

کوانٹم میکینکات

خالد حسان یوسفزئی

جامعہ کامپیٹ، اسلام آباد

khalidyou safzai@comsats.edu.pk

۹ مارچ ۲۰۲۱

عنوان

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

v

۱	۱	تفاسل موج
۱	۱.۱	شروڈنگر مساوات
۲	۱.۲	شماراتی مفہوم
۴	۱.۳	احتمال
۴	۱.۳.۱	غیر مسلسل متغیرات
۸	۱.۳.۲	استمراری متغیرات
۱۰	۱.۴	معمول زنی
۱۳	۱.۵	معیار حرکت
۱۶	۱.۶	اصول عدم یقینیت
۱۹	۲	غیر تاج وقت شروڈنگر مساوات
۱۹	۲.۱	ساکن حالات
۲۵	۲.۲	لامستثنای چپ کو رکنواں
۳۴	۲.۳	ہارمونی سر تقش
۳۵	۲.۳.۱	الجبرائی ترکیب
۴۴	۲.۳.۲	تحلیلی ترکیب
۵۰	۲.۴	آزاد ذرہ
۵۸	۲.۵	ڈیلٹا تفاسل محفہ
۵۸	۲.۵.۱	مقید حالات اور بکھراو حالات
۵۹	۲.۵.۲	ڈیلٹا تفاسل کنواں
۷۷	۳	قواعد وضوابط
۸۳	۴	تین البادی کو انٹیمیکانیات
۸۳	۴.۱	کروی محدود میں مساوات شروڈنگر
۸۵	۴.۱.۱	علیحدگی متغیرات

۸۶ زاویائی مساوات	۴.۱.۲
۹۱ ردای مساوات	۴.۱.۳
۹۵ ہائیدروجن جو بحر	۴.۲
۹۶ ردای تفسا عمل موج	۴.۲.۱
۱۰۷	۵ متماش ذرات
۱۰۹	۶ غیر تابع وقت نظریہ اضطراب
۱۱۱	۷ تغیری اصول
۱۱۳	۸ وکب تخمین
۱۱۵	۹ تابع وقت نظریہ اضطراب
۱۱۷	۱۰ حرارت ناگزیر تخمین
۱۱۹	۱۱ بکھراؤ
۱۲۱	۱۲ پس نوشت
۱۲۳	جوابات

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

حنالد حنان یوسفزئی

28 اکتوبر 2011

باب ۱

تفاعل موج

۱.۱ شرودنگر مساوات

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

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

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

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

^۲ wave function
^۳ Schrodinger align

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

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

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

۱.۲ شماریاتی مفہوم

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

۱.۳ احتمال

۱.۳.۱ غیر مسلسل متغیرات

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

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

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

$$N(14) = 1$$

$$N(15) = 1$$

$$N(16) = 3$$

$$N(22) = 2$$

$$N(24) = 2$$

$$N(25) = 5$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

سوال 5 عمروں کے مربعوں کا اوسط کیا ہوگا؟ جواب: آپ $\frac{1}{14}$ احتمال سے $14^2 = 196$ حاصل کر سکتے ہیں، یا $\frac{1}{14}$ احتمال سے $22^2 = 484$ ، یا $\frac{3}{14}$ احتمال سے $16^2 = 256$ حاصل کر سکتے ہیں، وغیرہ وغیرہ۔ یوں ان کے مربعوں کا اوسط درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

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

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

median^{۱۵}
mean^{۱۶}
expectation value^{۱۷}

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

۱.۳.۲ استمراری متغیرات

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

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

اس مساوات میں تناسبی مستقل $\rho(x)$ کثافت احتمال^{۲۰} کہلاتا ہے۔ مستثنیٰ وقفہ a تا b کے بیچ x پایا جانے کا احتمال $\rho(x)$ کا عمل دے گا:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

(اس وقفہ کے باہر کثافت احتمال صفر ہوگا۔)

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

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

مساوات ۱.۱۷ سے اوسط فاصلہ تلاش کرتے ہیں

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

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

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

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

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

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

ج. جزو ۱ اور ب کے نتائج استعمال کرتے ہوئے مساوات ۱۱.۱۲ کی تصدیق کریں۔
سوال ۱.۲:

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

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

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

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

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

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

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

۱.۴ معمولی زنی

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

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

اس حقیقت کے بغیر شماریاتی مفہوم بے معنی ہوگی۔

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

^{۲۱}normalization

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

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

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

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

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

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

اب مساوات شرودنگر کہتی ہے کہ

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

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

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

ہوگا لہذا درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

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

square-integrable^{۲۴}

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ه. متغیر x کی توقعاتی قیمت کیا ہوگی؟

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

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

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

۱. تفاعل موج Ψ کو معمول پر لائیں۔

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

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

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

۱.۵ معیار حرکت

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

اور زاویائی معیار حرکت کو

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

۱.۶ اصول عدم یقینیت

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

جہاں A اور a مثبت حقیقی مستقل ہیں۔

۱. مستقل A تلاش کریں۔

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

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

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

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

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

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

ج. اس تقسیم کا معیاری انحراف کیا ہوگا؟

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

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

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

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

باب ۲

غیر تابع وقت شرودنگر مساوات

۲.۱ ساکن حالات

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

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

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

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

کی صورت میں لکھنا ممکن ہو جہاں ψ صرف x اور φ صرف t کا تفاعل ہے۔ ظاہری طور پر حل پر ایسی شرط مسلط کرنا درست و قدم نظر نہیں آتا ہے لیکن حقیقت میں یوں حاصل کردہ حل بہت کارآمد ثابت ہوتے ہیں۔ مزید (جیسا کہ علیحدگی متغیرات کیلئے عموماً ہوتا ہے) ہم علیحدگی متغیرات سے حاصل حلوں کو یوں آپس میں جوڑ سکتے ہیں کہ ان سے عمومی حل حاصل کرنا ممکن ہو۔ و تاہل علیحدگی حلوں کیلئے درج ذیل ہوگا

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

separation of variables¹

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

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

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

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

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

$$(۲.۴) \quad i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = E$$

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

اور

$$(۲.۵) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V = E$$

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

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

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

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

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

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

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

وقت t کا تاجع ہے، کثافت احتمال

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

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

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

ہر توقعاتی قیمت، وقت میں منتقل ہوگی؛ یہاں تک کہ ہم $\varphi(t)$ کو رد کر کے Ψ کی جگہ ψ استعمال کر کے وہی نتائج حاصل کر سکتے ہیں۔ اگرچہ بعض اوقات ψ کو ہی تعامل موج پکارا جاتا ہے، لیکن ایسا کرنا حقیقتاً غلط ہے جس سے مسئلہ کھڑے ہو سکتے ہیں۔ یہ ضروری ہے کہ آپ یاد رکھیں کہ اصل تعامل موج ہر صورت تاجع وقت ہو گا۔ بالخصوص $\langle x \rangle$ منتقل ہو گا لہذا (مساوات ۱.۳۳ کے تحت) $\langle p \rangle = 0$ ہوگا۔ ساکن حال میں کبھی بھی کچھ نہیں ہوتا ہے۔

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

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

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

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

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

$$(۲.۱۲) \quad \hat{H}\psi = E\psi$$

جس کے کل توانائی کی توقعاتی قیمت درج ذیل ہوگی۔

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

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ ψ کی معمولی ψ کی معمولی ψ کے مترادف ہے۔ مزید درج ذیل

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

کی بنا درج ذیل ہوگا۔

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

یوں H کی تغیریت درج ذیل ہوگی۔

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

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

(3) عمومی حل متبادل علیحدگی حلوں کا خطہ جوڑا ہوگا۔ جیسا ہم جلد دیکھیں گے، غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات (مساوات ۲.۵) لامتناہی تعداد کے حل $(\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots)$ دے گا جہاں ہر ایک حل کے ساتھ ایک علیحدگی مستقل (E_1, E_2, E_3, \dots) منسلک ہوگا لہذا ہر اجازتی توانائی کا ایک منفرد تعلق عمل میں پایا جائے گا۔

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

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

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

حقیقتاً تاجع وقت شرودنگر مساوات کا ہر حل درج بالا روپ میں لکھا جاسکتا ہے۔ ایسا کرنے کی خاطر ہمیں وہ مخصوص مستقل (c_1, c_2, \dots) تلاش کرنے ہوں گے جن کو استعمال کرتے ہوئے درج بالا حل (مساوات ۲.۱۵) ابتدائی شرائط مطمئن کرتا ہو۔ آپ آنے والے حصوں میں دیکھیں گے کہ ہم کس طرح یہ سب کچھ کر پائیں گے۔

linear combination^{*}
allowed energy^o

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

گزشتہ چار صفحات میں ہم بہت کچھ کہا چکا ہے۔ میں ان کو مختصر اور مختلف نقطہ نظر سے دوبارہ پیش کرتا ہوں۔ زیر غور عمومی مسئلہ کا غیر تابع وقت خفی توانائی $V(x)$ اور ابتدائی تفاعل موج $\Psi(x, 0)$ دیے گئے ہوں گے۔ آپ کو مستقبل کے تمام t کیلئے $\Psi(x, t)$ تلاش کرنا ہوگا۔ ایسا کرنے کی خاطر آپ تابع وقت شرودنگر مساوات (مساوات ۲.۱) حل کریں گے۔ پہلی قدم میں آپ غیر تابع وقت شرودنگر مساوات (مساوات ۲.۵) حل کر کے لامتناہی تعداد کے حلوں کا سلسلہ $(\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots)$ حاصل کریں گے جہاں ہر ایک کی منفرد توانائی (E_1, E_2, E_3, \dots) ہوگی۔ ٹھیک ٹھیک $\Psi(x, 0)$ پر بیٹھنے کی خاطر آپ ان حلوں کا خطی جوڑ لیں گے۔

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

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

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

چونکہ متابیل علیحدگی حل

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

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

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

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

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

حل: اس کا پہلا حصہ آسان ہے

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

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

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

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

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

۱. متبادل علیحدگی حلوں کے لئے علیحدگی مستقل E لازماً حقیقی ہوگا۔ اشارہ: مساوات ۲.۴ میں E کو $E_0 + i\Gamma$ لکھ کر (جہاں E اور Γ حقیقی ہیں)، دکھائیں کہ تمام t کے لئے مساوات 20.1 اس صورت کارآمد ہوگا جب Γ صفر ہو۔

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

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

سوال ۲.۲: دکھائیں کہ غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات کے ہر اس حل کے لئے، جس کو معمول پر لایا جاسکتا ہو، E کی قیمت لازماً $V(x)$ کی کم سے کم قیمت سے زیادہ ہوگی۔ اس کا کلاسیکی مشا کیسا ہوگا؟ اشارہ: مساوات ۲.۵ کو درج ذیل روپ میں لکھ کر

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

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

۲.۲ لامتناہی چکور کنواں

درج ذیل مندرجہ ذیل کریں (شکل 1.2)۔

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

اس مخفی توانائی میں ایک ذرہ مکمل آزاد ہوگا، ماسوائے دونوں سروں یعنی $x = 0$ اور $x = a$ پر، جہاں ایک لامتناہی قوت اس کو مضرب ہونے سے روکتی ہے۔ اس کا کلاسیکی نمونہ ایک کنواں میں ایک لامتناہی چکور کنواں گیند ہو سکتا ہے جو ہمیشہ کے لئے دیواروں سے ٹکرا کر دائیں سے بائیں اور بائیں سے دائیں حرکت کرتا رہتا ہو۔ (اگرچہ یہ ایک مندرجہ مخفی توانائی ہے، آپ اس کو اہمیت دیں۔ اگرچہ یہ بہت سادہ نظر آتا ہے البتہ اس کی سادگی کی بنا ہی یہ بہت ساری معلومات مندرجہ ذیل کرنے کے قابل ہے۔ ہم اس سے بار بار رجوع کریں گے۔)

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

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

یا

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

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

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

جہاں A اور B اختیاری مستقل ہیں۔ ان مستطالات کو مسئلہ کے سرحدی شرائط تعین کرتے ہیں۔ $\psi(x)$ کے موزوں سرحدی شرائط کیا ہوں گے؟ عموماً ψ اور $\frac{d\psi}{dx}$ دونوں استمراری ہوں گے، لیکن جہاں مخفی لامتناہی کو پہنچتا ہو وہاں صرف اول الذکر کا اطلاق ہوگا۔ (میں حصہ 5.2 میں ان سرحدی شرائط کو ثابت کروں گا اور $V = \infty$ کی صورت حال کو بھی دیکھوں گا۔ فی الحال مجھ پر یقین کرتے ہوئے میری کہی ہوئی بات مان لیں۔)

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

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

باب ۲. غیر تابع وقت شرودنگر مساوات

تاکہ کنواں کے باہر اور کنواں کے اندر حل ایک دوسرے کے ساتھ جڑ سکیں۔ یہ ہمیں A اور B کے بارے میں کیا معلومات فراہم کرتی ہے؟ چونکہ

$$\psi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = B$$

ہے لہذا $B = 0$ اور درج ذیل ہوگا۔

$$(۲.۲۳) \quad \psi(x) = A \sin kx$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

میرے قول کو پورا کرتے ہوئے، (ہر مثبت عدد صحیح n کے عوض ایک حل دے کر) غیر تابع وقت شرودنگر مساوات نے حلوں کا ایک لامتناہی سلسلہ دیا ہے۔ ان میں سے اولین چند کو شکل 2.2 میں ترسیم کیا گیا ہے جو لمبائی a کے دھاگے پر ساکن امواج کی طرح نظر آتے ہیں۔ تفاعل ψ_1 جو زمینی حالت^۹ کہلاتا ہے کی توانائی کم سے کم ہے۔ باقی حالات جن کی توانائیاں n^2 کے براہ راست بڑھتی ہیں **پہچان** حالات^{۱۰} کہلاتے ہیں۔ تفاعلات $\psi_n(x)$ چند اہم اور دلچسپ خواص رکھتے ہیں:

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

۲. توانائی بڑھاتے ہوئے ہر اگلے حال کے **عقدوں**^{۱۱} (عبور صفر) کی تعداد میں ایک (1) کا اضافہ ہوگا۔ (چونکہ آخری نقاط کے صفر کو نہیں گنا جاتا ہے لہذا) ψ_1 میں کوئی عقدہ نہیں پایا جاتا ہے، ψ_2 میں ایک پایا جاتا ہے، ψ_3 میں دو پائے جاتے ہیں، وغیرہ وغیرہ۔

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

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

ثبوت:

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

دھیان رہے کہ $m = n$ کی صورت میں درج بالا دلیل درست نہیں ہوگا؛ (کیا آپ بتا سکتے ہیں کہ ایسی صورت میں دلیل کیوں نامقابل قبول ہوگا۔) ایسی صورت میں معمول پر لانے کا عمل ہمیں بتاتا ہے کہ مکمل کی قیمت 1 ہے۔ درحقیقت، عمودیت اور معمول زنی کو ایک فقرے میں سوایا جاسکتا ہے:^{۱۳}

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

ground state^۹

excited states^{۱۰}

nodes^{۱۱}

orthogonal^{۱۲}

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

باب ۲. غیر متناہج وقت شروڈنگر مساوات

جہاں δ_{mn} کرونیکر ڈیلٹا^{۱۷} کہلاتا ہے جس کی تعریف درج ذیل ہے۔

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

ہم کہتے ہیں کہ مذکورہ بالا (قسم) ψ معیاری عمودی^{۱۵} ہیں۔

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

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

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

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

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

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

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

درج بالا چار خواص انتہائی طاقتور ہیں جو صرف لامتناہی چکور کنواں کے لیے مخصوص نہیں ہیں۔ پہلا خواص ہر اس صورت میں کارآمد ہوگا جب مخفی تشاکلی ہو؛ دوسرا، مخفی کی شکل و صورت سے قطع نظر، ایک عامل گیر خواص ہے۔

^{۱۷} Kronecker delta

^{۱۵} orthonormal

^{۱۶} complete

^{۱۷} Fourier series

^{۱۸} Dirichlet's theorem

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

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

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

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

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

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

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

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

(اگر آپ کو اس حل پر شق ہو تو اس کی تصدیق ضرور کیجیے گا۔) مجھے صرف اتنا دکھانا ہوگا کہ کسی بھی ابتدائی تفاعل موج $\psi(x, 0)$ پر اس حل کو بٹھانے کے لیے موزوں عددی سر c_n درکار ہوں گے:

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

تفاعلات ψ کی کمیت (جس کی تصدیق یہاں مسئلہ ڈرشل کرتی ہے) اس کی ضمانت دیتی ہے کہ میں ہر $\psi(x, 0)$ کو ہر صورت یوں بیان کر سکتا ہوں، اور ان کی معیاری عمودیت کی بنا c_n کو فوراً سر تسلسل سے حاصل کیا جاسکتا ہے:

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

آپ نے دیکھا: دی گئی ابتدائی تفاعل موج $\Psi(x, 0)$ کے لئے ہم سب سے پہلے پھیلاؤ کے عددی سروں c_n کو مساوات ۲.۳۷ سے حاصل کرتے ہیں۔ اس کے بعد انہیں مساوات ۲.۳۶ میں پر کر $\Psi(x, t)$ حاصل کرتے ہیں۔ تفاعل موج جانتے ہوئے دلچسپی کی کسی بھی حیرت انگیز مقدار کا حساب، باب ۱ میں متعلقہ ترکیب استعمال کرتے ہوئے، کیا جاسکتا ہے۔ یہی ترکیب کسی بھی مخفیہ کے لیے کارآمد ہوگا؛ صرف ψ کی قیمتیں اور احبازی توانائیاں یہاں سے مختلف ہوں گی۔

مثال ۲.۲: لامتناہی چکور کنواں میں ایک ذرے کا ابتدائی تفاعل موج درج ذیل ہے جہاں A ایک مستقل ہے (شکل ۳.۲)۔

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

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

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

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

A تعین کرتے ہیں:

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

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

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

یوں درج ذیل ہوگا (مساوات ۲.۳۶)۔

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

□

غیر محتاط بات چیت میں ہم کہتے ہیں کہ Ψ میں ψ_n کی مقدار کو c_n ظاہر کرتا ہے۔ بعض اوقات ہم کہتے ہیں کہ n ویں ساکن حال میں ایک ذرہ پائے جانے کا احتمال $|c_n|^2$ ہے جو درست نہیں چونکہ ذرہ حال Ψ میں ناکہ حال ψ_n میں پایا جاتا ہے؛ مزید تجربہ گاہ میں آپ کسی ایک ذرہ کو کسی ایک مخصوص حال میں نہیں دیکھ پاتے بلکہ آپ کسی مشہود کی پیمائش کرتے ہو جس کا جواب ایک عدد کی صورت میں سامنے آتا ہے۔ جیسا

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

یقیناً ان تمام احتمالات کا مجموعہ 1 ہوگا

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

جس کا ثبوت Ψ کی عمود زنی سے حاصل ہوگا (چونکہ تمام c_n غیر متابع وقت ہیں لہذا میں $t = 0$ پر ثبوت پیش کرتا ہوں۔ آپ باآسانی اس ثبوت کو عموماً دے کر کسی بھی t کے لئے ثبوت پیش کر سکتے ہیں)۔

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

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

مزید، توانائی کی توقعاتی قیمت لازماً درج ذیل ہوگی

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

جس کی بلا واسطہ تصدیق کی جاسکتی ہے: غیر متابع وقت شرودنگر مساوات کہتی ہے

$$(۲.۴۰) \quad H\psi_n = E_n\psi_n$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

دھیان رہے کہ کسی ایک مخصوص توانائی کے حصول کا احتمال غیر متابع وقت ہوگا اور یوں H کی توقعاتی قیمت بھی غیر متابع وقت ہوگی۔ کوانٹم میکانیات میں بتا توانائی^۱ کی یہ ایک مثال ہے۔

^۱conservation of energy

باب ۲. غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات

مثال ۲.۳: ہم نے دیکھا کہ مثال 2.2 میں ابتدائی تفاعل موج (شکل 3.2) زمینی حال ψ_1 (شکل 2.2) کے ساتھ متربی مشابہت رکھتا ہے۔ یوں ہم توقع کرتے گے کہ $|c_1|^2$ غالب ہوگا۔ یقیناً ایسا ہی ہے۔

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

باقی تمام عددی سرسمل کر منقذ دیتے ہیں:

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

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

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

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

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

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

سوال ۲.۵: لامتناہی چکور کنواں میں ایک ذرے کا ابتدائی تفاعل موج اولین دوساکن حالات کے برابر حصوں کا مرکب ہے۔

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

ا. $\Psi(x, 0)$ کو معمول پر لائیں۔ (یعنی A تلاش کریں۔ آپ ψ_1 اور ψ_2 کی معیاری عمودیت بروئے کار لاتے ہوئے با آسانی ایسا کر سکتے ہیں۔ یاد رہے کہ $t = 0$ پر Ψ کو معمول پر لانے کے بعد آپ یقین رکھ سکتے ہیں کہ یہ معمول شدہ ہی رہے گا۔ اگر آپ کو شک ہے، جزو-ب کا نتیجہ حاصل کرنے کے بعد اس کی صریحاً تصدیق کریں۔)

ب. $\Psi(x, t)$ اور $|\Psi(x, t)|^2$ تلاش کریں۔ مومنر الذکر کو وقت کے سائن تفاعل عمل کی صورت میں لکھیں، جیسا مثال 1.2 میں کیا گیا۔ نتائج کو سادہ صورت میں لکھنے کی خاطر $\omega \equiv \frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}$ لیں۔

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

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

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

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

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

جہاں ϕ کوئی مستقل ہے۔ $\Psi(x, t)$ ، $|\Psi(x, t)|^2$ اور $\langle x \rangle$ تلاش کر کے ان کا موازنہ پہلے حاصل شدہ نتائج کے ساتھ کریں۔ بالخصوص $\phi = \pi/2$ اور $\phi = \pi$ کی صورتوں پر غور کریں۔

سوال ۲.۷: لامستناہی چکور کنواں میں ایک ذرے کا ابتدائی تعامل موج درج ذیل ہے۔

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

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

ب. $\Psi(x, t)$ تلاش کریں۔

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

د. توانائی کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔

سوال ۲.۸: ایک لامستناہی چکور کنواں، جس کی چوڑائی a ہے، میں کمیت m کا ایک ذرہ کنواں کے بائیں حصے سے ابتدا ہوتا ہے اور یہ $t = 0$ پر بائیں نصف حصے کے کسی بھی نقطہ پر ہو سکتا ہے۔

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

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

سوال ۲.۹: لمحہ $t = 0$ پر مثال 2.2 کے تعامل موج کیلئے H کی توقعاتی قیمت تکمیل کے ذریعہ حاصل کریں۔

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

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

۲.۳ ہارمونی مرتش

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

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

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

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

ہوگا جہاں

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

ارتعاش کا (زاویائی) تعدد ہے۔ مخفی توانائی

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

ہوگی جس کی ترمیم قطع مکانی ہے۔

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

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

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

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

^{۲۲} Hooke's law
^{۲۳} Taylor series

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

کو انٹرمیکانیات میں ہمیں مخفیہ

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

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

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

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

۲.۳.۱ الجبرائی ترکیب

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

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

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

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

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

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

باب ۲. غیر تاجع وقت شرودنجر مساوات

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

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

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

آئیں دیکھیں حاصل ضرب a_-a_+ کیا ہوگا؟

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

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

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

اس علامت کے تحت درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

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

$$[x, p] = i\hbar \quad (۲.۵۱)$$

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

اسے استعمال سے مساوات ۲.۴۹ درج ذیل روپے

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

یا

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

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

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

بالخصوص درج ذیل ہوگا۔

$$(۲.۵۵) \quad [a_-, a_+] = 1$$

یوں ہیمیلٹنی کو درج ذیل بھی لکھا جاسکتا ہے۔

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

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

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

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

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

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

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

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

یوں ہم نے ایک ایسی خود کار ترکیب دریافت کر لی ہے جس سے، کسی ایک حل کو جاننے ہوئے، بالائی اور زریں توانائی کے نئے حل دریافت کیے جاسکتے ہیں۔ چونکہ a_{\pm} کے ذریعے ہم توانائی میں اوپر چڑھ یا نیچے اتر سکتے ہیں لہذا انہیں ہم **عاملین** سیزھی^{۲۷} پکارتے ہیں: a_+ **عامل رُفعت**^{۲۸} اور a_- **عامل تقلیل**^{۲۹} ہے۔ حالات کی ”سیزھی“ کو شکل 5.2 میں دکھایا گیا ہے۔

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

$$a_- \psi_0 = 0 \quad (۲.۵۸)$$

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

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

سے تفرقی مساوات

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

لکھی جاسکتی ہے جسے باآسانی حل کیا جاسکتا ہے:

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

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

(C) مستقل ہے۔ لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

ہم اس کو یہیں معمول پر لاتے ہیں:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

حل: ہم مساوات ۲.۶۱ استعمال کرتے ہیں۔

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

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

ہم اس کو قسمل وکائغذ کے سائھ معمول ٲر لاتے ہیں۔

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

جیا آپ دیکھ سکتے ہیں $A_1 = 1$ ہوگا۔

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

آپ الجبرائی طریقے سے ہیجان حالات کو معمول پر بھی لا سکتے ہیں لیکن اس کے لیے بہت محاط چلتا ہوگا لہذا دھیان رکھیے گا۔ ہم جاننے ہیں کہ $a \pm \psi_n$ اور $\psi_{n\pm 1}$ ایک دوسرے کے راست متناسب ہیں۔

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

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

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

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

ثبوت:

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

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

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

اور بالخصوص درج ذیل ہوگا۔

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

مساوات ۲.۵۷ اور مساوات ۲.۶۱ استعمال کرتے ہوئے

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

ہوگا لہذا درج ذیل ہوں گے۔

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

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

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

اس طرح درج ذیل ہوں گے۔

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

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

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

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

لامتناہی چیکور کنواں کے ساکن حالات کی طرح ہارمونی سر تقش کے ساکن حالات ایک دوسرے کے عمودی ہیں۔

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

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

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

باب ۲. غیر تابع وقت شرودنگر مساوات

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

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

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

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

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

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

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

لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

اب (ماسوائے معمول زنی کے) $(a_+)^2 \psi_n$ تفاعل ψ_{n+2} کو ظاہر کرتا ہے جو ψ_n کو عمودی ہے۔ یہی کچھ $(a_-)^2 \psi_n$ کے بارے میں بھی کہا جاسکتا ہے جو ψ_{n-2} کا راست متناسب ہے۔ یوں یہ اجزاء خارج ہو جاتے ہیں، اور ہم مساوات ۲.۶۵ استعمال کر کے باقی دو کی قیمتیں حاصل کر سکتے ہیں:

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

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

سوال ۲.۱۰:

۱. $\psi_2(x)$ تیار کریں۔

ب. ψ_0, ψ_1, ψ_2 کا خن کہ کھنچن۔

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

سوال ۲.۱۱:

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

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

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

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

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

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

ا. A تلاش کریں۔

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

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

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

سوال ۲.۱۴: ہارمونی سر تعش کے زمینی حال میں ایک ذرہ کلاسیکی تعدد ω پر ارتعاش پذیر ہے۔ ایک دم مقیاس لک 4 گنا ہو جاتا ہے لہذا $\omega' = 2\omega$ ہوگا جبکہ ابتدائی تفاعل موج تبدیل نہیں ہوگا (یقیناً ہمیشگی تبدیل ہونے کے بن Ψ اب مختلف انداز سے ارتقاپائے گا)۔ اس کا احتمال کتنا ہے کہ توانائی کی پیمائش اب بھی $\hbar\omega/2$ قیمت دے؟ پیمائشی نتیجہ $\hbar\omega$ حاصل ہونے کا احتمال کیا ہوگا؟

۲.۳.۲ تحلیلی ترکیب

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

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

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

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

شرودنگر مساوات اب درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

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

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

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

ہم نے مساوات ۲.۷۲ کو حل کرنا ہوگا۔ ایسا کرتے ہوئے ہمیں K اور (E) کی ”اجبازتی“ قیمتیں بھی حاصل ہوں گی۔ ہم اس صورت سے شروع کرتے ہیں جہاں ξ کی قیمت (یعنی x کی قیمت) بہت بڑی ہو۔ ایسی صورت میں ξ^2 کی قیمت K کی قیمت سے بہت زیادہ ہوگی لہذا مساوات ۲.۷۲ درج ذیل روپ اختیار کرے گی

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

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

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

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

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

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

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

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

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

اور

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

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

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

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

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

اس تسلسل کے جزو در جزو تفصیلات

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

اور

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

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

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

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

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

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

^{۳۳} Frobenius method

لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

یہ کلیہ **توالی** ^{۳۴} شروع و نگر مساوات کا مکمل مبدل ہے جو a_0 سے ابتداء کرتے ہوئے تمام جفت عددی سر

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

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

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

ہم مکمل حل کو درج ذیل لکھتے ہیں

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

جہاں

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

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

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

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

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

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

جس کا تخمینی حل

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

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

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

اور اب اگر h کی قیمت e^{ξ^2} کے لحاظ سے بڑھے تب ψ (جس کو ہم حاصل کرنا چاہتے ہیں) $e^{\xi^2/2}$ (مساوات ۲.۷۷) کے لحاظ سے بڑھے گا جو وہی مستقل ψ روپ ہے جو ہم نہیں چاہتے۔ اس مشکل سے نکلنے کا ایک ہی طریقہ ہے۔ معمول پر لانے کے متبادل حل کے لئے لازم ہے کہ اس کا طاقتی تسلسل اختتام پذیر ہو۔ لازمی طور پر j کی ایک ایسی بلند ترین قیمت، n پائی جائے گی جو $a_{n+2} = 0$ دیتی ہو (یوں جفت h تسلسل یا طاق h تسلسل اختتام پذیر ہوگا؛ جبکہ دوسرا لازماً ابتداء سے ہی صفر ہوگا؛ جفت n کی صورت میں $a_1 = 0$ ہوگا جبکہ طاق n کی صورت میں $a_0 = 0$ ہوگا۔ یوں متبادل مقبول طبعی حل کے لیے مساوات ۲.۸۱ کے تحت درج ذیل ہوگا

$$K = 2n + 1$$

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

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

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

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

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

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

$$h_0(\xi) = a_0$$

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

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

لہذا

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

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

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

اور

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

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

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

اور

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

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

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

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

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

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

شکل 7.2 (a) میں چند ابتدائی n کے لیے $\psi_n(x)$ ترسیم کیے گئے ہیں۔ کوانٹم مرتعش حیران کن حد تک کلاسیکی مرتعش سے مختلف ہے۔ نہ صرف اس کی توانائیاں کوانٹا شدہ ہیں بلکہ اس کی موضعی تقسیم کے بھی عجیب خواص پائے جاتے ہیں۔ مثلاً کلاسیکی طور پر احبازتی سعت کے باہر (یعنی توانائی کے کلاسیکی حیطے سے زیادہ x پر) ذرہ پایا جانے کا احتمال غیر صفر ہے (سوال ۲.۱۵ دیکھیں) اور تمام طاق حالات میں عین وسط پر ذرہ پائے جانے کا احتمال صفر ہے۔ کلاسیکی اور کوانٹائی صورتوں میں مشابہت صرف n کی بڑی قیمتوں پر پائی جاتی ہے۔ میں نے شکل 7b.2 میں کلاسیکی موضعی تقسیم کو $n = 100$ کے کوانٹائی موضعی تقسیم پر ترسیم کیا ہے۔ انہیں ہموار کرنے سے یہ ایک دوسرے پر اچھی طرح بیٹھتے ہیں (البتہ کلاسیکی صورت میں ہم ایک ارتعاش میں وقت کے لحاظ سے معتم کی تقسیم کی بات کرتے ہیں جبکہ کوانٹائی صورت میں ہم یکساں تیار کردہ حالات کے ایک سگرا کی تقسیم کی بات کرتے ہیں)۔^{۳۹}

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

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

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

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

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

اس کو استعمال کر کے H_3 اور H_4 اخذ کریں۔

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

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

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

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

^{۴۰} Rodrigues formula

باب ۲. غیر تابع وقت شرودنگر مساوات

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

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

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

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

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

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

۲.۴ آزاد ذرہ

ہم اب آزاد ذرہ (جس کے لیے 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 کوانٹم میکانیات میں یہ مسئلہ حیران کن حد تک پیچیدہ اور پراسرار ثابت ہوتا ہے۔ غیر تابع وقت شرودنگر مساوات ذیل

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

یا ذیل ہے۔

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

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

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

لامتناہی چپکور کنواں کے برعکس، یہاں کوئی سرحدی شرائط نہیں پائے جاتے ہیں جو k (اور یوں E) کی ممکنہ قیمتوں پر کسی قسم کی پابندی عائد کرتے ہوں؛ لہذا آزاد ذرہ کسی بھی (مثبت) توانائی کا حاصل ہو سکتا ہے۔ اس کے ساتھ تابعیت وقت $e^{-iEt/\hbar}$ جوڑتے ہوئے ذیل حاصل ہوگا۔

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

ایسا کوئی بھی تفاعل جو x اور t متغیرات کی مخصوص جوڑ $(x \pm vt)$ کا تابع ہو (جہاں v مستقل ہے)، غیر تغیر شکل و صورت کی ایسی موج کو ظاہر کرے گا جو v رفتار سے $\mp x$ رخ حرکت کرتی ہے۔ اس موج پر ایک اٹل نقطہ (مثلاً کم سے کم یا زیادہ سے زیادہ قیمت کا نقطہ) تفاعل کے دلیل^۲ کی ایک اٹل قیمت کا یوں مطابقتی ہو گا کہ درج ذیل ہو۔

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

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

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

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

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

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

$$(۲.۹۶) \quad p = \hbar k$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

wave packet^{۴۹}

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

Plancherel's theorem^{۵۰}

Fourier transform^{۵۱}

inverse Fourier transform^{۵۲}

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

آئیں اب اس تضاد پر دوبارہ بات کریں جس کا ذکر ہم پہلے کر چکے: جہاں مساوات 94.2 میں دیا گیا علیحدگی حل $\Psi_k(x, t)$ ، ٹھیک اس ذرہ کی رفتار سے حرکت نہیں کرتی ہے جس کو یہ بظاہر ظاہر کرتی ہے۔ حقیقتاً یہ مسئلہ وہیں پر ختم ہو گیا تھا جب ہم جان چکے کہ Ψ_k طبعی طور پر قابل حصول حل نہیں ہے۔ بحر حال آزاد ذرے کی تعامل موج (مساوات 100.2) میں سموی سمتی رفتار کی معلومات پر غور کرنا دلچسپی کا باعث ہے۔ بنیادی تصور کچھ یوں ہے: سائن متفاعلات کا خطی میل جس کے محیط کو ϕ ترمیم کرتا ہو (شکل 11.2) موجی اکٹھ ہوگا؛ یہ ”عنائف“ میں ڈھانکے ہوئے ”لہروں“ پر مشتمل ہوگا۔ انفرادی لہر کی رفتار، جس کو دوری سمتی رفتار^۹ کہتے ہیں، ہر گز ذرے کی سمتی رفتار کو ظاہر نہیں کرتی ہے بلکہ عنائف کی رفتار، جس کو گروہی سمتی رفتار^{۱۰} کہتے ہیں، ذرے کی رفتار ہوگی۔ عنائف کی سمتی رفتار لہروں کی فطرت پر منحصر ہوگی؛ یہ لہروں کی سمتی رفتار سے زیادہ، کم یا اس کے برابر ہو سکتی ہے۔ ایک دھاگے پر امواج کی گروہی سمتی رفتار اور دوری سمتی رفتار ایک دوسرے کے برابر ہوتی ہیں۔ پانی کی امواج کیلئے یہ دوری سمتی رفتار کی نصف ہوگی، جیسا آپ نے جھیل میں پتھر پھینک کر دیکھا ہو گا (اگر آپ پانی کی ایک مخصوص لہر پر نظر جائے رکھیں تو آپ دیکھیں گے کہ، پیچھے سے آگے کی طرف بڑھتے ہوئے، آغاز میں اس لہر کا محیط بڑھتا ہے جبکہ آخر میں آگے پہنچ کر اس کا محیط گھٹ کر منفر ہو جاتا ہے؛ اس دوران یہ تمام بطور ایک مجموعہ نصف رفتار سے حرکت کرتا ہے۔) یہاں میں نے دکھانا ہو گا کہ کوانٹم میکانیات میں آزاد ذرے کے تعامل موج کی گروہی سمتی رفتار اس کی دوری سمتی رفتار سے دگنی ہے، جو عین ذرے کی کلاسیکی رفتار ہے۔

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

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

یہاں $\omega = (\hbar k^2 / 2m)$ ہے، لیکن جو کچھ میں کہنے جبار ہوں وہ کسی بھی موجی اکٹھ کیلئے، اس کے انتشاری رشتہ^{۱۱} ω کا متغیر k کے لحاظ سے کلیہ سے قطع نظر، درست ہوگا۔ ہم مندرجہ ذیل ہیں کہ کسی مخصوص قیمتی k_0 پر $\phi(k)$

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

نوکیلی صورت اختیار کرتا ہے۔ (ہم زیادہ وسعت کا k بھی لے سکتے ہیں لیکن ایسے موجی اکٹھ کے مختلف اجزاء مختلف رفتار سے حرکت کرتے ہیں جس کی بنیاد موجی اکٹھ بہت تیزی سے اپنی شکل و صورت تبدیل کرتا ہے اور کسی مخصوص سمتی رفتار پر حرکت کرتے ہوئے ایک مجموعہ کا تصور بے معنی ہو جاتا ہے۔) چونکہ k_0 سے دور مکمل متابل نظر انداز ہے لہذا ہم تفاعل $\omega(k)$ کو اس نقطہ کے گرد ٹیلر تسلسل سے پھیلانا صرف ابتدائی اجزاء لیتے ہیں:

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

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

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

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

وقت $t = 0$ پر

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

جبکہ بعد کے وقت پر درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

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

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

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

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

باب ۲. غیر تابع وقت شرودنگر مساوات

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

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

سوال ۲.۱۸: دکھائیں کہ متغیر x کے کسی بھی تفاعل کو لکھنے کے دو معادل طریقے $[Ae^{ikx} + Be^{-ikx}]$ اور $[C \cos kx + D \sin kx]$ ہیں۔ مستقالات C اور D کو مستقالات A اور B کی صورت میں لکھیں۔ اسی طرح مستقالات A اور B کو مستقالات C اور D کی صورت میں لکھیں۔ تبصرہ: کو انٹیمیکانیات میں جب $V = 0$ ہو، قوت نمائی تفاعل حرکت کرتے امواج کو ظاہر کرتی ہے اور انہیں استعمال کرتے ہوئے آزاد ذرے پر تبصرہ کرنا زیادہ آسان ہوتا ہے، جبکہ \sin اور \cos ساکن امواج کو ظاہر کرتی ہے جو لامستناہی چکور کنواں میں پائی جاتی ہے۔

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

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

۱. مسئلہ ڈرشلے کہتا ہے کہ وقفہ $[-a, +a]$ پر کسی بھی تفاعل $f(x)$ کو فوریسر تسلسل کے پھیلاوے ظاہر کیا جاسکتا ہے:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n \sin(n\pi x/a) + b_n \cos(n\pi x/a)]$$

دکھائیں کہ اس کو درج ذیل معادل روپ میں بھی لکھا جاسکتا ہے۔

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\pi x/a}$$

a_n اور b_n کی صورت میں c_n کیا ہوگا؟

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

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

ج. n اور c_n کی جگہ نئے متغیرات $k = (n\pi/a)$ اور $F(k) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} a c_n$ استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ جبزو-۱ اور جبزو-۲ درج ذیل روپ اختیار کرتے ہیں

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

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

د. حد $a \rightarrow \infty$ لیتے ہوئے مسئلہ پلانشرال حاصل کریں۔ تبصرہ: $F(k)$ کی صورت میں $f(x)$ اور $f(x)$ کی صورت میں $F(k)$ کے کلیات کے آغاز دو بالکل مختلف جگہوں ہوں گے۔ اس کے باوجود حد $a \rightarrow \infty$ کی صورت میں ان دونوں کی ساخت ایک دوسرے کے ساتھ مشابہت رکھتی ہیں۔

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

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

جہاں A اور a مثبت حقیقی مستقل ہیں۔

ا. $\Psi(x, 0)$ کو معمول پر لائیں۔

ب. $\phi(k)$ تلاش کریں۔

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

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

سوال ۲.۲۲: گاؤس موج اکٹھا ایک آزاد ذرے کا ابتدائی تغا عمل موج درج ذیل ہے

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

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

ا. $\Psi(x, 0)$ کو معمول پر لائیں۔

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

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

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

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

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

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

وقت $t = 0$ پر $|\Psi|^2$ کا حنا کہ (بظور x کا تغا عمل) بنائیں۔ کسی بڑے t پر دوبارہ حنا کہ کھینچیں۔ وقت گزرنے کے ساتھ ساتھ $|\Psi|^2$ کو کیا ہوگا؟

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

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

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

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

۲.۵ ڈیلٹا فنکشن

۲.۵.۱ مقید حالات اور بکھراو حالات

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

کلاسیکی میکانیات میں ایک بعدی غیر تاجع وقت مخفیہ دو مکمل طور پر مختلف حرکات پیدا کر سکتی ہے۔ اگر $V(x)$ ذرے کی کل توانائی E سے دونوں جانب زیادہ بلند ہو (شکل 12.2) تب یہ ذرہ اس مخفی توانائی کے کنواں میں ”پھنسا“ رہے گا: یہ **والپیٹھ نقاط**^{۵۲} کے پیچ آگے پیچھے حرکت کرتا رہے گا اور کنواں سے باہر نہیں نکل سکے گا (ماسوائے اس صورت میں کہ آپ اسے اضافی توانائی فراہم کریں جس کی ابھی ہم بات نہیں کر رہے ہیں)۔ ہم اسے مقید **حالت**^{۵۳} کہتے ہیں۔ اس کے برعکس اگر E ایک (یا دونوں) جانب $V(x)$ سے تجاوز کرے تب، لامتناہی سے آتے ہوئے، مخفی توانائی کے زیر اثر ذرہ اپنی رفتار کم یا زیادہ کرے گا اور اس کے بعد والپس لامتناہی کو لوٹے گا (شکل 12.2)۔ (یہ ذرہ مخفی توانائی میں پھنس نہیں سکتا ہے، ماسوائے اس صورت کہ اس کی توانائی (مثلاً رگڑ کی بنا) گھٹے، لیکن ہم یہاں بھی ایسی صورت کی بات نہیں کر رہے ہیں)۔ ہم اسے **بکھراو حالت**^{۵۴} کہتے ہیں۔ بعض مخفی توانائیاں صرف مقید حال پیدا کرتی ہیں (مثلاً ہارمونی سر تیش)؛ بعض صرف بکھراو حال پیدا کرتی ہیں (مثلاً پہاڑ مخفیہ جو کہیں پر بھی نیچے نہ جھکتا ہو)؛ اور بعض، ذرہ کی توانائی پر منحصر، دونوں اقسام کے حال پیدا کرتی ہیں۔

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

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

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

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

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

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

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

۲.۵.۲ ڈیلٹا تفاعل کنواں

مبداء پر لامستثنای کم چوڑائی اور لامستثنای بلند ایسا نوکیلا تفاعل جس کا رقبہ اکائی ہو (شکل 13.2) ڈیلٹا تفاعل^{۵۷} کہلاتا ہے۔

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

نقطہ $x = 0$ پر تفاعل مستثنای نہیں ہے لہذا تکنیکی طور پر اس کو تفاعل کہنا غلط ہوگا (ریاضی دان اسے متعمم تفاعل^{۵۸} یا متعمم تقیم^{۵۹} کہتے ہیں)۔ تاہم اس کا تصور نظریہ طبیعیات میں اہم کردار ادا کرتا ہے۔ (مثال کے طور پر، برقی حرکیات کے میدان میں نقطی بار کی کثافت بار ایک ڈیلٹا تفاعل ہوگا)۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ $\delta(x - a)$ نقطہ a پر اکائی رقبہ کا نوکیلی تفاعل ہوگا۔ چونکہ $\delta(x - a)$ اور ایک سادہ تفاعل $f(x)$ کا حاصل ضرب نقطہ a کے علاوہ ہر مقام پر صفر ہوگا لہذا $\delta(x - a)$ کو $f(x)$ سے ضرب دینا، اسے $f(a)$ سے ضرب دینے کے مترادف ہے:

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

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

^{۵۷} Dirac delta function

^{۵۸} generalized function

^{۵۹} generalized distribution

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

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

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

تکمل کی علامت کے اندر یہ نقطہ a پر انتفاع عمل $f(x)$ کی قیمت ”اٹھاتا“ ہے۔ (لازمی نہیں کہ تکمل $-\infty$ تا $+\infty$ ہو، صرف اتنا ضروری ہے کہ تکمل کے دائرہ کار میں نقطہ a شامل ہو لہذا $a - \epsilon$ تا $a + \epsilon$ تکمل لینا کافی ہوگا جہاں $\epsilon > 0$ ہے۔)

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

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

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

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

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

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

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

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

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

مساوات ۲.۱۱۶ کا عمومی حل

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

فنکشن $\psi(x)$ کو شکل 14.2 میں ترسیم کیا گیا ہے۔ دوم سرحدی شرط ہمیں ایسا کچھ نہیں بتاتی ہے؛ (لا
 متناہی چکور کٹواں کی طرح) جوڑ پر مخفی لامتناہی ہے اور فنکشن کی ترسیل سے واضح ہے کہ $x = 0$ پر اس میں بل
 پایا جاتا ہے۔ مزید اب تک کی کہانی میں ڈیلٹا فنکشن کا کوئی کردار نہیں پایا گیا۔ ظاہر ہے کہ $x = 0$ پر ψ
 کے تفرق میں عدم استمراری ڈیلٹا فنکشن تعیین کرے گا۔ میں یہ عمل آپ کو کر کے دکھاتا ہوں جہاں
 آپ یہ بھی دیکھ پائیں گے کہ کیوں $\frac{d\psi}{dx}$ عموماً استمراری ہوتا ہے۔

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

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

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

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

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

باب ۲. غیر تاجع وقت شرودنگر مساوات

یہاں درج ذیل ہوگا (مساوات ۲.۱۲۳):

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

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

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

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

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

آخر میں ψ کو معمول پر لاتے ہوئے

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 2|B|^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx = \frac{|B|^2}{k} = 1$$

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

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

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

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

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

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

جہاں

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

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

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

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

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

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

$$F + G = A + B \quad (۲.۱۳۳)$$

تفرقات درج ذیل ہوں گے۔

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

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

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

یا مختصراً:

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

دونوں سرحدی شرائط مطابقت کرنے کے بعد ہمارے پاس دو مساوات (مساوات ۲.۱۳۳ اور ۲.۱۳۵) جبکہ چار نامعلوم متغیرات A ، B ، C اور D بلکہ k شامل کرتے ہوئے پانچ نامعلوم متغیر ہوں گے۔ یہ معمول پر لانے کے قابل حال نہیں ہے لہذا معمول پر لانا مددگار ثابت نہیں ہوگا۔ بہتر ہوگا کہ ہم رک کر ان متغیرات کی انفرادی طبعی اہمیت پر غور کریں۔ آپ کو یاد ہوگا کہ e^{ikx} (کے ساتھ تایم وقت جزو ضربی $e^{-iEt/\hbar}$ منسلک کرنے سے) دائیں رخ حرکت کرتا ہوا انتقال معنی 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 چیط ہے، B بائیں رخ واپس لوٹتے ہوئے موج کا چیط ہے، F (مساوات ۲.۱۳۲) دائیں رخ نکل کر چلتے ہوئے موج کا چیط جبکہ H دائیں سے آمدی موج کا چیط ہے (شکل 15.2 دیکھیں)۔ بکھراؤ کے عمومی تجربہ میں عموماً ایک رخ (مثلاً بائیں) سے ذرات پھینکے جاتے ہیں۔ ایسی صورت میں دائیں جانب سے آمدی موج کا چیط صفر ہوگا:

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

باب ۲. غیر تاجع وقت شرودنکر مساوات

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

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

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

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

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

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

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

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

$$(۲.۱۴۰) \quad R + T = 1$$

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

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

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

یہاں تک باقی سب ٹھیک ہے لیکن ایک اصولی مسئلہ باقی ہے جسے ہم نظر انداز نہیں کر سکتے ہیں۔ چونکہ بکھراؤ موج کے تفاعل معمول پر لانے کے متبادل نہیں ہیں لہذا یہ کسی صورت بھی حقیقی ذرے کے حال کو ظاہر نہیں کر سکتے ہیں،

incident wave^{۱۲}
reflected wave^{۱۳}
transmitted wave^{۱۴}

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

reflection coefficient^{۱۶}
transmission coefficient^{۱۷}

لیکن ہم اس مسئلے کا حل جانتے ہیں۔ ہمیں ساکن حالات کے ایسے خطی جوڑ تیار کرنے ہونگے جو معمول پر لائے جانے کے قابل ہوں، جیسا ہم نے آزاد ذرہ کے لیے کیا تھا۔ حقیقی طبعی ذرات کو یوں تیار کردہ موجی اکٹھے ظاہر کرے گا۔ یہ ظاہری طور پر سیدھا اصول ہے جو عملی استعمال میں پیچیدہ ثابت ہوتا ہے لہذا یہاں سے آگے مسئلے کو کمپیوٹر کی مدد سے حل کرنا بہتر ہوگا۔^{۶۸} چونکہ توانائی کی قیمتوں کا پورا سلسلہ استعمال کیے بغیر آزاد ذرے کے تعامل موج کو معمول پر نہیں لایا جاسکتا ہے لہذا R اور T کو (بالترتیب) E کے متضرب ذرات کی تخمینی شرح انکاس اور شرح ترسیل سمجھنا چاہیے۔

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

متعلقہ مساوات جانتے ہوئے آئیں ڈیلٹا تعامل رکاوٹ (شکل 16.2) کے مسئلہ پر غور کریں۔ ہمیں صرف α کی علامت تبدیل کرنی ہوگی۔ ظاہر ہے یہ تحدیدی حال کو ختم کرے گا (سوال 2.2)۔ دوسری جانب، شرح انکاس اور شرح ترسیل جو α^2 پر منحصر ہیں تبدیل نہیں ہوں گے۔ کتنی عجیب بات ہے کہ ایک ذرہ ایک رکاوٹ کے اندر سے یا ایک کنواں کے اوپر سے ایک حتمی آسانی کے ساتھ گزرتا ہے۔ کلاسیکی طور پر جیسا کہ آپ جانتے ہیں، ایک ذرہ کبھی بھی لامتناہی فضا کے رکاوٹ کو عبور نہیں کر سکتا، چاہے اس کی توانائی کتنی ہی کیوں نہ ہو۔ حقیقتاً کلاسیکی مسائل بکھراؤ غیر دلچسپ ہوتے ہیں: اگر $E > V$ تب $R = 0$ اور $T = 1$ ہوگا اور ذرہ ہر صورت رکاوٹ عبور کر پائے گا؛ اگر $E < V$ تب $E = 0$ اور $T = 1$ ہوگا اور ذرہ پہاڑی پر وہاں تک چڑھے گا جہاں تک اس میں دم ہو اور اس کے بعد اسی راستے واپس لوٹے گا۔ کوانٹائی بکھراؤ زیادہ دلچسپ ہوتے ہیں: اگر $E < V$ تب بھی ایک ذرے کا مخفیہ عبور کرنے کا احتمال غیر صفر ہوگا۔ اس منظر کو سرنگے زنی^{۶۹} کہتے ہیں جس پر جدید برقیات کا بیشتر حصہ منحصر ہے اور جو خوردبین میں حیرت انگیز ترقی کے پشت پر ہے۔ اس کے برعکس $E > V$ کی صورت میں بھی ذرے کے انکاس کا احتمال غیر صفر ہوگا؛ اگرچہ میں آپ کو کبھی بھی مشورہ نہیں دوں گا کہ چھت سے نیچے کودیں اور توقع رکھیں کہ کوانٹم میکانیات آپ کی جان بچا پائے گی (سوال 35.2 سوال 35.2 دیکھئے گا)۔

سوال ۲.۲۳: درج ذیل کمالات کی قیمتیں تلاش کریں۔

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

$$۲. \int_0^{\infty} [\cos(3x) + 2] \delta(x - \pi) dx$$

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

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

سوال ۲.۲۳: ڈیلٹا انتفاعلات زیر علامت مکمل رہتے ہیں اور دو فکٹرے $D_1(x)$ اور $D_2(x)$ جو ڈیلٹا انتفاعلات پر مسببتی ہیں صرف درج صورت میں ایک دوسرے کے برابر ہوں گے

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

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

۱. درج ذیل دکھائیں

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

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

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

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

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

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

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

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

تبصرہ: یہ کلیہ دیکھ کر ایک عزت مند ریاضی دان پریشان ضرور ہوگا۔ اگرچہ $x = 0$ کے لئے یہ عمل لامتناہی ہے اور $x \neq 0$ کی صورت میں چونکہ مکمل ہمیشہ کے لئے ارتعاش پذیر رہتا ہے لہذا یہ (صنریا کسی دوسرے عدد کو) مرکوز نہیں ہوتا ہے۔ اس کی پیوندکاری کے طریقے پائے جاتے ہیں (مثلاً، ہم $-L$ تا $+L$ تکمل لے کر، مساوات ۲.۱۲۴ کو، $L \rightarrow \infty$ کرتے ہوئے مستناہی مکمل کی اوسط قیمت تصور کر سکتے ہیں)۔ یہاں دشواری کا سبب یہ ہے کہ مسئلہ پلانشرل کے (مربع عملیت) کی بنیادی شرط کو ڈیلٹا انتفاعلات عمل مطمئن نہیں کرتا ہے (صفحہ ۵۲ مربع عملیت کی شرط حاشیہ میں پیش کی گئی ہے)۔ اس کے باوجود مساوات ۲.۱۲۴ نہایت مددگار ثابت ہو سکتا ہے اگر اس کو احتیاط سے استعمال کیا جائے۔

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

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

ا. اس مخفیہ کا حنا کہ کھینچیں۔

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

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

ہم آخری مثال کے طور پر مستثنائی چوکور کنواں کی مخفی کو لیتے ہیں

$$\alpha = \hbar^2/4ma \quad (۲.۱۴۵)$$

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & -a \leq x \leq a \\ 0 & |x| > a \end{cases} \quad (۲.۱۴۶)$$

جہاں V_0 ایک مثبت مستقل ہے۔ شکل 17.2 ڈیلٹا فنکشنل کنواں کی طرح یہ مخفی کو بھی مقید حالات کے ساتھ جہاں $E < 0$ ہوگا بکھراؤ حالات بھی پیدا کرتا ہے جہاں $E > 0$ ہوگا۔ ہم پہلے مقید حالات پر غور کرتے خطے $x < -a$ جہاں مخفی کو صفر ہے شرح ونگر کی مساوات درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi, \quad (۲.۱۴۷)$$

یا

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = K^2\Psi \quad (۲.۱۴۸)$$

جہاں

$$K = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (۲.۱۴۹)$$

حقیقی اور مثبت ہے۔ اس کا عمومی حل $\Psi(x) = A \exp(-kx) + B \exp(kx)$ ہے لیکن $x \rightarrow -\infty$ کے صورت میں اس کا پہلا حبز لامتناہی تک بڑھتا ہے۔ یوں پہلی کی طرح مساوات 17.2 دیکھیے گا۔ طبعی طور پر مثال قبول حل درج ذیل ہوگا

$$\Psi(x) = B e^{Kx}, \text{ for } x < -a \quad (۲.۱۵۰)$$

باب ۲. غیر تابع وقت شرودنگر مساوات

خط $-a < x < a$ میں $V(x) = -V_0$ ہوگا جہاں شرودنگر کی مساوات درج ذیل روپ اختیار کرے گی
یا $V(x) = -V_0$

$$(۲.۱۵۱) \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -l^2 \psi$$

جہاں

$$(۲.۱۵۲) \quad l = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{h}$$

اگرچہ مقید حالات کے لئے E منفی ہوتا ہے اسے $-V_0$ سے بڑا ہونا ہوگا تاکہ V_{min} کمتر ہو۔ سوال 2.2 دیکھیے گا۔ لہذا l بھی حقیقی اور مثبت ہوگا۔ اس کا عمومی حل

$$(۲.۱۵۳) \quad \psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx)$$

ہوگا۔ $-a < x < a$ کے لئے جہاں C اور D اختیاری مستقل ہیں۔ آخر میں خط $x > a$ جہاں ایک بار پھر منفی کو صفر ہے عمومی حل $\psi(x) = F \exp(-kx) + G \exp(kx)$ ہوگا لیکن یہاں $x \rightarrow \infty$ کی صورت میں دوسرا جز لامتناہی تک بڑھتا ہے لہذا تامل مقبول حل درج ذیل ہوگا $\psi(x) = F \exp(-kx)$

اگلے قدم میں ہمیں سرحدی شرائط مسلط کرنے ہوں گے۔ ψ اور $\frac{d\psi}{dx}$ $-a$ اور $+a$ پر استمراری ہے۔ یہ جاننے ہوئے کہ یہ منفی کو جفت تقابل ہے ہم کچھ وقت بچا سکتے ہیں اور ہم فرض کر سکتے ہیں کہ حل مثبت یا تاک ہوں گے سوال حوالہ سوال 1.2 ج اس کی افادیت یہ ہے کہ ہمیں سرحدی شرائط صرف ایک طرف مثلاً $+a$ پر مسلط کرنے ہوں گے۔ چونکہ $\psi(x) = \pm \psi(-x)$ ہے لہذا دوسرا طرف ہمیں خود بخود حاصل ہو جائے گا۔ میں جفت حل حاصل کرتا ہوں جبکہ آپ کو سوال حوالہ سوال 2.9 میں تاک حل تلاش کرنے ہوں گے۔ \sin جفت ہے جبکہ \cos تاک ہے۔ لہذا میں درج ذیل حروف کے حل کی تلاش میں ہوں۔

$$(۲.۱۵۴) \quad \psi(x) = \begin{cases} Fe^{-kx} & x > a \\ D \cos(lx) & 0 < x < a \\ \psi(-x) & x < 0 \end{cases}$$

نقطہ $x = a$ پر سائی کی استمرار کہتی ہے کہ

$$(۲.۱۵۵) \quad Fe^{-ka} = D \cos(la)$$

اور $\frac{d\psi}{dx}$ کی استمرار کہتی ہے کہ

$$(۲.۱۵۶) \quad -kFe^{-ka} = -lD \sin(la)$$

مساوات حوالہ مساوات 153.2 کو مساوات حوالہ مساوات 152.2 سے تقسیم کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہوگا

$$(۲.۱۵۷) \quad k = l \tan(la)$$

چونکہ k اور l دونوں E کے تفاعل ہیں لہذا یہ کلیہ احبازتی توانائیاں دے گا۔ E کے لئے حل کرنے سے پہلے ہم کچھ بہتر علامتیں متعارف کرتے ہیں $z = la$ اور $z_0 = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mV_0}$ مساوات 146.2 اور مساوات 148.2 کے تحت $(k^2 + l^2) = 2mV_0/\hbar^2$ اور ہوگا لہذا $ka = \sqrt{z_0^2 - z^2}$ ہوگا اور مساوات مساوات 154.2 درج ذیل روپ اختیار کرے گی۔

$$(۲.۱۵۸) \quad \tan z = \sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$$

* یہ z لہذا E کی ماورائی مساوات ہے جس کا متغیر z_0 ہے۔ جو کنواں کی جسامت کا ناپ ہے۔ اس کو اعدادی طریقے سے کمپیوٹر کے ذریعے حل کیا جاسکتا ہے $\tan z$ اور $\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$ کو ایک ہی حوال پر ترسیم کرتے ہوئے ان کے نکتہ تکاتے لیتے ہوئے حل کیا جاسکتا ہے۔ شکل 18.2 دو تحدیدی صورتیں زیادہ دلچسپی کے حامل ہیں۔

۱. ایک چوڑا گہرا کنواں اگر z_0 بڑا ہو تب $z_n = n\pi/2$ کے لئے n نکتہ تکاتے سے ذرا نیچے ہوگا یوں درج ذیل ہوگا

$$(۲.۱۵۹) \quad E_n + V_0 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2}$$

اب $E + V_0$ کنواں کی تہ سے اوپر توانائی کو ظاہر کرتی ہے اور مساوات کا دایاں ہاتھ ہمیں ایسے لامتناہی چوکور کنواں کی توانائیاں دیتا ہے جس کی چوڑائی $2a$ ہو۔ مساوات 27.2 دیکھیں بلکہ n تاکہ ہونے کی بنیاد کل توانائیوں کا آدھا نہیں دیتی ہے جیسا آپ سوال سوال 29.2 میں دیکھیں گے کل توانائیوں کی باقی نصف تعداد تاکہ تفاعل موج سے حاصل ہوگی۔ یوں $\infty \rightarrow V_0$ کرتے ہوئے مستثنای چوکور کنواں سے لامتناہی چوکور کنواں حاصل ہوگا البتہ کسی بھی مستثنای V_0 کی صورت میں مقید حالات کی تعداد مستثنای ہوگی۔

۲. کم گہرائی کا کنواں جیسے جیسے z_0 کم کیا جاتا ہے مقید حالات کی تعداد کم سے کم ہوتی جاتی ہے حتیٰ کہ آخر کار $(z_0 < \pi/2)$ کیلئے جہاں کمتر تاکہ حال ختم ہوتا ہے صرف ایک مقید حال رہ جائے گا۔ ایک دلچسپ بات یہ ہے کہ چاہے کنواں کتنا ہی کمزور کیوں نہ ہو جائے یہ ہر صورت ایک عدد مقید حال دے گا۔

۳.

اگر آپ ψ مساوات 151.2 کو معمول پر لانے میں دلچسپی رکھتے ہیں سوال سوال 30.2 تو کیجئے گا جب کہ میں اب بکھراؤ حالات $E > 0$ کی طرف پڑھتا ہوں بائیں ہاتھ جہاں $V(x) = 0$ ہے درج ذیل ہوگا

$$(۲.۱۶۰) \quad \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{ikx}$$

باب ۲. غنیر تاج وقت شرودنگر مساوات

($x < -a$) جہاں عموماً کی طرح درج ذیل ہوگا

$$(۲.۱۶۱) \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

کنواں کے اندر جہاں $V(x) = -V_0$ ہے

$$(۲.۱۶۲) \quad \psi(x) = C \sin(lx) + D \cos(lx)$$

($-a < x < a$) جہاں پہلے کی طرح درج ذیل ہوگا

$$(۲.۱۶۳) \quad l \equiv \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}$$

دائیں جانب جہاں ہم فرض کرتے ہیں کہ کوئی عمودی موج نہیں پائی جاتی درج ذیل ہوگا

$$(۲.۱۶۴) \quad \psi(x) = Fe^{ikx}$$

یہاں عمودی پتا A ہے اور انعکاسی پتا B ہے اور ترسیلی پتا F ہے چار سرحدی شرائط پائے جاتے ہیں نقطہ $x = -a$ پر * کے تحت استمرار درج ذیل ہوگا * نقطہ $x = a$ پر $\psi(x)$ استمرار درج ذیل دیتی ہے

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

مثبت $x = a$ پر $\psi(x)$ کی استمرار درج ذیل دیتی ہے

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

اور $x = -a$ پر $\frac{d\psi}{dx}$ کے تحت درج ذیل ہوگا

$$(۲.۱۶۷) \quad C \sin(la) + D \cos(la) = Fe^{ika}$$

ہم ان میں سے C اور D کو خارج کر کے باقی دو کو حل کر کے B اور F تلاش کر سکتے ہیں۔ سوال سوال 32.2 دیکھیے گا

$$(۲.۱۶۸) \quad B = i \frac{\sin(2la)}{2kl} (l^2 - k^2) F$$

$$(۲.۱۶۹) \quad F = \frac{e^{-2ika} A}{\cos(2la) - i \frac{(k^2 + l^2)}{2kl} \sin(2la)}$$

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

$$(۲.۱۷۰) \quad T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E + V_0)} \sin^2 \left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(E + V_0)} \right)$$

دیکھیے گا جہاں بھی سائن کی قیمت صفر ہو وہاں $T = 1$ ہوگا یعنی کنواں شفاف ہوگا یعنی جب

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

جہاں n عدد صحیح ہے۔ یوں مسلسل ترسیل کے لیے درکار توانائی درج ذیل ہوگی

$$(۲.۱۷۲) \quad E_n + V_0 = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(2a)^2}$$

۔ جولا مستثنائی چوکور کنواں کی ایجاداتی توانائیاں ہیں۔ شکل 19.2 میں توانائی کے لحاظ سے T کو ترسیم کیا گیا ہے۔

سوال ۲.۲۹: مستثنائی چوکور کنواں کے تاک مقید حال کی انتقال موج کا تجزیہ کریں۔ احبازتی توانائیوں کی ماروائی مساوات اخذ کر کے اسے ترسیمی طور پر حل کریں اس کی دونوں تحدیدی صورتوں پر غور کریں۔ کیا ہر صورت ایک تاک مقید حال پایا جائے گا؟

سوال ۲.۳۰: مساوات مساوات 151.2 میں دیا گیا $\psi(x)$ کو معمول پر لا کر مستقل D اور F کا تعین کریں۔

سوال ۲.۳۱: ڈیراک ڈیٹا انتقال عمل کو ایک ایسے مسطحیت کی تحدیدی صورت تصور کیا جاسکتا ہے جس کا رقبہ ایک 1 رکھتے ہوئے اس کی چوڑائی صفر کے قریب سے قریب اور قد لامتناہی کے قریب سے قریب کرتے ہوئے حاصل ہو۔ دکھائیں کہ اگرچہ ڈیٹا انتقال عمل کنواں مساوات مساوات 114.2 لامتناہی گہرا ہے۔ یہ $z_0 \rightarrow 0$ کی بنا ایک کمزور مخفی کو ہے۔ ڈیٹا انتقال عمل مخفی کو کو مستثنائی چوکور کنواں کی تحدیدی صورت لیتے ہوئے اس کی مقید حال کی توانائی تعین کریں۔ تصدیق کریں کہ آپ کا جواب مساوات 129.2 کے مطابق ہے۔ دکھائیں کہ موزوں حد کی صورت میں مساوات مساوات 169.2 کی تخفیف مساوات 141.2 دے گی

سوال ۲.۳۲: مساوات مساوات 167.2 اور مساوات 168.2 آئینہ کریں۔ اشارہ مساوات مساوات 165.2 اور مساوات 166.2 اور C اور D کے لئے F کی صورت میں حل کریں

$$(۲.۱۷۳) \quad C = \left[\sin(la) + i \frac{k}{l} \cos(la) \right] e^{ika} F; D = \left[\cos(la) - i \frac{k}{l} \sin(la) \right] e^{ika} F$$

انہیں واپس مساوات مساوات 163.2 اور مساوات 164.2 میں پر کریں شرح ترسیل حاصل کر کے مساوات مساوات 169.2 کی تصدیق کریں۔

سوال ۲.۳۳: مستطیلی رکاوٹ جو خط $-a < x < a$ میں $V_0 > 0$ سے v_x لینے مساوات مساوات 145.2 دیتا ہے کی شرح ترسیل تعین کریں۔ تین صورتیں $E < V_0$ ، $E = V_0$ اور $E > V_0$

باب ۲. غیر تاجع وقت شرودنکر مساوات

کو علیحدہ علیحدہ حل کریں آپ دیکھیں گے کہ رکاوٹ کے اندر تینوں صورتوں میں تنافس عمل موج ایک دوسرے سے مختلف ہوگا۔ جسزوی جواب $E < V_0$ کے لئے

$$(۲.۱۷۴) \quad T^{-1} = 1 + \frac{V_0^0}{4E(V_0 - E)} \sinh^2 \left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \right)$$

سوال ۲.۳۴: درج ذیل سیدھی مخفی کو پر غور کریں

$$(۲.۱۷۵) \quad V(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 0 \\ V_0 & x > 0 \end{cases}$$

۱. صورت $E < V_0$ کیلئے شرح انعکاس کا حساب لگائیں اپنے جواب پر تبصرہ کریں

۲. $E > V_0$ کی شرح انعکاس کا حساب لگائیں

۳. ایسا مخفی کو جو رکاوٹ کے دائیں طرف واپس صفر کی طرف نہیں جاتا، میں ترسیلی موج کی رفتار مختلف ہوگی۔ لہذا اس صورت شرح ترسیل $|F|^2 / |A|^2$ نہیں ہوگا جہاں A عمودی پیتا اور F ترسیلی پیتا ہے۔ دکھائیں کہ

$$(۲.۱۷۶) \quad T = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}} \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

$V_0 > e$ کیلئے درج ذیل ہوگا۔ اشارہ آپ اے مساوات مساوات 98.2 سے حاصل کر سکتے ہیں یا زیادہ خوبصورتی کے ساتھ اور کم معلومات حاصل کیے بغیر احتمال رو سے حاصل کر سکتے ہیں سوال 19.2 صورت $E < V_0$ کی صورت میں T کیا ہوگا؟

۴. صورت $E > V_0$ کے لیے سی ڈی مخفی کو کے لئے شرح ترسیل تلاش کر کے $T + R = 1$ کی تصدیق کریں۔

سوال ۲.۳۵: ایک ذرہ جس کی کیت $E > 0$ ہو اور حرکی توانائی V_0 ہو ایک اچانک گہرائی کے مخفی توانائی شکل 34.2 کی طرف بڑھتا ہے۔

۱. صورت $E = V_0/3$ کی صورت میں اس کی انعکاس کا احتمال کیا ہوگا؟ اشارہ یہ بالکل سوال سوال 34.2 کی طرح ہے بس یہاں سیدھی اوپر کے بجائے نیچے کی طرف ہے۔

۲. میں نے شکل کو یوں بنایا ہے جیسے ایک گاڑی ایک چٹان سے نیچے گرنے والی ہے البتہ گاڑی کی انعکاس کا احتمال جزائف کے نتیجے سے بہت کم ہوگا۔ یہ مخفی کو کیوں ایک چٹان کی صحیح ترجمانی نہیں کرتا ہے؟ اشارہ شکل شکل 20.2 میں جیسے ہی گاڑی $x = 0$ پر سے گزرتی ہے اس کی توانائی عدم استمرار کے ساتھ گر کر $-V_0$ ہو جاتی ہے۔ کیا ایک گرتے ہوئے گاڑی کے لیے ایسا ہی ہوگا؟

سوال ۲.۳۶: عین امکدہ پر $-a < x < +a$ کے بیچ لامستناہی چوکور کنواں پایا جاتا ہے۔ جس کے اندر $V(x) = \infty$ اور جس کے باہر $V(x) = 0$ ہے۔ وقت کا غیر متابع شرودنگر مساوات پر موزوں سرحدی شرائط ملط کر کے اسے حل کریں۔ تصدیق کریں کہ آپ کی توانائیاں عین میری حاصل کردہ توانائیوں کے مطابق ہے مساوات مساوات 27.2 اور تصدیق کریں کہ میری ψ مساوات میں مساوات 28.2 کی جگہ $x \rightarrow (x+a)/2$ پر کر کے اور دوبارہ معمول پر لانے سے آپ کی سائی حاصل ہوگی۔ اپنے اولین تین حل ترسیم کریں اور ان کا موازنہ شکل شکل 2.2 سے کریں۔ دھیان رہے کہ یہاں کنواں کی چوڑائی $2a$ ہے۔

سوال ۲.۳۷: لامستناہی چوکور کنواں مساوات مساوات 19.2 میں ایک ذرے کے ابتدائی تفاسل موج درج ذیل ہے

$$\psi(x, 0) = A \sin^3(\pi x/a) \quad (2.144)$$

- $(0 \leq x \leq a)$ مستقل A تعین کر کے $\psi(x, t)$ تلاش کریں اور $(0 \leq x \leq a)$ کے لحاظ سے وقت کا حساب لگائیں۔ توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہے؟ اشارہ۔ $\sin(m\theta)$ اور $\cos(m\theta)$ کو تخفیف کے بعد $\sin^n \theta$ اور $\cos^n \theta$ کے خطی جوڑ لکھ جاسکتا ہے جہاں $m = 0, 1, 2, \dots, n$ ہوگا۔

سوال ۲.۳۸: کیت m کا ایک ذرہ لامستناہی چوکور کنواں میں مساوات مساوات 19.2 میں زمینی حال میں ہے۔ اچانک کنواں کا دایاں دیوار a سے حرکت کرتے ہوئے $2a$ منتقل ہوتا ہے جس سے کنواں کی چوڑائی دگنی ہو جاتی ہے۔ اس عمل سے لحاتی طور پر تفاسل موج اثر انداز نہیں ہوتا۔ اسذرہ کی توانائی کی پیمائش اب کی جاتی ہے۔

۱. کس نتیجہ کا امکان سب سے زیادہ ہے؟ اس نتیجے کے حصول کا احتمال کیا ہوگا؟

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

۳. توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہوگی؟ اشارہ۔ اگر آپ دیکھیں کہ آپ کو لامستناہی تسلسل کا سامنا پڑ گیا ہے تب کوئی دوسری ترکیب استعمال کریں۔

سوال ۲.۳۹:

۱. دکھائیں کہ لامستناہی چوکور کنواں میں ایک ذرے کی تفاسل موج کو انشائی تجبیدی نام $T = 4ma^2 / \pi \hbar$ کے بعد دوبارہ اپنے اصل روپ میں واپس آتا ہے۔ یعنی کسی بھی حال کے لئے نہ صرف ساکن حال کیلئے $\psi(x, T) = \psi(x, 0)$

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

۳. کس توانائی کیلئے یہ دو تجبیدی اوقات ایک دوسرے کے برابر ہیں؟

سوال ۲.۴۰: ایک ذرہ جس کی کیت m ہو درج ذیل مخفیہ کو میں پایا جاتا ہے

$$V(x) = \begin{cases} \infty & (x < 0) \\ -32\hbar^2/ma^2 & (0 \leq x \leq a) \\ 0 & (x > a) \end{cases} \quad (2.148)$$

باب ۲. غنیر تابع وقت شروع و نگر مساوات

۱. اس کے مقید حلوں کی تعداد کیا ہوگی؟

۲. مقید حال میں سب سے زیادہ توانائی کی صورت میں کنواں کے باہر یعنی $x > a$ پر ذرہ پائے جانے کا احتمال کیا ہوگا؟ جواب 0.542 اگر چہ یہ کنواں میں مقید ہے لیکن کنواں سے باہر اور کنواں کے اندر اس کی موجودگی کا امکان ایک جیسا ہے۔

سوال ۲.۴۱: ایک ذرہ جس کی کمیت m ہے ہارمونی سر تعیش کی مخفی کو مساوات 43.2 میں درج ذیل حال سے ابتدا کرتا ہے

$$\psi(x, 0) = A \left(1 - 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right)^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad (۲.۱۷۹)$$

جہاں A کوئی مستقل ہے۔

۱. توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہے؟

۲. مستقبل کے لمحہ ٹی پر فعال موج درج ذیل ہوگا

$$\psi(x, T) = B \left(1 + 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right)^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \quad (۲.۱۸۰)$$

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

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

$$V(x) = \begin{cases} (1/2)m\omega^2 x^2 & x > 0 \\ \infty & x < 0 \end{cases} \quad (۲.۱۸۱)$$

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

سوال ۲.۴۳: آپ نے سوال سوال 22.2 میں ساکن غوثی ذرہ پلندہ موج کا تجزیہ کیا۔ اب ابتدائی تقاضا عمل موج

$$\psi(x, 0) = Ae^{-ax^2} e^{ilx} \quad (۲.۱۸۲)$$

جہاں l ایک حقیقی مستقل ہے شروع کرتے ہوئے متحرک غوسی پلندہ موج کے لیے وہی مسئلہ دوبارہ حل کریں۔

سوال ۲.۴۴: مکدہ پر درج ذیل لامتناہی چوکور کنواں جس کے وسط پر ڈیلٹا تقاضا عمل رکاوٹ ہو کے لیے وقت کا غنیر تابع شروع و نگر مساوات حل کریں۔

$$v(x) = \begin{cases} \alpha \delta(x) & -a < x < +a \\ \infty & |x| \geq a \end{cases} \quad (۲.۱۸۳)$$

جفت اور طاق فنکشن امواج کو علیحدہ علیحدہ حل کریں۔ انہیں معمول پر لانے کی ضرورت نہیں ہے۔ احباب ذی توانائیوں کو اگر ضرورت ہو تریسی طور پر تلاش کریں۔ ان کا موازنہ ڈیلٹا فنکشن کی غیر موجودگی میں مطابقتی توانائیوں کے ساتھ کریں۔ تاکہ حلوں پر ڈیلٹا فنکشن کا کوئی اثر نہ ہونے پر تبصرہ کریں۔ تحدیدی صورت $0 \rightarrow a$ اور $a \rightarrow \infty$ تبصرہ کریں۔

سوال ۲.۴۵: ایسے دو یا دو سے زیادہ وقت کے غیر تابع شرودنگر مساوات کے حل جن کی توانائی E ایک دوسرے جیسی ہو کو انخطاطی حال کہتے ہیں۔ مثال کے طور پر آزاد ذرہ حالات دوہری انخطاطی ہیں۔ ان میں سے ایک حل دائیں رخ اور دوسرا بائیں رخ حرکت کو ظاہر کرتا ہے۔ لیکن ہم نے ایسے کوئی انخطاطی حل نہیں دیکھے جو معمول پر لانے کے قابل ہوں اور یہ محض ایک اتفاق نہیں ہے۔ درج ذیل مسئلہ ثابت کریں۔ ایک دور میں کوئی مقید انخطاطی حال بھی پائے جاتے ہیں۔ اشارہ۔ فرض کریں ψ_1 اور ψ_2 ایسے دو حل ہوں جن کی توانائی E ایک دوسرے جیسی ہو۔ حل ψ_1 کی شرودنگر مساوات کو ψ_2 سے ضرب دیں اور اس سے ψ_2 کے شرودنگر مساوات کو ψ_1 سے ضرب دے کر منفی کریں۔ یوں دکھائیں کہ $\psi_1 d\psi_2/dx - \psi_2 d\psi_1/dx$ ایک مستقل ہوگا۔ اب $0 \rightarrow \psi$ پر معمول پر لانے کے قابل ہر حل $\pm\infty$ ہوگا اس حقیقت کو استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ یہ مستقل درحقیقت صفر ہوگا اس سے آپ یہ نتیجہ اخذ کر سکتے ہیں کہ ψ_2 دراصل ψ_1 کا مضرب ہوگا لہذا یہ دو حل الگ الگ نہیں ہو سکتے ہیں۔

سوال ۲.۴۶: فرض کریں کہ m کا ایک معطی ایک دایری چملا پر بے رگڑ حرکت کرتا ہے۔ چملا کا محیط L ہے۔ یہ ایک آزاد ذرہ کی طرح ہے لیکن یہاں $\psi(x+L) = \psi(x)$ ہوگا۔ اس کے ساکن حال تلاش کریں اور انہیں معمول پر لائیں اور ان کے مطابقتی ایجاباتی توانائیاں تلاش کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ ہر توانائی E_n کے لئے دو آپس میں غیر تابع حل پائے جائیں گے جن میں سے ایک گھڑی وار اور دوسرا خلاف گھڑی حرکت کے لیے ہوگا۔ جنہیں آپ $\psi_n^+(x)$ اور $\psi_n^-(x)$ کہہ سکتے ہیں۔ سوال 45.2 کے مسئلہ کو مد نظر رکھتے ہوئے آپ اس انخطاط کے بارے میں کیا کہیں گے یہ مسئلہ یہاں کارآمد کیوں نہیں ہے؟

باب ۳

قواعد و ضوابط

سوال ۳.۱: توانائی اور وقت کی عدم یقینیت کے اصول کی ایک دلچسپ روپ $\tau / \pi = \Delta t$ ہے جہاں ابتدائی حال $\Psi(x, 0)$ کے عمومی حال تک ارتقاء کے لیے درکار وقت τ ہے۔ دو معیاری عمومی ساکن حالات کے دو برابر حصوں پر مشتمل اختیاری مخفی قوت $\Psi(x, 0) = 1/\sqrt{2}[\psi_1(x) + \psi_2(x)]$ کا انتقال موج استعمال کرتے ہوئے اس کی چانچ پڑتال کریں۔

سوال ۳.۲: ہارمونی مرتعش کی ساکن حالات کی معیاری عمومی اساس مساوات 67.2 میں $\langle n|x|n' \rangle$ اور $\langle n|p|n' \rangle$ تلاش کریں۔ آپ سوال 12.2 میں $n' = n$ تلاش کر چکے ہیں۔ وہی ترقیب موجودہ عمومی مسئلے میں استعمال کریں۔ میکانیکی لامتناہی X اور P تلاش کریں۔ دکھائیں کہ اس اساس میں $H = (1/2m)p^2 + (m\omega^2/2)x^2$ وتری ہے۔ کیا اس کے وتری ارکان آپکے توقع کے مطابقت ہیں۔ جسزوی جواب

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

سوال ۳.۳: ایک ہارمونی مرتعش ایسی حال میں ہے کہ اس کی توانائی کو پیمائش $(1/2)\hbar\omega$ یا $(3/2)\hbar\omega$ ایک دوسرے جیسے احتمال کے ساتھ دے گی۔ اس حال میں $\langle p \rangle$ کی زیادہ سے زیادہ ممکنہ قیمت کیا ہوگی۔ اگر لمحہ $t = 0$ پر اس کی $\langle p \rangle$ کی زیادہ سے زیادہ ممکنہ قیمت ہو تو $\Psi(x, t)$ کیا ہوگا۔

سوال ۳.۴: 35-3

ہارمونی مرتعش کے منطقی حالات۔

ہارمونی مرتعش کے ساکن حالات $\psi_n(x)$ مساوات 67.2 میں صرف $n = 0$ عین

عدم یقینیت کی حد $\hbar/2$ $\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$ پر بیٹھتا ہے جیسا آپ سوال 12.3 میں معلوم کر چکے ہیں عمومی طور پر $\sigma_x \sigma_p = (2n + 1) \hbar/2$ تاہم چند خطی جوڑ جنہیں منطقی حالات کہتے ہیں بھی عدم یقینیت کے حاصل ضرب تو کم سے کم کرتے ہیں جیسا ہم دیکھتے ہیں یہ عامل سس تکلیل کے امتیازی تفال ہوتے ہیں۔

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

جہاں امتیازی α کوئی بھی مخلوط عدد ہو سکتا ہے۔

حبز الف

حال $|\alpha\rangle$ میں $\langle x \rangle, \langle x^2 \rangle, \langle p \rangle$ اور $\langle p^2 \rangle$ دریافت کریں۔ مثال 5.2 کی ترقیب استعمال کریں۔ اور یاد رکھیں کہ a_- منفی کا پر مش جوڑی دار a_+ ہے ساتھ ہی یہ مندرجہ نہ کریں کہ α حقیقی ہے۔

حبز (ب)

$\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$ دکھائیں کہ $\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$

حبز (ج)

کسی بھی دوسرے تفال موج کی طرح منطقی حال کو توانائی امتیازی حالات کی صورت میں پھیلا یا جا سکتا ہے۔

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

رکھائیں کہ پھیلاؤ کے عددی سر درج ذیل ہوں گے۔

$$C_n = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} C_0$$

حبز (د)

$|\alpha\rangle$ کو معمول پر لاتے ہوئے C_0 تعین کریں۔ جواب $\exp(-|\alpha|^2/2)$

حبز (ح)

اس کے ساتھ وقت کی تابعت

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

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

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

یوں منطقی حال ہمیشہ منطقی حال ہی رہے گا اور عدم یقینیت کے حاصل ضرب کو تم سے کم برقرار رکھا ہے۔

حبز (و) کیا زمینی حال $|n=0\rangle$ از خود منطقی حال ہے اگر ایسا ہو تب امتیازی متدرک یا ہوگا

سوال 36.3: 3.5

مقصود عدم یقینیت کا اصول:

عمومی عدم یقینیت کا اصول مساوات 62.3 درج ذیل کہتا ہے

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

جہاں

$$\hat{C} \equiv i[\hat{A}, \hat{B}]$$

ہے

جب الف

دکھائے کہ اس کو زیادہ مستحکم کرتے ہوئے درج ذیل روٹ میں لکھا جاسکتا ہے

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

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

اشارہ: مساوات 60.3 میں $\text{Re}(z)$ اجزاء لیں

(ب)

مساوات 99.3 کو $A=B$ کے لئے جانچیں چونکہ اس صورت میں $C=0$ ہے لہذا معیاری عدم یقینیت غیر اہم ہوگا

بد قسمتی سے مقصود عدم یقینیت کا اصول بھی زیادہ مددگار ثابت نہیں ہوتا

سوال ۳.۶: 37.3:

ایک نظام جو 3 صدی ہے کہ ہیمیلٹونین کو درج ذیل کا الف ظاہر کرتی ہے

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

جہاں a, b, c حقیقی اعداد ہیں۔

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

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

تب $\delta(t)$ کیا ہوگا؟

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

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

تب δt کیا ہوگا؟

سوال ۳۷: 38.3: ایک نظام جو 3 صدی ہے کہ ہیمیلٹونین کو درجہ ذیل کا الف ظاہر کرتی ہے:

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

دیگر دو مشہور B اور A کو درجہ ذیل کا الف ظاہر کرتی ہے

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

جہاں λ, ω, μ حقیقی مثبت اعداد ہیں۔
 AH اور B کی امتیازی افتدار اور معمول پر لائے گئے امتیازی تفاعل تلاش کریں۔
 ب) یہ نظام کسی عمومی حال

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

سے استدار کرتا ہے جہاں $|c_1|^2 + |c_2|^2 + |c_3|^2 = 1$ ہے۔
 لمحہ $t=0$ پر B اور A کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔
 ج) $\delta(s)$ کیا ہوگا؟ لمحہ t پر اس نظام کی توانائی کی پیمائش کیا قیمتیں دے سکتی ہے؟ اور ہر ایک کا انفرادی احتمال کیا ہوگا؟ اسی سوال کے جوابات B اور A کے لیے بھی تلاش کریں۔

سوال ۳۸: 39.3: ایک تفاعل $f(x)$ جس کو Taylor تسلسل کی صورت میں پھیلا یا جا سکتا ہے کے لیے درجہ ذیل دکھائیں:

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

جہاں x_0 کوئی بھی مستقل فاصلہ ہو سکتا ہے۔ اسی وجہ کے بنا \hat{p}/\hbar کو فضا میں انتقال کا پیدا کار کہتے ہیں۔ یہاں دیہان رہے کہ ایک حاصل کی قوت نمائی کی قوتی تسلسلی پھیلاؤ کی تعریف درجہ ذیل ہے

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

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

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

جہاں t_0 کوئی بھی مستقل وقت ہوگا۔ اسی وجہ کی بنا \hat{H}/\hbar - وقت میں انتشار کا پیدا کار کہتے ہیں۔
(ج) دکھائیں کہ لمحہ $t_0 + t$ پر ہر کی متغیر Q کی توقعاتی قیمت کو درج ذیل لکھا جاسکتا ہے

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

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

سوال ۳.۹: 40-3:

- (ا) ایک آزاد ذرہ کے لیے وقت تائید schrodinger مساوات کو معیار حرکت فضا میں لکھ کر حل کریں۔ جواب:
- $$(\exp(-ip^2t/2m\hbar))\Phi(p, 0)$$
- (ب) متحرک گائی موجی اکڑ سوال 2-43 کے لیے $\Phi(p, 0)$ تلاش کریں اور $\Phi(p, t)$ تیار کریں۔ ساتھ ہی $|\Phi(p, t)|^2$ تیار کریں۔ اب دیکھیں گے کہ یہ وقت کا تابع نہیں ہوگا۔
- (ج) Φ پر مبنی موضوع نکلات حل کرتے ہوئے $\langle p \rangle$ اور $\langle p^2 \rangle$ تلاش کر کے سوال 2-43 کی حاصل کردہ جوابات کے ساتھ موازنہ کریں۔
- (د) دکھائیں کہ $\langle H \rangle = \langle p \rangle^2/2m + \langle H \rangle_0$ ہوگا جہاں زیر نوہشت میں 0 کان گائی کو ظاہر کرتا ہے اور اپنے نتیجے پر تبصرہ کریں۔

باب ۴

تین ابعادی کوانٹم میکانیات

۴.۱ کروی محدود میں مساوات شرودنگر

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

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

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

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

ہیملٹنی اعمال H کو کلاسیکی توانائی

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

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

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

یوں درج ذیل ہوگا

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

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

جہاں

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

کارٹیزی محدود میں لاپلاچ ہے۔

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

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

جہاں مکمل کوپوری فنکشن پر لینا ہوگا۔ اگر مختفی توانائی وقت کی تابع نہ ہو تب ساکن حالات کا مکمل سلسلہ پایا جائے گا:

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

جہاں فنکشن تفاعل موج ψ_n غیر تابع وقت شرودنگر مساوات

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

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

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

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

سوال ۴.۱:

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

جواب:

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

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

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

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

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

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

جواب:

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

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

۳.۱.۱ علیحدگی متغیرات

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

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

یوں کروئی محمد میں تابع وقت شرودنگر مساوات درج ذیل ہوگی۔

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

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

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

اس کو مساوات ۳.۱۴ میں پر کر کے

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

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

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

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

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

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

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

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

حل کریں۔

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

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

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

۴.۱.۲ زاویائی مساوات

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

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

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

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:

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

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

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

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

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

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

متغیر ϕ کی مساوات زیادہ آسان ہے۔

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

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

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

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

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

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

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

جدول ۴.۱: ابتدائی چند لیژانڈر کشیر رکنیاں۔

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

مساوات θ

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

اتنی سادہ نہیں ہے۔ اس کا حل درج ذیل ہے

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

کروی محدود میں جہمی رکن درج ذیل ہوگا

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

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

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

$$\begin{array}{ll}
Y_2^{\pm 2} = (\frac{15}{32\pi})^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} & Y_0^0 = (\frac{1}{4\pi})^{1/2} \\
Y_3^0 = (\frac{7}{16\pi})^{1/2} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) & Y_1^0 = (\frac{3}{4\pi})^{1/2} \cos \theta \\
Y_3^{\pm 1} = \mp (\frac{21}{64\pi})^{1/2} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\phi} & Y_1^{\pm 1} = \mp (\frac{3}{8\pi})^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\
Y_3^{\pm 2} = (\frac{105}{32\pi})^{1/2} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\phi} & Y_2^0 = (\frac{5}{16\pi})^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1) \\
Y_3^{\pm 3} = \mp (\frac{35}{64\pi})^{1/2} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\phi} & Y_2^{\pm 1} = \mp (\frac{15}{8\pi})^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}
\end{array}$$
$$(r, \mathbf{r}) \quad \int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = 1 \quad \text{and} \quad \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1$$
$$(r, \mathbf{r}) \quad Y_l^m(\theta, \phi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta)$$
$$(r,rr) \quad \int_0^{2\pi} \int_0^\pi [Y_l^m(\theta, \phi)]^* [Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi)] \sin \theta \, d\theta \, d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

جب کہ m کو مقناطیس کو آٹانائی عدد^{۱۵} کہتے ہیں۔ سوال ۴.۳: مساوات ۲.۷، ۲.۸، ۲.۹ اور ۳.۲ استعمال کر کے Y_2^1 اور Y_0^0 تیار کریں۔ تصدیق کریں کہ یہ معمول شدہ اور عموادی ہیں۔

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

۱۲ معمول ذرتی مستقل کو سوال 54.4 میں حاصل کیا گیا ہے، نظریہ زاویائی معیار حرکت میں مستقل علاقیت کے ساتھ ہم آہستگی کی خاطر e (جس کی قیمت 1 یا -1 ہوگی) کی علامت کا انتخاب کیا گیا ہے۔ ردھیان رہے کہ $Y_l^{-m} = (-1)^m (Y_l^m)^*$ ہوگا۔

spherical harmonics^{۱۳}
azimuthal quantum number^{۱۴}
magnetic quantum number^{۱۵}

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

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

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

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

اخذ کریں۔ (اشارہ: مکمل بالخصوص استعمال کریں۔)

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 ہوگا؛ مخفیہ $V(r)$ کی شکل و صورت تفاعل موج کے صرف رداسی حصہ، $R(r)$ ، پر اثر انداز ہوگی جسے مساوات ۴.۱۶ تعین کرتی ہے۔

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

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

$$u(r) \equiv rR(r) \quad (۴.۳۶)$$

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

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

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

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

^{۱۶} radial equation

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

^{۱۸} effective potential

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

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

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

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

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

اس کے تفاعلات موج اور احبازتی توانائیاں تلاش کریں۔

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

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

جہاں ہمیشہ کی طرح درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

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

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

centrifugal term^{۱۹}

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

جو عین یک بعدی لامتناہی چپکور کنواں کی توانائیاں ہیں (مساوات ۲.۲۷)۔ $u(r)$ کو معمول پر لانے سے $A = \sqrt{2/a}$ حاصل ہوگا۔ زاویائی جبزو (جو $1/\sqrt{4\pi}$) $Y_0^0(\theta, \phi)$ کی بنا غیر اہم ہے (کو ساتھ منسلک کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہوگا۔

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

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

(ایک اختیاری عدد صحیح l کے لئے) مساوات ۴.۴۱ کا عمومی حل

$$u(r) = Arj_l(kr) + Brn_l(kr). \quad (۴.۴۵)$$

بہت جانا پہچانا نہیں ہے جہاں $j_l(x)$ رتبہ l کا کروئی بیلل تفاعل^{۲۲} ہے اور $n_l(x)$ رتبہ l کا کروئی نیومن تفاعل^{۲۳} ہے جن کی تعریضات درج ذیل ہیں۔

$$j_l(x) \equiv (-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\sin x}{x}; \quad n_l(x) \equiv -(-x)^l \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \frac{\cos x}{x} \quad (۴.۴۶)$$

مشال کے طور پر درج ذیل ہوں گے، وغیرہ وغیرہ۔

$$\begin{aligned} j_0(x) &= \frac{\sin x}{x}; \quad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}; \\ j_1(x) &= (-x) \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \left(\frac{\sin x}{x} \right) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}; \\ j_2(x) &= (-x)^2 \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^2 \frac{\sin x}{x} = x^2 \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right) \frac{x \cos x - \sin x}{x^3} \\ &= \frac{3 \sin x - 3x \cos x - x^2 \sin x}{x^3} \end{aligned}$$

جدول ۴.۴ میں ابتدائی چند کروئی بیلل اور نیومن تفاعلات پیش کیے گئے ہیں۔ متغیر x کی چھوٹی قیمت کے لئے جہاں

$$\sin x \approx x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \dots \quad \text{اور} \quad \cos x \approx 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \dots$$

ہوں گے، درج ذیل ہوں گے، وغیرہ وغیرہ۔

$$j_0(x) \approx 1; \quad n_0(x) \approx -\frac{1}{x}; \quad j_1(x) \approx \frac{x}{3}; \quad j_2(x) \approx \frac{x^2}{15};$$

quantum numbers^{۲۱}
spherical Bessel function^{۲۲}
spherical Neumann function^{۲۳}

جدول ۴.۴: ابتدائی چند کروی بیل اور نیومن تفاعلات، $j_n(x)$ اور $n_l(x)$ ؛ چھوٹی x کے لئے مقتربی روپ۔

$n_0 = -\frac{\cos x}{x}$	$j_0 = \frac{\sin x}{x}$
$n_1 = -\frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}$	$j_1 = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$
$n_2 = -\left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \cos x - \frac{3}{x^2} \sin x$	$j_2 = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right) \sin x - \frac{3}{x^2} \cos x$
$n_l \rightarrow -\frac{(2l)!}{2^l l!} \frac{1}{x^{l+1}}, \quad x \ll 1$	$j_l \rightarrow \frac{2^l l!}{(2l+1)!} x^l$

دھیان رہے کہ مبدا پر بیل تفاعلات مستثنیٰ ہیں جبکہ مبدا پر نیومن تفاعلات بے فتابو بڑھتے ہیں۔ یوں ہمیں لازماً $B_l = 0$ منتخب کرنا ہوگا لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۴.۴۷) \quad R(r) = A j_l(kr)$$

اب سرحدی شرط $R(a) = 0$ کو مطمئن کرنا باقی ہے۔ ظاہر ہے کہ k کو درج ذیل کے تحت منتخب کرنا ہوگا

$$(۴.۴۸) \quad j_l(ka) = 0$$

یعنی l رتبی کروی بیل تفاعل کا (ka) ایک صفر ہوگا۔ اب بیل تفاعلات ارتعاشی ہیں (شکل 2.4 دیکھیں)؛ ہر ایک کے لامتناہی تعداد صفر پائے جاتے ہیں۔ تاہم (ہماری بد قسمتی سے) یہ ایک جیسے فنکشنوں پر نہیں پائے جاتے ہیں (جیسا کہ نقاط $n\pi$ یا انفریور)؛ انہیں اعدادی تراکیب سے حاصل کرنا ہوگا۔ بہر حال سرحدی شرط کے تحت درج ذیل ہوگا

$$(۴.۴۹) \quad k = \frac{1}{a} \beta_{nl}$$

جہاں β_{nl} رتبہ l کروی بیل تفاعل کا n واں صفر ہوگا۔ یوں اجبازتی توانائیاں

$$(۴.۵۰) \quad E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \beta_{nl}^2.$$

اور تفاعلات موج درج ذیل ہوں گے

$$(۴.۵۱) \quad \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = A_{nl} j_l(\beta_{nl} r/a) Y_l^m(\theta, \phi).$$

جہاں مستقل A_{nl} کا تعین معمولی ذنی سے کیا جاتا ہے۔ چونکہ l کی ہر ایک قیمت کے لئے m کی $(2l+1)$ مختلف قیمتیں پائی جاتی ہیں لہذا توانائی کی ہر سطح $(2l+1)$ گنا انحطاطی ہوگی (مساوات ۴.۲۹ دیکھیں)۔ □

ا. کروئی نیومن تفاعلات $n_1(x)$ اور $n_2(x)$ کو (مساوات ۴.۴۶) میں پیش کی گئی تعریفات سے تیار کریں۔

ب. سائن اور کوسائن کو پھیلا کر $1 \ll x$ کے لئے کارآمد $n_1(x)$ اور $n_2(x)$ کے تخمینی کلیات اخذ کریں۔ تصدیق کریں کہ یہ مبداء پر بے فتاویٰ بڑھتے ہیں۔

سوال ۴.۸:

ا. تصدیق کریں کہ $V(r) = 0$ اور $l = 1$ کے لئے $Arj_l(kr)$ رداسی مساوات کو مطمئن کرتا ہے۔

ب. لامتناہی کروئی کٹواں کیلئے $l = 1$ کی صورت میں احبازتی توانائیاں ترسیم کی مدد سے تعیین کریں۔ دکھائیں کہ n کی بڑی قیمت کے لئے $(\hbar^2 \pi^2 / 2ma^2)(n + 1/2)^2 \approx E_{n1}$ ہوگا۔ (اشارہ: پہلے $j_1(x) = 0 \Rightarrow \tan x = x$ دکھائیں۔ اس کے بعد x اور $\tan x$ کو ایک ساتھ ترسیم کرتے ہوئے ان کے نقاط تقاطع تلاش کریں۔)

سوال ۴.۹: ایک ذرہ جس کی کیت m ہے کو مستناہی کروئی کٹواں:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

میں رکھا جاتا ہے۔ اس کا زمینی حال، $l = 0$ کے لئے، رداسی مساوات کے حل سے حاصل کریں۔ دکھائیں کہ $V_0 a^2 < \pi^2 \hbar^2 / 8m$ کی صورت میں کوئی مقید حال نہیں پایا جائے گا۔

۴.۲ ہائیڈروجن جوہر

ہائیڈروجن جوہر بار e کے ایک بھاری پروٹان جس کے گرد بار $-e$ کا ایک ہلکا الیکٹران طواف کرتا ہو پر مشتمل ہوتا ہے۔ پروٹان بنیادی طور پر ساکن رہتا ہے (جسے ہم مبداء پر تصور کر سکتے ہیں)۔ ان دونوں کے مخالف بار کے بیچ قوت کشش پائی جاتی ہے جو انہیں اکٹھے رکھتی ہے (شکل 3.4 دیکھیں)۔ فتون کولب کے تحت مخفی توانائی درج ذیل ہوگی

$$(۴.۵۲) \quad V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

لہذا رداسی مساوات ۴.۳۷ درج ذیل روپ اختیار کرے گی۔

$$(۴.۵۳) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu$$

ہم نے اس مساوات کو $u(r)$ کے لئے حل کر کے احبازتی توانائیاں E تعیین کرنی ہیں۔ ہائیڈروجن جوہر کا حل نہایت اہم ہے لہذا میں اس کو، ہارمونی سرکش کے تحلیل حل کی ترکیب سے، قدم بامقدم حل کر کے پیش کرتا ہوں۔ (جس قدم پر آپ کو دشواری پیش آئے، حصہ ۲.۳.۲ سے مدد لیں جہاں مکمل تفصیل پیش کی گئی ہے)۔

باب ۴. تین ابعادی کوانٹم میکانیات

کولمب مخفیہ، مساوات ۴.۵۲، ($E > 0$ کے لئے) استراریہ حالات، جو الیکٹران پروٹون بکھراؤ کو ظاہر کرتے ہیں، تسلیم کرنے کے ساتھ ساتھ غیر مسلسل مقید حالات، جو ہائیڈروجن جوہر کو ظاہر کرتے ہیں، بھی تسلیم کرتا ہے۔ ہماری دلچسپی مومنٹال ذکر میں ہے۔

۴.۲.۱ رداسی تفاعل موج

سب سے پہلے نئی علامتیں متعارف کرتے ہوئے مساوات کی بہتر (صاف) صورت حاصل کرتے ہیں۔ درج ذیل متعارف کر کے (جہاں مقید حالات کے لئے e مٹنی ہونے کی وجہ سے κ حقیقی ہوگا)

$$\kappa \equiv \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} \quad (۴.۵۴)$$

مساوات ۴.۵۳ کو E سے تقسیم کرنے سے

$$\frac{1}{\kappa^2} \frac{d^2 u}{dr^2} = \left[1 - \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa} \frac{1}{(\kappa r)} + \frac{l(l+1)}{(\kappa r)^2} \right] u$$

حاصل ہوگا جس کو دیکھ کر ہمیں خیال آتا ہے کہ ہم درج ذیل علامتیں متعارف کریں

$$\rho \equiv \kappa r, \quad \rho_0 \equiv \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa} \quad (۴.۵۵)$$

لہذا درج ذیل لکھا جائے گا۔

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u \quad (۴.۵۶)$$

اس کے بعد ہم حالات کی مفت تاربی رویہ پر غور کرتے ہیں۔ اب $\rho \rightarrow \infty$ کرنے سے قوسین کے اندر مستقل جزو غالب ہوگا لہذا (تخمیناً) درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = u$$

اس کا عمومی حل درج ذیل ہے

$$u(\rho) = Ae^{-\rho} + Be^{\rho} \quad (۴.۵۷)$$

تاہم ($\rho \rightarrow \infty$ کی صورت میں) e^{ρ} بے وقتا بڑھتا ہے لہذا ہمیں $B = 0$ لینا ہوگا۔ یوں ρ کی بڑی قیمتوں کے لیے درج ذیل ہوگا۔

$$u(\rho) \sim Ae^{-\rho} \quad (۴.۵۸)$$

اس کے برعکس $0 \rightarrow \rho$ کی صورت میں مرکز گریز جزو غالب ہوگا؛^{۲۴} لہذا تخمیناً درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \frac{l(l+1)}{\rho^2} u$$

جس کا عمومی حل (تصدیق کیجیے) درج ذیل ہوگا

$$u(\rho) = C\rho^{l+1} + D\rho^{-l}$$

تاہم ($0 \rightarrow \rho$ کی صورت میں) ρ^{-l} بے متابوڑ ہوتا ہے لہذا $D = 0$ ہوگا۔ یوں ρ کی چھوٹی قیمتوں کے لیے درج ذیل ہوگا۔

$$u(\rho) \sim C\rho^{l+1} \quad (۴.۵۹)$$

اگلے قدم پر مفت رابی رویہ کو چھپانے کی خاطر یہ افت عمل $v(\rho)$:

$$u(\rho) = \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho) \quad (۴.۶۰)$$

اس امید سے متعارف کرتے ہیں کہ $u(\rho)$ سے $v(\rho)$ زیادہ سادہ ہوگا۔ ابتدائی نتائج

$$\frac{du}{d\rho} = \rho^l e^{-\rho} \left[(l+1-\rho)v + \rho \frac{dv}{d\rho} \right]$$

اور

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \rho^l e^{-\rho} \left\{ \left[-2l - 2 + \rho + \frac{l(l+1)}{\rho} \right] v + 2(l+1-\rho) \frac{dv}{d\rho} + \rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} \right\}$$

خوش آئین نظر نہیں آتے ہیں۔ اس طرح $v(\rho)$ کی صورت میں رداسی مساوات (مساوات ۴.۵۶) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2(l+1-\rho) \frac{dv}{d\rho} + [\rho_0 - 2(l+1)]v = 0 \quad (۴.۶۱)$$

آخر میں ہم فرض کرتے ہیں کہ حل، $v(\rho)$ ، کو ρ کا طمقی تسلسل لکھا جاسکتا ہے۔

$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j \quad (۴.۶۲)$$

^{۲۴} یہ دلیل $l = 0$ کی صورت میں کارآمد نہیں ہوگی (اگرچہ مساوات ۴.۵۹ میں پیش نتیجہ اس صورت کے لئے بھی درست ہے)۔ بہر حال، میرا مقصد نئی علاقیت (مساوات ۴.۶۰) کے استعمال کے لئے راستہ ہموار کرنا ہے۔

ہمیں عددی سر (c_0 ، c_1 ، c_2 ، وغیرہ) تلاش کرنے ہوں گے۔ جبزودر جبزوتفرق لیتے ہیں۔

$$\frac{dv}{d\rho} = \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^{j-1} = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} \rho^j$$

[میں نے دوسرے مجموعے میں ”مضریٰ اشاریہ“ j کو $j+1$ کہا ہے۔ اگر آپ کو یقین نہ ہو تو اولین چند اجزاء صریحاً لکھ کر تصدیق کر لیں۔ آپ سوال اٹھا سکتے ہیں کہ کیا مجموعہ $j = -1$ سے کیوں شروع نہیں کیا گیا؛ تاہم جبزومضریٰ $(j+1)$ اس جبزو کو ختم کرتا ہے لہذا ہم مضمر سے بھی شروع کر سکتے ہیں۔] دوبارہ تفرق لیتے ہیں۔

$$\frac{d^2 v}{d\rho^2} = \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) c_{j+1} \rho^{j-1}$$

انہیں مساوات ۴.۶۱ میں پر کرتے ہیں۔

$$\sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) c_{j+1} \rho^j + 2(l+1) + \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} \rho^j - 2 \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^j + [\rho_0 - 2(l+1)] \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j = 0$$

ایک جیسی طاقتوں کے عددی سروں کو مساوی رکھتے ہوئے

$$j(j+1) c_{j+1} + 2(l+1)(j+1) c_{j+1} - 2j c_j + [\rho_0 - 2(l+1)] c_j = 0$$

یا

$$(۴.۶۳) \quad c_{j+1} = \left\{ \frac{2(j+l+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2l+2)} \right\} c_j$$

ہوگا۔ یہ کلیہ تواری عددی سر تعین کرتے ہوئے تفاعل $v(\rho)$ تعین کرتا ہے۔ ہم c_0 سے شروع کر کے (جو مجموعی منتقل کاروب اختیار کرتا ہے جسے آخر میں معمول زنی سے حاصل کیا جائے گا)، مساوات ۴.۶۳ سے c_1 تعین کرتے ہیں؛ جس کو واپس اسی مساوات میں پر کر کے c_2 تعین ہوگا، وغیرہ، وغیرہ۔^{۲۵}

^{۲۵} آپ پوچھ سکتے ہیں: طاقی تسلسل کی ترکیب $u(\rho)$ پر ہی کیوں لاگو نہیں کی گئی؛ اس ترکیب کے اطلاق سے قبل متضاربی رویہ کو کیوں (جبزومضریٰ کی صورت میں) باہر نکالا گیا؟ درحقیقت اس کی وجہ نتائج کی خوبصورتی ہے۔ جبزومضریٰ ρ^{l+1} باہر نہ نکالنے سے تسلسل کے ابتدائی اجزاء مضمر ہوں گے (پہلا غیر مضمر عددی سر c_{l+1} ہوگا)؛ ρ^{l+1} باہر نہ نکالنے سے تسلسل کا پہلا جبزو ρ^0 حاصل ہوگا۔ اس کے برعکس جبزومضریٰ ρ^{-l} باہر نہ نکالنا زیادہ ضروری ہے؛ اسے باہر نہ نکالنے سے c_{j+2} ، c_{j+1} اور c_j پر مشتمل تین اجزائی کلیہ تواری حاصل ہوتا ہے (کر کے دیکھیں!) جس کے ساتھ کام کرنا زیادہ مشکل ثابت ہوتا ہے۔

آئے j کی بڑی قیمت (جو ρ کی بڑی قیمت کے مطابقتی ہوں گے جہاں بلند طاقتیں غالب ہوں گی) کے لئے عددی سروں کی صورت دیکھے۔ یہاں کلیہ تواری درج ذیل کہتا ہے۔^{۲۶}

$$c_{j+1} \cong \frac{2j}{j(j+1)} c_j = \frac{2}{j+1} c_j$$

ایک لمحہ کے لیے مضر کرے کہ یہ بالکل ٹھیک ٹھیک رشتہ ہے۔ تب

$$c_j = \frac{2^j}{j!} c_0 \quad (۴.۶۴)$$

لہذا

$$v(\rho) = c_0 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{2^j}{j!} \rho^j = c_0 e^{2\rho}$$

اور یوں درج ذیل ہوگا

$$u(\rho) = c_0 \rho^{l+1} e^{\rho} \quad (۴.۶۵)$$

جو ρ کی بڑی قیمتوں کے لیے بے متابو بڑھتا ہے۔ مثبت قوت نہا وہی غنیر پسندیدہ متقاربی رویہ دیتا ہے جو مساوات ۴.۵۷ میں پایا گیا۔ (درحقیقت متقاربی حل بھی رداسی مساوات کے حبانز حل ہیں البتہ ہم ان میں دلچسپی نہیں رکھتے ہیں کیونکہ یہ معمول پر لانے کے قابل نہیں ہیں۔) اس المیہ سے نجات کا صرف ایک ہی راستہ ہے؛ تسلسل کو کہیں نہ کہیں اختتام پذیر ہونا ہوگا۔ لازمی طور پر ایک ایسا زیادہ سے زیادہ عدد صحیح، بلند j ، پایا جائے گا جس پر درج ذیل ہو۔

$$c_{(j_{\text{بلند}}+1)} = 0 \quad (۴.۶۶)$$

(یوں کلیہ تواری کے تحت باقی تمام (زیادہ بلند) عددی سر صفر ہوں گے۔) مساوات ۴.۶۳ سے ظاہر ہے کہ درج ذیل ہوگا۔

$$2(j_{\text{بلند}} + l + 1) - \rho_0 = 0$$

صدر کو انٹیم عدد^{۲۷}

$$n \equiv j_{\text{بلند}} + l + 1 \quad (۴.۶۷)$$

^{۲۶} آپ پوچھ سکتے ہیں: شمار کنندہ میں $\rho_0 - 2(l+1)$ اور نسب نماس میں $2l+2$ رد کرنے کی طرح $j+1$ میں 1 کیوں رد نہیں کیا جاتا؟ اس تین میں ایک جاسکتا ہے، تاہم اسے رد نہ کرنے سے دلیل زیادہ واضح ہوگا۔ آپ 1 کو رد کر کے دیکھ سکتے ہیں کہ میں کیا کہتا چاہتا ہوں۔

^{۲۷} principal quantum number

باب ۴. تین ابعادی کوانٹم میکانیات

متعارف کرتے ہوئے درج ذیل ہوگا۔

$$\rho_0 = 2n \quad (۴.۶۸)$$

اب E کو ρ_0 تعین کرتا ہے (مساوات ۴.۵۴ اور ۴.۵۵)

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{me^4}{8\pi^2 \epsilon^2 \hbar^2 \rho^2} \quad (۴.۶۹)$$

لہذا احبازتی توانائیاں درج ذیل ہوں گی۔

$$E_n = -\left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon}\right)^2\right] \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (۴.۷۰)$$

یہ مشہور زمانہ **کلیہ بوہر**^{۲۸} ہے جو غالباً پورے کوانٹم میکانیات میں اہم ترین نتیجہ ہے۔ جناب بوہر نے 1913 میں، ناقابل استعمال کلاسیکی طبیعیات اور کوانٹم میکانیات کے ذریعہ یہ کلیہ کو اخذ کیا۔ مساوات شروڈنگر 1924 میں منظر عام ہوئی۔

مساوات ۴.۵۵ اور ۴.۶۸ کو ملا کر درج ذیل حاصل ہوگا

$$\kappa = \left(\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}\right) \frac{1}{n} = \frac{1}{an} \quad (۴.۷۱)$$

جہاں

$$a \equiv \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m} \quad (۴.۷۲)$$

رداء بوہر^{۲۹} کہلاتا ہے۔ یوں (مساوات ۴.۵۵ دوبارہ استعمال کرتے ہوئے) درج ذیل ہوگا۔

$$\rho = \frac{r}{an} \quad (۴.۷۳)$$

ہائیڈروجن جوہر کے فضائی تقاضات موج کے نام تین کوانٹائی اعداد (n ، l اور m) استعمال کر کے رکھے جاتے ہیں

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi) \quad (۴.۷۴)$$

جہاں مساوات ۴.۳۶ اور ۴.۶۰ کو دیکھتے ہوئے

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} \rho^{l+1} e^{-\rho} v(\rho) \quad (۴.۷۵)$$

^{۲۸} Bohr formula

^{۲۹} Bohr radius

^{۳۰} رداس بوہر کو روایتی طور پر زیر نوشت کے ساتھ لکھا جاتا ہے: a_0 ، تاہم یہ غیر ضروری ہے لہذا میں اس کو صرف a لکھوں گا۔

ہوگا جبکہ $v(\rho)$ متغیر ρ میں درجہ $n - l - 1$ = بندہ z کا کشیدہ رکھی ہوگا، جس کے عددی سر درجہ ذیل کلیہ توالی دے گا (اور پورے تق عمل کو معمول پر لانا باقی ہے)۔

$$c_{j+1} = \frac{2(j+l+1-n)}{(j+1)(j+2l+2)} c_j \quad (۴.۷۶)$$

زمینی حالت^{۳۱} (یعنی کم سے کم توانائی کے حال) کے لیے $n = 1$ ہوگا؛ طبعی مستقامت کی قیمتیں پر کرتے ہوئے درجہ ذیل حاصل ہوگا۔

$$E_1 = - \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon} \right)^2 \right] = -13.6 \text{ eV} \quad (۴.۷۷)$$

ظاہر ہوا کہ ہائیڈروجن کی بندہ z توانائی^{۳۲} (زمینی حال میں الیکٹران کو درکار توانائی کی وہ مقدار جو جوہر کو بار بار دہرنا ہے) 13.6 eV ہے۔ مساوات ۴.۷۷ کے تحت $l = 0$ لہذا $m = 0$ ہوگا (مساوات ۴.۲۹ دیکھیے) یوں درجہ ذیل ہو گا۔

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r) Y_0^0(\theta, \phi) \quad (۴.۷۸)$$

کلیہ توالی پہلے جزو پر ہی اختتام پذیر ہوتا ہے (مساوات ۴.۷۶ سے $j = 0$ کے لئے $c_1 = 0$ حاصل ہوتا ہے)، لہذا $v(\rho)$ ایک مستقل (c_0) ہوگا اور یوں درجہ ذیل ہوگا۔

$$R_{10}(r) = \frac{c_0}{a} e^{-r/a} \quad (۴.۷۹)$$

اس کو مساوات ۴.۳۱ کے تحت معمول پر لانے سے

$$\int_0^\infty |R_{10}|^2 r^2 dr = \frac{|c_0|^2}{a^2} \int_0^\infty e^{-2r/a} r^2 dr = |c_0|^2 \frac{a}{4} = 1$$

یعنی $c_0 = 2/\sqrt{a}$ حاصل ہوگا۔ مزید $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ ہے لہذا ہائیڈروجن کا زمینی حال درجہ ذیل ہوگا۔

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \quad (۴.۸۰)$$

اسی طرح $n = 2$ کے لئے توانائی

$$E_2 = \frac{-13.6 \text{ eV}}{4} = -3.4 \text{ eV} \quad (۴.۸۱)$$

ہوگی جو پہلی ہیجان حال، یا حالات کی بندہ z توانائی ہے کیونکہ $l = 0$ ہو سکتا ہے (جس میں $m = 0$ ہوگا) یا $l = 1$ ہو سکتا ہے (جس کے لئے m کی قیمت -1 ، 0 یا $+1$ ہوگی)؛ یوں چار مختلف حالات کی یہی توانائی ہوگی۔ کلیہ توالی

ground state^{۳۱}
binding energy^{۳۲}

باب ۴. تین ابعادی کوانٹم میکانیات

(ساوات ۴.۷۶) $l = 0$ کے لئے j استعمال کرتے ہوئے $c_1 = -c_0$ اور $j = 1$ استعمال کرتے ہوئے $c_2 = 0$ دے گا لہذا $v(\rho) = c_0(1 - \rho)$ اور درج ذیل ہوگا۔

$$(۴.۸۲) \quad R_{20}(r) = \frac{c_0}{2a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}$$

[دھیان رہے کہ مختلف کوانٹم اعداد l اور n کے لئے پھیلاؤ عددی سر $\{c_j\}$ مکمل طور پر مختلف ہونگے۔] کلیہ
تو $l = 1$ کی صورت میں پہلے جب زو پر تسلسل کو اختتام پذیر کرتا ہے؛ $v(\rho)$ ایک متقل ہوگا لہذا درج ذیل
حاصل ہوگا۔

$$(۴.۸۳) \quad R_{21}(r) = \frac{c_0}{4a^2} r e^{-r/2a}$$

(ہر منفرد صورت میں c_0 معمول زنی سے تعین ہوگا سوال 11.4 دیکھیں)۔

کسی بھی اختیاری n کے لئے (ساوات ۴.۶۷ سے ہم آہنگ) l کی ممکنہ قیمتیں درج ذیل ہوں گی

$$(۴.۸۴) \quad l = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

جبکہ ہر l کے لئے m کی ممکنہ قیمتوں کی تعداد $(2l + 1)$ ہوگی (ساوات ۴.۲۹)، لہذا E_n سطح توانائی کی کل
انحطاطیت درج ذیل ہوگی۔

$$(۴.۸۵) \quad d(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$$

کثیر رکنی $v(\rho)$ (جو ساوات ۴.۷۶ کے کلیہ توانی سے حاصل ہوگی) ایک ایسا تفاعل ہے جس سے عملی
ریاضی دان بخوبی واقف ہیں؛ ماسوائے معمول زنی کے، اسے درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(۴.۸۶) \quad v(\rho) = L_{n-l-1}^{2l+1}(2\rho)$$

جہاں

$$(۴.۸۷) \quad L_{q-p}^p(x) \equiv (-1)^p \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_q(x)$$

ایک شریکے لاگنچ کثیر رکنی^{۳۳} ہے جبکہ

$$(۴.۸۸) \quad L_q(x) \equiv e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^q (e^{-x} x^q)$$

q ویں لاگنچ کثیر رکنی^{۳۴} ہے۔^{۳۵} (جدول ۴.۵ میں چند ابتدائی لاگنچ کثیر رکنیاں پیش کی گئی ہیں؛ جدول ۴.۶ میں

^{۳۳} associated Laguerre polynomial

جدول ۴.۵: ابتدائی چند لاگنج کشیر رکنیاں، $L_q(x)$

$L_0 = 1$
$L_1 = -x + 1$
$L_2 = x^2 - 4x + 2$
$L_3 = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6$
$L_4 = x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24$
$L_5 = -x^5 + 25x^4 - 200x^3 + 600x^2 - 600x + 120$
$L_6 = x^6 - 36x^5 + 450x^4 - 2400x^3 + 5400x^2 - 4320x + 720$

جدول ۴.۶: ابتدائی چند شریک لاگنج کشیر رکنیاں، $L_{q-p}^p(x)$

$L_0^2 = 2$	$L_0^0 = 1$
$L_1^2 = -6x + 18$	$L_1^0 = -x + 1$
$L_2^2 = 12x^2 - 96x + 144$	$L_2^0 = x^2 - 4x + 2$
$L_0^3 = 6$	$L_0^1 = 1$
$L_1^3 = -24x + 96$	$L_1^1 = -2x + 4$
$L_2^3 = 60x^2 - 600x + 1200$	$L_2^1 = 3x^2 - 18x + 18$

جدول ۷.۴: ہائیڈروجن کے ابتدائی چند رداسی تفاسلات، $R_{nl}(r)$

$R_{10} = 2a^{-3/2}e^{-r/a}$
$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{2}\frac{r}{a}\right)e^{-r/2a}$
$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}}a^{-3/2}\frac{r}{a}e^{-r/2a}$
$R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{2}{3}\frac{r}{a} + \frac{2}{27}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)e^{-r/3a}$
$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{6}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)e^{-r/3a}$
$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}}a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2e^{-r/3a}$
$R_{40} = \frac{1}{4}a^{-3/2}\left(1 - \frac{3}{4}\frac{r}{a} + \frac{1}{8}\left(\frac{r}{a}\right)^2 - \frac{1}{192}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right)e^{-r/4a}$
$R_{41} = \frac{\sqrt{5}}{16\sqrt{3}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{4}\frac{r}{a} + \frac{1}{80}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)\left(\frac{r}{a}\right)e^{-r/4a}$
$R_{42} = \frac{1}{64\sqrt{5}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{12}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)^2e^{-r/4a}$
$R_{43} = \frac{1}{768\sqrt{35}}a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^3e^{-r/4a}$

چند ابتدائی شریک لائنج کشیر رکنیاں پیش کئے گئی ہیں؛ جدول ۴.۷ میں چند ابتدائی رداسی تفاعل امواج پیش کئے گئے ہیں جنہیں شکل 4.4 میں ترسیم کیا گیا ہے۔ ہائیڈروجن کے معمول شدہ تفاعلات موج درجہ ذیل ہیں۔

$$(۴.۸۹) \quad \psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^l [L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na)] Y_l^m(\theta, \phi)$$

یہ تفاعلات خوفناک نظر آتے ہیں لیکن شکوہ نہ کیجیے گا؛ یہ ان چند حقیقی نظاموں میں سے ایک ہے جن کا بند روپ میں ٹھیک ٹھیک حل حاصل کرنا ممکن ہے۔ دھیان رہے، اگرچہ تفاعلات موج تینوں کو انسانی اعداد کے نتائج ہیں، توانائیوں (مساوات ۴.۷۰) کو صرف n تعین کرتا ہے۔ یہ کولب توانائی کی ایک مخصوص خاصیت ہے؛ آپ کو یاد ہو گا کہ کروئی کنواں میں توانائیاں l پر منحصر تھیں (مساوات ۴.۵۰)۔ تفاعلات موج باہمی عمودی

$$(۴.۹۰) \quad \int \psi_{nlm}^* \psi_{n'l'm'} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

ہیں۔ یہ کروئی ہارمونیاں کی عمودیت (مساوات ۴.۳۳) اور ($n \neq n'$) کی صورت میں H کی منفرد امتیازی افتدار کے امتیازی تفاعل ہونے کی بنا ہے۔

ہائیڈروجن تفاعلات موج کی تصویر کشی آسان کام نہیں ہے۔ ماہر کیمیا ان کے ایسے کثافتی اشکال بناتے ہیں جن کی چمک $|\psi|^2$ کا راست متناسب ہوتی ہے (شکل 5.4)۔ زیادہ معلومات متقل کثافت احتمال کی سطحوں (شکل 6.4) کے اشکال دیتی ہیں (جنہیں پڑھنا نسبتاً مشکل ہو گا)۔

باب ۵ متمثال ذرات

باب ۶

غیر تابع وقت نظریہ اضطراب

باب ۷

تغییری اصول

باب ۸

و ک ب تخمین

باب ۹

تابع وقت نظریہ اضطراب

باب ۱۰

حرارت ناگزرتخمین

باب ۱۱

بجھراو

باب ۱۲

پس نوشت

جوابات

