ہوئے قوت نمائی ایک دوسرے کو حذف نہیں کرتے۔

مثال ۲.۱: فرض کریں ایک ذرہ کے ابتدائی حال کو دو ساکن حالات کے خطی جوڑ سے ظاہر کیا گیا ہے:

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

(چیزوں کو سادہ رکھنے کی خاطر میں فرض کرتا ہوں کے مستقل c_n اور حالات $\psi_n(x)$ حقیقی ہیں۔) مستقبل وقت t کیلئے تفاعل موج $\Psi(x,t)$ کیا ہو گا؟ کثافت احتمال تلاش کریں اور ذرے کی حرکت بیان کریں۔

حل: اس کا پہلا حصہ آسان ہے

$$\Psi(x,t) = c_1\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$$

جہاں E_1 اور E_2 بالترتیب تفاعل ψ_1 اور ψ_2 کی مطابقتی توانائیاں ہیں۔ یوں $|\Psi|^2$ درج ذیل ہو گا۔

$$\begin{aligned}\left|\Psi(x,t)\right|^2 &= \left(c_1\psi_1e^{iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2e^{iE_2t/\hbar}\right)\left(c_1\psi_1e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2e^{-iE_2t/\hbar}\right)\\ &= c_1^2\psi_1^2 + c_2^2\psi_2^2 + 2c_1c_2\psi_1\psi_2\cos[(E_2-E_1)t/\hbar]\end{aligned}$$

(میں نے نتیجہ کی سادہ صورت حاصل کرنے کی خاطر **کلیہ یولر** $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ استعمال[۱۴] کیا۔) ظاہر ہے کہ کثافت احتمال زاویائی تعدد $\left(\frac{E_2-E_1}{\hbar}\right)$ کے ساتھ سائن نما ارتعاش پذیر ہے لہٰذا یہ ہرگز ساکن حال نہیں ہو گا۔ لیکن دھیان رہے کہ (ایک دوسرے سے مختلف) توانائیوں کے تفاعل کے خطی جوڑنے یہ حرکت پیدا کی ہے۔ □

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

ا. قابل علیحدگی حلوں کے لئے علیحدگی مستقل E لازماً حقیقی ہو گا۔ اشارہ: مساوات ۲.۷ میں E کو $E_0 + i\Gamma$ لکھ کر (جہاں E اور Γ حقیقی ہیں)، دکھائیں کہ تمام t کے لئے مساوات ۲.۲۰ اس صورت کارآمد ہو گا جب Γ صفر ہو۔

ب. غیر تابع وقت تفاعل موج $\psi(x)$ ہر موقع پر حقیقی لیا جا سکتا ہے (جبکہ تفاعل موج $\Psi(x,t)$ لازماً مخلوط ہوتا ہے)۔ اس کا ہرگز یہ مطلب نہیں ہے کہ غیر تابع مساوات شروڈنگر کا ہر حل حقیقی ہو گا؛ بلکہ غیر حقیقی حل پائے جانے کی صورت میں اس حل کو ہمیشہ، ساکن حالات کا (اتنی ہی توانائی کا) خطی جوڑ لکھنا ممکن ہو گا۔ یوں بہتر ہو گا کہ آپ صرف حقیقی ψ ہی استعمال کریں۔ اشارہ: اگر کسی مخصوص E کے لئے $\psi(x)$ مساوات 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۔

---

[۱۴] Euler's formula

ج. اگر $V(x)$ **جفت تفاعل**[۱۵] ہو (یعنی $V(-x) = V(x)$) تب $\psi(x)$ کو ہمیشہ جفت یا طاق لیا جا سکتا 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 تابع وقت مساوات شروڈنگر کے ہر اس حل کے لئے، جس کی معمول زنی کی جا سکتی ہو، E کی قیمت لازماً $V(x)$ کی اقل قیمت سے زیادہ ہو گی۔ اس کا کلاسیکی مماثل کیا ہو گا؟ اشارہ: مساوات ۲.۵ کو درج ذیل روپ میں لکھ کر

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

دکھائیں کہ $E < V_{\text{اقل}}$ کی صورت میں ψ اور اس کے دو گنا تفرق کی علامتیں لازماً ایک جیسی ہوں گی؛ اب دلیل پیش کریں کہ ایسا تفاعل ناقابل معمول زنی ہو گا۔

۲.۲ لامتناہی چوکور کنواں

فرض کریں

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

(شکل ۲.۱)۔ اس مخفیہ میں ایک ذرہ مکمل آزاد ہو گا، ماسوائے دونوں سروں یعنی $x = 0$ اور $x = a$ پر، جہاں ایک لامتناہی قوت اس کو فرار ہونے سے روکتی ہے۔ اس کا کلاسیکی نمونہ کنویں میں بے رگڑ راستے پر چلتا ہوا جسم ہو سکتا ہے جو ہمیشہ کے لئے دیواروں سے ٹکرا کر دائیں سے بائیں اور بائیں سے دائیں حرکت کرتا ہے؛ دیوار کے ساتھ ٹکراؤ مکمل لچکدار ہے۔ (اگرچہ یہ ایک فرضی مخفیہ ہے لیکن آپ اس کو اہمیت دیں۔ باوجود اس کے کہ یہ انتہائی سادہ نظر آتا ہے، یہ بہت ساری معلومات فراہم کرتا ہے۔ ہم اس سے بار بار رجوع کریں گے۔)

کنویں سے باہر $\psi(x) = 0$ ہو گا (لہٰذا یہاں ذرے کے پائے جانے کا احتمال صفر ہو گا)۔ کنویں کے اندر، جہاں $V = 0$ ہے، غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر (مساوات ۲.۵) درج ذیل روپ اختیار کر لے گی۔

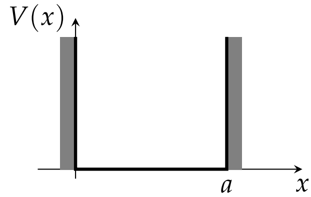
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi \tag{۲.۲۰}$$

یعنی

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -k^2\psi, \qquad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{۲.۲۱}$$

---

[۱۵] even function



شکل ۲.۱: لامتناہی چوکور کنواں مخفیہ (مساوات ۲.۱۹)

(اس کو یوں لکھتے ہوئے میں خاموشی سے $E \geq 0$ فرض کرتا ہوں۔ ہم سوال ۲.۲ سے جان چکے ہیں کہ $E < 0$ سے بات نہیں بنے گی۔) مساوات ۲.۲۱ کلاسیکی **سادہ ہارمونی مرتعش**[۱۶] کی مساوات ہے جس کا عمومی حل درج ذیل ہے

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx \tag{۲.۲۲}$$

جہاں A اور B اختیاری مستقل ہیں۔ ان مستقلات کو مسئلہ کے **سرحدی شرائط**[۱۷] متعین کرتے ہیں۔ $\psi(x)$ کے لئے موزوں سرحدی شرائط کیا ہونگے؟ عموماً ψ اور $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ دونوں استمراری ہونگے، لیکن جہاں مخفیہ لامتناہی کو پہنچتا ہو وہاں صرف اول الذکر کا اطلاق ہو گا۔ (میں حصہ ۲.۵ میں ان سرحدی شرائط کو ثابت کروں گا اور $V = \infty$ کی صورت حال کو بھی دیکھوں گا۔ فی الحال مجھ پر یقین کرتے ہوئے میری کہی ہوئی بات مان لیں۔)

تفاعل $\psi(x)$ کے استمراری شرط کے تحت درج ذیل ہو گا

$$\psi(0) = \psi(a) = 0 \tag{۲.۲۳}$$

تاکہ کنویں کے باہر اور کنویں کے اندر حل ایک 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 لہٰذا $B = 0$ پس

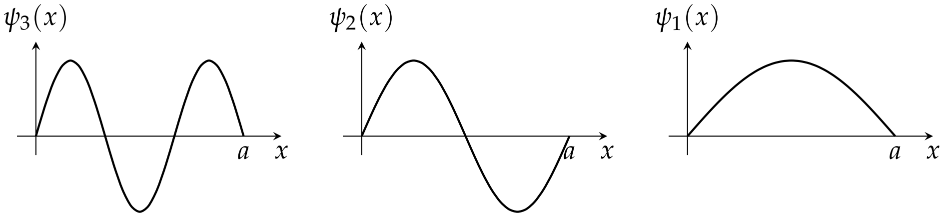
$$\psi(x) = A\sin kx \tag{۲.۲۴}$$

ہو گا۔ یوں $\psi(a) = A\sin ka$ کے تحت $A = 0$ (ایسی صورت میں ہمیں غیر اہم حل $\psi(x) = 0$ ملتا ہے جو ناقابل معمول زنی ہے) یا $\sin ka = 0$ ہو گا، جس کا نتیجہ درج ذیل ہو گا۔

$$ka = 0, \pm\pi, \pm 2\pi, \pm 3\pi, \cdots \tag{۲.۲۵}$$

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

[۱۶] simple harmonic oscillator
[۱۷] boundary conditions



شکل ۲.۲: لامتناہی چوکور کنویں کے ابتدائی تین ساکن حالات (مساوات ۲.۲۸)۔

ذیل ہوں گے۔

$$k_n = \frac{n\pi}{a}, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{۲.۲۶}$$

دلچسپ بات یہ ہے کہ $x = a$ پر سرحدی شرط عائد کرنے سے مستقل A کے بجائے مستقل k متعین ہوتا ہے جس کے نتیجہ میں E کی اجازتی قیمتیں:

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

حاصل ہو جائیں گی۔ کلاسیکی صورت کے برعکس لامتناہی چوکور کنویں میں کوانٹائی ذرہ ہر ایک توانائی کا حامل نہیں ہو سکتا ہے بلکہ اس کی توانائی کی قیمت کو درج بالا مخصوص **اجازتی**[۱۸] قیمتوں[۱۹] میں سے ہونا ہو گا۔ مستقل A کی قیمت حاصل کرنے کے لئے ψ کی معمول زنی کرنی ہو گی:

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

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

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

جیسا کہ وعدہ تھا (ہر مثبت عدد صحیح n کے عوض ایک حل دے کر) غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر نے حلوں کا ایک لامتناہی سلسلہ دیا ہے۔ ان میں سے اولین چند کو شکل ۲.۲ میں ترسیم کیا گیا ہے۔ یہ ایک دھاگے، جس کی لمبائی a ہو، پر بننے والی ساکن امواج کی طرح نظر آتے ہیں۔ تفاعل ψ_1 جو **زمینی حال**[۲۰] کہلاتا ہے کی توانائی قلیل ہے۔ باقی حالات جن کی توانائیاں n^2 کے براہ راست بڑھتی ہیں **ہیجان حالات**[۲۱] کہلاتے ہیں۔

---

[۱۸] allowed

[۱۹] دھیان رہے کہ غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر کو حل کرتے ہوئے سرحدی شرائط عائد کرنے سے اجازتی توانائیوں کی کوانٹازنی شرط محض تکنیکی وجوہات کی بنا پر ابھرتا ہے۔

[۲۰] groundstate

[۲۱] excitedstates

تفاعلات $\psi_n(x)$ چند اہم اور دلچسپ خواص رکھتے ہیں:

ا. 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۔[۲۲]

ب. توانائی بڑھاتے ہوئے ہر اگلے حال کے **عقدوں**[۲۳] (**صفر مقام انقطاع**[۲۴]) کی تعداد میں ایک (1) کا اضافہ ہو گا۔ (چونکہ سروں پر پائے جانے والے صفر کو نہیں گنا جاتا ہے لہٰذا) ψ_1 میں کوئی عقدہ نہیں ہے، ψ_2 میں ایک ہے، ψ_3 میں دو پائے جاتے ہیں، وغیرہ وغیرہ۔

ج. یہ تمام تفاعل درج ذیل معنوں میں باہم **عمودی**[۲۵] ہیں جہاں $m \neq n$ ہے۔

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\,\mathrm{d}x = 0 \tag{۲.۲۹}$$

ثبوت:

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

دھیان رہے کہ $m = n$ کی صورت میں درج بالا دلیل درست نہیں ہو گی؛ (کیا آپ بتا سکتے ہیں کہ ایسی صورت میں دلیل کیوں ناقابل قبول ہو گی؟) ایسی صورت میں معمول زنی اس تکمل کی قیمت 1 کر دے گا۔ در حقیقت، عمودیت اور معمول زنی کو ایک فقرے میں سمویا جا سکتا ہے:[۲۶]

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\,\mathrm{d}x = \delta_{mn} \tag{۲.۳۰}$$

جہاں δ_{mn} **کرونیکر ڈیلٹا**[۲۷] کہلاتا ہے جس کی تعریف درج ذیل ہے۔

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

---

[۲۲] اس تشاکلی کو زیادہ وضاحت سے پیش کرنے کی خاطر بعض مصنفین کنویں کے مرکز کو مبدا پر رکھتے ہیں (یوں کنواں $-a$ تا $+a$ رکھا جاتا ہے)۔ تب جفت تفاعلات کوسائن جبکہ طاق تفاعلات سائن ہوں گے۔ سوال ۲.۳۶ دیکھیں۔

[۲۳] nodes

[۲۴] zero-crossing

[۲۵] orthogonal

[۲۶] یہاں تمام ψ حقیقی ہیں لہٰذا ψ_m پر $*$ ڈالنے کی ضرورت نہیں ہے، لیکن مستقبل کی ضرورتوں کا لحاظ کرتے ہوئے ایسا کرنا ایک اچھی عادت ہے۔

[۲۷] Kroneckerdelta

ہم کہتے ہیں کہ مذکورہ بالا (تمام) ψ **معیاری عمودی**[28] ہیں۔

د. یہ **مکمل**[29] ہیں، جس سے مراد ہے کہ کسی بھی دوسرے تفاعل $f(x)$ کو ان کے خطی جوڑ سے بنایا جا سکتا ہے۔

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

میں تفاعلات $\sin \frac{n\pi x}{a}$ کی مکملیت کو یہاں ثابت نہیں کروں گا، البتہ اگر آپ اعلیٰ علم الاحصاء سے واقف ہیں تو آپ پہچان سکتے ہیں کہ مساوات ۲.۳۲ اور کچھ نہیں بلکہ $f(x)$ کا **فوریئر تسلسل**[30] ہے۔ یہ حقیقت، کہ ہر تفاعل کو فوریئر تسلسل کی صورت میں پھیلا کر لکھا جا سکتا ہے، بعض اوقات **مسئلہ ڈرشلے**[31] کہلاتا ہے۔[32]

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 تکمل لیں۔

$$\int \psi_m(x)^* f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{mn} = c_m \tag{۲.۳۳}$$

(کرونیکر ڈیلٹا مجموعے میں تمام اجزاء کو ختم کر دے گا ماسوائے اس جزو کو جس کے لئے $n = m$ ہو۔) یوں تفاعل $f(x)$ کی توسیع کے n ویں جزو کا عددی سر درج ذیل ہو گا۔[33]

$$c_n = \int \psi_n(x)^* f(x)\,\mathrm{d}x \tag{۲.۳۴}$$

درج بالا چار خواص انتہائی کارآمد ہیں جن کی افادیت صرف لامتناہی چوکور کنواں تک محدود نہیں ہیں۔ پہلی خاصیت ہر اس صورت میں کارآمد ہو گی جب مخفیہ تشاکلی ہو؛ دوسری خاصیت مخفیہ کی شکل و صورت سے قطع نظر، ایک عالمگیر خاصیت ہے۔ عمودیت بھی کافی عمومی خاصیت ہے، جس کا ثبوت میں باب ۳ میں پیش کروں گا۔ عمومیت ان تمام مخفیہ کے لئے برقرار رہتی ہے جو ہمیں درپیش ہو سکتے ہیں لیکن اس بات کا ثبوت کافی لمبا اور پیچیدہ ہے؛ مجھے خدشہ ہے کہ زیادہ تر ماہرین طبیعیات عام طور پر عمومیت فرض کر لیتے ہیں اور امید رکھتے ہیں کہ ایسا ہی ہو گا۔

لامتناہی چوکور کنویں کے ساکن حال (مساوات ۲.۱۸) درج ذیل ہوں گے۔

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

---

[28] orthonormal
[29] complete
[30] Fourierseries
[31] Dirichlet'stheorem
[32] تفاعل $f(x)$ میں متناہی تعداد کے عدم استمرار پائے جا سکتے ہیں۔
[33] آپ یہاں نقلی متغیر کے لئے m یا n یا کوئی تیسرا حرف استعمال کر سکتے ہیں (بس اتنا خیال رکھیں کہ مساوات کی دونوں اطراف ایک ہی حرف استعمال کیا جائے)، اور ہاں یاد رہے کہ یہ حرف "کسی مثبت عدد صحیح" کو ظاہر کرتا ہے۔

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

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

(اگر آپ کو اس حل پر شک 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

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

درکار ہوں گے۔ تفاعلات ψ کی مکملیت (جس کی تصدیق یہاں مسئلہ ڈرشلے کرتی ہے) اس کی ضمانت دیتی ہے کہ میں ہر $\psi(x,0)$ کو ہر صورت اس طریقے سے لکھ سکتا ہوں، اور ان کی معیاری عمودیت کی بنا پر c_n کو فوریئر تسلسل سے حاصل کیا جا سکتا ہے:

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

دی گئی ابتدائی تفاعل موج $\Psi(x,0)$ کے لئے ہم سب سے پہلے توسیعی عددی سروں c_n کو مساوات ۲.۳۷ سے حاصل کرتے ہیں۔ اس کے بعد انہیں مساوات ۲.۳۶ میں ڈال کر $\Psi(x,t)$ حاصل کرتے ہیں۔ تفاعل موج معلوم ہو جائے تو ہم دلچسپی کی کسی بھی حرکی مقدار کا حساب، باب ۱ میں مستعمل تراکیب استعمال کرتے ہوئے، کر سکتے ہیں۔ یہی ترکیب کسی بھی مخفیہ کے لیے کارآمد ہو گی؛ صرف ψ کی تفاعلی شکل اور اجازتی توانائیوں کی مساوات مختلف ہوں گی۔

مثال ۲.۲: لامتناہی چوکور کنویں میں ایک ذرے کا ابتدائی تفاعل موج درج ذیل ہے جس میں A ایک مستقل ہے (شکل ۲.۳)۔

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

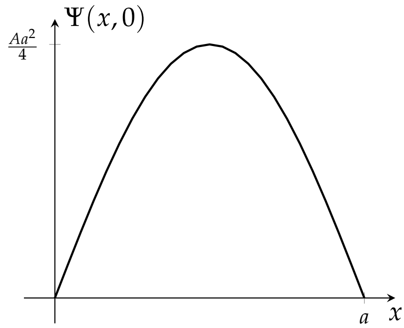
کنویں سے باہر $\psi = 0$ ہے۔ $\Psi(x,t)$ معلوم کریں۔

حل: ہم پہلے $\Psi(x,0)$ کی معمول زنی کرتے ہوئے

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

A متعین کرتے ہیں۔

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



شکل ۳.۲: ابتدائی تفاعل موج برائے مثال ۲.۲۔

مساوات ۲.۳۷ کے تحت n واں عددی سر درج ذیل ہو گا۔

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

یوں تفاعل موج درج ذیل ہو گا (مساوات ۲.۳۶)۔

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

□

سرسری طور پر ہم کہتے ہیں کہ c_n، ''تفاعل Ψ میں ψ_n کی مقدار'' کو ظاہر کرتا ہے۔ بعض اوقات ہم کہتے ہیں کہ

n ویں ساکن حال میں ایک ذرے کے پائے جانے کا احتمال $|c_n|^2$ ہے جو درست نہیں، چونکہ ذرہ حال Ψ میں ہے نہ کہ حال ψ_n میں؛ ویسے بھی، تجربہ گاہ میں آپ کسی ایک ذرے کو کسی ایک مخصوص حال میں نہیں دیکھ پاتے بلکہ آپ کسی قابل مشاہدہ مقدار کی پیمائش کرتے ہیں، جس کا نتیجہ ایک عدد کی صورت میں سامنے آتا ہے۔ جیسا کہ آپ باب ۳ میں دیکھیں گے، توانائی کی پیمائش سے E_n قیمت حاصل ہونے کا احتمال $|c_n|^2$ ہو گا۔ (کوئی بھی پیمائش، "اجازتی" قیمتوں میں سے کوئی ایک قیمت دے گی، اسی لئے انہیں اجازتی قیمتیں کہتے ہیں، اور کوئی مخصوص قیمت E_n حاصل ہونے کا احتمال $|c_n|^2$ ہو گا۔)

یقیناً ان تمام احتمالات کا مجموعہ 1 ہونا چاہیے،

$$\sum_{n=1}^{\infty}|c_n|^2 = 1 \tag{۲.۳۸}$$

جس کا ثبوت Ψ کی معمول زنی سے حاصل ہو گا (چونکہ تمام c_n غیر تابع وقت ہیں لہٰذا میں $t = 0$ پر اس کا ثبوت پیش کرتا ہوں؛ اگر آپ کو اس سے تشویش ہو تو آپ با آسانی اس ثبوت کی تعمیم کسی بھی t کے لئے کر سکتے ہیں۔)۔

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

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

مزید یہ کہ توانائی کی توقعاتی قیمت لازماً

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

ہو گی جس کی بلاواسطہ تصدیق کی جا سکتی ہے: غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر (مساوات ۲.۱۲) کہتی ہے کہ

$$H\psi_n = E_n\psi_n \tag{۲.۴۰}$$

لہٰذا

$$\begin{aligned}
\langle H\rangle &= \int \Psi^* H\Psi\,\mathrm{d}x = \int \Big(\sum c_m\psi_m\Big)^* H\Big(\sum c_n\psi_n\Big)\,\mathrm{d}x\\
&= \sum\sum c_m^* c_n E_n \int \psi_m^*\psi_n\,\mathrm{d}x = \sum |c_n|^2 E_n
\end{aligned}$$

ہو گا۔ دھیان رہے کہ کسی ایک مخصوص توانائی کے حصول کا احتمال غیر تابع وقت ہو گا اور یوں H کی توقعاتی قیمت حتماً غیر تابع وقت ہو گی۔ کوانٹائی میکانیات میں یہ **بقا توانائی**[۳۴] کا ظہور ہے۔

مثال ۳.۲: ہم نے دیکھا کہ مثال ۲.۲ میں ابتدائی تفاعل موج (شکل ۳.۲) زمینی حال ψ_1 (شکل ۲.۲) کے ساتھ قریبی مشابہت رکھتا ہے۔ یوں ہم توقع کریں گے کہ $|c_1|^2$ غالب ہو گا۔ یقیناً ایسا ہی ہے۔

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

باقی تمام عددی سر مل کر درج ذیل فرق دیتے ہیں۔[۳۵]

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

اس مثال میں توانائی کی توقعاتی قیمت

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

ہو گی جو کہ ہماری توقعات کے عین مطابق ہے۔ یہ $E_1 = \pi^2\hbar^2/2ma^2$ کے بہت قریب، مگر ہیجان حالتوں کی شمولیت کی بنا پر تھوڑی زیادہ ہے۔ □

سوال ۳.۲: یہ دکھائیں کہ لامتناہی چوکور کنویں کے لئے $E = 0$ یا $E < 0$ کی صورت میں غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر کا کوئی بھی قابل قبول حل نہیں پایا جاتا۔ (یہ سوال ۲.۲ میں دیے گئے عمومی مسئلے کی ایک مخصوص صورت ہے، لیکن اس مرتبہ مساوات شروڈنگر کو صریحاً حل کرتے ہوئے دکھائیں کہ آپ سرحدی شرائط کو پورا نہیں کر سکتے۔)

سوال ۴.۲: لامتناہی چوکور کنویں کے n ویں ساکن حال کیلئے $\langle x\rangle$، $\langle x^2\rangle$، $\langle p\rangle$، $\langle p^2\rangle$، σ_x، اور σ_p تلاش کریں۔ تصدیق کریں کہ اصول عدم یقینیت مطمئن ہوتا ہے۔ کونسا حال عدم یقینیت کی حد کے قریب ترین ہو گا؟

سوال ۵.۲: لامتناہی چوکور کنویں میں ایک ذرے کا ابتدائی تفاعل موج، پہلے دو ساکن حالات کے برابر حصوں کا مرکب ہے۔

$$\Psi(x,0) = A[\psi_1(x) + \psi_2(x)]$$

[۳۴] conservation of energy

[۳۵] آپ درج ذیل تسلسل کسی ریاضی کی کتاب سے دیکھ سکتے ہیں۔

$$\frac{1}{1^6} + \frac{1}{3^6} + \frac{1}{5^6} + \cdots = \frac{\pi^6}{960}$$
$$\frac{1}{1^4} + \frac{1}{3^4} + \frac{1}{5^4} + \cdots = \frac{\pi^4}{96}$$

ا. $\Psi(x,0)$ کی معمول زنی کریں۔(یعنی A تلاش کریں۔ آپ ψ_1 اور ψ_2 کی معیاری عمودیت کا فائدہ اٹھاتے ہوئے باآسانی ایسا کر سکتے ہیں۔یاد رہے کہ $t=0$ پر Ψ کی معمول زنی کرنے کے بعد آپ یقین رکھ سکتے ہیں کہ یہ معمول شدہ ہی رہے گا؛ اگر آپ کو شک ہو تو جزو-ب کا نتیجہ حاصل کرنے کے بعد اس کی صریحاً تصدیق کریں۔)

ب. $\Psi(x,t)$ اور $\left|\Psi(x,t)\right|^2$ تلاش کریں۔ موخر الذکر کو وقت کے سائن نما تفاعل کی صورت میں لکھیں، جیسا مثال ۲.۱ میں کیا گیا ہے۔ نتائج کی تسہیل کے لئے $\omega \equiv \frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}$ لیں۔

ج. $\langle x\rangle$ تلاش کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ یہ وقت میں ارتعاش پذیر ہے۔ اس ارتعاش کا زاویائی تعدد کتنا ہو گا؟ ارتعاش کا حیطہ کیا ہو گا؟(اگر حیطہ $\frac{a}{2}$ سے زیادہ نکل آئے تو آپ سیدھا قید خانے چلے جائیں۔)

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

ھ. اس ذرے کی توانائی کی پیمائش کی جائے تو کون کون سی قیمتیں متوقع ہوں گی اور ہر ایک قیمت کا احتمال کتنا ہو گا؟ H کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔ اس کی قیمت کا موازنہ E_1 اور E_2 کے ساتھ کریں؟

سوال ۲.۶: اگرچہ تفاعل موج کا مجموعی زاویائی مستقل کسی طبعی اہمیت کا حامل نہیں ہے(کیونکہ یہ کسی بھی قابل پیمائش مقدار کا حساب کرتے ہوئے منسوخ ہو جاتا ہے) لیکن مساوات ۲.۱۷ میں عددی سروں کے اضافی زاویائی مستقل اہمیت کے حامل ہیں۔ مثال کے طور پر، فرض کریں کہ ہم سوال ۲.۵ میں ψ_1 اور ψ_2 کے اضافی زاویائی مستقل تبدیل کر دیتے ہیں:

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

یہاں ϕ کوئی مستقل ہے۔ $\Psi(x,t)$ ، $\left|\Psi(x,t)\right|^2$ 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: لامتناہی چوکور کنویں میں ایک ذرے کا ابتدائی تفاعل موج درج ذیل ہے۔[۳۶]

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} Ax, & 0 \le x \le a/2 \\ A(a-x), & a/2 \le x \le a \end{cases}$$

ا. $\Psi(x,0)$ کا خاکہ کھینچیں اور مستقل A کی قیمت تعین کریں۔

ب. $\Psi(x,t)$ تلاش کریں۔

ج. توانائی کی پیمائش کا نتیجہ E_1 ہونے کا احتمال کتنا ہو گا؟

[۳۶] اصولی طور پر ابتدائی تفاعل موج کی شکل پر کوئی پابندی عائد نہیں ہوتی، جب تک کہ وہ قابل معمول زنی ہے۔ بالخصوص، ضروری نہیں کہ $\Psi(x,0)$ کا استمراری تفرق پایا جاتا ہو؛ بلکہ تفاعل کا خود استمراری ہونا بھی ضروری نہیں ہے۔تاہم، اگر آپ $\langle H\rangle$ کی قیمت کو $\int \Psi(x,0)^* H\Psi(x,0)\,\mathrm{d}x$ سے معلوم کرنا چاہیں گے تو آپ کو تکنیکی مشکلات کا سامنا کرنا پڑے گا، اس لئے کہ $\Psi(x,0)$ کا دوم تفرق بد معین ہے۔ سوال ۲.۹ میں ایسا کرنا اس لئے ممکن ہوا کہ عدم استمرار آخری سروں پر پائے گئے جہاں تفاعل خود صفر ہے۔ سوال ۲.۷ کی طرح کے مسائل کو حل کرنا آپ سوال ۲.۴۸ میں دیکھیں گے۔

د. توانائی کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔

سوال ۲.۸: ایک ذرہ جس کی کمیت m ہے ابتدا ($t = 0$) میں لامتناہی چوکور کنویں (چوڑائی a) کے نصف بائیں حصے میں پایا جاتا ہے جہاں ہر نقطے پر اس کے ہونے کا امکان ایک جیسا ہے۔

ا. اس کا ابتدائی تفاعل موج $\Psi(x,0)$ تلاش کریں۔ (فرض کریں کہ یہ حقیقی ہے۔ اس کی معمول زنی کرنا مت بھولیں۔)

ب. توانائی کی پیمائش کے نتیجے میں $\pi^2\hbar^2/2ma^2$ ملنے کا احتمال کیا ہوگا؟

سوال ۲.۹: لمحہ $t = 0$ پر مثال ۲.۲ کے تفاعل موج کیلئے H کی توقعاتی قیمت "پرانے دقیانوسی طریقے":

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

سے حاصل کریں۔ مثال ۲.۳ میں مساوات ۲.۳۹ کی مدد سے حاصل کردہ نتیجے کے ساتھ اس کا موازنہ کریں۔ توجہ کریں: کیونکہ H غیر تابع وقت ہے لہٰذا $t = 0$ لینے سے نتیجے پر کوئی اثر نہیں ہوگا۔

۲.۳ ہارمونی مرتعش

کلاسیکی ہارمونی مرتعش کی مثال ایک لچکدار اسپرنگ کی ہے جس کا مقیاس لچک k اور کمیت m ہوتا ہے۔ کمیت کی حرکت **قانون ہک**[۳۷]

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

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

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

ہوگا، جبکہ

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{۲.۴۱}$$

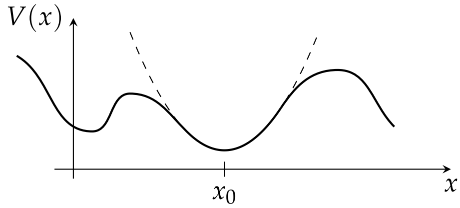
ارتعاش کا (زاویائی) تعدد ہے۔ مخفی توانائی

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \tag{۲.۴۲}$$

ہوگی جس کی ترسیم قطع مکافی ہے۔

---

[۳۷] Hooke's law



شکل ۲.۴: اختیاری مخفیہ کے مقامی اقل قیمت نقطہ کی پڑوس میں قطع مکافی تخمین (نقطہ دار ترسیم)۔

حقیقت میں کامل ہارمونی مرتعش نہیں پایا جاتا؛ اگر آپ اسپرنگ کو زیادہ کھینچیں تو وہ ٹوٹ جائے گا اور قانون ہک اس کے ٹوٹ جانے سے بہت پہلے غیر کارآمد ہو چکا ہو گا۔ تاہم عملاً کوئی بھی مخفیہ، مقامی نقطہ اقل کے پڑوس میں، تخمیناً قطع مکافی ہوتا ہے (شکل ۲.۴)۔ باضابطہ طور پر اگر ہم $V(x)$ کو نقطہ اقل کے پڑوس میں ٹیلر تسلسل میں کھولیں:

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

اس سے $V(x_0)$ منفی کریں (ہم $V(x)$ میں بغیر کسی ضرر کے مستقل کا اضافہ کر سکتے ہیں) یہ جانتے ہوئے کہ $V'(x_0) = 0$ ہو گا (چونکہ x_0 نقطہ اقل ہے) ہم بلند رتبی ارکان چھوڑ دیں (جو نظر انداز کیے جا سکتے ہیں جب تک $(x - x_0)$ مقدار میں کم ہے) تو ہمیں

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

ملے گا، جو نقطہ x_0 پر ایک ایسی سادہ ہارمونی ارتعاش کو ظاہر کرتا ہے جس کا موثر مقیاس لچک $k = V''(x_0)$ ہو۔[38] یہی وہ وجہ ہے جس کی بنا پر سادہ ہارمونی مرتعش اتنا اہم ہے: حقیقتاً ہر وہ ارتعاشی حرکت جس کا حیطہ کم ہو تخمیناً سادہ ہارمونی ہوتی ہے۔

کوانٹائی میکانیات میں ہمیں مخفیہ

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

کے لیے مساوات شروڈنگر حل کرنی ہو گی (جہاں روایتی طور پر مقیاس لچک کی جگہ کلاسیکی تعدد (مساوات ۲.۴۱) استعمال کیا جاتا ہے)۔ جیسا کہ ہم دیکھ چکے ہیں، اتنا کافی ہو گا کہ ہم غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi \tag{۲.۴۴}$$

[38] چونکہ ہم فرض کر رہے ہیں کہ x_0 نقطہ اقل ہے لہٰذا $V''(x_0) \geq 0$ ہو گا۔ صرف $V''(x_0) = 0$ ہونے کی شاذ صورت میں ارتعاش تخمینی طور پر بھی سادہ ہارمونی نہیں ہو گا۔

حل کریں۔ اس حوالے سے دو نہایت متفرق انداز نظر ملتے ہیں۔ پہلا، **طاقتی تسلسل**[۳۹] کو استعمال کرتے ہوئے "طاقت کے بل بوتے پر" سیدھا سادہ تفرقی مساوات کا حل معلوم کرنا؛ اس کی خوبی یہ ہے کہ یہی طریقہ کار دوسرے کئی مخفیوں کے لئے اختیار کیا جا سکتا ہے (جیسا کہ ہم باب ۴ میں کولمب مخفیے کے لیے استعمال کریں گے)۔ دوسرا، ایک نہایت زیرک الجبرائی ترکیب ہے، جس میں **سیڑھی عامل** کا استعمال کیا جاتا ہے۔ میں پہلے الجبرائی ترکیب دکھاؤں گا کیونکہ یہ چست اور سادہ (اور کہیں زیادہ پُر لطف)[۴۰] ہے۔ فی الحال اگر آپ طاقتی تسلسل کی ترکیب کو چھوڑ کر آگے بڑھنا چاہیں تو کوئی مسئلہ نہیں، لیکن آگے کسی موقع پر اس کو سیکھنے کا اہتمام کر لینا چاہیے۔

۲.۳.۱ الجبرائی ترکیب

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

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

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

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

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

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

البتہ یہاں بات اتنی سادہ نہیں ہے چونکہ p اور x عاملین ہیں اور عاملین عموماً **مقلوب**[۴۱] نہیں ہوتے ہیں (یعنی آپ xp سے مراد px نہیں لے سکتے ہیں)۔ اس کے باوجود یہ ہمیں درج ذیل مقداروں پر غور کرنے پر آمادہ کرتا ہے

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

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

آئیں دیکھیں حاصل ضرب a_-a_+ کیا ہو گا؟

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

اس میں متوقع اضافی جزو $(xp - px)$ پایا جاتا ہے جس کو ہم x اور p کا **مقلب**[۴۲] کہتے ہیں اور جو ان کی آپس

[۳۹] powerseries

[۴۰] یہی لائحہ عمل ہمیں زاویائی معیار حرکت کے نظریے (باب ۴) میں دیکھنے کو ملیں گی اور اس ترکیب کی تعمیم **اعلٰی تشاکلی کوانٹائی میکانیات** میں مخفیوں کی وسیع جماعت کے لئے کی جاتی ہے۔

[۴۱] commute

[۴۲] commutator

میں مقلوب نہ ہونے کی پیمائش ہے۔ عمومی طور پر عامل A اور عامل B کا مقلب (جسے چوکور قوسین میں لکھا ہے) درج ذیل ہو گا۔

$$[A, B] \equiv AB - BA \tag{۲.۴۸}$$

اس علامتیت کے تحت درج ذیل ہو گا۔

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

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

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

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

$$[x, p] = i\hbar \tag{۲.۵۱}$$

یہ خوبصورت نتیجہ جو بار بار سامنے آتا ہے **باضابطہ مقلبیت رشتہ**[۴۳] کہلاتا[۴۴] ہے۔
اسے کے استعمال سے مساوات ۲.۴۹ درج ذیل روپ

$$a_- a_+ = \frac{1}{\hbar\omega}H + \frac{1}{2} \tag{۲.۵۲}$$

یا

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

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

$$a_+ a_- = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2} \tag{۲.۵۴}$$

---

[۴۳] canonical commutation relation

[۴۴] گہری نظر سے دیکھا جائے تو کوانٹائی میکانیات کے تمام طلسمات کا دارومدار اس حقیقت پر ہے کہ مقام اور معیار حرکت آپس میں مقلوب نہیں ہیں۔ بعض مصنفین باضابطہ مقلبیت رشتہ کو مسلمہ لیتے ہوئے $p = (\hbar/i)\,\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ اخذ کرتے ہیں۔

بالخصوص درج ذیل ہو گا۔

$$[a_-, a_+] = 1 \tag{۲.۵۵}$$

یوں ہیملٹنی کو درج ذیل بھی لکھا جا سکتا ہے۔

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

ہارمونی مسر تعش کی مساوات شروڈنگر[۴۵] کو $a_\pm$ کی صورت میں درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

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

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

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

ثبوت:

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

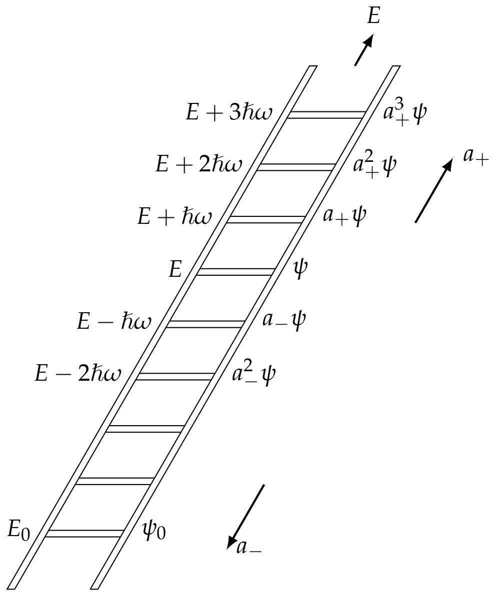
(میں نے دوسری لکیر میں مساوات ۲.۵۵ استعمال کرتے ہوئے a_-a_+ کی جگہ $a_+a_- + 1$ استعمال کیا ہے۔ دھیان رہے اگرچہ a_+ اور a_- کی ترتیب اہمیت کا حامل ہے، $a_\pm$ اور کسی بھی مستقل، مثلاً $\hbar$، ω اور E، کی ترتیب اہم نہیں ہے۔ ایک عامل ہر مستقل کے ساتھ مقلوب ہو گا۔)

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

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

یوں ہم نے ایک ایسی خود کار ترکیب دریافت کر لی ہے جس سے، کسی ایک حل کو جانتے ہوئے، بالائی اور زیریں توانائی کے نئے حل دریافت کیے جا سکتے ہیں۔ چونکہ $a_\pm$ کے ذریعے ہم توانائی میں اوپر چڑھ یا نیچے اتر سکتے ہیں لہٰذا انہیں ہم **عاملین**

[۴۵] میں بار بار "غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر" کہہ کر تھک گیا ہوں لہٰذا جہاں متن سے واضح ہو کہ میں کس قسم کی مساوات کی بات کر رہا ہوں، میں اس کو "مساوات شروڈنگر" پکاروں گا۔



شکل ۲.۵: ہارمونی مرتعش کے حالات کی "سیڑھی"۔

سیڑھی[۴۶] پکارتے ہیں: a_+ **عامل رفعت**[۴۷] اور a_- **عامل تقلیل**[۴۸] ہے۔ عامل رفعت کو رفعتی عامل اور عامل تقلیل کو تقلیلی عامل بھی پکارا جاتا ہے۔ حالات کی "سیڑھی" کو شکل ۲.۵ میں دکھایا گیا ہے۔

ذرا رکیے! عامل تقلیل کے بار بار استعمال سے آخر کار ایسا حل حاصل ہو گا جس کی توانائی صفر سے کم ہو گی (جو سوال ۲.۲ میں پیش عمومی مسئلہ کے تحت ناممکن ہے۔) نئے حالات حاصل کرنے کی خود کار ترکیب کسی نہ کسی نقطہ پر لازماً ناکامی کا شکار ہو گی۔ ایسا کیوں کر ہو گا؟ ہم جانتے ہیں کہ $a_-\psi$ مساوات شروڈنگر کا ایک نیا حل ہو گا، تاہم اس کی ضمانت نہیں دی جا سکتی ہے کہ یہ قابل معمول زنی بھی ہو گا؛ یہ صفر ہو سکتا ہے یا اس کا مربع تکمل لامتناہی ہو سکتا ہے۔ عملاً اول الذکر ہو گا: سیڑھی کے سب سے نچلے پایہ (جس کو ہم ψ_0 کہتے ہیں) پر درج ذیل ہو گا۔

$$a_-\psi_0 = 0 \tag{۲.۵۸}$$

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

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

---

[۴۶] ladderoperators
[۴۷] raisingoperator
[۴۸] loweringoperator

سے تفرقی مساوات

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

لکھی جا سکتی ہے جسے باآسانی حل کیا جا سکتا ہے:

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

(C مستقل ہے۔) لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

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

ہم اس کی معمول زنی یہیں کرتے ہیں:

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

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

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

اس حال کی توانائی دریافت کرنے کی خاطر ہم اس کو (مساوات ۲.۵۷ روپ کی) مساوات شروڈنگر میں پر کر کے $\hbar\omega(a_+a_- + \frac{1}{2})\psi_0 = E_0\psi_0$ حاصل کرتے ہیں اور یہ جانتے ہوئے کہ $a_-\psi_0 = 0$ ہو گا درج ذیل حاصل کرتے ہیں۔

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{۲.۶۰}$$

سیڑھی کے نچلا پایہ (جو کوانٹائی مرتعش کا زمینی حال ہے) پر پیر رکھ کر، بار بار عامل رفعت استعمال کر کے ہیجان حالات دریافت کیے جا سکتے ہیں[۴۹] جہاں ہر قدم پر توانائی میں $\hbar\omega$ کا اضافہ ہو گا۔

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

یہاں A_n مستقل معمول زنی ہے۔ یوں ψ_0 پر عامل رفعت بار بار استعمال کرتے ہوئے ہم (اصولاً) ہارمونی مرتعش کے تمام[۵۰] ساکن حالات دریافت کر سکتے ہیں۔ صریحاً ایسا کیے بغیر ہم تمام اجازتی توانائیاں تعین کر پائے ہیں۔

---

[۴۹] ہارمونی مرتعش کی صورت میں روایتی طور پر، عمومی طریقہ کار سے ہٹ کر، حالات کی شمار $n = 1$ کی بجائے $n = 0$ سے شروع کی جاتی ہے۔ ظاہر ہے ایسی صورت میں مساوات ۲.۱۷ طرز کی مساواتوں میں مجموعہ کی زیریں حد کو بھی تبدیل کیا جائے گا۔

[۵۰] دھیان رہے کہ ہم اس ترکیب سے (قابل معمول زنی) تمام حل حاصل کرتے ہیں۔ اب اگر کسی وجہ کی بنا پر دیگر حل بھی پائے جاتے تب ہم عامل رفعت اور عامل تقلیل استعمال کرتے ہوئے دوسری سیڑھی حاصل کر سکتے ہیں، تاہم اس سیڑھی کے سب سے نچلے پایہ کو مساوات ۲.۵۸ مطمئن کرنا ہو گا، جس سے ہم لازماً مساوات ۲.۵۹ تک پہنچتے ہیں۔ یوں نچلے پایہ ایک جیسے ہوں گے لہٰذا دونوں سیڑھیاں درحقیقت یکساں ہوں گی۔

مثال ۲.۴: ہارمونی مرتعش کا پہلا ہیجان حال تلاش کریں۔

حل: ہم مساوات ۲.۶۱ استعمال کرتے ہیں۔

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

ہم اس کی معمول زنی قلم و کاغذ کے ساتھ کرتے ہیں۔

$$\int |\psi_1|^2\,\mathrm{d}x = |A_1|^2\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\Big(\frac{2m\omega}{\hbar}\Big)\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\,\mathrm{d}x = |A_1|^2$$

جیسا آپ دیکھ سکتے ہیں $A_1 = 1$ ہو گا۔

اگرچہ میں پچاس مرتبہ عامل رفعت استعمال کر کے ψ_{50} حاصل نہیں کرنا چاہوں گا، اصولی طور پر، معمول زنی کے علاوہ، مساوات ۲.۶۱ اپنا کام خوش اسلوبی سے کرتی ہے۔ □

آپ الجبرائی طریقے سے ہیجان حالات کی معمول زنی کر سکتے ہیں لیکن اس کے لیے بہت محتاط چلنا ہو گا لہٰذا دھیان رکھیے گا۔ ہم جانتے ہیں کہ $a\pm\psi_n$ اور $\psi_{n\pm1}$ ایک دوسرے کے راست متناسب ہیں۔

$$a_+\psi_n = c_n\psi_{n+1},\qquad a_-\psi_n = d_n\psi_{n-1} \tag{۲.۶۳}$$

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 ہو گا۔ (ظاہر ہے کہ تکملات کا موجود ہونا لازمی ہے، جس کا مطلب ہے کہ $\pm\infty$ پر $f(x)$ اور $g(x)$ کو لازماً صفر پہنچنا ہو گا۔)

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_\pm g)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty}(a_\mp f)^* g\,\mathrm{d}x \tag{۲.۶۴}$$

(خطی الجبرا کی زبان میں $a\mp$ اور $a\pm$ ایک دوسرے کے **ہرمشی جوڑی دار**[۵۱] ہیں۔)

ثبوت:

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

تکمل بالحصص کے ذریعے $\int f^*\big(\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}\big)\,\mathrm{d}x$ سے $-\int\big(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\big)^* g\,\mathrm{d}x$ حاصل ہو گا (جہاں $\pm\infty$ پر $f(x)$ اور $g(x)$ کی قیمتیں صفر تک پہنچنے کی بنا پر سرحدی اجزاء صفر ہوں گے) لہٰذا

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

---

[۵۱] Hermitian conjugate

اور بالخصوص درج ذیل ہو گا۔

$$\int_{-\infty}^{\infty} (a_{\pm}\psi_n)^*(a_{\pm}\psi_n)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp}a_{\pm}\psi_n)^*\psi_n\,\mathrm{d}x$$

مساوات ۲.۵۷ اور مساوات ۲.۶۱ استعمال کرتے ہوئے

$$a_+a_-\psi_n = n\psi_n, \qquad a_-a_+\psi_n = (n+1)\psi_n \tag{۲.۶۵}$$

ہو گا لہٰذا درج ذیل ہوں گے۔

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} (a_+\psi_n)^*(a_+\psi_n)\,\mathrm{d}x &= |c_n|^2\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi_{n+1}\right|^2\mathrm{d}x = (n+1)\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi_n\right|^2\mathrm{d}x\\
\int_{-\infty}^{\infty} (a_-\psi_n)^*(a_-\psi_n)\,\mathrm{d}x &= |d_n|^2\int_{-\infty}^{\infty} \left|\psi_{n-1}\right|^2\mathrm{d}x = n\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi_n\right|^2\mathrm{d}x
\end{aligned}$$

چونکہ ψ_n اور $\psi_{n\pm1}$ معمول شدہ ہیں، لہٰذا $|c_n|^2 = n+1$ اور $|d_n|^2 = n$ ہوں گے۔ یوں درج ذیل ہو گا۔

$$a_+\psi_n = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}, \qquad a_-\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1} \tag{۲.۶۶}$$

اس طرح درج ذیل ہوں گے۔

$$\begin{aligned}
&\psi_1 = a_+\psi_0, \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}a_+\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_+)^2\psi_0,\\
&\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}a_+\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3\cdot2}}(a_+)^3\psi_0, \quad \psi_4 = \frac{1}{\sqrt{4}}a_+\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{4\cdot3\cdot2}}(a_+)^4\psi_0,
\end{aligned}$$

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

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

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

لامتناہی چوکور کنویں کے ساکن حالات کی طرح ہارمونی مسرتعش کے ساکن حالات ایک دوسرے کے عمودی ہیں۔

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^*\psi_n\,\mathrm{d}x = \delta_{mn} \tag{۲.۶۸}$$

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

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

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

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

حل:

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

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

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

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

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

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

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

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 جا سکتا 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:

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

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

سوال ۲.۱۰:

ا. $\psi_2(x)$ تیار کریں۔

ب. ψ_0, ψ_1 اور ψ_2 کا خاکہ کھینچیں۔

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

سوال ۲.۱۱:

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

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

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

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

سوال ۲.۱۳: ہارمونی مرتعش مخفی 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 $\left|\Psi(x,t)\right|^2$ تیار کریں۔

ج. $\langle x\rangle$ اور $\langle p\rangle$ تلاش کریں۔ ان کے کلاسیکی تعدد پر ارتعاش پذیر ہونے پر حیران مت ہوں: اگر میں $\psi_1(x)$ کی بجائے $\psi_2(x)$ دیتا تب جواب کیا ہوتا؟ تصدیق کریں کہ اس تفاعل موج کے لیے مسئلہ اہرنفسٹ (مساوات ۱.۳۸) مطمئن ہوتا ہے؟

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

سوال ۲.۱۴: ہارمونی مرتعش کے زمینی حال میں ایک ذرہ کلاسیکی تعدد ω پر ارتعاش پذیر ہے۔ ایک دم مقیاس لچک 4 گنا ہو جاتا ہے لہٰذا $\omega' = 2\omega$ ہو گا جبکہ ابتدائی تفاعل موج تبدیل نہیں ہو گا (یقیناً ہیملٹنی

تبدیل ہونے کے بنا پر Ψ اب مختلف انداز سے ارتقا پائے گا)۔ اس کا احتمال کتنا ہے کہ توانائی کی پیمائش اب بھی $\hbar\omega/2$ قیمت دے؟ پیمائشی نتیجہ $\hbar\omega$ حاصل ہونے کا احتمال کیا ہو گا؟

۲.۳.۲ تحلیلی ترکیب

ہم اب ہارمونی مرتعش کی مساوات شروڈنگر کو دوبارہ لوٹ کر

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

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

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \tag{۲.۷۱}$$

مساوات شروڈنگر اب درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

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

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

$$K\equiv\frac{2E}{\hbar\omega} \tag{۲.۷۳}$$

ہم نے مساوات ۲.۷۲ کو حل کرنا ہو گا۔ ایسا کرتے ہوئے ہمیں K اور (یوں E) کی "اجازتی" قیمتیں بھی حاصل ہوں گی۔

ہم اس صورت سے شروع کرتے ہیں جہاں ξ کی قیمت (یعنی x کی قیمت) بہت بڑی ہو۔ ایسی صورت میں ξ^2 کی قیمت K کی قیمت سے بہت زیادہ ہو گی لہٰذا مساوات ۲.۷۲ درج ذیل روپ اختیار کرے گی

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}\approx\xi^2\psi \tag{۲.۷۴}$$

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

$$\psi(\xi)\approx Ae^{-\xi^2/2}+Be^{+\xi^2/2} \tag{۲.۷۵}$$

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

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

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

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

اور توقع کرنی چاہیے کہ جو کچھ باقی رہ جائے، $h(\xi)$، اس کی صورت $\psi(\xi)$ سے سادہ ہو۔[۵۲] ہم مساوات ۲.۷۷ کے تفرقات

$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}\xi} = \Big(\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}\xi} - \xi h\Big)e^{-\xi^2/2}$$

اور

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} = \Big(\frac{\mathrm{d}^2h}{\mathrm{d}\xi^2} - 2\xi\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}\xi} + (\xi^2-1)h\Big)e^{-\xi^2/2}$$

لیتے ہیں لہٰذا مساوات شروڈنگر (مساوات ۲.۷۲) درج ذیل صورت اختیار کرتی ہے۔

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

ہم **ترکیب فروبنیوس**[۵۳] استعمال کرتے ہوئے مساوات ۲.۷۸ کا حل ξ کے طاقتی تسلسل کی صورت میں حاصل کرتے ہیں۔

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

اس تسلسل کے جزو در جزو تفرقات

$$\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}\xi} = a_1 + 2a_2\xi + 3a_3\xi^2 + \cdots = \sum_{j=0}^{\infty} ja_j\xi^{j-1}$$

اور

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

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

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

---

[۵۲] اگرچہ ہم نے مساوات ۲.۷۷ لکھتے ہوئے تخمین سے کام لیا، اس کے بعد باقی تمام بالکل ٹھیک ہے۔ تفرقی مساوات کے طاقتی تسلسل حل میں متقاربی جزو کا چھیلنا عموماً پہلا قدم ہوتا ہے۔

[۵۳] Frobenius method

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

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

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

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

یہ **کلیہ توالی**[۵۴] مساوات شروڈنگر کا مکمل مبدل ہے جو a_0 سے ابتداء کرتے ہوئے تمام جفت عددی سر

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

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

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

ہم مکمل حل کو درج ذیل لکھتے ہیں

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

جہاں

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

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

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

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

البتہ اس طرح حاصل حلوں میں سے کئی ناقابل معمول زنی 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

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

---

[۵۴] recursion formula

ہو گا جہاں C ایک مستقل ہے اور اس سے (بڑی ξ 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 متقاربی روپ[۵۵] ہے جو ہم نہیں چاہتے۔ اس مشکل سے نکلنے کا ایک ہی طریقہ ہے۔ قابل معمول زنی 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 $h_{\text{جفت}}$ تسلسل یا $h_{\text{طاق}}$ تسلسل اختتام پذیر ہو گا؛ جبکہ دوسرا لازماً ابتداء سے ہی صفر ہو گا؛ جفت n کی صورت میں $a_1 = 0$ ہو گا جبکہ طاق n کی صورت میں $a_0 = 0$ ہو گا)۔ یوں قابل قبول طبیعی حل کے لیے مساوات ۲.۸۱ کے تحت درج ذیل ہو گا

$$K = 2n + 1$$

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

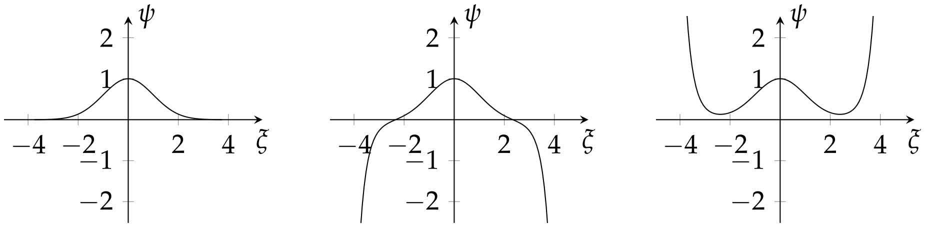
$$E_n = (n + \tfrac{1}{2})\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2 \cdots \tag{۲.۸۳}$$

یوں ہم ایک مختلف طریقہ کار سے مساوات ۲.۶۱ میں الجبرائی طریقہ سے حاصل کردہ بنیادی کوانٹازنی شرط دوبارہ حاصل کرتے ہیں۔ ابتدائی طور پر یہ حیرانی کی بات نظر آتی ہے کہ توانائی کی کوانٹازنی، مساوات شروڈنگر 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 تابع حل پائے جاتے ہیں)۔ تاہم ان میں سے زیادہ تر حل، بڑی x پر، بے قابو قوت نمائی بڑھتے ہیں جس کی بنا پر یہ ناقابل معمول زنی ہوں گے۔ مثال کے طور پر فرض کریں ہم E کی کسی ایک اجازتی قیمت سے معمولی کم قیمت (مثلاً $0.49\hbar\omega$) لے کر حل کو ترسیم کرتے ہیں (شکل ۲.۶-ا)؛ اس کی دم لامتناہی کی طرف بڑھے گی۔ اب E کی قیمت کسی ایک اجازتی قیمت سے معمولی زیادہ (مثلاً $0.51\hbar\omega$) تصور کر کے حل کو ترسیم کرتے ہیں؛ اب حل کی دم[۵۶] دوسری سمت میں لامتناہی کی طرف بڑھے گی (شکل ۲.۶-ب)۔ 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 الٹ (مخالف) طرف لامتناہی کی طرف بڑھے گی۔ ٹھیک 0.50 پر اس کی دم صفر کو پہنچ کر قابل معمول زنی حل دے گی (شکل ۲.۶-ج)۔

---

[۵۵] یہ حیرت کی بات نہیں کہ مساوات ۲.۸۱ میں بدخو حل بھی شامل ہے۔ یہ کلیہ توالی ہر لحاظ سے مساوات شروڈنگر کا معادل ہے لہٰذا اس میں لازماً وہ دونوں متقاربی حل شامل ہوں گے جنہیں ہم نے مساوات ۲.۷۵ میں حاصل کیا۔

[۵۶] ہم اس کو دم ہلانے (wagthetail) کی ترکیب کہہ سکتے ہیں۔ جب بھی دم ہلے، آپ جان جائیں کہ آپ اجازتی توانائی پر سے گزرے ہیں۔ سوال ۲.۵۴ تا سوال ۲.۵۶ دیکھیں۔



(ج) (ب) (ا)

شکل ۲.۶: مساوات شروڈنگر کی (ا) $E = 0.49\hbar\omega$، (ب) $E = 0.51\hbar\omega$ اور (ج) $E = \hbar\omega$ صورت میں حل۔

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

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

اگر $n = 0$ ہو تب تسلسل میں ایک جزو پایا جائے گا (ہمیں $a_1 = 0$ لینا ہو گا تا کہ $h_{\text{طاق}}$ خارج ہوں، اور مساوات ۲.۸۴ میں $j = 0$ سے $a_2 = 0$ حاصل ہوتا ہے):

$$h_0(\xi) = a_0$$

لہٰذا

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

(جو ماسوائے معمول زنی، مساوات ۲.۵۹ دوبارہ دیتی ہے)۔ اسی طرح ہم $n = 1$ کے لیے $a_0 = 0$ لیں گے[57]، اور مساوات ۲.۸۴ میں $j = 1$ سے $a_3 = 0$ حاصل ہو گا، لہٰذا

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

اور

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

ہو گا (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

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

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

جدول ۲.۱: ابتدائی چند ہرمائٹ کثیر رکنیاں $H_n(\xi)$

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

اور

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

ہوں گے، وغیرہ وغیرہ۔ (سوال ۲.۱۰ کے ساتھ موازنہ کریں جہاں یہ آخری نتیجہ الجبرائی ترکیب سے حاصل کیا گیا۔) عمومی طور پر $h_n(\xi)$ متغیر ξ کا n درجی کثیر رکنی ہو گا، جو جفت عدد صحیح n کی صورت میں جفت طاقتوں کا اور طاق عدد صحیح n کی صورت میں طاق طاقتوں کا کثیر رکنی ہو گا۔ جزو ضربی a_0 اور a_1 کے علاوہ یہ عین ہرمائٹ کثیر رکنی[58] $H_n(\xi)$ ہیں[59]۔ جدول ۲.۱ میں اس کے چند ابتدائی ارکان پیش کیے گئے ہیں۔ روایتی طور پر اختیاری جزو ضربی یوں منتخب کیا جاتا ہے کہ ξ کے بلند تر طاقت کا عددی سر 2^n ہو۔ اس روایت کے تحت ہارمونی مسر تعش کے معمول شدہ[60] ساکن حالات درج ذیل ہوں گے

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

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

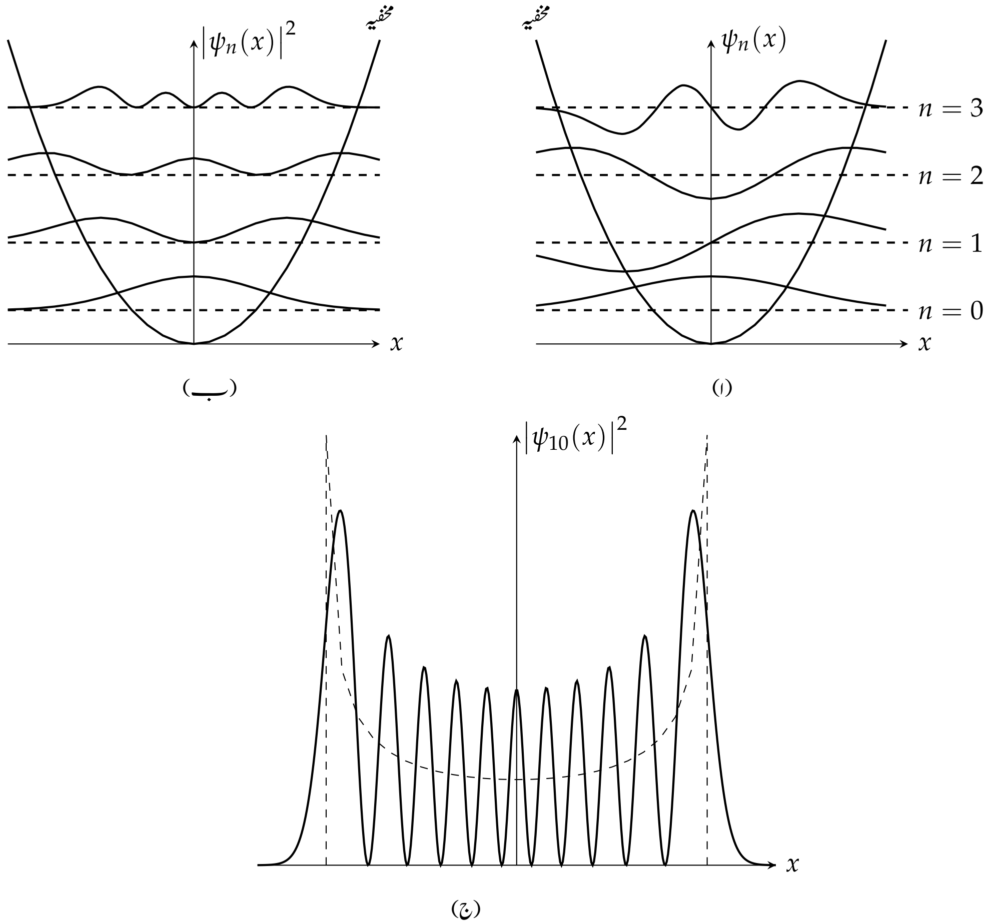
سوال ۲.۱۵: ہارمونی مسر تعش کے زمینی حال میں کلاسیکی اجازتی خطہ کے باہر ایک ذرہ کی موجودگی کا احتمال (تین با معنی ہندسوں تک) تلاش کریں۔ اشارہ: کلاسیکی طور پر ایک مسر تعش کی توانائی $E = (1/2)ka^2 = (1/2)m\omega^2a^2$ ہو گی جہاں a حیطہ ہے۔ یوں توانائی E کے مسر تعش کا "کلاسیکی اجازتی خطہ" $-\sqrt{2E/m\omega^2}$ تا $+\sqrt{2E/m\omega^2}$ ہو گا۔ تکمل کی قیمت "عمومی تقسیم" یا "تفاعل خلل" کی جدول سے دیکھیں۔

سوال ۲.۱۶: کلیہ توالی (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 سر روایت کے تحت 2^n لیں۔

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

---

[58] Hermite polynomials
[59] ہرمائٹ کثیر رکنیوں پر سوال ۲.۱۷ میں مزید غور کیا گیا ہے۔
[60] میں یہاں معمول زنی مستقلات حاصل نہیں کروں گا۔



شکل ۲.۷: ہارمونی مرتعش کے ابتدائی چار ساکن حالات۔

ا. **کلیہ روڈریگیس**[۶۱] درج ذیل کہتا ہے۔

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

اس کو استعمال کرکے H_3 اور H_4 اخذ کریں۔

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

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

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

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

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

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

د. **پیداکار تفاعل**[۶۲] $e^{-z^2+2z\xi}$ کا $z = 0$ پر n واں تفرق $H_n(\xi)$ ہوگا، یا دوسرے لفظوں میں، درج ذیل تفاعل کے ٹیلر توسیع میں یہ $z^n/n!$ کا عددی سر ہوگا۔

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

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

۲.۴ آزاد ذرہ

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

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

---

[۶۱] Rodrigues formula
[۶۲] generating function

یا ذیل ہے۔

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi \qquad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{۲.۹۱}$$

یہاں تک یہ لامتناہی چوکور کنویں (مساوات ۲.۲۱) کی مانند ہے جہاں (بھی) مخفی قوہ صفر ہے؛ البتہ اس بار، میں عمومی مساوات کو قوت نما (ناکہ سائن اور کوسائن) کی صورت میں لکھنا چاہوں گا، جس کی وجہ آپ پر جلد عیاں ہو گی۔

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

لامتناہی چوکور کنویں 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؛ لہٰذا آزاد ذرہ کسی بھی (مثبت) توانائی کا حامل ہو سکتا ہے۔ اس کے ساتھ تابعیت وقت $e^{-iEt/\hbar}$ جوڑتے ہوئے ذیل حاصل ہو گا۔

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

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 اقل یا اعظم قیمت نقطہ) تفاعل کے **دلیل**[۶۳] 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 لہٰذا موج کی شکل و صورت حرکت کے ساتھ تبدیل نہیں ہو گی۔ 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 (اتنی ہی توانائی کی) موج کو ظاہر کرتا ہے۔ چونکہ ان میں فرق صرف k کی علامت کا ہے لہٰذا انہیں درج ذیل بھی لکھا جا سکتا ہے

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

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

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

صاف ظاہر ہے کہ آزاد ذرے کے "ساکن حالات" حرکت کرتی امواج کو ظاہر کرتے ہیں، جن کی طول موج $\lambda = 2\pi/|k|$ ہو گا، اور کلیہ ڈی بروگلی (مساوات ۱.۳۹) کے تحت ان کا معیار حرکت درج ذیل ہو گا۔

$$p = \hbar k \tag{۲.۹۶}$$

---

[۶۳] argument

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

$$v_{\text{کوانٹائی}} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}} \tag{۲.۹۷}$$

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

$$v_{\text{کلاسیکی}} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{\text{کوانٹائی}} \tag{۲.۹۸}$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^* \Psi_k \, \mathrm{d}x = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x = |A|^2 \, (\infty) \tag{۲.۹۹}$$

یوں آزاد ذرے کی صورت میں قابل علیحدگی حل طبعی طور پر قابل قبول حالات کو ظاہر نہیں کرتے ہیں۔ ایک آزاد ذرہ ساکن حال میں نہیں پایا جا سکتا ہے؛ دوسرے لفظوں میں، غیر مبہم توانائی کے ایک آزاد ذرے کا تصور بے معنی ہے۔

اس کا ہرگز یہ مطلب نہیں کہ قابل علیحدگی حل ہمارے کسی کام کے نہیں ہیں، کیونکہ یہ طبعی مفہوم سے آزاد، ریاضیاتی کردار ادا کرتے ہیں۔ تابع وقت مساوات شروڈنگر کا عمومی حل اب بھی قابل علیحدگی حلوں کا خطی جوڑ ہو گا (صرف اتنا ہے کہ غیر مسلسل اشاریہ n پر مجموعہ کی بجائے اب یہ استمراری متغیر k کے لحاظ سے تکمل ہو گا)۔

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

(ہم $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ کو اپنی آسانی کیلئے تکمل کے باہر نکالتے ہیں؛ مساوات ۲.۱۷ میں عددی سر c_n کی جگہ یہاں $(1/\sqrt{2\pi})\phi(k)\,\mathrm{d}k$ کردار ادا کرتا ہے۔) اب اس تفاعل موج کی (موزوں $\phi(k)$ کیلئے) معمول زنی کی جا سکتی ہے۔ تاہم اس میں k کی قیمتوں کی سعت پائی جائے گی، لہٰذا توانائیوں اور رفتاروں کی بھی سعت پائی جائیں گی۔ ہم اس کو **موجی اکٹھ**[۶۴] کہتے ہیں۔[۶۵]

عمومی کوانٹائی مسئلہ میں ہمیں $\Psi(x,0)$ فراہم کر کے $\Psi(x,t)$ تلاش کرنے کو کہا جاتا ہے۔ آزاد ذرے کیلئے اس کا حل مساوات ۲.۱۰۰ کی صورت اختیار کرتا ہے۔ اب یہ سوال پیدا ہوتا ہے کہ ابتدائی تفاعل موج

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

---

[۶۴] wavepacket

[۶۵] سائن نما امواج کی وسعت لامتناہی تک پہنچتی ہے اور یہ ناقابل معمول زنی ہوتی ہیں۔ تاہم ایسی امواج کا خطی میل تباہ کن مداخلت پیدا کرتا ہے، جس کی بنا پر مقام بندی اور معمول زنی ممکن ہوتی ہے۔

پر پورا اترتا ہوا $\phi(k)$ کیسے تعین کیا جائے؟ یہ فوریئر تجزیہ کا کلاسیکی مسئلہ ہے جس کا جواب **مسئلہ پلانشرال**:[۶۶]

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} \, \mathrm{d}k \Leftrightarrow F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} \, \mathrm{d}x \tag{۲.۱۰۲}$$

پیش کرتا ہے (سوال ۲.۲۰ دیکھیں)۔ $F(k)$ کو $f(x)$ کا **فوریئر بدل**[۶۷] کہا جاتا ہے جبکہ $f(x)$ کو $F(k)$ کا **الٹ فوریئر بدل**[۶۸] کہتے ہیں (ان دونوں میں صرف قوت نما کی علامت کا فرق پایا جاتا ہے)۔ ہاں، اجازتی تفاعل پر کچھ پابندی ضرور عائد ہے: تکمل کا موجود[۶۹] ہونا لازم ہے۔ ہمارے مقاصد کے لئے، تفاعل $\Psi(x,0)$ پر بذات خود معمول شدہ ہونے کی طبعی شرط مسلط کرنا اس کی ضمانت دے گا۔ یوں آزاد ذرے کے عمومی کوانٹائی مسئلہ کا حل مساوات ۲.۱۰۰ ہو گا جہاں $\phi(k)$ درج ذیل ہو گا۔

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

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:

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

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

حل: ہم پہلے $\Psi(x,0)$ کی معمول زنی کرتے ہیں۔

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

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

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

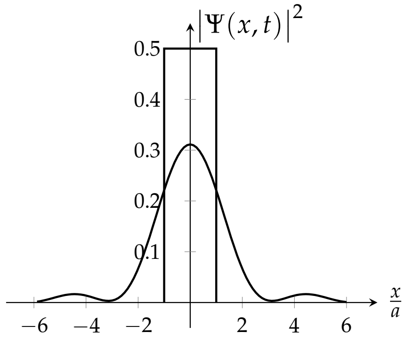
---

[۶۶] Plancherel'stheorem

[۶۷] Fouriertransform

[۶۸] inverseFouriertransform

[۶۹] تفاعل $f(x)$ پر عائد لازم اور کافی پابندی یہ ہے کہ $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 \, \mathrm{d}x$ متناہی ہو۔ (ایسی صورت میں $\int_{-\infty}^{\infty} |F(k)|^2 \, \mathrm{d}k$ بھی متناہی ہو گا، اور حقیقتاً ان دونوں تکملات کی قیمتیں ایک جتنی ہوں گی۔ Arfken کے حصہ 5.15 میں حاشیہ 24 دیکھیں۔)



شکل ۲.۸: تفاعل $|\Psi(x,t)|^2$ کی لمحہ $t=0$ پر مستطیل اور $t=ma^2/\hbar$ پر قوسی ترسیم (مساوات ۲.۱۰۴)۔

آخر میں ہم اس کو دوبارہ مساوات ۲.۱۰۰ میں پر کرتے ہیں۔

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

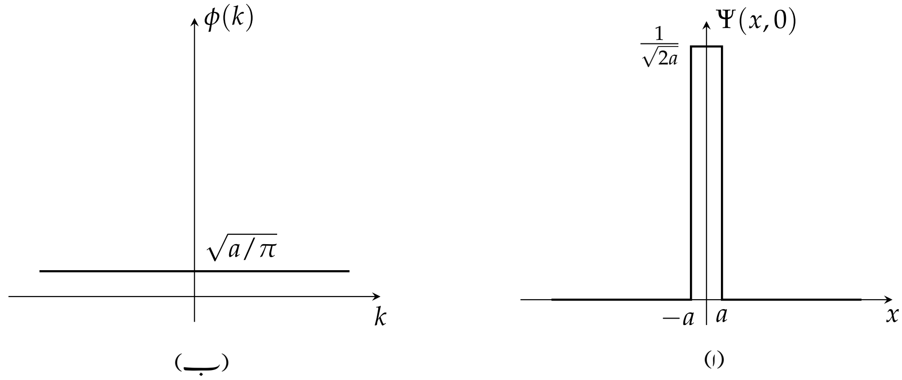
بد قسمتی سے اس تکمل کو بنیادی تفاعل کی صورت میں حل کرنا ممکن نہیں ہے، تاہم اس کی قیمت کو اعدادی تراکیب سے حاصل کیا جا سکتا ہے (شکل ۲.۸)۔ (ایسی بہت کم صورتیں حقیقتاً پائی جاتی ہیں جن کے لئے $\Psi(x,t)$ کا تکمل (مساوات ۲.۱۰۰) صریحاً حل کرنا ممکن ہو۔ سوال ۲.۲۲ میں ایسی ایک بالخصوص خوبصورت مثال پیش کی گئی 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 ۲.۹-ا)۔ ایسی صورت میں ہم چھوٹے زاویوں کے لئے تخمیناً $\sin ka\approx ka$ لکھ کر درج ذیل حاصل کرتے ہیں

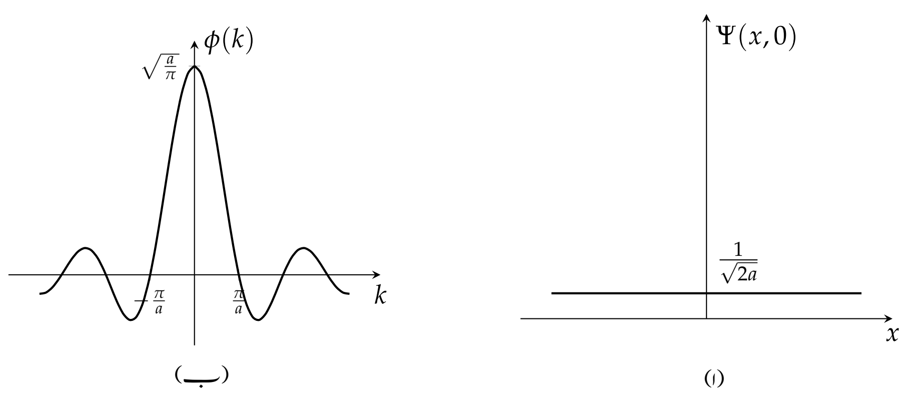
$$\phi(k)\approx\sqrt{\frac{a}{\pi}}$$

جو k کی مختلف قیمتوں کا آپس میں کٹ جانے کی بنا پر افقی ہے (شکل ۲.۹-ب)۔ یہ مثال ہے اصول عدم یقینیت کی: اگر ذرے کے مقام میں وسعت کم ہو، تب اس کی معیار حرکت (لہٰذا k، مساوات ۲.۹۶ دیکھیں) کی وسعت لازماً زیادہ ہو گا۔ اس کی دوسری انتہا (بڑی a) کی صورت میں مقام کی وسعت وزیادہ ہو گی (شکل ۲.۱۰) لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

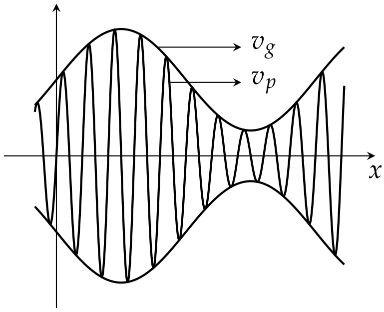
$$\phi(k)=\sqrt{\frac{a}{\pi}}\frac{\sin ka}{ka}$$



شکل ۲.۹: چھوٹے a کے لئے مثال ۲.۶۔ (ا) $\Psi(x,0)$ کی ترسیم؛ (ب) $\phi(k)$ کی ترسیم۔



شکل ۲.۱۰: بڑی a کے لئے (ا) $\Psi(x,0)$ کی ترسیم، (ب) $\phi(k)$ کی ترسیم (مثال ۲.۶)۔



شکل ۲.۱۱: موجی اکٹھ۔ "غلاف" گروہی سمتی رفتار جبکہ لہر دوری سمتی رفتار سے حرکت کرتی ہے۔

اب $\sin z/z$ کی اعظم قیمت $z = 0$ پر پائی جاتی ہے جو گھٹ کر $z = \pm\pi$ (جو یہاں $k = \pm\pi/a$ کو ظاہر کرتا ہے) پر صفر ہوتی ہے۔ یوں بڑی a کیلئے $k = 0$ پر $\phi(k)$ نوکیلی صورت اختیار کرے گا (شکل ۲.۱۰)۔ 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 ۲.۹۴ میں دیا گیا علیحدگی حل $\Psi_k(x,t)$، ٹھیک اس ذرہ کی رفتار سے حرکت نہیں کرتی ہے جس کو یہ بظاہر ظاہر کرتی ہے۔ حقیقتاً یہ مسئلہ وہیں پر ختم ہو گیا تھا جب ہم جان چکے کہ Ψ_k طبعی طور پر قابل حصول حل نہیں ہے۔ بحر حال آزاد ذرے کی تفاعل موج (مساوات ۲.۱۰۰) میں سموئی سمتی رفتار کی معلومات پر غور کرنا دلچسپی کا باعث ہے۔ بنیادی تصور کچھ یوں ہے: سائن نما تفاعلات کا خطی میل جس کے حیطہ کو ϕ ترمیم کرتا ہو (شکل ۲.۱۱) موجی اکٹھ ہو گا؛ یہ "غلاف" میں ڈھانکے ہوئے "لہروں" پر مشتمل ہو گا۔ انفرادی لہر کی رفتار، جس کو **دوری سمتی رفتار**[70] (v_p) کہتے ہیں، ہر گز ذرے کی سمتی رفتار کو ظاہر نہیں کرتی ہے بلکہ غلاف کی رفتار، جس کو **گروہی سمتی رفتار**[71] (v_g) کہتے ہیں، ذرے کی رفتار ہو گی۔ غلاف کی سمتی رفتار لہروں کی فطرت پر منحصر ہو گی؛ یہ لہروں کی سمتی رفتار سے زیادہ، کم یا اس کے برابر ہو سکتی ہے۔ ایک دھاگے پر امواج کی گروہی سمتی رفتار اور دوری سمتی رفتار برابر ہوتی ہیں۔ پانی کی امواج کیلئے یہ دوری سمتی رفتار کی نصف ہو گی، جیسا آپ نے جھیل میں پتھر پھینک کر دیکھا ہو گا (اگر آپ پانی کی ایک مخصوص لہر پر نظر جمائے رکھیں تو آپ دیکھیں گے کہ، پیچھے سے آگے کی طرف بڑھتے ہوئے، آغاز میں اس لہر کا حیطہ بڑھتا ہے جبکہ آخر میں آگے پہنچ کر اس کا حیطہ گھٹ کر صفر ہو جاتا ہے؛ اس دوران یہ تمام بطور ایک مجموعہ نصف رفتار سے حرکت کرتا ہے۔) یہاں میں نے دکھانا ہو گا کہ کوانٹائی میکانیات میں آزاد ذرے کے تفاعل موج کی گروہی سمتی رفتار اس کی دوری سمتی رفتار سے دگنی ہے، جو عین ذرے کی کلاسیکی رفتار ہے۔

[70] phasevelocity
[71] groupvelocity

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

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

(یہاں $\omega = (\hbar k^2/2m)$ ہے، لیکن جو کچھ میں کہنے جا رہا ہوں وہ کسی بھی موجی اکھ کیلئے، اس کے **انتشاری رشتہ**[۴۲] (ω کا متغیر k کے لحاظ سے کلیہ) سے قطع نظر، درست ہوگا۔) ہم فرض کرتے ہیں کہ کسی مخصوص قیمتی k_0 پر $\phi(k)$ نوکیلی صورت اختیار کرتا ہے۔ (ہم زیادہ وسعت کا k بھی لے سکتے ہیں لیکن ایسے موجی اکھ کے مختلف اجزاء مختلف رفتار سے حرکت کرتے ہیں جس کی بنا پر یہ موجی اکھ بہت تیزی سے اپنی شکل وصورت 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 متکمل قابل نظر انداز ہے لہٰذا ہم تفاعل $\omega(k)$ کو اس نقطہ کے گرد ٹیلر تسلسل سے پھیلا کر صرف ابتدائی اجزاء لیتے ہیں:

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

جہاں نقطہ k_0 پر k کے لحاظ سے ω کا تفرق ω_0' ہے۔

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

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

وقت $t=0$ پر

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

جبکہ بعد کے وقت پر درج ذیل ہوگا۔

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

ماسوائے x کو $(x-\omega_0' t)$ منتقل کرنے کے یہ $\Psi(x,0)$ میں پایا جانے والا تکمل ہے۔ یوں درج ذیل ہوگا۔

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

ماسوائے دوری جزو ضربی کے (جو کسی بھی صورت میں $|\Psi|^2$ کی قیمت پر اثر انداز نہیں ہوگا) یہ موجی اکھ بظاہر سمتی رفتار ω_0' سے حرکت کرے گا:

$$v_{\text{گروہی}} = \frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k} \tag{۲.۱۰۶}$$

---

[۴۲] dispersion relation

(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۔

$$v_{\text{دوری}} = \frac{\omega}{k} \tag{۲.۱۰۷}$$

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

$$v_{\text{کلاسیکی}} = v_{\text{گروہی}} = 2v_{\text{دوری}} \tag{۲.۱۰۸}$$

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۔ مستقلات C اور D کو مستقلات A اور B کی صورت میں لکھیں۔ اسی طرح مستقلات A اور B کو مستقلات C اور D کی صورت میں لکھیں۔ تبصرہ: کوانٹائی میکانیات میں جب $V = 0$ ہو، قوت نمائی تفاعل حرکت کرتے امواج کو ظاہر کرتی ہے اور انہیں استعمال کرتے ہوئے آزاد ذرے پر تبصرہ کرنا زیادہ آسان ہوتا ہے، جبکہ $\sin$ اور $\cos$ ساکن امواج کو ظاہر کرتی ہے جو لامتناہی چوکور کنویں میں پائی جاتی ہے۔

سوال ۲.۱۹: مساوات ۲.۹۴ میں دی گئی آزاد ذرے کے تفاعل موج کا احتمال رو J تلاش کریں (سوال 14.1 دیکھیں)۔ احتمال رو کے بہاو کا رخ کیا ہو گا؟

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

ا. مسئلہ ڈرشلے کہتا ہے کہ وقفہ $[-a, +a]$ پر کسی بھی تفاعل $f(x)$ کو فوریئر تسلسل توسیع سے ظاہر کیا جا سکتا 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 جا سکتا 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 ہو گا؟

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

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

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

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

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

د. حد $a \to \infty$ 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 ہوئیں۔ اس کے باوجود حد $a \to \infty$ کی صورت میں ان دونوں کی ساخت مشابہت رکھتی ہیں۔

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

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

جہاں A اور a مثبت حقیقی مستقل ہیں۔

ا. $\Psi(x, 0)$ کی معمول زنی کریں۔

ب. $\phi(k)$ تلاش کریں۔

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

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

سوال ۲.۲۲: **گاوسی موجی اکٹھ** ایک آزاد ذرے کا ابتدائی تفاعل موج درج ذیل ہے

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

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

ا. $\Psi(x, 0)$ کی معمول زنی کریں۔

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(ax^2 + bx)} \, \mathrm{d}x$$

مان لیں $y \equiv \sqrt{a}[x + (b/2a)]$ ہے۔ یوں $(ax^2 + bx) = y^2 - (b^2/4a)$ ہو گا۔ جواب:

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

ج. $|\Psi(x,t)|^2$ تلاش کریں۔ اپنا جواب درج ذیل مقدار کی صورت میں لکھیں۔

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

وقت $t = 0$ پر $|\Psi|^2$ کا خاکہ (بطور x کا تفاعل) بنائیں۔ کسی بڑے t پر دوبارہ خاکہ کھینچیں۔ وقت گزرنے کے ساتھ ساتھ $|\Psi|^2$ کو کیا ہو گا؟

د. توقعاتی قیمتیں $\langle x\rangle$ ، $\langle p\rangle$ ، $\langle x^2\rangle$ اور $\langle p^2\rangle$ ؛ اور احتمالات σ_x اور σ_p تلاش کریں۔ جزوی جواب: $\langle p^2\rangle = a\hbar^2$ ، تاہم جواب کو اس سادہ روپ میں لانے کیلئے آپ کو کافی الجبرا کرنا ہو گا۔

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

۲.۵ ڈیلٹا تفاعل مخفیہ

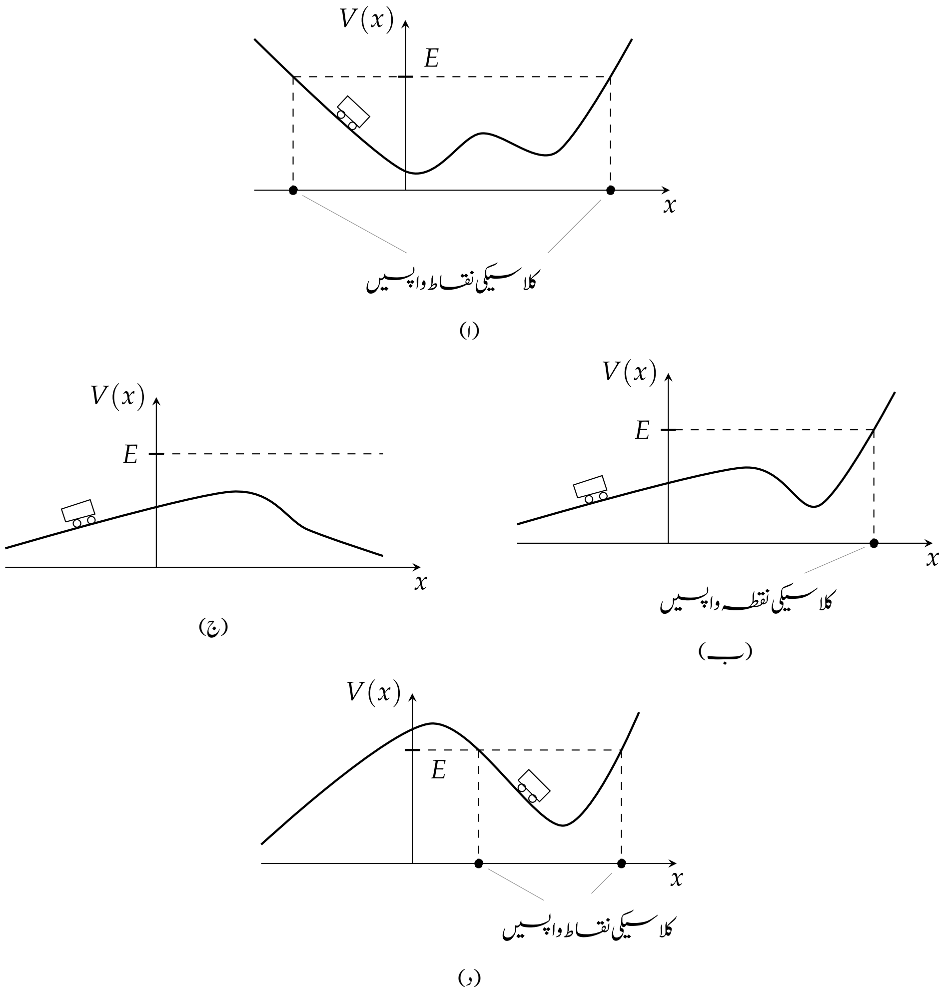
۲.۵.۱ مقید حالات اور بکھراو حالات

ہم غیر تابع وقت مساوات شرودنگر کے دو مختلف حل دیکھ چکے ہیں: لامتناہی چوکور کنواں اور ہارمونی مرتعش کے حل قابل معمول زنی تھے اور انہیں غیر مسلسل اشاریہ n کے لحاظ سے نام دیا جاتا ہے؛ آزاد ذرے کے لیے یہ ناقابل معمول زنی ہیں اور انہیں استمراری متغیر k کے لحاظ سے نام دیا جاتا ہے۔ اول الذکر بذات خود طبیعی طور پر قابل حصول حل کو ظاہر کرتے ہیں جبکہ موخر الذکر ایسا نہیں کرتے ہیں؛ تاہم دونوں صورتوں میں تابع وقت مساوات شرودنگر کے عمومی حل ساکن حالات کا خطی جوڑ ہو گا۔ پہلی قسم میں یہ جوڑ (n پر لیا گیا) مجموعہ ہو گا، جبکہ دوسرے میں یہ (k پر) تکمل ہو گا۔ اس امتیاز کی طبیعی اہمیت کیا ہے؟

کلاسیکی میکانیات میں یک بُعدی غیر تابع وقت مخفیہ دو مکمل طور پر مختلف حرکات پیدا کر سکتی ہے۔ اگر $V(x)$ ذرے کی کل توانائی E سے دونوں جانب زیادہ بلند ہو (شکل ۲.۱۲-ا) تب یہ ذرہ اس مخفی توانائی کے کنویں میں "پھنسا" رہے گا: یہ **واپسی نقاط**[43] کے بیچ آگے پیچھے حرکت کرتا رہے گا اور کنویں 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 حال**[44] کہتے ہیں۔ اس کے برعکس اگر E ایک (یا دونوں) جانب $V(x)$ سے تجاوز کرے تب، لامتناہی سے آتے ہوئے، مخفی توانائی کے زیر اثر ذرہ اپنی رفتار کم یا زیادہ کرے گا اور اس کے بعد واپس لامتناہی کو لوٹے گا (شکل ۲.۱۲-ب اور ج)۔ (یہ ذرہ مخفی توانائی میں پھنس نہیں سکتا ہے، ماسوائے اس صورت کہ اس کی توانائی (مثلاً رگڑ کی بنا) گھٹے، لیکن ہم یہاں بھی ایسی صورت کی بات نہیں کر رہے ہیں۔) ہم اسے **بکھراو حال**[45] کہتے ہیں۔ بعض مخفی توانائیاں صرف مقید حال پیدا کرتی ہیں (مثلاً ہارمونی مرتعش)؛ بعض صرف بکھراو حال پیدا کرتی ہیں (مثلاً پہاڑ مخفیہ جو کہیں پر بھی نیچے نہ جھکتا ہو)؛ اور بعض، ذرہ کی توانائی پر منحصر، دونوں اقسام کے حال پیدا کرتی ہیں۔

---

[43] turningpoints
[44] boundstate
[45] scatteringstate



شکل ۲.۱۲: (ا) مقید حال، (ب، ج) بکھراو حالات، (د) کلاسیکی مقید حال، لیکن کوانٹائی بکھراو حال۔

مساوات شروڈنگر کے حلوں کے دو اقسام ٹھیک انہیں مقید اور بکھراو حال کو ظاہر کرتی ہیں۔ کوانٹائی کے دائرہ کار میں یہ فرق اس سے بھی زیادہ واضح ہے جہاں **سرنگ زنی**[76] (جس پر ہم کچھ دیر میں بات کریں گے) ایک ذرے کو کسی بھی متناہی مخفیہ رکاوٹ کے اندر سے گزرنے دیتی ہے، لہٰذا مخفیہ کی قیمت صرف لامتناہی پر اہم ہو گی (شکل ۲.۱۲-د)۔

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

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

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

چونکہ $x \to \pm\infty$ پر لامتناہی چوکور کنویں اور ہارمونی مرتعش کی مخفی توانائیاں لامتناہی کو پہنچتی ہیں لہٰذا یہ صرف مقید حالات پیدا کرتی ہیں جبکہ آزاد ذرے کی مخفی توانائی ہر مقام پر صفر ہوتی ہے لہٰذا یہ صرف بکھراو حال[77] 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

مبدا پر لامتناہی کم چوڑائی اور لامتناہی بلند ایسا نوکیلا تفاعل جس کا رقبہ اکائی ہو (شکل 13.2) **ڈیلٹا تفاعل**[78] کہلاتا ہے۔

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases} \qquad\qquad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = 1 \tag{۲.۱۱۱}$$

نقطہ $x = 0$ پر یہ تفاعل متناہی نہیں ہے لہٰذا تکنیکی طور پر اس کو تفاعل کہنا غلط ہو گا (ریاضی دان اسے **متعمم تفاعل**[79] یا **متعمم تقسیم**[80] کہتے ہیں)۔[81] تاہم اس کا تصور نظریہ طبیعیات میں اہم کردار ادا کرتا ہے۔ (مثال کے طور پر، برقی حرکیات کے میدان میں نقطی بار کی کثافت بار ایک ڈیلٹا تفاعل ہو گا۔) آپ دیکھ سکتے ہیں کہ نقطہ a پر اکائی رقبہ کا نوکیلی تفاعل ہو گا۔ چونکہ $\delta(x - a)$ نقطہ a اور ایک سادہ تفاعل $f(x)$ کا $\delta(x-a)$

[76] tunneling

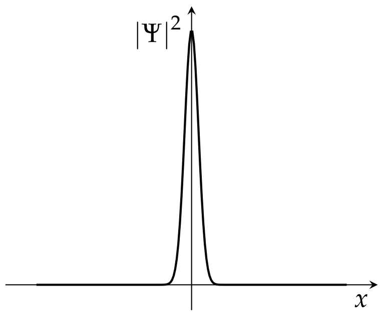
[77] آپ کو یہاں پریشانی کا سامنا ہو سکتا ہے کیونکہ عمومی مسئلہ جس کے لئے $E > V_{\text{اقل}}$ درکار ہے (سوال ۲.۲)، بکھراو حال، جو ناقابل معمول زنی ہیں، پر لاگو نہیں ہو گا۔ اگر آپ اس سے مطمئن نہیں ہیں تب $E \leq 0$ کے لئے مساوات شروڈنگر کو آزاد ذرہ کے لئے حل کر کے دیکھیں کہ اس کے خطی جوڑ بھی ناقابل معمول زنی ہیں۔ صرف مثبت مخفی توانائی حل مکمل سلسلہ دیں گے۔

[78] Diracdeltafunction

[79] generalizedfunction

[80] generalizeddistribution

[81] ڈیلٹا تفاعل کو ایسے مستطیل (یا شلث) کی تحدیدی صورت تصور کیا جا سکتا ہے جس کی چوڑائی بتدریج کم اور قد بتدریج بڑھتا ہو۔



شکل ۲.۱۳: ڈیراک ڈیلٹا تفاعل (مساوات ۲.۱۱۱)

حاصل ضرب نقطہ a کے علاوہ ہر مقام پر صفر ہوگا لہٰذا $\delta(x-a)$ کو $f(x)$ سے ضرب دینا، اسے $f(a)$ سے ضرب دینے کے مترادف ہے:

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a) \tag{۲.۱۱۲}$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a)\,\mathrm{d}x = f(a)\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(x-a)\,\mathrm{d}x = f(a) \tag{۲.۱۱۳}$$

تکمل کی علامت کے اندر سے نقطہ a پر تفاعل $f(x)$ کی قیمت "اٹھاتا" ہے۔ (لازمی نہیں کہ تکمل $-\infty$ تا $+\infty$ ہو، صرف اتنا ضروری ہے کہ تکمل کے دائرہ کار میں نقطہ a شامل ہو لہٰذا $a-\epsilon$ 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۔[۸۲]

$$V(x) = -\alpha\delta(x) \tag{۲.۱۱۴}$$

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

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

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

[۸۲] ڈیلٹا تفاعل کی اکائی ایک بٹا لمبائی ہے (مساوات ۲.۱۱۱ دیکھیں) لہٰذا α کا بُعد توانائی ضرب لمبائی ہوگا۔

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

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = k^2\psi \tag{۲.۱۱۶}$$

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

$$k \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \tag{۲.۱۱۷}$$

مساوات ۲.۱۱۶ کا عمومی حل

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

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

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

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

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

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

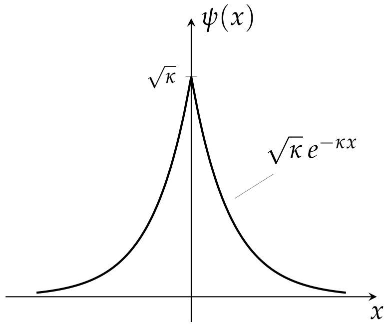
$$\begin{cases} 1. \quad \psi & \text{لازماً استمراری} \\ 2. \quad \frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x} & \text{استمراری، ماسوائے ان نقاط پر جہاں مخفیہ لامتناہی ہو} \end{cases} \tag{۲.۱۲۱}$$

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

$$\psi(x) = \begin{cases} Be^{kx}, & (x \le 0) \\ Be^{-kx}, & (x \ge 0) \end{cases} \tag{۲.۱۲۲}$$

تفاعل $\psi(x)$ کو شکل ۲.۱۴ میں ترسیم کیا گیا ہے۔ دوم سرحدی شرط ہمیں ایسا کچھ نہیں بتاتی ہے؛ (لامتناہی چوکور کنویں کی طرح) جوڑ پر مخفیہ لامتناہی ہے اور تفاعل کی ترسیل سے واضح ہے کہ $x = 0$ پر اس میں بل پایا جاتا ہے۔ مزید اب تک کی کہانی میں ڈیلٹا تفاعل کا کوئی کردار نہیں پایا گیا۔ ظاہر ہے کہ $x = 0$ پر ψ کے تفرق میں عدم استمرار یہی ڈیلٹا تفاعل تعین کرے گا۔ میں یہ عمل آپ کو کر کے دکھاتا ہوں جہاں آپ یہ بھی دیکھ پائیں گے کہ کیوں $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ عموماً استمراری ہوتا ہے۔

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



شکل ۲.۱۴: ڈیلٹا تفاعل مخفیہ (مساوات ۲.۱۲۲) کے لئے مقید حال تفاعل موج۔

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

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

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

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

یہاں درج ذیل ہو گا (مساوات ۲.۱۲۲):

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

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

$$k = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \tag{۲.۱۲۶}$$

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

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \tag{۲.۱۲۷}$$

آخر میں ψ کی معمول زنی کرتے ہوئے

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi(x)\right|^2 \mathrm{d}x = 2|B|^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx}\,\mathrm{d}x = \frac{|B|^2}{k} = 1$$

(اپنی آسانی کے لیے مثبت حقیقی جذر کا انتخاب کر کے) درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$B = \sqrt{k} = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} \tag{۲.۱۲۸}$$

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

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

ہم $E > 0$ کی صورت میں بکھراو حالات کے بارے میں کیا کہہ سکتے ہیں؟ مساوات شروڈنگر $x < 0$ کے لئے درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi$$

جہاں

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{۲.۱۳۰}$$

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

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

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

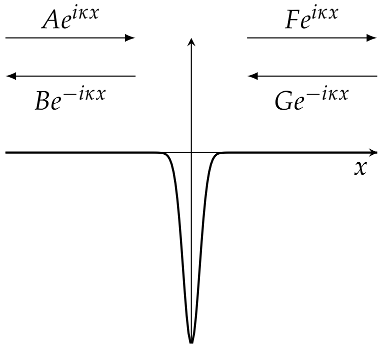
$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \tag{۲.۱۳۲}$$

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

$$F + G = A + B \tag{۲.۱۳۳}$$

تفرقات درج ذیل ہوں گے۔

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



شکل ۲.۱۵: ڈیلٹا تفاعل کنویں سے بکھراو۔

لہٰذا $(A+B)$ $=$ $\psi(0)$ ہوگا لہٰذا دوسری $\Delta(\mathrm{d}\psi/\,\mathrm{d}x) = ik(F-G-A+B)$ ہوگا۔ ساتھ ہی سرحدی شرط (مساوات ۲.۱۲۵) کہتی ہے

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

یا مختصراً:

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

دونوں سرحدی شرائط مسلط کرنے کے بعد ہمارے پاس دو مساوات (مساوات ۲.۱۳۳ اور ۲.۱۳۵) جبکہ چار نامعلوم مستقلات A ، B ، C اور D بلکہ k شامل کرتے ہوئے پانچ نامعلوم مستقل ہوں گے۔ یہ قابل معمول زنی حال نہیں ہے لہٰذا معمول زنی کرنا مددگار ثابت نہیں ہوگا۔ بہتر ہوگا کہ ہم رک کر ان مستقلات کی انفرادی طبعی اہمیت پر غور کریں۔ آپ کو یاد ہوگا کہ e^{ikx} (کے ساتھ تابع وقت جزو ضربی $e^{-iEt/\hbar}$ منسلک کرنے سے) دائیں رخ حرکت کرتا ہوا تفاعل موج پیدا ہوتا ہے۔ اسی طرح e^{-ikx} بائیں رخ حرکت کرتا ہوا موج دیتا ہے۔ یوں مساوات ۲.۱۳۱ میں مستقل A بائیں سے آمدی موج کا حیطہ ہے، B بائیں رخ واپس لوٹتے ہوئے موج کا حیطہ ہے، F (مساوات ۲.۱۳۲) دائیں رخ نکل کر چلتے ہوئے موج کا حیطہ جبکہ H دائیں سے آمدی موج کا حیطہ ہے (شکل ۲.۱۵ دیکھیں)۔ بکھراو کے عمومی تجربہ میں عموماً ایک رخ (مثلاً بائیں) سے ذرات پھینکے جاتے ہیں۔ ایسی صورت میں دائیں جانب سے آمدی موج کا حیطہ صفر ہوگا:

$$G = 0, \quad \text{بائیں سے بکھراو} \tag{۲.۱۳۶}$$

آمدی موج[۸۳] کا حیطہ A ، **منعکس موج**[۸۴] کا حیطہ B جبکہ **ترسیلی موج**[۸۵] کا حیطہ F ہوگا۔ مساوات ۲.۱۳۳ اور ۲.۱۳۵ کو B اور F

[۸۳] incidentwave
[۸۴] reflectedwave
[۸۵] transmittedwave

کے لیے حل کر کے درج ذیل حاصل ہوں گے۔

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

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

چونکہ کسی مخصوص مقام پر ذرے کی موجودگی کا احتمال $|\psi|$ ہوتا ہے لہٰذا آمدی ذرہ کے انعکاس کا تناسبی[۸۶] احتمال درج ذیل ہو گا

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

جہاں R کو **شرح انعکاس**[۸۷] کہتے ہیں۔ (اگر آپ کے پاس ذرات کی ایک شعاع ہو تو R آپ کو بتائے گا کہ ٹکرانے کے بعد ان میں سے کتنے ذرات واپس لوٹ کر آئیں گے۔) ترسیل کا احتمال درج ذیل ہو گا جسے **شرح ترسیل**[۸۸] کہتے ہیں۔

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

ظاہر ہے ان احتمال کا مجموعہ ایک (1) ہو گا۔

$$R + T = 1 \tag{۲.۱۴۰}$$

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

$$R = \frac{1}{1+\frac{2\hbar^2 E}{m\alpha^2}}, \qquad T = \frac{1}{1+\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E}} \tag{۲.۱۴۱}$$

توانائی جتنی زیادہ ہو، ترسیل کا احتمال اتنا ہی زیادہ ہو گا (جیسا کہ ظاہری طور پر ہونا چاہیے)۔

یہاں تک باقی سب ٹھیک ہے تاہم ایک اصولی مسئلہ باقی ہے جسے ہم نظر انداز نہیں کر سکتے ہیں۔ چونکہ بکھراو موج کے تفاعل ناقابل معمول زنی ہیں لہٰذا یہ کسی صورت بھی حقیقی ذرے کے حال کو ظاہر نہیں کر سکتے ہیں۔ تاہم ہم اس مسئلے کا حل جانتے ہیں۔ جیسا ہم نے آزاد ذرہ کے لیے کیا تھا، ہمیں ساکن حالات کے ایسے خطی جوڑ تیار کرنے ہونگے جو قابل معمول زنی ہوں۔ حقیقی طبعی ذرات کو یوں تیار کردہ موجی اکٹھ ظاہر کرے گا۔ یہ ظاہری طور پر سیدھا سادہ اصول ہے جو عملی استعمال میں پیچیدہ ثابت ہوتا ہے لہٰذا یہاں سے آگے مسئلے کو کمپیوٹر کی مدد سے حل کرنا بہتر ہو گا۔[۸۹] چونکہ

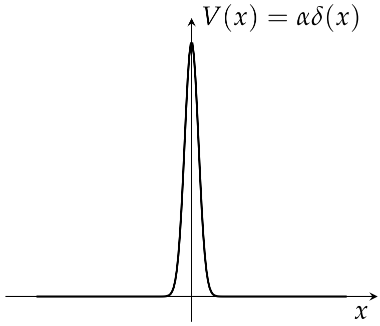
---

[۸۶] یہ ناقابل معمول زنی تفاعل ہے لہٰذا کسی ایک مخصوص نقطہ پر ذرہ پایا جانے کا احتمال بے معنی ہو گا؛ بہر حال آمدی اور منعکس امواج کے احتمالات کا تناسب معنی خیز ہے۔ اگلے پیراگراف میں اس پر مزید بات کی جائے گی۔

[۸۷] reflectioncoefficient

[۸۸] transmissioncoefficient

[۸۹] کنواں اور رکاوٹوں سے موجی اکٹھ کے بکھراو کے اعدادی مطالعہ دلچسپ معلومات فراہم کرتے ہیں۔



شکل ۲.۱۶: ڈیلٹا تفاعل رکاوٹ۔

توانائی کی قیمتوں کا پورا سلسلہ استعمال کیے بغیر آزاد ذرے کے تفاعل موج کی معمول زنی نہیں کی جا سکتی ہے لہٰذا R اور T کو (بالترتیب) E کے قریب ذرات کی تخمینی شرح انعکاس اور شرح ترسیل سمجھنا چاہیے۔

یہ ایک عجیب بات ہے کہ ہم لب لباب وقت کے تابع مسئلہ (جہاں ایک آمدی ذرہ مخفیہ سے بکھر کر لامتناہی کی طرف رواں ہوتا ہے) پر غور، ساکن حالات استعمال کرتے ہوئے کر پاتے ہیں۔ آخر کار (مساوات ۲.۱۳۱ اور ۲.۱۳۲ میں) ψ ایک مخلوط، غیر تابع وقت، سائن نما تفاعل ہے جو (مستقل حیطہ کے ساتھ) دونوں اطراف لامتناہی تک پھیلا ہوا ہے۔ اس کے باوجود اس تفاعل پر موزوں سرحدی شرائط مسلط کر کے ہم ایک ذرہ (جسے مقامی موجی اکٹھ سے ظاہر کیا گیا ہو) کی مخفیہ سے انعکاس یا ترسیل کا احتمال تعین کر پاتے ہیں۔ اس ریاضیاتی کرامت کی وجہ میرے خیال میں یہ حقیقت ہے کہ ہم پوری فضا میں پھیلے ہوئے، حقیقتاً حقیر تابعیت وقت کے تفاعل موج کے خطی جوڑ لے کر ایک (حرکت پذیر) نقطہ کے گرد ایسا تفاعل موج تیار کر سکتے ہیں جس پر وقت کے لحاظ سے تفصیلاً غور کیا جا سکتا ہے (سوال ۲.۴۳)۔

متعلقہ مساوات جانتے ہوئے آئیں ڈیلٹا تفاعل رکاوٹ (شکل ۲.۱۶) کے مسئلہ پر غور کریں۔ ہمیں صرف α کی علامت تبدیل کرنی ہو گی۔ ظاہر ہے یہ تحدیدی حال کو ختم کرے گا (سوال ۲.۲)۔ دوسری جانب، شرح انعکاس اور شرح ترسیل جو α^2 پر منحصر ہیں تبدیل نہیں ہوں گے۔ کتنی عجیب بات ہے کہ ذرہ ایک رکاوٹ کے اندر سے یا ایک کنویں کے اوپر سے ایک جیسی آسانی کے ساتھ گزرتا ہے۔ کلاسیکی طور پر جیسا کہ آپ جانتے ہیں، ایک ذرہ کبھی بھی لامتناہی قد کے رکاوٹ کو عبور نہیں کر سکتا، چاہے اس کی توانائی کتنی ہی کیوں نہ ہو۔ حقیقتاً کلاسیکی مسائل بکھراو غیر دلچسپ ہوتے ہیں: اگر $E > V_{\text{اعظم}}$ ہو تب $R = 0$ اور $T = 1$ ہو گا اور ذرہ ہر صورت رکاوٹ عبور کر پائے گا؛ اگر $E < V_{\text{اعظم}}$ ہو تب $T = 0$ اور $R = 1$ ہو گا اور ذرہ پہاڑی پر وہاں تک چڑھے گا جہاں تک اس میں دم ہو اور اس کے بعد اسی راستے واپس لوٹے گا۔ کوانٹائی بکھراو زیادہ دلچسپ ہوتے ہیں: اگر $E < V_{\text{اعظم}}$ ہو تب بھی ایک ذرے کا مخفیہ عبور کرنے کا احتمال غیر صفر ہو گا۔ اس مظہر کو **سرنگ زنی**[90] کہتے ہیں جس پر جدید برقیات کا بیشتر حصہ منحصر ہے اور جو خوردبین میں حیرت انگیز ترقی کا سبب بنا ہے۔ اس کے

[90] tunneling

بر عکس $E > V_{\text{اعظم}}$ کی صورت میں بھی ذرے کے انعکاس کا احتمال غیر صفر ہو گا؛ اگرچہ میں آپ کو کبھی بھی مشورہ نہیں دوں گا کہ چھت سے نیچے کود یں اور توقع رکھیں کہ کوانٹائی میکانیات آپ کی جان بچا پائے گی (سوال ۲.۳۵ دیکھیے گا)۔

سوال ۲.۲۳: درج ذیل تکملات کی قیمتیں تلاش کریں۔

ا. $\int_{-3}^{+1}(x^3-3x^2+2x-1)\delta(x+2)\,\mathrm{d}x$

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

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

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

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

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

ا. درج ذیل دکھائیں

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

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

ب. **سیڑھی تفاعل**[۹۱] $\theta(x)$ درج ذیل ہے۔

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

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

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 لہٰذا $\langle p^2\rangle$ کا حساب پیچیدہ ہو گا۔ سوال ۲.۲۴-ب کا نتیجہ استعمال کریں۔ جزوی جواب: $\langle p^2\rangle=(m\alpha/\hbar)^2$

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

$$\delta(x)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{ikx}\,\mathrm{d}k \tag{۲.۱۴۴}$$

---

[۹۱] stepfunction

تبصرہ: اس کلیہ دیکھ کر ایک عزت مند ریاضی دان پریشان ضرور ہو گا۔ اگرچہ $x = 0$ کے لئے یہ تکمل لامتناہی ہے اور $x \neq 0$ کی صورت میں چونکہ متکمل ہمیشہ کے لئے ارتعاش پذیر رہتا ہے لہٰذا یہ (صفر یا کسی دوسرے عدد کو) مرکوز نہیں ہوتا ہے۔ اس کی پیوند کاری کے طریقے پائے جاتے ہیں (مثلاً، ہم $-L$ تا $+L$ تکمل لے کر، مساوات ۲.۱۴۴ کو، $L \to \infty$ کرتے ہوئے متناہی تکمل کی اوسط قیمت تصور کر سکتے ہیں)۔ یہاں دشواری کا سبب یہ ہے کہ مسئلہ پلانشرل کے (مربع متکاملیت) کی بنیادی شرط کو ڈیلٹا تفاعل مطمئن نہیں کرتا ہے (صفحہ ۶۲ پر مربع متکاملیت کی شرط حاشیہ میں پیش کی گئی ہے)۔ اس کے باوجود مساوات ۲.۱۴۴ نہایت مددگار ثابت ہو سکتا ہے اگر اس کو احتیاط سے استعمال کیا جائے۔

سوال ۲.۲۷: درج ذیل جڑواں 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 خاکہ کھینچیں۔

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

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

۲.۶ متناہی چوکور کنواں

ہم آخری مثال کے طور پر متناہی چوکور کنویں کا مخفیہ

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

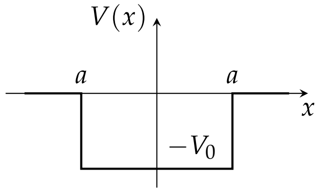
لیتے ہیں جہاں V_0 ایک (مثبت) مستقل ہے (شکل ۲.۱۷)۔ ڈیلٹا تفاعل کنویں کی طرح یہ مخفیہ مقید حالات (جہاں $E < 0$ ہو گا) کے ساتھ ساتھ بکھراو حالات (جہاں $E > 0$ ہو گا) بھی پیدا کرتا ہے۔ ہم پہلے مقید حالات پر غور کرتے ہیں۔

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

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

جہاں

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \tag{۲.۱۴۶}$$



شکل ۲.۱۷: متناہی چوکور کنواں (مساوات ۲.۱۴۵)۔

حقیقی اور مثبت ہے۔ اس کا عمومی حل $\Psi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx}$ ہے لیکن $x \to -\infty$ کی صورت میں اس کا پہلا جزو بے قابو بڑھتا ہے لہٰذا (ہمیشہ طرح؛ مساوات ۲.۱۱۹ دیکھیں) طبعی طور پر قابل قبول حل درج ذیل ہو گا۔

$$\psi(x) = Be^{kx}, \qquad x < -a \tag{۲.۱۴۷}$$

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

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

جہاں l درج ذیل ہے۔

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

اگرچہ مقید حالات کے لئے E منفی ہے تاہم $E > V_{\text{اقل}}$ کی بنا پر (سوال ۲.۲ دیکھیں) اس کو $-V_0$ سے بڑا ہونا ہو گا؛ لہٰذا l بھی حقیقی اور مثبت ہو گا۔ اس کا عمومی حل درج ذیل ہو گا[92]

$$\psi(x) = C\sin(lx) + D\cos(lx), \qquad -a < x < a \tag{۲.۱۴۹}$$

جہاں C اور D اختیاری مستقلات ہیں۔ آخر میں، خطہ $x > a$ جہاں ایک بار پھر مخفیہ صفر ہے؛ عمومی حل $\psi(x) = Fe^{-\kappa x} + Ge^{\kappa x}$ ہو گا تاہم $x \to \infty$ کی صورت میں دوسرا جزو بے قابو بڑھتا ہے لہٰذا قابل قبول حل درج ذیل ہو گا۔

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

اگلے قدم میں ہمیں سرحدی شرائط مسلط کرنے ہوں گے: ψ اور $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ نقاط $-a$ اور $+a$ پر استمراری ہیں۔ یہ جانتے ہوئے کہ دیا گیا مخفیہ جفت تفاعل ہے، ہم کچھ وقت بچا سکتے ہیں اور فرض کر سکتے ہیں کہ حل مثبت یا طاق

[92] آپ چاہیں تو عمومی حل کو قوت نمائی روپ $(C'e^{ilx} + D'e^{-ilx})$ میں لکھ سکتے ہیں۔ اس سے بھی وہی اختتامی نتائج حاصل ہوں گے، تاہم تشاکلی مخفیہ کی بنا پر ہم جانتے ہیں کہ حل جفت یا طاق ہوں گے، اور sin اور cos کا استعمال اس حقیقت کو بلاواسطہ بروئے کار لا سکتا ہے۔

ہوں گے (سوال ۱.۲-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 لہٰذا دوسری جانب کا حل ہمیں خود بخود حاصل ہو گا۔ میں جفت حل حاصل کرتا ہوں جبکہ آپ کو سوال ۲.۲۹ میں طاق حل تلاش کرنے کو کہا گیا ہے۔ cos جفت ہے (جبکہ sin طاق ہے) لہٰذا میں درج ذیل روپ کے حلوں کی تلاش میں ہوں۔

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

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

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

جبکہ $\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}$ کی استمرار درج ذیل کہتی ہے۔

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

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

$$\kappa = l\tan(la) \tag{۲.۱۵۴}$$

چونکہ κ اور l دونوں E کے تفاعل ہیں لہٰذا اس کلیہ سے اجازتی توانائیاں حاصل کی جا سکتی ہیں۔ اجازتی توانائی E کے لئے حل کرنے سے پہلے ہم درج ذیل بہتر علامتیں متعارف کرتے ہیں۔

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

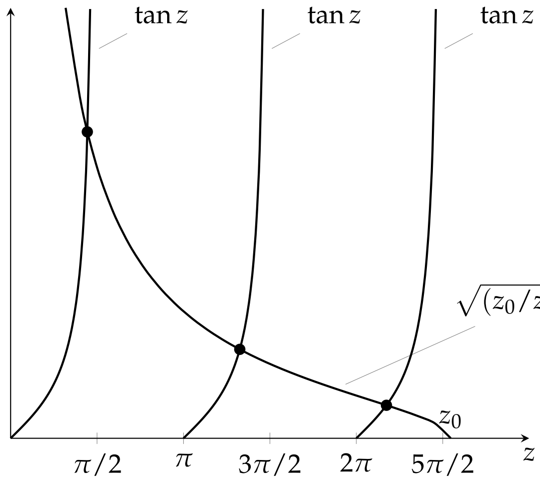
مساوات ۲.۱۴۶ اور ۲.۱۴۸ کے تحت $(\kappa^2 + l^2) = 2mV_0/\hbar^2$ ہو گا لہٰذا $\kappa a = \sqrt{z_0^2 - z^2}$ ہو گا اور مساوات ۲.۱۵۴ درج ذیل روپ اختیار کرے گی۔

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

یہ z (لہٰذا E) کی ماورائی مساوات ہے جس کا متغیر z_0 ہے (جو کنویں کی "جسامت" کی ناپ ہے)۔ اس کو اعدادی طریقہ سے کمپیوٹر کے ذریعے حل کیا جا سکتا یا $\tan z$ اور $\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$ کو ایک ساتھ ترسیم کر کے ان کے نقاط تقاطع لیتے ہوئے حل کیا جا سکتا ہے (شکل ۲.۱۸)۔ دو تحدیدی صورتیں زیادہ دلچسپی کے حامل ہیں۔

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

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



شکل ۲.۱۸: ترسیمی حل برائے مساوات ۲.۱۵۶ جہاں $z_0 = 8$ لیا گیا ہے (جفت حالات)۔

اب $E + V_0$ کنویں کی تہہ سے زیادہ توانائی کو ظاہر کرتی ہے اور مساوات کا دایاں ہاتھ ہمیں $2a$ چوڑائی کے لامتناہی چوکور کنویں کی توانائیاں دیتا ہے (مساوات ۲.۲۷ دیکھیں)؛ بلکہ n یہاں طاق ہے لہٰذا توانائیوں کی نصف تعداد حاصل ہو گی۔ (جیسا آپ سوال ۲.۲۹ میں دیکھیں گے کل توانائیوں کی باقی نصف تعداد طاق تفاعل موج سے حاصل ہو گی۔) یوں $V_0 \to \infty$ کرنے سے متناہی چوکور کنواں سے لامتناہی چوکور کنواں حاصل ہو گا؛ تاہم کسی بھی متناہی V_0 کی صورت میں مقید حالات کی تعداد متناہی ہو گی۔

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

اگر آپ ψ (مساوات ۲.۱۵۱) کی معمول زنی کرنے میں دلچسپی رکھتے ہیں (سوال ۲.۳۰) تو ایسا ضرور کریں جبکہ میں اب بکھراو حالات ($E > 0$) کی طرف بڑھنا چاہوں گا۔ بائیں ہاتھ جہاں $V(x) = 0$ ہے درج ذیل ہو گا

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

جہاں ہمیشہ کی طرح درج ذیل ہو گا۔

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{۲.۱۵۹}$$

کنویں کے اندر جہاں $V(x) = -V_0$ ہے درج ذیل ہو گا

$$\psi(x) = C\sin(lx) + D\cos(lx) \qquad (-a < x < a) \tag{۲.۱۶۰}$$

جہاں پہلے کی طرح درج ذیل ہو گا۔

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

دائیں جانب، جہاں ہم فرض کرتے ہیں کہ کوئی آمدی موج نہیں پائی جاتی، درج ذیل ہو گا۔

$$\psi(x) = Fe^{ikx} \tag{۲.۱۶۲}$$

یہاں آمدی حیطہ A، انعکاسی حیطہ B اور ترسیلی حیطہ F ہے۔[۹۳]
یہاں چار سرحدی شرائط پائے جاتے ہیں: نقطہ $-a$ پر $\psi(x)$ کے استمرار کے تحت درج ذیل ہو گا

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

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

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

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

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

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

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

ہم ان میں سے دو کو استعمال کرتے ہوئے C اور D خارج کر کے باقی دو کو B اور F کے لئے حل کر سکتے ہیں (سوال ۲.۳۲ دیکھیے گا)۔

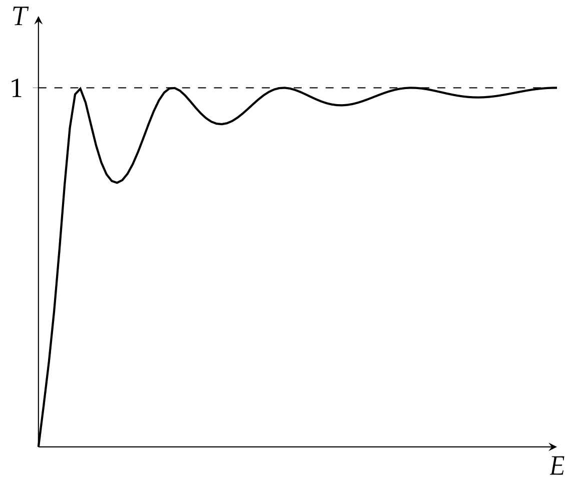
$$B = i\frac{\sin(2la)}{2kl}(l^2 - k^2)F \tag{۲.۱۶۷}$$

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

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

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

[۹۳] مقید حالات کی صورت میں ہم نے طاق اور جفت تفاعلات تلاش کیے۔ ہم یہاں بھی ایسا کر سکتے ہیں، تاہم مسئلہ بکھراو میں امواج صرف ایک رخ سے آتے ہیں لہٰذا یہ مسئلہ ذاتی طور پر غیر تشاکلی ہے اور سیاق و سباق کے لحاظ سے (حرکت پذیر امواج کے اظہار کے لئے) قوت نمائی علامت کا استعمال زیادہ موثر ہے۔



شکل ۲.۱۹: ترسیلی مستقل بطور توانائی کا تفاعل (مساوات ۲.۱۶۹)۔

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

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

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

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

جو عین لامتناہی چوکور کنویں کی اجازتی توانائیاں ہیں۔ شکل ۲.۱۹ میں توانائی کے لحاظ سے T ترسیم کیا گیا ہے۔[94]

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

سوال ۲.۳۰: مساوات ۲.۱۵۱ میں دیے گئے $\psi(x)$ کی معمول زنی کر کے مستقل D اور F تعین کریں۔

سوال ۲.۳۱: ڈیراک ڈیلٹا تفاعل کو ایک ایسی مستطیل کی تحدیدی صورت تصور کیا جا سکتا ہے، جس کا رقبہ اکائی (1) رکھتے ہوئے اس کی چوڑائی صفر تک اور قد لامتناہی تک پہنچائی جائے۔ دکھائیں کہ ڈیلٹا تفاعل کنواں (مساوات ۲.۱۱۴) لامتناہی گہرا ہونے کے باوجود $z_0 \to 0$ کی بنا پر ایک "کمزور" مخفیہ ہے۔ ڈیلٹا تفاعل مخفیہ کو متناہی چوکور کنویں کی تحدیدی صورت لیتے ہوئے اس کی مقید حال کی توانائی تعین کریں۔ تصدیق کریں کہ آپ

[94] اس حیرت کن مظہر کا مشاہدہ تجربہ گاہ میں بطور رمزاور وٹاونسنڈ اثر (Ramsauer–Townsendeffect) کیا گیا ہے۔

کا جواب مساوات ۲.۱۲۹ کے مطابق ہے۔ دکھائیں کہ موزوں حد کی صورت میں مساوات ۲.۱۶۹ کی تخفیف مساوات ۲.۱۴۱ دے گی۔

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

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

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

سوال ۲.۳۳: مستطیلی رکاوٹ (جسے خطہ $-a < x < a$ میں $V(x) = +V_0 > 0$ لیتے ہیں) کے لئے شرح ترسیل تعین کریں۔ تین صورتوں $E < V_0$، $E = V_0$ اور $E > V_0$ کو علیحدہ علیحدہ حل کریں۔ (آپ دیکھیں گے کہ رکاوٹ کے اندر تینوں صورتوں میں تفاعل موج ایک دوسرے سے مختلف ہوں گے۔) جزوی جواب: $E < V_0$ کے لئے درج ذیل ہوگا۔[95]

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

سوال ۲.۳۴: درج ذیل سیڑھی مخفیہ پر غور کریں۔

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

ا. شرح انعکاس $E < V_0$ صورت کیلئے حاصل کرکے 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 ہو گی لہٰذا شرح ترسیل $|F|^2/|A|^2$ نہیں ہو گی (جہاں A آمدی حیطہ اور F ترسیلی حیطہ ہے)۔ دکھائیں کہ $E > V_0$ کے لئے درج ذیل ہو گا۔

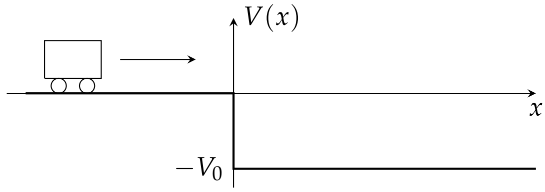
$$T = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}}\frac{|F|^2}{|A|^2} \tag{۲.۱۷۲}$$

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

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

سوال ۲.۳۵: ایک ذرہ جس کی کمیت m اور حرکی توانائی $E > 0$ ہو مخفیہ کی ایک اچانک گہرائی (شکل ۲.۲۰) کی طرف بڑھتا ہے۔

[95] یہ سرنگ زنی کی ایک اچھی مثال ہے۔ کلاسیکی طور پر ذرہ رکاوٹ سے ٹکرانے کے بعد واپس لوٹے گا۔



شکل ۲.۲۰: عمودی چٹان سے بکھراو (سوال ۲.۳۵)۔

ا. صورت $E = V_0/3$ میں اس کے انعکاس کا احتمال کیا ہو گا؟ 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 ٹکرا کر واپس لوٹنے کا احتمال جزو-ا کے نتیجہ سے بہت کم ہو گا۔ یہ مخفیہ کیوں ایک افقی چٹان کی صحیح ترجمانی نہیں کرتا ہے؟ اشارہ: شکل ۲.۲۰ 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 ہوئی گاڑی کے لیے درست ہو گا؟

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

اضافی سوالات برائے باب ۲

سوال ۲.۳۶: عین مبدا پر $-a < x < +a$ کے بیچ لامتناہی چوکور کنویں کے اندر $V(x) = 0$ اور اس کے باہر $V(x) = \infty$ ہے۔ غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر پر موزوں سرحدی شرائط مسلط کر کے اسے حل کریں۔ تصدیق کریں کہ آپ کی توانائیاں عین میری حاصل کردہ توانائیوں (مساوات ۲.۲۷) کے مطابق ہیں اور تصدیق کریں کہ میری ψ (مساوات ۲.۲۸) میں $x \to (x+a)/2$ پر کر کے، موزوں معمول زنی سے آپ کی تمام ψ حاصل ہوتی ہیں۔ اپنے اولین تین حل ترسیم کریں اور ان کا موازنہ شکل ۲.۲ سے کریں۔ دھیان رہے کہ یہاں کنویں کی چوڑائی $2a$ ہے۔

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

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

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 جا سکتا ہے جہاں $m = 0,1,2,\dots,n$ ہو گا۔

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

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

ب. کونسا نتیجہ اس کے بعد زیادہ امکان رکھتا ہے اور اس کا احتمال کیا ہو گا؟

ج. توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہو گی؟ اشارہ: اگر آپ کو لامتناہی تسلسل کا سامنا ہو تب کوئی دوسری ترکیب استعمال کریں۔

سوال ۲.۳۹:

ا. دکھائیں کہ لامتناہی چوکور کنویں میں ایک ذرہ کا تفاعل موج کوانٹائی **تجدیدی عرصہ**[۹۶] $T = 4ma^2/\pi\hbar$ 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۔

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

ج. کس توانائی کیلئے یہ تجدیدی عرصے ایک دوسرے کے برابر ہوں گے؟[۹۷]

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

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

ا. اس کے مقید حلوں کی تعداد کیا ہو گی؟

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

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

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

ا. توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہے؟

[۹۶] revivaltime

[۹۷] یہ غور طلب تضاد ہے کہ کلاسیکی اور کوانٹائی تجدیدی عرصوں کا بظاہر ایک دوسرے کے ساتھ کوئی تعلق نہیں پایا جاتا ہے (اور کوانٹائی تجدیدی عرصہ توانائی پر منحصر بھی نہیں ہے۔)

ب. مستقبل کے لمحہ T پر تفاعل موج درج ذیل ہو گا

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

جہاں B کوئی مستقل ہے۔ لمحہ T کی ممکنہ اقل قیمت کیا ہو گی؟

سوال ۲.۴۲: درج ذیل نصف ہارمونی مرتعش کی اجازتی توانائیاں تلاش کریں۔

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

(مثلاً ایک ایسا اسپرنگ جس کو کھینچا تو جا سکتا ہے لیکن دبایا نہیں جا سکتا ہے۔) اشارہ: اس کو حل کرنے کے لئے آپ کو ایک بار اچھی طرح معنز ماری کرنی ہو گی جبکہ حقیقی حساب بہت کم درکار ہو گی۔

سوال ۲.۴۳: آپ نے سوال ۲.۲۲ 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: مبدا پر لامتناہی چوکور کنواں، جس کے وسط پر درج ذیل ڈیلٹا تفاعل رکاوٹ ہو، کے لیے غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر 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۔ ان کی معمول زنی کرنے کی ضرورت نہیں ہے۔ اجازتی توانائیوں کو (اگر ضرورت پیش آئے) ترسیمی طور پر تلاش کریں۔ ان کا موازنہ ڈیلٹا تفاعل کی غیر موجودگی میں مطابقتی توانائیوں کے ساتھ کریں۔ طاق حلوں پر ڈیلٹا تفاعل کا کوئی اثر نہ ہونے پر تبصرہ کریں۔ تحدیدی صورتیں $a \to 0$ اور $a \to \infty$ پر تبصرہ کریں۔

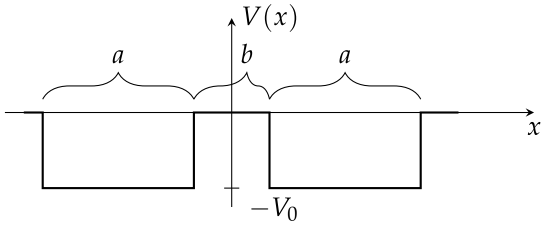
سوال ۲.۴۵: ایسے دو یا دو سے زیادہ غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر کے منفرد[98] حل جن کی توانائی E ایک جیسی ہو کو **انحطاطی**[99] کہتے ہیں۔ مثال کے طور پر آزاد ذرہ کے حال دوہری انحطاطی ہیں۔ ان میں سے ایک حل دائیں رخ اور دوسرا بائیں رخ حرکت کو ظاہر کرتا ہے۔ تاہم ہم نے ایسے کوئی انحطاطی حل نہیں دیکھے جو قابل معمول زنی ہوں اور یہ محض ایک اتفاق نہیں ہے۔ درج ذیل مسئلہ ثابت کریں: یک بُعدی مقید انحطاطی حال نہیں پائے جاتے ہیں۔[100] اشارہ:

---

[98] ایسے دو حل جن میں صرف جزو ضربی کا فرق پایا جاتا ہو (جن میں، ایک مرتبہ معمول زنی کرنے کے بعد، صرف دوری جزو $e^{i\phi}$ کا فرق پایا جاتا ہو) درحقیقت ایک ہی حل کو ظاہر کرتے ہیں لہٰذا انہیں یہاں منفرد نہیں کہا جا سکتا ہے۔ یہاں "منفرد" سے مراد "خطی طور پر غیر تابع" ہے۔

[99] degenerate

[100] جیسا ہم باب ۴ میں دیکھیں گے، بلند ابعاد میں ایسی انحطاط عام پائی جاتی ہیں۔ فرض کریں کہ مخفیہ علیحدہ علیحدہ حصوں پر مشتمل نہیں ہے جن کے بیچ خطہ میں $V = \infty$ ہو۔ مثلاً دو تنہا لامتناہی کنویں مقید انحطاطی حال دیں گے جہاں ذرہ ایک یا دوسرے کنویں میں پایا جائے گا۔



شکل ۲.۲۱: دوہرا چوکور کنواں (سوال ۲.۴۷)۔

فرض کریں ψ_1 اور ψ_2 ایسے دو حل ہوں جن کی توانائی، E، ایک جیسی ہو۔ حل ψ_1 کی مساوات شروڈنگر کو ψ_2 سے ضرب دیں اور اس سے ψ_2 کی مساوات شروڈنگر کو ψ_1 سے ضرب دے کر منفی کر کے دکھائیں کہ $\psi_2 \,\mathrm{d}\psi_1/\mathrm{d}x - \psi_1 \,\mathrm{d}\psi_2/\mathrm{d}x$ ایک مستقل ہو گا۔ اب $\pm\infty$ پر ہر قابل معمول زنی حل، $\psi \to 0$ ہو گا۔ اس حقیقت کو استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ یہ مستقل در حقیقت صفر ہو گا جس سے آپ نتیجہ اخذ کر سکتے ہیں کہ ψ_2 دراصل ψ_1 کا مضرب ہے لہٰذا یہ حل دو الگ الگ حل نہیں ہو سکتے ہیں۔

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

سوال ۲.۴۷: آپ کو صرف کیفی تجزیہ کی اجازت ہے حساب کر کے نتیجہ اخذ کرنے کی اجازت نہیں ہے۔ شکل ۲.۲۱ میں دکھائے گئے "دوہرا چوکور کنواں" پر غور کریں جہاں گہرائی V_0 اور چوڑائی a مقررہ ہیں جو اتنے بڑے ضرور ہیں کہ کئی مقید حال ممکن ہوں۔

ا. زمینی تفاعل موج ψ_1 اور پہلا ہیجان حال ψ_2 کا خاکہ درج ذیل صورت میں کھینچیں۔

۱. $b = 0$، ۲. $b \approx a$، ۳. $b \gg a$

ب. b کی قیمت صفر سے لامتناہی تک بڑھتے ہوئے مطابقتی توانائیاں (E_1 اور E_2) کس طرح تبدیل ہوتی ہیں، اس کا کیفی جواب دیں۔ $E_1(b)$ اور $E_2(b)$ کو ایک ساتھ ترسیم کریں۔

ج. دو جوہری سالمہ میں الیکٹران پر اثر انداز مخفی توانائی کا تاریخی یک دوری نمونہ دوہرا کنواں پیش کرتا ہے (مرکزوں کی قوت کشش کو دو کنویں ظاہر کرتی ہیں)۔ اگر مرکزے آزادی سے حرکت کر سکتے ہوں تب یہ اقل توانائی تشکیل اختیار کریں گے۔ جزو-(ب میں حاصل نتائج کے تحت کیا الیکٹران ان مرکزوں کو ایک

دوسرے کے قریب کھینچے گا یا انہیں ایک دوسرے سے دور رہنے پر مجبور کرے گا۔ (اگرچہ دو مرکزوں کے بیچ دافع قوت بھی پائی جاتی ہے تاہم اس کی بات یہاں نہیں کی جا رہی ہے۔)

سوال ۲.۴۸: آپ نے مساوات ۲.۳۹ کے تسلسل کا مجموعہ لیتے ہوئے سوال ۲.۷-د میں توانائی کی توقعاتی قیمت تلاش کی جہاں حاشیہ میں آپ کو میں نے آگاہ کیا کہ اس کو $\langle H\rangle = \int \psi(x,0)^* H\psi(x,0)\,\mathrm{d}x$ کے پرانے طریقہ سے حاصل نہ کریں چونکہ $\psi(x,0)$ کے پہلے تفرق میں عدم استمرار دوسرے تفرق کو پریشان کن بناتا ہے۔ حقیقت میں آپ تکمل بالحصص کے ذریعے اسے حل کر سکتے تھے لیکن ڈیراک ڈیلٹا تفاعل اس طرح کے انوکھا مسائل حل کرنے کا ایک بہترین طریقہ فراہم کرتا ہے۔

ا. آپ سوال ۲.۷ میں $\psi(x,0)$ کا پہلا تفرق حاصل کر کے اس کو سیڑھی تفاعل $\theta(x - a/2)$ کی صورت میں لکھیں جسے مساوات ۲.۱۴۳ میں پیش کیا گیا ہے۔ (آخری سروں کی فکر نہ کریں، صرف اندرونی خطہ $0 < x < a$ کے لیے لکھیں۔)

ب. ابتدائی موجی تفاعل $\psi(x,0)$ کے دوہرا تفرق کو سوال ۲.۲۴-ب کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے ڈیلٹا تفاعل کی صورت میں لکھیں۔

ج. تکمل $\int \psi(x,0)^* H\psi(x,0)\,\mathrm{d}x$ کو حل کر کے اس کی قیمت حاصل کر کے تصدیق کریں کہ یہ وہی نتیجہ ہے جو آپ پہلے حاصل کر چکے ہیں۔

سوال ۲.۴۹:

ا. دکھائیں کہ ہارمونی مرتعش کی مخفی توانائی (مساوات ۲.۴۳) کے لئے

$$\psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x^2+\frac{a^2}{2}(1+e^{-2i\omega t})+\frac{i\hbar t}{m}-2axe^{-i\omega t}\right)}$$

تابع وقت مساوات شروڈنگر پر پورا اترتا ہے جہاں a ایک حقیقی مستقل ہے جس کا بُعد لمبائی ہے۔[101]

ب. $\left|\psi(x,t)\right|^2$ تلاش کریں اور موجی اکٹھ کی حرکت پر تبصرہ کریں۔

ج. $\langle x\rangle$ اور $\langle p\rangle$ کا حساب لگائیں اور دیکھیں آیا مسئلہ اہرنفسٹ (مساوات ۱.۳۸) پر یہ پورا اترتے ہیں۔

سوال ۲.۵۰: درج ذیل حرکت کرتے ہوئے ڈیلٹا تفاعل کنویں پر غور کریں

$$V(x,t) = -\alpha\delta(x - vt)$$

جہاں کنویں کی (غیر تغیر) سمتی رفتار کو v ظاہر کرتا ہے۔

ا. دکھائیں کہ تابع وقت مساوات شروڈنگر کا حل درج ذیل ہے

$$\psi(x,t) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x-vt|/\hbar^2} e^{-i[(E+(1/2)mv^2)t-mvx]/\hbar}$$

[101] تابع وقت مساوات شروڈنگر کے ٹھیک ٹھیک بند روپ میں حل کی یہ ایک نایاب مثال ہے۔

جہاں $E = -m\alpha^2/2\hbar^2$ ساکن ڈیلٹا تفاعل کے مقید حال کی توانائی ہے۔ اشارہ: اس حل کو مساوات شروڈنگر میں پُر کر کے آپ تصدیق کر سکتے ہیں۔ سوال ۲.۲۴-ب کا نتیجہ استعمال کریں۔

ب. اس حال میں ہیملٹنی کی توقعاتی قیمت تلاش کر کے نتیجے پر تبصرہ کریں۔

سوال ۲.۵۱: درج ذیل مخفیہ پر غور کریں

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 a^2}{m}\operatorname{sech}^2(ax)$$

جہاں a ایک مثبت مستقل ہے۔

ا. اس مخفیہ کو ترسیم کریں۔

ب. تصدیق کریں کہ اس مخفیہ کا زمینی حال درج ذیل ہے

$$\psi_0(x) = A\operatorname{sech}(ax)$$

اور اسکی توانائی تلاش کریں۔ ψ_0 کی معمول زنی کر کے اس کی ترسیم کا خاکہ بنائیں۔

ج. دکھائیں کہ درج ذیل تفاعل کسی بھی (مثبت) توانائی E کے لیے مساوات شروڈنگر کو حل کرتا ہے (جہاں ہمیشہ کی طرح $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ ہے)۔

$$\psi_k(x) = A\left(\frac{ik - a\tanh(ax)}{ik + a}\right)e^{ikx}$$

چونکہ $z \to -\infty$ کرنے سے $\tanh z \to -1$ ہو گا لہٰذا x کی بہت بڑی منفی قیمتوں کے لیے درج ذیل ہو گا

$$\psi_k(x) \approx Ae^{ikx} \quad \text{بڑی منفی } x \text{ کے لیے}$$

جو e^{-ikx} کی عدم موجودگی کی بنا، بائیں سے آمد ایک موج کو ظاہر کرتا ہے جس میں کوئی انعکاسی موج نہیں پائی جاتی ہے۔ x کی بڑی مثبت قیمتوں کے لیے $\psi_k(x)$ کی متقاربی روپ کیا ہو گی؟ اس مخفیہ کے لیے R اور T کیا ہوں گے؟ تبصرہ: یہ **بلا انعکاس مخفیہ**[102] کی ایک بہت مشہور مثال ہے؛ ہر ذرہ، اس سے قطع نظر کہ اس کی توانائی کتنی ہے، اس مخفیہ سے سیدھا گزرتا ہے۔

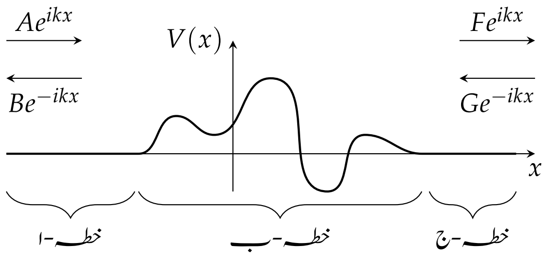
سوال ۲.۵۲: **قالب بکھراو**[103] مقامی مخفیہ کے لیے بکھراو کا نظریہ ایک عمومی صورت اختیار کرتا ہے (شکل ۲.۲۲)۔ بائیں ہاتھ خطہ-ا میں $V(x) = 0$ ہے لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \qquad \text{جہاں } k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{۲.۱۷۳}$$

---

[102] reflectionlesspotential

[103] scatteringmatrix



شکل ۲.۲۲: مقامی اختیاری مخفیہ (جو خطہ-2 کے علاوہ $V(x) = 0$ ہے) سے بکھراو (سوال ۲.۵۲)۔

دائیں ہاتھ خطہ-ج میں بھی $V(x) = 0$ ہے لہٰذا یہاں درج ذیل ہو گا

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \tag{۲.۱۷۴}$$

ان دونوں کے بیچ خطہ-ب میں مخفیہ جانے بغیر میں آپ کو ψ کے بارے میں کچھ نہیں بتا سکتا، تاہم چونکہ مساوات شروڈنگر خطی اور دو رتبی تفرقی ہے لہٰذا اس کا عمومی حل لازماً درج ذیل روپ کا ہو گا

$$\psi(x) = Cf(x) + Dg(x)$$

جہاں $f(x)$ اور $g(x)$ دو خطی غیر تابع مخصوص حل ہیں۔ یہاں چار عدد سرحدی شرائط ہوں گے جن میں سے دو خطہ-ا اور ب کو جوڑیں گے اور باقی دو خطہ-ب اور ج کو جوڑیں گے۔ ان میں سے دو کو استعمال کر کے C اور D کو خارج کرتے ہوئے باقی دو کو حل کر کے A اور G کی صورت میں B اور F تلاش کیے جا سکتے ہیں:

$$B = S_{11}A + S_{12}G, \qquad F = S_{21}A + S_{22}G$$

یہ چار عددی سر S_{ij} جو k (لہٰذا E) پر منحصر ہیں 2×2 قالب $\mathbf{S}$ دیتے ہیں جس کو **قالب بکھراو**[104] یا مختصراً **قالب S**[105] کہتے ہیں۔ قالب S آپ کو آمدی حیطوں (A اور G) کی صورت میں رخصتی حیطوں (B اور F) کی قیمت دیتا ہے:

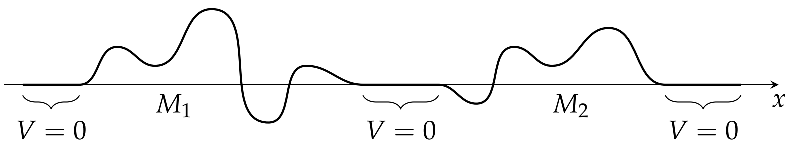
$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} \tag{۲.۱۷۵}$$

بائیں سے بکھراو کی صورت میں $G = 0$ ہو گا لہٰذا انعکاسی اور ترسیلی شرح درج ذیل ہوں گی۔

$$R_l = \left.\frac{|B|^2}{|A|^2}\right|_{G=0} = |S_{11}|^2, \qquad T_l = \left.\frac{|F|^2}{|A|^2}\right|_{G=0} = |S_{21}|^2 \tag{۲.۱۷۶}$$

---

[104] scattering matrix
[105] S-matrix



شکل ۲.۲۳: دو تنہا حصوں پر مبنی مخفیہ (سوال ۲.۵۳)۔

دائیں سے بکھراو کی صورت میں $A=0$ ہو گا لہٰذا درج ذیل ہوں گے۔

$$R_r=\left.\frac{|F|^2}{|G|^2}\right|_{A=0}=|S_{22}|^2\,,\qquad T_r=\left.\frac{|B|^2}{|G|^2}\right|_{A=0}=|S_{12}|^2 \tag{۲.۱۷۷}$$

ا. ڈیلٹا تفاعل کنویں (مساوات ۲.۱۱۴) کے لیے بکھراو کا قالب S تیار کریں۔

ب. لامتناہی چوکور کنویں (مساوات ۲.۱۴۵) کے لیے قالب S تیار کریں۔ اشارہ: مسئلہ کی تشاکلی پن بروئے کار لائیں۔ نئے کام کی ضرورت نہیں ہو گی۔

سوال ۲.۵۳: **قالب ترسیل**۔[106] قالب S (سوال ۲.۵۲) آپ کو رخصتی حیطوں (B اور F) کو آمدی حیطوں (A اور G) کی صورت میں پیش کرتا ہے (مساوات ۲.۱۷۵)۔ بعض اوقات ترسیلی قالب M کے ساتھ کام کرنا زیادہ آسان ثابت ہوتا ہے جو مخفیہ کے دائیں جانب حیطوں (F اور G) کو بائیں جانب حیطوں (A اور B) کی صورت میں پیش کرتا ہے:

$$\begin{pmatrix}F\\G\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}M_{11}&M_{12}\\m_{21}&M_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A\\B\end{pmatrix} \tag{۲.۱۷۸}$$

ا. قالب S کے اجزاء کی صورت میں قالب M کے چار اجزاء تلاش کریں۔ اسی طرح قالب M کے چار اجزاء کی صورت میں قالب S کے اجزاء تلاش کریں۔ مساوات ۲.۱۷۶ اور مساوات ۲.۱۷۷ میں دیے گئے R_l, T_l, R_r اور T_r کو $\mathbf{M}$ قالب کے ارکان کی صورت میں لکھیں۔

ب. فرض کریں آپ کے پاس ایک ایسا مخفیہ ہو جو دو تنہا ٹکڑوں پر مشتمل ہو (شکل ۲.۲۳)۔ دکھائیں کہ اس پورے نظام کا M قالب ان دو حصوں کے انفرادی M قالب کا حاصل ضرب ہو گا۔

$$\mathbf{M}=\mathbf{M}_2\mathbf{M}_1 \tag{۲.۱۷۹}$$

(ظاہر ہے کہ آپ دو سے زیادہ عدد انفرادی مخفیہ بھی استعمال کر سکتے تھے۔ یہی M قالب کی اہمیت کا سبب ہے۔)

ج. نقطہ a پر (درج ذیل) واحد ایک ڈیلٹا تفاعل مخفیہ سے بکھراو کا M قالب تلاش کریں۔

$$V(x)=-\alpha\delta(x-a)$$

[106] transfermatrix

د. جزو-ب کا طریقہ استعمال کرتے ہوئے دوہرا ڈیلٹا تفاعل

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

کے لیے M قالب تلاش کریں۔ اس مخفیہ کی ترسیلی شرح کیا ہو گی؟

سوال ۲.۵۴: **دم ہلانے** کی ترکیب سے ہارمونی مرتعش کی زمینی حال توانائیوں کو پانچ معنی خیز ہندسوں تک تلاش کریں۔ یعنی K کو تبدیل کرتے ہوئے مساوات ۲.۷۲ کو اعدادی طریقہ سے یوں حل کریں کہ ج کی بڑی قیمت کے لیے حاصل تفاعل موج صفر تک پہنچنے کی کوشش کرے۔ ماتھیمٹیکا میں درج ذیل پُر کرنے سے ایسا ہو گا

$$\begin{aligned}
&\text{Plot}[\text{Evaluate}[u[x]\,/.\text{NDSolve}[u''[x] - (x^2 - K)^* u[x] == 0, u[0] == 1, u'[0] == 0,\\
&\qquad u[x], x, 10^{-8}, 10, \text{MaxSteps}-> 10\,000]], x, a, b, \text{PlotRange}-> c, d]
\end{aligned}$$

یہاں a, b ترسیم کی افقی سعت ہے جبکہ c, d انتصابی سعت ہے (ابتدا $a = 0$، $b = 10$، $c = -10$ اور $d = 10$ سے کریں)۔ ہم جانتے ہیں کہ اس کا درست جواب $K = 1$ ہے لہٰذا آپ $K = 0.9$ سے شروع کر سکتے ہیں۔ تفاعل موج کی "دم" پر نظر رکھیں۔ اب $K = 1.1$ لیں، آپ دیکھیں گے کہ دم دوسری طرف پلٹ جائے گی۔ ان دونوں کے بیچ کہیں درست حل موجود ہے۔ K کی قیمت کو درست قیمت کے دونوں اطراف قریب سے قریب لانے سے درست جواب حاصل ہو گا۔

سوال ۲.۵۵: دم ہلانے کا طریقہ (سوال ۲.۵۴) استعمال کرتے ہوئے ہارمونی مرتعش کے ہیجان حال توانائی کو پانچ بامعنی ہندسوں تک تلاش کریں۔ پہلی اور تیسری ہیجان حال کے لیے آپ کو $u[0] == 0$ اور $u'[0] == 1$ لینا ہو گا۔

سوال ۲.۵۶: دم ہلانے کی ترکیب سے لامتناہی چوکور کنویں کی اولین چار توانائیوں کی قیمتیں پانچ بامعنی ہندسوں تک تلاش کریں۔ اشارہ: سوال ۲.۵۴ کی تفرقی مساوات میں درکار تبدیلیاں لائیں۔ اس بار آپ کو $u(1) = 0$ چاہتے ہیں۔

باب ۳

قواعد و ضوابط

۳.۱ ہلبرٹ فضا

گزشتہ دو ابواب میں سادہ ہارمونی نظاموں کے چند دلچسپ خواص ہماری نظروں سے گزرے۔ ان میں سے چند ایک مخصوص مخفیہ کے "ناگہاں" خدوخال تھے (مثلاً ہارمونی مرتعش میں توانائی کی سطح میں جفت فاصلے) جبکہ باقی (مثلاً عدم یقینیت کا اصول اور ساکن حالات کی عمودیت) زیادہ عمومی معلوم ہوتے ہیں، جنہیں ایک ہی مرتبہ ثابت کرنا مفید ہو گا۔ اس کو مد نظر رکھتے ہوئے اس باب میں نظریہ کو زیادہ مضبوط روپ میں پیش کیا جائے گا۔ یہاں کوئی نئی بات نہیں کی جائے گی بلکہ مخصوص صورتوں میں دیکھے گئے خواص سے معقول نتائج اخذ کیے جائیں گے۔

کوانٹائی نظریہ کا دارومدار تفاعل موج اور عاملین کے تصور پر مبنی ہے۔ نظام کے حال کو تفاعل موج ظاہر کرتا ہے جبکہ قابل مشاہدہ کو عاملین ظاہر کرتے ہیں۔ تفاعل موج، ریاضیاتی طور پر، تصوراتی **سمتیات**[1] کی تعریفی شرائط پر پورے اترتے ہیں؛ جبکہ عاملین ان پر **خطی تبادلہ**[2] کا عمل کرتے ہیں۔ یوں کوانٹائی میکانیات کی قدرتی زبان **خطی الجبرا**[3][4] ہے۔

مجھے خدشہ ہے کہ یہاں مستعمل خطی الجبرا سے آپ واقف نہیں ہوں گے۔ سمتیہ $|\alpha\rangle$ کو N بُعدی فضا میں کسی مخصوص

---

[1] vectors
[2] lineartransformations
[3] linearalgebra
[4] آگے بڑھنے سے پہلے بہتر ہو گا کہ آپ ضمیمہ پڑھ کر خطی الجبرا سیکھیں۔

معیاری عمودی اساس کے لحاظ سے N عدد اجزاء $\{a_n\}$ سے ظاہر کرنا سادہ ترین ثابت ہوتا ہے۔

$$|\alpha\rangle \to \mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \tag{۳.۱}$$

دو سمتیات کا **اندرونی ضرب**[۵] $\langle\alpha|\beta\rangle$ (تین ابعادی نقطہ ضرب کو وسعت دیتے ہوئے) درج ذیل مخلوط عدد ہو گا۔

$$\langle\alpha|\beta\rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \cdots + a_N^* b_N \tag{۳.۲}$$

خطی تبادلہ، T، کو (کسی مخصوص اساس کے لحاظ سے) **قالب**[۶] سے ظاہر کیا جاتا ہے، جو قالبی ضرب کے سادہ قواعد کے تحت سمتیات پر عمل کرتے (ہوئے نئے سمتیات پیدا کرتے) ہیں:

$$|\beta\rangle = T|\alpha\rangle \to \mathbf{b} = \mathbf{T}\,\mathbf{a} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & \dots & t_{1N} \\ t_{21} & t_{22} & \dots & t_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ t_{N1} & t_{N2} & \dots & t_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \tag{۳.۳}$$

کوانٹائی میکانیات میں پائے جانے والے "سمتیات" درحقیقت (زیادہ تر) تفاعلات ہوتے ہیں جو لامتناہی بُعدی فضا میں بستے ہیں۔ انہیں N اجزائی قالبی علامت سے ظاہر کرنا زیادہ ٹھیک نہیں ہو گا اور متناہی ابعاد میں سمجھ آنے والی ٹھیک وضاحتیں، لامتناہی ابعاد میں پریشان کن ثابت ہو سکتی ہیں۔ (اس کی بنیادی وجہ یہ ہے کہ مساوات ۳.۲ کا متناہی مجموعہ ہر صورت موجود ہوتا ہے، البتہ، لامتناہی مجموعہ یا تکمل، عدم مرکوزیت کا شکار ہو سکتا ہے، اور ایسی صورت میں اندرونی ضرب غیر موجود ہو گی لہٰذا اندرونی ضرب پر مبنی کوئی بھی دلیل مشکوک ہو گی۔) یوں اگرچہ خطی الجبرا کی اصطلاحات اور علامتیت سے آپ واقف ہوں گے، بہر حال ہوشیار رہنا بہتر ہو گا۔

متغیر x کے تمام تفاعلات مل کر سمتی فضا قائم کرتے ہیں، جو ہمارے مقصد کے لئے ضرورت سے زیادہ بڑی فضا ہے۔ کسی بھی ممکنہ طبیعی حال کو ظاہر کرنے کے لیے لازم ہے کہ تفاعل موج Ψ معمول شدہ ہو:

$$\int |\Psi|^2 \,\mathrm{d}x = 1$$

کسی مخصوص وقفہ[۷] پر تمام **مربع متکامل تفاعلات**[۸]

$$f(x) \quad \text{جہاں} \quad \int_a^b |f(x)|^2 \,\mathrm{d}x < \infty \quad \text{ہو} \tag{۳.۴}$$

[۵] inner product
[۶] matrices
[۷] ہمارے لئے حدود (a اور b) تقریباً ہر مرتبہ $\pm\infty$ ہوں گی، تاہم یہاں چیزوں کو زیادہ عمومی رکھنا بہتر ہو گا۔
[۸] square-integrable functions

مل کر (اس سے بہت چھوٹی) سمتی فضا قائم کرتے ہیں (سوال ۳.۱-ا دیکھیں)۔ ریاضی دان اسے $L_2(a, b)$ جبکہ ماہر طبیعیات اسے **ہلبرٹ فضا**[9] کہتے[10] ہیں۔ یوں کوانٹائی میکانیات میں

$$\text{تفاعلات موج ہلبرٹ فضا میں بستے ہیں۔} \tag{۳.۵}$$

دو تفاعلات کی اندرونی ضرب کی تعریف درج ذیل ہے جہاں $f(x)$ اور $g(x)$ تفاعلات ہیں۔

$$\langle f|g\rangle \equiv \int_a^b f(x)^* g(x)\,\mathrm{d}x \tag{۳.۶}$$

اگر f اور g دونوں مربع متکامل ہوں (یعنی دونوں ہلبرٹ فضا میں پائے جاتے ہوں)، تب ہم ضمانت کے ساتھ کہہ سکتے ہیں کہ ان کی اندرونی ضرب موجود ہو گی (مساوات ۳.۶ کا تکمل ایک متناہی عدد[11] پر مرکوز ہو گا)۔ ایسا **شوارز عدم مساوات**[12] کے درج ذیل تکملی روپ[13] کے پیش نظر ہو گا۔

$$\left|\int_a^b f(x)^* g(x)\,\mathrm{d}x\right| \le \sqrt{\int_a^b |f(x)|^2\,\mathrm{d}x \int_a^b |g(x)|^2\,\mathrm{d}x} \tag{۳.۷}$$

آپ تصدیق کر سکتے ہیں کہ مساوات ۳.۶ اندرونی ضرب کی تمام شرائط پر پوری اترتی ہے (سوال ۳.۱-ب)۔ بالخصوص درج ذیل مساوات میں ہم دیکھ سکتے ہیں۔

$$\langle g|f\rangle = \langle f|g\rangle^* \tag{۳.۸}$$

مزید $f(x)$ کی اپنے ہی ساتھ اندرونی ضرب

$$\langle f|f\rangle = \int_a^b |f(x)|^2\,\mathrm{d}x \tag{۳.۹}$$

---

[9] Hilbertspace

[10] تکنیکی طور پر، ہلبرٹ فضا سے مراد **مکمل اندرونی ضرب فضا** ہے، اور مربع متکامل تفاعلات کا ذخیرہ ہلبرٹ فضا کی فقط ایک مثال ہے؛ درحقیقت، ہر متناہی ابعادی سمتی فضا ایک بے وقعت ہلبرٹ فضا ہو گی۔ چونکہ L_2 کوانٹائی میکانیات کا اکھاڑا ہے لہٰذا ماہر طبیعیات اسی کو "ہلبرٹ فضا" کہتے ہیں۔ ویسے یہاں لفظ **مکمل** سے مراد یہ ہے کہ ہلبرٹ فضا کے کسی بھی تفاعل کی کوشی ترتیب جس تفاعل پر مرکوز ہو، وہ اسی فضا میں پایا جائے۔ اس میں کوئی "سوراخ" نہیں پایا جاتا، جیسا کہ تمام حقیقی اعداد کے سلسلہ میں کوئی سوراخ نہیں پایا جاتا (اس کے برعکس، مثلاً، تمام کثیر رکنیوں کی فضا میں اور تمام ناطق اعداد کے سلسلہ میں یقیناً سوراخ پائے جاتے ہیں)۔ فضا کی مکملیت کا تفاعلات کے سلسلہ کی مکملیت کے ساتھ (ایک ہی لفظ استعمال کیے جانے کے باوجود) کوئی تعلق نہیں۔ تفاعلات کی مکملیت سے مراد یہ ہے کہ کسی بھی تفاعل کو ان تفاعلات کے خطی جوڑ کی صورت میں لکھا جا سکتا ہے۔

[11] باب ۲ میں بعض اوقات ہمیں مجبوراً ناقابل معمول زنی تفاعلات کے ساتھ کام کرنا پڑا۔ ایسے تفاعلات ہلبرٹ فضا سے باہر بستے ہیں، اور جیسا آپ جلد دیکھیں گے، انہیں استعمال کرتے ہوئے ہمیں احتیاط کرنی ہو گی۔ ابھی کے لئے میں فرض کرتا ہوں کہ جن تفاعلات سے ہمیں واسطہ ہے وہ ہلبرٹ فضا میں بستے ہیں۔

[12] Schwarzinequality

[13] متناہی ابعادی سمتی فضا میں شوارز عدم مساوات $|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \le \langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle$ کو ثابت کرنا آسان ہے (صفحہ ۴۵۵ پر سوال A-۵ دیکھیں)۔ تاہم یہ ثبوت فرض کرتا ہے کہ جن تفاعلات سے ہمیں واسطہ ہے وہ ہلبرٹ فضا میں پائے جاتے ہیں، جبکہ ہم یہاں اسی حقیقت کو ثابت کرنا چاہتے ہیں۔

حقیقی اور غیر منفی ہو گی؛ یہ صرف اس صورت[۱۴] میں صفر ہو گی جب $f(x) = 0$ ہو۔

ایک تفاعل اس صورت میں **معمول شدہ**[۱۵] کہلاتا ہے جب اس کی اپنی ہی ساتھ اندرونی ضرب ایک (1) کے برابر ہو؛ دو تفاعلات اس صورت میں **عمودی**[۱۶] ہوں گے جب ان کی اندرونی ضرب صفر (0) ہو؛ اور تفاعلات کا سلسلہ $\{f_n\}$ اس صورت میں **معیاری عمودی**[۱۷] ہو گا جب تمام تفاعلات (درج ذیل دیکھیں) معمول شدہ اور باہمی عمودی ہوں۔

$$\langle f_m | f_n \rangle = \delta_{mn} \tag{۳.۱۰}$$

آخر میں، تفاعلوں کا ایک سلسلہ اس صورت میں **مکمل**[۱۸] ہو گا جب (ہلبرٹ فضا میں) ہر تفاعل کو ان کے خطی جوڑ کی صورت (درج ذیل دیکھیں) میں لکھا جا سکے۔

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x) \tag{۳.۱۱}$$

معیاری عمودی تفاعلات $\{f_n(x)\}$ کے عددی سر، فوریئر تسلسل کے عددی سروں کی طرح حاصل کیے جاتے ہیں:

$$c_n = \langle f_n | f \rangle \tag{۳.۱۲}$$

جس کی تصدیق آپ خود کر سکتے ہیں۔ میں نے باب ۲ میں یہی اصطلاح استعمال کی تھی۔ (لامتناہی چوکور کنویں کے ساکن حالات (مساوات ۲.۲۸) وقفہ $(0, a)$ پر مکمل معیاری عمودی سلسلہ دیتے ہیں؛ ہارمونی مرتعش کے ساکن حالات (مساوات ۲.۶۷ یا مساوات ۲.۸۵) وقفہ $(-\infty, \infty)$ پر مکمل معیاری عمودی سلسلہ دیتے ہیں۔

سوال ۳.۱:

ا. ظاہر کریں کہ تمام مربع متکامل تفاعلات کا سلسلہ سمتی فضا دے گا (صفحہ ۴۴۹ پر ضمیمہ ا-A میں تعریف کا موازنہ کریں)۔ اشارہ: آپ نے دکھانا ہو گا کے دو مربع متکامل تفاعلات کا مجموعہ خود مربع متکامل تفاعل ہو گا۔ مساوات ۳.۷ استعمال کریں۔ کیا تمام عمودی تفاعلات کا سلسلہ سمتی فضا ہو گا؟

ب. ظاہر کریں کہ مساوات ۳.۶ کا تکمل، اندرونی ضرب (ضمیمہ ۲-A) کی تمام شرائط پر پورا اترتا ہے۔

---

[۱۴] ایسے تفاعل کے لئے کیا کہا جا سکتا ہے جو چند مخصوص تنہا نقاط کے علاوہ ہر مقام پر صفر ہوں؟ اگرچہ تفاعل معدوم نہیں ہے لیکن تکمل (مساوات ۳.۹) اب بھی معدوم ہو گا۔ اگر آپ کو اس بات پر تشویش ہو تو آپ کو ریاضی پڑھنی چاہیے۔ طبیعیات میں ایسے گھمبیر تفاعلات نہیں پائے جاتے ہیں، تاہم ہلبرٹ فضا میں ایسے دو تفاعلات، جن کے مربع تکمل برابر ہوں، کو معادل تصور کیا جاتا ہے۔ تکنیکی طور پر ہلبرٹ فضا میں ترسیمات در حقیقت تفاعلات کی **تعادل جماعتوں** کو ظاہر کرتی ہیں۔)

[۱۵] normalized

[۱۶] orthogonal

[۱۷] orthonormal

[۱۸] complete

سوال ۳.۲:

ا. وقفہ $(0,1)$ کے بیچ، متغیر v کے کس خطہ پر، تفاعل $f(x) = x^v$ ہلبرٹ فضا میں پایا جاتا ہے؟ فرض کر لیں کہ v حقیقی تاہم ضروری نہیں کہ مثبت ہو۔

ب. کیا $v = \frac{1}{2}$ کی مخصوص صورت میں $f(x)$ ہلبرٹ فضا میں پایا جائے گا؟ تفاعل $xf(x)$ کے بارے میں آپ کیا کہیں گے؟ تفاعل $(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x})f(x)$ کے بارے میں آپ کیا کہہ سکتے ہیں؟

۳.۲ قابل مشاہدہ

۳.۲.۱ ہرمشی عاملین

قابل مشاہدہ $Q(x,p)$ کی توقعاتی قیمت کو نہایت خوش اسلوبی سے اندرونی ضرب علامتیت[19]:

$$\langle Q \rangle = \int \Psi^* \hat{Q} \Psi \, \mathrm{d}x = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle \tag{۳.۱۳}$$

کی صورت میں پیش کیا جا سکتا ہے۔ اب پیمائش کا نتیجہ ہر صورت حقیقی ہو گا، لہٰذا بہت ساری پیمائشوں کی اوسط بھی حقیقی (درج ذیل دیکھیں) ہو گی۔

$$\langle Q \rangle = \langle Q \rangle^* \tag{۳.۱۴}$$

لیکن اندرونی ضرب کا **مخلوط جوڑی دار** ترتیب کو الٹ دیتا ہے (مساوات ۳.۸) لہٰذا ہماری مساوات درج ذیل ہو جائے گی

$$\langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \langle \hat{Q} \Psi | \Psi \rangle^* \tag{۳.۱۵}$$

جو لازماً کسی بھی تفاعل موج Ψ کے لئے درست ہو گی۔ یوں قابل مشاہدہ کو ظاہر کرنے والے عاملین میں درج ذیل اہم خاصیت پائی جاتی ہے۔

$$\langle f | \hat{Q} f \rangle = \langle \hat{Q} f | f \rangle \quad \text{تمام } f(x) \text{ کے لئے} \tag{۳.۱۶}$$

ایسے عاملین کو ہم **ہرمشی**[20] کہتے ہیں۔

---

[19] یاد رہے کہ $p \rightarrow \hat{p} = (\hbar/i)\,\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ پر کر کے Q سے عامل $\hat{Q}$ حاصل کیا جاتا ہے۔ یہ عاملین اس لحاظ سے **خطی** ہوتے ہیں کہ کسی بھی مخلوط عدد a اور b اور تفاعل f اور g کے لئے $\hat{Q}[af(x) + bg(x)] = a\hat{Q}f(x) + b\hat{Q}g(x)$ ہو گا۔ یہ تمام تفاعلات کی فضا پر خطی تبادلہ (ضمیمہ A-۳) قائم کرتے ہیں۔ اگرچہ بعض اوقات یہ ہلبرٹ فضا کے اندر کے تفاعل کو باہر کے تفاعل میں لے جاتے ہیں (سوال ۳.۲-ب)، اور ایسی صورت میں ہمیں عامل کے دائرہ کار پر پابندی عائد کرنے کی ضرورت پیش آ سکتی ہے۔

[20] hermitian

در حقیقت زیادہ تر کتابوں میں (درج ذیل) بظاہر زیادہ سخت شرط عائد کی جاتی ہے۔

$$\langle f|\hat{Q}g\rangle = \langle \hat{Q}f|g\rangle \quad \text{تمام } f(x) \text{ اور تمام } g(x) \text{ کے لئے} \tag{۳.۱۷}$$

تاہم مختلف نظر آنے کے باوجود، جیسا آپ سوال ۳.۳ میں ثابت کریں گے، یہ شرط میری پیش کردہ تعریف (مساوات ۳.۱۶) کی عین معادل ہے۔ یوں جو تعریف آپ کو آسان لگتی ہو، آپ اسی کو استعمال کر سکتے ہیں۔ اصل نکتہ یہ ہے کہ ہرمشی عامل کو اندرونی ضرب کے اول یا دوم رکن پر لاگو کرنے سے نتیجہ تبدیل نہیں ہوتا، اور کوانٹائی میکانیات میں ہرمشی عاملین اسی لئے قدرتی طور پر رونما ہوتے ہیں کہ ان کی توقعاتی قیمتیں حقیقی ہوتی ہیں۔

$$\text{قابل مشاہدہ کو ہرمشی عاملین ظاہر کرتے ہیں۔} \tag{۳.۱۸}$$

آئیں اس کی تصدیق کرتے ہیں۔ مثلاً، کیا معیار حرکت کا عامل ہرمشی ہے؟

$$\langle f \mid \hat{p}g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x = \frac{\hbar}{i} f^* g\Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty}\Big(\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\Big)^* g\,\mathrm{d}x = \langle \hat{p}f \mid g\rangle \tag{۳.۱۹}$$

میں نے تکمل بالحصص استعمال کیا ہے اور چونکہ $f(x)$ اور $g(x)$ مربع متکامل ہیں لہٰذا $\pm\infty$ پر ان دونوں کو صفر تک جا پہنچنا چاہیے[۲۱] جس کی بنا پر تکمل میں سرحدی اجزاء کو رد کیا گیا ہے۔ آپ نے دیکھا کہ تکمل بالحصص سے پیدا منفی کی علامت کو i کے مخلوط جوڑی دار سے حاصل منفی کی علامت ختم کرتی ہے۔ عامل $\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ (جس میں i نہیں پایا جاتا) غیر ہرمشی ہے اور یہ کسی بھی قابل مشاہدہ کو ظاہر نہیں کرتا۔

سوال ۳.۳: ظاہر کریں کہ اگر (ہلبرٹ فضا میں) تمام تفاعل h کے لیے $\langle h \mid \hat{Q}h\rangle = \langle \hat{Q}h \mid h\rangle$ ہو تب تمام f اور g کے لیے $\langle f \mid \hat{Q}g\rangle = \langle \hat{Q}f \mid g\rangle$ ہوگا (یعنی مساوات ۳.۱۶ اور مساوات ۳.۱۷ میں ہرمشی کی تعریفات معادل ہیں)۔ اشارہ: پہلے $h = f + g$ اور بعد میں $h = f + ig$ لیں۔

سوال ۳.۴:

ا. دکھائیں کہ دو ہرمشی عاملین کا مجموعہ خود بھی ہرمشی ہوگا۔

ب. فرض کریں $\hat{Q}$ ہرمشی ہے اور α ایک مخلوط عدد ہے۔ α پر کیا شرائط عائد کرنے سے $\alpha\hat{Q}$ بھی ہرمشی ہوگا؟

ج. دو ہرمشی عاملین کا حاصل ضرب کب ہرمشی ہوگا؟

د. دکھائیں کہ عامل مقام $(\hat{x} = x)$ اور ہیملٹنی عامل $(\hat{H} = -(\hbar^2/2m)\,\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2 + V(x))$ ہرمشی ہیں۔

---

[۲۱] حقیقت میں ایسا ضروری نہیں ہے۔ جیسا میں نے باب ۱ میں ذکر کیا، ایسے گھمبیر تفاعلات پائے جاتے ہیں جو مربع متکامل ہونے کے باوجود لامتناہی پر صفر کو نہیں پہنچتے ہیں۔ اگرچہ ایسے تفاعلات طبیعیات میں نہیں پائے جاتے، لیکن اگر آپ اس کے باوجود اس حقیقت کو نظر انداز نہیں کر سکتے تو ہم عاملین کے دائرہ کار کو یوں پابند کر دیتے ہیں کہ یہ شامل نہ ہوں۔ متناہی وقفے پر آپ کو سرحدی اجزاء پر زیادہ دھیان دینا ہوگا کیونکہ $(-\infty, \infty)$ پر ہرمشی عامل، $(0, \infty)$ یا $(-\pi, \pi)$ پر غیر ہرمشی ہو سکتا ہے۔ اگر آپ لامتناہی چوکور کنویں کے بارے میں سوچ رہے ہوں تب تصور کریں کہ تفاعلات موج لامتناہی لکیر پر پائے جاتے ہیں؛ جو کسی وجہ سے $(0, a)$ کے باہر صفر ہیں۔

سوال ۳.۵: عامل $\hat{Q}$ کا **ہرمشی جوڑی دار**[۲۲] یا **شریک عامل**[۲۳] $\hat{Q}^\dagger$ درج ذیل کو مطمئن کرتا ہے۔

$$\langle f \mid \hat{Q}g \rangle = \langle \hat{Q}^\dagger f \mid g \rangle \quad (\text{تمام } f \text{ اور } g \text{ کے لئے}) \tag{۳.۲۰}$$

یوں ہرمشی عامل اپنے ہرمشی جوڑی دار کے برابر $(\hat{Q} = \hat{Q}^\dagger)$ گا۔

ا. x, i اور $\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ کے ہرمشی جوڑی دار تلاش کریں۔

ب. ہارمونی مرتعش کے عامل رفعت a_+ (مساوات ۲.۴۷) کا ہرمشی جوڑی دار تیار کریں۔

ج. دکھائیں کہ $(\hat{Q}\hat{R})^\dagger = \hat{R}^\dagger \hat{Q}^\dagger$ ہوگا۔

۳.۲.۲ تعیین حال

عام طور پر بالکل یکساں تیار کردہ نظاموں کے فرق، جس میں تمام ψ ایک حال میں ہوں، پر قابل مشاہدہ Q کی پیمائش سے ہر مرتبہ ایک جیسے نتائج حاصل نہیں ہوں گے؛ یہ ہے کوانٹائی میکانیات کی عدم تعیینیت[۲۴]۔ سوال: کیا ایسا ممکن ہو گا کہ ہم کوئی ایسا حال تیار کریں جہاں Q کی ہر پیمائش کوئی مخصوص قیمت (جسے ہم q کہہ لیں) دے؟ اس کو آپ قابل مشاہدہ Q کا **تعیین حال**[۲۵] کہہ سکتے ہیں۔ (در حقیقت، ہم ایسی ایک مثال دیکھ چکے ہیں: ساکن حالات، ہیملٹنی کے تعیین حالات ہیں؛ ساکن حال Ψ_n میں ایک ذرے کی کل توانائی کی پیمائش ہر صورت مطابقتی "اجازتی" توانائی E_n دیگی۔)

تعیین حال میں Q کا معیاری انحراف صفر ہو گا جسے درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\sigma^2 = \langle (\hat{Q} - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle \Psi \mid (\hat{Q} - q)^2 \Psi \rangle = \langle (\hat{Q} - q)\Psi \mid (\hat{Q} - q)\Psi \rangle = 0 \tag{۳.۲۱}$$

(اب اگر ہر پیمائش q دے تب ظاہر ہے کہ اوسط قیمت بھی q ہو گی: $\langle Q \rangle = q$۔ چونکہ $\hat{Q}$ ہرمشی ہے لہٰذا $\hat{Q} - q$ بھی ہرمشی عامل ہو گا؛ اس حقیقت کو استعمال کرتے ہوئے میں نے اندرونی ضرب کے ایک جزو ضربی $(\hat{Q} - q)$ کو بائیں منتقل کیا ہے۔) تاہم ایسا واحد تفاعل جس کی خود اپنے ساتھ اندرونی ضرب معدوم ہو جاتی ہو، 0 ہے، لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\hat{Q}\Psi = q\Psi \tag{۳.۲۲}$$

یہ عامل $\hat{Q}$ کی **امتیازی قیمت مساوات**[۲۶] ہے؛ $\hat{Q}$ کا **امتیازی تفاعل**[۲۷] Ψ اور مطابقتی **امتیازی قیمت**[۲۸] q ہے۔ یوں

---

[۲۲] hermitian conjugate

[۲۳] adjoint

[۲۴] ظاہر ہے، میں درست پیمائش کی بات کر رہا ہوں؛ کسی غلطی کی بنا پر غلط پیمائش کی بات نہیں کی جا رہی ہے، جس کو کوانٹائی میکانیات سے نہیں جوڑا جا سکتا

[۲۵] determinate state

[۲۶] eigenvalue equation

[۲۷] eigenfunction

[۲۸] eigenvalue

درج ذیل ہو گا۔

$$\text{تعیین حالات } \hat{Q} \text{ کے امتیازی تفاعلات ہوں گے۔} \tag{۳.۲۳}$$

ایسے حال پر Q کی پیمائش لازماً امتیازی قیمت q دیگی۔

دھیان رہے کہ امتیازی قیمت ایک عدد ہے (نہ کہ عامل یا تفاعل)۔ امتیازی تفاعل کو کسی مستقل سے ضرب دینے سے امتیازی تفاعل ہی حاصل ہوتا ہے، جس کی امتیازی قیمت وہی ہو گی۔ صفر کو امتیازی تفاعل نہیں لیا جا سکتا؛ (ہم تعریفاً اس کو امتیازی تفاعلات میں شامل نہیں کرتے؛ ورنہ کسی بھی عامل $\hat{Q}$ اور تمام q کے لیے $\hat{Q}0 = q0 = 0$ ہو گا جس کی بنا پر ہر عدد ایک امتیازی قیمت ہو گا)۔ ہاں امتیازی قیمت کے صفر ہونے میں کوئی قباحت نہیں ہے۔ کسی عامل کی تمام امتیازی قیمتوں کو اکٹھا کرنے سے اس عامل کا **طیف**[۲۹] حاصل ہو گا۔ بعض اوقات دو (یا دو سے زیادہ) خطی غیر تابع امتیازی تفاعلات کی امتیازی قیمت ایک جتنی ہو گی؛ ایسے طیف کو **انحطاطی**[۳۰] طیف کہا جاتا ہے۔

مثال کے طور پر، کل توانائی کے تعیین حالات، ہیملٹنی کے امتیازی تفاعلات ہوں گے:

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{۳.۲۴}$$

جو بالکل غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر ہے۔ اس سیاق و سباق میں ہم امتیازی قیمت کے لیے حرف E اور امتیازی تفاعل کے لیے (یونانی چھوٹا حرف) ψ استعمال کرتے ہیں (جس کے ساتھ $e^{-iEt/\hbar}$ چسپاں کر کے Ψ حاصل کیا جا سکتا ہے؛ جواب بھی H کا امتیازی تفاعل ہو گا)۔

مثال ۳.۱: درج ذیل عامل پر غور کریں جہاں ϕ، ہمیشہ کی طرح، دو ابعادی قطبی محدد کا متغیر ہے۔

$$\hat{Q} \equiv i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\phi} \tag{۳.۲۵}$$

(یہ عامل سوال ۲.۴۶ میں کارآمد ثابت ہو سکتا تھا۔) کیا $\hat{Q}$ ہرمشی ہے؟ اس کے امتیازی تفاعلات اور امتیازی قیمتیں تلاش کریں۔

حل: یہاں ہم متناہی وقفے $0 \leq \phi \leq 2\pi$ پر تفاعلات $f(\phi)$ کے ساتھ کام کر رہے ہیں جہاں ϕ اور $\phi + 2\pi$ ایک ہی طبعی نقطے کو ظاہر کرتے ہیں لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$f(\phi + 2\pi) = f(\phi) \tag{۳.۲۶}$$

تکمل بالحصص استعمال کرتے ہوئے یہ نتیجہ ملے گا

$$\langle f \mid \hat{Q}g\rangle = \int_0^{2\pi} f^*\Big(i\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}\phi}\Big)\,\mathrm{d}\phi = if^*g\Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} i\Big(\frac{\mathrm{d}f^*}{\mathrm{d}\phi}\Big)g\,\mathrm{d}\phi = \langle\hat{Q}f \mid g\rangle$$

---

[۲۹] spectrum
[۳۰] degenerate

لہٰذا $\hat{Q}$ ہر مشی ہے (یہاں مساوات ۳.۲۶ کی بنا پر سرحدی جز وخارج ہو جائے گا)۔
امتیازی قیمت مساوات:

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\phi}f(\phi) = qf(\phi) \tag{۳.۲۷}$$

کا عمومی حل درج ذیل ہو گا۔

$$f(\phi) = Ae^{-iq\phi} \tag{۳.۲۸}$$

q کی ممکنہ قیمتیں کو مساوات ۳.۲۶ درج ذیل رہنے کا پابند بناتی ہے۔

$$e^{-iq2\pi} = 1 \Rightarrow q = 0, \pm1, \pm2, \ldots \tag{۳.۲۹}$$

اس عامل کا طیف تمام صحیح اعداد پر مشتمل ہو گا اور یہ غیر انحطاطی ہے۔ □

سوال ۳.۶: عامل $\hat{Q} = \mathrm{d}^2 / \mathrm{d}\phi^2$ پر غور کریں جہاں (مثال ۳.۱ کی طرح) تفاعلات مساوات ۳.۲۶ پر پورا اترتے ہیں اور ϕ قطبی محدد میں اسمتی زاویہ ہے۔ کیا $\hat{Q}$ ہر مشی ہے؟ اس کے امتیازی تفاعلات اور امتیازی قیمتیں تلاش کریں۔ عامل $\hat{Q}$ کا طیف تلاش کریں۔ کیا طیف انحطاطی ہے؟

۳.۳ ہر مشی عامل کے امتیازی تفاعل

یوں ہم ہر مشی عاملین کے امتیازی تفاعل (جو طبعی طور پر قابل مشاہدہ کے تعیین حالات ہیں) کی طرف متوجہ ہوتے ہیں۔ ان کے دو اقسام ہیں: اگر طیف **غیر مسلسل**[۳۱] ہو (یعنی امتیازی قیمتیں الگ الگ ہوں) تب امتیازی تفاعلات ہلبرٹ فضا میں پائے جائیں گے اور یہ طبعی طور پر قابل حصول حالات ہوں گے۔ اگر طیف **استمراری**[۳۲] ہو (یعنی امتیازی قیمتیں ایک پوری سعت کو بھرتے ہوں) تب امتیازی تفاعلات ناقابل معمول زنی ہوں گے اور یہ کسی بھی ممکنہ تفاعل موج کو ظاہر نہیں کر سکتے ہیں (اگرچہ ان کے خطی جوڑ، جن میں لازماً امتیازی قیمتوں کی ایک وسعت موجود ہو گی، قابل معمول زنی ہو سکتے ہیں)۔ کچھ عاملین کا صرف غیر مسلسل طیف ہو گا (مثلاً ہارمونی مرتعش کی ہیملٹنی)، کچھ کا صرف استمراری طیف ہو گا (مثلاً آزاد ذرے کی ہیملٹنی)، اور کچھ کا ایک حصہ غیر مسلسل اور دوسرا حصہ استمراری ہو گا (مثلاً متناہی چوکور کنویں کی ہیملٹنی)۔ ان میں غیر مسلسل صورت نبھانا زیادہ آسان ہے چونکہ ان کی متعلقہ اندرونی ضرب لازماً موجود ہوں گی؛ درحقیقت یہ متناہی ابعادی نظریے (ہر مشی قالب کے امتیازی سمتیات) سے بہت مشابہت رکھتا ہے۔ میں پہلے غیر مسلسل صورت کو اور اس کے بعد استمراری صورت کو دیکھوں گا۔

---

[۳۱] discrete
[۳۲] continuous

۳.۳.۱ غیر مسلسل طیف

ریاضیاتی طور پر ہرمشی عامل کے قابل معمول زنی امتیازی تفاعل میں دو اہم خصوصیات پائے جاتے ہیں:

مسئلہ ۳.۱: ان کی امتیازی قیمتیں حقیقی ہوں گی۔

ثبوت: فرض کریں

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

ہو (یعنی $\hat{Q}$ کا امتیازی تفاعل f اور امتیازی قیمت q ہو) اور [۳۳]

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

ہو ($\hat{Q}$ ہرمشی ہے)۔ تب درج ذیل ہو گا۔

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

(چونکہ q ایک عدد ہے لہٰذا اس کو تکمل سے باہر نکالا جا سکتا ہے، اور چونکہ اندرونی ضرب میں پہلا تفاعل مخلوط جوڑی دار ہے (مساوات ۳.۶) لہٰذا دائیں طرف q بھی جوڑی دار ہو گا)۔ تاہم $\langle f|f\rangle$ صفر نہیں ہو سکتا ہے (قانون کے تحت $f(x) = 0$ امتیازی تفاعل نہیں ہو سکتا) لہٰذا $q = q^*$ یعنی q حقیقی ہو گا۔

□

یہ باعث اطمینان ہے: تعین حال میں ایک ذرے کے قابل مشاہدہ کی پیمائش ایک حقیقی عدد دے گی۔

مسئلہ ۳.۲: منفرد امتیازی قیمتوں کے متعلقہ امتیازی تفاعلات عمودی ہوں گے۔

ثبوت: فرض کریں:

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

اور $\hat{Q}$ ہرمشی ہو، تب $\langle f|\hat{Q}g\rangle = \langle \hat{Q}f|g\rangle$ ہو گا، لہٰذا

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

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

□

[۳۳] یہ وہ موقع ہے جہاں ہم فرض کرتے ہیں کہ امتیازی تفاعلات ہلبرٹ فضا میں پائے جاتے ہیں۔ دوسری صورت میں اندرونی ضرب غیر موجود ہو سکتی ہے۔

یہی وجہ ہے کہ لامتناہی چوکور کنویں یا مثال کے طور پر ہارمونی مرتعش کے امتیازی حالات عمودی ہیں؛ یہ منفرد امتیازی قیمتوں والے ہیملٹنی کے امتیازی تفاعلات ہیں۔ تاہم یہ خاصیت صرف انہیں یا ہیملٹنی کے لئے مخصوص نہیں بلکہ کسی بھی قابل مشاہدہ کے تعیین حالات کی بھی ہو گی۔

بد قسمتی سے مسئلہ ۳.۲ ہمیں انحطاطی حالات $(q' = q)$ کے بارے میں کوئی معلومات فراہم نہیں کرتا۔ تاہم، اگر دو (یا دو سے زیادہ) امتیازی حالات ایک جیسی امتیازی قیمت رکھتے ہوں، تب ان کا ہر خطی جوڑ بھی اسی امتیازی قیمت والا امتیازی حال ہو گا (سوال ۳.۷-ا) اور ہم **گرام شمد ترکیب عمودیت**[34] (صفحہ ۴۵۴ پر سوال A-۴) استعمال کرتے ہوئے ہر ایک انحطاطی ذیلی فضا میں عمودی امتیازی تفاعلات مرتب کر سکتے ہیں۔ اصولاً ایسا کرنا ہر صورت ممکن ہو گا، تاہم (اللہ کا شکر ہے) ہمیں عموماً ایسا کرنے کی ضرورت پیش نہیں آتی۔ یوں انحطاط کی صورت میں بھی ہم عمودی امتیازی تفاعلات منتخب کر سکتے ہیں، اور کوانٹائی میکانیات کے ضوابط طے کرتے ہوئے ہم فرض کریں گے کہ ہم ایسا کر چکے ہیں۔ یوں ہم فوریئر کی ترکیب استعمال کر سکتے ہیں جو اساسی تفاعلات کی معیاری عمودیت پر مبنی ہے۔

متناہی بُعدی سمتی فضا میں ہر مشی قالب کے امتیازی سمتیے تیسری بنیادی خاصیت بھی رکھتے ہیں۔ یہ فضا کا احاطہ کرتے ہیں (یعنی ہر سمتیے کو ان کے خطی جوڑ کی صورت میں لکھا جا سکتا ہے)۔ بد قسمتی سے لامتناہی بُعدی فضاوں میں اس خاصیت کے لئے ثبوت نہیں ہے۔ تاہم یہ خاصیت کوانٹائی میکانیات کے اندرونی ثبات کیلئے لازمی ہے، لہٰذا (ڈیراک کی طرح) ہم اسے ایک مسلمہ (بلکہ قابل مشاہدہ کو ظاہر کرنے والے ہر مشی عاملین پر عائد شرط) لیتے ہیں۔

مسلمہ: قابل مشاہدہ کے امتیازی تفاعلات مکمل ہوں گے: (ہلبرٹ فضا میں) ہر تفاعل کو ان کے خطی جوڑ کی صورت میں لکھا جا سکتا ہے۔[35]

سوال ۳.۷:

ا. فرض کریں کہ عامل $\hat{Q}$ کے دو امتیازی تفاعلات $f(x)$ اور $g(x)$ ہیں اور ان دونوں کی امتیازی قیمت q ہے۔ دکھائیں کہ f اور g کا ہر خطی جوڑ خود $\hat{Q}$ کا امتیازی تفاعل ہو گا اور اس کی امتیازی قیمت q ہو گی۔

ب. تصدیق کریں کہ $f(x) = e^{x}$ اور $g(x) = e^{-x}$ عامل $\mathrm{d}^2/\mathrm{d}x^2$ کے امتیازی تفاعل ہیں اور ان کی امتیازی قیمت برابر ہے۔ تفاعل f اور g کے ایسے دو خطی جوڑ بنائیں جو وقفہ $(-1,1)$ پر عمودی امتیازی تفاعل ہوں۔

سوال ۳.۸:

ا. تصدیق کریں کہ مثال ۳.۱ میں ہر مشی عامل کی امتیازی قیمتیں حقیقی ہیں۔ دکھائیں کہ (منفرد امتیازی قیمتوں کے) امتیازی تفاعلات عمودی ہیں۔

ب. یہی کچھ سوال ۳.۶ کے عامل کے لیے کریں۔

[34] Gram-Schmidt orthogonalization process

[35] چند مخصوص صورتوں میں مکملیت کو ثابت کیا جا سکتا ہے (مثلاً ہم جانتے ہیں کہ مسئلہ ڈرشلے کے تحت، لامتناہی چوکور کنویں کے ساکن حالات مکمل ہیں)۔ صرف چند صورتوں میں قابل ثبوت بات کو مسلمہ کہنا درست نظر نہیں آتا لیکن مجھے اس سے بہتر اصطلاح نہیں ملی۔

۳.۳.۲ استمراری طیف

ہر مشی عامل کا طیف استمراری ہونے کی صورت میں عین ممکن ہے کہ ان کی اندرونی ضرب غیر موجود ہوں، لہٰذا مسئلہ ۳.۱ اور مسئلہ ۳.۲ کے ثبوت کارآمد نہیں ہوں گے اور امتیازی تفاعلات ناقابل معمول زنی ہوں گے۔ اس کے باوجود ایک لحاظ سے تین لازم خصوصیات (حقیقت، عمودیت اور مکملیت) اب بھی کارآمد ہوں گی۔ اس پراسرار صورت کو ایک مخصوص مثال کی مدد سے سمجھنا بہتر ہو گا۔

مثال ۳.۲: عامل معیار حرکت کے امتیازی تفاعلات اور امتیازی قیمتیں تلاش کریں۔

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

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f_p(x) = pf_p(x) \tag{۳.۳۰}$$

اس کا عمومی حل درج ذیل ہو گا۔

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

چونکہ p کی کسی بھی (مخلوط) قیمت کے لیے یہ مربع متکامل نہیں ہے؛ اس لئے ہلبرٹ فضا میں عامل معیار حرکت کا کوئی امتیازی تفاعل نہیں پایا جاتا۔ اس کے باوجود، اگر ہم حقیقی امتیازی قیمتوں تک اپنے آپ کو محدود رکھیں تو ہمیں متبادل "معیاری عمودیت" حاصل ہوتی ہے۔ سوال ۲.۲۴-الف اور ۲.۲۶ کو دیکھ کر درج ذیل ہو گا۔

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_{p'}^*(x)f_p(x)\,\mathrm{d}x = |A|^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar}\,\mathrm{d}x = |A|^2 2\pi\hbar\delta(p-p') \tag{۳.۳۱}$$

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

$$f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar} \tag{۳.۳۲}$$

لہٰذا

$$\langle f_{p'}|f_p\rangle = \delta(p-p') \tag{۳.۳۳}$$

ہو گا جو حقیقی معیاری عمودیت (مساوات ۳.۱۰) کی یاد دلاتی ہے؛ یہ اشاریے استمراری متغیر ہیں، اور کرونیکر ڈیلٹا ڈیراک ڈیلٹا بن گیا ہے؛ تاہم اس کے علاوہ یہ ایک جیسی نظر آتی ہیں۔ میں مساوات ۳.۳۳ کو **ڈیراک معیاری عمودیت**[۳۶] کہوں گا۔

سب سے اہم بات یہ ہے کہ یہ امتیازی تفاعلات مکمل ہیں اور ان کے مجموعے (مساوات ۳.۱۱) کی جگہ اب تکمل استعمال ہوتا ہے: کسی بھی (مربع متکامل) تفاعل $f(x)$ کو درج ذیل روپ میں لکھا جا سکتا ہے۔

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p)f_p(x)\,\mathrm{d}p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} c(p)e^{ipx/\hbar}\,\mathrm{d}p \tag{۳.۳۴}$$

---

[۳۶] Diracorthonormality

توسیعی عددی سر (جواب تفاعل $c(p)$ ہو گا) کو فوریئر ترکیب سے حاصل کیا جاتا ہے۔

$$\langle f_{p'}|f\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} c(p)\langle f_{p'}|f\rangle \,\mathrm{d}p = \int_{\infty}^{\infty} c(p)\delta(p-p')\,\mathrm{d}p = c(p') \tag{۳.۳۵}$$

چونکہ یہ توسیع (مساوات ۳.۳۴) درحقیقت ایک فوریئر تبادل ہے لہٰذا انہیں مسئلہ پلانشرال (مساوات ۲.۱۰۲) سے بھی حاصل کیا جا سکتا ہے۔ □

معیار حرکت کے امتیازی تفاعلات (مساوات ۳.۳۲) سائن نما ہیں جن کا طول موج درج ذیل ہے۔

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p} \tag{۳.۳۶}$$

یہ وہ ڈی بروگلی کلیہ (مساوات ۱.۳۹) ہے جس کا ثبوت مناسب 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 تعیین ہو۔ہاں ہم قابل معمول زنی ایسا موجی اکٹھ بنا سکتے ہیں جس کے معیار حرکت کی سعت مختصر سی ہو گی اور ڈی بروگلی کا تعلق اس پر لاگو ہو گا۔

ہم مثال ۳.۲ سے کیا سمجھیں؟ اگرچہ $\hat{p}$ کا کوئی بھی امتیازی تفاعل ہلبرٹ فضا میں نہیں رہتا، ان کا ایک مخصوص کنبہ (جن کی امتیازی قیمتیں حقیقی ہوں گی) قریبی "مضافات" میں رہتا ہے اور یہ بظاہر قابل معمول زنی ہے۔ یہ ممکنہ طبعی حالات کو ظاہر نہیں کرتے، لیکن اس کے باوجود کارآمد ثابت ہوتے ہیں (جیسا کہ ہم یک بُعدی بکھراو کو پڑھتے ہوئے دیکھ چکے ہیں)۔[۳۷]

مثال ۳.۳: عامل مقام کی امتیازی قیمتیں اور امتیازی تفاعلات تلاش کریں۔

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

$$xg_y(x) = yg_y(x) \tag{۳.۳۷}$$

یہاں (کسی بھی ایک امتیازی تفاعل کے لیے) y ایک مقررہ عدد، جبکہ x استمراری متغیر ہے۔ متغیر x کا ایسا کون سا تفاعل ہو گا جس کی خاصیت یہ ہو کہ اسے x سے ضرب دینا، اس کو y سے ضرب دینے کے

[۳۷] غیر حقیقی امتیازی قیمتوں والے امتیازی تفاعلات کے بارے میں کیا کہا جا سکتا ہے؟ یہ نہ صرف ناقابل معمول زنی ہے بلکہ $\pm\infty$ پر بے قابو بڑھتے ہیں۔ اس خطے میں، جس کو میں "مضافات" کہہ چکا ہوں، اگرچہ تفاعلات کی اپنی (متناہی) اندرونی ضرب نہیں پائی جاتی، تاہم یہ ہلبرٹ فضا میں تمام ارکان کے ساتھ اندرونی ضرب دیتے ہیں۔ لیکن ایسا $\hat{p}$ کے ان امتیازی تفاعلات کے لئے درست نہیں ہو گا جن کی امتیازی قیمتیں غیر حقیقی ہوں۔ بالخصوص، میں دکھا چکا ہوں کہ ہلبرٹ فضا میں تفاعلات کے لئے عامل معیار حرکت ہرمشی ہو گا، اگرچہ اس کی دلیل پیش کرتے ہوئے (مساوات ۳.۱۹ میں) سرحدی جزو کو رد کیا گیا۔ (جب تک f ہلبرٹ فضا میں پایا جاتا ہو) یہ رکن تب بھی صفر ہو گا جب $\hat{p}$ کا امتیازی تفاعل g ہو جس کی امتیازی قیمت حقیقی ہو، تاہم امتیازی قیمت کا خیالی حصہ ہونے کی صورت میں ایسا نہیں ہو گا۔ اس نقطہ نظر سے ہر مخلوط عدد، عامل $\hat{p}$ کی امتیازی قیمت ہو گا، تاہم صرف حقیقی اعداد ہرمشی عامل $\hat{p}$ کی امتیازی قیمتیں ہوں گے؛ باقی اعداد اس خطے سے باہر پائے جائیں گے جس میں $\hat{p}$ ہرمشی ہو۔

مترادف ہو؟ ظاہر ہے کہ ماسوائے نقطہ $y = x$ کے ایسی خاصیت والا تفاعل صفر ہی ہوگا؛ یہ ڈیراک ڈیلٹا تفاعل کے علاوہ اور کچھ نہیں۔

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

اس مرتبہ امتیازی قیمت کو لازماً حقیقی ہونا چاہیے؛ امتیازی تفاعلات مربع متکامل نہیں ہیں، تاہم اب بھی یہ ڈیراک معیاری عمودیت پر پورا اترتے ہیں۔

$$\int_{-\infty}^{\infty} g_{y'}^* g_y(x)\,\mathrm{d}x = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y')\delta(x - y)\,\mathrm{d}x = |A|^2\delta(y - y') \tag{۳.۳۸}$$

اگر ہم $A = 1$ لیں تاکہ

$$g_y(x) = \delta(x - y) \tag{۳.۳۹}$$

ہو تب درج ذیل ہوگا۔

$$\langle g_{y'} | g_y \rangle = \delta(y - y') \tag{۳.۴۰}$$

یہ امتیازی تفاعلات بھی مکمل ہیں:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(y) g_y(x)\,\mathrm{d}y = \int_{-\infty}^{\infty} c(y)\delta(x - y)\,\mathrm{d}y, \tag{۳.۴۱}$$

جہاں درج ذیل ہوگا

$$c(y) = f(y) \tag{۳.۴۲}$$

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

اگر کسی ہرمشی عامل کا طیف استمراری ہو (جس کی امتیازی قیمتوں کو استمراری متغیر p یا یہاں پیش مثالوں میں y، اور بعد ازاں عموماً z کا نام دیا جائے گا)، تو اس کے امتیازی تفاعلات ناقابل معمول زنی ہوں گے، یہ ہلبرٹ فضا میں نہیں پائے جائیں گے اور کسی بھی ممکنہ طبعی حال کو ظاہر نہیں کریں گے؛ ہاں حقیقی امتیازی قیمتوں والے امتیازی تفاعلات ڈیراک معیاری عمودیت پر پورا اترتے ہیں اور مکمل ہوتے ہیں (وہاں مجموعے کی جگہ اب تکمل استعمال ہوگا)۔ خوش قسمتی سے ہمیں صرف اتنا ہی چاہیے تھا۔

سوال ۳.۹:

ا. باب ۲ سے (ہارمونی مرتعش 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 (متناہی چوکور کنویں کے علاوہ) ایک ایسے ہیملٹنی کی نشاندہی کریں جس کے طیف کا کچھ حصہ غیر مسلسل اور کچھ استمراری ہو۔

سوال ۳.۱۰: کیا لامتناہی چوکور کنویں کا زمینی حال معیار حرکت کا امتیازی تفاعل ہے؟ اگر ایسا ہے تب اس کا معیار حرکت کیا ہو گا؟ اگر ایسا نہیں ہے تب ایسا کیوں نہیں ہے؟

۳.۴ متعمم شماریاتی مفہوم

ایک ذرے کا کسی مخصوص مقام پر پائے جانے کے احتمال کا حساب، اور کسی قابل مشاہدہ مقدار کی توقعاتی قیمت تعین کرنا میں نے آپ کو باب ۱ میں دکھایا۔ باب ۲ میں آپ نے توانائی کی پیمائش کے ممکنہ نتائج اور ان کا احتمال حاصل کرنا سیکھا۔ میں اب **متعمم شماریاتی مفہوم**[38] پیش کر سکتا ہوں جس میں یہ تمام شامل ہیں اور جو ہمیں ہر پیمائش کے ممکنہ نتائج اور ان کا احتمال حاصل کرنے کے قابل بناتی ہے۔ متعمم شماریاتی مفہوم اور مساوات شروڈنگر (جو وقت کے ساتھ تفاعل موج کی ارتقا کے بارے میں ہمیں بتاتی ہے) کوانٹائی میکانیات کی بنیاد ہے۔

متعمم شماریاتی مفہوم: حال $\Psi(x,t)$ میں ایک ذرے کی ایک قابل مشاہدہ $Q(x,P)$ کی پیمائش ہر صورت ہرمشی عامل $\hat{Q}(x,-i\hbar\,\mathrm{d}/\mathrm{d}x)$ کی کوئی ایک امتیازی قیمت دے گی۔ اگر $\hat{Q}$ کا طیف غیر مسلسل ہو تب معیاری عمودی امتیازی تفاعل $f_n(x)$ سے منسلک کوئی مخصوص امتیازی قیمت q_n کے حصول کا احتمال

$$|c_n|^2 \quad \text{ہو گا جہاں} \quad c_n = \langle f_n|\Psi\rangle \quad \text{ہے۔} \tag{۳.۴۳}$$

استمراری طیف کی صورت میں جہاں امتیازی قیمتیں $q(z)$ حقیقی ہوں اور منسلک ڈیراک معیاری عمودی امتیازی تفاعلات $f_z(x)$ ہوں، سعت $\mathrm{d}z$ میں نتیجہ حاصل ہونے کا احتمال

$$\left|c(z)\right|^2\mathrm{d}z \quad \text{ہو گا جہاں} \quad c(z) = \langle f_z|\Psi\rangle \quad \text{ہو گا۔} \tag{۳.۴۴}$$

پیمائشی عمل کے بنا پر تفاعل موج مطابقتی امتیازی حال پر **منہدم**[39] ہوتا ہے۔[40]

شماریاتی مفہوم ان تمام تصورات سے یکسر مختلف ہے جو کلاسیکی طبیعیات میں پائے جاتے ہیں۔ اس کو ایک مختلف نقطہ نظر سے دیکھنا بہتر ہو گا: چونکہ ایک قابل مشاہدہ عامل کے امتیازی تفاعلات مکمل ہوں گے لہٰذا تفاعل موج کو ان کا ایک خطی جوڑ لکھا جا سکتا ہے۔

$$\Psi(x,t) = \sum_n c_n f_n(x) \tag{۳.۴۵}$$

---

[38] generalized statistical interpretation

[39] collapse

[40] استمراری طیف کی صورت میں پیمائشی قیمت کے گرد و نواح میں، پیمائشی آلہ کی حتمیت پر منحصر محدود سعت پر، تفاعل موج منہدم ہو گا۔

(اپنی آسانی کے لیے میں فرض کرتا ہوں کہ طیف غیر مسلسل ہے؛ اس دلیل کو با آسانی وسعت دے کر استمراری صورت کے لئے پیش کیا جا سکتا ہے۔) چونکہ امتیازی تفاعلات معیاری عمودی ہیں لہٰذا ان کے عددی سر کو فوریئر ترکیب سے حاصل کیا جا سکتا ہے۔[41]

$$c_n = \langle f_n|\Psi\rangle = \int f_n(x)^*\Psi(x,t)\,\mathrm{d}x \tag{۳.۴۶}$$

کیفی طور پر "Ψ میں f_n کی مقدار" کو c_n ظاہر کرتی ہے اور چونکہ کوئی ایک پیمائش $\hat{Q}$ کی کوئی ایک امتیازی قیمت دے گی لہٰذا ہم توقع کرتے ہیں کہ اس مخصوص امتیازی قیمت q_n کے حصول کا احتمال Ψ میں "f_n کی مقدار" پر منحصر ہو گا۔ اب چونکہ احتمال کو تفاعل موج کی مطلق قیمت کا مربع تعین کرتا ہے لہٰذا پیمائش کی ٹھیک ٹھیک قیمت $|c_n|^2$ ہو گی۔ متعمم شماریاتی مفہوم کا یہ ایک اثر ہے۔[42]

ہاں (تمام ممکنہ نتائج کا) کل احتمال اکائی کے برابر ہو گا

$$\sum_n |c_n|^2 = 1 \tag{۳.۴۷}$$

جو یقیناً تفاعل موج کی معمول زنی کرنے سے حاصل ہوتا ہے۔

$$\begin{aligned} 1 = \langle\Psi|\Psi\rangle &= \Big\langle \Big(\sum_{n'} c_{n'} f_{n'}\Big)\Big|\Big(\sum_n c_n f_n\Big)\Big\rangle = \sum_{n'}\sum_n c_{n'}^* c_n \langle f_{n'}|f_n\rangle \\ &= \sum_{n'}\sum_n c_{n'}^* c_n \delta_{n'n} = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n |c_n|^2 \end{aligned} \tag{۳.۴۸}$$

اسی طرح تمام ممکنہ امتیازی قیمتوں کو انفرادی طور ہر اس قیمت کے حصول کے احتمال کے ساتھ ضرب دے کر تمام کا مجموعہ لینے سے Q کی توقعاتی قیمت حاصل ہو گی۔

$$\langle Q\rangle = \sum_n q_n |c_n|^2. \tag{۳.۴۹}$$

یقیناً درج ذیل ہو گا

$$\langle Q\rangle = \langle\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle = \Big\langle \Big(\sum_{n'} c_{n'} f_{n'}\Big)\Big|\Big(\hat{Q}\sum_n c_n f_n\Big)\Big\rangle \tag{۳.۵۰}$$

---

[41] دھیان رہے کہ تابعیت وقت، جو یہاں مسئلہ خیز نہیں ہے، عددی سروں کا حصہ ہے۔ اس کو واضح رکھنے کی خاطر ہمیں $c_n(t)$ لکھنا چاہیے۔

[42] یہاں بھی احتیاط سے کام لیتے ہوئے میں یہ دعویٰ نہیں کرتا کہ "اس ذرے کا حال f_n میں پائے جانے کا احتمال $|c_n|^2$ ہے۔" ایسا کہنا بالکل غلط ہو گا۔ صرف یہ کہنا درست ہو گا کہ ذرہ حال Ψ میں ہے۔ ہاں Q کی پیمائش سے قیمت q_n کے حصول کا احتمال $|c_n|^2$ ہو گا۔ ایسی پیمائش اس حال کو تفاعل موج f_n پر منہدم کرتی ہے لہٰذا ہم کہہ سکتے ہیں کہ ایک ذرہ جو حال Ψ میں ہے، اس کا Q کی پیمائش کے بعد حال f_n میں ہونے کا احتمال $|c_n|^2$ ہے، وغیرہ وغیرہ، تاہم یہ ایک بالکل مختلف دعویٰ ہے۔

جسے $\hat{Q}f_n = q_n f_n$ کی بدولت درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\langle Q\rangle = \sum_{n'}\sum_{n} c_{n'}^{*} c_n q_n \langle f_{n'}|f_n\rangle = \sum_{n'}\sum_{n} c_{n'}^{*} c_n q_n \delta_{n'n} \sum_{n} q_n |c_n|^2. \tag{۳.۵۱}$$

کم از کم یہاں تک، چیزیں ٹھیک نظر آ رہی ہیں۔

کیا ہم مقام کی پیمائش کی اصل شماریاتی مفہوم کو اس زبان میں پیش کر سکتے ہیں؟ جی ہاں؛ اگرچہ یہ توپ سے چوہا مارنے والی بات ہو گی، آئیں اس کی تصدیق کرتے ہیں۔ حال Ψ میں ایک ذرے کے لیے x کی پیمائش لازماً عامل مقام کا کوئی ایک امتیازی قیمت دے گا۔ ہم مثال ۳.۳ میں دیکھ چکے ہیں کہ ہر (حقیقی) عدد y متغیر x کا امتیازی قیمت ہو گا، اور اس کا مطابقتی (ڈیراک معیاری عمودی) امتیازی تفاعل $g_y(x) = \delta(x-y)$ ہو گا۔ ظاہراً درج ذیل ہو گا

$$c(y) = \langle g_y|\Psi\rangle \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-y)\Psi(x,t)\,\mathrm{d}x = \Psi(y,t) \tag{۳.۵۲}$$

لہٰذا وسعت $\mathrm{d}y$ میں نتیجہ حاصل ہونے کا احتمال $|\Psi(y,t)|^2$ ہو گا جو ٹھیک اصل شماریاتی مفہوم ہے۔

معیار حرکت کے لیے کیا ہو گا؟ ہم مثال ۳.۲ میں دیکھ چکے ہیں کہ عامل معیار حرکت کے امتیازی تفاعلات $f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{(ipx/\hbar)}$ ہوں گے لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$c(p) = \langle f_p|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar}\Psi(x,t)\,\mathrm{d}x \tag{۳.۵۳}$$

یہ اتنی اہم مقدار ہے کہ ہم اسے ایک مخصوص نام سے پکارتے اور ایک مخصوص علامت سے ظاہر کرتے ہیں: اس کو **معیار حرکی فضا تفاعل موج**[۴۳] پکارا اور $\Phi(p,t)$ سے ظاہر کیا جاتا ہے۔ یہ درحقیقت (مقامی فضا) تفاعل موج $\Psi(x,t)$ کا فوریئر بدل ہے جو مسئلہ پلانشرال کے تحت اس کا الٹ فوریئر بدل ہے ہو گا۔

$$\Phi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar}\,\Psi(x,t)\,\mathrm{d}x, \tag{۳.۵۴}$$

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar}\,\Phi(p,t)\,\mathrm{d}p, \tag{۳.۵۵}$$

متعمم شماریاتی مفہوم کے تحت سعت $\mathrm{d}p$ میں معیار حرکت کی پیمائش کے حصول کا احتمال درج ذیل ہو گا۔

$$\left|\Phi(p,t)\right|^2 \mathrm{d}p \tag{۳.۵۶}$$

مثال ۳.۴: ایک ذرہ جس کی کمیت m ہے ڈیلٹا تفاعل کنواں $V(x) = -\alpha\delta(x)$ میں مقید ہے۔ معیار حرکت کی پیمائش کا $p_0 = m\alpha/\hbar$ سے بڑی قیمت دینے کا احتمال کیا ہے؟

---

[۴۳] momentum space wave function

حل: اس کا (مقامی فضا) تفاعل موج (مساوات ۲.۱۲۹) درج ذیل ہے (جہاں $E = -m\alpha^2/2\hbar^2$ ہے)۔

$$\Psi(x,t) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2} e^{-iEt/\hbar}$$

یوں معیار حرکی فضا تفاعل موج درج ذیل ہو گا۔

$$\Phi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-iEt/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2} \, \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{p_0^{3/2} e^{-iEt/\hbar}}{p^2 + p_0^2}$$

(میں نے تکمل کا حل جدول سے دیکھ کر لکھا ہے)۔ یوں احتمال درج ذیل ہو گا

$$\begin{aligned}\frac{2}{\pi} p_0^3 \int_{p_0}^{\infty} \frac{1}{(p^2+p_0^2)^2} \, \mathrm{d}p &= \frac{1}{\pi} \Big[\frac{p p_0}{p^2 + p_0^2} + \tan^{-1}\Big(\frac{p}{p_0}\Big) \Big] \Big|_{p_0}^{\infty} \\ &= \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi} = 0.0908\end{aligned}$$

(اور یہاں بھی میں نے تکمل کا حل جدول سے دیکھ کر لکھا ہے)۔ □

سوال ۳.۱۱: ہارمونی مرتعش کے زمینی حال میں ایک ذرے کی معیاری حرکی فضا تفاعل موج $\Phi(p,t)$ تلاش کریں۔ اس حال میں (اسی توانائی کے) ایک ذرہ کے p کی پیمائش کا کلاسیکی سعت کے باہر نتیجہ کا احتمال (دو بامعنی ہندسوں تک) کیا ہو گا؟ اشارہ: جواب کے عددی حصہ کے لئے "عمومی تقسیم" یا "تفاعل خلل" کے جدول سے مدد لیں یا کمپیوٹر استعمال کریں۔

سوال ۳.۱۲: درج ذیل دکھائیں۔

$$\langle x \rangle = \int \Phi^* \Big(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \Big) \Phi \, \mathrm{d}p. \tag{۳.۵۷}$$

اشارہ: دھیان رہے کہ $x e^{(ipx/\hbar)} = -i\hbar (\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}) e^{(ipx/\hbar)}$ ہے۔

یوں معیار حرکی فضا میں عامل مقام $i\hbar\partial/\partial p$ ہو گا۔ عمومی طور پر درج ذیل ہو گا۔

$$\langle Q(x,p) \rangle = \begin{cases} \int \Psi^* \hat{Q}\left(x, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right) \Psi \, \mathrm{d}x, & \text{مقامی فضا میں} \\ \int \Phi^* \hat{Q}\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial p}, p\right) \Phi \, \mathrm{d}p, & \text{معیار حرکی فضا میں} \end{cases} \tag{۳.۵۸}$$

اصولی طور پر آپ تمام حساب و کتاب مقامی فضا کی بجائے معیار حرکی فضا میں کر سکتے ہیں (اگرچہ ایسا کرنا عموماً اتنا آسان نہیں ہو گا)۔

۳.۵ اصول عدم یقینیت

میں نے عدم یقینیت کے اصول کو $\sigma_x\sigma_p \geq \hbar/2$ کی صورت میں حصہ ۱.۶ میں بیان کیا جس کو آپ کئی سوالات حل کرتے ہوئے دیکھ چکے ہیں۔ تاہم اس کا ثبوت ہم نے ابھی تک پیش نہیں کیا ہے۔ اس حصہ میں ہم اصول عدم یقینیت کی عمومی صورت پیش کریں گے اور اس کے چند مضمرات جانیں گے۔ ثبوت کا دلیل خوبصورت ضرور ہے لیکن ساتھ ہی پیچیدہ بھی ہے لہٰذا توجہ رکھیں۔

۳.۵.۱ اصول عدم یقینیت کا ثبوت

کسی بھی قابل مشاہدہ A کے لیے درج ذیل ہو گا (مساوات ۳.۲۱):

$$\sigma_A^2 = \langle(\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi|(\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi\rangle = \langle f|f\rangle$$

جہاں $f \equiv (\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi$ ہے۔ اسی طرح کسی دوسرے قابل مشاہدہ B کے لیے

$\sigma_B^2 = \langle g|g\rangle$ ہو گا جہاں $g \equiv (\hat{B} - \langle B\rangle)\Psi$ ہے۔

یوں (شوارز عدم مساوات مساوات ۳.۷ کے تحت) درج ذیل ہو گا۔

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 = \langle f|f\rangle\langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2 \tag{۳.۵۹}$$

اب کسی بھی مخلوط عدد z کے لیے درج ذیل ہو گا۔

$$|z|^2 = [(z)_{\text{حقیقی}}]^2 + [(z)_{\text{خیالی}}]^2 \geq [(z)_{\text{خیالی}}]^2 = \left[\frac{1}{2i}(z - z^*)\right]^2 \tag{۳.۶۰}$$

یوں $z = \langle f|g\rangle$ لیتے ہوئے

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i}[\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle]\right)^2 \tag{۳.۶۱}$$

ہو گا لیکن $\langle f|g\rangle$ کو درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\begin{aligned}
\langle f|g\rangle &= \langle(\hat{A} - \langle A\rangle)\Psi|(\hat{B} - \langle B\rangle)\Psi\rangle = \langle\Psi|(\hat{A} - \langle A\rangle)(\hat{B} - \langle B\rangle)\Psi\rangle \\
&= \langle\Psi|(\hat{A}\hat{B} - \hat{A}\langle B\rangle - \hat{B}\langle A\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle)\Psi\rangle \\
&= \langle\Psi|(\hat{A}\hat{B}\Psi\rangle - \langle B\rangle\langle\Psi|\hat{A}\Psi\rangle - \langle A\rangle\langle\Psi|\hat{B}\Psi\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle\langle\Psi|\Psi\rangle \\
&= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle B\rangle\langle A\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle + \langle A\rangle\langle B\rangle \\
&= \langle\hat{A}\hat{B}\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle
\end{aligned}$$

اسی طرح درج ذیل بھی لکھا جا سکتا ہے

$$\langle g|f\rangle = \langle \hat{B}\hat{A}\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$$

لہٰذا

$$\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle = \langle \hat{A}\hat{B}\rangle - \langle \hat{B}\hat{A}\rangle = \langle [\hat{A}, \hat{B}]\rangle,$$

ہو گا جہاں

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

ان دو عاملین کا مقلب ہے (مساوات ۲.۴۸ ہے)۔ نتیجتاً درج ذیل ہو گا۔

$$\sigma_A^2\sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right)^2 \tag{۳.۶۲}$$

یہ **اصول عدم یقینیت**[۴۴] کی **عمومی** صورت ہے۔ آپ یہاں سوچ سکتے ہیں کہ اس مساوات کا دایاں ہاتھ منفی ہے؟ یقیناً ایسا نہیں ہے؛ دو ہرمشی عاملین کے مقلب میں بھی i کا جذر پایا جاتا ہے جو اس مساوات میں موجود i کے ساتھ کٹ جاتا ہے۔[۴۵]

مثال کے طور پر، فرض کریں مقام $(\hat{A} = x)$ پہلا اور معیار حرکت $(\hat{B} = \frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x})$ دوسرا قابل مشاہدہ ہے۔ ہم باب ۲ (مساوات ۲.۵۱) میں ان کا مقلب

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

حاصل کر چکے ہیں لہٰذا

$$\sigma_x^2\sigma_p^2 \geq \left(\frac{1}{2i}i\hbar\right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2$$

یا، چونکہ تعریف کی رو سے معیاری انحراف مثبت ہوتے ہیں، درج ذیل ہو گا۔

$$\sigma_x\sigma_p \geq \frac{h}{2} \tag{۳.۶۳}$$

یہ اصل ہیزنبرگ اصول عدم یقینیت ہے، جو زیادہ عمومی مسئلے کی ایک مخصوص صورت ہے۔

حقیقتاً ہر دو قابل مشاہدہ جوڑی جن کے عاملین غیر مقلوب ہوں کے لیے ایک عدد "اصول عدم یقینیت" پایا جاتا ہے؛ ہم انہیں **غیر ہم آہنگ قابل مشاہدہ**[۴۶] کہتے ہیں۔ غیر ہم آہنگ قابل مشاہدہ کے مشترکہ امتیازی تفاعل نہیں پائے

---

[۴۴] uncertainty principle

[۴۵] یہ کہنا زیادہ درست ہو گا کہ دو ہرمشی عاملین کا مقلب خود خلاف ہرمشی $(\hat{Q}^\dagger = -\hat{Q})$ ہو گا اور اس کی توقعاتی قیمت خیالی ہو گی (سوال ۳.۲۶)۔

[۴۶] incompatible observables

جاتے؛ کم از کم ان کے مشترکہ امتیازی تفاعلات کا مکمل سلسلہ نہیں ہو گا (سوال ۱۵.۳ دیکھیں)۔ اس کے برعکس ہم آہنگ (مقلوب) قابل مشاہدہ کے مشترکہ امتیازی تفاعلات کا مکمل سلسلہ ممکن ہے۔[47]

مثال کے طور پر، (جیسا ہم باب ۴ میں دیکھیں گے) ہائیڈروجن جوہر کا ہیملٹنی، اس کی زاویائی معیار حرکت کی مقدار، اور زاویائی معیار حرکت کا z جزو باہمی ہم آہنگ قابل مشاہدہ ہیں، اور ہم ان تینوں کے بیک وقت امتیازی تفاعل تیار کر کے انہیں متعلقہ امتیازی قیمتوں کے لحاظ سے نام دیں گے۔ اس کے برعکس، چونکہ مقام اور معیار حرکت عاملین غیر ہم آہنگ ہیں لہٰذا مقام کا ایسا کوئی امتیازی تفاعل نہیں پایا جاتا جو معیار حرکت کا بھی امتیازی تفاعل ہو۔

یاد رہے کہ اصول عدم یقینیت کوانٹائی نظریہ میں ایک اضافی مفروضہ نہیں ہے، بلکہ یہ شماریاتی مفہوم کا ایک نتیجہ ہے۔ آپ تعجب سے پوچھ سکتے ہیں کہ تجربہ گاہ میں ہم ایک ذرے کا مقام اور معیار حرکت دونوں کیوں تعین نہیں کر سکتے ہیں؟ آپ یقیناً ایک ذرے کا مقام ناپ سکتے ہیں تاہم اس پیمائش سے تفاعل موج ایک نقطے پر نوکیلی صورت اختیار کرتے ہوئے منہدم ہوتا ہے، اور آپ (فوریئر نظریہ سے) جانتے ہیں کہ طول موج کی وسیع سعت نوکیلی تفاعل موج پیدا کرتی ہے، لہٰذا اس کے معیار حرکت کی وسعت بھی زیادہ ہو گی۔ اب اگر آپ ذرے کی معیار حرکت کی پیمائش کریں تو یہ حال ایک لمبی سائن نما موج پر منہدم ہو گا، جس کا طول موج (اب) پوری طرح معین لیکن مقام پہلی پیمائش سے مختلف ہو گا۔[48] مسئلہ یہ ہے کہ دوسری پیمائش پہلی پیمائش کے نتیجہ کو غیر مستعمل کرتی ہے۔ صرف اس صورت دوسری پیمائش ذرے کے حال پر اثر انداز نہیں ہو گی جب تفاعل موج بیک وقت دونوں قابل مشاہدہ کا امتیازی حال ہو (ایسی صورت میں دوسری پیمائش سے کچھ بھی تبدیل نہیں ہو گا)۔ تاہم ایسا عموماً تب ممکن ہو گا جب دونوں قابل مشاہدہ ہم آہنگ ہوں۔

سوال ۱۳.۳:

ا. درج ذیل مماثل مقلب ثابت کریں۔

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \tag{۳.۶۴}$$

ب. درج ذیل دکھائیں۔

$$[x^n, p] = i\hbar n x^{n-1}$$

[47] یہ اس حقیقت کے ساتھ مطابقت رکھتا ہے کہ غیر مقلب قالبوں کو بیک وقت وتری نہیں بنایا جا سکتا ہے (یعنی، انہیں ایک جیسی مماثلہ تبادلہ سے وتری نہیں بنایا جا سکتا ہے)، جبکہ مقلوب ہرمشی قالبوں کو بیک وقت وتری بنایا جا سکتا ہے۔ حصہ ۵-A دیکھیں۔

[48] جناب بوہر کو یہ ڈھونڈنے میں کافی دشواری پیش آئی کہ (مثلاً) x کی پیمائش کس طرح اس سے قبل موجود p کی قیمت کو تباہ کرتی ہے۔ حقیقت یہ ہے کہ کسی بھی پیمائش کے لئے ضروری ہے کہ ذرے کو کسی طرح کریدا جائے، مثلاً اس پر شعاع روشن کی جائے۔ تاہم ایسے نوریہ اس ذرے کو معیار حرکت منتقل کرتے ہیں جو آپ کے قابو میں نہیں ہے۔ اب آپ ذرے کا مقام جانتے ہیں لیکن اس کا معیار حرکت نہیں جانتے۔

ج. دکھائیں کہ زیادہ عمومی طور پر کسی بھی تفاعل $f(x)$ کے لئے پر درج ذیل ہو گا۔

$$[f(x), p] = i\hbar \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} \tag{۳.۶۵}$$

سوال ۳.۱۴: مقام $(A = x)$ میں عدم یقینیت اور توانائی $(B = p^2/2m + V)$ میں عدم یقینیت کا درج ذیل اصول عدم یقینیت ثابت کریں۔

$$\sigma_x \sigma_H \geq \frac{\hbar}{2m} |\langle p \rangle|$$

ساکن حالات کیلئے یہ آپ کو کوئی زیادہ معلومات فراہم نہیں کرتا؛ ایسا کیوں ہے؟

سوال ۳.۱۵: دکھائیں کہ دو غیر مقلوب عاملین کے مشترکہ امتیازی تفاعلات کا مکمل سلسلہ نہیں پایا جاتا ہے۔ اشارہ: دکھائیں اگر $\hat{P}$ اور $\hat{Q}$ کے مشترکہ امتیازی تفاعلات کا مکمل سلسلہ پایا جاتا ہو، تب ہلبرٹ فضا میں کسی بھی تفاعل کیلئے $[\hat{P}, \hat{Q}]f = 0$ ہو گا۔

۳.۵.۲ اقل عدم یقینیت کا موجی اکٹھ

ہم ہارمونی مرتعش کی زمینی حال (سوال ۲.۱۱) اور آزاد ذرے کی گاوسی موجی اکٹھ (سوال ۲.۲۲) کے تفاعل موج دیکھ چکے ہیں جو مقام و معیار حرکت کی عدم یقینیت کی حد $(\sigma_x \sigma_p = \hbar/2)$ کو چھوتے ہیں۔ اس سے ایک دلچسپ سوال پیدا ہوتا ہے: اقل عدم یقینیت کا سب سے زیادہ عمومی موجی اکٹھ کیا ہو گا؟ اصول عدم یقینیت کے ثبوت کے دلائل میں عدم مساوات دو نقطوں پر پیش آیا: مساوات ۳.۵۹ اور مساوات ۳.۶۰۔ ہم دونوں کو عدم مساوات کی بجائے مساوات لیتے ہوئے دیکھتے ہیں کہ Ψ کے بارے میں کیا معلومات فراہم ہوتی ہے۔

جب ایک تفاعل دوسرے تفاعل کا مضرب ہو: $g(x) = cf(x)$، جہاں c کوئی مخلوط عدد ہے تب شوارز عدم مساوات ایک مساوات بن جاتی ہے (صفحہ ۴۵۵ پر سوال A-5 دیکھیں)۔ ساتھ ہی میں مساوات ۳.۶۰ میں z کے حقیقی جزو کو رد کرتا ہوں؛ جب $0 = \text{حقیقی}(z)$ ہو، یعنی جب

$$\text{حقیقی}\langle f|g\rangle = \text{حقیقی}(c\langle f|f\rangle) = 0$$

ہو تب مساوات کی صورت پائی جائے گی۔ اب $\langle f|f\rangle$ یقیناً حقیقی ہے، لہٰذا مستقل c لازماً خالص خیالی ہو گا؛ جسے ہم ia لکھتے ہیں۔ یوں اقل عدم یقینیت کیلئے لازم اور کافی شرط درج ذیل ہو گا۔

$$g(x) = iaf(x), \quad a \text{ حقیقی} \tag{۳.۶۶}$$

مقام و معیار حرکت اصول عدم یقینیت کیلئے یہ شرط درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \langle p \rangle\right)\Psi = ia(x - \langle x \rangle)\Psi \tag{۳.۶۷}$$

جو متغیر x کے تفاعل Ψ کا تفرقی مساوات ہے۔ اس کا عمومی حل درج ذیل ہے (سوال ۳.۱۶)۔

$$\Psi(x) = Ae^{-a(x-\langle x\rangle)^2/2\hbar}e^{i\langle p\rangle x/\hbar} \tag{۳.۶۸}$$

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ اقل عدم یقینیت کا موجی اکٹھ درحقیقت گاوسی ہوگا اور جو دو مثالیں ہم دیکھ چکے ہیں وہ بھی گاوسی تھے۔[۴۹]

سوال ۳.۱۶: مساوات ۳.۶۷ کو $\Psi(x)$ کیلئے حل کریں۔ دھیان رہے کہ $\langle x\rangle$ اور $\langle p\rangle$ مستقلات ہیں۔

۳.۵.۳ توانائی و وقت اصول عدم یقینیت

مقام و معیار حرکت اصول عدم یقینیت کو عموماً درج ذیل روپ میں لکھا جاتا ہے۔

$$\Delta x\Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{۳.۶۹}$$

یکساں تیار کردہ نظام کی بار بار پیمائش کے نتائج کے معیاری انحراف کو بعض اوقات لاپرواہی سے Δx (متغیر x کی "عدم یقینیت") لکھا جاتا ہے جو ایک کمزور علامت ہے۔ مساوات ۳.۶۹ کی طرح کا **توانائی و وقت اصول عدم یقینیت**[۵۰] درج ذیل ہے۔

$$\Delta t\Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \tag{۳.۷۰}$$

چونکہ خصوصی نظریہ اضافت کی مقام و وقت چار سمتیات میں x اور t (بلکہ ct) اکٹھے شامل ہوتے ہیں، جبکہ توانائی و معیار حرکت چار سمتیات میں p اور E (بلکہ E/c) اکٹھے شامل ہوتے ہیں لہٰذا خصوصی نظریہ اضافت کے نقطہ نظر سے توانائی و وقت روپ کو مقام و معیار حرکت روپ کا نتیجہ تصور کیا جا سکتا ہے۔ یوں نظریہ اضافت میں مساوات ۳.۷۰ اور مساوات ۳.۶۹ ایک دوسرے کیلئے لازم و ملزوم ہیں۔ لیکن ہم اضافیتی کوانٹائی میکانیات نہیں کر رہے ہیں۔ مساوات شروڈنگر صریحاً غیر اضافی ہے۔ یہ t اور x کو ایک جیسی اہمیت نہیں دیتی ہے (یہ بطور تفرقی مساوات t میں یک رتبی جبکہ x میں دو رتبی ہے)، اور مساوات ۳.۶۹ سے قطعاً مساوات ۳.۷۰ مراد نہیں لی جا سکتی ہے۔ میں اب توانائی و وقت اصول عدم یقینیت اخذ کرتا ہوں اور ایسا کرتے ہوئے کوشش کروں گا کہ آپ کو مطمئن کروں کہ مقام و معیار حرکت اصول عدم یقینیت کے ساتھ اسکی ظاہری مشابہت گمراہ کن ہے۔

اب مقام، معیار حرکت اور توانائی تمام تغیر پذیر متغیرات ہیں، جو کسی بھی وقت پر نظام کے قابل پیمائش خواص ہیں۔ تاہم (کم از کم غیر اضافی نظریہ میں) وقت تغیر پذیر متغیر نہیں ہے؛ آپ مقام اور توانائی کی

[۴۹] دھیان رہے کہ صرف Ψ کو x کا تابع ہونا یہاں مسئلہ ہے؛ "مستقلات" A، a، $\langle x\rangle$ اور $\langle p\rangle$ تمام وقت کے تابع ہو سکتے ہیں، بلکہ Ψ اقل صورت سے ارتقا کر سکتا ہے۔ میں صرف اتنا دعویٰ کرتا ہوں کہ اگر کسی لمحہ پر تفاعل موج x کے لحاظ سے گاوسی ہو، تب (اس لمحہ پر) عدم یقینیت حاصل ضرب اقل ہوگا۔

[۵۰] energy-time uncertainty principle

پیمائش کی طرح ایک ذرے کا وقت نہیں ناپ سکتے ہیں۔ وقت ایک غیر تابع متغیر ہے اور تغیر پذیر مقدار اس کے تفاعلات ہیں۔ بالخصوص توانائی و وقت اصول عدم یقینیت میں وقت کی متعدد پیمائشوں کی معیاری انحراف کو Δt ظاہر نہیں کرتا ہے؛ آپ کہہ سکتے ہیں (اور میں جلد اس کی زیادہ درست صورت پیش کروں گا) کہ یہ اس وقت کو ظاہر کرتا ہے جس میں نظام "کافی زیادہ" تبدیل ہوتا ہے۔

یہ دیکھنے کیلئے کہ نظام کتنی تیزی سے تبدیل ہوتا ہے، ہم وقت کے لحاظ سے کسی قابل مشاہدہ $Q(x,p,t)$ کی توقعاتی قیمت کے تفرق کا حساب کرتے ہیں۔

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle Q\rangle=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle=\Big\langle\frac{\partial\Psi}{\partial t}|\hat{Q}\Psi\Big\rangle+\Big\langle\Psi|\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\Psi\Big\rangle+\Big\langle\Psi|\hat{Q}\frac{\partial\Psi}{\partial t}\Big\rangle$$

اب مساوات شروڈنگر درج ذیل کہتی ہے (جہاں $H=p^2/2m+V$ ہیملٹنی ہے)۔

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi$$

یوں درج ذیل ہو گا۔

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle Q\rangle=-\frac{1}{i\hbar}\langle\hat{H}\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle+\frac{1}{i\hbar}\langle\Psi|\hat{Q}\hat{H}\Psi\rangle+\Big\langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\Big\rangle$$

اب $\hat{H}$ ہرمشی ہے لہٰذا $\langle\hat{H}\Psi|\hat{Q}\Psi\rangle=\langle\Psi|\hat{H}\hat{Q}\Psi\rangle$ اور یوں ادرج ذیل ہو گا۔

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle Q\rangle=\frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{Q}]\rangle+\Big\langle\frac{\partial\hat{Q}}{\partial t}\Big\rangle \tag{۳.۷۱}$$

یہ خود ایک دلچسپ اور کار آمد نتیجہ ہے (سوال ۳.۱۷ اور ۳.۳۱ دیکھیں)۔ عمومی صورت میں جہاں عامل صریحاً وقت کا تابع نہیں ہو گا،[۵۱] یہ کہتی ہے کہ توقعاتی قیمت کی تبدیلی کی شرح کو عامل اور ہیملٹنی کا مقلب تعین کرتا ہے۔ بالخصوص اگر $\hat{H}$ اور $\hat{Q}$ آپس میں قابل تبدل ہوں، تب $\langle Q\rangle$ مستقل ہو گا، اور اس نقطہ نظر سے Q بقائی مقدار ہو گا۔

اب فرض کریں عمومی اصول عدم یقینیت (مساوات ۳.۶۲) میں ہم $A=H$ اور $B=Q$ لے کر فرض کریں کہ Q صریحاً t کا تابع نہیں ہے۔ تب

$$\sigma_H^2\sigma_Q^2\geq\Big(\frac{1}{2i}\langle[\hat{H},\hat{Q}]\rangle\Big)^2=\Big(\frac{1}{2i}\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}\langle Q\rangle}{\mathrm{d}t}\Big)^2=\Big(\frac{\hbar}{2}\Big)^2\Big(\frac{\mathrm{d}\langle Q\rangle}{\mathrm{d}t}\Big)^2$$

ہو گا جس کو درج ذیل سادہ روپ میں لکھا جا سکتا ہے۔

$$\sigma_H\sigma_Q\geq\frac{\hbar}{2}\Big|\frac{\mathrm{d}\langle Q\rangle}{\mathrm{d}t}\Big| \tag{۳.۷۲}$$

---

[۵۱] وقت کی صریحاً تابع عاملین بہت کم پائے جاتے ہیں لہٰذا عموماً $\partial\hat{Q}/\partial t=0$ ہو گا۔ صریحاً تابعیت وقت کی مثال لینے کی خاطر ایک ایسے ہارمونی مرتعش کی مخفی توانائی لیتے ہیں جس کے اسپرنگ کا مقیاس لچک تبدیل ہو رہا ہو (مثلاً درجہ حرارت تبدیل ہونے سے اسپرنگ زیادہ لچکدار ہو جاتا ہو): $Q=(1/2)m[\omega(t)]^2x^2$

ہم $\Delta E \equiv \sigma_H$ اور درج ذیل تعریفات لیتے ہیں۔

$$\Delta t \equiv \frac{\sigma_Q}{|\,\mathrm{d}\langle Q\rangle / \,\mathrm{d}t} \tag{۳.۷۳}$$

تب درج ذیل ہو گا۔

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \tag{۳.۷۴}$$

جو توانائی و وقت اصول عدم یقینیت ہے۔ یہاں Δt کی معنی کو دھیان دیں۔ چونکہ

$$\sigma_Q = \left|\frac{\mathrm{d}\langle Q\rangle}{\mathrm{d}t}\right| \Delta t,$$

ہے لہٰذا Δt اتنے وقت کو ظاہر کرتا ہے جتنے میں Q کی توقعاتی قیمت ایک معیاری انحراف کے برابر تبدیل ہو۔ بالخصوص Δt اس قابل مشاہدہ Q پر منحصر ہو گی جس پر آپ غور کر رہے ہوں؛ کسی ایک قابل مشاہدہ کی تبدیلی بہت تیز ہو سکتی ہے جبکہ دوسرے کی بہت سست ہو سکتی ہے۔ تاہم چھوٹی ΔE کی صورت میں تمام قابل مشاہدہ کی تبدیلی کی شرح بہت سست رفتار ہو گی؛ اس کو یوں بھی بیان کیا جا سکتا ہے کہ اگر ایک قابل مشاہدہ بہت تیزی سے تبدیل ہوتا ہو تب توانائی میں عدم یقینیت بہت زیادہ ہو گی۔

مثال ۳.۵: ساکن حال کی انتہائی صورت میں جہاں توانائی یکتا طور پر معین ہو گی، تمام توقعاتی قیمتیں وقت کے لحاظ سے مستقل ہوں گی ($\Delta E = 0 \Rightarrow \Delta t = \infty$)؛ جیسا ہم نے کچھ دیر پہلے (مساوات ۲.۹ میں) دیکھا۔ کچھ ہونے کے لیے ضروری ہے کہ کم از کم دو ساکن حالات کا خطی جوڑ لیا جائے، مثلاً درج ذیل۔

$$\Psi(x,t) = a\psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} + b\psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar}$$

اگر a ، b ، ψ_1 اور ψ_2 حقیقی ہوں تب درج ذیل ہو گا۔

$$|\Psi(x,t)|^2 = a^2(\psi_1(x))^2 + b^2(\psi_2(x))^2 + 2a\psi_1(x)\psi_2(x)\cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t\right)$$

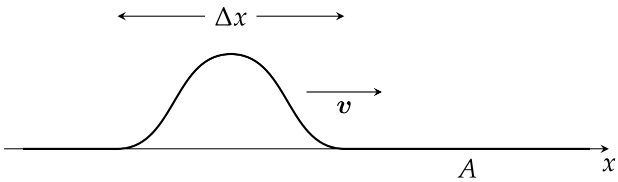
ایک ارتعاش کا دوری عرصہ $\tau = 2\pi\hbar/(E_2 - E_1)$ ہو گا۔ اندازاً بات کرتے ہوئے $\Delta E = E_2 - E_1$ اور $\Delta t = \tau$ لکھ کر درج ذیل لکھا جا سکتا ہے

$$\Delta E \Delta t = 2\pi\hbar$$

جو یقیناً $\geq \hbar/2$ ہے (ٹھیک ٹھیک حساب کے لیے سوال ۳.۱۸ دیکھیں)۔ □

مثال ۳.۶: کسی ایک مخصوص نقطہ سے آزاد ذرے کی موجی اکٹھ کتنی دیر میں گزرتی ہے (شکل ۳.۱)؟ کیفی طور پر $\Delta t = \Delta x/v = m\Delta x/p$ ہو گا لیکن $E = p^2/2m$ ہے، لہٰذا $\Delta E = p\Delta p/m$ ہو گا۔ یوں

$$\Delta E \Delta t = \frac{p\Delta p}{m}\frac{m\Delta x}{p} = \Delta x \Delta p$$



شکل ۳.۱: ایک آزاد ذرہ موجی اکٹھ نقطہ A کو پہنچتا ہے (مثال ۳.۶)۔

ہو گا جو مقام و معیار حرکت اصول عدم یقینیت کے تحت $\hbar/2 \geq$ ہو گا (ٹھیک ٹھیک حساب کے لیے سوال ۳.۱۹ دیکھیں)۔

$\square$

مثال ۳.۷: ذرہ Δ تقریباً 10^{-23} سیکنڈ حیات رہنے کے بعد از خود ٹکڑے ہو جاتا ہے۔ اس کی کمیت کی تمام پیمائشوں کا مستطیلی ترسیل، جرس کی شکل کا قوس دے گا جس کا وسط $1232\,\mathrm{MeV/c^2}$ پر اور چوڑائی تقریباً $120\,\mathrm{MeV/c^2}$ ہو گی (شکل ۳.۲)۔ ساکن صورت توانائی (mc^2) کیوں بعض اوقات 1232 سے زیادہ اور بعض اوقات اس سے کم حاصل ہوتی ہے؟ کیا یہ تجرباتی پیمائش کی خلل کے بنا پر ہے؟ جی نہیں کیوں کہ

$$\Delta E \Delta t = \left(\frac{120}{2}\mathrm{MeV}\right)(10^{-23}\,\mathrm{s}) = 6 \times 10^{-22}\,\mathrm{MeV\,s}$$

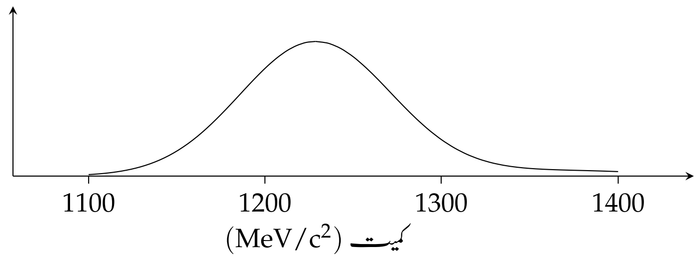
ہے جبکہ $\hbar/2 = 3 \times 10^{-22}\,\mathrm{MeV\,s}$ ہے۔ یوں کمیت میں وسعت اتنا ہی کم ہے جتنا اصول عدم یقینیت اجازت دیتا ہے؛ اتنا کم عرصہ حیات کے ذرے کی کمیت پوری طرح معین نہیں ہو سکتی ہے۔[۵۲] $\square$

ان مثالوں میں ہم نے جزو Δt کے کئی مخصوص مطلب دیکھے: مثال ۳.۵ میں اس سے مراد طول موج تھا؛ مثال ۳.۶ میں اس سے مراد وہ دورانیہ تھا جس میں ایک ذرہ کسی نقطہ سے گزرتا ہے؛ مثال ۳.۷ میں یہ ایک غیر مستحکم ذرے کے عرصہ حیات کو ظاہر کرتا ہے۔ تاہم تمام صورتوں میں Δt اس دورانیہ کو ظاہر کرتا ہے جس میں نظام میں "کافی زیادہ" تبدیلی رونما ہو۔

عموماً کہا جاتا ہے کہ اصول عدم یقینیت کے بنا پر کوانٹائی میکانیات میں توانائی صحیح معنوں میں بقائی نہیں ہے، یعنی آپ کو اجازت ہے کہ آپ توانائی ΔE "ادھار" لے کر وقت $\Delta t \approx \hbar/(2\Delta E)$ کے اندر "واپس" کریں۔ توانائی کی بقا کی جتنی زیادہ خلاف ورزی ہو، اتنا وہ دورانیہ کم ہو گا جس کے دوران یہ خلاف ورزی رونما

---

[۵۲] حقیقت میں مثال ۳.۷ میں غلط بیانی کی گئی ہے۔ آپ 10^{-23} سیکنڈ کو گھڑی پر ناپ نہیں سکتے ہیں، اور حقیقت میں اتنے کم عرصہ حیات کے ذرے کا عرصہ حیات ایسی کمیتی ترسیم سے بذریعہ اصول عدم یقینیت اخذ کیا جاتا ہے۔ تاہم، اگرچہ منطق الٹ رخ استعمال کی گئی ہے، ہمارا نقطہ درست ہے۔ مزید، اگر آپ فرض کریں کہ Δ تقریباً ایک پروٹان ($\sim 10^{-15}\,\mathrm{m}$) جتنا ہے، تب اس ذرے سے گزرنے کے لئے شعاع کو تقریباً 10^{-23} سیکنڈ درکار ہوں گے، اور یہ فرض کرنا مشکل ہو گا کہ ذرے کا عرصہ حیات اس سے بھی کم ہو گا۔



شکل ۲.۳: کمیت Δ کی پیمائشوں کی مستطیلی ترسیم (مثال ۷.۳)۔

ہو۔ اب توانائی و وقت اصول عدم یقینیت کے کئی جائز مطلب لیے جا سکتے ہیں، تاہم یہ ان میں سے ایک نہیں ہے۔ ہمیں کوانٹائی میکانیات کہیں بھی توانائی کی بقا کی خلاف ورزی کی اجازت نہیں دیتی ہے اور نہ ہی مساوات ۷۴.۳ کے حصول میں کوئی ایسی اجازت شامل کی گئی۔ تاہم، حقیقت یہ ہے کہ اصول عدم یقینیت انتہائی زیادہ مضبوط ہے: اس کی غلط استعمال کے باوجود نتائج زیادہ غلط نہیں ہوتے ہیں، اور یہی وجہ ہے کہ ماہر طبیعیات عموماً اس کو استعمال کرتے ہوئے زیادہ محتاط نہیں رہتے۔

سوال ۱۷.۳: درج ذیل ذیل مخصوص صورتوں پر مساوات ۷۱.۳ کی اطلاق کریں۔

ا. $Q = 1$ ب. $Q = H$ ج. $Q = x$ د. $Q = p$

ہر ایک صورت میں مساوات ۲۷.۱، مساوات ۳۳.۱، مساوات ۳۸.۱ اور توانائی کی بقا (مساوات ۳۹.۲ کے بعد کا تبصرہ دیکھیں) کو مد نظر رکھتے ہوئے نتیجے پر بحث کریں۔

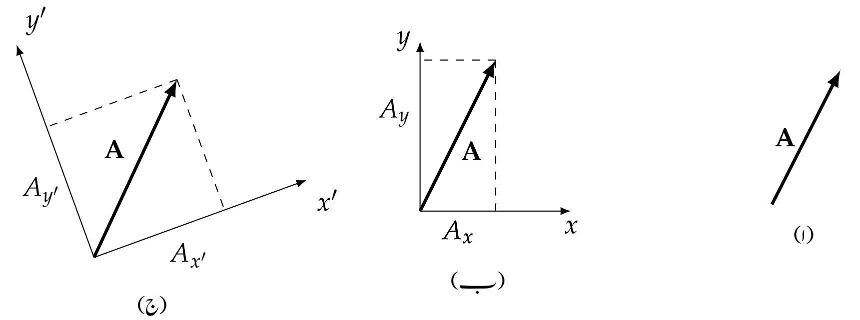
سوال ۱۸.۳: معیاری انحراف σ_H، σ_x اور $\mathrm{d}\langle x\rangle / \mathrm{d}t$ کی ٹھیک ٹھیک قیمتوں کا حساب کرتے ہوئے سوال ۵.۲ کے تفاعل موج اور قابل مشاہدہ x کے لیے توانائی و وقت اصول عدم یقینیت پر کھیں۔

سوال ۱۹.۳: معیاری انحراف σ_H، σ_x اور $\mathrm{d}\langle x\rangle / \mathrm{d}t$ کی ٹھیک ٹھیک قیمتوں کا حساب کرتے ہوئے سوال ۴۳.۲ میں آزاد ذرے کی موجی اکٹھ اور قابل مشاہدہ x کے لیے توانائی و وقت اصول عدم یقینیت پر کھیں۔

سوال ۲۰.۳: دکھائیں کہ قابل مشاہدہ x کے لیے توانائی و وقت اصول عدم یقینیت، تخفیف کے بعد سوال ۱۴.۳ کے اصول عدم یقینیت کا روپ اختیار کرتی ہے۔

۶.۳ ڈیراک علامتیت

دو ابعاد میں ایک سادہ سمتیہ $\mathbf{A}$ پر غور کریں (شکل ۳.۳-۱)۔ آپ اس سمتیہ کو کس طرح بیان کریں گے؟ سب سے آسان طریقہ یہ ہو گا کہ آپ x اور y محدد کا ایک کارتیسی نظام قائم کر کے اس پر سمتیہ $\mathbf{A}$ کے



شکل ۳.۳: (ا) سمتیہ $\mathbf{A}$، (ب) xy محدد سے لحاظ سے $\mathbf{A}$ کے اجزاء، (ج) $x'y'$ محدد کے لحاظ سے $\mathbf{A}$ کے اجزاء

اجزاء: $\mathbf{A} \cdot \hat{i} = A_x$ اور $\mathbf{A} \cdot \hat{j} = A_y$ وضع کریں (شکل ۳.۳-ب)۔ اب عین ممکن ہے کہ آپ کی بہن ایک مختلف کارتیسی نظام قائم کرے جس کے محدد x' اور y' ہوں؛ وہ سمتیہ $\mathbf{A}$ کے اجزاء $A'_x = \hat{i}' \cdot \mathbf{A}$ اور $A'_y = \hat{j}' \cdot \mathbf{A}$ پیش کرے گی (شکل ۳.۳-ج)۔ حقیقت میں آپ دونوں ایک ہی سمتیہ کو دو مختلف اساس ($\{\hat{i}, \hat{j}\}$) اور ($\hat{i}', \hat{j}'$) کی صورت میں بیان کر رہے ہیں۔ سمتیہ خود "باہر فضا" میں رہتا ہے اور کسی کے بھی قائم کردہ (اختیاری) محددی نظام کا تابع نہیں ہے۔

یہی کچھ کوانٹائی میکانیات میں ایک نظام کے حال کے لیے درست ہوگا۔ اس کو سمتیہ $|\mathcal{S}(t)\rangle$ سے ظاہر کیا جا سکتا ہے جو "باہر ہلبرٹ فضا" میں رہتا ہے اور جسے ہم مختلف اساس کے لحاظ سے بیان کر سکتے ہیں۔ درحقیقت امتیازی تفاعل مقام کی اساس میں $|\mathcal{S}\rangle$ کی توسیعی عددی سر موجی تفاعل $\Psi(x,t)$ ہوگا:

$$\Psi(x,t) = \langle x|\mathcal{S}(t)\rangle \tag{۳.۷۵}$$

(جہاں $\hat{x}$ کے امتیازی تفاعل جس کی امتیازی قیمت x ہے کو سمتیہ $|x\rangle$ ظاہر کرتا ہے)[۵۳]، جبکہ معیار حرکت امتیازی تفاعل کی اساس میں $|\mathcal{S}\rangle$ کی وسعت، مقام و معیار حرکت موجی تفاعل $\Phi(p,t)$ ہے:

$$\Phi(p,t) = \langle p|\mathcal{S}(t)\rangle \tag{۳.۷۶}$$

(جہاں $\hat{p}$ کا امتیازی تفاعل جس کی امتیازی قیمت p ہے کو سمتیہ $|p\rangle$ ظاہر کرتا ہے)۔[۵۴] ہم $|\mathcal{S}\rangle$ کی وسعت کو توانائی امتیازی تفاعل کی اساس میں بھی کر سکتے ہیں (یہاں اپنی آسانی کے لیے ہم غیر مسلسل طیف فرض کر

---

[۵۳] میں اس کو g_x (مساوات ۳.۳۹) نہیں کہنا چاہتا چونکہ وہ اس کی اساس مقام میں روپ ہے، اور یہاں پورا مقصد کسی بھی مخصوص اساس سے چھٹکارا ہے۔ یقیناً میں نے پہلی مرتبہ ہلبرٹ فضا کو، x پر، بطور مربع متکامل تفاعلات کا سلسلہ متعارف کرتے ہوئے اس کو (اساس مقام کا) پابند بنایا جو ایک امتناعی صورت ہے۔ میں چاہتا ہوں کہ آپ اس کو ایک تصوراتی سمتی فضا سمجھیں، جس کے ارکان کو کسی بھی اساس کے لحاظ سے ظاہر کیا جا سکتا ہے۔

[۵۴] مقامی فضا میں یہ $f_p(x)$ ہوگا (مساوات ۳.۳۲)۔

رہے ہیں):

$$c_n(t) = \langle n|\mathcal{S}(t)\rangle \tag{۳.۷۷}$$

(جہاں $\hat{H}$ کے n ویں امتیازی تفاعل کو سمتیہ $\langle n|$ ظاہر کرتا ہے)؛ مساوات ۳.۴۶۔ تاہم یہ تمام ایک ہی حالت کو ظاہر کرتے ہیں؛ تفاعلات Ψ اور Φ، اور عددی سروں کا سلسلہ $\{c_n\}$ ٹھیک ایک جیسی معلومات رکھتے ہیں؛ یہ ایک ہی سمتیہ کو ظاہر کرنے کے تین مختلف طریقے ہیں:

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) &= \int \Psi(y,t)\delta(x-y)\,\mathrm{d}y = \int \Phi(p,t)\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}\,\mathrm{d}p\\ &= \sum c_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x)\end{aligned} \tag{۳.۷۸}$$

(قابل مشاہدہ کو ظاہر کرنے والے) عاملین خطی مبدل ہوتے ہیں جو ایک سمتیہ کا "تبادلہ" دوسری سمتیہ میں کرتے ہیں۔

$$|\beta\rangle = \hat{Q}|\alpha\rangle \tag{۳.۷۹}$$

بالکل سمتیات کی طرح جنہیں ایک مخصوص اساس $\{|e_n\rangle\}$،[55] کے لحاظ سے ان کے اجزاء

$$\begin{aligned}|\alpha\rangle = \sum_n a_n|e_n\rangle \quad \text{جہاں} \quad a_n = \langle e_n|\alpha\rangle \quad \text{ہے، اور}\\ |\beta\rangle = \sum_n b_n|e_n\rangle \quad \text{جہاں} \quad b_n\langle e_n\beta\rangle \quad \text{ہے}\end{aligned} \tag{۳.۸۰}$$

سے ظاہر کیا جاتا ہے، عاملین کو (کسی مخصوص اساس کے لحاظ سے) ان کے **قالبی ارکان**[56,57]

$$\langle e_m|\hat{Q}|e_n\rangle \equiv Q_{mn} \tag{۳.۸۱}$$

سے ظاہر کیا جاتا ہے۔ اس علامت کو استعمال کرتے ہوئے مساوات ۳.۷۹ درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$\sum_n b_n|e_n\rangle = \sum_n a_n\hat{Q}|e_n\rangle \tag{۳.۸۲}$$

یا، سمتیہ $\langle e_m|$ کے ساتھ اندرونی ضرب لیتے ہوئے

$$\sum_n b_n\langle e_m|e_n\rangle = \sum_n a_n\langle e_m|\hat{Q}|e_n\rangle \tag{۳.۸۳}$$

---

[55] میں فرض کرتا ہوں کہ یہ اساس غیر مسلسل ہے؛ مسلسل اساس کی صورت میں n استمراری ہو گا اور مجموعات کی جگہ تکملات ہوں گے۔

[56] matrixelements

[57] یہ اصطلاح متناہی ابعادی صورت سے متاثر ہو کر منتخب کی گئی ہے، تاہم اس "قالب" کے ارکین کی تعداد اب لامتناہی ہو گی (جن کی گنتی ناممکن بھی ہو سکتی ہے)۔

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$b_m = \sum_n Q_{mn} a_n \tag{۳.۸۴}$$

یوں اجزاء کے تبادلہ کے بارے میں قالبی ارکان معلومات فراہم کرتے ہے۔

بعد میں ہمیں ایسے نظاموں سے واسطہ ہو گا جن کے خطی غیر تابع حالات کی تعداد متناہی عدد (N) ہو گا۔ سمتیہ $|\mathcal{S}(t)\rangle$ ایسی صورت میں N ابعادی سمتی فضا میں رہتا ہے؛ جس کو (کسی دیے گئے اساس کے لحاظ سے)، (N) اجزاء کی قطار سے ظاہر کیا جا سکتا ہے جبکہ عاملین $(N \times N)$ سادہ قالب کا روپ اختیار کرتے ہیں۔ یہ سادہ ترین کوانٹائی نظام ہیں؛ جن میں لامتناہی آبادی سمتی فضا سے وابستہ باریکیاں نہیں پائی جاتی ہیں۔ ان میں سب سے آسان دو حالتی نظام ہے جس پر درج ذیل مثال میں غور کیا گیا ہے۔

مثال ۳.۸: تصور کریں کہ ایک نظام میں صرف دو (درج ذیل) خطی غیر تابع حالات ممکن ہیں۔[۵۸]

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{اور} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

سب سے زیادہ عمومی حال ان کا معمول شدہ خطی جوڑ

$$|\mathcal{S}\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \text{ہو گا جہاں} \quad |a|^2 + |b|^2 = 1 \quad \text{ہے۔}$$

ہیملٹنی کو ایک (ہرمشی) قالب کے روپ میں لکھا جا سکتا ہے؛ فرض کریں کہ اس کا مخصوص روپ درج ذیل ہے

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix}$$

جہاں g اور h حقیقی مستقل ہیں۔ اگر ($t = 0$ پر) یہ نظام حال $|1\rangle$ سے ابتدا کرے تب وقت t پر اس کا حال کیا ہو گا؟

حل: (تابع وقت) مساوات شروڈنگر درج ذیل کہتی ہے۔

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\mathcal{S}\rangle = H|\mathcal{S}\rangle \tag{۳.۸۵}$$

ہمیشہ کی طرح ہم غیر تابع تابع شروڈنگر

$$H|\mathcal{S}\rangle = E|\mathcal{S}\rangle \tag{۳.۸۶}$$

[۵۸] یہاں "مساوات" کی نشان سے مراد "ظاہر کرتا ہے" لینا چاہیے، تاہم میرے خیال میں اس غیر رسمی علامتیت کے استعمال سے غلط فہمی پیدا ہونے کا کوئی امکان نہیں پایا جاتا ہے۔

کے حل سے ابتداء کرتے ہیں، یعنی ہم H کی امتیازی سمتیات اور امتیازی قیمتیں تلاش کرتے ہیں۔ امتیازی قیمت کا تعین امتیازی مساوات کرتی ہے۔

$$\text{مقطع}\begin{pmatrix} h-E & g \\ g & h-E \end{pmatrix} = (h-E)^2 - g^2 = 0 \Rightarrow h - E = \mp g \Rightarrow E_{\pm} = h \pm g$$

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ اجازتی توانائیاں $(h+g)$ اور $(h-g)$ ہیں۔ امتیازی سمتیات تعین کرنے کی خاطر ہم درج ذیل لکھتے ہیں

$$\begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = (h \pm g)\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow h\alpha + g\beta = (h \pm g)\alpha \Rightarrow \beta = \pm\alpha$$

لہٰذا معمول شدہ امتیازی سمتیات درج ذیل ہوں گے۔

$$|\mathcal{S}_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$$

اس کے بعد ابتدائی حال کو ہم ہیملٹنی کے امتیازی سمتیات کے خطی جوڑ کی صورت میں لکھتے ہیں۔

$$|\mathcal{S}(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\mathcal{S}_{+}\rangle + |\mathcal{S}_{-}\rangle)$$

آخر میں ہم اس کے ساتھ معیاری تابعیت وقت جزو $e^{-iE_n t/\hbar}$ منسلک کرتے ہیں۔

$$\begin{aligned}
|\mathcal{S}(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[e^{-i(h+g)t/\hbar}|\mathcal{S}_{+}\rangle + e^{-i(h-g)t/\hbar}|\mathcal{S}_{-}\rangle] \\
&= \frac{1}{2}e^{-iht/\hbar}\left[e^{-igt/\hbar}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + e^{igt/\hbar}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}\right] \\
&= \frac{1}{2}e^{-iht/\hbar}\begin{pmatrix} e^{-igt/\hbar} + e^{igt/\hbar} \\ e^{-igt/\hbar} - e^{igt/\hbar} \end{pmatrix} = e^{-iht/\hbar}\begin{pmatrix} \cos(gt/\hbar) \\ -i\sin(gt/\hbar) \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

اگر آپ کو اس نتیجے پر شک ہو تو آپ اس کی جانچ پڑتال کر سکتے ہیں: کیا یہ تابع وقت مساوات شروڈنگر کو مطمئن کرتا ہے؟ کیا یہ $t = 0$ پر ابتدائی حال کے موافق ہے؟

یہ (دیگر چیزوں کے علاوہ) **ارتعاش نیوٹرینو**[۵۹] کا ایک سادہ نمونہ ہے جہاں $|1\rangle$ **الیکٹران نیوٹرینو**[۶۰]، اور $|2\rangle$ **میوان نیوٹرینو**[۶۱] کو ظاہر کرتا ہے؛ اگر ہیملٹنی میں خلاف وتر جزو (g) غیر معدوم ہو تب وقت گزرنے کے ساتھ بار بار الیکٹران نیوٹرینو تبدیل ہو کر میون نیوٹرینو میں اور میون نیوٹرینو واپس الیکٹران نیوٹرینو میں تبدیل ہوتا رہے گا۔ □

---

[۵۹] neutrinooscillations
[۶۰] electronneutrino
[۶۱] muonneutrino

کوانٹائی میکانیات میں اندرونی ضرب کو **ڈیراک علامتیت**[۶۲] سے ظاہر کیا جاتا ہے جو تکونی قوسین، $\rangle$ اور $\langle$، اور افقی لکیر $|$، پر مشتمل ہے۔ یوں کوانٹائی میکانیات میں تکونی قوسین کو قوسین نہیں بلکہ عاملین تصور کریں۔ اندرونی ضرب $\langle\alpha|\beta\rangle$ کو دو حصوں $\langle\alpha|$ اور $|\beta\rangle$ میں تقسیم کیا جاتا ہے جنہیں بالترتیب **تفاعلیہ**[۶۳] اور **سمتاویہ**[۶۴] کہتے ہیں۔ ان میں سے موخر الذکر ایک سمتیہ ہے، مگر اول الذکر کیا ہے؟ یہ اس لحاظ سے سمتیات کا ایک خطی تفاعل ہے کہ اس کے دائیں جانب ایک سمتیہ چسپاں کرنے سے ایک (مخلوط) عدد حاصل ہوتا ہے جو اندرونی ضرب ہو گا۔ (ایک عامل کے ساتھ سمتیہ چسپاں کرنے سے دوسرا سمتیہ حاصل ہوتا ہے جبکہ ایک تفاعلیہ کے ساتھ سمتیہ چسپاں کرنے سے ایک عدد حاصل ہوتا ہے۔) جیسا آپ دیکھیں گے کوانٹائی میکانیات میں تفاعلیہ کو ایک قالب اور سمتاویہ کو سمتیہ کی روپ میں لکھا جاتا ہے۔ ڈیراک علامتیت کو **تفاعلیہ و سمتاویہ علامتیت**[۶۵] بھی کہتے ہیں۔ ایک تفاعلی فضا میں تفاعلیہ کو تکمل لینے کی ہدایت تصور کیا جا سکتا ہے:

$$\langle f| = \int f^*[\cdots]\,\mathrm{d}x$$

جہاں چوکور قوسین $[\cdots]$ میں وہ تفاعل پر کیا جائے گا جو تفاعلیہ کے دائیں ہاتھ سمتاویہ میں موجود ہو گا۔ ایک متناہی ابعادی سمتی فضا میں، جہاں سمتیات کو قطاروں

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \tag{۳.۸۷}$$

کی صورت میں بیان کیا گیا ہو، مطابقتی تفاعلیہ ایک سمتیہ صف

$$\langle\alpha| = (a_1^* a_2^* \ldots a_n^*) \tag{۳.۸۸}$$

ہو گا۔ تمام تفاعلیہ کو اکٹھا کرنے سے دوسرا سمتی فضا حاصل ہو گا جس کو **دوہری فضا**[۶۶] کہتے ہیں۔

تفاعلیہ کی ایک علیحدہ وجود کا تصور ہمیں طاقتور اور خوبصورت علامتیت کا موقع فراہم کرتی ہے (اگرچہ اس کتاب میں اس سے فائدہ نہیں اٹھایا جائے گا)۔ مثال کے طور پر، اگر $|\alpha\rangle$ ایک معمول شدہ سمتیہ ہو، تب عامل

$$\hat{P} \equiv |\alpha\rangle\langle\alpha| \tag{۳.۸۹}$$

کسی بھی دوسرے سمتیہ کا وہ حصہ اٹھاتا (منتخب کرتا) ہے جو $|\alpha\rangle$ کے "ساتھ ساتھ" پایا جاتا ہو:

$$\hat{P}|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle|\alpha\rangle;$$

[۶۲] Diracnotation
[۶۳] bra
[۶۴] ket
[۶۵] bra-ketnotation
[۶۶] dualspace

ہم اس کو $\langle\alpha|$ کے احاطہ کیے گئے یک بُعدی ذیلی فضا پر **عامل تظلیل**[67] کہتے ہیں۔ اگر $\{|e_n\rangle\}$ غیر مسلسل معیاری عمودی اساس،

$$\langle e_m|e_n\rangle = \delta_{mn} \tag{۳.۹۰}$$

ہو تب درج ذیل ہو گا

$$\sum_n |e_n\rangle\langle e_n| = 1 \tag{۳.۹۱}$$

(جو عامل مماثل ہے)۔ چونکہ کسی بھی سمتیہ $|\alpha\rangle$ پر عمل کرتے ہوئے یہ عامل اساس $\{|e_n\rangle\}$ میں سمتیہ $|\alpha\rangle$ کی وسعت کو دوبارہ سے حاصل کرتا ہے۔

$$\sum_n |e_n\rangle\langle e_n|\alpha\rangle = |\alpha\rangle \tag{۳.۹۲}$$

اسی طرح اگر $\{|e_z\rangle\}$ ڈیراک معیاری عمود شدہ استمراری اساس

$$\langle e_z|e_{z'}\rangle = \delta(z-z') \tag{۳.۹۳}$$

ہو، تب درج ذیل ہو گا۔

$$\int |e_z\rangle\langle e_z|\,\mathrm{d}z = 1 \tag{۳.۹۴}$$

مساوات ۳.۹۱ اور مساوات ۳.۹۴ کملیت کو خوش اسلوبی سے بیان کرتے ہیں۔

سوال ۳.۲۱: دکھائیں کہ عاملین تظلیل **یک طاقتی**[68] ہیں، یعنی ان کے لئے $\hat{P}^2 = \hat{P}$ ہو گا۔ $\hat{P}$ کے امتیازی قیمتیں تعین کریں اور اس کے امتیازی سمتیات کے خواص بیان کریں۔

سوال ۳.۲۲: معیاری عمودی اساس $|1\rangle$ ، $|2\rangle$ ، $|3\rangle$ کا احاطہ کیے گئے تین بُعدی فضا پر غور کریں۔ سمتاویہ $|\alpha\rangle$ اور سمتاویہ $|\beta\rangle$ درج ذیل ہیں۔

$$|\alpha\rangle = i|1\rangle - 2|2\rangle - i|3\rangle, \quad |\beta\rangle = i|1\rangle + 2|3\rangle$$

ا. $\langle\alpha|$ اور $\langle\beta|$ کو (دوہری اساس $\langle 1|$ ، $\langle 2|$ ، $\langle 3|$ کی صورت میں) تیار کریں۔

ب. $\langle\alpha|\beta\rangle$ اور $\langle\beta|\alpha\rangle$ تلاش کریں اور $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$ کی تصدیق کریں۔

ج. اس اساس میں عامل $\hat{A} \equiv |\alpha\rangle\langle\beta|$ کے نو ارکان قالب تلاش کر کے قالب $\mathbf{A}$ تیار کریں۔ کیا یہ ہرمشی ہے؟

---

[67] projection operator
[68] idempotent

سوال ۳.۲۳: کسی دو سطحی نظام کی ہیملٹنی درج ذیل ہے

$$\hat{H} = E(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$$

جہاں $\langle 2|$, $\langle 1|$ معیاری عمودی اساس اور E ایسا عدد ہے جس کا بُعد توانائی کا ہے۔ اس کے امتیازی قیمتیں اور ($\langle 1|$ اور $\langle 2|$ کے خطی جوڑ کی صورت میں معمول شدہ) امتیازی تفاعل تلاش کریں۔ اس اساس کے لحاظ سے $\hat{H}$ کا قالب $\mathbf{H}$ کیا ہو گا؟

سوال ۳.۲۴: فرض کریں عامل $\hat{Q}$ کے معیاری عمودی امتیازی تفاعلات کا ایک مکمل سلسلہ درج ذیل ہے۔

$$\hat{Q}|e_n\rangle = q_n|e_n\rangle \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

دکھائیں کہ $\hat{Q}$ کو اس کے **طیفی تحلیل**[69]

$$\hat{Q} = \sum_n q_n|e_n\rangle\langle e_n|$$

کی صورت میں لکھا جا سکتا ہے۔ اشارہ: تمام ممکنہ سمتیات پر عامل کے عمل سے عامل کو جانچا جاتا ہے لہٰذا کسی بھی سمتیہ $\langle \alpha|$ کے لیے آپ کو درج ذیل دکھانا ہو گا۔

$$\hat{Q}|\alpha\rangle = \left\{\sum_n q_n|e_n\rangle\langle e_n|\right\}|\alpha\rangle$$

اضافی سوالات برائے باب ۳

سوال ۳.۲۵: **لیژانڈر کثیر رکنیاں**۔ وقفہ $-1 \le x \le 1$ پر تفاعلات 1، x، x^2 اور x^3 کو گرام وشمد طریقہ کار سے معیاری عمود بنائیں (صفحہ ۴۵۴ پر سوال A-۴ دیکھیں)۔ عین ممکن ہے کہ آپ نتائج کو پہچان پائیں؛ (معیاری عمودزنی کے علاوہ)[70] یہ لیژانڈر کثیر رکنیاں ہیں (جدول ۴.۱)۔

سوال ۳.۲۶: ایک **خلاف ہرمشی**[71] (یا **منحرف ہرمشی**[72]) عامل اپنے ہرمشی جوڑی دار کا منفی ہوتا ہے۔

$$\hat{Q}^\dagger = -\hat{Q} \tag{۳.۹۵}$$

---

[69] spectraldecomposition

[70] لیژانڈر کو معلوم نہیں تھا کہ کونسی روایت بہتر ثابت ہو گی۔ انہوں نے مجموعی جزو ضربی یوں منتخب کیا کہ $x = 1$ پر تمام تفاعلات 1 کے برابر ہوں؛ ہم اس بد قسمت انتخاب کی پیروی کرنے پر مجبور ہیں۔

[71] anti-hermitian

[72] skew-hermitian

ا. دکھائیں کہ خلاف ہرمشی عامل کی توقعاتی قیمت خیالی ہو گی۔

ب. دکھائیں کہ دو عدد ہرمشی عاملین کا مقلب خلاف ہرمشی ہو گا۔ دو عدد خلاف ہرمشی عاملین کے مقلب کے بارے میں کیا کہا جا سکتا ہے؟

سوال ۳.۲۷: **ترتیبی پیمائشیں**[47]: قابل مشاہدہ A کو ظاہر کرنے والے عامل $\hat{A}$ کے دو معمول شدہ امتیازی حالات ψ_1 اور ψ_2، جن کے امتیازی قیمتیں بالترتیب a_1 اور a_2 ہیں، پائے جاتے ہیں۔ قابل مشاہدہ B کو ظاہر کرنے والے عامل $\hat{B}$ کے دو معمول شدہ امتیازی حالات ϕ_1 اور ϕ_2 اور بالترتیب امتیازی قیمتیں b_1 اور b_2 ہیں۔ ان امتیازی حالات کا تعلق درج ذیل ہے۔

$$\psi_1 = (3\phi_1 + 4\phi_2)/5, \quad \psi_2 = (4\phi_1 - 3\phi_2)/5$$

ا. قابل مشاہدہ A کی پیمائش a_1 قیمت دیتی ہے۔ اس پیمائش کے (فوراً) بعد یہ نظام کس حال میں ہو گا؟

ب. اب اگر B کی پیمائش کی جائے تو کیا نتائج ممکن ہوں گے اور ان کے احتمال کیا ہوں گے؟

ج. قابل مشاہدہ B کی پیمائش کے فوراً بعد دوبارہ A کی پیمائش کی جاتی ہے۔ نتیجہ a_1 حاصل کرنے کا احتمال کیا ہو گا؟ (دھیان رہے کہ اگر میں آپ کو B کی پیمائش کا نتیجہ بتاتا تب جواب بہت مختلف ہوتا۔)

سوال ۳.۲۸: لامتناہی چوکور کنویں کے n ویں ساکن حال کی معیار حرکت وفضا تفاعل موج $\Phi_n(p,t)$ تلاش کریں۔ $|\Phi_1(p,t)|^2$ اور $|\Phi_2(p,t)|^2$ کو p کے تفاعل کے طور پر ترسیم کریں (نقاط $p = \pm n\pi\hbar/a$ پر خصوصی توجہ دیں)۔ $\Phi_n(p,t)$ کو استعمال کرتے ہوئے p^2 کی توقعاتی قیمت کا حساب لگائیں۔ اپنے جواب کا سوال ۲.۴ کے ساتھ موازنہ کریں۔

سوال ۳.۲۹: درج ذیل تفاعل موج پر غور کریں

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2n\lambda}} e^{i2\pi x/\lambda}, & -n\lambda < x < n\lambda \\ 0, & \text{بصورت دیگر} \end{cases}$$

جہاں n کوئی مثبت عدد صحیح ہے۔ اگرچہ وقفہ $-n\lambda < x < n\lambda$ پر یہ تفاعل خالص سائن نما ہے (جس کا طول موج λ ہے) تاہم چونکہ یہ تفاعل لامتناہی تک ارتعاش جاری نہیں رکھتا لہٰذا اس کی معیار حرکت کی قیمتیں ایک سعت پر مشتمل ہوں گی۔ اس کا معیار حرکت وفضا تفاعل موج $\Phi(p,0)$ تلاش کریں۔ $|\Psi(x,0)|^2$ اور $|\Phi(p,0)|^2$ ترسیم کر کے (مرکزی چوٹی کے اطراف صفروں کے بیچ) چوڑائیاں ω_x اور ω_p تعین کریں۔ دیکھیں کہ $n \to \infty$ کا ان چوڑائیوں پر کیا اثر ہو گا؟ ω_x اور ω_p کو Δx اور Δp کی اندازاً قیمتیں لیتے ہوئے تصدیق کریں کہ اصول عدم یقینیت مطمئن ہوتا ہے۔ انتباہ: اگر آپ σ_p کا حساب کرنے کی کوشش کریں تو آپ کو حیرانی کا سامنا ہو گا۔ کیا آپ اس مسئلے کی وجہ بتلا سکتے ہیں؟

---

[47] sequentialmeasurements

سوال ۳.۳۰: درج ذیل فرض کریں

$$\Psi(x,0)=\frac{A}{x^2+a^2}$$

جہاں A اور a مستقلات ہیں۔

ا. $\Psi(x,0)$ کی معمول زنی کرتے ہوئے A تعین کریں۔

ب. (لمحہ $t=0$ پر) $\langle x\rangle$ ، $\langle x^2\rangle$ اور σ_x تلاش کریں۔

ج. معیار حرکت وفضا تفاعل موج $\Phi(p,0)$ تلاش کریں اور تصدیق کریں کہ یہ معمول شدہ ہے۔

د. $\Phi(p,0)$ استعمال کرتے ہوئے (لمحہ $t=0$ پر) $\langle p\rangle$ $\langle p^2\rangle$ اور σ_p کا حساب کریں۔

ہ. اس حال کے لیے ہیزنبرگ اصول عدم یقینیت کو جانچیں۔

سوال ۳.۳۱: **مسئلہ وریل۔** درج ذیل مساوات ۳.۷۱ کی مدد سے دکھائیں

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle xp\rangle-2\langle T\rangle-\left\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle \tag{۳.۹۶}$$

جہاں T حرکی توانائی $(H=T+V)$ ہے۔ساکن حال میں بایاں ہاتھ صفر ہوگا (ایسا کیوں ہے؟) لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$2\langle T\rangle=\left\langle x\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\right\rangle \tag{۳.۹۷}$$

اس کو **مسئلہ وریل**[۴۷] کہتے ہیں۔ہارمونی مرتعش کے ساکن حالات کے لیے اس مسئلہ کو استعمال کرتے ہوئے ثابت کریں کہ $\langle T\rangle=\langle V\rangle$ ہوگا اور تصدیق کریں کہ یہ سوال ۲.۱۱ اور سوال ۲.۱۲ میں آپ کے نتائج کے ہم آہنگ ہے۔

سوال ۳.۳۲: توانائی ووقت 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 موج $\Psi(x,0)=1/\sqrt{2}[\psi_1(x)+\psi_2(x)]$ استعمال کرتے ہوئے اس کی جانچ پڑتال کریں۔

سوال ۳.۳۳: ہارمونی مرتعش کے ساکن حالات کی (معیاری عمودی) اساس (مساوات ۲.۶۷) میں قالبی ارکان $\langle n|x|n'\rangle$ اور $\langle n|p|n'\rangle$ تلاش کریں۔ آپ سوال ۲.۱۲ میں قالبی وتری رکن $n=n'$ دریافت کر چکے ہیں؛ وہی ترکیب موجودہ عمومی مسئلے میں استعمال کریں۔ متعلقہ (لامتناہی) قالب $\mathbf{X}$ اور $\mathbf{P}$ مرتب کریں۔ دکھائیں کہ اس اساس میں $\mathbf{H}=\frac{1}{2m}\mathbf{P}^2+\frac{m\omega^2}{2}\mathbf{X}^2$ وتری ہوگا۔ کیا اس کے وتری ارکان آپ کے توقع کے مطابق ہیں؟ جزوی جواب:

$$\langle n|x|n'\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\sqrt{n'}\delta_{n,n'-1}+\sqrt{n}\delta_{n',n-1}) \tag{۳.۹۸}$$

---

[۴۷] virialtheorem

سوال ۳.۳۴: ایک ہارمونی مرتعش ایسے حال میں ہے کہ اس کی توانائی کی پیمائش، ایک جتنے احتمال کے ساتھ، $(1/2)\hbar\omega$ یا $(3/2)\hbar\omega$ دے گی۔ اس حال میں $\langle p \rangle$ کی ممکنہ اعظم قیمت کیا ہو گی؟ اگر لمحہ $t = 0$ پر اس کی قیمت (یہی اعظم قیمت) ہو تب $\Psi(x, t)$ کیا ہو گا؟

سوال ۳.۳۵: 35-3
ہارمونی مرتعش کے اتساقی حالات۔ ہارمونی مرتعش کے ساکن حالات ($|n\rangle = \psi_n(x)$، مساوات ۲.۶۷) میں صرف $n = 0$ عین عدم یقینیت کی حد ($\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$) پر بیٹھتا ہے؛ جیسا آپ سوال ۲.۱۲ میں معلوم کر چکے ہیں عمومی طور پر $\sigma_x \sigma_p = (2n+1)\hbar/2$ ہو گا۔ تاہم چند خطی جوڑ (جنہیں **اتساقی حالات**[45] کہتے ہیں) بھی عدم یقینیت کے حاصل ضرب کو اقل بناتے ہیں۔ ہم دیکھتے ہیں کہ یہ عامل تقلیل[46] کے امتیازی تفاعل ہوں گے

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

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

ا. 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 ہرمشی جوڑی دار a_+ ہے۔ فرض نہ کریں کہ α حقیقی ہو گا۔

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

ج. کسی بھی دوسرے تفاعل موج کی طرح، اتساقی حال کو توانائی امتیازی حالات کی وسعت

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

لکھا جا سکتا ہے۔ دکھائیں کہ توسیعی عددی سر درج ذیل ہوں گے۔

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

د. $|\alpha\rangle$ کی معمول زنی کرتے ہوئے c_0 تعین کریں۔ جواب: $e^{-|\alpha|^2/2}$

ہ. اس کے ساتھ تابعیت وقت

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

[45] coherent states
[46] عامل رفعت کے قابل معمول زنی امتیازی حالات نہیں پائے جاتے۔

شامل کر کے دکھائیں کہ $|\alpha(t)\rangle$ اب بھی a_- کا امتیازی حال ہو گا، تاہم وقت کے ساتھ امتیازی قیمت ارتقا پذیر ہو گا۔

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

یوں اتفاقی حال ہمیشہ اتفاقی حال ہی رہے گا اور عدم یقینیت کے حاصل ضرب کو قلیل کر تا رہے گا۔

و. کیا زمینی حال $|n = 0\rangle$ خود اتفاقی حال ہو گا؟ اگر ایسا ہو تب امتیازی قیمت کیا ہو گا۔

سوال ۳.۳۶: **مبسوط اصول عدم یقینیت۔** متعمم اصول عدم یقینیت (مساوات ۳.۶۲) 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 بنا کر درج ذیل روپ میں لکھا جا سکتا ہے

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \frac{1}{4}(\langle C \rangle^2 + \langle D \rangle^2) \tag{۳.۹۹}$$

جہاں $\hat{D} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} - 2\langle A \rangle \langle B \rangle$ ہو گا۔ اشارہ: مساوات ۳.۶۰ میں z کا حقیقی جزو $\text{Re}(z)$ جزو لیں۔

ب. مساوات ۳.۹۹ کو $A = B$ صورت کے لئے جانچیں (چونکہ اس صورت میں $C = 0$ ہے لہٰذا معیاری عدم یقینیت اصول یہاں بے وقعت ہے؛ بدقسمتی سے عدم یقینیت کا مبسوط اصول بھی زیادہ مددگار ثابت نہیں ہوتا ہے)۔

سوال ۳.۳۷: ایک نظام جو تین سطحی ہے کی ہیملٹنی درج ذیل قالب 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 $|\mathcal{S}(t)\rangle$ کیا ہو گا؟

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

ب. اگر اس نظام کا ابتدائی حال درج ذیل ہو تب $\lvert\mathcal{S}(t)\rangle$ کیا ہو گا؟

$$\lvert\mathcal{S}(0)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

سوال ۳.۳۸: ایک نظام جو تین سطحی ہے، کی ہیملٹنی درج ذیل قالب ظاہر کرتا ہے۔

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

باقی دو قابل مشاہدہ A اور B کو درج ذیل قالب 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 قیمتیں اور (معمول شدہ) امتیازی سمتیات تلاش کریں۔

ب. یہ نظام عمومی حال

$$\lvert\mathcal{S}(0)\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{pmatrix}$$

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

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

سوال ۳.۳۹:

ا. ا) ایک تفاعل $f(x)$ جس کو ٹیلر تسلسل کی صورت میں پھیلایا 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 بنا پر $\hat{p}/\hbar$ کو **فضا میں انتقال کا پیدا کار**[77] کہتے ہیں۔ تبصرہ: عامل کی قوت نما کی تعریف درج ذیل طاقتی تسلسل توسیع دیتا ہے۔

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

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

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

(جہاں t_0 کوئی بھی مستقل وقت ہو سکتا ہے)؛ اسی بنا پر $-\hat{H}/\hbar$ کو **وقت میں انتقال کا پیدا کار**[78] کہتے ہے۔

ج. دکھائیں لمحہ $t+t_0$ پر حرکی متغیر $Q(x,p,t)$ کی توقعاتی قیمت درج ذیل لکھی جا سکتی ہے۔[79]

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

اس کو استعمال کرتے ہوئے مساوات ۳.۷۱ حاصل کریں۔ اشارہ: $t_0 = \mathrm{d}t$ لے کر $\mathrm{d}t$ میں پہلے رتبہ تک پھیلائیں۔

سوال ۳.۴۰:

ا. ایک آزاد ذرہ کے لیے تابع وقت مساوات شروڈنگر کو معیار حرکت فضا میں لکھ کر حل کریں۔ جواب: ($e^{-ip^2t/2m\hbar}\Phi(p,0)$)

ب. متحرک گاوسی موجی اکٹھ (سوال ۲.۴۳) کے لئے $\Phi(p,0)$ تلاش کر کے اس صورت کے لئے $\Phi(p,t)$ مرتب کریں۔ ساتھ ہی $\left|\Phi(p,t)\right|^2$ مرتب کریں جو تابع وقت نہیں ہو گا۔

ج. Φ پر مبنی موزوں تکملات 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 $\langle H\rangle = \langle p\rangle^2/2m + \langle H\rangle_0$ ہو گا (جہاں زیر نوشت میں 0 ساکن گاوسی ظاہر کرتا ہے) اور اپنے نتیجے پر تبصرہ کریں۔

---

[77] generatoroftranslationinspace

[78] generatoroftranslationintime

[79] بالخصوص $t=0$ لے کر، t_0 کی زیر نوشت میں صفر لکھے بغیر
$$\langle Q(t)\rangle = \langle\Psi(x,t)|\hat{Q}|\Psi(x,t)\rangle = \langle\Psi(x,0)|\hat{U}^{-1}\hat{Q}\hat{U}|\Psi(x,0)\rangle$$
ہو گا 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 لپیٹ کر (تابعیت وقت کو تفاعل موج کا حصہ بنا 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 لپیٹ کر (تابعیت وقت کو عامل کا حصہ بنا کر) لکھ سکتے ہیں۔ اول الذکر کو **شروڈنگر نقطہ نظر** جبکہ موخر الذکر کو **ہیزنبرگ نقطہ نظر** کہتے ہیں۔

باب ۴

تین ابعادی کوانٹائی میکانیات

۴.۱ کروی محدد میں مساوات شروڈنگر

تین ابعاد تک توسیع با آسانی کی جا سکتی ہے۔ مساوات شروڈنگر

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}t} = H\Psi \tag{۴.۱}$$

کہتی ہے کہ معیاری طریقہ کار کا اطلاق (x کے ساتھ ساتھ y اور z پر بھی) کرتے ہوئے:

$$p_x \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \to \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \tag{۴.۲}$$

ہیملٹنی اعامل 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 مختصراً درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\boldsymbol{p} \to \frac{\hbar}{i}\nabla \tag{۴.۳}$$

یوں درج ذیل ہو گا

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

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

جہاں

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{۴.۵}$$

کارتیسی محدد میں **لاپلاسی**[۲] ہے۔

مخفی توانائی V اور تفاعل موج Ψ اب $\boldsymbol{r} = (x, y, z)$ اور t کے تفاعلات ہیں۔ لامتناہی چھوٹے حجم $\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r} = \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z$ میں ایک ذرہ پایا جانے کا احتمال $\left|\Psi(\boldsymbol{r}, t)\right|^2 \mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r}$ ہو گا اور معمول زنی شرط درج ذیل ہو گی

$$\int \left|\Psi\right|^2 \mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r} = 1 \tag{۴.۶}$$

جہاں تکمل کو پوری فضا پر لینا ہو گا۔ اگر مخفیہ وقت کے تابع نہ ہو تب ساکن حالات کا مکمل سلسلہ پایا جائے گا:

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

جہاں فضائی تفاعل موج ψ_n غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر

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

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

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

جہاں مستقلات c_n ہمیشہ کی طرح ابتدائی تفاعل موج $\Psi(\boldsymbol{r}, 0)$ سے حاصل کیے جائیں گے۔ (اگر مخفیہ **استمراریہ**[۳] حالات دیتا ہو تب مساوات ۴.۹ میں مجموعہ کی بجائے تکمل ہو گا۔)

سوال ۴.۱:

۱. عاملین $\boldsymbol{r}$ اور $\boldsymbol{p}$ کے تمام **باضابطہ مقلبیت رشتے**[۴]: $[x, y]$، $[x, p_y]$، $[x, p_x]$، $[p_y, p_z]$، وغیرہ وغیرہ، حاصل کریں۔

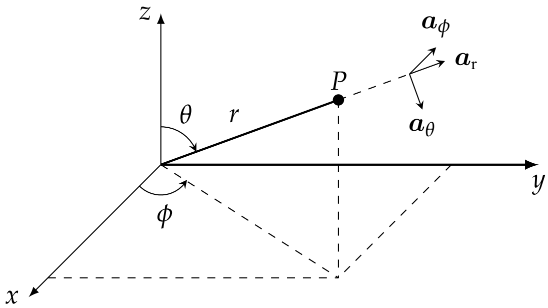
جواب:

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

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

---

[۲] Laplacian
[۳] continuum
[۴] canonical commutation relations



شکل ۴.۱: کروی محدد: رداس r، قطبی زاویہ θ، اور اسمتی زاویہ ϕ ہیں۔

ب. تین ابعاد کے لیے مسئلہ اہرنفسٹ کی تصدیق کریں:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \boldsymbol{p}\rangle = \langle -\nabla V\rangle \quad \text{اور} \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \boldsymbol{r}\rangle = \frac{1}{m}\langle \boldsymbol{p}\rangle \tag{۴.۱۱}$$

(ان میں سے ہر ایک در حقیقت تین مساوات کو ظاہر کرتی ہے۔ ایک مساوات ایک جزو کے لیے ہو گی۔) اشارہ: پہلے تصدیق کر لیں کہ مساوات ۳.۷۱ تین ابعاد کے لیے بھی کارآمد ہے۔

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

جواب:

$$\sigma_x\sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \sigma_y\sigma_{p_y} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \sigma_z\sigma_{p_z} \geq \frac{\hbar}{2} \tag{۴.۱۲}$$

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

۴.۱.۱ علیحدگی متغیرات

عموماً مخفیہ صرف مبدا سے فاصلہ کا تفاعل ہو گا۔ ایسی صورت میں **کروی محدد**[۵] (r,θ,ϕ) کا استعمال بہتر ثابت ہو گا (شکل ۴.۱)۔ کروی محدد میں لاپلاسی درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial}{\partial r}\Big) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\Big(\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\Big) \tag{۴.۱۳}$$

[۵] spherical coordinates

یوں کروی محدد میں غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر درج ذیل ہو گی۔

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Big[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\Big(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\Big)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\Big(\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}\Big)\Big]+V\psi=E\psi \tag{۴.۱۴}$$

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

$$\psi(r,\theta,\phi)=R(r)Y(\theta,\phi) \tag{۴.۱۵}$$

اس کو مساوات ۴.۱۴ میں پر کر کے؛

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

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

$$\begin{gathered}\Big\{\frac{1}{R}\frac{d}{\mathrm{d}r}\Big(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\Big)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}[V(r)-E]\Big\}\\+\frac{1}{Y}\Big\{\frac{1}{\sin\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\Big\}=0\end{gathered}$$

پہلی خمدار قوسین کے اندر جزو صرف r کا تابع ہے جبکہ باقی حصہ صرف θ اور ϕ کا تابع ہے؛ لہٰذا دونوں حصے انفرادی طور پر ایک مستقل کے برابر ہوں گے۔ اس علیحدگی مستقل کو ہم $\ell(\ell+1)$ روپ میں لکھتے ہیں جس کی وجہ کچھ دیر میں واضح ہو گی۔[6]

$$\frac{1}{R}\frac{d}{\mathrm{d}r}\Big(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\Big)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}[V(r)-E]=\ell(\ell+1) \tag{۴.۱۶}$$

$$\frac{1}{Y}\Big\{\frac{1}{\sin\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\Big)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}\Big\}=-\ell(\ell+1) \tag{۴.۱۷}$$

سوال ۴.۲: کارتیسی محدد میں علیحدگی متغیرات استعمال کرتے ہوئے لامتناہی کعبی کنواں (یا ڈبہ میں ایک ذرہ):

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

حل کریں۔

---

[6] ایسا کرنے سے ہم عمومیت نہیں کھوتے ہیں، چونکہ یہاں ℓ کوئی بھی مخلوط عدد ہو سکتا ہے۔ بعد میں ہم دیکھیں گے کہ ℓ کو لازماً عدد صحیح ہونا ہو گا۔ اسی نتیجہ کو ذہن میں رکھتے ہوئے میں نے علیحدگی مستقل کو اس عجیب روپ میں لکھا ہے۔

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

ب. بڑھتی توانائی کے لحاظ سے انفرادی توانائیوں کو E_1 ، E_2 ، E_3 ، وغیرہ، سے ظاہر کر کے E_1 تا E_6 تلاش کریں۔ ان کی انحطاطیت (یعنی ایک ہی توانائی کے مختلف حلوں کی تعداد) معلوم کریں۔ تبصرہ: یک بُعدی صورت میں انحطاطی مقید حالات نہیں پائے جاتے ہیں (سوال ۲.۴۵)، تاہم تین ابعادی صورت میں یہ کثرت سے پائے جاتے ہیں۔

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

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 ہو گا۔

$$\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\Big(\sin\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}\Big)+\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2}=-\ell(\ell+1)Y\sin^2\theta \tag{۴.۱۸}$$

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

$$Y(\theta,\phi)=\Theta(\theta)\Phi(\phi) \tag{۴.۱۹}$$

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

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

پہلا جزو صرف θ کا تفاعل ہے، جبکہ دوسرا صرف ϕ کا تفاعل ہے، لہٰذا ہر جزو ایک مستقل ہو گا۔ اس مرتبہ ہم علیحدگی مستقل[۷] کو m^2 لکھتے ہیں۔

$$\frac{1}{\Theta}\Big[\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\Big(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\Big)\Big]+\ell(\ell+1)\sin^2\theta=m^2 \tag{۴.۲۰}$$

$$\frac{1}{\Phi}\frac{\mathrm{d}^2\,\Phi}{\mathrm{d}\phi^2}=-m^2 \tag{۴.۲۱}$$

متغیر ϕ کی مساوات زیادہ آسان ہے۔

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

---

[۷] یہاں بھی ہم عمومیت نہیں کھوتے ہیں، چونکہ m کوئی بھی مخلوط عدد ہو سکتا ہے؛ اگرچہ ہم جلد دیکھیں گے کہ m کو عدد صحیح ہونا ہو گا۔ انتباہ: اب حرف m دو مختلف چیزوں، کمیت اور علیحدگی مستقل، کو ظاہر کر رہا ہے۔ امید ہے کہ آپ کو درست معنی جاننے میں مشکل در پیش نہیں ہو گی۔

[درحقیقت 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 جا سکتا ہے جسے ہم Θ میں ضم کرتے ہیں۔ چونکہ برقی مخفیہ لازماً حقیقی ہوں گے لہٰذا برقی حرکیات میں اسمتی تفاعل (Φ) کو سائن اور کوسائن کی صورت میں لکھا جاتا ہے نہ کہ قوت نمائی صورت میں۔ کوانٹائی 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، ہم فضا میں واپس اسی نقطہ پر پہنچتے ہیں (شکل ۴.۱ دیکھیں) لہٰذا درج ذیل شرط[8] عائد کی جا سکتی ہے۔

$$\Phi(\phi+2\pi)=\Phi(\phi) \tag{۴.۲۳}$$

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

$$m=0,\pm1,\pm2,\cdots \tag{۴.۲۴}$$

مساوات θ

$$\sin\theta\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\Big(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\Big)+[\ell(\ell+1)\sin^2\theta-m^2]\Theta=0 \tag{۴.۲۵}$$

اتنی سادہ نہیں ہے۔ اس کا حل درج ذیل ہے

$$\Theta(\theta)=AP_\ell^m(\cos\theta) \tag{۴.۲۶}$$

جہاں P_ℓ^m **شریک لیژانڈر تفاعل**[9] ہے جس کی تعریف درج ذیل ہے

$$P_\ell^m(x)\equiv(1-x^2)^{|m|/2}\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)^{|m|}P_\ell(x) \tag{۴.۲۷}$$

اور ℓ ویں لیژانڈر کثیر رکنی کو $P_\ell(x)$ ظاہر کرتا ہے[10] جس کی تعریف **کلیہ روڈریگیس**[11]:

$$P_\ell(x)\equiv\frac{1}{2^\ell\ell!}\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)^\ell(x^2-1)^\ell \tag{۴.۲۸}$$

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

$$\begin{aligned}P_0(x)&=1,\quad P_1(x)=\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(x^2-1)=x,\\P_2(x)&=\frac{1}{4\cdot2}\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big)^2(x^2-1)^2=\frac{1}{2}(3x^2-1)\end{aligned}$$

جدول ۴.۱ میں ابتدائی چند لیژانڈر کثیر رکنیاں پیش کی گئی ہیں۔ جیسا کہ نام سے ظاہر ہے، $P_\ell(x)$ متغیر x کی

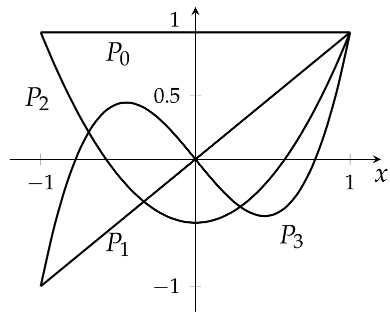
[8] یہ بظاہر سادہ شرط اتنی سادہ نہیں ہے۔ یاد رہے کہ m کی قیمت سے قطع نظر، احتمال کثافت $(|\Phi|^2)$ یک قیمتی ہے۔ ہم حصہ ۴.۳ میں ایک مختلف طریقے سے، زیادہ پرزور دلیل پیش کر کے m پر عائد شرط حاصل کریں گے۔

[9] associatedLegendrefunction

[10] دھیان رہے کہ $P_\ell^{-m}=P_\ell^m$ ہوگا۔

[11] Rodriguesformula

جدول ۱.۴: چند ابتدائی لیژانڈر کثیر رکنیاں $P_\ell(x)$۔ (ا) تفاعلی روپ، (ب) ترسیمات۔



(ب)

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

(ا)

درجہ ℓ کثیر رکنی ہے، اور ℓ کی قیمت طے کرتی ہے کہ آیا یہ جفت یا طاق ہو گی۔ تاہم $P_\ell^m(x)$ عموماً کثیر رکنی نہیں ہو گا؛ اور طاق m کی صورت میں اس میں $\sqrt{1-x^2}$ کا جزو ضربی پایا جائے گا:

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

وغیرہ وغیرہ۔ (اب ہمیں $P_\ell^m(\cos\theta)$ چاہیے اور چونکہ $\sin\theta = \sqrt{1-\cos^2\theta}$ ہوتا ہے لہٰذا $P_\ell^m(\cos\theta)$ ہر صورت $\cos\theta$ کا کثیر رکنی ہو گا جسے طاق m کی صورت میں $\sin\theta$ ضرب کرے گا۔ جدول ۴.۲ میں $\cos\theta$ کے چند شریک لیژانڈر تفاعلات پیش کیے گئے ہیں۔)

دھیان رہے کہ صرف غیر منفی عدد صحیح ℓ کی صورت میں کلیہ روڈریگیس معنی خیز ہو گا؛ مزید $|m| > \ell$ کی صورت میں مساوات ۴.۲۷ کے تحت $P_\ell^m = 0$ ہو گا۔ یوں ℓ کی کسی بھی مخصوص قیمت کے لئے m کی $(2\ell+1)$ ممکنہ قیمتیں ہوں گی:

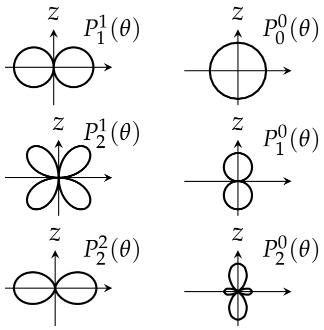
$$
\ell = 0, 1, 2, \ldots; \quad m = -\ell, -\ell+1, \ldots -1, 0, 1, \ldots \ell-1, \ell \tag{۴.۲۹}
$$

ذرا رکیے! مساوات ۴.۲۵ دو رتبی 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 (یا) $\theta = \pi$ پر ایسے حل بے قابو بڑھتے ہیں (سوال ۴.۴ دیکھیں) جس کی بنا پر یہ طبعی طور پر ناقابل قبول ہوں گے۔

کروی محدد میں حجمی رکن درج ذیل ہو گا

$$
\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = r^2\sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi \tag{۴.۳۰}
$$

جدول ۴.۲: چند شریک لیژانڈر تفاعلات $P_\ell^m(\cos\theta)$: (ا) تفاعلی روپ، (ب) ترسیمات برائے $r = P_\ell^m(\cos\theta)$ (ان ترسیمات میں r آپ کو θ رخ تفاعل کی کل مقدار دیتا ہے؛ ان اشکال کو z محور کے گرد گھمائیں۔)



(ب)

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

(ا)

لہٰذا معمول زنی شرط (مساوات ۴.۶) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

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

یہاں R اور Y کی علیحدہ علیحدہ معمول زنی کرنا زیادہ آسان ثابت ہوتا ہے۔

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 \, dr = 1 \quad \text{اور} \quad \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y|^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi = 1 \tag{۴.۳۱}$$

معمول شدہ زاویائی موجی تفاعلات[۱۲] کو **کروی ہارمونیات**[۱۳] کہتے ہیں:

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi} \frac{(\ell - |m|)!}{(\ell + |m|)!}} e^{im\phi} P_\ell^m(\cos\theta \tag{۴.۳۲}$$

جہاں $m \geq 0$ کے لئے $\epsilon = (-1)^m$ اور $m \leq 0$ کے لئے $\epsilon = 1$ ہو گا۔ جیسا کہ ہم بعد میں ثابت کریں گے، کروی ہارمونیات عمودی ہیں لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi [Y_\ell^m(\theta,\phi)]^* [Y_{\ell'}^{m'}(\theta,\phi)] \sin\theta \, d\theta \, d\phi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \tag{۴.۳۳}$$

---

[۱۲] معمول زنی مستقل کو سوال ۴.۵۴ میں حاصل کیا گیا ہے؛ نظریہ زاویائی معیار حرکت میں مستعمل علامتیت کے ساتھ ہم آہنگی کی خاطر ϵ (جس کی قیمت 1 یا -1 ہو گی) کی علامت کا انتخاب کیا گیا ہے۔ دھیان رہے کہ $Y_\ell^{-m} = (-1)^m (Y_\ell^m)^*$ ہو گا۔

[۱۳] spherical harmonics

جدول ۴.۳: ابتدائی چند کروی ہارمونیات، $Y_\ell^m(\theta,\phi)$

$Y_0^0 = (\frac{1}{4\pi})^{1/2}$	$Y_2^{\pm 2} = (\frac{15}{32\pi})^{1/2}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}$
$Y_1^0 = (\frac{3}{4\pi})^{1/2}\cos\theta$	$Y_3^0 = (\frac{7}{16\pi})^{1/2}(5\cos^3\theta - 3\cos\theta)$
$Y_1^{\pm 1} = \mp(\frac{3}{8\pi})^{1/2}\sin\theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm 1} = \mp(\frac{21}{64\pi})^{1/2}\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)e^{\pm i\phi}$
$Y_2^0 = (\frac{5}{16\pi})^{1/2}(3\cos^2\theta - 1)$	$Y_3^{\pm 2} = (\frac{105}{32\pi})^{1/2}\sin^2\theta\cos\theta e^{\pm 2i\phi}$
$Y_2^{\pm 1} = \mp(\frac{15}{8\pi})^{1/2}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}$	$Y_3^{\pm 3} = \mp(\frac{35}{64\pi})^{1/2}\sin^3\theta e^{\pm 3i\phi}$

جدول ۴.۳ میں چند ابتدائی کروی ہارمونیات پیش کیے گئے ہیں۔ تاریخی وجوہات کی بنا پر ℓ کو **اسمتی کوانٹائی عدد**[14] جب کہ m کو **مقناطیسی کوانٹائی عدد**[15] کہتے ہیں۔ سوال ۴.۳: مساوات ۴.۲۷، ۴.۲۸ اور ۴.۳۲ استعمال کرکے Y_0^0 اور Y_2^1 تیار کریں۔ تصدیق کریں کہ یہ معمول شدہ اور عمودی ہیں۔

سوال ۴.۴: دکھائیں کہ $\ell = m = 0$ کے لئے

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

مساوات θ (مساوات ۴.۲۵) کو مطمئن کرتی ہے۔ یہ (وہ) ناقابل قبول دوسرا حل ہے؛ اس میں کیا خرابی ہے؟

سوال ۴.۵: مساوات ۴.۳۲ استعمال کرکے $Y_\ell^\ell(\theta,\phi)$ اور $Y_3^2(\theta,\phi)$ مرتب کریں۔ (آپ P_3^2 کو جدول ۴.۲ سے دیکھ سکتے ہیں، جبکہ P_ℓ^ℓ آپ کو مساوات ۴.۲۷ اور ۴.۲۸ کی مدد سے مرتب کرنا 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 کرکے لیژانڈر کثیر رکنیوں کی معیاری عمودیت کی شرط:

$$\int_{-1}^{1} P_\ell(x)P_{\ell'}(x)\,\mathrm{d}x = \Big(\frac{2}{2\ell+1}\Big)\delta_{\ell\ell'} \tag{۴.۳۴}$$

اخذ کریں۔ (اشارہ: تکمل بالحصص استعمال کریں۔)

---

[14] azimuthal quantum number

[15] magnetic quantum number

۴.۱.۳ رداسی مساوات

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

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}[V(r)-E]R=\ell(\ell+1)R \tag{۴.۳۵}$$

نئے متغیرات استعمال کرتے ہوئے اس مساوات کی سادہ روپ حاصل کی جا سکتی ہے: درج ذیل لینے سے

$$u(r)\equiv rR(r) \tag{۴.۳۶}$$

$R=u/r$، $\mathrm{d}R/\mathrm{d}r=[r(\mathrm{d}u/\mathrm{d}r)-u]/r^2$، $(\mathrm{d}/\mathrm{d}r)[r^2(\mathrm{d}R/\mathrm{d}r)]=r\,\mathrm{d}^2u/\mathrm{d}r^2$ لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

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

اس کو **رداسی مساوات**[16] کہتے ہیں[17] جو شکل و صورت کے لحاظ سے یک بُعدی مساوات شروڈنگر (مساوات ۲.۵) کی طرح ہے، تاہم یہاں **موثر مخفیہ**[18] درج ذیل ہے

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

جس میں $(\hbar^2/2m)[\ell(\ell+1)/r^2]$ اضافی جزو پایا جاتا ہے جو **مرکز گریز جزو**[19] کہلاتا ہے۔ یہ کلاسیکی میکانیات کے مرکز گریز (مجازی) قوت کی طرح، ذرہ کو (مبدا سے دور) باہر جانب دھکیلتا ہے۔ یہاں معمول زنی شرط (مساوات ۴.۳۱) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$\int_0^\infty |u|^2\,\mathrm{d}r=1 \tag{۴.۳۹}$$

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

مثال ۴.۱: درج ذیل **لامتناہی کروی کنواں**[20] پر غور کریں۔

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

---

[16] radialequation

[17] یہاں m کمیت کو ظاہر کرتی ہے؛ رداسی مساوات میں علیحدگی مستقل m نہیں پایا جاتا ہے۔

[18] effectivepotential

[19] centrifugalterm

[20] infinitesphericalwell

اس کے تفاعلات موج اور اجازتی توانائیاں تلاش کریں۔

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

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2} = \left[\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - k^2\right] u \tag{۴.۴۱}$$

جہاں ہمیشہ کی طرح درج ذیل ہوگا۔

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{۴.۴۲}$$

ہم نے اس مساوات کو، سرحدی شرط $u(a) = 0$ مسلط کرکے، حل کرنا ہے۔ سب سے آسان صورت $\ell = 0$ کی ہے۔

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

یاد رہے، اصل رداسی تفاعل موج $R(r) = u(r)/r$ ہے اور $r \to 0$ کی صورت میں $[\cos(kr)]/r$ بے قابو بڑھتا ہے۔ یوں ہمیں $B = 0$ منتخب[21] کرنا ہوگا۔ اب سرحدی شرط پر پورا اترنے کے لئے ضروری ہے کہ $\sin(ka) = 0$ ہو لہٰذا $ka = n\pi$ ہوگا جہاں n عدد صحیح ہے۔ ظاہر ہے کہ اجازتی توانائیاں درج ذیل ہوں گی

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

جو عین یک بُعدی لامتناہی چکور کنویں کی توانائیاں ہیں (مساوات ۲.۲۷)۔ $u(r)$ کی معمول زنی کرنے سے $A = \sqrt{2/a}$ حاصل ہوگا۔ زاویائی جزو (جو $Y_0^0(\theta,\phi) = 1/\sqrt{4\pi}$ ہے لہٰذا اس کی شمولیت یہاں ایک حقیر سا کام ہے) کو ساتھ منسلک کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہوگا۔

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

[دھیان کیجیے کہ ساکن حالات کے نام تین **کوانٹائی اعداد**[22] n، ℓ اور m استعمال کر کے رکھے جاتے ہیں: $\psi_{nm\ell}(r,\theta,\phi)$؛ جبکہ توانائی، $E_{n\ell}$، صرف n اور ℓ پر منحصر ہوگی۔]

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

$$u(r) = Arj_\ell(kr) + Brn_\ell(kr). \tag{۴.۴۵}$$

---

[21] در حقیقت ہم صرف اتنا چاہتے ہیں کہ تفاعل موج قابل معمول زنی ہو؛ یہ ضروری نہیں کہ یہ متناہی ہو: مساوات ۴.۳۱ میں r^2 کی بنا پر مبدا پر $R(r) \sim 1/r$ قابل معمول زنی ہے۔

[22] quantum numbers

جدول ۴.۴: ابتدائی چند کروی بیسل اور نیومن تفاعلات، $j_n(x)$ اور $n_\ell(x)$؛ چھوٹی x کے لئے متقاربی روپ۔

$n_0 = -\frac{\cos x}{x}$	$j_0 = \frac{\sin x}{x}$
$n_1 = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}$	$j_1 = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$
$n_2 = -\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\cos x - \frac{3}{x^2}\sin x$	$j_2 = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\sin x - \frac{3}{x^2}\cos x$
$n_\ell \to -\frac{(2\ell)!}{2^\ell \ell!}\frac{1}{x^{\ell+1}}, \quad x \ll 1$	$j_\ell \to \frac{2^\ell \ell!}{(2\ell+1)!}x^\ell$

بہت جانا پہچانا نہیں ہے جہاں $j_\ell(x)$ رتبہ ℓ کا **کروی بیسل تفاعل**[۲۳] ہے اور $n_\ell(x)$ رتبہ ℓ کا **کروی نیومن تفاعل**[۲۴] ہے جن کی تعریفات درج ذیل ہیں۔

$$j_\ell(x) \equiv (-x)^\ell \left(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^\ell \frac{\sin x}{x}; \quad n_\ell(x) \equiv -(-x)^\ell \left(\frac{1}{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^\ell \frac{\cos x}{x} \tag{۴.۴۶}$$

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

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

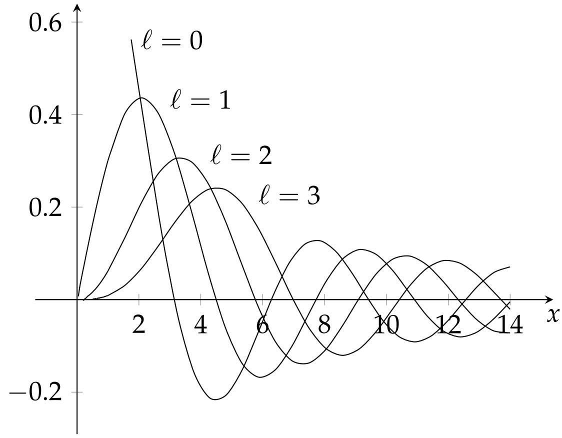
جدول ۴.۴ میں ابتدائی چند کروی بیسل اور نیومن تفاعلات پیش کیے گئے ہیں۔ متغیر x کی چھوٹی قیمت کے لئے جہاں

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

ہوں گے، درج ذیل ہوں گے، وغیرہ وغیرہ۔

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

---
[۲۳] spherical Bessel function
[۲۴] spherical Neumann function



شکل ۴.۲: ابتدائی چار کروی بیسل تفاعلات۔

دھیان رہے کہ مبدا پر بیسل تفاعلات متناہی ہیں جبکہ مبدا پر نیومن تفاعلات بے قابو بڑھتے ہیں۔ یوں ہمیں لازماً $B_\ell = 0$ منتخب کرنا ہو گا لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$R(r) = Aj_\ell(kr) \tag{۴.۴۷}$$

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

$$j_\ell(ka) = 0 \tag{۴.۴۸}$$

یعنی ℓ رتبی کروی بیسل تفاعل کا (ka) ایک صفر ہو گا۔ اب بیسل تفاعلات ارتعاشی ہیں (شکل ۴.۲ دیکھیں)؛ ہر ایک کے لامتناہی تعداد صفر پائے جاتے ہیں۔

تاہم (ہماری بد قسمتی سے) یہ ایک جیسے فاصلوں پر نہیں پائے جاتے (جیسا کہ نقاط n یا نقاط $n\pi$، وغیرہ پر)؛ انہیں اعدادی تراکیب سے حاصل کرنا ہو گا۔ بہر حال سرحدی شرط کے تحت درج ذیل ہو گا

$$k = \frac{1}{a}\beta_{n\ell} \tag{۴.۴۹}$$

جہاں $\beta_{n\ell}$ رتبہ ℓ کروی بیسل تفاعل کا n واں صفر ہو گا۔ یوں اجازتی توانائیاں

$$E_{n\ell} = \frac{\hbar^2}{2ma^2}\beta_{n\ell}^2. \tag{۴.۵۰}$$

اور تفاعلات موج درج ذیل ہوں گے

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = A_{n\ell}j_\ell(\beta_{n\ell}r/a)Y_\ell^m(\theta,\phi). \tag{۴.۵۱}$$

جہاں مستقل A_{n1} کا تعین معمول زنی سے کیا جاتا ہے۔ چونکہ ℓ کی ہر ایک قیمت کے لئے m کی $(2\ell+1)$ مختلف قیمتیں پائی جاتی ہیں لہٰذا توانائی کی ہر سطح $(2\ell+1)$ گنا انحطاطی ہو گی (مساوات ۴.۲۹ دیکھیں)۔ □

سوال ۴.۷:

ا. کروی 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 $x \ll 1$ کے لئے کارآمد $n_1(x)$ اور $n_2(x)$ کے تخمینی کلیات اخذ کریں۔ تصدیق کریں کہ یہ مبدا پر بے قابو بڑھتے ہیں۔

سوال ۴.۸:

ا. تصدیق کریں کہ $V(r)=0$ اور $\ell=1$ کے لئے $Arj_\ell(kr)$ رداسی مساوات کو مطمئن کرتا ہے۔

ب. لامتناہی کروی کنویں کیلئے $\ell = 1$ کی صورت میں اجازتی توانائیاں ترسیم کی مدد سے تعین کریں۔ دکھائیں کہ n کی بڑی قیمت کے لئے $E_{n1} \approx (\hbar^2\pi^2/2ma^2)(n+1/2)^2$ ہو گا۔ (اشارہ: پہلے $j_1(x)=0 \implies x=\tan x$ 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 کمیت m ہے کو متناہی کروی کنواں:

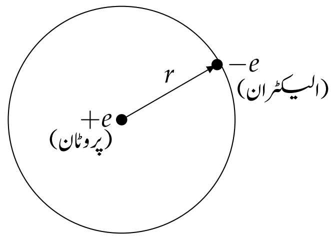
$$V(r)=\begin{cases}-V_0 & r\le a\\ 0 & r>a\end{cases}$$

میں رکھا جاتا ہے۔ اس کا زمینی حال، $\ell = 0$ کے لئے، رداسی مساوات کے حل سے حاصل کریں۔ دکھائیں کہ $V_0a^2 < \pi^2\hbar^2/8m$ 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 مبدا پر تصور کر سکتے ہیں)۔ ان دونوں کے مخالف بار کے بیچ قوت کشش پائی جاتی ہے جو انہیں اکٹھے رکھتی ہے (شکل ۴.۳ دیکھیں)۔ قانون کولمب کے تحت مخفی توانائی (بین الاقوامی اکائیوں میں) درج ذیل ہو گی

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



شکل ۴.۳: ہائیڈروجن جوہر

لہٰذا رداسی مساوات (مساوات ۴.۳۷) درج ذیل روپ اختیار کرے گی۔

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2}+\Big[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\Big]u=Eu \tag{۴.۵۳}$$

ہم نے اس مساوات کو $u(r)$ کے لئے حل کر کے اجازتی توانائیاں E تعین کرنی ہیں۔ ہائیڈروجن جوہر کا حل نہایت اہم ہے لہٰذا میں اس کو، ہارمونی مرتعش کے تحلیلی حل کی ترکیب سے، قدم باقدم 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۔) کولمب مخفیہ، مساوات ۴.۵۲، ($E>0$ کے لئے) استمراری حالات، جو الیکٹران پروٹون بکھراو کو ظاہر کرتے ہیں، تسلیم کرنے کے ساتھ ساتھ غیر مسلسل مقید حالات، جو ہائیڈروجن جوہر کو ظاہر کرتے ہیں، بھی تسلیم کرتا ہے۔ ہماری دلچسپی موخر الذکر میں ہے۔

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)

$$\kappa\equiv\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \tag{۴.۵۴}$$

مساوات ۴.۵۳ کو E سے تقسیم کرنے سے

$$\frac{1}{\kappa^2}\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2}=\Big[1-\frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa}\frac{1}{(\kappa r)}+\frac{\ell(\ell+1)}{(\kappa r)^2}\Big]u$$

حاصل ہوگا جس کو دیکھ کر ہمیں خیال آتا ہے کہ ہم درج ذیل علامتیں متعارف کریں

$$\rho\equiv\kappa r,\quad \rho_0\equiv\frac{me^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa} \tag{۴.۵۵}$$

لہٰذا درج ذیل لکھا جائے گا۔

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right]u \tag{۴.۵۶}$$

اس کے بعد ہم حالات کے متقاربی روپ پر غور کرتے ہیں۔ اب $\rho \to \infty$ کرنے سے قوسین کے اندر مستقل جزو غالب ہو گا لہٰذا (تخمیناً) درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = u$$

اس کا عمومی حل درج ذیل ہے

$$u(\rho) = Ae^{-\rho} + Be^{\rho} \tag{۴.۵۷}$$

تاہم ($\rho \to \infty$ کی صورت میں) e^{ρ} بے قابو بڑھتا ہے لہٰذا ہمیں $B = 0$ لینا ہو گا۔ یوں ρ کی بڑی قیمتوں کے لیے درج ذیل ہو گا۔

$$u(\rho) \sim Ae^{-\rho} \tag{۴.۵۸}$$

اس کے برعکس $\rho \to 0$ کی صورت میں مرکز گریز جزو غالب ہو گا؛[۲۵] لہٰذا تخمیناً درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}u$$

جس کا عمومی حل (تصدیق کیجیے) درج ذیل ہو گا

$$u(\rho) = C\rho^{\ell+1} + D\rho^{-\ell}$$

تاہم ($\rho \to 0$ کی صورت میں) $\rho^{-\ell}$ بے قابو بڑھتا ہے لہٰذا $D = 0$ ہو گا۔ یوں ρ کی چھوٹی قیمتوں کے لیے درج ذیل ہو گا۔

$$u(\rho) \sim C\rho^{\ell+1} \tag{۴.۵۹}$$

اگلے قدم پر متقاربی رویہ کو چھیلنے کی خاطر نیا تفاعل $v(\rho)$:

$$u(\rho) = \rho^{\ell+1}e^{-\rho}v(\rho) \tag{۴.۶۰}$$

---

[۲۵] یہ دلیل $\ell = 0$ کی صورت میں کارآمد نہیں ہو گی (اگرچہ مساوات ۴.۵۹ میں پیش نتیجہ اس صورت کے لئے بھی درست ہے)۔ بہر حال، میرا مقصد نئی علامتیت (مساوات ۴.۶۰) کے استعمال کے لئے راستہ ہموار کرنا ہے۔

اس امید سے متعارف کرتے ہیں کہ $v(\rho)$ سے $u(\rho)$ زیادہ سادہ ہو گا۔ ابتدائی نتائج

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\rho}=\rho^{\ell}e^{-\rho}\Big[(\ell+1-\rho)v+\rho\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho}\Big]$$

اور

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\rho^2}=\rho^{\ell}e^{-\rho}\Big\{\Big[-2\ell-2+\rho+\frac{\ell(\ell+1)}{\rho}\Big]v+2(\ell+1-\rho)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho}+\rho\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2}\Big\}$$

خوش آئین نظر نہیں آتے ہیں۔ اس طرح $v(\rho)$ کی صورت میں ردا سی مساوات (مساوات ۴.۵۶) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$\rho\frac{\mathrm{d}^2v}{\mathrm{d}\rho^2}+2(\ell+1-\rho)\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}\rho}+[\rho_0-2(\ell+1)]v=0 \tag{۴.۶۱}$$

آخر میں ہم فرض کرتے ہیں کہ حل، $v(\rho)$، کو ρ کا طاقتی تسلسل لکھا جا سکتا ہے۔

$$v(\rho)=\sum_{j=0}^{\infty}c_j\rho^j \tag{۴.۶۲}$$

ہمیں عددی سر (c_0، c_1، c_2، وغیرہ) تلاش کرنے ہوں گے۔ جزو در جزو تفرق لیتے ہیں۔

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

[میں نے دوسرے مجموعہ میں "فرضی اشاریہ" j کو $j+1$ کہا ہے۔ اگر آپکو یقین نہ ہو تو اولین چند اجزاء صریحاً لکھ کر تصدیق کر لیں۔ آپ سوال اٹھا سکتے ہیں کے نیا مجموعہ $j=-1$ سے کیوں شروع نہیں کیا گیا؛ تاہم جزو ضربی $(j+1)$ اس جزو کو ختم کرتا ہے لہٰذا ہم صفر سے بھی شروع کر سکتے ہیں۔] دوبارہ تفرق لیتے ہیں۔

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

انہیں مساوات ۴.۶۱ میں پر کرتے ہیں۔

$$\sum_{j=0}^{\infty}j(j+1)c_{j+1}\rho^j+2(\ell+1)+\sum_{j=0}^{\infty}(j+1)c_{j+1}\rho^j \\ -2\sum_{j=0}^{\infty}jc_j\rho^j+[\rho_0-2(\ell+1)]\sum_{j=0}^{\infty}c_j\rho^j=0$$

ایک جیسی طاقتوں کے عددی سروں کو مساوی رکھتے ہوئے

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

یا

$$c_{j+1} = \left\{ \frac{2(j+\ell+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2\ell+2)} \right\} c_j \tag{۴.۶۳}$$

ہو گا۔ یہ کلیہ توالی عددی سر تعین کرتے ہوئے تفاعل $v(\rho)$ تعین کرتا ہے۔ ہم c_0 سے شروع کر کے (جو مجموعی مستقل کا روپ 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 ہو گا، وغیرہ، وغیرہ۔[۲۶]

آئیں j کی بڑی قیمت (جو ρ کی بڑی قیمت کی مطابقتی ہو گی جہاں بلند طاقتیں غالب ہوں گی) کے لئے عددی سروں کی صورت دیکھیں۔ یہاں کلیہ توالی درج ذیل کہتا ہے۔[۲۷]

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

ایک لمحہ کے لیے فرض کریں کہ یہ بالکل ٹھیک رشتہ ہے۔ تب

$$c_j = \frac{2^j}{j!} c_0 \tag{۴.۶۴}$$

لہٰذا

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

اور یوں درج ذیل ہو گا

$$u(\rho) = c_0 \rho^{\ell+1} e^{\rho} \tag{۴.۶۵}$$

---

[۲۶] آپ پوچھ سکتے ہیں: طاقتی تسلسل کی ترکیب $u(\rho)$ پر ہی کیوں لاگو نہیں کی گئی؛ اس ترکیب کے اطلاق سے قبل متقاربی رویہ کو کیوں (جزو ضربی کی صورت میں) باہر نکالا گیا؟ درحقیقت اس کی وجہ نتائج کی خوبصورتی ہے۔ جزو ضربی $\rho^{\ell+1}$ باہر نہ نکالنے سے تسلسل کے ابتدائی اجزاء صفر ہوں گے (پہلا غیر صفر عددی سر $c_{\ell+1}$ ہو گا)؛ $\rho^{\ell+1}$ باہر نکالنے سے تسلسل کا پہلا جزو ρ^0 حاصل ہو گا۔ اس کے برعکس جزو ضربی $e^{-\rho}$ باہر نکالنا زیادہ ضروری ہے؛ اسے باہر نہ نکالنے سے c_{j+2}، c_{j+1} اور c_j پر مشتمل تین اجزائی کلیہ توالی حاصل ہوتا ہے (کر کے دیکھیں!) جس کے ساتھ کام کرنا زیادہ مشکل ثابت ہوتا ہے۔

[۲۷] آپ پوچھ سکتے ہیں: شمار کنندہ میں $2(\ell+1) - \rho_0$ اور نسب نما میں $2\ell + 2$ رد کرنے کی طرح $j+1$ میں 1 کیوں رد نہیں کیا جاتا؟ اس تخمین میں ایسا کیا جا سکتا ہے، تاہم اسے رد نہ کرنے سے دلیل زیادہ واضح ہو گا۔ آپ 1 کو رد کر کے دیکھ سکتے ہیں کہ میں کیا کہنا چاہتا ہوں۔

جو ρ کی بڑی قیمتوں کے لیے بے قابو بڑھتا ہے۔ مثبت قوت نما والی غیر پسندیدہ متقاربی رویہ دیتا ہے جو مساوات ۴.۵۷ میں پایا گیا۔ (درحقیقت متقاربی حل بھی رداسی مساوات کے جائز حل ہیں البتہ ہم ان میں دلچسپی نہیں رکھتے کیونکہ یہ ناقابل معمول زنی 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 اعظم عدد صحیح، $j_{\text{اعظم}}$، پایا جائے گا جس پر درج ذیل ہو۔

$$c_{(j_{\text{اعظم}}+1)} = 0 \tag{۴.۶۶}$$

(یوں کلیہ توالی کے تحت باقی تمام (زیادہ بلند) عددی سر صفر ہوں گے۔) مساوات ۴.۶۳ سے ظاہر ہے کہ درج ذیل ہو گا۔

$$2(j_{\text{اعظم}} + \ell + 1) - \rho_0 = 0$$

صدر کوانٹائی عدد[۲۸]

$$n \equiv j_{\text{اعظم}} + \ell + 1 \tag{۴.۶۷}$$

متعارف کرتے ہوئے درج ذیل ہو گا۔

$$\rho_0 = 2n \tag{۴.۶۸}$$

اب E کو ρ_0 تعین کرتا ہے (مساوات ۴.۵۴ اور ۴.۵۵)

$$E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{me^4}{8\pi^2\epsilon^2\hbar^2\rho^2} \tag{۴.۶۹}$$

لہٰذا اجازتی توانائیاں درج ذیل ہوں گی۔

$$E_n = -\left[\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon}\right)^2\right]\frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{۴.۷۰}$$

یہ مشہور زمانہ **کلیہ بوہر**[۲۹] ہے جو غالباً پورے کوانٹائی میکانیات میں اہم ترین نتیجہ ہے۔ جناب بوہر نے 1913 میں، ناقابل استعمال کلاسیکی طبیعیات اور نیم کوانٹائی میکانیات کے ذریعہ اس کلیہ کو اخذ کیا۔ مساوات شروڈنگر 1924 میں منظر عام پر آئی۔)

مساوات ۴.۵۵ اور ۴.۶۸ کو ملا کر درج ذیل حاصل ہو گا

$$\kappa = \left(\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\right)\frac{1}{n} = \frac{1}{an} \tag{۴.۷۱}$$

---

[۲۸] principalquantumnumber
[۲۹] Bohrformula

جہاں

$$a \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-10}\,\mathrm{m} \tag{۴.۷۲}$$

رداس بوہر[۳۰] کہلاتا[۳۱] ہے۔ یوں (مساوات ۴.۵۵ دوبارہ استعمال کرتے ہوئے) درج ذیل ہو گا۔

$$\rho = \frac{r}{an} \tag{۴.۷۳}$$

ہائیڈروجن جوہر کے فضائی تفاعلات موج کے نام تین کوانٹائی اعداد (n ، ℓ اور m) استعمال کرکے رکھے جاتے ہیں

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = R_{n\ell}(r)Y_\ell^m(\theta,\phi) \tag{۴.۷۴}$$

جہاں مساوات ۴.۳۶ اور ۴.۶۰ کو دیکھتے ہوئے

$$R_{n\ell}(r) = \frac{1}{r}\rho^{\ell+1}e^{-\rho}v(\rho) \tag{۴.۷۵}$$

ہو گا جبکہ $v(\rho)$ متغیر ρ میں درجہ $j_{\text{اعظم}} = n - \ell - 1$ کا کثیر رکنی ہو گا، جس کے عددی سر درج ذیل کلیہ توالی دے گا (اور پورے تفاعل کی معمول زنی کرنا باقی ہے)۔

$$c_{j+1} = \frac{2(j+\ell+1-n)}{(j+1)(j+2\ell+2)}c_j \tag{۴.۷۶}$$

زمینی حال[۳۲] (یعنی اقل توانائی کے حال) کے لیے $n = 1$ ہو گا؛ طبعی مستقلات کی قیمتیں پر کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$E_1 = -\left[\frac{m}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon}\right)^2\right] = -13.6\,\mathrm{eV} \tag{۴.۷۷}$$

ظاہر ہوا کہ ہائیڈروجن کی **بندشی توانائی**[۳۳] (زمینی حال میں الیکٹران کو درکار توانائی کی وہ مقدار جو جوہر کو باردارہ بنائے) $13.6\,\mathrm{eV}$ ہے۔ مساوات ۴.۶۷ کے تحت $\ell = 0$ لہٰذا $m = 0$ ہو گا (مساوات ۴.۲۹ دیکھیے) یوں درج ذیل ہو گا۔

$$\psi_{100}(r,\theta,\phi) = R_{10}(r)Y_0^0(\theta,\phi) \tag{۴.۷۸}$$

کلیہ توالی پہلے جزو پر ہی اختتام پذیر ہوتا ہے (مساوات ۴.۷۶ سے $j = 0$ کے لئے $c_1 = 0$ حاصل ہوتا ہے)، لہٰذا $v(\rho)$ ایک مستقل (c_0) ہو گا اور یوں درج ذیل ہو گا۔

$$R_{10}(r) = \frac{c_0}{a}e^{-r/a} \tag{۴.۷۹}$$

---

[۳۰] Bohrradius

[۳۱] رداس بوہر کو روایتی طور پر زیر نوشت کے ساتھ لکھا جاتا ہے: a_0، تاہم یہ غیر ضروری ہے لہٰذا میں اس کو صرف a لکھوں گا۔

[۳۲] groundstate

[۳۳] bindingenergy

اس کی مساوات ۴.۳۱ کے تحت معمول زنی کرنے سے

$$\int_0^\infty |R_{10}|^2 r^2 \, \mathrm{d}r = \frac{|c_0|^2}{a^2} \int_0^\infty e^{-2r/a} r^2 \, \mathrm{d}r = |c_0|^2 \frac{a}{4} = 1$$

یعنی $c_0 = 2/\sqrt{a}$ حاصل ہو گا۔ مزید $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ ہے لہٰذا ہائیڈروجن کا زمینی حال درج ذیل ہو گا۔

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \tag{۴.۸۰}$$

اسی طرح $n = 2$ کے لئے توانائی

$$E_2 = \frac{-13.6 \, \mathrm{eV}}{4} = -3.4 \, \mathrm{eV} \tag{۴.۸۱}$$

ہو گی جو پہلی ہیجان حال، بلکہ حالات کی بندشی توانائی ہے کیونکہ $\ell = 0$ ہو سکتا ہے (جس میں $m = 0$ ہو گا) یا $\ell = 1$ ہو سکتا ہے (جس کے لئے یا m کی قیمت -1، 0 یا $+1$ ہو گی)؛ یوں چار مختلف حالات کی یہی توانائی ہو گی۔ کلیہ توالی (مساوات ۴.۷۶) $\ell = 0$ کے لئے $j = 0$ استعمال کرتے ہوئے $c_1 = -c_0$ اور $j = 1$ استعمال کرتے ہوئے $c_2 = 0$ دے گا لہٰذا $v(\rho) = c_0(1 - \rho)$ اور درج ذیل ہو گا۔

$$R_{20}(r) = \frac{c_0}{2a}\left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a} \tag{۴.۸۲}$$

[دھیان رہے کہ مختلف کوانٹائی اعداد ℓ اور n کے لئے توسیعی عددی سر $\{c_j\}$ مکمل طور پر مختلف ہوں گے۔] کلیہ توالی $\ell = 1$ کی صورت میں پہلے جزو پر تسلسل کو اختتام پذیر کرتا ہے؛ $v(\rho)$ ایک مستقل ہو گا لہٰذا درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$R_{21}(r) = \frac{c_0}{4a^2} r e^{-r/2a} \tag{۴.۸۳}$$

(ہر منفرد صورت میں c_0 معمول زنی سے تعین ہو گا سوال ۴.۱۱ دیکھیں)۔

کسی بھی اختیاری n کے لئے (مساوات ۴.۶۷ سے ہم آہنگ) ℓ کی ممکنہ قیمتیں درج ذیل ہوں گی

$$\ell = 0, 1, 2, \cdots, n - 1 \tag{۴.۸۴}$$

جبکہ ہر ℓ کے لئے m کی ممکنہ قیمتوں کی تعداد $(2\ell + 1)$ ہو گی (مساوات ۴.۲۹)، لہٰذا E_n سطح توانائی کی کل انحطاطیت درج ذیل ہو گی۔

$$d(n) = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2 \tag{۴.۸۵}$$

جدول ۴.۵: ابتدائی چند لاگیغ کثیر 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 لاگیغ کثیر رکنیاں، $L^p_{q-p}(x)$

$L^2_0 = 2$	$L^0_0 = 1$
$L^2_1 = -6x + 18$	$L^0_1 = -x + 1$
$L^2_2 = 12x^2 - 96x + 144$	$L^0_2 = x^2 - 4x + 2$
$L^3_0 = 6$	$L^1_0 = 1$
$L^3_1 = -24x + 96$	$L^1_1 = -2x + 4$
$L^3_2 = 60x^2 - 600x + 1200$	$L^1_2 = 3x^2 - 18x + 18$

کثیر رکنی $v(\rho)$ (جو مساوات ۴.۷۶ کے کلیہ توالی سے حاصل ہو گی) ایک ایسا تفاعل ہے جس سے عملی ریاضی دان بخوبی واقف ہیں؛ ماسوائے معمول زنی کے، اسے درج ذیل لکھا جا سکتا ہے

$$v(\rho) = L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(2\rho) \tag{۴.۸۶}$$

جہاں

$$L^p_{q-p}(x) \equiv (-1)^p \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^p L_q(x) \tag{۴.۸۷}$$

ایک **شریک لاگیغ کثیر رکنی**[۳۴] ہے جبکہ

$$L_q(x) \equiv e^x \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^q (e^{-x} x^q) \tag{۴.۸۸}$$

q ویں **لاگیغ کثیر رکنی**[۳۵] ہے۔[۳۶] (جدول ۴.۵ میں چند ابتدائی لاگیغ کثیر رکنیاں پیش کی گئی ہیں؛ جدول ۴.۶ میں

[۳۴] associated Laguerre polynomial
[۳۵] Laguerre polynomial
[۳۶] دیگر علامتوں کی طرح ان کے لئے بھی کئی علامتیں استعمال کی جاتی ہیں۔ میں نے سب سے زیادہ مقبول علامتیں استعمال کی ہیں۔

جدول ۴.۷: ہائیڈروجن کے ابتدائی چند رداسی تفاعلات، $R_{n\ell}(r)$

$$R_{10} = 2a^{-3/2}e^{-r/a}$$

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}a^{-3/2}\left(1-\frac{1}{2}\frac{r}{a}\right)e^{-r/2a}$$

$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}}a^{-3/2}\frac{r}{a}e^{-r/2a}$$

$$R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27}}a^{-3/2}\left(1-\frac{2}{3}\frac{r}{a}+\frac{2}{27}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)e^{-r/3a}$$

$$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}}a^{-3/2}\left(1-\frac{1}{6}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)e^{-r/3a}$$

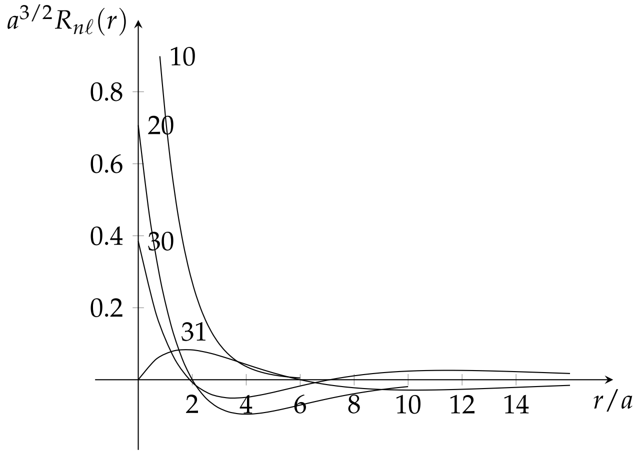
$$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}}a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2e^{-r/3a}$$

$$R_{40} = \frac{1}{4}a^{-3/2}\left(1-\frac{3}{4}\frac{r}{a}+\frac{1}{8}\left(\frac{r}{a}\right)^2-\frac{1}{192}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right)e^{-r/4a}$$

$$R_{41} = \frac{\sqrt{5}}{16\sqrt{3}}a^{-3/2}\left(1-\frac{1}{4}\frac{r}{a}+\frac{1}{80}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)\left(\frac{r}{a}\right)e^{-r/4a}$$

$$R_{42} = \frac{1}{64\sqrt{5}}a^{-3/2}\left(1-\frac{1}{12}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)^2e^{-r/4a}$$

$$R_{43} = \frac{1}{768\sqrt{35}}a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^3e^{-r/4a}$$



شکل ۴.۴: چند ابتدائی ہائیڈروجن رداسی تفاعل موج $R_{n\ell}(r)$ کی ترسیمات۔

جدول ۴.۸: ہائیڈروجنی جوہروں کے ابتدائی چند تفاعلات موج۔ ہائیڈروجن کے لئے $Z=1$ ہو گا۔

Ψ_{100}	$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a}}$
Ψ_{200}	$\frac{1}{\sqrt{32\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}}(2-\frac{Zr}{a})e^{-\frac{Zr}{2a}}$
Ψ_{210}	$\frac{1}{\sqrt{32\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}}(\frac{Zr}{a})e^{-\frac{Zr}{2a}}\cos(\theta)$
$\Psi_{21\pm1}$	$\frac{1}{\sqrt{64\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}}(\frac{Zr}{a})e^{-\frac{Zr}{2a}}\sin(\theta)e^{\pm i\phi}$
Ψ_{300}	$\frac{1}{81\sqrt{3\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}}\left(27-18(\frac{Zr}{a})+2(\frac{Zr}{a})^2\right)e^{-\frac{Zr}{3a}}$
Ψ_{310}	$\frac{1}{81}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}}\left(6(\frac{Zr}{a})-(\frac{Zr}{a})^2\right)e^{-\frac{Zr}{3a}}\cos(\theta)$
$\Psi_{31\pm1}$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}}\left(6(\frac{Zr}{a})-(\frac{Zr}{a})^2\right)e^{-\frac{Zr}{3a}}\sin(\theta)e^{\pm i\phi}$
Ψ_{320}	$\frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}}(\frac{Zr}{a})^2e^{-\frac{Zr}{3a}}(3\cos^2(\theta)-1)$
$\Psi_{32\pm1}$	$\frac{1}{81\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}}(\frac{Zr}{a})^2e^{-\frac{Zr}{3a}}\sin(\theta)\cos(\theta)e^{\pm i\phi}$
$\Psi_{32\pm2}$	$\frac{1}{162\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{\frac{3}{2}}(\frac{Zr}{a})^2e^{-\frac{Zr}{3a}}\sin^2(\theta)e^{\pm i2\phi}$

چند ابتدائی شریک لاگیغ کثیر رکنیاں پیش کی گئی ہیں؛ جدول ۴.۷ میں چند ابتدائی رداسی تفاعلات موج پیش کئے گئے ہیں جنہیں شکل ۴.۴ میں ترسیم کیا گیا ہے۔) ہائیڈروجن کے معمول شدہ تفاعلات موج درج ذیل ہیں۔

$$\psi_{n\ell m} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}}\, e^{-r/na}\left(\frac{2r}{na}\right)^\ell [L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(2r/na)] Y^m_\ell(\theta,\phi) \tag{۴.۸۹}$$

(جدول ۴.۸ میں ہائیڈروجنی (ہائیڈروجن جیسے) جوہروں کے چند ابتدائی تفاعلات موج دیے گئے ہیں، جہاں ہائیڈروجن کے لئے $Z = 1$ ہو گا۔) یہ تفاعلات خوفناک نظر آتے ہیں لیکن شکوہ نہ کیجیے گا؛ یہ اُن 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 کوانٹائی اعداد کے تابع ہیں، توانائیوں (مساوات ۴.۷۰) کو صرف n تعین کرتا ہے۔ یہ کولمب توانائی کی ایک مخصوص خاصیت ہے؛ آپ کو یاد ہو گا کہ کروی کنویں میں توانائیاں ℓ پر منحصر تھیں (مساوات ۴.۵۰)۔ تفاعلات موج باہمی عمودی

$$\int \psi^*_{n\ell m}\psi_{n'\ell' m'} r^2 \sin\theta \,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi = \delta_{nn'}\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} \tag{۴.۹۰}$$

ہیں۔ یہ کروی ہارمونیات کی عمودیت (مساوات ۴.۳۳) اور ($n \neq n'$) کی صورت میں H کی منفرد امتیازی قیمتوں کے امتیازی تفاعل ہونے کی بنا پر ہے۔

ہائیڈروجن تفاعلات موج کی تصویر کشی آسان کام نہیں ہے۔ ماہر کیمیا ان کے ایسے کثافتی اشکال بناتے ہیں جن کی چمک $|\psi|^2$ کا راست متناسب ہوتی ہے (شکل ۴.۵)۔ زیادہ معلومات مستقل کثافت احتمال کی سطحوں (شکل ۴.۶) کے اشکال دیتی ہیں (جنہیں پڑھنا نسبتاً مشکل ہو گا)۔

سوال ۴.۱۰: کلیہ توالی (مساوات ۴.۷۶) استعمال کرتے ہوئے تفاعل موج R_{30} ، R_{31} اور R_{32} حاصل کریں۔ ان کی معمول زنی کرنے کی ضرورت نہیں۔

سوال ۴.۱۱:

ا. مساوات ۴.۸۲ میں دیے گئے R_{20} کی معمول زنی کر کے ψ_{200} تیار کریں۔

ب. مساوات ۴.۸۳ میں دیے گئے R_{21} کی معمول زنی کر کے ψ_{211} ، ψ_{210} اور ψ_{21-1} تیار کریں۔

سوال ۴.۱۲:

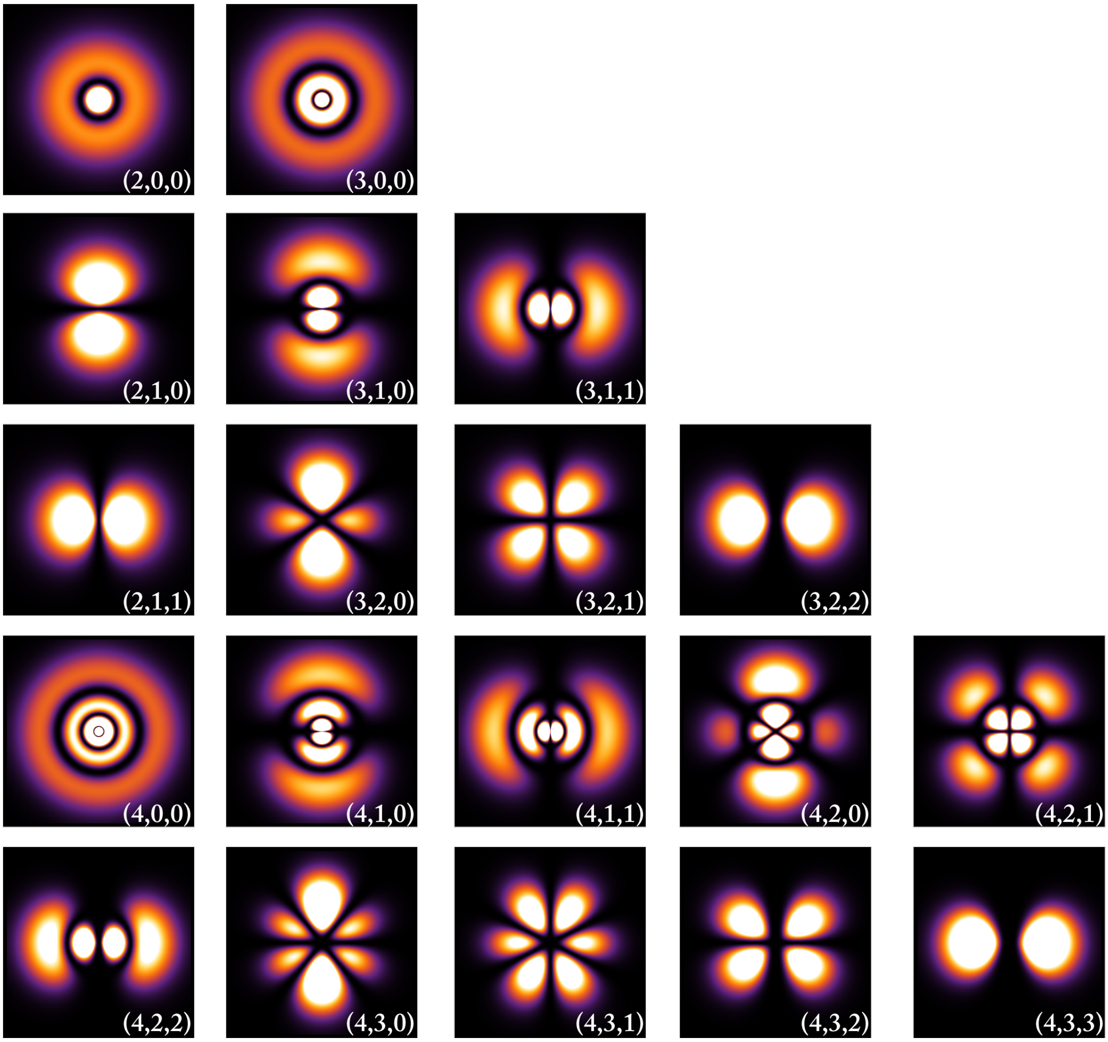
ا. مساوات ۴.۸۸ استعمال کرتے ہوئے ابتدائی چار لاگیغ کثیر رکنیاں حاصل کریں۔

ب. مساوات ۴.۸۶، ۴.۸۷ اور ۴.۸۸ استعمال کرتے ہوئے $n = 5$ ، $\ell = 2$ کی صورت میں $v(\rho)$ تلاش کریں۔

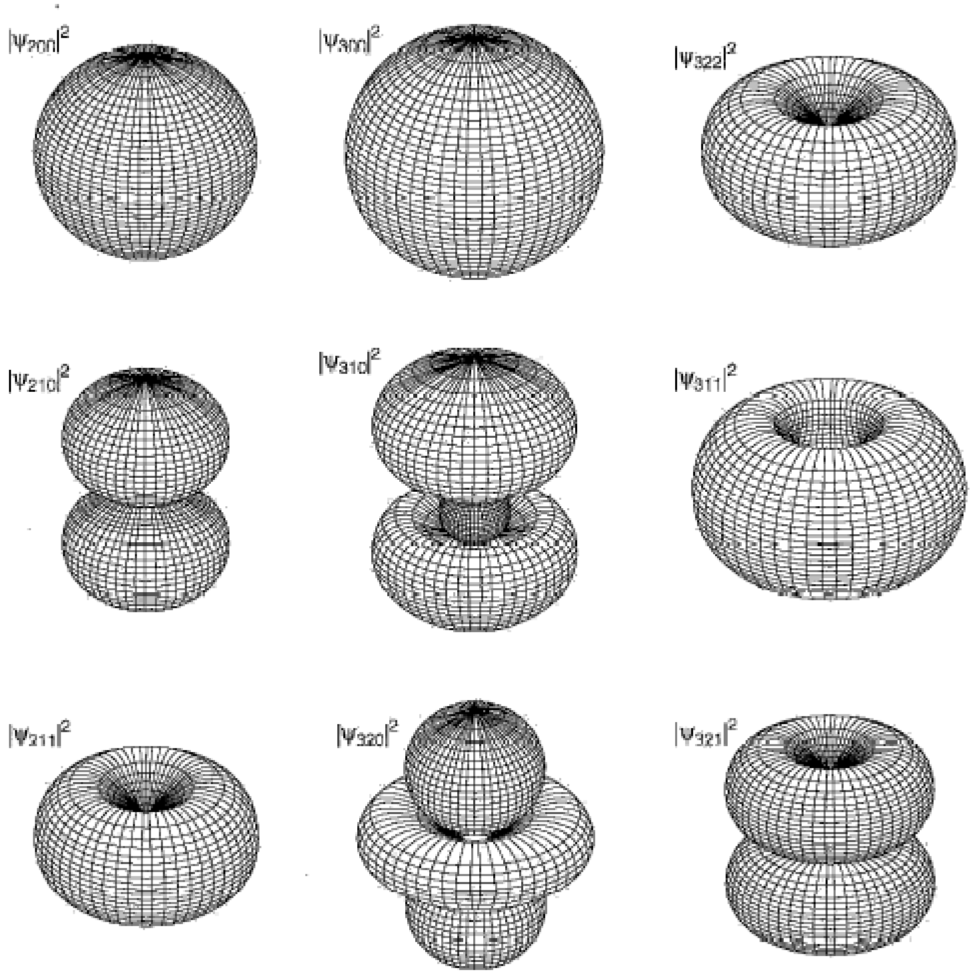
ج. کلیہ توالی (مساوات ۴.۷۶) استعمال کرتے ہوئے $n = 5$ ، $\ell = 2$ کی صورت میں $v(\rho)$ تلاش کریں۔

سوال ۴.۱۳:

ا. ہائیڈروجن جوہر کے زمینی حال میں الیکٹران کے لیے $\langle r\rangle$ اور $\langle r^2\rangle$ تلاش کریں۔ اپنے جواب کو رداس بوہر کی صورت میں لکھیں۔



شکل ۴.۵: ہائیڈروجن تفاعل موج (n, ℓ, m) کی کثافتی ترسیمات۔



شکل ۴.۶: چند ابتدائی ہائیڈروجن تفاعل موج کی مستقل $|\Psi|^2$ سطحیں۔

ب. ہائیڈروجن جوہر کے زمینی حال میں الیکٹران کے لیے $\langle x\rangle$ اور $\langle x^2\rangle$ تلاش کریں۔ اشارہ: آپکو کوئی نیا تکمل حاصل کرنے کی ضرورت نہیں۔ دھیان رہے کہ $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ ہو گا، اور از مینی حال میں تشاکلی کو بروئے کار لائیں۔

ج. حال $n = 2$، $\ell = 1$، $m = 1$ کے لیے $\langle x^2\rangle$ تلاش کریں۔ انتباہ: یہ حال x، y اور z کے لحاظ سے تشاکلی نہیں ہے۔ یہاں $x = r\sin\theta\cos\phi$ استعمال کرنا ہو گا۔

سوال ۴.۱۴: ہائیڈروجن کے زمینی حال میں r کی کون سی قیمت زیادہ محتمل ہو گی۔ (اس کا جواب صفر نہیں ہے!) اشارہ: آپکو پہلے معلوم کرنا ہو گا کہ r اور $r + \mathrm{d}r$ کے بیچ الیکٹران پائے جانے کا احتمال کیا ہو گا۔

سوال ۴.۱۵: ہائیڈروجن جوہر ساکن حال $n = 2$، $\ell = 1$، $m = 1$ اور $n = 2$، $\ell = 1$، $m = -1$ کے درج ذیل خطی مجموعہ سے ابتداء کرتا ہے۔

$$\Psi(\boldsymbol{r},0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{211} + \psi_{21-1})$$

ا. حال $\Psi(\boldsymbol{r},t)$ تیار کریں۔ اس کی سادہ ترین صورت حاصل کریں۔

ب. مخفی توانائی کی توقعاتی قیمت ی $\langle V\rangle$ تلاش کریں۔ (کیا یہ t کی تابع ہو گی؟) اصل کلیہ اور عددی جواب کو الیکٹران وولٹ توصورت میں پیش کریں۔

۴.۲.۴ ہائیڈروجن کا طیف

اصولی طور پر ایک ہائیڈروجن جوہر جو ساکن حال $\psi_{n\ell m}$ 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 **تحویل**[۳۷] کر سکتا ہے۔ یہ توانائی جذب کر کے زیادہ توانائی حال منتقل ہو سکتا ہے یا (عموماً برقناطیسی نوریہ کے اخراج سے) توانائی خارج کر کے کم توانائی حال منتقل ہو سکتا ہے۔[۳۸] عملاً ایسی چھیڑخانیاں ہر وقت پائی جائیں گی لہٰذا تحویل (جنہیں "کوانٹائی چھلانگ" کہتے ہیں) مستقل طور پر ہوتے رہیں گے، جن کی بنا پر ہائیڈروجن سے ہر وقت روشنی (نوریہ) خارج ہو گی جس کی تونائی ابتدائی اور اختتامی حالات کی توانائیوں کے فرق

$$E_\gamma = E_i - E_f = -13.6\,\mathrm{eV}\left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right) \tag{۴.۹۱}$$

کے برابر ہو گا۔

---

[۳۷] transition

[۳۸] فطرتاً، 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**[۳۹،۴۰] کے تحت نوریہ کی توانائی اس کے تعدد کے راست تناسب ہو گی:

$$E_\gamma = h\nu \tag{۴.۹۲}$$

جبکہ **طول موج** $\lambda = c/\nu$ ہے لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\frac{1}{\lambda} = R\Big(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\Big) \tag{۴.۹۳}$$

جہاں

$$R \equiv \frac{m}{4\pi c\hbar^3}\Big(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_o}\Big)^2 = 1.097 \times 10^7\,\mathrm{m}^{-1} \tag{۴.۹۴}$$

رڈبرگ مستقل[۴۱] کہلاتا ہے۔ مساوات ۴.۹۳ ہائیڈروجن کے طیف کا **کلیہ رڈبرگ**[۴۲] 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 قدرت کے بنیادی مستقلات کی صورت میں R کی قیمت دیتا ہے۔ زمینی حال $(n_f = 1)$ میں تحویل، بالائے بصری خطہ میں پائے جاتے ہیں جنہیں طیف پیمائی کار **لیمان تسلسل**[۴۳] کہتے ہیں۔ پہلی ہیجان حال $(n_f = 2)$ میں تحویل، دکھائی دینے والے خطہ میں روشنی پیدا کرتے ہیں جسے **بالمر تسلسل**[۴۴] کہتے ہیں۔ اسی طرح $n_f = 3$ میں تحویل، **پاشن تسلسل**[۴۵] دیتے ہیں جو زیر بصری شعاع ہے، وغیرہ وغیرہ (شکل ۴.۷ دیکھیں۔ اس شکل میں مساوات ۴.۷۰ سے حاصل E_1، E_2، اور E_3 بھی دکھائے گئے ہیں۔) (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 ۴.۱۶: **ہائیڈروجنی جوہر**[۴۶] Z پروٹان کے مرکزہ کے گرد طواف کرتے ہوئے ایک الیکٹران پر مشتمل ہے۔ (از خود ہائیڈروجن میں $Z = 1$ جبکہ باردارہ **ہیلیم**[۴۷] میں $Z = 2$ اور دہری باردارہ **لتھیم**[۴۸] میں $Z = 3$ ہو گا، وغیرہ وغیرہ۔) ہائیڈروجن جوہر کی بوہر توانائیاں $E_n(Z)$، بندشی توانائی $E_1(Z)$، رداس بوہر $a(Z)$، اور رڈبرگ مستقل

---

[۳۹] Planck's formula

[۴۰] نوریہ درحقیقت برقناطیسی اخراج کا ایک کوانٹائی ہے۔ یہ ایک اضافیتی چیز ہے جس پر غیر اضافی کوانٹائی میکانیات قابل استعمال نہیں ہے۔ اگرچہ ہم چند مواقع پر نوریہ 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۔

[۴۱] Rydberg constant

[۴۲] Rydberg formula

[۴۳] Lyman series

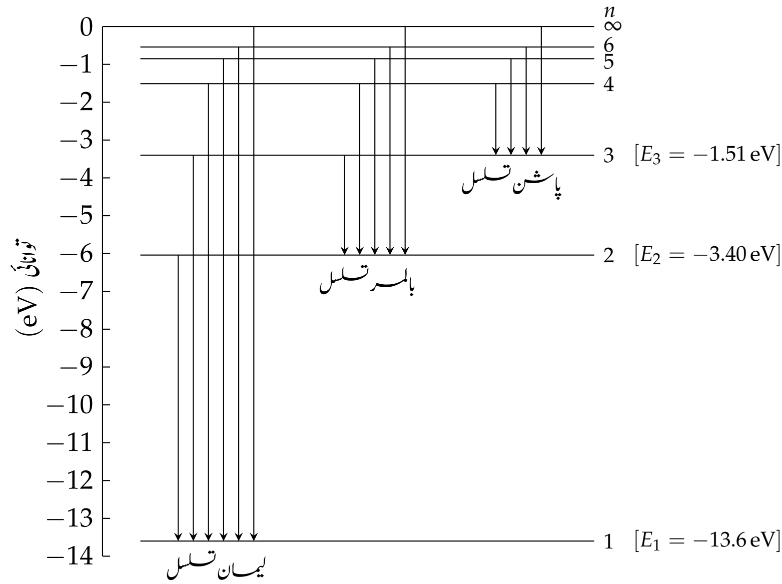
[۴۴] Balmer series

[۴۵] Paschen series

[۴۶] hydrogenic atom

[۴۷] Helium

[۴۸] Lithium



شکل ۴.۷: ہائیڈروجن طیف میں سطحیں توانائی اور تحویلات۔

$R(Z)$ تعین کریں۔ (اپنے جوابات کو ہائیڈروجن کی متعلقہ قیمتوں کے لحاظ سے پیش کریں۔) برقناطیسی طیف کے کس خطہ میں $Z = 2$ اور $Z = 3$ کی صورت میں لیمان تسلسل پائے جائیں گے؟ اشارہ: کسی نئے حساب کی ضرورت نہیں ہے؛ مخفیہ (مساوات ۴.۵۲) میں $e^2 \to Ze^2$ ہو گا لہٰذا تمام نتائج میں بھی یہی کچھ پر کرنا ہو گا۔

سوال ۴.۱۷: زمین اور سورج کو ہائیڈروجن جوہر کا متبادل تجاذبی نظام تصور کریں۔

ا. مساوات ۴.۵۲ کی جگہ مخفی توانائی تفاعل کیا ہو گا؟ (زمین کی کمیت m جبکہ سورج کی کمیت M لیں۔)

ب. اس نظام کا "رداس بوہر" a_g کیا ہو گا؟ اس کی عددی قیمت تلاش کریں۔

ج. تجاذبی کلیہ بوہر لکھ کر رداس r_0 کے مدار میں سیارہ کے کلاسیکی توانائی کو E_n کے برابر رکھ کر دکھائیں کہ $n = \sqrt{r_0/a_g}$ ہو گا۔ اس سے زمین کے کوانٹائی عدد n کی اندازاً قیمت تلاش کریں۔

د. فرض کریں زمین اگلی نچلی سطح $(n - 1)$ میں تحویل کرتی ہے۔ کتنی توانائی کا اخراج ہو گا؟ جواب جاول میں دیں۔ خارج نور یہ (یا زیادہ ممکنہ طور پر گریویٹان[۳۹]) کا طول موج کیا ہو گا؟ (اپنے جواب کو نوری سالوں میں پیش کریں۔ کیا یہ حیرت انگیز نتیجہ محض ایک اتفاق ہے۔)

[۳۹] graviton

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 کوانٹائی عدد (n) حال کی توانائی تعین کرتا ہے (مساوات ۴.۷۰)؛ ہم دیکھیں گے کہ ℓ اور m مدارچی 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 کوانٹائی میکانیات میں زاویائی معیار حرکت (اس سے بھی زیادہ) اہمیت رکھتا ہے۔

کلاسیکی طور پر (مبدا کے لحاظ سے) ایک ذرہ کی زاویائی معیار حرکت درج ذیل کلیہ دیتا ہے

$$\mathbf{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} \tag{۴.۹۵}$$

جس کے تحت درج ذیل ہو گا۔

$$L_x = yp_z - zp_y, \qquad L_y = zp_x - xp_z, \qquad L_z = xp_y - yp_x \tag{۴.۹۶}$$

ان کے متعلقہ کوانٹائی عاملین معیاری نسخہ $p_x \to -i\hbar\partial/\partial x$ ، $p_y \to -i\hbar\partial/\partial y$ ، $p_z \to -i\hbar\partial/\partial z$ سے حاصل ہوں گے۔ باب ۲ میں ہم نے ہارمونی مرتعش کے اجازتی توانائیوں کو خالص الجبرائی ترکیب سے حاصل کیا۔ اگلے حصہ میں الجبرائی ترکیب استعمال کرتے ہوئے زاویائی معیار حرکت عاملین کے امتیازی قیمتیں حاصل کیے جائیں گے۔ یہ ترکیب، عاملین کے مقلبیت تعلقات پر مبنی ہے۔ اس کے بعد ہم امتیازی تفاعلات حاصل کریں گے جو زیادہ دشوار کام ہے۔

۴.۳.۱ امتیازی قیمتیں

عاملین L_x اور L_y آپس میں غیر مقلوب ہیں۔ درحقیقت درج ذیل ہو گا۔[۵۰]

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z] \end{aligned} \tag{۴.۹۷}$$

باضابطہ مقلبیت رشتوں (مساوات ۴.۱۰) سے ہم جانتے ہیں کہ صرف x اور p_x ، y اور p_y ، z اور p_z عاملین غیر مقلوب ہیں۔ یوں درمیانے دو اجزاء حذف ہوں گے اور درج ذیل رہ جائے گا۔

$$[L_x, L_y] = yp_x[p_z, z] + xp_y[z, p_z] = i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar L_z \tag{۴.۹۸}$$

ہم $[L_y, L_z]$ یا $[L_z, L_x]$ بھی تلاش کر سکتے تھے، تاہم انہیں علیحدہ علیحدہ معلوم کرنے کی ضرورت نہیں ہے؛ ہم اشاریہ کی چکری ادل بدل $(x \to y, y \to z, z \to x)$ سے فوراً درج ذیل لکھ سکتے ہیں

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z; \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x; \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y \tag{۴.۹۹}$$

---

[۵۰] کوانٹائی میکانیات میں تمام عاملین قانون جزئیتی تقسیم: $AB + AC = (B + C)$ پر پورا اترتے ہیں (صفحہ ۱۷ پر حاشیہ ۳۶ دیکھیں)۔ بالخصوص $[A, B + C] = [A, B] + [A + C]$ ہو گا۔

جو زاویائی معیار حرکت کے **بنیادی مقلبیتی رشتے**[۵۱] ہیں جن سے باقی سب کچھ اخذ ہوتا ہے۔

دھیان رہے کہ L_x L_y اور L_z غیر ہم آہنگ قابل مشاہدہ ہیں۔ متعمم اصول عدم یقینیت (مساوات ۳.۶۲) کے تحت

$$\sigma_{L_x}^2\sigma_{L_y}^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle i\hbar L_z\rangle\right)^2 = \frac{\hbar^2}{4}\langle L_z\rangle^2$$

یا

$$\sigma_{L_x}\sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2}\left|\langle L_z\rangle\right| \tag{۴.۱۰۰}$$

ہوگا۔ یوں ایسے حالات کی تلاش جو L_x اور L_y کے بیک وقت امتیازی تفاعلات ہوں بے مقصد ہوگا۔ اس کے برعکس کل زاویائی معیار حرکت کا مربع:

$$L^2 \equiv L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \tag{۴.۱۰۱}$$

عامل L_x کے ساتھ مقلوب ہے۔

$$\begin{aligned}
[L^2, L_x] &= [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x]\\
&= L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z\\
&= L_y(-i\hbar L_z) + (-i\hbar L_z)L_y + L_z(i\hbar L_y) + (i\hbar L_y)L_z\\
&= 0
\end{aligned}$$

(مقالب کی سادہ روپ حاصل کرنے کے لیے میں نے مساوات ۳.۶۴ استعمال کیا؛ یہ بھی یاد رہے کہ ہر عامل اپنے آپ کے ساتھ مقلوب ہوگا۔) اس سے آپ اخذ کر سکتے ہیں کہ L_y اور L_z کے ساتھ بھی L^2 مقلوب ہوگا

$$[L^2, L_x] = 0, \quad [L^2, L_y] = 0, \quad [L^2, L_z] = 0 \tag{۴.۱۰۲}$$

یا مختصراً درج ذیل ہوگا۔

$$[L^2, \mathbf{L}] = 0 \tag{۴.۱۰۳}$$

اس طرح $\mathbf{L}$ کے ہر جزو کے ساتھ L^2 ہم آہنگ ہوگا اور ہم L^2 کا (مثلاً) L_z کے ساتھ بیک وقت امتیازی حالات

$$L^2 f = \lambda f \quad \text{اور} \quad L_z f = \mu f \tag{۴.۱۰۴}$$

---

[۵۱] fundamental commutation relations

تلاش کرنے کی امید رکھ سکتے ہیں۔ ہم نے حصہ ۲.۳.۱ میں ہارمونی مرتعش پر سیڑھی عامل کی ترکیب استعمال کی۔ اسی طرح کی ترکیب یہاں بھی استعمال کرتے ہیں۔ یہاں ہم درج ذیل لیتے ہیں۔

$$L\pm \equiv L_x \pm iL_y \tag{۴.۱۰۵}$$

L_z کے ساتھ مقلب درج ذیل ہو گا

$$[L_z, L_\pm] = [L_z, L_x] \pm i[L_z, L_y] = i\hbar L_y \pm i(-i\hbar L_x) = \pm\hbar(L_x \pm iL_y)$$

لہٰذا

$$[L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm \tag{۴.۱۰۶}$$

اور، ظاہر ہے کہ، درج ذیل ہو گا۔

$$[L^2, L_\pm] = 0 \tag{۴.۱۰۷}$$

میں دعویٰ کرتا ہوں کہ اگر L^2 اور L_z کا امتیازی تفاعل f ہو تب $L_\pm(f)$ بھی ان کا امتیازی تفاعل ہو گا: مساوات ۴.۱۰۷ درج ذیل کہتی ہے

$$L^2(L_\pm f) = L_\pm(L^2 f) = L_\pm(\lambda f) = \lambda(L_\pm f) \tag{۴.۱۰۸}$$

لہٰذا اسی امتیازی قیمت λ کے لیے $L_\pm f$ بھی L^2 کا امتیازی تفاعل ہو گا، اور مساوات ۴.۱۰۶ درج ذیل کہتی ہے

$$\begin{aligned} L_z(L_\pm f) &= (L_zL_\pm - L_\pm L_z)f + L_\pm L_z f = \pm\hbar L_\pm f + L_\pm(\mu f) \\ &= (\mu \pm \hbar)(L_\pm f) \end{aligned} \tag{۴.۱۰۹}$$

لہٰذا نئے امتیازی قیمت $\mu \pm \hbar$ کے لیے L_z کا $L_\pm f$ امتیازی تفاعل ہو گا۔ ہم L_+ کو **عامل رفعت**[۵۲] کہتے ہیں چونکہ یہ L_z کے امتیازی قیمت کو $\hbar$ بڑھاتا ہے جبکہ L_- **عامل تقلیل**[۵۳] کہلاتا ہے چونکہ یہ امتیازی قیمت کو $\hbar$ کم کرتا ہے۔

یوں ہمیں λ کی کسی ایک قیمت کے لیے، حالات کی ایک سیڑھی ملتی ہے، جس کا ہر پایہ قریبی پایہ سے L_z کی امتیازی قیمت کے لحاظ سے $\hbar$ کی ایک اکائی فاصلہ پر ہو گا (شکل ۴.۸)۔ سیڑھی چڑھنے کی خاطر ہم عامل رفعت کا اطلاق کرتے ہیں جبکہ سیڑھی اترنے کی خاطر ہم عامل تقلیل لاگو کرتے ہیں۔ تاہم یہ عمل ہمیشہ کے لئے برقرار نہیں رہ سکتا ہے۔ ہم آخر کار ایک ایسے حال تک پہنچیں گے جس کا z جزو کل سے زیادہ ہو گا جو ایک ناممکن صورت[۵۴] ہے۔ لازماً سیڑھی کا ایسا "بالاترین پایہ" f_t، پایا جائے گا جو درج ذیل کو مطمئن[۵۵] کرے گا۔

$$L_+ f_t = 0 \tag{۴.۱۱۰}$$

فرض کریں اس بالاترین پایہ پر L_z کی امتیازی قیمت $\hbar\ell$ ہو (حرف ℓ کی مناسبت آپ پر جلد آیا ہوں گی)۔

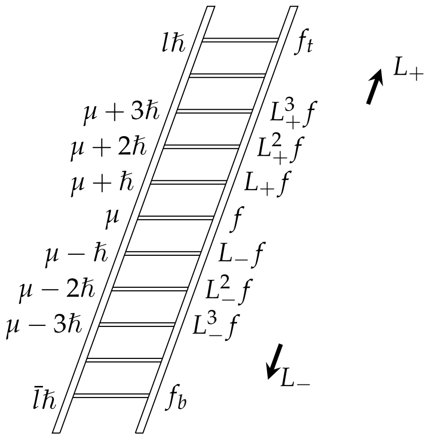
---

[۵۲] raisingoperator

[۵۳] loweringoperator

[۵۴] باضابطہ طور پر $\langle L^2\rangle = \langle L_x^2\rangle + \langle L_y^2\rangle + \langle L_z^2\rangle$ ہو گا، لیکن $\langle L_x^2\rangle = \langle f|L_x^2 f\rangle = \langle L_x f|L_x f\rangle \geq 0$ ہے (اور L_y کے لئے بھی ایسا ہی ہو گا) لہٰذا $\lambda = \langle L_x^2\rangle + \langle L_y^2\rangle + \mu^2 \geq \mu^2$ ہو گا۔

[۵۵] در حقیقت، ہم صرف اتنا اخذ کر سکتے ہیں کہ $L_+ f_t$ ناقابل معمول زنی ہے؛ اس کا معیار صفر کی بجائے لامتناہی ہو سکتا ہے۔ سوال ۴.۱۸ میں اس پر غور کیا گیا ہے۔



شکل ۴.۸: زاویائی معیار حرکت حالات کی "سیڑھی"۔

$$L_z f_t = \hbar \ell f_t; \quad L^2 f_t = \lambda f_t \tag{۴.۱۱۱}$$

اب درج ذیل ہو گا

$$\begin{aligned} L_\pm L_\mp &= (L_x \pm iL_y)(L_x \mp iL_y) = L_x^2 + L_y^2 \mp i(L_x L_y - L_y L_x) \\ &= L^2 - L_z^2 \mp i(i\hbar L_z) \end{aligned}$$

یا دوسرے الفاظ میں درج ذیل ہو گا۔

$$L^2 = L_\pm L_\mp + L_z^2 \mp \hbar L_z \tag{۴.۱۱۲}$$

یوں

$$L^2 f_t = (L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z) f_t = (0 + \hbar^2 \ell^2 + \hbar^2 \ell) f_t = \hbar^2 \ell(\ell + 1) f_t$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

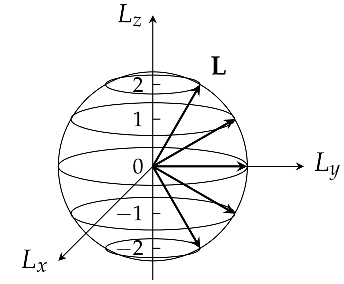
$$\lambda = \hbar^2 \ell(\ell + 1) \tag{۴.۱۱۳}$$

یہ ہمیں L_z کی امتیازی قیمت کی اعظم قیمت کی صورت میں L^2 کی امتیازی قیمت دیتی ہے۔
ساتھ ہی، اسی وجہ کی بنا، سیڑھی کا نچلا ترین پایہ f_b بھی پایا جائے گا جو درج ذیل کو مطمئن کرے گا۔

$$L_- f_b = 0 \tag{۴.۱۱۴}$$

فرض کریں اس نچلے ترین پایہ پر L_z کا امتیازی قیمت $\hbar \bar{\ell}$ ہو:

$$L_z f_b = \hbar \bar{\ell} f_b; \quad L^2 f_b = \lambda f_b \tag{۴.۱۱۵}$$



شکل ۴.۹: زاویائی معیار حرکت حالات (برائے $\ell = 2$)۔

مساوات ۴.۱۱۲ استعمال کرتے ہوئے

$$L^2 f_b = (L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z) f_b = (0 + \hbar^2 \bar{\ell}^2 - \hbar^2 \bar{\ell}) f_b = \hbar^2 \bar{\ell}(\bar{\ell} - 1) f_b$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\lambda = \hbar^2 \bar{\ell}(\bar{\ell} - 1) \tag{۴.۱۱۶}$$

مساوات ۴.۱۱۳ اور مساوات ۴.۱۱۶ کا موازنہ کرنے سے $\ell(\ell + 1) = \bar{\ell}(\bar{\ell} - 1)$ ہو گا لہٰذا یا $\bar{\ell} = \ell + 1$ ہو گا (جو بے معنی ہے، چونکہ نچلا ترین پایہ، بالاترین پایہ سے بلند نہیں ہو سکتا) یا درج ذیل ہو گا۔

$$\bar{\ell} = -\ell \tag{۴.۱۱۷}$$

ظاہر ہے کہ L_z کی امتیازی قیمتیں $m\hbar$ ہوں گے، جہاں m (اس حرف کی مناسبت آپ پر جلد عیاں ہو گی) کی قیمت N عدد صحیح قدم لیتے ہوئے $-\ell$ تا $+\ell$ ہو گی۔ بالخصوص آپ دیکھ سکتے ہیں کہ $\ell = -\ell + N$ یعنی $\ell = N/2$ ہو گا، لہٰذا ℓ لازماً عدد صحیح یا نصف عدد صحیح ہو گا۔ امتیازی تفاعلات کی تصویر کشی اعداد ℓ اور m کرتے ہیں:

$$L^2 f_\ell^m = \hbar^2 \ell(\ell + 1) f_\ell^m; \quad L_z f_\ell^m = \hbar m f_\ell^m \tag{۴.۱۱۸}$$

جہاں درج ذیل ہوں گے۔

$$\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots; \quad m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell \tag{۴.۱۱۹}$$

ℓ کی کسی ایک قیمت کے لیے m کی $2\ell + 1$ مختلف قیمتیں ہوں گی (یعنی "سیڑھی" کے $2\ell + 1$ "پائے" ہوں گے)۔

بعض اوقات اس نتیجہ کو شکل ۴.۹ کی طرز پر ظاہر کیا جاتا ہے (جو $\ell = 2$ کے لیے دکھایا گیا ہے)۔ یہاں تیر کے نشان ممکنہ زاویائی معیار حرکت کو ظاہر کرتے ہیں؛ ان تمام کی لمبائیاں $\hbar$ کی اکائیوں میں

$\sqrt{\ell(\ell+1)}$ ہوگی جو (یہاں $2.45 = \sqrt{6}$ ہے) جبکہ ان کے z اجزاء m کی اجازتی قیمتیں (-2 ، -1 ، 0 ، 1 ، 2) ہیں۔ دھیان رہے کہ ان سمتیات کے مقدار (یعنی کرہ کا رداس)، z جزو کی اعظم قیمت سے بڑا ہے! (ماسوائے $\ell = 0$ کی "حقیر" صورت میں، عموماً $\ell < \sqrt{\ell(\ell+1)}$ ہوگا۔) آپ دیکھ سکتے ہیں کہ آپ زاویائی معیار حرکت کو سیدھا z رخ نہیں رکھ سکتے ہیں۔ پہلی نظر میں یہ ایک نامعقول بات نظر آتی ہے۔ "کیا میں z محدد کو زاویائی معیار حرکت سمتیہ کے رخ منتخب نہیں کر سکتا ہوں؟" اب ایسا کرنے کی خاطر آپ کو تینوں اجزاء بیک وقت معلوم ہونے چاہیے ہیں جبکہ اصول عدم یقینیت (مساوات ۴.۱۰۰) کہتی ہے کہ یہ ناممکن ہے۔ چلو مان لیا لیکن کیا یہ بھی ممکن نہیں ہے کہ میں اتفاقاً z محدد کو $\mathbf{L}$ کے رخ منتخب کر لوں؟ بالکل نہیں! آپ بنیادی نکتہ نہیں سمجھ پائے ہیں۔ ایسا نہیں ہے کہ محض آپ $\mathbf{L}$ کے تینوں اجزاء نہیں جانتے ہیں بلکہ ایک ذرے کا تعیین زاویائی معیار حرکت سمتیہ ہو ہی نہیں سکتا ہے؛ جیسا کہ اس کا مقام اور معیار حرکت بیک وقت تعیین نہیں ہو سکتے ہیں۔ اگر L_z کی قیمت ہمیں ٹھیک ٹھیک معلوم ہو تب L_x اور L_y ہم نہیں جان سکتے ہیں شکل ۴.۹ میں سمتیات گمراہ کن ہیں؛ بہتر ہوتا کہ خطوط عرض بلند پر ان کی لپائی کی جاتی جو یہ ظاہر کرتی کہ L_x اور L_y بلا تعیین ہیں۔

میں امید کرتا ہوں کہ میں آپ کو متاثر کرنے میں کامیاب ہوا ہوں گا۔ زاویائی معیار حرکت کے بنیادی مقلبیت رشتوں (مساوات ۴.۹۹) سے آغاز کرتے ہوئے ہم نے، صرف الجبرائی تراکیب استعمال کرکے، امتیازی تفاعلات دیکھے بغیر، L^2 اور L_z کی امتیازی قیمتوں کا تعین کیا۔ آئیں اب امتیازی تفاعلات تیار کریں؛ جو آپ دیکھیں گے اتنا آسان نہیں ہوگا۔ میں کانٹے کی بات $f_\ell^m = Y_\ell^m$ سے شروع کرتا ہوں؛ L^2 اور L_z کے امتیازی تفاعلات وہی کروی ہارمونیات ہیں جنہیں ایک دوسری راہ پر چلتے ہوئے ہم نے حصہ ۴.۱.۲ میں حاصل کیا (یہی وجہ ہے کہ میں نے حروف ℓ اور m استعمال کیے)۔ اب میں آپ کو بتا سکتا ہوں کہ کروی ہارمونیات کیوں عمودی ہیں۔ یہ الگ تھلگ امتیازی قیمتوں کے ہرمشی عاملین (L^2 اور L_z) کے امتیازی تفاعلات ہیں (حصہ ۳.۳.۱ میں مسئلہ ۳.۲)۔

سوال ۴.۱۸: عامل رفعت اور عامل تقلیل m کی قیمت ایک (1) سے تبدیل کرتے ہیں

$$L_\pm f_\ell^m = (A_\ell^m) f_\ell^{m\pm1} \tag{۴.۱۲۰}$$

جہاں A_ℓ^m کوئی مستقل ہے۔ سوال: امتیازی تفاعلات کی معمول زنی کرنے کی خاطر A_ℓ^m کیا ہوگا؟ اشارہ: پہلے دکھائیں کہ $L_\mp$ اور $L_\pm$ ایک دوسرے کے ہرمشی جوڑی دار ہیں (چونکہ L_x اور L_y قابل مشاہدہ ہیں، آپ فرض کر سکتے ہیں یہ ہرمشی ہوں گے لیکن آپ چاہیں تو اس کی ثابت کر سکتے ہیں)؛ اور اس کے بعد مساوات ۴.۱۱۲ استعمال کریں۔ جواب:

$$A_\ell^m = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m(m\pm1)} = \hbar\sqrt{(\ell\mp m)(\ell\pm m+1)} \tag{۴.۱۲۱}$$

دیکھیے گا کہ سیڑھی کی بلند ترین اور نچلے ترین پایہ پر کیا ہوگا (جب آپ f_ℓ^ℓ پر L_+ یا $f_\ell^{-\ell}$ پر L_- لاگو کرتے ہیں)۔

سوال ۴.۱۹:

ا. مقام اور معیار حرکت کی باضابطہ مقلبیت رشتوں (مساوات ۴.۱۰) سے آغاز کرتے ہوئے درج ذیل

مقالب حاصل کریں۔

$$[L_z, x] = i\hbar y, \quad [L_z, y] = -i\hbar x, \quad [L_z, z] = 0,$$
$$[L_z, p_x] = i\hbar p_y, \quad [L_z, p_y] = -i\hbar p_x, \quad [L_z, p_z] = 0 \tag{۴.۱۲۲}$$

ب. ان نتائج کو استعمال کرتے ہوئے مساوات ۴.۹۶ سے $[L_z, L_x] = i\hbar L_y$ حاصل کریں۔

ج. مقالب $[L_z, r^2]$ اور $[L_z, p^2]$ کی قیمتیں (جہاں $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ اور $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$ ہیں) تلاش کریں۔

د. اگر V صرف r کا تابع ہو تب دکھائیں کے ہیملٹنی $H = (p^2/2m) + V$ زاویائی عامل $\mathbf{L}$ کے تینوں اجزاء کے ساتھ مقلوبی ہو گا۔ یوں H، L^2 اور L_z باہمی ہم آہنگ قابل مشاہدہ ہوں گے۔

سوال ۴.۲۰:

ا. دکھائیں کہ مخفیہ $V(\boldsymbol{r})$ میں ایک ذرے کی مدارچی زاویائی معیار حرکت $\mathbf{L}$ کی توقعاتی قیمت کی شرح تبدیلی اس کے قوت مروڑ کی توقعاتی قیمت کے برابر ہو گی

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle \mathbf{L} \rangle = \langle \mathbf{N} \rangle$$

جہاں درج ذیل ہے۔

$$\mathbf{N} = \boldsymbol{r} \times (-\nabla V)$$

(یہ مسئلہ اہرنفسٹ کا مماثل گھومتا تعلق ہے۔)

ب. دکھائیں کہ کسی بھی کروی تشاکلی مخفیہ کے لیے $\mathrm{d}\langle \mathbf{L} \rangle \, \mathrm{d}t = 0$ ہو گا۔ (یہ **زاویائی معیار حرکت کی بقا**[56] کا کوانٹائی میکانی روپ ہے۔)

۴.۳.۲ امتیازی تفاعلات

ہمیں سب سے پہلے L_x، L_y اور L_z کو کروی محدد میں لکھنا ہو گا۔ اب $\mathbf{L} = (\hbar/i)(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{\nabla})$ ہے جبکہ کروی محدد میں ڈھلوان درج ذیل ہو گا

$$\boldsymbol{\nabla} = \boldsymbol{a}_{\mathrm{r}} \frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{a}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \boldsymbol{a}_\phi \frac{1}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \tag{۴.۱۲۳}$$

جہاں $\boldsymbol{r} = r\boldsymbol{a}_{\mathrm{r}}$ ہے۔ یوں درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{i}\Big[r(\boldsymbol{a}_{\mathrm{r}} \times \boldsymbol{a}_{\mathrm{r}}) \frac{\partial}{\partial r} + (\boldsymbol{a}_{\mathrm{r}} \times \boldsymbol{a}_\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + (\boldsymbol{a}_{\mathrm{r}} \times \boldsymbol{a}_\phi) \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \Big]$$

[56] conservation of angular momentum

اب $(\boldsymbol{a}_{\mathrm{r}} \times \boldsymbol{a}_{\mathrm{r}}) = 0$، $(\boldsymbol{a}_{\mathrm{r}} \times \boldsymbol{a}_{\theta}) = \boldsymbol{a}_{\phi}$ اور $(\boldsymbol{a}_{\mathrm{r}} \times \boldsymbol{a}_{\phi}) = -\boldsymbol{a}_{\theta}$ ہوتے ہیں (شکل ۴.۱) لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{i}\Big(\boldsymbol{a}_{\phi}\frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{a}_{\theta}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\Big) \tag{۴.۱۲۴}$$

اکائی سمتیات $\boldsymbol{a}_{\theta}$ اور $\boldsymbol{a}_{\phi}$ کو ان کے کارتیسی اجزاء میں لکھتے ہیں۔

$$\boldsymbol{a}_{\theta} = (\cos\theta\cos\phi)\boldsymbol{i} + (\cos\theta\sin\phi)\boldsymbol{j} - (\sin\theta)\boldsymbol{k} \tag{۴.۱۲۵}$$

$$\boldsymbol{a}_{\phi} = -(\sin\phi)\boldsymbol{i} + (\cos\phi)\boldsymbol{j} \tag{۴.۱۲۶}$$

یوں

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{i}[(-\sin\phi\,\boldsymbol{i} + \cos\phi\,\boldsymbol{j})\frac{\partial}{\partial\theta} - (\cos\theta\cos\phi\,\boldsymbol{i} + \cos\theta\sin\phi\,\boldsymbol{j} - \sin\theta\,\boldsymbol{k})\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\phi}]$$

ہو گا ظاہر ہے درج ذیل ہوں گے۔

$$L_x = \frac{\hbar}{i}\Big(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\Big) \tag{۴.۱۲۷}$$

$$L_y = \frac{\hbar}{i}\Big(+\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\Big) \tag{۴.۱۲۸}$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{۴.۱۲۹}$$

ہمیں عامل رفت اور عامل تقلیل بھی درکار ہوں گے:

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y = \frac{\hbar}{i}\Big[(-\sin\phi \pm i\cos\phi)\frac{\partial}{\partial\theta} - (\cos\phi \pm i\sin\phi)\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\Big]$$

تاہم $\cos\phi \pm i\sin\phi = e^{\pm i\phi}$ ہوتا ہے لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$L_{\pm} = \pm\hbar e^{\pm i\phi}\Big(\frac{\partial}{\partial\theta} \pm i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\Big) \tag{۴.۱۳۰}$$

بالخصوص (سوال ۴.۲۱-۱) درج ذیل

$$L_{+}L_{-} = -\hbar^2\Big(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + i\frac{\partial}{\partial\phi}\Big) \tag{۴.۱۳۱}$$

لہٰذا (سوال ۴.۲۱-ب) درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$L^2 = -\hbar^2 \Big[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \Big(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \Big) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \Big] \tag{۴.۱۳۲}$$

ہم اب $f_\ell^m(\theta, \phi)$ تعین کر سکتے ہیں۔ یہ L^2 کا امتیازی تفاعل ہے، جس کا امتیازی قیمت $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ ہے۔

$$L^2 f_\ell^m = -\hbar^2 \Big[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \Big(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \Big) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \Big] f_\ell^m = \hbar^2 \ell(\ell + 1) f_\ell^m$$

یہ ٹھیک "زاویائی مساوات" (مساوات ۴.۱۸) ہے۔ ساتھ ہی یہ L_z کا امتیازی تفاعل بھی ہے جہاں اس کا امتیازی قیمت $m\hbar$ ہو گا:

$$L_z f_\ell^m = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\phi} f_\ell^m = \hbar m f_\ell^m$$

جو اُسمتی مساوات (مساوات ۴.۲۱) کا معادل ہے۔ ہم ان مساوات کا نظام حل کر چکے ہیں۔ ان کا معمول شدہ نتیجہ کروی ہارمونیات $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ ہے۔ اس سے ہم یہ نتیجہ اخذ کرتے ہیں کہ L^2 اور L_z کے امتیازی تفاعلات کروی ہارمونیات ہونگے۔ حصہ ۴.۱ میں علیحدگی متغیرات کی ترکیب سے مساوات شروڈنگر حل کرتے ہوئے ہم انجانے میں تین مقلوبی عاملین H ، L^2 اور L_z کے بیک وقت امتیازی تفاعلات تیار کر رہے تھے۔

$$H\psi = E\psi, \quad L^2\psi = \hbar^2 \ell(\ell + 1)\psi, \quad L_z\psi = \hbar m\psi \tag{۴.۱۳۳}$$

ہم مساوات ۴.۱۳۲ استعمال کرتے ہوئے مساوات مساوات شروڈنگر ۴.۱۴ کو مختصراً درج ذیل لکھ سکتے ہیں۔

$$\frac{1}{2mr^2} \Big[-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \Big(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \Big) + L^2 \Big] \psi + V\psi = E\psi$$

یہاں ایک دلچسپ صورت حال پیدا ہوتا ہے۔ علیحدگی متغیرات کی ترکیب سے امتیازی تفاعلات کی صرف عدد صحیح ℓ قیمتیں (مساوات ۴.۲۹) حاصل ہوئیں جبکہ زاویائی معیار حرکت کا الجبرائی نظریہ، ℓ کی (اور لہٰذا m کی) نصف عدد صحیح قیمتیں (مساوات ۴.۱۱۹) دیتی ہے۔ آپ کا خیال ہو گا کہ نصف عدد صحیح نتائج غیر ضروری ہیں، لیکن جیسا آپ اگلے حصوں میں دیکھیں گے، یہ انتہائی زیادہ اہمیت کا حامل نتیجہ ہے۔

سوال ۴.۲۱:

ا. مساوات ۴.۱۳۰ سے مساوات ۴.۱۳۱ اخذ کریں۔ اشارہ: آزمائشی تفاعل استعمال نہ کرنے سے غلط نتائج حاصل ہو سکتے ہیں لہٰذا اس کو ضرور استعمال کریں۔

ب. مساوات ۴.۱۲۹ اور مساوات ۴.۱۳۱ سے مساوات ۴.۱۳۲ اخذ کریں۔ اشارہ: مساوات ۴.۱۱۲ استعمال کریں۔

سوال ۴.۲۲:

ا. حساب کیے بغیر بتائیں $L_+Y_\ell^l$ کیا ہو گا؟

ب. مساوات ۴.۱۳۰ کے ساتھ جزو-ا کا نتیجہ اور یہ جانتے ہوئے کہ $L_zY_\ell^\ell = \hbar lY_\ell^\ell$ ہو گا، $Y_\ell^\ell(\theta,\phi)$ کی قیمت معمول زنی مستقل تک تلاش کریں۔

ج. بلاواسطہ تکمل کے ذریعے معمول زنی مستقل تعین کریں۔ اپنے حتمی نتیجے کا سوال ۴.۵ کے نتیجے کے ساتھ موازنہ کریں۔

سوال ۴.۲۳: آپ نے سوال ۴.۳ میں درج ذیل دکھایا۔

$$Y_2^1(\theta,\phi) = -\sqrt{15/8\pi}\sin\theta\cos\theta e^{i\phi}$$

عامل رفت کا $Y_2^2(\theta,\phi)$ پر اطلاق کریں۔ معمول زنی کے لیے مساوات ۴.۱۲۱ استعمال کریں۔

سوال ۴.۲۴: بغیر کمیت کا ایک ڈنڈا جس کی لمبائی a ہے، کے دونوں سروں پر کمیت m کے ذرات باندھے ہوئے ہیں۔ یہ نظام اپنے وسط کے گرد آزادی سے تین بُعدی حرکت کر سکتا ہے (جبکہ نظام کا وسط از خود حرکت نہیں کرتا)۔

ا. دکھائیں کے اس بے لچک پھرکی[57] کی اجازتی توانائیاں درج ذیل ہوں گی۔

$$E_n = \frac{\hbar^2 n(n+1)}{ma^2}, \qquad n = 0,1,2,\dots$$

اشارہ: پہلے (کلاسیکی) توانائیوں کو کل زاویائی معیار حرکت کی صورت میں لکھیں۔

ب. اس نظام کی معمول شدہ امتیازی تفاعلات کیا ہوں گے؟ اس نظام کی n وی توانائی سطح کی انحطاطیت کیا ہو گی؟

۴.۴ چکر

کلاسیکی میکانیات میں بے لچک جسم کے زاویائی معیار حرکت کے دو اقسام پائے جاتے ہیں: پہلی قسم، کمیت کے مرکز کی حرکت کے ساتھ وابستہ ہے جسے **مداری**[58] $(\mathbf{L} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})$ کہتے ہیں جبکہ دوسری قسم **چکر**[59] $(\mathbf{S} = I\omega)$ کہلاتا ہے جو مرکز کمیت کے گرد حرکت سے وابستہ ہے۔ مثال کے طور پر سورج کے گرد سالانہ مدار کی بنا پر زمین کا مداری زاویائی معیار حرکت ہو گا، جبکہ شمال و جنوب محور کے گرد، روزانہ چکر کی بنا پر اس کا چکری زاویائی معیار حرکت ہو گا۔ کلاسیکی نقطہ نظر کے لحاظ سے یہ فرق محض ہماری آسانی کے لئے ہے، چونکہ حقیقتاً، ہر پتھر ہر پہاڑ، ہر سمندر، وغیرہ، جن پر زمین مشتمل ہے، کا زمین کے محور کے گرد انفرادی "مداری" زاویائی معیار حرکت کا مجموعہ $\mathbf{S}$ کے برابر ہو گا۔ کوانٹائی میکانیات میں اس کا معادل پایا جاتا ہے، تاہم یہاں ایک حتمی طور پر بنیادی فرق پایا جاتا ہے۔ مرکزہ کے گرد (ہائیڈروجن کی صورت میں) الیکٹران کے طواف کی بنا پر مداری زاویائی معیار حرکت (جسے کروی ہارمونیات بیان کرتے ہیں) کے ساتھ ساتھ، الیکٹران زاویائی معیار

---

[57] rigid rotor
[58] orbital
[59] spin

حرکت کی ایک دوسری روپ بھی رکھتا ہے، جس کا فضا میں حرکت کے ساتھ کوئی تعلق نہیں پایا جاتا ہے (اور یوں اس کو مقام کے متغیرات r θ اور ϕ سے بیان نہیں کیا جا سکتا ہے) تاہم یہ کلاسیکی چکر کی مانند ہے (لہٰذا اسے ہم اسی لفظ سے پکارتے ہیں)۔ یہ مماثلت یہی پر ختم ہو جاتی ہے: الیکٹران (جہاں تک ہم جانتے ہیں) ایک بے ساخت (یعنی بغیر ٹکڑوں کے) نقطی ذرہ ہے، لہٰذا اس کی چکری زاویائی معیار حرکت کو الیکٹران کے ٹکڑوں کے مدارچی زاویائی معیار حرکت میں تقسیم نہیں کیا جا سکتا ہے (سوال ۴.۲۵ دیکھیں)۔ یہاں اتنا کہنا کافی ہوگا کہ بنیادی ذرات **غیر خلقی**[۶۰] زاویائی معیار حرکت $\mathbf{L}$ کے ساتھ ساتھ **خلقی**[۶۱] زاویائی معیار حرکت $\mathbf{S}$ بھی رکھتے ہیں۔

چکر کا الجبرائی نظریہ ہو بہو مدارچی زاویائی معیار حرکت کے نظریہ کی مانند ہے۔ ہم باضابطہ مقلبیت رشتوں[۶۲] سے شروع کرتے ہیں۔

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x, \quad [S_z, S_x] = i\hbar S_y \tag{۴.۱۳۴}$$

یوں (پہلے کی طرح) S^2 اور S_z کے امتیازی تفاعلات درج ذیل تعلقات[۶۳]

$$S^2|sm\rangle = \hbar^2 s(s+1)|sm\rangle; \quad S_z|sm\rangle = \hbar m|sm\rangle \tag{۴.۱۳۵}$$

اور

$$S_{\pm}|sm\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m\pm 1)}|s(m\pm 1)\rangle \tag{۴.۱۳۶}$$

کو مطمئن کرتے ہیں جہاں $S_{\pm} \equiv S_x \pm iS_y$ ہے۔ تاہم یہاں امتیازی سمتیات (θ اور ϕ کے تفاعل نہیں ہیں) لہٰذا یہ کروی ہارمونیات نہیں ہونگے اور ہم کوئی ایسی معلوم نہیں رکھتے جس کی بنا پر ہم s اور m کی نصف عدد صحیح قیمتوں

$$\tag{۴.۱۳۷}$$

کو قبول نہ کریں۔

ہم دیکھتے ہیں کہ ہر بنیادی ذرے کے s کی ایک مخصوص اور ناقابل تبدیل قیمت ہوتی ہے جسے اس (مخصوص نسل کا) **چکر**[۶۴] کہتے ہیں: π میذان کا چکر 0 ہے؛ الیکٹران کا چکر $1/2$ ؛ پروٹان کا چکر 1 ؛ ڈیلٹا کا چکر $3/2$ ؛ گریویٹان کا چکر 2 ؛ وغیرہ

---

[۶۰] extrinsic

[۶۱] intrinsic

[۶۲] ہم انہیں نظریہ چکر کے اصول موضوعہ لیتے ہیں؛ مداری زاویائی معیار حرکت کے مماثل کلیات (مساوات ۴.۹۹) کو عاملین کے معلوم روپ (مساوات ۴.۹۶) سے اخذ کیا گیا تھا۔ زیادہ نفیس انداز میں ان دونوں کو تین ابعاد میں گھماو کے عدم تغیریت سے حاصل کیا جا سکتا ہے۔ یقیناً، یہ تین بنیادی مقلوبی رشتے ہر قسم کے زاویائی معیار حرکت کے لئے درست ہوں گے، چاہے وہ چکری، مداری، یا مرکب جسم کا مجموعی زاویائی معیار حرکت ہو جس میں کچھ چکر اور کچھ مداری شامل ہوں گے۔

[۶۳] چونکہ چکر کے امتیازی حالات، تفاعلات نہیں ہیں؛ میں ان کے لئے "سمتاویہ" علامتیت استعمال کروں گا۔ (میں حصہ ۴.۳ میں بھی یہی کرتے ہوئے Y_ℓ^m کو $|\ell m\rangle$ لکھ سکتا تھا، تاہم سیاق و سباق کے نقطہ نظر سے وہاں تفاعلی روپ زیادہ بہتر تھی۔) مجھے حروف کی کمی کا سامنا ہے لہٰذا میں S_z کے امتیازی قیمت کے لئے m استعمال کروں گا، جیسا میں نے L_z کے لئے بھی کیا (بعض مصنفین، مکمل وضاحت کی خاطر اس مقام پر انہیں m_ℓ اور m_s لکھتے ہیں)۔

[۶۴] spin

وغیرہ۔ اس کے برعکس، (مثلاً ہائیڈروجن جوہر میں ایک الیکٹران کا) مدارچی زاویائی معیار حرکت کوانٹائی عدد l کوئی بھی عدد صحیح قیمت کا حامل ہو سکتا ہے، جو نظام چھیڑنے سے تبدیل ہو کر کسی ایک عدد صحیح سے کوئی دوسرا عدد صحیح ہو گا۔ تاہم کسی بھی ذرے کا s اٹل ہو گا، جس کی بنا پر نظریہ چکر نسبتاً سادہ ہے۔[۶۵]

سوال ۴.۲۵: اگر الیکٹران ایک کلاسیکی ٹھوس کرہ ہوتا جس کا رداس

$$r_c = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2} \tag{۴.۱۳۸}$$

(الیکٹران کے برقی میدان کی توانائی کو الیکٹران کی کمیت کا جواز لیتے ہوئے، آئنشٹائن کلیہ $E = mc^2$ سے **کلاسیکی الیکٹران رداس**[۶۶]، r_c، حاصل کیا جاتا ہے۔) اور زاویائی معیار حرکت $(1/2)\hbar$ ہوتا، تب "خط استوا" پر کسی نقطے کی رفتار ($\mathrm{m\,s^{-1}}$ میں) تلاش کریں۔ کیا حاصل جواب معنی خیز ہے؟ (در حقیقت، تجربات سے ثابت ہے کہ الیکٹران کا رداس r_c سے بہت کم ہے، جو اس نتیجہ کو مزید غلط قرار دیتا ہے۔)

چکر 1/2

سادہ مادہ (پروٹان، نیوٹران، الیکٹران) کے ساتھ ساتھ **کوارک**[۶۷] اور تمام **لپٹان**[۶۸] کیلئے $s = \frac{1}{2}$ ہو گا لہٰذا یہی اہم ترین صورت ہے۔ مزید 1/2 چکر سمجھنے کے بعد، زیادہ چکر کے ضوابط دریافت کرنا نسبتاً آسان کام ہے۔ صرف "دو" امتیازی تفاعلات پائے جاتے ہیں: پہلا $|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle$ (یا غیر رسمی طور پر $\uparrow$) ہے جو ہم **میدان چکر**[۶۹] پکارا جاتا ہے اور دوسرا $|\frac{1}{2}\,(-\frac{1}{2})\rangle$ ہے جو **مخالف میدان چکر**[۷۰] ($\downarrow$) کہلاتا ہے۔ انہیں کو اساس سمتیات لیتے ہوئے 1/2 چکر ذرے کے عمومی حال کو دو رکنی قالب قطار (یا **چکر کار**[۷۱]) سے ظاہر کیا جا سکتا ہے:

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\chi_+ + b\chi_- \tag{۴.۱۳۹}$$

---

[۶۵] یقیناً، ریاضیات کے نقطہ نظر سے 1/2 چکر، غیر حقیر سادہ ترین ممکنہ کوانٹائی نظام ہو سکتا ہے، چونکہ یہ صرف دو اساس حالات دیتا ہے۔ پیچیدگیوں اور باریکیوں سے لیس لامتناہی ابعادی ہلبرٹ فضا کی بجائے، ہم سادہ دو بُعدی سمتی فضا میں کام کرتے ہیں؛ غیر مانوس تفرقی مساوات اور ترنگ تفاعلات کی بجائے، ہمارا واسطہ 2×2 قالب اور 2 رکنی سمتیات سے ہوتا ہے۔ اسی لئے بعض مصنفین کوانٹائی میکانیات کا آغاز چکر کے مطالعہ سے کرتے ہیں۔ ہاں، ریاضیاتی سادگی سے تصوراتی غور و فکر میں مداخلت پیدا ہوتی ہے جس کو میں پسند نہیں کرتا ہوں۔

[۶۶] classicalelectronradius

[۶۷] quarks

[۶۸] leptons

[۶۹] spinup

[۷۰] spindown

[۷۱] spinor

جہاں

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{۴.۱۴۰}$$

ہم میدان چکر کو ظاہر کرتا ہے اور

$$\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{۴.۱۴۱}$$

مخالف میدان چکر کو ظاہر کرتا ہے۔

ساتھ ہی، عاملین چکر 2×2 قالب ہوں گے، جنہیں حاصل کرنے کی خاطر ہم ان کا اثر χ_+ اور χ_- پر دیکھتے ہیں۔ مساوات ۴.۱۳۵ درج ذیل کہتی ہے۔

$$\mathbf{S}^2\,\chi_+ = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_+ \quad \text{اور} \quad \mathbf{S}^2\,\chi_- = \frac{3}{4}\hbar^2\chi_- \tag{۴.۱۴۲}$$

ہم $\mathbf{S}^2$ کو (اب تک) نامعلوم ارکان کا قالب

$$\mathbf{S}^2 = \begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}$$

لکھ کر مساوات ۴.۱۴۲ کی بائیں مساوات کو درج ذیل لکھ سکتے ہیں

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} \hbar \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{یا} \quad \begin{pmatrix} c \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4}\hbar^2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

لہٰذا $c = \frac{3}{4}\hbar^2$ اور $e = 0$ ہو گا۔ مساوات ۴.۱۴۲ کی دائیں مساوات کے تحت

$$\begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{یا} \quad \begin{pmatrix} d \\ f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{3}{4}\hbar^2 \end{pmatrix}$$

لہٰذا $d = 0$ اور $f = \frac{3}{4}\hbar^2$ ہو گا۔ یوں درج ذیل ہو گا۔

$$\mathbf{S}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{۴.۱۴۳}$$

اسی طرح

$$\mathbf{S}_z\,\chi_+ = \frac{\hbar}{2}\chi_+, \quad \mathbf{S}_z\,\chi_- = -\frac{\hbar}{2}\chi_-, \tag{۴.۱۴۴}$$

سے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\mathbf{S}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{۴.۱۴۵}$$

ساتھ ہی، مساوات ۴.۱۳۶ ذیل کہتی ہے

$$\mathbf{S}_+\chi_- = \hbar\chi_+, \quad \mathbf{S}_-\chi_+ = \hbar\chi_-, \quad \mathbf{S}_+\chi_+ = \mathbf{S}_-\chi_- = 0,$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\mathbf{S}_+ = \hbar\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_- = \hbar\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix} \tag{۴.۱۴۶}$$

اب چونکہ $S_\pm = S_x \pm iS_y$ ہے لہٰذا $S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)$ اور $S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-)$ ہوں گے اور یوں درج ذیل ہو گا۔

$$\mathbf{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \tag{۴.۱۴۷}$$

چونکہ $\mathbf{S}_x$, $\mathbf{S}_y$, $\mathbf{S}_z$ تینوں میں $\hbar/2$ کا جزو ضربی پایا جاتا ہے لہٰذا انہیں زیادہ صاف روپ $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\sigma$ میں لکھا جا سکتا ہے جہاں درج ذیل ہوں گے۔

$$\sigma_x \equiv \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad \sigma_y \equiv \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, \quad \sigma_z \equiv \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{۴.۱۴۸}$$

یہ **پالی قالب چکر**[۴۲] ہیں۔ دھیان رکھیں کہ $\mathbf{S}_x$, $\mathbf{S}_y$, $\mathbf{S}_z$ اور $\mathbf{S}^2$ تمام ہرمشی ہیں (جیسا کہ انہیں ہونا بھی چاہیے کیونکہ یہ قابل مشاہدہ کو ظاہر کرتے ہیں)۔ اس کے برعکس $\mathbf{S}_+$ اور $\mathbf{S}_-$ غیر ہرمشی ہیں؛ یہ ناقابل مشاہدہ ہیں۔

یقیناً $\mathbf{S}_z$ کے امتیازی چکر کار درج ذیل ہوں گے۔

$$\chi_+ = \begin{pmatrix}1\\ 0\end{pmatrix}, \quad \left(+\frac{\hbar}{2}\ \text{امتیازی قیمت}\right); \quad \chi_- = \begin{pmatrix}0\\ 1\end{pmatrix}, \quad \left(-\frac{\hbar}{2}\ \text{امتیازی قیمت}\right) \tag{۴.۱۴۹}$$

عمومی حال χ (مساوات ۴.۱۳۹) میں ایک ذرہ کی S_z کی پیمائش، $|a|^2$ احتمال کے ساتھ $+\hbar/2$ یا $|b|^2$ احتمال کے ساتھ $-\hbar/2$ دے سکتی ہے۔ چونکہ صرف یہی ممکنات ہیں لہٰذا درج ذیل ہو گا (یعنی چکر کار لازماً معمول شدہ ہو گا)۔[۴۳]

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \tag{۴.۱۵۰}$$

---

[۴۲] Paulispinmatrices

[۴۳] لوگ عموماً کہتے ہیں کہ ہم میدان ذرہ ہونے کا احتمال $|a|^2$ ہے۔ ایسا کہنا درست نہیں۔ درحقیقت انہیں کہنا چاہتے ہیں کہ اگر S_z کی پیمائش کی جائے تب $\frac{\hbar}{2}$ نتیجہ حاصل ہونے کا احتمال $|a|^2$ ہو گا۔ (صفحہ ۱۱۲ پر حاشیہ ۴۲ دیکھیں۔)

تاہم اس کی بجائے آپ S_x کی پیمائش کر سکتے ہیں۔ اس کے کیا نتائج اور ان کے انفرادی احتمالات کیا ہونگے؟ عمومی شماریاتی مفہوم کے تحت ہمیں $\mathbf{S}_x$ کے امتیازی قیمتیں اور امتیازی چکر کار جاننے ہوں گے۔ امتیازی مساوات درج ذیل ہے۔

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \hbar/2 \\ \hbar/2 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \implies \lambda^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \implies \lambda = \pm\frac{\hbar}{2}$$

یہ ہرگز حیرت کی بات نہیں کہ S_x کی ممکنہ قیمتیں وہی ہیں جو S_z کی ہیں۔ امتیازی چکر کار کو ہمیشہ کی طرز پر حاصل کرتے ہیں:

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \pm\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \pm\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

لہٰذا $\beta = \pm\alpha$ ہو گا۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ $\mathbf{S}_x$ کے (معمول شدہ) امتیازی چکر کار درج ذیل ہوں گے۔

$$\chi_+^{(x)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \left(+\frac{\hbar}{2}\ \text{امتیازی قیمت}\right); \quad \chi_-^{(x)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \left(-\frac{\hbar}{2}\ \text{امتیازی قیمت}\right) \tag{۴.۱۵۱}$$

بطور ہرمشی قالب کے امتیازی سمتیات سے فضا کا احاطہ کرتے ہیں؛ عمومی چکر کار χ (مساوات ۴.۱۳۹) کو ان کا خطی مجموعہ لکھا جا سکتا ہے۔

$$\chi = \left(\frac{a+b}{\sqrt{2}}\right)\chi_+^{(x)} + \left(\frac{a-b}{\sqrt{2}}\right)\chi_-^{(x)} \tag{۴.۱۵۲}$$

اگر آپ S_x کی پیمائش کریں تب $+\hbar/2$ کے حصول کا احتمال $\frac{1}{2}|a+b|^2$ اور $-\hbar/2$ کے حصول کا احتمال $\frac{1}{2}|a-b|^2$ ہو گا۔ (تصدیق کیجیے کہ ان احتمالات کا مجموعہ 1 کے برابر ہے۔)

مثال ۴.۲: فرض کریں $\frac{1}{2}$ چکر کا ایک ذرہ درج ذیل حال میں ہے۔

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{pmatrix} 1+i \\ 2 \end{pmatrix}$$

بتائیں کہ S_z اور S_x کی پیمائش کرتے ہوئے $+\hbar/2$ اور $-\hbar/2$ حاصل کرنے کے احتمالات کیا ہونگے۔

حل: یہاں $a = (1+i)\sqrt{6}$ اور $b = \frac{2}{\sqrt{6}}$ ہے لہٰذا S_z کیلئے $+\frac{\hbar}{2}$ کے حصول کا احتمال

$$\left|\frac{1+i}{\sqrt{6}}\right|^2 = \frac{1}{3}$$

جبکہ $-\frac{\hbar}{2}$ حاصل کرنے کا احتمال

$$\left|\frac{2}{\sqrt{6}}\right|^2 = \frac{2}{3}$$

ہوگا۔اسی طرح S_x کیلئے $+\frac{\hbar}{2}$ کے حصول کا احتمال $5/6 \quad = \quad (1/2)\left|(3+i)/\sqrt{6}\right|^2$ جبکہ $-\frac{\hbar}{2}$ کے حصول کا احتمال $1/6 = (1/2)\left|(-1+i)/\sqrt{6}\right|^2$ ہوگا۔اتفاقاً S_x کی توقعاتی قیمت درج ذیل ہے

$$\frac{5}{6}\Big(+\frac{\hbar}{2}\Big) + \frac{1}{6}\Big(-\frac{\hbar}{2}\Big) = \frac{\hbar}{3}$$

جس کو ہم بلاواسطہ درج ذیل طریقہ سے بھی حاصل کر سکتے ہیں۔

$$\langle S_x \rangle = \chi^\dagger \, \mathbf{S}_x \, \chi = \begin{pmatrix} \frac{1-i}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1+i}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{3}$$

□

میں آپ کو $1/2$ چکر سے متعلق ایک فرضی پیمائشی تجربہ سے گزارتا ہوں جو ان تصورات کی وضاحت کرتا ہے جن پر باب ۱ میں تبصرہ کیا گیا۔ فرض کریں ہم ایک ذرہ سے آغاز کرتے ہیں جو حال ψ_+ میں پایا جاتا ہے۔ اب اگر کوئی سوال پوچھے، "اس ذرے کے زاویائی چکری معیار حرکت کا z جزو کیا ہے؟"، ہم پورے یقین کے ساتھ جواب دے سکتے ہیں کہ اس کا جواب $+\hbar/2$ ہے؛ چونکہ S_z کی پیمائش لازماً یہی قیمت دے گی۔ اب اگر اس کے بجائے، پوچھنے والا سوال کرے، "اس ذرے کے چکر زاویائی معیار حرکت کا x جزو کیا ہوگا؟"، تب ہم کہنے پر مجبور ہونگے کہ S_x کی پیمائش سے $+\hbar/2$ یا $-\hbar/2$ کے حصول کا احتمال آدھا آدھا ہے۔ گر سوال پوچھنے والا کلاسیکی ماہر طبیعیات یا (حصہ ۱.۲ کے نقطہ نظر سے) "حقیقت پسند" ہو تب وہ اس جواب کو ناکافی بلکہ غیر متعلقہ سمجھے گا: "کیا آپ کہنا چاہتے ہیں کہ آپ کو اس ذرے کا حقیقی حال معلوم نہیں ہے؟" نہیں میں نے ایسا نہیں کہا! مجھے ذرے کا حال ٹھیک معلوم ہے جو ψ_+ ہے۔ "تب ایسا کیوں ہے کہ آپ مجھے اس کے چکر کا x جزو نہیں بتا سکتے ہیں؟" اس لیے کہ اس کے چکر کا کوئی مخصوص x جزو نہیں پایا جاتا ہے۔ یقیناً، ایسا ہی ہونا چاہیے، اگر S_x اور S_z کی واضح قیمتیں ہوں تب اصول عدم یقینیت مطمئن نہیں ہوگا۔

یہ سنتے ہی سوال کرنے والا ذرے کے چکر کا x جزو خود پیمائش کرتا ہے؛ فرض کریں وہ $+\hbar/2$ قیمت حاصل کرتا ہے۔ (وہ خوشی سے چلا اٹھا ہے) "اس ذرے کی S_x قیمت ٹھیک $+\hbar/2$ ہے۔" جی آپ درست فرمارہے ہے ہیں، اب اس کی یہی قیمت ہے؛ جس سے یہ بالکل ثابت نہیں ہوتا کہ تجربہ سے قبل اس کی یہی قیمت تھی۔" ظاہر ہے، آپ بال کی کھال اتار رہے ہو۔ اور ہاں، آپ کے عدم یقینیت اصول کا کیا بنا؟ میں اب S_x اور S_z دونوں کو جانتا ہوں۔" جی نہیں آپ انہیں نہیں جانتے ہیں: آپ نے پیمائش کے دوران ذرے کا حال تبدیل کر دیا ہے۔ اب وہ $\chi_+^{(x)}$ میں ہے اور آپ اس کے S_x کی قیمت جانتے ہیں جبکہ S_z کی قیمت نہیں جانتے ہیں۔ "لیکن

S_x کی پیمائش کے دوران میں نے پوری کوشش کی کہ ذرے کا سکون خراب نہ ہو۔" اچھا اگر آپ میری بات پر یقین نہیں کرتے ہیں تو خود تصدیق کیجیے۔ آپ S_z کی پیمائش کریں اور دیکھیں نتیجہ کیا حاصل ہوتا ہے۔ (عین ممکن ہے کہ $\hbar/2$ حاصل ہو؛ جو میرے لیے شرمندگی کا باعث ہوگا؛ تاہم اس پورے عمل کو بار بار سر انجام دینے سے نصف مرتبہ $-\hbar/2$ حاصل ہوگا۔)

ایک عام آدمی، فلسفی یا کلاسیکی ماہر طبیعیات کے لئے ایسا فقرہ: "اس ذرے کا ٹھیک ٹھیک مقام (یا معیار حرکت یا چکر زاویائی معیار حرکت کا x جزو، وغیرہ) نہیں پایا جاتا ہے"، ایک گول مول جواب ہے جو آپ کی نااہلی کے سوا کچھ نظر نہیں آتا۔ حقیقت میں ایسا بالکل نہیں ہے۔ تاہم، اس کے اصل معنی، کسی ایسے شخص کو سمجھانا جس نے کوانٹائی میکانیات کا گہرا مطالعہ نہ کیا ہو، تقریباً ناممکن ہے۔ اگر آپ کی عقل دنگ رہ گئی ہو (اگر آپ کی عقل دنگ نہیں رہی تب اس کا مطلب ہوگا کہ آپ کو کوئی بات سمجھ ہی نہیں آئی) تب $1/2$ چکر نظام پر دوبارہ غور کریں جو کوانٹائی میکانیات کی تصوراتی پیچیدگیوں کو جاننے کی سادہ ترین مثال ہے۔

سوال ۴.۲۶:

ا. تصدیق کیجیے گا کہ چکری قالب (مساوات ۴.۱۴۵ اور مساوات ۴.۱۴۷) زاویائی معیار حرکت کے بنیادی مقلبیت رشتوں (مساوات ۴.۱۳۴) کو مطمئن کرتے ہیں۔

ب. دکھائیں کہ پالی چکری قالب (مساوات ۴.۱۴۸) قاعدہ ضرب

$$\sigma_j\sigma_k = \delta_{jk} + i\sum_{\ell}\epsilon_{jk\ell}\sigma_\ell \tag{۴.۱۵۳}$$

کو مطمئن کرتا ہے جہاں اشاریہ x ، y اور z کو ظاہر کرتے ہیں، اور $\epsilon_{jk\ell}$ علامت **لوی و چویتا**[47] ہے، جس کی قیمت $jk\ell = 123$ یا 231 یا 312 کی صورت میں $+1$ جبکہ $jk\ell = 132$ یا 213 یا 321 کی صورت میں -1 اور بصورت دیگر 0 ہوگی۔

سوال ۴.۲۷: ایک الیکٹران درج ذیل چکری حال میں ہے۔

$$\chi = A\begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix}$$

ا. معمول زنی مستقل A تعین کریں۔

ب. S_x ، S_y ، اور S_z کی توقعاتی قیمتیں تلاش کریں۔

ج. "عدم یقینیت" σ_{S_x} ، σ_{S_y} اور σ_{S_z} تلاش کریں۔ (دھیان رہے یہاں σ سے مراد معیاری انحراف ہے نہ کہ پالی قالب!)

د. تصدیق کیجیے گا کہ آپ کے نتائج تینوں اصول عدم یقینیت (مساوات ۴.۱۰۰ اور اس کے چکردار ترتیبی مرتب اجتماعات جہاں L کی جگہ S ہوگا) کے عین مطابق ہیں۔

---

[47] Levi-Civita

سوال ۴.۲۸: سب سے زیادہ عمومی معمول شدہ چکر کار χ (مساوات ۴.۱۳۹) کے لیے $\langle S_x \rangle$ ، $\langle S_y \rangle$ ، $\langle S_z \rangle$ ، $\langle S_x^2 \rangle$ ، $\langle S_y^2 \rangle$ ، اور $\langle S_z^2 \rangle$ ، تلاش کریں۔ تصدیق کیجیے کہ $\langle S^2 \rangle = \langle S_z^2 \rangle + \langle S_y^2 \rangle + \langle S_x^2 \rangle$ ہے۔

سوال ۴.۲۹:

ا. S_y کی امتیازی قیمتیں اور امتیازی چکر کار تلاش کریں۔

ب. عمومی حال χ (مساوات ۴.۱۳۹) میں پائے جانے والے ذرے کے S_y کی پیمائش سے کیا قیمتیں متوقع ہیں اور ہر قیمت کا احتمال کیا ہو گا؟ تصدیق کیجیے گا کہ تمام احتمال کا مجموعہ 1 ہے۔ دھیان رہے کہ a اور b غیر حقیقی ہو سکتے ہیں!

ج. S_y^2 کی پیمائش سے کیا قیمتیں متوقع ہیں اور ان کے احتمالات کیا ہوں گے؟

سوال ۴.۳۰: کسی اختیاری رخ $\boldsymbol{a}_\text{r}$ کے ہم رہ چکری زاویائی معیار حرکت کے اجزاء کا قالب $\mathbf{S}_r$ تیار کریں۔ کروی محدد استعمال کریں جہاں درج ذیل ہو گا۔

$$\boldsymbol{a}_\text{r} = \sin\theta\cos\phi\,\boldsymbol{i} + \sin\theta\sin\phi\,\boldsymbol{j} + \cos\theta\,\boldsymbol{k} \tag{۴.۱۵۴}$$

قالب $\mathbf{S}_r$ کی امتیازی قیمتیں اور (معمول شدہ) امتیازی چکر کار تلاش کریں۔ جواب:

$$\chi_+^{(r)} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi}\sin(\theta/2) \end{pmatrix}; \quad \chi_-^{(r)} = \begin{pmatrix} e^{-i\phi}\sin(\theta/2) \\ -\cos(\theta/2) \end{pmatrix}; \tag{۴.۱۵۵}$$

چونکہ آپ مرضی کے دوری جزو ضرب، مثلاً $e^{i\phi}$ ، سے ضرب دے سکتے ہو لہٰذا آپ کا جواب کچھ مختلف ہو سکتا ہے۔

سوال ۴.۳۱: ایک ذرہ جس کا چکر ایک (1) ہے کے لیے چکری قالب ($\mathbf{S}_x$ ، $\mathbf{S}_y$ اور $\mathbf{S}_z$) تیار کریں۔ اشارہ: S_z کے کتنے امتیازی حالات ہونگے؟ ہر (ان) حال پر S_z ، S_+ اور S_- کا عمل تعین کریں۔ نصاب میں $1/2$ چکر کے لیے مستعمل ترکیب استعمال کریں۔

۴.۴.۱ مقناطیسی میدان میں ایک الیکٹران

چکر کاٹتا ہوا بار دار ذرہ، مقناطیسی جفت قطب قائم کرتا ہے۔ اس کا **مقناطیسی جفت قطبی معیار اثر**[۴۵] $\boldsymbol{\mu}$ ، ذرے کی چکری زاویائی معیار حرکت $\mathbf{S}$ کا راست متناسب ہو گا:

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma\,\mathbf{S} \tag{۴.۱۵۶}$$

[۴۵] magneticdipolemoment

جہاں تناسبی مستقل γ **مسکن مقناطیسی نسبت**[۷۶] کہلاتا[۷۷] ہے۔ مقناطیسی میدان $\boldsymbol{B}$ میں رکھے گئے مقناطیسی جفت قطب پر قوت مروڑ $\boldsymbol{\mu} \times \boldsymbol{B}$ عمل کرتی ہے جو (مقناطیسی قطب نما کی سوئی طرح) اس کو میدان کے متوازی لانے کی کوشش کرتی ہے۔ اس قوت مروڑ کے ساتھ وابستہ توانائی درج ذیل ہو گی۔

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B} \tag{۴.۱۵۷}$$

لہٰذا مقناطیسی میدان $\boldsymbol{B}$ میں، ایک مقام پر ساکن[۷۸]، باردار چکر کھاتے ہوئے ذرے کی ہیملٹنی درج ذیل ہو گی۔

$$H = -\gamma \boldsymbol{B} \cdot \mathbf{S} \tag{۴.۱۵۸}$$

مثال ۴.۳: **لارمر استقبالی حرکت**[۷۹]: فرض کریں z رخ یکساں مقناطیسی میدان

$$\boldsymbol{B} = B_0 \boldsymbol{k} \tag{۴.۱۵۹}$$

میں $1/2$ چکر کا ساکن ذرہ پایا جاتا ہے۔ قالبی روپ میں ہیملٹنی (مساوات ۴.۱۵۸) درج ذیل ہو گی۔

$$\mathbf{H} = -\gamma B_0 \, \mathbf{S}_z = -\frac{\gamma B_0 \hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{۴.۱۶۰}$$

ہیملٹنی $\mathbf{H}$ کے امتیازی حالات وہی ہوں گے جو $\mathbf{S}_z$ کے تھے:

$$\begin{cases} \chi_+, & E_+ = -(\gamma B_0 \hbar)/2 \\ \chi_-, & E_- = +(\gamma B_0 \hbar)/2 \end{cases} \tag{۴.۱۶۱}$$

کلاسیکی صورت کی طرح یہاں بھی اقل توانائی اس صورت ہو گی جب جفت قطب معیار اثر، مقناطیسی میدان کا متوازی ہو۔

چونکہ ہیملٹنی غیر تابع وقت ہے لہٰذا تابع وقت مساوات شروڈنگر

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = \mathbf{H} \chi \tag{۴.۱۶۲}$$

---

[۷۶] gyromagnetic ratio

[۷۷] کلاسیکی طور پر ایک جسم، جس میں بار q اور کمیت m کی تقسیم یکساں ہو، کی مسکن مقناطیسی نسبت $q/2m$ ہو گی۔ چند وجوہات کی بنا، جن کی وضاحت صرف کوانٹائی نظریہ سے ممکن ہے، الیکٹران کی مسکن مقناطیسی نسبت کی قیمت کلاسیکی قیمت کے (تقریباً) ٹھیک دگنی $(\gamma = -e/m)$ ہے۔

[۷۸] اگر ذرہ کو حرکت کی اجازت ہو، تب حرکی توانائی پر بھی نظر رکھنی ہو گی، اور مزید اس کو قوت لورنز $(q\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B})$ کا بھی سامنا ہو گا، جس کو مخفی توانائی تفاعل سے حاصل نہیں کیا جا سکتا ہے، لہٰذا اس کو (اب تک متعارف) مساوات شروڈنگر میں نسب نہیں کیا جا سکتا ہے۔ اس صورت کو نمٹنے کا طریقہ میں جلد پیش کروں گا (سوال ۴.۵۹)، تاہم ابھی تصور کریں کہ ذرہ گھوم سکتا ہے لیکن بصورت دیگر ساکن ہے۔

[۷۹] Larmor precession

کے عمومی حل کو ساکن حالات کی صورت میں لکھا جا سکتا ہے:

$$\chi(t) = a\chi_{+}e^{-iE_{+}t/\hbar} + b\chi_{-}e^{-iE_{-}t/\hbar} = \begin{pmatrix} ae^{i\gamma B_0 t/2} \\ be^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix}$$

مستقلات a اور b کو ابتدائی معلومات:

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

سے حاصل کیا جاتا ہے (یقیناً $|a|^2 + |b|^2 = 1$ ہو گا)۔ ہم ان مستقلات کو

$$a = \cos(\alpha/2), \qquad b = \sin(\alpha/2)$$

لکھ سکتے ہیں[80] جہاں α ایک مقررہ زاویہ ہے جس کی اہمیت جلد عیاں ہو گی۔ یوں درج ذیل ہو گا۔

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2)e^{i\gamma B_0 t/2} \\ \sin(\alpha/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix} \tag{۴.۱۶۳}$$

آئیں $\mathbf{S}$ کی توقعاتی قیمت بطور تفاعل وقت حاصل کریں:

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \chi(t)^\dagger\, \mathbf{S}_x\, \chi(t) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} & \sin(\alpha/2)e^{i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix} \\ &\quad \times \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2)e^{i\gamma B_0 t/2} \\ \sin(\alpha/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \sin\alpha \cos(\gamma B_0 t) \end{aligned} \tag{۴.۱۶۴}$$

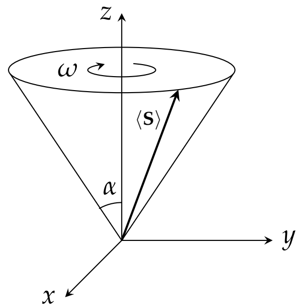
اسی طرح

$$\langle S_y \rangle = \chi(t)^\dagger\, \mathbf{S}_y\, \chi(t) = -\frac{\hbar}{2} \sin\alpha \sin(\gamma B_0 t) \tag{۴.۱۶۵}$$

اور درج ذیل ہو گا۔

$$\langle S_z \rangle = \chi(t)^\dagger\, \mathbf{S}_z\, \chi(t) = \frac{\hbar}{2} \cos\alpha \tag{۴.۱۶۶}$$

[80] یہاں a اور b کو حقیقی فرض کیا گیا ہے۔ آپ چاہیں تو مخلوط صورت کے لئے بھی ایسی مساواتیں ڈھونڈ سکتے ہیں، جو t کے ساتھ محض ایک مستقل جمع کرتا ہے۔



شکل ۴.۱۰: یکساں مقناطیسی میدان میں $\langle \mathbf{S} \rangle$ کی استقبالی حرکت۔

کلاسیکی صورت کی طرح (شکل ۴.۱۰) محور z کے ساتھ $\langle \mathbf{S} \rangle$ مستقل زاویہ α پر رہتے ہوئے محور کے گرد **لارمر تعدد**[۸۱]

$$\omega = \gamma B_0 \tag{۴.۱۶۷}$$

سے استقبالی حرکت[۸۲] کرتا ہے۔ یہ حیرت کی بات نہیں ہے؛ مسئلہ اہرنفسٹ (کی وہ صورت جسے سوال ۴.۲۰ میں اخذ کیا گیا) ضمانت دیتا ہے کہ کلاسیکی قوانین کے تحت $\langle \mathbf{S} \rangle$ ارتقا پائے گا۔ بہر حال اس عمل کو ایک مخصوص سیاق و سباق میں دیکھنا اچھا لگا۔ □

مثال ۴.۴: **تجربہ شٹرن و گرلاخ:**[۸۳] ایک غیر یکساں مقناطیسی میدان میں ایک مقناطیسی جفت قطب پر نہ صرف قوت مروڑ بلکہ قوت:[۸۴]

$$\boldsymbol{F} = \nabla(\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}) \tag{۴.۱۶۸}$$

بھی پایا جاتا ہے۔ اس قوت کو استعمال کرتے ہوئے کسی مخصوص سمت بند چکر کے ذرہ کو درج ذیل طریقہ سے علیحدہ کیا جا سکتا ہے۔ فرض کریں نسبتاً بھاری تعدیلی[۸۵] جوہروں کی شعاع y رخ حرکت کرتے ہوئے ایک غیر یکساں مقناطیسی میدان:

$$\boldsymbol{B}(x, y, z) = -\alpha x \boldsymbol{i} + (B_0 + \alpha z)\boldsymbol{k} \tag{۴.۱۶۹}$$

کے خطہ سے گزرتی ہے (شکل ۴.۱۱)، جہاں B_0 ایک طاقتور یکساں میدان ہے جبکہ مستقل α میدان کی یکسانیت سے معمولی انحراف کو ظاہر کرتا ہے۔ (حقیقت میں ہمیں صرف z جزو سے غرض ہے، لیکن بد قسمتی

---

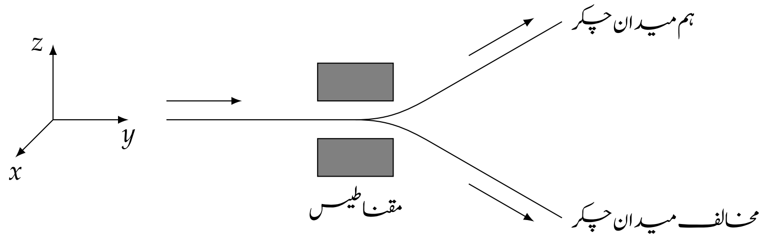
[۸۱] Larmor frequency

[۸۲] کلاسیکی صورت میں صرف توقعاتی قیمت نہیں بلکہ زاویائی معیار حرکت سمتیہ بھی مقناطیسی میدان میں لارمر تعدد سے استقبالی حرکت کرتا ہے۔

[۸۳] Stern-Gerlach experiment

[۸۴] توانائی (مساوات ۴.۱۵۷) کی منفی ڈھلوان کے برابر قوت $\boldsymbol{F}$ ہو گی۔

[۸۵] ہم تعدیلی جوہر کا انتخاب کر کے قوت لورنز کی بنا پر شعاع کے جھکنے سے چھٹکارا حاصل کرتے ہیں، اور بھاری جوہر اس لئے لیتے ہیں تا کہ ہم مقامی موجی اکٹھ مرتب کر کے حرکت کو کلاسیکی تصور کر سکیں۔ عملاً، شٹرن و گرلاخ تجربہ، آزاد الیکٹران کی شعاع کے لئے کارآمد نہیں ہو گا۔



شکل ۴.۱۱: شٹرن وگرلاخ آلہ۔

سے ایسا ممکن نہیں ہوگا؛ چونکہ برقناطیسی قانون $\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0$ کے تحت آپ چاہیں یا نہ چاہیں x جزو بھی پایا جائے گا۔) ان جوہروں پر قوت درج ذیل ہو گی۔

$$\boldsymbol{F} = \gamma\alpha(-S_x\boldsymbol{i} + S_z\boldsymbol{k})$$

تاہم B_0 کے گرد لارمر استقبالی حرکت کی بنا، S_x تیزی سے ارتعاش کرتے ہوئے صفر اوسط قیمت دیگا، لہٰذا z رخ خالص قوت درج ذیل ہو گی

$$F_z = \gamma\alpha S_z \tag{۴.۱۷۰}$$

اور شعاع کے چکری زاویائی معیار حرکت کے z جزو کی تناسب سے شعاع اوپر یا نیچے کی طرف جھکے گی۔ کلاسیکی طور پر (چونکہ S_z کوانٹاشدہ نہیں ہوگا) ہم توقع کرتے کہ z محور پر شعاع کی لمبائی پائی جاتی جبکہ حقیقتاً شعاع $2s + 1$ علیحدہ علیحدہ شعاعوں میں تقسیم ہو کر زاویائی معیار حرکت کے کوانٹازنی کا خوبصورت مظاہرہ کرتی ہے۔ (چاندی کو مثال بناتے ہوئے، چونکہ چاندی کے جوہر میں اندر جانب تمام الیکٹران جوڑیوں کی صورت میں یوں پائے جاتے ہیں کہ ان کے چکر اور مدارچی زاویائی معیار حرکت ایک دوسرے کو منسوخ کرتے ہیں، لہٰذا صرف بیرونی اکیلے الیکٹران کا چکر $s = 1/2$ ہی جوہر کا چکر ہو گا۔ یوں شعاع دو ٹکڑوں میں تقسیم ہو گی۔)

اب بالکل آخری قدم تک یہ دلیل خالصتاً کلاسیکی تھا جبکہ کوانٹائی میکانیات میں "قوت" کی کوئی جگہ نہیں پائی جاتی ہے، لہٰذا اسی مسئلے کو درج ذیل نقطہ نظر سے دیکھنا زیادہ بہتر ہوگا۔ ہم اس عمل کو اس حوالہ چھوکٹ کے نقطہ نظر سے دیکھتے ہیں جو شعاع کے ساتھ ساتھ چلتا ہو۔ اس چھوکٹ میں ہیملٹنی صفر سے آغاز کرتے ہوئے وقت T (جس دوران ذرہ مقناطیسی میدان سے گزرتا ہے) کے لیے بیدار ہو کر واپس گہری نیند سو جاتا ہے۔

$$H(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ -\gamma(B_0 + \alpha z)S_z & 0 \leq t \leq T \\ 0 & t > T \end{cases} \tag{۴.۱۷۱}$$

(جیسے ہم بتا چکے ہیں اس مسئلہ میں B کے x جزو کا کوئی کردار نہیں ہے لہذا میں اس تکلیف دہ جزو کو نظر انداز کرتا ہوں۔) فرض کریں جوہر کا چکر $1/2$ ہے اور یہ درج ذیل حال سے آغاز کرتا ہے۔

$$\chi(t) = a\chi_+ + b\chi_- \qquad\qquad t \leq 0$$

ہیملٹنی کی بیداری کے دوران $\chi(t)$ ہمیشہ کی طرح ارتقا پاتا ہے

$$\chi(t) = a\chi_+ e^{-iE_+t/\hbar} + b\chi_- e^{-iE_-t/\hbar} \qquad\qquad 0 \leq t \leq T$$

جہاں (مساوات ۴.۱۶۱ کے تحت)

$$E_\pm = \mp\gamma(B_0 + \alpha z)\frac{\hbar}{2} \tag{۴.۱۷۲}$$

ہوگا لہذا ($t \geq T$ کے لیے) یہ درج ذیل حال اختیار کرے گا۔

$$\chi(t) = \left(ae^{i\gamma TB_0/2}\chi_+\right)e^{i(\alpha\gamma T/2)z} + \left(be^{-i\gamma TB_0/2}\chi_-\right)e^{-i(\alpha\gamma T/2)z} \tag{۴.۱۷۳}$$

ان دونوں اجزاء کا اب z رخ میں معیار حرکت پایا جاتا ہے (مساوات ۳.۳۲ دیکھیں)؛ ہم میدان جزو کا معیار حرکت درج ذیل ہوگا

$$p_z = \frac{\alpha\gamma T\hbar}{2} \tag{۴.۱۷۴}$$

اور یہ مثبت z رخ حرکت کرے گا؛ مخالف میدان جزو کا معیار حرکت الٹ ہے اور یہ منفی z رخ حرکت کرے گا۔ یوں پہلے کی طرح شعاع دو حصوں میں تقسیم ہوگی۔ (چونکہ یہاں $S_z = \hbar/2$ اور $p_z = F_zT$ ہے لہذا مساوات ۴.۱۷۴ پہلے حاصل کردہ نتیجہ (مساوات ۴.۱۷۰) کے مطابق ہے۔)

کوانٹائی میکانیات کے فلسفہ میں شٹرن و گرلاخ تجربہ نے کلیدی کردار ادا کیا ہے۔ اس کے ذریعے کوانٹائی حالات تیار کیے جاتے ہیں اور یہ ایک مخصوص قسم کی کوانٹائی پیمائشوں پر روشنی ڈالنے کا ایک بہترین نمونہ ہے۔ ہم بیٹھے بیٹھے یہ فرض کر لیتے ہیں کہ ہم نظام کا ابتدائی حال جانتے ہیں (جس سے مساوات شروڈنگر کے ذریعے مستقبل کا حال جانا جا سکتا ہے)؛ تاہم، یہاں سوال پیدا ہوتا ہے کہ ہم ایک نظام کو کسی مخصوص حال میں ابتدائی طور پر کس طرح لاتے ہیں۔ آپ کسی مخصوص چکر کے جوہروں کی شعاع تیار کرنے کی خاطر غیر تقطیب شدہ شعاع کو شٹرن و گرلاخ مقناطیس سے گزار کر اخراجی شعاعوں میں سے وہ شعاع منتخب کرتے ہیں جو آپ کے مطلب کی ہو۔ اسی طرح اگر آپ جوہر کے چکر کا z جزو جاننا چاہیں تب آپ انہیں شٹرن و گرلاخ آلہ سے گزار کر دیکھتے ہیں کہ یہ بطور ہم میدان یا مخالف میدان شعاع خارج ہوتے ہیں۔ میں یہ دعویٰ نہیں کرتا کہ اس مقصد کے حصول کا یہ عمل سب سے بہتر طریقہ ہے، لیکن اتنا ضرور کہنا چاہوں گا کہ حالات کی تیاری اور پیمائش کے بارے میں سوچنے کی یہ ایک سادہ مثال ہے۔ □

سوال ۴.۳۲: لارمر استقبالی حرکت کی مثال ۴.۳ میں:

ا. وقت t پر چکری زاویائی معیار حرکت کی x رخ جزو کا پیمائشی نتیجہ $\hbar/2$ حاصل کرنے کا احتمال کیا ہو گا؟

ب. y رخ کے لیے اسی سوال کا جواب کیا ہو گا؟

ج. z رخ اسی سوال کا جواب کیا ہو گا؟

سوال ۴.۳۳: ایک ارتعاشی مقناطیسی میدان

$$\boldsymbol{B} = B_0 \cos(\omega t)\, \boldsymbol{k}$$

جہاں B_0 اور ω مستقل ہیں، میں ایک الیکٹران ساکن پایا جاتا ہے۔

ا. اس نظام کا ہیملٹنی قالب تیار کریں۔

ب. محور x کے لحاظ سے وقت $t = 0$ پر یہ الیکٹران ہم میدان حال (یعنی $\chi(0) = \chi_+^{(x)}$) سے آغاز کرتا ہے۔ مستقبل کسی بھی وقت کے لیے $\chi(t)$ تعین کریں۔ دھیان رہے کہ یہ ہیملٹنی تابع وقت ہے، لہٰذا آپ ساکن حالات سے $\chi(t)$ حاصل نہیں کر سکتے ہیں۔ خوش قسمتی سے آپ تابع وقت مساوات شروڈنگر (مساوات ۴.۱۶۲) کو بلاواسطہ حل کر سکتے ہیں۔

ج. S_x کی پیمائش سے $\hbar/2$ نتیجہ حاصل ہونے کا احتمال کیا ہو گا؟ جواب:

$$\sin^2\left(\frac{\gamma B_0}{2\omega}\sin(\omega t)\right)$$

د. S_x کو مکمل الٹا کرنے کے لیے اقل درکار میدان (B_0) کتنا ہو گا؟

۴.۴.۲ زاویائی معیار حرکت کا مجموعہ

فرض کریں ہمارے پاس $1/2$ چکر کے دو ذرات، مثلاً، ہائیڈروجن کے زمینی حال[۸۶] میں ایک الیکٹران اور ایک پروٹان، پائے جاتے ہیں۔ ان میں سے ہر ایک ہم میدان یا مخالف میدان ہو سکتا ہے لہٰذا کل چار ممکنات ہوں گی:[۸۷]

$$\uparrow\uparrow, \quad \uparrow\downarrow, \quad \downarrow\uparrow, \quad \downarrow\downarrow \tag{۴.۱۷۵}$$

جہاں پہلا تیر کا نشان (یعنی بایاں تیر) الیکٹران کو جبکہ دوسرا (یعنی دایاں) تیر کا نشان پروٹان کو ظاہر کرتا ہے۔ سوال: اس جوہر کا کل زاویائی معیار حرکت کیا ہو گا؟ ہم درج ذیل فرض کرتے ہیں۔

$$\mathbf{S} \equiv \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)} \tag{۴.۱۷۶}$$

[۸۶] میں انہیں زمینی حال میں اس مقصد سے رکھتا ہوں کہ نہ تو مداری زاویائی معیار حرکت ہو اور نہ ہی ہمیں اس کے بارے میں فکر مند ہونے کی ضرورت ہو۔

[۸۷] یہ کہنا زیادہ درست ہو گا کہ ہر ایک ذرہ ہم میدان اور مخالف میدان کا خطی مجموعہ ہو گا، اور مرکب نظام ان چار حالات کا خطی مجموعہ ہو گا۔

ان چار مرکب حالات میں سے ہر ایک، S_z کا امتیازی حال ہوگا؛ ان کے z اجزاء ایک دوسرے کے ساتھ سادہ طریقے سے جمع ہوتے ہیں:

$$\begin{aligned} S_z\chi_1\chi_2 &= (S_z^{(1)} + S_z^{(2)})\chi_1\chi_2 = (S_z^{(1)}\chi_1)\chi_2 + \chi_1(S_z^{(2)}\chi_2) \\ &= (\hbar m_1\chi_1)\chi_2 + \chi_1(\hbar m_2\chi_2) = \hbar(m_1 + m_2)\chi_1\chi_2 \end{aligned}$$

دیتے ہیں۔ یاد رہے $\mathbf{S}^{(1)}$ صرف χ_1 پر عمل کرتا ہے اور $\mathbf{S}^{(2)}$ صرف $\chi 2$ پر عمل کرتا ہے۔ یہ علامتیت زیادہ خوبصورت نہیں ہے لیکن اپنا کام کرپاتی ہے۔ یوں مرکب نظام کا کوانٹائی عدد m یہاں $m_1 + m_2$ ہوگا:

$$\begin{aligned} \uparrow\uparrow: &\quad m = m_{s1} + m_{s2} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \\ \uparrow\downarrow: &\quad m = m_{s1} + m_{s2} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \\ \downarrow\uparrow: &\quad m = m_{s1} + m_{s2} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 0 \\ \downarrow\downarrow: &\quad m = m_{s1} + m_{s2} = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = -1 \end{aligned}$$

پہلی نظر میں یہ ٹھیک معلوم نہیں ہوتا ہے: m کو چاہیے کہ $-s$ تا $+s$ عدد صحیح قدموں کے لحاظ سے بڑھے؛ ایسا لگتا ہے کہ $s = 1$ ہے لیکن یہاں ایک "اضافی" حال جس کا $m = 0$ ہے بھی پایا جاتا ہے۔ اس الجھن سے نکلنے کی خاطر ہم مساوات ۴.۱۴۶ استعمال کرتے ہوئے $\uparrow\uparrow$ حال پر عامل تقلیل $S_- = S_-^{(1)} + S_-^{(2)}$ لاگو کرتے ہیں۔

$$\begin{aligned} S_-(\uparrow\uparrow) &= (S_-^{(1)}\uparrow)\uparrow + \uparrow(S_-^{(2)}\uparrow) \\ &= (\hbar\downarrow)\uparrow + \uparrow(\hbar\downarrow) = \hbar(\downarrow\uparrow + \uparrow\downarrow) \end{aligned}$$

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ $s = 1$ کے تین حالات (علامتی روپ $|sm\rangle$ میں) درج ذیل ہونگے۔

$$\left\{\begin{aligned} |11\rangle &= \uparrow\uparrow \\ |10\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \\ |1-1\rangle &= \downarrow\downarrow \end{aligned}\right\} \quad s = 1 \text{ (سہ تا)} \tag{۴.۱۷۷}$$

(تصدیق کی خاطر $|10\rangle$ پر عامل تقلیل کا اطلاق کر کے دیکھیں؛ آپ کو کیا حاصل ہونا چاہیے؟ سوال ۴.۳۴-ا دیکھیں۔) اسی بنا پر اسے سہ تا[۸۸] ملاپ کہتے ہیں۔ ساتھ ہی، وہ عمودی حال جس کا $m = 0$ ہو $s = 0$ کا حامل ہوگا۔

$$\left\{|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)\right\} \qquad s = 0 \text{ (یک تا)} \tag{۴.۱۷۸}$$

[۸۸] triplet

اس حال پر عامل رفعت یا عامل تقلیل کے اطلاق سے صفر حاصل ہو گا (سوال ۴.۳۴-ب دیکھیں۔)

یوں میں دعویٰ کرتا ہوں کہ $1/2$ چکر کے دو ذرات کا کل چکر ایک (1) یا صفر (0) ہو گا، جو اس پر منحصر ہو گا کہ آیا وہ سہ تا یا یک تا تنظیم اختیار کرتے ہیں۔ اس کی تصدیق کی خاطر مجھے ثابت کرنا ہو گا کہ سہ تا حالات، S^2 کے امتیازی سمتیات ہیں جن کا امتیازی قیمت $2\hbar^2$ ہے، اور یک تا حالات، S^2 کا وہ امتیازی سمتیہ ہے جس کا امتیازی قیمت صفر ہے۔ اب درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$S^2 = (\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}) \cdot (\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}) = (S^{(1)})^2 + (S^{(2)})^2 + 2\,\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} \tag{۴.۱۷۹}$$

مساوات ۴.۱۴۵ اور مساوات ۴.۱۴۷ سے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}(\uparrow\downarrow) &= (S_x^{(1)}\uparrow)(S_x^{(2)}\downarrow) + (S_y^{(1)}\uparrow)(S_y^{(2)}\downarrow) + (S_z^{(1)}\uparrow)(S_z^{(2)}\downarrow) \\
&= \Big(\frac{\hbar}{2}\downarrow\Big)\Big(\frac{\hbar}{2}\uparrow\Big) + \Big(\frac{i\hbar}{2}\downarrow\Big)\Big(\frac{-i\hbar}{2}\uparrow\Big) + \Big(\frac{\hbar}{2}\uparrow\Big)\Big(\frac{-\hbar}{2}\downarrow\Big) \\
&= \frac{\hbar^2}{4}(2\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow)
\end{aligned}$$

اسی طرح درج ذیل بھی ہو گا۔

$$\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}(\downarrow\uparrow) = \frac{\hbar^2}{4}(2\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$$

یوں

$$\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}\,|10\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\frac{1}{\sqrt{2}}(2\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow + 2\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) = \frac{\hbar^2}{4}|10\rangle \tag{۴.۱۸۰}$$

اور

$$\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}\,|00\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\frac{1}{\sqrt{2}}(2\downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow - 2\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) = -\frac{3\hbar^2}{4}|00\rangle \tag{۴.۱۸۱}$$

ہوں گے۔

مساوات ۴.۱۷۹ پر دوبارہ غور کرتے ہوئے (اور مساوات ۴.۱۴۲ استعمال کرکے) ہم اخذ کرتے ہیں کہ

$$S^2|10\rangle = \Big(\frac{3\hbar^2}{4} + \frac{3\hbar^2}{4} + 2\frac{\hbar^2}{4}\Big)|10\rangle = 2\hbar^2|10\rangle \tag{۴.۱۸۲}$$

ہے لہٰذا $|10\rangle$ یقیناً S^2 کا امتیازی حال ہو گا جس کا امتیازی قیمت $2\hbar^2$ ہو گی؛ اور

$$S^2|00\rangle = \Big(\frac{3\hbar^2}{4} + \frac{3\hbar^2}{4} - 2\frac{3\hbar^2}{4}\Big)|00\rangle = 0 \tag{۴.۱۸۳}$$

ہے لہٰذا $|00\rangle$ یقیناً S^2 کا امتیازی حال ہوگا جس کا امتیازی قیمت 0 ہوگی۔ (میں آپ کے لئے سوال ۴.۳۴-ج چھوڑتا ہوں، جہاں آپ نے تصدیق کرنی ہوگی کہ $|11\rangle$ اور $|1\quad-1\rangle$ موزوں امتیازی قیمت کے، S^2 کے امتیازی تفاعلات ہیں۔)

ہم نے $1/2$ چکر اور $1/2$ چکر کو ملا کر 1 چکر اور 0 چکر حاصل کیا، جو ایک بڑے مسئلے کی سادہ ترین مثال ہے: اگر آپ s_1 چکر اور s_2 چکر کو ملائیں تب کل چکریں s کیا حاصل ہونگے؟[89] اس کا جواب[90] ہے کہ عدد صحیح قدم لیتے ہوئے (s_1+s_2) سے $s_2 > s_1$ کی صورت میں (s_2-s_1) تک؛ اور $s_1 > s_2$ کی صورت میں (s_1-s_2) تک، نیچے آتے ہوئے ہر چکر:

$$s = (s_1+s_2),\ (s_1+s_2-1),\ (s_1+s_2-2),\ \ldots,\ |s_1-s_2| \tag{۴.۱۸۴}$$

حاصل ہو گا۔ (اندازاً بات کرتے ہوئے، اعظم کل چکر اس صورت حاصل ہوگا جب انفرادی چکر ایک دوسرے کے متوازی ایک رخ صف بند ہوں، اور اقل اس صورت ہوگا جب یہ ایک دوسرے کے مخالف رخ صف بند ہوں۔) مثال کے طور پر، اگر آپ $3/2$ چکر کے ایک ذرہ کے ساتھ 2 چکر کا ایک ذرہ ملائیں تب آپ کو $7/2$، $5/2$، $3/2$، یا $1/2$ کل چکر حاصل ہو سکتا ہے جو تشکیل پر منحصر ہوگا۔ دوسری مثال پیش کرتا ہوں: حال $\psi_{n\ell m}$ کے ایک ہائیڈروجن جوہر کے الیکٹران کا خالص زاویائی معیار حرکت (چکر جمع مدارچی) $\ell + 1/2$ یا $\ell - 1/2$ ہوگا؛ اب اگر آپ پروٹان کے چکر کو بھی شامل کریں، تب جوہر کا کل زاویائی معیار حرکت کوانٹائی عدد $\ell + 1$، ℓ، یا $\ell - 1$ ہوگا (جہاں ℓ کو دو منفرد طریقوں سے حاصل کیا جا سکتا ہے، جس کا انحصار اس بات پر ہوگا کہ آیا کہ الیکٹران خود $\ell + 1/2$ تشکیل یا $\ell - 1/2$ تشکیل میں ہے)۔

(چونکہ z اجزاء آپس میں جمع ہوتے ہیں، لہٰذا صرف وہ مرکب حالات جن کے لئے $m_1 + m_2 = m$ ہو حصہ ڈال سکتے ہیں، لہٰذا) مجموعی حال $|sm\rangle$ جس کا کل چکر s ہو اور z جزو m ہو، مرکب حالات $|s_1m_1\rangle|s_2m_2\rangle$ کا خطی مجموعہ:

$$|sm\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C^{s_1s_2s}_{m_1m_2m}|s_1m_1\rangle|s_2m_2\rangle \tag{۴.۱۸۵}$$

ہو گا۔ مساوات ۴.۱۷۷ اور مساوات ۴.۱۷۸ اس عمومی روپ کے دو مخصوص صورت ہیں جہاں $s_1 = s_2 = 1/2$ ہے (میں نے یہاں غیر رسمی علامتیت $\uparrow = |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$، $\downarrow = |\frac{1}{2}(-\frac{1}{2})\rangle$ استعمال کیا ہے)۔ مستقلات $C^{s_1s_2s}_{m_1m_2m}$ کو **کلبش و گورڈن عددی سر**[91] کہتے ہیں۔ جدول ۴.۹ میں ان کی چند سادہ مثالیں پیش کی گئی ہے۔ مثال کے طور پر 1×2 جدول کے سایہ دار قطار میں درج ذیل پیش کیا گیا ہے۔

$$|30\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}|21\rangle|1-1\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}}|20\rangle|10\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}}|2-1\rangle|11\rangle$$

بالخصوص، اگر ایک ڈبہ میں (2 چکر اور 1 چکر کے) ساکن ذرات پائیں جاتے ہوں جن کا کل چکر 3، اور z جزو 0 ہو تب $S_z^{(1)}$ کی پیمائش ($1/5$ احتمال کے ساتھ) $\hbar$ یا ($3/5$ احتمال کے ساتھ) 0 یا ($1/5$ احتمال کے

---

[89] میں یہاں چکروں کی بات کر رہا ہوں، تاہم ان میں سے کوئی ایک (یا دونوں) مدارچی زاویائی معیار حرکت بھی ہو سکتے ہیں (جن کے لئے، البتہ، ہم حرف l استعمال کرتے)۔

[90] ثبوت کے لئے آپ کو اعلیٰ نصاب دیکھنا ہوگا۔

[91] Clebsch-Gordon coefficients

ساتھ) $\hbar-$ قیمت دے سکتی ہے۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ احتمالات کا مجموعہ 1 ہے۔ (کلیبش و گورڈن جدول کے کسی بھی قطار کے مربعوں کا مجموعہ 1 ہوگا۔)

ان جدول کو الٹ کر کے

$$|s_1 m_1\rangle |s_2 m_2\rangle = \sum_s C^{s_1 s_2 s}_{m_1 m_2 m} |sm\rangle \tag{۴.۱۸۶}$$

بھی استعمال کیا جا سکتا ہے۔ مثال کے طور پر $1 \times 3/2$ جدول میں سایہ دار صف درج ذیل کہتی ہے۔

$$|\tfrac{3}{2}\tfrac{1}{2}\rangle|10\rangle = \sqrt{\tfrac{3}{5}}|\tfrac{5}{2}\tfrac{1}{2}\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{15}}|\tfrac{3}{2}\tfrac{1}{2}\rangle - \sqrt{\tfrac{1}{3}}|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\rangle$$

اگر آپ ایک ڈبے میں $3/2$ چکر اور 1 چکر کے دو ذرات رکھیں اور آپ جانتے ہوں کہ پہلے کے لیے $m_1 = 1/2$ اور دوسرے کے لئے $m_2 = 0$ ہے (m لازماً $1/2$ ہوگا) اور آپ کل چکر s کی پیمائش کریں تب آپ ($3/5$ احتمال کے ساتھ) $5/2$ یا ($1/15$ احتمال کے ساتھ) $3/2$ یا ($1/3$ احتمال کے ساتھ) $1/2$ حاصل کر سکتے ہیں۔ اب بھی احتمالات کا مجموعہ 1 ہوگا (کلیبش و گورڈن جدول میں ہر صف کے مربع کا مجموعہ 1 ہوگا)۔

یہاں آپ کا کوئی قصور نہیں ہوگا اگر آپ کو یہ سب کچھ صوفیانہ اعداد و شمار نظر آنے لگا ہو۔ ہم اس کتاب میں کلیبش و گورڈن عددی سر کو زیادہ استعمال نہیں کریں گے۔ میں صرف چاہتا تھا کہ آپ ان سے واقف ہوں۔ ریاضیات کے نقطہ نظر سے یہ سب کچھ **عملی گروہی نظریہ**[۹۲] کا حصہ ہے۔

سوال ۴.۳۴:

ا. مساوات ۴.۱۷۷ میں دیے گئے $|10\rangle$ پر S_- کا اطلاق کر کے تصدیق کیجیے کہ $\sqrt{2}\hbar|1-1\rangle$ حاصل ہوگا۔

ب. مساوات ۴.۱۷۸ میں $|00\rangle$ پر $S_\pm$ کا اطلاع کر کے تصدیق کیجیے کہ 0 حاصل ہوگا۔

ج. دکھائی کہ $|11\rangle$ اور $|1\;-1\rangle$ (جنہیں مساوات ۴.۱۷۷ میں پیش کیا گیا ہے) S^2 کے موزوں امتیازی قیمت والے امتیازی تفاعلات ہیں۔

سوال ۴.۳۵: **کوارک**[۹۳] کا چکر $1/2$ ہے۔ تین کوارک مل کر ایک **بیریان**[۹۴] مرتب کرتے ہیں (مثلاً پروٹان یا نیوٹران)؛ دو کوارک (بلکہ یہ کہنا زیادہ درست ہوگا کہ ایک کوارک اور ایک ضد کوارک) مل کر ایک **میزان**[۹۵] مرتب کرتے ہیں (مثلاً **پایان**[۹۶] یا **کایان**[۹۷])۔ فرض کریں یہ کوارک زمینی حال میں ہیں (لہٰذا ان کا مداری زاویائی معیار حرکت صفر ہوگا)۔

ا. بیریان کے کیا ممکنہ چکر ہوں گے؟

---

[۹۲] grouptheory
[۹۳] quark
[۹۴] baryon
[۹۵] meson
[۹۶] pion
[۹۷] kion

جدول ۹.۴: کلیبش و گورڈن عددی سر۔ در حقیقت ہر عددی سر در، جذر کی علامت کے اندر ہو گا اور منفی عددی سر کی صورت میں منفی کی علامت جذر کے باہر ہو گی۔ یوں $-1/3$ سے مراد $-\sqrt{1/3}$ ہو گا۔

$j_1 \times j_2$

		J	J	...
		M	M	...
m_1	m_2	عددی سر		
m_1	m_2			
⋮	⋮			

$2 \times 1/2$

		5/2	
		5/2	
2	1/2	1	
		5/2	3/2
		3/2	3/2
2	1/2-	1/5	4/5
1	1/2	4/5	1/5-
		5/2	3/2
		1/2	1/2
1	1/2-	2/5	3/5
0	1/2	3/5	2/5-
		5/2	3/2
		1/2-	1/2-
0	1/2-	3/5	2/5
1-	1/2	2/5	3/5-
		5/2	3/2
		3/2-	3/2-
1-	1/2-	4/5	1/5
2-	1/2	1/5	4/5-
		5/2	
		5/2-	
2-	1/2-	1	

$3/2 \times 1/2$

		2	
		2	
3/2	1/2	1	
		2	1
		1	1
3/2	1/2-	1/4	3/4
1/2	1/2	3/4	1/4-
		2	1
		0	0
1/2	1/2-	1/2	1/2
1/2-	1/2	1/2	1/2-
		2	1
		1-	1-
1/2-	1/2-	3/4	1/4
3/2-	1/2	1/4	3/4-
		2	
		2-	
3/2-	1/2-	1	

$1/2 \times 1/2$

		1	
		1	
1/2	1/2	1	
		1	0
		0	0
1/2	1/2-	1/2	1/2
1/2-	1/2	1/2	1/2-
		1	
		1-	
1/2-	1/2-	1	

$1 \times 1/2$

		3/2	
		3/2	
1	1/2	1	
		3/2	1/2
		1/2	1/2
1	1/2-	1/3	2/3
0	1/2	2/3	1/3-
		3/2	1/2
		1/2-	1/2-
0	1/2-	2/3	1/3
1-	1/2	1/3	2/3-
		3/2	
		3/2-	
1-	1/2-	1	

$3/2 \times 1$

		5/2		
		5/2		
3/2	1	1		
		5/2	3/2	
		3/2	3/2	
3/2	0	2/5	3/5	
1/2	1	3/5	2/5-	
		5/2	3/2	1/2
		1/2	1/2	1/2
3/2	1-	1/10	2/5	1/2
1/2	0	3/5	1/15	1/3-
1/2-	1	3/10	8/15-	1/6
		5/2	3/2	1/2
		1/2-	1/2-	1/2-
1/2	1-	3/10	8/15	1/6
1/2-	0	3/5	1/15-	1/3-
3/2-	1	1/10	2/5-	1/2
		5/2	3/2	
		3/2-	3/2-	
1/2-	1-	3/5	2/5	
3/2-	0	2/5	3/5-	
		5/2		
		5/2-		
3/2-	1-	1		

2×1

		3		
		3		
2	1	1		
		3	2	
		2	2	
2	0	1/3	2/3	
1	1	2/3	1/3-	
		3	2	1
		1	1	1
2	1-	1/15	1/3	3/5
1	0	8/15	1/6	3/10-
0	1	6/15	1/2-	1/10
		3	2	1
		0	0	0
1	1-	1/5	1/2	3/10
0	0	3/5	0	2/5-
1-	1	1/5	1/2-	3/10
		3	2	1
		1-	1-	1-
0	1-	6/15	1/2	1/10
1-	0	8/15	1/6-	3/10-
2-	1	1/15	1/3-	3/5
		3	2	
		2-	2-	
1-	1-	2/3	1/3	
2-	0	1/3	2/3-	
		3		
		3-		
2-	1-	1		

1×1

		2		
		2		
1	1	1		
		2	1	
		1	1	
1	0	1/2	1/2	
0	1	1/2	1/2-	
		2	1	0
		0	0	0
1	1-	1/6	1/2	1/3
0	0	2/3	0	1/3-
1-	1	1/6	1/2-	1/3
		2	1	
		1-	1-	
0	1-	1/2	1/2	
1-	0	1/2	1/2-	
		2		
		2-		
1-	1-	1		

ب. میذان کے کیا ممکنہ چکر ہونگے؟

سوال ۴.۳۶:

ا. چکر 1 کا ایک ساکن ذرہ اور چکر 2 کا ایک ساکن ذرہ اس تشکیل میں پائے جاتے ہیں کہ ان کا کل چکر 3، اور z جزو $\hbar$ ہے۔ چکر 2 ذرہ کے زاویائی معیار حرکت کے z جزو کی پیمائش سے کیا قیمتیں حاصل ہو سکتی ہیں اور ہر ایک قیمت کا احتمال کیا ہو گا؟

ب. ہائیڈروجن جوہر کے حال ψ_{510} میں ایک مخالف میدان الیکٹران پایا جاتا ہے۔ اگر آپ (پروٹان کے چکر کو شامل کئے بغیر) صرف الیکٹران کے کل زاویائی معیار حرکت کے مربع کی پیمائش کر سکیں، تب کیا قیمتیں حاصل ہو سکتی ہیں اور ان کا انفرادی احتمال کیا ہو گا؟

سوال ۴.۳۷: S^2 اور $S_z^{(1)}$ کا مقلوب تعین کریں (جہاں $\mathbf{S} \equiv \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}$ ہو گا)۔ اپنے نتیجہ کو عمومیت دیتے ہوئے درج ذیل دکھائیں۔

$$[S^2, \mathbf{S}^{(1)}] = 2i\hbar(\mathbf{S}^{(1)} \times \mathbf{S}^{(2)}) \tag{۴.۱۸۷}$$

تبصرہ: میں یہاں بتانا چاہوں گا کہ چونکہ $S_z^{(1)}$ اور S^2 آپس میں غیر مقلوبی ہیں لہٰذا ہم ایسے حالات حاصل کرنے سے قاصر ہونگے جو دونوں کے بیک وقت امتیازی سمتیات ہوں۔ ہمیں S^2 کے امتیازی حالات تیار کرنے کی خاطر $S_z^{(1)}$ کے امتیازی حالات کے خطی مجموعے درکار ہونگے۔ (مساوات ۴.۱۸۵ میں) کلیبش و گورڈن عددی سر یہی کچھ کرتے ہیں۔ ساتھ ہی مساوات ۴.۱۸۷ سے ہم کہہ سکتے ہیں کہ S^2 کے ساتھ مجموعہ $\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}$ مقلوبی ہو گا، جو ہماری معلومات (مساوات ۴.۱۰۳) کی ایک مخصوص صورت ہے۔

اضافی سوالات برائے باب ۴

سوال ۴.۳۸: ایک ایسے **تین ابعادی ہارمونی مرتعش**[۹۸] پر غور کریں جس کا مخفیہ درج ذیل ہے۔

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \tag{۴.۱۸۸}$$

ا. کارتیسی محدد میں علیحدگی متغیرات استعمال کرتے ہوئے اس کو تین یک بُعدی مرتعش میں تبدیل کر کے، موخر الذکر کے بارے میں اپنی معلومات استعمال کرتے ہوئے، اجازتی توانائیاں تعین کریں۔ جواب:

$$E_n = (n + 3/2)\hbar\omega \tag{۴.۱۸۹}$$

ب. E_n کی انحطاطیت $d_{(n)}$ تعین کریں۔

---

[۹۸] three-dimensional harmonic oscillator

سوال ۴.۳۹: چونکہ (مساوات ۴.۱۸۸ میں دیا گیا) تین ابعادی ہارمونی مرتعش مخفیہ کروی تشاکلی ہے لہٰذا اس کی مساوات شروڈنگر کو کارتیسی محدد کے علاوہ کروی محدد میں بھی علیحدگی متغیرات سے حل کیا جا سکتا ہے۔ طاقتی تسلسل کی ترکیب استعمال کرتے ہوئے رداسی مساوات حل کریں۔ عددی سروں کا کلیہ توالی حاصل کرتے ہوئے اجازتی توانائیاں تعین کریں۔ اپنے جواب کی تصدیق مساوات ۴.۱۸۹ کے ساتھ کریں۔

سوال ۴.۴۰:

ا. (ساکن حالات کے لئے) درج ذیل **تین ابعادی مسئلہ وریل**[99] ثابت کریں۔

$$2\langle T\rangle = \langle \boldsymbol{r}\cdot\nabla V\rangle \tag{۴.۱۹۰}$$

اشارہ: سوال ۳.۳۱ دیکھیے گا۔

ب. مسئلہ وریل کو ہائیڈروجن کے لیے استعمال کرتے ہوئے درج ذیل دکھائیں۔

$$\langle T\rangle = -E_n; \quad \langle V\rangle = 2E_n \tag{۴.۱۹۱}$$

ج. مسئلہ وریل کو (سوال ۴.۳۸ کے) تین ابعادی ہارمونی مرتعش پر لاگو کر کے درج ذیل دکھائیں۔

$$\langle T\rangle = \langle V\rangle = E_n/2 \tag{۴.۱۹۲}$$

سوال ۴.۴۱: اس سوال کو صرف اس صورت میں حل کرنے کی کوشش کریں اگر آپ سمتی علم الاحصاء سے واقف ہوں۔ سوال ۱.۱۴ کو عمومیت دیتے ہوئے تین ابعادی **رو احتمال**[100] کی درج ذیل تعریف پیش کی جاتی ہے۔

$$\mathbf{J} \equiv \frac{i\hbar}{2m}(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi) \tag{۴.۱۹۳}$$

ا. دکھائے کہ $\mathbf{J}$ **استمراری مساوات**[101]:

$$\nabla\cdot\mathbf{J} = -\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 \tag{۴.۱۹۴}$$

کو مطمئن کرتا ہے جو مقامی **بقا احتمال**[102] کو بیان کرتی ہے۔ یوں (مسئلہ پھیلاو کے تحت) درج ذیل ہو گا

$$\int_S \mathbf{J}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{a} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V |\Psi|^2\,\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r} \tag{۴.۱۹۵}$$

جہاں V ایک مقررہ حجم اور S اس کی سرحدی سطح ہے۔ دوسرے الفاظ میں، کسی سطح سے احتمال کا اخراج، اس بند حجم میں ذرہ پائے جانے کے احتمال میں کمی کے برابر ہو گا۔

---

[99] three-dimensional virial theorem
[100] probability current
[101] continuity equation
[102] conservation of probability

ب. حال $n=2$ ، $\ell=1$ ، $m=1$ میں پائے جانے والے ہائیڈروجن کے لیے $\mathbf{J}$ تلاش کریں۔ جواب:

$$\frac{\hbar}{64\pi m a^5} r e^{-r/a} \sin\theta \boldsymbol{a}_\phi$$

ج. اگر ہم کمیت کے بہاؤ کو $m\mathbf{J}$ سے ظاہر کریں تب زاویائی معیار حرکت درج ذیل ہو گا۔

$$\mathbf{L} = m\int (\boldsymbol{r}\times\mathbf{J})\,\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r}$$

اس کو استعمال کرتے ہوئے حال ψ_{211} کے لیے L_z کا حساب کر کے نتیجہ پر تبصرہ کریں۔

سوال ۴.۴۲: (غیر تابع وقت) **معیار حرکی فضا تفاعل موج**[103] کی تعریف تین ابعاد میں مساوات ۳.۵۴ کی قدرتی عمومیت سے پیش کرتے ہیں۔

$$\phi(\boldsymbol{p}) \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int e^{-i(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})/\hbar}\psi(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r} \tag{۴.۱۹۶}$$

ا. زمینی حال میں ہائیڈروجن (مساوات ۴.۸۰) کے لیے معیار حرکی فضا تفاعل موج تلاش کریں۔ اشارہ: کروی محدد استعمال کرتے ہوئے قطبی محور کو $\boldsymbol{p}$ کے رخ رکھیں اور θ کا تکمل پہلے حاصل کریں۔ جواب:

$$\phi(\boldsymbol{p}) = \frac{1}{\pi}\Big(\frac{2a}{\pi}\Big)^{3/2}\frac{1}{[1+(ap/\hbar)^2]^2} \tag{۴.۱۹۷}$$

ب. تصدیق کیجیے گا کہ $\phi(\boldsymbol{p})$ معمول شدہ ہے۔

ج. زمینی حال میں ہائیڈروجن کے لیے $\psi(\boldsymbol{p})$ استعمال کرتے ہوئے $\langle p^2\rangle$ کا حساب لگائیں۔

د. اس حال میں حرکی توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہو گی؟ اپنے جواب کو E_1 کی مضرب کی صورت میں لکھ کر تصدیق کریں کہ یہ مسئلہ وریل (مساوات ۴.۱۹۱) کا بلا تضاد ہے۔

سوال ۴.۴۳:

ا. حال $n=3$ ، $l=2$ ، $m=1$ میں ہائیڈروجن کے لیے فضائی تفاعل موج (ψ) تیار کریں۔ اپنی جواب کو صرف r ، θ ، ϕ اور a (رداس بوہر) کے تفاعل کی صورت میں لکھیں۔ کسی دوسرے متغیر (ρ ، z ، وغیرہ) یا تفاعلات (Y ، v ، وغیرہ) یا مستقلات (A ، c_0 ، وغیرہ) یا تفرقات استعمال کرنے کی اجازت نہیں ہے (ہاں π e اور 2 ، وغیرہ استعمال کیے جا سکتے ہیں)۔

ب. r ، θ اور ϕ کے لحاظ سے موزوں تکملات حاصل کر کے تصدیق کریں کہ یہ تفاعل موج معمول شدہ ہے۔

ج. اس حال میں r^s کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔ s کی کس سعت (مثبت اور منفی) کے لیے جواب متناہی ہو گا؟

---

[103] momentum space wave function

سوال ۴.۴۴:

ا. حال $n = 4$ ، $\ell = 3$ ، $m = 3$ کے لیے ہائیڈروجن کا تفاعل موج تیار کریں۔ اپنے جواب کو کروی محدد r ، θ اور ϕ کا تفاعل لکھیں۔

ب. اس حال میں r کی توقعاتی قیمت کیا ہو گی؟ (تکملات کو جدول سے دیکھنے کی اجازت ہے۔)

ج. اس حال میں ایک جوہر کے قابل مشاہدہ $L_x^2 + L_y^2$ کی پیمائش سے کیا قیمت (یا قیمتیں) متوقع ہے اور ہر ایک کا انفرادی احتمال کیا ہو گا؟

سوال ۴.۴۵: ہائیڈروجن کے زمینی حال میں، مرکزہ کے اندر الیکٹران پایا جانے کا احتمال کیا ہو گا؟

ا. پہلے فرض کرتے ہوئے کہ تفاعل موج (مساوات ۴.۸۰) $r = 0$ تک درست ہے اور مرکزہ کا رداس b لیتے ہوئے بالکل ٹھیک ٹھیک جواب حاصل کریں۔

ب. اپنے جواب کو ایک چھوٹے عدد $\epsilon \equiv 2b/a$ کے طاقتی تسلسل کے روپ میں لکھ کر دکھائیں کہ قلیل رتبی جزو کعبی: $P \approx (4/3)(b/a)^3$ ہو گا۔ دکھائیں کہ $b \ll a$ کی صورت میں (جیسا کہ ہے) یہ تخمین موزوں ہو گی۔

ج. اس کے برعکس ہم فرض کر سکتے ہیں کہ مرکزہ کے (نہایت چھوٹے) حجم میں $\psi(r)$ تقریباً مستقل ہو گا لہٰذا $P \approx (4/3)\pi b^3 \left|\psi(0)\right|^2$ لیا جا سکتا ہے۔ تصدیق کیجیے گا کہ اب بھی وہی جواب حاصل ہو گا۔

د. $b \approx 10^{-15}\,\mathrm{m}$ اور $a \approx 0.5 \times 10^{-10}\,\mathrm{m}$ لیتے ہوئے P کی اندازاً اعدادی قیمت حاصل کریں۔ یہ الیکٹران کا، اندازاً وہ وقت ہو گا جو وہ مرکزہ کے اندر گزارتا ہے۔

سوال ۴.۴۶:

ا. کلیہ توالی (مساوات ۴.۷۶) استعمال کرتے ہوئے تصدیق کریں کہ $\ell = n - 1$ کی صورت میں رداسی تفاعل موج درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$R_n(n-1) = N_n r^{n-1} e^{-r/na}$$

بلاواسطہ تکمل کرتے ہوئے مستقل معمول زنی N_n تعین کریں۔

ب. حال $\psi_n(n-1)m$ روپ کے حالات کے لیے $\langle r \rangle$ اور $\langle r^2 \rangle$ کا حساب لگائیں۔

ج. دکھائیں کے ان حالات کی $r(\sigma_r)$ میں "عدم یقینیت" $\langle r \rangle / \sqrt{2n+1}$ ہو گی۔ دھیان رہے کہ n بڑھانے سے r میں نسبتی وسعت گھٹتی ہے (یوں n کی بڑی قیمت کے لیے یہ نظام کلاسیکی نظر آنا شروع ہوتا ہے، جس میں دائری مدار پہچانے جا سکتے ہیں)۔ رداسی تفاعل امواج کا خاکہ، n کی کئی قیمتوں کے لیے، بناتے ہوئے اس نکتہ کی وضاحت کریں۔

سوال ۴.۴۷: **ہم مکان طیفی خطوط:**[104] کلیہ رڈبرگ (مساوات ۴.۹۳) کے تحت ابتدائی اور اختتامی حالات

---

[104] coincident spectral lines

کے صدر کوانٹائی اعداد ہائیڈروجن طیف کے لکیر کا طول موج تعین کرتے ہیں۔ ایسی دو منفرد جوڑیاں $\{n_i, n_f\}$ تلاش کریں جو λ کی ایک ہی قیمت دیتے ہوں، مثلاً $\{6851, 6409\}$ اور $\{15283, 11687\}$ ایسا کرتے ہیں۔ آپ کو ان کے علاوہ جوڑیاں تلاش کرنی ہو گی۔

سوال ۴.۴۸: قابل مشاہدہ $A = x^2$ اور $B = L_z$ پر غور کریں۔

ا. $\sigma_A \sigma_B$ کے لیے عدم یقینیت کا اصول تیار کریں۔

ب. حال $\psi_{n\ell m}$ میں ہائیڈروجن کے لیے σ_B کی قیمت معلوم کریں۔

ج. اس حال میں $\langle xy \rangle$ کے بارے میں آپ کیا نتیجہ اخذ کرتے ہیں۔

سوال ۴.۴۹: ایک الیکٹران درج ذیل چکری حال میں ہے۔

$$\chi = A \begin{pmatrix} 1 - 2i \\ 2 \end{pmatrix}$$

ا. χ کی معمول زنی کرتے ہوئے مستقل A تعین کریں۔

ب. اس الیکٹران کے S_z کی پیمائش سے کیا قیمتیں متوقع ہیں اور ہر قیمت کا انفرادی احتمال کیا ہو گا؟ S_z کی توقعاتی قیمت کیا ہو گی؟

ج. اس الیکٹران کے S_x کی پیمائش کی جائے تو کیا قیمتیں متوقع ہونگی اور ہر قیمت کا انفرادی احتمال کیا ہو گا؟ S_x کی توقعاتی قیمت کیا ہو گی؟

د. اس الیکٹران کے S_y کی پیمائش سے کیا قیمتیں متوقع ہیں اور ان قیمتوں کا انفرادی احتمال کیا ہو گا؟ S_y کی توقعاتی قیمت کیا ہو گی؟

سوال ۴.۵۰: فرض کریں ہم جانتے ہیں کہ $1/2$ چکر کے دو ذرات یکتا تنظیم (۴.۱۷۸) میں پائے جاتے ہیں۔ مان لیں کہ اکائی سمتیہ $\boldsymbol{a}_\text{a}$ کے رخ ذرہ 1 کے چکری زاویائی معیار حرکت کا جزو $S_a^{(1)}$ ہے۔ اسی طرح مان لیں کہ اکائی سمتیہ $\boldsymbol{a}_\text{b}$ کے رخ ذرہ 2 کے چکری زاویائی معیار حرکت کا جزو $S_b^{(2)}$ ہے۔ درج ذیل دکھائیں جہاں $\boldsymbol{a}_\text{a}$ اور $\boldsymbol{a}_\text{b}$ کے بیچ زاویہ θ ہے۔

$$\langle S_a^{(1)} S_b^{(2)} \rangle = -\frac{\hbar^2}{4} \cos\theta \tag{۴.۱۹۸}$$

سوال ۴.۵۱:

ا. کلیبش گورڈن عددی سر کو، $s_1 = 1/2$ اور s_2 کچھ بھی لیتے ہوئے، حاصل کریں۔ اشارہ: آپ درج ذیل میں A اور B عددی سروں کی وہ قیمت تلاش کرنا چاہتے ہیں جن کے لیے S^2 کا امتیازی حال $|sm\rangle$ ہو۔

$$|sm\rangle = A|\tfrac{1}{2}\tfrac{1}{2}\rangle|s_2(m-\tfrac{1}{2})\rangle + B|\tfrac{1}{2}(-\tfrac{1}{2})\rangle|s_2(m+\tfrac{1}{2})\rangle$$

مساوات ۴.۱۷۹ تا مساوات ۴.۱۸۲ کی ترکیب استعمال کریں۔ اگر آپ یہ جاننے سے قاصر ہوں کہ (مثلاً) $S_x^{(2)}$ حال $|s_2 m_2\rangle$ کو کیا کرتا ہے، تب مساوات ۴.۱۳۶ سے رجوع کریں اور مساوات ۴.۱۴۷ سے قبل جملہ دوبارہ پڑھیں۔ جواب:

$$A = \sqrt{\frac{s_2 \pm m + 1/2}{2s_2 + 1}}; \qquad B = \pm\sqrt{\frac{s_2 \mp m + 1/2}{2s_2 + 1}}$$

جہاں $s = s_2 \pm 1/2$ علامتیں تعین کرتا ہے۔

ب. اس عمومی نتیجے کی تصدیق جدول ۴.۹ میں تین یا چار اندراج کے لئے کریں۔

سوال ۴.۵۲: (ہمیشہ کی طرح S_z کی امتیازی حالات کو اساس لیتے ہوئے) $3/2$ چکر ذرہ کے لیے قالب S_x تلاش کریں۔ امتیازی مساوات حل کرتے ہوئے S_x کی امتیازی قیمتیں معلوم کریں۔

سوال ۴.۵۳: مساوات ۴.۱۴۵ اور مساوات ۴.۱۴۷ میں $1/2$ چکر، سوال ۴.۳۱ میں 1 چکر، اور سوال ۴.۵۲ میں $3/2$ چکر کے قالبوں کی بات کی گئی۔ ان نتائج کو عمومیت دیتے ہوئے اختیاری s چکر کے لیے چکری قالب تلاش کریں۔ جواب:

$$\boldsymbol{S}_z = \hbar\begin{pmatrix} s & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s-1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & s-2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -s \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{S}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & b_s & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ b_s & 0 & b_{s-1} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & b_{s-1} & 0 & b_{s-2} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_{s-2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & b_{-s+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & b_{-s+1} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{S}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -ib_s & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ ib_s & 0 & -ib_{s-1} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & ib_{s-1} & 0 & -ib_{s-2} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & ib_{s-2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -ib_{-s+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & ib_{-s+1} & 0 \end{pmatrix}$$

جہاں $b_j \equiv \sqrt{(s+j)(s+1-j)}$ ہے۔

سوال ۴.۵۴: کروی ہارمونیات کے لیے معمول زنی ضربیہ درج ذیل طریقے سے حاصل کریں۔ ہم حصہ ۴.۱.۲ سے درج ذیل جانتے ہیں۔

$$Y_\ell^m = B_\ell^m e^{im\phi} P_\ell^m(\cos\theta)$$

آپ کو جزو B_ℓ^m تعین کرنا ہو گا (جس کی قیمت تلاش کیے بغیر میں نے ذکر مساوات ۴.۳۲ میں کیا)۔ مساوات ۴.۱۲۰، مساوات ۴.۱۲۱، اور مساوات ۴.۱۳۰ استعمال کرتے ہوئے B_ℓ^m کی صورت میں B_ℓ^{m+1} کا کلیہ توالی دریافت کریں۔ اس کو m کے ریاضی ماخوذ کی ترکیب سے حل کرتے ہوئے B_ℓ^m کو مجموعی مستقل $C(\ell)$ تک حل کریں۔ آخر میں سوال ۴.۲۲ کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے اس مستقل کی قیمت تلاش کریں۔ شریک لیژانڈر تفاعل کے تفرق کا درج ذیل کلیہ مددگار ثابت ہو سکتا ہے:

$$(1-x^2)\frac{\mathrm{d}P_\ell^m}{\mathrm{d}x} = \sqrt{1-x^2}P_\ell^{m+1} - mxP_\ell^m \tag{۴.۱۹۹}$$

سوال ۴.۵۵: ہائیڈروجن جوہر میں ایک الیکٹران درج ذیل چکر اور فضائی حال کے ملاپ میں پایا جاتا ہے۔

$$R_{21}(\sqrt{1/3}Y_1^0\chi_+ + \sqrt{2/3}Y_1^1\chi_-)$$

ا. مدارچی زاویائی معیار حرکت کے مربع (L^2) کی پیمائش سے کیا قیمتیں حاصل ہو سکتی ہیں؟ ہر قیمت کا انفرادی احتمال کیا ہو گا؟

ب. یہی کچھ مدارچی زاویائی معیار حرکت کے z جزو (L_z) کے لیے معلوم کریں۔

ج. یہی کچھ چکری زاویائی معیار حرکت کے مربع (S^2) کے لیے معلوم کریں۔

د. یہی کچھ چکری زاویائی معیار حرکت کے z جزو (S_z) کے لیے کریں۔ کل زاویائی معیار حرکت $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ لیں۔

ھ. آپ J^2 کی پیمائش کرتے ہیں۔ آپ کیا قیمتیں حاصل کر سکتے ہیں ان کا انفرادی احتمال کیا ہو گا؟

و. یہی کچھ J_z کے لیے معلوم کریں۔

ز. آپ ذرے کے مقام کی پیمائش کرتے ہیں۔ اس کی r ، θ ، ϕ پر پائے جانے کی کثافت احتمال کیا ہو گی؟

ح. آپ چکر کا z جزو اور منبع سے فاصلہ کی پیمائش کرتے ہیں (یاد رہے کہ یہ ہم آہنگ قابل مشاہدہ ہیں)۔ ایک ذرے کا رداس r پر اور ہم میدان ہونے کی کثافت احتمال کیا ہو گی؟

سوال ۴.۵۶:

ا. دکھائیں کہ ایک تفاعل $f(\phi)$ جس کو ٹیلر تسلسل میں پھیلایا جا سکتا ہے، کے لیے درج ذیل ہو گا

$$f(\phi+\varphi) = e^{\frac{iL_z\varphi}{\hbar}}f(\phi)$$

(جہاں φ اختیاری زاویہ ہے)۔اسی کی بنا پر $L_z/\hbar$ کو z کے گرد **گھومنے کا پیداکار**[105] کہتے ہیں۔اشارہ: مساوات ۴.۱۲۹ استعمال کریں اور سوال ۳.۳۹ سے مدد لیں۔ زیادہ عمومی $\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{a}_{\text{n}}/\hbar$ ہو گا جو $\boldsymbol{a}_{\text{n}}$ رخ گھومنے کا پیداکار ہے، یعنی $e^{(i\mathbf{L}\cdot\boldsymbol{a}_{\text{n}}\varphi/\hbar)}$ محور $\boldsymbol{a}_{\text{n}}$ کے گرد (دائیں ہاتھ سمت میں) زاویہ φ گھومنے کا اثر پیدا کرتا ہے۔ چکر کی صورت میں گھومنے کا پیداکار $\mathbf{S}\cdot\boldsymbol{a}_{\text{n}}/\hbar$ ہو گا۔بالخصوص $1/2$ چکر کے لیے

$$\chi' = e^{i(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}_{\text{n}})\varphi/2}\chi \tag{۴.۲۰۰}$$

ہمیں چکر کاروں کے گھومنے کے بارے میں بتاتی ہے۔

ب. محور x کے لحاظ سے 180° گھومنے کو ظاہر کرنے والا (2×2) قالب تیار کریں اور دکھائیں کہ یہ، ہماری توقعات کے عین مطابق، ہم میدان (χ_+) کو خلاف میدان (χ_-) میں تبدیل کرتا ہے۔

ج. محور y کے لحاظ سے 90° گھومنے والا قالب تیار کریں اور (χ_+) پر اس کا اثر دیکھیں؟

د. محور z کے لحاظ سے 360° زاویہ گھومنے کو ظاہر کرنے والا قالب تیار کریں۔ کیا جواب آپ کی توقعات کے مطابق ہے؟ ایسا نہ ہونے کی صورت میں اس کی مضمرات پر تبصرہ کریں۔

ھ. درج ذیل دکھائیں۔

$$e^{i(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}_{\text{n}})\varphi/2} = \cos(\varphi/2) + i(\boldsymbol{a}_{\text{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma})\sin(\varphi/2) \tag{۴.۲۰۱}$$

سوال ۴.۵۷: زاویائی معیار حرکت کے بنیادی مقلبیت رشتے (مساوات ۴.۹۹) امتیازی قیمتوں کی (عدد صحیح قیمتوں کے ساتھ ساتھ) نصف عدد صحیح قیمتوں کی اجازت دیتے ہیں، جبکہ مدارچی زاویائی معیار حرکت کی صرف عدد صحیح قیمتیں پائی جاتی ہیں۔ خصوصی روپ $\mathbf{L} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ پر ضرور کوئی اضافی شرط مسلط ہے جو نصف عددی قیمتوں کو خارج کرتی ہے۔ ہم مستقل a جس کا بُعد لمبائی ہو (مثلاً، ہائیڈروجن پر بات کرتے ہوئے رداس بوہر) لیتے ہوئے درج ذیل عاملین متعارف کرتے ہیں۔

$$q_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}[x + (a^2/\hbar)p_y]; \qquad p_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}[p_x - (\hbar/a^2)y];$$

$$q_2 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}[x - (a^2/\hbar)p_y]; \qquad p_2 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}[p_x + (\hbar/a^2)y]$$

ا. تصدیق کیجیے کہ $[q_1, p_1] = [q_2, p_2] = i\hbar$؛ $[q_1, q_2] = [p_1, p_2] = 0$ ہیں۔یوں مقام اور معیار حرکت کی باضابطہ مقلبیت رشتوں کو تمام q اور p مطمئن کرتے ہیں اور اشاریہ 1 کے عاملین اشاریہ 2 کے عاملین کے ہم آہنگ ہیں۔

ب. درج ذیل دکھائیں۔

$$L_z = \frac{\hbar}{2a^2}(q_1^2 - q_2^2) + \frac{a^2}{2\hbar}(p_1^2 - p_2^2)$$

[105] generator of rotation

ج. تصدیق کیجیے کہ ایسا ہارمونی مرتعش جس کی کمیت $m = \hbar/a^2$ اور تعدد $\omega = 1$ ہو کے لیے $L_z = H_1 - H_2$ ہوگا جہاں H ہیملٹنی ہیں۔

د. ہم جانتے ہیں ہارمونی مرتعش ہیملٹنی کی امتیازی قیمتیں $(n + 1/2)\hbar\omega$ ہیں جہاں $n = 0, 1, 2, 3, \cdots$ ہو گا(حصہ ۲.۳.۱ کے الجبرائی نظریہ میں ہیملٹنی کے روپ اور باضابطہ مقلبیت رشتوں سے یہ اخذ کیا گیا)۔ اس کو استعمال کرتے ہوئے اخذ کریں کہ L_z کی امتیازی قیمتیں لازماً عدد صحیح ہوں گے۔

سوال ۴.۵۸: عمومی حال (مساوات ۴.۱۳۹) میں $1/2$ چکر کے S_z اور S_y کی اقل عدم یقینیت کے لئے شرط معلوم کریں (یعنی، فقرہ $\sigma_{S_x}\sigma_{S_y} \geq (\hbar/2)|\langle S_z\rangle|$ میں مساوی $(=)$ صورت تلاش کریں)۔ جواب: عمومیت کھوئے بغیر ہم a کو حقیقی منتخب کر سکتے ہیں؛ تب عدم یقینیت کی اقل قیمت اس صورت حاصل ہو گی جب b خالص حقیقی یا خالص خیالی ہو۔

سوال ۴.۵۹: کلاسیکی برقی حرکیات میں ایک ذرہ، جس کا بار q ہو اور جو برقی میدان $\boldsymbol{E}$ اور مقناطیسی میدان $\boldsymbol{B}$ میں سمتی رفتار $\boldsymbol{v}$ کے ساتھ حرکت کرتا ہو، پر قوت عمل کرتا ہے جسے **لورینز قوت کا قانون**[106]:

$$\boldsymbol{F} = q(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}) \tag{۴.۲۰۲}$$

پیش کرتا ہے۔ اس قوت کو کسی بھی غیر سمتی مخفی توانائی تفاعل کی ڈھلوان کی صورت میں نہیں لکھا جا سکتا ہے لہٰذا مساوات شروڈنگر اپنی اصلی روپ (مساوات ۱.۱) میں اس کو قبول نہیں کر سکتی ہے۔ تاہم اس کا نفیس روپ:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi \tag{۴.۲۰۳}$$

کوئی مسئلہ نہیں کھڑا کرتا ہے۔ کلاسیکی ہیملٹنی درج ذیل ہو گی

$$H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})^2 + q\varphi \tag{۴.۲۰۴}$$

جہاں $\boldsymbol{A}$ سمتی مخفیہ $(\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A})$ اور φ غیر سمتی مخفیہ $(\boldsymbol{E} = -\nabla\varphi - \partial\boldsymbol{A}/\partial t)$ ہے، لہٰذا مساوات شروڈنگر (باضابطہ متبادل $(\boldsymbol{p} \to ((\hbar/i)\nabla))$ پر کر کے) درج ذیل لکھی جا سکتی ہے۔

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \Big[\frac{1}{2m}(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\boldsymbol{A})^2 + q\varphi\Big]\Psi \tag{۴.۲۰۵}$$

ا. درج ذیل دکھائیں۔

$$\frac{\mathrm{d}\langle r\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{m}\langle(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})\rangle \tag{۴.۲۰۶}$$

---

[106] Lorentz force law

ب. ہمیشہ کی طرح (مساوات ۱.۳۲ دیکھیں) ہم $\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{r}\rangle}{\mathrm{d}t}$ کو $\langle \boldsymbol{v}\rangle$ لیتے ہیں۔ درج ذیل دکھائیں۔

$$m\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{v}\rangle}{\mathrm{d}t}=q\langle \boldsymbol{E}\rangle+\frac{q}{2m}\langle(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{p})\rangle-\frac{q^2}{m}\langle(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\rangle \tag{۴.۲۰۷}$$

ج. بالخصوص موجی اکٹھ کے حجم پر یکساں $\boldsymbol{E}$ اور $\boldsymbol{B}$ میدانوں کی صورت میں درج ذیل دکھائیں۔

$$m\frac{\mathrm{d}\langle \boldsymbol{v}\rangle}{\mathrm{d}t}=q(\boldsymbol{E}+\langle \boldsymbol{v}\rangle\times\boldsymbol{B}) \tag{۴.۲۰۸}$$

اس طرح $\langle \boldsymbol{v}\rangle$ کی توقعاتی قیمت عین لورینز قوت کی مساوات کے تحت حرکت کرے گی، جیسا ہم مسئلہ اہرنفسٹ کے تحت توقع کر سکتے تھے۔

سوال ۴.۶۰: [پس منظر جاننے کے لیے سوال ۴.۵۹ پر نظر ڈالیں۔] فرض کریں

$$\boldsymbol{A}=\frac{\boldsymbol{B_0}}{2}(x\boldsymbol{j}-y\boldsymbol{i}) \quad \text{اور} \quad \varphi=Kz^2$$

ہیں جہاں B_0 اور K مستقلات ہیں۔

ا. میدان $\boldsymbol{E}$ اور $\boldsymbol{B}$ تلاش کریں۔

ب. ان میدان اس ذرہ کے امتیازی تفاعلات اور اجازتی توانائیاں تلاش کریں جس کی کمیت m اور بار q ہو۔ جواب:

$$E(n_1,n_2)=(n_1+\tfrac{1}{2})\hbar\omega_1+(n_2+\tfrac{1}{2})\hbar\omega,\quad (n_1,n_2=0,1,2,3,\cdots) \tag{۴.۲۰۹}$$

جہاں $\omega_1\equiv q\boldsymbol{B_0}/m$ اور $\omega_2\equiv\sqrt{2qK/m}$ ہیں۔ تبصرہ: $K=0$ کی صورت میں یہ **سائیکلوٹران حرکت**[107] کا کوانٹائی مماثل ہوگا؛ کلاسیکی سائیکلوٹران تعدد ω_1 ہوگا اور یہ z رخ میں آزاد ذرہ ہوگا۔ اجازتی توانائیاں $(n_1+\frac{1}{2})\hbar\omega_1$ **لنڈو سطحیں**[108] کہلاتی ہیں۔

سوال ۴.۶۱: [پس منظر جاننے کی خاطر سوال ۴.۵۹ پر نظر ڈالیں۔] کلاسیکی برقی حرکیات میں مخفیے $\boldsymbol{A}$ اور φ یکتا طور پر تعین نہیں کیے جا سکتے ہیں؛ طبعی مقداریں میدان $\boldsymbol{E}$ اور $\boldsymbol{B}$ ہوں گے۔

ا. دکھائیں کہ مخفیے

$$\varphi'\equiv\varphi-\frac{\partial\Lambda}{\partial t},\qquad \boldsymbol{A}'\equiv\boldsymbol{A}+\nabla\Lambda \tag{۴.۲۱۰}$$

(جہاں Λ مقام اور وقت کا ایک اختیاری حقیقی تفاعل ہے) بھی وہی میدان دیتے ہیں جو φ اور $\boldsymbol{A}$ دیتے ہیں۔ مساوات ۴.۲۱۰ **ماپ تبادلہ**[109] کہلاتی ہے اور ہم کہتے ہیں کہ یہ نظریہ **ماپ غیر متغیر**[110] ہے۔

---

[107] cyclotronmotion
[108] LandauLevels
[109] gaugetransformation
[110] gaugeinvariant

ب. کوانٹائی میکانیات میں مخفیہ کا کردار زیادہ براہ راست پایا جاتا ہے اور ہم جاننا چاہیں گے کہ آیا یہ نظریہ ماپ غیر متغیر رہتا ہے یا نہیں۔ دکھائیں کہ ماپ تبادلہ مخفیے φ' اور $\boldsymbol{A}$ لیتے ہوئے درج ذیل

$$\Psi' \equiv e^{iq\Lambda/\hbar}\Psi \tag{۴.۲۱۱}$$

مساوات شروڈنگر (مساوات ۴.۲۰۵) کو مطمئن کرتا ہے۔ چونکہ Ψ اور Ψ' میں صرف ہیّتی جز وضربی کا فرق پایا جاتا ہے لہٰذا یہ ایک ہی طبعی حال[111] کو ظاہر کرتے ہیں اور یوں یہ نظریہ ماپ غیر متغیر ہو گا (مزید معلومات کے لیے حصہ ۱۰.۲.۳ سے رجوع کیجیے گا)۔

سوال ۴.۶۲: ہائیڈروجنی جوہروں کے چند ابتدائی تفاعلات موج جدول ۴.۸ میں پیش کیے گئے ہیں۔ انہیں مساوات ۴.۸۹ کی مدد سے حاصل کریں۔ آپ کو Z خود شامل کرنا ہو گا۔

[111] یعنی $\langle \boldsymbol{r} \rangle$ ، $\mathrm{d}\langle \boldsymbol{r} \rangle / \mathrm{d}t$ ، وغیرہ تبدیل نہیں ہوں گے۔ چونکہ Λ مقام کا تابع ہے، $\langle \boldsymbol{p} \rangle$ (جہاں $\boldsymbol{p}$ کو عامل $(\hbar/i)\nabla$ ظاہر کرتا ہے) تبدیل ہو گا، تاہم جیسا ہم نے مساوات ۴.۲۰۶ میں دیکھا، $\boldsymbol{p}$ موجودہ سیاق و سباق میں میکانی معیار حرکت $(m\boldsymbol{v})$ کو ظاہر نہیں کرتا ہے (لگرانج میکانیات میں اس کو **با ضابطہ معیار حرکت** کہتے ہیں)۔

باب ۵

متماثل ذرات

۵.۱ دو ذروی نظام

ایک ذرے کے لیے (فی الحال چکر کو نظر انداز کرتے ہوئے) $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ فضائی محدد، $\boldsymbol{r}$ ، اور وقت t ، کا تفاعل ہو گا۔ دو ذروی نظام کا حال پہلے ذرے کے محدد، $(\boldsymbol{r}_1)$ ، دوسرے ذرے کے محدد، $(\boldsymbol{r}_2)$ ، اور وقت کا تابع ہو گا۔

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, t) \tag{۵.۱}$$

یہ وقت کے لحاظ سے (ہمیشہ کی طرح) مساوات شروڈنگر

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

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

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 + V(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, t) \tag{۵.۳}$$

(ذرہ 1 اور ذرہ 2 کے محدد کے لحاظ سے تفرقات کو، ∇ کے زیر نوشت میں، بالترتیب 1 اور 2 سے ظاہر کیا گیا ہے۔) ذرہ 1 کا حجم $\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r}_1$ اور ذرہ 2 کا حجم $\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r}_2$ میں پائے جانے کا احتمال درج ذیل ہو گا:

$$\left|\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, t)\right|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2 \tag{۵.۴}$$

جہاں شماریاتی مفہوم معمول کے مطابق کارآمد ہو گا۔ ظاہر ہے کہ ψ کی معمول زنی درج ذیل کے تحت کرنی ہو گی۔

$$\int \left|\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, t)\right|^2 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_1 \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2 = 1 \tag{۵.۵}$$

غیر تابع وقت مخفیہ کے لیے علیحدگی متغیرات سے حلوں کا مکمل سلسلہ:

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, t) = \psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)e^{-iEt/\hbar} \tag{۵.۶}$$

حاصل ہو گا جہاں فضائی تفاعل موج (ψ) غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر:

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

کو مطمئن کرتا ہے جس میں E نظام کی کل توانائی ہے۔

سوال ۵.۱: عام طور پر باہم عمل مخفیہ کا انحصار صرف دو ذرات کے بیچ سمتیہ $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ پر ہو گا۔ ایسی صورت میں متغیرات $\boldsymbol{r}_1$ اور $\boldsymbol{r}_2$ کی جگہ نئے متغیرات $\boldsymbol{r}$ اور (مرکز کمیت) $\boldsymbol{R} \equiv \frac{(m_1\boldsymbol{r}_1+m_2\boldsymbol{r}_2)}{m_1+m_2}$ کے استعمال سے مساوات شروڈنگر دو حصوں میں علیحدہ ہو گی۔

ا. درج ذیل دکھائیں

$$\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{R} + \frac{\mu}{m_1}\boldsymbol{r}, \qquad \boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{R} - \frac{\mu}{m_2}\boldsymbol{r}$$
$$\nabla_1 = \frac{\mu}{m_2}\nabla_R + \nabla_r, \qquad \nabla_2 = \frac{\mu}{m_1}\nabla_R - \nabla_r$$

جہاں

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

نظام کی **تخفیف شدہ کمیت**[1] ہے۔

ب. دکھائیں کہ (غیر تابع وقت) مساوات شروڈنگر درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

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

ج. متغیرات کو $\psi(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}) = \psi_R(\boldsymbol{R})\psi_r(\boldsymbol{r})$ لیتے ہوئے علیحدہ کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ ψ_R یک ذروی مساوات شروڈنگر، جس میں کمیت m کی بجائے کل کمیت $(m_1 + m_2)$، مخفیہ صفر ہو اور نظام کی توانائی E_R ہو، کو مطمئن کرتا ہے، جبکہ ψ_r یک ذروی مساوات شروڈنگر، جس میں کمیت m کی بجائے تخفیف شدہ کمیت، مخفیہ $V(\boldsymbol{r})$ اور توانائی E_r ہو، کو مطمئن کرتا ہے۔ کل توانائی ان کا مجموعہ: $E = E_R + E_r$ ہو گا۔ اس سے ہمیں یہ معلوم ہوتا ہے کہ مرکز کمیت ایک آزاد ذرہ کی مانند حرکت کرتا ہے اور (ذرہ 1 کے لحاظ سے ذرہ 2 کی) نسبتی حرکت ایسی ہو گی جیسا مخفیہ V میں تخفیف شدہ کمیت کا ایک ذرہ کرتا ہے۔ کلاسیکی میکانیات میں بالکل یہی تحلیل ہو گی، جو دو جسمی مسئلہ کو معادل یک جسمی مسئلہ میں تبدیل کرتی ہے۔

---

[1] reduced mass

سوال ۵.۲: یوں ہائیڈروجن کے مرکزہ کی حرکت کو درست کرنے کے لیے ہم الیکٹران کی کمیت کی جگہ تخفیف شدہ کمیت استعمال کرتے ہیں (سوال ۵.۱)۔

ا. ہائیڈروجن کی بندشی توانائی (مساوات ۴.۷۷) جاننے کی خاطر μ کی جگہ m استعمال کرنے سے پیدا فی صد سہو، (دو بامعنی ہندسوں تک) تلاش کریں۔

ب. ہائیڈروجن اور ڈیوٹریم کے لیے سرخ بالمر لکیروں $(n = 3 \rightarrow n = 2)$ کے طول موج کے بیچ فاصلہ (فرق) تلاش کریں۔

ج. **پازیٹرانیم**[۲] کی بندشی توانائی تلاش کریں۔ پروٹان کی جگہ ضد الیکٹران رکھنے سے پازیٹرانیم پیدا ہوگا۔ ضد الیکٹران کی کمیت الیکٹران کی کمیت کے برابر جبکہ اس کا بار الیکٹران کے بار کے مخالف ہے۔

د. فرض کریں آپ **میونی ہائیڈروجن**[۳] (جس میں الیکٹران کی جگہ ایک میون ہوگا) کی وجودیت کی تصدیق کرنا چاہتے ہیں۔ میون کا بار الیکٹران کے بار کے برابر ہے، تاہم اس کی کمیت الیکٹران سے 206.77 گنا زیادہ ہے۔ آپ "لیمان α" لکیر $(n = 2 \rightarrow n = 1)$ کے لیے کس طول موج پر نظر رکھیں گے؟

سوال ۵.۳: کلورین کے دو قدرتی ہم جا Cl^{35} اور Cl^{37} پائے جاتے ہیں۔ دکھائیں کہ HCl کا لرزشی طیف قریب قریب جوڑیوں پر مشتمل ہوگا جن میں فاصلہ $\Delta\nu = 7.51 \times 10^{-4}\nu$ ہوگا جہاں ν خارجی نور یہ کا تعدد ہے۔ (اشارہ: اس کو ایک ہارمونی مرتعش تصور کریں جہاں $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ ہوگا، جہاں μ تخفیف شدہ کمیت (مساوات ۵.۸) ہے، جبکہ دونوں ہم جا کا k ایک جیسا تصور کریں۔)

۵.۱.۱ بوسن اور فرمیان

فرض کریں ذرہ 1 (یک ذروی) حال $\psi_a(\boldsymbol{r})$ اور ذرہ 2 حال $\psi_b(\boldsymbol{r})$ میں پائے جاتے ہیں۔ (یاد رہے، میں یہاں چکر کو نظر انداز کر رہا ہوں۔) ایسی صورت میں $\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ سادہ حاصل ضرب ہوگا۔[۴]

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi_a(\boldsymbol{r}_1)\psi_b(\boldsymbol{r}_2) \tag{۵.۹}$$

ہم یہاں فرض کر رہے ہیں ان ذرات کو علیحدہ علیحدہ پہچانا جا سکتا ہے؛ ورنہ یہ کہنا کہ ذرہ 1 حال ψ_a اور ذرہ 2 حال ψ_b میں ہے، بے معنی ہوگا؛ ہم صرف اتنا کہہ پاتے کہ ایک ذرہ حال ψ_a اور دوسرا ذرہ حال ψ_b میں پایا جاتا ہے، تاہم ہم نہیں جان پاتے کہ کونسا ذرہ کس حال میں ہے۔ کلاسیکی میکانیات میں یہ ایک بے

---

[۲] positronium

[۳] muonic hydrogen

[۴] در حقیقت، ضروری نہیں کہ ہر دو ذروی تفاعل موج دو ایک ذروی تفاعلات موج کا حاصل ضرب ہو۔ ایسے حال جنہیں **ہمبستہ حال** (entangled states) کہتے ہیں کو اس طرح دو حصوں میں علیحدہ نہیں کیا جا سکتا ہے۔ تاہم اگر ذرہ 1 حال a اور ذرہ 2 حال b میں ہوں، تب دو ذروی حال حاصل ضرب ہوگا۔ میں جانتا ہوں، آپ سوچ رہے ہیں: "ذرہ 1 کیسے کسی حال میں اور ذرہ 2 کسی دوسرے حال میں نہیں ہوں گے؟" اس کی کلاسیکی مثال یک تا چکری تشاکل ہے (مساوات ۴.۱۷۸)؛ میں آپ کو اکیلے ذرہ 1 کا حال نہیں بتا سکتا ہوں، چونکہ یہ ذرہ 2 کے حال کے ساتھ ہمبستہ ہے۔ اگر 2 کی پیمائش کی جائے اور نتیجہ ہم میدان چکر ہو تب 1 ہم میدان چکر اور 2 مخالف میدان چکر ہوگا۔

وقوفانہ اعتراض ہو گا: اصولاً ایک ذرے کو سرخ رنگ اور دوسرے کو نیلا رنگ دے کر آپ انہیں ہر وقت پہچان سکتے ہیں۔ کوانٹائی میکانیات میں صورتحال بنیادی طور پر مختلف ہے: آپ کسی الیکٹران کو سرخ رنگ نہیں دے سکتے اور نہ ہی اس پر کوئی پرچی چسپاں کر سکتے ہیں۔ حقیقت یہ ہے کہ تمام الیکٹران بالکل متماثل ہوتے ہیں جبکہ کلاسیکی اشیاء میں اتنی یکسانیت کبھی نہیں ہوتی۔ ایسا نہیں ہے کہ ہم الیکٹرانوں کو پہچاننے سے قاصر ہیں بلکہ حقیقت یہ ہے کہ "یہ" الیکٹران اور "وہ" الیکٹران کہنا کوانٹائی میکانیات میں بے معنی ہیں؛ ہم صرف "ایک" الیکٹران کی بات کر سکتے ہیں۔

ایسے ذرات کی موجودگی کو، جو اصولاً غیر ممیز ہوتے ہیں، کوانٹائی میکانیات خوش اسلوبی سے سموتی ہے: ہم ایسا غیر مشروط تفاعل موج تیار کرتے ہیں جو یہ بات نہیں کرتا کہ کونسا ذرہ کس حال میں ہے۔ ایسا درج ذیل دو طریقوں سے کرنا ممکن ہے۔

$$\psi_{\pm}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = A[\psi_a(\boldsymbol{r}_1)\psi_b(\boldsymbol{r}_2) \pm \psi_b(\boldsymbol{r}_1)\psi_a(\boldsymbol{r}_2)] \tag{۵.۱۰}$$

یوں یہ ذرہ دو اقسام کے متماثل ذرات کا حامل ہو گا: **بوسن**[۵] جن کے لئے ہم مثبت علامت استعمال کرتے ہیں اور **فرمیان**[۶] جن کے لئے ہم منفی علامت استعمال کرتے ہیں۔ بوسن کی مثالیں نوریہ اور میزون ہیں جبکہ فرمیان کی مثالیں پروٹان اور الیکٹران ہیں۔ ایسا ہے کہ

$$\left.\begin{array}{r}\text{عدد صحیح چکر کے تمام ذرات بوسن جبکہ}\\ \text{نصف عدد صحیح چکر کے تمام ذرات فرمیان ہوں گے۔}\end{array}\right\} \tag{۵.۱۱}$$

چکر اور **شماریات** کے مابین یہ تعلق (جیسا کہ ہم دیکھیں گے، فرمیان اور بوسن کے شماریاتی خواص ایک دوسرے سے بہت مختلف ہوتے ہیں) کو اضافی کوانٹائی میکانیات میں ثابت کیا جا سکتا ہے؛ غیر اضافی نظریہ میں اس کو ایک مسلمہ لیا جاتا ہے۔[۷]

اس سے بالخصوص ہم اخذ کر سکتے ہیں کہ دو متماثل فرمیان (مثلاً دو الیکٹران) ایک ہی حال کے مکین نہیں ہو سکتے۔ اگر $\psi_a = \psi_b$ ہو تب

$$\psi_{-}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = A[\psi_a(\boldsymbol{r}_1)\psi_a(\boldsymbol{r}_2) - \psi_a(\boldsymbol{r}_1)\psi_a(\boldsymbol{r}_2)] = 0$$

کی بنا پر کوئی تفاعل موج[۸] نہیں ہو گا۔ یہ مشہور نتیجہ **پالی اصول مناعت**[۹] کہلاتا ہے۔ یہ کوئی عجیب مفروضہ نہیں جو صرف الیکٹران پر لاگو ہوتا ہو، بلکہ یہ دو ذروی تفاعلات موج کی تیاری کے قواعد کا ایک نتیجہ ہے، جس کا اطلاق تمام متماثل فرمیان پر ہو گا۔

---

[۵] bosons

[۶] fermions

[۷] اضافیت کے اثرات یہاں پائے جانا عجیب سی بات ہے۔

[۸] یاد رہے کہ میں چکر کو نظر انداز کر رہا ہوں؛ اگر آپ کو اس سے الجھن ہو (کیونکہ بغیر چکر فرمیان خود ایک تضاد ہے)، فرض کریں تمام الیکٹران کے چکر ایک جیسے ہیں۔ میں جلد چکر کو بھی شامل کروں گا۔

[۹] Pauliexclusionprinciple

میں نے دلائل پیش کرنے کے نقطہ نظر سے فرض کیا تھا کہ ایک ذرہ حال ψ_a اور دوسرا حال ψ_b میں پایا جاتا ہے، تاہم اس مسئلہ کو زیادہ عمومی (اور زیادہ نفیس) طریقے سے وضع کیا جا سکتا ہے۔ ہم **عامل مبادلہ**[10]، P، متعارف کرتے ہیں جو دو ذرات کا باہمی مبادلہ کرتا ہے۔

$$Pf(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = f(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) \tag{۵.۱۲}$$

صاف ظاہر ہے کہ $P^2 = 1$ ہوگا لہٰذا (تصدیق کریں کہ) P کی امتیازی قیمتیں ± 1 ہوں گی۔ اب اگر یہ دونوں ذرات متماثل ہوں، تب لازماً ہیملٹنی ان کے ساتھ ایک جیسا رویہ برتے گا: ($m_1 = m_2$ اور $V(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = V(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1)$)۔ اس طرح P اور H ہم آہنگ قابل مشاہدہ ہوں گے:

$$[P, H] = 0 \tag{۵.۱۳}$$

لہٰذا ہم دونوں کے بیک وقت امتیازی حالات کے تفاعلوں کا مکمل سلسلہ معلوم کر سکتے ہیں۔ دوسرے لفظوں میں ہم زیر مبادلہ، مساوات شروڈنگر کے ایسے حل تلاش کر سکتے ہیں جو یا تشاکلی (امتیازی قیمت $+1$) یا غیر تشاکلی (امتیازی قیمت -1) ہوں۔

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \pm\psi(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_1) \tag{۵.۱۴}$$

مزید، ایک نظام جو اس طرح کے حال سے آغاز کرے، اسی حال میں برقرار رہتا ہے۔ متماثل ذرات کا نیا قاعدہ (جس کو میں **ضرورت تشاکلیت**[11] کہتا ہوں) کے تحت تفاعل موج کو مساوات ۵.۱۴ پر صرف پورا اترنے کی اجازت نہیں بلکہ اس پر لازم ہے کہ وہ اس مساوات کو مطمئن کرتا ہو؛ بوسن کے لئے مثبت علامت اور فرمیان کے لئے منفی علامت ہو گی۔[12] یہ ایک عمومی فقرہ ہے جس کی ایک مخصوص صورت مساوات ۵.۱۰ ہے۔

مثال ۵.۱: فرض کریں ایک لامتناہی چوکور کنویں (حصہ ۲.۲) میں کمیت m کے باہم غیر متعامل دو ذرات (جو ایک دوسرے کے اندر سے گزر سکتے ہوں) پائے جاتے ہیں؛ آپکو فکر کرنے کی ضرورت نہیں کہ عملاً ایسا کیسے کیا جا سکتا ہے! یک ذروی حالات درج ذیل ہوں گے (جہاں اپنی سہولت کے لئے ہم $K \equiv \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ لیتے ہیں)۔

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

---

[10] exchange operator

[11] symmetrization requirement

[12] بعض اوقات اشارہ دیا جاتا ہے کہ P اور H کے باہمی مقلوبی ہونا ضرورت تشاکلیت (مساوات ۵.۱۴) کی پشت پر ہے۔ یہ بالکل غلط ہے: ہم دو قابل ممیز ذرات (مثلاً ایک الیکٹران اور ایک ضد الیکٹران) کا ایسا نظام تصور کر سکتے ہیں جس کا ہیملٹنی تشاکلی ہو، جس کے باوجود تفاعل موج کا تشاکلی (یا غیر تشاکلی) ہونے کی ضرورت نہیں پائی جاتی۔ اس کے برعکس متماثل ذرات کو لازماً تشاکلی یا غیر تشاکلی حالات کا مکین ہونا ہو گا، اور یہ ایک بالکل نیا بنیادی قاعدہ ہے؛ جو مساوات شروڈنگر اور شماریاتی مفہوم جتنی اہمیت کا حامل ہے۔ اب، ایسا ضروری نہیں تھا کہ متماثل ذرات پائے جاتے؛ ایسا ہو سکتا تھا کہ ہر دو ذروں کے بیچ تمیز کرنا ممکن ہوتا۔ کوانٹائی میکانیات متماثل ذرات کے امکان کی اجازت دیتی ہے، اور قدرت نے اس موقع کو ہاتھ سے جانے نہیں دیا۔ (مجھے کوئی شکوہ نہیں ہے چونکہ اس سے چیزیں نہایت آسان ہو جاتی ہیں!)

قابل ممیز ذرات کی صورت میں، جب ذرہ 1 حال n_1 میں اور ذرہ 2 حال n_2 میں ہو، مرکب تفاعل موج سادہ حاصل ضرب:

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

ہوگا۔ مثال کے طور پر زمینی حال:

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

ہوگا، اور پہلا ہیجان حال دوچند انحطاطی:

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

ہوگا، وغیرہ، وغیرہ۔ دونوں ذرات متماثل بوسن ہونے کی صورت میں زمینی حال تبدیل نہیں ہوگا، تاہم پہلا ہیجان حال:

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

(جس کی توانائی اب بھی $5K$ ہوگی) غیر انحطاطی ہوگا۔ اور اگر ذرات متماثل فرمیان ہوں، تب $2K$ توانائی کا کوئی بھی حال نہیں ہوگا؛ زمینی حال جس کی توانائی $5K$ ہوگی درج ذیل ہوگا۔

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

□

سوال ۵.۴:

ا. اگر ψ_a اور ψ_b عمودی ہو اور دونوں معمول شدہ ہوں، تب مساوات ۵.۱۰ میں مستقل A کیا ہوگا؟

ب. اگر $\psi_a=\psi_b$ ہو (اور یہ معمول شدہ ہوں)، تب A کیا ہوگا؟ (یہ صورت صرف بوسن کیلئے ممکن ہے۔)

سوال ۵.۵:

ا. لامتناہی چوکور کنویں میں باہم غیر متعامل دو متماثل ذرات کا ہیملٹنی لکھیں۔ تصدیق کریں کہ مثال ۵.۱ میں دیے گئے فرمیان کے زمینی حال H کا مناسب امتیازی قیمت والا امتیازی تفاعل ہوگا۔

ب. مثال ۵.۱ میں دیے گئے ہیجان حالات سے اگلے دو تفاعل موج اور توانائیاں، تینوں صورتوں (قابل ممیز، متماثل بوسن، متماثل فرمیان) میں ہر ایک کے لئے حاصل کریں۔

۵.۱.۲ قوت مبادلہ

میں ایک سادہ یک بُعدی مثال کے ذریعہ آپ کو ضرورت تشاکلیت کی وضاحت کرنا چاہتا ہوں۔ فرض کریں ایک ذرہ حال $\psi_a(x)$ میں اور دوسرا حال $\psi_b(x)$ میں ہے، اور یہ دونوں حالات عمودی اور معمول شدہ ہیں۔ اگر دونوں ذرات قابل ممیز ہوں، اور ذرہ 1 حال ψ_a میں ہو تب ان کا مجموعی تفاعل موج

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_a(x_1)\psi_b(x_2) \tag{۵.۱۵}$$

ہوگا؛ اگر یہ متماثل بوسن ہوں تب ان کا مرکب تفاعل موج (معمول زنی کے لئے سوال ۵.۴ دیکھیں) درج ذیل ہوگا

$$\psi_+(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) + \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)] \tag{۵.۱۶}$$

اور اگر یہ متماثل فرمیان ہوں تب درج ذیل ہوگا۔

$$\psi_-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)] \tag{۵.۱۷}$$

آئیں ان ذرات کے بیچ فاصلہ علیحدگی کے مربع کی توقعاتی قیمت معلوم کریں۔

$$\langle(x_1 - x_2)^2\rangle = \langle x_1^2\rangle + \langle x_2^2\rangle - 2\langle x_1x_2\rangle \tag{۵.۱۸}$$

صورت اول: قابل ممیز ذرات۔ مساوات ۵.۱۵ میں دیے گئے تفاعل موج کے لئے

$$\langle x_1^2\rangle = \int x_1^2|\psi_a(x_1)|^2\,\mathrm{d}x_1 \int|\psi_b(x_2)|^2\,\mathrm{d}x_2 = \langle x^2\rangle_a$$

(یک ذروی حال ψ_a میں x^2 کی توقعاتی قیمت)،

$$\langle x_2^2\rangle = \int|\psi_a(x_1)|^2\,\mathrm{d}x_1 \int x_2^2|\psi_b(x_2)|^2\,\mathrm{d}x_2 = \langle x^2\rangle_b$$

اور

$$\langle x_1x_2\rangle = \int x_1|\psi_a(x_1)|^2\,\mathrm{d}x_1 \int x_2|\psi_b(x_2)|^2\,\mathrm{d}x_2 = \langle x\rangle_a\langle x\rangle_b$$

ہوں گی۔ یوں اس صورت درج ذیل ہوگا۔

$$\langle(x_1 - x_2)^2\rangle_d = \langle x^2\rangle_a + \langle x^2\rangle_b - 2\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b \tag{۵.۱۹}$$

(اتفاقاً یہی جواب ذرہ 1 حال ψ_b میں اور ذرہ 2 حال ψ_a میں ہونے کی صورت میں بھی حاصل ہوتا ہے۔)

صورت دوم: متماثل ذرات۔ مساوات ۵.۱۶ اور مساوات ۵.۱۷ کے تفاعلات موج کے لئے

$$
\begin{aligned}
\langle x_1^2\rangle =&\frac{1}{2}\Big[\int x_1^2\big|\psi_a(x_1)\big|^2\,\mathrm{d}x_1\int\big|\psi_b(x_2)\big|^2\,\mathrm{d}x_2\\
&+\int x_1^2\big|\psi_b(x_1)\big|^2\,\mathrm{d}x_1\int\big|\psi_a(x_2)\big|^2\,\mathrm{d}x_2\\
&\pm\int x_1^2\psi_a(x_1)^*\psi_b(x_1)\,\mathrm{d}x_1\int\psi_b(x_2)^*\psi_a(x_2)\,\mathrm{d}x_2\\
&\pm\int x_1^2\psi_b(x_1)^*\psi_a(x_1)\,\mathrm{d}x_1\int\psi_a(x_2)^*\psi_b(x_2)\,\mathrm{d}x_2\Big]\\
=&\frac{1}{2}\Big[\langle x^2\rangle_a+\langle x^2\rangle_b\pm 0\pm 0\Big]=\frac{1}{2}\Big(\langle x^2\rangle_a+\langle x^2\rangle_b\Big)
\end{aligned}
$$

اور بالکل اسی طرح درج ذیل ہو گا۔

$$
\langle x_2^2\rangle=\frac{1}{2}\Big(\langle x^2\rangle_b+\langle x^2\rangle_a\Big)
$$

(ظاہر ہے $\langle x_2^2\rangle=\langle x_1^2\rangle$ ہو گا کیونکہ آپ ان میں تمیز نہیں کر سکتے۔) تاہم

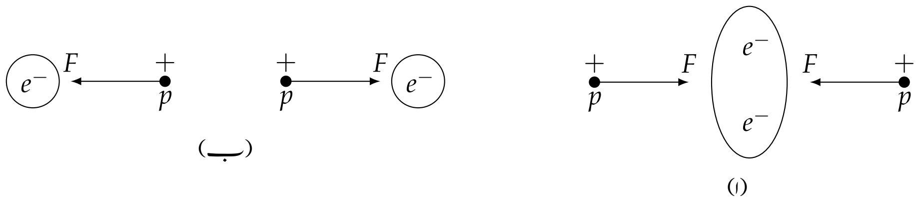
$$
\begin{aligned}
\langle x_1x_2\rangle =&\frac{1}{2}\Big[\int x_1\big|\psi_a(x_1)\big|^2\,\mathrm{d}x_1\int x_2\big|\psi_b(x_2)\big|^2\,\mathrm{d}x_2\\
&+\int x_1\big|\psi_b(x_1)\big|^2\,\mathrm{d}x_1\int x_2\big|\psi_a(x_2)\big|^2\,\mathrm{d}x_2\\
&\pm\int x_1\psi_a(x_1)^*\psi_b(x_1)\,\mathrm{d}x_1\int x_2\psi_b(x_2)^*\psi_a(x_2)\,\mathrm{d}x_2\\
&\pm\int x_1\psi_b(x_1)^*\psi_a(x_1)\,\mathrm{d}x_1\int x_2\psi_a(x_2)^*\psi_b(x_2)\,\mathrm{d}x_2\Big]\\
=&\frac{1}{2}\big(\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b+\langle x\rangle_b\langle x\rangle_a\pm\langle x\rangle_{ab}\langle x\rangle_{ba}\pm\langle x\rangle_{ba}\langle x\rangle_{ab}\big)\\
=&\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b\pm\big|\langle x\rangle_{ab}\big|^2
\end{aligned}
$$

جہاں درج ذیل ہے۔

$$
\langle x\rangle_{ab}\equiv\int x\psi_a(x)^*\psi_b(x)\,\mathrm{d}x \tag{۵.۲۰}
$$

ظاہر ہے کہ درج ذیل ہو گا۔

$$
\langle(x_1-x_2)^2\rangle_\pm=\langle x^2\rangle_a+\langle x^2\rangle_b-2\langle x\rangle_a\langle x\rangle_b\mp 2\big|\langle x\rangle_{ab}\big|^2 \tag{۵.۲۱}
$$



شکل ۵.۱: شریک گرفتی بندھ کی نقشہ کشی: (ا) تشاکلی تشکیل قوت کشش پیدا کرتی ہے، (ب) خلاف تشاکلی تشکیل دافع قوت پیدا کرتی ہے۔

مساوات ۵.۱۹ اور مساوات ۵.۲۱ کا موازنہ کرتے ہوئے ہم دیکھ سکتے ہیں کہ فرق صرف آخری جزو میں پایا جاتا ہے۔

$$\underbrace{\langle(\Delta x)^2\rangle_\pm}_{\text{متماثل}} = \underbrace{\langle(\Delta x)^2\rangle_d}_{\text{قابل ممیز}} \underbrace{\mp 2\left|\langle x\rangle_{ab}\right|^2}_{\text{فرق}} \tag{۵.۲۲}$$

قابل ممیز ذرات کے لحاظ سے متماثل بوسن (بالائی علامتیں) ایک دوسرے کے نسبتاً قریب جبکہ متماثل فرمیان (زیریں علامتیں) ایک دوسرے سے نسبتاً دور ہوں گے (جہاں ذرات ایک جیسے دو حالات میں ہوں)۔ دھیان رہے کہ جب تک یہ دو تفاعلات موج ایک دوسرے پر منطبق نہ ہوں، $\langle x\rangle_{ab}$ صفر ہوگا (غیر صفر $\psi_b(x)$ کی صورت میں جب بھی $\psi_a(x)$ صفر ہو تب مساوات ۵.۲۰ میں تکمل کی قیمت صفر ہوگی)۔ یوں اگر کراچی میں ایک جوہر کے اندر الیکٹران کو ψ_a سے ظاہر کیا گیا ہو، جبکہ صوابی (میرے آبائی ضلع) میں ایک جوہر کے اندر الیکٹران کو ψ_b سے ظاہر کیا گیا ہو، تب تفاعل موج کو غیر تشاکلی بنانے یا نہ بنانے سے کوئی فرق نہیں پڑے گا۔ یوں عملی نقطہ نظر سے ایسے الیکٹران جن کے تفاعلات موج غیر منطبق ہوں، ان کو آپ قابل ممیز تصور کرنے کا ڈھونگ رچا سکتے ہیں۔ (یقیناً اسی کی بنا پر ماہر طبیعیات اور کیمیا دان آگے بڑھ سکتے ہیں چونکہ اصولاً کائنات میں ہر ایک الیکٹران باقی تمام کے ساتھ، ان کے تفاعلات موج کی عدم تشاکلیت کے ذریعہ، جڑا ہے اور اگر یہ واقعی اہمیت کا حامل ہوتا تب تمام کائنات کے الیکٹرانوں کی بات کیے بغیر ہم کسی ایک الیکٹران کی بات کرنے سے قاصر ہوتے!)

دلچسپ صورت تب پیدا ہوتی ہے جب انکے تفاعلات موج جزوی منطبق ہوں۔ ایسی صورت میں نظام کا رویہ کچھ یوں ہوگا جیسے متماثل بوسن کے بیچ "قوت کشش" پائی جاتی ہو، جو انہیں قریب کھینچتی ہے، اور متماثل فرمیان کے بیچ "دافع قوت" پائی جاتی ہو، جو انہیں ایک دوسرے سے دور دھکا دیتی ہے (یاد رہے کہ ہم فی الحال چکر کو نظر انداز کر رہے ہیں)۔ ہم اس کو **قوت مبادلہ**[۱۳] کہتے ہیں اگرچہ یہ حقیقتاً ایک قوت نہیں ہے؛ کوئی بھی چیز ان ذرات کو دھکیل نہیں رہی ہے؛ یہ صرف ضرورت تشاکلیت کا ہندسی نتیجہ ہے۔ ساتھ ہی یہ کوانٹائی میکانی مظہر ہے جس کا کلاسیکی میکانیات میں کوئی مماثل نہیں پایا جاتا۔ بہر حال اس کے دور رس نتائج پائے جاتے ہیں۔ مثلاً، ہائیڈروجن سالمہ $(\mathrm{H_2})$ پر غور کریں۔ اندازاً بات کرتے ہوئے، جوہری زمینی حال (مساوات ۴.۸۰) جس کا مرکز مرکزہ 1 پر واقع ہے، میں ایک الیکٹران اور جوہری زمینی حال جس کا مرکز مرکزہ 2

[۱۳] exchange force

پر واقع ہے، میں ایک الیکٹران پر زمینی حال مشتمل ہوگا۔ اگر الیکٹران بوسن ہوتے تب ضرورت تشاکلیت (یا "قوت مبادلہ"، اگر آپ اسے پسند کرتے ہیں) کوشش کرتی ہے کہ دونوں پروٹان کے بیچ الیکٹرانوں کو جمع کرے (شکل ۱.۵-ا)، نتیجتاً منفی بار کا انبار دونوں پروٹان کو اندر کی طرف ایک دوسرے کی جانب کھینچتا ہے، جو **شریک گرفتی بندھ**[14] کا سبب بنتا۔[15] بدقسمتی سے الیکٹران درحقیقت فرمیان ہیں نہ کہ بوسن جس کی بنا پر منفی بار اطراف پر انبار ہوگا (شکل ۱.۵-ب) جو سالمہ کو ٹکڑے ٹکڑے کر دے گا!

ذرا رکیے گا! ہم اب تک چکر کو نظر انداز کرتے رہے ہیں۔ الیکٹران کا مقامی تفاعل موج اور چکر دار (جو الیکٹران کے چکر کی سمت بندی کو بیان کرتا ہے) مل کر اس کا (درج ذیل) مکمل حال دیں گے۔[16]

$$\psi(\boldsymbol{r})\chi(s) \tag{۵.۲۳}$$

دو الیکٹرانی حال مرتب کرتے ہوئے ہمیں مبادلہ کے لحاظ سے صرف فضائی جزو کو عدم تشاکلی نہیں بلکہ مکمل حال کو عدم تشاکلی بنانا ہوگا۔ مرکب چکری حالات (مساوات ۴.۱۷۷ اور مساوات ۴.۱۷۸) پر نظر ڈالتے ہوئے ہم دیکھتے ہیں کہ یکتا ملاپ خلاف تشاکل ہے (لہٰذا اس کو تشاکل فضائی تفاعل کے ساتھ جوڑنا ہوگا) جبکہ تینوں سہ تا حالات تشاکلی ہیں (لہٰذا انہیں خلاف تشاکل فضائی تفاعل کے ساتھ منسلک کرنا ہوگا)۔ ظاہر ہے کہ یوں یکتا حال بندھ پیدا کرے گا جبکہ سہ تا حال خلاف بندھ ہوگا۔ یقیناً کیمیادان ہمیں بتاتے ہیں کہ شریک گرفتی بندھ کے لئے ضروری ہے کہ دونوں الیکٹران یکتا حال کے مکین ہوں اور ان کا کل چکر صفر ہو۔[17]

سوال ۵.۶: لامتناہی چوکور کنویں میں دو غیر متعامل ذرات، جن میں سے ہر ایک کی کمیت m ہے، پائے جاتے ہیں۔ ان میں سے ایک حال ψ_n (مساوات ۲.۲۸) اور دوسرا حال ψ_ℓ $(\ell \neq n)$ میں ہے۔ آپ کو $\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle$ کا حساب اس صورت کرنا ہے جب (الف) ذرات غیر قابل ممیز ہوں، (ب) ذرات متماثل بوسن ہوں اور (ج) ذرات متماثل فرمیان ہوں۔

سوال ۵.۷: فرض کریں آپ کے پاس تین ذرات ہیں، جن میں سے ایک حال ψ_a، دوسرا حال ψ_b، اور تیسرا حال ψ_c میں پایا جاتا ہے۔ حالات ψ_a، ψ_b، اور ψ_c کو معیاری عمودی تصور کرتے ہوئے (مساوات ۵.۱۵، ۵.۱۶ اور ۵.۱۷ کی طرز پر) تین ذروی حالات تیار کریں جو (الف) قابل ممیز ذرات، (ب) متماثل بوسن اور (ج) متماثل فرمیان کو ظاہر کرتے ہوں۔ یاد رہے کہ کسی بھی دو ذرات کی جوڑی کے باہمی مبادلہ کے لحاظ سے (ب) کو مکمل طور پر تشاکلی ہونا ہوگا، جبکہ (ج) کو مکمل طور پر خلاف تشاکلی ہونا ہوگا۔ تبصرہ: مکمل طور پر خلاف تشاکلی تفاعلات موج تیار کرنے کا ایک بہترین طریقہ پایا جاتا ہے: **مقطع سلیٹر**[18] تیار کریں جس کی پہلی صف

---

[14] covalentbond

[15] مراکزہ کے بیچ شراکتی الیکٹران جمع ہو کر جوہروں کو قریب کھینچ کر شریک گرفتی بندھ پیدا کرتے ہیں۔ اس کے لئے دو عدد الیکٹران لازمی نہیں۔ ہم حصہ ۷.۳ میں صرف ایک الیکٹران پر مبنی شریک گرفتی بندھ دیکھیں گے۔

[16] چکر اور مقام کے بیچ عدم ارتباط کی صورت میں ہم فرض کر سکتے ہیں کہ چکر اور فضائی محدد میں حال کو علیحدہ کرنا ممکن ہے۔ اس سے مراد یہ ہے کہ ہم میدان چکر حاصل کرنے کا احتمال، ذرے کے مقام پر منحصر نہیں ہوگا۔ ارتباط کی موجودگی میں عمومی حال، سوال ۴.۵۵ کی طرز پر، خطی ملاپ $\psi_+(\boldsymbol{r})\chi_+ + \psi_-(\boldsymbol{r})\chi_-$ کا روپ اختیار کرے گا۔

[17] بے احتیاطی میں ہم عموماً کہتے ہیں کہ الیکٹران ایک دوسرے کے مخالف صف بند ہیں (ایک ہم میدان اور دوسرا خلاف میدان)۔ یہ ضرورت سے زیادہ سادہ صورت ہوگی چونکہ یہی کچھ $m = 0$ سہ تا حال کے بارے میں بھی کہا جا سکتا ہے۔ درست فقرہ یہ ہوگا: "وہ یکتا تشکیل میں ہیں"۔

[18] Slaterdeterminant

$\psi_a(x_1)$ ، $\psi_b(x_1)$ ، $\psi_c(x_1)$ ، وغیرہ ہو گی، اس کی دوسری صف $\psi_a(x_2)$ ، $\psi_b(x_2)$ ، $\psi_c(x_2)$ ، وغیرہ ہو گی اور اسی طرح اس کی باقی صفیں ہوں گی (یہ طریقہ کسی بھی تعداد کے ذرات کیلئے کارآمد ہے)۔

۵.۲ جوہر

ایک معادل جوہر جس کا جوہری عدد Z ہو، ایک بھاری مرکزہ جس کا بار Ze ہو اور جس کو Z الیکٹران (کمیت m، بار $-e$) گھیرتے ہوں، پر مشتمل ہو گا۔ اس نظام کی ہیملٹنی درج ذیل ہو گی۔[۱۹]

$$H = \sum_{j=1}^{Z}\Big\{-\frac{h^2}{2m}\nabla_j^2 - \Big(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\Big)\frac{Ze^2}{r_j}\Big\} + \frac{1}{2}\Big(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\Big)\sum_{j\neq k}^{Z}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r}_k|} \tag{۵.۲۴}$$

لہریا قوسین میں بند جزو، مرکزہ کے برقی میدان میں j ویں الیکٹران کی حرکی توانائی جمع مخفی توانائی کو ظاہر کرتا ہے؛ دوسرا مجموعہ (جو ماسوائے $j = k$، تمام j اور k پر لیا گیا ہے) الیکٹرانوں کی باہمی دافع قوت سے وابستہ مخفی توانائی کو ظاہر کرتا ہے (جہاں $\frac{1}{2}$ اس حقیقت کو درست کرتا ہے کہ مجموعہ لیتے ہوئے ہر جوڑی کو دو مرتبہ گنا گیا ہے)۔ ہمیں تفاعل موج $\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots \boldsymbol{r}_Z)$ کیلئے درج ذیل مساوات شروڈنگر:

$$H\psi = E\psi \tag{۵.۲۵}$$

حل کرنا ہو گی۔ البتہ الیکٹران متماثل فرمیان ہیں، لہٰذا، تمام حل قابل قبول نہیں ہوں گے: صرف وہ حل قابل قبول ہوں گے جن میں مکمل حال (مقام اور چکر):

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \ldots, \boldsymbol{r}_z)\chi(\boldsymbol{s}_1, \boldsymbol{s}_2, \cdots, \boldsymbol{s}_Z), \tag{۵.۲۶}$$

کسی بھی دو الیکٹران کے باہمی مبادلہ کے لحاظ سے خلاف تشاکلی ہو۔ بالخصوص کوئی بھی دو الیکٹران ایک ہی حال کے مکین نہیں ہو سکتے۔

بدقسمتی سے مساوات شروڈنگر کو مساوات ۵.۲۴ میں دی گئی ہیملٹنی کے لئے، ماسوائے سادہ ترین صورت $Z = 1$ (ہائیڈروجن)، ٹھیک حل نہیں کیا جا سکتا (کم از کم آج تک کوئی بھی ایسا نہیں کر پایا)۔ عملاً ہمیں پیچیدہ تخمینی تراکیب استعمال کرنے ہوں گے۔ ان میں سے چند ایک تراکیب پر اگلے ابواب میں غور کیا جائے گا؛ ابھی میں الیکٹران کی دافع قوت کو مکمل نظر انداز کرتے ہوئے حلوں کا کیفی تجزیہ پیش کرنا چاہوں گا۔ حصہ ۵.۲.۱ میں ہم ہیلیم کے زمینی حال اور ہیجان حالات پر غور کریں گے جبکہ حصہ ۵.۲.۲ میں ہم زیادہ بڑے جوہر کے زمینی حالات پر غور کریں گے۔

---

[۱۹] مرکزہ کو ساکن تصور کیا گیا ہے۔ مرکزہ کی حرکت کو تخفیف شدہ کمیت (سوال ۵.۱) کے ذریعہ شامل کرنا صرف دو جسمی نظام کے لئے ممکن ہے؛ خوش قسمتی سے مرکزہ کی کمیت الیکٹران کی کمیت سے اتنی زیادہ ہوتی ہے کہ درکار درستگی، ہائیڈروجن کے لئے بھی، نظر انداز کی جا سکتی ہے (سوال ۵.۲-الف دیکھیں)، اور زیادہ بھاری جوہروں کے لئے یہ مزید کم ہو گی۔ مرکزہ کی متناہی جسامت، اضافیتی تصحیح اور الیکٹران چکر کے ساتھ وابستہ مقناطیسی باہم عمل کے زیادہ دلچسپ اثرات پائے جاتے ہیں۔ ان پر آنے والے ابواب میں غور کیا جائے گا، تاہم یہ تمام "خالص کولمب" جوہر، جسے مساوات ۵.۲۴ بیان کرتی ہے، میں انتہائی چھوٹی درستگیاں ہیں۔

سوال ۵.۸: فرض کریں مساوات ۵.۲۴ میں دی گئی ہیملٹنی کے لیے آپ مساوات شروڈنگر (مساوات ۵.۲۵) کا حل $(\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \ldots \boldsymbol{r}_Z))$ حاصل کر سکتے ہیں۔ آپ اس سے ایک ایسا مکمل تشاکلی تفاعل اور ایک مکمل خلاف تشاکلی تفاعل کس طرح بنا پائیں گے جو مساوات شروڈنگر کو اسی توانائی کیلئے مطمئن کرتا ہو؟

۵.۲.۱ ہیلیم

ہائیڈروجن کے بعد سب سے سادہ جوہر ہیلیم $(Z = 2)$ ہے۔ اس کی ہیملٹنی

$$H = \Big\{ -\frac{h^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2e^2}{r_1}\Big\} + \Big\{ -\frac{h^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2e^2}{r_2}\Big\} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} \tag{۵.۲۷}$$

(بار $2e$ مرکزہ کے) دو ہائیڈروجنی ہیملٹنی، ایک الیکٹران 1 اور ایک الیکٹران 2، کے ساتھ دو الیکٹران کے بیچ دافع توانائی پر مشتمل ہو گا۔ یہ آخری جزو ہمارے لئے پریشانی کا سبب بنتا ہے۔ اس کو نظر انداز کرتے ہوئے مساوات شروڈنگر قابل علیحدگی ہو گی، اور اس کے حلوں کو نصف بوہر رداس (مساوات ۴.۷۲) اور چار گنا بوہر توانائیوں (مساوات ۴.۷۰) [وجہ سمجھ نہ آنے کی صورت میں سوال ۴.۱۶ پر دوبارہ نظر ڈالیں] کے ہائیڈروجن تفاعلات موج کے حاصل ضرب:

$$\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi_{n\ell m}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{n'\ell' m'}(\boldsymbol{r}_2) \tag{۵.۲۸}$$

کی صورت میں لکھا جا سکتا ہے۔ کل توانائی درج ذیل ہو گی، جہاں $E_n = -13.6/n^2\,\text{eV}$ ہو گا۔

$$E = 4(E_n + E_{n'}) \tag{۵.۲۹}$$

بالخصوص زمینی حال

$$\psi_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi_{100}(\boldsymbol{r}_1)\psi_{100}(\boldsymbol{r}_2) = \frac{8}{\pi a^3}e^{-2(r_1+r_2)/a} \tag{۵.۳۰}$$

ہو گا (مساوات ۴.۸۰ دیکھیں) اور اس کی توانائی درج ذیل ہو گی۔

$$E_0 = 8(-13.6\,\text{eV}) = -109\,\text{eV} \tag{۵.۳۱}$$

چونکہ ψ_0 تشاکلی تفاعل ہے، لہٰذا چکری حال کو خلاف تشاکلی ہونا ہو گا اور یوں ہیلیم کا زمینی حال یکتا تشکیل میں ہو گا، جس میں چکر ایک دوسرے کے "مخالف صف بند" ہوں گے۔ یقیناً حقیقت میں ہیلیم کا زمینی حال یکتا ہی ہے، تاہم اس کی تجرباتی حاصل توانائی $-78.975\,\text{eV}$ ہے جو مساوات ۵.۳۱ سے کافی مختلف ہے۔ یہ زیادہ حیرت کی بات نہیں ہے: ہم نے الیکٹران کی دافع توانائی کو مکمل طور پر نظر انداز کیا جو کہ چھوٹی

مقدار نہیں ہے۔ یہ ایک مثبت مقدار (مساوات ۵.۲۷ دیکھیں) ہے جس کو شامل کرتے ہوئے کل توانائی کم ہو کر $-109\,\mathrm{eV}$ کی بجائے $-79\,\mathrm{eV}$ ہو جائے گی (سوال ۵.۱۱ دیکھیں)۔

ہیلیم کے ہیجان حالات:

$$\psi_{n\ell m}\psi_{100} \tag{۵.۳۲}$$

ہائیڈروجنی زمینی حال میں ایک الیکٹران اور ہیجان حال میں دوسرے الیکٹران، پر مشتمل ہوگا۔[دونوں الیکٹران کو ہیجان حالات میں ڈالنے سے ایک الیکٹران فوراً زمینی حال میں واپس گر کر توانائی خارج کرتا ہے، جو دوسرے الیکٹران کو جوہر سے باہر استمراریہ $(E > 0)$ میں دھکیلتا ہے، اور یوں ایک آزاد الیکٹران اور ہیلیم باردار یہ (He^+) حاصل ہوگا۔ یہ بذات خود ایک دلچسپ نظام ہے جس پر ہم یہاں بات نہیں کر رہے؛ سوال ۵.۹ دیکھیں] ہم ہمیشہ کی طرح تشاکلی اور خلاف تشاکلی ملاپ تیار کر سکتے ہیں (مساوات ۵.۱۰)؛ اول الذکر خلاف تشاکلی چکر تشکیل (یک تا) کے ساتھ جائے گا، جنہیں **نزد ہیلیم**[20] کہتے ہیں، جبکہ موخر الذکر کو تشاکلی چکر تشکیل (سہ تا) درکار ہوگی اور انہیں **ہیلیم پرست**[21] کہتے ہیں۔ زمینی حال لازماً نزد ہیلیم ہوگا؛ جبکہ ہیجان حالات دونوں روپ میں پائے جاتے ہیں۔ جیسا ہم نے حصہ ۵.۱.۲ میں دریافت کیا، تشاکلی فضائی حال الیکٹرانوں کو قریب لاتا ہے، جس کی بنا پر ہم توقع کرتے ہیں کہ نزد ہیلیم کی باہم متعامل توانائی زیادہ ہوگی، اور یقیناً تجربات سے تصدیق ہوتی ہے کہ ہیلیم پرست کے لحاظ سے نزد ہیلیم حالات کی توانائی زیادہ ہے (شکل ۵.۲ دیکھیں)۔

سوال ۵.۹:

ا. فرض کریں کہ آپ ہیلیم جوہر کے دونوں الیکٹران کو $n = 2$ حال میں رکھتے ہیں؛ خارجی الیکٹران کی توانائی کیا ہوگی؟

ب. ہیلیم باردار یہ He^+ کے طیف پر (مقداری) تجزیہ کریں۔

سوال ۵.۱۰: ہیلیم توانائی سطحوں پر درج ذیل صورت میں (کیفی) تجزیہ کریں۔ (ا) اگر الیکٹران متماثل بوسن ہوتے، (ب) اگر الیکٹران قابل ممیز ذرات ہوتے (لیکن ان کی کمیت اور بار ایک جیسے ہوں)۔ فرض کریں کہ الیکٹران کا چکر اب بھی $\frac{1}{2}$ ہے، لہٰذا چکری تشکیلات یک تا اور سہ تا ہوں گی۔

سوال ۵.۱۱:

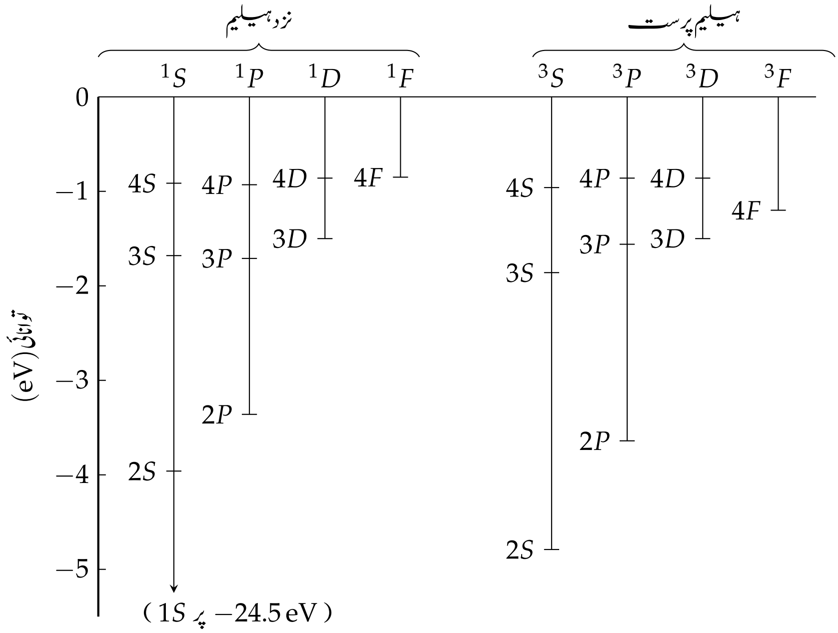
ا. مساوات ۵.۳۰ میں دیے گئے حال ψ_0 کیلئے $\langle(1/|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|)\rangle$ کا حساب لگائیں۔ اشارہ: کروی محدد استعمال کرتے ہوئے قطبی محور کو $\boldsymbol{r}_1$ پر رکھیں تاکہ

$$|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2\cos\theta_2}.$$

پہلے $\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_2$ کا تکمل حل کریں۔ زاویہ θ_2 کے لحاظ سے تکمل آسان ہے، بس مثبت جذر لینا یاد رکھیں۔ آپ کو r_2 تکمل دو ٹکڑوں میں تقسیم کرنا ہوگا؛ پہلا 0 سے r_1 تک اور دوسرا r_1 سے ∞ تک۔ جواب: $\frac{5}{4a}$

---

[20] parahelium
[21] orthohelium



شکل ۵.۲: ہیلیم کی توانائیوں کی سطحیں (علامتیت کی وضاحت حصہ ۵.۲.۲ کی گئی ہے)۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ نزدہیلیم کی توانائیاں مطابقتی ہیلیم پرست سے زیادہ ہیں۔انتصابی پیمانہ باردارہ ہیلیم کے زمینی حال ($He^+ \;:\; 4 \times (-13.6)\,\mathrm{eV} = -54.4\,\mathrm{eV}$) کے لحاظ سے ہیں۔؛ کسی بھی حال کی کل توانائی جاننے کی خاطر 54.4 eV منفی کریں۔

ب. جزو-الف کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے ہیلیم کے زمینی حال میں الیکٹران کی باہمی متعامل توانائی کا اندازہ لگائیں۔ اپنے جواب کو الیکٹران وولٹ کی صورت میں پیش کریں اور اس کو E_0 (مساوات ۵.۳۱) کے ساتھ جمع کر کے زمینی حال توانائی کی بہتر تخمین حاصل کریں۔ اس کا موازنہ تجرباتی قیمت کے ساتھ کریں۔ (دھیان رہے کہ اب بھی آپ تخمینی تفاعل موج کے ساتھ کام کر رہے ہیں، لہٰذا آپ کا جواب ٹھیک تجرباتی جواب نہیں ہو گا۔)

۵.۲.۲ دوری جدول

بھاری جوہروں کے زمینی حال الیکٹرانی تشکیل تقریباً اسی طرح جوڑ کر حاصل کیے جاتے ہیں۔ پہلی تخمین میں (انکی باہمی دافع توانائی کو مکمل نظرانداز کرتے ہوئے) بار Ze کے مرکزہ کے کولمب مخفیہ میں یک ذروی ہائیڈروجنی حالات (n, ℓ, m)، جنہیں **مدارچے**[22] کہتے ہیں، کے انفرادی الیکٹران مکین ہوں گے۔ اگر الیکٹران بوسن (یا قابل ممیز ذرات) ہوتے تب یہ زمینی حال $(1, 0, 0)$ میں گر جاتے اور کیمیا اتنا دلچسپ نہ ہوتا۔ حقیقت میں الیکٹران متماثل فرمیان ہیں، جن پر پالی اصول مناعت لاگو ہوتا ہے، لہٰذا کسی ایک مدارچہ کے صرف دو الیکٹران مکین ہو سکتے ہیں (ایک ہم میدان اور ایک خلاف میدان؛ بلکہ یہ کہنا زیادہ بہتر ہو گا، کہ یک تا تشکیل حال میں)۔ کسی بھی n کی قیمت کے لئے n^2 ہائیڈروجنی تفاعلات موج پائے جاتے ہیں (جن میں سے ہر ایک کی توانائی E_n ہو گی)، یوں $n = 1$ **خول**[23] میں دو الیکٹرانوں کی جگہ ہو گی، $n = 2$ خول میں آٹھ، $n = 3$ میں اٹھارہ، اور n ویں خول میں $2n^2$ الیکٹرانوں کی جگہ ہو گی۔ کیفی طور پر بات کرتے ہوئے **دوری جدول**[24] کے افقی صف، ہر ایک انفرادی خول کو بھرنے کے مترادف ہے (اگرچہ یہ پوری کہانی نہیں ہے؛ اگر ایسا ہوتا، انکی لمبائیاں 2 ، 8 ، 18 ، 32 ، 50 ،وغیرہ ہوتیں نہ کہ 2 ، 8 ، 8 ، 18 ، 18 ،وغیرہ؛ ہم جلد دیکھیں گے کہ الیکٹران کا باہمی دفع اس شمار کو کس طرح خراب کرتا ہے)۔

ہیلیم میں، $n = 1$ خول بھرا ہو گا، لہٰذا اگلے جوہر لتھیم $(Z = 3)$ کو $n = 2$ خول میں ایک الیکٹران رکھنا ہو گا۔ اب $n = 2$ کے لئے $\ell = 0$ یا $\ell = 1$ ہو سکتا ہے؛ تیسرا الیکٹران ان میں سے کسی ایک کا انتخاب کرے گا؟ (چونکہ بوہر توانائی n پر منحصر ہوتی ہے نہ کہ ℓ پر) لہٰذا الیکٹران کا باہمی عمل نہ ہونے کی صورت میں ان دونوں کی توانائی ایک جیسی ہو گی۔ تاہم درج ذیل وجہ کی بنا پر الیکٹران کی دافع توانائی ℓ کی اقل قیمت کی طرف داری کرتی ہے۔ زاویائی معیار حرکت الیکٹران کو بیرونی رخ دھکیلنے کی کوشش کرتا ہے اور الیکٹران جتنا زیادہ مرکزہ سے دور ہو گا اتنا مرکزہ، اندرونی الیکٹرانوں کے زیادہ **پس پردہ**[25] ہو کر او جھل ہو گا۔ (اندازاً بات کرتے ہوئے ہم کہہ سکتے ہیں کہ اندرونی الیکٹران کو مرکزہ کا پورا بار Ze "نظر" آتا ہے جب کہ بیرونی الیکٹران کو مشکل سے e سے کچھ زیادہ بار نظر آتا ہے۔) یوں کسی بھی ایک خول میں اقل توانائی کا حال (یعنی دوسرے لفظوں میں سب سے سخت مقید الیکٹران) $\ell = 0$ ہو گا، اور بڑھتے ℓ کے ساتھ توانائی بڑھے گی۔ اس طرح لتھیم میں تیسرا الیکٹران مدارچہ $(2, 0, 0)$ کا مکین ہو گا۔ اگلا جوہر (بیریلیم جس کا $Z = 4$ ہے) بھی اسی حال میں ہو گا (پس اس کا چکر "الٹ رخ" ہو گا) لیکن بوران $(Z = 5)$

[22] orbitals
[23] shell
[24] periodictable
[25] screened

کو $\ell = 1$ استعمال کرنا ہو گا۔

اسی طرح چلتے ہوئے ہم نیون $(Z = 10)$ کو پہنچتے ہیں جہاں $n = 2$ خول مکمل بھرا ہو گا اور ہم دوری جدول کی اگلی صف کو پہنچ کر $n = 3$ خول کو بھرنا شروع کرتے ہیں۔ اس صف کے آغاز میں دو جوہر (سوڈیم اور میگنیشیم) کا $\ell = 0$ ہے اور اس کے بعد (**سلور**[۲۶] سے آرگن تک) چھ ایسے جوہر ہیں جن کا $\ell = 1$ ہو گا۔ آرگن کے بعد ہم "توقع" کرتے ہیں کہ دس ایسے جوہر پائے جائیں گے جن کے لیے $n = 3$ اور $\ell = 2$ ہو گا؛ البتہ یہاں پہنچ کر اندرونی الیکٹران کا مرکزہ کو پس پردہ کرنے کا اثرات نا زور پکڑ تا ہے کہ اگلا خول بھی اس کے نظر ہو جاتا ہے (یعنی یہ خول بھی او جھل ہو جاتا ہے) لہٰذا پوٹاشیم $(Z = 19)$ اور کلشیم $(Z = 20)$، $n = 3$، $\ell = 2$ کی بجائے $n = 4$، $\ell = 0$ منتخب کرتے ہیں۔ اس کے بعد ہم دوبارہ نیچے اتر کر $n = 3$ اور $\ell = 2$ (اسکینڈیم تا جست)، اور اس کے بعد $n = 4$، $\ell = 1$ (گیلیم تا کرپٹان) اٹھاتے ہیں، اور یہاں پہنچ کر ہم دوبارہ قبل از وقت اگلی صف $(n = 5)$ میں چھلانگ لگا کر بعد میں $n = 4$ خول کے $\ell = 2$ اور $\ell = 3$ بھرتے ہیں۔

یہاں جوہری حالات کے تسمیہ جس کو تمام کیمیا دان اور ماہر طبیعیات استعمال کرتے ہیں، پر تبصرہ کرنا ضروری ہو گا۔ اس کی وجہ شاید صرف انیسویں صدی کے طیف پیمائی کاروں کو معلوم ہو گی کہ $\ell = 0$ کو کیوں s کہتے ہیں، $\ell = 1$ کو p، $\ell = 2$ کو d، اور $\ell = 3$ کو کیوں f کہتے ہیں؛ میرے خیال سے اس کے بعد وہ سیدھی راہ پر آ گئے اور انہوں نے لاطینی حروف تہجی کے تحت (g، h، i، اور j کو نظر انداز کرتے ہوئے، k، ℓ، وغیرہ)[۲۷] نام دیے۔ کسی ایک الیکٹران کے حال کو $n\ell$ کی جوڑی ظاہر کرتی ہے، جہاں (عدد) n حال کو اور (حرف) ℓ مدارچی زاویائی معیار حرکت کو ظاہر کرتا ہے؛ کوانٹائی عدد m کا ذکر نہیں کیا جاتا لیکن قوت نما میں حال کے مکین الیکٹرانوں کی تعداد لکھی جاتی ہے۔ یوں درج ذیل تشکیل

$$(1s)^2(2s)^2(2p)^2 \tag{۵.۳۳}$$

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

اس مثال میں دو الیکٹران ایسے ہیں جن کا مدارچی زاویائی معیار حرکت کوانٹائی عدد ایک (1) ہے، لہٰذا کل مدارچی زاویائی معیار حرکت کوانٹائی عدد L (چھوٹے ℓ کی بجائے بڑا L جو انفرادی ذرہ کا نہیں بلکہ کل کو ظاہر کرتا ہے) 2، 1، یا 0 ہو سکتا ہے۔ ساتھ ہی، $(1s)$ کے دو الیکٹران ایک دوسرے کے ساتھ یکتا حال بندھن میں ہیں اور ان کا کل چکر صفر ہو گا؛ یہی کچھ $(2s)$ کے دو الیکٹران کے لئے بھی ہو گا، لیکن $(2p)$ کے دو الیکٹران یا تو یکتا نظام اور یا سہ تا نظام میں ہوں گے۔ یوں کل چکر کوانٹائی عدد S (کل کو ظاہر کرنے کے لئے یہاں بھی بڑا حرف استعمال ہو گا) 1 یا 0 ہو سکتا ہے۔ ظاہر ہے کہ میزان کل (مدارچی جمع چکر) J کی قیمت 3، 2، 1، یا 0 ہو سکتی ہے۔ کسی ایک جوہر کے لئے ان کل قیمتوں کو **قواعد ہنڈ**[۲۸] (سوال ۵.۱۳ دیکھیں) سے حاصل کیا جا سکتا ہے۔ نتیجہ کو درج ذیل علامتی

---

[۲۶] aluminium

[۲۷] خول $n = 1$ کا نام K، $n = 2$ کا نام L، $n = 3$ کا نام M، وغیرہ رکھے گئے۔ خولوں کے نام M سے شروع ہو کر لاطینی حروف تہجی کے ترتیب سے ہیں۔

[۲۸] Hund's Rules

روپ مسیں لکھا جا سکتا ہے

$$^{2S+1}L_J \tag{۵.۳۴}$$

(جہاں S اور J اعداد جبکہ L (جو کل کو ظاہر کرتا ہے) بڑا حرف ہو گا۔ کاربن کا زمینی حال $^3P_0$ ہے؛ اس کا کل چکر 1 ہے (جس کی بنا پر 3 لکھا گیا ہے)، کل مداری زاویائی معیار حرکت 1 ہے (لہٰذا P لکھا گیا ہے) اور میزان کل زاویائی معیار حرکت صفر ہے (لہٰذا 0 لکھا گیا ہے)۔ جدول ۵.۱ میں دوری جدول کی ابتدائی چار صفوں کے لئے انفرادی تشکیلات اور کل زاویائی معیار حرکت مساوات ۵.۳۴ کی روپ میں پیش کئے گئے ہیں۔[۲۹]

سوال ۵.۱۲:

ا. دوری جدول کی ابتدائی دو صفوں (نیون تک) کے لئے مساوات ۵.۳۳ کے روپ میں الیکٹران تشکیلات پیش کر کے ان کی تصدیق جدول ۵.۱ کے ساتھ کریں۔

ب. ابتدائی چار عناصر کے لئے مساوات ۵.۳۴ کے روپ میں مطابقتی کل زاویائی معیار حرکت تلاش کریں۔ بوران، کاربن اور نائیٹروجن کے لئے تمام ممکنات پیش کریں۔

سوال ۵.۱۳:

ا. **ہنڈ کا پہلا قاعدہ**[۳۰] کہتا ہے کہ باقی چیزیں ایک جیسی ہونے کی صورت میں وہ حال جس کا کل چکر S اعظم ہو، کی توانائی اقل ہو گی۔ ہیلیم کے ہیجان حالات کے لیے یہ کیا پیشگوئی کرتا ہے۔

ب. **ہنڈ کا دوسرا قاعدہ**[۳۱] کہتا ہے کہ کسی ایک چکر کی صورت میں مجموعی طور پر خلاف تشاکلیت پر پورا اترتا ہوا وہ حال جس کا اعظم کل مداری زاویائی معیار حرکت L ہو، کی توانائی اقل ہو گی۔ کاربن کے لئے $L = 2$ کیوں نہیں ہے؟ اشارہ: یاد رہے کہ "سیڑھی کا بالائی سر" $(M_L = L)$ تشاکلی ہے۔

ج. **ہنڈ کا تیسرا قاعدہ**[۳۲] کہتا ہے کہ اگر ایک ذیلی خول (n, ℓ) نصف سے زیادہ بھرا نہ ہو، تب اقل توانائی کی سطح کے لئے $J = |L - S|$ ہو گا؛ اگر یہ نصف سے زیادہ بھرا ہو تب $J = L + S$ کی توانائی اقل ہو گی۔ اس حقیقت کو استعمال کرتے ہوئے سوال ۵.۱۲-ب میں بوران کے مسئلہ سے شک دور کریں۔

د. قواعد ہنڈ کے ساتھ یہ حقیقت استعمال کرتے ہوئے کہ تشاکلی چکری حال کے ساتھ خلاف تشاکل مقام حال (اور خلاف تشاکل مقام حال کے ساتھ تشاکلی چکری حال) استعمال ہو گا، سوال ۵.۱۲-ب میں کاربن اور نائیٹروجن میں درپیش مشکلات سے چھٹکارا حاصل کریں۔ اشارہ: کسی بھی حال کی تشاکلی جاننے کی خاطر "سیڑھی کے بالائی سر" کو دیکھیں۔

سوال ۵.۱۴: (دوری جدول کی چھٹے صف میں عنصر 66) ڈسپروزیم کا زمینی حال $^5I_8$ ہے۔ اس کے کل چکر، کل مداری، اور میزان کل زاویائی معیار حرکت کے کوانٹائی اعداد کیا ہوں گے؟ ڈسپروزیم کے الیکٹران تشکیل کا خاکہ تجویز کریں۔

---

[۲۹] کرپٹان، عنصر 36 کے بعد، صورت حال زیادہ پیچیدہ ہو جاتی ہے (حالات کے ترتیب میں مہین ساخت زیادہ بڑا کردار ادا کرنے لگتا ہے) لہٰذا یہ صفحہ پر جگہ کی کمی نہیں تھی جس کی وجہ سے جدول کو یہاں اختتام پذیر کیا گیا۔

[۳۰] Hund'sfirstrule

[۳۱] Hund'ssecondrule

[۳۲] Hund'sthirdrule

جدول ۵.۱: دوری جدول کی اولین چار قطاروں کی الیکٹران تشکیلات

تشکیل		عنصر	Z
$^2S_{1/2}$	$(1s)$	H	1
$^1S_0$	$(1s)^2$	He	2
$^2S_{1/2}$	$(\mathrm{He})(2s)$	Li	3
$^1S_0$	$(\mathrm{He})(2s)^2$	Be	4
$^2P_{1/2}$	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)$	B	5
$^3P_0$	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^2$	C	6
$^4S_{3/2}$	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^3$	N	7
$^3P_2$	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^4$	O	8
$^2P_{3/2}$	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^5$	F	9
$^1S_0$	$(\mathrm{He})(2s)^2(2p)^6$	Ne	10
$^2S_{1/2}$	$(\mathrm{Ne})(3s)$	Na	11
$^1S_0$	$(\mathrm{Ne})(3s)^2$	Mg	12
$^2P_{1/2}$	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)$	Al	13
$^3P_0$	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^2$	Si	14
$^4S_{3/2}$	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^3$	P	15
$^3P_2$	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^4$	S	16
$^2P_{3/2}$	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^5$	Cl	17
$^1S_0$	$(\mathrm{Ne})(3s)^2(3p)^6$	Ar	18
$^2S_{1/2}$	$(\mathrm{Ar})(4s)$	K	19
$^1S_0$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2$	Ca	20
$^2D_{3/2}$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)$	Sc	21
$^3F_2$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^2$	Ti	22
$^4F_{3/2}$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^3$	V	23
$^7S_3$	$(\mathrm{Ar})(4s)(3d)^5$	Cr	24
$^6S_{5/2}$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^5$	Mn	25
$^5D_4$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^6$	Fe	26
$^4F_{9/2}$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^7$	Co	27
$^3F_4$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^8$	Ni	28
$^2S_{1/2}$	$(\mathrm{Ar})(4s)(3d)^{10}$	Cu	29
$^1S_0$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}$	Zn	30
$^2P_{1/2}$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)$	Ga	31
$^3P_0$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^2$	Ge	32
$^4S_{3/2}$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^3$	As	33
$^3P_2$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^4$	Se	34
$^2P_{3/2}$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^5$	Br	35
$^1S_0$	$(\mathrm{Ar})(4s)^2(3d)^{10}(4p)^6$	Kr	36

۵.۳ ٹھوس اجسام

ٹھوس حال مسیں ہر جوہر کے بیسرونی ڈھیلے مقید گرفتی [۳۳] الیکٹران مسیں سے چند ایک علیحدہ ہو کر، کسی مخصوص "موروثی" مسرکزہ کے کولمب میدان سے آزاد، تمام قلمی جال کے مخفیہ کے زیر اثر، حسرکت کرتے ہیں۔ اسس حصہ مسیں ہم دو انتہائی سادہ نمونوں پر غور کریں گے: پہلا نمونہ سمرفلڈ کا الیکٹران گیس نظریہ ہے جس مسیں (سرحد کے عسلاوہ) باقی تمام قوتوں کو نظر انداز کیا جاتا ہے اور ان الیکٹران کو (لامتناہی چوکور کنویں کے تین ابعادی مماثل کی طرح) ڈبے مسیں آزاد ذرات تصور کیا جاتا ہے؛ اور دوسرا نمونہ نظریہ بلوخ ہے جو الیکٹران کے باہمی دفع کو نظر انداز کرتے ہوئے باقاعدگی سے ایک جتنے فاصلے پر مثبت بار کے مسرکزہ کی قوت کشش کو دوری مخفیہ سے ظاہر کرتا ہے۔ یہ نمونے ٹھوس اجسام کی کوانٹائی نظریے کی طرف پہلے لڑکھڑاتے قدم ہیں، لیکن اسس کے باوجود یہ "جمود" کے حصول مسیں پالی حصول مناعت کے گہرے کردار پر اور موصل، غیر موصل، اور نیم موصل کی حیرت کن برقی خواص پر روشنی ڈالنے مسیں مدد دیتے ہیں۔

۵.۳.۱ آزاد الیکٹران گیس

فرض کریں، ایک ٹھوس جسم مستطیل شکل کا ہے جس کے اضلاع ℓ_x ، ℓ_y اور ℓ_z ہیں، اور اسس جسم کے اندر الیکٹران پر کوئی قوت اثر انداز نہیں ہوتی، ماسوائے ناقابل گزر دیواروں کے۔

$$V(x,y,z)=\begin{cases}0 & 0<x<\ell_x,\quad 0<y<\ell_y,\quad 0<z<\ell_z\\ \infty & \text{بصورت دیگر}\end{cases} \tag{۵.۳۵}$$

مساوات شروڈنگر،

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi=E\psi$$

کارتیسی محدد مسیں علیحدہ ہوتی ہے: $\psi(x,y,z)=X(x)Y(y)Z(z)$ جہاں

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2X}{\mathrm{d}x^2}=E_xX;\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2Y}{\mathrm{d}y^2}=E_yY;\quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2Z}{\mathrm{d}z^2}=E_zZ$$

اور $E=E_x+E_y+E_z$ ہوں گے۔ اب

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

[۳۳] valence

لکھ کر درج ذیل عمومی حل حاصل ہوں گے۔

$$X(x) = A_x \sin(k_x x) + B_x \cos(k_x x), \quad Y(y) = A_y \sin(k_y y) + B_y \cos(k_y y),$$
$$Z(z) = A_z \sin(k_z z) + B_z \cos(k_z z)$$

سرحدی شرائط کے تحت $X(0) = Y(0) = Z(0) = 0$ لہٰذا $B_x = B_y = B_z = 0$ اور $X(\ell_x) = Y(\ell_y) = Z(\ell_z) = 0$ ہوں گے اور یوں

$$k_x\ell_x = n_x\pi, \quad k_y\ell_y = n_y\pi, \quad k_z\ell_z = n_z\pi \tag{۵.۳۶}$$

ہوں گے جہاں ہر n ایک مثبت عدد صحیح ہو گا۔

$$n_x = 1, 2, 3, \ldots, \quad n_y = 1, 2, 3, \ldots, \quad n_z = 1, 2, 3, \ldots \tag{۵.۳۷}$$

(معمول شدہ) تفاعلات موج:

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{8}{\ell_x \ell_y \ell_z}} \sin\left(\frac{n_x\pi}{\ell_x}x\right) \sin\left(\frac{n_y\pi}{\ell_y}y\right) \sin\left(\frac{n_z\pi}{\ell_z}z\right) \tag{۵.۳۸}$$

ہوں گے اور اجازتی توانائیاں:

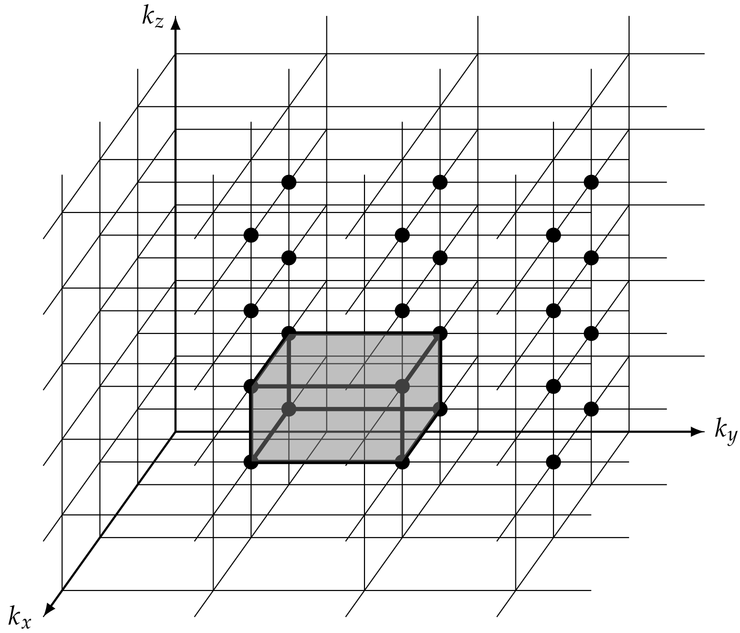
$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left(\frac{n_x^2}{\ell_x^2} + \frac{n_y^2}{\ell_y^2} + \frac{n_z^2}{\ell_z^2}\right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{۵.۳۹}$$

ہوں گی، جہاں **سمتیہ موج**[۳۴] $\boldsymbol{k} \equiv (k_x, k_y, k_z)$ کی مقدار k ہے۔

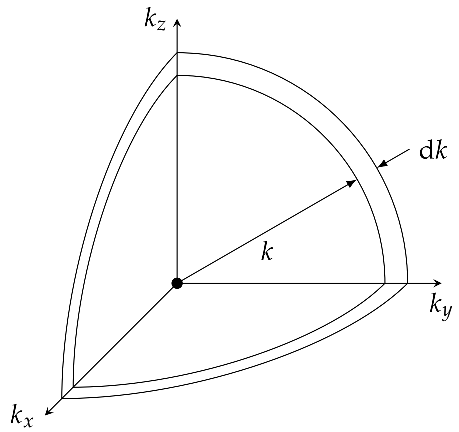
ایک تین ابعادی فضا جس کے محور k_x، k_y، k_z ہوں کا تصور کریں جس میں

$$k_x = \frac{\pi}{\ell_x}, \frac{2\pi}{\ell_x}, \frac{3\pi}{\ell_x}, \ldots$$
$$k_y = \frac{\pi}{\ell_y}, \frac{2\pi}{\ell_y}, \frac{3\pi}{\ell_y}, \ldots$$
$$k_z = \frac{\pi}{\ell_z}, \frac{2\pi}{\ell_z}, \frac{3\pi}{\ell_z}, \ldots$$

[۳۴] wavevector



شکل ۵.۳: آزاد الیکٹران گیس۔ جال کا ہر نقطہ تقاطع ایک ساکن حال کو ظاہر کرتا ہے۔ ایک "ڈبے" کو سیاہ دکھایا گیا ہے۔ ایک ڈبے کے لئے ایک حال پایا جاتا ہے۔



شکل ۵.۴: کروی خول کا k فضا میں ایک مثمن۔

پر سیدھی سطحیں پائی جاتی ہوں؛ اس فضا میں ہر انفرادی نقطہ تقاطع، منفرد یک ذروی ساکن حال دیگا (شکل ۵.۳)۔ اس جال کا ہر خانہ، اور یوں ہر حال، k فضا میں درج ذیل حجم گھیرے گا، جہاں پورے جسم کا حجم $V \equiv \ell_x\ell_y\ell_z$ ہے۔

$$\frac{\pi^3}{\ell_x\ell_y\ell_z} = \frac{\pi^3}{V} \tag{۵.۴۰}$$

فرض کریں مادہ کے ایک ٹکڑا میں N جوہر پائے جاتے ہوں اور ہر جوہر اپنے حصہ کے q آزاد الیکٹران دیتا ہو۔ (عملاً، کسی بھی کلاں بین جامت کی چیز کے لئے N کی قیمت بہت بڑی ہو گی، جس کی گنتی ایوگادرو عدد میں کی جائے گی؛ جبکہ q ایک چھوٹا عدد مثلاً 1 یا 2 ہو گا۔) اگر الیکٹران بوسن (یا قابل ممیز ذرات) ہوتے تب وہ زمینی حال ψ_{111} میں سکونت[۳۵] اختیار کرتے ہیں۔ لیکن، حقیقت میں الیکٹران متماثل فرمیان ہیں جن پر پالی اصول مناعت کا اطلاق ہوتا ہے، لہٰذا کسی بھی حال کے صرف دو الیکٹران مکین ہو سکتے ہیں۔ یوں یہ الیکٹران k فضا میں رداس k_F کے کرہ کا ایک مثمن[۳۶] بھرتے ہیں؛ اس رداس کا تعین اس حقیقت سے کیا جا سکتا ہے کہ الیکٹران کے ہر ایک جوڑے کو $\frac{\pi^3}{V}$ حجم درکار ہو گا (مساوات ۵.۴۰)۔

---

[۳۵] میں یہاں فرض کر رہا ہوں کہ ایسا کوئی حراری یا دیگر اضطراب نہیں پایا جاتا جو ٹھوس جسم کو مجموعی زمینی حال سے اٹھاتا ہو۔ میں "ٹھنڈے" ٹھوس جسم کی بات کر رہا ہوں، اگرچہ جیسا آپ سوال ۵.۱۶-ج میں دیکھیں گے، ٹھوس اجسام، رہائشی درجہ حرارت سے بہت زیادہ درجہ حرارت پر بھی موجودہ نقطہ نظر سے "ٹھنڈے" ہوتے ہیں۔

[۳۶] کیونکہ، N بہت بڑا عدد ہے لہٰذا ہمیں جال کی اصل دندانے دار سطح اور کرہ کی اس ہموار سطح میں فرق کرنے کی ضرورت نہیں جو اس کو تخمیناً ظاہر کرتی ہے۔

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

یوں

$$k_F = (3\rho\pi^2)^{\frac{1}{3}} \tag{۵.۴۱}$$

ہو گا جہاں

$$\rho \equiv \frac{Nq}{V} \tag{۵.۴۲}$$

کثافت آزاد الیکٹران[۳۷] (اکائی حجم میں آزاد الیکٹران کی تعداد) ہے۔

k فضا میں آباد حالات (الیکٹران ان کے مکین ہیں) اور غیر آباد حالات (الیکٹران ان کے مکین نہیں ہیں) کی سرحد کو **فرمی سطح**[۳۸] کہتے ہیں (جس کی بنا پر زیر نوشت میں F لکھا گیا ہے)۔ اس سطح پر طاقتی توانائی کو **فرمی توانائی**[۳۹]، E_F کہتے ہیں، آزاد الیکٹران گیس کے لئے درج ذیل ہو گا۔

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\rho\pi^2)^{\frac{2}{3}} \tag{۵.۴۳}$$

الیکٹران گیس کی کل توانائی کو درج ذیل طریقے سے حاصل کیا جا سکتا ہے: ایک خول جس کی موٹائی $\mathrm{d}k$ ہو (شکل ۵.۴) کا حجم

$$\frac{1}{8}(4\pi k^2)\,\mathrm{d}k$$

ہو گا، لہٰذا اس خول میں الیکٹران حالات کی تعداد درج ذیل ہو گی۔

$$\frac{2[(1/2)\pi k^2\,\mathrm{d}k]}{(\pi^3/V)} = \frac{V}{\pi^2}k^2\,\mathrm{d}k$$

ان میں سے ہر ایک حال کی توانائی $\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ (مساوات ۵.۳۹) ہے، لہٰذا خول کی توانائی

$$\mathrm{d}E = \frac{\hbar^2k^2}{2m}\frac{V}{\pi^2}k^2\,\mathrm{d}k \tag{۵.۴۴}$$

---

[۳۷] free electron density
[۳۸] Fermi surface
[۳۹] Fermi energy

اور کل توانائی درج ذیل ہو گی۔

$$E_{\text{کل}} = \frac{\hbar^2 V}{2\pi^2 m}\int_0^{k_F} k^4 \,\mathrm{d}k = \frac{\hbar^2 k_F^5 V}{10\pi^2 m} = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 Nq)^{5/3}}{10\pi^2 m} V^{-2/3} \tag{۵.۴۵}$$

کوانٹائی میکانی توانائی کا کردار کچھ ایسا ہی ہے جیسے سادہ گیس میں اندرونی حراری توانائی (U) کا ہوتا ہے۔ بالخصوص یہ دیواروں پر ایک دباؤ پیدا کرتا ہے اور اگر ڈبے کے حجم میں $\mathrm{d}V$ کا اضافہ ہو تب کل توانائی میں درج ذیل کمی رونما ہو گی

$$\mathrm{d}E_{\text{کل}} = -\frac{2}{3}\frac{\hbar^2 (3\pi^2 Nq)^{5/3}}{10\pi^2 m} V^{-5/3}\,\mathrm{d}V = -\frac{2}{3}E_{\text{کل}}\frac{\mathrm{d}V}{V}$$

جو کوانٹائی دباؤ P کا کیا ہوا بیرونی کام $(\mathrm{d}W = P\,\mathrm{d}V)$ ہو گا۔ ظاہر ہے کہ درج ذیل ہو گا۔

$$P = \frac{2}{3}\frac{E_{\text{کل}}}{V} = \frac{2}{3}\frac{\hbar^2 k_F^5}{10\pi^2 m} = \frac{(3\pi^2)^{2/3}\hbar^2}{5m}\rho^{5/3} \tag{۵.۴۶}$$

یہ اس سوال کا جزوی جواب ہے کہ ایک ٹھنڈا ٹھوس جسم اندر کی طرف منہدم کیوں نہیں ہو جاتا: ایک اندرونی کوانٹائی میکانی دباؤ توازن برقرار رکھتا ہے جس کا الیکٹران کے باہمی دفع (جنہیں ہم نظر انداز کر چکے ہیں) یا حراری حرکت (جس کو ہم خارج کر چکے ہیں) کے ساتھ کوئی تعلق نہیں، بلکہ جو متماثل فرمیان کی ضرورت خلاف تشاکلیت سے پیدا ہوتا ہے۔ اس کو بعض اوقات **انحطاطی دباؤ**[۴۰] کہتے ہیں، اگرچہ "مناعتی دباؤ" بہتر اصطلاح ہو گی۔[۴۱]

سوال ۵.۱۵: ایک آزاد الیکٹران کی اوسط توانائی $\frac{E_{\text{کل}}}{Nq}$ کو فرمی توانائی کی نسبت کی صورت میں لکھیں۔ جواب: $\frac{3}{5}E_F$

سوال ۵.۱۶: تانبے کی کثافت $8.96\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$ ہے، جبکہ اس کا جوہری وزن $63.5\,\mathrm{g\,mol^{-1}}$ ہے۔

ا. مساوات ۵.۴۳ استعمال کرکے $q = 1$ لیتے ہوئے تانبے کی فرمی توانائی کا حساب لگا کر نتیجے کو الیکٹران وولٹ میں لکھیں۔

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

ج. تانبا کے لئے کس درجہ حرارت پر امتیازی حراری توانائی ($k_B T$ جہاں k_B بولٹزمن مستقل اور T کیلون حرارت ہے)، فرمی توانائی کے برابر ہو گی؟ تبصرہ: اس کو **فرمی درجہ حرارت**[۴۲] کہتے ہیں۔ جب تک اصل درجہ حرارت فرمی درجہ حرارت سے کافی کم ہو، مادے کو "ٹھنڈا" تصور کیا جا سکتا ہے، اور اس میں الیکٹران نچلے ترین قابل پہنچ حال میں ہوں گے۔ کیونکہ تانبا $1356\,\mathrm{K}$ پر پگھلتا ہے، لہٰذا ٹھوس تانبا ہر صورت ٹھنڈا ہو گا۔

---

[۴۰] degeneracypressure

[۴۱] ہم نے مساوات ۵.۴۱، مساوات ۵.۴۳، مساوات ۵.۴۵، اور مساوات ۵.۴۶ لامتناہی مستطیل جسم کے لئے اخذ کیے، تاہم یہ کسی بھی شکل کے ہر اس جسم کے لئے درست ہیں جس میں ذرات کی تعداد بہت زیادہ ہو۔

[۴۲] Fermitemperature

د. الیکٹران گیس نمونہ میں تانبا کے لئے انحطاطی دباو (مساوات ۵.۴۶) کا حساب لگائیں۔

سوال ۵.۱۷: کسی جسم پر دباو میں معمولی کمی اور نتیجتاً حجم میں نسبتی اضافہ کے تناسب کو **جسیم مقیاس**[43] کہتے ہیں۔

$$B = -V\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}V}$$

دکھائیں کہ آزاد الیکٹران نمونہ میں $B = \frac{5}{3}P$ ہو گا، اور سوال ۵.۱۶-د کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے تانبے کے لئے جسیم مقیاس کی اندازاً قیمت تلاش کریں۔ تبصرہ: تجربہ سے حاصل قیمت $13.4 \times 10^{10}\,\mathrm{N\,m^{-2}}$ ہے؛ مکمل درست جواب کی توقع نہ کریں، کیونکہ ہم نے الیکٹران مرکزہ اور الیکٹران الیکٹران قوتوں کو نظر انداز کیا ہے! حقیقت میں یہ حیران کن ہے کہ حساب سے حاصل نتیجہ حقیقت کے اتنا قریب ہے۔

۵.۳.۲ پٹی دار ساخت

ہم آزاد الیکٹران نمونہ میں منظم فاصلوں پر ساکن مثبت بار کے مراکزہ کی الیکٹرانوں پر قوت کو شامل کر کے بہتر نمونہ حاصل کرتے ہیں۔ ٹھوس اجسام کا رویہ نمایاں حد تک اس حقیقت پر مبنی ہے کہ اس کا مخفیہ دوری ہوتا ہے۔ مخفیہ کی حقیقی شکل مادہ کی تفصیلی رویہ میں کردار ادا کرتی ہے۔ یہ عمل دیکھنے کی خاطر میں سادہ ترین نمونہ تیار کرتا ہوں، جسے یک بُعدی **ڈیراک کنگھی**[44] کہتے ہیں، اور جو برابر فاصلوں پر ڈیلٹا تفاعل سوزنات پر مشتمل ہوتا ہے (شکل ۵.۵)۔[45] لیکن اس سے پہلے میں ایک طاقتور مسئلہ پیش کرتا ہوں جو دوری مخفیہ کے مسائل کا حل نہایت آسان بناتا ہے۔

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

$$V(x+a) = V(x) \tag{۵.۴۷}$$

مسئلہ بلوخ[46] کہتا ہے کہ دوری مخفیہ کے لئے مساوات شروڈنگر،

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi = E\psi \tag{۵.۴۸}$$

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

$$\psi(x+a) = e^{iKa}\psi(x) \tag{۵.۴۹}$$

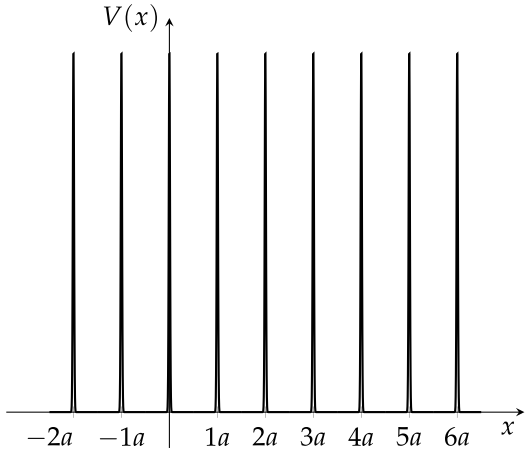
---

[43] bulkmodulus

[44] Diraccomb

[45] ڈیلٹا تفاعلات کو نیچے رخ رکھنا زیادہ ٹھیک ہوتا، جو مراکزہ کے قوت کشش کو ظاہر کرتے؛ تاہم، ایسا کرنے سے مثبت توانائی حل کے ساتھ ساتھ منفی توانائی حل بھی حاصل ہوتے جس کی بنا پر حساب کرنا زیادہ مشکل ہو جاتا ہے (سوال ۵.۲۰ دیکھیں)۔ ہم یہاں مخفیہ کی دوریت کے اثرات میں دلچسپی رکھتے ہیں؛ بظاہر کم معقول شکل منتخب کر کے مسئلے کا حل آسان ہوتا ہے؛ آپ تصور کر سکتے ہیں کہ مراکزہ $\pm a/2$، $\pm 3a/2$، $\pm 5a/2$، وغیرہ پر پائے جاتے ہیں۔

[46] Bloch'stheorem



شکل ۵.۵: ڈیراک کنگھی (مساوات ۵.۵۷)۔

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

ثبوت: مان لیں کہ D ایک "ہٹاو" عامل ہے:

$$Df(x) = f(x+a) \tag{۵.۵۰}$$

دوری مخفیہ مساوات ۵.۴۷ کی صورت میں D ہیملٹنی کا مقلوبی ہو گا:

$$[D, H] = 0 \tag{۵.۵۱}$$

لہٰذا ہم H کے ایسے امتیازی تفاعلات چن سکتے ہیں جو بیک وقت D کے امتیازی تفاعلات بھی ہوں: $D\psi = \lambda\psi$ یا درج ذیل۔

$$\psi(x+a) = \lambda\psi(x) \tag{۵.۵۲}$$

یہاں λ کسی صورت صفر نہیں ہو سکتی (اگر ایسا ہو تب چونکہ مساوات ۵.۵۲ تمام x کے لئے مطمئن ہو گا، لہٰذا ہمیں $\psi(x) = 0$ ملے گا جو قابل قبول امتیازی تفاعل نہیں ہے)؛ کسی بھی غیر صفر مخلوط عدد کی طرح، اس کو قوت نمائی روپ میں لکھا جا سکتا ہے:

$$\lambda = e^{iKa} \tag{۵.۵۳}$$

جہاں K ایک مستقل ہو گا۔

□

اس مقام پر مساوات ۵.۵۳ امتیازی قیمت λ لکھنے کا ایک انوکھا طریقہ ہے، لیکن ہم جلد دیکھیں گے کہ K "حقیقی" ہے اور یوں اگرچہ $\psi(x)$ خود غیر دوری ہے $\left|\psi(x)\right|^2$:

$$\left|\psi(x+a)\right|^2 = \left|\psi(x)\right|^2 \tag{۵.۵۴}$$

دوری ہو گا، جیسا کہ ہم توقع کرتے آئے ہیں۔[۴۷]

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

$$\psi(x+Na) = \psi(x) \tag{۵.۵۵}$$

یوں (مساوات ۵.۴۹ کے تحت) درج ذیل ہو گا

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

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

$$K = \frac{2\pi n}{Na}, \qquad (n = 0, \pm1, \pm2, \dots) \tag{۵.۵۶}$$

(درج بالا مساوات میں حقیقتاً $n = 0, 1, 2, \cdots, N-1$ ہو گا؛ تفصیل کے لئے مساوات ۵.۶۲ کے نیچے پیراگراف پڑھیں۔) موجودہ صورت میں K لازماً حقیقی ہو گا۔ مسئلہ بلوخ کی افادیت یہ ہے کہ ہمیں صرف ایک خانہ (مثلاً $(0 \leq x < a)$ کے وقفہ) پر مسئلہ شروڈنگر حل کرنا ہو گا؛ مساوات ۵.۴۹ کی بار بار اطلاق سے باقی تمام جگہوں کے لئے حل حاصل ہو گا۔

اب فرض کریں کہ مخفیہ درحقیقت (درج ذیل) نوکیلی ڈیلٹا تفاعل سوزنات (ڈیراک کنگھی) پر مشتمل ہو۔

$$V(x) = \alpha \sum_{j=0}^{N-1} \delta(x - ja) \tag{۵.۵۷}$$

(شکل ۵.۵ میں آپ تصور کریں گے کہ محور x کو یوں دائروی شکل میں لپیٹا گیا ہے کہ N ویں سوزن درحقیقت نقطہ $x = -a$ پر پائی جاتی ہے۔) اگرچہ یہ حقیقت پسند نمونہ نہیں ہے، لیکن یاد رہے، ہمیں صرف دوریت کے

[۴۷] یقیناً، آپ دلیل کو الٹ کر کے مساوات ۵.۵۴ سے آغاز کرتے ہوئے مسئلہ بلوخ ثابت کرنا چاہیں گے۔ ایسا کرنا ممکن نہیں ہے، کیونکہ مساوات ۵.۴۹ کے پیچھے جزو ضربی کو x کا تفاعل ہونے کی اجازت صرف مساوات ۵.۵۴ دیتی ہے۔

اثرات میں دلچسپی ہے؛ کلاسیکی **کرانگ و پینی نمونہ**[۴۸] میں دہراتا ہوا مستطیل مخفیہ استعمال کیا گیا، جواب بھی بہت سے مصنفین کا پسندیدہ مخفیہ ہے۔ خطہ $(0 < x < a)$ میں مخفیہ صفر ہوگا، لہٰذا

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

یا

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

ہوگا، جہاں ہمیشہ کی طرح درج ذیل ہوگا۔

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \tag{۵.۵۸}$$

اس کا عمومی حل درج ذیل ہے۔

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx), \qquad (0 < x < a). \tag{۵.۵۹}$$

مسئلہ بلوخ کے تحت مبدا کے بائیں جانب پہلے خانہ میں تفاعل موج درج ذیل ہوگا۔

$$\psi(x) = e^{-iKa}[A\sin k(x+a) + B\cos k(x+a)], \qquad (-a < x < 0). \tag{۵.۶۰}$$

نقطہ $x = 0$ پر ψ لازماً استمراری ہوگا، لہٰذا

$$B = e^{-iKa}[A\sin(ka) + B\cos(ka)] \tag{۵.۶۱}$$

ہوگا؛ اس کے تفرق میں ڈیلٹا تفاعل کے زور کے براہ راست متناسب عدم استمرار پایا جائے گا (مساوات ۲.۱۲۵، جس میں α کی علامت اُلٹ ہوگی، چونکہ یہاں کنووں کی بجائے سوزنات پائے جاتے ہیں):

$$kA - e^{-iKa}k[A\cos(ka) - B\sin(ka)] = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}B \tag{۵.۶۲}$$

مساوات ۵.۶۱ کو $A\sin(ka)$ کے لئے حل کرتے ہیں۔

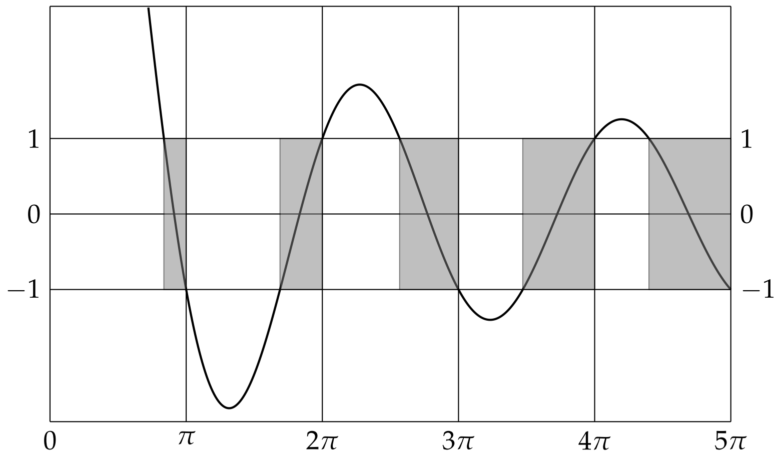
$$A\sin(ka) = [e^{iKa} - \cos(ka)]B \tag{۵.۶۳}$$

اس کو مساوات ۵.۶۲ میں پُر کر کے اور k_B کو منسوخ کرتے ہوئے

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

---

[۴۸] Kronig-Penny model



شکل ۵.۶: تفاعل $f(z)$ (مساوات ۵.۶۶) کو $\beta = 10$ کے لئے ترسیم کر کے اجازتی پٹیاں (سایہ دار) دکھائی گئی ہیں جن کے بیچ ممنوعہ درز (جہاں $|f(z)| > 1$ ہو گا) پائے جاتے ہیں۔

حاصل ہو گا، جس سے درج ذیل سادہ روپ حاصل ہوتا ہے۔

$$\cos(Ka) = \cos(ka) + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}\sin(ka) \tag{۵.۶۴}$$

یہ وہ بنیادی نتیجہ ہے جس سے باقی سب کچھ اخذ ہوتا ہے۔ کرانگ و پینی مخفیہ کے لئے کلیہ زیادہ پیچیدہ ہو گا، لیکن جو خدوخال ہم دیکھنے جا رہے ہیں، وہی اس میں بھی پائے جاتے ہیں۔

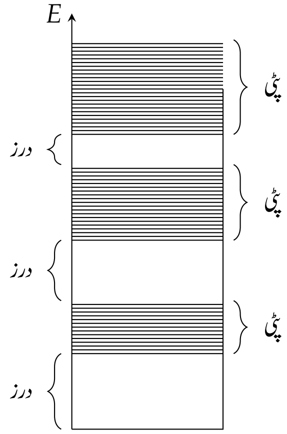
مساوات ۵.۶۴ متغیر k کی ممکنہ قیمتیں، لہٰذا اجازتی توانائیاں، تعین کرتی ہے۔ علامتیت کو سادہ بنانے کی غرض سے ہم درج ذیل لکھتے ہیں

$$z \equiv ka, \quad \beta \equiv \frac{m\alpha a}{\hbar^2} \tag{۵.۶۵}$$

جس سے مساوات ۵.۶۴ کا دایاں ہاتھ درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$f(z) \equiv \cos(z) + \beta\frac{\sin(z)}{z} \tag{۵.۶۶}$$

مستقل β، ڈیلٹا تفاعل کے "زور" کا، بے بُعدی ناپ ہے۔ شکل ۵.۶ میں میں نے $\beta = 10$ کے لئے $f(z)$ کو ترسیم کیا ہے۔ یہاں دیکھنے کی اہم بات یہ ہے کہ $f(z)$ سعت $(-1, +1)$ سے باہر بھٹکتا ہے، اور چونکہ $|\cos(Ka)|$ کی قیمت کسی صورت بھی 1 سے تجاوز نہیں کر سکتی، لہٰذا ایسے خطوں میں مساوات ۵.۶۴ کا حل



شکل ۵.۷: دوری مخفیہ کی اجازتی توانائیاں بنیادی طور پر استمراری پٹیاں پیدا کرتی ہیں۔

نہیں پایا جائے گا۔ یہ **درز**[۴۹] ممنوع توانائیوں کو ظاہر کرتی ہیں؛ انکے بیچ اجازتی توانائیوں کی **پٹیاں**[۵۰] پائی جاتی ہیں۔ مساوات ۵.۵۶ کے تحت، $Ka = \frac{2\pi n}{N}$ ہوگا، جہاں N ایک بہت بڑا عدد ہے، لہٰذا n کوئی بھی عدد صحیح ہو سکتا ہے۔ یوں کسی ایک پٹی میں تقریباً ہر توانائی اجازتی ہوگی۔ آپ تصور میں شکل ۵.۶ پر $\cos\left(\frac{2\pi n}{N}\right)$ قیمت کے فاصلوں پر $+1$ (یعنی $n = 0$) سے لے کر نیچے -1 (یعنی $n = \frac{N}{2}$) تک اور واپس تقریباً $+1$ (یعنی $n = N - 1$) تک (جہاں بلوخ جزو ضربی e^{iKa} دوبارہ چکر شروع کرتا ہے لہٰذا n کو مزید بڑھانے سے کوئی نیا حل حاصل نہیں ہوگا) لکیریں کھینچ کر دیکھ سکتے ہیں۔ ہر لکیر کا $f(z)$ کے ساتھ تقاطع، ایک اجازتی توانائی دیگا۔ ظاہر ہے کہ ہر پٹی میں N حالات پائے جاتے ہیں، جو ایک دوسرے کے اتنے قریب ہیں کہ عموماً مقاصد کے لئے ہم فرض کر سکتے ہیں کہ یہ ایک استمراریہ پیدا کرتے ہیں (شکل ۵.۷)۔ (یوں مساوات ۵.۵۶ میں $n = 0, \pm 1, \cdots$ کی بجائے $n = 0, 1, \cdots, N - 1$ ہوگا۔)

اب تک ہم نے اپنے مخفیہ میں صرف ایک الیکٹران رکھا ہے۔ حقیقت میں N_q الیکٹران ہوں گے، جہاں ہر ایک جوہر q تعداد کے آزاد الیکٹران مہیا کرے گا۔ پالی اصول مناعت کی بنا پر صرف دو الیکٹران کسی ایک فضائی حال کے مکین ہو سکتے ہیں، یوں $q = 1$ کی صورت میں یہ زمینی حال میں پہلی پٹی کو آدھا بھریں گے، اگر $q = 2$ ہو تب یہ پہلی پٹی کو مکمل بھریں گے، اگر $q = 3$ ہو تب یہ دوسری پٹی کو آدھا بھریں گے، وغیرہ وغیرہ۔ (تین ابعاد میں، اور زیادہ حقیقی مخفیہ کی صورت میں، پٹیوں کی ساخت زیادہ پیچیدہ ہو سکتی ہے، لیکن اجازتی پٹیاں جن کے بیچ ممنوع درز پائے جاتے ہوں، تب بھی ہوں گی؛ دوری مخفیہ کی نشانی ہی پٹی دار ساخت ہے۔)

اب اگر ایک پٹی مکمل طور پر بھری ہوئی ہو، ممنوع خطہ سے گزر کر اگلی پٹی تک چھلانگ کے لئے ایک الیکٹران کو نسبتاً زیادہ توانائی درکار ہوگی؛ ایسا مادہ برقی طور پر **غیر موصل**[۵۱] ہوگا۔ اس کے برعکس اگر ایک پٹی پوری طرح بھری نہ ہو

[۴۹] gaps
[۵۰] bands
[۵۱] insulator

تب ایک الیکٹران کو ہیجان[۵۲] کرنے کے لئے بہت کم توانائی درکار ہو گی؛ اس طرح کا مادہ عموماً **موصل**[۵۳] ہو گا۔ ایک غیر موصل میں، زیادہ یا کم q والے، چند جوہر کی **ملاوٹ**[۵۴] سے، اگلی بالا پٹی میں چند اضافی الیکٹران آ جاتے ہیں، یا سابقہ بھری پٹی میں چند **خول**[۵۵] پیدا ہو جاتے ہیں؛ ان دونوں صورتوں میں ایک کمزور برقی رو گزر سکتا ہے؛ ایسی اشیاء **نیم موصل**[۵۶] کہلاتی ہیں۔ آزاد الیکٹران نمونہ میں تمام ٹھوس اجسام کو لازماً اچھا موصل ہونا ہو گا چونکہ انکی اجازتی توانائیوں کے طیف میں کوئی بڑا وقفہ نہیں پایا جاتا۔ قدرت میں پائے جانے والے ٹھوس اجسام کی برقی موصلیت میں اتنا زیادہ فرق صرف پٹی دار نظریہ کی مدد سے سمجھا سکتا ہے۔

سوال ۵.۱۸:

ا. مساوات ۵.۵۹ اور مساوات ۵.۶۳ استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ دوری ڈیلٹا تفاعل مخفیہ میں ایک ذرے کا تفاعل موج درج ذیل روپ میں لکھا جا سکتا ہے۔

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

(معمول زنی مستقل C کا تعین کرنے کی ضرورت نہیں۔)

ب. البتہ پٹی کے بالائی سر پر، جہاں z مستقل π کا عدد صحیح مضرب ہو گا (شکل ۵.۶)، جزو-الف $\psi(x) = 0$ دیگا۔ ایسی صورت میں درست تفاعل موج تلاش کریں۔ دیکھیں کہ ہر ایک ڈیلٹا تفاعل پر ψ کو کیا ہوتا ہے؟

سوال ۵.۱۹: پہلی اجازتی پٹی کی تہہ پر، $\beta = 10$ کی صورت میں توانائی کی قیمت، تین بامعنی ہندسوں تک، تلاش کریں۔ دلائل پیش کرتے ہوئے $\frac{\alpha}{a} = 1\,\text{eV}$ تصور کریں۔

سوال ۵.۲۰: فرض کریں ہم ڈیلٹا تفاعل سوزنات کے بجائے ڈیلٹا تفاعل کنووں پر غور کر رہے ہیں (یعنی مساوات ۵.۵۷ میں α کی علامت الٹ ہے)۔ ایسی صورت میں شکل ۵.۶ اور شکل ۵.۷ طرز کی اشکال بنا کر تجزیہ کریں۔ مثبت توانائی حلوں کے لئے آپ کو کوئی نیا حساب کرنے کی ضرورت نہیں ہے (بس مساوات ۵.۶۶ میں موزوں تبدیلیاں لائیں)، لیکن منفی توانائی حلوں کے لئے آپ کو کام کرنا ہو گا؛ اور انہیں ترسیم پر شامل کرنا مت بھولیں (جواب منفی z تک وسیع ہو گا)۔ پہلی اجازتی پٹی میں کتنے حالات ہونگے؟

سوال ۵.۲۱: دکھائیں کہ مساوات ۵.۶۴ سے متعین زیادہ تر توانائیاں دوہری انحطاطی ہیں۔ کونسی توانائیاں ایسی نہیں ہیں؟ اشارہ: $N = 1, 2, 3, 4, \ldots$ لیتے ہوئے دیکھیں کہ کیا ہوتا ہے۔ ایسی ہر صورت میں $\cos(Ka)$ کی کیا ممکنہ قیمتیں ہوں گی؟

---

[۵۲] غیر مکمل بھری پٹی میں الیکٹران کی موجودہ توانائی سے معمولی زیادہ توانائی والا حال دستیاب ہو گا جس میں الیکٹران ہیجان ہو کر داخل ہو سکتا ہے۔
[۵۳] conductor
[۵۴] dope
[۵۵] hole
[۵۶] semiconductors

۵.۴ کوانٹائی شماریاتی میکانیات

مطلق صفر حرارت پر ایک طبیعی نظام اپنی اقل اجازتی توانائی تشکیل کا مکین ہو گا۔ درجہ حرارت بڑھانے سے بلا منصوبہ حراری سرگرمیوں کی بنا پر ہیجانی حالات بھرنے شروع ہوں گے، جس سے درج ذیل سوال پیدا ہوتا ہے: اگر درجہ حرارت T پر، حراری توازن میں N ذرات پائے جاتے ہوں، جہاں N ایک بڑا عدد ہے، تب اس کا کیا احتمال ہو گا کہ ایک ذرہ جس کو بلا منصوبہ منتخب کیا گیا ہو، کی توانائی بالخصوص E_j ہو گی؟ دھیان رہے کہ اس "احتمال" کا کوانٹائی عدم تعیینیت کے ساتھ کوئی تعلق نہیں؛ بالکل یہی سوال کلاسیکی شماریاتی میکانیات میں بھی کھڑا ہوتا ہے۔ ہمیں احتمالی جواب اس لئے منظور ہو گا کہ جن ذرات کی بات ہم کر رہے ہیں انکی تعداد اتنی زیادہ ہو گی کہ کسی بھی صورت میں ہر ایک پر علیحدہ علیحدہ نظر رکھنا ممکن نہیں ہو گا، چاہے مستمل میکانیات تعیینی ہو یا نہ ہو۔

شماریاتی میکانیات کا بنیادی مفروضہ یہ ہے کہ **حراری توازن**[۵۷] میں ایک جیسی کل توانائی، E، والا ہر منفرد حال ایک جتنا محتمل ہو گا۔ بلا واسطہ حراری حرکت کی بنا پر توانائی ایک ذرہ سے دوسرے ذرہ، اور ایک روپ (حرکی، گردشی، لرزشی، وغیرہ) سے دوسرے روپ میں مسلسل منتقل ہو گا لیکن (بیرونی مداخلت کی عدم موجودگی میں) بقا توانائی کی بنا پر کل مقررہ ہو گا۔ یہاں (بہت گہرا اور قابل سوچ) مفروضہ یہ ہے کہ توانائی کی مستمر تقسیم کسی مخصوص حال کو ترجیح نہیں دیتی۔ **درجہ حرارت**[۵۸]، T، حراری توازن میں ایک نظام کی کل توانائی کی ایک پیمائش ہے۔ ان منفرد حالات کی گنتی میں کوانٹائی میکانیات ایک نئی پیچیدگی پیدا کرتی ہے (تاہم حالات غیر مسلسل ہوتے ہیں جس کی بنا پر یہ کلاسیکی نظریہ کی گنتی سے زیادہ آسان ہو گا)، اور گنتی کا انحصار اس بات پر ہو گا کہ آیا ذرات قابل ممیز، متماثل بوسن یا متماثل فرمیان ہیں۔ ان کے دلائل نسبتاً سیدھے لیکن ریاضی کافی گہری ہے، لہٰذا میں ایک انتہائی سادہ مثال سے شروع کرتا ہوں تاکہ آپ بنیادی حقائق سمجھ سکیں۔

۵.۴.۱ ایک مثال

فرض کریں ہمارے پاس یک بُعدی لامتناہی چوکور کنویں (حصہ ۲.۲) میں، کمیت m والے، صرف تین باہم غیر متعامل ذرات پائے جاتے ہیں۔ کل توانائی درج ذیل ہو گی (مساوات ۲.۲۷ دیکھیں)

$$E = E_A + E_B + E_C = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}(n_A^2 + n_B^2 + n_C^2) \tag{۵.۶۷}$$

جہاں n_A، n_B اور n_C مثبت عدد صحیح ہوں گے۔ ہم $E = 363\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right)$ یعنی

$$n_A^2 + n_B^2 + n_C^2 = 363 \tag{۵.۶۸}$$

لیتے ہوئے تبصرہ جاری رکھتے ہیں۔ جیسا کہ آپ تصدیق کر سکتے ہیں، تین مثبت عدد صحیح اعداد کے تیرہ ایسے ملاپ پائے جاتے ہیں جن کے مربعوں کا مجموعہ 363 ہو: تینوں اعداد 11 ہو سکتے ہیں، دو اعداد 13 اور

---

[۵۷] thermal equilibrium
[۵۸] temperature

ایک 5 (جو تین مرتب اجتماعات میں پایا جائے گا)، ایک عدد 19 اور دو 1 (یہاں بھی تین مرتب اجتماعات ہوں گے)، یا ایک عدد 17، ایک 7 اور ایک 5 (چھ مرتب اجتماعات) ہو سکتے ہیں۔ یوں (n_A, n_B, n_C) درج ذیل میں سے ایک ہو گا۔

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

اگر یہ ذرات قابل ممیز ہوں، تب ان میں سے ہر ایک کسی ایک منفرد کوانٹائی حال کو ظاہر کرے گا، اور شماریاتی میکانیات کے بنیادی مفروضے کے تحت، حراری توازن[59] میں یہ سب برابر محتمل ہوں گے۔ لیکن میں اس میں دلچسپی نہیں رکھتا کہ کونسا ذرہ کس (یک ذروی) حال میں پایا جاتا ہے، بلکہ میں یہ جاننا چاہتا ہوں کہ ہر ایک حال میں کل کتنے ذرات پائے جاتے ہیں؛ جس کو حال ψ_n کی **تعداد مکین**[60] N_n کہتے ہیں۔ ہم اس 3 ذروی حال کی تمام تعداد مکین کے اجتماع کو **تشکیل**[61] کہتے ہیں۔ اگر تینوں حال ψ_{11} میں ہوں تب تشکیل درج ذیل ہو گی

$$
(0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,3,0,0,0,0,0,0,0,\dots) \tag{۵.۶۹}
$$

(یعنی $N_{11} = 3$ ہے اور باقی تمام صفر ہیں)۔ اگر دو حال ψ_{13} میں اور ایک ψ_5 میں ہو، تب تشکیل درج ذیل ہو گی

$$
(0,0,0,0,1,0,0,0,0,0,0,0,2,0,0,0,0,\dots) \tag{۵.۷۰}
$$

(یعنی $N_5 = 1$، $N_{13} = 2$، اور باقی تمام صفر ہوں گے)۔ اگر دو ψ_1 میں اور ایک ψ_{19} میں ہو تب تشکیل درج ذیل ہو گی

$$
(2,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,\dots) \tag{۵.۷۱}
$$

(یعنی $N_1 = 2$، $N_{19} = 1$ اور باقی تمام صفر ہوں گے)۔ اور اگر ایک ذرہ ψ_5 میں، ایک ψ_7 میں اور ایک ψ_{17} میں ہو تب تشکیل درج ذیل ہو گی

$$
(0,0,0,0,1,0,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,0,\dots) \tag{۵.۷۲}
$$

---

[59] غیر متعامل ذرات کس طرح حراری توازن برقرار رکھتے ہیں؟ میں اس کے بارے میں سوچنا نہیں چاہوں گا؛ حقیقتاً، توانائی کی مستمر نئی تقسیم ذرات کے باہم عمل سے ہی ممکن ہو گی۔ ہم فرض کر سکتے ہیں کہ ذرات کا باہم عمل اتنا کمزور ہے کہ اگرچہ یہ (لمبے عرصے کی صورت میں) حراری توازن پیدا کرتا ہے، تاہم یہ اتنا کمزور ہے کہ نظام کے ساکن حالات اور اجازتی توانائیوں پر قابل دید اثر نہیں ڈالتا۔

[60] occupationnumber

[61] configuration

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

میں اب دوبارہ اپنے اصل سوال پر آتا ہوں کہ بلا واسطہ تین ذرات منتخب کرتے ہوئے کوئی مخصوص (اجازتی) توانائی E_n حاصل کرنے کا احتمال (P_n) کیا ہو گا؟ توانائی E_1 صرف اس صورت حاصل ہو گی جب وہ تیسری تشکیل (مساوات ۵.۷۱) میں ہو؛ اس تشکیل میں نظام ہونے کا اتفاق 13 میں سے 3 ہے، اور اس تشکیل میں E_1 کے حصول کا احتمال $\frac{2}{3}$ ہے لہٰذا $P_1 = \frac{3}{13} \times \frac{2}{3} = \frac{2}{13}$ ہو گا۔ آپ E_5 کو تشکیل 2 (مساوات ۵.۷۰) سے 13 میں سے 3 امکان اور احتمال $\frac{1}{3}$ یا تشکیل 4 (مساوات ۵.۷۲) سے 13 میں سے 6 امکان اور احتمال $\frac{1}{3}$ کے ساتھ حاصل کر سکتے ہیں، لہٰذا $P_5 = \frac{3}{13} \times \frac{1}{3} + \frac{6}{13} \times \frac{1}{3} = \frac{3}{13}$ ہو گا۔ آپ E_7 کو صرف تشکیل 4 سے حاصل کر سکتے ہیں اور $P_7 = \frac{6}{13} \times \frac{1}{3} = \frac{2}{13}$ ہو گا۔ اسی طرح E_{11} صرف پہلی تشکیل (مساوات ۵.۶۹) سے 13 میں سے 1 امکان اور احتمال ایک (1) کے ساتھ حاصل ہو گا، لہٰذا $P_{11} = \frac{1}{13}$ ہو گا۔ اسی طرح $P_{13} = \frac{3}{13} \times \frac{2}{3} = \frac{2}{13}$، $P_{17} = \frac{6}{13} \times \frac{1}{3} = \frac{2}{13}$ اور $P_{19} = \frac{3}{13} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{13}$ ہوں گے۔ انکی تصدیق درج ذیل سے ہو گی۔

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

یہ قابل ممیز ذرات کے لئے تھا۔ اس کی بجائے اگر ذرات متماثل فرمیان ہوتے، ضرورت خلاف تشاکلیت (اپنی آسانی کے لئے چکر کو نظر انداز کرتے ہوئے، یا اگر آپ چاہیں تو، یہ تصور کرتے ہوئے کہ تمام ایک جیسے چکری حال میں ہیں) کی بنا پر پہلی تین تشکیلات (جو دو ذرات کو، یا اس سے بھی بری صورت میں تین ذرات کو، ایک ہی حال میں ڈالتے ہیں) ناممکن ہوں گی، اور چوتھی تشکیل میں صرف ایک حال ہو گا (سوال ۵.۲۲-الف دیکھیں)۔ متماثل فرمیان کے لئے $P_5 = P_7 = P_{17} = \frac{1}{3}$ ہو گا (اور اب بھی احتمالات کا مجموعہ ایک (1) ہے)۔ اس کے برعکس، اگر ذرات متماثل بوسن ہوتے تو ضرورت تشاکلیت ہر تشکیل میں ایک حال کی اجازت دیتا (سوال ۵.۲۲-ب دیکھیں)، لہٰذا $P_1 = \frac{1}{4} \times \frac{2}{3} = \frac{1}{6}$، $P_5 = \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} + \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{6}$، $P_7 = \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{12}$، $P_{11} = \frac{1}{4} \times 1 = \frac{1}{4}$، $P_{13} = \frac{1}{4} \times \frac{2}{3} = \frac{1}{6}$، $P_{17} = \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{12}$ اور $P_{19} = \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{12}$ ہوتا۔ ہمیشہ کی طرح احتمالات کا مجموعہ ایک (1) ہے۔

اس مثال کا مقصد آپ کو یہ دکھانا تھا کہ حالات کی شمار کس طرح ذرات کی قسم پر منحصر ہوتی ہے۔ ایک لحاظ سے حقیقی صورت، جہاں N ایک بہت بڑا عدد ہو گا، سے یہ مثال زیادہ پیچیدہ تھی۔ چونکہ N کی قیمت بڑھانے سے زیادہ محتمل تشکیل (جو قابل ممیز ذرات کے لئے اس مثال میں $N_5 = N_7 = N_{17} = 1$ ہے) پایا جانے کا امکان اتنا زیادہ ہو جائے گا کہ کسی بھی شماریاتی مقاصد کے لئے باقی تمام امکانات کو رد کیا جا سکتا ہے:[۶۲] توازن کی صورت میں انفرادی ذروی توانائیوں کی تقسیم، انکی اعظم محتمل تشکیل میں تقسیم ہے۔ (اگر $N = 3$ کے لئے یہ درست ہوتا، جو کہ یہ نہیں ہے، ہم قابل ممیز ذرات کے لئے $P_5 = P_7 = P_{17} = \frac{1}{3}$ اخذ کرتے۔) میں حصہ ۵.۴.۳ میں اس نقطہ پر دوبارہ آؤں گا لیکن اس سے پہلے گنتی کی ترکیب کو عمومیت دیتے ہیں۔

---

[۶۲] بڑے اعداد کی شماریات کا یہ ایک حیرت کن اور غیر متوقع حقیقت ہے۔

سوال ۵.۲۲:

ا. حال ψ_5 میں ایک، حال ψ_7 میں ایک، اور حال ψ_{17} میں ایک متماثل تین فرمیان کا مکمل خلاف تشاکلی تفاعل موج $\psi(x_A, x_B, x_C)$ تیار کریں۔

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

سوال ۵.۲۳: فرض کریں یک بُعدی ہارمونی ارتعاشی مخفیہ میں آپ کے پاس تین باہم غیر متعامل ذرات، حراری توازن میں پائے جاتے ہوں، جن کی کل توانائی $E = \frac{9}{2}\hbar\omega$ ہے۔

ا. اگر یہ (ایک جیسی کمیت کے) قابل ممیز ذرات ہوں تب انکی تعداد مکین کی کتنی تشکیلات ہوں گی اور ہر ایک کے لئے کتنے منفرد (تین ذروی) حالات ہوں گے؟ سب سے زیادہ محتمل تشکیل کیا ہو گی؟ اگر آپ ایک ذرہ بلا منصوبہ منتخب کر کے اسکی توانائی کی پیمائش کریں تو کیا قیمتیں متوقع ہوں گی اور ہر ایک کا احتمال کیا ہو گا؟ سب سے زیادہ محتمل توانائی کیا ہو گی؟

ب. یہی کچھ متماثل فرمیان کے لئے کریں (چکر کو نظر انداز کریں جیسا ہم نے حصہ ۵.۴.۱ میں کیا)۔

ج. یہی کچھ (چکر نظر انداز کرتے ہوئے) متماثل بوسن کے لئے کریں۔

۵.۴.۲ عمومی صورت

اب ایک ایسے اختیاری مخفیہ پر غور کرتے ہیں جس کی یک ذروی توانائیاں E_1، E_2، E_3، ... اور انحطاط d_1، d_2، d_3، ... ہوں (یعنی توانائی E_n کے d_n منفرد یک ذروی حالات ہیں)۔ فرض کریں ہم (ایک جیسی کمیت کے) N ذرات کو اس مخفیہ میں رکھتے ہیں؛ ہم تشکیل $(N_1, N_2, N_3, \ldots)$ میں دلچسپی رکھتے ہیں جس میں N_1 ذرات کی توانائی E_1، N_2 ذرات کی توانائی E_2، وغیرہ ہو گی۔ سوال: ایسا کتنے مختلف طریقوں سے کیا جا سکتا ہے (بلکہ یہ کہنا زیادہ درست ہو گا کہ اس مخصوص تشکیل کے مطابقتی کتنے منفرد حالات ہونگے)؟ اس کے جواب $Q(N_1, N_2, N_3, \ldots)$ کا انحصار اس بات پر ہو گا کہ آیا ذرات قابل ممیز، متماثل فرمیان، یا متماثل بوسن ہیں، لہٰذا ہم ان تین صورتوں پر علیحدہ علیحدہ غور کرتے ہیں۔

ہم پہلے یہ فرض کرتے ہیں کہ ذرات قابل ممیز ہیں۔ دستیاب کل N ذرات میں سے کتنے طریقوں سے N_1 منتخب کر کے پہلے "ٹوکرے" میں رکھے جا سکتے ہیں؟ جواب: **ثنائی عددی سر**[۴۳]:

$$\binom{N}{N_1} \equiv \frac{N!}{N_1!(N-N_1)!} \tag{۵.۷۳}$$

N_1 کو N میں سے منتخب کرتا ہے۔ پہلا ذرہ N مختلف طریقوں سے منتخب کیا جا سکتا ہے، جس کے بعد $(N-1)$ ذرات رہ جاتے ہیں لہٰذا دوسرے ذرے کے انتخاب کے $N-1$ مختلف طریقے ہوں گے،

[۴۳] binomial coefficient

وغیرہ۔

$$N(N-1)(N-2)\dots(N-N_1+1)=\frac{N!}{(N-N_1)!}$$

لیکن یہ N_1 ذرات کے $N_1!$ مختلف مرتب اجتماعات کو علیحدہ علیحدہ گنتا ہے جبکہ ہمیں اس سے کوئی دلچسپی نہیں کے عدد 37 کو پہلے انتخاب میں یا 29 ویں انتخاب میں منتخب کیا گیا؛ لہٰذا ہم $N_1!$ سے تقسیم کرتے ہیں جس سے مساوات ۵.۷۳ حاصل ہوتا ہے۔ اب پہلے ٹوکرے کے اندر ان N_1 ذرات کو کتنے مختلف طریقوں سے رکھا جا سکتا ہے؟ چونکہ پہلے ٹوکرے میں d_1 حالات ہیں لہٰذا ہر ایک ذرے کو d_1 مختلف طریقوں سے چنا جا سکتا ہے؛ یوں کل ممکنات $(d_1)^{N_1}$ ہوں گے۔ اس طرح ایک ٹوکرا، جس میں d_1 منفرد حق انتخاب ہوں، میں کل آبادی N میں سے N_1 ذرات منتخب کر کے رکھنے کی تعداد درج ذیل ہو گی۔

$$\frac{N!d_1^{N_1}}{N_1!(N-N_1)!}$$

دوسرے ٹوکرے میں صرف $(N-N_1)$ ذرات ہونے کے علاوہ بالکل ایسا ہی ہو گا:

$$\frac{(N-N_1)!d_2^{N_2}}{N_2!(N-N_1-N_2)!}$$

وغیرہ وغیرہ۔ اس طرح درج ذیل ہو گا

$$\begin{aligned}
&Q(N_1,N_2,N_3,\dots)\\
&\quad=\frac{N!d_1^{N_1}}{N_1!(N-N_1)!}\frac{(N-N_1)!d_2^{N_2}}{N_2!(N-N_1-N_2)!}\frac{(N-N_1-N_2)!d_3^{N_3}}{N_3!(N-N_1-N_2-N_3)!}\cdots\\
&\quad=N!\frac{d_1^{N_1}d_2^{N_2}d_3^{N_3}\dots}{N_1!N_2!N_3!\dots}=N!\prod_{n=1}^{\infty}\frac{d_n^{N_n}}{N_n!}
\end{aligned}\tag{۵.۷۴}$$

(یہاں رک کر حصہ ۵.۴.۱ میں دیے گئے مثال کے لئے اس نتیجے کی تصدیق کریں۔ سوال ۵.۲۴ دیکھیں)

متماثل فرمیان کے لئے یہ مسئلہ نسبتاً بہت آسان ہے۔ چونکہ یہ غیر ممیز ہیں لہٰذا اس سے کوئی فرق نہیں پڑتا کہ کون سے ذرات کن حالات میں ہیں؛ ضرورت خلاف تشاکلیت کے تحت ایک مخصوص یک ذروی حالات کے سلسلہ کو بھرنے کے لئے صرف ایک N ذروی حال ہو گا۔ مزید واحد ایک ذرہ کسی ایک حال کو بھر سکتا ہے۔ لہٰذا n ویں ٹوکرا میں N_n بھرے حالات کو منتخب کرنے کے

$$\binom{d_n}{N_n}$$

طریقے[64] ہونگے۔ اس طرح درج ذیل ہوگا

$$Q(N_1, N_2, N_3, \dots) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{d_n!}{N_n!(d_n - N_n)!} \tag{۵.۷۵}$$

(اس کی تصدیق حصہ ۵.۴.۱ میں دیے گئے مثال کے لئے کریں۔ سوال ۵.۲۴ دیکھیں)۔

متماثل بوسن کے لیے یہ حساب سب سے مشکل ہوگا۔ یہاں ضرورت تشاکلیت کے تحت ایک ذروی حالات کے ایک مخصوص سلسلہ کو بھرنے کا صرف ایک N ذروی حال ہوگا، تاہم اس مرتبہ ایک ذروی حال کو بھرنے کے لئے ذرات کی تعداد پر پابندی عائد نہیں ہوگی۔ یہاں n ویں ٹوکرے کیلئے سوال یہ ہوگا: ہم متماثل N_n ذرات کو d_n مختلف خانوں میں کس طرح رکھ سکتے ہیں؟ غیر مرتب اجتماعات کے اس سوال کو حل کرنے کے کئی طریقے ہیں۔ ایک دلچسپ طریقہ درج ذیل ہے: ہم ذرہ کو نقطہ اور خانوں کو صلیب سے ظاہر کرتے ہیں؛ یوں مثال کے طور پر، $d_n = 5$ اور $N_n = 7$ کی صورت میں

$$\bullet \quad \bullet \quad \times \quad \bullet \quad \times \quad \bullet \quad \bullet \quad \bullet \quad \times \quad \bullet \quad \times$$

یہ ظاہر کرے گا کہ پہلے حال میں دو ذرات، دوسرے حال میں ایک ذرہ، تیسرے میں تین، چوتھے میں ایک، اور پانچویں میں کوئی ذرہ نہیں پایا جاتا۔ دھیان رہے کہ نقطوں کی تعداد N_n اور صلیبوں کی تعداد $d_n - 1$ ہے (جو ان نقطوں کو d_n گروہ میں خانہ بند کرتے ہیں)۔ اگر ان انفرادی نقطوں اور صلیبوں کو نام دیے جاتے تب انہیں $(N_n + d_n - 1)!$ مختلف طریقوں سے رکھا جا سکتا تھا۔ تاہم ہمارے لئے تمام نقطے ایک جیسے ہیں؛ اور ان کو ($N_n!$ مختلف) مرتب اجتماعات کی صورت میں لکھنے سے حال تبدیل نہیں ہوتا۔ اسی طرح تمام صلیب معادل ہیں اور انہیں ($(d_n - 1)!$ مختلف) مرتب اجتماعات لکھنے سے کچھ بھی تبدیل نہیں ہوگا۔ یوں N ویں ٹوکرے میں d_n یک ذروی حالات کو N_n ذرات مختص کرنے کے درج ذیل منفرد طریقے ہونگے

$$\frac{(N_n + d_n - 1)!}{N_n!(d_n - 1)!} = \binom{N_n + d_n - 1}{N_n} \tag{۵.۷۶}$$

جس کی بنا پر ہم درج ذیل اخذ کرتے ہیں۔

$$Q(N_1, N_2, N_3, \dots) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{(N_n + d_n - 1)!}{N_n!(d_n - 1)!} \tag{۵.۷۷}$$

(اس کی تصدیق حصہ ۵.۴.۱ میں دیے گئے مثال کے لئے کریں۔ سوال ۵.۲۴ دیکھیں)۔

سوال ۵.۲۴: حصہ ۵.۴.۱ میں دیے گئے مثال کے لئے مساوات ۵.۷۴، مساوات ۵.۷۵ اور مساوات ۵.۷۷ کی تصدیق کریں۔

سوال ۵.۲۵: مساوات ۵.۷۶ کو الکراجی ماخوذ کی مدد سے حاصل کریں۔ غیر مرتب اجتماعات کا سوال درج ذیل ہوگا: آپ d ٹوکریوں میں N متماثل گیندوں کو کتنے مختلف طریقوں سے رکھ سکتے ہیں (یہاں زیر نوشت میں

[64] ظاہر ہے کہ $N_n > d_n$ کی صورت میں یہ صفر ہوگا، جو منفی عدد صحیح کے عدد ضربیہ کو لامتناہی تصور کرنے سے ہوگا۔

n کو نظر انداز کریں)؟ آپ تمام کے تمام N کو تیسرے ٹوکرے میں رکھ سکتے تھے، یا ایک کو پانچویں اور باقیوں کو دوسرے ٹوکرے میں، یا دو کو پہلے اور تین کو تیسرے ٹوکرے میں اور باقی کو ساتویں ٹوکرے میں، وغیرہ، رکھ سکتے تھے۔ اس کو صریحاً $N = 1$، $N = 2$، $N = 3$، اور $N = 4$ کے لئے حاصل کریں؛ یہاں تک پہنچ کر آپ عمومی کلیہ اخذ کر پائیں گے۔

۵.۴.۳ سب سے زیادہ محتمل تشکیل

حراری توازن میں ہر وہ حال جس کی کل توانائی E اور ذروی عدد N ہو ایک جتنا محتمل ہو گا۔ یوں سب سے زیادہ محتمل تشکیل $N_1, N_2, N_3, \ldots$ وہ ہو گا جس کو سب سے زیادہ مختلف طریقوں سے حاصل کرنا ممکن ہو؛ یہ وہ مخصوص تشکیل ہو گی جو جس کے لئے

$$\sum_{n=1}^{\infty} N_n = N \tag{۵.۷۸}$$

اور

$$\sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n = E \tag{۵.۷۹}$$

پر پورا اترتے ہوئے $Q(N_1, N_2, N_3, \ldots)$ کی قیمت اعظم ہو۔

زیر شرائط $f_1(x_1, x_2, x_3, \ldots) = 0$، $f_2(x_1, x_2, x_3, \ldots) = 0$، وغیرہ، متعدد متغیرات کے ایک تفاعل $F(x_1, x_2, x_3, \ldots)$ کی اعظم قیمت **لگرانج مضرب**[۶۵] کی ترکیب سے باآسانی حاصل ہوتی ہے۔ ہم ایک نیا تفاعل

$$G(x_1, x_2, x_3, \ldots, \lambda_1, \lambda_2, \ldots) \equiv F + \lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2 + \cdots \tag{۵.۸۰}$$

متعارف کر کے اس کے تمام تفرقات کو صفر کے برابر رکھتے ہیں

$$\frac{\partial G}{\partial x_n} = 0; \quad \frac{\partial G}{\partial \lambda_n} = 0 \tag{۵.۸۱}$$

موجودہ صورت میں Q کی بجائے Q کے لوگارتھم کے ساتھ کام کرنا زیادہ آسان ثابت ہوتا ہے؛ جو حاصل ضرب کو مجموعہ میں تبدیل کرتا ہے۔ چونکہ لوگارتھم اپنے دلیل کا یکسر تفاعل ہے، لہٰذا Q کی اعظم قیمت اور $\ln(Q)$ کی اعظم قیمت ایک ہی نقطے پر پائی جائیں گی۔ لہٰذا تفاعل Q کے لئے ہم مساوات ۵.۸۰ میں Q کی بجائے $\ln(Q)$ لکھتے ہیں:

$$G \equiv \ln(Q) + \alpha\Big[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n\Big] + \beta\Big[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n\Big] \tag{۵.۸۲}$$

---

[۶۵] Lagrangemultiplier

جہاں α اور β لگرانج مضرب (λ_1 اور λ_2) ہیں (اور چوکور قوسین مساوات ۵.۷۸ اور مساوات ۵.۷۹ میں دیے گئے شرط ہیں)۔ α اور β کے لحاظ سے تفرقات کو صفر کے برابر رکھنے سے محض (مساوات ۵.۷۸ اور مساوات ۵.۷۹ میں دی گئے) پابندیاں دوبارہ حاصل ہوتی ہیں؛ یوں N_n کے لحاظ سے تفرق کو صفر کے برابر رکھنا باقی ہے۔

اگر ذرات قابل ممیز ہوں، تب مساوات ۵.۷۴ ہمیں Q دے گی، لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$G = \ln(N!) + \sum_{n=1}^{\infty} \left[N_n \ln(d_n) - \ln(N_n!) \right] + \alpha \Big[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n \Big] + \beta \Big[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n \Big] \tag{۵.۸۳}$$

ہم متعلقہ تعداد مکین (N_n) کو بہت بڑا تصور کرتے ہوئے سٹرلنگ تخمین:[۶۶]

$$\ln(z!) \approx z \ln(z) - z \qquad z \ll 1 \tag{۵.۸۴}$$

بروئے کار لاتے ہوئے[۶۷] درج ذیل لکھتے ہیں۔

$$G \approx \sum_{n=1}^{\infty} \left[N_n \ln(d_n) - N_n \ln(N_n) + N_n - \alpha N_n - \beta E_n N_n \right] + \ln(N!) + \alpha N + \beta E \tag{۵.۸۵}$$

یوں درج ذیل ہو گا۔

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = \ln(d_n) - \ln(N_n) - \alpha - \beta E_n \tag{۵.۸۶}$$

اس کو صفر کے برابر رکھ کر N_n کے لیے حل کرتے ہوئے ہم قابل ممیز ذرات کی سب سے زیادہ محتمل تعداد مکین کی قیمتیں حاصل کرتے ہیں۔

$$N_n = d_n e^{-(\alpha + \beta E_n)} \tag{۵.۸۷}$$

---

[۶۶] Stirling'sapproximation

[۶۷] سٹرلنگ تسلسل کے مزید اجزاء شامل کرتے ہوئے سٹرلنگ تخمین کو مزید بہتر بنایا جا سکتا ہے، تاہم ہماری ضرورت اولین دو اجزاء لینے سے پوری ہو جاتی ہے۔ اگر حصہ ۵.۴.۱ کی طرح، متعلقہ تعداد مکین بہت زیادہ نہ ہوں، تب شماریاتی میکانیات کارآمد نہیں ہو گی۔ یہاں ہمارا مقصد یہی ہے کہ تعداد اتنی زیادہ ہو کہ شماریاتی پیش گوئی قابل اعتماد ہو۔ یقیناً ایسے یک ذروی حالات ضرور ہوں گے جن کی توانائی انتہائی زیادہ ہو گی اور جو بھرے نہیں ہوں گے؛ ہماری خوش قسمتی ہے کہ سٹرلنگ تخمین $z = 0$ کے لئے بھی کارآمد ہے۔ میں نے لفظ "متعلقہ" استعمال کرتے ہوئے ان غیر مطلوب حالات کو شامل نہیں کیا ہے جو حاشیہ پر رہتے ہوں اور جن کے لئے N_n نہ تو بہت زیادہ ہو اور نہ ہی صفر ہو۔

اگر ذرات متماثل فرمیان ہوں تب Q کی قیمت مساوات ۵.۷۵ دیگی لہٰذا درج ذیل ہو گا

$$\begin{aligned} G &= \sum_{n=1}^{\infty}\{\ln(d_n!) - \ln(N_n!) - \ln[(d_n - N_n)!]\} \\ &\quad + \alpha\Big[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n\Big] + \beta\Big[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n\Big] \end{aligned} \tag{۵.۸۸}$$

یہاں ہم N_n کی قیمت بہت بڑی تصور کرنے کے ساتھ ساتھ $d_n \gg N_n$ بھی[۶۸] فرض کرتے ہیں لہٰذا سٹرلنگ تخمین دونوں اجزاء کے لیے قابل استعمال ہو گی۔ ایسی صورت میں

$$\begin{aligned} G \approx \sum_{n=1}^{\infty} \Big[&\ln(d_n!) - N_n \ln(N_n) + N_n - (d_n - N_n)\ln(d_n - N_n) \\ &+ (d_n - N_n) - \alpha N_n - \beta E_n N_n\Big] + \alpha N + \beta E \end{aligned} \tag{۵.۸۹}$$

اور درج ذیل ہو گا۔

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = -\ln(N_n) + \ln(d_n - N_n) - \alpha - \beta E_n \tag{۵.۹۰}$$

اس کو صفر کے برابر رکھتے ہوئے N_n کے لیے حل کر کے ہم متماثل فرمیان کی تعداد مکینوں کی سب سے زیادہ محتمل تعداد مکین N_n کی قیمتیں حاصل کرتے ہیں۔

$$N_n = \frac{d_n}{e^{(\alpha + \beta E_n)} + 1} \tag{۵.۹۱}$$

آخر میں اگر ذرات متماثل بوسن ہوں تب Q کی قیمت مساوات ۵.۷۷ دیگی اور درج ذیل ہو گا۔

$$\begin{aligned} G &= \sum_{n=1}^{\infty}\{\ln[(d_n!)] - \ln(N_n!) - \ln[(d_n - N_n)!]\} \\ &\quad + \alpha\Big[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n\Big] + \beta\Big[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n\Big] \end{aligned} \tag{۵.۹۲}$$

یہاں بھی ہمیشہ کی طرح $1 \ll N_n$ فرض کرتے ہوئے سٹرلنگ تخمین استعمال کرتے ہوئے

$$\begin{aligned} G \approx \sum_{n=1}^{\infty}\{&(N_n + d_n - 1)\ln(N_n + d_n - 1) - (N_n + d_n - 1) - N_n \ln(N_n) \\ &+ N_n - \ln[(d_n - 1)!] - \alpha N_n - \beta E_n N_n\} + \alpha N + \beta E \end{aligned} \tag{۵.۹۳}$$

---

[۶۸] ایک بُعد میں توانائیاں غیر انحطاطی ہوں گی (سوال ۵.۴۵ دیکھیں)، لیکن تین ابعاد میں n بڑھنے سے d_n عموماً بہت تیزی سے بڑھتا ہے (مثلاً، ہائیڈروجن کے لئے $d_n = n^2$ ہے)۔ یوں زیادہ تر بھرے حالات کے لئے $1 \gg d_n$ فرض کرنا غیر معقول نہیں ہو گا۔ اس کے برعکس، مطلق صفر درجہ حرارت کے قریب، d_n کی قیمت کسی صورت بھی N_n سے بہت زیادہ نہیں ہو گی، فرمی سطح تک تمام حالات بھرے ہوں گے لہٰذا $d_n = N_n$ ہو گا۔ یہاں بھی ہمیں یہ حقیقت مدد کرتی ہے کہ سٹرلنگ کلیہ $z = 0$ کے لئے کارآمد ہے۔

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = \ln(N_n + d_n - 1) - \ln(N_n) - \alpha - \beta E_n \tag{۵.۹۴}$$

اس کو صفر کے برابر رکھ کر N_n کے لئے حل کرتے ہوئے ہم متماثل بوسن کی تعداد مکینوں کی سب سے زیادہ محتمل قیمتیں تلاش کرتے ہیں۔

$$N_n = \frac{d_n - 1}{e^{(\alpha+\beta E_n)} - 1} \tag{۵.۹۵}$$

(فرمیان کے لئے مستعمل تخمین کے ساتھ ثبات کی خاطر شمار کنندہ میں 1 کو نظرانداز کیا جا سکتا ہے؛ میں یہاں سے آگے ایسا ہی کروں گا۔)

سوال ۵.۲۶: ترخیم $(x/a)^2 + (y/b)^2 = 1$ کے اندر سب سے بڑے رقبے کا ایسا مستطیل جس کے اضلاع محور کے متوازی ہوں، لگرانج مضرب کی ترکیب سے تلاش کریں۔ یہ اعظم رقبہ کتنا ہو گا؟

سوال ۵.۲۷:

ا. $z = 10$ کے لیے سٹرلنگ تخمین میں فی صد سہو کتنی ہو گی؟

ب. سہو کو ایک فی صد سے کم رکھنے کیلئے عدد صحیح z کی اقل قیمت کیا ہو گی؟

۵.۴.۴ α اور β کی طبعی اہمیت

لگرانج مضرب کی کہانی میں ذرات کی کل تعداد اور کل توانائی سے بالترتیب منسلک مقدار معلوم α اور β پائے گئے۔ ریاضیاتی طور پر تعداد مکین (مساوات ۵.۸۷، مساوات ۵.۹۱، اور مساوات ۵.۹۵) کو واپس مطلق شرائط (مساوات ۵.۷۸ اور مساوات ۵.۷۹) میں پر کرتے ہوئے انہیں تعین کیا جاتا ہے۔ البتہ کسی مخفیہ کے لیے مجموعہ کے حصول کے لئے ہمیں اجازتی توانائیاں (E_n) اور ان کی انحطاط (d_n) کا معلوم ہونا ضروری ہے۔ میں سہ ابعادی لامتناہی چوکور کنویں میں ایک جتنی کمیت کی بہت بڑی تعداد کے باہم غیر متعامل ذرات کی **کامل گیس**[۲۹] کی مثال لیتے ہوئے آپ کو اس ترکیب سے متعارف کرتا ہوں۔ اس سے ہم پر α اور α کی طبعی مفہوم عیاں ہو گی۔

ہم نے حصہ ۵.۳.۱ میں اجازتی توانائیاں (مساوات ۵.۳۹):

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \tag{۵.۹۶}$$

اخذ کیں جہاں درج ذیل تھا۔

$$\boldsymbol{k} = \left(\frac{\pi n_x}{\ell_x}, \frac{\pi n_y}{\ell_y}, \frac{\pi n_z}{\ell_z}\right)$$

[۲۹] idealgas

پہلے کی طرح، یہاں بھی ہم مجموعہ کو تکمل میں بدلتے ہیں، جہاں $\boldsymbol{k}$ ایک استمراری متغیر ہے، اور جہاں k فضا کے π^3/V حجم میں ایک حال (یا، چکر s کی صورت میں، $1 + 2s$ حالات) پائے جاتے ہیں۔ مثمن اول میں کروی خولوں کو "ٹوکریاں" تصور کرتے ہوئے (شکل ۵.۴ دیکھیں) "انحطاط" (یعنی ہر ٹوکرے میں حالات کی تعداد) درج ذیل ہو گی۔

$$d_k = \frac{1}{8}\,\frac{4\pi k^2\,\mathrm{d}k}{8(\pi^3/V)} = \frac{V}{2\pi^2}k^2\,\mathrm{d}k \tag{۵.۹۷}$$

قابل ممیز ذرات (مساوات ۵.۸۷) کیلئے پہلی عائد پابندی (مساوات ۵.۷۸) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$N = \frac{V}{2\pi^2}e^{-\alpha}\int_0^\infty e^{-\beta\hbar^2k^2/2m}k^2\,\mathrm{d}k = Ve^{-\alpha}\Big(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\Big)^{3/2}$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$e^{-\alpha} = \frac{N}{V}\Big(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m}\Big)^{3/2} \tag{۵.۹۸}$$

دوسری عائد شرط (مساوات ۵.۷۹) درج ذیل کہتی ہے

$$E = \frac{V}{2\pi^2}e^{-\alpha}\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty e^{-\beta\hbar^2k^2/2m}k^4\,\mathrm{d}k = \frac{3V}{2\beta}e^{-\alpha}\Big(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2}\Big)^{3/2}$$

جس میں مساوات ۵.۹۸ سے $e^{-\alpha}$ پر کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$E = \frac{3N}{2\beta} \tag{۵.۹۹}$$

(اگر آپ مساوات ۵.۹۷ میں چکری جزو ضربی، $1 + 2s$، شامل کرتے تو وہ یہاں پہنچ کر حذف ہو جاتا ہے، لہٰذا مساوات ۵.۹۹ تمام چکر کے لیے درست ہو گی۔)

یہ نتیجہ (مساوات ۵.۹۹) ہمیں درجہ حرارت T پر ایک جوہر کی اوسط حرکی توانائی کے کلاسیکی کلیہ:

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{2}k_BT \tag{۵.۱۰۰}$$

کی یاد دلاتی ہے، جہاں k_B بولٹزمن مستقل ہے۔ یہ ہمیں β اور حرارت کے درمیان درج ذیل تعلق پر آمادہ کرتا ہے۔

$$\beta = \frac{1}{k_BT} \tag{۵.۱۰۱}$$

یہ ثابت کرنے کے لیے کہ یہ تعلق صرف تین ابعادی لامتناہی چوکور کنویں میں موجود ممیز ذرات کے لئے نہیں بلکہ عمومی نتیجہ ہے ہمیں دکھانا ہو گا کہ، مختلف اشیاء کے لئے، جو ایک دوسرے کے ساتھ حراری توازن میں ہوں،

β کی قیمت ایک جیسی ہے۔ یہ دلیل کئی کتابوں میں پیش کی گئی ہے، جس کو میں یہاں پیش نہیں کروں گا؛ بلکہ میں مساوات ۵.۱۰۱ کو T کی تعریف مان لیتا ہوں۔

روایتی طور پر α (جو مساوات ۵.۹۸ کی خصوصی صورت سے ظاہر ہے کہ T کا تفاعل ہے) کی جگہ **کیمیاوی مخفیہ**[۷۰]:

$$\mu(T) \equiv -\alpha k_B T \tag{۵.۱۰۲}$$

استعمال کرکے مساوات ۵.۸۷، مساوات ۵.۹۱، اور مساوات ۵.۹۵ کو دوبارہ یوں لکھا جاتا ہے کہ یہ توانائی ϵ کے کسی ایک مخصوص (یک ذروی) حال میں ذرات کی سب سے زیادہ محتمل عدد دے (کسی ایک توانائی کے حامل ذرات کی تعداد سے اس توانائی کے حامل کسی مخصوص حال میں ذرات کی تعداد حاصل کرنے کے خاطر صرف اس حال کے انحطاط سے تقسیم کرنا ہوگا)۔

$$n(\epsilon) = \begin{cases} e^{-(\epsilon-\mu)/k_B T} & \text{میکسویل و بولٹزمن} \\ \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T}+1} & \text{فرمی و ڈیراک} \\ \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T}-1} & \text{بوس و آئنشٹائن} \end{cases} \tag{۵.۱۰۳}$$

قابل ممیز ذرات پر **میکسویل و بولٹزمن تقسیم**[۷۱]، متماثل فرمیان پر **فرمی و ڈیراک تقسیم**[۷۲] اور متماثل بوسن پر **بوس و آئنشٹائن تقسیم**[۷۳] کا اطلاق ہوگا۔

فرمی و ڈیراک تقسیم $T \to 0$ کے لئے خصوصی طور پر سادہ رویہ رکھتی ہے:

$$e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} \to \begin{cases} 0, & \epsilon < \mu(0) \\ \infty, & \epsilon > \mu(0) \end{cases}$$

لہٰذا درج ذیل ہوگا۔

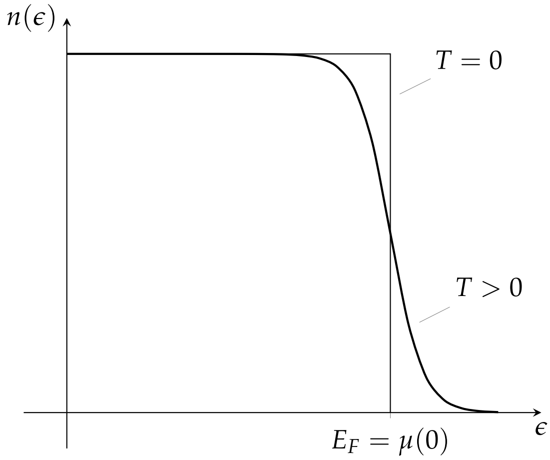
$$n(\epsilon) \to \begin{cases} 1, & \epsilon < \mu(0) \\ 0, & \epsilon > \mu(0) \end{cases} \tag{۵.۱۰۴}$$

توانائی $\mu(0)$ تک تمام حالات بھرے ہوں گے جبکہ اس سے زیادہ توانائی کے تمام حالات خالی ہوں گے (شکل ۵.۸)۔ ظاہر ہے کہ مطلق صفر حرارت پر کیمیاوی مخفیہ عین فرمی توانائی ہوگی۔

$$\mu(0) = E_F \tag{۵.۱۰۵}$$

---

[۷۰] chemical potential
[۷۱] Maxwell-Boltzmann distribution
[۷۲] Fermi-Dirac distribution
[۷۳] Bose-Einstein distribution



شکل ۵.۸: فرمی وڈیراک تقسیم برائے $T = 0$ اور صفر سے کچھ زیادہ T کے لئے۔

درجہ حرارت بڑھنے سے بھرے حالات اور خالی حالات کے بیچ غیر استمراری سرحد کو فرمی ڈیراک تقسیم استمراری بناتا ہے، جو شکل ۵.۸ میں دائری منحنی سے ظاہر ہے۔

ہم قابل ممیز ذرات کی کامل گیس کی مثال پر دوبارہ لوٹتے ہیں جہاں ہم نے دیکھا کہ حرارت T پر کل توانائی (مساوات ۵.۹۹) درج ذیل ہو گی

$$E = \frac{3}{2} N k_B T \tag{۵.۱۰۶}$$

جبکہ (مساوات ۵.۹۸ کے تحت) کیمیاوی مخفیہ درج ذیل ہو گا۔

$$\mu(T) = k_B T\Big[\ln\Big(\frac{N}{V}\Big) + \frac{3}{2}\ln\Big(\frac{2\pi\hbar^2}{m k_B T}\Big)\Big] \tag{۵.۱۰۷}$$

میں مساوات ۵.۸۷ کی بجائے مساوات ۵.۹۱ اور مساوات ۵.۹۵ استعمال کرتے ہوئے متماثل فرمیان اور متماثل بوسن کے کامل گیس کے لئے مطابقتی کلیات حاصل کرنا چاہوں گا۔ پہلی عائد پابندی (مساوات ۵.۷۸) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$N = \frac{V}{2\pi^2}\int_0^\infty \frac{k^2}{e^{[(\hbar^2k^2/2m)-\mu]/k_B T} \pm 1}\,\mathrm{d}k \tag{۵.۱۰۸}$$

جہاں مثبت علامت فرمیان کو اور منفی علامت بوسن کو ظاہر کرتی ہے دوسری عائد پابندی (مساوات

۵.۷۹) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$E = \frac{V}{2\pi^2}\frac{\hbar^2}{2m}\int_0^\infty \frac{k^4}{e^{[(\hbar^2k^2/2m)-\mu]/k_BT} \pm 1}\,\mathrm{d}k \tag{۵.۱۰۹}$$

ان میں سے پہلی $\mu(T)$ اور دوسری $E(T)$ تعین کرتی ہے (موخر الذکر سے، مثلاً، ہم مخصوص حراری استعداد $C = \partial E/\partial T$ حاصل کرتے ہیں)۔ بدقسمتی سے ان تکملات کو بنیادی تفاعلات کی صورت میں حل کرنا ممکن نہیں ہے اور میں انہیں آپ کے لئے غور کرنے کے لئے چھوڑتا ہوں (سوال ۵.۲۸ اور سوال ۵.۲۹ دیکھیں)۔

سوال ۵.۲۸: مطلق صفر درجہ حرارت پر متماثل فرمیان کے لیے ان تکملات (مساوات ۵.۱۰۸ اور مساوات ۵.۱۰۹) کی قیمتیں حاصل کریں۔ اپنے نتائج کا موازنہ مساوات ۵.۴۳ اور مساوات ۵.۴۵ کے ساتھ کریں۔ (دھیان رہے کہ مساوات ۵.۱۰۸ اور مساوات ۵.۱۰۹ میں الیکٹرانوں کے لیے 2 کا اضافی جز و ضربی پایا جاتا ہے جو چکری انحطاط کو ظاہر کرتا ہے۔)

سوال ۵.۲۹:

ا. بوسن کے لیے دکھائیں کہ کیمیاوی مخفیہ ہر صورت میں اقل احازتی توانائی سے کم ہوگا۔ اشارہ: $n(\epsilon)$ منفی نہیں ہو سکتا ہے۔

ب. بالخصوص تمام T کے لیے، کامل بوسن گیس کے لیے $\mu(T) < 0$ ہوگا۔ ایسی صورت میں N اور V کو مستقل تصور کرتے ہوئے دکھائیں کہ T کم کرنے سے $\mu(T)$ یکسر بڑھے گا۔ اشارہ: منفی علامت لیتے ہوئے مساوات ۵.۱۰۸ پر غور کریں۔

ج. حرارت T کم کرتے ہوئے اس وقت ایک بحران (جسے **بوس انجماد**[۴۷] کہتے ہیں) پیدا ہوتا ہے جب $\mu(T)$ صفر کو پہنچتا ہے۔ تکمل کی قیمت، $\mu = 0$ کے لیے، حاصل کرتے ہوئے اس فاصل حرارت کا کلیہ اخذ کریں جس پر ایسا ہوگا۔ اس فاصل حرارت سے نیچے ذرات زمینی حال میں جمع ہو جائیں گے لہٰذا غیر مسلسل مجموعے (مساوات ۵.۷۸) کی جگہ استمراری تکمل (مساوات ۵.۱۰۸) کا استعمال بے معنی ہو جائے گا۔ اشارہ:

$$\int_0^\infty \frac{x^{s-1}}{e^x - 1}\,\mathrm{d}x = \Gamma(s)\zeta(s) \tag{۵.۱۱۰}$$

جہاں Γ کو یولر کا **گیما تفاعل**[۴۸] اور ζ کو **ریمان زیٹا تفاعل**[۴۹] کہتے ہیں۔ ان کی موزوں اعدادی قیمتیں جدول سے دیکھیں۔

د. ہیلیم ^{4}He کی حرارت فاصل تلاش کریں۔ اس درج حرارت پر اس کی کثافت $0.15\,\mathrm{g\,cm^{-3}}$ ہوگی۔ تبصرہ: ہیلیم کی تجرباتی حاصل حرارت فاصل کی قیمت $2.17\,\mathrm{K}$ ہے۔

---

[۴۷] Bosecondensation
[۴۸] gammafunction
[۴۹] Riemannzetafunction

۵.۴.۵ سیاہ جسمی طیف

نوریہ (برقناطیسی میدان کے کوانٹا) چکر 1 کے متماثل بوسن ہیں، تاہم یہ بے کمیت ذرات لہٰذا خلقی طور پر اضافیتی ہیں۔ ہم درج ذیل چار دعوے، جو غیر اضافیتی کوانٹائی میکانیات کا حصہ نہیں ہیں، قبول کر کے انہیں یہاں شامل کر سکتے ہیں۔

۱. نوریہ کی تعدد اور توانائی کا تعلق کلیہ پلانک $E = h\nu = \hbar\omega$ دیتا ہے۔

۲. عدد موج k اور تعدد کا تعلق $k = 2\pi/\lambda = \omega/c$ ہے جہاں c روشنی کی رفتار ہے۔

۳. صرف دو چکری حالات ہو سکتے ہیں (کوانٹائی عدد m کی قیمت $+1$ یا -1 ہو سکتی ہے، تاہم یہ 0 نہیں ہو سکتی۔

۴. نوریوں کی تعداد بقائی مقدار نہیں ہے؛ درجہ حرارت بڑھانے سے (فی اکائی حجم) نوریوں کی تعداد بڑھتی ہے۔

جزو 4 کی موجودگی میں، پہلی عائد پابندی (مساوات ۵.۷۸) کا اطلاق نہیں ہو گا۔ ہم مساوات ۵.۸۲ اور اس کے بعد آنے والی مساواتوں میں $\alpha \rightarrow 0$ لے کر اس شرط کو ختم کر سکتے ہیں۔ یوں نوریہ کے لیے سب سے زیادہ محتمل تعداد مکین (مساوات ۵.۹۵) درج ذیل ہو گی۔

$$N_\omega = \frac{d_k}{e^{\hbar\omega/k_BT} - 1} \tag{۵.۱۱۱}$$

ایک ڈبہ جس کا حجم V ہو، میں آزاد نوریوں کے لیے d_k کی قیمت، مساوات ۵.۹۷ کو[77] چکر (جزو 3) کی بنا پر 2 سے ضرب دے کر حاصل ہو گی، جس کو k (جزو 2) کی بجائے ω کی صورت میں لکھتے ہیں۔

$$d_k = \frac{V}{\pi^2 c^3}\omega^3 \, \mathrm{d}\omega \tag{۵.۱۱۲}$$

یوں تعددی سعت $\mathrm{d}\omega$ میں کثافت توانائی $N_\omega\hbar\omega/V$ کی قیمت $\rho(\omega)\,\mathrm{d}\omega$ ہو گی جہاں $\rho\omega$ درج ذیل ہے۔

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3(e^{\hbar\omega/k_BT} - 1)} \tag{۵.۱۱۳}$$

یہ **سیاہ جسمی طیف**[78] کے لئے پلانک کا مشہور کلیہ ہے جو برقناطیسی میدان کی، حرارت T پر توازن کی صورت میں، فی اکائی حجم فی اکائی تعدد، توانائی دیتا ہے۔ اس کو تین مختلف حرارتوں پر شکل ۵.۹ میں ترسیم کیا گیا ہے۔

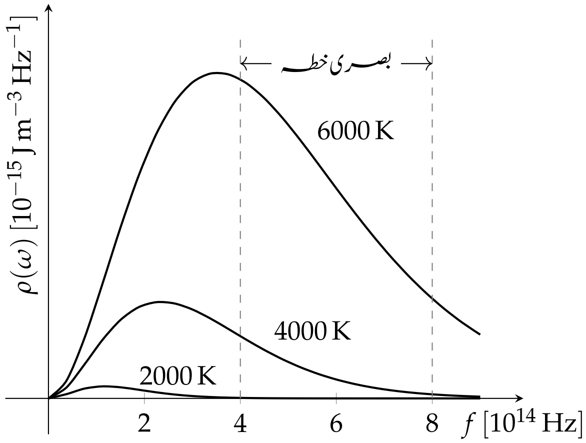
سوال ۵.۳۰:

۱. مساوات ۵.۱۱۳ استعمال کرتے ہوئے طول موج کی سعت $\mathrm{d}\lambda$ میں کثافت توانائی تعین کریں۔ اشارہ: $\rho(\omega)\,\mathrm{d}\omega = \bar{\rho}(\lambda)\,\mathrm{d}\lambda$ لے کر $\bar{\rho}(\lambda)$ کے لیے حل کریں۔

---

[77] درحقیقت ہمیں اس کلیہ سے کچھ لینا دینا نہیں چونکہ یہ (غیر اضافیتی) مساوات شروڈنگر سے حاصل ہوا؛ خوش قسمتی سے اضافیتی صورت میں بھی انحطاط ٹھیک یہی ہے۔

[78] blackbodyspectrum



شکل ۵.۹: سیاہ جسمی اخراج کے لئے کلیہ پلانک، مساوات ۵.۱۱۳۔

ب۔ اس طول موج کے لئے، جس پر سیاہ جسمی کثافت توانائی اعظم ہو، **وائن قانون ہٹاو**:[۷۹]

$$\lambda_{\text{اعظم}} = \frac{2.90 \times 10^{-3}\,\mathrm{mK}}{T} \tag{۵.۱۱۴}$$

اخذ کریں۔ اشارہ: آپ کو کیلکولیٹر یا کمپیوٹر کی استعمال سے مساوات $5e^{-x} = (5 - x)$ حل کر تین بامعنی ہندسوں تک اعدادی جواب حاصل کرنا ہوگا۔

سوال ۵.۳۱: سیاہ جسمی اخراج میں کل کثافت توانائی کا **سٹیفن وبولٹزمن کلیہ**:[۸۰]

$$\frac{E}{V} = \left(\frac{\pi^2 k_B^4}{15\hbar^3 c^3}\right) T^4 = (7.57 \times 10^{-16}\,\mathrm{Jm^{-3}K^{-4}}) T^4 \tag{۵.۱۱۵}$$

اخذ کریں۔ اشارہ: مساوات ۵.۱۱۰ استعمال کرتے ہوئے تکمل کی قیمت تلاش کریں۔ یاد رہے کہ $\zeta(4) = \pi^4/90$ ہوگا۔

اضافی سوالات برائے باب ۵

سوال ۵.۳۲: فرض کریں یک بُعدی ہارمونی ارتعاشی مخفیہ (مساوات ۲.۴۳) میں کمیت m کے دو غیر متعامل ذرات پائے جاتے ہیں۔ فرض کریں ان میں سے ایک زمینی حال اور دوسرا پہلے ہیجان حال میں پایا جاتا ہے۔ درج ذیل صورتوں میں $\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle$ کا حساب کریں۔ (الف) ذرات قابل ممیز ہیں، (ب) یہ متماثل

[۷۹] Wiendisplacementlaw
[۸۰] Stefan-Boltzmannformula

بوسن ہیں، (ج) یہ متماثل فرمیان ہیں۔ چکر کو نظر انداز کریں (اگر آپ ایسا نہیں کرنا چاہتے تو دونوں کو ایک ہی چکری حال میں تصور کریں)۔

سوال ۵.۳۳: فرض کریں آپ کے پاس تین ذرات اور تین منفرد یک ذروی حالات ($\psi_a(x)$ ، $\psi_b(x)$ ، اور $\psi_c(x)$) دستیاب ہیں۔ درج ذیل صورتوں میں کتنے (مختلف) تین ذروی حالات تیار کیے جا سکتے ہیں؟ (الف) ذرات قابل ممیز ہیں، (ب) یہ متماثل بوسن ہیں، (ج) یہ متماثل فرمیان ہیں۔ (ضروری نہیں کہ ذرات مختلف حالات میں ہوں؛ قابل ممیز ذرات کی صورت میں $\psi_a(x_1)\psi_a(x_2)\psi_a(x_3)$ ایک ممکن صورت ہو سکتا ہے۔)

سوال ۵.۳۴: دو ابعادی لامتناہی چوکور کنویں میں غیر متعامل الیکٹرانوں کی فرمی توانائی کا حساب کریں۔ فی اکائی رقبہ آزاد الیکٹرانوں کی تعداد σ لیں۔

سوال ۵.۳۵: ایک مخصوص قسم کے سرد ستارے (جنہیں **سفید بونا**[81] کہتے ہیں) کو تجاذبی انہدام سے الیکٹرانوں کی انحطاطی دباو (مساوات ۵.۴۶) روکتا ہے۔ مستقل کثافت فرض کرتے ہوئے، ایسے جسم کا رداس R درج ذیل طریقہ سے دریافت کیا جا سکتا ہے۔

ا. کل الیکٹران توانائی (مساوات ۵.۴۵) کو رداس، مرکزویہ (پروٹان جمع نیوٹران) کی تعداد N ، فی مرکزویہ الیکٹران کی تعداد q ، اور الیکٹران کی کمیت m کی صورت میں لکھیں۔

ب. یکساں کثافت کے کرہ کی تجاذبی توانائی تلاش کریں۔ اپنے جواب کو (عالمگیر تجاذبی مستقل) G ، R ، N ، اور (ایک مرکزویہ کی کمیت) M کی صورت میں لکھیں۔ یاد رہے کہ تجاذبی توانائی منفی ہے۔

ج. وہ رداس معلوم کریں جس پر جزو-الف اور جزو-ب کی مجموعی توانائی اقل ہو۔ جواب:

$$R = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2 q^{5/3}}{GmM^2N^{1/3}}$$

(کل کمیت بڑھنے سے رداس گھٹتا ہے!) ماسوائے N کے، تمام مستقلات کی قیمتیں پر کریں اور $q = 1/2$ لیں (حقیقت میں، جوہری عدد بڑھنے سے q کی قیمت معمولی کم ہوتی ہے، لیکن ہمارے مقاصد کے لئے یہ کافی ٹھیک ہے)۔ جواب: $R = 7.6 \times 10^{25} N^{-1/3}$

د. سورج کے برابر کمیت کے سفید بونا کا رداس، کلومیٹروں میں، دریافت کریں۔

ھ. الیکٹران کی ساکن توانائی کے ساتھ، جزو-د میں سفید بونا کی فرمی توانائی (الیکٹران وولٹ میں تعین کرتے ہوئے) کا موازنہ کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ یہ نظام اضافیت کے بہت قریب ہے (سوال ۵.۳۶ دیکھیں)۔

سوال ۵.۳۶: ہم کلاسیکی حرکی توانائی $E = p^2/2m$ میں اضافیتی کلیہ $E = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4} - m_0^2c^2$ پر کرتے ہوئے آزاد الیکٹران گیس نظریہ (حصہ ۵.۳.۱) کو اضافیتی دائرہ کار تک وسعت دے سکتے ہیں۔ معیار حرکت اور سمتیہ موج کا تعلق ہمیشہ کی طرح $\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$ ہوگا۔ بالخصوص انتہائی اضافیتی حد میں $E \approx pc = \hbar ck$ ہوگا۔

---

[81] white dwarf

ا. مساوات ۵.۴۴ میں $\hbar^2 k^2/2m$ کی جگہ بالائے اضافیتی فقرہ، $\hbar ck$، پر کرکے $E_{کل}$ حاصل کریں۔

ب. بالائے اضافیتی الیکٹران گیس کی صورت میں سوال ۵.۳۵ کے جزو-الف اور جزو-ب کو دوبارہ حل کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ، R سے قطع نظر، کوئی مستحکم اقل قیمت نہیں پائی جاتی؛ اگر کل توانائی مثبت ہو تب انحطاطی قوتیں تجاذبی قوتوں سے تجاوز کرتی ہیں، جس کی بنا پر ستارہ پھولے گا، اس کے برعکس اگر کل توانائی منفی ہو تب تجاذبی قوتیں جیتی ہیں، جس کی بنا پر ستارہ منہدم ہو گا۔ مرکزویہ کی وہ فاصل تعداد، N_c، معلوم کریں جس کے لیے $N > N_c$ پر تجاذبی انہدام واقع ہو گا۔ اس کو **چندر شیکھر حد**[82] کہتے ہیں۔ جواب: 2.4×10^{57}۔ مطابقتی ستارہ کی کمیت کیا ہو گی (اپنے جواب کو سورج کی کمیت کے مضرب کے صورت میں لکھیں)۔ اس سے بھاری ستارے سفید بونا نہیں بنتے، بلکہ مزید منہدم ہو کر (اگر حالات درست ہوں) **نیوٹران ستارے**[83] بنتے ہیں۔

ج. انتہائی زیادہ کثافت پر، **مخالف بیٹا تحلیل**[84]، $e^- + p^+ \rightarrow n + v$، تقریباً تمام پروٹان اور الیکٹران کو نیوٹران میں بدلتا ہے (جس کی بنا پر نیوٹرینو خارج ہوتے ہیں جو ساتھ توانائی لے کر جاتے ہیں)۔ آخر کار نیوٹران انحطاطی دباو انہدام کو روکتا ہے، جیسا کہ سفید بونا میں الیکٹران انحطاطی قوتیں کرتی ہیں (سوال ۵.۳۵ دیکھیں)۔ سورج کے برابر کمیت کے نیوٹران ستارہ کا رداس تلاش کریں۔ ساتھ ہی (نیوٹران) فرمی توانائی کا حساب کر کے، اس کا ساکن نیوٹران کی توانائی کے ساتھ موازنہ کریں۔ کیا نیوٹران ستارہ کو غیر اضافیتی تصور کیا جا سکتا ہے؟

سوال ۵.۳۷:

ا. تین ابعادی ہارمونی ارتعاشی مخفیہ (سوال ۴.۳۸) میں قابل ممیز ذرات کا کیمیاوی مخفیہ اور کل توانائی تلاش کریں۔ اشارہ: یہاں مساوات ۵.۷۸ اور مساوات ۵.۷۹ میں دیے گئے مجموعوں کی قیمتیں ٹھیک ٹھیک حاصل کی جا سکتی ہیں؛ ہمیں لامتناہی چوکور کنویں کی مثال میں تکمل کی تخمینی قیمت پر ہمیں گزارہ کرنا پڑا تھا؛ یہاں ایسا کرنے کی ضرورت نہیں۔ **ہندسی تسلسل**[85]

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \tag{۵.۱۱۶}$$

کا تفرق لینے سے

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{x}{1-x}\right) = \sum_{n=1}^{\infty} (n+1)x^n$$

حاصل ہو گا۔ اسی طرح بلند تفرقات حاصل کیے جا سکتے ہیں۔ جواب:

$$E = \frac{3}{2}N\hbar\omega\left(\frac{1+e^{-\hbar\omega/k_B T}}{1-e^{-\hbar\omega/k_B T}}\right) \tag{۵.۱۱۷}$$

---

[82] Chandrasekharlimit
[83] neutronstar
[84] inversebetadecay
[85] geometricseries

ب. تحدیدی حد $\hbar\omega \ll k_B T$ پر تبصرہ کریں۔

ج. **مسئلہ مساوی خانہ بندی**[۸۶] کی روشنی میں کلاسیکی حد $\hbar\omega \ll k_B T$ پر تبصرہ کریں۔ تین ابعادی ہارمونی مرتعش میں ایک ذرے کے **درجات آزادی**[۸۷] کتنے ہوں گے؟

---

[۸۶] equipartition theorem
[۸۷] degrees of freedom

باب ۶

غیر تابع وقت نظریہ اضطراب

۶.۱ غیر انحطاطی نظریہ اضطراب

۶.۱.۱ عمومی ضابطہ بندی

فرض کریں ہم کسی مخفیہ (مثلاً یک بُعدی لامتناہی چوکور کنویں) کے لئے غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر:

$$H^0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0 \tag{۶.۱}$$

حل کر کے معیاری عمودی امتیازی تفاعلات ψ_n^0 کا مکمل سلسلہ

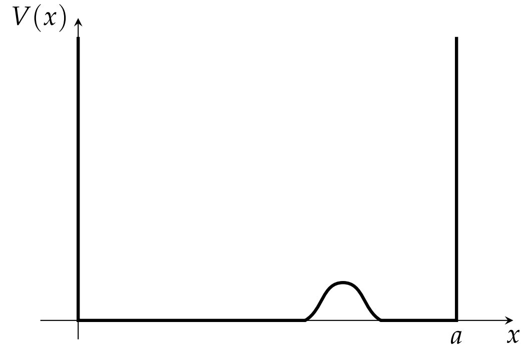
$$\langle\psi_n^0|\psi_m^0\rangle = \delta_{nm} \tag{۶.۲}$$

اور ان کی مطابقتی امتیازی قیمتیں E_n^0 حاصل کرتے ہیں۔ اب ہم مخفیہ میں معمولی اضطراب پیدا کرتے ہیں (مثلاً کنویں کی تہہ میں ایک چھوٹا موڑ ڈال کر؛ شکل ۶.۱) ہم نئے امتیازی تفاعلات اور امتیازی قیمتیں جاننا چاہیں گے

$$H\psi_n = E_n\psi_n \tag{۶.۳}$$

تاہم ہماری خوش قسمتی کے علاوہ ایسی کوئی وجہ نہیں پائی جاتی کہ ہم اس پیچیدہ مخفیہ کے لیے مساوات شروڈنگر کو بالکل ٹھیک ٹھیک حل کر پائیں۔ **نظریہ اضطراب**، غیر مضطرب صورت کے معلوم ٹھیک ٹھیک حلوں کو لے کر، قدم بقدم چلتے ہوئے مضطرب مسئلے کے تخمینی حل دیتا ہے۔ ہم نئے ہیملٹنی کو دو اجزاء کا مجموعہ:

$$H = H^0 + \lambda H' \tag{۶.۴}$$



شکل ۶.۱: لامتناہی چوکور کنویں میں معمولی اضطراب

لکھ کر آغاز کرتے ہیں، جہاں H' اضطراب ہے (زیر بالا میں 0 ہمیشہ غیر مضطرب مقدار کو ظاہر کرتا ہے)۔ ہم وقتی طور پر λ کو ایک چھوٹا عدد تصور کرتے ہیں؛ بعد میں اس کی قیمت کو بڑھا کر ایک (1) کر دی جائے گی، اور H اصل ہیملٹنی ہو گی۔ اگلے قدم میں، ہم ψ_n اور E_n کو λ کی طاقتی تسلسل کے صورت میں لکھتے ہیں۔

$$\psi_n = \psi_n^0 + \lambda\psi_n^1 + \lambda^2\psi_n^2 + \cdots \tag{۶.۵}$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots \tag{۶.۶}$$

یہاں n ویں امتیازی قیمت میں **اول رتبی تصحیح** کو E_n^1 ظاہر کرتا ہے جبکہ n ویں امتیازی تفاعل میں **اول رتبی تصحیح** کو ψ_n^1 ظاہر کرتا ہے؛ اسی طرح E_n^2 اور ψ_n^2 دوم رتبی تصحیح ہوں گی، وغیرہ۔ مساوات ۶.۵ اور مساوات ۶.۶ کو مساوات ۶.۳ میں پُر کر کے

$$\begin{aligned}(H^0 + \lambda H')[\psi_n^0 + \lambda\psi_n^1 + \lambda^2\psi_n^2 + \cdots]\\ = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots)[\psi_n^0 + \lambda\psi_n^1 + \lambda^2\psi_n^2 + \cdots]\end{aligned}$$

یا (λ کے ایک جیسے طاقتوں کو اکٹھا لکھ کر) درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\begin{aligned}H^0\psi_n^0 + \lambda(H^0\psi_n^1 + H'\psi_n^0) + \lambda^2(H^0\psi_n^2 + H'\psi_n^1) + \cdots\\ = E_n^0\psi_n^0 + \lambda(E_n^0\psi_n^1 + E_n^1\psi_n^0) + \lambda^2(E_n^0\psi_n^2 + E_n^1\psi_n^1 + E_n^2\psi_n^0) + \cdots\end{aligned}$$

کمتر رتبہ (λ^0) کی صورت میں[1] اس سے $H^0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0$ حاصل ہوتا ہے، جو نئی مساوات نہیں ہے (مساوات ۶.۱)۔ رتبہ اول (λ^1) تک درج ذیل ہو گا۔

$$H^0\psi_n^1 + H'\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^1 + E_n^1\psi_n^0 \tag{۶.۷}$$

---

[1] ہمیشہ کی طرح، طاقتی تسلسل پھیلاو کی یکتائی ضمانت دیتی ہے کہ ایک جیسی طاقت کے عددی سر ایک جتنے ہوں گے۔

رتبہ دوم (λ^2) تک درج ذیل ہو گا

$$H^0\psi_n^2 + H'\psi_n^1 = E_n^0\psi_n^2 + E_n^1\psi_n^1 + E_n^2\psi_n^0 \tag{۶.۸}$$

وغیرہ۔ (رتبہ پر نظر رکھنے کی غرض سے ہم نے λ استعمال کیا؛ اب اس کی کوئی ضرورت نہیں لہٰذا اس کی قیمت ایک، 1، کر دیں۔)

۶.۱.۲ اول رتبی نظریہ

مساوات ۶.۷ کا ψ_n^0 کے ساتھ اندرونی ضرب لیتے ہیں (یعنی $(\psi_n^0)^*$ سے ضرب دے کر تکمل لیتے ہیں)۔

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^1\rangle + \langle\psi_n^0|H'\psi_n^0\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle$$

تاہم H^0 ہرمشی ہے لہٰذا

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^1\rangle = \langle H^0\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle$$

ہو گا، جو دائیں ہاتھ کے پہلے جزو کو حذف کرے گا۔ مزید $\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle = 1$ کی بنا پر درج ذیل ہو گا۔[۲]

$$E_n^1 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^0\rangle \tag{۶.۹}$$

یہ رتبہ اول نظریہ اضطراب کا بنیادی نتیجہ ہے؛ بلکہ عملاً یہ پوری کوانٹائی میکانیات میں غالباً سب سے اہم مساوات ہے۔ یہ کہتی ہے کہ غیر مضطرب حال میں اضطراب کی توقعاتی قیمت، توانائی کی اول رتبی تصحیح ہو گی۔

مثال ۶.۱: لامتناہی چوکور کنویں کے غیر مضطرب تفاعلات موج (مساوات ۲.۲۸) درج ذیل ہیں۔

$$\psi_n^0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

فرض کریں ہم کنویں کی "تہہ" (زمین) کو مستقل مقدار V_0 اوپر اٹھاتے ہوئے اس نظام کو مضطرب کرتے ہیں (شکل ۶.۲)۔ توانائیوں میں رتبہ اول تصحیح تلاش کریں۔

حل: یہاں $H' = V_0$ ہو گا لہٰذا n ویں حال کی توانائی میں رتبہ اول تصحیح درج ذیل ہو گی۔

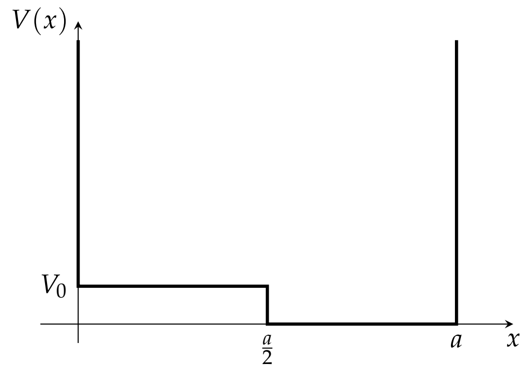
$$E_n^1 = \langle\psi_n^0|V_0|\psi_n^0\rangle = V_0\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle = V_0$$

یوں تصحیح شدہ توانائیوں کی سطحیں $E_n \cong E_n^0 + V_0$ ہوں گی؛ جی ہاں، تمام V_0 مقدار اوپر اٹھتی ہیں۔ یہاں حیرانگی کی بات صرف یہ ہے کہ رتبہ اول نظریہ بالکل ٹھیک جواب دیتا ہے۔ یوں ظاہر ہے کہ مستقل اضطراب کی

---

[۲] موجودہ سیاق و سباق میں $\langle\psi_n^0|H'\psi_n^0\rangle$ یا $\langle\psi_n^0|H'|\psi_n^0\rangle$ (جہاں اضافی انتصابی لکیر شامل کی گئی ہے) لکھنے میں کوئی فرق نہیں، چونکہ ہم حال کو تفاعل موج کے لحاظ سے "نام" دیتے ہیں۔ لیکن موخر الذکر علامتی اظہار زیادہ بہتر ہے، چونکہ یہ ہمیں اس روایت سے آزاد کرتا ہے۔

شکل ۶.۲: پورے کنویں میں مستقل اضطراب



شکل ۶.۳: نصف کنویں میں مستقل اضطراب

صورت میں تمام بلند رتبی تصحیح صفر ہوں گی۔[3] اس کے برعکس کنویں کی نصف چوڑائی تک اضطراب کی وسعت کی صورت (شکل ۶.۳) میں درج ذیل ہو گا۔

$$E_n^1 = \frac{2V_0}{a}\int_0^{a/2}\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x = \frac{V_0}{2}$$

اب توانائی کی ہر سطح $\frac{V_0}{2}$ اوپر اٹھتی ہے۔ یہ غالباً بالکل ٹھیک نتیجہ نہیں، تاہم اول رتبی تخمین کے نقطہ نظر سے معقول جواب ہے۔ □

[3] یہاں کوئی بھی چیز لامتناہی چوکور کنویں کی خصوصیات پر منحصر نہیں ہے، لہٰذا یہی کچھ کسی بھی مخفیہ کے لیے مستقل اضطراب کی صورت میں درست ہو گا۔

مساوات ۶.۹ ہمیں توانائی کی اول رتبی تصحیح دیتی ہے؛ تفاعل موج کے لئے اول رتبی تصحیح حاصل کرنے کی غرض سے ہم مساوات ۶.۷ کو درج ذیل روپ میں لکھتے ہے۔

$$(H^0 - E_n^0)\psi_n^1 = -(H' - E_n^1)\psi_n^0 \tag{۶.۱۰}$$

چونکہ اس کا دایاں ہاتھ ایک معلوم تفاعل ہے، لہٰذا یہ ψ_n^1 کی غیر متجانس تفرقی مساوات ہے۔ اب غیر مضطرب تفاعلات موج ایک مکمل سلسلہ دیتے ہیں، لہٰذا (کسی بھی تفاعل کی طرح) ψ_n^1 کو ان کا خطی جوڑ:

$$\psi_n^1 = \sum_{m\neq n} c_m^{(n)}\psi_m^0 \tag{۶.۱۱}$$

لکھا جا سکتا ہے۔ اگر ψ_n^1 مساوات ۶.۱۰ کو مطمئن کرتے ہوں تب کسی بھی مستقل α کے لیے $(\psi_n^1 + \alpha\psi_n^0)$ بھی اس مساوات کو مطمئن کریں گے، لہٰذا ہم جزو ψ_n^0 کو منفی کر سکتے ہیں؛ ایسا ہی کرتے ہوئے مساوات ۶.۱۱ کے مجموعہ میں $m = n$ شامل نہیں کیا گیا۔ عددی سر $c_m^{(n)}$ تعین کرکے ہم مسئلہ حل کر سکتے ہیں۔

ہم مساوات ۶.۱۰ میں مساوات ۶.۱۱ پُر کرتے ہوئے، اور یہ جانتے ہوئے کہ غیر مضطرب مساوات شروڈنگر (مساوات ۶.۱) کو ψ_m^0 مطمئن کرتے ہیں درج ذیل حاصل کرتے ہیں۔

$$\sum_{m\neq n}(E_m^0 - E_n^0)c_m^{(n)}\psi_m^0 = -(H' - E_n^1)\psi_n^0$$

اس کا ψ_l^0 کے ساتھ اندرونی ضرب لیتے ہیں۔

$$\sum_{m\neq n}(E_m^0 - E_n^0)c_m^{(n)}\langle\psi_l^0|\psi_m^0\rangle = -\langle\psi_l^0|H'|\psi_n^0\rangle + E_n^1\langle\psi_l^0|\psi_n^0\rangle$$

اگر $l = n$ ہو تب بایاں ہاتھ صفر ہو گا اور ہمیں دوبارہ مساوات ۶.۹ ملتی ہے؛ اگر $l \neq n$ ہو تو

$$(E_l^0 - E_n^0)c_l^{(n)} = -\langle\psi_l^0|H'|\psi_n^0\rangle$$

یا

$$c_m^{(n)} = \frac{\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \tag{۶.۱۲}$$

ہو گا، لہٰذا درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\psi_n^1 = \sum_{m\neq n}\frac{\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle}{(E_n^0 - E_m^0)}\psi_m^0 \tag{۶.۱۳}$$

جب تک غیر مضطرب توانائی طیف غیر انحطاطی ہو، نسب نما کوئی مسئلہ کھڑا نہیں کرتا (چونکہ کسی بھی عددی سر کے لئے $n = m$ نہیں ہو گا)۔ ہاں اگر دو غیر مضطرب حالات کی توانائیاں ایک جتنی ہوں (مساوات ۶.۱۲ کے نسب نما میں صفر پایا جائے گا) تب نسب نما ہمیں مصیبت میں ڈالتا ہے؛ ایسی صورت میں **انحطاطی نظریہ اضطراب**[4] کی ضرورت پیش آئے گی، جس پر حصہ ۶.۲ میں غور کیا جائے گا۔

یوں اول رتبی نظریہ اضطراب مکمل ہوتا ہے۔ توانائی کی اول رتبی تصحیح، E_n^1، مساوات ۶.۹ دیتی ہے، اور تفاعل موج کی اول رتبی تصحیح، ψ_n^1، مساوات ۶.۱۳ دیتی ہے۔ میں آپ کو یہاں یہ ضرور بتانا چاہوں گا کہ اگرچہ نظریہ اضطراب عموماً توانائیوں کی انتہائی درست قیمتیں دیتا ہے (یعنی $E_n^0 + E_n^1$ اصل قیمت E_n کے بہت قریب ہو گی)، اس سے حاصل تفاعلات موج عموماً افسوس کن ہوتے ہیں۔

سوال ۶.۱: فرض کرے ہم لامتناہی چوکور کنویں کے وسط میں δ تفاعلی موڑا:

$$H' = \alpha\delta\left(x - \frac{a}{2}\right)$$

ڈالتے ہیں، جہاں α ایک مستقل ہے۔

ا. اجازتی توانائیوں کی اول رتبی تصحیح تلاش کریں۔ بتائیں جفت n کی صورت میں توانائیاں کیوں مضطرب نہیں۔

ب. زمینی حال کی تصحیح، ψ_1^1، کی اتساع (مساوات ۶.۱۳) کے ابتدائی تین غیر صفر اجزاء تلاش کریں۔

سوال ۶.۲: ہارمونی مرتعش $[V(x) = \frac{1}{2}kx^2]$ کی اجازتی توانائیاں درج ذیل ہیں

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad\qquad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

جہاں $\omega = \sqrt{k/m}$ کلاسیکی تعدد ہے۔ اب فرض کریں مقیاس لچک میں معمولی تبدیلی رونما ہوتی ہے: $k \to (1+\epsilon)k$، (جس سے اسپرنگ کی لچک کم ہو گی)۔

ا. نئی توانائیوں کی بالکل ٹھیک قیمتیں حاصل کریں (جو یہاں ایک آسان کام ہے)۔ اپنے کلیہ کو دوم رتبہ تک ϵ کی طاقتیں تسلسل میں پھیلائیں۔

ب. اب مساوات ۶.۹ استعمال کرتے ہوئے توانائی میں اول رتبی اضطراب کا حساب لگائیں۔ یہاں H' کیا ہو گا؟ اپنے نتیجے کا جزو-ا کے ساتھ موازنہ کریں۔ اشارہ: یہاں کسی نئے تکمل کی قیمت کے حصول کی نہ ضرورت اور نہ اجازت ہے۔

سوال ۶.۳: ایک لامتناہی چوکور کنویں (مساوات ۲.۱۹) میں دو یکساں بوسن رکھے جاتے ہیں۔ یہ مخفیہ

$$V(x_1, x_2) = -aV_0\delta(x_1 - x_2)$$

(جہاں V_0 ایک مستقل جس کا بُعد توانائی ہے اور a کنویں کی چوڑائی ہے) کے ذریعے ایک دوسرے پر بہت معمولی اثرانداز ہوتے ہیں۔

---

[4] degenerate perturbation theory

ا. پہلے قدم میں، ذرات کے باہمی اثر کو نظر انداز کرتے ہوئے، زمینی حال اور پہلے ہیجان حال کے تفاعلات موج اور مطابقتی توانائیاں تلاش کریں۔

ب. زمینی حال اور پہلے ہیجان حال کی توانائیوں پر ذرات کے باہمی اثر کا تخمین اول رتبی نظریہ اضطراب سے دریافت کریں۔

۶.۱.۳ دوم رتبی توانائیاں

اسی طرح بڑھتے ہوئے، ہم ψ_n^0 اور دور تبی مساوات (مساوات ۶.۸) کا اندرونی ضرب لیتے ہیں۔

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^2\rangle + \langle\psi_n^0|H'\psi_n^1\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^2\rangle + E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^2\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle$$

یہاں بھی ہم H^0 کے ہرمشی پن کو بروئے کار لاتے ہیں:

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^2\rangle = \langle H^0\psi_n^0|\psi_n^2\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^2\rangle$$

لہٰذا بائیں ہاتھ کا پہلا جزو دائیں ہاتھ کے پہلے جزو کے ساتھ کٹ جائے گا۔ ساتھ ہی $\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle = 1$ ہے لہٰذا E_n^2 کا درج ذیل کلیہ حاصل ہوتا ہے۔

$$E_n^2 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^1\rangle - E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle \tag{۶.۱۴}$$

تاہم مجموعہ میں $m = n$ شامل نہیں اور باقی تمام عمودی ہیں لہٰذا

$$\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} c_m^{(n)}\langle\psi_n^0|\psi_m^0\rangle = 0$$

ہو گا جس کی بنا پر

$$E_n^2 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} c_m^{(n)}\langle\psi_n^0|H'|\psi_m^0\rangle = \sum_{m\neq n}\frac{\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle\langle\psi_n^0|H'|\psi_m^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

یا

$$E_n^2 = \sum_{m\neq n}\frac{\left|\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle\right|^2}{E_n^0 - E_m^0} \tag{۶.۱۵}$$

ہو گا۔ یہ دور تبی نظریہ اضطراب کا بنیادی نتیجہ ہے۔

اگرچہ ہم اسی طرح آگے بڑھتے ہوئے تفاعل موج (ψ_n^2) کی دوم رتبی تصحیح، توانائی کی سوم رتبی تصحیح، وغیرہ حاصل کر سکتے ہیں، لیکن عملاً اس ترکیب کو صرف مساوات ۶.۱۵ تک استعمال کرنا سودمند ہوگا۔[۵]

سوال ۶.۴:

ا. توانائیوں کی دوم رتبی تصحیح (E_n^2)، سوال ۶.۱ کے مخفیہ کے لیے تلاش کریں۔ تبصرہ: آپ تسلسل کا مجموعہ صریحاً حاصل کر کے طاق n کیلئے $-2m(\alpha/\pi\hbar n)^2$ حاصل کر سکتے ہیں۔

ب. زمینی حال توانائی کے لئے دوم رتبی تصحیح (E_n^2)، سوال ۶.۲ کے مخفیہ کے لیے تلاش کریں۔ تصدیق کریں کہ آپ کا نتیجہ بالکل درست نتیجے کے مطابق ہے۔

سوال ۶.۵: ایک ایسے باردار ذرہ پر غور کریں جو یک بُعدی ہارمونی ارتعاشی مخفیہ میں پایا جاتا ہو۔ فرض کریں ہم ایک کمزور برقی میدان (E) چالو کرتے ہیں جس کی بنا پر مخفی توانائی میں $H' = qEx$ مقدار کی تبدیلی پیدا ہوتی ہے۔

ا. دکھائیں کہ توانائیوں کی دو سطحوں میں کوئی اول رتبی تبدیلی پیدا نہیں ہوگی۔ دوم رتبی تصحیح تلاش کریں۔ اشارہ: سوال ۳.۳۳ دیکھیں۔

ب. تبدیلی متغیرات $x' \equiv x - (qE/m\omega^2)$ استعمال کرتے ہوئے موجودہ صورت میں مساوات شروڈنگر کو بلاواسطہ حل کیا جا سکتا ہے۔ ایسا کرتے ہوئے ٹھیک ٹھیک توانائیاں تلاش کر کے دکھائیں کہ یہ نظریہ اضطراب کی تخمین کے مطابق ہیں۔

۶.۲ انحطاطی نظریہ اضطراب

اگر غیر مضطرب حالات انحطاطی ہوں؛ یعنی، دو (یا دو سے زیادہ) منفرد حالات (ψ_a^0 اور ψ_b^0) کی توانائیاں ایک جیسی ہوں، تب سادہ نظریہ اضطراب غیر کارآمد ہوگا، چونکہ $c_a^{(b)}$ (مساوات ۶.۱۲) اور E_a^2 (مساوات ۶.۱۵) بے قابو بڑھتے ہیں (ماسوائے اس صورت میں جب شمار کنندہ صفر ہو: $\langle\psi_a^0|H'|\psi_b^0\rangle = 0$؛ اس پوشیدہ صورت کو ہم بعد میں استعمال کریں گے)۔ یوں انحطاطی صورت میں ہمیں توانائیوں کی اول رتبی تصحیح (مساوات ۶.۹) پر بھی یقین نہیں کرنا چاہیے اور ہمیں مسئلے کا کوئی دوسرا حل ڈھونڈنا ہوگا۔

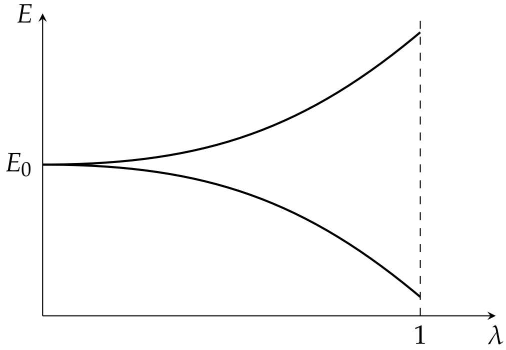
۶.۲.۱ دوپڑتا انحطاط

درج ذیل فرض کریں جہاں ψ_a^0 اور ψ_b^0 معمول شدہ ہیں۔

$$H^0\psi_a^0 = E^0\psi_a^0, \quad H^0\psi_b^0 = E^0\psi_b^0, \quad \langle\psi_a^0|\psi_b^0\rangle = 0 \tag{۶.۱۶}$$

[۵] مختصر انداز لکھائی میں $V_{mn} \equiv \langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle$، $\Delta_{mn} \equiv E_m^0 - E_n^0$ اور n ویں توانائی کی پہلی تین تصحیح درج ذیل ہوں گی۔

$$E_n^1 = V_{nn}, \quad E_n^2 = \sum_{m\neq n}\frac{|V_{nm}|^2}{\Delta_{nm}}, \quad E_n^3 = \sum_{l,m\neq n}\frac{V_{nl}V_{lm}V_{mn}}{\Delta_{nl}\Delta_{nm}} - V_{nn}\sum_{m\neq n}\frac{|V_{nm}|^2}{\Delta_{nm}^2}$$



شکل ۶.۴: انحطاط کا خاتمہ بذریعہ اضطراب۔

دھیان رہے کہ ان حالات کا ہر خطی جوڑ

$$\psi^0 = \alpha\psi_a^0 + \beta\psi_b^0 \qquad (۶.۱۷)$$

بھی H^0 کا امتیازی حال ہو گا اور اس کی امتیازی قیمت E^0 بھی وہی ہو گی۔

$$H^0\psi^0 = E^0\psi^0 \qquad (۶.۱۸)$$

عام طور پر اضطراب (H') انحطاط کو "توڑے" (یا "منسوخ" کرے) گا: جیسے جیسے ہم λ کی قیمت (0 سے 1 کی طرف) بڑھاتے ہیں مشترک غیر مضطرب توانائی E^0 دو ٹکڑوں میں تقسیم ہو گی (شکل ۶.۴)۔ مخالف رخ چلتے ہوئے اگر ہم اضطراب کو بند (یعنی صفر) کر دیں تب "بالائی" حال کی تخفیف، ψ_a^0 اور ψ_b^0 کے ایک خطی جوڑ میں جبکہ "زیریں" حال کی تخفیف کسی دوسرے عمودی خطی جوڑ میں ہو گا، تاہم ہم قبل از وقت نہیں جان سکتے کہ یہ "**موزوں**"[۶] خطی جوڑ کیا ہوں گے۔ چونکہ ہم غیر مضطرب حالات نہیں جانتے، لہٰذا ہم اول رتبی توانائیوں (مساوات ۶.۹) کا حساب نہیں کر سکتے۔

اسی لیے، ہم ان "موزوں" غیر مضطرب حالات کو فی الحال عمومی روپ (مساوات ۶.۱۷) میں لکھتے ہیں، جہاں α اور β قابل تغیر ہوں گے۔ ہم مساوات شروڈنگر

$$H\psi = E\psi \qquad (۶.۱۹)$$

کو $H = H^0 + \lambda H'$ اور

$$E = E^0 + \lambda E^1 + \lambda^2 E^2 + \cdots, \quad \psi = \psi^0 + \lambda\psi^1 + \lambda^2\psi^2 + \cdots \qquad (۶.۲۰)$$

---

[۶]goodlinearcombinations

کیلئے حل کرنا چاہتے ہیں۔ انہیں مساوات ۶.۱۹ میں ڈال کر (ہمیشہ کی طرح) λ کی ایک جیسی طاقتیں اکٹھی کر کے درج ذیل حاصل کرتے ہیں۔

$$H^0\psi^0 + \lambda(H'\psi^0 + H^0\psi^1) + \cdots = E^0\psi^0 + \lambda(E^1\psi^0 + E^0\psi^1) + \cdots$$

اب $H^0\psi^0 = E^0\psi^0$ (مساوات ۶.۱۸) کی بنا پر اولین اجزاء ایک دوسرے کے ساتھ کٹ جائیں گے، جبکہ λ^1 رتبہ کے لیے درج ذیل ہو گا۔

$$H^0\psi^1 + H'\psi^0 = E^0\psi^1 + E^1\psi^0 \tag{۶.۲۱}$$

اس کا ψ_a^0 کے ساتھ اندرونی ضرب لیتے ہیں۔

$$\langle\psi_a^0|H^0\psi^1\rangle + \langle\psi_a^0|H'\psi^0\rangle = E^0\langle\psi_a^0|\psi^1\rangle + E^1\langle\psi_a^0|\psi^0\rangle$$

چونکہ H^0 ہرمشی ہے، لہذا بائیں ہاتھ پہلا جزو دائیں ہاتھ کے پہلے جزو کے ساتھ کٹ جائے گا۔ مساوات ۶.۱۷ کو استعمال کرتے ہوئے اور معیاری عمودیت کی شرط (مساوات ۶.۱۶) کو بروئے کار لاتے ہوئے

$$\alpha\langle\psi_a^0|H'|\psi_a^0\rangle + \beta\langle\psi_a^0|H'|\psi_b^0\rangle = \alpha E^1$$

یا مختصراً

$$\alpha W_{aa} + \beta W_{ab} = \alpha E^1 \tag{۶.۲۲}$$

حاصل ہو گا جہاں درج ذیل ہو گا۔

$$W_{ij} \equiv \langle\psi_i^0|H'|\psi_j^0\rangle, \quad (i, j = a, b) \tag{۶.۲۳}$$

اسی طرح ψ_b^0 کے ساتھ اندرونی ضرب درج ذیل دے گا۔

$$\alpha W_{ba} + \beta W_{bb} = \beta E^1 \tag{۶.۲۴}$$

دھیان رہے کہ (اصولاً) ہمیں تمام W معلوم ہیں، چونکہ یہ غیر مضطرب تفاعلات موج ψ_a^0 اور ψ_b^0 کے لحاظ سے H' کے ارکان قالب ہیں۔ مساوات ۶.۲۴ کو W_{ab} سے ضرب دے کر، مساوات ۶.۲۲ استعمال کرتے ہوئے βW_{ab} کو خارج کر کے، درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\alpha[W_{ab}W_{ba} - (E^1 - W_{aa})(E^1 - W_{bb})] = 0 \tag{۶.۲۵}$$

غیر صفر α کی صورت میں مساوات ۶.۲۵ ہمیں E^1 کی مساوات دیگی۔

$$(E^1)^2 - E^1(W_{aa} + W_{bb}) + (W_{aa} + W_{bb} - W_{ab}W_{ba}) = 0 \tag{۶.۲۶}$$

دو درجی کلیہ استعمال کرتے ہوئے اور (مساوات ۶.۲۳ سے) جانتے ہوئے کہ $W_{ba} = W_{ab}^*$ ہو گا، ہم درج ذیل اخذ کرتے ہیں۔

$$E_{\pm}^1 = \frac{1}{2}\left[W_{aa} + W_{bb} \pm \sqrt{(W_{aa} - W_{bb})^2 + 4|W_{ab}|^2}\,\right] \tag{۶.۲۷}$$

یہ انحطاطی نظریہ اضطراب کا بنیادی نتیجہ ہے، جہاں دو جذر دو مضطرب توانائیوں ہیں۔

لیکن صفر α کی صورت میں کیا ہو گا؟ ایسی صورت میں $\beta = 1$ ہو گا، لہٰذا مساوات ۶.۲۲ کے تحت $W_{ab} = 0$ اور مساوات ۶.۲۴ کے تحت $E^1 = W_{bb}$ ہو گا۔ یہ در حقیقت عمومی نتیجہ (مساوات ۶.۲۷) میں منفی علامت کے ذریعے شامل ہے (مثبت علامت $\alpha = 1$، $\beta = 0$ کی صورت میں ہو گا)۔ اس کے علاوہ ہمارے جوابات

$$E_+^1 = W_{aa} = \langle\psi_a^0|H'|\psi_a^0\rangle, \quad E_-^1 = W_{bb} = \langle\psi_b^0|H'|\psi_b^0\rangle$$

ٹھیک وہی ہیں جو غیر انحطاطی نظریہ اضطراب سے حاصل ہوتے (مساوات ۶.۹)۔ یہ محض ہماری خوش قسمتی ہے: حالات ψ_a^0 اور ψ_b^0 پہلے سے "موزوں" خطی جوڑ تھے۔ کیا اچھا ہوتا، اگر ہم آغاز سے ہی "موزوں" حالات جان پاتے؛ تب ہم غیر انحطاطی نظریہ اضطراب استعمال کر پاتے۔ حقیقت میں درج ذیل مسئلہ کے تحت ہم عموماً ایسا کر پاتے ہیں۔

مسئلہ ۶.۱: فرض کریں A ایک ایسا ہرمشی عامل ہے، جو H^0 اور H' کے ساتھ مقلوبی ہے۔ اگر (H^0 کے انحطاطی امتیازی تفاعلات) ψ_a^0 اور ψ_b^0 عامل A کے بھی امتیازی تفاعلات ہوں، جن کے منفرد امتیازی قیمتیں ہوں،

$$A\psi_a^0 = \mu\psi_a^0, \quad A\psi_b^0 = \nu\psi_b^0 \quad \text{اور} \quad \mu \neq \nu \quad \text{ہو}$$

تب $W_{ab} = 0$ ہو گا (لہٰذا ψ_a^0 اور ψ_b^0 نظریہ اضطراب میں قابل استعمال، "موزوں" حالات ہوں گے)۔

ثبوت: ہم فرض کر چکے کہ $[A, H'] = 0$ ہو گا لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\begin{aligned}
\langle\psi_a^0|[A, H']\psi_b^0\rangle &= 0 \\
&= \langle\psi_a^0|AH'\psi_b^0\rangle - \langle\psi_a^0|H'A\psi_b^0\rangle \\
&= \langle A\psi_a^0|H'\psi_b^0\rangle - \langle\psi_a^0|H'\nu\psi_b^0\rangle \\
&= (\mu - \nu)\langle\psi_a^0|H'\psi_b^0\rangle = (\mu - \nu)W_{ab}
\end{aligned}$$

اب $\mu \neq \nu$ ہے لہٰذا $W_{ab} = 0$ ہو گا۔

سبق: اگر آپ کا سامنا انحطاطی حالات سے ہو، ایسا ہرمشی عامل A تلاش کرنے کی کوشش کریں جو H^0 اور H' کے ساتھ مقلوبی ہو؛ H^0 اور A کے بیک وقت امتیازی تفاعلات کو غیر مضطرب حالات منتخب کر کے سادہ اول رتبی نظریہ اضطراب بروئے کار لائیں۔ ایسے عامل کی تلاش میں ناکامی کی صورت میں آپ کو مساوات ۶.۲۷ استعمال کرنا ہو گا، جس کی ضرورت عملاً کم ہی پڑتی ہے۔

□

سوال ۶.۶: دو "موزوں" غیر مضطرب حالات

$$\psi^0_\pm = \alpha_\pm\psi^0_a + \beta_\pm\psi^0_b$$

لیں، جہاں $\alpha_\pm$ اور $\beta_\pm$ کو (معمول زنی تک) مساوات ۶.۲۲ (یا مساوات ۶.۲۴) تعین کرتا ہے۔ صریحاً درج ذیل دکھائیں۔

ا. $\psi^0_\pm$ عمودی ہیں: $(\langle\psi^0_+|\psi^0_-\rangle = 0)$ ؛

ب. $\langle\psi^0_+|H'|\psi^0_-\rangle = 0$ ؛

ج. $\langle\psi^0_\pm|H'|\psi^0_\pm\rangle = E^1_\pm$ جہاں $E^1_\pm$ کی قیمت مساوات ۶.۲۷ دیتی ہے۔

سوال ۶.۷: فرض کرے ایک ذرہ، جس کی کمیت m ہے، ایک بند یک بُعدی تار، جس کی لمبائی L ہے، پر آزادی سے حرکت کرتا ہے (سوال ۲.۴۶)۔

ا. دکھائیں کے ساکن حالات کو درج ذیل روپ میں لکھا جا سکتا ہے

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{2\pi inx/L}, \qquad (-L/2 < x < L/2)$$

جہاں $n = 0, \pm1, \pm2, \ldots$ اور اجازتی توانائیاں درج ذیل ہوں گی۔

$$E_n = \frac{2}{m}\Big(\frac{n\pi\hbar}{L}\Big)^2$$

دھیان رہے کہ زمینی حال $(n = 0)$ کے علاوہ تمام حالات دہرے انحطاطی ہیں۔

ب. فرض کریں ہم اب اضطراب

$$H' = -V_0 e^{-x^2/a^2}$$

متعارف کرتے ہیں جہاں $L \gg a$ ہے۔ (یہ $x = 0$ پر مخفیہ میں ایک ٹویا پیدا کرتا ہے، گویا تار کو مروڑ کر پکڑ بنایا گیا ہو۔) مساوات ۶.۲۷ استعمال کرتے ہوئے E_n کی اول رتبی تصحیح تلاش کریں۔ اشارہ: چونکہ H' خطہ $-a < x < a$ کے باہر تقریباً صفر ہے اور $L \gg a$ ہے لہٰذا تکمل کی قیمت حاصل کرتے وقت تکمل کی حدوں کو $\pm L/2$ کی بجائے $\pm\infty$ رکھیں۔

ج. اس مسئلہ کے لئے ψ_n اور ψ_{-n} کے "موزوں" خطی جوڑ کیا ہوں گے؟ دکھائے کہ ان حالات کو لے کر، مساوات ۶.۹ استعمال کرتے ہوئے، اول رتبی تصحیح حاصل ہو گی۔

د. ایسا ہرمشی عامل A تلاش کریں جو مسئلہ کے شرائط پر پورا اترتا ہو، اور دکھائیں کہ H^0 اور A کے بیک وقت امتیازی حالات ٹھیک وہی ہیں جنہیں آپ نے جزو-ج میں استعمال کیا۔

۶.۲.۲ بلند رتبی انحطاط

گزشتہ حصہ میں انحطاط کو دو پڑتا تصور کیا گیا، تاہم ہم دیکھ سکتے ہیں کہ اس ترکیب کو کس طرح عمومی بنایا جا سکتا ہے۔ مساوات ۶.۲۲ اور مساوات ۶.۲۴ کو ہم قالبی روپ میں لکھتے ہیں۔

$$\begin{pmatrix} W_{aa} & W_{ab} \\ W_{ba} & W_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E^1 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \tag{۶.۲۸}$$

ظاہر ہے کہ E^1 W ، قالب کے امتیازی قیمتیں ہیں۔ مساوات ۶.۲۶ اس قالب کی امتیازی مساوات ہے، اور غیر مضطرب حالات کے "موزوں" خطی جوڑ $\mathbf{W}$ کے امتیازی سمتیات ہیں۔

ہم n پڑتا انحطاط کی صورت میں $n \times n$ قالب:

$$W_{ij} = \langle \psi_i^0 | H' | \psi_j^0 \rangle \tag{۶.۲۹}$$

کے امتیازی قیمتیں تلاش کرتے ہیں۔ الجبرا کی زبان میں "موزوں" غیر مضطرب تفاعلات موج کی تلاش سے مراد انحطاطی ذیلی فضا میں ایسی اساس تیار کرنا ہے جو قالب $\mathbf{W}$ کو وتری بناتی ہو۔ یہاں بھی اگر آپ ایسا عامل A تلاش کر سکیں، جو H' کا مقلوبی ہو، اور A اور H' کے بیک وقت امتیازی تفاعلات استعمال کر سکیں تو قالب W خود بخود وتری ہو گا، لہٰذا آپ کو امتیازی مساوات حل کرنے کی ضرورت پیش نہیں آئی گی۔[۷] (اگر آپ کو میری دو پڑتا انحطاط کو عمومیت دیتے ہوئے n پڑتا انحطاط پر یقین نہ ہو تو سوال ۶.۱۰ حل کر کے اپنی تسلی کر لیں۔)

مثال ۶.۲: تین ابعادی لامتناہی کعبی کنویں (سوال ۴.۲):

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a,\ 0 < y < a,\ 0 < z < a \\ \infty & \text{بصورت دیگر} \end{cases} \tag{۶.۳۰}$$

پر غور کریں۔ ساکن حالات درج ذیل ہیں

$$\psi^0_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{a} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{a} z\right) \tag{۶.۳۱}$$

جہاں n_x ، n_y اور n_z مثبت عدد صحیح ہیں۔ ان کی مطابقتی اجازتی توانائیاں درج ذیل ہیں۔

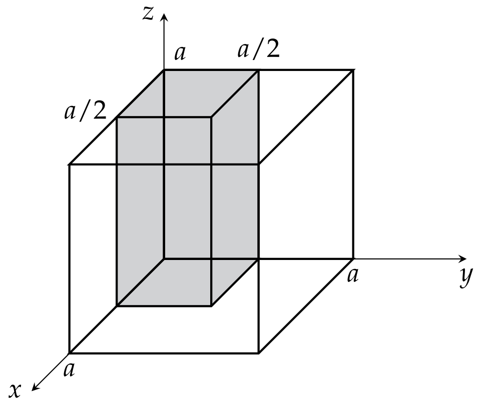
$$E^0_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \tag{۶.۳۲}$$

دھیان رہے کہ زمینی حال (ψ_{111}) غیر انحطاطی ہے جس کی توانائی درج ذیل ہے۔

$$E_1^0 \equiv 3 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \tag{۶.۳۳}$$

---

[۷] انحطاطی نظریہ اضطراب، در حقیقت، ہیملٹنی کے انحطاطی حصہ کو وتری بنانے کے مترادف ہے۔ قوالب کا وتری بنانا (اور مقلوبی قوالب کا بیک وقت وتری بنانا) ضمیمہ کے حصہ ۵-A میں سکھایا گیا ہے۔



شکل ۶.۵: سایہ دار خطہ میں مخفیہ کو اضطراب مقدار V_0 بڑھاتا ہے۔

تاہم پہلا ہیجان حال (تہرا) انحطاطی ہے:

$$\psi_a \equiv \psi_{112}, \quad \psi_b \equiv \psi_{121}, \quad \psi_c \equiv \psi_{211} \tag{۶.۳۴}$$

اور ان تینوں کی توانائی:

$$E_1^0 \equiv 3\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2} \tag{۶.۳۵}$$

ایک جیسی ہے۔ آئیے اب درج ذیل اضطراب متعارف کرتے ہیں

$$H' = \begin{cases} V_0, & 0 < x < a/2, 0 < y < a/2 \\ 0, & \text{بصورت دیگر} \end{cases} \tag{۶.۳۶}$$

جوڑبے کے ایک چوتھائی حصہ میں مخفیہ کو V_0 مقدار بڑھاتا ہے (شکل ۶.۵)۔ زمینی حال توانائی کی ایک رتبی تصحیح مساوات ۶.۹ دیتی ہے:

$$\begin{aligned} E_0^1 &= \langle\psi_{111}|H'|\psi_{111}\rangle \\ &= \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}y\right) \mathrm{d}y \int_0^{a} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) \mathrm{d}z \\ &= \frac{1}{4}V_0 \end{aligned} \tag{۶.۳۷}$$

جو ہمارے توقعات کے عین مطابق ہے۔

اول ہیجان حال جاننے کے لیے ہمیں انحطاطی نظریہ اضطراب کی پوری صلاحیت درکار ہو گی۔ پہلے قدم میں ہم قالب **W** تیار کرتے ہیں۔ اس کے وتری ارکان وہی ہونگے جو زمینی حال کے ہیں (سوائے اس بات کے، کہ ان میں

سے ایک سائن کا دلیل دگنا ہے)؛ آپ درج ذیل کی تصدیق کر سکتے ہیں۔

$$W_{aa} = W_{bb} = W_{cc} = \frac{1}{4}V_0$$

غیر وتری ارکان زیادہ دلچسپ ہیں۔

$$\begin{aligned} W_{ab} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x \\ \times \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \mathrm{d}y \int_0^{a} \sin\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}z\right) \mathrm{d}z \end{aligned}$$

تاہم z تکمل صفر ہو گا (جیسا W_{ac} کے لیے بھی ہو گا)، لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$W_{ab} = W_{ac} = 0$$

الغرض

$$\begin{aligned} W_{bc} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x \\ \times \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \mathrm{d}y \int_0^{a} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) \mathrm{d}z = \frac{16}{9\pi^2}V_0 \end{aligned}$$

ہو گا۔ یوں درج ذیل ہو گا جہاں $\kappa \equiv (8/3\pi)^2 \approx 0.7205$ ہے۔

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_{aa} & W_{ab} & W_{ac} \\ W_{ba} & W_{bb} & W_{bc} \\ W_{ca} & W_{cb} & W_{cc} \end{pmatrix} = \frac{V_0}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \kappa \\ 0 & \kappa & 1 \end{pmatrix} \tag{۶.۳۸}$$

قالب $\mathbf{W}$ بلکہ $4\,\mathbf{W}\,/\,V_0$ جس کے ساتھ کام کرنا زیادہ آسان ہے کی امتیازی مساوات (ضمیمہ A-۵ کے تحت):

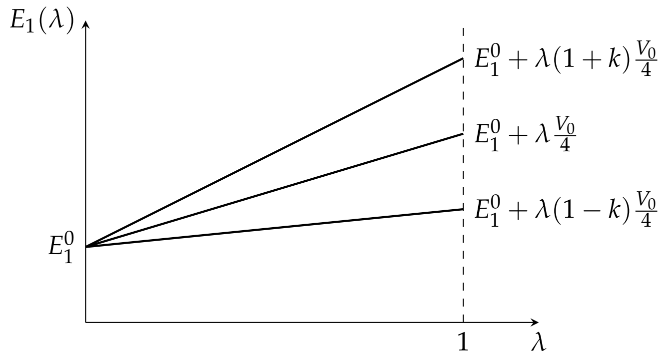
$$\begin{vmatrix} 1-w & 0 & 0 \\ 0 & 1-w & \kappa \\ 0 & \kappa & 1-w \end{vmatrix}$$

یعنی

$$(1-w)^3 - \kappa^2(1-w) = 0$$

ہو گی جس کی امتیازی قیمتیں درج ذیل ہوں گی۔

$$w_1 = 1; \quad w_2 = 1 + \kappa \approx 1.7205; \quad w_3 = 1 - \kappa \approx 0.2795$$



شکل ۶.۶: انحطاط کا اختتام برائے مثال ۶.۲ (مساوات ۶.۳۹)۔

یوں λ کے اول رتبہ تک درج ذیل ہو گا

$$E_1(\lambda) = \begin{cases} E_1^0 + \lambda V_0/4 \\ E_1^0 + \lambda(1+\kappa)V_0/4 \\ E_1^0 + \lambda(1-\kappa)V_0/4 \end{cases} \tag{۶.۳۹}$$

جہاں E_1^0 (مشترکہ) غیر مضطرب توانائی (مساوات ۶.۳۵) ہے۔ یہ اضطراب، توانائی E_1^0 کو تین منفرد توانائیوں کی سطحوں میں تقسیم کر کے انحطاط ختم کرتا ہے (شکل ۶.۶ دیکھیں)۔ اگر ہم بھول کر اس مسئلے کو غیر انحطاطی نظریہ اضطراب سے حل کرتے تب ہم اخذ کرتے کہ اول رتبی تصحیح (مساوات ۶.۹) تینوں حالات کے لئے ایک جتنی اور $V_0/4$ کے برابر ہوتی جو در حقیقت صرف درمیانے حال کے لیے درست ہے۔

مزید "موزوں" غیر مضطرب حالات درج ذیل روپ کے خطی جوڑ ہونگے

$$\psi^0 = \alpha\psi_a + \beta\psi_b + \gamma\psi_c \tag{۶.۴۰}$$

جہاں عددی سر (α، β اور γ) قالب $\mathbf{W}$ کے امتیازی سمتیات ہیں۔

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \kappa \\ 0 & \kappa & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = w \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

ہمیں $w = 1$ کے لیے $\alpha = 1$، $\beta = \gamma = 0$؛ جبکہ $w = 1 \pm \kappa$ کے لیے $\alpha = 0$، $\beta = \pm\gamma = 1/\sqrt{2}$

حاصل ہوتے ہیں۔ (میں نے انہیں معمول شدہ کیا ہے۔) یوں "موزوں" حالات درج ذیل ہوں گے۔[۸]

$$\psi^0 = \begin{cases} \psi_a \\ (\psi_b + \psi_c)/\sqrt{2} \\ (\psi_b - \psi_c)/\sqrt{2} \end{cases} \tag{۶.۴۱}$$

□

سوال ۶.۸: لامتناہی کعبی کنویں (مساوات ۶.۳۰) میں نقطہ $(a/4, a/2, 3a/4)$ پر ڈیلٹا تفاعل "موڑا":

$$H' = a^3 V_0 \delta(x - a/4)\delta(y - a/2)\delta(z - 3a/4)$$

رکھ کر کنویں کو مضطرب کیا جاتا ہے۔ زمینی حال اور (تہرا انحطاطی) اول ہیجان حال کی توانائیوں میں اول رتبی تصحیح کتنی ہو گی؟

سوال ۶.۹: ایک ایسے کوانٹائی نظام پر غور کریں جس میں صرف "تین" خطی غیر تابع حالات پائے جاتے ہوں۔ فرض کریں قالبی روپ میں اس کا ہیملٹنی درج ذیل ہے

$$\mathbf{H} = V_0 \begin{pmatrix} (1-\epsilon) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \epsilon \\ 0 & \epsilon & 2 \end{pmatrix} = \underbrace{V_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}}_{H^0} + \underbrace{\epsilon V_0 \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}}_{H'}$$

جہاں V_0 ایک مستقل ہے، اور ϵ کوئی چھوٹا عدد $(\epsilon \ll 1)$ ہے۔

ا. غیر مضطرب ہیملٹنی $(\epsilon = 0)$ کے امتیازی سمتیات اور امتیازی قیمتیں لکھیں۔

ب. قالب $\mathbf{H}$ کے ٹھیک ٹھیک امتیازی قیمتوں کے لئے حل کریں۔ ہر ایک کو ϵ کی صورت میں دوم رتبہ تک طاقتی تسلسل کی روپ میں پھیلائیں۔

ج. اول رتبی اور دوم رتبی غیر انحطاطی نظریہ اضطراب استعمال کرتے ہوئے اس حال کی امتیازی قیمت کی تخمینی قیمت تلاش کریں جو H^0 کے غیر انحطاطی امتیازی سمتیہ سے پیدا ہوتا ہے۔ اس نتیجے کا جزو-ا کے ٹھیک ٹھیک نتیجہ کے ساتھ موازنہ کریں۔

---

[۸] یہ جانتے ہوئے کہ H' کے ساتھ، x اور y کو آپس میں تبدیل کرنے والا عامل، P_{xy} مقلوب ہے، ہم اس نتیجے کو قیاساً معلوم کر سکتے تھے۔ اس کے امتیازی قیمتیں (زیر تبدیلی جفت تفاعلوں کے لئے) $+1$ اور (طاق تفاعلات کے لئے) -1 ہے۔ یہاں ψ_a پہلے سے جفت ہے، $(\psi_b + \psi_c)$ جفت اور $(\psi_b - \psi_c)$ طاق ہے۔ یہ فیصلہ کن نہیں ہے، چونکہ جفت حالات کا ہر ایک خطی جوڑ جفت ہو گا۔ لیکن، اگر ہم عامل Q بھی استعمال کریں، جو z کو $a - z$ منتقل کرتا ہو، اور یہ جانتے ہوں کہ ψ_a ایسا امتیازی تفاعل ہے جس کی امتیازی قیمت -1 ہے اور باقی دو امتیازی تفاعلات کی امتیازی قیمت $+1$ ہے، ابہام دور ہو جاتا ہے۔ یہاں عاملین P_{xy} اور Q مل کر، حصہ ۶.۲.۱ میں پیش کئے گئے مسئلہ میں A کا کردار ادا کرتے ہیں۔

د. دو ابتدا میں انحطاطی امتیازی قیمتوں کی اول رتبی تصحیح کو انحطاطی نظریہ اضطراب سے تلاش کریں۔ ٹھیک نتائج کے ساتھ موازنہ کریں۔

سوال ۶.۱۰: میں دعویٰ چکا ہوں کہ n پڑتا انحطاطی توانائی کی اول رتبی تصحیح، قالب W کی امتیازی قیمتیں ہوں گی۔ میں نے اس دعوے کی وجہ سے پیش کی کہ یہ $n = 2$ صورت کی "قدرتی" عمومیت ہے۔ اس کو ثابت کرنے کے لئے، حصہ ۶.۲.۱ کے قدموں پر چل کر، درج ذیل سے آغاز کرکے

$$\psi^0 = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \psi_j^0$$

(مساوات ۶.۱۷ کو عمومیت دیتے ہوئے) دکھائیں کہ مساوات ۶.۲۲ کے مماثل کا مفہوم قالب $\mathbf{W}$ کی امتیازی قیمت مساوات لی جا سکتی ہے۔

۶.۳ ہائیڈروجن کا مہین ساخت

ہائیڈروجن جوہر (حصہ ۴.۲) کے مطالعہ کے دوران ہم نے ہیملٹنی درج ذیل لی

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} \tag{۶.۴۲}$$

(جو الیکٹران کی حرکی توانائی جمع کولمب مخفی توانائی ہے)۔ تاہم یہ مکمل کہانی نہیں ہے۔ ہم m کی بجائے تخفیف شدہ کمیت (سوال ۵.۱) استعمال کرکے ہیملٹنی میں حرکت مرکزہ کا اثر شامل کرنا سیکھ چکے ہیں۔ زیادہ اہم **مہین ساخت**[۹] ہے، جو در حقیقت دو منفرد وجوہات، **اضافیتی تصحیح**[۱۰] اور **چکرو مدار ربط**[۱۱]، کی بنا پر پیدا ہوتی ہے۔ بوہر توانائیوں (مساوات ۴.۷۰) کے لحاظ سے مہین ساخت، α^2 جزو ضربی کم، نہایت چھوٹا اضطراب ہے، جہاں

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \cong \frac{1}{137.036} \tag{۶.۴۳}$$

مہین ساخت مستقل[۱۲] کہلاتا ہے۔ اس سے بھی (مزید α جزو ضربی) چھوٹا **لیمب انتقال**[۱۳] ہے، جو برقی میدان کی کوانٹازنی سے وابستہ ہے، اور اس سے مزید ایک رتبہ کم، **نہایت مہین ساخت**[۱۴] کہلاتی ہے، جو الیکٹران اور پروٹان کے جفت قطب معیار اثر کے بیچ مقناطیسی باہم عمل سے پیدا ہوتا ہے۔ اس تنظیمی ڈھانچہ کو جدول ۶.۱ میں پیش کیا گیا ہے۔ موجودہ حصہ میں ہم غیر تابع وقت نظریہ اضطراب کی مثال کے طور پر ہائیڈروجن کی مہین ساخت پر غور کریں گے۔ سوال ۶.۱۱:

---

[۹] finestructure
[۱۰] relativisticcorrection
[۱۱] spin-orbitcoupling
[۱۲] finestructureconstant
[۱۳] Lambshift
[۱۴] hyperfinestructure

جدول ۶.۱: ہائیڈروجن کی بوہر توانائیوں میں تصحیح کی درجہ بندی۔

بوہر توانائی:	کا رتبہ	$\alpha^2 mc^2$
مہین ساخت:	کا رتبہ	$\alpha^4 mc^2$
لیمب انتقال:	کا رتبہ	$\alpha^5 mc^2$
نہایت مہین ساخت:	کا رتبہ	$(m/m_p)\alpha^4 mc^2$

ا. بوہر توانائیوں کو مہین ساخت مستقل اور الیکٹران کی ساکن توانائی (mc^2) کی صورت میں لکھیں۔

ب. ($\hbar$ ، e ، ϵ_0 اور c کی تجرباتی قیمتیں استعمال کیے بغیر) مہین ساخت مستقل کی قیمت بنیادی اصول استعمال کرتے ہوئے تلاش کریں۔ تبصرہ: پوری طبیعیات میں بلاشبہ مہین ساخت مستقل سب سے زیادہ خالص (بے بُعدی) بنیادی عدد ہے۔ یہ برقناطیسیت (الیکٹران کا بار)، اضافیت (روشنی کی رفتار) اور کوانٹائی میکانیات (پلانک مستقل) کے بنیادی مستقلات کے بیچ رشتہ بیان کرتا ہے۔ اگر آپ جزو-ب حل کر پائیں، یقیناً آپ کو نوبیل انعام سے نوازا جائے گا۔ البتہ میرا مشورہ ہو گا کہ اس پر زیادہ وقت ضائع نہ کریں؛ (اب تک) بہت سارے انتہائی قابل لوگ ایسا کر کے ناکام ہو چکے ہیں۔

۶.۳.۱ اضافیتی تصحیح

ہیملٹنی کا پہلا جزو بظاہر حرکی توانائی کو ظاہر کرتا ہے

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \tag{۶.۴۴}$$

جس میں باضابطہ متبادل $\boldsymbol{p} \to (\hbar/i)\nabla^2$ پُر کر کے درج ذیل عامل حاصل ہو گا۔

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \tag{۶.۴۵}$$

تاہم مساوات ۶.۴۴ حرکی توانائی کا کلاسیکی کلیہ ہے؛ اضافیتی کلیہ درج ذیل ہے

$$T = \frac{mc^2}{\sqrt{1-(v/c)^2}} - mc^2 \tag{۶.۴۶}$$

جہاں پہلا جزو کل اضافیتی توانائی ہے (جس میں مخفی توانائی شامل نہیں ہے، اور جس سے ہمیں فی الحال غرض بھی نہیں ہے)، جبکہ دوسرا جزو ساکن توانائی ہے؛ ان کے فرق کو حرکت سے منسوب کیا جا سکتا ہے۔

ہمیں سمتی رفتار کی بجائے (اضافیتی) معیار حرکت

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \tag{۶.۴۷}$$

کی صورت میں T کو لکھنا ہو گا۔ دھیان رہے کہ

$$p^2c^2 + m^2c^4 = \frac{m^2v^2c^2 + m^2c^4[1-(v/c)^2]}{1-(v/c)^2} = \frac{m^2c^4}{1-(v/c)^2} = (T+mc^2)^2$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$T = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} - mc^2 \tag{۶.۴۸}$$

غیر اضافیتی حد $p \ll mc$ کی صورت میں حرکی توانائی کی اضافیتی مساوات تخفیف کے بعد کلاسیکی نتیجہ (مساوات ۶.۴۴) دیتی ہے؛ ایک چھوٹے عدد (p/mc) کی طاقتی تسلسل میں پھیلا کر درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\begin{aligned} T &= mc^2\Big[\sqrt{1+\Big(\frac{p}{mc}\Big)^2} - 1\Big] = mc^2\Big[1 + \frac{1}{2}\Big(\frac{p}{mc}\Big)^2 - \frac{1}{8}\Big(\frac{p}{mc}\Big)^4 \cdots - 1\Big] \\ &= \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + \cdots \end{aligned} \tag{۶.۴۹}$$

ظاہر ہے کہ ہیملٹنی کی سب سے کم رتبی[15] اضافیتی تصحیح درج ذیل ہے۔

$$H_r' = -\frac{p^4}{8m^3c^2} \tag{۶.۵۰}$$

غیر مضطرب حال میں H' کی توقعاتی قیمت رتبہ اول نظریہ اضطراب میں E_n کی تصحیح ہو گی (مساوات ۶.۹)۔

$$E_r^1 = \langle H_r' \rangle = -\frac{1}{8m^3c^2}\langle \psi | p^4 \psi \rangle = -\frac{1}{8m^3c^2}\langle p^2\psi | p^2\psi \rangle \tag{۶.۵۱}$$

اب (غیر مضطرب حالات کے لئے) مساوات شروڈنگر کہتی ہے کہ

$$p^2\psi = 2m(E-V)\psi \tag{۶.۵۲}$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔[16]

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2}\langle (E-V)^2 \rangle = -\frac{1}{2mc^2}[E^2 - 2E\langle V \rangle + \langle V^2 \rangle] \tag{۶.۵۳}$$

---

[15] چونکہ ہائیڈروجن میں الیکٹران کی حرکی توانائی کا رتبہ $10\,\mathrm{eV}$ ہے، جو اس کی ساکن توانائی $(511\,000\,\mathrm{eV})$ سے بہت کم ہے، لہٰذا ہائیڈروجن جوہر بنیادی طور پر غیر اضافیتی ہے اور یوں ہم صرف سب سے کم رتبی تصحیح رکھ سکتے ہیں۔ مساوات ۶.۴۹ میں p اضافیتی معیار حرکت (مساوات ۶.۴۷) ہے نا کہ کلاسیکی معیار حرکت (mv)۔ ہم مساوات ۶.۵۰ میں اب کوانٹائی عامل $-i\hbar\nabla$ کے ساتھ اول الذکر منسلک کرتے ہیں۔

[16] یہاں، ہم نے p^2 اور $(E-V)$ کی ہرمشی پن استعمال کی جو درست نہیں ہے۔ در حقیقت ان حالات کے لئے جن کا $\ell = 0$ ہو عامل p^4 غیر ہرمشی ہو گا (سوال ۶.۱۵)، اور مساوات ۶.۵۰ پر ($\ell = 0$ کی صورت میں) نظریہ اضطراب کا اطلاق شک سے خالی نہیں ہو گا۔ خوش قسمتی سے، ہمیں ٹھیک جواب معلوم ہے؛ جسے (غیر اضافیتی) مساوات شروڈنگر کی بجائے (اضافیتی) مساوات ڈیراک استعمال کرتے ہوئے حاصل کیا جا سکتا ہے، اور جو یہاں سرسری انداز میں حاصل نتیجہ کی تصدیق کرتا ہے (سوال ۶.۱۹ دیکھیں)۔

اب تک یہ مکمل طور پر ایک عمومی نتیجہ ہے؛ تاہم ہمیں ہائیڈروجن میں دلچسپی ہے جس کے لیے $(-1/4\pi\epsilon_0)e^2/r$ لہٰذا درج ذیل ہو گا

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2}\Big[E_n^2 + 2E_n\Big(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\Big)\Big\langle\frac{1}{r}\Big\rangle + \Big(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\Big)^2\Big\langle\frac{1}{r^2}\Big\rangle\Big] \tag{۶.۵۴}$$

جہاں E_n زیر غور حال کی بوہر توانائی ہے۔

یہ کام مکمل کرنے کی خاطر، ہمیں (غیر مضطرب) حال $\psi_{n\ell m}$ (مساوات ۴.۸۹) میں $1/r$ اور $1/r^2$ کی توقعاتی قیمتیں درکار ہوں گی۔ ان میں سے پہلا دریافت کرنا آسان ہے (سوال ۶.۱۲ دیکھیں):

$$\Big\langle\frac{1}{r}\Big\rangle = \frac{1}{n^2a} \tag{۶.۵۵}$$

جہاں a رداس بوہر (مساوات ۴.۷۲) ہے۔ دوسرا اتنا آسان نہیں ہے (سوال ۶.۳۳ دیکھیں)، تاہم اس کا جواب درج ذیل ہے۔[۱۷]

$$\Big\langle\frac{1}{r^2}\Big\rangle = \frac{1}{(\ell+1/2)n^3a^2} \tag{۶.۵۶}$$

یوں درج ذیل ہو گا

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2}\Big[E_n^2 + 2E_n\Big(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\Big)\frac{1}{n^2a} + \Big(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\Big)^2\frac{1}{(\ell+1/2)n^3a^2}\Big]$$

یا (مساوات ۴.۷۲ استعمال کرتے ہوئے) a کو خارج کر کے، (مساوات ۴.۷۰ استعمال کر کے) تمام کو E_n کی صورت میں لکھ کے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$E_r^1 = -\frac{(E_n)^2}{2mc^2}\Big[\frac{4n}{\ell+1/2} - 3\Big] \tag{۶.۵۷}$$

ظاہر ہے کہ اضافیتی تصحیح کی مقدار E_n سے تقریباً $E_n/mc^2 = 2\times10^{-5}$ جزو ضربی کم ہے۔

اگرچہ ہائیڈروجن جوہر بہت زیادہ انحطاطی ہے، میں نے حساب کے دوران غیر انحطاطی نظریہ اضطراب استعمال کیا (مساوات ۶.۵۱)۔ لیکن یہاں اضطراب کروی تشاکلی ہے، لہٰذا یہ L^2 اور L_z کا مقلوب ہو گا۔ مزید کسی E_n کے n^2 حالات کے لئے ان (ایک ساتھ تمام) عاملین کے امتیازی تفاعلات کی منفرد امتیازی قیمتیں ہوں گی۔ یوں خوش قسمتی سے، تفاعلات $\psi_{n\ell m}$ اس مسئلہ کے "موزوں" حالات ہوں گے (یا جیسا ہم کہتے ہیں n، ℓ اور m **موزوں کوانٹائی اعداد**[۱۸] ہیں)، لہٰذا غیر انحطاطی نظریہ اضطراب کا استعمال قانوناً درست تھا (حصہ ۶.۲.۱ کے آخر میں سبق دیکھیں)۔

---

[۱۷] متغیر r کے کسی بھی طاقت کی توقعاتی قیمت کا عمومی کلیہ موجود ہے۔

[۱۸] goodquantumnumbers

سوال ۶.۱۲: مسئلہ وریل (سوال ۴.۴۰) استعمال کرتے ہوئے مساوات ۶.۵۵ ثابت کریں۔

سوال ۶.۱۳: آپ نے سوال ۴.۴۳ میں حال ψ_{321} میں r^s کی توقعاتی قیمت حاصل کی۔ اپنے جواب کی تصدیق $s = 0$ (حقیر ساکام)، $s = -1$ (مساوات ۶.۵۵)، $s = -2$ (مساوات ۶.۵۶)، اور $s = -3$ (مساوات ۶.۶۴) کے لیے کریں۔ اس پر تبصرہ کریں کہ $s = -7$ کی صورت میں کیا ہو گا۔

سوال ۶.۱۴: یک بُعدی ہارمونی مرتعش کی توانائی کی سطحوں کے لیے (سب سے کم رتبی) اضافیتی تصحیح تلاش کریں۔ اشارہ: مثال ۲.۵ میں مستعمل ترکیب بروئے کار لائیں۔

سوال ۶.۱۵: دکھائیں کہ ہائیڈروجن حالات کے لیے $\ell = 0$ لیتے ہوئے p^2 ہرمشی اور p^4 غیر ہرمشی ہے۔ ایسے حالات کے لئے ψ، متغیرات θ اور ϕ کا غیر تابع ہے، لہٰذا درج ذیل ہو گا (مساوات ۴.۱۳)۔

$$p^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)$$

تکمل بالحصص استعمال کرتے ہوئے درج ذیل دکھائیں۔

$$\langle f|p^2 g\rangle = -4\pi\hbar^2\left(r^2 f\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}r} - r^2 g\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}\right)\Big|_0^\infty + \langle p^2 f|g\rangle$$

تصدیق کریں کہ ψ_{n00} کے لیے، جو مبدا کے قریب درج ذیل ہو گا، سرحدی جزو صفر ہے۔

$$\psi_{n00} \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(na)^{3/2}}e^{(-r/na)}$$

اب یہی کچھ p^4 کے لئے کر کے دیکھیں، اور دکھائیں کہ سرحدی اجزاء صفر نہیں ہونگے۔ درحقیقت درج ذیل ہو گا۔

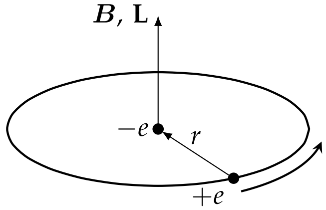
$$\langle\psi_{n00}|p^4\psi_{m00}\rangle = \frac{8\hbar^4}{a^4}\frac{(n-m)}{(nm)^{5/2}} + \langle p^4\psi_{n00}|\psi_{m00}\rangle$$

۶.۳.۲ چکر ومدار ربط

مرکزہ کے گرد مدار میں الیکٹران کا تصور کریں؛ الیکٹران کے نقطہ نظر سے پروٹان اس کے گرد گھومتا ہے (شکل ۶.۷)۔ مدار میں مثبت بار الیکٹران کے چھوکٹ میں مقناطیسی میدان $\boldsymbol{B}$ پیدا کرتا ہے، جو چکر کھاتے ہوئے الیکٹران پر قوت مروڑ پیدا کر کے الیکٹران کے مقناطیسی معیار اثر (μ) کو میدان کے ہم رخ بنانے کی کوشش کرتا ہے۔ اس کی ہیملٹنی (مساوات ۴.۱۵۷) درج ذیل ہے۔

$$H = -\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B} \tag{۶.۵۸}$$

ہمیں پروٹان کا مقناطیسی میدان $(\boldsymbol{B})$ اور الیکٹران کا جفت قطب معیار اثر $(\boldsymbol{\mu})$ درکار ہو گا۔



شکل ۶.۷: الیکٹران کے نقطہ نظر سے ہائیڈروجن جوہر۔

پروٹان کا مقناطیسی میدان۔ ہم (الیکٹران کے نقطہ نظر سے) پروٹان کو استمراری دائری رو (شکل ۶.۷) تصور کر کے، اس کے مقناطیسی میدان کو بایوٹ و سیوارٹ قانون سے حاصل کرتے ہیں:

$$B = \frac{\mu_0 I}{2r}$$

جس میں موثر رو $I = e/T$ ہے، جہاں e پروٹان کا بار، اور T دائرے پر ایک چکر کا دوری عرصہ ہے۔ اس کے برعکس، $L = rmv = 2\pi m r^2/T$ (مرکزہ کے ساکن چھوکٹ میں) الیکٹران کا مداری زاویائی معیار حرکت ہوگا۔ مزید، $\boldsymbol{B}$ اور $\mathbf{L}$ دونوں کا رخ ایک جیسا ہوگا (شکل ۶.۷ میں اوپر جانب)، لہٰذا

$$\boldsymbol{B} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e}{mc^2r^3}\,\mathbf{L} \qquad (۶.۵۹)$$

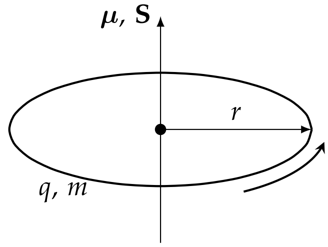
لکھا جا سکتا ہے (جہاں میں نے $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ استعمال کر کے μ_0 کی جگہ ϵ_0 استعمال کیا ہے)۔

الیکٹران کا مقناطیسی جفت قطب معیار حرکت۔ چکر کھاتے بار کا مقناطیسی جفت قطب معیار اثر، اس کے (چکری) زاویائی معیار حرکت سے تعلق رکھتا ہے؛ مسکن مقناطیسی نسبت (جسے ہم حصہ ۴.۴.۱ میں دیکھ چکے ہیں)، ان کے بیچ تناسبی جزو ضربی ہوگا۔ آئیں اس مرتبہ، کلاسیکی برقی حرکیات استعمال کرتے ہوئے، اسے اخذ کرتے ہیں۔ ایک ایسا بار q جس کی لپائی رداس r کے چھلا پر کی گئی ہو، اور جو محور کے گرد دوری عرصہ T سے گھومتا ہو، پر غور کریں (شکل ۶.۸)۔ اس چھلے کے مقناطیسی جفت قطب معیار اثر کی تعریف، رو (q/T) ضرب رقبہ (πr^2) ہے۔

$$\mu = \frac{q\pi r^2}{T}$$

اگر چھلے کی کمیت m ہو، جمودی معیار اثر (mr^2) ضرب زاویائی سمتی رفتار $(2\pi/T)$ اس کا زاویائی معیار حرکت، S، ہوگا۔

$$S = \frac{2\pi m r^2}{T}$$



شکل ۶.۸: بار کا چھلا جو اپنے محور کے گرد گھوم رہا ہے۔

اس تشکیل کے لیے ظاہر ہے کہ مسکن مقناطیسی نسبت $\mu/S = q/2m$ ہو گا۔ دھیان رہے کہ یہ r (اور T) کا تابع نہیں ہے۔ اگر میرے پاس کوئی زیادہ پیچیدہ شکل کا جسم ہوتا، مثلاً ایک کرہ (صرف اتنا ضروری ہے کہ یہ اپنے محور کے گرد گھومتا ہوا شکل طواف ہو)، میں اس کو باریک چھلوں میں ٹکڑے کر کے، تمام چھلوں کی پیدا حصوں کا مجموعہ لے کر $\boldsymbol{\mu}$ اور $\mathbf{S}$ کی قیمتیں معلوم کر پاتا۔ جب تک کمیت اور بار کی تقسیم ایک جیسی ہو (تاکہ بار اور کمیت کی نسبت یکساں ہو)، ہر چھلے کا اور لہٰذا پورے جسم کا مسکن مقناطیسی نسبت ایک جیسا ہو گا۔ مزید، $\boldsymbol{\mu}$ اور $\mathbf{S}$ کے رخ ایک جیسے (یا اگر بار منفی ہو تو ایک دونوں کے مخالف) ہوں گے، لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\boldsymbol{\mu} = \left(\frac{q}{2m}\right)\mathbf{S}$$

یہ خالصتاً کلاسیکی حساب ہے، در حقیقت، الیکٹران کا مقناطیسی معیار اثر اس کی کلاسیکی قیمت کا دگنا ہے۔

$$\boldsymbol{\mu}_e = -\frac{e}{m}\mathbf{S} \tag{۶.۶۰}$$

ڈیراک نے الیکٹران کی (اپنی) اضافیتی نظریہ میں "اضافی" جزو ضربی 2 کی وجہ پیش کی ہے۔[۱۹]

ان تمام کو اکٹھے کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$H = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{1}{m^2c^2r^3}\,\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}$$

اس حساب میں ایک فریب سے کام لیا گیا ہے: میں نے الیکٹران کے ساکن چھوکٹ میں تجزیہ کیا، جو ایک غیر جمودی نظام ہے؛ چونکہ الیکٹران مرکزہ کے گرد گھومتا ہے، لہٰذا یہ چھوکٹ اسراع

[۱۹] ہم دیکھ چکے ہیں کہ الیکٹران کو محور کے گرد چکر کاٹتا ہوا کرہ تصور کرنا، خطرے سے باہر نہیں ہے (سوال ۴.۲۵ دیکھیں)، اور یہ حیرت کی بات نہیں کہ سادہ لوح کلاسیکی نمونہ، مسکن مقناطیسی نسبت کی غلط قیمت دیتا ہے۔ کلاسیکی توقعات سے حاصل قیمت کو g **جزو ضربی** کہتے ہیں: $\boldsymbol{\mu} = g(q/2m)\boldsymbol{S}$، لہٰذا نظریہ ڈیراک میں g جزو ضربی کی قیمت ٹھیک 2 ہے۔ لیکن **کوانٹائی برقی حرکیات** اس میں معمولی تصحیح دیتی ہے: **بے ضابطہ مقناطیسی معیار اثر**، g_e، کی قیمت دراصل $2.002\ldots = \ldots + (\alpha/\pi) + 2$ ہے۔ اس کا حساب اور اس کی پیمائش (جو آپس میں شاندار حتمیت تک متفق ہیں) بیسویں صدی طبعیات کی اہم ترین کامیابیوں میں سے ایک ہے۔

پذیر ہو گا۔ اس حساب میں مجرد حرکیات تصحیح، جسے **طامس استقبالی حرکت**[۲۰] کہتے[۲۱] ہیں، شامل کر کے قبول کیا جا سکتا ہے، جو حساب میں جزو ضربی $1/2$ شامل کرتا ہے۔[۲۲]

$$H'_{so} = \left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\right)\frac{1}{m^2c^2r^3}\,\mathbf{S}\cdot\mathbf{L} \tag{۶.۶۱}$$

یہ **چکر و مدار باہم عمل**[۲۳] ہے؛ ماسوائے دو تصحیح (الیکٹران کی ترمیم شدہ ممکن مقناطیسی نسبت اور طامس استقبالی حرکت جزو ضربی جو اتفاقاً ایک دوسرے کو کاٹتے ہیں) کے، یہ وہی نتیجہ ہے جو آپ سادہ لوح کلاسیکی نمونہ سے حاصل کرتے ہیں۔ طبعی طور پر، یہ الیکٹران کے لحاتی ساکن چھوکٹ میں، چکر کاٹتے ہوئے الیکٹران کے مقناطیسی جفت قطب معیار اثر پر، پروٹان کے مقناطیسی میدان کی قوت مروڑ کے بدولت ہے۔

اب کوانٹائی میکانیات کی بات کرتے ہیں۔ چکر و دائری ربط کی صورت میں $\mathbf{L}$ اور $\mathbf{S}$ کے ساتھ ہیملٹنی غیر مقلوب ہو گا، لہٰذا چکر اور مداری زاویائی معیار اثر علیحدہ علیحدہ بقائی نہیں ہوں گے (سوال ۶.۱۶ دیکھیں)۔ البتہ، L^2، S^2 اور کل زاویائی معیار حرکت:

$$\mathbf{J} \equiv \mathbf{L} + \mathbf{S} \tag{۶.۶۲}$$

کے ساتھ H'_{so} مقلوب ہو گا، لہٰذا یہ مقداریں بقائی ہوں گی (مساوات ۴.۱۷۱ اور اس کے نیچے پیرا گراف دیکھیں)۔ دوسرے لفظوں میں، L_z اور S_z کے امتیازی حالات نظریہ اضطراب میں استعمال کے لئے "موزوں" حالات نہیں ہیں، جبکہ L^2، S^2، J^2، اور J_z کے امتیازی حالات "موزوں" حالات ہیں۔ اب

$$J^2 = (\mathbf{L}+\mathbf{S})\cdot(\mathbf{L}+\mathbf{S}) = L^2 + S^2 + 2\,\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$$

کی بنا پر

$$\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) \tag{۶.۶۳}$$

ہو گا لہٰذا $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ کی امتیازی قیمتیں درج ذیل ہوں گی۔

$$\frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)]$$

---

[۲۰] Thomas precession

[۲۱] سوچنے کا ایک انداز یہ ہو گا کہ آپ تصور کریں کہ الیکٹران مستمر انداز میں ایک ساکن نظام سے دوسرے ساکن نظام میں قدم رکھتا ہے؛ ان لورینز تبادلہ کے مجموعی اثر کو طامس استقبالی حرکت بیان کرتا ہے۔ ہم تجربہ گاہ کی چھوکٹ میں، جہاں پروٹان ساکن ہے، رہ کر اس پوری مصیبت سے نجات حاصل کر سکتے تھے۔ ایسی صورت میں، پروٹان کا میدان خالصتاً برقی ہو گا، اور آپ سوچ سکتے ہیں کہ یہ الیکٹران پر قوت مروڑ کیا پیدا کرتا ہے۔ حقیقت یہ ہے کہ حرکت پذیر مقناطیسی جفت قطب، برقی جفت قطب معیار اثر اختیار کرتا ہے، اور تجربہ گاہ کے چھوکٹ میں مرکزہ کے برقی میدان اور الیکٹران کے برقی جفت قطب معیار اثر کے بیچ باہم عمل، چکر و مدار ربط کا باعث بنتا ہے۔ چونکہ اس تجزیہ کے لئے زیادہ پیچیدہ برقی حرکیات درکار ہو گا لہٰذا بہتر یہی ہے کہ ہم الیکٹران کے ساکن چھوکٹ میں کام کریں جہاں طبعی پہلو زیادہ واضح ہے۔

[۲۲] یہ کہنا زیادہ درست ہو گا کہ طامس استقبالی حرکت g جزو ضربی سے 1 منفی کرتا ہے۔

[۲۳] spin-orbit interaction

یہاں یقیناً $s = 1/2$ ہے۔ مزید $1/r^3$ کی توقعاتی قیمت (سوال ۶.۳۵-ج دیکھیں)

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{\ell(\ell+1/2)(\ell+1)n^3a^3} \tag{۶.۶۴}$$

ہے، لہٰذا

$$E^1_{so} = \langle H'_{so} \rangle = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\frac{1}{m^2c^2}\frac{(\hbar^2/2)[j(j+1)-\ell(\ell+1)-3/4]}{\ell(\ell+1/2)(\ell+1)n^3a^3}$$

یا، تمام کو E_n کی صورت میں لکھتے ہوئے، درج ذیل اخذ کرتے ہیں۔[۲۴]

$$E^1_{so} = \frac{(E_n)^2}{mc^2}\left\{\frac{n[j(j+1)-\ell(\ell+1)-3/4]}{\ell(\ell+1/2)(\ell+1)}\right\} \tag{۶.۶۵}$$

یہ ایک حیرت کن بات ہے کہ، بالکل مختلف طبیعی پہلوؤں کے باوجود، اضافیتی تصحیح (مساوات ۶.۵۷) اور چکر و مدار ربط (مساوات ۶.۶۵) ایک جتنا رتبہ (E_n^2/mc^2) رکھتے ہیں۔ انہیں جمع کرکے، ہمیں مکمل مہین ساخت کلیہ:

$$E^1_{fs} = \frac{(E_n)^2}{2mc^2}\left(3 - \frac{4n}{j+1/2}\right) \tag{۶.۶۶}$$

(سوال ۶.۱۷ دیکھیں) حاصل ہوتا ہے۔ اسے کلیہ بوہر کے ساتھ ملا کر، ہم ہائیڈروجن توانائی سطحوں کا عظیم نتیجہ:

$$E_{nj} = -\frac{13.6\,\text{eV}}{n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{2}\right)\right] \tag{۶.۶۷}$$

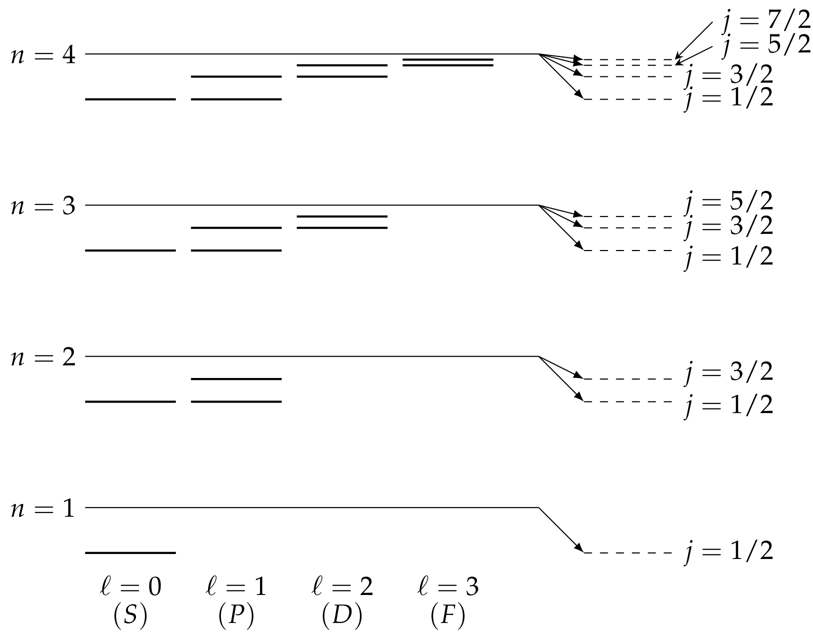
حاصل کرتے ہیں، جس میں مہین ساخت شامل ہے۔

مہین ساخت ℓ میں انحطاط توڑتی ہے (یعنی کسی ایک n کیلئے، ℓ کی مختلف اجازتی قیمتیں ایک جیسی توانائی کے حامل نہیں ہونگی)، تاہم اب بھی یہ j میں انحطاط برقرار رکھتی ہے (شکل ۶.۹ دیکھیں)۔ مدارچی اور چکری زاویائی معیار حرکت کے z جزو امتیازی قیمتیں (m_ℓ اور m_s) اب "موزوں" کوانٹائی اعداد نہیں ہونگے؛ ان مقداروں کی مختلف قیمتوں والے حالات کے خطی جوڑ سا کن حالات ہوں گے؛ "موزوں" کوانٹائی اعداد n، ℓ، s، j، اور m_j ہونگے۔[۲۵]

---

[۲۴] یہاں بھی، $\ell = 0$ کی صورت میں ہمیں مسئلہ درپیش ہوگا، چونکہ ہم بظاہر صفر سے تقسیم کرتے ہیں۔ ساتھ ہی، اس صورت میں $j = s$ کی بنا پر، شمار کنندہ بھی صفر ہے، لہٰذا مساوات ۶.۶۵ بلا تعیین ہوگا۔ طبیعی بنیادوں پر $\ell = 0$ کی صورت میں چکر و مدار ربط ہونا ہی نہیں چاہیے۔ اس ابہام کو دور کرنے کا ایک طریقہ یہ ہے کہ ہم جزو ڈارون متعارف کریں۔ غیر متوقع طور پر، اگرچہ اضافیتی تصحیح (مساوات ۶.۵۷) اور چکر و مدار ربط (مساوات ۶.۶۵) دونوں $\ell = 0$ کی صورت میں شک سے مبرا نہیں ہیں، ان کا مجموعہ (مساوات ۶.۶۶) تمام ℓ کے لئے درست ہے (سوال ۶.۱۹ دیکھیں)۔

[۲۵] کسی ℓ اور s کے لئے، $|jm_j\rangle$ کو $|\ell m_\ell\rangle|sm_s\rangle$ کا خطی جوڑ لکھنے کی خاطر ہمیں مناسب کلیبش و گورڈن عددی سر (مساوات ۴.۱۸۵) استعمال کرنے ہوں گے۔



شکل ۶.۹: ہائیڈروجن کی سطحیں توانائی، جن میں مہین ساخت شامل ہے (درست پیمانہ کے مطابق نہیں ہے)۔

سوال ۶.۱۶: درج ذیل مقلب کی قیمتیں تلاش کریں۔ (الف) $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S},\mathbf{L}]$، (ب) $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S},\mathbf{S}]$، (ج) $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S},\mathbf{J}]$، (د) $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S},L^2]$، (ہ) $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S},S^2]$، (و) $[\mathbf{L}\cdot\mathbf{S},J^2]$؛ اشارہ: $\mathbf{L}$ اور $\mathbf{S}$ زاویائی معیار حرکت کے بنیادی مقلبیت رشتوں (مساوات ۴.۹۹ اور مساوات ۴.۱۳۴) کو مطمئن کرتے ہیں، لیکن یہ ایک دوسرے کے ساتھ مقلوب ہیں۔

سوال ۶.۱۷: اضافیتی تصحیح (مساوات ۶.۵۷) اور چکر و مدار ربط (مساوات ۶.۶۵) سے مہین ساخت کلیہ (مساوات ۶.۶۶) اخذ کریں۔ اشارہ: دھیان رہے کہ $j = \ell \pm 1/2$ (مساوات ۶.۶۲) ہے؛ مثبت اور منفی علامت کو باری باری لیں، آپ دیکھیں گے کہ دونوں صورتوں میں ایک جیسا نتیجہ حاصل ہو گا۔

سوال ۶.۱۸: ہائیڈروجن طیف کے مرئی خطہ میں سرخ بالمر لکیر نمایاں ترین ہے، جو $n = 3$ سے $n = 2$ میں منتقلی سے پیدا ہوتی ہے۔ سب سے پہلے، اس طیفی لکیر کا طول موج اور تعدد بوہر نظریہ سے تعین کریں۔ مہین ساخت اس لکیر کو قریب قریب کئی لکیروں میں تقسیم کرتی ہے؛ اب ایک سوال پیدا ہوتا ہے: لکیروں کی تعداد کیا ہو گی اور ان کے بیچ فاصلہ کتنا ہو گا؟ اشارہ: پہلے قدم میں، معلوم کریں کہ $n = 2$ سطح کتنی ذیلی سطحوں میں تقسیم ہو گی، اور ہر ایک کے لیے، E^1_{fs} تلاش کریں۔ یہی کچھ $n = 3$ کے لیے کریں۔ سطح توانائی کی شکل کا خاکہ بنا کر $n = 3$ سے $n = 2$ تک تمام ممکنہ منتقلی دکھائیں۔ توانائی کا اخراج (نوریہ کی صورت میں) $(E_3 - E_2) + \Delta E$ ہو گا، جہاں پہلا جزو سب میں مشترک جبکہ (مہین ساخت کی پیدا) ΔE کی قیمت ہر منتقلی کے لئے بدلے گی۔ ہر منتقلی کے لئے ΔE کو (eV میں) تلاش کریں۔ آخر میں، تعدد نوریہ میں تبدیل کر کے، ساتھ ساتھ طیفی لکیروں کے بیچ فاصلہ (Hz کی صورت میں) تعین کریں؛ یہ ہر لکیر اور غیر مضطرب لکیر کے بیچ تعددی فاصلہ نہیں (جو یقیناً، قابل مشاہدہ نہیں)، بلکہ یہ ہر لکیر اور اس سے اگلی لکیر کے بیچ تعددی فاصلہ ہو گا۔ آپ کا جواب درج ذیل روپ میں ہونا چاہیے: "سرخ بالمر لکیر () لکیروں میں تقسیم ہوتا ہے۔ بڑھتے تعدد کے لحاظ سے یہ (1) $(???)$ $j =$ سے $(???)$ $j =$، 2 $(???)$ $j =$ سے $(???)$ $j =$، . . . ، ہونگے۔ لکیر 1 اور لکیر 2 کے بیچ تعددی فاصلہ $(???)$ Hz ہے، لکیر 2 اور لکیر 3 کے بیچ فاصلہ ??? Hz ہے، . . . ۔"

سوال ۶.۱۹: مساوات ڈیراک سے (نظریہ اضافت استعمال کیے بغیر) ہائیڈروجن کے مہین ساخت کا ٹھیک ٹھیک کلیہ درج ذیل حاصل ہوتا ہے۔

$$E_{nj} = mc^2\left\{\left[1+\left(\frac{\alpha}{n-(j+1/2)+\sqrt{(j+1/2)^2-\alpha^2}}\right)^2\right]^{-1/2}-1\right\}$$

اس کو (یہ جانتے ہوئے کہ $\alpha \ll 1$ ہے) α^4 رتبہ تک پھیلا کر دکھائیں کہ مساوات ۶.۶۷ حاصل ہوتا ہے۔

۶.۴ زیمان اثر

ایک جوہر کو یکساں بیرونی مقناطیسی میدان $\boldsymbol{B}_{\text{بیرونی}}$ میں رکھنے سے، اس کی توانائی سطحوں میں تبدیلی پیدا ہوتی ہے۔ اس مظہر کو **زیمان اثر**[۲۶] کہتے ہیں۔ واحد ایک الیکٹران کے لیے اضطراب درج ذیل ہو گا

$$H_z' = -(\boldsymbol{\mu}_\ell + \boldsymbol{\mu}_s) \cdot \boldsymbol{B}_{\text{بیرونی}} \tag{۶.۶۸}$$

جہاں

$$\boldsymbol{\mu}_s = -\frac{e}{m}\,\mathbf{S} \tag{۶.۶۹}$$

الیکٹران چکر کے ساتھ وابستہ مقناطیسی جفت قطب معیار اثر، اور

$$\boldsymbol{\mu}_{ell} = -\frac{e}{2m}\,\mathbf{L} \tag{۶.۷۰}$$

مداری حرکت کے ساتھ وابستہ جفت قطب معیار اثر ہے۔[۲۷] یوں درج ذیل ہو گا۔

$$H_z' = \frac{e}{2m}(\mathbf{L} + 2\,\mathbf{S}) \cdot \boldsymbol{B}_{\text{بیرونی}} \tag{۶.۷۱}$$

زیمان تقسیم کی فطرت فیصلہ کن حد تک اندرونی میدان (مساوات ۶.۵۹)، جو چکر و مدار ربط پیدا کرتا ہے، کے لحاظ سے بیرونی میدان کی طاقت پر منحصر ہو گی۔ اگر $B_{\text{اندرونی}} \ll B_{\text{بیرونی}}$ ہو تب مہین ساخت غالب ہو گی، اور H' کو ایک چھوٹا اضطراب تصور کیا جا سکتا ہے، جبکہ $B_{\text{اندرونی}} \gg B_{\text{بیرونی}}$ کی صورت میں زیمان اثر غالب ہو گا، اور مہین ساخت اضطراب تصور کی جائے گی۔ ان خطوں کے بیچ، جہاں دونوں میدان مد مقابل ہوں گے، ہمیں انحطاطی نظریہ اضطراب کی پوری قوت درکار ہو گی، اور ہیملٹنی کے متعلقہ حصے کو "ہاتھ سے" وتری بنانا لازم ہو گا۔ درج ذیل حصوں میں ہائیڈروجن کے لئے ہم ان تینوں صورتوں پر غور کریں گے۔

سوال ۶.۲۰: ہائیڈروجن کی اندرونی میدان کی اندازاً قیمت، مساوات ۶.۵۹ استعمال کرتے ہوئے، تلاش کر کے "طاقتور" اور "کمزور" زیمان میدان کی مقداری تصویر کشی کریں۔

۶.۴.۱ کمزور میدان زیمان اثر

اگر $B_{\text{بیرونی}} \ll B_{\text{اندرونی}}$ ہو تب مہین ساخت (مساوات ۶.۶۷) غالب ہو گی، اور "موزوں" کوانٹائی اعداد n، ℓ، j، اور m_j ہوں گے (تاہم، چکر و مدار ربط کی موجودگی میں $\mathbf{L}$ اور $\mathbf{S}$ علیحدہ علیحدہ بقائی نہیں ہوں گے، لہٰذا m_ℓ اور m_s

---

[۲۶] Zeeman effect

[۲۷] مداری حرکت کے لئے کلاسیکی قیمت $(q/2m)$ ہی مسکن مقناطیسی نسبت ہو گی؛ صرف چکر کی صورت میں 2 کا "اضافی" جزو ضربی پایا جاتا ہے۔

"موزوں" کوانٹائی اعداد نہیں ہوں گے)۔[۲۸] رتبہ اول نظریہ اضطراب میں زیمان توانائی میں تصحیح درج ذیل ہو گی۔

$$E_Z^1 = \langle n\ell jm_j|H'_Z|nljm_j\rangle = \frac{e}{2m}\boldsymbol{B}_{\text{بیرونی}} \cdot \langle \mathbf{L} + 2\,\mathbf{S}\rangle \tag{۶.۷۲}$$

اب $\mathbf{L} + 2\,\mathbf{S} = \mathbf{J} + \mathbf{S}$ ہو گا۔ بد قسمتی سے، ہمیں $\mathbf{S}$ کی توقعاتی قیمت فوری طور پر معلوم نہیں ہے۔ لیکن ہم درج ذیل طریقہ سے اسے جان سکتے ہیں: کل زاویائی معیار حرکت $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ایک مستقل ہے (شکل ۶.۱۰)؛ اس مقررہ سمتیہ کے گرد $\mathbf{L}$ اور $\mathbf{S}$ تیزی سے استقبالی حرکت کرتے ہیں۔ بالخصوص، $\mathbf{J}$ پر $\mathbf{S}$ کی قائمہ تظلیل، $\mathbf{S}$ کی (وقتی) اوسط قیمت:

$$\mathbf{S}_{\text{اوسط}} = \frac{(\mathbf{S}\cdot\mathbf{J})}{J^2}\,\mathbf{J} \tag{۶.۷۳}$$

ہو گی۔ لیکن $\mathbf{L} = \mathbf{J} - \mathbf{S}$ ہے، لہٰذا $L^2 = J^2 + S^2 - 2\,\mathbf{J}\cdot\mathbf{S}$ اور یوں

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{J} = \frac{1}{2}(J^2 + S^2 - L^2) = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)] \tag{۶.۷۴}$$

ہو گا، جس سے درج ذیل حاصل ہوتا ہے۔

$$\langle \mathbf{L} + 2\,\mathbf{S}\rangle = \left\langle \left(1 + \frac{\mathbf{S}\cdot\mathbf{J}}{J^2}\right)\mathbf{J}\right\rangle = \left[1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + 3/4}{2j(j+1)}\right]\langle\mathbf{J}\rangle \tag{۶.۷۵}$$

چوکور قوسین میں بند رکن کو **لنڈے g جزو ضربی**[۲۹] کہتے ہیں جس کو g_J سے ظاہر کیا جاتا ہے۔

ہم محور z کو $\boldsymbol{B}_{\text{بیرونی}}$ کے ساتھ ساتھ رکھ سکتے ہیں؛ تب

$$E_Z^1 = \mu_B g_J B_{\text{بیرونی}} m_j \tag{۶.۷۶}$$

ہو گا، جہاں

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m} = 5.788 \times 10^{-5}\,\mathrm{eV/T} \tag{۶.۷۷}$$

بوہر مقناطیسہ[۳۰] کہلاتا ہے۔ مہین ساخت (مساوات ۶.۶۷) اور زیمان (مساوات ۶.۷۶) حصوں کا مجموعہ کل توانائی دے گا۔ مثال کے طور پر، زمینی حال ($n = 1$، $\ell = 0$، $j = 1/2$ لہٰذا $g_J = 2$) دو سطحوں:

$$\underbrace{-13.6\,\mathrm{eV}(1 + \alpha^2/4)}_{\text{مساوات ۶.۶۷}}\ \underbrace{\pm\mu_B B_{\text{بیرونی}}}_{\text{مساوات ۶.۷۶}} \tag{۶.۷۸}$$

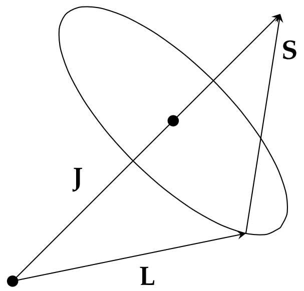
میں بٹ جائے گا، جہاں $m_j = 1/2$ کے لیے مثبت علامت اور $m_j = -1/2$ کے لیے منفی علامت استعمال ہو گی۔ ان توانائیوں کو ($B_{\text{بیرونی}}$ کے تفاعل کے طور پر) شکل ۶.۱۱ میں ترسیم کیا گیا ہے۔

---

[۲۸] یہاں ایک اضطراب (زیمان بٹوارا) کے اوپر دوسرا اضطراب (مہین ساخت) انبار ہے۔ "موزوں" کوانٹائی اعداد وہ ہوں گے جو غالب اضطراب، جو موجودہ مسئلہ میں مہین ساخت ہے، کے لئے درست ہوں۔ ثانوی اضطراب (زیمان بٹوارا) J_z میں، جو یہاں حصہ ۶.۲.۱ میں پیش کئے گئے مسئلہ میں عامل A کا کردار ادا کرتا ہے، باقی انحطاط اٹھاتا ہے۔ عامل J_z تکنیکی لحاظ سے H'_Z کے ساتھ غیر مقلوبی ہے، تاہم مساوات ۶.۷۳ کی وقتی اوسط نقطہ نظر سے یہ مقلوبی ہوں گے۔

[۲۹] Landeg-factor

[۳۰] Bohrmagneton



شکل ۶.۱۰: چکر و مدار ربط کی عدم موجودگی میں $\mathbf{L}$ اور $\mathbf{S}$ علیحدہ علیحدہ بقائی نہیں ہوں گے؛ یہ اٹل کل زاویائی معیار حرکت $\mathbf{J}$ کے گرد استقبالی حرکت کرتے ہیں۔

سوال ۶.۲۱: آٹھ عدد $n = 2$ حالات $|2\ell j m_j\rangle$ پر غور کریں۔ کمزور میدان زیمان بٹوارے کی صورت میں ہر ایک حال کی توانائی تلاش کر کے شکل ۶.۱۱ کی طرز کا خاکہ بنا کر دکھائیں بیرونی B بڑھانے سے توانائیاں کس طرح ارتقا کرتی ہے۔ ہر خط کو نام دے کر اس کی ڈھلوان دکھائیں۔

۶.۴.۲ طاقتور میدان زیمان اثر

اگر $B_{\text{اندرونی}} \ll B_{\text{بیرونی}}$ ہو، تب زیمان اثر غالب ہوگا؛[31] میدان $B_{\text{بیرونی}}$ کو z محور پر رکھ کر "موزوں" کوانٹائی اعداد n ، ℓ ، m_ℓ ، اور m_s ہونگے (جبکہ j اور m_j نہیں ہونگے، چونکہ بیرونی قوت مروڑ کی صورت میں کل زاویائی معیار حرکت بقائی نہیں ہوگا، جبکہ L_z اور S_z بقائی ہونگے)۔ زیمان ہیملٹنی

$$H'_Z = \frac{e}{2m} B_{\text{بیرونی}} (L_z + 2S_z)$$

ہوگا، جبکہ "غیر مضطرب" توانائیاں درج ذیل ہوں گی۔

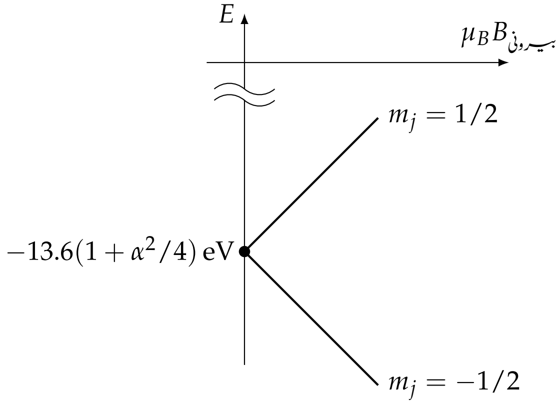
$$E_{nm_\ell m_s} = -\frac{13.6\,\text{eV}}{n^2} + \mu_B B_{\text{بیرونی}} (m_\ell + 2m_s) \tag{۶.۷۹}$$

مہین ساخت کو مکمل نظر انداز کرتے ہوئے یہی جواب ہوگا۔ تاہم ہم اس سے بہتر جواب حاصل کر سکتے ہیں۔

رتبہ اول نظریہ اضطراب میں ان سطحوں کی مہین ساخت تصحیح درج ذیل ہوگی۔

$$E^1_{fs} = \langle n\ell m_\ell m_s | (H'_r + H'_{so}) | \rangle n\ell m_\ell m_s \rangle \tag{۶.۸۰}$$

[31] ایسی صورت میں زیمان اثر کو **پاشن و بیک اثر** بھی کہتے ہیں۔



شکل ۶.۱۱: ہائیڈروجن کے زمینی حال کا کمزور میدانی زیمان بٹوارا؛ بالائی لکیر ($m_j = 1/2$) کی ڈھلوان 1 ہے؛ نچلی لکیر ($m_j = -1/2$) کی ڈھلوان -1 ہے۔

اضافیتی حصہ وہی ہو گا جو پہلے تھا (مساوات ۶.۵۷)؛ چکر و مدار جزو (مساوات ۶.۶۱) کے لیے ہمیں

$$\langle \mathbf{S}\cdot\mathbf{L}\rangle = \langle S_x\rangle\langle L_x\rangle + \langle S_y\rangle\langle L_y\rangle + \langle S_z\rangle\langle L_z\rangle = \hbar^2 m_\ell m_s \tag{۶.۸۱}$$

درکار ہو گا (یاد رہے S_z اور L_z کے امتیازی تفاعلات کے لیے $\langle S_x\rangle = \langle S_y\rangle = \langle L_x\rangle = \langle Ly\rangle = 0$ ہو گا)۔ ان تمام کو اکٹھے کر کے (سوال ۶.۲۲) ہم درج ذیل اخذ کرتے ہیں۔

$$E^1_{fs} = \frac{13.6\,\text{eV}}{n^3}\alpha^2\left\{\frac{3}{4n} - \left[\frac{\ell(\ell+1) - m_\ell m_s}{\ell(\ell+1/2)(\ell+1)}\right]\right\} \tag{۶.۸۲}$$

(چوکور قوسین میں جزو، $\ell = 0$ کے لئے بلا تعیین ہے؛ اس صورت میں اس کی درست قیمت 1 ہے؛ سوال ۶.۲۴ دیکھیں۔) زیمان (مساوات ۶.۷۹) اور مہین ساخت (مساوات ۶.۸۲) حصوں کا مجموعہ کل توانائی دے گا۔

سوال ۶.۲۲: مساوات ۶.۸۰ سے آغاز کر کے مساوات ۶.۵۷، مساوات ۶.۶۱، مساوات ۶.۶۴، اور مساوات ۶.۸۱ استعمال کرتے ہوئے مساوات ۶.۸۲ اخذ کریں۔

سوال ۶.۲۳: آٹھ عدد $n = 2$ حالات $|2\ell m_\ell m_s\rangle$ پر غور کریں۔ طاقتور میدان زیمان بٹوارا کی صورت میں ہر حال کی توانائی تلاش کریں۔ اپنے جواب کو بوہر توانائی، (α^2 کے راست متناسب) مہین ساخت، اور ($\mu_B B_{\text{بیرونی}}$ کے راست متناسب) زیمان حصے کے مجموعے کی صورت میں لکھیں۔ مہین ساخت کو مکمل طور پر نظر انداز کرتے ہوئے، منفرد سطحوں کی تعداد کتنی ہو گی، اور ان کے انحطاط کیا ہوں گے؟

سوال ۶.۲۴: اگر $\ell = 0$ ہو، تب $j = s$، $m_j = m_s$ ہو گا، اور کمزور اور طاقتور دونوں میدانوں کے لیے موزوں حالات ($|nm_s\rangle$) ایک جیسے ہوں گے۔ (مساوات ۶.۷۲ سے) E_Z^1 اور (مساوات ۶.۶۷ سے) مہین ساخت

توانائیاں تعین کرکے، میدان کی طاقت سے قطع نظر، $\ell = 0$ زیمان اثر کا عمومی نتیجہ لکھیں۔ دکھائیں کہ چوکور توسین رکن کی قیمت 1 لیتے ہوئے، طاقتور میدان کلیہ (مساوات ۶.۸۲) یہی نتیجہ دے گا۔

۶.۴.۳ درمیانہ میدان زیمان اثر

درمیانے میدان کی صورت میں نہ H'_Z اور نہ ہی H'_{fs} غالب ہوگا، لہٰذا ہمیں دونوں کو، ایک نظر سے دیکھ کر، بوہر ہیملٹنی (مساوات ۶.۴۲) کے اضطراب تصور کرنا ہوگا۔

$$H' = H'_Z + H'_{fs} \tag{۶.۸۳}$$

میں $n = 2$ صورت پر اپنی توجہ محدود رکھ کر، ان حالات کو، جن کی تصویر کشی ℓ ، j ، اور m_j کرتے ہیں،[۳۲] انحطاطی نظریہ اضطراب کی اساس لیتا ہوں۔ کلیبش و گورڈن عددی سر (سوال ۴.۵۱ یا جدول ۴.۹) استعمال کرتے ہوئے $|jm_j\rangle$ کو $|\ell m_\ell\rangle|sm_s\rangle$ کا خطی جوڑ لکھ کر، درج ذیل ہوگا۔

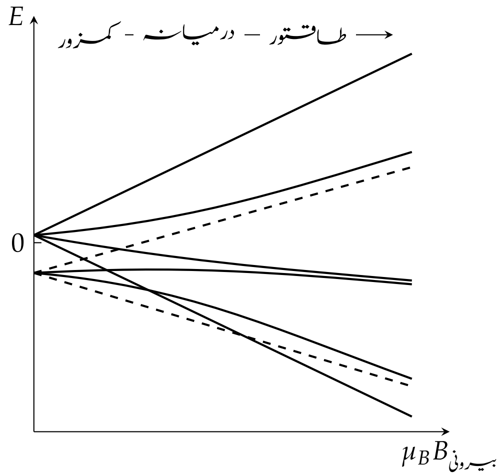
$$\ell = 0\begin{cases}\psi_1 \equiv |\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle = |00\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle\\ \psi_2 \equiv |\frac{1}{2}\,\frac{-1}{2}\rangle = |00\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{-1}{2}\rangle\end{cases}$$

$$\ell = 1\begin{cases}\psi_3 \equiv |\frac{3}{2}\,\frac{3}{2}\rangle = |11\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle\\ \psi_4 \equiv |\frac{3}{2}\,\frac{-3}{2}\rangle = |1-1\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{-1}{2}\rangle\\ \psi_5 \equiv |\frac{3}{2}\,\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{2/3}|10\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{1/3}|11\rangle\frac{1}{2}\,\frac{-1}{2}\rangle\\ \psi_6 \equiv |\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle = -\sqrt{1/3}|10\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{2/3}|11\rangle\frac{1}{2}\,\frac{-1}{2}\rangle\\ \psi_7 \equiv |\frac{3}{2}\,\frac{-1}{2}\rangle = \sqrt{1/3}|1-1\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{2/3}|10\rangle\frac{1}{2}\,\frac{-1}{2}\rangle\\ \psi_8 \equiv |\frac{1}{2}\,\frac{-1}{2}\rangle = -\sqrt{2/3}|1-1\rangle|\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{1/3}|10\rangle\frac{1}{2}\,\frac{-1}{2}\rangle\end{cases}$$

اس اساس میں H'_{fs} کے تمام غیر صفر قالبی ارکان، جنہیں مساوات ۶.۶۶ دیتی ہے، وتر پر ہوں گے؛ H'_Z کے چار غیر وتری ارکان پائے جاتے ہیں، اور مکمل قالب W (سوال ۶.۲۵ دیکھیں) درج ذیل ہوگا

$$\begin{pmatrix}5\gamma-\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 5\gamma+\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & \gamma-2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & \gamma+2\beta & 0 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma-\frac{2}{3}\beta & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 5\gamma-\frac{1}{3}\beta & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma+\frac{2}{3}\beta & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 5\gamma+\frac{1}{3}\beta\end{pmatrix}$$

[۳۲] آپ چاہیں تو ℓ ، m_ℓ ، m_s حالات استعمال کر سکتے ہیں، جو H'_Z کے قالبی ارکان کا حصول آسان لیکن H'_{fs} کا زیادہ مشکل بناتے ہیں؛ قالب $\mathbf{W}$ زیادہ پیچیدہ ہوگا، لیکن امتیازی قیمتیں (جو اساس کی تابع نہیں) دونوں صورتوں میں ایک جیسی ہوں گی۔



شکل ۶.۱۲: کمزور، درمیانہ اور طاقتور میدان میں ہائیڈروجن کے $n = 2$ حال کا زیمان بٹوارا۔

جہاں درج ذیل ہوں گے۔

$$\gamma \equiv (\alpha/8)^2 13.6\,\text{eV} \quad \text{اور} \quad \beta \equiv \mu_B \boldsymbol{B}_{\text{بیرونی}}$$

ابتدائی چار امتیازی قیمتیں پہلے سے وتر پر دکھائے گئے ہیں؛ اب صرف دو 2×2 ڈبوں کی امتیازی قیمتیں تلاش کرنا باقی ہے۔ ان میں سے پہلی کی امتیازی مساوات درج ذیل ہے

$$\lambda^2 - \lambda(6\gamma - \beta) + \left(5\gamma^2 - \frac{11}{3}\gamma\beta\right) = 0$$

جس سے دو درجی کلیہ درج ذیل امتیازی قیمتیں دے گا۔

$$\lambda_{\pm} = -3\gamma + (\beta/2) \pm \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + (\beta^2/4)} \tag{۶.۸۴}$$

دوسرے ڈبے کی امتیازی قیمتیں یہی مساوات دے گی، لیکن اس میں β کی علامت الٹ ہو گی۔ ان آٹھ توانائیوں کو جدول ۶.۲ میں پیش کیا گیا ہے، اور شکل ۶.۱۲ میں $B_{\text{بیرونی}}$ کے لحاظ سے ترسیم کیا گیا ہے۔ صفر میدان حد $(\beta = 0)$ میں یہ گھٹ کر مہین ساخت قیمتیں دیتی ہیں؛ کمزور میدان $(\beta \ll \gamma)$ میں یہ سوال ۶.۲۱ میں حاصل نتائج دیتی ہیں؛ طاقتور میدان $(\beta \gg \gamma)$ میں سوال ۶.۲۳ کے نتائج حاصل ہوتے ہیں (دھیان رہے، جیسا سوال ۶.۲۳ میں پیشگوئی کی گئی، بہت زیادہ طاقتور میدانوں میں پانچ منفرد سطح توانائی پر ارتکاز ہو گا)۔

سوال ۶.۲۵: قوالب H'_Z اور H'_{fs} کے ارکان دریافت کر کے، $n = 2$ کے لئے، متن میں دیا گیا قالب W مرتب کریں۔

جدول ۶.۲: مہین ساخت اور زیمان بٹوارا کے ساتھ، ہائیڈروجن کے $n = 2$ حالات کی سطحیں توانائی۔

$\epsilon_1 = E_2 - 5\gamma + \beta$
$\epsilon_2 = E_2 - 5\gamma - \beta$
$\epsilon_3 = E_2 - \gamma + 2\beta$
$\epsilon_4 = E_2 - \gamma - 2\beta$
$\epsilon_5 = E_2 - 3\gamma + \beta/2 + \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4}$
$\epsilon_6 = E_2 - 3\gamma + \beta/2 - \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4}$
$\epsilon_7 = E_2 - 3\gamma - \beta/2 + \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4}$
$\epsilon_8 = E_2 - 3\gamma - \beta/2 - \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4}$

سوال ۶.۲۶: ہائیڈروجن کے $n = 3$ حالات کے لیے کمزور، طاقتور اور درمیانے میدان خطوں کے لیے زیمان اثر کا تجزیہ کریں۔ (جدول ۶.۲ کی طرز پر) توانائیوں کا جدول تیار کر کے، انہیں (شکل ۶.۱۲ کی طرح) بیرونی میدان کے تفاعلات کے طور پر ترسیم کریں، اور تصدیق کریں کہ درمیانے میدان نتائج دو تحدیدی صورتوں میں گھٹ کر درست قیمتیں دیتی ہیں۔

۶.۵ نہایت مہین بٹوارا

پروٹان خود ایک مقناطیسی جفت قطب ہے، اگرچہ نسب نما میں بڑی کمیت کی بنا پر اس کا جفت قطب معیار اثر، الیکٹران کے جفت قطب معیار اثر سے بہت کم ہو گا (مساوات ۶.۶۰)۔

$$\boldsymbol{\mu}_p = \frac{g_p e}{2m_p}\,\mathbf{S}_p, \quad \boldsymbol{\mu}_e = -\frac{e}{m_e}\,\mathbf{S}_e \tag{۶.۸۵}$$

(پروٹان تین کوارکوں پر مشتمل مخلوط ساخت کا ذرہ ہے، اور اس کی ممکن مقناطیسی نسبت الیکٹران کی ممکن مقناطیسی نسبت کی طرح سادہ نہیں؛ اسی لئے g جزو ضربی کو g_p لکھا گیا ہے، جس کی پیمائشی قیمت 5.59 ہے جو الیکٹران کی قیمت (2) سے مختلف ہے۔) کلاسیکی برقی حرکیات کے تحت، جفت قطب $\boldsymbol{\mu}$ درج ذیل مقناطیسی میدان پیدا کرتا ہے۔[۳۳]

$$\boldsymbol{B} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3}[3(\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{a}_{\text{r}})\boldsymbol{a}_{\text{r}} - \boldsymbol{\mu}] + \frac{2\mu_0}{3}\boldsymbol{\mu}\delta^3(\boldsymbol{r}) \tag{۶.۸۶}$$

[۳۳] اگر آپ مساوات ۶.۸۶ میں مشتمل ڈیلٹا تفاعلی جزو سے واقف نہیں، جفت قطب کو چکر کاٹتا ہوا بار دار کروی خول تصور کر کے، ($\boldsymbol{\mu}$ کو برقرار رکھ کر) رداس کو صفر تک اور بار کو لامتناہی تک پہنچا کر، آپ اس کو اخذ کر سکتے ہیں۔

یوں، پروٹان کے مقناطیسی جفت قطب معیار اثر سے پیدا مقناطیسی میدان میں الیکٹران کا ہیملٹنی درج ذیل ہوگا (مساوات ۶.۵۸)۔

$$H'_{hf} = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e} \frac{[3(\mathbf{S}_p \cdot \boldsymbol{a}_r)(\mathbf{S}_e \cdot \boldsymbol{a}_r) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e]}{r^3} + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3m_p m_e} \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \, \delta^3(\boldsymbol{r}) \tag{۶.۸۷}$$

نظریہ اضطراب کے تحت توانائی کی اول رتبی تخفیف (مساوات ۶.۹) اضطرابی ہیملٹنی کی توقعاتی قیمت ہوگی۔

$$E^1_{hf} = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e} \left\langle \frac{3(\mathbf{S}_p \cdot \boldsymbol{a}_r)(\mathbf{S}_e \cdot \boldsymbol{a}_r - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e)}{r^3} \right\rangle + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3m_p m_e} \langle \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \rangle |\psi(0)|^2 \tag{۶.۸۸}$$

زمینی حال میں (یا کسی دوسری ایسے حال میں جس میں $\ell = 0$ ہو) تفاعل موج کروی تشاکلی ہوگا، اور پہلی توقعاتی قیمت صفر ہوگی (سوال ۶.۲۷ دیکھیں)۔ مزید، مساوات ۴.۸۰ کے تحت $|\psi_{100}(0)|^2 = 1/(\pi a^3)$ ہوگا، لہٰذا زمینی حال میں درج ذیل ہوگا۔

$$E^1_{hf} = \frac{\mu_0 g_p e^2}{3\pi m_p m_e a^3} \langle \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \rangle \tag{۶.۸۹}$$

چونکہ اس میں دو چکروں کے بیچ ضرب نقطہ پائی جاتی ہے، لہٰذا اس کو **چکر چکر ربط**[۳۴] کہتے ہیں (چکر مدار ربط میں $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ پایا جاتا ہے)۔

چکر چکر ربط کی موجودگی میں، انفرادی چکری زاویائی معیار اثر بقائی نہیں رہتے؛ "موزوں" حالات، کل چکر:

$$\mathbf{S} \equiv \mathbf{S}_e + \mathbf{S}_p \tag{۶.۹۰}$$

کے امتیازی سمتیات ہوں گے۔ پہلے کی طرح، ہم اس کا مربع لے کر درج ذیل حاصل کرتے ہیں۔

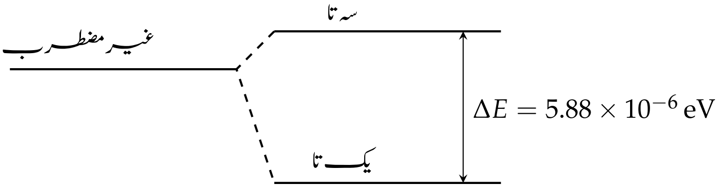
$$\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e = \frac{1}{2}(S^2 - S_e^2 - S_p^2) \tag{۶.۹۱}$$

اب الیکٹران اور پروٹان دونوں کا چکر $\frac{1}{2}$ ہے، لہٰذا $S_e^2 = S_p^2 = (3/4)\hbar^2$ ہوگا۔ سہ تا حال (تمام چکر "ہم متوازی") میں کل چکر 1 ہوگا، لہٰذا $S^2 = 2\hbar^2$ ہوگا؛ یک تا حال میں کل چکر 0، لہٰذا $S^2 = 0$ ہوگا۔ یوں درج ذیل ہوگا۔

$$E^1_{hf} = \frac{4g_p\hbar^4}{3m_p m_e^2 c^2 a^4} \begin{cases} +1/4, & (\text{سہ تا}) \\ -3/4, & (\text{یک تا}) \end{cases} \tag{۶.۹۲}$$

چکر چکر ربط، زمینی حال کے چکری انحطاط کو توڑ کر سہ تا تشکیل کو اٹھاتا جبکہ یک تا تشکیل کو دباتا ہے (شکل ۶.۱۳)۔ ظاہر ہے کہ ان کے بیچ **درز توانائی**[۳۵] درج ذیل ہوگی۔

$$\Delta E = \frac{4g_p\hbar^4}{3m_p m_e^2 c^2 a^4} = 5.88 \times 10^{-6}\,\text{eV} \tag{۶.۹۳}$$



شکل ۶.۱۳: ہائیڈروجن کے زمینی حال کا نہایت مہین بٹوارا۔

سہ تا حال سے یک تا حال منتقلی کی بنا پر خارج نوریہ کا تعدد

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = 1420\,\text{MHz} \tag{۶.۹۴}$$

ہو گا، اور اس کا مطابقتی طول موج $c/\nu = 21\,\text{cm}$ ہو گا، جو خورد موج خطہ میں پایا جاتا ہے۔ یہ وہ مشہور 21 **سینٹی میٹر لکیر**[۳۶] ہے جو کائنات میں اخراج کی صورت میں ہر طرف پائی جاتی ہے۔

سوال ۶.۲۷: فرض کریں $\boldsymbol{a}$ اور $\boldsymbol{b}$ دو مستقل سمتیات ہیں۔ درج ذیل دکھائیں

$$\int (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}_\text{r})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a}_\text{r}) \sin\theta \,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi = \frac{4\pi}{3}(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}) \tag{۶.۹۵}$$

(تکمل ہمیشہ کی طرح سعت $0 < \theta < \pi$، $0 < \phi < 2\phi$ پر کر لیا گیا ہے)۔ اس نتیجے کو استعمال کرتے ہوئے ان حالات کے لئے جن کے لیے $l = 0$ ہو، درج ذیل دکھائیں۔

$$\left\langle \frac{3(\mathbf{S}_p\cdot\boldsymbol{a}_\text{r})(\mathbf{S}_e\cdot\boldsymbol{a}_\text{r}) - \mathbf{S}_p\cdot\mathbf{S}_e}{r^3} \right\rangle = 0$$

اشارہ: $\boldsymbol{a}_\text{r} = \sin\theta\cos\phi\boldsymbol{i} + \sin\theta\sin\phi\boldsymbol{j} + \cos\theta\boldsymbol{k}$

سوال ۶.۲۸: ہائیڈروجن کلیہ میں موزوں ترمیم کرتے ہوئے، درج ذیل کے لیے زمینی حال کی نہایت مہین ساخت تعین کریں: (الف) **میونی ہائیڈروجن**[۳۷] (جس میں الیکٹران کے بجائے میون ہو گا، جس کا بار اور g جزو ضربی، بالترتیب، الیکٹران کے بار اور g جزو ضربی کے برابر، لیکن کمیت 207 گنا زیادہ ہے)، (ب) **پازیٹرانیم**[۳۸] (جس میں پروٹان کی جگہ ضد الیکٹران ہو گا، جس کی کمیت اور g جزو ضربی، بالترتیب، الیکٹران کی کمیت اور g جزو ضربی ہیں، لیکن بار کی علامت الٹ ہے)، (ج) **میونیئم**[۳۹] (جس میں پروٹان کی جگہ ضد میون ہو گا، (جس

---

[۳۴] spin-spincoupling
[۳۵] energygap
[۳۶] 21-centimeterline
[۳۷] muonichydrogen
[۳۸] positronium
[۳۹] muonium

کی کمیت اور g جزو ضربی عین میون کے برابر، لیکن بار الٹ ہے)۔ اشارہ: یاد رہے کہ ان عجیب "جوہروں" کا رداس بوہر حاصل کرتے وقت تخفیف شدہ کمیت (سوال ۱.۵) استعمال کی جائی گی۔ دیکھا یہ گیا ہے کہ پازیٹرانیم کے لئے حاصل جواب $(8.41 \times 10^{-4}\ \text{eV})$ سے بہت مختلف $(4.85 \times 10^{-4}\ \text{eV})$، تجرباتی حاصل قیمت ہے؛ اتنے زیادہ فرق کی وجہ نابودگی جوڑا[40] $(e^+ + e^- \rightarrow \gamma + \gamma)$ ہے، جو اضافی $(3/4)\Delta E$ حصہ ڈالتا ہے، اور جو سادہ ہائیڈروجن، میونی ہائیڈروجن، اور میونیئم میں (ظاہر ہے کہ) نہیں ہو گا۔

اضافی سوالات برائے باب ۶

سوال ۶.۲۹: مرکزہ کی متناہی جسامت کی بنا پر ہے ہائیڈروجن کی زمینی حال توانائی میں تصحیح کی اندازاً قیمت تلاش کریں۔ پروٹان کو رداس b کا یکساں بار دار کروی خول تصور کریں، یوں خول کے اندر الیکٹران کی مخفی توانائی مستقل، $-e^2/4\pi\epsilon_0 b$، ہو گی؛ یہ زیادہ درست نہیں ہے، لیکن یہ سادہ ترین نمونہ ہے، جس سے ہمیں مقدار کا رتبہ ٹھیک دے گا۔ اپنے نتیجے کو چھوٹی مقدار معلوم (b/a) کے طاقتی تسلسل توسیع میں لکھ کر، جہاں a رداس بوہر ہے، صرف ابتدائی جزو رکھ کر، درج ذیل روپ میں جواب حاصل کریں۔

$$\frac{\Delta E}{E} = A(b/a)^n$$

آپ نے مستقل A اور طاقت n کی قیمتیں تعین کرنی ہیں۔ آخر میں $b \approx 10 \times 10^{-15}\ \text{m}$ (جو تقریباً پروٹان کا رداس ہے) پُر کر کے اصل عدد تلاش کریں۔ اس کا موازنہ مہین ساخت اور نہایت مہین ساخت کے ساتھ کریں۔

سوال ۶.۳۰: ہم سمت تین ابعادی ہارمونی مرتعش (سوال ۴.۳۸) پر غور کریں۔ اضطراب

$$H' = \lambda x^2 yz$$

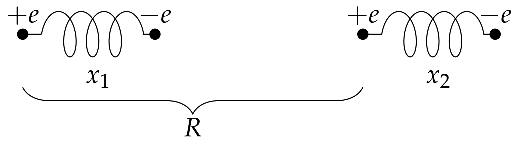
(جہاں λ ایک مستقل ہے) کے، درج ذیل پر، (رتبہ اول) اثر پر بحث کریں۔

ا. زمینی حال؛

ب. (تہرا انحطاطی) پہلا ہیجان حال۔ اشارہ: سوال ۲.۱۲ اور سوال ۳.۳۳ کے جوابات استعمال کریں۔

سوال ۶.۳۱: **وان در والز باہم عمل**۔ دو ایسے جوہر پر غور کریں جن کے بیچ فاصلہ R ہو۔ چونکہ دونوں برقی معادل ہیں، لہٰذا آپ فرض کر سکتے ہیں کہ ان کے بیچ کوئی قوت نہیں پائی جاتی، تاہم قابل تقطیب ہونے کی صورت میں ان کے بیچ کمزور قوت کشش پائی جائی گی۔ اس نظام کی نمونہ کشی کرنے کی خاطر، جوہر کو (کمیت m، بار $-e$ کا) ایک الیکٹران جو (بار $+e$) کے مرکزہ کے ساتھ ایک اسپرنگ (جس کا مقیاس لچک k ہے) سے جڑا ہوا تصور کریں (شکل ۶.۱۴)۔ ہم فرض کرتے ہیں کہ مراکزہ بھاری ہونے کے بنا پر غیر متحرک یعنی ساکن ہوں گے۔ اس

[40] pair annihilation



شکل ۶.۱۴: دو قابل تقطیب قریبی جوہر (سوال ۶.۳۱)۔

غیر مضطرب نظام کی ہیملٹنی درج ذیل ہو گی۔

$$H^0 = \frac{1}{2m}p_1^2 + \frac{1}{2}kx_1^2 + \frac{1}{2m}p_2^2 + \frac{1}{2}kx_2^2 \tag{۶.۹۶}$$

ان جوہروں کے بیچ کولمب باہم عمل درج ذیل ہو گا۔

$$H' = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\Big(\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{R+x_1} - \frac{e^2}{R-x_2} + \frac{e^2}{R+x_1-x_2}\Big) \tag{۶.۹۷}$$

ا. مساوات ۶.۹۷ کی تفصیل پیش کریں۔ فاصلہ R سے $|x_1|$ اور $|x_2|$ کی قیمتوں کو بہت کم تصور کرتے ہوئے درج ذیل دکھائیں۔

$$H' \cong -\frac{e^2 x_1 x_2}{2\pi\epsilon_0 R^3} \tag{۶.۹۸}$$

ب. دکھائیں کے کل ہیملٹنی (مساوات ۶.۹۶ جمع مساوات ۶.۹۸) دو ہارمونی مرتعش ہیملٹنیوں:

$$H = \Big[\frac{1}{2m}p_+^2 + \frac{1}{2}\Big(k - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3}\Big)x_+^2\Big] + \Big[\frac{1}{2m}p_-^2 + \frac{1}{2}\Big(k + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3}\Big)x_-^2\Big] \tag{۶.۹۹}$$

میں زیر تبدیلی متغیرات:

$$p\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(p_1 \pm p_2) \quad \text{اور نتیجتاً} \quad x\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 \pm x_2) \tag{۶.۱۰۰}$$

علیحدہ علیحدہ ہو گی۔

ج. ظاہر ہے کہ اس ہیملٹنی کی زمینی حال توانائی درج ذیل ہو گی۔

$$\omega_{\pm} = \sqrt{\frac{k \mp (e^2/4\pi\epsilon_0 R^3)}{m}} \quad \text{جہاں} \quad E = \frac{1}{2}\hbar(\omega_+ + \omega_-) \tag{۶.۱۰۱}$$

کولمب باہم عمل کے بغیر یہ $E_0 = \hbar\omega_0$ ہوتی، جہاں $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ ہے۔ یہ فرض کرتے ہوئے کہ $k \gg (e^2/4\pi\epsilon_0 R^3)$ ہے، درج ذیل دکھائیں۔

$$\Delta V \equiv E - E_0 \cong -\frac{\hbar}{8m^2\omega_0^3}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\frac{1}{R^6} \tag{۶.۱۰۲}$$

ماخوذ: دو جوہروں کے بیچ کشش مخفیہ پایا جاتا ہے، جو ان کے بیچ فاصلہ کے چھٹی طاقت کے تغیر معکوس ہے۔ یہ دو معادل جوہروں کے بیچ **وان در والس باہم عمل**[۴۱] ہے۔

د. یہی حساب دورتی نظریہ اضطراب استعمال کرتے ہوئے دوبارہ کریں۔ اشارہ: غیر مضطرب حالات کا روپ $\psi_{n1}(x_1)\psi_{n2}(x_2)$ ہوگا، جہاں $\psi_n(x)$ یک ذروی مرتعش تفاعل موج ہے جس میں کمیت m اور مقیاس لچک k ہوگا؛ مساوات ۶.۹۸ میں دی گئی اضطراب کے لیے زمینی حال توانائی کی دورتی تصحیح ΔV ہوگی (دھیان رہے کہ اول رتبی تصحیح صفر ہے)۔

سوال ۶.۳۲: فرض کریں، ایک مخصوص کوانٹائی نظام کی ہیملٹنی H، کسی مقدار معلوم λ کی تفاعل ہے؛ $H(\lambda)$ کی امتیازی قیمتیں $E_n(\lambda)$، اور امتیازی تفاعلات $\psi_n(\lambda)$ لیں۔ **مسئلہ فائنمن وہلمن**[۴۲] درج ذیل کہتا ہے[۴۳]

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle \psi_n \right| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \left| \psi_n \right\rangle \tag{۶.۱۰۳}$$

(جہاں E_n کو غیر انحطاطی تصور کریں، یا؛ اگر انحطاطی ہو تب، تمام ψ_n کو انحطاطی امتیازی تفاعلات کے "موزوں" خطی جوڑ تصور کریں)۔

ا. مسئلہ فائنمن وہلمن ثابت کریں۔ اشارہ: مساوات ۶.۹ استعمال کریں۔

ب. اس کا اطلاق یک بُعدی ہارمونی مرتعش پر درج ذیل صورتوں میں کریں۔

۱. $\lambda = \omega$ لیں (جو V کی توقعاتی قیمت کا کلیہ دیگا)،

۲. $\lambda = \hbar$ لیں (جو $\langle T \rangle$ دے گا)، اور

۳. $\lambda = m$ لیں (جو $\langle T \rangle$ اور $\langle V \rangle$ کا رشتہ دے گا)۔

اپنے جوابات کا سوال ۲.۱۲ اور مسئلہ وریل کی پیشگوئیوں (سوال ۳.۳۱) کے ساتھ موازنہ کریں۔

سوال ۶.۳۳: مسئلہ فائنمن وہلمن (سوال ۶.۳۲) استعمال کرتے ہوئے ہائیڈروجن کے لئے $1/r$ اور $1/r^2$ کی توقعاتی قیمتیں

---

[۴۱] VanderWaalsinteraction

[۴۲] Feynmann-Hellmanntheorem

[۴۳] فائنمن نے مساوات ۶.۱۰۳ اپنی اعلیٰ تعلیم کے دوران اخذ کی، جبکہ ہلمن اسی مسئلہ کو چار سال قبل ایک غیر مشہور روسی جریدہ میں کر چکے تھے۔

تعین کی جا سکتی ہیں۔ رداسی تفاعلات موج (مساوات ۴.۵۳) کی موثر ہیملٹنی درج ذیل ہے

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}$$

اور امتیازی قیمتیں (جنہیں ℓ کی صورت میں لکھا گیا ہے)[44] درج ذیل ہیں (مساوات ۴.۷۰)۔

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2(j_{\text{اعظم}} + \ell + 1)^2}$$

ا. مسئلہ فائنمن وہلمن میں $e = \lambda$ لیتے ہوئے $\langle 1/r \rangle$ تلاش کریں۔ اپنے نتیجے کی تصدیق مساوات ۶.۵۵ سے کریں۔

ب. $\lambda = \ell$ لیتے ہوئے $\langle 1/r^2 \rangle$ تلاش کریں۔ اپنے نتیجے کی تصدیق مساوات ۶.۵۶ سے کریں۔

سوال ۶.۳۴: **رشتہ کرامرز:**[45]

$$\frac{s+1}{n^2}\langle r^s \rangle - (2s+1)a\langle r^{s-1} \rangle + \frac{s}{4}[(2\ell+1)^2 - s^2]a^2\langle r^{s-2} \rangle = 0 \tag{۶.۱۰۴}$$

ثابت کریں؛[46] یہ ہائیڈروجن کے حال $\psi_{n\ell m}$ میں الیکٹران کے لئے، r کی تین مختلف طاقتوں (s ، $s - 1$ اور $s + 1$) کے توقعاتی قیمتوں کا تعلق پیش کرتا ہے۔ اشارہ: رداسی مساوات (مساوات ۴.۵۳) کو درج ذیل روپ میں لکھ کر

$$u'' = \Big[\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2}{ar} + \frac{1}{n^2a^2}\Big]u$$

$\int (ur^su'')\,\mathrm{d}r$ کو $\langle r^s \rangle$ ، $\langle r^{s-1} \rangle$ ، $\langle r^{s-2} \rangle$ کی صورت میں لکھیں۔ اس کے بعد تکمل بالحصص کے ذریعہ دہرے تفرق کو گھٹائیں۔ دکھائیں کہ

$$\int (ur^su')\,\mathrm{d}r = -(s/2) < r^{s-1} >$$

اور

$$\int (u'r^su')\,\mathrm{d}r = -[2/(s+1)]\int (u''r^{s+1}u')\,\mathrm{d}r$$

ہوں گے۔ یہاں سے آگے چلیں۔

سوال ۶.۳۵:

[44] جزو-ب میں ہم ℓ کو استمراری متغیر تصور کرتے ہیں؛ یوں مساوات ۴.۶۷، جس میں $j_{\text{اعظم}}$ جو لازماً عدد صحیح ہو گا ایک مستقل ہے، کے تحت n متغیر ℓ کا تفاعل ہو گا۔ ابہام دور کرنے کی غرض سے میں نے n کو خارج کیا تاکہ ℓ پر تابعیت واضح ہو۔

[45] Kramers' relation

[46] اس تعلق کو رشتہ پسترنک بھی کہتے ہیں۔

ا. رشتہ کرامرس (مساوات ۶.۱۰۴) میں $s=0$ ، $s=1$ ، $s=2$ اور $s=3$ ڈال کر $\langle r^{-1}\rangle$ ، $\langle r\rangle$ ، $\langle r^2\rangle$ ، اور $\langle r^3\rangle$ کے کلیات حاصل کریں۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ اس طرح چلتے ہے کسی بھی مثبت طاقت کے کلیات دریافت کیے جا سکتے ہیں۔

ب. البتہ، مخالف رخ چلتے ہوئے آپ کو ایک مسئلہ در پیش ہو گا۔ آپ $s=-1$ ڈال کر دیکھ سکتے ہیں کہ صرف $\langle r^{-2}\rangle$ اور $\langle r^{-3}\rangle$ کا رشتہ حاصل ہوتا ہے۔

ج. اگر آپ کسی دوسرے طریقے سے $\langle r^{-2}\rangle$ دریافت کر پائیں، تب آپ رشتہ کرامرس استعمال کر کے باقی تمام منفی قوتوں کے لئے کلیات دریافت کر سکتے ہیں۔ مساوات ۶.۵۶ (جو سوال ۶.۳۳ میں اخذ کی گئی ہے) استعمال کرتے ہوئے $\langle r^{-3}\rangle$ تعین کریں، اور اپنے نتیجہ کی تصدیق مساوات ۶.۶۴ کے ساتھ کریں۔

سوال ۶.۳۶: جوہر کو یکساں بیرونی برقی میدان $E_{\text{بیرونی}}$ میں رکھنے سے اس کی سطحیں توانائی اپنی جگہ سے سرک جاتی ہیں، جسے **شٹارک اثر**[47] کہتے ہیں (اور جو زیمان اثر کا برقی مماثل ہے)۔ اس سوال میں ہم ہائیڈروجن کے $n=1$ اور $n=2$ حالات کے لئے شٹارک اثر کا تجزیہ کرتے ہیں۔ فرض کریں میدان z رخ ہے، لہٰذا الیکٹران کی مخفی توانائی درج ذیل ہو گی۔

$$H'_S = eE_{\text{بیرونی}}z = eE_{\text{بیرونی}}r\cos\theta$$

اس کو بوہر ہیملٹنی (مساوات ۶.۴۲) میں اضطراب تصور کریں۔ (اس مسئلہ میں چکر کا کوئی کردار نہیں ہے، لہٰذا اسے نظر انداز کریں، اور مہین ساخت کو نظر انداز کریں۔)

ا. دکھائیں کہ اول رتبہ میں زمینی حال توانائی اس اضطراب سے اثر انداز نہیں ہوتی۔

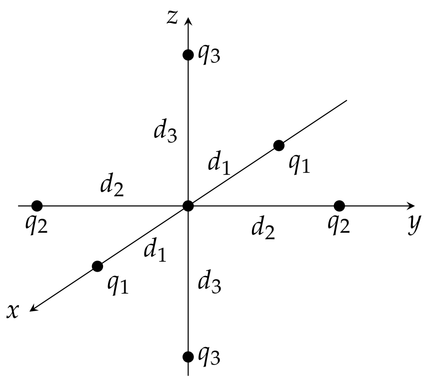
ب. پہلا ہیجان حال 4 پڑتا انحطاطی: ψ_{200} ، ψ_{211} ، ψ_{210} ، ψ_{21-1} ہے۔ انحطاطی نظریہ اضطراب استعمال کرتے ہوئے، توانائی کی اول رتبی تصحیح تعین کریں۔ توانائی E_2 کا بٹوارا کتنی سطحوں میں ہو گا؟

ج. درج بالا جزو-ب میں "موزوں" تفاعلات موج کیا ہوں گے؟ ہر ایک "موزوں" حال میں برقی جفت قطب معیار اثر $(\boldsymbol{p}_e = -e\boldsymbol{r})$ کی توقعاتی قیمت معلوم کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ نتائج لاگو کیے گئے میدان کے تابع نہیں ہیں؛ ظاہر ہے کہ پہلے ہیجان حال میں ہائیڈروجن ایک دائمی برقی جفت قطب معیار اثر کا حامل ہو گا۔

اشارہ: اس سوال میں بہت سارے تکملات پائے جاتے ہیں، تاہم تقریباً تمام کی قیمت صفر ہے۔ اس لئے حساب سے قبل غور کریں، اگر ϕ تکمل صفر ہو تو r اور θ تکملات حل کرنے کی ضرورت نہیں ہو گی۔ اگر ϕ تکمل صفر ہو، r اور θ تکملات کا حساب کرنا بے معنی ہو گا! جزوی جواب: $W_{13} = W_{31} = -3eaE_{\text{بیرونی}}$؛ باقی تمام ارکان صفر ہیں۔

سوال ۶.۳۷: ہائیڈروجن کے $n=3$ حالات کے لئے شٹارک اثر (سوال ۶.۳۶) پر غور کرتے ہیں۔ ابتدائی طور پر (پہلے کی طرح، چکر کو نظر انداز کرتے ہوئے) نو انحطاطی حالات $\psi_{3\ell m}$ ہوں گے، اور اب ہم z رخ برقی میدان چالو کرتے ہیں۔

[47] Starkeffect



شکل ۶.۱۵: ہائیڈروجن جوہر کے گرد چھ نقطی بار (قلمی جال کا ایک سادہ نمونہ؛ سوال ۶.۳۹)۔

ا. اضطرابی ہیملٹنی کو ظاہر کرنے والا 9×9 قالب تیار کریں۔ جزوی جواب:

$$\langle 300|z|310\rangle = -3\sqrt{6}\,a, \ \langle 310|z|320\rangle = -3\sqrt{3}\,a, \ \langle 31 \pm 1|z|32 \pm 1\rangle = -(9/2)a$$

ب. امتیازی قیمتیں اور انکے انحطاط دریافت کریں۔

سوال ۶.۳۸: **ڈیوٹریم**[۴۸] کے زمینی حال $(n = 1)$ میں نہایت مہین منتقلی کی بدولت خارج نوریہ کا طول موج، سنٹی میٹروں میں، تلاش کریں۔ ڈیوٹریم درحقیقت "بھاری" ہائیڈروجن ہے، جس کے مرکز میں ایک اضافی نیوٹران پایا جاتا ہے؛ پروٹان اور نیوٹران کی بندش سے **ڈیوٹیرانی**[۴۹] پیدا ہوتا ہے، جس کا چکر 1 اور مقناطیسی معیار اثر

$$\boldsymbol{\mu}_d = \frac{g_d e}{2m_d}\boldsymbol{S}_d$$

ہے؛ ڈیوٹریم کا g جزو ضربی 1.71 ہے۔

سوال ۶.۳۹: ایک قلم میں قریبی باردارئے کے برقی میدان جوہر کی سطحیں توانائی کو مضطرب کرتے ہیں۔ سادہ نمونہ کے طور پر (شکل ۶.۱۵)، فرض کریں ہائیڈروجن جوہر کے گرد نقطی بار کی تین جوڑیاں پائی جاتی ہیں۔ (چونکہ چکر اس سوال سے غیر متعلقہ ہے، لہٰذا اسے نظرانداز کریں۔)

ا. فرض کریں $r \ll d_1$، $r \ll d_2$، اور $r \ll d_3$ ہے۔ دکھائیں:

$$H' = V_o + 3(\beta_1 x^2 + \beta_2 y^2 + \beta_3 z^2) - (\beta_1 + \beta_2 + \beta_3)r^2,$$

---

[۴۸] deuterium
[۴۹] deuteron

جہاں درج ذیل ہیں۔

$$\beta_i \equiv -\frac{e}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_i}{d_i^3}, \qquad V_o = 2(\beta_1 d_1^2 + \beta_2 d_2^2 + \beta_3 d_3^2)$$

ب. زمینی حال توانائی کی اول رتبی تصحیح تلاش کریں۔

ج. پہلے ہیجان حالات $(n = 2)$ کی توانائی کے اول رتبی تصحیح تلاش کریں۔ درج ذیل صورتوں میں اس چار پڑتا انحطاطی نظام کا بٹوارا کتنی سطحوں میں ہو گا؟

۱. **کعبی تشاکل**[۵۰]، $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3$؛

۲. **چوزاویہ تشاکل**[۵۱]، $\beta_1 = \beta_2 \neq \beta_3$؛

۳. **قائمی معیّن**[۵۲] تشاکل کی عمومی صورت (جس میں تینوں مختلف ہوں گے)۔

سوال ۶.۴۰: بعض اوقات ψ_n^1 کو غیر مضطرب تفاعلات موج (مساوات ۶.۱۱) میں پھیلائے بغیر مساوات ۶.۱۰ کو بلا واسطہ حل کرنا ممکن ہوتا ہے۔ اسکی دو خوبصورت مثالیں درج ذیل ہیں۔

۱. **ہائیڈروجن کے زمینی حال میں شٹارک اثر۔**

۱. یکساں بیرونی برقی میدان $E_{\text{بیرونی}}$ کی صورت میں ہائیڈروجن کے زمینی حال کا اول رتبی تصحیح تلاش کریں (سوال ۶.۳۶؛ شٹارک اثر دیکھیں)۔ اشارہ: حل کا درج ذیل روپ

$$(A + Br + Cr^2)e^{-r/a}\cos\theta$$

استعمال کر کے دیکھیں؛ آپ نے مستقلات A، B اور C کی ایسی قیمتیں تلاش کرنی ہیں جو مساوات ۶.۱۰ کو مطمئن کرتی ہوں۔

۲. زمینی حال توانائی کی دوم رتبی تصحیح مساوات ۶.۱۴ کی مدد سے تعین کریں (جیسا اپنے سوال ۶.۳۶-الف میں دیکھا اول رتبی تصحیح صفر ہو گی)۔ جواب: $-m(3a^2eE_{\text{بیرونی}}/2\hbar)^2$

ب. اگر پروٹان کا برقی جفت قطب معیار اثر p ہوتا، تو ہائیڈروجن میں الیکٹران کی مخفی توانائی درج ذیل مقدار سے مضطرب ہوتی۔

$$H' = \frac{ep\cos\theta}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

۱. زمینی حال تفاعل موج کی اول رتبی تصحیح کو مساوات ۶.۱۰ حل کر کے تلاش کریں۔

---

[۵۰] cubicsymmetry
[۵۱] tetragonalsymmetry
[۵۲] orthorhombicsymmetry

۲. دکھائیں کہ اس رتبہ تک جوہر کا کل برقی جفت قطب معیار اثر (حیرت کی بات ہے) صفر ہے۔

۳. زمینی حال توانائی کی دوم رتبی تصحیح مساوات ۶.۱۴ سے تعین کریں۔ اول رتبی تصحیح کتنی ہو گی؟

باب ۷

تغیری اصول

۷.۱ نظریہ

فرض کریں آپ ایک نظام، جسے ہیملٹنی H بیان کرتی ہو، کی زمینی حال توانائی E_{gs} کا حساب کرنا چاہتے ہیں لیکن آپ (غیر تابع وقت) مساوات شروڈنگر حل نہیں کر پاتے۔ **اصول تغیریت**[1] آپ کو E_{gs} کی بالائی حد بندی دیتا ہے، اور بعض اوقات آپ کو صرف اسی سے غرض ہو گا، اور عموماً، ہوشیاری سے کام لیتے ہوئے آپ بالکل ٹھیک قیمت کے قریب قیمت حاصل کر سکیں گے۔ آئیں اس کا استعمال دیکھیں: کوئی ایک معمول شدہ تفاعل ψ لیں۔ میں درج ذیل دعویٰ کرتا ہوں:

$$E_{gs} \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \equiv \langle H \rangle \tag{۷.۱}$$

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

ثبوت: چونکہ H کے (نامعلوم) امتیازی تفاعلات مکمل سلسلہ دیتے ہیں، لہٰذا ہم ψ کو ان کا خطی جوڑ:[2]

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

ہے لکھ سکتے ہیں۔ چونکہ ψ معمول شدہ ہے، لہٰذا درج ذیل ہو گا

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

---

[1] variational principle

[2] اگر ہیملٹنی مقید حالات کے ساتھ بکھر حالات کا بھی حامل ہو، تب ہمیں مجموعہ کے ساتھ تکمل بھی درکار ہو گا، تاہم باقی دلیل یہی رہی گی۔

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

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

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

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

ہم یہی ثابت کرنا چاہتے تھے۔

□

مثال ۷.۱: فرض کریں ہم یک بُعدی ہارمونی مرتعش:

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

کی زمینی حال توانائی جاننا چاہتے ہیں۔ یقیناً، ہم اس کا ٹھیک ٹھیک جواب جانتے ہیں (مساوات ۲.۶۱): $E_{gs} = (1/2)\hbar\omega$؛ جس سے اس ترکیب کو پرکھا جا سکتا ہے۔ ہم گاوسی تفاعل:

$$\psi(x) = Ae^{-bx^2} \tag{۷.۲}$$

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

$$1 = |A|^2\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2bx^2}\,\mathrm{d}x = |A|^2\sqrt{\frac{\pi}{2b}} \Rightarrow A = \Big(\frac{2b}{\pi}\Big)^{1/4} \tag{۷.۳}$$

تعین کرتی ہے۔ اب

$$\langle H\rangle = \langle T\rangle + \langle V\rangle \tag{۷.۴}$$

ہے، جبکہ یہاں

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

اور

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

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

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

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

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

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

$$\langle H \rangle_{\text{اقل}} = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{۷.۷}$$

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

مثال ۷.۲: فرض کرے ہم ڈیلٹا تفاعل مخفیہ:

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

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

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

ظاہر ہے

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

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

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

لہٰذا

$$\langle H\rangle_{\text{اقل}} = -\frac{m\alpha^2}{\pi\hbar^2} \tag{۷.۹}$$

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

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

مثال ۷.۳: آزمائشی "تکونی" تفاعل موج (شکل ۷.۱):

$$\psi(x) = \begin{cases} Ax & 0 \le x \le a/2 \\ A(a-x) & a/2 \le x \le a \\ 0 & \text{بصورت دیگر} \end{cases} \tag{۷.۱۰}$$

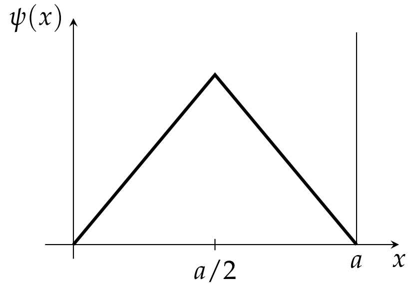
استعمال کرتے ہوئے یک بُعدی لامتناہی چوکور کنویں کی زمینی حال توانائی کی بالائی حد بندی تلاش کریں، جہاں A معمول زنی سے تعین کیا جائے گا۔

$$1 = |A|^2\Big[\int_0^{a/2} x^2\,\mathrm{d}x + \int_{a/2}^{a}(a-x)^2\,\mathrm{d}x\Big] = |A|^2\,\frac{a^3}{12} \Rightarrow A = \frac{2}{a}\sqrt{\frac{3}{a}} \tag{۷.۱۱}$$

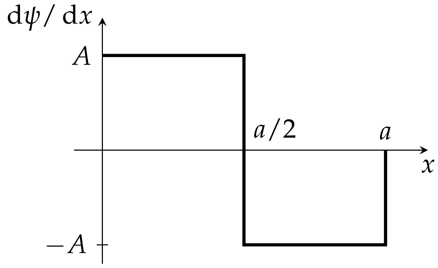
جیسا شکل ۷.۲ میں دکھایا گیا ہے یہاں درج ذیل ہوگا۔

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

[۳] ایسا تفاعل (مثلاً گاوسی) جو کنویں سے باہر سرکتا ہو استعمال کرنا بے مقصد ہے، چونکہ آپ $\langle V\rangle = \infty$ حاصل کرتے ہیں اور مساوات ۷.۱ کچھ نہیں بتاتی۔



شکل ۱.۷: لامتناہی چوکور کنواں کے لئے آزمائشی تکونی تفاعل موج (مساوات ۷.۱۰)۔



شکل ۲.۷: تکونی تفاعل موج (شکل ۱.۷) کا تفرق۔

سیڑھی تفاعل کا تفرق ایک ڈیلٹا تفاعل ہے (سوال ۲.۲۴-ب دیکھیں):

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

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

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

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

اصول تغیریت انتہائی طاقتور اور استعمال کے نقطہ نظر سے شرمناک حد تک آسان ہے۔ کسی پیچیدہ سالمہ کی زمینی حال توانائی جاننے کے لئے ماہر کیمیا متعدد مقدار معلوم والا آزمائشی تفاعل موج منتخب کر کے ان مقدار معلوم کی قیمتیں تبدیل کرتے ہوئے $\langle H\rangle$ کی سب سے کم ممکنہ قیمت تلاش کرتا ہے۔ اصل تفاعل موج کے ساتھ ψ کی کوئی مشابہت نہ ہونے کی صورت میں بھی آپ کو E_{gs} کی حیرت کن حد تک درست قیمت حاصل ہو گی۔ ظاہر ہے، اگر آپ ψ کو اصل تفاعل کے جتنا زیادہ قریب منتخب کر پائیں، اتنا بہتر ہو گا۔ اس ترکیب کے ساتھ صرف ایک مسئلہ ہے: آپ کبھی بھی نہیں جان سکتے کہ آپ ہدف کے کتنے قریب ہیں؛ آپ صرف بالائی حد بندی جان پاتے ہو۔[4] مزید، اس روپ میں یہ ترکیب صرف زمینی حال کے لیے کارآمد ہے (البتہ سوال ۷.۴ دیکھیں)۔

[4] عملاً یہ بہت بڑا مسئلہ نہیں اور بعض اوقات درستگی کا اندازہ لگایا جا سکتا ہے۔ زمینی حال ہیلیم کو کئی با معنی ہندسوں تک اس طرح حل کیا گیا ہے۔

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

ا. خطی مخفیہ $V(x) = \alpha|x|$؛

ب. چوطاقت مخفیہ $V(x) = \alpha x^4$

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

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

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

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

سوال ۷.۴:

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

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

ب. آزمائشی تفاعل:

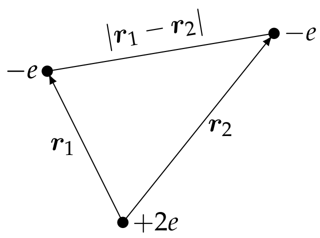
$$\psi(x) = Axe^{-bx^2}$$

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

سوال ۷.۵:

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

ب. آپ جزو-الف جانتے ہوئے توقع کریں گے کہ زمینی حال کی دو رتبی تصحیح لازماً منفی ہو گی۔ مساوات ۶.۱۵ کا معائنہ کرتے ہوئے تصدیق کریں کہ ایسا ہی ہو گا۔



شکل ۷.۳: ہیلیم جوہر۔

۷.۲ ہیلیم کا زمینی حال

ہیلیم جوہر (شکل ۷.۳) کے مرکزہ میں دو پروٹان (اور دو نیوٹران جو ہمارے مقصد سے غیر متعلقہ ہیں) پائے جاتے ہیں اور مرکزہ کے گرد مدار میں دو الیکٹران حرکت کرتے ہیں۔ (مہین ساخت اور باریک تصحیح نظر انداز کرتے ہوئے) اس نظام کی ہیملٹنی درج ذیل ہو گی۔

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

ہم نے زمینی حال توانائی E_{gs} کا حساب کرنا ہے۔ طبعی طور پر یہ دونوں الیکٹران اکھاڑنے کے لیے درکار توانائی کو ظاہر کرتی ہے۔ (E_{gs} جانتے ہوئے، ہم ایک الیکٹران اکھاڑنے کے لیے درکار "بارداریتی توانائی" معلوم کر سکتے ہیں (سوال ۷.۶ دیکھیں)۔ تجربہ گاہ میں ہیلیم کی زمینی حال توانائی کی قیمت کی پیمائش انتہائی زیادہ درستگی تک کی گئی ہے۔

$$E_{gs} = -78.975\,\text{eV} \qquad \text{(تجرباتی)} \tag{۷.۱۵}$$

ہم نظریہ سے اس عدد کو حاصل کرنا چاہیں گے۔

یہ تجسس کی بات ہے کہ ابھی تک اتنے سادہ اور اہم مسئلے کا ٹھیک حل نہیں ڈھونڈا جا سکا ہے۔[۵] الیکٹران الیکٹران دفع:

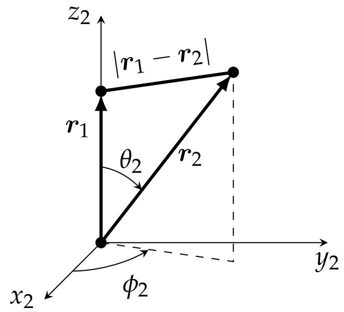
$$V_{ee} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} \tag{۷.۱۶}$$

مسئلہ پیدا کرتا ہے۔ اس جزو کو نظر انداز کرنے سے H دو ہائیڈروجن ہیملٹنیوں میں علیحدہ علیحدہ ہوتا ہے (تاہم مرکزوی بار e کی بجائے $2e$ ہو گا)؛ ٹھیک حل ہائیڈروجنی تفاعلات موج کا حاصل ضرب:

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

---

[۵] ہیلیم کے کیفی خدوخال والے، ایسے تین جسمی مسئلے پائے جاتے ہیں جن کا ٹھیک ٹھیک حل حاصل کیا جا سکتا ہے، تاہم ان میں مخفیے غیر کولمب ہیں (سوال ۷.۱۷ دیکھیں)۔



شکل ۷.۴: محدد کا انتخاب برائے $\boldsymbol{r}_2$ تکمل (مساوات ۷.۲۰)۔

ہوگا، اور توانائی $8E_1 = -109\,\text{eV}$ الیکٹران وولٹ (مساوات ۵.۳۱) ہوگی۔[۶] یہ $-79\,\text{eV}$ سے بہت مختلف ہے، تاہم یہ ابھی ابتدا ہے۔

ہم ψ_0 کو آزمائشی تفاعل موج لے کر E_{gs} کی بہتر تخمین اصول تغیریت سے حاصل کرتے ہیں۔ چونکہ یہ ہیملٹنی کے زیادہ تر حصے کا امتیازی تفاعل ہے:

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

لہٰذا یہ بہت بہتر انتخاب ہے۔ یوں درج ذیل ہوگا

$$\langle H \rangle = 8E_1 + \langle V_{ee} \rangle \tag{۷.۱۹}$$

جہاں درج ذیل ہے۔[۷]

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

میں $\boldsymbol{r}_2$ تکمل پہلے حل کرتا ہوں؛ اس مقصد کے لئے $\boldsymbol{r}_1$ مقررہ ہوگا، اور ہم $\boldsymbol{r}_2$ محددی نظام کو یوں رکھتے ہیں کہ اس کا قطبی محور $\boldsymbol{r}_1$ پر پایا جاتا ہو (شکل ۷.۴)۔ قانون کوسائن کے تحت

$$|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_2} \tag{۷.۲۱}$$

---

[۶] یہاں a سادہ رداس بوہر ہے اور n ویں بوہر توانائی $E_n = -13.6/n^2\,\text{eV}$ ہے؛ یاد رہے کہ ایک مرکزہ جس کا جوہری عدد Z ہو، کے لئے $E_n \to Z^2E_n$ اور $a \to a/Z$ ہوں گے (سوال ۴.۱۶)۔ مساوات ۷.۱۷ کے ساتھ وابستہ چکری تشکیل غیر تشاکلی (یک تا) ہوگی۔

[۷] آپ $H' = V_{ee}$ لیتے ہوئے مساوات ۷.۲۰ کا مفہوم اول رتبی نظریہ اضطراب لے سکتے ہیں۔ میں اس کو اس ترکیب کا غلط استعمال سمجھتا ہوں، چونکہ یہاں اضطراب اور غیر مضطرب ہیملٹنی ہم پلہ ہیں۔ اس وجہ سے میں اس کو تغیریتی حساب تصور کرتا ہوں، جس میں ہم E_{gs} کی بالائی حد بندی تلاش کرتے ہیں۔

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$I_2 \equiv \int \frac{e^{-4r^2/a}}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|}\,\mathrm{d}^3\,r_2 = \int \frac{e^{-4r^2/a}}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos\theta_2}} r_2^2 \sin\theta_2\,\mathrm{d}r_2\,\mathrm{d}\theta_2\,\mathrm{d}\phi_2 \tag{۷.۲۲}$$

متغیر ϕ_2 کا (نہایت آسان) تکمل 2π دے گا؛ متغیر θ_2 کا تکمل درج ذیل ہو گا۔

$$\begin{aligned}
\int_0^{\pi} \frac{\sin\theta_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos\theta_2}}\,\mathrm{d}\theta_2 &= \left.\frac{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos\theta_2}}{r_1r_2}\right|_0^{\pi} \\
&= \frac{1}{r_1r_2}\left(\sqrt{r_1^2 + r_2^2 + 2r_1r_2} - \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2}\right) \\
&= \frac{1}{r_1r_2}[(r_1 + r_2) - |r_1 - r_2|] = \begin{cases} 2/r_1 & r_2 < r_1 \\ 2/r_2 & r_2 > r_1 \end{cases}
\end{aligned} \tag{۷.۲۳}$$

یوں درج ذیل ہو گا۔

$$\begin{aligned}
I_2 &= 4\pi\left(\frac{1}{r_1}\int_0^{r_1} e^{-4r_2/a} r_2^2\,\mathrm{d}r_2 + \int_{r_1}^{\infty} e^{-4r_2/a} r_2\,\mathrm{d}r_2\right) \\
&= \frac{\pi a^3}{8r_1}\left[1 - \left(1 + \frac{2r_1}{a}\right)e^{-4r_1/a}\right]
\end{aligned} \tag{۷.۲۴}$$

اسی طرح $\langle V_{ee}\rangle$ درج ذیل ہو گا۔

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

زاویائی تکملات 4π دیں گے، جبکہ r_1 تکمل درج ذیل ہو گا۔

$$\int_0^{\infty}\left[re^{-4r/a} - \left(r + \frac{2r^2}{a}\right)e^{-8r/a}\right]\mathrm{d}r = \frac{5a^2}{128}$$

یوں، آخر کار

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

جس کی بنا پر درج ذیل ہو گا۔

$$\langle H\rangle = -109\,\mathrm{eV} + 34\,\mathrm{eV} = -75\,\mathrm{eV} \tag{۷.۲۶}$$

یہ جواب زیادہ برا نہیں ہے (یاد رہے، تجرباتی قیمت $-79\,\text{eV}$ ہے)۔ تاہم ہم اس سے بہتر جواب حاصل کر سکتے ہیں۔

ہم ψ_0 (جو دو الیکٹرانوں کو یوں تصور کرتا ہے جیسے یہ ایک دوسرے پر بالکل اثر انداز نہیں ہوتے) سے بہتر زیادہ حقیقت پسند آزمائشی تفاعل سوچ سکتے ہیں۔ ایک الیکٹران کے دوسرے الیکٹران پر اثر کو مکمل نظر انداز کرنے کی بجائے، ہم ایک الیکٹران کو اوسطاً منفی بار کا بادل تصور کرتے ہیں، جو مرکزہ کو جزوی طور پر سپر (پناہ) کرتا ہے، جس کی بنا پر دوسرے الیکٹران کو موثر مرکزوی بار (Z) کی قیمت 2 سے کچھ کم نظر آتی ہے۔ یہ تصور ہمیں آمادہ کرتی ہے کہ ہم درج ذیل روپ کا آزمائشی تفاعل استعمال کریں۔

$$\psi_1(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\frac{Z^3}{\pi a^3}e^{-Z(r_1+r_2)/a} \tag{۷.۲۷}$$

ہم Z کو تغیری مقدار معلوم تصور کر کے اس کی وہ قیمت منتخب کرتے ہیں جو H کی قیمت کمتر بناتی ہو (دھیان رہے کہ تغیریت ترکیب میں کبھی بھی ہیملٹنی تبدیل نہیں کی جاتی؛ ہیلیم کی ہیملٹنی مساوات ۷.۱۴ دیتی ہے اور دیتی رہے گی۔ البتہ ہیملٹنی کی تخمینی قیمت کے بارے میں سوچ کر بہتر آزمائشی تفاعل موج حاصل کرنا جائز ہے)۔

یہ تفاعل موج اس "غیر مضطرب" ہیملٹنی (الیکٹران دفع نظر انداز کیا گیا ہے) کا امتیازی حال ہے جس کے کولمب اجزاء میں 2 کی بجائے Z ہے۔ اس کو ذہن میں رکھتے ہوئے، ہم H (مساوات ۷.۱۴) کو درج ذیل روپ میں لکھتے ہیں۔

$$\begin{aligned}H=&-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2+\nabla_2^2)-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{Z}{r_1}+\frac{Z}{r_2}\right)\\&+\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{(Z-2)}{r_1}+\frac{(Z-2)}{r_2}+\frac{1}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}\right)\end{aligned} \tag{۷.۲۸}$$

ظاہر ہے کہ H کی تحقیقاتی قیمت درج ذیل ہو گی۔

$$\langle H\rangle=2Z^2E_1+2(Z-2)\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle+\langle V_{ee}\rangle \tag{۷.۲۹}$$

یہاں $\langle 1/r\rangle$ سے مراد (یک ذروی) ہائیڈروجنی زمینی حال ψ_{100} (جس میں مرکزوی بار Z ہو) میں $1/r$ کی توقعاتی قیمت ہے؛ مساوات ۶.۵۵ کے تحت درج ذیل ہو گا۔

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle=\frac{Z}{a} \tag{۷.۳۰}$$

یہاں بھی V_{ee} کی توقعاتی قیمت وہی ہو گی جو پہلے تھی (مساوات ۷.۲۵)، لیکن اب ہم $Z=2$ کی بجائے اختیاری Z استعمال کرنا چاہتے ہیں؛ لہٰذا ہم a کو $2/Z$ سے ضرب دیتے ہیں۔

$$\langle V_{ee}\rangle=\frac{5Z}{8a}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)=-\frac{5Z}{4}E_1 \tag{۷.۳۱}$$

ان تمام کو اکٹھے کر کے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\langle H\rangle = \left[2Z^2 - 4Z(Z-2) - (5/4)Z\right]E_1 = [-2Z^2 + (27/4)Z]E_1 \tag{۷.۳۲}$$

اصول تغیریت کے تحت Z کی کسی بھی قیمت کے لیے یہ مقدار E_{gs} سے تجاوز کرے گی۔ بالائی حد بندی کی سب سے کم قیمت تب پائی جائے گی جب $\langle H\rangle$ کی قیمت کمتر ہو:

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

جس سے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$Z = \frac{27}{16} = 1.69 \tag{۷.۳۳}$$

یہ ایک معقول نتیجہ نظر آتا ہے؛ جو کہتا ہے دوسرا الیکٹران مرکزہ کو سپر کرتا ہے جس کی بنا پر مرکزہ کا موثر بار 2 کی بجائے 1.69 نظر آتا ہے۔ اس قیمت کو Z لیتے ہوئے درج ذیل ہو گا۔

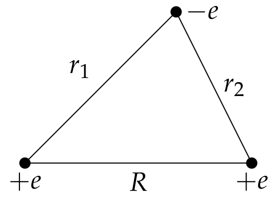
$$\langle H\rangle = \frac{1}{2}\left(\frac{3}{2}\right)^6 E_1 = -77.5\,\mathrm{eV} \tag{۷.۳۴}$$

قابل تبدیل مقدار معلوم کی تعداد بڑھا کر، زیادہ پیچیدہ آزمائشی تفاعل موج استعمال کرتے ہوئے، ہیلیم کی زمینی حال توانائی کو اس طرح انتہائی زیادہ درستگی تک حاصل کیا گیا ہے۔ ہم اصل جواب کے دو فی صد سے بھی کم قریب ہیں، لہٰذا اس کو یہی پر چھوڑتے ہیں۔[8]

سوال ۷.۶: ہیلیم کی زمینی حال توانائی $E_{gs} = -79\,\mathrm{eV}$ لیتے ہوئے بارداریتی توانائی (صرف ایک الیکٹران اکھاڑنے کے لیے درکار توانائی) کا حساب کریں۔ اشارہ: پہلے ہیلیم باردارے He^+، جس کے مرکزہ کے گرد صرف ایک الیکٹران مدار میں حرکت کرتا ہے، کی زمینی حال توانائی تلاش کریں؛ اس کے بعد دونوں توانائیوں کا فرق لیں۔

سوال ۷.۷: اس حصہ میں مستعمل ترکیبات کا اطلاق H^- اور Li^+ باردارے پر کریں (جن میں ہیلیم کی طرح دو الیکٹران پائے جاتے ہیں، لیکن مرکزوی بار بالترتیب $Z = 1$ اور $Z = 3$ ہیں)۔ ایک ایک باردارے کا موثر (جزوی سپر شدہ) مرکزوی بار تلاش کر کے، E_{gs} کی بہترین بالائی حد بندی تعین کریں۔ تبصرہ: باردارے H^- کی صورت میں آپ دیکھیں گے کہ $\langle H\rangle > -13.6\,\mathrm{eV}$ ہے، جس کے تحت مقید حال نہیں ہو گا، چونکہ توانائی کے نقطہ نظر سے زیادہ بہتر صورت حال یہ ہو گی کہ ایک الیکٹران نکل کر اڑ جائے اور پیچھے معادل ہائیڈروجن جوہر چھوڑے۔ یہ حیرت کی بات نہیں چونکہ ہیلیم کے لحاظ سے مرکزہ کے ساتھ الیکٹران کی قوت کشش کم ہے، اور الیکٹران کی باہم دافع قوت جوہر کو توڑنا چاہتی ہے۔ البتہ، حقیقت میں یہ سب غلط ہے۔ زیادہ نفیس آزمائشی تفاعل (سوال ۷.۲۰ دیکھیں) استعمال کرتے ہوئے دکھایا جا سکتا ہے کہ $E_{gs} < -13.6\,\mathrm{eV}$ ہے، لہٰذا مقید

[8] ایسا آزمائشی تفاعل، جو زمینی حال کو عمودی ہو، منتخب کر کے ہیلیم کا پہلا ہیجان حال اسی طرح حاصل کیا جا سکتا ہے۔



شکل ۷.۵: ہائیڈروجن سالمہ باردار یہ، H_2^+

حال موجود ہو گا۔ تاہم، یہ بشکل مقید ہے، اور ہیجان حال نہیں پائے جاتے، اور یوں H^- کا کوئی غیر مسلسل طیف نہیں پایا جاتا (تمام استمراریہ سے اور استمراریہ میں ہوں گے)۔ نتیجتاً، تجربہ گاہ میں اس کا مطالعہ کرنا دشوار ہوتا ہے، اگرچہ سورج کی سطح پر یہ وافر مقدار میں پائے جاتے ہیں۔

۷.۳ ہائیڈروجن سالمہ باردار یہ

اصول تغیریت کا ایک اور کلاسیکی استعمال ہائیڈروجن سالمہ باردار یہ، H_2^+، جو دو پروٹان کے کولمب میدان میں ایک الیکٹران پر مشتمل ہے،، کا معائنہ ہے (شکل ۷.۵)۔ میں فی الوقت فرض کرتا ہوں کہ دونوں پروٹان کا مقام مقررہ، اور ان کے بیچ فاصلہ R ہے، اگرچہ اس حساب کا ایک دلچسپ ذیلی نتیجہ R کی اصل قیمت ہو گی۔ ہیملٹنی درج ذیل ہے

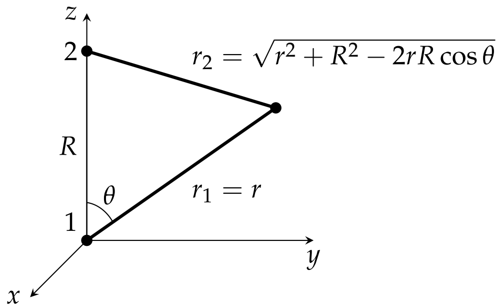
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right) \tag{۷.۳۵}$$

جہاں الیکٹران سے متعلقہ پروٹان تک فاصلے r_1 اور r_2 ہیں۔ ہمیشہ کی طرح ہم کوشش کریں گے کہ ایک معقول آزمائشی تفاعل موج منتخب کر کے زمینی حال توانائی کی حد بندی اصول تغیریت سے دریافت کریں۔ (درحقیقت، ہماری دلچسپی یہ جاننے میں ہے کہ آیا اس نظام میں بندھن پیدا ہو گی؛ یعنی کیا ایک معادل ہائیڈروجن جوہر جمع ایک آزاد پروٹان سے اس نظام کی توانائی کم ہو گی۔ اگر ہمارا آزمائشی تفاعل موج دکھائے کہ مقید حال پایا جاتا ہے، اس سے بہتر آزمائشی تفاعل اس بندھ کو صرف زیادہ طاقتور بنا سکتا ہے۔)

آزمائشی تفاعل موج تیار کرنے کی خاطر فرض کریں کہ زمینی حال (مساوات ۴.۸۰)

$$\psi_0(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}e^{-r/a} \tag{۷.۳۶}$$

میں ہائیڈروجن جوہر کے قریب فاصلہ R پر، دوسرا پروٹان "لامتناہی" سے لا کر رکھتے ہوئے باردار یہ پیدا کیا جاتا ہے۔ اگر رداس بوہر سے R کافی زیادہ ہو تب الیکٹران کا تفاعل موج غالباً زیادہ تبدیل نہیں ہو گا۔ تاہم ہم دونوں پروٹان کو ایک نظر سے دیکھنا چاہیں گے، لہٰذا دونوں کے ساتھ الیکٹران کی وابستگی کا احتمال ایک جیسا ہو گا۔ یوں ہم



شکل ۷.۶: مقدار I کے حساب کی خاطر محدد (مساوات ۷.۳۹)۔

آمادہ ہوتے ہیں کہ درج ذیل روپ کا آزمائشی تفاعل استعمال کریں۔

$$\psi = A[\psi_0(r_1) + \psi_0(r_2)] \tag{۷.۳۷}$$

(چونکہ ہم سالماتی تفاعل موج کو جوہری مداروں کا خطی جوڑ لکھتے ہیں لہٰذا ماہر کوانٹائی کیمیا اس کو **جوہری مداروں کی خطی جوڑ ترکیب**[۹] کہتے ہیں۔)

پہلا کام آزمائشی تفاعل کی معمول زنی ہے۔

$$\begin{aligned}1 = \int |\psi|^2 \,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = |A|^2 \Big[\int |\psi_0(r_1)|^2 \,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \\ + \int |\psi_0(r_2)|^2 \,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} + 2\int \psi_0(r_1)\psi_0(r_2)\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\Big]\end{aligned} \tag{۷.۳۸}$$

پہلے دو تکملات 1 ہیں (چونکہ ψ_0 معمول شدہ ہے)؛ تیسرا زیادہ پیچیدہ ہے۔ درج ذیل لیں۔

$$I \equiv \langle \psi_0(r_1)|\psi_0(r_2)\rangle = \frac{1}{\pi a^3}\int e^{-(r_1+r_2)/a}\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{۷.۳۹}$$

ایسا محددی نظام کھڑا کرکے، جس کے مبدا پر پروٹان 1 اور z محور پر R فاصلے پر پروٹان 2 ہو (شکل ۷.۶)،

$$r_1 = r \quad \text{اور} \quad r_2 = \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR\cos\theta} \tag{۷.۴۰}$$

ہوں گے لہٰذا درج ہو گا۔

$$I = \frac{1}{\pi a^3}\int e^{-r/a} e^{-\frac{\sqrt{r^2+R^2-2rR\cos\theta}}{a}}\, r^2 \sin\theta \,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi \tag{۷.۴۱}$$

---
[۹] LCAO technique

متغیر ϕ کا (نہایت آسان) تکمل 2π دے گا۔ متغیر θ کا تکمل کرنے کی خاطر درج ذیل لیں۔

$$y \equiv \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR\cos\theta} \quad \Rightarrow \quad \mathrm{d}(y^2) = 2y\,\mathrm{d}y = 2rR\sin\theta\,\mathrm{d}\theta$$

تب درج ذیل ہو گا۔

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

اب تکمل r با آسانی حل ہو گا۔

$$\begin{aligned}I = \frac{2}{a^2R}\Big[-e^{-R/a}\int_0^{\infty}(r+R+a)e^{-2r/a} r\,\mathrm{d}r + e^{-R/a}\int_0^{R}(R-r+a)r\,\mathrm{d}r \\ + e^{R/a}\int_R^{\infty}(r-R+a)e^{-2r/a} r\,\mathrm{d}r\Big]\end{aligned}$$

ان تکملات کی قیمتوں کے حساب کے بعد الجبرائی تسہیل سے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$I = e^{-R/a}\Big[1 + \Big(\frac{R}{a}\Big) + \frac{1}{3}\Big(\frac{R}{a}\Big)^2\Big] \tag{۷.۴۲}$$

ہم I کو **ڈھانپائی تکمل**[10] کہتے ہیں؛ جو $\psi_0(r_1)$ کے $\psi_0(r_2)$ پر چڑھنے کی مقدار کی پیمائش ہے (دھیان رہے کہ $R \to 0$ کی صورت میں یہ 1 کو، اور $R \to \infty$ کی صورت 0 کو پہنچتا ہے)۔ ڈھانپائی تکمل I کی صورت میں مستقل معمول زنی (مساوات ۷.۳۸) درج ذیل ہو گا۔

$$|A|^2 = \frac{1}{2(1+I)} \tag{۷.۴۳}$$

اس کے بعد ہمیں آزمائشی حال ψ میں H کی توقعاتی قیمت کا حساب کرنا ہو گا۔ یاد رہے کہ

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

ہو گا (جہاں $E_1 = -13.6\,\mathrm{eV}$ جوہری ہائیڈروجن کی زمینی حال توانائی ہے)؛ اور r_1 کی جگہ r_2 کے لئے بھی ایسا ہی ہو گا؛ لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

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

[10] overlap integral

یوں H کی توقعاتی قیمت درج ذیل ہو گی۔

$$\langle H\rangle = E_1 - 2|A|^2\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\left[\langle\psi_0(r_1)\left|\frac{1}{r_2}\right|\psi_0(r_1)\rangle + \langle\psi_0(r_1)\left|\frac{1}{r_1}\right|\psi_0(r_2)\rangle\right] \tag{۷.۴۴}$$

میں آپ کے لئے باقی دو مقدار جو **بلا واسطہ تکمل**[11]:

$$D \equiv a\langle\psi_0(r_1)\left|\frac{1}{r_2}\right|\psi_0(r_1)\rangle \tag{۷.۴۵}$$

اور **مبادلہ تکمل**[12]:

$$X \equiv a\langle\psi_0(r_1)\left|\frac{1}{r_1}\right|\psi_0(r_2)\rangle \tag{۷.۴۶}$$

کہلاتے ہیں، حل کرنے کے لئے چھوڑتا ہوں۔ بلاواسطہ تکمل کا نتیجہ:

$$D = \frac{a}{R} - \left(1+\frac{a}{R}\right)e^{-2R/a} \tag{۷.۴۷}$$

اور مبادلہ تکمل کا نتیجہ درج ذیل ہے (سوال ۷.۸ دیکھیں)۔

$$X = \left(1+\frac{R}{a}\right)e^{-R/a} \tag{۷.۴۸}$$

ان تمام نتائج کو اکٹھے کرتے ہوئے اور (مساوات ۷.۴۰ اور مساوات ۷.۴۲ کو) یاد کرتے ہوئے کہ $E_1 = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{2a}$ ہے، ہم درج ذیل اخذ کرتے ہیں۔

$$\langle H\rangle = \left[1+2\frac{(D+X)}{(1+I)}\right]E_1 \tag{۷.۴۹}$$

اصول تغیریت کے تحت، زمینی حال توانائی $\langle H\rangle$ سے کم ہو گی۔ یقیناً، یہ صرف الیکٹران کی توانائی ہے؛ اس کے علاوہ پروٹان پروٹان دفع سے وابستہ مخفی توانائی:

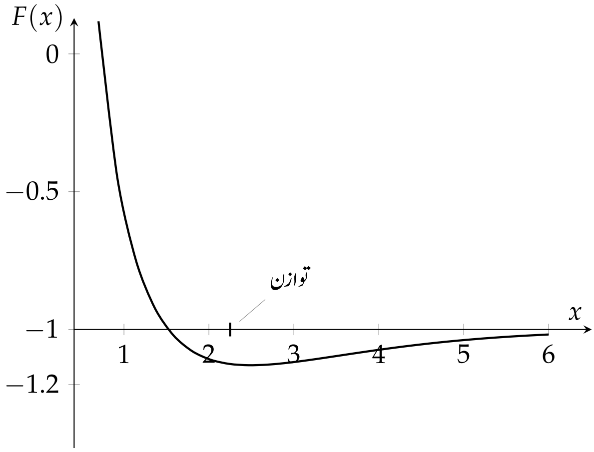
$$V_{pp} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{R} = -\frac{2a}{R}E_1 \tag{۷.۵۰}$$

بھی پائی جاتی ہے۔ یوں نظام کی کل توانائی ($-E_1$ کی اکائیوں میں)، $x \equiv R/a$ کا تفاعل لکھتے ہوئے، درج ذیل سے کم ہو گی۔

$$F(x) = -1 + \frac{2}{x}\left\{\frac{(1-(2/3)x^2)e^{-x} + (1+x)e^{-2x}}{1+(1+x+(1/3)x^2)e^{-x}}\right\} \tag{۷.۵۱}$$

---

[11] directintegral
[12] exchangeintegral



شکل ۷.۷: تفاعل $F(x)$ (مساوات ۷.۵۱) کی ترسیم مقید حال کی موجودگی دکھاتی ہے (بوہر رداس کی اکائیوں میں x دو پروٹان کے بیچ فاصلہ ہے)۔

اس تفاعل کو شکل ۷.۷ میں ترسیم کیا گیا ہے۔ اس ترسیم کا کچھ حصہ -1 سے نیچے ہے، جہاں معادل جوہر جمع ایک آزاد پروٹان کی توانائی ($-13.6\,\text{eV}$) سے کم ہے، لہٰذا اس نظام میں بندھ پیدا ہو گا۔ یہ ایک شریک گرفتی بندھ ہو گا، جہاں الیکٹران دونوں پروٹان کا برابر شریک ہو گا۔ پروٹان کے بیچ توازنی فاصلہ تقریباً 2.4 رداس بوہر، یعنی $0.13\,\text{nm}$ ہے (تجرباتی قیمت $0.106\,\text{nm}$ ہے)۔ بندشی توانائی کے حساب سے حاصل قیمت $1.8\,\text{eV}$، جبکہ پیمائشی قیمت $2.8\,\text{eV}$ ہے (اصول تغیریت ہمیشہ زمینی حال توانائی سے تجاوز کرتا ہے، لہٰذا یہ طاقت بندھ کی کم قیمت دے گا؛ بہر حال اس کی فکر نہ کریں:) یہاں اہم نقطہ یہ ہے کہ بندھ پایا جاتا ہے؛ بہتر تغیری تفاعل اس مخفیہ کو مزید گہرا بنائے گا۔

سوال ۷.۸: بلاواسطہ تکمل D اور مبادلہ تکمل X مساوات ۷.۴۵ اور مساوات ۷.۴۶ کی قیمتیں تلاش کریں۔ اپنے جوابات کا موازنہ مساوات ۷.۴۷ اور مساوات ۷.۴۸ کے ساتھ کریں۔

سوال ۷.۹: فرض کریں ہم نے آزمائشی تفاعل موج (مساوات ۷.۳۷) میں منفی علامت استعمال کی ہوتی۔

$$\psi = A[\psi_0(r_1) - \psi_0(r_2)] \tag{۷.۵۲}$$

کوئی نیا تکمل حل کیے بغیر (مساوات ۷.۵۱ کا مماثل) $F(x)$ معلوم کر کے ترسیم کریں۔ دکھائیں کہ ایسی صورت میں بندھ پیدا ہونے کا کوئی ثبوت نہیں ملتا۔[13] (چونکہ اصول تغیریت صرف بالائی حد بندی دیتا ہے، لہٰذا اس سے یہ ثابت نہیں ہو گا کہ ایسے حال میں بندھ نہیں پایا جائے گا، تاہم اس سے زیادہ امید بھی نہیں کرنی

[13] بندھن اس صورت پیدا ہوتا ہے جب دو پروٹان کے بیچ رہنے کو الیکٹران ترجیح دیتا ہو، اور ان کے بیچ رہ کر یہ دونوں پروٹان کو اندر جانب کھینچتا ہے۔ لیکن طاق خطی جوڑ (مساوات ۷.۵۲) کا وسط میں عقدہ پایا جاتا ہے، لہٰذا حیرانی کی بات نہیں کہ یہ تشکیل پروٹان کو ایک دوسرے سے دور کرتی ہے۔

چاہیے۔) تبصرہ: درحقیقت درج ذیل روپ کے ہر تفاعل

$$\psi = A[\psi_0(r_1) + e^{i\phi}\psi_0(r_2)] \tag{۷.۵۳}$$

کی خاصیت یہ ہے کہ الیکٹران دونوں پروٹان کے ساتھ برابر کا وابستگی رکھتا ہے۔ تاہم، چونکہ باہمی ادل بدل $P : r_1 \leftrightarrow r_2$ کی صورت میں ہیملٹنی (مساوات ۷.۳۵) غیر متغیر ہے، لہٰذا اس کے امتیازی تفاعلات کو بیک وقت P کے امتیازی تفاعلات چنا جا سکتا ہے۔ امتیازی قیمت $+1$ کے ساتھ مثبت علامت (مساوات ۷.۳۷) اور امتیازی قیمت -1 کے ساتھ منفی علامت (مساوات ۷.۵۲) ہو گی۔ زیادہ عمومی صورت (مساوات ۷.۵۳) کے استعمال سے مزید فائدہ نہیں ہو گا؛ آپ چاہیں تو اسے استعمال کر کے دیکھ سکتے ہیں۔

سوال ۷.۱۰: نقطہ توازن پر $F(x)$ کے دوہرا تفرق سے ہائیڈروجن سالمہ باردارسیہ (حصہ ۲.۳ دیکھیں) میں دونوں پروٹان کے ارتعاش کی قدرتی تعدد (ω) کی اندازاً قیمت تلاش کی جا سکتی ہے۔ اگر اس مرتعش کی زمینی حال توانائی $(\hbar\omega/2)$ نظام کی بندشی توانائی سے زیادہ ہو، تب نظام بکھر کر ٹوٹ جائے گا۔ دکھائیں کہ حقیقت میں مرتعش توانائی اتنی کم ہے کہ ایسا کبھی بھی نہیں ہو گا، اور ساتھ ہی مقید لرزشی سطحوں کی اندازاً تعداد دریافت کریں۔ تبصرہ: آپ تحلیلی طور پر نقطہ اقل، یا اس نقطہ پر دوہرا تفرق حاصل نہیں کر پائیں گے۔ اعدادی طریقہ یا کمپیوٹر کی مدد سے ایسا کریں۔

اضافی سوالات برائے باب ۷

سوال ۷.۱۱:

ا. درج ذیل روپ کا آزمائشی تفاعل موج

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

استعمال کرتے ہوئے یک بُعدی ہارمونی مرتعش کی زمینی حال توانائی کی حد بندی تلاش کریں۔ متغیر a کی "بہترین" قیمت کیا ہو گی؟ $\langle H \rangle_{\text{اقل}}$ کا موازنہ اصل توانائی سے کریں۔ تبصرہ: آزمائشی تفاعل میں $\pm a/2$ پر ایک "بل" (غیر استمراری تفرق) پایا جاتا ہے؛ کیا آپ کو اس سے نمٹنا ہو گا، جیسا مجھے مثال ۷.۳ میں کرنا پڑا؟

ب. وقفہ $(-a, a)$ پر $\psi(x) = B\sin(\pi x/a)$ استعمال کرتے ہوئے پہلے ہیجان حال کی حد بندی تلاش کریں۔ اپنے جواب کا اصل جواب سے موازنہ کریں۔

سوال ۷.۱۲:

ا. درج ذیل آزمائشی تفاعل موج

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

جہاں n اختیاری مستقل ہے، استعمال کرتے ہوئے سوال ۲.۷ کو عمومیت دیں۔ جزوی جواب: مقدار معلوم b کی بہترین قیمت درج ذیل دے گی۔

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

ب. ہارمونی مرتعش کے پہلے ہیجان حال کی بالائی حد بندی کی سب سے کم قیمت درج ذیل آزمائشی تفاعل استعمال کرتے ہوئے معلوم کریں۔

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

جزوی جواب: مقدار معلوم b کی بہترین قیمت درج ذیل دے گی۔

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

ج. آپ دیکھیں گے کہ $n \to \infty$ سے حد بندیاں بالکل ٹھیک توانائیوں تک پہنچتی ہیں۔ ایسا کیوں ہے؟ اشارہ: آزمائشی تفاعلات موج کو $n = 2$ ، $n = 3$ اور $n = 4$ کے لیے ترسیم کرتے ہوئے ان کا موازنہ اصل تفاعلات موج (مساوات ۲.۵۹ اور مساوات ۲.۶۲) کے ساتھ کریں۔ تحلیلی طور پر ایسا کرنے کی خاطر درج ذیل مماثل سے آغاز کریں۔

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

سوال ۷.۱۳: ہائیڈروجن کے زمینی حال کی سب سے کم حد بندی، گاوسی آزمائشی موج تفاعل:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = Ae^{-br^2}$$

استعمال کرتے ہوئے تلاش کریں، جہاں A معمول زنی سے تعین ہو گا، جبکہ b قابل تبدیل مقدار معلوم ہے۔ جواب: $-11.5\,\text{eV}$

سوال ۷.۱۴: اگر نوریہ کی کمیت غیر صفر $(m_\gamma \neq 0)$ ہوتی تب مخفیہ کی جگہ **یوکاوا مخفیہ**:[۱۴]

$$V(\boldsymbol{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^{-\mu r}}{r} \tag{۷.۵۴}$$

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

---

[۱۴] Yukawapotential

سوال ۷.۱۵: فرض کریں آپکو ایسا کوانٹائی نظام دیا جاتا ہے جس کا ہیملٹنی H_0 صرف دو امتیازی حالات ψ_a (جس کی توانائی E_a ہے) اور ψ_b (جس کی توانائی E_b ہے) کا حامل ہے۔ یہ حالات عمودی معمول شدہ اور غیر انحطاطی ہیں (دونوں توانائیوں میں E_a کو کم تصور کریں)۔ اب ہم اضطراب H' جس کے قالبی ارکان درج ذیل ہیں چالو کرتے ہیں، جہاں h کوئی مخصوص مستقل ہے۔

$$\langle\psi_a|H'|\psi_a\rangle = \langle\psi_b|H'|\psi_b\rangle = 0; \quad \langle\psi_a|H'|\psi_b\rangle = \langle\psi_b|H'|\psi_a\rangle = h \tag{۷.۵۵}$$

ا. مضطرب ہیملٹنی کی امتیازی قیمتیں ٹھیک ٹھیک تلاش کریں۔

ب. دوم رتبی نظریہ اضطراب استعمال کرتے ہوئے مضطرب نظام کی توانائیوں کی اندازاً قیمت معلوم کریں۔

ج. مضطرب نظام کی زمینی حال توانائی کی اندازاً قیمت درج ذیل روپ کا آزمائشی تفاعل، جہاں ϕ قابل تبدیل مقدار معلوم ہے

$$\psi = (\cos\phi)\psi_a + (\sin\phi)\psi_b \tag{۷.۵۶}$$

استعمال کرکے اصول تغیریت سے حاصل کریں۔ تبصرہ: خطی جوڑیوں لکھنے سے ψ لازماً معمول شدہ ہو گا۔

د. اپنے جوابات کا جزو الف، ب، اور ج کے ساتھ موازنہ کریں۔ یہاں اصول تغیریت اتنا زیادہ درست کیوں ہے ؟

سوال ۷.۱۶: ہم سوال ۷.۱۵ میں تیار کی گئی ترکیب کی مثال کے طور پر، یکساں مقناطیسی میدان $\boldsymbol{B} = B_z\hat{k}$ میں ایک ساکن الیکٹران پر غور کرتے ہیں، جس کی ہیملٹنی (مساوات ۴.۱۵۸) درج ذیل ہو گی۔

$$H_0 = \frac{eB_z}{m}S_z \tag{۷.۵۷}$$

امتیازی چکر کار χ_a اور χ_b اور ان کی مطابقتی توانائیاں E_a اور E_b مساوات ۴.۱۶۱ میں دی گئی ہیں۔ اب ہم x رخ درج ذیل روپ کے یکساں میدان

$$H' = \frac{eB_x}{m}S_x \tag{۷.۵۸}$$

کا اضطراب چالو کرتے ہیں۔

ا. اضطراب H' کے قالبی ارکان تلاش کرکے تصدیق کریں کہ ان کی ساخت مساوات ۷.۵۵ کی طرح ہے۔ یہاں h کیا ہو گا؟

ب. دوم رتبی نظریہ اضطراب میں نئی زمینی حال توانائی کو سوال ۷.۱۵-ب کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے تلاش کریں۔

ج. زمینی حال توانائی کی اصول تغیریت حد بندی، سوال ۷.۱۵-ج کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے معلوم کریں۔

سوال ۷.۱۷: اگرچہ ہیلیم کے لیے مساوات شروڈنگر کا اصل حل تلاش نہیں کیا جا سکتا، ایسے "ہیلیم نما" نظام پائے جاتے ہیں جن کے اصل حل پائے جاتے ہیں۔ اس کی ایک سادہ مثال "ربڑی ہیلیم" ہے جس میں کولمب قوتوں کی بجائے قانون ہک کی درج ذیل قوتیں استعمال کی جاتی ہیں۔

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(r_1^2 + r_2^2) - \frac{\lambda}{4}m\omega^2|\boldsymbol{r_1} - \boldsymbol{r_2}|^2 \tag{۷.۵۹}$$

ا. دکھائیں کہ $\boldsymbol{r_1}$، $\boldsymbol{r_2}$ کی بجائے متغیرات

$$\boldsymbol{u} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{r_1} + \boldsymbol{r_2}), \quad \boldsymbol{v} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{r_1} - \boldsymbol{r_2}) \tag{۷.۶۰}$$

استعمال کرنے سے ہیملٹنی دو علیحدہ علیحدہ تین ابعادی ہارمونی مرتعشات:

$$H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_u^2 + \frac{1}{2}m\omega^2u^2\right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_v^2 + \frac{1}{2}(1-\lambda)m\omega^2v^2\right] \tag{۷.۶۱}$$

میں تقسیم ہو گی۔

ب. اس نظام کی اصل زمینی حال توانائی کیا ہو گی؟

ج. اصل حل نہ جاننے کی صورت میں ہم ہیملٹنی کی اصل صورت (مساوات ۷.۵۹) پر حصہ ۷.۲ کی ترکیب استعمال کرنا چاہیں گے۔ ایسا (سپر کرنے کو نظر انداز کرتے ہوئے) ہوئے کریں۔ اپنے نتیجے کا اصل جواب کے ساتھ موازنہ کریں۔ جواب: $\langle H\rangle = 3\hbar\omega(1-\lambda/4)$

سوال ۷.۱۸: ہم نے سوال ۷.۷ میں دیکھا کہ سپر مہیا کرتا ہوا آزمائشی تفاعل (مساوات ۷.۲۷) جو ہیلیم کے لئے عمدہ ثابت ہوا، منفی ہائیڈروجن باردار یہ میں مقید حال کی تصدیق کرنے کے لیے کافی نہیں ہے۔ چندر شیکھر نے درج ذیل روپ کا آزمائشی تفاعل موج استعمال کیا

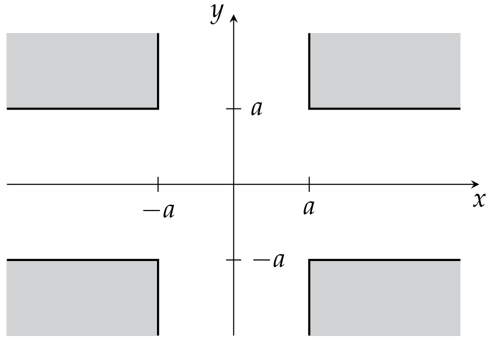
$$\psi(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r_2}) \equiv A[\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) + \psi_2(r_1)\psi_1(r_2)] \tag{۷.۶۲}$$

جہاں درج ذیل ہیں۔

$$\psi_1(r) \equiv \sqrt{\frac{Z_1^3}{\pi a^3}}e^{-Z_1r/a}, \quad \psi_2(r) \equiv \sqrt{\frac{Z_2^3}{\pi a^3}}e^{-Z_2r/a} \tag{۷.۶۳}$$

یعنی، انہوں نے دو مختلف سپر اجزائے ضربی کی اجازت دی، جہاں ایک الیکٹران کو مرکزہ کے قریب اور دوسرے کو مرکزہ سے دور تصور کیا گیا۔ (چونکہ الیکٹران متماثل ذرات ہیں، لہٰذا فضائی تفاعل موج کو باہمی مبادلہ کے لحاظ سے لازماً تشاکلی بنانا ہو گا۔ چکری حال، جس کا موجودہ حساب میں کوئی کردار نہیں، خلاف تشاکلی ہے۔) دکھائیں کہ قابل تبدیل مقدار معلوم Z_1 اور Z_2 کی قیمتوں کو سوچ سمجھ کر منتخب کرنے سے $\langle H\rangle$ کی قیمت $-13.6\,\text{eV}$ سے کم حاصل کی جا سکتی ہے۔ جواب:

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



شکل ۷.۸: صلیبی شکل کا خطہ برائے سوال ۷.۲۰

جہاں $x \equiv Z_1 + Z_2$ اور $y \equiv 2\sqrt{Z_1 Z_2}$ ہیں۔ چندر شیکھر نے $Z_1 = 1.039$ (چونکہ یہ 1 سے بڑا ہے، لہٰذا اس کو موثر مرکزوی بار تصور نہیں کیا جا سکتا ہے، تاہم اس کے باوجود اس کو آزمائشی تفاعل موج قبول کیا جا سکتا ہے) اور $Z_2 = 0.283$ استعمال کیے۔

سوال ۷.۱۹: مرکزوی اختلاط برقرار رکھنے میں بنیادی مسئلہ، دو ذرات (مثلاً دو ڈیوٹیران) کو ایک دوسرے کے اتنے قریب لانا ہے، کہ کولمب دافع قوت پر ان کے بیچ (قریب اثر) کششی مرکزوی قوتیں سبقت لے جائیں۔ ہم ذرات کو شاندار درجہ حرارت تک گرم کر کے، بلا منصوبہ تصادم کے ذریعے انہیں ایک دوسرے کے قریب زبردستی لا سکتے ہیں۔ دوسری تجویز **میوان عمل انگیزی**[15] ہے، جس میں ہم پروٹان کی جگہ ڈیوٹیران اور الیکٹران کی جگہ میون رکھ کر "ہائیڈروجن سالمہ باردار" تیار کرتے ہیں۔ اس ساخت میں ڈیوٹیران کے بیچ توازنی فاصلے کی پیشگوئی کریں، اور سمجھائیں کہ اس مقصد کی خاطر الیکٹران سے میون کیوں بہتر ثابت ہو گا۔

سوال ۷.۲۰: **کوانٹائی نقطے**[16] فرض کریں ایک ذرے کو شکل ۷.۸ میں دکھائے گئے دو ابعادی صلیبی شکل کے خطہ پر حرکت کرنے کا پابند بنایا جاتا ہے۔ صلیب کی "شاخیں" لامتناہی تک پہنچتی ہیں۔ صلیب کے اندر مخفیہ صفر جبکہ باہر سایہ دار خطوں میں لامتناہی ہے۔ حیرانی کی بات ہے کہ یہ تشکیل مثبت توانائی مقید حال کی حامی ہے۔[17]

ا. دکھائیں کہ سب سے کم توانائی جو لامتناہی کی طرف حرکت کر سکتی ہے درج ذیل ہے؛

$$E_{\text{دہلیز}} = \frac{\pi^2\hbar^2}{8ma^2}$$

اس سے کم توانائی کا حل لازماً مقید حال ہو گا۔ اشارہ: ایک شاخ پر بہت دور (مثلاً $x \gg a$) چل کر، مساوات شروڈنگر کو علیحدگی متغیرات سے حل کریں؛ اگر تفاعل موج لامتناہی کی جانب حرکت

[15] muon catalysis
[16] quantum dots
[17] کوانٹائی سرنگ زنی کی موجودگی میں، کلاسیکی مقید حال غیر مقید ہو جاتا ہے؛ یہاں اس کے الٹ ہے: کلاسیکی غیر مقید حال، کوانٹائی میکانی مقید ہے۔

کرتا ہو، تب تابعیت x کا روپ لازماً $e^{ik_x x}$ ہوگا، جہاں $k_x > 0$ ہے۔

ب. اب اصول تغیریت استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ زمینی حال کی توانائی $E_{\text{دہلیز}}$ سے کم ہے۔ درج ذیل آزمائشی تفاعل موج استعمال کریں۔

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

اس کی معمول زنی کر کے A کا تعین کریں، اور H کی توقعاتی قیمت کا حساب لگائیں۔ جواب:

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

اب α کے لحاظ سے کم ترین قیمت تلاش کر کے دکھائیں کہ نتیجہ $E_{\text{دہلیز}}$ سے کم ہے۔ صلیب کی تشاکل سے پورا فائدہ اٹھائیں؛ آپکو کھلے خطہ کے صرف $1/8$ حصے پر تکمل لینا ہوگا؛ باقی سات تکملات بھی یہی جواب دیں گے۔ البتہ دھیان رہے کہ، اگرچہ آزمائشی تفاعل موج استمراری ہے، اس کے تفرقات غیر استمراری ہیں؛ "رکاوٹی لکیریں" $x = 0$، $y = 0$، $x = \pm a$ اور $y = \pm a$ پر پائی جاتی ہیں جہاں آپکو مثال ۳.۷ کی ترکیب کا سہارا لینا ہوگا۔

باب ۸

ونٹزل وکرامرس وبرلوان تخمین

ونٹزل وکرامرس و برلوان[1] ترکیب سے غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر کی یک بُعدی تخمینی حل حاصل کیے جا سکتے ہیں (اسی بنیادی تصور کا اطلاق کئی دیگر تفرقی مساوات پر اور بالخصوص تین ابعاد میں مساوات شروڈنگر کی رداسی حصے پر کیا جا سکتا ہے)۔ یہ مقید حال توانائیوں اور مخفی رکاوٹ سے گزرنے کی سرنگ زنی شرح کے حساب میں خصوصاً مفید ثابت ہوتا ہے۔

اس کا بنیادی تصور درج ذیل ہے: فرض کریں ایک ذرہ جس کی توانائی E ہو ایک ایسے خطہ میں حرکت کرتا ہے جہاں مخفیہ $V(x)$ مستقل ہو۔ تفاعل موج، $E > V$ کی صورت میں، درج ذیل روپ کا ہوگا۔

$$\psi(x) = Ae^{\pm ikx}, \qquad k \equiv \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$$

دائیں رخ حرکت کرتے ہوئے ذرہ کے لئے مثبت علامت جبکہ بائیں رخ کے لئے منفی علامت استعمال ہوگا (یقیناً ان دونوں کا خطی جوڑ ہمیں عمومی حل دیگا)۔ یہ تفاعل موج ارتعاشی ہے، جس کا طول موج ($\lambda = 2\pi/k$) اٹل اور حیطہ (A) غیر تغیری ہے۔ اب فرض کریں $V(x)$ مستقل نہیں، بلکہ λ کے لحاظ سے بہت آہستہ تبدیل ہوتا ہو، لہٰذا کئی مکمل طول موج پر مخفیہ مستقل تصور کیا جا سکتا ہو۔ ایسی صورت میں ہم کہہ سکتے ہیں کہ ψ عملاً سائن نما ہوگا، تاہم اس کا طول موج اور حیطہ x کے ساتھ آہستہ آہستہ تبدیل ہوں گے۔ یہی ونٹزل وکرامرس وبرلوان تخمین کے تصور کی بنیاد ہے۔ درحقیقت، یہ x پر دو مختلف طرز کے تابعیت کی بات کرتا ہے: تیز ارتعاشات، اور ان کے طول موج اور حیطہ میں آہستہ آہستہ تبدیلی۔

اسی طرح، $E < V$ (جہاں V مستقل ہے) کی صورت میں ψ قوت نمائی ہوگا۔

$$\psi(x) = Ae^{\pm \kappa x}, \qquad \kappa \equiv \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$$

---

[1] WKB(Wentzel,Kramers,Brillouin)

اور اگر $V(x)$ مستقل نہ ہو، بلکہ $1/\kappa$ کے لحاظ سے آہستہ آہستہ تبدیل ہوتا ہو، تب حل عملاً قوت نمائی ہو گا، البتہ A اور κ اب x کے تفاعل ہوں گے جو آہستہ آہستہ تبدیل ہوں گے۔

یہ پورا قصہ کلاسیکی **نقطہ واپسی**[۲]، جہاں $V \approx E$ ہو، کے قریبی پڑوس میں ناکامی کا شکار ہو گا۔ چونکہ یہاں λ (یا $1/\kappa$) لامتناہی تک بڑھتا ہے، اور ہم یہ نہیں کہہ سکتے کہ $V(x)$ مقابلے میں "آہستہ آہستہ" تبدیل ہوتا ہے۔ جیسا ہم دیکھیں گے، اس تخمین میں نقاط واپسی سے نمٹنا دشوار ترین ہو گا، اگرچہ آخری نتائج بہت سادہ ہوں گے۔

۸.۱ کلاسیکی خطہ

مساوات شروڈنگر

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

کو درج ذیل روپ میں لکھا جا سکتا ہے

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=-\frac{p^2}{\hbar^2}\psi \tag{۸.۱}$$

جہاں

$$p(x)\equiv\sqrt{2m[E-V(x)]} \tag{۸.۲}$$

ذرے کے معیار حرکت کا کلاسیکی کلیہ ہے، جس کی کل توانائی E اور مخفی توانائی $V(x)$ ہے۔ فی الحال میں فرض کرتا ہوں کہ $E > V(x)$ ہے، لہٰذا $p(x)$ حقیقی ہو گا؛ اس خطے کو ہم کلاسیکی خطہ کہتے ہیں چونکہ کلاسیکی طور پر یہ ذرہ سعت x پر رہنے کا پابند ہو گا (شکل ۸.۱)۔ عمومی طور پر، ψ ایک مخلوط تفاعل ہو گا؛ اس کو حیطہ، $A(x)$، اور ہیئت، $\phi(x)$، جہاں دونوں حقیقی ہیں، کی صورت میں لکھا جا سکتا ہے۔

$$\psi(x)=A(x)e^{i\phi(x)} \tag{۸.۳}$$

ہم x کے لحاظ سے تفرق کو قوت نمائی میں چھوٹی لکیر $(')$ سے ظاہر کرتے ہوئے

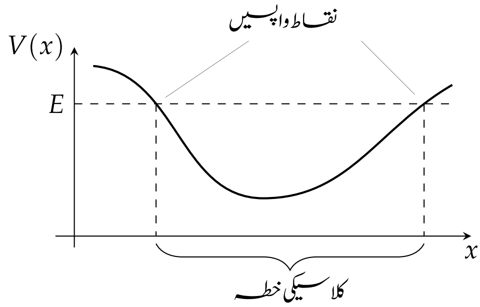
$$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}x}=(A'+iA\phi')e^{i\phi}$$

اور

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}=[A''+2iA'\phi'+iA\phi''-A(\phi')^2]e^{i\phi} \tag{۸.۴}$$

---

[۲] turningpoint



شکل ۸.۱: کلاسیکی طور پر یہ ذرہ اس خطہ میں مقید ہو گا جہاں $E \geq V(x)$ ہو۔

لکھ سکتے ہیں۔ اس کو مساوات ۸.۱ میں پُر کرتے ہیں۔

$$A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A(\phi')^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2}A \tag{۸.۵}$$

دونوں ہاتھ کے حقیقی اجزاء کو ایک دوسرے کے برابر رکھ کر ایک حقیقی مساوات:

$$A'' - A(\phi')^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2}A \quad \Rightarrow \quad A'' = A\Big[(\phi')^2 - \frac{p^2}{\hbar^2}\Big] \tag{۸.۶}$$

جبکہ خیالی اجزاء کو ایک دوسرے کے برابر رکھ کر دوسری حقیقی مساوات:

$$2A'\phi' + A\phi'' = 0 \quad \Rightarrow \quad \Big(A^2\phi'\Big)' = 0 \tag{۸.۷}$$

حاصل ہو گی۔

مساوات ۸.۶ اور مساوات ۸.۷ ہر لحاظ سے اصل مساوات شروڈنگر کے معادل ہیں۔ ان میں سے دوسری با آسانی حل ہوتی ہے:

$$A^2\phi' = C^2 \quad \Rightarrow \quad A = \frac{C}{\sqrt{\phi'}} \tag{۸.۸}$$

جہاں C (حقیقی) مستقل ہو گا۔ ان میں سے پہلی (مساوات ۸.۶) عموماً حل نہیں کی جا سکتی ہے، لہٰذا ہمیں تخمین کی ضرورت پیش آتی ہے: ہم فرض کرتے ہیں کہ حیطہ A بہت آہستہ آہستہ تبدیل ہوتا ہے، لہٰذا جزو A'' قابل نظر انداز ہو گا (بلکہ یہ کہنا زیادہ درست ہو گا کہ، ہم فرض کرتے ہیں کہ $(\phi')^2$ اور $p^2/\hbar^2$ سے A''/A بہت کم ہے)۔ ایسی صورت میں ہم مساوات ۸.۶ کے بائیں ہاتھ کو نظر انداز کر کے:

$$(\phi')^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x} = \pm\frac{p}{\hbar}$$

حاصل کرتے ہیں، لہٰذا

$$\phi(x) = \pm\frac{1}{\hbar}\int p(x)\,\mathrm{d}x \tag{۸.۹}$$

ہو گا۔ (میں فی الحال اس کو ایک غیر قطعی تکمل لکھتا ہوں؛ کسی بھی مستقل کو C میں ضم کیا جا سکتا ہے، جس کے تحت C مخلوط ہو سکتا ہے۔) اس طرح

$$\psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{p(x)}}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int p(x)\,\mathrm{d}x} \qquad \text{(ونٹزل وکرامرس وبرلوان کلیہ)} \tag{۸.۱۰}$$

ہو گا، اور (تخمینی) عمومی حل اس طرح کے دو اجزاء کا خطی جوڑ ہو گا، جہاں ایک جزو میں مثبت اور دوسرے میں منفی علامت استعمال ہو گی۔

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ درج ذیل ہو گا

$$\left|\psi(x)\right|^2 \cong \frac{|C|^2}{p(x)} \tag{۸.۱۱}$$

جس کے تحت، نقطہ x پر ذرہ پایا جانے کا احتمال، اس نقطہ پر ذرے کے (کلاسیکی) معیار حرکت (لہٰذا سمتی رفتار) کا بالعکس متناسب ہو گا۔ ہم یہی توقع رکھتے ہیں، چونکہ جس مقام پر ذرے کی رفتار تیز ہو، وہاں اس کے پائے جانے کا احتمال کم ہو گا۔ در حقیقت، بعض اوقات تفرقی مساوات میں جزو A'' نظر انداز کرنے کی بجائے، اس نیم کلاسیکی مشاہدہ سے آغاز کرتے ہوئے ونٹزل وکرامرس وبرلوان تخمین اخذ کیا جاتا ہے۔ موخر الذکر طریقہ ریاضیاتی طور پر زیادہ صاف ہے، لیکن اول الذکر بہتر طبعی وجہ پیش کرتا ہے۔

مثال ۸.۱: **دو انتصابی دیواروں والا مخفیہ کنواں۔** فرض کریں ہمارے پاس ایک لامتناہی چوکور کنواں ہو جس کی تہہ موڑے دار ہو (شکل ۸.۲)۔

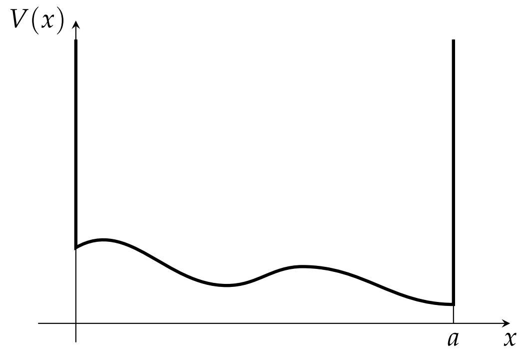
$$V(x) = \begin{cases} \text{کوئی منتخب تفاعل}, & 0 < x < a \\ \infty, & \text{بصورت دیگر} \end{cases} \tag{۸.۱۲}$$

کنویں کے اندر (ہر جگہ $E > V(x)$ فرض کرتے ہوئے)

$$\psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[C_+e^{i\phi(x)} + C_-e^{-i\phi(x)}\right]$$

ہو گا، جس کو بہتر انداز میں

$$\psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[C_1\sin\phi(x) + C_2\cos\phi(x)\right] \tag{۸.۱۳}$$



شکل ۸.۲: ایسا لامتناہی چوکور کنواں جس کی تہہ موڑے دار ہے۔

لکھا جا سکتا ہے، جہاں (یہ جانتے ہوئے کہ ہم تکمل کی زیریں حد اپنی مرضی سے منتخب کر سکتے ہیں) درج ذیل ہوگا۔

$$\phi(x) = \frac{1}{\hbar}\int_0^x p(x')\,\mathrm{d}x' \tag{۸.۱۴}$$

اب $x = 0$ پر $\psi(x)$ لازماً صفر کو پہنچے گا، لہٰذا (چونکہ $\psi(0) = 0$ ہے) $C_2 = 0$ ہوگا۔ ساتھ ہی $x = a$ پر بھی $\psi(x)$ صفر کو پہنچے گا، لہٰذا درج ذیل ہوگا۔

$$\phi(a) = n\pi \qquad (n = 1, 2, 3, \dots) \tag{۸.۱۵}$$

ماخوذ:

$$\int_0^a p(x)\,\mathrm{d}x = n\pi\hbar \tag{۸.۱۶}$$

یہ کوانٹازنی شرط (تخمینی) اجازتی توانائیوں کا تعین کرتی ہے۔

مثلاً، اگر کنویں کی تہہ ہموار ہو $(V(x) = 0)$، تب $p(x) = \sqrt{2mE}$ (ایک مستقل) ہوگا، اور مساوات ۸.۱۶ کے تحت $p(x) = n\pi\hbar$ یا

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

ہوگا، جو لامتناہی چوکور کنویں کی توانائیوں کا پرانا کلیہ ہے (مساوات ۲.۲۷)۔ یہاں ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین ہمیں بالکل ٹھیک جواب فراہم کرتا ہے (اصل تفاعل موج کا حیطہ مستقل ہے، لہٰذا A'' کو نظرانداز کرنے سے کوئی اثر نہیں پڑا)۔ □

سوال ۸.۱: ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین استعمال کرتے ہوئے ایسے لامتناہی چوکور کنویں کی احجازتی توانائیاں (E_n) تلاش کریں جس کی نصف تہہ میں V_0 بلند سیڑھی پائی جاتی ہو (شکل ۶.۳)۔

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 < x < a/2 \\ 0, & a/2 < x < a \\ \infty, & \text{بصورت دیگر} \end{cases}$$

اپنے جواب کو V_0 اور $E_n^0 \equiv (n\pi\hbar)^2/2ma^2$ (بغیر سیڑھی لامتناہی چوکور کنویں کی n ویں احجازتی توانائی) کی صورت میں لکھیں۔ فرض کریں $E_1^0 > V_0$ ہے، تاہم یہ فرض نہ کریں کہ $E_n \gg V_0$ ہوگا۔ اپنے جواب کا موازنہ مثال ۶.۱ میں رتبہ اول نظریہ اضطراب سے حاصل جواب کے ساتھ کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ بہت چھوٹے V_0 (جہاں نظریہ اضطراب کارآمد ہوگا) یا بہت بڑے n (جہاں ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین کارآمد ہوگی) کی صورت میں جوابات ایک جیسے ہوں گے۔

سوال ۸.۲: ونٹزل و کرامرس و برلوان کلیہ (مساوات ۸.۱۰) کو $\hbar$ طاقتی توسیع سے اخذ کیا جا سکتا ہے۔ آزاد ذرے کے تفاعل موج $\psi = A\exp(\pm ipx/\hbar)$ سے حوصلہ افزا ہو کر کے ہم درج ذیل لکھتے ہیں

$$\psi(x) = e^{if(x)/\hbar}$$

جہاں $f(x)$ کوئی مخلوط تفاعل ہے۔ (دھیان رہے کہ ہم یہاں عمومیت نہیں کھوتے؛ کسی بھی غیر صفر تفاعل کو اس طرح لکھا جا سکتا ہے۔)

ا. اس کو (مساوات ۸.۱ روپ کی) مساوات شروڈنگر میں پُر کر کے درج ذیل دکھائیں۔

$$i\hbar f'' - (f')^2 + p^2 = 0$$

ب. تفاعل $f(x)$ کو $\hbar$ کے طاقتی تسلسل کی صورت:

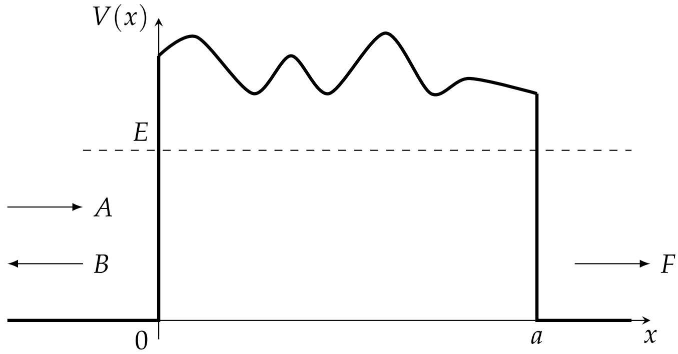
$$f(x) = f_0(x) + \hbar f_1(x) + \hbar^2 f_2(x) + \dots$$

میں لکھ کر $\hbar$ کی ایک جیسی طاقتوں کو اکٹھا کر کے درج ذیل دکھائیں۔

$$(f_0')^2 = p^2, \quad if_0'' = 2f_0'f_1', \quad if_1'' = 2f_0'f_2' + (f_1')^2, \quad \text{وغیرہ}$$

ج. انہیں $f_0(x)$ اور $f_1(x)$ کے لئے حل کر کے دکھائیں کہ $\hbar$ کی اول رتبہ تک آپ مساوات ۸.۱۰ دوبارہ حاصل کرتے ہیں۔

تبصرہ: منفی عدد کے لوگارتھم کی تعریف $\ln(-z) = \ln(z) + in\pi$ ہے، جہاں n طاق عدد صحیح ہوگا۔ اگر آپ اس کلیہ سے ناواقف ہوں، تب دونوں اطراف کو قوت نما میں منتقل کر کے دیکھیں۔



شکل ۸.۳: موڑے دار بالائی سطح کی مستطیلی رکاوٹ سے بکھراو۔

۸.۲ سرنگ زنی

اب تک $E > V$ فرض کیا گیا، لہٰذا $p(x)$ حقیقی تھا۔ ہم غیر کلاسیکی خطہ $(E < V)$ کا مطابقتی نتیجہ با آسانی لکھ سکتے ہیں:

$$\psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int |p(x)|\, dx} \tag{۸.۱۷}$$

یہ پہلے کی طرح ہے (مساوات ۸.۱۰)، تاہم اب $p(x)$ تخیلی ہے۔[۳]

ایک مثال کے طور پر، مستطیلی رکاوٹ جس کی بالائی سطح غیر ہموار ہو (شکل ۸.۳) سے بکھراو کے مسئلے پر غور کریں۔ رکاوٹ کی بائیں جانب $(x < 0)$

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{۸.۱۸}$$

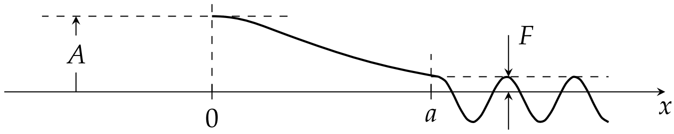
ہوگا، جہاں A آمدی حیطہ اور B منعکس حیطہ ہے، اور $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ ہے (حصہ ۲.۵ دیکھیں)۔ رکاوٹ کے دائیں جانب $(x > a)$

$$\psi(x) = Fe^{ikx} \tag{۸.۱۹}$$

ہوگا؛ F ترسیلی حیطہ ہے، اور ترسیلی احتمال درج ذیل ہوگا۔

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} \tag{۸.۲۰}$$

[۳] اس صورت میں تفاعل موج حقیقی ہوگا، اور مساوات ۸.۶ اور مساوات ۸.۷ کے مماثل ضروری نہیں کہ مساوات ۸.۵ سے حاصل ہوں، اگرچہ یہ اب بھی کافی ہیں۔ اگر آپ اس سے مطمئن نہیں، سوال ۸.۲ میں پیش متبادل حصول کے طریقے پر غور کریں۔



شکل ۸.۴: اونچی اور چوڑی رکاوٹ سے بکھراو کے تفاعل موج کی کیفی ساخت۔

سرنگ زنی خطہ $(0 \leq x \leq a)$ میں ونٹزل وکرامرس وبرلوان تخمین درج ذیل دیگی۔

$$\psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar}\int_0^x |p(x')|\,\mathrm{d}x'} + \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^x |p(x')|\,\mathrm{d}x'} \tag{۸.۲۱}$$

اگر رکاوٹ بہت بلند، یا بہت چوڑا یا دونوں ہو (یعنی جب سرنگ زنی کا احتمال بہت کم ہو)، تب قوت نمائی بڑھتے جزو کا عددی سر (C) لازماً چھوٹا ہو گا (درحقیقت، لامتناہی چوڑے رکاوٹ کی صورت میں یہ صفر ہو گا)، اور تفاعل موج کا نقش شکل ۸.۴ کی طرز[4] کا ہو گا۔ غیر کلاسیکی خطہ پر قوت نمائی میں کل کمی، آمدی اور ترسیلی امواج کے حیطوں کے تناسب کو تعین کرتا ہے

$$\frac{|F|}{|A|} \sim e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^a |p(x')|\,\mathrm{d}x'}$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

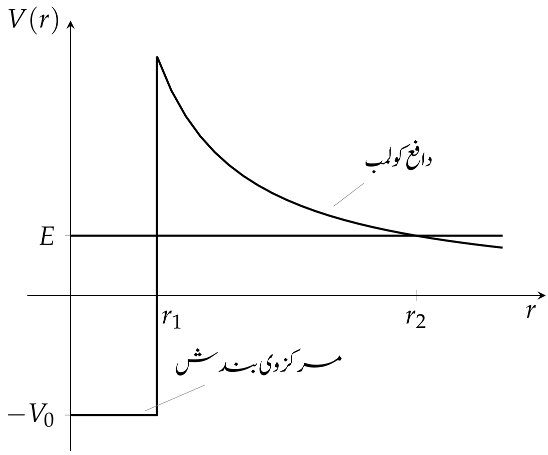
$$T \cong e^{-2\gamma}, \quad \gamma \equiv \frac{1}{\hbar}\int_0^a \left|p(x)\right| \mathrm{d}x \tag{۸.۲۲}$$

مثال ۸.۲: **الفا تحلیل کا نظریہ گامو۔**[5] 1928 میں جارج گامو نے مساوات ۸.۲۲ استعمال کرتے ہوئے الفا تحلیل (چند مخصوص تابکار مراکزہ سے، دو پروٹان اور دو نیوٹران پر مشتمل، الفا ذرہ کے اخراج) کی وجہ پیش کی۔ چونکہ الفا ذرہ مثبت بار $(2e)$ کا حامل ہے، لہٰذا جیسے ہی یہ مرکزوی بندشی قوت کی پہنچ سے باہر نکلتا ہے، باقی مرکزہ (کے بار (Ze)) کی برقی قوت دافع اس کو دور جانے پر مجبور کرتی ہے۔ لیکن، اس کو پہلے اس مخفی رکاوٹ سے گزرنا ہو گا (جو یورینیم کی صورت میں) خارجی الفا ذرے کی توانائی سے دوگنا سے بھی زیادہ ہے۔ گامو نے اس مخفی توانائی کو تخمینی طور پر (پروٹان کے رداس) r_1 وسعت کے چوکور کنواں (جو مرکزوی قوت کشش کو ظاہر کرتا ہے) کو کولمب قوت دافع کی دم سے جوڑ کر ظاہر کیا (شکل ۸.۵)، اور کوانٹائی سرنگ زنی کو الفا ذرہ کی فرار کی وجہ قرار دیا (مرکزوی طبیعیات پر کوانٹائی میکانیات کے اطلاق کا یہ پہلا واقع ہے)۔

---

[4] اس تجسسی دلیل کو زیادہ پختہ بنایا جا سکتا ہے (سوال ۸.۱۰ دیکھیں)۔

[5] Gamow'stheoryofalphadecay



شکل ۸.۵: تابکار مرکزہ میں الفاذرے کی مخفی توانائی کا گامو نمونہ۔

اگر خارج الفاذرے کی توانائی E ہو، بیرونی واپسی نقطے (r_2) کا تعین درج ذیل کرے گا۔

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2Ze^2}{r_2} = E \tag{۸.۲۳}$$

ظاہر ہے قوت نما γ (مساوات ۸.۲۲) درج ذیل ہو گا۔[۶]

$$\gamma = \frac{1}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{2m\left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{2Ze^2}{r} - E\right)}\,\mathrm{d}r = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{\frac{r_2}{r}-1}\,\mathrm{d}r$$

اس تکمل میں $r \equiv r_2 \sin^2 u$ پُر کر کے نتیجہ حاصل کرتے ہیں۔

$$\gamma = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left[r_2\left(\frac{\pi}{2} - \sin^{-1}\sqrt{\frac{r_1}{r_2}}\right) - \sqrt{r_1(r_2-r_1)}\right] \tag{۸.۲۴}$$

عام طور پر $r_2 \gg r_1$ ہو گا، لہٰذا ہم چھوٹے زاویوں کا تخمین $(\sin\epsilon \cong \epsilon)$ استعمال کر کے اس نتیجے کا سادہ روپ حاصل کرتے ہیں:

$$\gamma \cong \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\left[\frac{\pi}{2}r_2 - 2\sqrt{r_1r_2}\right] = K_1\frac{Z}{\sqrt{E}} - K_2\sqrt{Zr_1} \tag{۸.۲۵}$$

---

[۶] یہاں رکاوٹ کی بائیں جانب مخفیہ صفر نہیں ہے (مزید، حقیقتاً یہ تین بعدی مسئلہ ہے)، تاہم مساوات ۸.۲۲ میں پیش بنیادی تصور سے ہمیں دلچسپی ہے۔

جہاں

$$K_1 \equiv \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{\pi\sqrt{2m}}{\hbar} = 1.980\,\mathrm{MeV}^{1/2}, \tag{۸.۲۶}$$

اور درج ذیل ہو گا۔

$$K_2 \equiv \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^{1/2}\frac{4\sqrt{m}}{\hbar} = 1.485\,\mathrm{fm}^{-1/2}. \tag{۸.۲۷}$$

(عمومی مرکزہ کی جسامت تقریباً 10^{-15} m یعنی 1 fm ہوتی ہے۔)

اگر ہم مرکزہ کے اندر الفاذرے کو محصور تصور کریں اور کہیں کہ اسکی اوسط سمتی رفتار v ہے، تب دیواروں کے ساتھ تصادم کے بیچ اوسط وقفہ تقریباً $2r_1/v$ ہو گا، لہٰذا تصادم کا تعدد $v/2r_1$ ہو گا۔ ہر تصادم پر فرار ہونے کا احتمال $e^{-2\gamma}$ ہے، لہٰذا اکائی وقت میں اخراج کا احتمال $(v/2r_1)e^{-2\gamma}$ ہو گا، اور یوں مائی مرکزہ کا **عرصہ حیات**[7] تقریباً درج ذیل ہو گا۔

$$\tau = \frac{2r_1}{v}e^{2\gamma}. \tag{۸.۲۸}$$

بدقسمتی سے ہم v نہیں جانتے، لیکن اس سے زیادہ فرق نہیں پڑتا، چونکہ ایک تابکار مرکزہ سے اور دوسرے تابکار مرکزہ کے بیچ قوت نمائی جزو ضربی پچیس رتبی تک تبدیل ہوتا ہے؛ اس کے سامنے v کی تبدیلی قابل نظرانداز ہے۔ بالخصوص، عرصہ حیات کی تجرباتی پیمائشی قیمتوں کو $1/\sqrt{E}$ کے ساتھ ترسیم کرنے سے ایک خوبصورت سیدھا خط (شکل ۸.۶) حاصل ہوتا ہے جو عین مساوات ۸.۲۵ اور مساوات ۸.۲۸ کے تحت ہو گا۔ □

سوال ۸.۳: ایک متناہی چوکور رکاوٹ، جس کی اونچائی $V_0 > E$ اور چوڑائی $2a$ ہے، سے ایسے ذرے، جس کی توانائی E ہے، کی تخمینی ترسیمی احتمال مساوات ۸.۲۸ استعمال کرتے ہوئے حاصل کریں۔ اپنے جواب کا موازنہ اصل نتیجہ (سوال ۲.۳۳) کے ساتھ کریں، جس تک ونٹزل وکرامرس وبرلوان طریق $T \ll 1$ میں اس کی تخفیف ہو گی۔

سوال ۸.۴: مساوات ۸.۲۵ اور مساوات ۸.۲۸ استعمال کرتے ہوئے U^{238} اور Po^{212} کے عرصہ حیات تلاش کریں۔ اشارہ: تمام مراکزہ میں مرکزوی مادہ کی کثافت تقریباً ایک جیسی ہوتی ہے، لہٰذا $(r_1)^3$ (پروٹان اور نیوٹران کی تعداد کے مجموعہ) A کا راست متناسب ہو گا۔ تجرباتی طور پر درج ذیل حاصل کیا گیا ہے۔

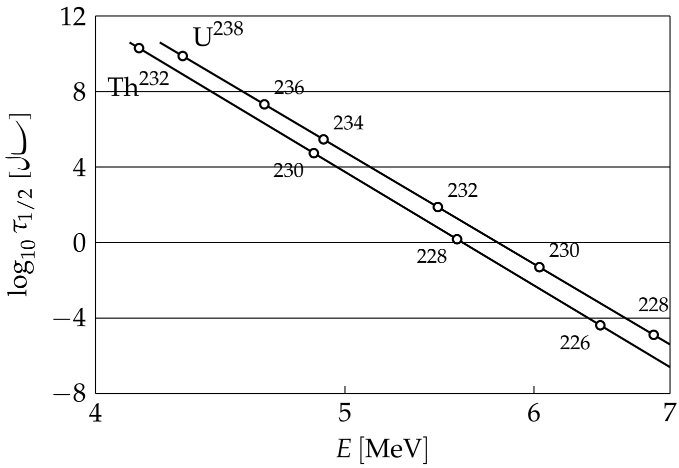
$$r_1 \cong (1.07\,\mathrm{fm})A^{1/3} \tag{۸.۲۹}$$

خارج شدہ الفاذرے کی توانائی، کلیہ آئنسٹائن $(E = mc^2)$ سے اخذ کی جا سکتی ہے

$$E = m_p c^2 - m_d c^2 - m_\alpha c^2 \tag{۸.۳۰}$$

---

[7] lifetime



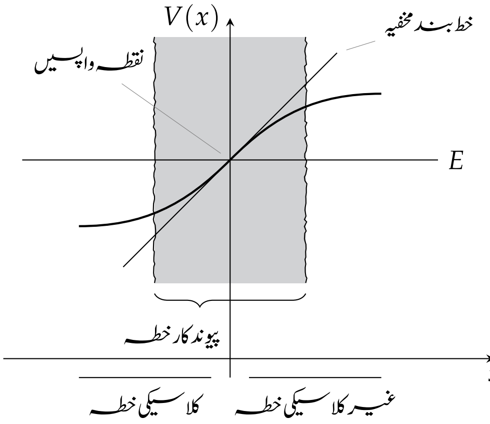
شکل ۸.۶: یورینیم اور تھوریم کے عرصہ حیات کے لوگارتھم بالمقابل $1/\sqrt{E}$ کی ترسیمات (جہاں خارجی الفا ذرے کی توانائی E ہے)۔

جہاں m_p مائی مرکزہ کی کمیت، m_d بیٹی مرکزہ کی کمیت، اور m_α الفا ذرے (یعنی He^4 مرکزہ) کی کمیت ہے۔ یہ دیکھنے کی خاطر کہ بیٹی مرکزہ کیا ہو گا، یاد رہے کہ الفا ذرہ دو پروٹان اور دو نیوٹران لے کر فرار ہوتا ہے، لہٰذا Z سے دو اور A سے چار منفی کریں۔ حاصل جوابات استعمال کرتے ہوئے دوری جدول سے کیمیائی عنصر کا تعین کریں۔ سمتی رفتار v کی اندازاً قیمت $E = (1/2)m_\alpha v^2$ سے حاصل کریں؛ یہ مرکزہ کے اندر منفی مخفی توانائی کو نظر انداز کرتی ہے، لہٰذا v کی قیمت اصل سے زیادہ دیگی، تاہم اب تک ہم صرف اتنا ہی کر سکتے ہیں۔ اتفاقی طور پر ان کیمیائی عناصر کی تجربے سے حاصل کردہ عرصہ حیات بالترتیب 6×10^9 سال اور $0.5\,\mu s$ ہے۔

۸.۳ کلیات پیوند

اب تک کے بحث و فکر میں میں فرض کرتا رہا کہ مخفی کنویں (یا رکاوٹ) کی "دیواریں" انتصابی تھیں، جس کی بنا پر بیرونی حل آسان اور سرحدی شرائط سادہ تھے۔ درحقیقت، ہمارے مرکزی نتائج (مساوات ۸.۱۶ اور مساوات ۸.۲۲) اس صورت میں بھی کافی حد تک درست ثابت ہوتے ہیں جب کناروں کی ڈھلان زیادہ نہ ہو (یقیناً نظریہ گامو میں ایسی صورت پر ہی ان کا اطلاق کیا گیا)۔ بہر حال، نقطہ واپسی $(E = V)$، جہاں "کلاسیکی" اور "غیر کلاسیکی" خطے جڑتے ہیں اور ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین ناقابل استعمال ہو گی، پر ہم تفاعل موج کا قریبی مطالعہ کرنا چاہیں گے۔ اس حصہ میں میں مقید حال مسئلہ (شکل ۸.۱) پر غور کروں گا؛ آپ مسئلہ بکھراو (سوال ۸.۱۰) حل کریں گے۔[8]

[8]انتباہ: درج ذیل دلائل زیادہ تکنیکی ہیں جنہیں پہلی مرتبہ پڑھ کر سمجھنا ضروری نہیں۔



شکل ۸.۷: دائیں ہاتھ نقطہ واپسی کو وضاحت سے دکھایا گیا ہے۔

اپنی آسانی کی خاطر، ہم محددیوں منتخب کرتے ہیں کہ دائیں ہاتھ کا نقطہ واپسی $x = 0$ پر واقع ہو (شکل ۸.۷)۔ ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین میں درج ذیل ہوگا۔

$$\psi(x) \cong \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[Be^{\frac{i}{\hbar}\int_x^0 p(x')\,\mathrm{d}x'} + Ce^{-\frac{i}{\hbar}\int_x^0 p(x')\,\mathrm{d}x'}\right], & x < 0 \\ \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}}De^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^x |p(x')|\,\mathrm{d}x'}, & x > 0 \end{cases} \tag{۸.۳۱}$$

(یہ فرض کرتے ہوئے کہ تمام $x > 0$ کے لئے E سے $V(x)$ بڑا ہوگا، ہم اس خطہ میں مثبت قوت نما کو خارج کر سکتے ہیں، چونکہ $x \to \infty$ پر یہ بے قابو بڑھتا ہے۔) ہمارا کام ان دو حل کو سرحد پر ایک دوسرے کے ساتھ جوڑنا ہے۔ لیکن یہاں ہمیں شدید مشکلات کا سامنا در پیش ہے: ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین میں نقطہ واپسی (جہاں $p(x) \to 0$ ہوگا) پر ψ کی قیمت لامتناہی تک پہنچتی ہے۔ حقیقی تفاعل موج یقیناً ایسا رویہ نہیں رکھتا؛ جیسا ہمارا گمان تھا، ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین نقطہ واپسی کی پڑوس میں ناقابل استعمال ہے۔ لیکن اجازتی توانائیوں کا تعین نقاط واپسی پر سرحدی شرائط کرتی ہیں۔ ہم ایک ایسا "پیوند کار" تفاعل موج لیتے ہیں جو نقطہ واپسی کو ڈھانپ کر دونوں اطراف کے ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین حل کو ایک دوسرے کے ساتھ پیوند کرتا ہو۔

چونکہ ہمیں پیوند کار تفاعل موج (ψ_p) صرف مبدا کے پڑوس میں چاہیے، لہٰذا ہم اس مخفیہ کو سیدھی لکیر:

$$V(x) \cong E + V'(0)x, \tag{۸.۳۲}$$

سے تخمین دے کر، اس خطہ بند V کے لئے مساوات شروڈنگر:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_p}{\mathrm{d}x^2}+[E+V'(0)x]\psi_p=E\psi_p$$

یا

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_p}{\mathrm{d}x^2}=\alpha^3x\psi_p \tag{۸.۳۳}$$

حل کرتے ہیں، جہاں درج ذیل ہے۔

$$\alpha\equiv\left[\frac{2m}{\hbar^2}V'(0)\right]^{1/3} \tag{۸.۳۴}$$

درج ذیل متعارف کر کے ہم ان α کو غیر تابع متغیر میں ضم کر سکتے ہیں

$$z\equiv\alpha x \tag{۸.۳۵}$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_p}{\mathrm{d}z^2}=z\psi_p \tag{۸.۳۶}$$

یہ **مساوات ایئری**[۹] ہے جس کے حلوں کو **تفاعلات ایئری**[۱۰] کہتے ہیں۔[۱۱] چونکہ مساوات ایئری دو رتبی تفرقی مساوات ہے، لہٰذا دو خطی غیر تابع ایئری تفاعلات $\mathrm{Ai}(z)$ اور $\mathrm{Bi}(z)$ پائے جاتے ہیں۔

ان کا تعلق رتبہ $1/3$ کے بیسل تفاعلات کے ساتھ ہے؛ ان کے چند خواص جدول ۸.۱ میں پیش کیے گئے ہیں جبکہ شکل ۸.۸ میں انہیں ترسیم کیا گیا ہے۔ ظاہر ہے کہ پیوند کار تفاعل موج $\mathrm{Ai}(z)$ اور $\mathrm{Bi}(z)$ کا خطی جوڑ:

$$\psi_p(x)=a\,\mathrm{Ai}(\alpha x)+b\,\mathrm{Bi}(\alpha x) \tag{۸.۳۷}$$

ہو گا، جہاں a اور b مناسب مستقلات ہیں۔

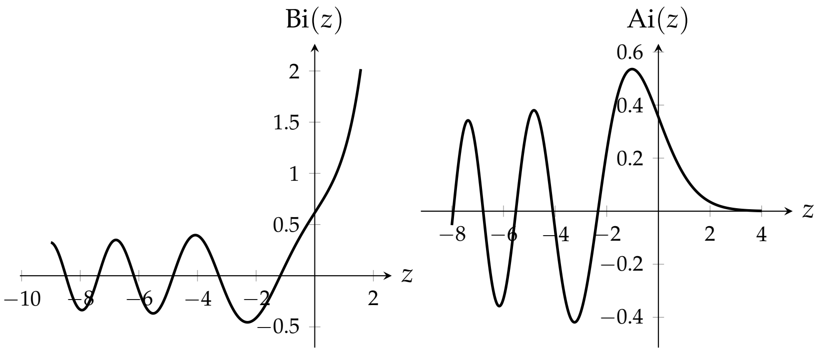
اب ψ_p مبدا کے پڑوس میں (تخمینی) تفاعل موج ہے؛ ہم نے مبدا کے دونوں اطراف منطبق خطوں میں ψ_p کو ونٹزل و کرامرس و برلوان حلوں کے ساتھ ہم پلہ بنانا ہو گا (شکل ۸.۹ دیکھیں)۔ یہ منطبق خطے نقاط واپسی کے اتنے قریب ہیں کہ خطہ بند مخفیہ کافی درست ہو گا (لہٰذا ψ_p اصل تفاعل موج کا بہترین تخمین ہو گا)، اور ساتھ ہی

---

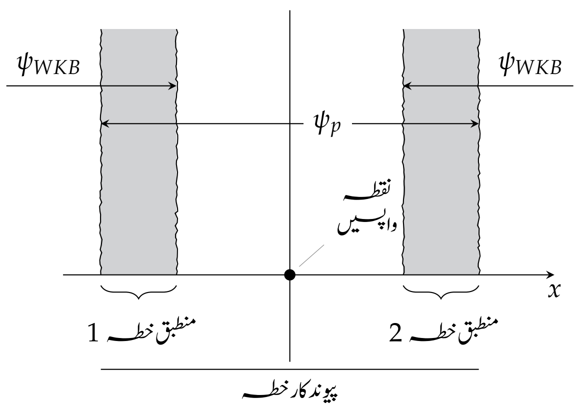
[۹] Airy's equation

[۱۰] Airy functions

[۱۱] کلاسیکی طور پر، خطی مخفیہ سے مراد مستقل قوت، لہٰذا مستقل اسراع ہے؛ یہ سادہ ترین حرکت ہے، جہاں سے بنیادی میکانیات کا آغاز ہوتا ہے۔ ستم ظریفی کی بات ہے کہ یہی سادہ مخفیہ، کوانٹائی میکانیات میں ماورائی تفاعلات کو جنم دیتا ہے، اور اس نظریہ میں کلیدی کردار ادا نہیں کرتا۔



شکل ۸.۸: ایئری تفاعلات کی ترسیمات



شکل ۸.۹: پیوندی خطہ اور دو منطبق خطے۔

جدول ۸.۱: ایئری تفاعلات کے چند خواص۔

تفرقی مساوات:	$\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}z^2} = zy$
حل:	ایئری تفاعلات $\mathrm{Ai}(z)$ اور $\mathrm{Bi}(z)$ کے خطی مجموعے۔
تکملی روپ:	$\mathrm{Ai}(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos\left(\frac{s^3}{3} + sz\right)\mathrm{d}s$
	$\mathrm{Bi}(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \left[e^{-\frac{s^3}{3}+sz} + \sin\left(\frac{s^3}{3} + sz\right)\right]\mathrm{d}s$
متقاربی روپ:	

$$\left.\begin{aligned} \mathrm{Ai}(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}}\sin\left[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \\ \mathrm{Bi}(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}}\cos\left[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \end{aligned}\right\} z \ll 0 \qquad \left.\begin{aligned} \mathrm{Ai}(z) &\sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}} \\ \mathrm{Bi}(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}}e^{\frac{2}{3}z^{3/2}} \end{aligned}\right\} z \gg 0$$

نقاط واپسیں سے اتنے دور ضرور ہیں کہ ونٹزل و کرامرس وبرلوان تخمین پر بھروسہ کیا جا سکتا ہے۔[۱۲] منطبق خطوں میں مساوات ۸.۳۲ کارآمد ہے، لہٰذا (مساوات ۸.۳۴ کی علامتیت میں) درج ذیل ہو گا۔

$$p(x) \cong \sqrt{2m(E - E - V'(0)x)} = \hbar\alpha^{3/2}\sqrt{-x} \tag{۸.۳۸}$$

بالخصوص منطبق خطہ 2 میں

$$\int_0^x \left|p(x')\right| \mathrm{d}x' \cong \hbar\alpha^{3/2}\int_0^x \sqrt{x'}\,\mathrm{d}x' = \frac{2}{3}\hbar(\alpha x)^{3/2}$$

ہو گا، لہٰذا ونٹزل و کرامرس وبرلوان تفاعل موج (مساوات ۸.۳۱) درج ذیل لکھی جا سکتی ہے۔

$$\psi(x) \cong \frac{D}{\sqrt{\hbar}\alpha^{3/4}x^{1/4}}e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \tag{۸.۳۹}$$

ایئری تفاعلات کی بڑی z متقاربی روپ[۱۳] (جدول ۸.۱) استعمال کرتے ہوئے، منطبق خطہ 2 میں پیوند کار

---

[۱۲] یہ نازک دوہری مسلط شرط ہے، اور ایسے گھمبیر مخفیے تیار کرنا ممکن ہے کہ جن میں اس طرح کا کوئی منطبق خطہ نہ پایا جاتا ہو۔ البتہ، عملی استعمال میں ایسا شاذ و نادر ہی ہوتا ہے۔ سوال ۸.۸ دیکھیں۔

[۱۳] پہلی نظر میں، اس خطہ میں، جسے $z = 0$ پر نقطہ واپسیں کا قریب تصور کیا گیا ہے (لہٰذا مخفیہ کا خط بند تخمین کارآمد ہو گا)، بڑی z تخمین کا استعمال نامعقول نظر آتا ہے۔ لیکن یہاں تفاعل کا دلیل z نہیں αx ہے، اور اگر آپ غور کریں (سوال ۸.۸ دیکھیں) تو آپ دیکھیں گے کہ (عموماً) ایسا خطہ ہو گا جہاں αx بڑا ہو گا، اور ساتھ ہی $V(x)$ کو خطی لکیر سے تخمین دینا معقول ہو گا۔

تفاعل موج (مساوات ۸.۳۷) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$\psi_p(x) \cong \frac{a}{2\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + \frac{b}{\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \tag{۸.۴۰}$$

دونوں حلوں کے موازنہ سے درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$a = \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha\hbar}} D \quad \text{اور} \quad b = 0 \tag{۸.۴۱}$$

ہم یہی کچھ منطبق خطہ 1 کے لئے بھی کرتے ہیں۔ اب بھی مساوات ۸.۳۸ ہمیں $p(x)$ دیگی، تاہم اس مرتبہ x منفی ہوگا، لہٰذا

$$\int_x^0 p(x')\,\mathrm{d}x' \cong \frac{2}{3}\hbar(-\alpha x)^{3/2} \tag{۸.۴۲}$$

ہوگا، اور ونٹزل و کرامرس وبرلوان تفاعل موج (مساوات ۸.۳۱) درج ذیل ہوگا۔

$$\psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{\hbar}\alpha^{3/4}(-x)^{1/4}} \left[B e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} + C e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} \right] \tag{۸.۴۳}$$

ساتھ ہی بہت بڑی منفی z کے لئے ایئری تفاعل کا متقارب روپ (جدول ۸.۱) استعمال کرتے ہوئے پیوندی تفاعل (مساوات ۸.۳۷ جس میں $b = 0$ لیا گیا ہو) درج ذیل ہوگا۔

$$\begin{aligned} \psi_p(x) &\cong \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \\ &= \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \frac{1}{2i} \left[e^{i\pi/4} e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} - e^{-i\pi/4} e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} \right] \end{aligned} \tag{۸.۴۴}$$

منطبق خطہ 1 میں ونٹزل و کرامرس وبرلوان اور پیوندی تفاعلات موج کے موازنے سے

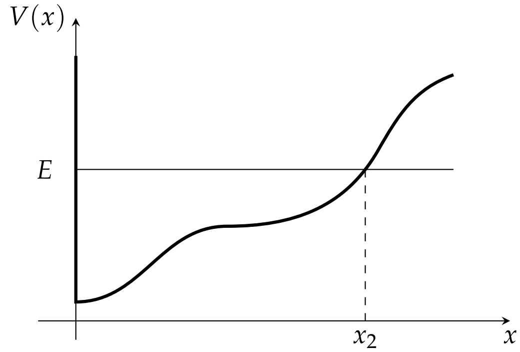
$$\frac{a}{2i\sqrt{\pi}} e^{i\pi/4} = \frac{B}{\sqrt{\hbar\alpha}} \quad \text{اور} \quad \frac{-a}{2i\sqrt{\pi}} e^{-i\pi/4} = \frac{C}{\sqrt{\hbar\alpha}}.$$

حاصل ہوگا، جس میں a کی قیمت مساوات ۸.۴۱ سے پر کر کے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$B = -ie^{i\pi/4} D \quad \text{اور} \quad C = ie^{-i\pi/4} D \tag{۸.۴۵}$$

انہیں **کلیات جوڑ**[۱۴] کہتے ہیں، جو نقطہ واپسی کے دونوں اطراف ونٹزل و کرامرس وبرلوان حلوں کو آپس میں پیوند کرتے ہیں۔ پیوندی تفاعل موج کا کام، نقطہ واپسی پر پیدا درز کو ڈھانپنا تھا؛ اس کی ضرورت آگے نہیں آئے

[۱۴] connectionformulas



شکل ۸.۱۰: ایک انتصابی دیوار والا مخفیہ کنواں۔

گی۔ تمام چیزوں کو معمول زنی مستقل D کی صورت میں بیان کر کے نقطہ واپسی کو واپس مبدا سے اختیاری نقطہ x_2 منتقل کرتے ہوئے، ونٹزل و کرامرس و برلوان تفاعل موج (مساوات ۸.۳۱) درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$\psi(x) \cong \begin{cases} \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p(x')\,\mathrm{d}x' + \frac{\pi}{4}\right], & x < x_2 \\ \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x} |p(x')|\,\mathrm{d}x'\right], & x > x_2 \end{cases} \tag{۸.۴۶}$$

مثال ۸.۳: **ایک انتصابی دیوار والا مخفیہ کنواں۔** فرض کریں ایک مخفیہ کنویں کی $x = 0$ پر انتصابی دیوار جبکہ دوسری دیوار ڈھلوان ہے (شکل ۸.۱۰)۔ ایسی صورت میں $\psi(0) = 0$ ہوگا لہٰذا مساوات ۸.۴۶ کے تحت

$$\frac{1}{\hbar}\int_0^{x_2} p(x)\,\mathrm{d}x + \frac{\pi}{4} = n\pi, \qquad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

یا درج ذیل ہوگا۔

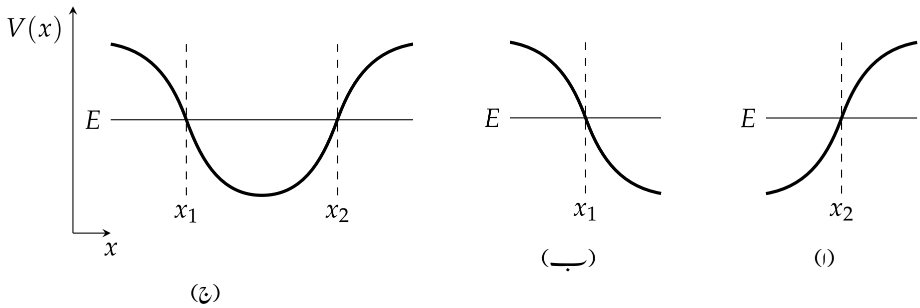
$$\int_0^{x_2} p(x)\,\mathrm{d}x = \left(n - \frac{1}{4}\right)\pi\hbar \tag{۸.۴۷}$$

مثلاً، "نصف ہارمونی مرتعش":

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2x^2, & x > 0, \\ 0, & \text{بصورت دیگر} \end{cases} \tag{۸.۴۸}$$

پر غور کریں۔ اس صورت میں

$$p(x) = \sqrt{2m[E - (1/2)m\omega^2x^2]} = m\omega\sqrt{x_2^2 - x^2}$$



شکل ۸.۱۱: بالائی رخ ڈھلوان اور نیچے رخ ڈھلوان نقاط واپسی۔

ہو گا، جہاں

$$x_2 = \frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}}$$

نقطہ واپسی ہے۔ لہٰذا

$$\int_0^{x_2} p(x)\,\mathrm{d}x = m\omega \int_0^{x_2} \sqrt{x_2^2 - x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{\pi}{4} m\omega x_2^2 = \frac{\pi E}{2\omega}$$

ہو گا، اور کوانٹازنی شرط (مساوات ۸.۴۷) درج ذیل دیگا۔

$$E_n = \left(2n - \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(\frac{3}{2}, \frac{7}{2}, \frac{11}{2}, \dots\right)\hbar\omega \tag{۸.۴۹}$$

اس مخصوص صورت میں ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین اصل اجازتی توانائیاں دیتی ہے (جو مکمل ہارمونی مرتعش کی طاق توانائیاں ہیں؛ سوال ۲.۴۲ دیکھیں)۔ □

مثال ۸.۴: **بغیر انتصابی دیواروں کا مخفیہ کنواں۔** اس نقطہ واپسی پر جہاں مخفیہ کی ڈھلوان اوپر رخ (شکل ۸.۱۱-ا) ہو، مساوات ۸.۴۶ ونٹزل و کرامرس و برلوان تفاعلات موج کو آپس میں پیوند کرتی ہے۔ نیچے ڈھلوان نقطہ واپسی (شکل ۸.۱۱-ب) پر یہی دلائل درج ذیل دیگا (سوال ۸.۹)۔

$$\psi(x) \cong \begin{cases} \frac{D'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_1} |p(x')|\,\mathrm{d}x'}, & x < x_1 \\ \frac{2D'}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x')\,\mathrm{d}x' + \frac{\pi}{4}\right], & x > x_1 \end{cases} \tag{۸.۵۰}$$

بالخصوص، مخفیہ کنویں (شکل ۸.۱۱-ج) کی بات کرتے ہوئے، "اندرونی" خطہ $(x_1 < x < x_2)$ میں تفاعل موج کو

$$\psi(x) \cong \frac{2D}{\sqrt{p(x)}}\sin\theta_2(x), \qquad \theta_2(x) \equiv \frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p(x')\,\mathrm{d}x' + \frac{\pi}{4}$$

(مساوات ۸.۴۶)، یا درج ذیل لکھا جا سکتا ہے

$$\psi(x) \cong \frac{-2D'}{\sqrt{p(x)}}\sin\theta_1(x), \qquad \theta_1(x) \equiv -\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x} p(x')\,\mathrm{d}x' - \frac{\pi}{4}$$

(مساوات ۸.۵۰)۔ ظاہر ہے، ماسوائے مضرب π کے،[15] سائن تفاعلات کے دلیل لازماً برابر ہوں گے: $\theta_2 = \theta_1 + n\pi$، لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x)\,\mathrm{d}x = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{۸.۵۱}$$

یہ کوانٹازنی شرط، دو ڈھلوان اطراف کے "عمومی" مخفیہ کنویں کی اجازتی توانائیوں کو تعین کرتا ہے۔ دھیان رہے کہ دو انتصابی دیواروں کے کلیہ (مساوات ۸.۱۶) یا ایک انتصابی دیوار کے کلیہ (مساوات ۸.۴۷) اور موجودہ کلیہ (مساوات ۸.۵۱) میں صرف اس عدد (0، $1/4$ یا $1/2$) کا فرق ہے جو n سے منفی ہوتا ہے۔ چونکہ ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین (بڑی n کی) نیم کلاسیکی طریق میں بہترین کام کرتی ہے، لہٰذا یہ فرق صرف دکھاوے کی حد تک ہے۔ بہر حال یہ نتیجہ انتہائی طاقتور ہے، جس کو استعمال کر کے، مساوات شروڈنگر حل کیے بغیر، ایک سادہ تکمل کی قیمت حاصل کر کے تخمینی اجازتی توانائیاں معلوم کی جا سکتی ہیں۔ تفاعل موج خود کہیں نہیں نظر آتا۔ □

سوال ۸.۵: زمین پر لچکدار ٹپکیاں لیتے ہوئے (کمیت m کی) گیند کے کلاسیکی مسئلے کے مماثل کوانٹائی میکانی مسئلے پر غور کریں۔[16]

ا. مخفی توانائی کیا ہو گی اس کو زمین سے بلندی x کا تفاعل لکھیں؟ (منفی x کی صورت میں مخفیہ لامتناہی ہو گا؛ گیند کبھی وہاں نہیں جا سکتا۔)

ب. اس مخفیہ کے لئے مساوات شروڈنگر حل کر کے جواب کو مناسب ایئری تفاعل کے روپ میں لکھیں (یاد رہے، بڑی z پر $\mathrm{Bi}(z)$ بے قابو بڑھتا ہے، لہٰذا اس کو لازماً رد کرنا ہو گا)۔ تفاعل $\psi(x)$ کی معمول زنی کرنے کی ضرورت نہیں۔

ج. پہلی چار اجازتی توانائیوں کو تین معنی خیز ہندسوں تک $g = 9.80\,\mathrm{m/s^2}$ اور $m = 0.1\,\mathrm{kg}$ لے کر حاصل کریں۔

د. اس ثقلی میدان میں ایک الیکٹران کی زمینی حال توانائی، eV میں، کتنی ہو گی؟ اوسطاً یہ الیکٹران زمین سے کتنی بلندی پر ہو گا؟ اشارہ: مسئلہ وریل سے $\langle x\rangle$ کا تعین کریں۔

---

[15] سائن تفاعلات کے دلیل میں فرق مضرب π نہ کے مضرب 2π ہو گا، چونکہ مجموعی منفی علامت کو معمول زنی مستقلات D اور D' میں ضم کیا جا سکتا ہے۔

[16] یہ ایک مصنوعی مسئلہ نظر آتا ہے؛ در حقیقت، نیوٹران کے لئے یہ تجربہ سر انجام دیا گیا ہے۔

سوال ۸.۶: ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین استعمال کرتے ہوئے (سوال ۸.۵ کی) ٹپکیاں کھاتے ہوئے گیند کا تجزیہ کریں۔

ا. اجازتی توانائیوں E_n کو m ، g اور $\hbar$ کی صورت میں لکھیں۔

ب. ابسوال ۸.۵-ج میں دی گئی مخصوص قیمتوں کو پُر کر کے ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین کی ابتدائی چار توانائیوں کا "بالکل ٹھیک" نتائج کے ساتھ موازنہ کریں۔

ج. کوانٹائی عدد n کو کتنا بڑا ہونا ہوگا کہ گیند اوسطاً زمین سے، مثلاً، ایک میٹر کی بلندی پر ہو۔

سوال ۸.۷: ہارمونی مرتعش کی اجازتی توانائیوں کو ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین سے حاصل کریں۔

سوال ۸.۸: ہارمونی مرتعش (جس کی زاویائی تعدد ω ہو) کی n ویں ساکن حال میں کمیت m کے ایک ذرے پر غور کریں۔

ا. نقطہ واپسی، x_2 ، تلاش کریں۔

ب. نقطہ واپسی سے کتنی بلندی (d) پر خط بند مخفیہ (مساوات ۸.۳۲ لیکن نقطہ واپسی x_2 پر ہو) میں سہو 1% ہو گا؟ یعنی، اگر

$$\frac{V(x_2+d)-V_{\text{خطی}}(x_2+d)}{V(x_2)}=0.01$$

ہو، تب d کیا ہو گا؟

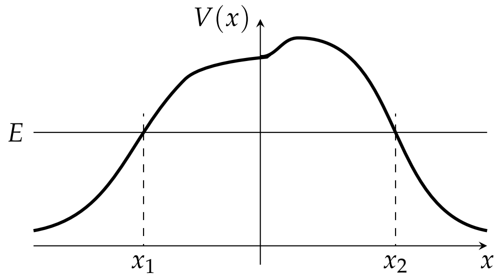
ج. جب تک $z \geq 5$ ہو $\mathrm{Ai}(z)$ کا متقاربی روپ 1% تک درست ہو گا۔ جزو-ب میں حاصل کردہ d کے لئے n کی ایسی سب سے کم قیمت تلاش کریں کہ $\alpha d \geq 5$ ہو۔ (اس سے بڑی n کے لئے ایسا منطبق خطہ موجود ہو گا جس میں خط بند مخفیہ 1% تک درست اور بڑی z روپ کا ائیری تفاعل 1% درست ہو گا۔)

سوال ۸.۹: نیچے ڈھلوان نقطہ واپسی کا پیوندی کلیہ اخذ کر کے مساوات ۸.۵۰ کی تصدیق کریں۔

سوال ۸.۱۰: مناسب پیوندی کلیات استعمال کر کے ڈھلوان دیواروں کی رکاوٹ (شکل ۸.۱۲) سے بکھراو کے مسئلہ پر غور کریں۔ اشارہ: درج ذیل روپ کے ونٹزل و کرامرس و برلوان تفاعل موج سے آغاز کریں۔

$$\psi(x)\cong\begin{cases}\dfrac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[Ae^{\frac{i}{\hbar}\int_x^{x_1}p(x')\,\mathrm{d}x'}+Be^{-\frac{i}{\hbar}\int_x^{x_1}p(x')\,\mathrm{d}x'}\right], & (x<x_1)\\[2ex] \dfrac{1}{\sqrt{|p(x)|}}\left[Ce^{\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}|p(x')|\,\mathrm{d}x'}+De^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x}|p(x')|\,\mathrm{d}x'}\right], & (x_1<x<x_2)\\[2ex] \dfrac{1}{\sqrt{p(x)}}\left[Fe^{\frac{i}{\hbar}\int_{x_2}^{x}p(x')\,\mathrm{d}x'}\right], & (x>x_2)\end{cases} \tag{۸.۵۲}$$

کسی صورت $C=0$ مت لیں۔ سرنگ زنی احتمال $T=|F|^2/|A|^2$ کا حساب کریں، اور دکھائیں کہ بلند اور چوڑی رکاوٹ کی صورت میں آپ کا نتیجہ مساوات ۸.۲۲ دے گا۔



شکل ۸.۱۲: ڈھلوانی دیواروں والا رکاوٹ۔

اضافی سوالات برائے باب ۸

سوال ۸.۱۱: عمومی قوت نمائی مخفیہ:

$$V(x) = \alpha|x|^{\nu}$$

جہاں ν ایک مثبت عدد ہے، کی اجازتی توانائیوں کو ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین سے تلاش کریں۔ اپنے نتیجہ کو $\nu = 2$ جانچیں۔ جواب:[17]

$$E_n = \alpha\left[(n - 1/2)\hbar\sqrt{\frac{\pi}{2m\alpha}}\frac{\Gamma\left(\frac{1}{\nu}+\frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\nu}+1\right)}\right]^{\left(\frac{2\nu}{\nu+2}\right)} \tag{۸.۵۳}$$

سوال ۸.۱۲: ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین استعمال کرکے سوال ۲.۵۱ کے مخفیہ کے لئے مقید حال توانائی تلاش کریں۔ نتیجہ کا ٹھیک جواب کے ساتھ موازنہ کریں۔ جواب: $-[(9/8) - (1/\sqrt{2})]\hbar^2 a^2/m$

سوال ۸.۱۳: کروی تشاکلی مخفیہ کے لئے ہم رداسی حصے (مساوات ۴.۳۷) پر ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین کا اطلاق کر سکتے ہیں۔ مساوات ۸.۴۷ کی درج ذیل روپ کو $l = 0$ کی صورت میں استعمال کرنا معقول ہو گا[18]

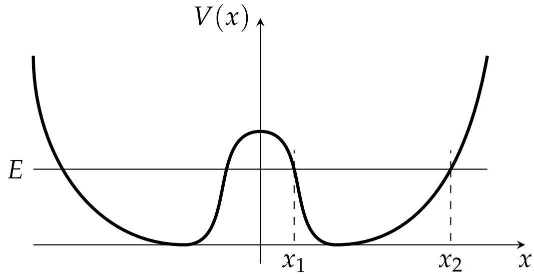
$$\int_0^{r_0} p(r)\,\mathrm{d}r = (n - 1/4)\pi\hbar \tag{۸.۵۴}$$

جہاں r_0 نقطہ واپسی ہے، (یعنی ہم $r = 0$ کو لامتناہی دیوار تصور کرتے ہیں)۔ اس کلیہ کو زیر استعمال لاتے ہوئے لوگارتھمی مخفیہ:

$$V(r) = V_0 \ln(r/a)$$

[17] ہمیشہ کی طرح، ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین نیم کلاسیکی (بڑی n) طریق میں سب سے زیادہ درست ثابت ہوتی ہے۔ بالخصوص، مساوات ۸.۵۳ زمینی حال (n=1) کے لئے اتنی اچھی نہیں ہے۔

[18] رداسی مساوات پر ونٹزل و کرامرس و برلوان تخمین کا اطلاق چند نازک اور پیچیدہ مسائل پیدا کرتا ہے، جس پر یہاں کوئی بات نہیں کی جائے گی۔



شکل ۸.۱۳: تشاکلی دوہرا کنواں؛ سوال ۸.۱۵۔

کی اجازتی توانائیوں کی اندازاً قیمت تلاش کریں (جہاں V_0 اور a مستقلات ہیں)۔ صرف $l = 0$ کی صورت پر غور کریں۔ دکھائیں کہ سطحوں کے بیچ فاصلوں کا انحصار کمیت پر نہیں۔ جزوی جواب:

$$E_{n+1} - E_n = V_0 \ln\left(\frac{n+3/4}{n-1/4}\right)$$

سوال ۸.۱۴: ونٹزل و کرامرز و برلوان تخمین کا درج ذیل روپ

$$\int_{r_1}^{r_2} p(r)\,\mathrm{d}r = (n-1/2)\pi\hbar \tag{۸.۵۵}$$

استعمال کر کے ہائیڈروجن کی مقید حال توانائیوں کی اندازاً قیمت تلاش کریں۔ موثر مخفیہ (مساوات ۴.۳۸) میں مرکز گریز جزو شامل کرنا مت بھولیں۔ درج ذیل تکمل مددگار ثابت ہو سکتا ہے۔

$$\int_a^b \frac{1}{x}\sqrt{(x-a)(b-x)}\,\mathrm{d}x = \frac{\pi}{2}(\sqrt{b}-\sqrt{a})^2 \tag{۸.۵۶}$$

آپ دیکھیں گے کہ $n \gg l$ اور $n \gg 1/2$ کی صورت میں بوہر سطحیں حاصل ہوں گی۔ جواب:

$$E_{nl} \cong \frac{-13.6\,\mathrm{eV}}{[n-(1/2)+\sqrt{l(l+1)}]^2} \tag{۸.۵۷}$$

سوال ۸.۱۵: تشاکلی دوہرا کنویں (شکل ۸.۱۳) پر غور کریں۔ ہم $E < V(0)$ والی مقید حالات میں دلچسپی رکھتے ہیں۔

ا. خطہ (i) $x > x_2$، (ii) $x_1 < x < x_2$ اور (iii) $0 < x < x_1$ کے لئے ونٹزل و کرامرز و برلوان تفاعلات موج لکھیں۔ نقطہ x_1 اور x_2 پر مناسب پیوندی کلیات کا اطلاق کر کے

(مساوات ۸.۴۶ میں x_2 کے لئے ایسا کیا گیا ہے؛ آپ کو x_1 کے لئے کرنا ہوگا) درج ذیل دکھائیں

$$\psi(x) \cong \begin{cases} \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x} |p(x')|\,\mathrm{d}x'} & (i) \\ \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin\left[\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_2} p(x')\,\mathrm{d}x' + \frac{\pi}{4}\right] & (ii) \\ \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \left[2\cos\theta e^{\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_1} |p(x')|\,\mathrm{d}x'} + \sin\theta e^{-\frac{1}{\hbar}\int_x^{x_1} |p(x')|\,\mathrm{d}x'}\right] & (iii) \end{cases}$$

جہاں درج ذیل ہوگا۔

$$\theta \equiv \frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} p(x)\,\mathrm{d}x \tag{۸.۵۸}$$

ب. چونکہ $V(x)$ تشاکلی ہے، لہٰذا ہمیں صرف جفت $(+)$ اور طاق $(-)$ تفاعلات موج پر غور کرنا ہوگا۔ اول الذکر صورت میں $\psi'(0) = 0$ ہوگا، جبکہ موخرالذکر صورت میں $\psi(0) = 0$ ہوگا۔ دکھائیں کہ اس سے درج ذیل کوانٹازنی شرط حاصل ہوتی ہے

$$\tan\theta = \pm 2e^{\phi} \tag{۸.۵۹}$$

جہاں درج ذیل ہوگا۔

$$\phi \equiv \frac{1}{\hbar}\int_{-x_1}^{x_1} |p(x')|\,\mathrm{d}x' \tag{۸.۶۰}$$

مساوات ۸.۵۹ (تخمینی) اجازتی توانائیوں کا تعین کرتی ہے (دھیان رہے کہ x_1 اور x_2 میں E کی قیمت داخل ہوتی ہے، لہٰذا θ اور ϕ دونوں E کے تفاعلات ہوں گے)۔

ج. ہم بالخصوص ایسی درمیانے رکاوٹ میں دلچسپی رکھتے ہیں جو بلند یا چوڑی یا دونوں ہو؛ ایسی صورت میں ϕ بڑا ہوگا، لہٰذا e^{ϕ} انتہائی بڑا ہوگا۔ مساوات ۸.۵۹ کے تحت θ کی قیمتیں π کی نصف عدد صحیح مضرب کے بہت قریب ہوں گی۔ اس کو ذہن میں رکھتے ہوئے $\theta = (n + 1/2)\pi + \epsilon$، جہاں $1 \ll |\epsilon|$ ہے، لکھ کر دکھائیں کہ کوانٹازنی شرط درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$\theta \cong \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi \mp \frac{1}{2}e^{-\phi} \tag{۸.۶۱}$$

د. فرض کریں دونوں کنووں میں مخفیہ قطع مکافی ہیں۔[۱۹]

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2(x+a)^2, & x < 0 \\ \frac{1}{2}m\omega^2(x-a)^2, & x > 0 \end{cases} \tag{۸.۶۲}$$

---

[۱۹] حصہ ۲.۳ کے شروع کے تذکرہ میں $\omega \cong \sqrt{V''(x_0)/m}$ لیتے ہوئے جہاں x_0 نقطہ اقل کا مقام ہے، ہم دیکھتے ہیں کہ اگر دونوں کنووں میں مخفیہ ٹھیک قطع مکافی نہ ہوں تب بھی یہاں θ کا حساب، لہٰذا نتیجہ (مساوات ۸.۶۳) تخمیناً درست ہوگا۔

اس مخفیہ کو ترسیم کر کے θ (مساوات ۸.۵۸) تلاش کریں، اور درج ذیل دکھائیں۔

$$E_n^{\pm} \cong \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \mp \frac{\hbar\omega}{2\pi}e^{-\phi} \tag{۸.۶۳}$$

تبصرہ: اگر درمیانی رکاوٹ ناقابل گزر $(\phi \rightarrow \infty)$ ہو، تب ہمارے پاس دو الگ الگ ہارمونی مرتعشات ہوتے، اور توانائیاں $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ دوہری انحطاطی ہوتیں، چونکہ ذرہ بائیں کنویں یا دائیں کنویں میں ہو سکتا ہے۔ متناہی رکاوٹ کی صورت میں (دونوں کنویں کے بیچ "رابطہ" ممکن ہو گا، لہٰذا) انحطاط ختم ہو گا۔ جفت حالات (ψ_n^+) کی توانائی معمولی کم اور طاق تفاعلات (ψ_n^-) کی توانائی معمولی زیادہ ہو گی۔

ھ. فرض کریں ذرہ دائیں کنویں سے آغاز کرتا ہے؛ یا یہ کہنا زیادہ درست ہو گا کہ، ذرہ ابتدائی طور پر درج ذیل روپ میں پایا جاتا ہے

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n^+ + \psi_n^-)$$

جہاں ہم فرض کرتے ہیں کہ ہیئت کی وہ قیمتیں منتخب کی جاتی ہیں کہ ذرے کا بیشتر حصہ دائیں کنویں میں پایا جاتا ہو۔ دکھائیں کہ یہ ذرہ دونوں کنوں کے بیچ دوری عرصہ:

$$\tau = \frac{2\pi^2}{\omega}e^{\phi} \tag{۸.۶۴}$$

کے ساتھ ارتعاش کرتا ہے۔

و. متغیر ϕ کی قیمت، جزو-د کے مخصوص مخفیہ کے لئے تلاش کریں، اور دکھائیں کہ $E \ll V(0)$ کے لئے $\phi \sim m\omega a^2/\hbar$ ہو گا۔

سوال ۸.۱۶: **شٹارک اثر میں سرنگ زنی۔** بیرونی برقی میدان چالو کرنے سے اصولاً ایک الیکٹران جوہر سے سرنگ زنی کے ذریعے باہر نکل کر جوہر کو باردار بنا سکتا ہے۔ سوال: کیا عمومی شٹارک اثر تجربے میں ایسا ہو گا؟ ہم ایک سادہ یک بُعدی نمونہ استعمال کر کے اس احتمال کی اندازاً قیمت دریافت کر سکتے ہیں: فرض کریں ایک ذرہ بہت گہرے متناہی چوکور کنواں (حصہ ۲.۶) میں پایا جاتا ہے۔

ا. کنویں کی تہہ سے ناپتے ہوئے، زمینی حال توانائی کتنی ہو گی؟ یہاں $V_0 \gg \hbar^2/ma^2$ فرض کریں۔ اشارہ: یہ ($2a$ چوڑائی کے) لامتناہی چوکور کنویں کی زمینی حال توانائی ہے۔

ب. اب اضطراب $H' = -\alpha x$ متعارف کریں (برقی میدان $\boldsymbol{\hat{\imath}}$ $E_{\text{بیرونی}}$ $E = -$ میں الیکٹران کے لئے $\alpha = eE_{\text{بیرونی}}$ ہو گا)۔ فرض کریں یہ نسبتاً کمزور اضطراب $(\alpha a \ll \hbar^2/ma^2)$ ہے۔ کل مخفیہ کا خاکہ ترسیم کر کے دیکھیں کہ ذرہ اب مثبت x رخ سرنگ زنی کے ذریعے خارج ہو سکتا ہے۔

ج. سرنگ زنی جزو ضربی γ (مساوات ۸.۲۲) کا حساب کریں، اور ذرے کو فرار ہونے کے لئے درکار وقت (مساوات ۸.۲۸) کی اندازاً معلوم کریں۔ جواب: $\gamma = \sqrt{8mV_0^3}/3\alpha\hbar,\ \tau = (8ma^2/\pi\hbar)e^{2\gamma}$

د. معقول اعداد: $V_0 = 20\,\mathrm{eV}$ (بیرونی الیکٹران کی بندشی توانائی کی عمومی قیمت)، $a = 10^{-10}\,\mathrm{m}$ (عمومی جوہری رداس)، $E_{\text{بیرونی}} = 7 \times 10^6\,\mathrm{V/m}$ (تجربہ گاہ میں مضبوط میدان)، الیکٹران بار e اور الیکٹران کمیت m لیں۔ عرصہ τ کا حساب کر کے اس کا موازنہ کائنات کی عمر سے کریں۔

سوال ۸.۱۷: میز پر کھڑی بوتل، رہائشی درجہ حرارت پر کوانٹائی سرنگ زنی کی وجہ سے کتنی دیر میں از خود گر سکتی ہے؟ اشارہ: بوتل کو کمیت m، رداس R، اور قد h کی یکساں نلکی تصور کریں۔ گرتی ہوئی بوتل کے وسطی نقطے کی، توازنی مقام $(h/2)$ سے، بلندی کو x سے ظاہر کریں۔ مخفی توانائی mgx ہو گی، اور بوتل اُس صورت گرے گی جب x کی قیمت فاصل قیمت $x_0 = \sqrt{R^2 + (h/2)^2} - h/2$ کو پہنچے۔ سرنگ زنی احتمال (مساوات ۸.۲۲) $E = 0$ کے لئے حاصل کریں۔ حراری توانائی $((1/2)mv^2 = (1/2)k_B T)$ لیتے ہوئے رفتار کی اندازاً قیمت مساوات ۸.۲۸ سے معلوم کریں۔ مناسب قیمتیں پُر کر کے اپنا جواب سالوں میں دیں۔

باب ۹

تابع وقت نظریہ اضطراب

اب تک ہم جو کچھ کر چکے ہیں اس کو **کوانٹائی سکونیات**[1] کہا جا سکتا ہے، جس میں مخفی توانائی تفاعل غیر تابع وقت: $V(\boldsymbol{r}, t) = V(\boldsymbol{r})$ ہے۔ ایسی صورت میں (تابع وقت) مساوات شروڈنگر:

$$H\Psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

کو علیحدگی متغیرات:

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r})e^{-iEt/\hbar}$$

سے حل کیا جا سکتا ہے، جہاں $\psi(\boldsymbol{r})$ غیر تابع مساوات شروڈنگر

$$H\psi = E\psi$$

کو مطمئن کرتا ہے۔ چونکہ علیحدگی حلوں میں تابعیت وقت کو قوت نمائی جزو ضربی $(e^{iEt/\hbar})$ ظاہر کرتا ہے، جو کسی بھی طبیعی مقدار $|\Psi|^2$ کے حصول میں منسوخ ہوتا ہے، لہٰذا تمام احتمالات اور توقعاتی قیمتیں وقت کے لحاظ سے مستقل ہوں گے۔ ان ساکن حالات کے خطی جوڑ سے ہم زیادہ دلچسپ تابعیت وقت والے تفاعلات موج تیار کر سکتے ہیں، لیکن اب بھی توانائی اور ان کے متعلقہ احتمالات مستقل ہوں گے۔

توانائی کی ایک سطح سے دوسری سطح میں الیکٹران کی **تحویلات** (جنہیں بعض اوقات **کوانٹائی چھلانگ**[2] کہتے ہیں) ممکن بنانے کی خاطر، ضروری ہے کہ ہم تابع وقت مخفیہ (**کوانٹائی حرکیات**[3]) متعارف کریں۔ کوانٹائی حرکیات میں

---

[1] quantumstatics
[2] quantumjumps
[3] quantumdynamics

ایسے بہت کم مسائل پائے جاتے ہیں جن کا بالکل ٹھیک ٹھیک حل معلوم کیا جا سکتا ہے۔ ہاں، اگر ہیملٹنی کے غیر تابع وقت حصہ کے لحاظ سے تابع وقت حصہ بہت چھوٹا ہو، تب اسے اضطراب تصور کیا جا سکتا ہے۔ اس باب میں، میں تابع وقت نظریہ اضطراب تیار کرتا ہوں، اور اس کی دو اہم ترین استعمال: جوہر سے اشعاعی اخراج اور انجذاب، پر غور کرتا ہوں۔

۹.۱ دو سطحی نظام

شروعات کرنے کی غرض سے فرض کریں (غیر مضطرب) نظام کے صرف دو حالات ψ_a اور ψ_b پائے جاتے ہیں۔ یہ غیر مضطرب ہیملٹنی، H^0، کے امتیازی حالات:

$$H^0\psi_b = E_b\psi_b, \qquad \text{اور} \qquad H^0\psi_a = E_a\psi_a \tag{۹.۱}$$

ہوں گے جو معیاری عمودی ہیں۔

$$\langle\psi_a|\psi_b\rangle = \delta_{ab} \tag{۹.۲}$$

کسی بھی حال کو ان کا خطی جوڑ لکھا جا سکتا ہے؛ بالخصوص، درج ذیل ہو گا۔

$$\Psi(0) = c_a\psi_a + c_b\psi_b \tag{۹.۳}$$

اس سے فرق نہیں پڑتا کہ تفاعلات ψ_a اور ψ_b مقام و فضائی تفاعلات، یا چکر کار، یا کوئی اور عجیب تفاعل ہوں؛ ہمیں یہاں صرف تابعیت وقت سے غرض ہے، لہٰذا جب میں $\Psi(t)$ لکھتا ہوں، میرا مراد وقت t پر نظام کا حال ہے۔ عدم اضطراب کی صورت میں، ہر جزو اپنی خصوصی قوت نمائی جزو ضربی کے ساتھ ارتقا:

$$\Psi(t) = c_a\psi_a e^{-iE_at/\hbar} + c_b\psi_b e^{-iE_bt/\hbar} \tag{۹.۴}$$

پائے گا۔ ہم کہتے ہیں کہ "حال ψ_a میں ذرہ پائے جانے کا احتمال" $|c_a|^2$ ہے؛ جس سے ہمارا مطلب دراصل یہ ہے کہ پیمائش سے توانائی کی قیمت E_a حاصل ہونے کا احتمال $|c_a|^2$ ہے۔ یقیناً، تفاعل Ψ کی معمول زنی کے تحت درج ذیل ہو گا۔

$$|c_a|^2 + |c_b|^2 = 1 \tag{۹.۵}$$

۹.۱.۱ مضطرب نظام

فرض کریں، اب ہم تابع وقت اضطراب، $H'(t)$، چالو کرتے ہیں۔ چونکہ ψ_a اور ψ_b ایک مکمل سلسلہ قائم کرتے ہیں، لہٰذا تفاعل موج $\Psi(t)$ کو بھی ان کا خطی جوڑ لکھا جا سکتا ہے۔ فرق صرف اتنا ہو گا کہ اب c_a اور c_b وقت t کے تفاعلات ہوں گے۔

$$\Psi(t) = c_a(t)\psi_a e^{-iE_at/\hbar} + c_b(t)\psi_b e^{-E_bt/\hbar} \tag{۹.۶}$$

(میں قوت نمائی جزو ضربیوں کو $c_a(t)$ یا $c_b(t)$ میں ضم کر سکتا ہوں، جیسا بعض لوگ کرنا پسند کرتے ہیں، لیکن میں چاہتا ہوں کے تابعیت وقت کا وہ حصہ جو عدم اضطراب کی صورت میں بھی پایا جاتا ہو نظر آتا رہے۔)
ہمارا پورا کام صرف اتنا ہے کہ ہم وقت کے تفاعلات c_a اور c_b کا تعین کریں۔ مثال کے طور پر، اگر ایک ذرہ آغاز میں حال ψ_a ($c_a(0) = 1$، $c_b(0) = 0$) میں پایا جاتا ہو اور بعد میں کسی وقت t_1 پر $c_a(t_1) = 0$، $c_b(t_1) = 1$ ہوں، تب ہم کہیں گے کہ نظام ψ_a سے ψ_b میں تحویل ہوا ہے۔

ہم $c_a(t)$ اور $c_b(t)$ معلوم کرنے کی غرض سے مطالبہ کرتے ہیں کہ $\Psi(t)$ تابع وقت مساوات شروڈنگر کو مطمئن کرے۔

$$H\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \qquad H = H^0 + H'(t) \tag{۹.۷}$$

مساوات ۹.۶ اور مساوات ۹.۷ سے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\begin{aligned}c_a[H^0\psi_a]e^{-iE_at/\hbar} + c_b[H^0\psi_b]e^{-iE_bt/\hbar} + c_a[H'\psi_a]e^{-iE_at/\hbar} + c_b[H'\psi_b]e^{-iE_bt/\hbar}\\ = i\hbar\Big[\dot{c}_a\psi_ae^{-iE_at/\hbar} + \dot{c}_b\psi_be^{-iE_bt/\hbar}\\ + c_a\psi_a\left(-\frac{iE_a}{\hbar}\right)e^{-iE_at/\hbar} + c_b\psi_b\left(-\frac{iE_b}{\hbar}\right)e^{-iE_bt/\hbar}\Big]\end{aligned}$$

مساوات ۹.۱ کی بدولت بائیں ہاتھ کے پہلے دو اجزاء دائیں ہاتھ کے آخری دو اجزاء کے ساتھ کٹتے ہیں، لہٰذا درج ذیل رہ جائے گا۔

$$c_a[H'\psi_a]e^{-iE_at/\hbar} + c_b[H'\psi_b]e^{-iE_bt/\hbar} = i\hbar\left[\dot{c}_a\psi_ae^{-iE_at/\hbar} + \dot{c}_b\psi_be^{-iE_bt/\hbar}\right] \tag{۹.۸}$$

تفاعل ψ_a کے ساتھ اندرونی ضرب لے کر ψ_a اور ψ_b کی عمودیت (مساوات ۹.۲) بروئے کار لاتے ہوئے ہم $\dot{c}_a$ کو الگ کرتے ہیں۔

$$c_a\langle\psi_a|H'|\psi_a\rangle e^{-iE_at/\hbar} + c_b\langle\psi_a|H'|\psi_b\rangle e^{-iE_bt/\hbar} = i\hbar\dot{c}_ae^{-iE_at/\hbar}$$

مختصر لکھائی کے غرض سے ہم درج ذیل متعارف کرتے ہیں:

$$H'_{ij} \equiv \langle\psi_i|H'|\psi_j\rangle \tag{۹.۹}$$

دھیان رہے کہ H' ہرمشی ہے، لہٰذا $H'_{ji} = (H'_{ij})^*$ ہو گا۔ دونوں اطراف کو $-(i/\hbar)e^{iE_at/\hbar}$ سے ضرب دے کر درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\dot{c}_a = -\frac{i}{\hbar}\left[c_aH'_{aa} + c_bH'_{ab}e^{-i(E_b-E_a)t/\hbar}\right] \tag{۹.۱۰}$$

اسی طرح ψ_b کے ساتھ اندرونی ضرب سے $\dot{c}_b$ الگ کیا جا سکتا ہے:

$$c_a\langle\psi_b|H'|\psi_a\rangle e^{-iE_at/\hbar}+c_b\langle\psi_b|H'|\psi_b\rangle e^{-iE_bt/\hbar}=i\hbar\dot{c}_be^{-iE_bt/\hbar}$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\dot{c}_b=-\frac{i}{\hbar}\left[c_bH'_{bb}+c_aH'_{ba}e^{i(E_b-E_a)t/\hbar}\right] \tag{۹.۱۱}$$

مساوات ۹.۱۰ اور مساوات ۹.۱۱ مل کر $c_a(t)$ اور $c_b(t)$ کا تعین کرتے ہیں؛ یہ دونوں مل کر دو سطحی نظام کی (تابع وقت) مساوات شروڈنگر کے مکمل معادل ہیں۔ عمومی طور پر H' کے وتری قالبی ارکان صفر ہوں گے:

$$H'_{aa}=H'_{bb}=0 \tag{۹.۱۲}$$

(عمومی صورت کے لیے سوال ۹.۴ دیکھیں)۔ اگر ایسا ہو تب مساوات سادہ روپ:

$$\dot{c}_a=-\frac{i}{\hbar}H'_{ab}e^{-i\omega_0t}c_b,\qquad \dot{c}_b=-\frac{i}{\hbar}H'_{ba}e^{i\omega_0t}c_a \tag{۹.۱۳}$$

اختیار کرتی ہے، جہاں درج ذیل ہو گا۔

$$\omega_0\equiv\frac{E_b-E_a}{\hbar} \tag{۹.۱۴}$$

(میں $E_b\geq E_a$ فرض کرتا ہوں، لہٰذا $\omega_0\geq0$ ہو گا۔)

سوال ۹.۱: ایک ہائیڈروجن جوہر کو (تابع وقت) برقی میدان $\boldsymbol{E}=E(t)\boldsymbol{k}$ میں رکھا جاتا ہے۔ زمینی حال $(n=1)$ اور (چار گنا انحطاطی) پہلے ہیجان حالات $(n=2)$ کے بیچ اضطراب $H'=eEz$ کے چاروں قالبی ارکان H'_{ij} تلاش کریں۔ دکھائیں کہ پانچوں حالات کے لیے $H'_{ii}=0$ ہو گا۔ تبصرہ: محور z کے لحاظ سے **طاق پن**[۳] کو بروئے کار لاتے ہوئے، صرف ایک تکمل حل کرنے کی ضرورت ہو گی؛ اس روپ کا اضطراب زمینی حال سے $n=2$ حالات میں سے صرف ایک تک رسائی دیتا ہے، لہٰذا یہ نظام دو حالات تشکیل کے طور پر کام کرے گا؛ یہاں فرض کیا گیا ہے کہ بلند ہیجان حالات تک تحویل نظر انداز کی جا سکتی ہے۔

سوال ۹.۲: غیر تابع وقت اضطراب کی صورت میں $c_a(0)=1$ اور $c_b(0)=0$ لیتے ہوئے مساوات ۹.۱۳ حل کریں۔ تصدیق کریں کہ $\left|c_a(t)\right|^2+\left|c_b(t)\right|^2=1$ ہے۔ تبصرہ: بظاہر یہ نظام "خالص ψ_a" اور "کسی ψ_b" کے بیچ ارتعاش کرتا ہے۔ کیا یہ میرے اس عمومی دعوے کی نفی نہیں کرتا کہ غیر تابع وقت اضطراب کی صورت میں تحویل نہیں ہو گی؟ جی نہیں، لیکن اس کی وجہ کچھ لطیف ہے: یہاں ψ_a اور ψ_b نہ کبھی ہیملٹنی کے امتیازی تفاعلات تھے اور نہ ہیں؛ توانائی کی پیمائش کبھی بھی E_a یا E_b نہیں دیگی۔ نظام پر نظر ڈالنے کی خاطر، تابع وقت نظریہ اضطراب میں ہم عموماً اضطراب چالو کر کے کچھ دورانیہ کے بعد بند

---

[۳] oddness

کرتے ہیں۔ آغاز اور اختتام میں ψ_a اور ψ_b بالکل ٹھیک ہیملٹنی کے امتیازی حالات ہوں گے، اور صرف اس سیاق و سباق میں ہم کہہ سکتے ہیں کہ نظام ایک سے دوسرے میں تحویل ہوا۔ یوں، موجودہ مسئلے میں، فرض کریں کہ وقت $t = 0$ پر اضطراب چالو کیا جاتا ہے جسے وقت t پر بند کیا جاتا ہے؛ اس سے حساب پر کوئی فرق نہیں پڑے گا، تاہم یہ نتائج کی معقول تشریح ممکن بناتی ہے۔

سوال ۹.۳: فرض کریں اضطراب کا روپ (وقت کا) δ تفاعل ہے۔

$$H' = U\delta(t)$$

فرض کریں $U_{aa} = U_{bb} = 0$ اور $U_{ab} = U_{ba}^* \equiv \alpha$ ہے۔ اگر $c_a(-\infty) = 1$ اور $c_b(-\infty) = 0$ ہوں، $c_a(t)$ اور $c_b(t)$ تلاش کریں، اور تصدیق کریں کہ $\left|c_a(t)\right|^2 + \left|c_b(t)\right|^2 = 1$ ہے۔ تحویل ہونے کا خالص احتمال ($t \to \infty$ کے لیے $P_{a\to b}$) کیا ہوگا؟ اشارہ: آپ ڈیلٹا تفاعل کو مستطیلوں کے تسلسل کی تحدیدی حد لے سکتے ہیں۔

جواب: $P_{a\to b} = \sin^2(|\alpha|/\hbar)$

۹.۱.۲ تابع وقت نظریہ اضطراب

اب تک سب کچھ بالکل ٹھیک رہا ہے: ہم نے اضطراب کی جسامت کے بارے میں کچھ فرض نہیں کیا۔ لیکن، "چھوٹے" H' کی صورت میں ہم مساوات ۹.۱۳ کو (درج ذیل) یک بعد دیگر تخمین سے حل کر سکتے ہیں۔ فرض کریں ذرہ زیریں حال:

$$c_a(0) = 1, \quad c_b(0) = 0 \tag{۹.۱۵}$$

سے آغاز کرتا ہے۔ عدم اضطراب کی صورت میں ذرہ ہمیشہ کے لیے یہیں (صفر رتبی میں) رہے گا۔

صفر رتبی:

$$c_a^{(0)}(t) = 1, \quad c_b^{(0)}(t) = 0 \tag{۹.۱۶}$$

(میں تخمین کے رتبہ کو زیر بالا میں قوسین میں لکھتا ہوں۔ یوں $c_a^{(0)}(t)$ میں 0 رتبہ صفر کو ظاہر کرتا ہے۔)

ہم مساوات ۹.۱۳ کے دائیں ہاتھ میں رتبہ صفر قیمتیں پُر کر کے اول رتبی تخمین حاصل کرتے ہیں۔

اول رتبی:

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}c_a^{(1)}}{\mathrm{d}t} &= 0 \to c_a^{(1)}(t) = 1\\
\frac{\mathrm{d}c_b^{(1)}}{\mathrm{d}t} &= -\frac{i}{\hbar}H'_{ba}e^{i\omega_0 t} \to c_b^{(1)} = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t H'_{ba}(t')e^{i\omega_0 t'}\,\mathrm{d}t'
\end{aligned} \tag{۹.۱۷}$$

اب ہم انہیں دائیں ہاتھ میں پُر کر کے رتبہ دوم تخمین حاصل کرتے ہیں۔

دوم رتبی:

$$\frac{\mathrm{d}c_a^{(2)}}{\mathrm{d}t} = -\frac{i}{\hbar}H'_{ab}e^{-i\omega_0 t}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_0^t H'_{ba}(t')e^{i\omega_0 t'}\,\mathrm{d}t' \rightarrow$$
$$c_a^{(2)}(t) = 1 - \frac{1}{\hbar^2}\int_0^t H'_{ab}(t')e^{-i\omega_0 t'}\left[\int_0^{t'} H'_{ba}(t'')e^{i\omega_0 t''}\,\mathrm{d}t''\right]\mathrm{d}t' \tag{۹.۱۸}$$

جہاں c_b تبدیل نہیں ہوا $(c_b^{(2)}(t) = c_b^{(1)}(t))$۔ (دھیان رہے کہ $c_a^{(2)}(t)$ میں صفر رتبی جزو بھی شامل ہے؛ دوم رتبی تصحیح صرف تکملی حصہ ہو گا۔)

اصولاً، ہم اسی طرح چلتے ہوئے n رتبی تخمین کو مساوات ۹.۱۳ کے دائیں ہاتھ میں پُر کر کے $(n+1)$ رتبی تخمین کے لیے حل کر سکتے ہیں۔ صفر رتبی میں H' کا کوئی جزو ضربی نہیں پایا جاتا، اول رتبی تصحیح میں H' کا ایک جزو ضربی پایا جاتا ہے، دوم رتبی تصحیح میں H' کے دو جزو ضربی پائے جاتے ہیں، وغیرہ۔[۵] اول رتبی تخمین میں سہو $|c_a^{(1)}(t)|^2 + |c_b^{(1)}(t)|^2 \neq 1$ سے صاف ظاہر ہے (ٹھیک عددی سروں کو یقیناً مساوات ۹.۵ پر پورا اترنا ہو گا)۔ ہاں H' میں اول رتبہ تک $|c_a^{(1)}(t)|^2 + |c_b^{(1)}(t)|^2$ کی قیمت 1 ہو گی؛ اول رتبی تخمین سے اتنی ہی توقع کی جا سکتی ہے۔ یہی کچھ زیادہ بلند رتبی تخمین کے لیے بھی ہو گا۔

سوال ۹.۴: فرض کریں آپ $H'_{aa} = H'_{bb} = 0$ نہیں لیتے۔

ا. صورت $c_a(0) = 1$ اور $c_b(0) = 0$ کے لئے اول رتبی نظریہ اضطراب سے $c_a(t)$ اور $c_b(t)$ حاصل کریں۔ دکھائیں کہ H' میں اول رتبہ تک $|c_a^{(1)}(t)|^2 + |c_b^{(1)}(t)|^2 = 1$ ہو گا۔

ب. اس مسئلے کو بہتر انداز میں نمٹا جا سکتا ہے۔ درج ذیل لیکر

$$d_a \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t H'_{aa}(t')\,\mathrm{d}t'}c_a, \qquad d_b \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^t H'_{bb}(t')\,\mathrm{d}t'}c_b \tag{۹.۱۹}$$

دکھائیں کہ

$$\dot{d}_a = -\frac{i}{\hbar}e^{i\phi}H'_{ab}e^{-i\omega_0 t}d_b; \qquad \dot{d}_b = -\frac{i}{\hbar}e^{-i\phi}H'_{ba}e^{i\omega_0 t}d_a \tag{۹.۲۰}$$

ہو گا، جہاں درج ذیل ہے۔

$$\phi(t) \equiv \frac{1}{\hbar}\int_0^t [H'_{aa}(t') - H'_{bb}(t')]\,\mathrm{d}t' \tag{۹.۲۱}$$

---

[۵] دھیان رہے کہ ہر جفت رتبہ میں c_a، اور ہر طاق رتبہ میں c_b تبدیل ہوتا ہے؛ اگر نظام ان دو حالات کے خطی جوڑ سے آغاز کرے، یا اضطراب میں وتری ارکان پائے جائیں، تب ایسا نہیں ہو گا۔

یوں (H' کے ساتھ چسپاں اضافی جزو ضرب $e^{i\phi}$ کے علاوہ) d_a اور d_b کی مساواتیں، ساخت کے لحاظ سے مساوات ۹.۱۳ کی متماثل ہیں۔

ج. اول رتبی نظریہ اضطراب سے، جزو-ب کی ترکیب استعمال کرتے ہوئے، $c_a(t)$ اور $c_b(t)$ حاصل کریں، اور اپنے جواب کا جزو-الف کے ساتھ موازنہ کریں۔ دونوں میں فرق پر تبصرہ کریں۔

سوال ۹.۵: عمومی صورت $c_a(0) = a$ ، $c_b(0) = b$ کے لیے نظریہ اضطراب میں مساوات ۹.۱۳ کو دوم رتبہ تک حل کریں۔

سوال ۹.۶: غیر تابع وقت اضطراب (سوال ۹.۲) کے لیے $c_a(t)$ اور $c_b(t)$ کو دوم رتبہ تک حاصل کریں۔ اپنے جواب کا ٹھیک ٹھیک نتیجے کے ساتھ موازنہ کریں۔

۹.۱.۳ سائن نما اضطراب

فرض کریں اضطراب میں تابعیت وقت سائن نما ہو:

$$H'(\boldsymbol{r},t) = V(\boldsymbol{r})\cos(\omega t) \tag{۹.۲۲}$$

تب

$$H'_{ab} = V_{ab}\cos(\omega t) \tag{۹.۲۳}$$

ہو گا، جہاں V_{ab} درج ذیل ہے۔

$$V_{ab} \equiv \langle\psi_a|V|\psi_b\rangle \tag{۹.۲۴}$$

(عملاً، تقریباً ہر صورت میں وتری قابلی ارکان صفر ہوتے ہیں، لہٰذا پہلے کی طرح یہاں بھی میں فرض کرتا ہوں کہ وتری قابلی ارکان صفر ہیں۔) اول رتبہ تک (یہاں سے آگے، ہم صرف اول رتبہ تک کام کریں گے، لہٰذا زیر بالا میں رتبہ کی نشاندہی نہیں کی جائے گی)) درج ذیل ہو گا (مساوات ۹.۱۷)۔

$$\begin{aligned} c_b(t) &\cong -\frac{i}{\hbar}V_{ba}\int_0^t \cos(\omega t')e^{i\omega_0 t'}\,\mathrm{d}t' = -\frac{iV_{ba}}{2\hbar}\int_0^t \left[e^{i(\omega_0+\omega)t'} + e^{i(\omega_0-\omega)t'}\right]\mathrm{d}t' \\ &= -\frac{V_{ba}}{2\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t}-1}{\omega_0+\omega} + \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t}-1}{\omega_0-\omega}\right] \end{aligned} \tag{۹.۲۵}$$

یہی جواب ہے، لیکن اس کے ساتھ کام کرنا ذرا دشوار ہو گا۔ جبری تعدد (ω) کو تحویلی تعدد (ω_0) کے بہت قریب رہنے کا پابند بنانے سے، چوکور قوسین میں دوسرا جزو غالب ہو گا، جس سے چیزیں نہایت آسان ہو جاتی ہیں؛ بالخصوص ہم درج ذیل فرض کرتے ہیں۔

$$\omega_0 + \omega \gg |\omega_0 - \omega| \tag{۹.۲۶}$$

سے بہت بڑی پابندی نہیں ہے، چونکہ کسی دوسرے تعدد پر تحویل کا احتمال نہ ہونے کے برابر ہے۔[۶] پہلے جزو کو نظر انداز کرتے ہوئے درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$
\begin{aligned}
c_b(t) &\cong -\frac{V_{ba}}{2\hbar}\frac{e^{i(\omega_0-\omega)t/2}}{\omega_0-\omega}\left[e^{i(\omega_0-\omega)t/2}-e^{-i(\omega_0-\omega)t/2}\right] \\
&= -i\frac{V_{ba}}{\hbar}\frac{\sin[(\omega_0-\omega)t/2]}{\omega_0-\omega}e^{i(\omega_0-\omega)t/2}
\end{aligned} \tag{۹.۲۷}
$$

ایک ذرہ جو حال ψ_a سے آغاز کرے کے لمحہ t پر حال ψ_b میں پایا جاتا ہو، کے تحویل کا احتمال، جس کو **تحویلی احتمال**[۷] کہتے ہیں، درج ذیل ہو گا۔

$$
P_{a\to b}(t)=\left|c_b(t)\right|^2 \cong \frac{\left|V_{ab}^2\right|}{\hbar^2}\frac{\sin^2[(\omega_0-\omega)t/2]}{(\omega_0-\omega)^2} \tag{۹.۲۸}
$$

اس نتیجے کا دلچسپ پہلو یہ ہے کہ، وقت کے لحاظ سے تحویلی احتمال سائن نما ارتعاش کرتا ہے (شکل ۹.۱)۔ یہ $|V_{ab}|^2/\hbar^2(\omega_0-\omega)^2$ کی اعظم قیمت تک پہنچ کر، جو لازماً 1 سے بہت کم ہے (ورنہ ہم اضطراب کو چھوٹا فرض نہیں کر پائیں گے) یہ واپس گر کر صفر ہوتا ہے! لمحات $t_n = 2n\pi/|\omega_0-\omega|$ پر، جہاں $n=1,2,3,\dots$ ہے، ذرہ لازماً نچلے حال میں ہو گا۔ اگر آپ تحویل کا احتمال بڑھانا چاہتے ہیں، اضطراب کو لمبے عرصے کے لیے چالو نہ رکھیں؛ بہتر ہو گا کہ آپ وقت $\pi/|\omega_0-\omega|$ پر اضطراب کو بند کر کے نظام کو بالائی حال میں "پانے" کی امید کریں۔ سوال ۹.۷ میں آپ دیکھیں گے کہ دو حالات کے بیچ تحویل، نظریہ اضطراب کی پیدا کردہ مصنوعی خاصیت نہیں، بلکہ ٹھیک حال میں بھی ایسا ہی ہو گا، اگرچہ تحویلی تعدد کچھ مختلف ہو گا۔

جیسا میں ذکر کر چکا ہوں، تحویل کا احتمال اس صورت سب سے زیادہ ہو گا جب جبری تعدد قدرتی تعدد ω_0 کے قریب ہو۔ شکل ۹.۲ میں ω کے لحاظ سے $P_{a\to b}$ ترسیم کر کے اس حقیقت کو اجاگر کیا گیا ہے۔ چوٹی کی بلندی $(|V_{ab}|t/2\hbar)^2$ جبکہ چوڑائی $4\pi/t$ ہے؛ ظاہر ہے کہ وقت گزرنے کے ساتھ ساتھ اس کی بلندی بڑھتی اور چوڑائی گھٹتی ہے۔ (بظاہر، اعظم قیمت بغیر کسی حد کی بتدریج بڑھتی ہے۔ تاہم 1 تک پہنچنے سے بہت پہلے چھوٹے اضطراب کا مفروضہ ناکارہ ہو جاتا ہے، لہٰذا ہم نسبتاً کم t کے لیے اس نتیجے پر یقین کر سکتے ہیں۔ سوال ۹.۷ میں آپ دیکھیں گے کہ ٹھیک نتیجہ 1 سے تجاوز نہیں کرتا۔)

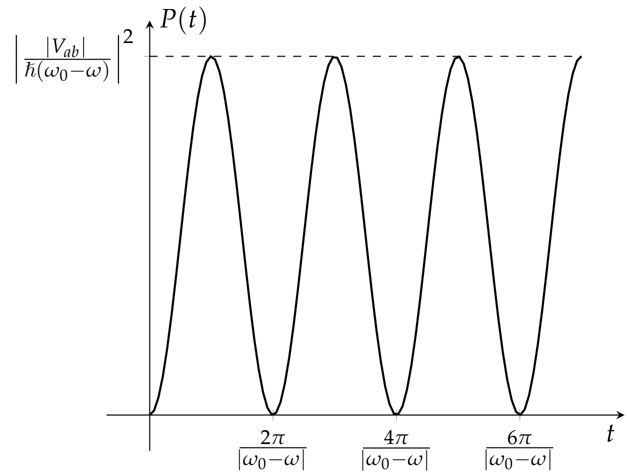
سوال ۹.۷: مساوات ۹.۲۵ میں پہلا جزو $\cos(\omega t)$ کے $e^{i\omega t}/2$ حصہ سے، اور دوسرا $e^{-i\omega t}/2$ سے آتا ہے۔ یوں پہلے جزو کو نظر انداز کرنا باضابطہ طور پر $H'=(V/2)e^{-i\omega t}$ لکھنے کا معادل ہے، یعنی ہم درج ذیل کہہ سکتے ہیں۔

$$
H'_{ba}=\frac{V_{ba}}{2}e^{-i\omega t},\qquad H'_{ab}=\frac{V_{ab}}{2}e^{i\omega t} \tag{۹.۲۹}
$$

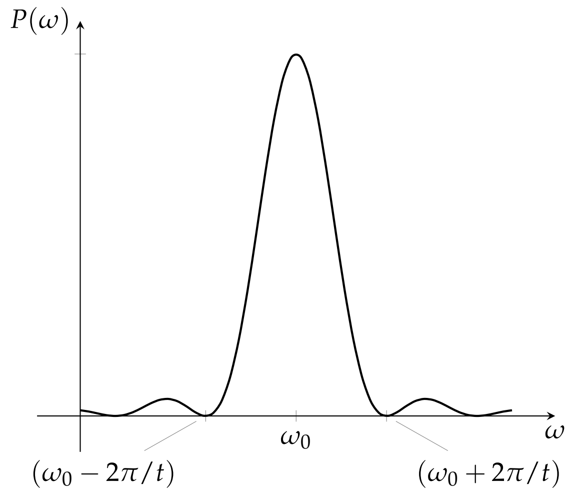
---

[۶] آنے والے حصوں میں ہم اس نظریے کا اطلاق روشنی پر کریں گے، جس کا $\omega \sim 10^{15}\,\mathrm{s}^{-1}$ ہے، لہٰذا دونوں اجزاء میں نسب نما انتہائی بڑا ہو گا، ماسوائے ω_0 کے قریب (دوسرے جزو میں)۔

[۷] transitionprobability



شکل ۹.۱: سائن نما اضطراب کے لئے وقت کے لحاظ سے تحویلی احتمال (مساوات ۹.۲۸)۔



شکل ۹.۲: تحویلی احتمال بالمقابل متحرک تعدد (مساوات ۹.۲۸)۔

(ہیملٹنی قالب کو ہرمشی بنانے کی خاطر موخر الذکر کی ضرورت پیش آتی ہے؛ آپ کہہ سکتے ہیں کہ ہم $c_a(t)$ کے لیے مساوات ۹.۲۵ کی طرح کلیہ میں غالب جزو منتخب کرتے ہیں۔) اس کو **گھومتی موج تخمین**[۸] کہتے ہیں۔ جناب **رابی** نے دیکھا کہ حساب کے آغاز میں گھومتی موج تخمین کرتے ہوئے مساوات ۹.۱۳ کو، نظریہ اضطراب استعمال کیے بغیر اور میدان کے زور کے بارے میں کچھ فرض کیے بغیر، بالکل ٹھیک حل کیا جا سکتا ہے۔

ا. عمومی ابتدائی معلومات $c_a(0) = 1$، $c_b(0) = 0$ کے لیے گھومتی موج تخمین (مساوات ۹.۲۹) لیتے ہوئے مساوات ۹.۱۳ حل کریں۔ اپنے جوابات ($c_a(t)$ اور $c_b(t)$) کو **رابی پلٹنی تعدد:**[۹]

$$\omega_r \equiv \frac{1}{2}\sqrt{(\omega-\omega_0)^2 + (|V_{ab}|/\hbar)^2} \tag{۹.۳۰}$$

کی صورت میں لکھیں۔

ب. تحویلی احتمال $P_{a\to b}(t)$ کا تعین کریں، اور دکھائیں کہ یہ کبھی بھی 1 سے تجاوز نہیں کرتا۔ تصدیق کریں کہ $|c_a(t)|^2 + |c_b(t)|^2 = 1$ ہے۔

ج. تصدیق کریں کہ "کم" اضطراب کی صورت میں $P_{a\to b}(t)$ نظریہ اضطراب کا نتیجہ (مساوات ۹.۲۸) دے گا۔ سیاق و سباق کے لحاظ سے یہاں "کم" سے مراد V پر عائد کیا پابندی ہے۔

د. نظام پہلی مرتبہ اپنے ابتدائی حال میں کس وقت واپس آئے گا؟

۹.۲ اشعاعی اخراج اور انجذاب

۹.۲.۱ برقناطیسی امواج

ایک برقناطیسی موج (جس کو میں روشنی کہوں گا، اگرچہ یہ زیریں سرخ، بالائے بصری شعاع، خرد امواج، ایکس رے، وغیرہ ہو سکتی ہے؛ جن میں صرف تعدد کا فرق ہے) عرضی (اور باہم قائمہ) ارتعاشی برقی اور مقناطیسی میدانوں پر مشتمل ہو گا (شکل ۹.۳)۔ ایک جوہر، گزرتی ہوئی بصری موج کی برقی جزو کو، بنیادی طور پر رد عمل کرتا ہے۔ اگر طول موج (جوہر کی جسامت کے لحاظ سے) لمبا ہو، ہم میدان کے **فاصلاتی** تغیر کو نظر انداز کر سکتے ہیں۔[۱۰] تب جوہر سائن نما ارتعاشی برقی میدان:

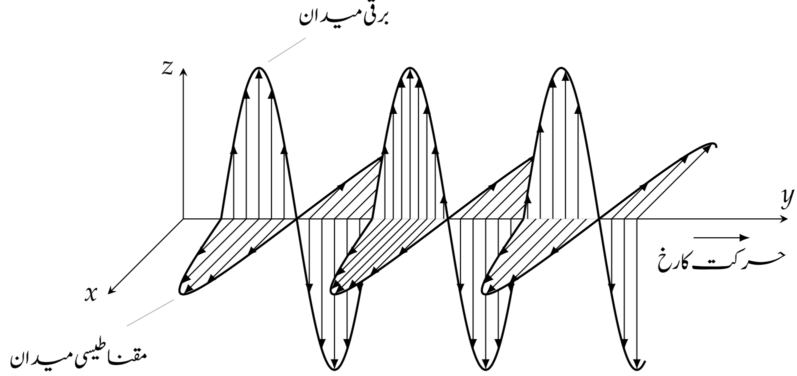
$$\boldsymbol{E} = E_0 \cos(\omega t)\,\boldsymbol{k} \tag{۹.۳۱}$$

---

[۸] rotating wave approximation

[۹] Rabi flopping frequency

[۱۰] بصری روشنی کے لئے $\lambda \sim 500\,\text{nm}$ جبکہ جوہر کا قطر $0.1\,\text{nm}$ کے لگ بھگ ہے، لہٰذا یہ تخمین معقول ہے؛ تاہم ایکس رے کے لئے ایسا نہیں ہو گا۔ سوال ۹.۲۱ میدان کے فاصلاتی تغیر پر غور کرتا ہے۔



شکل ۹.۳: برقناطیسی موج۔

کے زیر اثر ہو گا (فی الحال میں روشنی کو یک رنگی اور z رخ تقطیب شدہ فرض کرتا ہوں)۔ اضطرابی ہیملٹنی[۱۱] درج ذیل ہو گی، جہاں q الیکٹران کا بار ہے۔[۱۲]

$$H' = -qE_0 z\cos(\omega t) \tag{۹.۳۲}$$

بظاہر درج ذیل ہو گا۔[۱۳]

$$H'_{ba} = -\wp E_0\cos(\omega t), \qquad \wp \equiv q\langle\phi_b|z|\phi_a\rangle \tag{۹.۳۳}$$

عمومی طور پر، ψ متغیر z کا جفت یا طاق تفاعل ہو گا؛ دونوں صورتوں میں $z|\psi|^2$ طاق ہو گا، جس کا تکمل صفر ہو گا (چند مثالوں کے لئے سوال ۹.۱ دیکھیں)۔ اسی کی بنا پر ہم فرض کرتے ہیں کہ H' کے وتری قالبی ارکان صفر ہوں گے۔ یوں

$$V_{ba} = -\wp E_0 \tag{۹.۳۴}$$

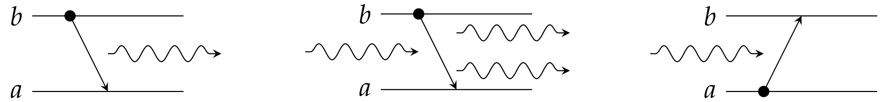
لیتے ہوئے، روشنی اور مادے کا باہم عمل ٹھیک اُسی قسم کے ارتعاشی اضطراب کے تحت ہو گا جس پر ہم نے حصہ ۹.۱.۳ میں غور کیا۔

---

[۱۱] ساکن میدان $\boldsymbol{E}$ میں بار q کی توانائی $-q\int \boldsymbol{E}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ ہو گی۔ آپ تابع وقت (یعنی غیر ساکن) میدان کے لئے برقی سکونیات کے کلیہ کے استعمال پر ناراض ہو سکتے ہیں۔ میں بغیر کہے، فرض کرتا ہوں کہ (جوہر کے اندر) الیکٹران کو حرکت کرنے کے لئے درکار وقت سے ارتعاش کا دوری عرصہ زیادہ ہے۔

[۱۲] ہمیشہ کی طرح ہم فرض کرتے ہیں کہ مرکزہ بھاری اور ساکن ہے؛ ہمیں یہاں الیکٹران کے تفاعل موج سے غرض ہے۔

[۱۳] حرف $\wp$ کے استعمال سے آپ کو **برقی جفت قطب کا معیار اثر** یاد دلایا جاتا ہے (جس کے لئے برقی حرکیات میں حرف p مستعمل ہے؛ یہاں اسے ٹیڑھا $\wp$ لکھا گیا ہے تاکہ معیار حرکت کے ساتھ غلط فہمی پیدا نہ ہو۔) درحقیقت، جفت قطب معیار حرکت عامل، $q\boldsymbol{r}$، کے z جزو کا، $\wp$ غیر وتری قالبی رکن ہے۔ برقی جفت قطب معیار حرکات کے ساتھ وابستگی کی بنا پر، ایسا اخراج جو مساوات ۹.۳۳ کے تحت ہو **برقی جفت قطب اخراج** کہلاتا ہے۔ یہ، کم از کم بصری خطہ میں، غالب قسم ہے۔ عمومیت اور اصطلاحات کے لئے سوال ۹.۲۱ دیکھیں۔



(ج)ازخود اخراج (ب) تحریک زدہ اخراج (ا)جذب

شکل ۹.۴: روشنی کا جوہر کے ساتھ تین قسم کے باہم عمل پائے جاتے ہیں۔

۹.۲.۲ انجذاب، تحریک شدہ اخراج اور ازخود اخراج

ایک جوہر جو ابتدائی طور پر زیریں حال ψ_a میں پایا جاتا ہو پر تقطیب شدہ یک رنگی روشنی کی شعاع ڈالی جاتی ہے۔ بالا حال ψ_b میں تحویل کا احتمال مساوات ۹.۲۸ دیتی ہے جو (مساوات ۹.۳۴ کو مد نظر رکھتے ہوئے) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$P_{a\to b}(t) = \left(\frac{|\wp|\, E_0}{\hbar}\right)^2 \frac{\sin^2[(\omega_0-\omega)t/2]}{(\omega_0-\omega)^2} \tag{۹.۳۵}$$

اس عمل میں برقناطیسی میدان سے جوہر $E_b - E_a = \hbar\omega_0$ توانائی جذب کرتا ہے۔ ہم کہتے ہیں اس نے "ایک نوریہ جذب کیا" (شکل ۹.۴-ا)۔ (جیسا میں ذکر کر چکا ہوں، لفظ "نوریہ" در حقیقت **کوانٹائی برقی حرکیات**[14] [برقناطیسی میدان کی کوانٹائی نظریہ] سے تعلق رکھتا ہے، جبکہ ہم میدان کو کلاسیکی نقطہ نظر سے دیکھ رہے ہیں۔ یہ زبان اُس وقت تک استعمال کرنا مناسب ہے جب تک آپ اس سے زیادہ گہرے مطلب نہ لیں۔)

یقیناً، میں بالا حال ($c_a(0) = 0$ اور $c_b(0) = 1$) سے آغاز کرتے ہوئے پورا عمل دوبارہ کر سکتا ہوں۔ آپ چاہیں تو ایسا کر سکتے ہیں؛ نتیجہ بالکل وہی ہو گا؛ البتہ اس مرتبہ $P_{b\to a} = |c_a(t)|^2$ حاصل ہو گا، جو نچلے زیریں سطح میں تحویل کا احتمال ہو گا۔

$$P_{b\to a}(t) = \left(\frac{|\wp|\, E_0}{\hbar}\right)^2 \frac{\sin^2[(\omega_0-\omega)t/2]}{(\omega_0-\omega)^2} \tag{۹.۳۶}$$

(چونکہ ہم a اور b کو آپس میں بدل $(a \leftrightarrow b)$ رہے ہیں جو ω_0 کی جگہ $-\omega_0$ ڈالتا ہے، لہٰذا لازماً یہی نتیجہ حاصل ہو گا۔ مساوات ۹.۲۵ پر پہنچ کر اب ہم پہلا جزو چنتے ہیں جس کے نسب نما میں $\omega + -\omega_0$ ہو گا، باقی حساب پہلے کی طرح ہے۔) لیکن اگر آپ رک کر سوچیں تو یہ ایک حیرت انگیز نتیجہ ہے: بالا حال میں پائے جانے والے ذرے پر روشنی کی شعاع ڈالنے سے ذرہ زیریں حال میں تحویل ہوتا ہے اور اس کا احتمال بالکل ٹھیک وہی ہو گا جو زیریں حال سے بالا حال تحویل کا ہے۔ اس عمل کو **تحریک زدہ اخراج**[15] کہتے ہیں، جس کی پیشگوئی آئنسٹائن نے کی تھی۔

---

[14] quantumelectrodynamics
[15] stimulatedemission

تحریک زدہ اخراج کی صورت میں برقناطیسی میدان جوہر سے $\hbar\omega_0$ توانائی کرتا ہے؛ ہم کہتے ہیں ایک نوریہ داخل ہوا اور دو نوریے (ایک اصل جس نے تحویل پیدا کی اور دوسرا جو تحویل کی بدولت پیدا ہوا) باہر نکلے (شکل ۹.۴-ب)۔ اس طرح **افزائش**[۱۶] کا امکان پیدا ہوتا ہے، چونکہ ایک بوتل میں بہت سارے جوہر، جو بالا حال میں ہوں، کو ایک آمدی نوریہ **متحرک**[۱۷] کر کے **مسلسل تعامل**[۱۸] پیدا کریگا؛ یوں پہلا نوریہ 2 نوریے پیدا کرے گا، یہ نوریے 4 پیدا کریں گے، وغیرہ۔ **لیزر**[۱۹] کا اصول یہی ہے۔ دھیان رہے کہ (لیزر عمل کے لیے) ضروری ہے کہ جوہر کی اکثریت بالا حال میں پہنچائی جائے (جسے **آبادی الٹنا**[۲۰] کہتے ہیں)؛ چونکہ انجذاب (جو ایک نوریہ کم کرتا ہے) اور تحریک زدہ اخراج (جو ایک پیدا کرتا ہے) بالمقابل ہوں گے، لہٰذا دونوں حالات کی برابر تعداد سے آغاز کر کے افزائش پیدا نہیں کی جا سکتی۔

(انجذاب اور تحریک شدہ اخراج کے علاوہ) روشنی اور مادے کے باہم عمل کا تیسرا طریقہ بھی پایا جاتا ہے؛ اس کو **ازخود اخراج**[۲۱] کہتے ہیں۔ اس میں بیرونی برقناطیسی میدان، جو اخراج پیدا کر سکتا تھا، کی عدم موجودگی میں ہیجان جوہر زیریں حال میں تحویل ہو کر ایک نوریہ خارج کرتا ہے (شکل ۹.۴-ج)۔ ہیجان حال سے جوہر کا زمینی حال میں تنزل عموماً اسی ذریعہ سے ہوتا ہے۔ پہلی نظر میں واضح نہیں کہ ازخود اخراج کیوں کر ہو گا۔ ساکن حال (اگرچہ ہیجان) جوہر کو کیا ضرورت پیش آتی ہے کہ وہ بیرونی اضطراب کی عدم موجودگی میں زمینی حال میں تحویل ہو، اسے وہیں عمر بھر رہنا چاہیے۔ درحقیقت، جوہر وہیں رہتا اگر اس پر کسی قسم کا بیرونی اضطراب اثر انداز نہ ہوتا۔ البتہ، کوانٹائی برقی حرکیات میں زمینی حال میں بھی میدان غیر صفر نہیں ہوتے؛ جیسا (مثال کے طور پر) ہارمونی مرتعش زمینی حال میں بھی غیر صفر توانائی $(\hbar\omega/2)$ کا حامل ہے۔ آپ تمام روشنی کو روک لیں، کمرے کو مطلق صفر حرارت پر لے جائیں، تب بھی کچھ برقناطیسی شعاع پائی جائے گی، اور یہی "صفر نقطی" اخراج ازخود اخراج کا سبب بنتا ہے۔ اگر جڑ سے دیکھا جائے تو تمام اخراج تحریک شدہ اخراج ہو گا۔ آپ کو یہ امتیاز کرنا ہو گا کہ آیا آپ میدان فراہم کر رہے ہیں یا قدرتی میدان پایا جاتا ہے۔ اس نقطہ نظر سے یہ کلاسیکی اخراجی عمل کے بالکل اُلٹ ہے، جہاں تمام اخراج ازخود ہوتا ہے اور تحریک شدہ اخراج کا تصور نہیں پایا جاتا۔

کوانٹائی برقی حرکیات اس کتاب کی دسترس سے باہر ہے،[۲۲] تاہم آئنسٹائن کی ایک خوبصورت دلیل ان تینوں (انجذاب، تحریک شدہ اخراج اور ازخود اخراج) کا تعلق پیش کرتی ہے۔ آئنسٹائن نے ازخود اخراج کی وجہ (زمینی حال برقناطیسی میدان کا اضطراب) پیش نہیں کی، تاہم انکے نتائج ہمیں ازخود اخراج کا حساب کرنے کا مجاز بناتی ہے، جس سے ہیجان جوہری حال کا قدرتی عرصہ حیات تلاش کیا جا سکتا ہے۔[۲۳] البتہ ایسا کرنے سے پہلے، ہر طرف سے غیر یک رنگی، غیر تقطیب شدہ، غیر اتفاقی برقناطیسی امواج کی آمد (جیسا

---

amplification[۱۶]
trigger[۱۷]
chainreaction[۱۸]
laser[۱۹]
populationinversion[۲۰]
spontaneousemission[۲۱]

[۲۲] آئنسٹائن کا مقالہ مساوات شروڈنگر کی آمد سے قبل 1917 میں شائع ہوا۔ اس دلیل میں پلانک سیاہ جسمی کلیہ (مساوات ۵.۱۱۳)، جو 1900 میں منظر عام پر آیا، کے ذریعہ کوانٹائی حرکیات داخل ہوتی ہے۔

[۲۳] متبادل اشتقاق کے لئے سوال ۹.۸ دیکھیں۔

حقیقت میں ہو گا) سے جوہر کے رد عمل پر بات کرتے ہیں؛ حراری شعاع میں جوہر رکھنے سے ایسی صورت حال پیدا ہو گی۔

۹.۲.۳ غیر اتفاقی اضطراب

برقناطیسی موج کی کثافت توانائی درج ذیل ہے، جہاں E_0 ہمیشہ کی طرح برقی میدان کا حیطہ ہے۔[۲۴]

$$u = \frac{\epsilon_0}{2} E_0^2 \tag{۹.۳۷}$$

یوں حیرانی کی بات نہیں کہ تحویلی احتمال (مساوات ۹.۳۶) میدان کی کثافت توانائی کا راست متناسب ہے۔

$$P_{b\to a}(t) = \frac{2u}{\epsilon_0 \hbar^2} |\wp|^2 \frac{\sin^2[(\omega_0-\omega)t/2]}{(\omega_0-\omega)^2} \tag{۹.۳۸}$$

تاہم یہ نتیجہ واحد ایک تعدد ω پر **یک رنگی**[۲۵] موج کے لیے درست ہو گا۔ عملی استعمال کے کئی نظاموں پر وسیع تعددی سعت کی برقناطیسی امواج کی روشنی ڈالی جاتی ہے۔ ایسی صورت میں $u \to \rho(\omega)\,\mathrm{d}\omega$ ہو گا، جہاں $\rho(\omega)\,\mathrm{d}\omega$ تعددی سعت $\mathrm{d}\omega$ میں کثافت توانائی ہے، اور خالص تحویلی احتمال درج ذیل تکمل کا روپ اختیار کرے گا۔[۲۶]

$$P_{b\to a}(t) = \frac{2}{\epsilon_0 \hbar^2} |\wp|^2 \int_0^\infty \rho(\omega) \frac{\sin^2[(\omega_0-\omega)t/2]}{(\omega_0-\omega)^2}\,\mathrm{d}\omega \tag{۹.۳۹}$$

لہریا قوسین میں جزو کی ω_0 پر نوکدار چوٹی پائی جاتی ہے (شکل ۹.۲)، جبکہ عام طور پر $\rho(\omega)$ کافی چوڑا ہو گا، لہٰذا ہم $\rho\omega$ کی جگہ $\rho(\omega_0)$ لکھ کر اسے تکمل کے باہر منتقل کر سکتے ہیں۔

$$P_{b\to a}(t) \cong \frac{2|\wp|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_0) \int_0^\infty \frac{\sin^2[(\omega_0-\omega)t/2]}{(\omega_0-\omega)^2}\,\mathrm{d}\omega \tag{۹.۴۰}$$

---

[۲۴] برقناطیسی میدان میں فی اکائی حجم توانائی درج ذیل ہے۔

$$u = (\epsilon_2/2)E^2 + (1/2\mu_0)B^2$$

برقناطیسی موج کے لئے برقی اور مقناطیسی حصے برابر ہوں گے، لہٰذا

$$u = \epsilon_0 E^2 = \epsilon_0 E_0^2 \cos^2(\omega t)$$

ہو گا، اور چونکہ $\cos^2$ (یا $\sin^2$) کا اوسط $1/2$ ہے لہٰذا ایک مکمل پھیرے پر اوسط $(\epsilon_0/2)E_0^2$ ہو گا۔

[۲۵] monochromatic

[۲۶] مساوات ۹.۳۹ فرض کرتی ہے کہ مختلف تعدد پر تحویل ایک دوسرے کے غیر تابع ہیں، لہٰذا کل تحویلی احتمال ان انفرادی احتمالات کا مجموعہ ہو گا۔ اگر مختلف حصے **اتساقی** ہوں، تب ہمیں حیطوں ($c_b(t)$) نہ کہ احتمالات ($|c_b(t)|^2$) کا مجموعہ لینا ہو گا، اور اس میں حیطوں کے مربعوں کے علاوہ حاصل ضرب بھی پائے جائیں گے۔ ہم عملی استعمال میں ہر مرتبہ فرض کرتے ہیں کہ اضطراب غیر اتساقی ہے۔

متغیرات کو تبدیل کرکے $x \equiv (\omega_0 - \omega)t/2$ لکھ کر (اور چونکہ بنیادی طور پر متکمل باہر صفر ہی ہے) تکمل کی حدود کو $x = \pm\infty$ تک وسعت دے کر، اور قطعی تکمل کو جدول سے دیکھ کر:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2}\,\mathrm{d}x = \pi \tag{۹.۴۱}$$

درج ذیل حاصل ہوتا ہے۔

$$P_{b\to a}(t) \cong \frac{\pi|\wp|^2}{\epsilon_0\hbar^2}\rho(\omega_0)t \tag{۹.۴۲}$$

اس مرتبہ تحویلی احتمال t کا راست متناسب ہے۔ آپ نے دیکھا کہ یک رنگی اضطراب کے برعکس، غیر اتفاقی وسیع تعدد کی شعاع پلٹیں کھاتا ہوا احتمال نہیں دیتی۔ بالخصوص، **تحویلی شرح**[۲۷] $(R \equiv \mathrm{d}P/\mathrm{d}t)$ اب ایک مستقل ہوگا۔

$$R_{b\to a} = \frac{\pi}{\epsilon_0\hbar^2}|\wp|^2\rho(\omega_0) \qquad \text{(مستقل تحویلی شرح)} \tag{۹.۴۳}$$

اب تک ہم فرض کرتے رہے ہیں کہ اضطرابی موج y رخ سے آمدی (شکل ۹.۳) اور z رخ تقطیب شدہ ہے۔ لیکن ہم اُس صورت میں دلچسپی رکھتے ہیں جب جوہر پر شعاع ہر رخ سے آمدی ہو، اور اس میں ہر ممکنہ تقطیب پائی جاتی ہو؛ میدان کی توانائی $(\rho(\omega))$ ان مختلف انداز میں برابر تقسیم ہوگی۔ ہمیں $|\wp|^2$ کے بجائے $|\boldsymbol{\wp}\cdot\boldsymbol{a}_\mathrm{n}|^2$ کی اوسط قیمت درکار ہوگی، جہاں (مساوات ۹.۳۳ کو عمومیت دیتے ہوئے) درج ذیل ہوگا،

$$\boldsymbol{\wp} \equiv q\langle\psi_b|\boldsymbol{r}|\psi_a\rangle \tag{۹.۴۴}$$

اور اوسط تمام تقطیب اور تمام آمدی رخ پر لیا جائے گا۔

اوسط درج ذیل طریقہ سے حاصل کیا جا سکتا ہے: کروی محددیوں منتخب کریں کہ شعاع کی حرکت کا رخ z محور پر ہو (تاکہ تقطیب xy سطح میں ہو) اور (اٹل) سمتیہ $\boldsymbol{p}$ سطح yz میں پایا جاتا ہو (شکل ۹.۵)۔[۲۸]

$$\boldsymbol{a}_\mathrm{n} = \cos\phi\,\boldsymbol{i} + \sin\phi\,\boldsymbol{j}, \qquad \boldsymbol{\wp} = \wp\sin\theta\,\boldsymbol{j} + \wp\cos\theta\,\boldsymbol{k} \tag{۹.۴۵}$$

---

[۲۷] transitionrate

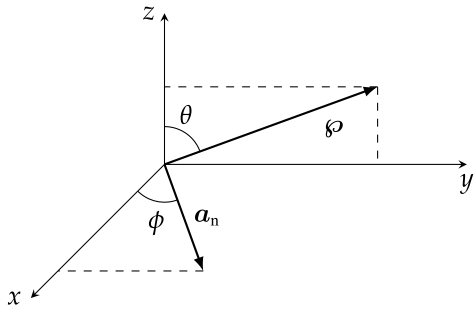
[۲۸] میں $\wp$ کو حقیقی کی طرح تصور کرتا ہوں، اگرچہ یہ عموماً مخلوط ہوگا۔ درج ذیل کی بنا پر

$$|\boldsymbol{\wp}\cdot\boldsymbol{a}_\mathrm{n}|^2 = |(\boldsymbol{\wp}_{\text{حقیقی}})\cdot\boldsymbol{a}_\mathrm{n} + i(\wp_{\text{خیالی}})\cdot\boldsymbol{a}_\mathrm{n}|^2 = |(\boldsymbol{\wp}_{\text{حقیقی}})\cdot\boldsymbol{a}_\mathrm{n}|^2 + |(\wp_{\text{خیالی}})\cdot\boldsymbol{a}_\mathrm{n}|^2$$

ہم حقیقی اور خیالی حصوں کا حساب علیحدہ علیحدہ کرکے نتائج جمع کر سکتے ہیں۔ مساوات ۹.۴۷ میں مطلق قیمت علامت دو کام کر رہی ہے، یہ سمتیہ کی مقدار اور مخلوط حیطہ:

$$|\boldsymbol{\wp}|^2 = |\wp_x|^2 + |\wp_y|^2 + |\wp_z|^2$$

ظاہر کرتی ہے۔



شکل ۹.۵: محدد برائے $|\wp\cdot\boldsymbol{a}_{\mathrm{n}}|^2$ کی اوسط زنی۔

تب

$$\wp\cdot\boldsymbol{a}_{\mathrm{n}} = \wp\sin\theta\sin\phi$$

اور درج ذیل ہو گا۔

$$\begin{aligned}|\wp\cdot\boldsymbol{a}_{\mathrm{n}}|^2_{\text{اوسط}} &= \frac{1}{4\pi}\int|\wp|^2\sin^2\theta\sin^2\phi\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi\\ &= \frac{|\wp|^2}{4\pi}\int_0^{\pi}\sin^3\theta\,\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\sin^2\phi\,\mathrm{d}\phi = \frac{1}{3}|\wp|^2\end{aligned} \tag{۹.۴۶}$$

ماخوذ: ہر جانب سے آمدی، غیر تقطیبی، غیر اتفاقی شعاع کے زیر اثر حال b سے حال a میں تحریک شدہ اخراج کی تحویلی شرح درج ذیل ہو گی،

$$R_{b\to a} = \frac{\pi}{3\epsilon_0\hbar^2}|\wp|^2\rho(\omega_0) \tag{۹.۴۷}$$

جہاں دو حالات کے بیچ برقی جفت قطب معیار اثر کا قابلی رکن $\wp$ ہو گا (مساوات ۹.۴۴) اور $\omega_0 = (E_b - E_a)/\hbar$ پر فی اکائی تعدد میدان میں کثافت توانائی $\rho(\omega_0)$ ہو گی۔[۲۹]

[۲۹] یہ تابع وقت نظریہ اضطراب کے **فرمی** کے سنہرا **قانون** کی ایک مخصوص صورت ہے، جو کہتا ہے کہ تحویلی شرح، اضطرابی مخفیہ کے قابلی ارکان کے مربع اور تحویلی تعدد پر اضطراب کے زور کا راست متناسب ہو گا۔

۹.۳ ازخود اخراج

۹.۳.۱ آئنشٹائن عددی سر A اور B

فرض کریں ایک برتن میں زیریں حال ψ_a میں N_a اور بالا حال ψ_b میں N_b جوہر پائے جاتے ہوں۔ ازخود اخراجی شرح کو A لیتے ہوئے،[30] اکائی وقت میں بالا حال سے $N_b A$ ذرات ازخود عمل کے ذریعہ نکلیں گے۔[31] جیسا ہم (مساوات ۹.۴۷) دیکھ چکے ہیں تحرک شدہ اخراج کی تحویلی شرح برقناطیسی میدان کی کثافت توانائی، $\rho(\omega_0)$، کے راست متناسب ہو گی؛ یوں بالا حال سے تحرک شدہ اخراج کی بنا پر اکائی وقت میں $N_b B_{ba}\rho(\omega_0)$ ذرات نکلیں گے۔ اسی طرح انجذابی شرح $\rho(\omega_0)$ کی راست متناسب ہے، جسے ہم $B_{ab}\rho(\omega_0)$ کہتے ہیں؛ لہٰذا اکائی وقت میں $N_a B_{ab}\rho(\omega_0)$ ذرات بالا حال میں شامل ہوں گے۔ ان تمام کو یکجا کر کے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\frac{\mathrm{d}N_b}{\mathrm{d}t} = -N_b A - N_b B_{ba}\rho(\omega_0) + N_a B_{ab}\rho(\omega_0) \tag{۹.۴۸}$$

فرض کریں یہ جوہر محیط میدان کے ساتھ حراری توازن میں ہیں، لہٰذا ہر سطح میں ذرات کی تعداد مستقل ہو گی۔ یوں $\mathrm{d}N_b/\mathrm{d}t = 0$ لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\rho(\omega_0) = \frac{A}{(N_a/N_b)B_{ab} - B_{ba}} \tag{۹.۴۹}$$

ہم بنیادی شماریاتی میکانیات سے جانتے ہیں کہ، درجہ حرارت T پر حراری توازن میں، توانائی E کے حامل ذرات، کی تعداد **بولٹزمن جزو ضربی**[32] $e^{(-E/k_B T)}$ کے راست متناسب ہو گی؛ یوں

$$\frac{N_a}{N_b} = \frac{e^{-E_a/k_B T}}{e^{-E_b/k_B T}} = e^{\hbar\omega_0/k_B T} \tag{۹.۵۰}$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\rho(\omega_0) = \frac{A}{e^{\hbar\omega_0/k_B T}B_{ab} - B_{ba}} \tag{۹.۵۱}$$

لیکن پلانک کا سیاہ جسمی کلیہ (مساوات ۵.۱۱۳) ہمیں حراری شعاع کی کثافت توانائی دیتی ہے۔

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3}\frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \tag{۹.۵۲}$$

---

[30] میں عام طور پر تحویلی شرح کے لئے علامت R استعمال کرتا ہوں، لیکن اس سیاق و سباق میں، باقی لوگوں کی طرح، میں بھی آئنشٹائن کی علامتیت استعمال کروں گا۔

[31] ذرات کی تعداد N_a اور N_b بہت بڑی تصور کریں، لہٰذا ہم انہیں وقت کے استمراری تفاعلات تصور کر کے شماریاتی اتار چھڑاو نظر انداز کرتے ہیں۔

[32] Boltzmann factor

ان دونوں ریاضی فقروں کا موازنہ کرنے سے

$$B_{ab} = B_{ba} \tag{۹.۵۳}$$

اور درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$A = \frac{\omega_0^3 \hbar}{\pi^2 c^3} B_{ba} \tag{۹.۵۴}$$

مساوات ۹.۵۳ اُس بات کی تصدیق کرتی ہے جو ہم پہلے سے جانتے تھے: تحریک شدہ اخراج کی تحویلی شرح وہی ہے جو انجذاب کی ہے۔ 1907 میں یہ ایک حیرت کن نتیجہ تھا جس میں آئنشٹائن کو اس بات پر مجبور کیا کہ وہ کلیہ پلانک حاصل کرنے کی خاطر تحریک شدہ اخراج کا تصور پیدا کرے۔ تاہم ہم یہاں مساوات ۹.۵۴ میں دلچسپی رکھتے ہیں، جو ہمیں تحریک شدہ اخراجی شرح $(B_{ba}\rho(\omega_0))$، جسے ہم پہلے سے جانتے ہیں، کی صورت میں از خود اخراجی شرح (A) دیتی ہے۔ جسے ہم جاننا چاہتے ہیں مساوات ۹.۴۷ سے

$$B_{ba} = \frac{\pi}{3\epsilon_0 \hbar^2} |\wp|^2 \tag{۹.۵۵}$$

لیتے ہیں، لہٰذا از خود اخراجی شرح درج ذیل ہو گی۔

$$A = \frac{\omega_0^3 |\wp|^2}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} \tag{۹.۵۶}$$

سوال ۹.۸: نیچے کی طرف تحویل میں از خود اخراج اور حراری تحریک شدہ اخراج (وہ تحریک شدہ اخراج جو سیاہ جسم شعاع کی بنا پر ہو) میں مقابلہ ہوتا ہے۔ دکھائیں کہ رہائشی درجہ حرارت $(T = 300\,\mathrm{K})$ پر $5 \times 10^{12}\,\mathrm{Hz}$ سے بہت کم تعددوں پر حراری تحریک شدہ اخراج غالب ہو گا، جبکہ $5 \times 10^{12}\,\mathrm{Hz}$ سے بہت زیادہ تعددوں پر از خود اخراج غالب ہو گا۔ بصری روشنی کے لیے کونسا غالب ہو گا؟

سوال ۹.۹: برقناطیسی میدان کی زمینی حال کثافت توانائی $\rho_0(\omega)$ جانتے ہوئے از خود اخراجی شرح درحقیقت تحریک شدہ اخراجی شرح (مساوات ۹.۴۷) ہو گی، لہٰذا آئنشٹائن عددی سر A اور B جانے بغیر آپ از خود اخراجی شرح (مساوات ۹.۵۶) اخذ کر سکتے ہیں۔ اگرچہ ایسا کرنے کے لیے کوانٹائی برقی حرکیات بروئے کار لانی ہو گی، تاہم اگر آپ یہ قبول کریں کہ زمینی حال میں ایک نوریہ فی انداز پایا جاتا ہے، تب اس کو اخذ کرنا بہت آسان ہو گا:

ا. مساوات ۵.۱۱۱ کی جگہ $N_\omega = d_k$ پُر کر کے $\rho_0(\omega)$ اخذ کریں (زیادہ تعدد پر اس کلیہ کو ناکارہ ہونا ہو گا ورنہ کل "خلائی توانائی" لامتناہی ہو گی؛ تاہم یہ کہانی کسی دوسرے دن کے لیے چھوڑتے ہیں)۔

ب. اپنے نتیجہ کے ساتھ مساوات ۹.۴۷ استعمال کر کے از خود اخراجی شرح حاصل کریں۔ مساوات ۹.۵۶ کے ساتھ موازنہ کریں۔

۹.۳.۲ ہیجان حال کا عرصہ حیات

مساوات ۹.۵۶ ہمارا بنیادی نتیجہ ہے: یہ تحرک شدہ اخراج کی تحویلی شرح دیتا ہے۔ اب فرض کریں کسی طرح آپ بہت بڑی تعداد میں جوہر کو ہیجان حال منتقل کرتے ہیں۔ از خود اخراج کے نتیجے میں، وقت کے ساتھ یہ تعداد گھٹے گی؛ بالخصوص، دورانیہ dt میں جوہروں کی تعداد میں $A\,dt$ کمی ہو گی:

$$dN_b = -AN_b\,dt \tag{۹.۵۷}$$

(جہاں ہم فرض کرتے ہیں کہ مزید جوہر ہیجان انگیز نہیں کیے جا رہے ہیں)۔[۳۳] اس کو $N_b(t)$ کے لیے حل کرتے ہیں:

$$N_b(t) = N_b(0)e^{-At} \tag{۹.۵۸}$$

بظاہر، ہیجان حال میں تعداد، قوت نمائی طور پر وقتی مستقل:

$$\tau = \frac{1}{A} \qquad \text{(عرصہ حیات)} \tag{۹.۵۹}$$

کے ساتھ کم ہو گی، جسے اس حال کا **عرصہ حیات**[۳۴] کہتے ہیں۔ ایک عرصہ حیات میں $N_b(t)$ کی قیمت ابتدائی قیمت کی $1/e \approx 0.368$ گنا ہو گی۔

میں اب تک فرض کرتا آ رہا ہوں کہ نظام میں صرف دو حالات پائے جاتے ہیں، تاہم علامتیت سادہ رکھنے کی خاطر ایسا کیا گیا؛ تحرک شدہ اخراج کا کلیہ (مساوات ۹.۵۶)، دیگر قابل رسائی حالات سے قطع نظر، $\psi_b \rightarrow \psi_a$ کی تحویلی شرح دیتا ہے (سوال ۹.۱۵ دیکھیں)۔ عمومی طور پر ایک ہیجان جوہر کے کئی مختلف **انداز تنزل**[۳۵] ہوں گے (یعنی: ψ_b کا تنزل بہت سارے زیریں توانائی حالات ψ_{a1}، ψ_{a2}، ψ_{a3}، وغیرہ میں ہو سکتا ہے)۔ ایسی صورت میں تمام تحویلی شرحیں جمع ہو کر درج ذیل خالص عرصہ حیات دیں گی۔

$$\tau = \frac{1}{A_1 + A_2 + A_3 + \cdots} \tag{۹.۶۰}$$

مثال ۹.۱: فرض کریں ایک اسپرنگ کے ساتھ باندھا ہوا بار q محور x پر ارتعاش کا پابند ہے۔ فرض کریں یہ حال $|n\rangle$ (مساوات ۲.۶۷) سے آغاز کر کے از خود اخراج کے ذریعے حال $|n'\rangle$ کو پہنچتا ہے۔ مساوات ۹.۴۴ کے تحت درج ذیل ہو گا۔

$$\wp = q\langle n|x|n'\rangle\hat{\imath}$$

آپ نے سوال ۳.۳۳ میں x کے قالبی ارکان:

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

---

[۳۳] یہ حراری توازن نہیں ہے جس پر گزشتہ حصے میں بات کی گئی۔ یہاں ہم فرض کر رہے ہیں کہ جوہروں کو ہیجان حال میں اٹھایا گیا ہے اور یہ اب واپس توازنی سطحوں کو لوٹ رہے ہیں۔

[۳۴] lifetime

[۳۵] decaymodes

تلاش کئے، جہاں مرتعش کا قدرتی تعدد ω ہے۔ (مجھے تحریک شدہ اخراج کے تعدد کے لیے اس حرف کی ضرورت اب پیش نہیں آئے گی۔) ہم اخراج کی بات کر رہے ہیں لہٰذا n' لازماً n سے نیچے ہو گا؛ یوں ہمارے اس مقصد کے لئے درج ذیل ہو گا۔

$$\wp = q\sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}}\delta_{n',n-1}\,\boldsymbol{i} \tag{۹.۶۱}$$

بظاہر "سیڑھی" پر صرف ایک پایہ نیچے تحویل ممکن ہے $(n - n' = 1)$؛ اور اخراجی نوریہ کا تعدد درج ذیل ہے۔

$$\omega_0 = \frac{E_n - E'_n}{\hbar} = \frac{(n+1/2)\hbar\omega - (n'+1/2)\hbar\omega}{\hbar} = (n-n')\omega = \omega \tag{۹.۶۲}$$

کوئی حیرانی کی بات نہیں، نظام کلاسیکی ارتعاشی تعدد پر شعاع ریز ہے۔ تحویلی شرح (مساوات ۹.۵۶) درج ذیل

$$A = \frac{nq^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3} \tag{۹.۶۳}$$

اور n ویں ساکن حال کا عرصہ حیات درج ذیل ہو گا۔

$$\tau_n = \frac{6\pi\epsilon_0 mc^3}{nq^2\omega^2} \tag{۹.۶۴}$$

چونکہ، ہر ایک اخراجی نوریہ $\hbar\omega$ توانائی ساتھ لے جاتا ہے، لہٰذا اشعاعی طاقت $A\hbar\omega$ ہو گی

$$P = \frac{q^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3}(n\hbar\omega)$$

یا، n ویں حال میں مرتعش کی توانائی $E = (n+1/2)\hbar\omega$ لیتے ہوئے درج ذیل ہو گی۔

$$P = \frac{q^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3}\left(E - \frac{1}{2}\hbar\omega\right) \tag{۹.۶۵}$$

(ابتدائی) توانائی E کے کوانٹائی مرتعش کی اوسط اشعاعی طاقت اتنی ہو گی۔

موازنہ کی خاطر اسی طاقت کے کلاسیکی مرتعش کی اوسط اشعاعی طاقت کا تعین کرتے ہیں۔ کلاسیکی برقی حرکیات کے تحت مسرع بار q کی اشعاعی طاقت **کلیہ لارمر**:[۳۶]

$$P = \frac{q^2a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \tag{۹.۶۶}$$

---

[۳۶] Larmorformula

دیتا ہے۔ ہارمونی مرتعش $x(t) = x_0 \cos(\omega t)$ کا حیطہ x_0، اور اسراع $a = -x_0\omega^2 \cos(\omega t)$ ہو گا۔ ایک مکمل پھیرے پر اوسط درج ذیل ہو گا۔

$$P = \frac{q^2 x_0^2 \omega^4}{12\pi\epsilon_0 c^3}$$

لیکن اس مرتعش کی توانائی $E = (1/2)m\omega^2 x_0^2$ ہے، لہٰذا $x_0^2 = 2E/m\omega^2$ ہو گا، جس سے درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$P = \frac{q^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3}E \tag{۹.۶۷}$$

توانائی E کا کلاسیکی مرتعش اوسطاً اتنی اشعاعی طاقت دے گا۔ کلاسیکی حد $(\hbar \to 0)$ میں کلاسیکی اور کوانٹائی کلیات آپس میں متفق ہیں؛[۳۷] البتہ زمینی حال کو کوانٹائی کلیہ (مساوات ۹.۶۵) تحفظ دیتا ہے: اگر $E = (1/2)\hbar\omega$ ہو تب مرتعش شعاع ریز نہیں ہو گا۔ □

سوال ۹.۱۰: ہیجان حال کی **نصف حیات**[۳۸] $(t_{1/2})$ سے مراد وہ دورانیہ ہے جس میں بڑی تعداد کے جوہروں میں سے نصف تحویل کرتے ہوں۔ نصف حیات $t_{1/2}$ اور (حال کے) "عرصہ حیات" τ کے بیچ رشتہ تلاش کریں۔

سوال ۹.۱۱: ہائیڈروجن کے چاروں $n = 2$ حالات کے لیے عرصہ حیات (سیکنڈوں میں) تلاش کریں۔
اشارہ: آپ کو $\langle\psi_{100}|x|\psi_{200}\rangle$، $\langle\psi_{100}|y|\psi_{211}\rangle$، وغیرہ طرز کے قالبی ارکان کی قیمتیں تلاش کرنی ہوں گی۔ یاد رہے کہ $x = r\sin\theta\cos\phi$، $y = r\sin\theta\sin\phi$ اور $z = r\cos\theta$ ہیں۔ ان میں سے زیادہ تر تکملات صفر کے برابر ہیں، لہٰذا حساب شروع کرنے سے پہلے ان پر ایک گہری نظر ضرور ڈالیں۔
جواب: سوائے ψ_{200} جو لامتناہی ہے، باقی تمام کے لیے 1.60×10^{-9} سیکنڈ ہو گا۔

۹.۳.۳ قواعد انتخاب

از خود اخراجی شرح درج ذیل روپ کے قالبی ارکان معلوم کر کے حاصل کی جا سکتی ہے۔

$$\langle\psi_b|\boldsymbol{r}|\psi_a\rangle$$

اگر آپ نے سوال ۹.۱۱ حل کیا ہو (اگر حل نہیں کیا، اسی وقت پہلے اس کو حل کریں!) تو آپ نے دیکھا ہو گا کہ یہ مقداریں عموماً صفر ہوتی ہیں، اور کیا بہتر ہو گا اگر ہم پہلے سے جان سکیں کہ کون سے تکملات صفر دیں گے، تاکہ ہم اپنا وقت غیر ضروری تکملات حل کرنے میں ضائع نہ کریں۔ فرض کریں ہم ہائیڈروجن کی طرح کے نظام

---
[۳۷] درحقیقت، P کو زمینی حال سے زائد توانائی کی صورت میں لکھیں تو دونوں کلیات متماثل ہوں گے۔
[۳۸] half-life

میں دلچسپی رکھتے ہیں، جس کی ہیملٹنی کروی تشاکلی ہے۔ ایسی صورت میں ہم حالات کو عمومی کوانٹائی اعداد n ، ℓ ، اور m سے ظاہر کر سکتے ہیں اور قالبی ارکان درج ذیل ہوں گے۔

$$\langle n'\ell'm'|\boldsymbol{r}|n\ell m\rangle$$

زاویائی معیاری حرکت مقلبیت رشتے اور زاویائی معیاری حرکت عاملین کی ہرمشی پن مل کر اس مقدار پر طاقتور پابندیاں عائد کرتے ہیں۔

انتخابی قواعد برائے m اور m' :

ہم پہلے x ، y ، اور z کے ساتھ L_z کے مقالب پر غور کرتے ہیں جنہیں باب ۴ میں حاصل کیا گیا (مساوات ۴.۱۲۲ دیکھیں)۔

$$[L_z,x]=i\hbar y,\quad [L_z,y]=-i\hbar x,\quad [L_z,z]=0 \tag{۹.۶۸}$$

ان میں تیسرے سے درج ذیل حاصل ہوتا ہے۔

$$\begin{aligned}0&=\langle n'\ell'm'|[L_z,z]|n\ell m\rangle=\langle n'\ell'm'|L_zz-zL_z|\,n\ell m\rangle\\&=\langle n'\ell'm'|[(m'\hbar)z-z(m\hbar)]|n\ell m\rangle=(m'-m)\hbar\langle n'\ell'm'|z|n\ell m\rangle\end{aligned}$$

ماخوذ:

$$\text{یا}\quad m'=m\quad \text{یا پھر}\quad \langle n'\ell'm'|z|n\ell m\rangle=0 \tag{۹.۶۹}$$

لہٰذا، ماسوائے $m'=m$ کی صورت میں، z کے قالبی ارکان ہر صورت صفر ہوں گے۔

ساتھ ہی، x کے ساتھ L_z کا مقلب درج ذیل دے گا۔

$$\begin{aligned}\langle n'\ell'm'|[L_z,x]|n\ell m\rangle&=\langle n'\ell'm'|(L_zx-xL_z)|n\ell m\rangle\\&=(m'-m)\hbar\langle n'\ell'm'|x|n\ell m\rangle=i\hbar\langle n'\ell'm'|y|n\ell m\rangle\end{aligned}$$

ماخوذ:

$$(m'-m)\langle n'\ell'm'|x|n\ell m\rangle=i\langle n'\ell'm'|y|n\ell m\rangle \tag{۹.۷۰}$$

یوں، آپ y کے قالبی ارکان کو x کے مطابقتی قالبی ارکان سے حاصل کر سکتے ہیں، اور آپ کو کبھی بھی y کے قالبی ارکان کے حساب کی ضرورت پیش نہیں آئے گی۔

اور آخر میں، y کے ساتھ L_z کا مقلب درج ذیل دیتا ہے۔

$$\begin{aligned}\langle n'\ell'm'|[L_z,y]|n\ell m\rangle&=\langle n'\ell'm'|(L_zy-yL_z)|n\ell m\rangle\\&=(m'-m)\hbar\langle n'\ell'm'|y|n\ell m\rangle=-i\hbar\langle n'\ell'm'|x|n\ell m\rangle\end{aligned}$$

ماخوذ:

$$(m'-m)\langle n'\ell'm'|y|n\ell m\rangle = -i\langle n'\ell'm'|x|n\ell m\rangle \tag{۹.۷۱}$$

بالخصوص، مساوات ۹.۷۰ اور مساوات ۹.۷۱ کو ملا کر:

$$(m'-m)^2\langle n'\ell'm'|x|n\ell m\rangle = i(m'-m)\langle n'\ell'm'|y|n\ell m\rangle = \langle n'\ell'm'|x|n\ell m\rangle$$

لہٰذا،

$$\text{یا}\quad (m'-m)^2 = 1 \quad \text{یا پھر} \quad \langle n'\ell'm'|x|n\ell m\rangle = \langle n'\ell'm'|y|n\ell m\rangle = 0 \tag{۹.۷۲}$$

ہو گا۔ مساوات ۹.۶۹ اور مساوات ۹.۷۲ سے ہمیں m کے **انتخابی قواعد**:[۳۹]

$$\text{تحویل صرف اس صورت ہو گی جب یہ ہو:}\quad \Delta m = 1, 0, -1 \tag{۹.۷۳}$$

حاصل ہوتے ہیں۔ اس نتیجے (کو اخذ کرنا آسان نہیں تھا، تاہم اس) کو سمجھنا آسان ہے۔ آپ کو یاد ہو گا، نوریہ چکر 1 کا حامل ہے، لہٰذا اس کی m قیمت 1، 0، یا -1 ہو سکتی ہے؛[۴۰] زاویائی معیار حرکت کے z جزو کی بقا کے تحت نوریہ جو کچھ لے کر جاتا ہے، جوہر اتنا کچھ کھوئے گا۔

انتخابی قواعد برائے ℓ اور ℓ':

آپ سے سوال ۹.۱۲ میں درج ذیل مقلبیت رشتہ اخذ کرنے کا کہا گیا۔

$$\Big[L^2,[L^2,\boldsymbol{r}]\Big] = 2\hbar^2(\boldsymbol{r}L^2 + L^2\boldsymbol{r}) \tag{۹.۷۴}$$

ہمیشہ کی طرح، ہم اس مقلب کو $\langle n'\ell'm'|$ اور $|n\ell m\rangle$ کے بیچ لپیٹ کر انتخابی قواعد اخذ کرتے ہیں۔

$$\begin{aligned}
\langle n'\ell'm'|[L^2,[L^2,\boldsymbol{r}]]|n\ell m\rangle &= 2\hbar^2\langle n'\ell'm'|(\boldsymbol{r}L^2+L^2\boldsymbol{r})|n\ell m\rangle\\
&= 2\hbar^4[\ell(\ell+1)+\ell'(\ell'+1)]\langle n'\ell'm'|\boldsymbol{r}|n\ell m\rangle\\
&= \langle n'\ell'm'|(L^2[L^2,\boldsymbol{r}]-[L^2,\boldsymbol{r}]L^2)|n\ell m\rangle\\
&= \hbar^2[\ell'(\ell'+1)-\ell(\ell+1)]\langle n'\ell'm'|[L^2,\boldsymbol{r}]|n\ell m\rangle\\
&= \hbar^2[\ell'(\ell'+1)-\ell(\ell+1)]\langle n'\ell'm'|(L^2\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}L^2)|n\ell m\rangle\\
&= \hbar^4[\ell'(\ell'+1)-\ell(\ell+1)]^2\langle n'\ell'm'|\boldsymbol{r}|n\ell m\rangle
\end{aligned} \tag{۹.۷۵}$$

ماخوذ:

$$\begin{aligned}
\text{یا}\quad & 2[\ell(\ell+1)+\ell'(\ell'+1)] = [\ell'(\ell'+1)-\ell(\ell+1)]^2\\
\text{یا پھر}\quad & \langle n'\ell'm'|\boldsymbol{r}|n\ell m\rangle = 0
\end{aligned} \tag{۹.۷۶}$$

---

[۳۹] selection rules

[۴۰] جب قطبی محور حرکت کے رخ کے ساتھ ساتھ ہو، درمیانی قیمت نہیں پائی جاتی، اور اگر آپ غیر تابع نوری حالات کی تعداد میں دلچسپی رکھتے ہوں، تو جواب 2 نہ کہ 3 ہے۔ البتہ، اگر یہاں ضروری نہیں کہ نوریہ z محور کے رخ حرکت کرتا ہو، لہٰذا تینوں قیمتیں ممکن ہیں۔

ہو گا، لیکن

$$[\ell'(\ell'+1)-\ell(\ell+1)]=(\ell'+\ell+1)(\ell'-\ell)$$

اور

$$2[\ell(\ell+1)+\ell'(\ell'+1)]=(\ell'+\ell+1)^2+(\ell'-\ell)^2-1$$

لکھے جا سکتے ہیں، لہٰذا مساوات ۹.۷۶ میں پہلی شرط کو درج ذیل روپ میں لکھا جا سکتا ہے۔

$$[(\ell'+\ell+1)^2-1][(\ell'-\ell)^2-1]=0 \tag{۹.۷۷}$$

ان میں پہلا (بایاں) جزو ضربی صفر نہیں ہو سکتا ہے (ماسوائے اُس صورت جب $\ell'=\ell=0$ ہو؛ اس "کمزوری" سے سوال ۹.۱۳ میں چھٹکارا حاصل کیا گیا ہے)، لہٰذا یہ شرط $\ell'=\ell\pm1$ کی سادہ روپ اختیار کرتی ہے۔ یوں ℓ کے انتخابی قواعد:

$$\text{تحویل صرف اُس صورت ہو گا جب یہ ہو:}\quad \Delta\ell=\pm1 \tag{۹.۷۸}$$

حاصل ہوتا ہے۔ اگرچہ اس نتیجہ کو اخذ کرنا آسان کام نہیں ہے، لیکن اس کی تشریح آسان ہے۔ نوریہ چکر 1 کا حامل ہے، لہٰذا زاویائی معیار حرکت جمع کرنے کے قواعد $\ell'=\ell+1$، $\ell'=\ell$، یا $\ell'=\ell-1$ کی اجازت دیں گے (برقی جفت قطبی اشعاع کے لیے درمیانی صورت نہیں پائی جاتی، اگرچہ زاویائی معیار حرکت کی بقا اس کی اجازت دیتی ہے)۔

یوں ظاہر ہے کہ از خود اخراج کے ذریعہ تمام زیریں توانائی حالات تک تحویل ممکن نہیں ہو گی' ان میں سے کئی انتخابی قواعد کے تحت ممنوع ہیں۔ شکل ۹.۶ میں ہائیڈروجن کے ابتدائی چار بوہر سطحوں کے لیے اجازتی تحویلات دکھائے گئے ہیں۔ دھیان رہے کہ $2S$ حال (ψ_{200}) اسی جگہ "پھنسا" رہے گا: چونکہ $\ell=1$ کا کوئی بھی زیریں توانائی حال نہیں پایا جاتا، لہٰذا یہ تنزل پذیر نہیں ہو گا۔ اس کو **نازک مستحکم**[۴۱] حال کہتے ہیں، اور یقیناً اس کا عرصہ حیات، مثلاً، $2P$ حالات (ψ_{210}, ψ_{211} اور ψ_{21-1}) سے، کافی لمبا ہے۔ نازک مستحکم حالات بھی آخر کار تصادم کی بنا پر، یا (جنہیں گمراہ کن نام دیا گیا ہے) **ممنوعہ تحویلات**[۴۲] کی بنا پر (سوال ۹.۲۱)، یا متعدد نوری اخراج کی بنا پر، تنزل پذیر ہوں گے۔

سوال ۹.۱۲: مساوات ۹.۷۴ میں دی گئی مقلوبی رشتہ ثابت کریں۔ اشارہ: پہلے درج ذیل دکھائیں۔

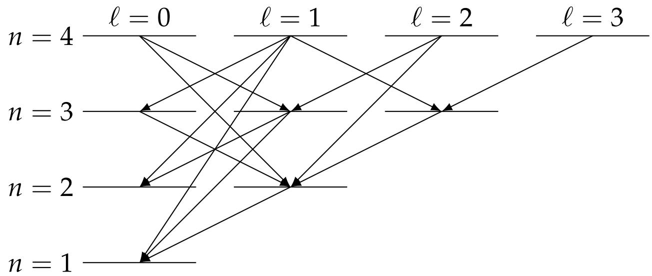
$$[L^2,z]=2i\hbar(xL_y-yL_x-i\hbar z)$$

اس کے ساتھ $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})=0$ استعمال کرکے درج ذیل دکھائیں۔

$$[L^2,[L^2,z]]=2\hbar^2(zL^2+L^2z)$$

---

[۴۱] metastable
[۴۲] forbiddentransitions



شکل ۹.۶: ہائیڈروجن کی اولین چار سطحوں کا اجازتی تنزل۔

z سے $\boldsymbol{r}$ تک عمومیت دینا ایک آسان کام ہے۔

سوال ۹.۱۳: دکھائیں کہ $0 = \ell = \ell'$ کی صورت میں $0 = \langle n'\ell'm'|\boldsymbol{r}|n\ell m\rangle$ ہوگا۔ یوں مساوات ۹.۷۸ میں درپیش "کمزوری" ختم ہوتی ہے۔

سوال ۹.۱۴: ہائیڈروجن کے $3 = n$، $0 = \ell$، $0 = m$ حال میں ایک الیکٹران زمینی حال تک (برقی جفت قطبی) تحویلی تسلسل کے ذریعہ پہنچتا ہے۔

ا. اس تنزل کے لیے کونسی راہیں کھلی ہیں؟ انہیں درج ذیل صورت میں پیش کریں۔

$$|300\rangle \to |n\ell m\rangle \to |n'\ell'm'\rangle \to \cdots \to |100\rangle$$

ب. اگر آپ کے پاس، اس حال میں جوہروں سے بھرا ہوا ایک بوتل ہو، تب ہر راہ سے کتنا حصہ گزرے گا؟

ج. اس حال کا عرصہ حیات کیا ہوگا؟ اشارہ: پہلی تحویل کے بعد یہ حال $\langle 300|$ میں نہیں ہوگا، لہٰذا ہر تسلسل کا صرف پہلا قدم، عرصہ حیات کے حصول میں کام آئے گا۔ متعدد تحویلی راستوں کی صورت میں تمام تحویلی شرحوں کا مجموعہ لینا ہوگا۔

اضافی سوالات برائے باب ۹

سوال ۹.۱۵: متعدد سطحی نظام کے لیے مساوات ۹.۱ اور مساوات ۹.۲

$$H_0\psi_n = E_n\psi_n, \quad \langle\psi_n|\psi_m\rangle = \delta_{nm} \tag{۹.۷۹}$$

کو عمومیت دیتے ہوئے تابع وقت نظریہ اضطراب مرتب کریں۔ لمحہ $t = 0$ پر ہم اضطراب $H'(t)$ چالو کرتے ہیں؛ یوں کل ہیملٹنی درج ذیل ہوگی۔

$$H = H_0 + H'(t) \tag{۹.۸۰}$$

ا. مساوات ۹.٦ کو درج ذیل تعمیمی روپ دیں

$$\Psi(t) = \sum c_n(t)\psi_n e^{-iE_n t/\hbar} \tag{۹.۸۱}$$

اور دکھائیں کہ

$$\dot{c}_m = -\frac{i}{\hbar}\sum_n c_n H'_{mn} e^{i(E_m-E_n)t/\hbar} \tag{۹.۸۲}$$

ہوگا، جہاں H'_{mn} درج ذیل ہے۔

$$H'_{mn} \equiv \langle \psi_m \Big| H' \Big| \psi_n \rangle \tag{۹.۸۳}$$

ب. اگر نظام حال ψ_N سے آغاز کرے، تو دکھائیں کہ (اول رتبی نظریہ اضطراب میں)

$$c_N(t) \cong 1 - \frac{i}{\hbar}\int_0^t H'_{NN}(t')\,\mathrm{d}t' \tag{۹.۸۴}$$

اور درج ذیل ہوگا۔

$$c_m(t) \cong -\frac{i}{\hbar}\int_0^t H'_{mN}(t') e^{i(E_m-E_N)t'/\hbar}\,\mathrm{d}t' \qquad (m \neq N) \tag{۹.۸۵}$$

ج. فرض کریں، (لمحہ $t = 0$ پر چالو اور بعد میں لمحہ t پر منقطع کرنے کے علاوہ) H' مستقل ہے۔ حال N سے حال M جہاں $N \neq M$ ہے، میں تحویل کے احتمال کو t کا تفاعل لکھیں۔ جواب:

$$4\Big|H'_{MN}\Big|^2 \frac{\sin^2[(E_N-E_M)t/2\hbar]}{(E_N-E_M)^2} \tag{۹.۸٦}$$

د. فرض کریں H' وقت کا سائن نما تفاعل: $H' = V\cos(\omega t)$ ہے۔ عمومی مفروضے فرض کرتے ہوئے دکھائیں کہ صرف توانائی $E_M = E_N \pm \hbar\omega$ کے حالات میں تحویل ہو سکتی ہے اور ان کا احتمال درج ذیل ہے۔

$$P_{N\to M} = |V_{MN}|^2 \frac{\sin^2[(E_N-E_M\pm\hbar\omega)t/2\hbar]}{(E_N-E_M\pm\hbar\omega)^2} \tag{۹.۸۷}$$

ھ. فرض کریں کہ متعدد سطحی نظام پر غیر اتفاقی برقناطیسی روشنی ڈالی جاتی ہے۔ حصہ ۹.۲.۳ کو دیکھتے ہوئے دکھائیں کہ تحریک شدہ اخراج کی تحویلی شرح وہی دو سطحی نظام کا کلیہ (مساوات ۹.۴۷) دیگا۔

سوال ۹.۱۶: عددی سر $c_m(t)$ کو رتبہ اول تک سوال ۹.۱۵ کے جزو-ج اور جزو-د کے لیے تلاش کریں۔ معمول زنی شرط:

$$\sum_m \left|c_m(t)\right|^2 = 1 \tag{۹.۸۸}$$

کی تصدیق کرکے، تضاد اگر موجود ہو، پر تبصرہ کریں۔ فرض کریں آپ ابتدائی حال ψ_N میں رہنے کا احتمال جاننا چاہتے ہیں؛ کیا $\left|c_N(t)\right|^2$ یا $1 - \sum_{m\neq N}\left|c_m(t)\right|^2$ کا استعمال بہتر ثابت ہوگا؟

سوال ۹.۱۷: لامتناہی چوکور کنویں کے N ویں حال میں (وقت $t = 0$ پر) ایک ذرہ آغاز کرتا ہے۔ وقتی طور پر کنویں کی تہہ بلند ہو کر واپس اپنی جگہ نیچے بیٹھتی ہے، جس کے تحت کنویں کے اندر مخفیہ یکساں ضرور لیکن تابع وقت ہوگا: $V_0(t)$، جہاں $V_0(0) = V_0(T) = 0$ ہوگا۔

ا. مساوات ۹.۸۲ استعمال کرکے $c_m(t)$ کی ٹھیک قیمت دریافت کریں، اور دکھائیں کہ تفاعل موج کی ہیئت تبدیل ہو گی لیکن کوئی تحویل نہیں ہو گی۔ تفاعل $V_0(t)$ کی صورت میں تبدیلی ہیئت، $\psi(T)$، تلاش کریں۔

ب. اسی مسئلے کو رتبہ اول نظریہ اضطراب سے حل کرکے دونوں نتائج کا موازنہ کریں۔

تبصرہ: جب بھی مخفیے کے ساتھ اضطراب ایک مستقل (x میں مستقل نہ کہ t میں) جمع کرتا ہو، یہی نتیجہ حاصل ہوگا؛ یہ صرف لامتناہی چوکور کنویں کی خاصیت نہیں ہے۔ سوال ۱.۸ کے ساتھ موازنہ کریں۔

سوال ۹.۱۸: ابتدا میں (یک بُعدی لامتناہی) چوکور کنویں کے زمینی حال میں کمیت m کا ایک ذرہ پایا جاتا ہے۔ لمحہ $t = 0$ پر ایک "اینٹ" اس کنویں میں گرائی جاتی ہے، جس سے مخفیہ درج ذیل ہو جاتا ہے، جہاں $V_0 \ll E_1$ ہے۔

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 \leq x \leq a/2 \\ 0 & a/2 < x \leq a \\ \infty & \text{بصورت دیگر} \end{cases}$$

کچھ وقت T کے بعد، اینٹ ہٹائی جاتی ہے، اور ذرے کی توانائی ناپی جاتی ہے۔ (رتبہ اول نظریہ اضطراب میں) نتیجہ E_2 ہونے کا احتمال کیا ہوگا؟

سوال ۹.۱۹: ہم تحرک شدہ اخراج، (تحرک شدہ) انجذاب، اور ازخود اخراج دیکھ چکے ہیں۔ ازخود انجذاب کیوں نہیں پایا جاتا ہے؟

سوال ۹.۲۰: **مقناطیسی گمک**۔[۴۳] ساکن مقناطیسی میدان $B_0\boldsymbol{k}$ میں، $1/2$ چکر کا ایک ذرہ جس کی مسکن مقناطیسی نسبت γ ہو، لارمر تعدد $\omega_0 = \gamma B_0$ (مثال ۴.۳) سے استقبالی حرکت کرتا ہے۔ اب ہم ایک کمزور عرضی ریڈیائی تعدد میدان، $B_r[\cos(\omega t)\boldsymbol{i} - \sin(\omega t)\boldsymbol{j}]$، چالو کرتے ہیں جس سے کل میدان درج ذیل ہو جاتا ہے۔

$$\boldsymbol{B} = B_r\cos(\omega t)\boldsymbol{i} - B_r\sin(\omega t)\boldsymbol{j} + B_0\boldsymbol{k} \tag{۹.۸۹}$$

[۴۳] magnetic resonance

ا. اس نظام کے لیے 2×2 ہیملٹنی قالب (مساوات ۴.۱۵۸) تیار کریں۔

ب. وقت t پر چکری حال $\chi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$ ہونے کی صورت میں درج ذیل دکھائیں

$$\dot{a} = \frac{i}{2}\left(\Omega e^{i\omega t} b + \omega_0 a\right); \quad \dot{b} = \frac{i}{2}\left(\Omega e^{-i\omega t} a - \omega_0 b\right) \tag{۹.۹۰}$$

جہاں $\Omega \equiv \gamma B_r$ کا تعلق ریڈیائی تعدد میدان کے زور سے ہے۔

ج. ابتدائی قیمتوں a_0 اور b_0 کی صورت میں $a(t)$ اور $b(t)$ کا عمومی حل تلاش کریں۔ جواب:

$$a(t) = \left\{a_0 \cos(\omega' t/2) + \frac{i}{\omega'}[a_0(\omega_0 - \omega) + b_0\Omega] \sin(\omega' t/2)\right\} e^{i\omega t/2}$$
$$b(t) = \left\{b_0 \cos(\omega' t/2) + \frac{i}{\omega'}[b_0(\omega - \omega_0) + a_0\Omega] \sin(\omega' t/2)\right\} e^{-i\omega t/2}$$

جہاں درج ذیل ہو گا۔

$$\omega' \equiv \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \Omega^2} \tag{۹.۹۱}$$

د. ایک ذرہ ہم میدان چکری حال ($b_0 = 0$ ، $a_0 = 1$) سے آغاز کرتا ہے۔ مخالف میدان چکر میں تحویل کے احتمال کو بطور وقت کا تفاعل تلاش کریں۔
جواب: $P(t) = \{\Omega^2/[(\omega - \omega_0)^2 + \Omega^2]\} \sin^2(\omega' t/2)$

ھ. **منحنی گمک**،[۴۴]

$$P(\omega) = \frac{\Omega^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \Omega^2} \tag{۹.۹۲}$$

کو (مقررہ ω_0 اور Ω کے لئے) جبری تعدد ω کے تفاعل کے طور پر ترسیم کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ $\omega = \omega_0$ پر اس کی اعظم قیمت پائی جاتی ہے۔ "اعظم قیمت کی نصف پر پوری چوڑائی" $\Delta\omega$ تلاش کریں۔

و. چونکہ $\omega_0 = \gamma B_0$ ہے، لہٰذا ہم گمک کا تجرباتی مشاہدہ کر کے ذرے کے مقناطیسی جفت قطبی معیار اثر کا تعین کر سکتے ہیں۔ **مرکزوی مقناطیسی گمک**[۴۵] تجربے میں نوریے کا g جز وضربی، ایک ٹسلا ($1\,\mathrm{T}$) کے ساکن میدان اور ایک مائیکرو ٹسلا ($1\,\mu\mathrm{T}$) حیطے کے ریڈیائی تعدد میدان کی مدد سے، ناپا جاتا ہے۔ تعدد گمک کیا ہو گا؟ (پروٹان کے مقناطیسی معیار اثر کے لیے حصہ ۶.۵ دیکھیں۔) منحنی گمک کی چوڑائی تلاش کریں۔ (اپنا جواب Hz میں دیں۔)

---

[۴۴] resonance curve
[۴۵] nmr, nuclear magnetic resonance

سوال ۹.۲۱: میں نے مساوات ۹.۳۱ میں جوہر کو (روشنی کے طول موج سے) اتنا چھوٹا تصور کیا کہ میدان کے فضائی تغیر کو نظر انداز کیا جا سکتا تھا۔ حقیقی برقی میدان درج ذیل ہو گا۔

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = E_0 \cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t) \tag{۹.۹۳}$$

اگر جوہر کا مرکز مبدا پر ہو، تب متعلقہ حجم پر $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} \ll 1$ ($|\boldsymbol{k}| = 2\pi/\lambda$ لہٰذا $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} \sim r/\lambda \ll 1$) ہو گا، جس کی بنا پر ہم اس جزو کو نظر انداز کر سکتے تھے۔ فرض کریں ہم اول رتبی درستگی:

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t) = E_0[\cos(\omega t) + (\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})\sin(\omega t)] \tag{۹.۹۴}$$

کو نظر انداز نہیں کرتے۔ اس کا پہلا جزو **اجازتی** (**برقی جفت قطبی**)[۴۶] تحویلات دے گا جن پر متن میں بات کی جا چکی ہے؛ دوسرا جزو **ممنوعہ** (**مقناطیسی جفت قطبی**[۴۷] اور **برقی چو قطبی**[۴۸]) تحویلات دے گا ($\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}$ کی مزید بڑی طاقتیں، مزید ممنوعہ تحویلات دیں گی، جو زیادہ بلند متعدد قطبی معیار اثر سے وابستہ ہوں گی)۔

ا. ممنوعہ تحویلات کی ازخود اخراجی شرح حاصل کریں (تقطیب اور حرکت کے رخوں پر اوسط تلاش کرنے کی ضرورت نہیں، اگرچہ مکمل جواب کے لیے ایسا کرنا ضروری ہے)۔ جواب:

$$R_{b\to a} = \frac{q^2\omega^5}{\pi\epsilon_0\hbar c^5}\left|\langle a|(\boldsymbol{a}_\text{n}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})|b\rangle\right|^2 \tag{۹.۹۵}$$

ب. دکھائیں کہ یک بُعدی مرتعش کے لیے ممنوعہ تحویلات سطح n سے سطح $n-2$ میں ہوں گی، اور تحویلی شرح (جس کا اوسط $\boldsymbol{a}_\text{n}$ اور $\boldsymbol{k}$ پر حاصل کیا گیا ہو) درج ذیل ہو گی۔

$$R = \frac{\hbar q^2\omega^3 n(n-1)}{15\pi\epsilon_0 m^2 c^5} \tag{۹.۹۶}$$

(تبصرہ: یہاں ω سے مراد نوریہ کا تعدد ہے نہ کہ مرتعش کا تعدد۔) "اجازتی" شرح کے لحاظ سے "ممنوعہ" شرح کی نسبت تلاش کریں اور اس اصطلاح پر تبصرہ کریں۔

ج. دکھائیں کہ ہائیڈروجن میں ممنوعہ تحویل بھی $2S \to 1S$ تحویل کی اجازت نہیں دیتی۔ (یہ تمام بلند متعدد قطب کے لیے بھی درست ہو گا؛ غالب تنزل، در حقیقت، دو نوریہ اخراج کی بنا پر ہو گا، جس کا عرصہ حیات تقریباً ایک سیکنڈ کا دسواں حصہ ہو گا۔)

سوال ۹.۲۲: دکھائیں کہ n,ℓ سے n',ℓ' میں تحویل کے لیے ہائیڈروجن کی ازخود اخراجی شرح (مساوات ۹.۵۶) درج ذیل ہو گی

$$\frac{e^2\omega^3 I^2}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3}\times\begin{cases}\frac{\ell+1}{2\ell+1}, & \ell' = \ell+1\\ \frac{\ell}{2\ell-1}, & \ell' = \ell-1\end{cases} \tag{۹.۹۷}$$

---

[۴۶] allowed electric dipole transitions
[۴۷] forbidden magnetic dipole transitions
[۴۸] forbidden electric quadrupole transitions

جہاں I درج ذیل ہے۔

$$I \equiv \int_0^\infty r^3 R_{n\ell}(r) R_{n'\ell'}(r)\,\mathrm{d}r \tag{۹.۹۸}$$

(جو ہر m کی کسی مخصوص قیمت سے آغاز کر کے کسی ایک m' حال میں، انتخابی قواعد:

$$m' = m-1, \quad m' = m, \quad m' = m+1$$

کے تحت، پہنچتا ہے۔ دھیان رہے کہ جواب m کا تابع نہیں۔) اشارہ: پہلے $\ell' = \ell + 1$ صورت کے لیے $|n\ell m\rangle$ اور $|n'\ell' m'\rangle$ کے بیچ x ، y ، اور z کے تمام غیر صفر قالبی ارکان معلوم کریں۔ ان سے درج ذیل مقدار کا تعین کریں۔

$$|\langle n', \ell+1, m+1|\boldsymbol{r}|n\ell m\rangle|^2 + |\langle n', \ell+1, m|\boldsymbol{r}|n\ell m\rangle|^2 + |\langle n', \ell+1, m-1|\boldsymbol{r}|n\ell m\rangle|^2$$

یہی کچھ $\ell' = \ell - 1$ کے لیے بھی کریں۔

باب ۱۰

حرناگزر تخمین

۱۰.۱ مسئلہ حرناگزر

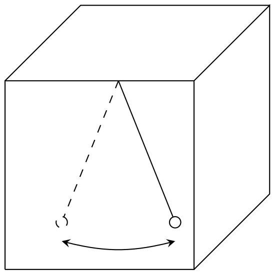
۱۰.۱.۱ حرناگزر عمل

فرض کریں ایک کامل رقاص انتصابی سطح میں بغیر کسی رگڑ یا ہوائی مزاحمت کے آگے پیچھے ارتعاش کرتا ہے۔ اگر آپ اس رقاص کو جھٹکے سے ہلائیں تو یہ افراتفری کے ساتھ حرکت کرنے لگے گا، لیکن اگر آپ بغیر جھٹکا دیے رقاص کو آہستہ آہستہ ایک مقام سے دوسرے مقام منتقل کریں (شکل ۱۰.۱) تو یہ اسی سطح (یا اس کی متوازی سطح) میں شائستگی اور روانی سے، اسی حیطہ کے ساتھ جھولتا رہے گا۔ بیرونی کیفیت کی بہت آہستہ تبدیلی ہی **حرناگزر** عمل کی پہچان ہے۔ دھیان رہے کہ یہاں دو مختلف وقتوں کی بات کی جا رہی ہے: نظام کی اپنی حرکت (جو یہاں رقاص کے ارتعاش کا دوری عرصہ ہو گا) کو ظاہر کرنے والا "اندرونی" وقت T_i، اور نظام کی مقادیر معلوم میں نمایاں تبدیلی (مثلاً، لرزتے ہوئے چبوترے پر نصب رقاص کی صورت میں چبوترے کی لرزش کا دوری عرصہ) کو ظاہر کرنے والا "بیرونی" وقت T_e۔ حرناگزر عمل میں $T_e \gg T_i$ ہو گا۔

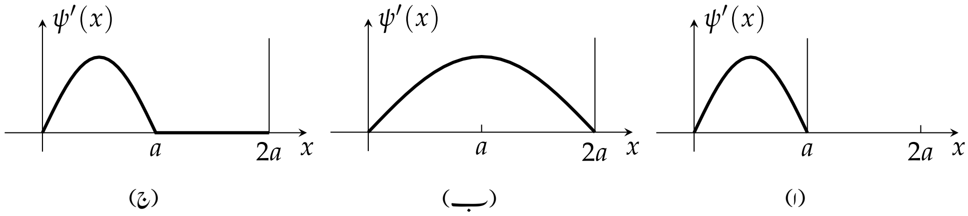
حرناگزر عمل کے تجزیے کی بنیادی حکمت عملی یہ ہے کہ پہلے بیرونی مقادیر معلوم کو غیر متغیر رکھتے ہوئے مسئلہ حل کیا جاتا ہے، اور حساب کے بالکل آخر میں انہیں (بہت آہستہ) وقت کے ساتھ تبدیل ہونے کی اجازت دی جاتی ہے۔ مثال کے طور پر، مقررہ لمبائی L کے رقاص کا کلاسیکی دوری عرصہ $2\pi\sqrt{L/g}$ ہو گا؛ اب اگر لمبائی آہستہ آہستہ تبدیل ہو، تو دوری عرصہ بظاہر $2\pi\sqrt{L(t)/g}$ ہو گا۔ ہائیڈروجن سالمہ (حصہ ۷.۳) پر تبصرہ کے دوران زیادہ باریک بین مثال پیش کی گئی۔ ہم نے مراکزہ کو ساکن تصور کرتے ہوئے آغاز کیا، اور ان کے بیچ فاصلہ R کی صورت میں الیکٹران کی حرکت کے لئے حل کیا۔ نظام کی زمینی حال توانائی کو R کے تفاعل کی صورت میں دریافت کرنے کے بعد، ہم نے توازنی فاصلہ معلوم کر کے ترسیم کے انحنا سے مراکزہ کی لرزش کا تعدد حاصل کیا (سوال ۱۰.۷)۔ طبیعیات سالمہ میں اس ترکیب کو (جس میں ساکن

---

adiabatic[1]



شکل ۱.۱۰: حرناگزر حرکت: اگر ڈبے کو نہایت آہستہ ایک جگہ سے دوسری جگہ منتقل کیا جائے تو رقاص اسی حیطہ کے ساتھ ابتدائی سطح کی متوازی سطح میں جھولتا ہے۔



شکل ۲.۱۰: (ا) لامتناہی چوکور کنویں کے زمینی حال سے ایک ذرہ ابتدا کرتا ہے، (ب) اگر دیوار نہایت آہستہ حرکت کرے تو ذرہ اسی حال میں رہتا ہے، (ج) اگر دیوار تیزی سے حرکت کرے تو ذرہ لمحاتی طور پر ابتدائی حال میں رہتا ہے۔

مراکزہ سے آغاز کرتے ہوئے، الیکٹرانی تفاعلات موج کا حساب کر کے، ان سے نسبتاً سست رفتار مراکزہ کے مقامات اور حرکت کے بارے میں معلومات حاصل کرنے کو) **بارن واوپن ہائیمر تخمین**[2] کہتے ہیں۔

کوانٹائی میکانیات میں، **حرناگزر تخمین**[3] کے بنیادی تصور کو ایک مسئلہ کے روپ میں پیش کیا جا سکتا ہے۔ فرض کریں ہیملٹنی ابتدائی روپ H^i سے بہت آہستہ تبدیل ہو کر کسی اختتامی روپ H^f تک پہنچتی ہے۔ **مسئلہ حرناگزر**[4] کہتا ہے کہ اگر ذرہ ابتدائی طور پر H^i کے n ویں امتیازی حال میں پایا جاتا ہو، تو (زیر مساوات شروڈنگر) یہ H^f کے n ویں امتیازی حال میں منتقل ہو گا۔ (میں یہاں فرض کرتا ہوں کہ H^i سے H^f تک تحویل کے دوران، طیف غیر مسلسل اور غیر انحطاطی ہے، لہٰذا احالات کی ترتیب میں کوئی شبہ نہیں پایا جائے گا؛ امتیازی تفاعلات پر نظر رکھنے کی کوئی ترکیب وضع کرنے سے ان شرائط کو نرم بنایا جا سکتا ہے، لیکن میں یہاں ایسا نہیں کروں گا۔)

[2] Born-Oppenheimerapproximation
[3] adiabaticapproximation
[4] adiabatictheorem

مثال کے طور پر، ہم لامتناہی چوکور کنویں میں ایک ذرے کو زمینی حال:

$$\psi^i(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \tag{۱۰.۱}$$

میں تیار کرتے ہیں (شکل ۱۰.۲-ا)۔ اب دائیں دیوار کو بہت آہستہ مقام $2a$ پر منتقل کیا جاتا ہے؛ مسئلہ حرناگزر کے تحت (ماسوائے ہیّتی جزو ضربی کے) یہ ذرہ توسیع شدہ کنویں کے زمینی حال:

$$\psi^f(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{2a}x\right) \tag{۱۰.۲}$$

میں منتقل ہو گا (شکل ۱۰.۲-ب)۔ دھیان رہے کہ ہم ہیملٹنی میں چھوٹی تبدیلی (نظریہ اضطراب کی طرح) کی بات نہیں کر رہے ہیں؛ ہاں تبدیلی بہت بڑی ہے۔ فقط اتنا ضروری ہے کہ تبدیلی آہستہ رونما ہو۔ یہاں توانائی کی بقا نہیں ہو گی: جو بھی دیوار کو حرکت دے رہا ہے، نظام سے توانائی حاصل کرے گا، جیسا کہ گاڑی کے انجن کے شلنڈر میں آہستہ آہستہ پھیلتا ہوا گیس بو کا کو توانائی فراہم کرتا ہے۔ اس کے برعکس، کنویں کی اچانک وسعت کی صورت میں حال $\psi^i(x)$ ہی رہتا ہے (شکل ۱۰.۲-ج)، جو نئی ہیملٹنی کے امتیازی حالات کا پیچیدہ خطی جوڑ ہو گا (سوال ۲.۳۸)۔ یہاں توانائی (کم از کم، اس کی توقعاتی قیمت) کی بقا ہو گی؛ جیسا اچانک رکاوٹ ہٹانے سے خلاء میں گیس کی آزادانہ پھیلانے سے کوئی کام نہیں ہوتا۔

سوال ۱۰.۱: ایک لامتناہی چوکور کنواں، جس کی دائیں دیوار ایک مستقل سمتی رفتار v سے حرکت کرتے ہوئے کنویں کو وسیع بناتی ہے، کو ٹھیک ٹھیک حل کرنا ممکن ہے۔ اس کے حلوں کا مکمل سلسلہ درج ذیل ہو گا

$$\Phi_n(x,t) \equiv \sqrt{\frac{2}{\omega}} \sin\left(\frac{n\pi}{\omega}x\right) e^{i(mvx^2 - 2E_n^i at)/2\hbar\omega} \tag{۱۰.۳}$$

جہاں $w(t) \equiv a + vt$ کنویں کی (لمحاتی) چوڑائی اور $E_n^i \equiv n^2\pi^2\hbar^2/2ma^2$ (چوڑائی a) کے اصل کنویں کی n ویں اجازتی توانائی ہے۔ عمومی حل ان Φ کا خطی جوڑ:

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Phi_n(x,t) \tag{۱۰.۴}$$

ہو گا، جہاں عددی سر c_n وقت t کے تابع نہیں ہوں گے۔

ا. دیکھیں آیا تابع وقت مساوات شروڈنگر بمع مناسب سرحدی شرائط کو مساوات ۱۰.۳ مطمئن کرتی ہے۔

ب. فرض کریں اصل کنویں کے زمینی حال میں ایک ذرہ آغاز $(t = 0)$ کرتا ہے۔

$$\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

دکھائیں کے توسیعی عددی سروں کو درج ذیل روپ میں لکھا جا سکتا ہے

$$c_n = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi} e^{-i\alpha z^2} \sin(nz)\sin(z)\,\mathrm{d}z \tag{۱۰.۵}$$

جہاں $mva/2\pi^2\hbar \equiv \alpha$ کنویں کے پھیلنے کی رفتار کی بے بُعدی پیمائش ہے۔(بدقسمتی سے اس تکمل کی قیمت بنیادی تفاعلات کی صورت میں حاصل نہیں کی جا سکتی۔)

ج. فرض کریں ہم کنویں کو ابتدائی چوڑائی کے دگنی چوڑائی تک پھیلنے دیتے ہیں، یوں "بیرونی" وقت $w(T_e) = 2a$ ہو گا۔ (ابتدائی) زمینی حال کے تابع وقت قوت نما جزو ضربی کا دوری عرصہ، "اندرونی" وقت T_i کا تعین کرکے، دکھائیں کہ حسرناگزر طریق سے مراد $\alpha \ll 1$ ہو گا، لہٰذا تکمل کے دائرہ کار پر $e^{-i\alpha z^2} \cong 1$ ہو گا۔ اس کو استعمال کرتے ہوئے توسیعی عددی سر c_n کا تعین کریں۔ حال $\Psi(x,t)$ تیار کرکے تصدیق کریں کہ یہ مسئلہ حسرناگزر کے مطابق ہے۔ اور وقت T_e ہو گا۔ وقت

د. دکھائیں کہ $\Psi(x,t)$ میں پیّتی جزو ضربی کو درج ذیل روپ میں لکھا جا سکتا ہے

$$\theta(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^1 E_1(t')\,\mathrm{d}t' \tag{۱۰.۶}$$

جہاں لمحہ t پر لمحاتی امتیازی قیمت $E_n(t) \equiv n^2\pi^2\hbar^2/2m\omega^2$ ہو گی۔ اس نتیجہ پر تبصرہ کریں۔

۱۰.۱.۲ مسئلہ حسرناگزر کا ثبوت

مسئلہ حسرناگزر بظاہر معقول نظر آتا ہے، اور اسے با آسانی بیان کیا جا سکتا ہے، تاہم اس کو ثابت کرنا اتنا آسان نہیں۔ غیر تابع وقت ہیملٹنی کی صورت میں، ایک ذرہ جو n ویں امتیازی حال،[۵] ψ_n، میں آغاز کرتا ہے،

$$H\psi_n = E_n\psi_n \tag{۱۰.۷}$$

پیّتی جزو ضربی اپنانے کے علاوہ اسی n ویں امتیازی حال:

$$\Psi_n(t) = \psi_n e^{-iE_nt/\hbar} \tag{۱۰.۸}$$

میں رہتا ہے۔ اگر ہیملٹنی وقت کے ساتھ تبدیل ہوتا ہو، تب امتیازی تفاعلات اور امتیازی قیمتیں بھی تابع وقت ہوں گی:

$$H(t)\psi_n(t) = E_n(t)\psi_n(t) \tag{۱۰.۹}$$

لیکن اب بھی (کسی ایک مخصوص لمحہ پر) یہ معیاری عمودی سلسلہ:

$$\langle\psi_n(t)|\psi_m(t)\rangle\delta_{nm} \tag{۱۰.۱۰}$$

دیں گے، اور یہ مکمل ہیں، لہٰذا تابع وقت مساوات شروڈنگر

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t) = H(t)\Psi(t) \tag{۱۰.۱۱}$$

[۵] میں مقام (یا چکر، وغیرہ) کا ذکر نہیں کروں گا، چونکہ اس دلیل میں تابعیت وقت کی بات کی جا رہی ہے۔

کے عمومی حل کو ان کا خطی جوڑ:

$$\Psi(t) = \sum_n c_n(t)\psi_n(t)e^{i\theta_n(t)} \tag{۱۰.۱۲}$$

لکھا جا سکتا ہے، جہاں

$$\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')\,\mathrm{d}t' \tag{۱۰.۱۳}$$

وقت کے ساتھ تبدیل ہوتے ہوئے E_n کی صورت میں "معیاری" ہیئتی جزو ضربی کو عمومیت دیتا ہے۔ (ہمیشہ کی طرح میں اس کو عددی سر $c_n(t)$ میں ضم کر سکتا تھا، لیکن غیر تابع وقت ہیملٹنی کی صورت میں بھی یہ پایا جاتا ہے، لہٰذا تابعیت وقت کے اس حصے کو صریحاً لکھنا موزوں ہو گا۔)

مساوات ۱۰.۱۲ کو مساوات ۱۰.۱۱ میں پر کرنے سے

$$i\hbar\sum_n[\dot{c}_n\psi_n + c_n\dot{\psi}_n + ic_n\psi_n\dot{\theta}_n]e^{i\theta_n} = \sum_n c_n(H\psi_n)e^{i\theta_n} \tag{۱۰.۱۴}$$

حاصل ہو گا (جہاں وقت کے لحاظ سے تفرق کو نقطے سے ظاہر کیا گیا ہے)۔ مساوات ۱۰.۹ اور مساوات ۱۰.۱۳ کی بنا پر آخری دو اجزاء کٹتے ہیں، لہٰذا درج ذیل باقی رہتا ہے۔

$$\sum_n \dot{c}_n\psi_n e^{i\theta_n} = -\sum_n c_n\dot{\psi}_n e^{i\theta_n} \tag{۱۰.۱۵}$$

اس کا ψ_m کے ساتھ اندرونی ضرب لے کر، لحاظی امتیازی تفاعلات کی معیاری عمودیت (مساوات ۱۰.۱۰) بروئے کار لاتے ہوئے

$$\sum_n \dot{c}_n\delta_{mn}e^{i\theta_n} = -\sum_n c_n\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle e^{i\theta_n}$$

یا درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\dot{c}_m(t) = -\sum_n c_n\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle e^{i(\theta_n-\theta_m)} \tag{۱۰.۱۶}$$

اب مساوات ۱۰.۹ کا وقت کے ساتھ تفرق لیتے ہیں

$$\dot{H}\psi_n + H\dot{\psi}_n = \dot{E}_n\psi_n + E_n\dot{\psi}_n$$

اور یوں (دوبارہ ψ_m کے ساتھ اندرونی ضرب لے کر) درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\langle\psi_m|\dot{H}|\psi_n\rangle + \langle\psi_m|H|\dot{\psi}_n\rangle = \dot{E}_n\delta_{mn} + E_n\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle \tag{۱۰.۱۷}$$

ہم H کے ہرمشی پن سے فائدہ اٹھاتے ہوئے $\langle\psi_m|H|\dot{\psi}_n\rangle = E_m\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle$ لکھتے ہیں، یوں $n \neq m$ کی صورت میں درج ذیل ہو گا۔

$$\langle\psi_m|\dot{H}|\psi_n\rangle = (E_n - E_m)\langle\psi_m|\dot{\psi}_n\rangle \tag{۱۰.۱۸}$$

(یہ جانتے ہوئے کہ توانائیاں غیر انحطاطی ہیں) مساوات ۱۰.۱۸ کو مساوات ۱۰.۱۶ میں پُر کر کے درج ذیل اخذ ہو گا۔

$$\dot{c}_m(t) = -c_m\langle\psi_m|\dot{\psi}_m\rangle - \sum_{n\neq m} c_n \frac{\langle\psi_m|\dot{H}|\psi_n\rangle}{E_n - E_m} e^{(-i/\hbar)\int_0^t [E_n(t')-E_m(t')]\,\mathrm{d}t'} \tag{۱۰.۱۹}$$

یہ ٹھیک ٹھیک نتیجہ ہے۔ اب حسرناگزر تخمین کی باری آتی ہے: فرض کریں $\dot{H}$ نہایت چھوٹا ہے، اور دوسرے جزو کو نظر انداز کرتے ہوئے[6]

$$\dot{c}_m(t) = -c_m\langle\psi_m|\dot{\psi}_m\rangle \tag{۱۰.۲۰}$$

ہو گا، جس کا حل

$$c_m(t) = c_m(0)e^{i\gamma_m(t)} \tag{۱۰.۲۱}$$

ہے، جہاں درج ذیل ہو گا۔[7]

$$\gamma_m(t) \equiv i\int_0^t \left\langle \psi_m(t') \middle| \frac{\partial}{\partial t'}\psi_m(t') \right\rangle \mathrm{d}t' \tag{۱۰.۲۲}$$

بالخصوص، اگر ذرہ n ویں امتیازی حال (یعنی $m \neq n$ کیلئے $c_n(0) = 1$ اور $c_m(0) = 0$ ہو) سے آغاز کرے، تب (مساوات ۱۰.۱۲)

$$\Psi_n(t) = e^{i\theta_n(t)}e^{i\gamma_n(t)}\psi_n(t) \tag{۱۰.۲۳}$$

ہو گا، لہٰذا (چند ہیّتی جزو ضربی حاصل کرنے کے علاوہ) یہ ذرہ (ارتقائی ہیملٹنی کے) n ویں امتیازی حال میں ہی رہے گا۔

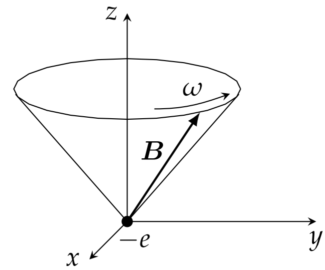
مثال ۱۰.۱: فرض کریں مقناطیسی میدان میں مبدا پر (کمیت m اور بار $-e$ کا) ساکن الیکٹران پایا جاتا ہے۔ اس مقناطیسی میدان کی مقدار (B_0) مستقل ہے، جبکہ اس کا رخ z محور کے گرد، مقررہ زاویائی سمتی رفتار ω کے ساتھ، مخروطی سطح پر رہتے ہوئے گھومتا ہے۔ محور z کے ساتھ مخروط کا اندرونی زاویہ α ہے (شکل ۱۰.۳)۔

$$\boldsymbol{B}(t) = B_0[\sin(\alpha)\cos(\omega t)\boldsymbol{i} + \sin(\alpha)\sin(\omega t)\boldsymbol{j} + \cos\alpha\boldsymbol{k}] \tag{۱۰.۲۴}$$

---

[6] اس قدم کی پختہ وجہ تلاش کرنا اتنا آسان نہیں۔

[7] چونکہ ψ_m کی معمول زنی میں $(\mathrm{d}/\mathrm{d}t)\langle\psi_m|\psi_m\rangle = \langle\psi_m|\dot{\psi}_m\rangle + \langle\dot{\psi}_m|\psi_m\rangle = 2(\langle\psi_m|\dot{\psi}_m\rangle)_{\text{حقیقی}} = 0$ شامل ہے لہٰذا γ حقیقی ہو گا۔



شکل ۱۰.۳: مقناطیسی میدان زاویائی سمتی رفتار ω سے مخروطی راہ جھاڑتا ہے (مساوات ۱۰.۲۴)۔

اس کی ہیملٹنی (مساوات ۴.۱۵۸) درج ذیل ہو گی

$$
\begin{aligned}
H(t) &= \frac{e}{m}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{S} = \frac{e\hbar B_0}{2m}\left[\sin\alpha\cos(\omega t)\sigma_x + \sin\alpha\sin(\omega t)\sigma_y + \cos\alpha\sigma_z\right] \\
&= \frac{\hbar\omega_1}{2}\begin{pmatrix} \cos\alpha & e^{-i\omega t}\sin\alpha \\ e^{i\omega t}\sin\alpha & -\cos\alpha \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{۱۰.۲۵}
$$

جہاں ω_1 درج ذیل ہے۔

$$
\omega_1 \equiv \frac{eB_0}{m} \tag{۱۰.۲۶}
$$

ہیملٹنی $H(t)$ کے معمول شدہ امتیازی چکر کار χ_+ اور χ_- درج ذیل ہیں

$$
\chi_+(t) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) \\ e^{i\omega t}\sin(\alpha/2) \end{pmatrix} \tag{۱۰.۲۷}
$$

$$
\chi_-(t) = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t}\sin(\alpha/2) \\ -\cos(\alpha/2) \end{pmatrix} \tag{۱۰.۲۸}
$$

جو $\boldsymbol{B}(t)$ کے لحاظ رخ کے ساتھ، بالترتیب، ہم چکر اور خلاف چکر کو ظاہر کرتے ہیں (سوال ۴.۳۰ دیکھیں)۔ ان کی مطابقتی امتیازی قیمتیں درج ذیل ہوں گی۔

$$
E\pm = \pm\frac{\hbar\omega_1}{2} \tag{۱۰.۲۹}
$$

فرض کریں $\boldsymbol{B}(0)$ کی ہم راہ، الیکٹران ہم چکر:

$$
\chi(0) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) \\ \sin(\alpha/2) \end{pmatrix} \tag{۱۰.۳۰}
$$

صورت سے آغاز کرتا ہے۔[۸] تابع وقت مساوات شروڈنگر کا ٹھیک حل درج ذیل ہوگا (سوال ۱۰.۲)

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} [\cos(\lambda t/2) - i\frac{(\omega_1-\omega)}{\lambda}\sin(\lambda t/2)]\cos(\alpha/2)e^{-i\omega t/2} \\ [\cos(\lambda t/2) - i\frac{(\omega_1+\omega)}{\lambda}\sin(\lambda t/2)]\sin(\alpha/2)e^{+i\omega t/2} \end{pmatrix} \tag{۱۰.۳۱}$$

جہاں λ درج ذیل ہے۔

$$\lambda \equiv \sqrt{\omega^2 + \omega_1^2 - 2\omega\omega_1\cos\alpha} \tag{۱۰.۳۲}$$

اس حل کو χ_+ اور χ_- کا خطی جوڑ لکھا جا سکتا ہے۔

$$\begin{aligned}\chi(t) = \Big[\cos\Big(\frac{\lambda t}{2}\Big) - i\frac{(\omega_1 - \omega\cos\alpha)}{\lambda}\sin\Big(\frac{\lambda t}{2}\Big)\Big]e^{-i\omega t/2}\chi_+(t) \\ + i\Big[\frac{\omega}{\lambda}\sin\alpha\sin\Big(\frac{\lambda t}{2}\Big)\Big]e^{+i\omega t/2}\chi_-(t)\end{aligned} \tag{۱۰.۳۳}$$

ظاہر ہے کہ ($\boldsymbol{B}$ کے موجودہ رخ کے لحاظ سے) خلاف چکر تحویل کا ٹھیک احتمال درج ذیل ہوگا۔

$$\left|\langle\chi(t)|\chi_-(t)\rangle\right|^2 = \Big[\frac{\omega}{\lambda}\sin\alpha\sin\Big(\frac{\lambda t}{2}\Big)\Big]^2 \tag{۱۰.۳۴}$$

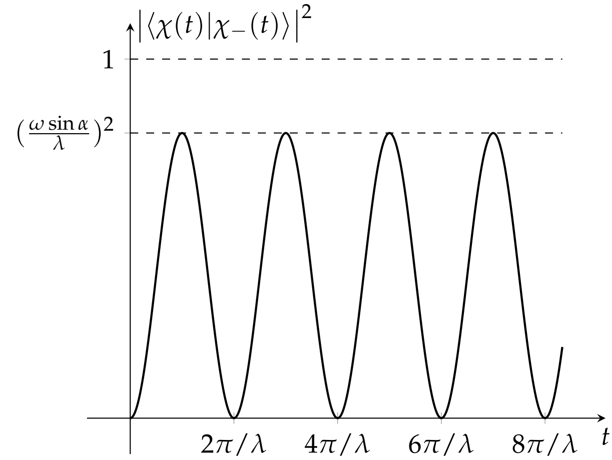
مسئلہ حرناگزر کہتا ہے کہ $T_i \gg T_e$ کی تحدیدی صورت میں تحویلی احتمال صفر کو پہنچے گا، جہاں ہیملٹنی میں تبدیلی کو درکار امتیازی وقت T_e ہے (جو موجودہ صورت میں $1/\omega$ ہوگا)، اور تفاعل موج میں تبدیلی کے لیے درکار امتیازی وقت T_i ہے (جو موجودہ صورت میں $\hbar/(E_+ - E_-) = 1/\omega_1$ ہوگا)۔ یوں حرناگزر تخمین سے مراد $\omega_1 \gg \omega$ ہے: (غیر مضطرب) تفاعلات موج کی ہیئت کے لحاظ سے میدان آہستہ گھومتا ہے۔ حرناگزر طریق میں $\lambda \cong \omega_1$ لہٰذا

$$\left|\langle\chi(t)|\chi_-(t)\rangle\right|^2 \cong \Big[\frac{\omega}{\omega_1}\sin\alpha\sin\Big(\frac{\lambda t}{2}\Big)\Big]^2 \to 0 \tag{۱۰.۳۵}$$

ہوگا، جیسا ہم پہلے سے ذکر کر چکے۔ مقناطیسی میدان الیکٹران کو ہاتھ سے پکڑ کر یوں گھماتا ہے کہ الیکٹران کا چکر ہر لمحہ $\boldsymbol{B}$ کے ہم رخ ہوتا ہے۔ اس کے برعکس $\omega_1 \ll \omega$ کی صورت میں $\lambda \cong \omega$ ہوگا اور نظام ہم میدان اور خلاف میدان صورتوں کے بیچ ٹپکیاں کھائے گا (شکل ۱۰.۴)۔ □

سوال ۱۰.۲: تصدیق کریں کہ مساوات ۱۰.۲۵ کی ہیملٹنی کیلئے مساوات ۱۰.۳۱ تابع وقت مساوات شروڈنگر کو مطمئن کرتی ہے۔ ساتھ ہی مساوات ۱۰.۳۳ کی تصدیق کریں اور دکھائیں کہ، معمول زنی شرط کے عین مطابق، عددی سروں کے مربعوں کا مجموعہ 1 ہوگا۔

[۸] یہ بنیادی طور پر سوال ۹.۲۰ ہی ہے، البتہ یہاں الیکٹران $\boldsymbol{B}$ کی ہم راہ، ہم چکر سے آغاز کرتا ہے، جبکہ سوال ۹.۲۰-د میں یہ z محور کی ہم راہ، ہم چکر سے آغاز کرتا ہے۔



شکل ۱۰.۴: غیر حر ناگزر طریق $(\omega \gg \omega_1)$ میں تحویلی احتمال (مساوات ۱۰.۳۴)۔

۱۰.۲ ہیّت بیری

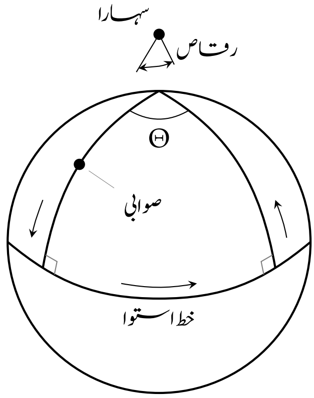
۱۰.۲.۱ گرگٹی عمل

آئیں حصہ ۱۰.۱.۱ کے کلاسیکی نمونہ پر دوبارہ نظر ڈالتے ہیں جس میں ایک ایسے کامل بے رگڑ رقاص، جس کے سہارا کو ایک مقام سے دوسرے اور دوسرے سے تیسرے مقام منتقل کیا جاتا ہو، استعمال کرتے ہوئے حر ناگزر عمل کا تصور اخذ کیا گیا۔ میں نے دعویٰ کیا تھا کہ جب تک سہارا کی حرکت رقاص کے دوری عرصے سے بہت آہستہ ہو (تاکہ سہارا کی نمایاں حرکت کے دوران رقاص بہت ساری ارتعاش کرتا ہو)، یہ اسی مستوی (یا اس کے متوازی مستوی) میں اسی حیطے (اور اسی تعدد) کے ساتھ جھومتا رہے گا۔

اگر میں اس کامل رقاص کو شمالی قطب پر لے جا کر، مثلاً صوابی شہر کے رخ، جھولا دوں (شکل ۱۰.۵) تو کیا ہو گا؟ فی الحال تصور کریں کہ دنیا گھوم نہیں رہی ہے۔ میں اس کو بہت آہستہ (یعنی حر ناگزر طریقہ سے) صوابی سے گزرتے خط طول بلد پر چلتے ہوئے، خط استوا تک پہنچتا ہوں۔ یہاں پہنچ کر یہ شمال و جنوب جھولے رہا ہو گا۔ میں اس کو خط استوا پر کچھ فاصلہ دور تک لے جاتا ہوں (رقاص ابھی بھی شمال و جنوب جھولتا ہے)۔ آخر میں نئے خط طول بلند پر چلتے ہوئے، میں رقاص کو واپس شمالی قطب منتقل کرتا ہوں۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ رقاص اب اسی مستوی میں نہیں جھولے گا جس سے اس نے آغاز کیا تھا؛ یقیناً، نئے اور پرانے مستوی کے بیچ زاویہ Θ پایا جاتا ہے، جہاں جنوب کی طرف چلتے ہوئے اور شمال کی طرف چلتے ہوئے خط طول بلند کے بیچ زاویہ Θ ہے۔

جس راہ پر میں رقاص کو اٹھا کر چلتا رہا، وہ راہ (زمین کے مرکز پر) **ٹھوس زاویہ**[۹]، Ω، بناتی ہے اور Θ اسی (Ω) کے

[۹] solidangle



شکل ۱۰.۵: سطح زمین پر رقاص کی حرناگزر منتقلی۔

برابر ہے۔ یہ راہ شمالی نصف کرہ کا $\Theta/2\pi$ حصہ گھیرتی ہے، لہٰذا اس کا رقبہ

$$A = (1/2)(\Theta/2\pi)4\pi R^2 = \Theta R^2$$

ہو گا (جہاں R زمین کا رداس ہے)؛ یوں

$$\Theta = A/R^2 \equiv \Omega \tag{۱۰.۳۶}$$

ہو گا جو اس نتیجے کو نہایت عمدہ انداز میں پیش کرتا ہے، چونکہ یہ راہ کی شکل و صورت پر منحصر نہیں (شکل ۱۰.۶)۔[10]

کرہ کی سطح پر بند راہ پر چلتے ہوئے حرناگزر منتقلی کی ایک مثال **فوقو رقاص**[11] ہے، جہاں رقاص کو اٹھا کر چلنے کا کام مجھے نہیں بلکہ زمین کے گھومنے کو سونپا جاتا ہے۔ خط عرض بلد θ_0 درج ذیل ٹھوس زاویہ بناتا ہے (شکل ۱۰.۷)۔

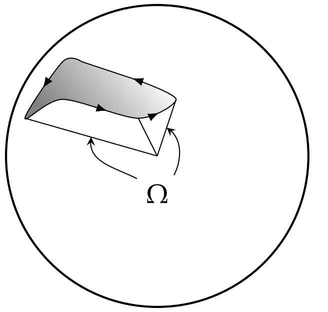
$$\Omega = \int \sin\theta \,\mathrm{d}\theta \,\mathrm{d}\phi = 2\pi(-\cos\theta)\Big|_0^{\theta_0} = 2\pi(1-\cos\theta_0) \tag{۱۰.۳۷}$$

زمین کے لحاظ سے (جو اس دوران 2π زاویہ گھوم چکی ہوگی) فوقو رقاص کی روزانہ استقبالی حرکت $2\pi\cos\theta_0$ ہوگی؛ اس نتیجہ کو، عموماً، گھومتی حوالہ چوکھٹ پر **کوریولس**[12] قوتوں کے اثر سے حاصل کیا جاتا ہے، لیکن یہاں یہ خالصتاً ہندسی مفہوم کا حامل ہے۔

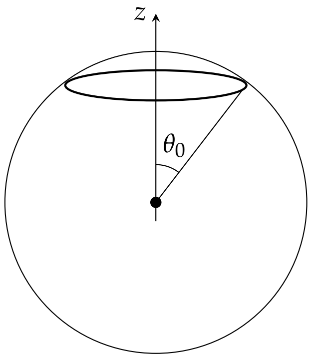
[10] آپ چاہیں تو اس کو ثابت کر سکتے ہیں۔ اس راہ کو زمین کے گرد دائری لکیروں کے چھوٹے چھوٹے حصوں کا مجموعہ تصور کریں۔ رقاص ہر ایسی لکیر کے ساتھ مستقل زاویہ بنائے گا لہٰذا حاصل زاویائی انحراف کا تعلق کروی کثیر الاضلاع کے راس زاویوں کے مجموعہ کے ساتھ ہو گا۔

[11] Foucaultpendulum

[12] Coriolis



شکل ۱۰.۶: کرہ پر اختیاری راہ، ٹھوس زاویہ Ω بناتی ہے۔



شکل ۱۰.۷: ایک دن کے دوران، فوقو رقاص کی راہ۔

ایسا نظام جو بند راہ پر چلتے ہوئے واپس ابتدائی نقطہ پہنچ کر اپنے ابتدائی حال کو نہیں لوٹتا **گر گٹی**[۱۳] کہلاتا ہے۔ (یہاں ضروری نہیں کہ راہ پر چلنے سے مراد "حرکت دینا" ہو؛ اس سے مراد صرف اتنا ہے کہ نظام کی مقدار معلوم قیمتوں کو یوں تبدیل کیا جاتا ہے کہ آخر کار ان کی قیمتیں وہی ہوں جو ابتدا میں تھیں۔) گر گٹی نظام جگہ جگہ پائے جاتے ہیں؛ ایک لحاظ سے ہر چکر دار انجن گر گٹی ہے: ہر ایک پھیرے کے اختتام تک گاڑی آگے حرکت کر چکی ہو گی، یا کوئی وزن اٹھایا گیا ہو گا، وغیرہ۔ اس تصور کا اطلاق، چھوٹے **رینالڈ عدد**[۱۴] پر سیال میں، جرثوموں کی حرکت پر بھی کیا گیا ہے۔ اگلے حصہ میں میں گر گٹی حرناگزر عمل کی کوانٹائی میکانیات پر غور کروں گا۔ ہم نے دیکھنا ہو گا کہ ہیملٹنی کی مقدار معلوم مقداروں کو کسی بند راہ پر حرناگزر پھیرا دینے سے اختتامی حال کس طرح ابتدائی حال سے مختلف ہو گا۔

۱۰.۲.۲ ہندسی ہیئت

میں نے حصہ ۱۰.۱.۲ میں دکھایا کہ ایک ذرہ جو $H(0)$ کے n وی امتیازی حال سے آغاز کرتا ہے، حرناگزر صورت میں، تابع وقت ہیئتی جزو ضربی کے علاوہ، $H(t)$ کے n وی امتیازی حال میں رہتا ہے۔ بالخصوص، اس کا تفاعل موج (مساوات ۱۰.۲۳):

$$\Psi_n(t) = e^{i[\theta_n(t)+\gamma_n(t)]}\psi_n(t) \tag{۱۰.۳۸}$$

ہو گا، جہاں

$$\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_n(t')\,\mathrm{d}t' \tag{۱۰.۳۹}$$

[۱۳] nonholonomic
[۱۴] Reynolds number

حرکی ہیئت[۱۵] ہے (جو وقت کے تفاعل E_n کی صورت میں، جزو ضربی $e^{(-iE_nt/\hbar)}$ کو عمومیت دیتی ہے)، اور درج ذیل ہندسی ہیئت[۱۶] کہلاتی ہے۔

$$\gamma_n(t) \equiv i\int_0^t \left\langle \psi_n(t') \middle| \frac{\partial}{\partial t'}\psi_n(t') \right\rangle \mathrm{d}t' \tag{۱۰.۴۰}$$

چونکہ ہیملٹنی میں کوئی ایسی مقدار معلوم $R(t)$ پائی جاتی ہے جو وقت کے ساتھ تبدیل ہوتی ہے، لہٰذا $\psi_n(t)$ وقت t کا تابع ہوگا۔ (سوال ۱.۱۰ میں $R(t)$، پھیلتے ہوئے چوکور کنویں کی، چوڑائی ہوگی۔) یوں

$$\frac{\partial\psi_n}{\partial t} = \frac{\partial\psi_n}{\partial R}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t} \tag{۱۰.۴۱}$$

لہٰذا

$$\gamma_n(t) = i\int_0^t \left\langle \psi_n \middle| \frac{\partial\psi_n}{\partial R} \right\rangle \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t'}\,\mathrm{d}t' = i\int_{R_i}^{R_f} \left\langle \psi_n \middle| \frac{\partial\psi_n}{\partial R} \right\rangle \mathrm{d}R \tag{۱۰.۴۲}$$

ہوگا، جہاں R_i اور R_f مقدار معلوم R_t کی بالترتیب ابتدائی اور اختتامی قیمتیں ہوں گی۔ بالخصوص، اگر وقت T کے بعد ہیملٹنی واپس اپنا ابتدائی روپ اختیار کرے تب $R_f = R_i$ لہٰذا $\gamma_n(T) = 0$ ہوگا، جو زیادہ دلچسپ صورت حال نہیں!

میں نے مساوات ۱۰.۴۱ میں فرض کیا کہ ہیملٹنی میں صرف ایک مقدار معلوم ایسا ہے جو تبدیل ہوتا ہو۔ اب فرض کریں N عدد مقدار معلوم $R_1(t)$، $R_2(t)$، ...، $R_N(t)$ تبدیل ہوتے ہوں؛ تب درج ذیل ہوگا

$$\frac{\partial\psi_n}{\partial t} = \frac{\partial\psi_n}{\partial R_1}\frac{\mathrm{d}R_1}{\mathrm{d}t} + \frac{\partial\psi_n}{\partial R_2}\frac{\mathrm{d}R_2}{\mathrm{d}t} + \cdots + \frac{\partial\psi_n}{\partial R_N}\frac{\mathrm{d}R_N}{\mathrm{d}t} = (\nabla_R\psi_n)\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t} \tag{۱۰.۴۳}$$

جہاں $\boldsymbol{R} \equiv (R_1, R_2, \dots, R_N)$ ہے اور ∇_R ان مقدار معلوم کے لحاظ سے ڈھلوان ہے۔ اس مرتبہ درج ذیل ہوگا

$$\gamma_n(t) = i\int_{\boldsymbol{R}_i}^{\boldsymbol{R}_f} \langle\psi_n|\nabla_R\psi_n\rangle\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{R} \tag{۱۰.۴۴}$$

اور اگر وقت T کے بعد ہیملٹنی واپس اپنا اصل روپ اختیار کرتا ہو تب خالص ہندسی ہیئتی تبدیلی درج ذیل ہوگی۔

$$\gamma_n(T) = i\oint \langle\psi_n|\nabla_R\psi_n\rangle\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{R} \tag{۱۰.۴۵}$$

یہ مقدار معلوم فضا میں بند راہ پر لکیری تکمل ہے، جو عموماً غیر صفر ہوگا۔ مساوات ۱۰.۴۵ کو پہلی مرتبہ 1984 میں[۱۷] میکائل بیری نے حاصل کیا اور یوں $\gamma_n(T)$ ہیئت بیری[۱۸] کہلاتی ہے۔ دھیان رہے کہ

---

[۱۵] dynamic phase
[۱۶] geometric phase
[۱۷] حیرت کی بات ہے کہ 60 سال تک یہ حقیقت کسی کو نظر نہیں آئی۔
[۱۸] Berry's phase

(جب تک حرکت اتنی آہستہ ہو کہ حرناگزر کے شرائط مطمئن ہوتے ہوں) $\gamma_n(T)$ کی قیمت صرف اس راہ پر منحصر ہو گی جس پر چلا جائے نہ کہ راہ پر چلنے کی رفتار پر۔ اس کے برعکس، مجموعی حرکی ہیّت

$$\theta_n(T) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^T E_n(t')\,\mathrm{d}t'$$

گزرے ہوئے وقت کے تابع ہو گی۔

ہم اس سوچ کے عادی ہیں کہ تفاعل موج کی ہیّت اختیاری ہے؛ طبعی مقداروں میں $|\Psi|^2$ پایا جاتا ہے، لہٰذا اپنی جزو ضربی کٹ جاتا ہے۔ اسی لیے عموماً لوگوں کا خیال تھا کہ ہندسی ہیّت کی کوئی طبعی اہمیت نہیں؛ آخر $\psi_n(t)$ کی ہیّت بھی تو اختیاری ہے۔ یہ بیری کی دور اندیشی تھی کہ انہوں نے اس حقیقت کو پہچانا کہ ہیملٹنی کو بند دائرے پر پھیر ادے کر واپس اپنے اصل روپ میں لانے سے ابتدا اور اختتام کے بیچ زائد ہیّت غیر اختیاری ہو گی، جس کی پیمائش بھی کی جا سکتی ہے۔

مثال کے طور پر، ذرات (تمام حال Ψ میں) کی ایک شعاع کو دو حصوں میں تقسیم کر کے، صرف ایک حصے کو حرناگزر تبدیل ہوتے مخفیہ سے گزارا جاتا ہے۔ دونوں حصوں کو دوبارہ اکٹھا کرنے سے درج ذیل روپ کا مجموعی تفاعل موج حاصل ہو گا

$$\Psi = \frac{1}{2}\Psi_0 + \frac{1}{2}\Psi_0 e^{i\Gamma} \tag{۱۰.۴۶}$$

جہاں Ψ_0 "سیدھی پہنچتی" شعاع کا تفاعل موج اور Γ تغیر پذیر H کی بنا پر شعاع کی زائد ہیّت ہے (جس کا کچھ حصہ حرکی اور کچھ ہندسی ہو گا)۔ اس صورت میں درج ذیل ہو گا۔

$$\begin{aligned}|\Psi|^2 &= \frac{1}{4}|\Psi_0|^2\left(1+e^{i\Gamma}\right)\left(1+e^{-i\Gamma}\right)\\ &= \frac{1}{2}|\Psi_0|^2\left(1+\cos\Gamma\right) = |\Psi_0|^2\cos^2(\Gamma/2)\end{aligned} \tag{۱۰.۴۷}$$

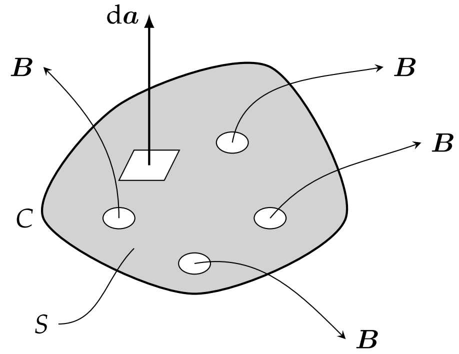
یوں تعمیری اور تباہ کن **مداخلت**[۱۹] کے نقاط (جہاں Γ کی قیمت π کی بالترتیب جفت اور طاق مضرب ہو گی) سے Γ کی پیمائش کی جا سکتی ہے (بیری اور دیگر مصنفین کو شبہ تھا کہ زیادہ بڑی حرکی ہیّت کی موجودگی میں ہندسی ہیّت نظر نہیں آئے گی، لیکن انہیں علیحدہ علیحدہ کرنا ممکن ثابت ہوا ہے)۔

تین ابعادی مقدار معلوم فضا، $\boldsymbol{R} = (R_1, R_2, R_3)$، میں کلیہ بیری (مساوات ۱۰.۴۵) سمتی مخفیہ $\boldsymbol{A}$ کی صورت میں **مقناطیسی بہاو**[۲۰] کے کلیہ کا یاد دلاتا ہے۔ سطح S جس کی سرحد منحنی C ہو سے درج ذیل بہاو گزرتا ہے (شکل ۱۰.۸)۔

$$\Phi \equiv \int_S \boldsymbol{B}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{a} \tag{۱۰.۴۸}$$

---

[۱۹] interference
[۲۰] magneticflux



شکل ۱۰.۸: بند منحنی C کے بیچ سطح S سے گزرتا مقناطیسی بہاو۔

مقناطیسی میدان کو سمتی مخفیہ کے روپ $(\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A})$ میں لکھ کر مسئلہ سٹوکس کے اطلاق سے درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\Phi = \int_S (\nabla \times \boldsymbol{A}) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{a} = \oint_C \boldsymbol{A} \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r} \tag{۱۰.۴۹}$$

یوں ہیئت بیری کو مقدار معلوم فضا میں بند راہ کے اندر سے "مقناطیسی میدان" کا "بہاو"

$$\text{“}\boldsymbol{B}\text{”} = i\nabla_R \times \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \tag{۱۰.۵۰}$$

تصور کیا جا سکتا ہے۔ اس کو دوسری طرف سے بھی بیان کیا جا سکتا ہے: تین ابعادی صورت میں ہیئت بیری کو سطحی تکمل:

$$\gamma_n(T) = i \int [\nabla_R \times \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle] \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{a} \tag{۱۰.۵۱}$$

لکھا جا سکتا ہے۔ اس مقناطیسی مماثلت کو کافی دور تک لے جایا جا سکتا ہے، تاہم ہماری مقاصد کے نقطہ نظر سے مساوات ۱۰.۵۱ محض $\gamma_n(T)$ لکھنے کا دوسرا انداز ہے۔

سوال ۱۰.۳:

ا. لامتناہی چوکور کنویں کی چوڑائی w_1 سے بڑھ کر w_2 ہوتی ہے؛ مساوات ۱۰.۴۲ سے کنویں کی ہندسی تبدیلی ہیئت تلاش کریں۔ نتیجے پر تبصرہ کریں۔

ب. اگر وسعت مستقل شرح $(\mathrm{d}w/\mathrm{d}t = v)$ سے ہو، تب حرکی تبدیلی ہیئت کیا ہو گی؟

ج. چوڑائی کم ہو کر واپس w_1 ہو جاتی ہے؛ اس پورے پھیرے کی ہیئت بیری کیا ہو گی؟

سوال ۱۰.۴: ڈیلٹا تفاعل کنواں (مساوات ۲.۱۱۴) واحد ایک مقید حال (مساوات ۲.۱۲۹) کا حامل ہے۔ α آہستہ آہستہ α_1 سے بڑھ کر α_2 ہوتا ہے؛ ہندسی تبدیلی ہیئت کا حساب لگائیں۔ اگر تبدیلی مستقل شرح $(\mathrm{d}\alpha/\,\mathrm{d}t = c)$ سے رونما ہو تب حر کی تبدیلی ہیئت کیا ہو گی؟

سوال ۱۰.۵: دکھائیں کہ حقیقی $\psi_n(t)$ کی صورت میں ہندسی ہیئت صفر ہو گی۔ (سوال ۱۰.۳ اور سوال ۱۰.۴ اس کی مثالیں ہیں۔) امتیازی تفاعلات موج کے ساتھ غیر ضروری (لیکن قانونی طور پر بالکل جائز) جزو ضربی ہیئت منسلک کریں: $\psi'_n(t) \equiv e^{i\Phi_n}\psi_n(t)$، جہاں $\Phi_n(\boldsymbol{R})$ اختیاری (حقیقی) تفاعل ہے۔ یقیناً، آپ غیر صفر ہندسی ہیئت حاصل کریں گے، تاہم دیکھنا یہ ہے کہ اسے مساوات ۱۰.۲۳ میں پُر کرنے سے کیا ہو گا۔ اور بند راہ پر اس سے صفر حاصل ہوتا ہے۔ سبق: غیر صفر ہیئت بیری کی خاطر (الف) آپ کو ہیملٹنی میں ایک سے زائد تابع وقت مقدار معلوم کی ضرورت ہو گی، اور (ب) ایسی ہیملٹنی درکار ہو گی جو غیر مہمل مخلوط امتیازی تفاعلات دیتی ہو۔

مثال ۱۰.۲: ہیئت بیری کی کلاسیکی مثال مستقل مقدار کے مقناطیسی میدان، جس کی سمت تبدیل ہوتی ہو، میں مبدا پر الیکٹران ہے۔ پہلے اس مخصوص صورت (جس کا تجزیہ مثال ۱۰.۱ میں کیا گیا) پر غور کرتے ہیں جس میں محور z کے ساتھ مقررہ زاویہ α پر رہتے ہوئے، مستقل زاویائی سمتی رفتار ω سے، $\boldsymbol{B}(t)$ استقبالی حرکت کرتا ہے۔ (میدان B کی ہم راہ "ہم میدان" الیکٹران کے لئے) مساوات ۱۰.۳۳ ٹھیک حل دیتی ہے۔ حرناگزر طریق، $\omega \ll \omega_1$، میں

$$\lambda = \omega_1\sqrt{1-2\frac{\omega}{\omega_1}\cos\alpha+\left(\frac{w}{w_1}\right)^2} \cong \omega_1\Big(1-\frac{\omega}{\omega_1}\cos\alpha\Big) = \omega_1-\omega\cos\alpha \tag{۱۰.۵۲}$$

ہو گا، لہٰذا مساوات ۱۰.۳۳ درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$\begin{aligned}\chi(t) &\cong e^{-i\omega_1 t/2}e^{i(\omega\cos\alpha)t/2}e^{-i\omega t/2}\chi_+(t)\\ &\quad+i\Big[\frac{\omega}{\omega_1}\sin\alpha\sin\Big(\frac{\omega_1 t}{2}\Big)\Big]e^{+i\omega t/2}\chi_-(t)\end{aligned} \tag{۱۰.۵۳}$$

دوسرے جزو کو $\omega/\omega_1 \to 0$ کی صورت میں رد کرتے ہوئے حرناگزر روپ کے مطابق نتیجہ حاصل ہو گا (مساوات ۱۰.۲۳)۔ حر کی ہیئت درج ذیل ہے

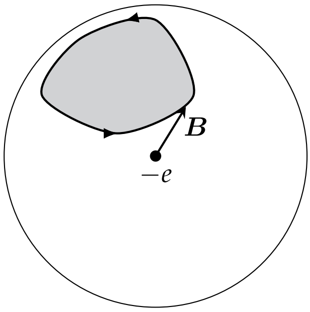
$$\theta_+(t) = -\frac{1}{\hbar}\int_0^t E_+(t')\,\mathrm{d}t' = -\frac{\omega_1 t}{2} \tag{۱۰.۵۴}$$

(جہاں مساوات ۱۰.۲۹ سے $E_+ = \hbar\omega_1/2$ ہو گا)، لہٰذا ہندسی ہیئت درج ذیل ہو گی۔

$$\gamma_+(t) = (\cos\alpha-1)\frac{\omega t}{2} \tag{۱۰.۵۵}$$

ایک مکمل پھیرے کے لیے $T = 2\pi/\omega$ ہو گا، لہٰذا ہیئت بیری درج ذیل ہو گی۔

$$\gamma_+(T) = \pi(\cos\alpha-1) \tag{۱۰.۵۶}$$



شکل ۱۰.۹: مستقل مقدار لیکن بدلتے رخ کا مقناطیسی میدان بند راہ جھاڑتا ہے۔

اب زیادہ عمومی صورت پر غور کرتے ہیں، جس میں مقناطیسی میدان سمتیہ کی نوک رداس $r = B_0$ کرہ کی سطح پر اختیاری بند راہ جھاڑتی ہے (شکل ۱۰.۹)۔ میدان $\boldsymbol{B}(t)$ کی ہم راہ ہم میدان کو ظاہر کرنے والا امتیازی حال درج ذیل روپ کا ہوگا (سوال ۴.۳۰ دیکھیں)

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi}\sin(\theta/2) \end{pmatrix} \tag{۱۰.۵۷}$$

جہاں $\boldsymbol{B}$ کے کروی محدد θ اور π اب وقت کے تفاعلات ہیں۔ کروی محدد میں ڈھلوان درج ذیل ہوگا، جیسے آپ جدول سے دیکھ سکتے ہیں۔

$$\begin{aligned}
\nabla\chi_+ &= \frac{\partial\chi_+}{\partial r}\boldsymbol{a}_{\text{r}} + \frac{1}{r}\frac{\partial\chi_+}{\partial\theta}\boldsymbol{a}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\chi_+}{\partial\phi}\boldsymbol{a}_\phi \\
&= \frac{1}{r}\begin{pmatrix} -(1/2)\sin(\theta/2) \\ (1/2)e^{i\phi}\cos(\theta/2) \end{pmatrix}\boldsymbol{a}_\theta + \frac{1}{r\sin\theta}\begin{pmatrix} 0 \\ ie^{i\phi}\sin(\theta/2) \end{pmatrix}\boldsymbol{a}_\phi
\end{aligned} \tag{۱۰.۵۸}$$

یوں درج ذیل ہوگا۔

$$\begin{aligned}
\langle\chi_+|\nabla\chi_+\rangle &= \frac{1}{2r}\Big[-\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\boldsymbol{a}_\theta + \sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\boldsymbol{a}_\theta + 2i\,\frac{\sin^2(\theta/2)}{\sin\theta}\boldsymbol{a}_\phi\Big] \\
&= i\,\frac{\sin^2(\theta/2)}{r\sin\theta}\boldsymbol{a}_\phi
\end{aligned} \tag{۱۰.۵۹}$$

مساوات ۱۰.۵۱ کے لیے ہمیں اس مقدار کی گردش درکار ہو گی۔

$$\nabla\times\langle\chi_+|\nabla\chi_+\rangle = \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\Big[\sin\theta\Big(\frac{i\sin^2(\theta/2)}{r\sin\theta}\Big)\Big]\boldsymbol{a}_{\text{r}} = \frac{i}{2r^2}\boldsymbol{a}_{\text{r}} \tag{۱۰.۶۰}$$

یوں مساوات ۱۰.۵۱ کے تحت درج ذیل ہو گا۔

$$\gamma_+(T) = -\frac{1}{2}\int \frac{1}{r^2}\boldsymbol{a}_{\mathrm{r}}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{a} \tag{۱۰.۶۱}$$

تکمل کرہ کی سطح پر اس رقبے پر لیا جائے گا جس کو $\boldsymbol{B}$ کی نوک ایک پھیرے میں جھاڑتی ہے، لہٰذا $\mathrm{d}\boldsymbol{a} = r^2\,\mathrm{d}\Omega\boldsymbol{a}_{\mathrm{r}}$ اور

$$\gamma_+(T) = -\frac{1}{2}\int \mathrm{d}\Omega = -\frac{1}{2}\Omega \tag{۱۰.۶۲}$$

ہو گا، جہاں مبدا پر ٹھوس زاویہ Ω ہے۔ یہ ایک انتہائی سادہ نتیجہ ہے، جو ہمیں اس کلاسیکی مسئلے کا یاد دلاتا ہے جس سے ہم نے یہ تبصرہ شروع کیا (یعنی زمین کی سطح پر بند راہ پر بلا رگڑ رقاص کی منتقلی)۔ اس نتیجے کے تحت، کسی اختیاری بند راہ پر، مقناطیس کی مدد سے الیکٹران کے چکر کو حر ناگزر پھیرا دینے سے، خالص (ہندسی) تبدیلی ہیئت مقناطیسی میدان سمتیہ کے جھاڑنے کے ٹھوس زاویہ کی منفی آدھی ہو گی۔ مساوات ۱۰.۳۷ کو مد نظر رکھتے ہوئے یہ عمومی نتیجہ مخصوص نتیجہ (مساوات ۱۰.۵۶) کے مطابق ہے، جیسا یقیناً ہونا بھی چاہیے تھا۔ □

سوال ۱۰.۶: ایک ذرہ جس کا چکر 1 ہو کے لئے مساوات ۱۰.۶۲ کا مماثل حاصل کریں۔ جواب: $-\Omega$ (ایک ذرہ جس کا چکر s ہو کے لیے نتیجہ $-s\Omega$ ہو گا)۔

۱۰.۲.۳ اہارونوو بوہم اثر

کلاسیکی برقی حرکیات میں؛ مخفیے (φ اور $\boldsymbol{A}$)[۲۱] بلاواسطہ ناقابل پیمائش ہیں؛ برقی اور مقناطیسی میدان:

$$\boldsymbol{E} = -\nabla\varphi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t},\quad \boldsymbol{B} = \nabla\times\boldsymbol{A} \tag{۱۰.۶۳}$$

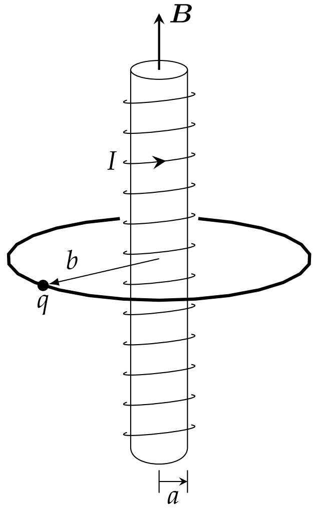
طبعی مقادیر ہیں۔ بنیادی قوانین (میکسویل مساوات اور لورنز قوت قاعدہ) مخفیوں کا کوئی ذکر نہیں کرتے، جو (منطقی نقطہ نظر سے) نظریہ مرتب کرنے کے لیے کار آمد لیکن ویسے غیر ضروری ہیں۔ یقیناً، آپ بغیر خوف و خطر ان مخفیوں کو تبدیل کر سکتے ہیں:

$$\varphi \to \varphi' = \varphi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t},\quad \boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A} + \nabla\Lambda \tag{۱۰.۶۴}$$

جہاں Λ مقام اور وقت کا کوئی بھی تفاعل ہو سکتا ہے؛ یہ **ماپ تبادلہ**[۲۲] کہلاتا ہے، جس کا میدانوں پر کوئی اثر نہیں (جیسا آپ مساوات ۱۰.۶۳ استعمال کرتے ہوئے دیکھ سکتے ہیں)۔

[۲۱] کوانٹائی میکانیات میں روایتی طور پر حرف V کو مخفی توانائی کے لئے استعمال کیا جاتا ہے، لیکن برقی حرکیات میں یہی حرف غیر سمتی مخفیہ کے لئے استعمال کیا جاتا ہے۔ غلط فہمی سے بچنے کے لئے غیر سمتی مخفیہ کے لئے حرف φ استعمال کروں گا۔ اس حصے کے پس منظر کے لئے سوال ۴.۵۹، سوال ۴.۶۰ اور سوال ۴.۶۱ دیکھیں۔

[۲۲] gaugetransformation



شکل ۱۰.۱۰: ایک دائرہ، جس کے اندر سے لمبا پیچواں لچھا گزرتا ہو، پر باردار ذرہ حرکت کرتا ہے۔

کوانٹائی میکانیات میں مخفیے زیادہ اہم کردار ادا کرتے ہیں، چونکہ ہیملٹنی کو φ اور $\boldsymbol{A}$ کی صورت میں بیان کیا جاتا ہے:

$$H = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\boldsymbol{A}\right)^2 + q\varphi \tag{۱۰.۶۵}$$

نہ کہ $\boldsymbol{E}$ اور $\boldsymbol{B}$ کی صورت میں۔ بہر حال، زیر ماپ تبادلہ کوانٹائی نظریہ غیر متغیر رہتا ہے (سوال ۴.۶۱ دیکھیں)، اور بہت لمبے عرصے کے لیے مانا جاتا تھا کہ جن خطوں میں $\boldsymbol{E}$ اور $\boldsymbol{B}$ صفر ہوں وہاں، بالکل کلاسیکی نظریہ کی طرح، کسی قسم کا برقناطیسی اثر نہیں پایا جاتا۔ لیکن 1959 میں اہارونو اور بوہم نے دکھایا کہ اس خطہ میں بھی، جہاں میدان صفر ہو، حرکت پذیر باردار ذرہ کے کوانٹائی رویہ پر سمتی مخفیہ اثر انداز ہو گا۔ میں ایک سادہ مثال پیش کر کے اہارونو و بوہم اثر پر تبصرہ کروں گا اور اس کے بعد اس کا ہیئت بیری کے ساتھ تعلق دکھاؤں گا۔

فرض کریں ایک ذرے کو رداس b کے دائرے پر رہنے کا پابند بنایا جاتا ہے۔ اس دائرے کے محور پر رداس $a < b$ کا لمبا **پیچواں لچھا**[۲۳] ہے جس میں یکسمتی برقی رو I ہے (شکل ۱۰.۱۰)۔ بہت لمبے پیچواں لچھے کی صورت میں، پیچواں لچھے کے اندر مقناطیسی میدان یکساں ہو گا، جبکہ اس کے باہر میدان صفر ہو گا۔ تاہم پیچواں لچھے کے باہر سمتی مخفیہ غیر صفر ہو گا؛ یقیناً ($\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0$ کی موزوں ماپ شرط لیتے ہوئے) درج ذیل ہو گا

$$\boldsymbol{A} = \frac{\Phi}{2\pi r}\boldsymbol{a}_\phi \qquad (r > a) \tag{۱۰.۶۶}$$

جہاں $\Phi = \pi a^2 B$ پیچواں لچھے سے گزرتا ہوا **مقناطیسی بہاو**[۲۴] ہو گا۔ پیچواں لچھا خود غیر باردار ہے، لہٰذا غیر سمتی مخفیہ φ

[۲۳] solenoid
[۲۴] magneticflux

صفر ہو گا۔ ایسی صورت میں ہیملٹنی (مساوات ۱۰.٦۵) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$H = \frac{1}{2m}[-\hbar^2\nabla^2 + q^2A^2 + 2i\hbar q\boldsymbol{A}\cdot\nabla] \tag{۱۰.٦۷}$$

تفاعل موج صرف اسمتی زاویہ ϕ $(\theta = \pi/2, r = b)$ کا تابع ہے، لہٰذا $(\boldsymbol{a}_\phi/b)(\mathrm{d}/\mathrm{d}\phi)$ $\nabla \to$ ہو گا، اور مساوات شروڈنگر درج ذیل لکھی جائے گی۔

$$\frac{1}{2m}\Big[-\frac{\hbar^2}{b^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\phi^2} + \Big(\frac{q\Phi}{2\pi b}\Big)^2 + i\frac{hq\Phi}{\pi b^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\phi}\Big]\psi(\phi) = E\psi(\phi) \tag{۱۰.٦۸}$$

یہ مستقل عددی سروں والی خطی تفرقی مساوات ہے:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\phi^2} - 2i\beta\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}\phi} + \epsilon\psi = 0 \tag{۱۰.٦۹}$$

جہاں درج ذیل ہیں۔

$$\beta \equiv \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} \quad \text{اور} \quad \epsilon \equiv \frac{2mb^2E}{\hbar^2} - \beta^2 \tag{۱۰.۷۰}$$

اس کے حل درج ذیل روپ کے ہوں گے

$$\psi = Ae^{i\lambda\phi} \tag{۱۰.۷۱}$$

جہاں درج ذیل ہو گا۔

$$\lambda = \beta \pm \sqrt{\beta^2 + \epsilon} = \beta \pm \frac{b}{\hbar}\sqrt{2mE} \tag{۱۰.۷۲}$$

نقطہ $\phi = 2\pi$ پر $\psi(\phi)$ کے استمرار کی بنا پر λ عدد صحیح ہو گا:

$$\beta \pm \frac{b}{\hbar}\sqrt{2mE} = n \tag{۱۰.۷۳}$$

جس سے درج ذیل حاصل ہوتا ہے۔

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mb^2}\Big(n - \frac{q\Phi}{2\pi\hbar}\Big)^2, \quad (n = 0, \pm1, \pm2, \dots) \tag{۱۰.۷۴}$$

پیچواں لچھا دائرے پر ذرے کا دوپٹہ تا انحطاط ختم کرتا ہے (سوال ۲.۴٦): مثبت n، جو پیچواں لچھے میں رو کے رخ حرکت کرتے ہوئے ذرے کو ظاہر کرتا ہے (q مثبت فرض کرتے ہوئے)، کی توانائی منفی n کے لحاظ سے، جو مخالف رخ ذرے کو

ظاہر کرتا ہے، کم ہو گی۔ زیادہ اہم بات یہ ہے کہ، اجازتی توانائیوں کا دارومدار پیچواں لچھے کے اندر میدان پر ہو گا، اگرچہ اس مقام پر جہاں ذرہ پایا جاتا ہے میدان صفر ہے![۲۵]

زیادہ عمومی صورت پر غور کرنے کی خاطر، فرض کریں ایک ذرہ ایسے خطے میں حرکت کرتا ہے جہاں $\boldsymbol{B}$ صفر ہے (لہٰذا $\nabla \times \boldsymbol{A} = 0$ ہو گا)، لیکن $\boldsymbol{A}$ خود غیر صفر ہو گا۔ (اگرچہ میں فرض کرتا ہوں کہ $\boldsymbol{A}$ ساکن ہے، اس ترکیب کو تابع وقت مخفیے کے لئے عمومیت دی جا سکتی ہے۔) مخفی توانائی V، جس میں برقی حصہ $q\varphi$ شامل یا غیر شامل ہو سکتا ہے، کی (تابع وقت) مساوات شروڈنگر

$$\left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\boldsymbol{A}\right)^2 + V\right]\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{۱۰.۷۵}$$

کی سادہ روپ درج ذیل لکھ کر حاصل کی جا سکتی ہے

$$\Psi = e^{ig}\Psi' \tag{۱۰.۷۶}$$

جہاں

$$g(\boldsymbol{r}) \equiv \frac{q}{\hbar}\int_{\mathcal{O}}^{\boldsymbol{r}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \tag{۱۰.۷۷}$$

ہے اور $\mathcal{O}$ کوئی (اختیاری منتخب) نقطہ حوالہ ہے۔ دھیان رہے کہ یہ تعریف صرف اس صورت بامعنی ہو گی جب پورے خطے میں $\nabla \times \boldsymbol{A} = 0$ ہو؛ ورنہ لکیری تکمل $\mathcal{O}$ سے $\boldsymbol{r}$ تک راہ پر منحصر ہو گا، اور یوں $\boldsymbol{r}$ کا تفاعل نہیں ہو گا۔ Ψ' کی صورت میں Ψ کی ڈھلوان

$$\nabla\Psi = e^{ig}(i\nabla g)\Psi' + e^{ig}(\nabla\Psi')$$

ہو گی، لیکن $\nabla g = (q/\hbar)\boldsymbol{A}$ ہے، لہٰذا

$$\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\boldsymbol{A}\right)\Psi = \frac{\hbar}{i}e^{ig}\nabla\Psi' \tag{۱۰.۷۸}$$

اور یوں درج ذیل ہو گا۔

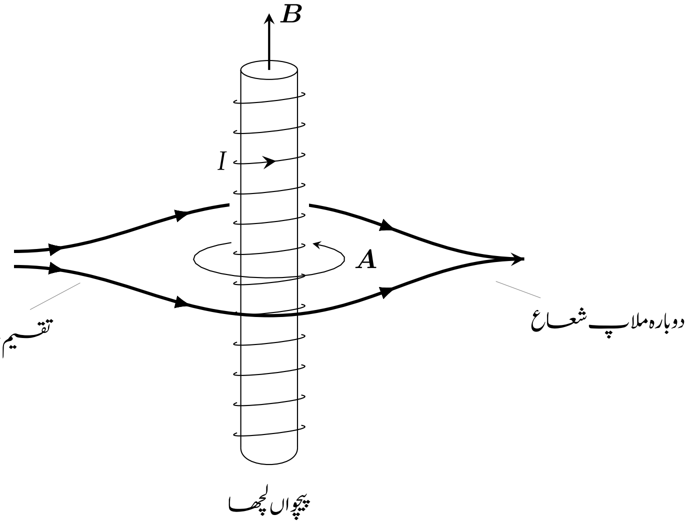
$$\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\boldsymbol{A}\right)^2\Psi = -\hbar^2 e^{ig}\nabla^2\Psi' \tag{۱۰.۷۹}$$

اس کو مساوات ۱۰.۷۵ میں پُر کر کے مشترک جزو ضربی e^{ig} کو کاٹ کر درج ذیل ملتا ہے۔

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi' + V\Psi' = i\hbar\frac{\partial\Psi'}{\partial t} \tag{۱۰.۸۰}$$

---

[۲۵] **اعلٰی موصلی** (superconducting) چھلوں کی ایک مخصوص خاصیت یہ ہے کہ ان کے احاطہ میں بہاو کوانٹائی ہوتا ہے: $\Phi = (2\pi\hbar/q)n'$، جہاں n' عدد صحیح ہو گا۔ ایسی صورت میں یہ اثر قابل کشف نہیں ہو گا، چونکہ $E_n = (\hbar^2/2mb^2)(n+n')^2$ ہو گا اور $(n+n')$ بھی عدد صحیح ہے۔ اتفاق کی بات ہے کہ یہاں بار q الیکٹران کے بار کا دگنا ہو گا؛ (اعلٰی موصلی الیکٹران جوڑوں کی صورت میں رہتے ہیں۔) لیکن **کوانٹازنی بہاو** (flux quantization) کو اعلٰی موصل نافذ کرتا ہے (جو دائری برقی رو کے امالہ کے ذریعہ فرق کو ختم کرتا ہے)، نہ کہ پیچواں لچھا یا برقناطیسی میدان، اور یہ (غیر اعلٰی موصل) مثال میں نہیں پایا جاتا، جس پر یہاں غور کیا گیا ہے۔



شکل ۱۰.۱۱: اہارونوو بوہم اثر: الیکٹرانی شعاع تقسیم ہو کر آدھا حصہ لمبے پیچواں لچھے کے ایک طرف اور دوسرا حصہ دوسرے طرف سے گزرتا ہے۔

بظاہر بغیر $\boldsymbol{A}$ مساوات شروڈنگر کو Ψ' مطمئن کرتا ہے۔ مساوات ۱۰.۸۰ کا حل تلاش کرنے کے بعد (بغیر گردش) سمتی مخفیہ کے شمول کی تصحیح حقیر سا کام ہے: صرف ہیّتی جزو ضربی e^{ig} ساتھ منسلک کرنا ہو گا۔

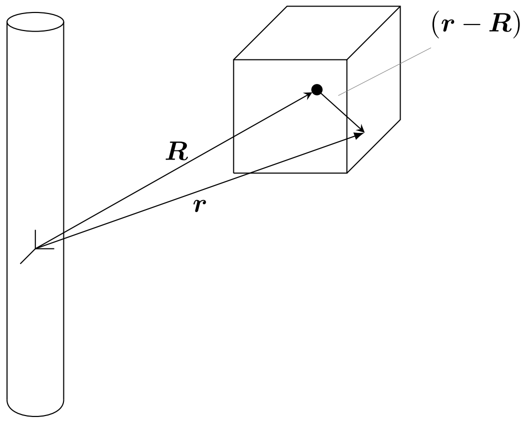
اہارونو اور بوہم نے ایک تجربہ تجویز کیا، جس میں الیکٹران کی شعاع کو دو حصوں میں تقسیم کر کے لمبے پیچواں لچھے کے دونوں اطراف سے گزار کر دوبارہ اکٹھا کیا جاتا ہے (شکل ۱۰.۱۱)۔ ان شعاعوں کو پیچواں لچھے سے اتنا دور رکھا جاتا ہے کہ شعاع صرف ان مقامات سے گزرتی ہے جہاں $\boldsymbol{B} = 0$ ہوتا ہے۔ تاہم $\boldsymbol{A}$، جسے مساوات ۱۰.۶۲ پیش کرتی ہے، غیر صفر ہو گا، اور (دونوں اطراف V کی قیمت ایک جیسی تصور کرتے ہوئے) اختتامی نقطے پر دونوں شعاعوں کی ہیّت:

$$g = \frac{q}{\hbar}\int \boldsymbol{A}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \frac{q\Phi}{2\pi\hbar}\int\left(\frac{1}{r}\boldsymbol{a}_{\phi}\right)\cdot(r\boldsymbol{a}_{\phi}\,\mathrm{d}\phi) = \pm\frac{q\Phi}{2\hbar} \tag{۱۰.۸۱}$$

مختلف ہو گی۔ یہاں مثبت علامت ان الیکٹران کے لیے ہے جو $\boldsymbol{A}$ کے رخ حرکت کرتے ہیں؛ یعنی پیچواں لچھے میں برقی رو کے رخ۔ دونوں شعاعوں کے بیچ ہیّتی فرق اس مقناطیسی بہاو کے راست متناسب ہو گا جسے ان کی راہ گھیرتی ہیں۔

$$\text{ہیّتی فرق} = \frac{q\Phi}{\hbar} \tag{۱۰.۸۲}$$

اس ہیّتی انتقال سے قابل پیمائش مداخلت (مساوات ۱۰.۴۷) پیدا ہوتی ہے جس کی تجرباتی تصدیق چیمبرز اور ساتھی کر چکے ہیں۔



شکل ۱۰.۱۲: مخفیہ $V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})$ ایک ذرے کو ڈبے میں مقید کیے ہوئے ہے۔

اہارونوو بوہم اثر کو ہندسی ہیّت کی ایک مثال تصور کی جا سکتی ہے۔ فرض کریں مخفیہ $V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})$ بار دار ذرے کو ایک ڈبے میں رہنے کا پابند بناتا ہے (ڈبے کا مرکز پیچواں لچھے سے باہر نقطہ $\boldsymbol{R}$ پر ہے)؛ شکل ۱۰.۱۲ دیکھیں۔ (ہم کچھ ہی دیر میں اس ڈبے کو پیچواں لچھے کے گرد ایک پھیرا دیں گے، لہٰذا $\boldsymbol{R}$ وقت کا تفاعل ہو گا، تاہم ابھی اسے ایک غیر متغیر سمتیہ تصور کریں۔) اس ہیملٹنی کے امتیازی تفاعلات کا تعین درج ذیل کرتی ہے۔

$$\left\{\frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{i}\nabla-q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\right]^2+V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})\right\}\psi_n=E_n\psi_n \tag{۱۰.۸۳}$$

ہم اس طرز کی مساوات کو حل کرنا جانتے ہیں: ہم

$$\psi_n=e^{ig}\psi_n' \tag{۱۰.۸۴}$$

لیتے ہے جہاں[۲۶]

$$g\equiv\frac{q}{\hbar}\int_{\boldsymbol{R}}^{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\cdot\mathrm{d}(\boldsymbol{r}') \tag{۱۰.۸۵}$$

ہے، اور $\boldsymbol{A}\to 0$ کی صورت میں ψ' اسی امتیازی قیمت مساوات کو مطمئن کرے گا۔

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})\right]\psi_n'=E_n\psi_n' \tag{۱۰.۸۶}$$

[۲۶] حوالہ نقطہ $\mathcal{O}$ کو ڈبے کے وسط پر منتخب کرنا سود مند ثابت ہوتا ہے، چونکہ ایسا کرنا ضمانت دیتا ہے کہ پیچواں لچھے کے گرد ایک پھیرا مکمل کرنے سے ابتدائی ہیّتی روایت حاصل ہو گی۔ اگر آپ، مثلاً، مقررہ فضا میں حوالہ نقطہ منتخب کریں، تب راہ پیچواں لچھے کے گرد لپٹی ہو گی، اور ایسے خطے کو گھیرے گی جہاں $\boldsymbol{A}$ کی گردش غیر صفر ہے، لہٰذا آپ کو آخری نقطے پر "ہاتھ سے" ہیّت درست کرنی ہو گی۔ اگرچہ، اب بھی وہی جواب حاصل ہو گا، تاہم جواب حاصل کرنے کا یہ بہتر طریقہ نہیں ہے۔ عموماً، مساوات ۱۰.۹ میں تفاعلات موج کی ہیّتی روایت طے کرتے ہوئے، ہم چاہیں گے کہ $\psi_n(x,T)=\psi_n(x,0)$ ہو تاکہ جعلی ہیّتی فرق شامل نہ ہوں۔

آپ نے دیکھا کہ ψ_n' صرف ہٹاو $(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})$ کا تفاعل ہے، نہ کہ (ψ_n کی طرح) $\boldsymbol{r}$ اور $\boldsymbol{R}$ کا علیحدہ علیحدہ تفاعل۔

آیئے اب اس ڈبے کو پیچواں لچھے کے گرد ایک پھیرا دیتے ہیں (اس عمل کو حرنا گزر ہونے کی بھی ضرورت نہیں)۔ ہیئت بیری کا تعین کرنے کی خاطر ہمیں مقدار $\langle\psi_n|\nabla\psi_n\rangle$ کی قیمت درکار ہو گی۔ چونکہ

$$\nabla_R\psi_n = \nabla_R[e^{ig}\psi_n'(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})] = -i\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})e^{ig}\psi_n'(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}) + e^{ig}\nabla_R\psi_n'(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})$$

ہے لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\begin{aligned}\langle\psi_n|\nabla_R\psi_n\rangle\\ &= \int e^{-ig}[\psi_n'(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})]^* e^{ig}\Big[-i\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})\psi_n'(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R}) + \nabla_R\psi_n'(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})\Big]\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\\ &= -i\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}) - \int[\psi_n'(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})]^*\nabla\psi_n'(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})\,\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\end{aligned} \tag{۱۰.۸۷}$$

بغیر زیر نوشت ∇ متغیر $\boldsymbol{r}$ کے لحاظ سے ڈھلوان ظاہر کرتا ہے، اور میں $(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{R})$ کے تفاعل پر عمل کے دوران $\nabla_R = -\nabla$ بروئے کار لایا۔ لیکن آخری تکمل کی قیمت ہیملٹنی $-(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V$ کے امتیازی حال میں معیار حرکت کی توقعاتی قیمت ضرب $i/\hbar$ ہے، جو ہم حصہ ۲.۱ سے جانتے ہیں کہ صفر ہو گا۔ یوں درج ذیل ہو گا۔

$$\langle\psi_n|\nabla_R\psi_n\rangle = -i\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}) \tag{۱۰.۸۸}$$

اس کو کلیہ بیری (مساوات ۱۰.۴۵) میں پُر کرتے ہوئے درج ذیل نتیجہ اخذ ہو گا

$$\gamma_n(T) = \frac{q}{\hbar}\oint\boldsymbol{A}(\boldsymbol{R})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{R} = \frac{q}{\hbar}\int(\nabla\times\boldsymbol{A})\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{a} = \frac{q\Phi}{\hbar} \tag{۱۰.۸۹}$$

جو اہارونو و بوہم نتیجے (مساوات ۱۰.۸۲) کی تصدیق کرتا ہے، اور واضح کرتا ہے کہ اہارونو و بوہم اثر ہندسی ہیئت کی ایک خصوصی صورت ہے۔[۲۷]

اہارونو و بوہم اثر سے ہم کیا مطلب لیا جائے؟ ظاہر ہے کہ ہمارا کلاسیکی شعور درست نہیں: برقناطیسی اثرات ان خطوں میں پائے جا سکتے ہیں جہاں میدان صفر ہو۔ البتہ، یاد رہے کہ اس سے $\boldsymbol{A}$ خود قابل پیمائش نہیں ہو جاتا؛ صرف محیط بہاو اختتامی نتیجہ میں پایا جاتا ہے، اور نظریہ ماپ غیر متغیر رہتا ہے۔

سوال ۱۰.۷:

ا. مساوات ۱۰.۶۵ سے مساوات ۱۰.۶۷ اخذ کریں۔

ب. مساوات ۱۰.۷۸ سے آغاز کرتے ہوئے مساوات ۱۰.۷۹ اخذ کریں۔

---

[۲۷] اتفاقاً، موجودہ صورت میں ہیئت بیری اور مقناطیسی بہاو (مساوات ۱۰.۵۰) کی تمثیل تقریباً مماثل: $\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{B}$ = "$\boldsymbol{B}$" ہے۔

اضافی سوالات برائے باب ۱۰

سوال ۱۰.۸: ایک ذرہ (وقفہ $0 \leq x \leq a$ پر) لامتناہی چوکور کنویں کے زمینی حال سے آغاز کرتا ہے۔ اب کنویں کے وسط سے ذرا ہٹ کر ایک دیوار:

$$V(x) = f(t)\delta(x - \frac{a}{2} - \epsilon)$$

آہستہ آہستہ کھڑی کی جاتی ہے، جہاں $f(t)$ آہستہ آہستہ 0 سے ∞ تک بڑھتا ہے۔ مسئلہ حرارت گزر کے تحت، یہ ذرہ ارتقائی ہیملٹنی کے زمینی حال میں رہے گا۔

ا. وقت $t \to \infty$ پر زمینی حال تلاش کریں (اور اس کا خاکہ بنائیں)۔ اشارہ: یہ اس لامتناہی چوکور کنویں کا زمینی حال ہوگا جس میں $a/2 + \epsilon$ پر ناقابل گزر رکاوٹ ہو۔ آپ دیکھیں گے کہ ذرہ بائیں ہاتھ کے نسبتاً بڑے حصے میں رہنے کا پابند ہوگا۔

ب. وقت t پر ہیملٹنی کے زمینی حال کی ماورائی مساوات تلاش کریں۔ جواب:

$$z \sin z = T[\cos z - \cos(z\delta)]$$

جہاں $z \equiv ka$ ، $T \equiv maf(t)/\hbar^2$ ، $\delta \equiv 2\epsilon/a$ ، اور $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ ہیں۔

ج. اب $\delta = 0$ لیتے ہوئے z کے لیے ترسیمی طور پر حل کر کے دکھائیں کے T کی قیمت 0 تا ∞ ہونے سے z کی قیمت π تا 2π ہوگی۔ اس نتیجہ کی وضاحت پیش کریں۔

د. اب $\delta = 0.01$ لیتے ہوئے $T = 0, 1, 5, 20, 100, 1000$ کے لیے اعدادی طریقے سے z حاصل کریں۔

ھ. کنویں کے دائیں نصف حصہ میں ذرہ پائے جانے کا احتمال، بطور z اور δ کا تفاعل، تلاش کریں۔ جواب:

$I_\pm \equiv [1 \pm \delta - (1/z)\sin(z(1 \pm \delta))]\sin^2[z(1 \mp \delta)/2]$ جہاں $P_r = 1/[1 + (I_+/I_-)]$

ہوگا۔ جزو-د میں دیے گئے T کے لئے اس ریاضی جملے کی قیمتیں تلاش کریں۔ اپنے نتائج پر تبصرہ کریں۔

و. T اور δ کی انہی قیمتوں کے لئے زمینی حال تفاعل موج ترسیم کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ رکاوٹ بلند ہونے سے کس طرح ذرہ کنویں کے بائیں نصف حصہ میں رہنے کا پابند ہو جاتا ہے۔

سوال ۱۰.۹: فرض کریں یک بُعدی ہارمونی مرتعش (کمیت m، تعدد ω) پر $F(t) = m\omega^2 f(t)$، جہاں $f(t)$ کوئی مخصوص تفاعل ہے، کی جبری قوت اثر انداز ہوتی ہے (میں نے $m\omega^2$ کو صریحاً لکھا ہے؛ $f(t)$ کا بُعد فاصلہ ہے)۔ اس کی ہیملٹنی درج ذیل ہوگی۔

$$H(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - m\omega^2 x f(t) \tag{۱۰.۹۰}$$

فرض کریں وقت $t = 0$ پر یہ قوت پہلی مرتبہ چالو کی جاتی ہے: لہٰذا $t \leq 0$ پر $f(t) = 0$ ہوگا۔ اس نظام کو کلاسیکی اور کوانٹائی میکانیات دونوں میں بالکل ٹھیک حل کیا جا سکتا ہے۔

ا. اگر مرتعش مبدا پر ساکن حال ($x_c(0) = \dot{x}_c(0) = 0$) سے آغاز کرے، تب مرتعش کا کلاسیکی مقام کیا ہو گا۔ جواب:

$$x_c(t) = \omega \int_0^t f(t') \sin[\omega(t - t')]\,\mathrm{d}t' \tag{۱۰.۹۱}$$

ب. جبری قوت کی غیر موجودگی میں، اگر مرتعش n ویں حال ($\Psi(x,0) = \psi_n(x)$ جہاں $\psi_n(x)$ مساوات ۲.۶۱ دیتی ہے) سے آغاز کرے، تو دکھائیں کہ (تابع وقت) مساوات شروڈنگر کے حل کو درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\Psi(x,t) = \psi_n(x - x_c)e^{\frac{i}{\hbar}\left[-(n+\frac{1}{2})\hbar\omega t + m\dot{x}_c(x - \frac{x_c}{2}) + \frac{m\omega^2}{2}\int_0^t f(t')x_c(t')\,\mathrm{d}t'\right]} \tag{۱۰.۹۲}$$

ج. دکھائیں کہ $H(t)$ کے امتیازی تفاعلات اور امتیازی قیمتیں درج ذیل ہونگی۔

$$\psi_n(x,t) = \psi_n(x - f); \quad E_n(t) = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2 f^2 \tag{۱۰.۹۳}$$

د. دکھائیں کہ حرناگزر تخمین کی صورت میں کلاسیکی مقام (مساوات ۱۰.۹۱) سادہ روپ: $x_c(t) \cong f(t)$ اختیار کرتی ہے۔ موجودہ سیاق و سباق کے لحاظ سے، حرناگزر پن تفاعل f کے وقتی تفرق پر کیا پابندی عائد کرتا ہے۔ اشارہ: $\sin[\omega(t - t')]$ کو $(1/\omega)(\mathrm{d}/\mathrm{d}t')\cos[\omega(t - t')]$ لکھ کر تکمل بالحصص استعمال کریں۔

ھ. اس مثال کے لیے مسئلہ حرناگزر کی تصدیق جزو-ج اور جزو-د کے نتائج سے درج ذیل دکھا کر کریں۔

$$\Psi(x,t) \cong \psi_n(x,t)e^{i\theta_n(t)}e^{i\gamma_n(t)} \tag{۱۰.۹۴}$$

تصدیق کریں کہ حر کی ہیئت کا روپ درست ہے (مساوات ۱۰.۳۹)۔ کیا ہندسی ہیئت آپ کی توقعات کے مطابق ہے؟

سوال ۱۰.۱۰: حرناگزر تخمین کو مساوات ۱۰.۱۲ میں عددی سر $c_m(t)$ کے **حرناگزر تسلسل**[۲۸] کا پہلا جزو تصور کیا جا سکتا ہے۔ فرض کریں نظام n ویں حال سے آغاز کرتا ہے؛ حرناگزر تخمین میں، اضافی تابع وقت ہندسی ہیئتی جزو ضربی (مساوات ۱۰.۲۱) حاصل کرنے کے علاوہ، یہ n وی حال میں ہی رہتا ہے۔

$$c_m(t) = \delta_{mn}e^{i\gamma_n(t)}$$

ا. اس کو مساوات ۱۰.۱۶ کے دائیں ہاتھ میں پُر کر کے حرناگزر کی "پہلی تصحیح" حاصل کریں۔

$$c_m(t) = c_m(0) - \int_0^t \left\langle \psi_m(t') \middle| \frac{\partial}{\partial t'}\psi_n(t') \right\rangle e^{i\gamma_n(t')}e^{i(\theta_n(t') - \theta_m(t'))}\,\mathrm{d}t' \tag{۱۰.۹۵}$$

یہ ہمیں قریب حرناگزر طریق میں تحویلی احتمالات کا حساب کرنے کے قابل بناتا ہے۔ "دوسری تصحیح" کی خاطر ہم مساوات ۱۰.۹۵ کو مساوات ۱۰.۱۶ کے دائیں ہاتھ میں پُر کریں گے، وغیرہ، وغیرہ۔

[۲۸] adiabatic series

ب. ایک مثال کے طور پر، مساوات ۱۰.۹۵ کا اطلاق جبری مرتعش (سوال ۱۰.۹) پر کریں۔ دکھائیں کہ (قریب حرناگزر تخمین میں) صرف قریبی دو سطحوں، جن کے لیے درج ذیل ہوگا، میں تحویل ممکن ہے۔

$$c_{n+1}(t) = i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\sqrt{n+1}\int_0^t \dot{f}(t')e^{i\omega t'}\,\mathrm{d}t'$$
$$c_{n-1}(t) = i\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\sqrt{n}\int_0^t \dot{f}(t')e^{-i\omega t'}\,\mathrm{d}t'$$

(یقیناً، تحویلی احتمالات ان کے مطلق مربع کے برابر ہوں گے۔)

باب ۱۱

بکھراو

۱۱.۱ تعارف

۱۱.۱.۱ کلاسیکی نظریہ بکھراو

فرض کریں کسی مرکز بکھراو پر ایک ذرے کی آمد ہوتی ہے (مثلاً، پروٹان ایک بھاری مرکزہ پر داغا جاتا ہے)۔ یہ توانائی E اور **ٹکراو مقدار معلوم**[1] b کے ساتھ آکر، **زاویہ بکھراو**[2] θ پر اُبھرتا ہے؛ شکل ۱.۱۱ دیکھیں۔ (میں اپنی آسانی کے لئے فرض کرتا ہوں کہ ہدف اسّمتی تشاکلی ہے، یوں خط حرکت[3] مستوی میں پایا جائے گا، اور ساتھ ہی فرض کرتا ہوں کہ نشانہ بھاری ہے، لہٰذا تصادم کی بنا پر اس کی اچھال نظر انداز کی جا سکتی ہے۔) کلاسیکی نظریہ بکھراو کا بنیادی مسئلہ یہ ہو گا: ٹکراو مقدار معلوم جانتے ہوئے، زاویہ بکھراو کا حساب کریں۔ یقیناً، عام طور پر، ٹکراو مقدار معلوم جتنا چھوٹا ہو، زاویہ بکھراو اتنا بڑا ہو گا۔

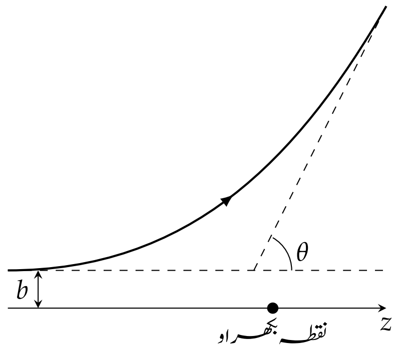
مثال ۱.۱۱: **سخت کرہ بکھراو**۔ فرض کریں رداس R کا ایک سخت بھاری گیند ہدف، جبکہ ہوائی بندوق کا چھرا (جس کو ہم نقطی تصور کرتے ہیں) آمدی ذرہ ہے، جو لچکیلا ٹپا کھا کر مڑتا ہے (شکل ۲.۱۱)۔ زاویہ α کی صورت میں ٹکراو مقدار معلوم $b = R\sin\alpha$ اور زاویہ بکھراو $\theta = \pi - 2\alpha$ ہوں گے۔ یوں درج ذیل ہو گا۔

$$b = R\sin\left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2}\right) = R\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{۱۱.۱}$$

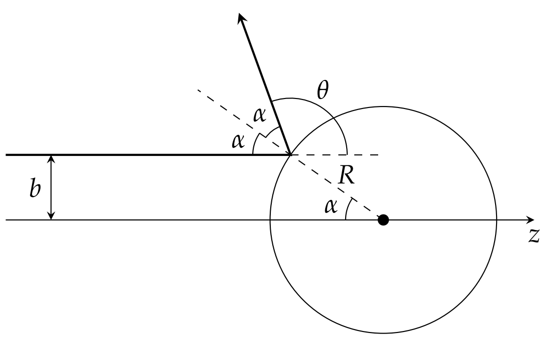
ظاہر اً درج ذیل ہو گا۔

---

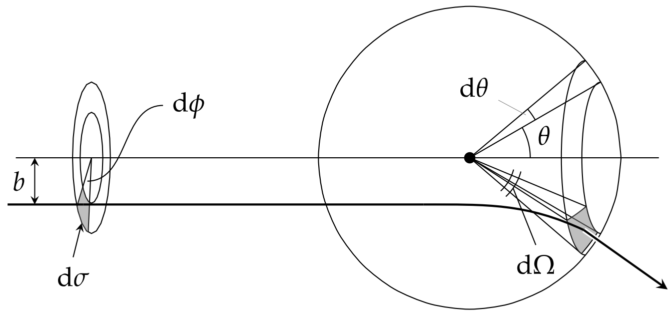
[1] impactparameter
[2] scatteringangle
[3] trajectory



شکل ۱.۱۱: کلاسیکی مسئلہ بکھراو، جس میں ٹکراو مقدار معلوم b اور زاویہ بکھراو θ کی وضاحت کی گئی ہے۔



شکل ۲.۱۱: سخت کرہ سے لچکدار بکھراو۔



شکل ۱۱.۳: رقبہ $\mathrm{d}\sigma$ میں آمدی ذرات ٹھوس زاویہ $\mathrm{d}\Omega$ میں بکھرتے ہیں۔

$$\theta = \begin{cases} 2\cos^{-1}(b/R), & b \leq R \\ 0, & b \geq R \end{cases} \tag{۱۱.۲}$$

□

عمومی طور پر، لامتناہی چھوٹے قطعہ، جس کا رقبہ عمودی تراش $\mathrm{d}\sigma$ ہو، میں آمدی ذرات، مطابقتی لامتناہی چھوٹے ٹھوس زاویہ $\mathrm{d}\Omega$ میں بکھریں گے (شکل ۱۱.۳)۔ جتنا $\mathrm{d}\sigma$ بڑا ہو، اتنا $\mathrm{d}\Omega$ بڑا ہو گا؛ ان کے تناسبی جزو ضربی $D(\theta) \equiv \mathrm{d}\sigma / \mathrm{d}\Omega$ کو **تفریقی (بکھراو) عمودی تراش**[۴] کہتے ہیں۔[۵] یوں درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\mathrm{d}\sigma = D(\theta)\,\mathrm{d}\Omega \tag{۱۱.۳}$$

ٹکراو مقدار معلوم اور سمتی زاویہ ϕ کی صورت میں $\mathrm{d}\sigma = b\,\mathrm{d}b\,\mathrm{d}\phi$ اور $\mathrm{d}\Omega = \sin\theta\,\mathrm{d}\theta\,\mathrm{d}\phi$ ہیں، لہٰذا

$$D(\theta) = \frac{b}{\sin\theta}\left|\frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}\theta}\right| \tag{۱۱.۴}$$

ہو گا۔ (عمومی طور پر θ مقدار معلوم b کا گھٹتا ہوا تفاعل ہو گا، لہٰذا ایسا تفرق حقیقتاً منفی ہو گا؛ اسی لئے مطلق قیمت لی گئی ہے۔)

مثال ۱۱.۲: **سخت کرہ کے بکھراو کی مثال جاری رکھتے ہیں۔** سخت کرہ بکھراو (مثال ۱۱.۱) کی صورت میں

$$\frac{\mathrm{d}b}{\mathrm{d}\theta} = -\frac{1}{2}R\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{۱۱.۵}$$

---

[۴] differential (scattering) cross-section

[۵] یہ ناقص زبان ہے: D تفریقی نہیں ہے، اور نہ ہی یہ عمودی تراش ہے۔

لہٰذا

$$D(\theta) = \frac{R\cos(\theta/2)}{\sin\theta}\left(\frac{R\sin(\theta/2)}{2}\right) = \frac{R^2}{4} \tag{۱۱.۶}$$

ہو گا۔ اس مثال میں تفریقی عمودی تراش θ کی تابع نہیں ہے، جو ایک غیر معمولی بات ہے۔ □

تمام ٹھوس زاویوں پر $D(\theta)$ کا تکمل:

$$\sigma \equiv \int D(\theta)\,\mathrm{d}\Omega \tag{۱۱.۷}$$

کل عمودی تراش[۶] ہو گا۔ اندازاً بات کرتے ہوئے، یہ آمدی شعاع کا وہ رقبہ ہے جس کو ہدف بکھیرتا ہے۔ مثال کے طور پر، سخت کرہ بکھراو کی صورت میں

$$\sigma = (R^2/4)\int \mathrm{d}\Omega = \pi R^2 \tag{۱۱.۸}$$

ہو گا، جو ہمارے توقعات کے عین مطابق ہے: یہ کرہ کا رقبہ عمودی تراش ہے؛ اس رقبہ کے اندر آمدی چھرے ہدف کو مار پائیں گے، جبکہ اس سے باہر چھرے ہدف کو خطا کریں گے۔ یہی تصورات "نرم" اہداف (جیسا مرکزہ کا کولمب میدان) کے لئے بھی کار آمد ہے، جن میں صرف نشانے پر "لگنا یا نہ لگنا" کے علاوہ بھی بات کی جائے گی۔

آخر میں فرض کریں ہمارے پاس آمدی ذرات کی یکساں شدت (**یا تابندگی**[۷]) کی ایک شعاع ہو۔

$$\mathcal{L} \equiv \text{اکائی رقبہ پر فی اکائی وقت آمدی ذرات کی تعداد} \tag{۱۱.۹}$$

فی اکائی وقت، رقبہ $\mathrm{d}\sigma$ میں داخل ہونے والے ذرات (اور یوں ٹھوس زاویہ $\mathrm{d}\Omega$ میں بکھرنے والے ذرات) کی تعداد $\mathrm{d}N = \mathcal{L}\,\mathrm{d}\sigma = \mathcal{L}D(\theta)\,\mathrm{d}\Omega$ ہو گی، لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$D(\theta) = \frac{1}{\mathcal{L}}\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}\Omega} \tag{۱۱.۱۰}$$

چونکہ یہ صرف ان مقداروں کی بات کرتی ہے جنہیں تجربہ گاہ میں با آسانی ناپا جا سکتا ہے، لہٰذا اس کو عموماً تفریقی عمودی تراش کی تعریف لی جاتی ہے۔ اگر ٹھوس زاویہ $\mathrm{d}\Omega$ میں بکھرے ذرات کاشف تک پہنچتے ہوں، ہم اکائی وقت میں کشف کیے گئے ذرات کی گنتی کو $\mathrm{d}\Omega$ سے تقسیم کرکے، آمدی شعاع کی تابندگی کے لحاظ سے معمول زنی کرتے ہیں۔

سوال ۱.۱۱: **ردرفورڈ بکھراو۔**[۸] بار q_1 اور حرکی توانائی E کا ایک آمدی ذرہ بھاری ساکن ذرے سے، جس کا بار q_2 ہو، بکھرتا ہے۔

---

[۶] total cross-section
[۷] luminosity
[۸] Rutherford scattering

ا. ٹکراو مقدار معلوم اور زاویہ بکھراو کے بیچ رشتہ اخذ کریں۔

جواب: $b = (q_1 q_2/8\pi\epsilon_0 E)\cot(\theta/2)$

ب. تفریقی بکھراو عمودی تراش تعین کریں۔ جواب:

$$D(\theta) = \left[\frac{q_1 q_2}{16\pi\epsilon_0 E \sin^2(\theta/2)}\right]^2 \tag{۱۱.۱۱}$$

ج. دکھائیں کہ ردرفورڈ بکھراو کا کل عمودی تراش لامتناہی ہے۔ ہم کہتے ہیں کہ $1/r$ مخفیہ کی "لامتناہی سعت" ہے؛ آپ کولمب قوت سے بچ نہیں سکتے ہیں۔

۱۱.۱.۲ کوانٹائی نظریہ بکھراو

بکھراو کے کوانٹائی نظریے میں، ہم فرض کرتے ہیں کہ z رخ حرکت کرتی ہوئی آمدی مستوی موج، $\psi(z) = Ae^{ikz}$، کا مخفیہ بکھر سے سامنا ہوتا ہے، جس کے نتیجے میں ایک رخصتی کروی موج پیدا ہوتی ہے (شکل ۱۱.۴)۔[۹] یعنی، ہم مساوات شروڈنگر کے وہ حل تلاش کرنا چاہتے ہیں جن کی عمومی روپ درج ذیل ہو

$$\psi(r,\theta) \approx A\left\{e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\right\}, \qquad \text{بڑے } r \text{ کے لئے} \tag{۱۱.۱۲}$$

(احتمال کے بقا کی خاطر $|\psi|^2$ کے اس حصے کو لازماً $1/r^2$ سے تبدیل ہونا ہوگا، لہٰذا کروی موج میں جزو ضربی $1/r$ پایا جاتا ہے)۔ **عدد موج**[۱۰] k کا آمدی ذرات کی توانائی کے ساتھ ہمیشہ کی طرح رشتہ:

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \tag{۱۱.۱۳}$$

ہوگا۔ یہاں بھی میں فرض کرتا ہوں کہ ہدف اسّمتی تشاکلی ہے؛ زیادہ عمومی صورت میں، رخصتی کروی موج کا حیطہ f متغیرات ϕ اور θ کا تابع ہو سکتا ہے۔

ہمیں **حیطہ بکھراو**[۱۱] $f(\theta)$ کا تعین کرنا ہوگا؛ یہ رخ θ میں بکھراو کا احتمال دیتا ہے، لہٰذا اس کا تعلق تفریقی عمودی تراش سے ہوگا۔ یقیناً، رفتار v پر چلتے ہوئے آمدی ذرے کا لامتناہی چھوٹے رقبہ $\mathrm{d}\sigma$ میں سے وقت $\mathrm{d}t$

---

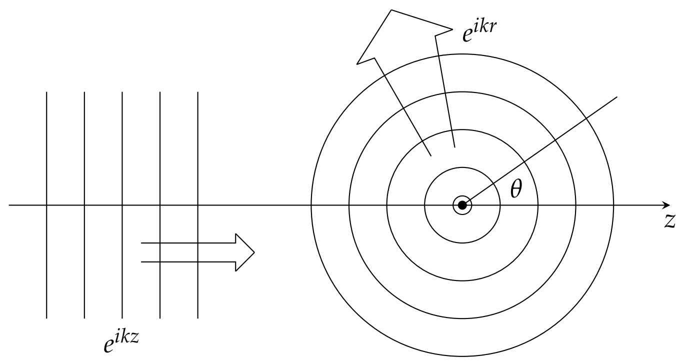
[۹] فی الحال، یہاں کوئی خاص کوانٹائی میکانیات نہیں ہے؛ ہم در حقیقت، کلاسیکی ذرات کی بجائے امواج کے بکھراو کی بات کر رہے ہیں، اور آپ شکل ۱۱.۴ کو پانی کے امواج کا پتھر کے ساتھ ٹکراو تصور کر سکتے ہیں، یا (چونکہ، ہم تین بُعدی بکھراو میں دلچسپی رکھتے ہیں، لہٰذا بہتر یہ ہوگا کہ انہیں) ایک گیند سے صوتی امواج کا بکھراو تصور کریں۔ ایسی صورت میں ہم تفاعل موج کو حقیقی روپ:

$$A[\cos(kz) + f(\theta)\cos(kr+\delta)/r]$$

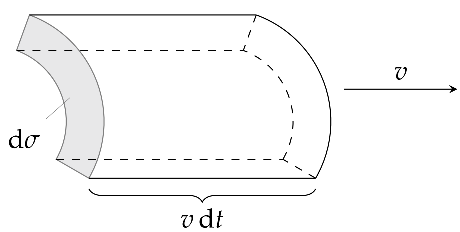
میں لکھتے ہیں اور θ رخ بکھرتے صوتی موج کے حیطے کو $f(\theta)$ ظاہر کرتا ہے۔

[۱۰] wavenumber

[۱۱] scatteringamplitude



شکل ۱۱.۴: امواج کا بکھراو؛ آمدی مستوی موج رخصتی کروی موج پیدا کرتی ہے۔



شکل ۱۱.۵: وقت $\mathrm{d}t$ کے دوران رقبہ $\mathrm{d}\sigma$ سے گزرتی ہوئی آمدی شعاع کا حجم $\mathrm{d}V = (\mathrm{d}\sigma)(v\,\mathrm{d}t)$ ہے۔

میں گزرنے کا احتمال (شکل ۱۱.۵ دیکھیں)

$$dP = \left|\psi_{\text{آمدی}}\right|^2 dV = |A|^2 \,(v\,dt)\, d\sigma$$

ہو گا۔ لیکن مطابقتی ٹھوس زاویہ $d\Omega$ میں اس ذرے کے بکھراو کا احتمال:

$$dP = \left|\psi_{\text{بکھراو}}\right|^2 dV = \frac{|A|^2 |f|^2}{r^2} (v\,dt) r^2\, d\Omega$$

بھی یہی ہو گا، لہٰذا $d\sigma = \left|f\right|^2 d\Omega$ اور درج ذیل ہو گا۔

$$D(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = \left|f(\theta)\right|^2 \tag{۱۱.۱۴}$$

ظاہر ہے کہ، تفریقی عمودی تراش (جس میں تجربیت پسند دلچسپی رکھتا ہے) حیطہ بکھراو (جو مساوات شروڈنگر کے حل سے حاصل ہو گا) کے مطلق مربع کے برابر ہو گا۔ آنے والے حصوں میں ہم حیطہ بکھراو کے حساب کے دو تراکیب: **جزوی موج تجزیہ** اور **بارن تخمین** پر غور کریں گے۔

سوال ۱۱.۲: یک بُعدی اور دو ابعادی بکھراو کے لئے مساوات ۱۱.۱۲ کے مماثل تیار کریں۔

۱۱.۲ جزوی موج تجزیہ

۱۱.۲.۱ اصول و ضوابط

ہم نے باب ۴ میں دیکھا کہ کروی تشاکلی مخفیہ $V(r)$ کے لئے مساوات شروڈنگر قابل علیحدگی حلوں:

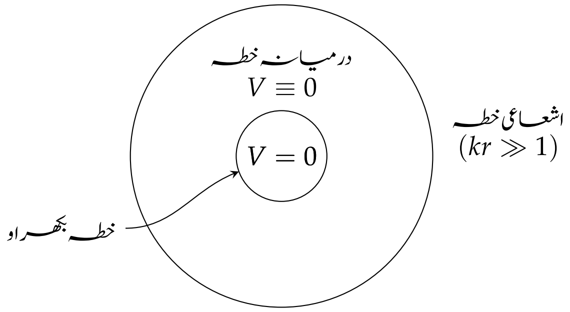
$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r) Y_\ell^m(\theta,\phi) \tag{۱۱.۱۵}$$

کا حامل ہو گا، جہاں Y_ℓ^m کروی ہارمونی (مساوات ۴.۳۲) ہے اور $u(r) = rR(r)$ رداسی مساوات (مساوات ۴.۳۷):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right] u = Eu \tag{۱۱.۱۶}$$

کو مطمئن کرتا ہے۔ بہت بڑے r کی صورت میں مخفیہ صفر کو پہنچتا ہے، اور مرکز گریز حصہ قابل نظر انداز ہو گا، لہٰذا

$$\frac{d^2u}{dr^2} \approx -k^2 u$$



شکل ۱۱.۶: مقامی مخفیہ سے بکھراو؛ خطہ بکھراو، درمیانہ خطہ، اور اشعاعی خطہ۔

لکھا جا سکتا ہے۔ اس کا عمومی حل

$$u(r) = Ce^{ikr} + De^{-ikr}$$

ہے؛ پہلا جزو رخصتی کروی موج کو اور دوسرا جزو آمدی موج کو ظاہر کرتا ہے؛ ظاہر ہے کہ بکھرے موج کے لئے ہم $D = 0$ چاہتے ہیں۔ یوں بہت بڑے r کی صورت میں

$$R(r) \sim \frac{e^{ikr}}{r}$$

ہو گا، جسے ہم گزشتہ حصہ میں (طبیعی بنیادوں پر) اخذ کر چکے (مساوات ۱۱.۱۲)۔

یہ بہت بڑے r کے لئے تھا (یا یہ کہنا زیادہ درست ہو گا کہ $kr \gg 1$ کے لئے تھا؛ بصریات میں اسے **خطہ اشعاعی**[۱۲] کہیں گے)۔ یک بُعدی نظریہ بکھراو کی طرح، ہم یہاں فرض کرتے ہیں کہ مخفیہ "مقامی" ہے، جس سے ہمارا مراد یہ ہے کہ کسی متناہی بکھراو خطہ کے باہر مخفیہ تقریباً صفر ہو گا (شکل ۱۱.۶)۔ درمیانہ خطہ میں (جہاں V کو نظر انداز کیا جا سکتا ہے لیکن مرکز گریز جزو کو نظر انداز نہیں کیا جا سکتا)،[۱۳] ردا سی مساوات درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$\frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}u = -k^2 u \tag{۱۱.۱۷}$$

جس کا عمومی حل (مساوات ۴.۴۵) کروی بیسل تفاعلات کا خطی جوڑ:

$$u(r) = Arj_\ell(kr) + Brn_\ell(kr) \tag{۱۱.۱۸}$$

---

[۱۲] radiation zone

[۱۳] یہاں سے آگے تبصرہ کولمب مخفیہ کے لئے درست نہیں، چونکہ $r \to \infty$ کرنے سے $1/r^2$ کے لحاظ سے $1/r$ صفر تک زیادہ آہستہ پہنچتا ہے، اور مرکز گریز جزو اس خطہ میں غالب نہیں ہو گا۔ اس نقطہ نظر سے کولمب مخفیہ مقامی نہیں ہے، اور جزوی موج تجزیہ قابل اطلاق نہیں ہو گا۔

ہو گا۔ لیکن نہ ہی j_ℓ (جو سائن تفاعل کی طرح ہے) اور نہ ہی n_ℓ (جو متمم کوسائن کی طرح ہے) رخصتی (یا آمدی) موج کو ظاہر کرتے ہیں۔ ہمیں یہاں e^{ikr} اور e^{-ikr} کے مماثل خطی جوڑ درکار ہوں گے؛ انہیں **کروی ہینکل تفاعلات**[14]:

$$h_\ell^{(1)}(x) \equiv j_\ell(x) + in_\ell(x); \quad h_\ell^{(2)}(x) \equiv j_\ell(x) - in_\ell(x) \tag{۱۱.۱۹}$$

کہتے ہیں۔ جدول ۱.۱۱ میں چند ابتدائی کروی ہینکل تفاعلات پیش کیے گئے ہیں۔ بڑے r کی صورت میں،

جدول ۱.۱۱: کروی ہینکل تفاعلات $h_\ell^{(1)}(x)$ اور $h_\ell^{(2)}(x)$

$h_0^{(1)} = -i\dfrac{e^{ix}}{x}$	$h_0^{(2)} = i\dfrac{e^{-ix}}{x}$
$h_1^{(1)} = \left(-\dfrac{i}{x^2} - \dfrac{1}{x}\right)e^{ix}$	$h_1^{(2)} = \left(\dfrac{i}{x^2} - \dfrac{1}{x}\right)e^{-ix}$
$h_2^{(1)} = \left(-\dfrac{3i}{x^3} - \dfrac{3}{x^2} + \dfrac{i}{x}\right)e^{ix}$	$h_2^{(2)} = \left(\dfrac{3i}{x^3} - \dfrac{3}{x^2} + \dfrac{i}{x}\right)e^{-ix}$
$\left.\begin{array}{l} h_\ell^{(1)} \to \frac{1}{x}(-i)^{\ell+1}e^{ix} \\ h_2^{(2)} \to \frac{1}{x}(i)^{\ell+1}e^{-ix} \end{array}\right\} x \gg 1$	

$h_\ell^{(1)}(kr)$ (جسے "ہینکل تفاعل کی پہلی قسم" کہتے ہیں) e^{ikr}/r کی طرح سے تبدیل ہوتا ہے، جبکہ $h_\ell^{(2)}(kr)$ (ہینکل تفاعل کی دوسری قسم) e^{-ikr}/r سے تبدیل ہو گا۔ یوں، رخصتی امواج کے لئے ہمیں کروی ہینکل تفاعلات کی پہلی قسم درکار ہو گی۔

$$R(r) \sim h_\ell^{(1)}(kr) \tag{۱۱.۲۰}$$

اس طرح خطہ بکھراو کے باہر (جہاں $V(r) = 0$ ہو گا) ٹھیک ٹھیک تفاعل موج درج ذیل ہو گا۔

$$\psi(r,\theta,\phi) = A\left\{e^{ikz} + \sum_{\ell,m} C_{\ell,m} h_\ell^{(1)}(kr) Y_\ell^m(\theta,\phi)\right\} \tag{۱۱.۲۱}$$

اس کا پہلا جزو آمدی مستوی موج ہے، جبکہ مجموعہ (جس کے عددی سر $C_{\ell,m}$ ہیں) موج بکھراو کو ظاہر کرتا ہے۔ چونکہ، ہم فرض کر چکے ہیں کہ مخفیہ کروی تشاکلی ہے، لہٰذا تفاعل موج ϕ کا تابع نہیں ہو سکتا۔[15] یوں صرف وہ اجزاء

---

[14] spherical Hankel functions

[15] چونکہ آمدی موج z رخ کا تعین کرتی ہے جو کروی تشاکل خراب کرتی ہے، لہٰذا تابعیت θ کوئی مسئلہ کھڑا نہیں کرتی۔ تاہم اسمتی تشاکل برقرار رہتا ہے؛ آمدی مستوی موج میں تابعیت ϕ نہیں پائی جاتی، اور بکھراو کے عمل میں ایسی کوئی خاصیت نہیں جو رخصتی موج میں تابعیت ϕ پیدا کرے۔

باقی رہیں گے جن میں $m = 0$ ہو (یاد رہے، $Y_\ell^m \sim e^{im\phi}$)۔ اب مساوات ۴.۲۷ اور مساوات ۴.۳۲ سے درج ذیل ہو گا

$$Y_\ell^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}P_\ell(\cos\theta) \tag{۱۱.۲۲}$$

جہاں ℓ ویں لیژانڈر کثیر رکنی کو P_ℓ ظاہر کرتا ہے۔ روایتی طور پر $C_{\ell,0} \equiv i^{\ell+1}k\sqrt{4\pi(2\ell+1)}a_\ell$ لکھ کر عددی سروں کی تعریف نو کی جاتی ہے۔ یوں درج ذیل لکھا جاتا ہے۔

$$\psi(r,\theta) = A\left\{e^{ikz} + k\sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell+1}(2\ell+1)a_\ell h_\ell^{(1)}(kr)P_\ell(\cos\theta)\right\} \tag{۱۱.۲۳}$$

آپ کچھ ہی دیر میں دیکھیں گے کہ یہ مخصوص علامتیت کیوں بہتر ہے؛ a_ℓ کو ℓ واں **جزوی موج حیطہ**[۱۶] کہتے ہیں۔

اب بہت بڑے r کے لئے ہینکل تفاعل $(-i)^{\ell+1}e^{ikr}/kr$ صورت اختیار کرتا ہے (جدول ۱۱.۱)، لہٰذا

$$\psi(r,\theta) \approx A\left\{e^{ikz} + f(\theta)\frac{e^{(ikr)}}{r}\right\} \tag{۱۱.۲۴}$$

ہو گا، جہاں $f(\theta)$ درج ذیل ہے۔

$$f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)a_\ell P_\ell(\cos\theta) \tag{۱۱.۲۵}$$

یہ مساوات ۱۱.۱۲ میں پیش کی گئی عمومی ساخت کے اصول موضوعہ کی زیادہ پختہ تصدیق کرتا ہے، اور ہمیں جزوی موج حیطوں (a_ℓ) کی صورت میں حیطہ بکھراو، $f(\theta)$، حاصل کرنے کے قابل بناتا ہے۔ تفریقی عمودی تراش:

$$D(\theta) = \left|f(\theta)\right|^2 = \sum_\ell\sum_{\ell'}(2\ell+1)(2\ell'+1)a_\ell^* a_{\ell'}P_\ell(\cos\theta)P_{\ell'}(\cos\theta) \tag{۱۱.۲۶}$$

ہو گا، اور کل عمودی تراش درج ذیل ہو گا۔

$$\sigma = 4\pi\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)|a_\ell|^2 \tag{۱۱.۲۷}$$

(زاویائی تکمل کو حل کرنے کے لئے میں نے لیژانڈر کثیر رکنیوں کی عمودیت مساوات ۴.۳۴ استعمال کی۔)

[۱۶] partialwaveamplitude

۱۱.۲.۲ لائحہ عمل

زیر غور مخفیہ کے لئے جزوی موج حیطوں، a_ℓ، کا تعین کرنا باقی ہے۔ اندرونی خطہ (جہاں $V(r)$ واضح طور پر غیر صفر ہے) میں مساوات شروڈنگر کو حل کر کے اسے بیرونی حل (مساوات ۱۱.۲۳) کے ساتھ، مناسب سرحدی شرائط استعمال کرتے ہوئے، ملانے سے ایسا کیا جا سکتا ہے۔ مسئلہ صرف اتنا ہے کہ میں نے دو مختلف محددی نظام استعمال کیے ہیں: بکھراو موج کے لئے کروی محدد جبکہ آمدی موج کے لئے کارتیسی محدد۔ ہمیں تفاعل موج کو ایک جیسی علامتوں میں لکھنا ہو گا۔

یقیناً، $V = 0$ کے لئے مساوات شروڈنگر کو e^{ikz} مطمئن کرتا ہے۔ ساتھ ہی، میں دلائل پیش کر چکا ہوں کہ $V = 0$ کے لئے مساوات شروڈنگر کا عمومی حل درج ذیل روپ کا ہو گا۔

$$\sum_{\ell,m}\left[A_{\ell,m}\,j_\ell(kr)+B_{\ell,m}\,n_\ell(kr)\right]Y_\ell^m(\theta,\phi)$$

یوں بالخصوص، e^{ikz} کو اس روپ میں لکھنا ممکن ہونا چاہیے۔ لیکن مبدا پر e^{ikz} متناہی ہے، لہٰذا نیومن تفاعلات کی اجازت نہیں ہو گی ($r = 0$ پر $n_\ell(kr)$ بے قابو بڑھتے ہیں)، اور چونکہ $z = r\cos\theta$ میں تابعیت ϕ نہیں پائی جاتی، لہٰذا صرف $m = 0$ اجزاء واقع ہوں گے۔ کروی امواج کی صورت میں مستوی موج کی صریحاً پھیلاو **کلیہ ریلے**[17]:

$$e^{ikz}=\sum_{\ell=0}^{\infty}i^\ell(2\ell+1)j_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta) \tag{۱۱.۲۸}$$

دیتی ہے۔ اس کو استعمال کرتے ہوئے بیرونی خطہ میں تفاعل موج کو صرف r اور θ کی صورت:

$$\psi(r,\theta)=A\sum_{\ell=0}^{\infty}i^\ell(2\ell+1)\left[j_\ell(kr)+ika_\ell h_\ell^{(1)}(kr)\right]P_\ell(\cos\theta) \tag{۱۱.۲۹}$$

میں پیش کیا جا سکتا ہے۔

مثال ۱۱.۳: **کوانٹائی سخت کرہ بکھراو** فرض کریں:

$$V(r)=\begin{cases}\infty, & r\le a\\ 0, & r>a\end{cases} \tag{۱۱.۳۰}$$

تب، سرحدی شرط

$$\psi(a,\theta)=0 \tag{۱۱.۳۱}$$

ہو گا۔ یوں تمام θ کے لئے

$$\sum_{\ell=0}^{\infty}i^\ell(2\ell+1)\left[j_\ell(ka)+ika_\ell h_\ell^{(1)}(ka)\right]P_\ell(\cos\theta)=0 \tag{۱۱.۳۲}$$

---

[17] Rayleigh's formula

ہو گا، جس سے درج ذیل حاصل ہوتا ہے (سوال ۱۱.۳)۔

$$a_\ell = i\frac{j_\ell(ka)}{kh_\ell^{(1)}(ka)} \tag{۱۱.۳۳}$$

بالخصوص کل عمودی تراش

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\left|\frac{j_\ell(ka)}{h_\ell^{(1)}(ka)}\right|^2 \tag{۱۱.۳۴}$$

ہو گا۔ یہ بالکل ٹھیک جواب ہے، لیکن اس کو دیکھ کر زیادہ معلومات فراہم نہیں ہوتیں، لہٰذا آئیں کم توانائی بکھراو، $ka \ll 1$، کی تحدیدی صورت پر غور کریں۔ (چونکہ $k = 2\pi/\lambda$ ہے، اس سے مراد یہ لیا جا سکتا ہے کہ کرہ کے رداس سے طول موج بہت بڑا ہے۔) جدول ۴.۴ (صفحہ ۱۴۸) سے ہم دیکھتے ہیں کہ چھوٹے z کے لئے $n_\ell(z)$ کی مقدار $j_\ell(z)$ سے بہت زیادہ ہو گی، لہٰذا

$$\begin{aligned}\frac{j_\ell(z)}{h_\ell^{(1)}(z)} &= \frac{j_\ell(z)}{j_\ell(z)+in_\ell(z)} \approx -i\frac{j_\ell(z)}{n_\ell(z)}\\ &\approx -i\frac{2^\ell \ell! z^\ell/(2\ell+1)!}{-(2\ell)!z^{-\ell-1}/2^\ell\ell!} = \frac{i}{2\ell+1}\left[\frac{2^\ell\ell!}{(2\ell)!}\right]^2 z^{2\ell+1}\end{aligned} \tag{۱۱.۳۵}$$

اور درج ذیل ہو گا۔

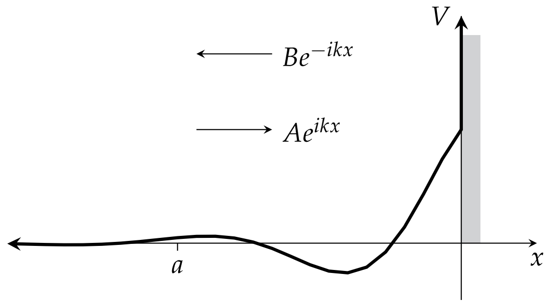
$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{1}{2\ell+1}\left[\frac{2^\ell\ell!}{(2\ell)!}\right]^4 (ka)^{4\ell+2}$$

لیکن ہم $ka \ll 1$ فرض کر رہے ہیں، لہٰذا بلند طاقتیں قابل نظر انداز ہوں گی؛ کم توانائی تخمین میں $\ell = 0$ جزو، بکھراو میں غالب ہو گا (یوں کلاسیکی صورت کے طرح، تفرقی عمودی تراش θ کی تابع نہیں ہو گی)۔ ظاہر ہے کہ کم توانائی سخت کرہ بکھراو کے لئے درج ذیل ہو گا۔

$$\sigma \approx 4\pi a^2 \tag{۱۱.۳۶}$$

حیرانی کی بات ہے کہ بکھراو عمودی تراش کی قیمت ہندسی عمودی تراش کے چار گنا ہے؛ درحقیقت، σ کی قیمت کرہ کا کل سطحی رقبہ ہے۔ لمبی طول موج بکھراو کی ایک خاصیت "بڑی موثر جسامت" ہے (جو بصریات میں بھی درست ہو گا)؛ ایک لحاظ سے، یہ امواج کرہ کو "چھوتے ہوئے" اس کے اُوپر سے گزرتے ہیں، نہ کہ کلاسیکی ذرات کی طرح جنہیں صرف (سیدھا دیکھتے ہوئے) عمودی تراش نظر آتا ہے۔ □

سوال ۱۱.۳: مساوات ۱۱.۳۲ سے آغاز کرتے ہوئے مساوات ۱۱.۳۲ ثابت کریں۔ اشارہ: لیژانڈر کثیر رکنیوں کی عمودیت بروئے کار لاتے ہوئے دکھائیں کہ ℓ کی مختلف قیمتوں والے عددی سر علیحدہ علیحدہ لازماً صفر ہوں گے۔



شکل ۱۱.۷: مقامی مخفیہ، جس کے دائیں جانب ایک لامتناہی دیوار پائی جاتی ہے، سے یک بُعدی بکھراو۔

سوال ۱۱.۴: کروی ڈیلٹا تفاعل خول:

$$V(r) = \alpha\delta(r-a)$$

سے کم توانائی بکھراو کی صورت پر غور کریں، جہاں α اور a مستقلات ہیں۔ حیطہ بکھراو، $f(\theta)$، تفرقی عمودی تراش، $D(\theta)$، اور کل عمودی تراش، σ، کا حساب کریں۔ ان میں $ka \ll 1$ فرض کریں، لہٰذا صرف $\ell = 0$ جزو خاطر خواہ حصہ ڈالیں گے۔ (چیزوں کو آسان بنانے کی خاطر، آغاز سے ہی $\ell \neq 0$ والے تمام اجزاء کو نظر انداز کریں۔) یہاں a_0 کا تعین کرنا اصل مسئلہ ہے۔ اپنے جواب کو بے بُعدی مقدار $\beta \equiv 2ma\alpha/\hbar^2$ کی صورت میں پیش کریں۔

جواب: $\sigma = 4\pi a^2\beta^2/(1+\beta)^2$

۱۱.۳ پیّتی انتقال

نصف لکیر $x < 0$ پر مقامی مخفیہ $V(x)$ سے یک بُعدی بکھراو کے مسئلے پر، پہلے، غور کرتے ہیں (شکل ۱۱.۷)۔ میں $x = 0$ پر اینٹوں کی ایک دیوار کھڑی کرتا ہوں تا کہ بائیں سے آمدی موج

$$\psi_i(x) = Ae^{ikx} \qquad (x < -a) \tag{۱۱.۳۷}$$

مکمل طور پر منعکس ہو گی۔

$$\psi_r(x) = Be^{-ikx} \qquad (x < -a) \tag{۱۱.۳۸}$$

باہم عمل خطہ ($-a < x < 0$) میں جو کچھ بھی ہو، احتمال کی بقا کی بنا پر، منعکس موج کا حیطہ لازماً آمدی موج کے حیطہ کے برابر ہو گا۔ تاہم ضروری نہیں کہ ان کے حیطے بھی برابر ہوں۔ اگر ($x = 0$ پر دیوار کے سوا) کوئی مخفیہ نہیں ہو، تب چونکہ مبدا پر کل

تفاعل موج (آمدی جمع منعکس) صفر ہو گا:

$$\psi_0(x) = A\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) \qquad (V(x) = 0) \tag{۱۱.۳۹}$$

لہٰذا $B = -A$ ہو گا۔ غیر صفر مخفیہ کی صورت میں، ($x < -a$ کے لئے) تفاعل موج درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$\psi(x) = A\left(e^{ikx} - e^{i(2\delta - kx)}\right) \qquad (V(x) \neq 0) \tag{۱۱.۴۰}$$

نظریہ بکھراو کی پوری کہانی، کسی مخصوص مخفیہ کے لئے (k، لہٰذا توانائی $E = \hbar^2k^2/2m$ کی صورت میں)، **ہیّتی انتقال**[۱۸] δ کے حساب کا دوسرا نام ہے۔[۱۹] اہم خطہ بکھراو ($-a < x < 0$) میں مساوات شروڈنگر کو حل کر کے مناسب سرحدی شرائط عائد کر کے ایسا کرتے ہیں (سوال ۱۱.۵ دیکھیں)۔ (مخلوط حیطہ B کے بجائے) ہیّتی انتقال کے ساتھ کام کرنے سے طبیعیات عیاں ہوتی ہے (احتمال کے بقا کے بدولت مخفیہ منعکس موج کا صرف ہیّت منتقل کر سکتا ہے) اور (ایک مخلوط مقدار جو دو حقیقی اعداد پر مشتمل ہوتا ہے کی بجائے ایک حقیقی مقدار کے ساتھ کام کرتے ہوئے) ریاضی آسان ہوتی ہے۔

آئیں اب تین بُعدی صورت پر دوبارہ نظر ڈالیں۔ آمدی مستوی موج (Ae^{ikz}) کا z رخ میں کوئی زاویائی معیار حرکت نہیں پایا جاتا (کلیہ ریلے میں $m \neq 0$ والا کوئی جزو نہیں پایا جاتا)، لیکن اس میں کل زاویائی معیار حرکت ($\ell = 0, 1, 2, \ldots$) کی تمام قیمتیں شامل ہیں۔ چونکہ کروی تشاکلی مخفیہ زاویائی معیار حرکت کا بقا کرتا ہے، لہٰذا ہر ایک **جزوی موج**[۲۰] (جسے کسی ایک مخصوص ℓ سے نام دیا جاتا ہے) انفرادی طور پر بکھرے گی اور اس کے حیطہ[۲۱] میں (اب بھی) کوئی تبدیلی رونما نہیں ہو گی؛ تاہم اس کی ہیّت تبدیل ہو گی۔ مخفیہ نہ ہونے کی صورت میں، $\psi_0 = Ae^{ikz}$ ہو گا، لہٰذا ℓ ویں جزوی موج درج ذیل ہو گی (مساوات ۱۱.۲۸)۔

$$\psi_0^{(\ell)} = Ai^\ell(2\ell+1)j_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta) \qquad (V(r) = 0) \tag{۱۱.۴۱}$$

لیکن مساوات ۱۱.۱۹ اور جدول ۱۱.۱ کے تحت

$$j_\ell(x) = \frac{1}{2}\left[h^{(1)}(x) + h_\ell^{(2)}(x)\right] \approx \frac{1}{2x}\left[(-i)^{\ell+1}e^{ix} + i^{\ell+1}e^{-ix}\right] \quad (x \gg 1) \tag{۱۱.۴۲}$$

ہو گا۔ یوں بڑے r کی صورت میں درج ذیل ہو گا۔

$$\psi_0^{(\ell)} \approx A\frac{(2\ell+1)}{2ikr}\left[e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr}\right]P_\ell(\cos\theta) \qquad (V(r) = 0) \tag{۱۱.۴۳}$$

---

[۱۸] phaseshift

[۱۹] مساوات ۱۱.۴۰ میں δ کے آگے روایتی طور پر 2 لکھا جاتا ہے۔ ہم کہتے ہیں کہ آمدی موج آتے ہوئے ایک مرتبہ اور جاتے ہوئے ایک مرتبہ ہیّتی منتقل ہوتی ہے؛ ہم "ایک رخ" ہیّتی انتقال کو δ سے ظاہر کرتے ہیں لہٰذا کل 2δ ہو گا۔

[۲۰] partialwave

[۲۱] یہ مضمون میں اس لئے بھی غلط فہمی پیدا ہوتی ہے کہ ہر دوسری چیز "حیطہ" پکارا جاتا ہے: $f(\theta)$ "بکھراو حیطہ" ہے، a_ℓ "جزوی موج حیطہ" ہے، لیکن اول الذکر θ کا تفاعل ہے، اور دونوں مخلوط اعداد ہیں۔ میں اب "حیطہ" کو اس کی اصل مفہوم (سائن نما موج کی بلندی) میں استعمال کر رہا ہوں۔

چونکہ قوسین میں دوسرا جزو آمدی کروی موج کو ظاہر کرتا ہے؛ مخفیہ بکھراو متعارف کرنے سے یہ جزو تبدیل نہیں ہوگا۔ پہلا جزو رخصتی موج ہے جو پیّتی انتقال δ_ℓ

$$\psi^{(1)} \approx A\frac{(2\ell+1)}{2ikr}\left[e^{i(kr+2\delta_1)}-(-1)^\ell e^{-ikr}\right]P_\ell(\cos\theta) \qquad (V(r)\neq 0) \tag{۱۱.۴۴}$$

اٹھاتا ہے۔ آپ (e^{ikz} میں $h_\ell^{(2)}$ جزو کی بنا پر) اس کو کروی مرکوز موج تصور کر سکتے ہیں، جس میں $2\delta_\ell$ پیّتی انتقال (حاشیہ ۱۹ دیکھیں) پایا جاتا ہے اور جو (e^{ikz} میں $h_\ell^{(1)}$ حصہ کے ساتھ بکھری موج شامل کر کے) رخصتی کروی موج کے طور پر اُبھرتی ہے۔

حصہ ۱۱.۲.۱ میں پورے نظریہ کو جزوی تفاعل حیطوں a_ℓ کی صورت میں پیش کیا گیا؛ یہاں اس کو پیّتی انتقال δ_ℓ کی صورت میں پیش کیا جائے گا۔ ان دونوں کے بیچ ضرور کوئی تعلق ہوگا۔ یقیناً مساوات ۱۱.۲۳ کے (بڑے r کی صورت میں) متقاربی روپ:

$$\psi^{(1)} \approx A\left\{\frac{(2\ell+1)}{2ikr}\left[e^{ikr}-(-1)^\ell e^{-ikr}\right]+\frac{(2\ell+1)}{r}a_\ell e^{ikr}\right\}P_\ell(\cos\theta) \tag{۱۱.۴۵}$$

کا δ_ℓ کی صورت میں عمومی روپ (مساوات ۱۱.۴۴) کے ساتھ موازنہ کرنے سے درج ذیل حاصل ہوگا۔[۲۲]

$$a_\ell = \frac{1}{2ik}\left(e^{2i\delta_\ell}-1\right)=\frac{1}{k}e^{i\delta_\ell}\sin(\delta_\ell) \tag{۱۱.۴۶}$$

اس طرح بالخصوص (مساوات ۱۱.۲۵)

$$f(\theta)=\frac{1}{k}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)e^{i\delta_\ell}\sin(\delta_\ell)P_\ell(\cos\theta) \tag{۱۱.۴۷}$$

اور درج ذیل ہوگا (مساوات ۱۱.۲۷)۔

$$\sigma=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{\ell=0}^{\infty}(2\ell+1)\sin^2(\delta_\ell) \tag{۱۱.۴۸}$$

اب بھی (جزوی موج حیطوں کی بجائے) پیّتی انتقال کے ساتھ کام کرنا بہتر ثابت ہوتا ہے، چونکہ ان سے طبعی مفہوم با آسانی سمجھے جا سکتے ہیں، اور ریاضی آسان ہوتی ہے؛ پیّتی انتقال، زاویائی معیار حرکت کے بقا کو بروئے کار لاتے ہوئے، (دو حقیقی اعداد پر مشتمل) مخلوط مقدار a_ℓ کی تخفیف ایک حقیقی عدد δ_ℓ میں کرتا ہے۔

---

[۲۲] اگرچہ میں نے تفاعل موج کا متقاربی روپ استعمال کرتے ہوئے a_ℓ اور δ_ℓ کے بیچ تعلق دریافت کیا، نتائج (مساوات ۱۱.۴۶) میں کوئی تخمین نہیں پایا جاتا۔ دونوں (r کے غیر تابع) مستقلات ہیں، اور متقاربی خطہ (جہاں ہینکل تفاعلات $e^{\pm ikr}/kr$ روپ اختیار کر چکے ہوں گے) میں δ_ℓ سے مراد پیّتی انتقال ہے۔

سوال ۱۱.۵: ایک ذرہ جس کی کمیت m اور توانائی E ہے درج ذیل مخفیہ پر بائیں سے آمدی ہے۔

$$V(x) = \begin{cases} 0, & (x < -a) \\ -V_0, & (-a \leq z \leq 0) \\ \infty, & (x > 0) \end{cases}$$

ا. آمدی موج Ae^{ikx} (جہاں $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ہے) لے کر منعکس موج تلاش کریں۔ جواب:

$$Ae^{-2ika}\left[\frac{k - ik'\cot(k'a)}{k + ik'\cot(k'a)}\right]e^{-ikx}, \qquad k' = \sqrt{2m(E+V_0)}/\hbar$$

ب. تصدیق کریں کہ منعکس موج کا حیطہ وہی ہے جو آمدی موج کا ہے۔

ج. بہت گہرے کنویں ($E \ll V_0$) کے لئے ہیّتی انتقال δ (مساوات ۱۱.۴۰) تلاش کریں۔

جواب: $\delta = -ka$

سوال ۱۱.۶: سخت کرہ بکھراو کے لئے جزوی موج ہیّت انتقال (δ_ℓ) کیا ہوں گے (مثال ۱۱.۳)؟

سوال ۱۱.۷: ڈیلٹا تفاعل خول (سوال ۱۱.۴) سے S موج ($\ell = 0$) جزوی موج ہیّت انتقال $\delta_0(k)$ تلاش کریں۔ فرض کریں کہ $r \to \infty$ پر ردای تفاعل موج $u(r)$ صفر کو پہنچتا ہے۔ جواب:

$$-\cot^{-1}\left[\cot(ka) + \frac{ka}{\beta\sin^2(ka)}\right], \qquad \beta \equiv \frac{2m\alpha a}{\hbar^2}$$

۱۱.۴ بارن تخمین

۱۱.۴.۱ مساوات شروڈنگر کی تکملی روپ

غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi + V\psi = E\psi \tag{۱۱.۴۹}$$

کو مختصراً

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = Q \tag{۱۱.۵۰}$$

لکھا جا سکتا ہے جہاں درج ذیل ہوں گے۔

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{اور} \quad Q \equiv \frac{2m}{\hbar^2}V\psi \tag{۱۱.۵۱}$$

اس کا روپ سر سری طور پر مساوات ہلم ہولٹز[۲۳] کی طرح ہے؛البتہ، غیر متجانس جزو (Q) خود ψ کا تابع ہے۔

فرض کریں ہم ایک تفاعل $G(\boldsymbol{r})$ دریافت کر پائیں جو ڈیلٹا تفاعلی "منبع" کے لئے مساوات ہلم ہولٹز کو مطمئن کرتا ہو۔

$$(\nabla^2 + k^2)G(\boldsymbol{r}) = \delta^3(\boldsymbol{r}) \tag{۱۱.۵۲}$$

ایسی صورت میں ہم ψ کو بطور تکمل:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \int G(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) Q(\boldsymbol{r}_0)\, \mathrm{d}^3\, \boldsymbol{r}_0 \tag{۱۱.۵۳}$$

لکھ سکتے ہیں۔ ہم با آسانی دکھا سکتے ہیں کہ یہ مساوات ۱۱.۵۰ کے روپ کی مساوات شروڈنگر کو مطمئن کرتا ہے۔

$$\begin{aligned}(\nabla^2 + k^2)\psi(\boldsymbol{r}) &= \int [(\nabla^2 + k^2)G(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)] Q(\boldsymbol{r}_0)\, \mathrm{d}^3\, \boldsymbol{r}_0 \\ &= \int \delta^3(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) Q(\boldsymbol{r}_0)\, \mathrm{d}^3\, \boldsymbol{r}_0 = Q(\boldsymbol{r})\end{aligned}$$

تفاعل $G(\boldsymbol{r})$ کو مساوات ہلم ہولٹز کا **تفاعل گرین**[۲۴] کہتے ہیں۔ (عمومی طور پر، خطی تفرقی مساوات کا تفاعل گرین ایک ڈیلٹا تفاعلی منبع کو "رد عمل" ظاہر کرتا ہے۔)

ہمارا پہلا کام، $G(\boldsymbol{r})$ کے لئے مساوات ۱۱.۵۲ کا حل تلاش کرنا ہے۔[۲۵] آسان ترین طریقہ یہ ہے کہ ہم فوریئر بدل لیں، جو تفرقی مساوات کو الجبرائی مساوات میں تبدیل کرتا ہے۔ درج ذیل لیں۔

$$G(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{r}} g(\boldsymbol{s})\, \mathrm{d}^3\, \boldsymbol{s} \tag{۱۱.۵۴}$$

تب

$$(\nabla^2 + k^2)G(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \Big[(\nabla^2 + k^2)e^{i\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{r}}\Big] g(\boldsymbol{s})\, \mathrm{d}^3\, \boldsymbol{s}$$

ہو گا۔ لیکن

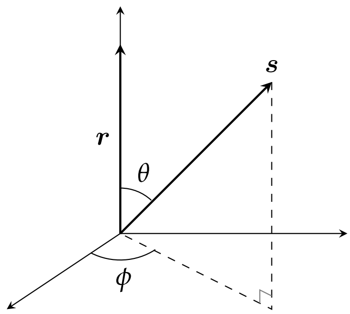
$$\nabla^2 e^{i\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{r}} = -s^2 e^{i\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{۱۱.۵۵}$$

---

[۲۳] Helmholtz equation

[۲۴] Green's function

[۲۵] خبر دار کرتا چلوں کہ اگلے دو صفحات میں آپ کا سامنا مشکل ترین تجزیے سے ہو گا، جس میں ارتفاعی تکمل شامل ہیں۔ آپ چاہیں تو سیدھا جواب دیکھیں (مساوات ۱۱.۶۵)۔



شکل ۱۱.۸: موزوں محدد برائے مساوات ۱۱.۵۸ کا تکمل۔

اور (مساوات ۲.۱۴۴ دیکھیں)

$$\delta^3(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{r}}\,\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{s} \tag{۱۱.۵۶}$$

ہیں، لہٰذا مساوات ۱۱.۵۲ درج ذیل کہے گی۔

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int(-s^2+k^2)e^{i\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{r}}g(\boldsymbol{s})\,\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{s} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{r}}\,\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{s}$$

یوں درج ذیل ہو گا۔[۲۶]

$$g(\boldsymbol{s}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}(k^2-s^2)} \tag{۱۱.۵۷}$$

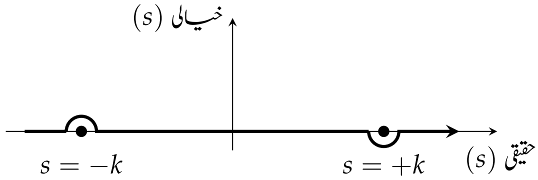
اس کو واپس مساوات ۱۱.۵۴ میں پُر کر کے درج ذیل ملتا ہے۔

$$G(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{r}}\frac{1}{(k^2-s^2)}\,\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{s} \tag{۱۱.۵۸}$$

اب، $\boldsymbol{s}$ تکمل کے نقطہ نظر سے $\boldsymbol{r}$ غیر متغیر ہے، لہٰذا ہم کروی محدد (s,θ,ϕ) کو یوں چن سکتے ہیں کہ $\boldsymbol{r}$ قطبی محور پر پایا جاتا ہو (شکل ۱۱.۸)۔ یوں $\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{r} = sr\cos\theta$ ہو گا، ϕ کا تکمل 2π جبکہ θ تکمل

$$\int_0^{\pi} e^{isr\cos\theta}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta = -\frac{e^{isr\cos\theta}}{isr}\bigg|_0^{\pi} = \frac{2\sin(sr)}{sr} \tag{۱۱.۵۹}$$

[۲۶] صاف ظاہر ہے کہ یہ کافی ہے، البتہ یہ لازم بھی ہے، جیسا آپ ان دونوں اجزاء کا ایک تکمل لکھ کر مسئلہ پلانشرال (مساوات ۲.۱۰۲) استعمال کر کے دیکھ سکتے ہیں۔



شکل ۱۱.۹: ارتفاعی تکمل (مساوات ۱۱.۶۱) میں ہمیں قطبین کے اطراف سے گزرنا ہو گا۔

ہو گا۔ یوں درج ذیل ہو گا۔

$$G(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(2\pi^2)}\frac{2}{r}\int_0^{\infty}\frac{s\sin(sr)}{k^2-s^2}\,\mathrm{d}s=\frac{1}{4\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{s\sin(sr)}{k^2-s^2}\,\mathrm{d}s \tag{۱۱.۶۰}$$

باقی تکمل اتنا آسان نہیں ہے۔ قوت نمائی علامتیت استعمال کر کے نصب نما کو اجزائے ضربی کے روپ میں لکھنا مددگار ثابت ہوتا ہے۔

$$\begin{aligned}G(\boldsymbol{r})&=\frac{i}{8\pi^2 r}\left\{\int_{-\infty}^{\infty}\frac{se^{isr}}{(s-k)(s+k)}\,\mathrm{d}s-\int_{-\infty}^{\infty}\frac{se^{-isr}}{(s-k)(s+k)}\,\mathrm{d}s\right\}\\&=\frac{i}{8\pi^2 r}(I_1-I_2)\end{aligned} \tag{۱۱.۶۱}$$

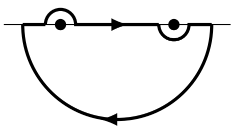
اگر z_0 خط ارتفاع کے اندر پایا جاتا ہو، تب **کوشی کلیہ تکمل**[27]:

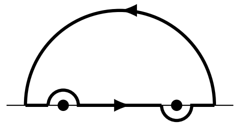
$$\oint\frac{f(z)}{(z-z_0)}\,\mathrm{d}z=2\pi i f(z_0) \tag{۱۱.۶۲}$$

استعمال کرتے ہوئے ان تکملات کی قیمت تلاش کی جا سکتی ہے، (بصورت دیگر تکمل صفر ہو گا)۔ یہاں حقیقی محور، جو $\pm k$ پر قطبی نادر نقاط کے بالکل اوپر سے گزرتا ہے، کی ہم راہ تکمل لیا جا رہا ہے۔ ہمیں قطبین کے اطراف سے گزرنا ہو گا؛ میں $-k$ کے اوپر سے $+k$ کے نیچے سے گزروں گا (شکل ۱۱.۹)۔ (آپ کوئی نیا راستہ منتخب کر سکتے ہیں؛ مثلاً، آپ ہر قطب کے گرد سات مرتبہ چکر کاٹ کر راہ منتخب کر سکتے ہیں، جس سے آپ کو مختلف تفاعل گرین حاصل ہو گا، لیکن جیسا میں کچھ ہی دیر میں دکھاؤں گا، یہ تمام قابل قبول ہوں گے۔)

مساوات ۱۱.۶۱ میں ہر ایک تکمل کے لئے ہمیں اس طرح "خط استوا کو بند" کرنا ہو گا کہ لامتناہی پر نصف دائرہ تکمل کی قیمت میں کوئی حصہ نہ ڈالتا ہو۔ تکمل I_1 کی صورت میں، جب s کا خیالی جزو بہت بڑا اور مثبت ہو تب جزو ضربی e^{isr} صفر کو پہنچتا ہے؛ اس تکمل کے لئے ہم دائرہ اوپر سے بند کرتے ہیں (شکل ۱۱.۱۰-الف)۔ خط ارتفاع

[27]Cauchy’sintegralformula


(ب)


(ا)

شکل ۱۰.۱۱: مساوات ۱۱.۶۳ اور مساوات ۱۱.۶۴ کے خط ارتفاع کو بند کرنا دکھایا گیا ہے۔

صرف $s = +k$ پر نادر نقطہ کو گھیرتا ہے، لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$I_1 = \oint \left[\frac{se^{isr}}{s+k}\right]\frac{1}{s-k}\,\mathrm{d}s = 2\pi i\left[\frac{se^{isr}}{s+k}\right]\bigg|_{s=k} = i\pi e^{ikr} \tag{۱۱.۶۳}$$

تکمل I_2 کی صورت میں، جب s کا خیالی جزو بہت بڑا اور منفی ہو تب جزو ضربی e^{-isr} صفر کو پہنچتا ہے لہٰذا ہم دائرے کو نیچے سے بند کرتے ہیں (شکل ۱۰.۱۱-ب)۔ اس مرتبہ خط ارتفاع $s = -k$ پر نادر نقطہ جو کو گھیرتا ہے (اور یہ گھڑی وار ہے، جس سے اضافی منفی علامت حاصل ہو گی)۔

$$I_2 = -\oint \left[\frac{se^{-isr}}{s-k}\right]\frac{1}{s+k}\,\mathrm{d}s = -2\pi i\left[\frac{se^{-isr}}{s-k}\right]\bigg|_{s=-k} = -i\pi e^{ikr} \tag{۱۱.۶۴}$$

ماخوذ:

$$G(\boldsymbol{r}) = \frac{i}{8\pi^2 r}\left[\left(i\pi e^{ikr}\right) - \left(-i\pi e^{ikr}\right)\right] = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r} \tag{۱۱.۶۵}$$

یہ مساوات ۱۱.۵۲ کا حل؛ مساوات ہلم ہولٹز کا تفاعل گرین ہے۔ (اگر آپ ریاضیاتی تجزیہ میں کہیں بھٹک گئے ہوں، بلاواسطہ تفرق سے نتیجے کی تصدیق کریں؛ سوال ۸.۱۱ دیکھیں۔) بلکہ، یہ مساوات ہلم ہولٹز کا تفاعل گرین ہے، چونکہ ہم $G(r)$ کے ساتھ ایسا کوئی بھی تفاعل $G_0(r)$ جمع کر سکتے ہیں جو متجانس ہلم ہولٹز مساوات کو مطمئن کرتا ہو؛

$$(\nabla^2 + k^2)G_0(r) = 0 \tag{۱۱.۶۶}$$

صاف ظاہر ہے کہ مساوات ۱۱.۵۲ کو $(G \;\; + \;\; G_0)$ بھی مطمئن کرتا ہے۔ اس ابہام کی وجہ، قطبین کے قریب سے گزرتے ہوئے، راہ کے انتخاب میں ابہام کی بنا پر ہے؛ ایک نئی راہ منتخب کرنا، ایک نئے تفاعل $G_0(\boldsymbol{r})$ کے انتخاب کے مترادف ہے۔

مساوات ۱۱.۵۳ پر دوبارہ نظر ڈالتے ہیں؛ مساوات شروڈنگر کا عمومی حل درج ذیل روپ کا ہو گا

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \psi_0(\boldsymbol{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\int \frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|}V(\boldsymbol{r}_0)\psi(\boldsymbol{r}_0)\,\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r}_0 \tag{۱۱.۶۷}$$

جہاں ψ_0 آزاد ذروی مساوات شروڈنگر کو مطمئن:

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_0 = 0 \tag{۱۱.۶۸}$$

کرتا ہے۔ مساوات ۱۱.۶۷ **مساوات شروڈنگر کا تکملی روپ**[۲۸] ہے، جو زیادہ معروف تفرقی روپ کے مکمل طور پر معادل ہے۔ پہلی نظر میں ایسا معلوم ہوتا ہے کہ (کسی بھی مخفیہ کے لئے) یہ مساوات شروڈنگر کا صریح حل ہے؛ جو ماننے والی بات نہیں ہے۔ دھوکا مت ہوں: دائیں ہاتھ تکمل کی علامت کے اندر ψ پایا جاتا ہے، لہٰذا حل جانے بغیر آپ تکمل حل نہیں کر سکتے۔ تاہم، تکملی روپ انتہائی طاقتور ثابت ہوتا ہے، اور جیسا ہم اگلے حصہ میں دیکھیں گے، یہ بالخصوص بکھراو مسائل کے لئے نہایت موزوں ہے۔

سوال ۱۱.۸: مساوات ۱۱.۶۵ کو مساوات ۱۱.۵۲ میں پُر کر کے دیکھیں کہ یہ اسے مطمئن کرتا ہے۔ اشارہ: $\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta^3(\boldsymbol{r})$

سوال ۱۱.۹: دکھائیں کہ V اور E کی مناسب قیمتوں کے لئے، مساوات شروڈنگر کے تکملی روپ کو ہائیڈروجن کا زمینی حال (مساوات ۴.۸۰) مطمئن کرتا ہے (یاد رہے کہ E منفی ہے، لہٰذا $k = i\kappa$ ہوگا، جہاں $\kappa \equiv \sqrt{-2mE}/\hbar$ ہے)۔

۱۱.۴.۲ بارن تخمین اول

فرض کریں $\boldsymbol{r}_0 = 0$ پر $V(\boldsymbol{r}_0)$ مقامی مخفیہ ہے (یعنی، کسی متناہی خطے کے باہر مخفیہ کی قیمت صفر ہو گی، جو مسئلہ بکھراو میں عموماً ہو گا)، اور ہم مرکز بکھراو سے دور نقاط پر $\psi(\boldsymbol{r})$ جاننا چاہتے ہیں۔ یوں مساوات ۱۱.۶۷ کے تکمل میں حصہ ڈالنے والے تمام نقاط کے لئے $|\boldsymbol{r}| \gg |\boldsymbol{r}_0|$ ہو گا، لہٰذا

$$|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0|^2 = r^2 + r_0^2 - 2\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}_0 \cong r^2\left(1 - 2\frac{\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}_0}{r^2}\right) \tag{۱۱.۶۹}$$

اور یوں درج ذیل ہو گا۔

$$|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0|^2 \cong r - \boldsymbol{a}_{\mathrm{r}}\cdot\boldsymbol{r}_0 \tag{۱۱.۷۰}$$

ہم

$$\boldsymbol{k} \equiv k\boldsymbol{a}_{\mathrm{r}} \tag{۱۱.۷۱}$$

لیتے ہیں، یوں

$$e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|} \cong e^{ikr}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_0} \tag{۱۱.۷۲}$$

---

[۲۸] integral form of Schrodinger equation

لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|} \cong \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_0} \tag{11.73}$$

(نصب نما میں ہم زیادہ بڑی تخمین، $r \cong |\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|$، کر سکتے ہیں؛ قوت نما میں ہمیں اگلا جزو رکھنا ہو گا۔ اگر آپ کو یقین نہیں، نصب نما کے پھیلاو میں اگلا جزو لکھنے کی کوشش کریں۔ ہم یہاں ایک چھوٹی مقدار (r_0/r) کی طاقت میں پھیلا کر، سب سے کم رتبی جزو کے علاوہ تمام کو رد کرتے ہیں۔)

بکھراو کی صورت میں، ہم

$$\psi_0(\boldsymbol{r}) = Ae^{ikz} \tag{11.74}$$

چاہتے ہیں جو آمدی مستوی موج کو ظاہر کرتا ہے۔ یوں، بڑے r کے لئے

$$\psi(\boldsymbol{r}) \cong Ae^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_0}V(\boldsymbol{r}_0)\psi(\boldsymbol{r}_0)\,\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r}_0 \tag{11.75}$$

ہو گا۔ یہ معیاری روپ (مساوات ۱۱.۱۲) ہے، جس سے ہم حیطہ بکھراو (درج ذیل) پڑھ سکتے ہیں۔

$$f(\theta,\phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2 A}\int e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_0}V(\boldsymbol{r}_0)\psi(\boldsymbol{r}_0)\,\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r}_0 \tag{11.76}$$

یہاں تک، یہ ٹھیک ہے۔ ہم اب **بارن تخمین**[29] بروئے کار لاتے ہیں: فرض کریں آمدی مستوی موج کو مخفیہ قابل ذکر تبدیل نہیں کرتا ہو؛ ایسی صورت میں

$$\psi(\boldsymbol{r}_0) \approx \psi_0(\boldsymbol{r}_0) = Ae^{ikz_0} = Ae^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}_0} \tag{11.77}$$

استعمال کرنا معقول ہو گا، جہاں تکمل کے اندر $\boldsymbol{k}'$ درج ذیل ہے۔

$$\boldsymbol{k}' \equiv k\boldsymbol{a}_z \tag{11.78}$$

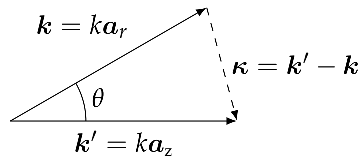
(مخفیہ V صفر ہونے کی صورت میں، یہ بالکل ٹھیک تفاعل موج ہو گا؛ یہ درحقیقت کمزور مخفیہ تخمین ہے۔[30]) یوں، بارن تخمین میں

$$f(\theta,\phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_0}V(\boldsymbol{r}_0)\,\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r}_0 \tag{11.79}$$

---

[29] Born approximation

[30] عمومی طور پر، جزوی موج تجزیہ کم توانائی کے آمدی ذرہ کے لئے مددگار ثابت ہوتا ہے، چونکہ ایسی صورت میں تسلسل کے چند ابتدائی اجزاء معنی خیز حصہ ڈالتے ہیں؛ جہاں آمدی توانائی کے لحاظ سے مخفیہ کمزور ہو، اور یوں موج کا جھکاو کم ہو، وہاں بارن تخمین کارآمد ہو گی۔



شکل ۱۱.۱۱: بارن تخمین میں دو تفاعل موج: $\boldsymbol{k}'$ آمدی رخ جبکہ $\boldsymbol{k}$ بکھراو رخ ہے۔

ہو گا۔ (ہو سکتا ہے کہ آپ $\boldsymbol{k}'$ اور $\boldsymbol{k}$ کی تعریفات بھول چکے ہوں؛ دونوں کی مقدار k ہے، لیکن اول الذکر کا رخ آمدی شعاع کے رخ، جبکہ موخر الذکر کا رخ کاشف کی طرف ہے؛ شکل ۱۱.۱۱ دیکھیں؛ اس عمل میں **انتقال معیار حرکت**[31] کو $\hbar(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$ ظاہر کرتا ہے۔)

بالخصوص، خطی بکھراو پر **کم توانائی** (لمبا طول موج) **بکھراو**[32] کے لئے قوت نمائی جزو ضربی بنیادی طور پر مستقل ہو گا، اور یوں تخمین بارن درج ذیل سادہ روپ اختیار کرتا ہے۔

$$f(\theta,\phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar}\int V(\boldsymbol{r})\,\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r}, \qquad \text{کم توانائی} \tag{۱۱.۸۰}$$

(میں نے یہاں $\boldsymbol{r}$ کے زیر نوشت میں کچھ نہیں لکھا، امید کی جاتی ہے کہ اس سے کوئی غلط فہمی پیدا نہیں ہو گی۔)

مثال ۱۱.۴: **کم توانائی نرم کرہ بکھراو**۔[33] درج ذیل مخفیہ لیں۔[34]

$$V(\boldsymbol{r}) = \begin{cases} V_0, & r \le a \\ 0, & r > a \end{cases} \tag{۱۱.۸۱}$$

کم توانائی بکھراو کی صورت میں (θ اور ϕ کا غیر تابع) حیطہ بکھراو

$$f(\theta,\phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2}V_0\left(\frac{4}{3}\pi a^3\right) \tag{۱۱.۸۲}$$

ہے، تفرقی عمودی تراش

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left|f\right|^2 \cong \left(\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2}\right)^2 \tag{۱۱.۸۳}$$

---

[31] momentumtransfer

[32] lowenergyscattering

[33] low-energysoft-spherescattering

[34] آپ سخت کرہ بکھراو $(V_0 = \infty)$ پر بارن تخمین کا اطلاق نہیں کر سکتے، چونکہ تکمل بے قابو بڑھتا ہے۔ آپ کو یاد رکھنا ہو گا کہ ہم مخفیہ کو کم زور تصور کرتے ہیں، جو خطی بکھراو میں تفاعل موج کو تبدیل نہیں کرتا۔ تاہم سخت کرہ اس کو Ae^{ikz} سے صفر کرتا ہے، جو بہت بڑی تبدیلی ہے۔

اور کل عمودی تراش درج ذیل ہو گا۔

$$\sigma \cong 4\pi \left(\frac{2mV_0 a^3}{3\hbar^2} \right)^2 \tag{11.84}$$

□

کروی تشاکلی مخففیہ [35] $V(\boldsymbol{r}) = V(r)$ کے لئے، جو ضروری نہیں کہ کم توانائی ہو، تخمین بارن سادہ روپ اختیار کرتا ہے۔ درج ذیل متعارف کرتے ہوئے

$$\boldsymbol{\kappa} \equiv \boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k} \tag{11.85}$$

$\boldsymbol{r}_0$ تکمل کے قطبی محور کو $\boldsymbol{\kappa}$ پر رکھتے ہوئے

$$(\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k}) \cdot \boldsymbol{r}_0 = \kappa r_0 \cos\theta_0 \tag{11.86}$$

ہو گا۔ یوں

$$f(\theta) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\kappa r_0 \cos\theta_0} V(r_0) r_0^2 \sin\theta_0 \, \mathrm{d}r_0 \, \mathrm{d}\theta_0 \, \mathrm{d}\phi_0 \tag{11.87}$$

ہو گا۔ متغیر ϕ_0 کے لحاظ سے تکمل 2π دیگا، اور θ_0 تکمل کو ہم پہلے دیکھ چکے ہیں (مساوات ۱۱.۵۹ دیکھیں)۔ یوں r کے زیر نوشت کو نہ لکھتے ہوئے درج ذیل رہ جاتا ہے۔

$$f(\theta) \cong -\frac{2m}{\hbar^2 \kappa} \int_0^\infty r V(r) \sin(\kappa r) \, \mathrm{d}r \qquad \text{(کروی تشاکل)} \tag{11.88}$$

f کی زاویائی تابعیت κ میں سموئی گئی ہے؛ شکل ۱۱.۱۱ کو دیکھ کر درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\kappa = 2k \sin(\theta/2) \tag{11.89}$$

مثال ۱۱.۵: **یوکاوا بکھراو۔** [36] **یوکاوا مخففیہ** [37] (جو جوہری مرکزہ کے اندر بندشی قوت کا ایک سادہ نمونہ پیش کرتا ہے) کا روپ درج ذیل ہے، جہاں β اور μ مستقلات ہیں۔

$$V(r) = \beta \frac{e^{-\mu r}}{r} \tag{11.90}$$

تخمین بارن درج ذیل دیگا۔

$$f(\theta) \cong -\frac{2m\beta}{\hbar^2 \kappa} \int_0^\infty e^{-\mu r} \sin(\kappa r) \, \mathrm{d}r = -\frac{2m\beta}{\hbar^2(\mu^2 + \kappa^2)} \tag{11.91}$$

---

[35] sphericalsymmetricalpotential
[36] Yukawascattering
[37] Yukawapotential

(آپ کو سوال ۱۱.۱۱ میں یہ تکمل حل کرنے کو کہا گیا ہے۔) □

مثال ۱۱.۶: **ردرفورڈ بکھراو۔**[۳۸] مخفیہ یوکاوا میں $\beta = q_1 q_2/4\pi\epsilon_0$ اور $\mu = 0$ پُر کرنے سے مخفیہ کولمب حاصل ہوتا ہے، جو دو نقطی بار کے برقی باہم عمل کو بیان کرتا ہے۔ ظاہر ہے کہ حیطہ بکھراو

$$f(\theta) \cong -\frac{2mq_1q_2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa^2} \tag{۱۱.۹۲}$$

ہو گا یا (مساوات ۱۱.۸۹ اور مساوات ۱۱.۵۱ استعمال کرتے ہوئے)

$$f(\theta) \cong -\frac{q_1q_2}{16\pi\epsilon_0 E\sin^2(\theta/2)} \tag{۱۱.۹۳}$$

ہو گا۔ اس کا مربع ہمیں تفریقی عمودی تراش

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left[\frac{q_1q_2}{16\pi\epsilon_0 E\sin^2(\theta/2)}\right]^2 \tag{۱۱.۹۴}$$

دیگا، جو ٹھیک کلیہ ردرفورڈ (مساوات ۱۱.۱۱) ہے۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ کولمب مخفیہ کے لئے کلاسیکی میکانیات، تخمین بارن، اور کوانٹائی نظریہ میدان ایک جیسا نتیجہ دیتے ہیں۔ ہم کہہ سکتے ہیں کہ کلیہ ردرفورڈ نہایت "مضبوط" کلیہ ہے۔ □

سوال ۱۱.۱۰: اختیاری توانائی کے لئے، بارن تخمین میں، نرم کرہ بکھراو کا حیطہ بکھراو حاصل کریں۔ دکھائیں کہ کم توانائی حد میں اس کی تخفیف مساوات ۱۱.۸۲ میں ہو گی۔

سوال ۱۱.۱۱: مساوات ۱۱.۹۱ میں تکمل کی قیمت تلاش کر کے، دائیں ہاتھ کے ریاضی فقرے کی تصدیق کریں۔

سوال ۱۱.۱۲: بارن تخمین میں، یوکاوا مخفیہ سے بکھراو کا کل عمودی تراش تلاش کریں۔ اپنے جواب کو E کا تفاعل لکھیں۔

سوال ۱۱.۱۳: درج ذیل اقدام سوال ۱۱.۴ کے مخفیہ کے لئے کریں۔

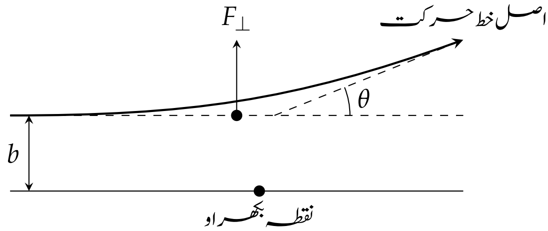
ا. کم توانائی تخمین بارن میں $f(\theta)$، $D(\theta)$، اور σ کا حساب لگائیں۔

ب. تخمین بارن میں اختیاری توانائیوں کے لئے $f(\theta)$ کا حساب لگائیں۔

ج. دکھائیں کہ آپ کے نتائج مناسب طریق میں سوال ۱۱.۴ کے جواب کے مطابق ہیں۔

---

[۳۸] Rutherford scattering



شکل ۱۱.۱۲: ذرہ کے منتقل معیار حرکت کا حساب کرتے ہوئے، تخمین ضرب کی ترکیب میں فرض کیا جاتا ہے کہ ذرہ بغیر مڑے سیدھی لکیر پر حرکت کیے جاتا ہے۔

۱۱.۴.۳ تسلسل بارن

تخمین بارن روح کے لحاظ سے کلاسیکی نظریہ بکھراو میں **تخمین ضرب**[۳۹] کی طرح ہے۔ ایک ذرے کو منتقل عرضی ضرب کا حساب کرنے کے لئے ہم تخمین ضرب میں فرض کرتے ہیں کہ ذرہ سیدھی لکیر پر حرکت کیے جاتا ہے (شکل ۱۱.۱۲)۔ ایسی صورت میں درج ذیل ہو گا۔

$$I = \int F_\perp \,\mathrm{d}t \qquad \text{(عرضی ضرب)} \tag{۱۱.۹۵}$$

اگر ذرہ زیادہ نہیں مڑے، تب ذرے کو منتقل معیار حرکت کی یہ ایک اچھی تخمین ہو گی، اور یوں زاویہ بکھراو درج ذیل ہو گا، جہاں p آمدی معیار حرکت ہے۔

$$\theta \cong \tan^{-1}(I/p) \tag{۱۱.۹۶}$$

اسے ہم "رتبہ اول" تخمین ضرب کہہ سکتے ہیں (ابتدائی، نہ مڑنے کی، صورت کو صفر رتبی کہیں گے)۔ اسی طرح، صفر رتبی تخمین بارن میں آمدی مستوی موج بغیر تبدیلی کے گزرے گی، اور ہم نے جو کچھ گزشتہ حصہ میں دیکھا در حقیقت اس کی اول رتبی تصحیح ہے۔ اسی تصور کو بار بار استعمال کر کے زیادہ بلند رتبی تصحیح کا تسلسل پیدا کیا جا سکتا ہے، اور توقع کی جا سکتی ہے کہ یہ بالکل ٹھیک جواب پر مرکوز ہو گا۔

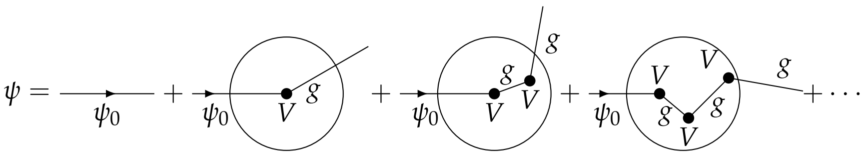
مساوات شروڈنگر کا تکملی روپ

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \psi_0(\boldsymbol{r}) + \int g(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)V(\boldsymbol{r}_0)\psi(\boldsymbol{r}_0)\,\mathrm{d}^3\,\boldsymbol{r}_0 \tag{۱۱.۹۷}$$

لکھا جا سکتا ہے، جہاں ψ_0 آمدی موج ہے،

$$g(\boldsymbol{r}) \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{ikr}}{r} \tag{۱۱.۹۸}$$

[۳۹] impulse approximation



شکل ۱۱.۱۳: بارن تسلسل (مساوات ۱۱.۱۰۱) کی نظریری مفہوم۔

تفاعل گرین (جس میں میں نے اپنی آسانی کے لئے جزو ضربی $2m/\hbar^2$ شامل کیا ہے)، اور V مخفیہ بکھراو ہے۔ درج ذیل (سادہ روپ) لکھا جا سکتا ہے۔

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi \tag{11.99}$$

فرض کریں ہم ψ کی اس ریاضی جملے کو لیکر انکمل کی علامت کے اندر لکھیں۔

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi_0 + \iint gVgV\psi \tag{11.100}$$

اس عمل کو بار بار دہرانے سے ہمیں ψ کا تسلسل:

$$\psi = \psi_0 + \int gV\psi_0 + \iint gVgV\psi_0 + \iiint gVgVgV\psi_0 + \dots \tag{11.101}$$

حاصل ہو گا۔ ہر منکمل میں صرف آمدی تفاعل موج ψ_0، اور اس کے علاوہ gV کے مزید زیادہ طاقتیں پائی جاتی ہیں۔ بارن کی تخمین اول اس تسلسل کو دوسرے جزو کے بعد ختم کرتی ہے، لیکن آپ دیکھ سکتے ہیں کہ بلند رتبی تصحیح کس طرح پیدا کی جائیں گی۔

بارن تسلسل کا خاکہ شکل ۱۱.۱۳ میں پیش کیا گیا ہے۔ صفر رتبی ψ پر مخفیہ کا کوئی اثر نہیں ہو گا؛ اول رتبی میں اسے ایک "چوٹ" پڑتی ہے، جس کے بعد یہ کسی نئے رخ چلتا ہے؛ دوم رتبی میں اسے ایک چوٹ پڑتی ہے جس کے بعد یہ ایک نئے مقام کو پہنچتا ہے جہاں اسے دوبارہ ایک چوٹ پڑتی ہے جس کے بعد یہ ایک نئی راہ پر چل نکلتا ہے، وغیرہ، وغیرہ۔ اسی بنا پر بعض اوقات تفاعل گرین کو **اشاعت کار**[۴۰] کہا جاتا ہے؛ جو ایک باہم عمل سے دوسرے باہم عمل تک خلل کی اشاعت کے بارے میں بتاتا ہے۔ تسلسل بارن اضافیتی کوانٹائی میکانیات کی **فائن من تشریح**[۴۱] کا سبب بنا جس میں **اشکال فائن من**[۴۲] میں جزو ضربی راس V اور اشاعت کار g کو ایک ساتھ جوڑ کر سب کچھ بیان کیا جاتا ہے۔

سوال ۱۱.۱۴: تخمین ضرب میں ردر فورڈ بکھراو کے لئے θ (بطور ٹکراؤ مقدار معلوم کا تفاعل) تلاش کریں۔ دکھائیں کہ، مناسب حدوں کے اندر، آپ کا نتیجہ بالکل ٹھیک ریاضی فقرے (سوال ۱.۱۱-الف) کے مطابق ہے۔

[۴۰] propagator
[۴۱] Feynman's formulation
[۴۲] Feynman diagram

سوال ۱۱.۱۵: بارن کی دوسری تخمین میں کم توانائی نرم کرہ بکھراو کے لئے حیطہ بکھراو تلاش کریں۔
جواب: $-(2mV_0a^3/3\hbar^2)[1-(4mV_0a^2/5\hbar^2)]$

اضافی سوالات برائے باب ۱۱

سوال ۱۱.۱۶: یک بُعدی مساوات شروڈنگر کے لئے تفاعل گرین تلاش کر کے (مساوات ۱۱.۶۷ کا مماثل) تکملی روپ تیار کریں۔ جواب:

$$\psi(x)=\psi_0(x)-\frac{im}{\hbar^2k}\int_{-\infty}^{\infty}e^{ik|x-x_0|}V(x_0)\psi(x_0)\,\mathrm{d}x_0 \tag{۱۱.۱۰۲}$$

سوال ۱۱.۱۷: یک بُعدی بکھراو کے لئے سوال ۱۱.۱۶ کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے (مبدا پر بغیر "اینٹوں کی دیوار" کی صورت میں وقفہ $-\infty<x<\infty$ پر) تخمین بارن تیار کریں۔ یعنی $\psi_0(x)=Ae^{ikx}$ منتخب کر کے، اور $\psi(x_0)\cong\psi_0(x_0)$ تصور کرتے ہوئے، تکمل کی قیمت تلاش کریں۔ دکھائیں کہ انعکاسی عددی سر درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$R\cong\left(\frac{m}{\hbar^2k}\right)^2\left|\int_{-\infty}^{\infty}e^{2ikx}V(x)\,\mathrm{d}x\right|^2 \tag{۱۱.۱۰۳}$$

سوال ۱۱.۱۸: ایک ڈیلٹا تفاعل (مساوات ۲.۱۱۴) اور ایک متناہی چوکور کنواں (مساوات ۲.۱۴۵) سے بکھراو کے لئے ترسیلی عددی سر $(T=1-R)$ کو یک بُعدی تخمین بارن (سوال ۱۱.۱۷) سے حاصل کریں۔ اپنے جوابات کا موازنہ ٹھیک جوابات (مساوات ۲.۱۴۱ اور مساوات ۲.۱۶۹) کے ساتھ کریں۔

سوال ۱۱.۱۹: آگے رخ حیطہ بکھراو کے خیالی جز اور کل عمودی تراش کے بیچ رشتہ پیش کرنے والا **مسئلہ بصریات**[۴۳]:

$$\sigma=\frac{4\pi}{k}Im(f(0)) \tag{۱۱.۱۰۴}$$

ثابت کریں۔ اشارہ: مساوات ۱۱.۴۷ اور مساوات ۱۱.۴۸ استعمال کریں۔

[۴۳] optical theorem

باب ۱۲

پس نوشت

مسیں توقع کرتا ہوں کہ آپ کوانٹائی میکانیات کو اب سمجھتے ہوں گے لہٰذا حصہ ۱.۲ مسیں کیا گیا سوال دوبارہ اٹھاتے ہیں: کوانٹائی میکانیات کے نتائج سے کیا مطلب اخذ کرنا چاہیے؟ تفاعل موج کے ساتھ وابستہ شماریاتی مفہوم کی عدم تعیّنیت، مسئلے کی جڑ ہے۔ تفاعل Ψ (یا کوانٹائی حال کہنا زیادہ بہتر ہو گا؛ جو مثال کے طور پر، چکر کار ہو سکتا ہے) پیمائش کا نتیجہ یکتا طور پر تعین نہیں کرتا؛ بلکہ ممکنہ نتائج کی شماریاتی تقسیم مہیا کرتا ہے۔ اس سے ایک اہم سوال کھڑا ہوتا ہے: کیا پیمائش سے قبل نظام یہ مخصوص خاصیت "حقیقتاً رکھتا تھا" (جسے **حقیقت پسند** نقطہ نظر کہتے ہیں) یا پیمائش کے عمل نے اس خاصیت کو "جنم" دیا، جو تفاعل موج کی شماریاتی پابندی کو مطمئن کرتا ہے (**تقلید پسند** نقطہ نظر)؛ یا ہم اس سوال کو ان بنیادوں پر رد کرتے ہیں کہ یہ ایک فرضی سوال ہے (**انکاری** نقطہ نظر)؟

حقیقت پسند کے نقطہ نظر سے کوانٹائی میکانیات نامکمل نظریہ ہے، چونکہ کوانٹائی میکانیات کی تمام فراہم کردہ معلومات (یعنی اس کا تفاعل موج) جانتے کے باوجود آپ اس کے خواص تعین نہیں کر سکتے ہیں۔ ظاہر ہے، کوانٹائی میکانیات کے دائرہ کار سے باہر، مزید معلومات ہو گی جو (Ψ کے ساتھ مل کر) طبیعی حقائق مکمل طور پر بیان کرے گی۔

تقلید پسند نقطہ نظر اس سے بھی زیادہ سنگین سوالات کھڑے کرتا ہے، چونکہ اگر پیمائشی عمل نظام کو ایک ایسی خاصیت اختیار کرنے پر مجبور کرتا ہو جو اس مسیں پہلے نہیں پائی جاتی تھی،[1] تب پیمائش ایک عجیب عمل ہو گا۔ ساتھ ہی یہ جانتے ہوئے کہ ایک پیمائش کے فوراً بعد دوسری پیمائش وہی نتیجہ دیتی ہے، ہمیں ماننا ہو گا کہ پیمائشی عمل تفاعل موج کو یوں **منہدم**[2] کرتا ہے، جو مساوات شروڈنگر کی تجویز کردہ ارتقا کے برعکس ہے۔

---

[1] مسیں یہاں کہنا چاہتا ہوں کہ، مثلاً، اگر ایک الیکٹران چکری حال $\chi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ مسیں ہو؛ اس کے زاویائی معیار حرکت کے x جزو کی پیمائش $\hbar/2$ یا (برابر احتمال کے ساتھ) $-\hbar/2$ دے سکتی ہے، تاہم پیمائش سے قبل S_x کی پوری طرح معین قیمت نہیں ہو گی۔

[2] collapses

$$e^- \longleftarrow \overset{\pi^0}{\bullet} \longrightarrow e^+$$

شکل ۱.۱۲: آئنشٹائن، پوڈلسکی و روزن تضاد کا بوہم انداز۔ ساکن π^0 کا تنزل الیکٹران اور ضد الیکٹران جوڑی میں ہوتا ہے۔

اس کی روشنی میں، ہم دیکھ سکتے ہیں کہ نسل در نسل ماہر طبیعیات انکاری سوچ کے پیچھے پناہ لینے پر کیوں مجبور ہوئے، اور اپنے شاگردوں کو نصیحت کرتے رہے کہ نظریے کی تصوراتی بنیادوں پر غور و فکر کر کے اپنا وقت ضائع نہ کریں۔

۱.۱۲ آئنشٹائن، پوڈلسکی و روزن تضاد

1935 میں آئنشٹائن، پوڈلسکی اور روزن نے مل کر **آئنشٹائن، پوڈلسکی و روزن تضاد**[3] پیش کیا، جس کا مقصد (خالصتاً نظریاتی بنیادوں پر) یہ ثابت کرنا تھا کہ صرف حقیقت پسندانہ نقطہ نظر درست ہو سکتا ہے۔ میں آئنشٹائن، پوڈلسکی و روزن تضاد کا ایک سادہ روپ، جو داؤد بوہم نے متعارف کیا، پر تبصرہ کرتا ہوں۔ تعدیلی **پائے میزون**[4] کی ایک الیکٹران اور ایک پروٹان میں تنزل:

$$\pi^0 \to e^- + e^+$$

پر غور کریں۔ ساکن پایون کی صورت میں الیکٹران اور پروٹان ایک دوسرے کے مخالف رخ جائیں گے (شکل ۱.۱۲)۔ پایون کا چکر صفر ہے، لہٰذا زاویائی معیار حرکت کے بقا کے تحت یہ الیکٹران اور ضد الیکٹران یک تا تشکیل:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow_-\downarrow_+ - \downarrow_-\uparrow_+) \tag{۱.۱۲}$$

میں ہوں گے۔ اگر الیکٹران ہم میدان میں پایا جائے، تو ضد الیکٹران لازماً خلاف میدان ہو گا، اور اسی طرح اگر الیکٹران خلاف میدان پایا جائے تو ضد الیکٹران ہم میدان ہو گا۔ کوانٹائی میکانیات آپ کو یہ بتانے سے قاصر ہے کہ کسی ایک پایون تحویل میں آپ کو کونسی جوڑی ملے گا، لیکن کوانٹائی میکانیات یہ ضرور بتا سکتی ہے کہ ان پیمائش کا ایک دوسرے کے ساتھ **باہمی رشتہ**[5] ہو گا، اور (اوسطاً) نصف وقت ایک قسم اور نصف وقت دوسری قسم کی جوڑیاں پیدا ہوں گے۔ اب فرض کریں، ہم ان الیکٹران اور ضد الیکٹران کو دور جانے دیں؛ عملی تجربے میں دس میٹر دور، یا، اصولی تجربہ میں دس نوری سال دور؛ اور اس کے بعد الیکٹران کے چکر کی پیمائش کریں۔ فرض کریں آپ کو ہم میدان ملتا ہے۔ آپ فوراً جان پائیں گے کہ بیس میٹر (یا بیس نوری سال) دور دوسرے شخص کو ضد الیکٹران خلاف میدان ملے گا، اگر وہ اس ضد الیکٹران پر پیمائش کرے۔

”حقیقت پسند“ نقطہ نظر سے اس میں کوئی حیرانی کی بات نہیں؛ پیدائش کے وقت سے ہی الیکٹران حقیقتاً ہم میدان اور ضد الیکٹران خلاف میدان تھے؛ ہاں کوانٹائی میکانیات اس بارے میں جاننے سے قاصر تھی۔

---

[3] EPRparadox
[4] pimeson
[5] correlated

تاہم، "تقلید پسند" نقطہ نظر کے تحت پیمائش سے قبل دونوں ذرات نہ ہم میدان اور نہ ہی خلاف میدان تھے؛ الیکٹران پر پیمائش تفاعل موج کو منہدم کرتی ہے جو بیس میٹر (یا بیس نوری سال) دور ضد الیکٹران کو فوراً خلاف میدان "بناتی" ہے۔ آئنسٹائن، پوڈلسکی اور روزن اس قسم کے فاصلاتی عمل کرنے والے عوامل میں یقین نہیں رکھتے تھے۔ انہوں نے تقلید پسند نقطہ نظر کو ناقابل قبول قرار دیا؛ چاہے کوانٹائی میکانیات جانتی ہو یا نہ جانتی ہو، الیکٹران اور ضد الیکٹران لازماً پوری طرح معین چکر کے حامل تھے۔

ان کی دلیل اس بنیادی مفروضہ پر کھڑی ہے کہ کوئی بھی اثر روشنی کی رفتار سے تیز سفر نہیں کر سکتا۔ ہم اسے اصول **مقامیت**[6] کہتے ہیں۔ آپ کو شبہ ہو سکتا ہے کہ تفاعل موج کے انہدام کی خبر کسی متناہی سمتی رفتار سے "سفر" کرتی ہے۔ تاہم ایسی صورت میں زاویائی معیار حرکت کی بقا مطمئن نہیں ہوگی، چونکہ ضد الیکٹران تک انہدام کی خبر پہنچنے سے پہلے اگر اس کے چکر کی پیمائش کی جائے تو دونوں ذرات ہم میدان پائے جانے کا احتمال پچاس فی صد ہو گا۔ آپ نظریے کے بارے میں جو بھی رائے رکھتے ہوں، تجربات سے ہمیں معلوم ہوا کہ دونوں کے چکر ہر صورت ایک دوسرے کے مخالف ہوتے ہیں؛ زاویائی معیار حرکت کی بقا ہر صورت برقرار رہتی ہے؛ ان چکر کا (خلاف) باہمی رشتہ ہر صورت برقرار رہتا ہے۔ ظاہر ہے تفاعل موج کا انہدام یک دم ہوتا ہے۔

سوال ۱.۱۲: **ہمبستہ حالات**[7] یکتا چکر تشکیل (مساوات ۱.۱۲) ہمبستہ حال کی ایک کلاسیکی مثال ہے؛ اس دو ذروی حال کو دو یک ذروی حالات کا مجموعہ نہیں لکھا جا سکتا ہے، لہٰذا اس کے بارے میں بات کرتے ہوئے، کسی ایک ذرے کے "حال" کی بات علیحدہ سے نہیں کی جا سکتی ہے۔ آپ گمان کر سکتے ہیں کہ شاید ہماری علامتیت کی بنا پر ایسا ہے، اور عین ممکن ہے کہ یک ذروی حالات کا کوئی خطی جوڑ اس نظام کو غیر ہمبستہ بنا سکے گا۔ درج ذیل مسئلے کا ثبوت پیش کریں۔

دو سطحی نظام $|\phi_a\rangle$ اور $|\phi_b\rangle$ پر غور کریں، جہاں $\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$ ہو۔ (مثلاً $|\phi_a\rangle$ ہم میدان اور $|\phi_b\rangle$ خلاف میدان کو ظاہر کر سکتا ہے۔) دو ذروی حال

$$\alpha|\phi_a(1)\rangle|\phi_b(2)\rangle + \beta|\phi_b(1)\rangle|\phi_a(2)\rangle$$

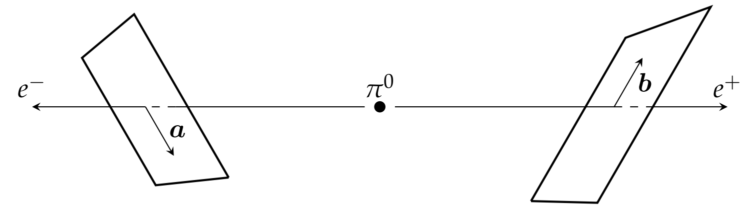
(جہاں $\alpha \neq 0$ اور $\beta \neq 0$ ہیں) کو کسی بھی یک ذروی حالات $|\psi_r\rangle$ اور $|\psi_s\rangle$ کا حاصل ضرب

$$|\psi_r(1)\rangle|\psi_s(2)\rangle$$

نہیں لکھا جا سکتا ہے۔

اشارہ: $|\psi_r\rangle$ اور $|\psi_s\rangle$ کو $|\phi_a\rangle$ اور $|\phi_b\rangle$ کے خطی جوڑ لکھیں۔

[6] locality
[7] entangledstates



شکل ۱۲.۲: آئنسٹائن، پوڈلسکی و روزن تضاد کا بل انداز۔ کاشف آزادانہ طور پر $\boldsymbol{a}$ اور $\boldsymbol{b}$ رخ سمت بند ہیں۔

۱۲.۲ مسئلہ بل

آئنسٹائن، پوڈلسکی اور روزن کو کوانٹائی میکانیات کی درستگی پر کوئی شک نہیں تھا، البتہ ان کا دعویٰ تھا کہ طبیعی حقیقت کو بیان کرنے کے لیے یہ ایک نامکمل نظریہ ہے: کسی بھی نظام کا حال پوری طرح جاننے کی خاطر Ψ کے ساتھ ساتھ مزید ایک مقدار، λ، درکار ہو گی۔ چونکہ فی الحال ہم نہیں جانتے کہ λ کو کس طرح ناپا یا حساب کے ذریعہ معلوم کیا جائے، لہٰذا ہم اسے "درپردہ متغیر"[۸] کہتے ہیں۔[۹] تاریخی طور پر کوانٹائی میکانیات کو سہارا دینے والے کئی درپردہ متغیر نظریات پیش کئے گئے، جو پیچیدہ ہونے کے ساتھ ساتھ نامعقول ثابت ہوئے۔ بہر حال سن 1964 تک اس پر کام کرنے کی وجہ نظر آتی تھی۔ تاہم اس سال بل نے ثابت کیا کہ درپردہ متغیر نظریہ اور کوانٹائی میکانیات ساتھ ساتھ نہیں چل سکتے ہیں۔

بل نے آئنسٹائن، پوڈلسکی، روزن اور بوہم تجربہ کو عمومی بنانے کی تجویز پیش کی: الیکٹران اور ضد الیکٹران کاشف کو ایک رخ رکھنے کی بجائے بل نے انہیں علیحدہ علیحدہ زاویوں پر رکھنے کی اجازت دی۔ پہلا کاشف اکائی سمتیہ $\boldsymbol{a}$ کے رخ الیکٹران چکر کا جزو ناپتا ہے، جبکہ دوسرا $\boldsymbol{b}$ رخ ضد الیکٹران کے چکر کا حصہ ناپتا ہے (شکل ۱۲.۲)۔ ہم اپنی آسانی کے لیے چکر کو $\hbar/2$ کی اکائیوں میں ناپتے ہیں؛ یوں کاشف کے رخ ہم میدان کی قیمت $+1$ اور خلاف میدان کی قیمت -1 ناپی جائے گی۔ کئی π^0 تنزل کے نتائج درج ذیل جدول میں پیش کئے گئے نتائج کی طرح ہو سکتے ہیں۔

الیکٹران	ضد الیکٹران	حاصل ضرب
$+1$	-1	-1
$+1$	$+1$	$+1$
-1	$+1$	-1
$+1$	-1	-1
-1	-1	$+1$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

[۸] hiddenvariable

[۹] درپردہ متغیر کوئی ایک عدد یا اعداد کا ذخیرہ ہو سکتا ہے؛ عین ممکن ہے کہ مستقبل کے کسی نظریے سے λ حاصل ہو گا، یا کسی وجہ کی بنا پر اس کا حساب ناممکن ہو سکتا ہے۔ میں صرف اتنا کہنا چاہتا ہوں کہ کوئی ایسی معلومات ہو گی؛ مثلاً پیمائش سے قبل، نظام پر ہم ممکنہ تجربہ کے نتائج کی فہرست۔

کاشف کے رخوں کی کسی ایک جوڑی کے لیے بل نے چکر کے ترچھا حاصل ضرب کی اوسط قیمت تلاش کرنے کی تجویز پیش کی، جسے ہم $P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})$ لکھتے ہیں۔ اگر کاشف متوازی ہوں، $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b}$، ہمیں اصل آئنشٹائن، پوڈلسکی، روزن و بوہم تشکیل حاصل ہو گا؛ ایسی صورت میں ایک ہم میدان اور دوسرا خلاف میدان ہو گا، لہٰذا حاصل ضرب ہر صورت -1 ہو گا، اور یوں اوسط کی قیمت بھی یہی ہو گی۔

$$P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{a}) = -1 \tag{۱۲.۲}$$

اسی طرح اگر کاشف ضد متوازی ہوں، $\boldsymbol{b} = -\boldsymbol{a}$، ہر حاصل ضرب $+1$ ہو گا، لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$P(\boldsymbol{a},-\boldsymbol{a}) = +1 \tag{۱۲.۳}$$

اختیاری سمت بندی کے لیے کوانٹائی میکانیات درج ذیل پیشگوئی کرتی ہے (سوال ۴.۵۰ دیکھیں)۔

$$P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) = -\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} \tag{۱۲.۴}$$

بل نے دریافت کیا کہ یہ نتیجہ کسی بھی درپردہ متغیر نظریہ کا ہم آہنگ نہیں ہو سکتا۔

اس کی دلیل حیرت کن حد تک سادہ ہے۔ فرض کریں الیکٹران و ضد الیکٹران نظام کے "مکمل" حال کو درپردہ متغیر (یا متغیرات) λ ظاہر کرتا ہے۔ (ایک پایون تنزل سے دوسرے پایون تنزل تک λ کی تبدیلی کو نہ ہم سمجھتے اور نہ ہی قابو کر سکتے ہیں۔) ساتھ ہی فرض کریں کہ الیکٹرانی پیمائش پر ضد الیکٹران کاشف کی سمت بندی $\boldsymbol{b}$ کا کوئی اثر نہیں پایا جاتا؛ یاد رہے کہ تجربہ گر الیکٹرانی پیمائش کے بعد ضد الیکٹران کاشف کا رخ منتخب کر سکتا ہے۔ ایسی صورت میں چونکہ ضد الیکٹران کاشف کا رخ منتخب کرنے سے پہلے ہی الیکٹران کی پیمائش کی جا چکی ہو گی لہٰذا اس پر $\boldsymbol{b}$ کی سمت کا کوئی اثر نہیں ہو سکتا۔ (یہ اصول مقامیت کا مفروضہ ہے۔) یوں الیکٹرانی پیمائش کوئی تفاعل $A(\boldsymbol{a},\lambda)$ اور ضد الیکٹرانی پیمائش کوئی دوسرا تفاعل $B(\boldsymbol{b},\lambda)$ دیگا۔ ان تفاعلات کی قیمتیں صرف ± 1 ہو سکتی ہیں۔

$$A(\boldsymbol{a},\lambda) = \pm 1; \qquad B(\boldsymbol{b},\lambda) = \pm 1 \tag{۱۲.۵}$$

جب کاشف متوازی ہوں، تمام λ کے لیے نتائج مکمل طور پر (غیر) باہمی رشتہ:

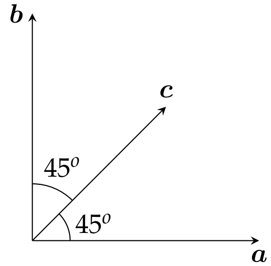
$$A(\boldsymbol{a},\lambda) = -B(\boldsymbol{a},\lambda) \tag{۱۲.۶}$$

ہوں گے۔

اب پیمائشوں کے حاصل ضرب کی اوسط قیمت درج ذیل ہو گی، جہاں $\rho(\lambda)$ درپردہ متغیر کی کثافت احتمال ہے۔

$$P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) = \int \rho(\lambda) A(\boldsymbol{a},\lambda) B(\boldsymbol{b},\lambda)\,\mathrm{d}\lambda \tag{۱۲.۷}$$

(کسی بھی کثافت احتمال کی طرح، یہ غیر منفی ہو گا، اور معمول زنی شرط $\int \rho(\lambda)\,\mathrm{d}\lambda = 1$ کو مطمئن کرے گا، لیکن اس کے علاوہ ہم $\rho(\lambda)$ کے بارے میں کچھ بھی فرض نہیں کرتے ہیں؛ درپردہ متغیر کے مختلف نظریات ρ کے لیے کافی مختلف تفاعلات پیش کر سکتے ہیں۔) مساوات ۱۲.۶ استعمال کرتے ہوئے ہم B کو خارج کرتے ہیں۔



شکل ۱۲.۳: کاشف کو یوں سمت بند کیا گیا ہے کہ بل عدم مساوات کی کوانٹائی خلاف ورزی ظاہر ہو۔

$$P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) = -\int \rho(\lambda) A(\boldsymbol{a},\lambda) A(\boldsymbol{b},\lambda)\,\mathrm{d}\lambda \tag{۱۲.۸}$$

اگر $\boldsymbol{c}$ کوئی تیسرا اکائی سمتیہ ہو تب

$$P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) - P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{c}) = -\int \rho(\lambda)\left[A(\boldsymbol{a},\lambda)A(\boldsymbol{b},\lambda) - A(\boldsymbol{a},\lambda)A(\boldsymbol{c},\lambda)\right]\mathrm{d}\lambda \tag{۱۲.۹}$$

ہو گا، اور چونکہ $[A(\boldsymbol{b},\lambda)]^2 = 1$ ہے لہٰذا

$$P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) - P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{c}) = -\int \rho(\lambda)\left[1 - A(\boldsymbol{b},\lambda)A(\boldsymbol{c},\lambda)\right] A(\boldsymbol{a},\lambda)A(\boldsymbol{b},\lambda)\,\mathrm{d}\lambda \tag{۱۲.۱۰}$$

ہو گا۔ تاہم مساوات ۱۲.۵ کے تحت $-1 \leq [A(\boldsymbol{a},\lambda)A(\boldsymbol{b},\lambda)] \leq +1$ ہے؛ مزید $\rho(\lambda)[1 - A(\boldsymbol{b},\lambda)A(\boldsymbol{c},\lambda)] \geq 0$ ہے، لہٰذا

$$\left|P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) - P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{c})\right| \leq \int \rho(\lambda)\left[1 - A(\boldsymbol{b},\lambda)A(\boldsymbol{c},\lambda)\right]\mathrm{d}\lambda \tag{۱۲.۱۱}$$

یا مختصراً

$$\left|P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b}) - P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{c})\right| \leq 1 + P(\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}) \tag{۱۲.۱۲}$$

ہو گا۔ یہ مشہور **بل عدم مساوات**[10] ہے۔ ہم نے درپردہ متغیرات کی تعداد یا خاصیت یا تقسیم ρ کے بارے میں کچھ بھی فرض نہیں کیا، لہٰذا بل عدم مساوات (مساوات ۱۲.۵ اور مساوات ۱۲.۶ کو مطمئن کرنے والے) ہر مقامی درپردہ متغیر نظریہ کے لیے کارآمد ہو گا۔

[10] Bellinequality

لیکن ہم بہت آسانی کے ساتھ دکھا سکتے ہیں کہ کوانٹائی میکانیات کی پیشگوئی (مساوات ۱۲.۴) اور بل عدم مساوات غیر ہم آہنگ ہیں۔ مثال کے طور پر، فرض کریں تینوں سمتیے ایک مستوی میں پائے جاتے ہیں، اور a ، b کے ساتھ c کا زاویہ $45°$ ہے (شکل ۱۲.۳)۔ ایسی صورت میں کوانٹائی میکانیات کہتی ہے

$$P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{b})=0,\quad P(\boldsymbol{a},\boldsymbol{c})=P(\boldsymbol{b},\boldsymbol{c})=-0.707$$

ہو گا، جبکہ بل عدم مساوات کہتی ہے

$$0.707 \not\leq 1-0.707=0.293$$

ہو گا، جو ایک دوسرے کے غیر ہم آہنگ نتائج ہیں۔

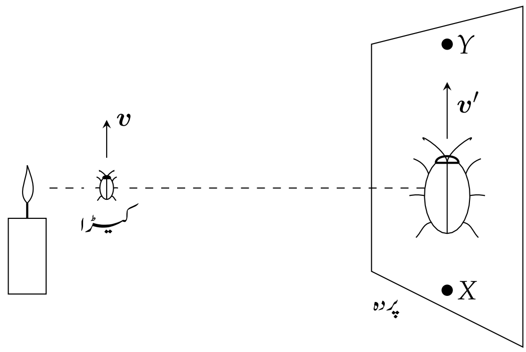
یوں ترمیم بل سے آئنسٹائن، پوڈلسکی و روزن تضاد ایک ایسی بات ثابت کرتا ہے جو اس کے مصنفین تصور بھی نہیں کر سکتے تھے۔ اگر وہ درست ہوں، تب کوانٹائی میکانیات صرف نامکمل نہیں بلکہ مکمل طور پر غلط بھی ہے۔ اس کے برعکس اگر کوانٹائی میکانیات درست ہو، تب کوئی درپردہ متغیر نظریہ ہمیں غیر مقامیت، جسے آئنسٹائن مضحکہ خیز سمجھتا تھا، سے نجات نہیں دلا سکتا۔ مزید، اب ہم ایک نہایت سادہ تجربے سے اس معاملے کو دفنا سکتے ہیں۔

بل عدم مساوات کو پرکھنے کے لیے ساٹھ اور ستر کی دہائیوں میں کئی تجربے کیے گئے، جن میں اسپکٹ، گرنگیر اور روجر کا کام قابل فخر ہے۔ ہمیں یہاں انکے تجربے کی تفصیل سے دلچسپی نہیں ہے (انہوں نے پایون تنزل کی بجائے دو نوریہ جوہری تحویل استعمال کیا)۔ یہ خدشہ دور کرنے کے لیے کہ الیکٹران کاشف کی سمت بندی کو کسی طرح ضد الیکٹران کاشف "جان پائے"، نوریہ کی روانگی کے بعد دونوں کی نیم بلا منصوبہ سمت بندی کی گئی۔ نتائج کوانٹائی میکانیات کی پیشگوئی کی عین مطابق، اور بل عدم مساوات کے غیر ہم آہنگ تھے۔[11]

ستم ظریفی کی بات ہے کہ کوانٹائی میکانیات کی تجرباتی تصدیق نے سائنسی برادری کو ہلا کر رکھ دیا۔ لیکن اس کی وجہ "حقیقت پسند سوچ" کا غلط ثابت ہونا نہیں تھا؛ عموماً سائنسدان کب کے اس حقیقت کو مان چکے تھے (اور جو ابھی بھی نہیں مانتے تھے، انکے لیے غیر مقامی درپردہ متغیر نظریات کا راستہ کھلا ہے، جن پر مسئلہ بل کا اطلاق نہیں ہوتا[12])۔ اصل صدمہ اس بات کا تھا کہ قدرت خود بنیادی طور پر غیر مقامی ہے۔ تفاعل موج کے یکدم انہدام کی صورت میں (اور غیر مقامیت یا متماثل ذرات کے لیے ضرورت تشاکلیت) ہمیشہ تقلید پسند نظریہ کی خاصیت رہی ہے، لیکن اسپکٹ تجربہ سے قبل اُمید کی جا سکتی تھی کہ کوانٹائی غیر مقامیت کسی طرح قائد و ضوابط کی غیر طبیعی پیداوار ہے، جس کے قابل کشف اثرات نہیں ہو سکتے۔ اس اُمید کو بھول جائیں، اور ہمیں فاصلہ پر یکدم عمل پر اعتراض پر نظر ثانی کرنی ہو گی۔

[11] مسئلہ بل میں اوسط استعمال ہوتے ہیں، اور ممکن ہے کہ اسپکٹ کے آلات خفیہ طور پر جانب دار ہوں، جو غیر نمائندہ نمونے منتخب کر کے اوسط کی غلط قیمت دیتے ہوں۔ 1989 میں مسئلہ بل کا بہتر نمونہ تجویز کیا گیا، جو صرف ایک پیمائش سے کوانٹائی پیشگوئی اور مقامی درپردہ متغیر کے بیچ تمیز کر سکتا ہے۔

[12] قسمت کی ایک عجیب کھیل ہے کہ آئنسٹائن، پوڈلسکی و روزن تضاد، جس نے حقیقت پسند سوچ کو ثابت کرنے کے لئے مقامیت فرض کی، نے مقامیت کو غلط ثابت کیا، اور حقیقت پسند سوچ کو غیر طے شدہ چھوڑا؛ اس نتیجے کو آئنسٹائن بالکل پسند نہ کرتے۔ زیادہ تر ماہر طبیعیات کا خیال ہے کہ مقامی حقیقت پسند سوچ نہ ہونے کی صورت میں حقیقت پسند سوچ بے کار ہے، اور اسی لئے غیر مقامی درپردہ متغیر نظریات کو اہمیت نہیں دی جاتی۔ اس کے باوجود بعض مصنفین، جن میں بل بھی شامل ہے، کہتے ہیں کہ پیمائشی آلات اور اس نظام جس کی پیمائش کی جا رہی ہو، کے بیچ تصوراتی فاصلے کو ایسے نظریے ختم کر سکتے ہیں، اور تفاعل موج کے انہدام کی قابل سمجھ وجہ پیش کر سکتے ہیں۔



شکل ۱۲.۴: پردہ پر کیڑے کا سایہ، روشنی کی رفتار c سے زیادہ رفتار v' سے حرکت کرتا ہے بشرطیکہ پردہ کافی دور ہو۔

ماہر طبیعیات روشنی سے زیادہ تیز رفتار اثر و رسوخ کو کیوں برداشت نہیں کر سکتے؟ آخر، کئی چیزیں روشنی سے زیادہ تیز رفتار سے حرکت کرتی ہیں۔ ایک موم بتی کے سامنے چلتے ہوئے کیڑے کا سامنے دیوار پر سائے کی رفتار دیوار تک فاصلے کے راست متناسب ہو گی؛ اصولاً آپ اس فاصلہ کو اتنا بڑھا سکتے ہیں کہ سائے کی رفتار روشنی سے زیادہ ہو (شکل ۱۲.۴)۔ تاہم، دیوار پر کسی ایک نقطہ سے دوسرے نقطہ تک سایہ نہ کوئی توانائی منتقل کر سکتا ہے اور نہ ہی کوئی خبر پہنچا سکتا ہے۔ نقطہ X پر ایک شخص ایسا کوئی عمل نہیں کر سکتا جو یہاں سے گزرتے ہوئے سائے کے ذریعہ نقطہ Y پر اثر انداز ہو۔

اس کے برعکس، روشنی سے زیادہ تیز حرکت کرنے والے سبھی اثر و رسوخ کے ناقابل قبول مضمرات پائے جاتے ہیں۔ خصوصی نظریہ اضافت میں ایسے جمودی چوکھٹ پائے جاتے ہیں جن میں اس طرح کا اشارہ وقت میں پیچھے جا سکے گا؛ یعنی سبب سے پہلے اثر رونما ہو گا؛ جس سے ناقابل قبول منطقی مسائل کھڑے ہوتے ہیں۔ (مثلاً، آپ اپنے نوزائیدہ دادا کو قتل کر سکتے ہیں، جو ایک بری بات ہے!) اب سوال یہ کھڑا ہوتا ہے کہ آیا روشنی سے تیز اثرات جن کی پیشگوئی کوانٹائی میکانیات کرتی ہے، اور جو اسپکٹ تجربے میں کشف ہوتے ہیں ان معنوں میں سببی ہیں، یا یہ (سائے کی حرکت کی طرح) غیر حقیقی ہیں جن پر فلسفیانہ اعتراضات نہیں لگائے جا سکتے؟

آئیں تجربہ بل پر غور کرتے ہیں۔ کیا الیکٹران کی پیمائش کا ضد الیکٹران کی پیمائش پر اثر ہو گا؟ یقیناً، اس کا اثر ہوتا ہے؛ ورنہ ہم مواد کے بیچ باہم رشتے کی وضاحت پیش کرنے سے قاصر ہوں گے۔ لیکن کیا الیکٹران کی پیمائش ضد الیکٹران کے کسی مخصوص نتیجے کا سبب ہے؟ اس لفظ کے عام مطلب کے نقطہ نظر سے ایسا نہیں ہوتا۔ الیکٹران کے کاشف پر مامور شخص اپنی پیمائش کے ذریعہ ضد الیکٹران کاشف پر مامور شخص کو اشارہ نہیں بھیج سکتا، چونکہ وہ اپنی پیمائش کے نتیجہ کو قابو نہیں کرتا (وہ الیکٹران کو ہم میدان ہونے پر مجبور نہیں کر سکتا، جیسا نقطہ X پر کیڑا کے سائے پر وہ شخص اثر انداز نہیں ہو سکتا)۔ ہاں الیکٹران کاشف پر مامور شخص پیمائش کرنے یا نہ کرنے کا فیصلہ کر سکتا ہے، لیکن ضد الیکٹران کاشف پر مامور شخص اپنی پیمائشی نتائج کو دیکھ کر یہ نہیں بتا سکتا کہ الیکٹران کی پیمائش کی گئی یا

نہیں، چونکہ دونوں کاشف کے نتائج پر علیحدہ علیحدہ غور کرنے سے مکمل بلا واسطہ مواد دیکھنے کو ملتا ہے۔ صرف بعد میں دونوں مواد کا ایک دوسرے کے ساتھ موازنہ کرنے سے ہمیں ان کے بیچ باہم رشتہ نظر آتا ہے۔ کسی دوسری جمودی چوکھٹ میں الیکٹران کی پیمائش سے قبل ضد الیکٹران کی پیمائش کی جائے گی، لیکن اس کے باوجود اس سے کوئی منطقی تضاد پیدا نہیں ہوتا؛ دکھایا گیا باہم رشتہ اس پر منحصر نہیں کہ ہم کہیں الیکٹران کی پیمائش ضد الیکٹران کی پیمائش پر اثر انداز ہوتی ہے یا ضد الیکٹران کی پیمائش الیکٹران کی پیمائش پر اثر انداز ہوتی ہے۔ یہ ایک نہایت نازک اور خوبصورت اثر ہے جو بلا واسطہ مواد کے بیچ باہم رشتہ کی صورت میں نظر آتا ہے۔

یوں، ہمیں دو مختلف اقسام کے اثرات کی بات کرنی ہوگی: "سببی" قسم، جو وصول کنندہ کی کسی طبعی خاصیت میں حقیقی تبدیلیاں پیدا کرتا ہے، جنہیں صرف ذیلی نظام پر تجرباتی پیمائش سے کشف کیا جا سکتا ہے، اور "غیر حقیقی" قسم جو توانائی یا معلومات کی ترسیل نہیں کرتا، اور جس کا واحد ثبوت دو علیحدہ ذیلی نظاموں کے مواد کے بیچ باہم رشتہ ہے؛ اس باہم رشتہ کو کسی بھی طرح کسی ایک ذیلی نظام میں تجربات کے نتائج کو دیکھ کر کشف نہیں کیا جا سکتا ہے۔ سببی اثرات روشنی کی رفتار سے تیز حرکت نہیں کر سکتے، جبکہ غیر حقیقی اثرات پر ایسی کوئی پابندی عائد نہیں۔ تفاعل موج کے انہدام سے وابستہ اثرات موخر الذکر قسم کے ہیں، جن کا روشنی سے تیز سفر کرنا حیران کن ضرور، لیکن تباہ کن نہیں۔

۱۲.۳ مسئلہ قلمیہ

کوانٹائی پیمائش، اس لحاظ سے عام طور پر **تباہ کن** ہوتی ہیں، کہ یہ نظام کے حال کو تبدیل کرتی ہیں۔ یہی تجربہ گاہ میں اصول عدم یقینیت کو یقینی بناتا ہے۔ ہم اصل حال کے کئی متماثل نقل (**قلمیہ**[۱۳]) بنا کر، اصل نظام کو چھوئے بغیر، کیوں ان کی پیمائش نہیں کرتے۔ ایسا کرنا ممکن نہیں ہے۔ جس دن آپ قلمیہ بنانے والا **نقل گیر آلہ**[۱۴] بنا پائیں، اس دن کوانٹائی میکانیات کو خدا حافظ کہنا ہوگا۔

مثال کے طور پر، یوں آئنسٹائن، پوڈلسکی، روزن اور بوہم تجربہ کے ذریعہ روشنی سے تیز رفتار پر خبر بھیجنا ممکن ہوگا۔ فرض کریں ضد الیکٹران کاشف چلانے والا شخص "ہاں" یا "نہیں" کا خبر ترسیل کرتا ہے۔ "ہاں" کا خبر ہونے کی صورت میں بھیجنے والا (ضد الیکٹران کا) S_z ناپتا ہے۔ یہ جاننے کی ضرورت نہیں کہ پیمائشی نتیجہ کیا ہے؛ صرف اتنا ضروری ہے کہ پیمائش کی جائے؛ یوں الیکٹران کسی غیر مبہم حال $\uparrow$ یا $\downarrow$ میں ہوگا (جس کا جاننا غیر اہم ہے)۔ خبر وصول کنندہ جلدی سے الیکٹران کے دس لاکھ قلمیہ تیار کر کے، ہر ایک پر S_z ناپتا ہے۔ اگر تمام کا ایک ہی جواب ہو (جواب کیا ہے؟ یہ جاننا ضروری نہیں)، ہم یقین سے کہہ سکیں گے کہ الیکٹران کی پیمائش کی گئی، لہٰذا خبر "ہاں" ہوگا۔ اگر نصف الیکٹران ہم میدان، اور نصف خلاف میدان ہوں، تب یقیناً الیکٹران کی پیمائش نہیں کی گئی، اور "نہیں" خبر ہوگا۔

لیکن 1982 میں ووٹرز، زورک اور ڈائکز نے ثابت کیا کہ ایسا نقل گیر آلہ نہیں بنایا جا سکتا جو کوانٹائی متماثل ذرات پیدا کرتا ہو۔ ہم چاہیں گے کہ یہ آلہ حال $|\psi\rangle$ میں ایک ذرہ (جس کا نقل بنانا مقصود ہو) اور حال $|X\rangle$

[۱۳] clones
[۱۴] photocopier

میں ایک اضافی ذرہ ("صاف" کاغذ) لے کر حال $|\psi\rangle$ میں دو ذرات (اصل اور نقل):

$$|\psi\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi\rangle|\psi\rangle \tag{۱۲.۱۳}$$

دیتا ہو۔ فرض کریں ہم ایسا آلہ بنانے میں کامیاب ہوتے ہیں جو حال $|\psi_1\rangle$ کا قلمیہ تیار کرتا ہو:

$$|\psi_1\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi_1\rangle|\psi_1\rangle \tag{۱۲.۱۴}$$

اور جو $|\psi_2\rangle$ کے لئے بھی کارآمد ہو:

$$|\psi_2\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi_2\rangle|\psi_2\rangle \tag{۱۲.۱۵}$$

(مثال کے طور پر، اگر یہ ذرہ ایک الیکٹران ہو، تب $|\psi_1\rangle$ اور $|\psi_2\rangle$ ہم میدان اور خلاف میدان ہو سکتے ہیں)۔ یہاں تک کوئی مسئلہ پیدا نہیں ہوتا۔ یہ دکھانا ہو گا کہ ان کے خطی جوڑ $|\psi\rangle = \alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle$ کی صورت میں کیا ہو گا؟ ظاہر ہے ایسی صورت میں

$$|\psi\rangle|X\rangle \rightarrow \alpha|\psi_1\rangle|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle|\psi_2\rangle \tag{۱۲.۱۶}$$

ہو گا،[15] جو ہم بالکل نہیں چاہتے۔ ہم درج ذیل چاہتے تھے۔

$$\begin{aligned}|\psi\rangle|X\rangle \rightarrow |\psi\rangle|\psi\rangle &= [\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle][\alpha|\psi_1\rangle + \beta|\psi_2\rangle]\\ &= \alpha^2|\psi_1\rangle|\psi_1\rangle + \beta^2|\psi_2\rangle|\psi_2\rangle + \alpha\beta[|\psi_1\rangle|\psi_2\rangle + |\psi_2\rangle|\psi_1\rangle]\end{aligned} \tag{۱۲.۱۷}$$

آپ ہم میدان الیکٹران اور خلاف میدان الیکٹران کے قلمیہ بنانے کا آلہ بنا سکتے ہیں، لیکن وہ کسی بھی غیر مہمل خطی جوڑ کی صورت میں ناکامی کا شکار ہو گا۔ یہ بالکل ایسا ہو گا جیسا نقل گیر آلہ افقی لکیروں اور انتصابی لکیروں کی نقل خوش اسلوبی سے کرتا ہو لیکن وتری لکیروں کو مکمل طور پر بگاڑتا ہو۔

۱۲.۴ شروڈنگر کی بلی

کوانٹائی میکانیات میں پیمائش کا عمل ایک شرارتی کردار ادا کرتا ہے: یہیں پر عدم تعیّنیت، غیر مقامیت، تفاعل موج کا انہدام، اور باقی تمام تصوراتی مشکلات رونما ہوتی ہیں۔ پیمائش کی غیر موجودگی میں، مساوات شروڈنگر کے تحت، تفاعل موج اطمینان اور تعیینی طریقے سے ارتقا کرتا ہے، اور کوانٹائی میکانیات کسی بھی سادہ نظریہ میدان کی طرح نظر آتی ہے (جو کلاسیکی برقی حرکیات سے بہت سادہ ہو گی، چونکہ دو میدان ($\boldsymbol{E}$ اور $\boldsymbol{B}$) کے بجائے اس میں ایک میدان (ψ) پایا جاتا ہے، اور جو غیر سمتی ہے)۔ یہ پیمائش کا عجیب و غریب کردار عمل ہی ہے، جو کوانٹائی میکانیات کو سمجھ سے باہر خواص سے نوازتا ہے۔ پیمائش در حقیقت ہے کیا؟ اسے کیا دیگر طبیعی عوامل سے منفرد بناتا ہے؟[16] اور ہم کس طرح جان سکتے ہیں کہ پیمائش کی گئی؟

---

[15] ہم فرض کر رہے ہیں کہ حال $|\psi\rangle$ پر آلہ خطی عمل کرتا ہے؛ ہونا بھی ایسا ہی چاہیے، چونکہ تابع وقت مساوات شروڈنگر (جس کے تحت یہ عمل ہو گا) خطی ہے۔

[16] یہ طبقہ سوچ اس امتیاز کو رد کرتا ہے، اور کہتا ہے کہ پیمائشی آلہ اور نظام کو ایک ہی بڑا تفاعل موج ظاہر کرے، جو مساوات شروڈنگر کے تحت ارتقا کرتا ہو۔ ایسے نظریات میں تفاعل موج منہدم نہیں ہوتا، تاہم ہم انفرادی وقوعہ کو بیان کرنے سے قاصر ہوں گے؛ اس (نقطہ نظر میں) کوانٹائی میکانیات صرف یکساں تیار کردہ فرقہ کے نظاموں پر قابل اطلاق ہو گا۔

شروڈنگر نے یہ بنیادی سوال (اپنے مشہور) **تضاد بلی**[۱۷] کے مفروضے کی صورت میں پوچھا:

ایک بلی کو فولاد کے ایک بند ڈبے میں بند کیا جاتا ہے؛ اس ڈبے میں ایک **گائگر گنتی کار**[۱۸] اور کسی تابکار مادے کی اتنی چھوٹی مقدار رکھی جاتی ہے جس میں ایک گھنٹہ میں صرف ایک جوہر کے تنزل کا امکان ہو، تاہم یہ بھی ممکن ہے کہ کوئی جوہر تنزل نہ ہو۔ تنزل کی صورت میں گنتی کار اس ڈبے میں زہریلی گیس چھوڑتا ہے۔ ایک گھنٹہ گزرنے کے بعد ہم کہہ سکتے ہیں کہ تنزل نہ ہونے کی صورت میں یہ بلی زندہ ہو گی۔ پہلا تنزل اس کو زہر سے مار دیتا۔ اس مکمل نظام کا تفاعل موج، اس حقیقت کو ظاہر کرنے کے لیے، زندہ اور مردہ بلی کے برابر حصوں پر مشتمل ہو گا۔

ایک گھنٹہ بعد، بلی کا تفاعل موج درج ذیل روپ کا ہو گا۔

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{\text{زندہ}} + \psi_{\text{مردہ}}\right) \tag{۱۲.۱۸}$$

یہ بلی نہ تو زندہ اور نہ ہی مردہ ہے، بلکہ پیمائش سے پہلے یہ ان دونوں کا ایک خطی جوڑ ہو گا۔ کھڑکی سے اندر دیکھ کر بلی کا حال جاننے کو پیمائش تصور کیا جائے گا۔ آپ کا دیکھنے کا عمل بلی کو زندہ یا مردہ ہونے پر مجبور کرتا ہے۔ ایسی صورت میں اگر بلی مردہ پائی جائے، تو یقیناً اس کے ذمہ دار آپ ہی ہیں، چونکہ آپ نے کھڑکی سے دیکھ کر اسے قتل کیا۔

شروڈنگر اس تمام کو ایک بکواس سے زیادہ نہیں سمجھتا تھا، اور میرے خیال ہے زیادہ تر ماہر طبیعیات ان کے ساتھ متفق ہیں۔ کلاں بین اجسام کا دو (واضح طور پر) مختلف حالات کے ایک خطی جوڑ کی صورت میں ہونے کا تصور بے معنی ہے۔ ایک الیکٹران ہم میدان اور خلاف میدان کا خطی جوڑ ہو سکتا ہے، لیکن ایک بلی زندہ اور مردہ کی خطی جوڑ نہیں ہو سکتی۔ اس کو کوانٹائی میکانیات کی تقلید پسند تشریح کے ساتھ کس طرح ہم آہنگ بنایا جا سکتا ہے؟

شماریاتی مفہوم کے لحاظ سے مقبول ترین جواب یہ ہے کہ گنتی کار کے گنتی کا عمل "پیمائش" ہو گا، نہ کہ کھڑکی میں سے انسانی مشاہدہ۔ پیمائش وہ عمل ہے جو "کلاں بین" نظام (جو یہاں گنتی کار ہے) پر اثر انداز ہوتا ہے۔ پیمائش کا عمل اس لمحہ پر رونما ہو گا جب خورد بین نظام (جسے کوانٹائی میکانیات کے قوانین بیان کرتا ہے) کلاں بین نظام (جسے کلاسیکی میکانیات کے قواعد بیان کرتے ہیں) کے ساتھ اس طرح باہم عمل کرے کہ دائمی تبدیلی رونما ہو۔ کلاں بین نظام خود منفرد حالات کے خطی جوڑ کا مکین نہیں ہو سکتا۔[۱۹]

---

[۱۷] catparadox

[۱۸] Geigercounter

[۱۹] یقیناً، کلاں بین نظام کو بھی حتماً کوانٹائی میکانیات کے قواعد بیان کرتے ہیں۔ پہلی مثال میں تفاعل موج انفرادی بنیادی ذرات کو بیان کرتے ہیں؛ کلاں بین نظام کا تفاعل موج ان 10^{23} انفرادی ذرات کے تفاعلات موج سے بنے گا جو مل کر نظام بناتے ہیں۔ میرا خیال ہے کہ بڑے اعداد کی شماریات میں کہیں ذکر کیا گیا ہے کہ کلاں بین خطی جوڑ کا ہونا انتہائی غیر محتمل ہے۔ اگر آپ کسی طرح مقصور سادہ رقاص کو (مثلاً) کلاں بین منفرد کوانٹائی حالات کے خطی جوڑ میں لائیں، وہ، تقصیری وقت سے بہت کم وقت میں ایک سادہ کلاسیکی حال میں واپس آجائے گا۔ اس مظہر کو **ختمیت اتساق** (decoherence) کہتے ہیں۔

۱۲.۵ کوانٹائی زینو تضاد

اس عجیب قصے کی خاص بات تفاعل موج کا انہدام ہے۔ ایک پیمائش کے فوراً بعد دوسری پیمائش سے اسی نتیجے کے حصول کی خاطر، خالصتاً نظریاتی بنیادوں پر، اسے متعارف کیا گیا تھا۔ یقیناً اس دور رس اصول موضوعہ کے قابل مشاہدہ اثرات بھی ہوں گے۔ 1977 میں مسرا اور سدرشان نے تفاعلی موج کے انہدام کا ایک ڈرامائی تجرباتی مظاہرہ تجویز کیا جسے انہوں نے **کوانٹائی زینو اثر**[20] کا نام دیا۔ ان کا تصور یہ تھا کہ ایک غیر مستحکم نظام (مثلاً، ہیجان حال میں ایک جوہر) کو بار بار پیمائشی عمل سے گزارا جائے۔ ہر ایک مشاہدہ تفاعل موج کو منہدم کر کے گھڑی کو دوبارہ صفر سے چالو کرے گا، اور یوں زیریں حال میں متوقع تحویل کو غیر معینہ مدت تک روکا جا سکتا ہے۔[21]

فرض کریں ایک نظام ہیجان حال ψ_2 سے آغاز کرتا ہے، اور زمینی حال ψ_1 میں تحویل کے لیے اس کا قدرتی عرصہ حیات τ ہے۔ عام طور پر τ سے کافی کم وقتوں کے لیے، تحویل کا احتمال وقت t کا راست متناسب ہو گا (مساوات ۹.۴۲ دیکھیں)؛ حقیقت میں چونکہ تحویلی شرح $1/\tau$ ہے لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$P_{2\to1} = \frac{t}{\tau} \tag{۱۲.۱۹}$$

وقت t پر پیمائش کرنے کی صورت میں، نظام کا بالائی حال میں ہونے کا احتمال درج ذیل ہو گا۔

$$P_2(t) = 1 - \frac{t}{\tau} \tag{۱۲.۲۰}$$

فرض کریں ہم نظام کو بالائی حال میں ہی پاتے ہیں۔ ایسی صورت میں تفاعل موج واپس ψ_2 کو منہدم ہو گا، اور پورا عمل دوبارہ نئے سرے سے شروع ہو گا۔ اگر ہم وقت $2t$ پر دوسری پیمائش کریں، نظام کا بالائی حال میں اب بھی ہونے کا احتمال

$$\left(1 - \frac{t}{\tau}\right)^2 \approx 1 - \frac{2t}{\tau} \tag{۱۲.۲۱}$$

ہو گا، جو t پر پہلی پیمائش نہ کرنے کی صورت میں بھی ہوتا۔ سادہ سوچ رکھنے والے یہی توقع کرتے؛ اگر ایسا ہی ہوتا، نظام کا بار بار مشاہدہ کرنے سے کوئی فائدہ نہیں ہوتا، اور کوانٹائی زینو اثر نہیں ہوتا۔

تاہم انتہائی کم وقت کی صورت میں تحویلی احتمال وقت t کے بجائے t^2 کا راست متناسب ہو گا (مساوات ۹.۳۹ دیکھیں)۔[22]

$$P_{2\to1} = \alpha t^2 \tag{۱۲.۲۲}$$

---

[20]quantumZenoeffect

[21]اس اثر کا زینو کے ساتھ کوئی تعلق نہیں، تاہم یہ اس پرانی کہاوت کی یاد دلاتی ہے کہ "دودھ اس لمحے ابھل کر گرتا ہے جس لمحہ آپ اسے دیکھنا بند کرتے ہیں"، لہٰذا اسے بعض اوقات **نگاہ تلے برتن مظہر** watchedpotphenomenon پکارا جاتا ہے۔

[22]خطی تابعیت وقت کی بحث میں ہم نے مساوات ۹.۳۹ میں تفاعل $\sin^2(\Omega t/2)/\Omega^2$ کو نوکیلی سوزن تصور کیا۔ تاہم، اس "سوزن" کے عرض کا رتبہ $\Delta\omega = 4\pi/t$ ہے، اور انتہائی کم t کے لئے یہ تخمین ناکارہ ہو گی، اور تکمل $(t^2/4)\int \rho(\omega)\,\mathrm{d}\omega$ ہو جائے گا۔

ایسی صورت میں دو پیمائشوں کے بعد بھی نظام کا بالائی حال میں ہونے کا احتمال

$$\left(1-\alpha t^2\right)^2 \approx 1-2\alpha t^2 \tag{۱۲.۲۳}$$

ہو گا، جبکہ پہلی پیمائش نہ کرنے کی صورت میں اب احتمال درج ذیل ہوتا۔

$$1-\alpha(2t)^2 \approx 1-4\alpha t^2 \tag{۱۲.۲۴}$$

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ وقت t گزرنے کے بعد نظام کے مشاہدہ کی بنا پر زیریں حال میں تحویل کا احتمال کم ہوا ہے!

یقیناً، $t=0$ سے لیکر $t=T$ تک n برابر وقفوں $(T/n, 2T/n, 3T/n, \ldots, T)$ پر نظام کا مشاہدہ کرنے کی وجہ سے، اس دورانیہ کے آخر میں نظام کا (اب بھی) بالائی حال میں پائے جانے کا احتمال

$$\left(1-\alpha(T/n)^2\right)^n \approx 1-\frac{\alpha}{n}T^2 \tag{۱۲.۲۵}$$

ہو گا، جو $n \to \infty$ کی حد میں 1 تک پہنچتا ہے: ایک غیر مستحکم نظام جس کا مسلسل مشاہدہ کیا جائے کبھی بھی تحویل نہیں ہو گا! بعض مصنفین اس ماخوذ سے اتفاق نہیں کرتے، اور ان کے نزدیک یہ تفاعل موج کے انہدام کا غیر درست ہونے کا ثبوت ہے۔ تاہم، ان کے دلائل "مشاہدہ" کے مفہوم کی غلط تشریح پر مبنی ہے۔ اگر **بلبلا خانہ**[۲۳] میں ایک ذرے کی راہ کو "مسلسل مشاہدہ" قرار دے دیا جائے، تب یہ بالکل درست ہوں گے، چونکہ ایسے ذرات یقیناً تحویل ہوتے ہیں (درحقیقت، ان کے عرصہ حیات پر کاشف کا قابل پیمائش اثر نہیں پایا جاتا)۔ لیکن ایسا ذرہ خانے کے اندر جوہروں کے ساتھ خدوخال باہم عمل کرتا ہے، جبکہ کوانٹائی زینو اثر پیدا ہونے کے لیے ضروری ہے کہ یکے بعد دیگر پیمائشوں کے بیچ وقفہ اتنا کم ہو کہ نظام t^2 طریق میں ہو۔

ہم دیکھتے ہیں کہ، از خود تحویل کے لئے یہ تجربہ عملاً ممکن نہیں، تاہم **امالی**[۲۴] تحویل کے لئے ممکن ہے، اور نتائج کا نظریاتی پیشگوئی کے ساتھ مکمل اتفاق پایا جاتا ہے۔ بدقسمتی سے یہ تجربہ تفاعل موج کے انہدام کا حتمی ثبوت پیش نہیں کرتا؛ اس مشاہدہ کیے اثر کے دیگر وجوہات بھی دئے جا سکتے ہیں۔

میں نے اس کتاب میں ایک ہم آہنگ اور بلا تضاد کہانی پیش کرنے کی کوشش کی: تفاعل موج (Ψ) کسی ذرے (یا نظام) کا حال ظاہر کرتا ہے؛ عمومی طور پر ذرات، اس وقت تک، کسی مخصوص حر کی خاصیت (مقام، معیار حرکت، توانائی، زاویائی معیار حرکت، وغیرہ) کے حامل نہیں ہوتے، جب تک پیمائشی عمل مداخلت نہ کرے؛ کسی ایک تجربہ میں حاصل مخصوص قیمت کا احتمال Ψ کی شماریاتی مفہوم تعین کرتا ہے؛ پیمائشی عمل سے تفاعل موج منہدم ہوتا ہے، جس کی بنا پر فوراً دوسری پیمائش لازماً وہی نتیجہ دیگی۔ دیگر تشریحات، مثلاً، غیر مقامی درپردہ متغیر نظریات، "متعدد کائنات" کا تصور، "بلا تضاد تاریخیں،" فرقہ نمونے، وغیرہ بھی پائے جاتے ہیں، لیکن میں یقین کرتا ہوں کہ یہ سب سے سادہ ہے، جس سے عموماً ماہر طبیعیات اتفاق کرتے ہیں۔ یہ ہر تجربہ سے کامیابی سے ابھرا ہے۔ لیکن مجھے یقین ہے کہ یہ کہانی کا اختتام

---

[۲۳] bubble chamber
[۲۴] induced

نہیں ہو سکتا؛ پیمائشی عمل اور انہدام کے طریقہ کار کے بارے میں ابھی بہت کچھ جاننا باقی ہے۔ عین ممکن ہے کہ آنے والی نسلیں، جو زیادہ پیچیدہ نظریہ جانتے ہوں، سوچتے ہوں کہ ہم اتنا سادہ کیوں تھے۔

ضمیمہ ا

خطی الجبرا

کالج کی سطح پر پڑھائے جانے والے سادہ سمتیات کے حساب کو خطی الجبرا تصوراتی جامع پہناتا اور عمومیت دیتا ہے۔ عمومیت دو رخوں میں دی جاتی ہے: (1) ہم غیر سمتیات کو مخلوط اعداد ہونے کی اجازت دیتے ہیں، اور (2) ہم اپنے آپ کو تین ابعاد میں رہنے کا پابند نہیں رکھتے۔

A-ا سمتیات

سمتیات $\langle\alpha|$ ، $\langle\beta|$ ، $\langle\gamma|$ ، . . . کے سلسلہ اور **غیر سمتیات** (a ، b ، c ، . . .)[1] کے سلسلہ پر **سمتی فضا**[2] مشتمل ہو گا جو سمتی جمع اور غیر سمتی ضرب کے زیر عمل **بند**[3] ہو گا۔[4]

- **سمتی جمع**

کسی بھی دو سمتیات کا مجموعہ بھی سمتیہ ہو گا۔

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle \tag{A-ا}$$

سمتی مجموعہ **استبدالی**[5]:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle \tag{A-۲}$$

[1] ہمارے مقصد کے لئے غیر سمتیات سادہ مخلوط اعداد ہوں گے۔ ریاضی دان آپ کو زیادہ پر اسرار میدانوں پر سمتی فضاؤں کے بارے میں بتا سکتے ہیں، تاہم ان کا کوانٹائی میکانیات میں کوئی کردار نہیں پایا جاتا۔ یاد رہے کہ α ، β ، γ ، . . . (عموماً) اعداد نہیں ہوں گے؛ یہ نام ہوں گے، مثلاً "جمشید"، یا "در-73ءم"، یا، زیر غور سمتیہ کو جو بھی آپ پکارنا چاہیں۔

[2] vectorspace

[3] closed

[4] یعنی یہ اعمال پوری طرح معین ہیں، اور کبھی بھی آپ کو سمتی فضا سے باہر منتقل نہیں کریں گے۔

[5] commutative

اور **تلازمی**[۶]:

$$|\alpha\rangle + (|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = (|\alpha\rangle + |\beta\rangle) + |\gamma\rangle \tag{A-۳}$$

ہے۔ایک **معدوم**[۷] (یا صفر[۸]) سمتیہ $|0\rangle$ پایا جاتا ہے[۹] جو ہر سمتیہ $|\alpha\rangle$ کے لئے درج ذیل خاصیت رکھتا ہے

$$|\alpha\rangle + |0\rangle = |\alpha\rangle \tag{A-۴}$$

اور ہر سمتیہ $|\alpha\rangle$ کا شریک **مخالف سمتیہ**[۱۰] $(|-\alpha\rangle)$ [۱۱] پایا جاتا ہے جو درج ذیل دیتا ہے۔

$$|\alpha\rangle + |-\alpha\rangle = |0\rangle \tag{A-۵}$$

- **غیر سمتی ضرب**

کسی بھی غیر سمتیہ اور سمتیہ کا حاصل ضرب:

$$a|\alpha\rangle = |\gamma\rangle \tag{A-۶}$$

ایک سمتیہ ہو گا۔ غیر سمتی ضرب سمتی مجموعہ کے لحاظ سے **جزئیتی تقسیمی**[۱۲]

$$a(|\alpha\rangle + |\beta\rangle) = a|\alpha\rangle + a|\beta\rangle \tag{A-۷}$$

اور غیر سمتی جمع کے لحاظ سے بھی جزئیتی تقسیمی ہے۔

$$(a + b)|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle + b|\alpha\rangle \tag{A-۸}$$

یہ غیر سمتیات کے سادہ ضرب کے لحاظ سے **تلازمی** بھی ہے۔

$$a(b|\alpha\rangle) = (ab)|\alpha\rangle \tag{A-۹}$$

غیر سمتیات 0 اور 1 کے ساتھ ضرب آپ کی توقع کے مطابق نتائج دیں گے۔

$$1|\alpha\rangle = |\alpha\rangle; \quad 0|\alpha\rangle = |0\rangle \tag{A-۱۰}$$

---

[۶] associative
[۷] null
[۸] zero
[۹] جہاں غلط فہمی کا امکان نہ ہو، وہاں روایتی طور پر معدوم سمتیہ کو سادہ صفر لکھا جاتا ہے: $|0\rangle \rightarrow 0$
[۱۰] inversevector
[۱۱] یہ ایک انوکھی علامت ہے چونکہ α عدد نہیں۔ میں ایک سمتیہ جس کا نام "جمشید" ہے کے مخالف سمتیہ کو "جمشید-" کا نام دے رہا ہوں۔ کچھ ہی دیر میں ہم بہتر اصطلاح دیکھ پائیں گے۔
[۱۲] distributive

ظاہر ہے $\langle\alpha|(-1) = \langle -\alpha|$ ہوگا جس کو ہم $\langle\alpha|-$ لکھتے ہیں۔

یہاں جتنا نظر آ رہا ہے، حقیقتاً اتنا ہے نہیں؛ پس میں نے سمتیات کی جوڑ توڑ کے عام فہم قواعد کو تصوراتی روپ میں پیش کیا ہے۔ نتیجتاً دیگر نظام جو یہی باضابطہ خواص رکھتے ہوں پر ہم سادہ سمتیات کے رویہ کے بارے میں معلوم علم اور وجدان بروئے کار لا سکیں گے۔

سمتیات $\langle\alpha|$ ، $\langle\beta|$ ، $\langle\gamma|$ ، ۔۔۔ کا **خطی مجموعہ**[۱۳] درج ذیل روپ کا فقرہ ہوگا۔

$$a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle + \cdots \tag{A-۱۱}$$

ایک سمتیہ $\langle\lambda|$ جس کو سلسلہ $\langle\alpha|$ ، $\langle\beta|$ ، $\langle\gamma|$ ، ۔۔۔ کا خطی مجموعہ لکھنا ممکن نہ ہو **خطی غیر تابع**[۱۴] کہلاتا ہے۔ (مثلاً، تین ابعاد میں اکائی سمتیہ $\hat{k}$ سمتیات $\hat{i}$ اور $\hat{j}$ کا خطی غیر تابع ہے، جبکہ xy مستوی میں ہر سمتیہ $\hat{i}$ اور $\hat{j}$ کا خطی تابع ہوگا۔) اسی کی توسط سے، سمتیات کا وہ ذخیرہ جس میں ہر ایک سمتیہ باقی تمام سمتیات کا خطی غیر تابع ہو "خطی غیر تابع" کہلاتا ہے۔ جب ہر سمتیہ کو سمتیات کے ایک ذخیرہ کے ارکان کا خطی مجموعہ لکھنا ممکن ہو، ہم کہتے ہیں کہ سمتیات کا یہ ذخیرہ فضا کا **احاطہ**[۱۵] کرتے[۱۶] ہیں۔ فضا کا احاطہ کرنے والے خطی غیر تابع سمتیات کا سلسلہ **اساس**[۱۷] کہلاتا ہے۔ اساس میں سمتیات کی تعداد فضا کا **بُعد**[۱۸] کہلاتا ہے۔ فی الحال ہم فرض کرتے ہیں کہ بُعد (n) متناہی ہے۔

دیے گئے اساس

$$|e_1\rangle, |e_2\rangle, \ldots, |e_n\rangle \tag{A-۱۲}$$

کے لحاظ سے کسی بھی سمتیہ

$$|\alpha\rangle = a_1|e_1\rangle + a_2|e_2\rangle + \cdots + a_n|e_n\rangle \tag{A-۱۳}$$

کو اس اساس کے **ارکان** کی (مرتب) n اجزائی سلسلہ

$$|\alpha\rangle \leftrightarrow (a_1, a_2, \ldots, a_n) \tag{A-۱۴}$$

سے یکتا طور پر ظاہر کیا جا سکتا ہے۔ عموماً سمتیات کی بجائے ان اجزاء کے ساتھ کام کرنا زیادہ آسان ہوتا ہے۔ سمتیات جمع کرنے کے لئے ان کے مطابقتی اجزاء آپس میں جمع کئے جاتے ہیں:

$$|\alpha\rangle + |\beta\rangle \leftrightarrow (a_1 + b_1, a_2 + b_2, \ldots, a_n + b_n) \tag{A-۱۵}$$

---

[۱۳] linearcombination

[۱۴] linearlyindependent

[۱۵] span

[۱۶] فضا کا احاطہ کرنے والے سمتیات کا سلسلہ **مکمل** (complete) بھی کہلاتا ہے، اگرچہ میں اس اصطلاح کو لامتناہی بُعد کی صورت کے لئے رکھتا ہوں جہاں ارتکاز پر سوالات اٹھائے جا سکتے ہیں۔

[۱۷] basis

[۱۸] dimension

غیر سمتیہ سے ضرب کے لئے ہر جزو کو اس غیر سمتیہ سے ضرب کریں:

$$c|\alpha\rangle \leftrightarrow (ca_1, ca_2, \ldots, ca_n) \tag{A-۱۶}$$

معدوم سمتیہ کو صفروں کی ایک کھڑی ظاہر کرتی ہے:

$$|0\rangle \leftrightarrow (0, 0, \ldots, 0) \tag{A-۱۷}$$

اور مخالف سمتیہ کے ارکان کی علامتیں الٹ کی جاتی ہیں۔

$$|-\alpha\rangle \leftrightarrow (-a_1, -a_2, \ldots, -a_n) \tag{A-۱۸}$$

ارکان کے ساتھ کام کرنے کی واحد قباحت یہ ہے کہ آپ کو کسی ایک مخصوص اساس کے ساتھ کام کرنا ہو گا، اور یہی حسابی عمل کسی دوسری اساس میں بالکل مختلف نظر آئے گا۔

سوال:ا-A مخلوط اجزاء والے تین ابعادی سادہ سمتیات $(a_x\hat{\imath} + a_y\hat{\jmath} + a_z\hat{k})$ پر غور کریں۔

ا کیا وہ ذیلی سلسلہ جس میں تمام سمتیات کے لئے $a_z = 0$ ہو سمتی فضا قائم کرتے ہیں؟ اگر کرتا ہو تب اس کا بُعد کیا ہو گا؛ اگر نہیں کرتا تو کیوں نہیں کرتا؟

ب اس ذیلی سلسلہ کے بارے میں آپ کیا کہیں گے جن کا z جزو 1 کے برابر ہو؟ اشارہ: کیا ایسے دو سمتیات کا مجموعہ اسی ذیلی سلسلہ میں پایا جائے گا؟ معدوم سمتیہ کے بارے میں سوچیں؟

ج ان سمتیات کے ذیلی سلسلہ کے بارے میں آپ کیا کہہ سکتے ہیں جن کے تمام ارکان برابر ہوں؟

سوال:۲-A ان تمام کثیر رکنیوں، (جن کے عددی سر مخلوط ہوں اور) جن کا x میں درجہ N سے کم ہو کے ذخیرہ پر غور کریں۔

ا کیا یہ سلسلہ سمتی فضا قائم کرتا ہے (جہاں کثیر رکنیاں بطور "سمتیات" ہوں)؟ اگر فضا قائم کرتا ہو تو مناسب اساس تجویز کریں اور اس فضا کا بُعد بتائیں۔ اگر فضا قائم نہ کرتا ہو تو تعریفی خصوصیات میں سے کونسی اس میں نہیں پائی جاتی (جاتیں)؟

ب اگر ہم چاہیں کہ تمام کثیر رکنیاں جفت تفاعلات ہوں تب کیا ہو گا؟

ج اگر ہم چاہیں کہ پہلا عددی سر (جو x^{N-1} کو ضرب کرتا ہے) 1 ہو تب کیا ہو گا؟

د اگر ہم چاہیں کہ $x = 1$ پر کثیر رکنیوں کی قیمت 0 ہو تب کیا ہو گا؟

ہ اگر ہم چاہیں کہ $x = 0$ پر کثیر رکنیوں کی قیمت 1 ہو تب کیا ہو گا؟

سوال:۳-A ثابت کریں کہ کسی بھی ایک اساس کے لحاظ سے سمتیہ کے ارکان یکتا ہوں گے۔

A-۲ اندرونی ضرب

تین ابعاد میں دو اقسام کے سمتی ضرب پائے جاتے ہیں: نقطی ضرب اور صلیبی ضرب۔ موخر الذکر کی قدرتی توسیع کسی طرح بھی n ابعادی سمتی فضاؤں میں نہیں کی جا سکتی، جبکہ اول الذکر کی کی جا سکتی ہے؛ اور اس سیاق و سباق میں اسے عموماً **اندرونی ضرب**[۱۹] پکارا جاتا ہے۔ دو سمتیات $|\alpha\rangle$ اور $|\beta\rangle$ کا اندرونی ضرب ایک مخلوط عدد ہو گا جسے $\langle\alpha|\beta\rangle$ لکھا جاتا ہے اور جس کے خواص درج ذیل ہیں۔

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^* \tag{A-۱۹}$$

$$\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0, \quad \text{اور} \quad \langle\alpha|\alpha\rangle = 0 \leftrightarrow |\alpha\rangle = |0\rangle \tag{A-۲۰}$$

$$\langle\alpha|(b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle) = b\langle\alpha|\beta\rangle + c\langle\alpha|\gamma\rangle \tag{A-۲۱}$$

مخلوط اعداد تک عمومیت کے علاوہ یہ مسلمات نقطی ضرب کے جانے پہچانے رویوں کو ریاضی کی زبان میں پیش کرتے ہیں۔ ایسی سمتی فضا جس میں اندرونی ضرب بھی شامل ہو **اندرونی ضرب فضا**[۲۰] کہلاتی ہے۔

چونکہ سمتیہ کا اپنے ساتھ اندرونی ضرب غیر منفی عدد ہے (مساوات A-۲۰) لہٰذا اس کا جذر حقیقی ہو گا؛ جو سمتیہ کا **معیار**[۲۱] کہلاتا ہے:

$$\|\alpha\| \equiv \sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle} \qquad \text{معیار} \tag{A-۲۲}$$

اور جو "لمبائی" کے تصور کو وسعت دیتا ہے۔ **اکائی سمتیہ**[۲۲] (جس کا معیار 1 ہو گا) **معمول شدہ**[۲۳] کہلاتا ہے۔ دو سمتیات جن کا اندرونی ضرب صفر ہو **قائمہ**[۲۴] کہلاتے ہیں (جو "سیدھا کھڑا" ہونے کے تصور کو عمومیت دیتا ہے)۔ باہمی قائمہ معمول شدہ سمتیات:

$$\langle\alpha_i|\alpha_j\rangle = \delta_{ij} \tag{A-۲۳}$$

کے ذخیرہ کو **معیاری عمودی سلسلہ**[۲۵] کہتے ہیں۔ معیاری عمودی اساس ہر صورت منتخب کیا جا سکتا ہے (سوال A-۴ دیکھیں) اور ایسا کرنا عموماً بہتر بھی ثابت ہوتا ہے۔ ایسی صورت میں دو سمتیات کے اندرونی ضرب کو ان کے اجزاء کے روپ میں نہایت خوبصورتی سے لکھا جا سکتا ہے:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = a_1^*b_1 + a_2^*b_2 + \cdots + a_n^*b_n \tag{A-۲۴}$$

لہٰذا معیار کا مربع

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = |a_1|^2 + |a_2|^2 + \cdots + |a_n|^2 \tag{A-۲۵}$$

---

innerproduct[۱۹]
innerproductspace[۲۰]
norm[۲۱]
unitvector[۲۲]
normalized[۲۳]
orthogonal[۲۴]
orthonormalset[۲۵]

ہو گا جبکہ اجزاء از خود درج ذیل ہوں گے۔

$$a_i = \langle e_i|\alpha\rangle \tag{A-۲۶}$$

(یہ نتائج تین ابعادی معیاری عمودی اساس $\hat{\imath}$، $\hat{\jmath}$، $\hat{k}$ کے مشہور کلیات $\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} = a_xb_x + a_yb_y + a_zb_z$، $|\boldsymbol{a}|^2 = a_x^2 + a_y^2 + a_z^2$ اور $a_x = \hat{\imath}\cdot\boldsymbol{a}$، $a_y = \hat{\jmath}\cdot\boldsymbol{a}$، $a_z = \hat{k}\cdot\boldsymbol{a}$ کو عمومیت دیتے ہیں۔) یہاں سے آگے ہم صرف معیاری عمودی اساس استعمال کریں گے، ماسوائے جب صریحاً ایسا نہ کرنے کا کہا گیا ہو۔

دو سمتیات کے بیچ زاویہ ایسی ہندسی مقدار ہے جس کو ہم عمومیت دینا چاہیں گے۔ سادہ سمتی تجزیہ میں $\cos\theta = (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})/|\boldsymbol{a}||\boldsymbol{b}|$ ہے۔ تاہم اندرونی ضرب عموماً مخلوط عدد ہو گا، لہٰذا (اختیاری اندرونی ضرب فضا میں) مماثل کلیہ (حقیقی) زاویہ θ نہیں دیگا۔ بہر حال، اس مقدار کی مطلق قیمت ایسا عدد ہو گا جو 1 سے تجاوز نہیں کرتا۔

$$\left|\langle\alpha|\beta\rangle\right|^2 \le \langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle \tag{A-۲۷}$$

(اس اہم نتیجہ کو **شوارز عدم مساوات**[۲۶] کہتے ہیں؛ جس کا ثبوت سوال A-۵ میں پیش کیا گیا ہے۔) یوں، آپ چاہیں تو، $|\alpha\rangle$ اور $|\beta\rangle$ کے بیچ زاویہ کی تعریف درج ذیل لی جا سکتی ہے۔

$$\cos\theta = \sqrt{\frac{\langle\alpha|\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle}{\langle\alpha|\alpha\rangle\langle\beta|\beta\rangle}} \tag{A-۲۸}$$

سوال A-۴: فرض کریں آپ اساس ($|e_1\rangle$، $|e_2\rangle$، $\cdots$، $|e_n\rangle$) سے آغاز کرتے ہیں جو معیاری عمودی نہیں ہے۔ اس اساس سے، **گرام و شمد حکمت عملی**[۲۷] کے ذریعہ (جو ایک منظم ترکیب ہے) معیاری عمودی اساس ($|e'_1\rangle$، $|e'_2\rangle$، $\cdots$، $|e'_n\rangle$) حاصل کی جا سکتی ہے۔ یہ ترکیب کچھ یوں ہے:

ا اساس کے پہلے سمتیہ $|e_1\rangle$ کو (اس کے معیار سے تقسیم کر کے) معمول شدہ بنائیں۔

$$|e'_1\rangle = \frac{|e_1\rangle}{\|e_1\|}$$

ب پہلے سمتیہ پر دوسرے سمتیہ کا ظلیل دریافت کر کے اس ظلیل کو دوسرے سمتیہ سے منفی کریں۔

$$|e_2\rangle - \langle e'_1|e_2\rangle|e'_1\rangle$$

(سمتیہ $|e_2\rangle$ کا $|e'_1\rangle$ کے رخ غیر سمتیہ ظلیل $\langle e'_1|e_2\rangle$ ہے جس کے دائیں جانب اکائی سمتیہ $|e'_1\rangle$ چسپاں کرنے سے سمتیہ ظلیل حاصل کیا گیا۔) درج بالا سمتیہ $|e'_1\rangle$ کا قائمہ ہو گا؛ اس کو معمول شدہ کر کے $|e'_2\rangle$ حاصل کریں۔

---
[۲۶] Schwarz inequality
[۲۷] Gram-Schmidt procedure

ج سمتیہ $|e_3\rangle$ کی $|e_1'\rangle$ پر تظلیل اور $|e_2'\rangle$ پر تظلیل کو $|e_3\rangle$ سے منفی کریں۔

$$|e_3\rangle - \langle e_1'|e_3\rangle|e_1'\rangle - \langle e_2'|e_3\rangle|e_2'\rangle$$

یہ $|e_1'\rangle$ اور $|e_2'\rangle$ کو قائمہ ہوگا؛ اس کو معمول شدہ کر کے $|e_3'\rangle$ حاصل کریں؛ وغیرہ، وغیرہ۔

گرام و شمد حکمت عملی استعمال کرتے ہوئے درج ذیل تین ابعادی فضائی اساس کو معیاری عمود شدہ کریں۔

$$|e_1\rangle = (1+i)\hat{i} + (1)\hat{(j)} + (i)\hat{k}, |e_2\rangle = (i)\hat{i} + (3)\hat{j} + (1)\hat{k}, |e_3\rangle = (0)\hat{i} + (28)\hat{j} + (0)\hat{k}$$

سوال :A-۵ شوارز عدم مساوات (مساوات A-۲۷) ثابت کریں۔ اشارہ: $|\gamma\rangle = |\beta\rangle - (\langle\alpha|\beta\rangle / \langle\alpha|\alpha\rangle)|\alpha\rangle$ لیں اور $\langle\gamma|\gamma\rangle \geq 0$ استعمال کریں۔

سوال:A-۶ سمتیات $|\alpha\rangle = (1+i)\hat{i} + (1)\hat{j} + (i)\hat{k}$ اور $|\beta\rangle = (4-i)\hat{i} + (0)\hat{j} + (2-2i)\hat{k}$ کے بیچ (مساوات A-۲۸ کی معنوں میں) زاویہ تلاش کریں۔

سوال:A-۷ تکونی عدم مساوات $\|(|\alpha\rangle + |\beta\rangle)\| \leq \|\alpha\| + \|\beta\|$ ثابت کریں۔

A-۳ قوالب

فرض کریں آپ (تین بُعدی فضا میں) ہر سمتیہ کو 17 سے ضرب دیں، یا ہر سمتیہ کو z محور کے گرد $39°$ گھمائیں، یا xy مستوی میں ہر سمتیہ کا عکس لیں؛ یہ تمام **خطی تبادلہ**[۲۸] کی مثالیں ہیں۔ خطی مبدل $\hat{T}$ [۲۹] سمتی فضا میں ہر ایک سمتیہ کا کسی دوسرے سمتیہ $(|\alpha\rangle \rightarrow |\alpha'\rangle = \hat{T}|\alpha\rangle)$ میں تبادلہ کرتا ہے جہاں کسی بھی سمتیات $|\alpha\rangle$، $|\beta\rangle$ اور کسی بھی غیر سمتیات a، b کے لئے اس عمل کا خطی ہونا:

$$\hat{T}(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = a(\hat{T}|\alpha\rangle) + b(\hat{T}|\beta\rangle) \tag{A-۲۹}$$

لازمی شرط ہے۔

یہ جانتے ہوئے کہ اساسی سمتیات کے سلسلہ کے ساتھ خطی مبدل کیا کرتا ہے، آپ با آسانی جان سکتے ہیں کہ وہ کسی بھی سمتیہ کے ساتھ کیا کرے گا۔ مثلاً، اگر $|e_1\rangle$، $|e_2\rangle$، $\cdots$، $|e_n\rangle$ اساس قائم کرتے ہوں اور خطی مبدل $\hat{T}$ اساسی سمتیہ $|e_1\rangle$ پر عمل ($\hat{T}|e_1\rangle$) کر کے ایک نیا سمتیہ پیدا کرتا ہے؛ ظاہر ہے، کسی بھی سمتیہ کی طرح، اس نئے سمتیہ کو بھی اس اساس میں لکھا جا سکتا ہے لہٰذا $\hat{T}|e_1\rangle = T_{11}|e_1\rangle + T_{21}|e_2\rangle + \cdots + T_{n1}|e_n\rangle$ لکھا جا سکتا ہے جہاں T_{11}، T_{21}، $\cdots$، T_{n1} عددی سر ہیں۔ اسی طرح باقی اساسی سمتیات کے لئے ایسا کیا

---

[۲۸] lineartransformation

[۲۹] اس باب میں خطی تبادلہ کو ٹوپی کی علامت (^) سے ظاہر کیا جائے گا؛ جیسا ہم دیکھیں گے، کوانٹائی عامل بھی خطی مبدل ہیں اور ان کو بھی ٹوپی کی نشان سے ظاہر کیا جائے گا۔

جا سکتا ہے:

$$\begin{aligned}
\hat{T}|e_1\rangle &= T_{11}|e_1\rangle + T_{21}|e_2\rangle + \cdots + T_{n1}|e_n\rangle \\
\hat{T}|e_2\rangle &= T_{12}|e_1\rangle + T_{22}|e_2\rangle + \cdots + T_{n2}|e_n\rangle \\
&\vdots \\
\hat{T}|e_n\rangle &= T_{1n}|e_1\rangle + T_{2n}|e_2\rangle + \cdots + T_{nn}|e_n\rangle
\end{aligned}$$

جس کو مختصراً درج ذیل لکھتے ہیں۔

$$\hat{T}|e_j\rangle = \sum_{i=1}^{n} T_{ij}|e_i\rangle, \quad (j = 1, 2, \ldots, n) \tag{A-۳۰}$$

اگر $\langle\alpha|$ ایک اختیاری سمتیہ ہو (جس کو ہم ان اساسی سمتیات میں لکھتے ہیں):

$$|\alpha\rangle = a_1|e_1\rangle + a_2|e_2\rangle + a_3|e_3\rangle + \cdots + a_n|e_n\rangle = \sum_{j=1}^{n} a_j|e_j\rangle \tag{A-۳۱}$$

تب

$$\hat{T}|\alpha\rangle = a_1\hat{T}|e_1\rangle + a_2\hat{T}|e_2\rangle + a_3\hat{T}|e_3\rangle + \cdots + a_n\hat{T}|e_n\rangle$$

ہو گا جس میں $\hat{T}|e_1\rangle = T_{11}|e_1\rangle + T_{21}|e_2\rangle + \cdots + T_{n1}|e_n\rangle$ وغیرہ پُر کرکے

$$\begin{aligned}
\hat{T}|\alpha\rangle = \quad & a_1(T_{11}|e_1\rangle + T_{21}|e_2\rangle + T_{31}|e_3\rangle + \cdots + T_{n1}|e_n\rangle) \\
&+a_2(T_{12}|e_1\rangle + T_{22}|e_2\rangle + T_{32}|e_3\rangle + \cdots + T_{n2}|e_n\rangle) \\
&+a_3(T_{13}|e_1\rangle + T_{23}|e_2\rangle + T_{33}|e_3\rangle + \cdots + T_{n3}|e_n\rangle) \\
&\quad\vdots \\
&+a_n(T_{1n}|e_1\rangle + T_{2n}|e_2\rangle + T_{3n}|e_3\rangle + \cdots + T_{nn}|e_n\rangle)
\end{aligned}$$

ترتیب نو کرتے ہوئے اکائی سمتیات کے عددی سر اکٹھے کرکے درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

$$\begin{aligned}
\hat{T}|\alpha\rangle = \quad & (a_1T_{11} + a_2T_{12} + a_3T_{13} + \cdots + a_nT_{1n})|e_1\rangle \\
&+(a_1T_{21} + a_2T_{22} + a_3T_{23} + \cdots + a_nT_{2n})|e_2\rangle \\
&+(a_1T_{31} + a_2T_{32} + a_3T_{33} + \cdots + a_nT_{3n})|e_3\rangle \\
&\quad\vdots \\
&+(a_1T_{n1} + a_2T_{n2} + a_3T_{n3} + \cdots + a_nT_{nn})|e_n\rangle
\end{aligned}$$

اس مساوات میں اساسی سمتیہ $|e_1\rangle$ کے عددی سر $(a_1T_{11} + a_2T_{12} + \cdots + a_nT_{1n})$ کو $\sum_{j=1}^{n} a_jT_{1j}$ لکھا جا سکتا ہے، اور اسی طرح باقی اساسی سمتیات کے عددی سروں کے لئے بھی لکھا جا سکتا ہے۔ یوں درج ذیل حاصل ہو گا۔

$$\begin{aligned}\hat{T}|\alpha\rangle &= \sum_{j=1}^{n} a_jT_{1j}|e_1\rangle + \sum_{j=1}^{n} a_jT_{2j}|e_2\rangle + \cdots + \sum_{j=1}^{n} a_jT_{nj}|e_n\rangle\\ &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_jT_{ij}|e_i\rangle\end{aligned}$$

ہم مساوات A-۳۱ سے یہاں تک کے حساب کو مختصراً درج ذیل لکھ سکتے ہیں۔

$$\hat{T}|\alpha\rangle = \sum_{j=1}^{n} a_j\left(\hat{T}|e_j\rangle\right) = \sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n} a_jT_{ij}|e_i\rangle = \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{n} T_{ij}a_j\right)|e_i\rangle \tag{A-۳۲}$$

ظاہر ہے کہ $\hat{T}$ ایک سمتیہ کو جس کے ارکان a_1 ، a_2 ، $\cdots$ ، a_n ہوں کا تبادلہ ایک نئے سمتیہ میں کرتا ہے جس کے ارکان درج ذیل ہوں گے۔

$$a'_i = \sum_{j=1}^{n} T_{ij}a_j \tag{A-۳۳}$$

(مساوات A-۳۰ اور مساوات A-۳۲ میں اشاریہ آگے پیچھے کئے گئے ہیں۔ یہ لکھتے ہوئے غلطی نہیں کی گئی۔ دوسرے لفظوں میں (i اور j آپس میں تبدیل کرنے $j \leftrightarrow i$ سے مراد یہ ہے کہ) اگر اجزاء کا تبادلہ T_{ij} سے ہو، تب اساسی سمتیات کا تبادلہ T_{ji} سے ہو گا۔)

یوں جس طرح کسی اساس کے لحاظ سے n ارکان a_i سمتیہ یا $|\alpha\rangle$ کو یکتا طور ظاہر کرتے ہیں اسی طرح n^2 کے T_{ij} ارکان[۳۰] خطی مبدل $\hat{T}$ کو اسی اساس کے لحاظ سے یکتا طور پر بیان کرتے ہیں۔

$$\hat{T} \leftrightarrow (T_{11}, T_{12}, \cdots, T_{nn}) \tag{A-۳۴}$$

اگر اساس معیاری عمودی ہو، مساوات A-۳۰ کے تحت درج ذیل ہو گا۔

$$T_{ij} = \langle e_i|\hat{T}|e_j\rangle \tag{A-۳۵}$$

[۳۰] elements

ان مخلوط اعداد کو **قالب**[۳۱] کے روپ[۳۲] میں لکھنا بہتر ثابت ہوتا ہے۔

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & \dots & T_{1n} \\ T_{21} & T_{22} & \dots & T_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ T_{n1} & T_{n2} & \dots & T_{nn} \end{pmatrix} \tag{A-۳۶}$$

یوں خطی مبدل کا مطالعہ محض قوالب کے نظریہ کا مطالعہ ہو گا۔ دو خطی مبدل کے مجموعہ $(\hat{S} + \hat{T})$ کی تعریف:

$$(\hat{S}+\hat{T})|\alpha\rangle = \hat{S}|\alpha\rangle + \hat{T}|\alpha\rangle \tag{A-۳۷}$$

ہماری توقع کے عین مطابق قوالب جمع کرنے کے مترادف ہے (جہاں آپ انکے مطابقتی ارکان جمع کرتے ہیں)۔

$$\mathbf{U} = \mathbf{S} + \mathbf{T} \Leftrightarrow U_{ij} = S_{ij} + T_{ij} \tag{A-۳۸}$$

دو خطی تبادلہ کا حاصل ضرب $(\hat{S}\hat{T})$، پہلے $\hat{T}$ اور اس کے بعد $\hat{S}$ تبادلہ کرنے کے مترادف ہے۔

$$|\alpha'\rangle = \hat{T}|\alpha\rangle; \quad |\alpha''\rangle = \hat{S}|\alpha'\rangle = \hat{S}(\hat{T}|\alpha\rangle) = \hat{S}\hat{T}|\alpha\rangle \tag{A-۳۹}$$

مجموعی مبدل $\hat{U} = \hat{S}\hat{T}$ کو کونسا قالب $\mathbf{U}$ ظاہر کرتا ہے؟ اسے حاصل کرنا مشکل نہیں۔

$$a_i'' = \sum_{j=1}^{n} S_{ij}a_j' = \sum_{j=1}^{n} S_{ij}\left(\sum_{k=1}^{n} T_{jk}a_k\right) = \sum_{k=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{n} S_{ij}T_{jk}\right)a_k = \sum_{k=1}^{n} U_{ik}a_k$$

ظاہر ہے کہ درج ذیل ہو گا۔

$$\mathbf{U} = \mathbf{S}\,\mathbf{T} \Leftrightarrow U_{ik} = \sum_{j=1}^{n} S_{ij}T_{jk} \tag{A-۴۰}$$

قوالب ضرب کرنے کا یہ رائج طریقہ ہے؛ آپ $\mathbf{S}$ کے i ویں صف اور $\mathbf{T}$ کے k ویں قطار کے مطابقتی اندراج آپس میں ضرب کر کے تمام کا مجموعہ لے کر حاصل ضرب $\mathbf{ST}$ کا ik ویں رکن تلاش کرتے ہیں۔ یہی طریقہ کار بروئے کار لاتے ہوئے مستطیل قوالب ضرب کیے جاتے ہیں، بس اتنا ضروری ہے کہ پہلے قالب میں قطاروں کی تعداد دوسرے قالب میں صفوں کی تعداد کے برابر ہو۔ بالخصوص $|\alpha\rangle$ کے ارکان کے n اجزائی سلسلہ کو

[۳۱] matrix
[۳۲] میں چوکور قوالب کو موٹی لکھائی میں لاطینی بڑے حروف، مثلاً $\mathbf{T}$، سے ظاہر کروں گا۔

$n \times 1$ **قطار قالب**[۳۳] (یا "قطار سمتیہ")[۳۴]:

$$\mathbf{a} \equiv \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \tag{A-۴۱}$$

لکھ کر قاعدہ تبادلہ (مساوات A-۳۳) کو قالبی حاصل ضرب:

$$\mathbf{a}' = \mathbf{T}\,\mathbf{a} \tag{A-۴۲}$$

لکھا جا سکتا ہے۔

آئیں اب قالبی اصطلاحات سیکھیں:

- قالب کا **تبدیل محل**[۳۵] (جس کو ہم لاطینی حرف پر "مد" ڈال کر لکھتے ہیں: $\tilde{T}$) انہی ارکان پر مشتمل ہو گا، تاہم اس میں صف اور قطار آپس میں جگہیں تبدیل کرتی ہیں۔ بالخصوص قطار قالب کا تبدیل محل **صف قالب**[۳۶] ہو گا۔

$$\tilde{\mathbf{a}} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \ldots & a_n \end{pmatrix} \tag{A-۴۳}$$

چوکور قالب کے (بالائی بائیں سے زیریں دائیں) **مرکزی وتر**[۳۷] میں عکس اس کا تبدیل محل ہو گا۔

$$\tilde{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{21} & \ldots & T_{n1} \\ T_{12} & T_{22} & \ldots & T_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ T_{1n} & T_{2n} & \ldots & T_{nn} \end{pmatrix} \tag{A-۴۴}$$

ایسا (چوکور) قالب جو اپنے تبدیل محل کے برابر ہو **تشاکلی**[۳۸] کہلاتا ہے؛ اگر تبدیل محل کی علامت الٹ ہو تب یہ **خلاف تشاکلی**[۳۹] ہو گا۔

$$\tilde{\mathbf{T}} = \mathbf{T} \quad \text{تشاکلی} \qquad\qquad \tilde{\mathbf{T}} = -\,\mathbf{T} \quad \text{خلاف تشاکلی} \tag{A-۴۵}$$

---

[۳۳] column matrix

[۳۴] میں قطار قوالب اور صف قوالب کو موٹی لکھائی میں لاطینی چھوٹے حروف، مثلاً **a**، سے ظاہر کروں گا۔

[۳۵] transpose

[۳۶] row matrix

[۳۷] main diagonal

[۳۸] symmetric

[۳۹] antisymmetric

- ہر رکن کا مخلوط جوڑی دار لینے سے قالب کا (مخلوط) **جوڑی دار**[۴۰] (جس کو ہم ہمیشہ کی طرح ستارہ، $\mathbf{T}^*$ سے ظاہر کرتے ہیں) حاصل ہو گا۔

$$\mathbf{T}^* = \begin{pmatrix} T_{11}^* & T_{12}^* & \dots & T_{1n}^* \\ T_{21}^* & T_{22}^* & \dots & T_{2n}^* \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ T_{n1}^* & T_{n2}^* & \dots & T_{nn}^* \end{pmatrix} \qquad \mathbf{a}^* = \begin{pmatrix} a_1^* \\ a_2^* \\ \vdots \\ a_n^* \end{pmatrix} \tag{A-۴۶}$$

تمام ارکان حقیقی ہونے کی صورت میں قالب **حقیقی**[۴۱] ہو گا، جبکہ تمام ارکان خیالی ہونے کی صورت میں قالب **خیالی**[۴۲] ہو گا۔

$$\mathbf{T}^* = \mathbf{T} \quad \text{حقیقی} \qquad\qquad \mathbf{T}^* = -\mathbf{T} \quad \text{خیالی} \tag{A-۴۷}$$

- قالب کا تبدیل محل وجوڑی دار اس کا **ہرمشی جوڑی دار**[۴۳] (یا **شریک**[۴۴]) ہو گا (جسے خنجر کے نشان، $\mathbf{T}^\dagger$ سے ظاہر کیا جاتا ہے)۔

(A-۴۸)

$$\mathbf{T}^\dagger \equiv \tilde{\mathbf{T}}^* = \begin{pmatrix} T_{11}^* & T_{21}^* & \dots & T_{n1}^* \\ T_{12}^* & T_{22}^* & \dots & T_{n2}^* \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ T_{1n}^* & T_{2n}^* & \dots & T_{nn}^* \end{pmatrix}; \quad \mathbf{a}^\dagger \equiv \tilde{\mathbf{a}}^* = \begin{pmatrix} a_1^* & a_2^* & \dots & a_n^* \end{pmatrix}$$

ایسا چوکور قالب جو اپنے ہرمشی جوڑی دار کے برابر ہو **ہرمشی**[۴۵] (یا **خود شریک**[۴۶]) قالب کہلاتا ہے؛ اگر ہرمشی جوڑی دار منفی علامت متعارف کرتا ہو قالب **منحرف ہرمشی**[۴۷] (یا **خلاف ہرمشی**[۴۸]) ہو گا۔

$$\mathbf{T}^\dagger = \mathbf{T} \quad \text{ہرمشی} \qquad\qquad \mathbf{T}^\dagger = -\mathbf{T} \quad \text{منحرف ہرمشی} \tag{A-۴۹}$$

اس علامتیت میں دو سمتیات کے اندرونی ضرب کو (معیاری عمودی اساس کے لحاظ سے) نہایت خوبصورتی کے ساتھ قالبی ضرب (مساوات A-۲۴) لکھا جا سکتا ہے۔

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \mathbf{a}^\dagger \, \mathbf{b} \tag{A-۵۰}$$

---

[۴۰] conjugate
[۴۱] real
[۴۲] imaginary
[۴۳] hermitianconjugate
[۴۴] adjoint
[۴۵] hermitian
[۴۶] adjoint
[۴۷] skewhermitian
[۴۸] anti-hermitian

یاد رہے کہ درج بالا رکوع میں متعارف تینوں اعمال (تبدیلی محل، جوڑی دار، ہرمشی جوڑی دار) کا دو مرتبہ اطلاق سے واپس اصل قالب حاصل ہو گا۔

عام طور پر قالبی ضرب غیر مقلبی $\mathbf{TS} \neq \mathbf{ST}$ ہو گا؛ ضرب لکھنے کے دونوں طریقوں کے بیچ فرق کو **مقلب**[۴۹] کہتے ہیں۔[۵۰]

$$[\mathbf{S}, \mathbf{T}] \equiv \mathbf{ST} - \mathbf{TS} \qquad \text{مقلب} \tag{A-۵۱}$$

حاصل ضرب کا تبدیل محل الٹ ترتیب میں تبدیل محلوں کا حاصل ضرب:

$$(\widetilde{\mathbf{ST}}) = \tilde{\mathbf{T}}\tilde{\mathbf{S}} \tag{A-۵۲}$$

ہو گا (سوال A-۱۱ دیکھیں)، اور یہی کچھ ہرمشی جوڑی دار کے لئے بھی درست ہو گا۔

$$(\mathbf{ST})^\dagger = \mathbf{T}^\dagger\,\mathbf{S}^\dagger \tag{A-۵۳}$$

اکائی قالب[۵۱] کے مرکزی وتر پر ارکان کی قیمت ایک اور باقیوں کی قیمت صفر ہو گی۔

$$\mathbf{I} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \tag{A-۵۴}$$

(اکائی قالب خطی تبادلہ کو ظاہر کرتا ہے جو ہر سمتیہ کا تبادلہ اسی سمتی میں کرتا ہے۔) دوسرے لفظوں میں درج ذیل ہو گا۔

$$\mathbf{I}_{ij} = \delta_{ij} \tag{A-۵۵}$$

چوکور قالب کے **معکوس**[۵۲]، جسے $\mathbf{T}^{-1}$ لکھا جاتا ہے، کی تعریف بدیہی ہے۔[۵۳]

$$\mathbf{T}^{-1}\,\mathbf{T} = \mathbf{T}\,\mathbf{T}^{-1} = \mathbf{I} \tag{A-۵۶}$$

قالب کا معکوس صرف اور صرف اس صورت ہو گا جب اس کا **مقطع**[۵۴] غیر صفر ہو؛ در حقیقت

$$\mathbf{T}^{-1} = \frac{1}{|\mathbf{T}|}\tilde{\mathbf{C}} \qquad \text{قالب کا معکوس} \tag{A-۵۷}$$

---

[۴۹] commutator

[۵۰] صرف چوکور قوالب کے لئے مقلب معنی خیز ہے۔ غیر چوکور قوالب میں دونوں ضرب کی جسامت بھی ایک جیسی نہیں ہو گی۔

[۵۱] unitmatrix

[۵۲] inverse

[۵۳] دھیان رہے کہ بایاں معکوس، دائیں معکوس کے برابر ہے، چونکہ اگر $\mathbf{AT} = \mathbf{I}$ اور $\mathbf{TB} = \mathbf{I}$ ہوں، تب (دوسرے کو بائیں سے $\mathbf{A}$ سے ضرب کر کے پہلا استعمال کرنے سے) ہمیں $\mathbf{B} = \mathbf{A}$ حاصل ہو گا۔

[۵۴] determinant

ہو گا، جہاں ہم **ضربیوں**[۵۵] کا قالب $\mathbf{C}$ ہے اور $|\mathbf{T}|$ قالب کا مقطع ہے (قالب $\mathbf{T}$ سے i ویں صف اور j ویں قطار خارج کر کے حاصل ذیلی قالب کے مقطع کو $(-1)^{i+j}$ سے ضرب دینے سے رکن T_{ij} کا ہم ضربی حاصل ہو گا)۔ (چوکور) قالب کے مرکزی ارکان کے مجموعہ کو قالب کے **آثار**[۵۶] کہتے ہیں۔

$$\text{آثار}(\mathbf{T}) = \sum_{i}^{n} T_{ii}$$

ایسا قالب جس کا معکوس نہ پایا جاتا ہو **نادر**[۵۷] کہلاتا ہے۔ حاصل ضرب کا معکوس (اگر موجود ہو) الٹ ترتیب میں انفرادی معکوس کا حاصل ضرب ہو گا۔

$$(\mathbf{ST})^{-1} = \mathbf{T}^{-1}\,\mathbf{S}^{-1} \tag{A-۵۸}$$

ایسا قالب جس کا معکوس اس کے ہرمشی جوڑی دار کے برابر ہو **اکہرا**[۵۸] کہلاتا ہے۔[۵۹]

$$\mathbf{U}^{\dagger} = \mathbf{U}^{-1} \qquad \text{اکہرا} \tag{A-۵۹}$$

یہ فرض کرتے ہوئے کہ اساس معیاری عمودی ہے، اکہرا قالب کے قطار معیاری عمودی سلسلہ قائم کرتے ہیں، اور اس کے صف بھی ایسا کرتے ہیں (سوال A-۱۲ دیکھیں)۔ ایسے خطی تبادلہ جنہیں اکہرا قوالب ظاہر کرتے ہوں، مساوات A-۵۰ کی بدولت، اندرونی ضرب برقرار رکھتے ہیں۔

$$\langle\alpha'|\beta'\rangle = \mathbf{a}'^{\dagger}\,\mathbf{b}' = (\mathbf{Ua})^{\dagger}(\mathbf{Ub}) = \mathbf{a}^{\dagger}\,\mathbf{U}^{\dagger}\,\mathbf{Ub} = \mathbf{a}^{\dagger}\,\mathbf{b} = \langle\alpha|\beta\rangle \tag{A-۶۰}$$

سوال A-۸: درج ذیل قوالب لیتے ہوئے

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & i \\ 2 & 0 & 3 \\ 2i & -2i & 2 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

درج ذیل کا حساب لگائیں: (الف) $\mathbf{A}+\mathbf{B}$، (ب) $\mathbf{AB}$، (ج) $[\mathbf{A},\mathbf{B}]$، (د) $\tilde{\mathbf{A}}$، (ہ) $\mathbf{A}^{*}$، (و) $\mathbf{A}^{\dagger}$، (ز) آثار ($\mathbf{B}$)، (ح) مقطع ($\mathbf{B}$)، اور (ط) $\mathbf{B}^{-1}$۔ دکھائیں کہ $\mathbf{B}\,\mathbf{B}^{-1} = \mathbf{I}$ ہے۔ کیا $\mathbf{A}$ کا معکوس پایا جاتا ہے؟

سوال A-۹: قطار قوالب

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} i \\ 2i \\ 2 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 2 \\ (1-i) \\ 0 \end{pmatrix}$$

---

[۵۵] cofactors

[۵۶] trace

[۵۷] singular

[۵۸] unitary

[۵۹] حقیقی سمتیہ فضا (یعنی جس میں غیر سمتیات حقیقی ہوں) میں ہرمشی جوڑی دار اور تبدیل محل ایک ہوں گے، اور اکہرا قالب قائمہ: $\tilde{\mathbf{O}} = \mathbf{O}^{-1}$ ہو گا۔ مثلاً، سادہ تین بُعدی فضا میں گھومنے کو قائمہ قوالب سے ظاہر کیا جاتا ہے۔

اور سوال A-۸ میں مستعمل چو کور قوالب استعمال کرتے ہوئے درج ذیل تلاش کریں۔ (الف) $\mathbf{Aa}$، (ب) $\mathbf{a^\dagger\, b}$، (ج) $\tilde{\mathbf{a}}\, \mathbf{Bb}$، (د) $\mathbf{ab^\dagger}$

سوال A-۱۰: درج ذیل میں صریحاً قوالب تیار کرتے ہوئے دکھائیں کہ کسی بھی قالب T کو درج ذیل لکھا جا سکتا ہے۔

۱. تشاکلی قالب $\mathbf{S}$ اور خلاف تشاکلی قالب $\mathbf{A}$ کا مجموعہ۔

۲. حقیقی قالب $\mathbf{R}$ اور خیالی قالب $\mathbf{M}$ کا مجموعہ۔

۳. ہرمشی قالب $\mathbf{H}$ اور منحرف ہرمشی قالب $\mathbf{K}$ کا مجموعہ۔

سوال A-۱۱: مساوات A-۵۲، مساوات A-۵۳ اور مساوات A-۵۸ ثابت کریں۔ دکھائیں کہ دو اکہرا قوالب کا حاصل ضرب اکہرا ہو گا۔ کن شرائط کے تحت دو ہرمشی قوالب کا حاصل ضرب بھی ہرمشی ہو گا؟ کیا دو اکہرا قوالب کا مجموعہ اکہرا ہو گا؟ کیا دو ہرمشی قوالب کا مجموعہ ہرمشی ہو گا؟

سوال A-۱۲: دکھائیں کہ اکہرا قالب کے صف اور قطار عمودی معیاری سلسلہ قائم کرتے ہیں۔

سوال A-۱۳: یہ جانتے ہوئے کہ مقطع $\mathbf{T}$ = مقطع $\tilde{\mathbf{T}}$ ہے دکھائیں کہ ہرمشی قالب کا مقطع حقیقی ہو گا، اکہرا قالب کے مقطع کا معیار 1 ہو گا (جس کی بنا اس کا نام اکہرا قالب ہے) اور معیاری عمودی قالب کا مقطع $+1$ یا -1 ہو گا۔

A-۴ تبدیلی اساس

خطی تبادلہ کو ظاہر کرنے والے قالب کے ارکان یا سمتیہ کے ارکان یقیناً اساس کے انتخاب پر منحصر ہوں گے۔ آئیں اس بات پر غور کرتے ہیں کہ اساس کی تبدیلی سے یہ اعداد کس طرح تبدیل ہوں گے۔

پرانے اساسی سمتیات $|e_i\rangle$، کسی بھی سمتیہ کی طرح، ان نئے سمتیات $|f_i\rangle$ کا خطی مجموعہ ہوں گے:

$$\begin{aligned}
|e_1\rangle &= S_{11}|f_1\rangle + S_{21}|f_2\rangle + \cdots + S_{n1}|f_n\rangle\\
|e_2\rangle &= S_{12}|f_1\rangle + S_{22}|f_2\rangle + \cdots + S_{n2}|f_n\rangle\\
&\cdots\\
|e_n\rangle &= S_{1n}|f_1\rangle + S_{2n}|f_2\rangle + \cdots + S_{nn}|f_n\rangle
\end{aligned}$$

(جہاں S_{ij} مخلوط اعداد کا سلسلہ ہو گا) یا مختصراً درج ذیل۔

$$|e_j\rangle = \sum_{i=1}^{n} S_{ij}|f_i\rangle, \quad (j = 1, 2, \ldots, n) \tag{A-۶۱}$$

سے از خود ایک خطی تبادلہ ہے (مساوات A-۳۰ سے موازنہ کریں)،[۶۰] اور یوں ہم جانتے ہیں کہ ارکان کا تبادلہ کس طرح ہو گا:

$$a_i^f = \sum_{j=1}^{n} S_{ij} a_j^e \tag{A-۶۲}$$

(جہاں زیر بالا اساس کو ظاہر کرتی ہے، یعنی a^e سے مراد اساسی سمتیات $|e_i\rangle$ میں لکھے گئے ارکان ہیں)۔ قالبی روپ میں درج ذیل ہو گا۔

$$\mathbf{a}^f = \mathbf{S}\,\mathbf{a}^e \tag{A-۶۳}$$

خطی تبادلہ $\hat{T}$ کو ظاہر کرنے والا قالب، اساس کی تبدیلی سے کس طرح تبدیل ہو گا؟ پرانے اساس میں ہمارے پاس (مساوات A-۴۲)

$$\mathbf{a}^{e'} = \mathbf{T}^e\,\mathbf{a}^e$$

اور مساوات A-۶۳ تھے؛ مساوات A-۶۳ کے دونوں اطراف کو $\mathbf{S}^{-1}$ سے ضرب دے کر $\mathbf{a}^e = \mathbf{S}^{-1}\,\mathbf{a}^f$، لہٰذا

$$\mathbf{a}^{f'} = \mathbf{S}\,\mathbf{a}^{e'} = \mathbf{S}(\mathbf{T}^e\,\mathbf{a}^e) = \mathbf{S}\,\mathbf{T}^e\,\mathbf{S}^{-1}\,\mathbf{a}^f$$

حاصل[۶۱] ہو گا (مساوات A-۶۳ میں $\mathbf{a}^f$ کی جگہ $\mathbf{a}^{f'}$، وغیرہ لکھا گیا ہے)۔ ظاہری طور پر

$$\mathbf{T}^f = \mathbf{S}\,\mathbf{T}^e\,\mathbf{S}^{-1} \tag{A-۶۴}$$

ہو گا۔ عمومی طور پر دو قوالب ($\mathbf{T}_1$ اور $\mathbf{T}_2$) اس صورت **متشابہ**[۶۲] ہوں گے جب کسی (غیر نادر) قالب $\mathbf{S}$ کے لئے $\mathbf{T}_2 = \mathbf{S}\,\mathbf{T}_1\,\mathbf{S}^{-1}$ ہو۔ یوں ہم دریافت کر چکے کہ، مختلف اساس کے لحاظ سے، ایک ہی خطی تبادلہ کو ظاہر کرنے والے قوالب متشابہ ہوں گے۔ اتفاقی طور پر، اگر پہلی اساس معیاری عمودی ہو تب دوسری اساس صرف اس صورت معیاری عمودی ہو گی جب قالب $\mathbf{S}$ اکہرا ہو (سوال A-۱۶ دیکھیں)۔ چونکہ ہم صرف معیاری عمودی اساس میں کام کرتے ہیں لہٰذا ہماری دلچسپی بنیادی طور پر اکہرا متشابہت تبادلہ میں ہے۔

اگرچہ نئی اساس میں خطی تبادلہ کے ارکان بہت مختلف نظر آتے ہیں، قالب سے وابستہ دو اعداد، مقطع اور **آثار**[۶۳] قالب، تبدیل نہیں ہوتے۔ چونکہ حاصل ضرب کا مقطع، مقطعوں کا حاصل ضرب ہو گا، لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\left|\mathbf{T}^f\right| = \left|\mathbf{S}\,\mathbf{T}^e\,\mathbf{S}^{-1}\right| = |\mathbf{S}|\left|\mathbf{T}^e\right|\left|\mathbf{S}^{-1}\right| = \left|\mathbf{T}^e\right| \tag{A-۶۵}$$

---

[۶۰] یاد رہے کہ یہاں موجودہ بحث میں ہم ایک ہی سمتیہ کا دو مکمل مختلف اساس میں بات کر رہے ہیں، جبکہ وہاں بالکل مختلف سمتیہ کی بات اسی ایک اساس میں کی جا رہی تھی۔

[۶۱] یاد رہے کہ $\mathbf{S}^{-1}$ لازماً موجود ہو گا؛ اگر $\mathbf{S}$ نادر ہوتا، تب $|f_i\rangle$ فضا کا احاطہ نہ کرتے، لہٰذا اساس قائم نہ کرتے۔

[۶۲] similar

[۶۳] trace

آثار قالب (Tr) جو وتری ارکان کا مجموعہ ہے:

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{T}) \equiv \sum_{i=1}^{m} T_{ii} \tag{A-۶۶}$$

درج ذیل خاصیت رکھتا ہے (سوال A-۱۷ دیکھیں)

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{T}_1\,\mathbf{T}_2) = \mathrm{Tr}(\mathbf{T}_2\,\mathbf{T}_1) \tag{A-۶۷}$$

(جہاں $\mathbf{T}_1$ اور $\mathbf{T}_2$ کوئی بھی دو قوالب ہیں)، لہٰذا درج ذیل ہو گا۔

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{T}^f) = \mathrm{Tr}(\mathbf{S}\,\mathbf{T}^e\,\mathbf{S}^{-1}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{T}_e\,\mathbf{S}^{-1}\,\mathbf{S}) = \mathrm{Tr}(\mathbf{T}^e) \tag{A-۶۸}$$

سوال: A-۱۴ تین ابعاد میں سمتیات کی لئے معیاری اساس $(\hat{\imath}, \hat{\jmath}, \hat{k})$ استعمال کرتے ہوئے۔

ا. (مبدا کی طرف نیچے دیکھتے ہوئے) خلاف گھڑی z محور کے گرد زاویہ θ گھومنے کو ظاہر کرنے والا قالب تیار کریں۔

ب. نقطہ $(1,1,1)$ سے گزرتے ہوئے محور کے گرد (محور سے مبدا کی طرف نیچے دیکھتے ہوئے) خلاف گھڑی $120°$ گھومنے کو ظاہر کرنے والا قالب تیار کریں۔

ج. مستوی xy میں عکس کو ظاہر کرنے والا قالب تیار کریں۔

د. تصدیق کریں کہ یہ تمام قوالب معیاری عمودی ہیں اور ان کے مقطعات تلاش کریں۔

سوال: A-۱۵ عمومی اساس $(\hat{\imath}, \hat{\jmath}, \hat{k})$ میں محور x کے گرد زاویہ θ گھومنے کو ظاہر کرنے والا قالب $\mathbf{T}_x$، اور محور y کے گرد زاویہ θ گھومنے کو ظاہر کرنے والے قالب $\mathbf{T}_y$ تیار کریں۔ فرض کریں اب ہم اساس تبدیل کر کے $\hat{\imath}' = \hat{\jmath}$، $\hat{\jmath}' = -\hat{\imath}$، $\hat{k}' = \hat{k}$ لیتے ہیں۔ اساس کی اس تبدیلی کو پیدا کرنے والا قالب $\mathbf{S}$ تیار کریں، اور تصدیق کریں کہ آیا $\mathbf{S}\,\mathbf{T}_x\,\mathbf{S}^{-1}$ اور $\mathbf{S}\,\mathbf{T}_y\,\mathbf{S}^{-1}$ آپ کے توقعات کے مطابق ہیں یا نہیں۔

سوال: A-۱۶ دکھائیں کہ مماثلت قالبی ضرب برقرار رکھتا ہے (یعنی $\mathbf{A}^e\,\mathbf{B}^e = \mathbf{C}^e$ ہونے کی صورت میں $\mathbf{A}^f\,\mathbf{B}^f = \mathbf{C}^f$ ہو گا)۔ مماثلت عمومی طور پر تشاکلی، حقیقت یا ہرمشی پن برقرار نہیں رکھتا؛ لیکن، دکھائیں اگر $\mathbf{S}$ اکہرا ہو، اور $\mathbf{H}^e$ ہرمشی ہو، تب $\mathbf{H}^f$ ہرمشی ہو گا۔ دکھائیں کہ $\mathbf{S}$ صرف اور صرف اس صورت معیاری عمودی اساس کو دوسری معیاری عمودی اساس میں منتقل کرے گا اگر یہ اکہرا ہو۔

سوال: A-۱۷ ثابت کریں کہ $\mathrm{Tr}(\mathbf{T}_1\,\mathbf{T}_2) = \mathrm{Tr}(\mathbf{T}_2\,\mathbf{T}_1)$ ہو گا۔ یوں $\mathrm{Tr}(\mathbf{T}_1\,\mathbf{T}_2\,\mathbf{T}_3) = \mathrm{Tr}(\mathbf{T}_2\,\mathbf{T}_3\,\mathbf{T}_1)$ ہو گا، لیکن کیا عام طور پر $\mathrm{Tr}(\mathbf{T}_1\,\mathbf{T}_2\,\mathbf{T}_3) = \mathrm{Tr}(\mathbf{T}_2\,\mathbf{T}_1\,\mathbf{T}_3)$ ہو گا؟ اس کو ٹھیک یا غلط ثابت کریں۔ اشارہ: غلط ثابت کرنے کا بہترین ثبوت اس کی اُلٹ مثال پیش کرنا ہے؛ جتنا مثال سادہ ہو اتنا ہی بہتر ہے۔

A-۵ امتیازی سمتیات اور امتیازی اقدار

تہرا فضا میں کسی مخصوص محور کے گرد زاویہ θ گھمانے کو ظاہر کرنے والے خطی تبادلہ پر غور کریں۔ زیادہ تر سمتیات پیچیدہ انداز سے تبدیل ہوں گے (یہ اس محور کے گرد مخروط پر حرکت کریں گے)، لیکن وہ سمتیات جو اسی محور پر پائے جاتے ہوں کا رویہ نہایت سادہ ہوگا: وہ بالکل تبدیل نہیں ہوں گے ($\hat{T}|\alpha\rangle = |\alpha\rangle$)۔ اگر θ کی قیمت $180°$ ہو تب "استوائی" مستوی میں پائے جانے والے سمتیات کی علامت تبدیل ہو گی ($\hat{T}|\alpha\rangle = -|\alpha\rangle$)۔ مخلوط سمتی فضا[۶۴] میں ہر خطی تبادلہ کے، اس طرح کے "مخصوص" سمتیات پائے جاتے ہیں جو اپنے آپ کے غیر سمتی مضرب میں تبدیل ہوتے:

$$\hat{T}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle \tag{A-۶۹}$$

انہیں اس تبادلہ کے **امتیازی سمتیات**[۶۵] کہتے ہیں، اور (مخلوط) عدد λ ان کا **امتیازی قدر**[۶۶] ہے۔ (اگرچہ، معدوم سمتیہ مہمل معنوں میں مساوات A-۶۹ کو کسی بھی $\hat{T}$ اور λ کے لئے مطمئن کرتا ہے، اسے امتیازی سمتیات میں نہیں گنا جاتا۔ تکنیکی طور پر امتیازی سمتیہ سے مراد وہ غیر صفر سمتیہ ہے جو مساوات A-۶۹ کو مطمئن کرتا ہو۔) دھیان رہے کہ امتیازی سمتیہ کا ہر (غیر صفر) مضرب بھی امتیازی سمتیہ ہوگا، اور اس کی امتیازی قدر وہی ہو گی۔

کسی مخصوص اساس کے لحاظ سے، امتیازی سمتیہ مساوات قالبی روپ:

$$\mathbf{T}\,\mathbf{a} = \lambda\,\mathbf{a} \tag{A-۷۰}$$

(جہاں $\mathbf{a}$ غیر صفر ہے) یا

$$(\mathbf{T} - \lambda\,\mathbf{I})\,\mathbf{a} = \mathbf{0} \tag{A-۷۱}$$

اختیار کرتی ہے۔ (یہاں $\mathbf{0}$ ایسا **صفر قالب**[۶۷] ہے جس کے تمام ارکان صفر ہیں۔) اب، اگر قالب $(\mathbf{T} - \lambda\,\mathbf{I})$ کا معکوس پایا جاتا، ہم مساوات A-۷۱ کے دونوں اطراف کو $(\mathbf{T} - \lambda\,\mathbf{I})^{-1}$ سے ضرب دے کر $\mathbf{a} = \mathbf{0}$ اخذ کرتے۔ لیکن ہم $\mathbf{a}$ کو غیر صفر فرض کر چکے ہیں، لہٰذا $(\mathbf{T} - \lambda\,\mathbf{I})$ حقیقتاً نادر ہوگا، جس سے مراد یہ ہے کہ اس کا مقطع صفر ہو گا۔

$$\text{مقطع}(\mathbf{T} - \lambda\,\mathbf{I}) = \begin{vmatrix} (T_{11} - \lambda) & T_{12} & \dots & T_{1n} \\ T_{21} & (T_{22} - \lambda) & \dots & T_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ T_{n1} & T_{n2} & \dots & (T_{nn} - \lambda) \end{vmatrix} = 0. \tag{A-۷۲}$$

مقطع کھولنے سے λ کی الجبرائی مساوات:

$$C_n\lambda^n + C_{n-1}\lambda^{n-1} + \cdots + C_1\lambda + C_0 = 0 \qquad \text{امتیازی مساوات} \tag{A-۷۳}$$

---

[۶۴] حقیقی سمتی فضا میں (جہاں غیر سمتیہ کی قیمتیں حقیقی ہونے کی پابند ہوں گی) ایسا لازمی نہیں۔ سوال A-۱۸ دیکھیں۔
[۶۵] eigenvectors
[۶۶] eigenvalue
[۶۷] zeromatrix

حاصل ہوتی ہے، جہاں عددی سر C_i کی قیمتیں T کے ارکان کی تابع ہیں (سوال A-۲۰ دیکھیں)۔ اس کو قالب کی **امتیازی مساوات**[۶۸] کہتے ہیں؛ اور اس کے حل امتیازی اقدار کا تعین کرتے ہیں۔ یاد رہے کہ یہ n رتبی مساوات ہے، لہٰذا (**الجبرا کے بنیادی مسئلہ**[۶۹] کے تحت) اس کے n (مخلوط) جذر ہوں گے۔[۷۰] تاہم، ان میں سے چند **متعدد جذر**[۷۱] ہو سکتے ہیں، لہٰذا ہم صرف اتنا کہہ سکتے ہیں کہ $n \times n$ قالب کا کم سے کم ایک اور زیادہ سے زیادہ n منفرد امتیازی اقدار ہو سکتے ہیں۔ قالب کے تمام امتیازی اقدار کے ذخیرہ کو اس کا **طیف**[۷۲] کہتے ہیں؛ اگر دو یا دو سے زیادہ خطی غیر تابع امتیازی سمتیات کا ایک ہی امتیازی قدر ہو، ہم کہتے ہیں طیف **انحطاطی**[۷۳] ہے۔

عام طور پر، امتیازی سمتیات تیار کرنے کا سادہ ترین طریقہ یہ ہو گا کہ مساوات A-۷۰ میں ہر ایک λ ڈال کر $\mathbf{a}$ کے ارکان کے لئے قلم و کاغذ سے حل کیا جائے۔ میں یہ عمل ایک مثال حل کر کے سمجھاتا ہوں۔

مثال A-۱: درج ذیل قالب کے امتیازی اقدار اور امتیازی سمتیات تلاش کریں۔

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ -2i & i & 2i \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{A-۷۴}$$

حل: اس کی امتیازی مساوات

$$\begin{vmatrix} (2-\lambda) & 0 & -2 \\ -2i & (i-\lambda) & 2i \\ 1 & 0 & (-1-\lambda) \end{vmatrix} = -\lambda^3 + (1+i)\lambda^2 - i\lambda = 0 \tag{A-۷۵}$$

ہے، جس کے جذر 0، 1 اور i ہیں۔ پہلے امتیازی سمتیہ کے جزو (a_1, a_2, a_3) لیتے ہوئے

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ -2i & i & 2i \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = 0 \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

ہو گا، جو درج ذیل تین مساوات دیتا ہے۔

$$\begin{aligned} 2a_1 - 2a_3 &= 0 \\ -2ia_1 + ia_2 + 2ia_3 &= 0 \\ a_1 - a_3 &= 0 \end{aligned}$$

---

[۶۸] characteristic equation

[۶۹] fundamental theorem of algebra

[۷۰] یہ وہ مقام ہے جہاں حقیقی سمتی فضا کا مسئلہ مزید پیچیدہ ہوتا ہے، چونکہ ضروری نہیں امتیازی مساوات کا کوئی بھی (حقیقی) حل پایا جاتا ہو۔ سوال A-۱۸ دیکھیں۔

[۷۱] multiple roots

[۷۲] spectrum

[۷۳] degenerate

ان میں سے پہلی مساوات (a_1 کی صورت میں) a_3 کا تعین کرتی ہے: $a_3 = a_1$؛ دوسری مساوات a_2 کا تعین کرتی ہے: $a_2 = 0$؛ اور تیسری مساوات زائد از ضرورت م ہے۔ ہم $a_1 = 1$ چن سکتے ہیں (چونکہ امتیازی سمتیہ کا کوئی بھی مضرب امتیازی سمتیہ ہی ہوگا)۔

$$\mathbf{a}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \lambda_1 = 0 \text{ کے لئے} \tag{A-۷۶}$$

دوسرے امتیازی سمتیہ کے لئے (جزو کی وہی علامتیں استعمال کرتے ہوئے)

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ -2i & i & 2i \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

ہوگا، جس سے درج ذیل مساوات حاصل ہوں گی:

$$\begin{aligned} 2a_1 - 2a_3 &= a_1 \\ -2ia_1 + ia_2 + 2ia_3 &= a_2 \\ a_1 - a_3 &= a_3 \end{aligned}$$

جن کے حل $a_3 = (1/2)a_1$ ، $a_2 = [(1-i)/2]a_1$ ہیں؛ اس مرتبہ میں $a_1 = 2$ لیتا ہوں، لہٰذا

$$\mathbf{a}^{(2)} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1-i \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad \lambda_2 = 1 \text{ کے لئے} \tag{A-۷۷}$$

ہوگا۔ آخر میں، تیسرا امتیازی سمتیہ کے لئے

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 \\ -2i & i & 2i \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ia_1 \\ ia_2 \\ ia_3 \end{pmatrix}$$

درج ذیل مساوات دیگا

$$\begin{aligned} 2a_1 - 2a_3 &= ia_1 \\ -2ia_1 + ia_2 + 2ia_3 &= ia_2 \\ a_1 - a_3 &= ia_3 \end{aligned}$$

جس کے حل $a_3 = a_1 = 0$ ہیں، جہاں a_2 غیر متعین ہے۔ ہم $a_2 = 1$ چنتے ہیں، یوں درج ذیل ہوگا۔

$$\mathbf{a}^{(3)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \lambda_3 = i \text{ کے لئے} \tag{A-۷۸}$$

□

اگر امتیازی سمتیات فضا کا احاطہ کرتے ہوں (جیسا گزشتہ مثال میں کرتے تھے)، ہم انہیں اساس کے طور پر استعمال کر سکتے ہیں۔

$$\hat{T}|f_1\rangle = \lambda_1|f_1\rangle,$$
$$\hat{T}|f_2\rangle = \lambda_2|f_2\rangle,$$
$$\dots$$
$$\hat{T}|f_n\rangle = \lambda_n|f_n\rangle$$

اس اساس میں $\hat{T}$ کو ظاہر کرنے والا قالب انتہائی سادہ روپ اختیار کرتا ہے، جس میں امتیازی اقدار مرکزی وتر پر پائے جاتے ہیں، جبکہ باقی تمام ارکان صفر ہوں گے:

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix} \tag{A-۷۹}$$

اور (معمول شدہ) امتیازی سمتیات درج ذیل ہوں گے۔

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \tag{A-۸۰}$$

ایسا قالب جس کو اساس کی تبدیلی سے **وتری روپ**[۷۴] (مساوات A-۷۹) میں لایا جا سکے **وتر پذیر**[۷۵] کہلاتا ہے (ظاہر ہے کہ ایک قالب صرف اور صرف اس صورت وتر پذیر ہو گا جب اس کے امتیازی سمتیات فضا کا احاطہ کرتے ہوں)۔ (پرانی اساس میں) معمول شدہ امتیازی سمتیات کو $\mathbf{S}^{-1}$ کے قطار لیتے ہوئے، میثابہت قالب جو **وتری سازی**[۷۶] کرتا ہے، تیار کیا جا سکتا ہے۔

$$(\mathbf{S}^{-1})_{ij} = (\mathbf{a}^{(j)})_i \tag{A-۸۱}$$

---

[۷۴] diagonalform
[۷۵] diagonalizable
[۷۶] diagonalization

مثال A-۲: ہم مثال A-۱ میں حاصل $\mathbf{a}^1$ (مساوات A-۷۶)، $\mathbf{a}^2$ (مساوات A-۷۷) اور $\mathbf{a}^3$ (مساوات A-۷۸) کو $\mathbf{S}^{-1}$ کے قطار لکھتے ہیں:

$$\mathbf{S}^{-1}=\begin{pmatrix}1 & 2 & 0\\ 0 & (1-i) & 1\\ 1 & 1 & 0\end{pmatrix}$$

لہٰذا (مساوات A-۵۷ استعمال کرتے ہوئے)

$$\mathbf{S}=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 2\\ 1 & 0 & -1\\ (i-1) & 1 & (1-i)\end{pmatrix}$$

اور آپ تصدیق کر سکتے ہیں کہ

$$\mathbf{S}\mathbf{a}^{(1)}=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix},\quad \mathbf{S}\mathbf{a}^{(2)}=\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix},\quad \mathbf{S}\mathbf{a}^{(3)}=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

اور

$$\mathbf{S}\mathbf{M}\mathbf{S}^{-1}=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & i\end{pmatrix}$$

ہوں گے۔ □

قالب کو وتری روپ میں لانے کا فائدہ صاف ظاہر ہے: اس کے ساتھ کام کرنا زیادہ آسان ہے۔ بد قسمتی سے، ہر قالب کو وتری نہیں بنایا جا سکتا؛ امتیازی سمتیات کو فضا کا احاطہ کرنا ہو گا۔ اگر امتیازی مساوات کے n منفرد جذر ہوں، تب قالب لازماً وتر پذیر ہو گا، لیکن بعض اوقات متعدد جذر کی صورت میں بھی یہ وتر پذیر ہو گا۔ (غیر وتر پذیر قالب کی مثال کے لئے سوال A-۱۹ دیکھیں۔) کیا بہتر ہوتا (اگر تمام امتیازی سمتیات معلوم کرنے سے قبل) ہم جان سکتے کہ آیا قالب وتر پذیر ہے یا نہیں۔ ایک کارآمد کافی (تاہم غیر لازمی) شرط درج ذیل ہے: ایک قالب جو اپنے ہر مشی جوڑی دار کے ساتھ مقلوب ہو **عمودی**[۲۲] قالب کہلاتا ہے۔

$$[\mathbf{N}^{\dagger},\mathbf{N}]=\mathbf{0},\qquad \text{عمودی} \tag{A-۸۲}$$

ہر عمودی قالب وتر پذیر ہو گا (اس کے امتیازی سمتیات فضا کا احاطہ کرتے ہیں)۔ بالخصوص، ہر ہر مشی قالب، اور اکہرا قالب، وتر پذیر ہو گا۔

[۲۲] normal

فرض کریں ہمارے پاس دو وتر پذیر قوالب ہوں؛ کوانٹائی معاملات میں عموماً ایک سوال کھڑا ہوتا ہے: کیا انہیں (ایک ہی مماثلت قالب S کے ذریعہ) **بیک وقت وتری**[۴۸] بنایا جا سکتا ہے؟ دوسرے لفظوں میں، کیا ایسی اساس موجود ہے جس میں دونوں وتری ہوں؟ اس کا جواب ہے کہ صرف اور صرف اس صورت ایسا ممکن ہو گا جب دونوں قالب آپس میں مقلوبی ہوں (سوال A-۲۲ دیکھیں)۔

سوال A-۱۸: درج ذیل قالب مستوی xy میں گھومنے کو ظاہر کرنے والا 2×2 قالب ہے۔

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \tag{A-۸۳}$$

دکھائیں کہ (ماسوائے مخصوص زاویوں کے؛ بتائیں وہ کون سے زاویے ہیں؟) اس قالب کے کوئی حقیقی امتیازی اقدار نہیں پائے جاتے۔ (یہ اس ہندسی حقیقت کی عکاسی کرتا ہے کہ مستوی میں کسی بھی سمتیہ کو ایسا گھما کر اپنے آپ میں نہیں پہنچایا جا سکتا؛ اس کا موازنہ تین ابعاد میں گھمانے سے کریں۔) اس قالب کے، البتہ، مخلوط امتیازی اقدار اور امتیازی سمتیات پائے جاتے ہیں۔ انہیں تلاش کریں۔ قالب $\mathbf{T}$ کا وتری ساز قالب $\mathbf{S}$ تیار کریں۔ مماثلت تبادلہ $\mathbf{STS}^{-1}$ صریحاً کریں، اور دکھائیں کہ یہ $\mathbf{T}$ کو وتری روپ میں گھٹاتا ہے۔

سوال A-۱۹: درج ذیل قالب کے امتیازی اقدار اور امتیازی سمتیات تلاش کریں۔

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

کیا یہ قالب وتر پذیر ہے؟

سوال A-۲۰: دکھائیں کہ امتیازی مساوات (مساوات A-۷۳) کا پہلا، دوسرا اور آخری عددی سر درج ذیل ہے۔

$$C_n = (-1)^n, \quad C_{n-1} = (-1)^{n-1}\,\mathrm{Tr}(\mathbf{T}), \quad \text{اور} \quad C_0 = |\mathbf{T}| \tag{A-۸۴}$$

ایک 3×3 قالب جس کے ارکان T_{ij} ہوں کا C_1 کیا ہو گا؟

سوال A-۲۱: صاف ظاہر ہے کہ وتری قالب کا آثار، اس قالب کے امتیازی اقدار کا مجموعہ، اور اس کا مقطع ان کا حاصل ضرب ہو گا (صرف مساوات A-۷۹ کو دیکھنے کی دیر ہے)۔ یوں (مساوات A-۶۵ اور مساوات A-۶۸ کے تحت) کسی بھی وتر پذیر قالب کے لئے بھی ایسا ہی ہو گا۔ ہر قالب کے لئے درج ذیل ہو گا؛ اسے ثابت کریں۔

$$|\mathbf{T}| = \lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n, \quad \mathrm{Tr}(\mathbf{T}) = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n \tag{A-۸۵}$$

(یہاں کے λ، امتیازی مساوات کے n حل ہیں؛ متعدد جذر کی صورت میں، خطی غیر تابع امتیازی سمتیات کی تعداد، حلوں کی تعداد سے کم ہو سکتی ہے، لیکن ہم λ کو اتنی مرتبہ ہی گنتے ہیں جتنی مرتبہ یہ پایا جاتا ہے۔) اشارہ: امتیازی مساوات کو درج ذیل روپ میں لکھیں

$$(\lambda_1 - \lambda)(\lambda_2 - \lambda)\ldots(\lambda_n - \lambda) = 0$$

---

[۴۸] simultaneously diagonalized

اور سوال A-۲۰ کا نتیجہ زیر استعمال لائیں۔

سوال:A-۲۲

ا دکھائیں اگر دو قالب کسی ایک اساس میں مقلوبی ہوں تب وہ ہر اساس میں مقلوبی ہوں گے۔ یعنی درج ذیل ہو گا۔

$$[\mathbf{T}_1^e, \mathbf{T}_2^e] = \mathbf{0} \Rightarrow [\mathbf{T}_1^f, \mathbf{T}_2^f] = \mathbf{0} \tag{A-۸۶}$$

اشارہ: مساوات A-۶۴ استعمال کریں۔

ب دکھائیں کہ اگر دو قالب بیک وقت وتر پذیر ہوں، وہ مقلوبی ہوں گے۔[۷۹]

سوال:A-۲۳ درج ذیل قالب لیں۔

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & i \end{pmatrix}$$

ا کیا یہ عمودی ہے؟

ب کیا یہ وتر پذیر ہے؟

A-۶ ہرمشی تبادلہ

میں نے مساوات A-۴۸ میں قالب کے تبدیل محل وجوڑی دار $\tilde{\mathbf{T}}^* = \mathbf{T}^\dagger$ کو اس کے ہرمشی جوڑی دار (یا شریک قالب) کی تعریف قرار دیا۔ میں اب خطی تبادلہ کے ہرمشی جوڑی دار کی زیادہ بنیادی تعریف پیش کرتا ہوں۔ یہ وہ تبادلہ $\hat{\mathbf{T}}^\dagger$ ہے جس کا اطلاق (ہر $\langle\alpha|$ اور $\langle\beta|$ سمتیات کے) اندرونی ضرب کے پہلے رکن پر وہی نتیجہ دیتا ہے جو دوسرے سمتیہ پر $\hat{\mathbf{T}}$ کا اطلاق دیگا۔[۸۰]

$$\langle\hat{\mathbf{T}}^\dagger\alpha|\beta\rangle = \langle\alpha|\hat{\mathbf{T}}\beta\rangle \tag{A-۸۷}$$

میں آپ کو خبردار کرتا چلوں کہ اگرچہ ہر کوئی اسے استعمال کرتا ہے یہ فرسودہ علامتیت ہے۔ سمتیات $\langle\alpha|$ اور $|\beta\rangle$ ہیں ناکہ α اور β جو در حقیقت محض نام ہیں۔ بالخصوص، ان کے کوئی ریاضیاتی خواص نہیں پائے جاتے، اور "$\hat{T}\beta$" کا فقرہ بے معنی ہے۔ خطی تبادلہ سمتیہ پر ناکہ نام پر عمل کرتے ہیں۔ تاہم، اس علامت کا مطلب صاف ظاہر ہے: سمتیہ $\hat{T}|\beta\rangle$ کا نام $\hat{T}\beta$ ہے اور سمتیہ $\hat{T}^\dagger|\alpha\rangle$ اور سمتیہ $|\beta\rangle$ کا اندرونی ضرب $\langle\hat{T}^\dagger\alpha|\beta\rangle$ ہے۔ بالخصوص

$$\langle\alpha|c\beta\rangle = c\langle\alpha|\beta\rangle \tag{A-۸۸}$$

---

[۷۹] اس کا الٹ (یعنی اگر دو وتر پذیر قالب مقلوبی ہوں تب وہ بیک وقت وتر پذیر ہوں گے) ثابت کرنا اتنا آسان نہیں۔
[۸۰] آپ پوچھ سکتے ہیں، کیا ایسا تبادلہ لازماً موجود ہو گا؟ یہ ایک اچھا سوال ہے۔ اس کا جواب ہے "جی ہاں"۔

ہوگا، جبکہ جہاں کسی بھی غیر سمتیہ c کے لئے درج ذیل ہوگا۔

$$\langle c\alpha|\beta\rangle = c^*\langle\alpha|\beta\rangle \tag{A-۸۹}$$

اگر آپ (ہمیشہ کی طرح) معیاری عمودی اساس میں کام کر رہے ہوں، خطی تبادلہ کے ہرمشی جوڑی دار کو مطابقتی قالب کا ہرمشی جوڑی دار ظاہر کریگا؛ چونکہ (مساوات A-۵۰ اور مساوات A-۵۳ استعمال کرتے ہوئے) درج ذیل ہے۔

$$\langle\alpha|\hat{T}\beta\rangle = \mathbf{a}^\dagger\,\mathbf{T}\mathbf{b} = (\mathbf{T}^\dagger\,\mathbf{a})^\dagger\,\mathbf{b} = \langle\hat{T}^\dagger\alpha|\beta\rangle \tag{A-۹۰}$$

یوں یہ علامتیت شباتی ہے، اور ہم چاہیں تو تبادلہ کی زبان اور چاہیں تو قوالب کی زبان میں بات کر سکتے ہیں۔

کوانٹائی میکانیات میں، **ہرمشی تبادلہ**[۸۱] $(\hat{T}^\dagger = \hat{T})$ بنیادی کردار ادا کرتے ہیں۔ ہرمشی تبادلہ کے امتیازی سمتیات اور امتیازی اقدار تین نہایت اہم خواص رکھتے ہیں۔

ا ہرمشی تبادلہ کے امتیازی اقدار حقیقی ہوں گے۔

ثبوت: فرض کریں $\hat{T}$ کی ایک امتیازی قدر λ ہے: $\hat{T}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle$، جہاں $|\alpha\rangle \neq |0\rangle$ ہے۔ تب درج ذیل ہوگا۔

$$\langle\alpha|\hat{T}\alpha\rangle = \langle\alpha|\lambda\alpha\rangle = \lambda\langle\alpha|\alpha\rangle$$

ساتھ ہی $\hat{T}$ ہرمشی ہے لہٰذا درج ذیل ہوگا۔

$$\langle\alpha|\hat{T}\alpha\rangle = \langle\hat{T}\alpha|\alpha\rangle = \langle\lambda\alpha|\alpha\rangle = \lambda^*\langle\alpha|\alpha\rangle$$

لیکن $\langle\alpha|\alpha\rangle \neq 0$ ہے (مساوات A-۲۰) لہٰذا $\lambda = \lambda^*$ اور یوں λ حقیقی ہوگا۔

ب ہرمشی تبادلہ کے منفرد امتیازی اقدار والے امتیازی سمتیات قائمہ ہونگے۔

ثبوت: فرض کریں $\hat{T}|\alpha\rangle = \lambda|\alpha\rangle$ اور $\hat{T}|\beta\rangle = \mu|\beta\rangle$ ہیں، جہاں $\lambda \neq \mu$ ہے۔ تب

$$\langle\alpha|\hat{T}\beta\rangle = \langle\alpha|\mu\beta\rangle = \mu\langle\alpha|\beta\rangle$$

اور اگر $\hat{T}$ ہرمشی ہو درج ذیل ہوگا۔

$$\langle\alpha|\hat{T}\beta\rangle = \langle\hat{T}\alpha|\beta\rangle = \langle\lambda\alpha|\beta\rangle = \lambda^*\langle\alpha|\beta\rangle$$

لیکن (جزو-الف کے تحت) $\lambda = \lambda^*$ ہے، اور ہم فرض کر چکے ہیں کہ $\mu \neq \lambda$ ہے، لہٰذا $\langle\alpha|\beta\rangle = 0$ ہوگا۔

---
[۸۱] hermitian transformation

ج ہرمشی تبادلہ کے امتیازی سمتیات فضا کا احاطہ کرتے ہیں۔

جیسا ہم دیکھ چکے ہیں، یہ اس فقرہ کے مترادف ہے کہ ہر ہرمشی قالب کو وتری بنایا جا سکتا ہے (مساوات A-۸۲ دیکھیں)۔ یہ حقیقت جو خاصی تکنیکی ہے، وہ ریاضیاتی سہارا ہے جس پر، ایک لحاظ سے، زیادہ تر کوانٹائی میکانیات کھڑی ہے۔ چونکہ اس ثبوت کو لامتناہی ابعادی سمتی فضاؤں تک وسعت نہیں دی جا سکتی، لہٰذا یہ ایک نہایت نازک اور باریک لڑی ہے جس پر کوانٹائی میکانیات منحصر ہے۔

سوال:A-۲۴ ہرمشی خطی تبادلہ کو تمام سمتیات $|\alpha\rangle$ اور $|\beta\rangle$ کے لئے لازماً $\langle\alpha|\hat{T}\beta\rangle = \langle\hat{T}\alpha|\beta\rangle$ مطمئن کرنا ہو گا۔ دکھائیں کہ اتنا کافی ہو گا (جو ایک حیرانی کی بات ہے) کہ تمام سمتیات $|\gamma\rangle$ کے لئے $\langle\gamma|\hat{T}\gamma\rangle = \langle\hat{T}\gamma|\gamma\rangle$ ہو۔ اشارہ: پہلے $|\gamma\rangle = |\alpha + |\beta\rangle$ اور اس کے بعد $|\gamma\rangle = |\alpha\rangle + i|\beta\rangle$ لیں۔

سوال:A-۲۵ درج ذیل لیں۔

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 1 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix}$$

ا تصدیق کریں کہ $\mathbf{T}$ ہرمشی ہے۔

ب اس کی امتیازی اقدار تلاش کریں (آپ دیکھیں گے کہ یہ حقیقی ہیں)۔

ج امتیازی سمتیات تلاش کر کے ان کی معمول زنی کریں (آپ دیکھیں گے کہ یہ معیاری عمودی ہیں)۔

د اکہرا وتر ساز قالب $\mathbf{S}$ تیار کریں، اور صریحاً تصدیق کریں کہ یہ $\mathbf{T}$ کو وتری بناتا ہے۔

ھ تصدیق کریں کہ $\mathbf{T}$ کے لئے مقطع $\mathbf{T}$ اور $\operatorname{Tr}\mathbf{T}$ جو ہیں، وہی اس کے وتری روپ کے لئے بھی ہیں۔

سوال:A-۲۶ درج ذیل ہرمشی قالب لیں۔

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 2 & i & 1 \\ -i & 2 & i \\ 1 & -i & 2 \end{pmatrix}$$

ا اس قالب کا مقطع، $|\mathbf{T}|$ اور $\operatorname{Tr}(\mathbf{T})$ تلاش کریں۔

ب قالب $\mathbf{T}$ کی امتیازی اقدار تلاش کریں۔ تصدیق کریں کہ ان کا مجموعہ اور حاصل ضرب (مساوات A-۸۵ کے معنوں میں) جزو (الف) کے عین مطابق ہے۔ قالب $\mathbf{T}$ کا وتری روپ لکھیں۔

ج قالب $\mathbf{T}$ کے امتیازی سمتیات تلاش کریں۔ انحطاطی حلقہ کے اندر، دو خطی غیر تابع امتیازی سمتیات تیار کریں (ہرمشی قالب کے لئے یہ قدم ہر صورت ممکن ہو گا، لیکن کسی بھی اختیاری قالب کے لئے لازمی نہیں کہ ایسا ممکن ہو؛ سوال A-۱۹ کے ساتھ موازنہ کریں)۔ انہیں قائمہ بنائیں، اور تصدیق کریں کہ تیسرے کے لحاظ سے دونوں قائمہ ہیں۔ تینوں امتیازی سمتیات کی معمول زنی کریں۔

د ااکہرا قالب $\mathbf{S}$ تیار کریں جو $\mathbf{T}$ کی وتری سازی کرتا ہے، اور صریحاً دکھائیں کہ، $\mathbf{S}$ کو استعمال کرتے ہوئے، مماثلت تبادلہ قالب $\mathbf{T}$ کو موزوں وتری روپ میں گھٹاتا ہے۔

سوال:A-۲۷ اکہرا تبادلہ وہ ہے جس کے لئے $\hat{U}^{\dagger}\hat{U} = 1$ ہو۔

ا دکھائیں کہ کسی بھی سمتیات $\langle\alpha|$ ، $|\beta\rangle$ کے لئے $\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\hat{U}\alpha|\hat{U}\beta\rangle$ کے معنوں میں اکہرا تبادلے اندرونی حاصل ضرب برقرار رکھتے ہیں۔

ب دکھائیں کہ اکہرا تبادلہ کے امتیازی اقدار کا معیار 1 ہو گا۔

ج دکھائیں کہ منفرد امتیازی اقدار سے متعلق اکہرا قالب کے امتیازی سمتیات قائمہ ہوں گے۔

سوال:A-۲۸ قوالب کے تفاعلات ان کے ٹیلر تسلسل اتساع دیتے ہیں؛ مثلاً درج ذیل۔

$$e^{\mathbf{M}} \equiv \mathbf{I} + \mathbf{M} + \frac{1}{2}\mathbf{M}^2 + \frac{1}{3!}\mathbf{M}^3 + \cdots \tag{A-۹۱}$$

ا درج ذیل کے لئے $\exp(\mathbf{M})$ تلاش کریں۔

$$\text{(الف)}\quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{(ب)}\quad \mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & \theta \\ -\theta & 0 \end{pmatrix}$$

ب اگر $\mathbf{M}$ وتر پذیر ہو، تب درج ذیل دکھائیں۔

$$\left|e^{\mathbf{M}}\right| = e^{\mathrm{Tr}(\mathbf{M})} \tag{A-۹۲}$$

تبصرہ: اگر $\mathbf{M}$ غیر وتر پذیر ہو تب بھی یہ درست ہو گا، تاہم ایسی عمومی صورت کے لئے اس کو ثابت کرنا زیادہ مشکل ہے۔

ج دکھائیں اگر قوالب $\mathbf{M}$ اور $\mathbf{N}$ مقلوبی ہوں تب درج ذیل ہو گا۔

$$e^{\mathbf{M}+\mathbf{N}} = e^{\mathbf{M}}e^{\mathbf{N}} \tag{A-۹۳}$$

ثابت کریں (سادہ ترین متضاد مثال دے کر) کہ غیر مقلوبی قالب کے لئے مساوات A-۹۳، عام طور، درست نہیں۔

د دکھائیں اگر $\mathbf{H}$ ہرمشی ہو تب $e^{i\mathbf{H}}$ اکہرا ہو گا۔

فرہنگ