کوانٹم میکانیات

خالد خان یوسفزئی

جامعہ کامسیٹ، اسلام آباد
khalidyousafzai@comsats.edu.pk

۵/ اگست ۲۰۲۱

عنوان

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

خالد خان یوسفزئی

28اکتوبر 2011ء

باب ۶

غیر تابع وقت نظریہ اضطراب

۶.۱ غیر انحطاطی نظریہ اضطراب

۶.۱.۱ عمومی ضابطہ بندی

فرض کریں ہم کسی مخفیہ (مثلاً یک بعدی لامتناہی چکور کنواں) کے لئے غیر تابع وقت شروڈنگر مساوات:

$$H^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0 \tag{۶.۱}$$

حل کر کے معیاری عمودی امتیازی تفاعلات ψ_n^0 کا مکمل سلسلہ

$$\langle \psi_n^0 | \psi_m^0 \rangle = \delta_{nm} \tag{۶.۲}$$

اور ان کی مطابقتی امتیازی اقدار E_n^0 حاصل کرتے ہیں۔ اب ہم مخفیہ میں معمولی اضطراب پیدا کرتے ہیں (مثلاً کنواں کی تہہ میں ایک چھوٹا موڑ اڈال کر؛ شکل 6-1) ہم نئے امتیازی تفاعلات اور امتیازی اقدار جاننا چاہیں گے:

$$H\psi_n = E_n \psi_n \tag{۶.۳}$$

تاہم انتہائی خوش قسمتی کے علاوہ کوئی وجہ نہیں پائی جاتی کے ہم اس پیچیدہ مخفیہ کے لیے مساوات شروڈنگر کو بالکل ٹھیک ٹھیک حل کر پائیں گے۔ **نظریہ اضطراب** کو غیر مضطرب صورت کے معلوم ٹھیک ٹھیک حلوں کو لے کر قدم بقدم چلتے ہوئے مضطرب مسئلے کے تخمینی حل دیتا ہے ہم نئے ہیملٹنی کو دو اجزاء کا مجموعہ لکھ کر آغاز کرتے ہیں

$$H = H^0 + \lambda H' \tag{۶.۴}$$

جہاں H' اضطراب ہے زیر بالا میں 0 ہمیشہ غیر مضطرب مقدار کو ظاہر کرتا ہے ہم یہاں λ کو ایک چھوٹا عدد تصور کرتے ہیں بعد میں اس کی قیمت کو بڑھا کر ایک (1) کر دی جائے گی اور H اصل ہیملٹنی ہو گا اس کے بعد ہم ψ_n اور E_n کو λ کی طاقتی تسلسل کے صورت میں لکھتے ہیں

$$\psi_n = \psi_n^0 + \lambda\psi_n^1 + \lambda^2\psi_n^2 + \cdots \tag{۶.۵}$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots \tag{۶.۶}$$

یہاں n ویں امتیازی قدر کی قیمت میں **اول رتبی تصحیح** کو E_n^1 ظاہر کرتا ہے جبکہ n ویں امتیازی تفاعل میں **اول رتبی تصحیح** کو ψ_n^1 ظاہر کرتا ہے اسی طرح E_n^2 اور ψ_n^2 دوم رتبی تصحیح ہوں گے وغیرہ وغیرہ مساوات ۶.۵ اور مساوات ۶.۶ کو مساوات ۶.۳ میں پر کر کے

$$(H^0 + \lambda H')[\psi_n^0 + \lambda\psi_n^1 + \lambda^2\psi_n^2 + \cdots] \\ = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \cdots)[\psi_n^0 + \lambda\psi_n^1 + \lambda^2\psi_n^2 + \cdots]$$

یا λ کے ایک جیسے طاقتوں کو اکٹھا لکھ کر درج ذیل لکھا جا سکتا ہے

$$H^0\psi_n^0 + \lambda(H^0\psi_n^1 + H'\psi_n^0) + \lambda^2(H^0\psi_n^2 + H'\psi_n^1) + \cdots \\ = E_n^0\psi_n^0 + \lambda(E_n^0\psi_n^1 + E_n^1\psi_n^0) + \lambda^2(E_n^0\psi_n^2 + E_n^1\psi_n^1 + E_n^2\psi_n^0) + \cdots$$

کمتر رتبہ λ^0 کی صورت میں اس سے $H^0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0$ حاصل ہوتا ہے جو کوئی نئی مساوات نہیں ہے (مساوات ۶.۱)رتبہ اول (λ^1) تک درج ذیل ہو گا

$$H^0\psi_n^1 + H'\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^1 + E_n^1\psi_n^0 \tag{۶.۷}$$

رتبہ دوم (λ^2) تک درج ذیل ہو گا

$$H^0\psi_n^2 + H'\psi_n^1 = E_n^0\psi_n^2 + E_n^1\psi_n^1 + E_n^2\psi_n^0 \tag{۶.۸}$$

وغیرہ وغیرہ (رتبہ پر نظر رکھنے کی غرض سے ہم نے λ استعمال کیا اب اس کی ضرورت نہیں رہی لہٰذا اس کی قیمت ایک، 1، کر دیں)

۶.۱.۲ اول رتبی نظریہ

مساوات ۶.۷ کا ψ_n^0 کے ساتھ اندرونی ضرب لیتے ہیں یعنی $(\psi_n^0)^*$ سے ضرب دے کر تکمل لیتے ہیں

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^1\rangle + \langle\psi_n^0|H'\psi_n^0\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle$$

تاہم H^0 ہرمشی ہے لہٰذا

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^1\rangle = \langle H^0\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle$$

ہو گا جو دائیں ہاتھ کے پہلے جزو کو حذف کرے گا مزید $\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle = 1$ کی بنا درج ذیل ہو گا

$$E_n^1 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^0\rangle \tag{۶.۹}$$

یہ رتبہ اول نظریہ اضطراب کا بنیادی نتیجہ ہے بلکہ عملاً یہ پوری کوانٹم میکانیات میں غالباً سب سے اہم مساوات ہے یہ کہتی ہے کے غیر مضطرب حال میں اضطراب کی توقعاتی قیمت توانائی کی اول رتبی تصحیح ہو گی

مثال ۶.۱: لامتناہی چکور کنواں کی غیر مضطرب تفاعلات موج مساوات 28.2 درج ذیل ہیں

$$\psi_n^0(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

فرض کریں ہم کنواں کی تہہ کو مستقل مقدار V_0 اوپر اٹھاتے ہوئے اس نظام کو مضطرب کرتے ہیں شکل 2.6 توانائیوں میں رتبہ اول تصحیح تلاش کریں

حل: یہاں $H' = V_0$ ہو گا لہٰذا n ویں حال کی توانائی میں رتبہ اول تصحیح درج ذیل ہو گی

$$E_n^1 = \langle\psi_n^0|V_0|\psi_n^0\rangle = V_0\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle = V_0$$

یوں تصحیح شدہ توانائیوں کی سطحیں $E_n \cong E_n^0 + V_0$ ہونگے جی ہاں تمام کی تمام V_0 مقدار سے اوپر اٹھتی ہیں یہاں حیرانگی کی بات یہ ہے کہ رتبہ اول نظریہ بالکل ٹھیک جواب دیتا ہے یوں ظاہر ہے کہ مستقل اضطراب کی صورت میں تمام بلند رتبی تصحیح صفر ہوں گی[1] اس کے برعکس کنواں کی نصف چوڑائی تک اضطراب کی وسعت کی صورت میں شکل 3.6 ہو گا۔

$$E_n^1 = \frac{2V_0}{a}\int_0^{a/2}\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\mathrm{d}x = \frac{V_0}{2}$$

اب توانائی کی ہر سطح $\frac{V_0}{2}$ اوپر اٹھتی ہے یہ غالباً بالکل ٹھیک نتیجہ نہیں ہے لیکن اول رتبہ تخمین کی نقطہ نظر سے معقول جواب ہے۔
□

مساوات 9.6 ہمیں توانائی کی اول رتبی تصحیح دیتی ہے تفاعل موج کے لئے اول رتبی تصحیح حاصل کرنے کی غرض سے ہم مساوات 7.6 کو درج ذیل روپ میں لکھتے ہے

$$(H^0 - E_n^0)\psi_n^1 = -(H' - E_n^1)\psi_n^0 \tag{۶.۱۰}$$

[1] یہاں کوئی ی چیز لامتناہی چکور کنواں کی خصوصیات پر منحصر نہیں ہے لہٰذا یہی کچھ کسی بھی مخفیہ کے لیے مستقل اضطراب کی صورت میں درست ہو گا

چونکہ اس کا دایاں ہاتھ ایک معلوم تفاعل ہے لہٰذا یہ ψ_n^1 میں ایک غیر متجانس تفرقی مساوات ہے اب غیر مضطرب تفاعلات موج ایک مکمل سلسلہ دیتے ہیں لہٰذا کسی بھی تفاعل کی طرح ψ_n^1 کو ان کا خطی جوڑ لکھا جا سکتا ہے

$$\psi_n^1 = \sum_{m\neq n} c_m^{(n)}\psi_m^0 \tag{۶.۱۱}$$

اگر psi_n^1 / مساوات 10.6 کو مطمئن کرتا ہوں تب کسی بھی مستقل α کے لیے $(\psi_n^1 + \alpha\psi_n^0)$ بھی اس مساوات کو مطمئن کرے گا لہٰذا ہم جزو ψ_n^0 کو منفی کر سکتے ہیں ایسے ہی کرتے ہوئے مساوات 11.6 کے مجموعہ میں $m = n$ شامل نہیں کیا گیا عددی سر $c_m^{(n)}$ تعین کر کے ہم مسئلہ حل کر سکتے ہیں ہم مساوات 10.6 میں مساوات 11.6 پر کرتے ہوئے یہ جانتے ہوئے کہ غیر مضطرب شروڈنگر مساوات مساوات 1.6 کو ψ_m^0 مطمئن کرتے ہیں درج ذیل حاصل کرتے ہیں

$$\sum_{m\neq n}(E_m^0 - E_n^0)c_m^{(n)}\psi_m^0 = -(H' - E_n^1)\psi_n^0$$

اس کا ψ_l^0 کے ساتھ اندرونی ضرب لیتے ہیں

$$\sum_{m\neq n}(E_m^0 - E_n^0)c_m^{(n)}\langle\psi_l^0|\psi_m^0\rangle = -\langle\psi_l^0|H'|\psi_n^0\rangle + E_n^1\langle\psi_l^0|\psi_n^0\rangle$$

اگر $l = n$ ہو تب بایاں ہاتھ صفر ہو گا اور ہمیں دوبارہ مساوات 9.6 ملے گی اگر $l \neq n$ ہو تو درج ذیل ہو گا

$$(E_l^0 - E_n^0)c_l^{(n)} = -\langle\psi_l^0|H'|\psi_n^0\rangle$$

یا

$$c_m^{(n)} = \frac{\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \tag{۶.۱۲}$$

لہٰذا درج ذیل حاصل ہو گا

$$\psi_n^1 = \sum_{m\neq n}\frac{\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle}{(E_n^0 - E_m^0)}\psi_m^0 \tag{۶.۱۳}$$

جب تک غیر مضطرب توانائی طیف غیر انحطاطی ہو نسب نما کوئی ی مسئلہ کھڑا نہیں کرے گا (چونکہ کسی بھی عددی سر کے لئے $m = n$ نہیں ہوتا) ہاں اس صورت میں جب دو غیر مضطرب حالات کی توانائیاں ایک دوسرے جتنی ہو تب مساوات 12.6 میں نسب نما میں صفر پایا جائے گا جو ہمیں مصیبت میں ڈالے گا ایسی صورت میں انحطاطی نظریہ اضطراب کی ضرورت پیش آئے گی جس پر حصہ 2.6 میں غور کیا جائے گا یوں اول رتبی نظریہ اضطراب مکمل ہوتا ہے توانائی کی اول رتبی تصحیح E_n^1 مساوات 9.6 دیتی ہے جبکہ

تفاعل موج کی اول رتبی تصحیح ψ_n^1 مساوات 13.6 دیتی ہے میں آپ کو یہاں یہ ضرور بتانا چاہوں گا کہ اگرچہ نظریہ اضطراب عموماً توانائیوں کی بہت درست قیمتیں دیتا ہے یعنی $E_n^1 + E_n^0$ اصل قیمت E_n کے بہت قریب ہے اس سے حاصل تفاعلات موج عموماً افسوس کن ہوتے ہیں

سوال ۶.۱: فرض کرے ہم لامتناہی چکور کنواں کے وسط میں δ تفاعلی موڑا ڈالتے ہیں

$$H' = \alpha\delta(x - \frac{a}{2})$$

جہاں α ایک مستقل ہے

ا. اجازتی توانائیوں کی اول رتبی تصحیح تلاش کریں بتائیں کہ جفت n کی صورت میں توانائیاں مضطرب کیوں نہیں ہونگی

ب. زمینی حال کی تصحیح ψ_1^1 کی مساوات مساوات 13.6 کی پھیلاو میں ابتدائی تین غیر صفر اجزاء تلاش کریں

سوال ۶.۲: ہارمونی مرتعش $[V(x) = \frac{1}{2}kx^2]$ کی اجازتی توانائیاں درج ذیل ہیں

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad\qquad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

جہاں $\sqrt{k/m} = \omega$ کلاسیکی تعدد ہے اب فرض کرے مقیاس لچک میں معمولی تبدیلی رونما ہوتی ہے $k \to (1+\epsilon)k$

ا. (الف) نہیں توانائیوں کی بالکل ٹھیک ٹھیک قیمتیں حاصل کرے آپ نے کل سیہ کو دوم رتبہ تک ϵ کی طاقتیں تسلسل میں پھیلائیں

ب. اب مساوات 9.6 استعمال کرتے ہوئے توانائی میں اول رتبی اضطراب کا حساب لگائیں یہاں H' کیا ہو گا اپنے نتیجے کا جزو(الف) کے ساتھ موازنہ کرے اشارہ: نئے تکمل کی قیمت کے حصول کی ناضرورت اور نہ اجازت ہے

سوال ۶.۳: ایک لامتناہی چکور کنواں مساوات 19.2 میں دو یکساں بوسن رکھے جاتے ہیں یہ مخفیہ

$$V(x_1, x_2) = -aV_0\delta(x_1 - x_2)$$

جہاں V_0 ایک مستقل ہے جس کا بعد توانائی ہے اور a کنواں کی چوڑائی ہے کے ذریعے ایک دوسرے پر بہت معمولی اثر انداز ہوتے ہیں

ا. پہلی قدم میں ذرات کے باہمی اثر کو نظر انداز کرتے ہوئے زمینی حال اور پہلے ہیجان حال کے تفاعلات موج اور مطابقتی توانائیاں تلاش کریں

ب. اول رتبی نظریہ اضطراب استعمال کرتے ہوئے زمینی حال اور پہلے ہیجان حال کے توانائیوں پر ذرات کے باہمی اثر کا تخمین اول رتبی نظریہ اضطراب سے دریافت کریں

۶.۱.۳ دوم رتبی توانائیاں

یہاں بھی اسی طرح بڑھتے ہوئے ہم ψ_n^0 اور دور تبی مساوات مساوات 8.6 کا اندرونی ضرب لیتے ہیں

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^2\rangle + \langle\psi_n^0|H'\psi_n^1\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^2\rangle + E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle + E_n^2\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle$$

یہاں بھی ہم H^0 کی ہرمشی پن کو بروئے کار لاتے ہیں

$$\langle\psi_n^0|H^0\psi_n^2\rangle = \langle H^0\psi_n^0|\psi_n^2\rangle = E_n^0\langle\psi_n^0|\psi_n^2\rangle$$

لہٰذا بائیں ہاتھ کا پہلا جزو دائیں ہاتھ کے پہلے جزو کے ساتھ کٹ جائے گا ساتھ ہی $\langle\psi_n^0|\psi_n^0\rangle = 1$ ہو گا لہٰذا ہمارے پاس E_n^2 کا درج ذیل کلیہ رہ جاتا ہے

$$E_n^2 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^1\rangle - E_n^1\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle \tag{۶.۱۴}$$

تاہم مجموعہ میں $m = n$ شامل نہیں اور باقی تمام عمودی ہیں لہٰذا

$$\langle\psi_n^0|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} c_m^{(n)}\langle\psi_n^0|\psi_m^0\rangle = 0$$

ہو گا جس کی بنا

$$E_n^2 = \langle\psi_n^0|H'|\psi_n^1\rangle = \sum_{m\neq n} c_m^{(n)}\langle\psi_n^0|H'|\psi_m^0\rangle = \sum m \neq n\frac{\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\rangle\langle\psi_n^0|H'|\psi_m^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0}$$

یا آخر کار

$$E_n^2 = \sum_{m\neq n}\frac{\left|\langle\psi_m^0|H'|\psi_n^0\right|^2}{E_n^0 - E_m^0} \tag{۶.۱۵}$$

ہو گا جو دور تبی نظریہ اضطراب کا بنیادی نتیجہ ہے۔

اگرچہ ہم اسی طرح آگے بڑھتے ہوئے تفاعل موج کی دوم رتبی تصحیح ψ_n^2 توانائی کی سوم رتبی تصحیح وغیرہ وغیرہ حاصل کر سکتے ہیں لیکن عملاً اس ترکیب کو صرف مساوات 15.6 تک استعمال کرنا سود مند ہو گا۔ سوال ۶.۴:

ا. توانائیوں کی دوم رتبی تصحیح (E_n^2) سوال 1.6 کی مخفیہ کے لیے تلاش کریں۔ تبصرہ: آپ تسلسل کا مجموعہ صریحاً حاصل کر کے طاق n کیلئے $-2m(\alpha/\pi\hbar n)^2$ حاصل کر سکتے ہیں۔

ب. زمینی حال توانائی کے لئے دوم رتبی تصحیح E_n^2 سوال 2.6 کے مخفیہ کے لیے تلاش کریں۔ تصدیق کیجیے گا کہ آپ کا نتیجہ بالکل درست نتیجہ کے مطابق ہے۔

سوال ۶.۵: ایک ایسے باردار ذرہ پر غور کریں جو یک بعدی ہارمونی ارتعاشی مخفیہ میں پایا جاتا ہو۔ فرض کریں ہم ایک کمزور برقی میدان (E) چالو کرتے ہیں جس کی بنا مخفی توانائی میں $H' = qEx$ مقدار کی تبدیلی پیدا ہوتی ہے۔

ا. دکھائیں کہ توانائیوں کی دو سطحوں میں کوئی اول رتبی تبدیلی پیدا نہیں ہو گی۔ دو رتبی تصحیح تلاش کریں۔ اشارہ: سوال 33.3 دیکھیں۔

ب. تبدیلی متغیرات $x' \equiv x - (qE/m\omega^2)$ استعمال کرتے ہوئے موجودہ صورت میں شروڈنگر مساوات کو بلا واسطہ حل کیا جا سکتا ہے۔ ایسا کرتے ہوئے ٹھیک ٹھیک توانائیاں تلاش کر کے دکھائیں کہ یہ نظریہ اضطراب کی تخمین کے مطابق ہے۔

۶.۲ انحطاطی نظریہ اضطراب

اگر غیر مضطرب حالات انحطاطی ہوں یعنی دو یا دو سے زیادہ منفرد حالات ψ_a^0 اور ψ_b^0 کی توانائیاں ایک دوسرے جیسی ہوں تب سادہ نظریہ اضطراب غیر کارآمد ہو گا چونکہ $c_a^{(b)}$ مساوات 12.6 اور E_a^2 مساوات 15.6 بے قابو بڑھتے ہیں شاید ماسوائے اس صورت جب شمار کنندہ صفر ہو $\langle\psi_a^0|H'|\psi_b^0\rangle = 0$ اور جس کو ہم بعد میں استعمال کریں گے۔ یوں انحطاط صورت میں ہمیں توانائیوں کی اول

رتبی تصحیح مساوات 9.6 پر بھی یقین نہیں کرنا چاہیے اور ہمیں مسئلے کا کوئی دوسرا حل ڈھونڈنا ہو گا۔

۶.۲.۱ دوپڑتا انحطاط

درج ذیل فرض کریں جہاں ψ_a^0 اور ψ_b^0 معمول شدہ ہیں۔

$$H^0\psi_a^0 = E^0\psi_a^0, \quad H^0\psi_b^0 = E^0\psi_b^0, \quad \langle\psi_a^0|\psi_b^0\rangle = 0 \tag{۶.۱۶}$$

دھیان رہے کہ ان حالات کا ہر خطی جوڑ

$$\psi^0 = \alpha\psi_a^0 + \beta\psi_b^0 \tag{۶.۱۷}$$

بھی H^0 کا امتیازی حال ہو گا جس کا امتیازی قدر E^0 بھی وہی ہو گا

$$H^0\psi^0 = E^0\psi^0 \tag{۶.۱۸}$$

عام طور پر اضطراب (H') انحطاط کو "توڑے" (یا "منسوخ" کرے) گا جیسے جیسے ہم λ کی قیمت صفر سے ایک کی طرف بڑھاتے ہیں مشترک غیر مضطرب توانائی E^0 دو ٹکڑوں میں تقسیم ہو گا شکل 4.6 مخالف چلتے ہوئے اگر ہم اضطراب کو بند یعنی صفر کر دیں تب بالائی حال کا تخفیف ψ_a^0 اور ψ_b^0 کے ایک خطی جوڑ میں ہو گا جبکہ زیریں حال کا تخفیف کسی دوسرے عمودی خطی جوڑ میں ہو گا تاہم ہم قبل از وقت نہیں جان سکتے ہیں کہ یہ موزوں خطی جوڑ کیا ہوں گے چونکہ ہم غیر مضطرب حالات نہیں جانتے ہیں لہٰذا یہی وجہ ہے کہ ہم اول رتبی توانائیاں مساوات 9.6 کا حساب نہیں کر سکتے ہیں

اسی لیے ہم ان موزوں غیر مضطرب حالات کو فی الحال عمومی روپ مساوات 17.6 میں لکھتے ہیں جہاں α اور β قابل تغیر ہوں گے ہم مساوات شروڈنگر

$$H\psi = E\psi \tag{۶.۱۹}$$

کو $H = H^0 + \lambda H'$ اور

$$E = E^0 + \lambda E^1 + \lambda^2 E^2 + \cdots, \quad \psi = \psi^0 + \lambda \psi^1 + \lambda^2 \psi^2 + \cdots \tag{۶.۲۰}$$

کیلئے حل کرنا چاہتے ہیں انہیں مساوات 19.6 میں پر کر کے پہلے کی طرح λ کی ایک جیسی طاقتوں کو اکٹھا کر کے درج ذیل حاصل ہو گا

$$H^0\psi^0 + \lambda(H'\psi^0 + H^0\psi^1) + \cdots = E^0\psi^0 + \lambda(E^1\psi^0 + E^0\psi^1) + \cdots$$

اب $H^0\psi^0 = E^0\psi^0$ مساوات 18.6 کی بنا اولین اجزاء ایک دوسرے کے ساتھ کٹ جائیں گے جبکہ λ^1 رتبہ کے لیے درج ذیل ہو گا

$$H^0\psi^1 + H'\psi^0 = E^0\psi^1 + E^1\psi^0 \tag{۶.۲۱}$$

اس کا ψ_a^0 کے ساتھ اندرونی ضرب لیتے ہیں

$$\langle\psi_a^0|H^0\psi^1\rangle + \langle\psi_a^0|H'\psi^0\rangle = E^0\langle\psi_a^0|\psi^1\rangle + E^1\langle\psi_a^0|\psi^0\rangle$$

چونکہ H^0 ہرمشی ہے لہٰذا بائیں ہاتھ پہلا جزو دائیں ہاتھ کے پہلے جزو کے ساتھ کٹ جائے گا مساوات 17.6 کو استعمال کرتے ہوئے اور معیاری عمودیت کی شرط مساوات 17.6 کو بروئے کار لاتے ہوئے

$$\alpha\langle\psi_a^0|H'|\psi_a^0\rangle + \beta\langle\psi_a^0|H'|\psi_b^0\rangle = \alpha E^1$$

یا مختصراً

$$\alpha W_{aa} + \beta W_{ab} = \alpha E^1 \tag{۶.۲۲}$$

حاصل ہو گا جہاں درج ذیل ہو گا

$$W_{ij} \equiv \langle\psi_i^0|H'|\psi_j^0\rangle, \quad (i, j = a, b) \tag{۶.۲۳}$$

اسی طرح ψ_b^0 کے ساتھ اندرونی ضرب درج ذیل دے گا

$$\alpha W_{ba} + \beta W_{bb} = \beta E^1 \tag{۶.۲۴}$$

دھیان رہے کہ اصولاً ہمیں تمام W معلوم ہے چونکہ یہ غیر مضطرب تفاعلات موج ψ_a^0 اور ψ_b^0 کے لحاظ سے H' کے ارکان قالب ہیں مساوات 24.6 کو W_{ab} سے ضرب دے کر مساوات 22.6 استعمال کر کے βW_{ab} کو خارج کر کے درج ذیل حاصل ہو گا

$$\alpha[W_{ab}W_{ba} - (E^1 - W_{aa})(E^1 - W_{bb})] = 0 \tag{۶.۲۵}$$

غیر صفر α کی صورت میں مساوات 25.6 ہمیں E^1 کی مساوات دیگی

$$(E^1)^2 - E^1(W_{aa} + W_{bb}) + (W_{aa} + W_{bb} - W_{ab}W_{ba}) = 0 \tag{۶.۲۶}$$

دو درجی کلیہ استعمال کرتے ہوئے اور مساوات 23.6 سے یہ جانتے ہوئے $W_{ba} = W_{ab}^*$ ہم درج ذیل اخذ کرتے ہیں

$$E^1_{\pm} = \frac{1}{2}\left[W_{aa} + W_{bb} \pm \sqrt{(W_{aa} - W_{bb})^2 + 4|W_{ab}|^2}\right] \tag{۶.۲۷}$$

یہ انحطاطی نظریہ اضطراب کا بنیادی نتیجہ ہے جہاں دو جذر دو مضطرب توانائیوں سے مطابقت رکھتے ہیں لیکن صفر α کی صورت میں کیا ہوگا ایسی صورت میں $1 \quad = \quad \beta$ ہوگا لہٰذا مساوات 22.6 کے تحت $W_{ab} = 0$ اور مساوات 24.6 کے تحت $E^1 = W_{bb}$ ہوگا یہ درحقیقت مساوات 27.6 کے عمومی نتیجہ میں منفی علامت کے ذریعے شامل ہے مثبت علامت $\alpha = 1$ ، $\beta = 0$ کی صورت میں ہوگا۔ اس کے علاوہ ہمارے جوابات

$$E^1_{+} = W_{aa} = \langle\psi_a^0|H'|\psi_a^0\rangle, \quad E^1_{-} = W_{bb} = \langle\psi_b^0|H'|\psi_b^0\rangle$$

ٹھیک وہی ہیں جو ہم غیر انحطاطی نظریہ اضطراب سے حاصل کرتے ہیں مساوات 9.6 یہ محض ہماری خوش قسمتی ہے حالات ψ_a^0 اور ψ_b^0 پہلے سے موزوں خطی جوڑ تھے کیا اچھی بات ہوتی اگر ہم آغاز سے موزوں حالات جان پاتے ایسی صورت میں ہم غیر انحطاطی نظریہ اضطراب استعمال کر پاتے حقیقت میں درج ذیل مسئلہ کے تحت ہم عموماً ایسا کر پاتے ہیں

مسئلہ ۶.۱: فرض کریں A ایک ایسا ہرمشی عامل ہے جو H^0 اور H' کے ساتھ قابل تبادل ہے اگر H^0 کے انحطاطی امتیازی تفاعلات ψ_a^0 اور ψ_b^0 عامل A کے بھی امتیازی تفاعلات ہوں جن کے منفرد امتیازی اقدار ہوں

$$\mu \neq \nu \quad \text{اور} \quad A\psi_a^0 = \mu\psi_a^0, \quad A\psi_b^0 = \nu\psi_b^0$$

تب $W_{ab} = 0$ ہوگا لہٰذا ψ_a^0 اور ψ_b^0 نظریہ اضطراب میں قابل استعمال موزوں حالات ہوں گے

ثبوت: ہم فرض کر چکے ہیں کہ $[A, H'] = 0$ ہوگا جس کے تحت درج ذیل ہوگا

$$\begin{aligned}
\langle\psi_a^0|[A, H']\psi_b^0\rangle &= 0 \\
&= \langle\psi_a^0|AH'\psi_b^0\rangle - \langle\psi_a^0|H'A\psi_b^0\rangle \\
&= \langle A\psi_a^0|H'\psi_b^0\rangle - \langle\psi_a^0|H'\nu\psi_b^0\rangle \\
&= (\mu - \nu)\langle\psi_a^0|H'\psi_b^0\rangle = (\mu - \nu)W_{ab}
\end{aligned}$$

اب $\mu \neq \nu$ ہے لہٰذا $W_{ab} = 0$ ہوگا

سبق اگر آپ کا سامنا انحطاطی حالات سے ہو ایسا ہرمشی عامل A تلاش کرنے کی کوشش کریں جو H^0 اور H' کے ساتھ قابل تبادل ہو H^0 اور A کے بیک وقت امتیازی تفاعلات کو اپنے غیر مضطرب حالات

منتخب کر کے سادہ اول رتبی نظریہ اضطراب بروئے کار لائے ایسا عامل تلاش نہ کرنے کی صورت میں آپ کو مساوات 27.6 استعمال کرنا ہو گا جس کی ضرورت عملاً کم ہی پڑتی ہے

□

سوال ۶.۶: فرض کریں دو موزوں غیر مضطرب حالات

$$\psi^0_\pm = \alpha_\pm \psi^0_a + \beta_\pm \psi^0_b$$

جہاں $\alpha_\pm$ اور $\beta_\pm$ کو معمول شدگی تک مساوات 22.6 یا مساوات 24.6 تعین کرتے ہیں صریحاً درج ذیل دکھائیں

ا. $\psi^0_\pm$ عمودی ہے $(\langle\psi^0_+|\psi^0_-\rangle = 0)$

ب. $\langle\psi^0_+|H'|\psi^0_-\rangle = 0$

ج. $\langle{}^0_\pm|H'|\psi^0_\pm\rangle = E^1_\pm$ جہاں E^1 کی قیمت مساوات 27.6 دیتی ہے

سوال ۶.۷: فرض کرے ایک ذرہ جس کی کمیت m ہے اپنے آپ پر بند یک بعدی خطہ جس کی لمبائی L ہے پر آزادی سے حرکت کرتا ہے

ا. دکھائیں کے ساکن حالات کو درج ذیل روپ میں لکھا جا سکتا ہے

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{2\pi i n x/L}, \qquad (-L/2 < x < L/2)$$

جہاں $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ اور اجازتی توانائیاں درج ذیل ہیں

$$E_n = \frac{2}{m}\left(\frac{n\pi\hbar}{L}\right)^2$$

دھیان رہے کہ زمینی حال $n = 0$ کے علاوہ تمام حالات دہرا انحطاطی ہے

ب. فرض کریں ہم اب اضطراب

$$H' = -V_0 e^{-x^2/a^2}$$

متعارف کرتے ہیں جہاں $a \ll L$ ہو یہ $x = 0$ پر مخفیہ میں معمولی جھکاوٹ پیدا کرتا گویا تار کو یہاں مروڑا گیا ہوں مساوات 27.6 استعمال کرتے ہوئے E_n کی اول رتبی تصحیح تلاش کریں اشارہ: چونکہ H' خطہ $-a < x < a$ کے باہر تقریباً صفر ہے اور $L \ll a$ ہے لہٰذا تکمل کی قیمت حاصل کرتے وقت تکمل کی حدوں کو $\pm L/2$ کی بجائے $\pm\infty$ رکھیں

ج. اس مسئلہ کے لئے ψ_n اور ψ_{-n} کی موزوں خطی جوڑ کیا ہوں گے دکھائے کہ ان حالات کے ساتھ آپ کو مساوات 19.6 استعمال کرتے ہوئے اول رتبی تصحیح حاصل ہو گی

د. ایسا ہرمشی عامل A تلاش کریں جو مسئلہ کے شرائط پر پورا اترتا ہو دکھائیں کہ H^0 اور A کے بیک وقت امتیازی حالات ٹھیک وہی ہے جو آپ نے جزو-ج میں استعمال کیے

۶.۲.۲ بلند رتبی انحطاط

گزشتہ حصہ میں انحطاط کو دوپڑتا تصور کیا گیا تاہم ہم دیکھ سکتے ہیں کہ اس ترکیب کو کس طرح عمومی بنایا جا سکتا ہے مساوات 22.6 اور 24.6 کو ہم دوبارہ قالبی روپ میں لکھتے ہیں

$$\begin{pmatrix} W_{aa} & W_{ab} \\ W_{ba} & W_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = E^1 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \tag{۶.۲۸}$$

ظاہر ہے کہ E^1 W قالب کے امتیازی اقدار ہیں مساوات 26.6 اس قالب کی امتیازی مساوات ہے اور غیر مضطرب حالات کے موزوں خطی جوڑ W کے امتیازی سمتیات ہوں گے

ہم n پڑتا انحطاط کی صورت میں $n \times n$ قالب

$$W_{ij} = \langle \psi_i^0 | H' | \psi_j^0 \rangle \tag{۶.۲۹}$$

کے امتیازی اقدار تلاش کرتے ہیں الجبرا کی زبان میں موزوں غیر مضطرب تفاعلات موج کی تلاش سے مراد انحطاطی ذیلی فضا میں ایسا اساس تیار کرنا ہے جو قالب W کو وتری بناتا ہو یہاں بھی ایک ایسا عامل A تلاش کر کے جو H' کا قابل تبادل ہو A اور H' کے بیک وقت امتیازی تفاعلات استعمال کر کے ہم قالب W حاصل کریں گے جو از خود وتری ہو گا لہٰذا آپ کو امتیازی مساوات حل کرنے کی ضرورت پیش نہیں آئی گی اگر آپ کو میری دوپڑتا انحطاط کو عمومیت دیتے ہوئے n پڑتا انحطاط پر یقین نہ ہو تب سوال 10.6 حل کر کے اپنی تسلی کر لیں

مثال ۶.۲: تین آبادی لامتناہی کعبی کنواں سوال 2.4 پر غور کریں

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a,\, 0 < y < a,\, 0 < z < a \\ \infty & \text{دیگر صورت} \end{cases} \tag{۶.۳۰}$$

ساکن حالات درج ذیل ہیں

$$\psi^0_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_x \pi}{a} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{a} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{a} z\right) \tag{۶.۳۱}$$

جہاں n_x ، n_y اور n_z مثبت عدد صحیح ہیں ان کی مطابقتی اجازتی توانائیاں درج ذیل ہیں

$$E^0_{n_x n_y n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \tag{۶.۳۲}$$

دھیان رہے کہ زمینی حال ψ_{111} غیر انحطاطی ہے جس کی توانائی درج ذیل ہے

$$E_1^0 \equiv 3\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{۶.۳۳}$$

تاہم پہلا ہیجان حال تہرا انحطاطی ہیں

$$\psi_a \equiv \psi_{112}, \quad \psi_b \equiv \psi_{121}, \quad \psi_c \equiv \psi_{211} \tag{۶.۳۴}$$

اور ان تینوں کی توانائی

$$E_1^0 \equiv 3\frac{\pi^2\hbar^2}{ma^2} \tag{۶.۳۵}$$

ایک دوسری جیسی ہے۔ آئیے اب درج ذیل اضطراب متعارف کرتے ہیں

$$H' = \begin{cases} V_0, & 0 < x < a/2, 0 < y < a/2 \\ 0, & \text{دیگر صورت} \end{cases} \tag{۶.۳۶}$$

جو ڈبے کے ایک چوتھائی حصہ میں مخفیہ کو V_0 مقدار بڑھاتا ہے شکل 5.6 زمینی حال توانائی کی ایک رتبی تصحیح مساوات 9.6 دیتی ہے

$$\begin{aligned} E_0^1 &= \langle\psi_{111}|H'|\psi_{111}\rangle \\ &= \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}y\right) \mathrm{d}y \int_0^{a} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) \mathrm{d}z \\ &= \frac{1}{4}V_0 \end{aligned} \tag{۶.۳۷}$$

جو ہمارے توقعات کے عین مطابق ہے اول ہیجان حال جاننے کے لیے ہمیں انحطاطی نظریہ اضطراب کی پوری صلاحیت درکار ہو گی پہلے قدم میں ہم قالب W تیار کرتے ہیں اس کے وتری ارکان وہی ہونگے جو زمینی حال کے ہیں ماسوائے ان میں سے ایک سائن جس کا دلیل دگنا ہے آپ درج ذیل کی خود تصدیق کر سکتے ہیں

$$W_{aa} = W_{bb} = W_{cc} = \frac{1}{4}V_0$$

غیر وتری ارکان زیادہ دلچسپ ہے

$$\begin{aligned} W_{ab} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 &\int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x \\ &\times \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \mathrm{d}y \int_0^{a} \sin\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}z\right) \mathrm{d}z \end{aligned}$$

تاہم z تکمل صفر ہو گا جیسا W_{ac} کے لیے بھی ہو گا لہٰذا درج ذیل ہو گا

$$W_{ab} = W_{ac} = 0$$

الغرض درج ذیل ہو گا

$$W_{bc} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \mathrm{d}x \\ \times \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \mathrm{d}y \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) \mathrm{d}z = \frac{16}{9\pi^2} V_0$$

یوں درج ذیل ہو گا جہاں $\kappa \equiv (8/3\pi)^2 \approx 0.7205$ ہے

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_{aa} & W_{ab} & W_{ac} \\ W_{ba} & W_{bb} & W_{bc} \\ W_{ca} & W_{cb} & W_{cc} \end{pmatrix} = \frac{V_0}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \kappa \\ 0 & \kappa & 1 \end{pmatrix} \tag{۶.۳۸}$$

قالب $\mathbf{W}$ بلکہ $4\mathbf{W}/V_0$ جس کے ساتھ کام کرنا زیادہ آسان ہے کی امتیازی مساوات ضمیمہ ا.۵ کے تحت

$$\begin{vmatrix} 1-w & 0 & 0 \\ 0 & 1-w & \kappa \\ 0 & \kappa & 1-w \end{vmatrix}$$

یعنی

$$(1-w)^3 - \kappa^2(1-w) = 0$$

ہو گی جس کے امتیازی اقدار درج ذیل ہوں گے

$$w_1 = 1; \quad w_2 = 1+\kappa \approx 1.7205; \quad w_3 = 1-\kappa \approx 0.2795$$

یوں λ کے اول رتبہ تک درج ذیل ہو گا

$$E_1(\lambda) = \begin{cases} E_1^0 + \lambda V_0/4 \\ E_1^0 + \lambda(1+\kappa)V_0/4 \\ E_1^0 + \lambda(1-\kappa)V_0/4 \end{cases} \tag{۶.۳۹}$$

جہاں E_1^0 مشترکہ غیر مضطرب توانائی مساوات 35.6 ہے اضطراب توانائی E_1^0 تین منفرد توانائیوں کی سطحوں میں تقسیم کر کے انحطاط ختم کرتا ہے شکل 6.6 دیکھیں دھیان رہے اگر ہم بھولا پن میں اس مسئلے کو غیر انحطاطی نظریہ اضطراب سے حل کرتے تب ہم اخذ کرتے کہ اول رتبی تصحیح مساوات 9.6 تینوں حالات کے لئے ایک جیسی $V_0/4$ ہوتی جو در حقیقت صرف درمیانے حال کے لیے درست ہے

مزید موزوں غیر مضطرب حالات درج ذیل روپ کے خطی جوڑ ہونگے

$$\psi^0 = \alpha\psi_a + \beta\psi_b + \gamma\psi_c \tag{۶.۴۰}$$

جہاں عددی سر (α، β اور γ) قالب $\mathbf{W}$ کے امتیازی سمتیات ہوں گے

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \kappa \\ 0 & \kappa & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta\gamma \end{pmatrix} = w \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix}$$

ہمیں $w = 1$ کے لیے $\alpha = 1$، $\beta = \gamma = 0$ جبکہ $w = 1 \pm \kappa$ کے لیے $\alpha = 0$، $\beta = \pm\gamma = 1/\sqrt{2}$ حاصل ہوتے ہیں۔ میں نے ان کی معمول شدہ قیمتیں پی کی ہیں۔ یوں موزوں حالات درج ذیل ہونگے

$$\psi^0 = \begin{cases} \psi_a \\ (\psi_b + \psi_c)/\sqrt{2} \\ (\psi_b - \psi_c)/\sqrt{2} \end{cases} \tag{۶.۴۱}$$

$\square$

سوال ۶.۸: لامتناہی کعبی کنواں مساوات 30.6 میں نقطہ $(a/4, a/2, 3a/4)$ پر ڈیلٹا تفاعلی موڑا:

$$H' = a^3 V_0 \delta(x - a/4)\delta(y - a/2)\delta(z - 3a/4)$$

رکھ کر کنواں کو مضطرب کیا جاتا ہے۔ زمینی حال اور تہرا انحطاطی اول ہیجان حالات کی توانائیوں میں اول رتبی تصحیح تلاش کریں

سوال ۶.۹: ایک ایسے کوانٹائی نظام پر غور کریں جس میں صرف تین خطی غیر تابع حالات پائے جاتے ہوں فرض کریں قالبی روپ میں اس کا ہیملٹنی درج ذیل ہے

$$\mathbf{H} = V_0 \begin{pmatrix} (1-\epsilon) & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \epsilon \\ 0 & \epsilon & 2 \end{pmatrix} = \underbrace{V_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}}_{H^0} + \underbrace{\epsilon V_0 \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}}_{H'}$$

جہاں V_0 ایک مستقل ہے اور ϵ کوئی چھوٹا عدد $(\epsilon \ll 1)$ ہے۔

ا. غیر مضطرب ہیملٹنی $(\epsilon = 0)$ کے امتیازی سمتیات اور امتیازی اقدار لکھیں

ب. قالب $\mathbf{H}$ کہ بالکل ٹھیک امتیازی اقدار کے لئے حل کریں ان میں سے ہر ایک کو ϵ کی صورت میں دوم رتبہ تک طاقتی تسلسل کی روپ میں پھیلائیں

ج. اول رتبی اور دوم رتبی غیر انحطاطی نظریہ اضطراب استعمال کرتے ہوئے اس حال کی امتیازی قدر کی تخمینی قیمت تلاش کریں جو H^0 کے غیر انحطاطی امتیازی سمتیہ سے پیدا ہوتا ہے آپ نے جواب کا جزو-ا کے بالکل ٹھیک جواب کے ساتھ موازنہ کریں

د. ابتدائی طور پر انحطاطی دو امتیازی اقدار کی اول رتبی تصحیح کو انحطاطی نظریائے اضطراب سے تلاش کریں بالکل ٹھیک نتائج کے ساتھ موازنہ کریں

سوال ۶.۱۰: میں دعویٰ چکا ہوں کہ n پڑتا انحطاطی توانائی کے اول رتبی تصحیح قالب W کے امتیازی اقدار ہوں گے میں نے دعویٰ کیا کہ یہ $n = 2$ صورت کی قدرتی عمومیت ہے۔ اس کو ثابت کرنے کے لئے، حصہ 1.2.6 کی قدموں پر چل کر درج ذیل سے آغاز کرکے

$$\psi^0 = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \psi_j^0$$

(مساوات 17.6 کو عمومیت دیتے ہوئے) دکھائیں کہ مساوات 22.6 کے مماثل کا مفہوم قالب $\mathbf{W}$ کی امتیازی قدر مساوات لیا جا سکتا ہے۔

۶.۳ ہائیڈروجن کا مہین ساخت

ہائیڈروجن جوہر کے مطالعہ کے دوران حصہ 2.4 ہم نے ہیملٹنی درج ذیل لی

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} \tag{۶.۴۲}$$

جو الیکٹران کی حرکی توانائی جمع کولمب مخفی توانائی ہے۔ تاہم یہ مکمل کہانی نہیں ہے ہم m کی بجائے تخفیف شدہ کمیت سوال 1.5 استعمال کرکے ہیملٹنی میں حرکت مرکزہ کا اثر شامل کرنا سیکھ چکے ہیں زیادہ اہم مہین ساخت ہے جو در حقیقت دو منفرد وجوہات، اضافیتی تصحیح اور چکر و مدار ربط، کی بنا پیدا ہوتا ہے۔ بوہر توانائیوں مساوات 70.4 کے لحاظ سے مہین ساخت α^2 گنا کم نہایت چھوٹا اضطراب ہے جہاں

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \cong \frac{1}{137.036} \tag{۶.۴۳}$$

مہین ساخت مستقل کہلاتا ہے اس سے بھی α گنا چھوٹا لیمب انتقال ہے جو بھر کی میدان کی کوانٹازنی سے وابستہ ہے اور اس سے مزید کم نہایت مہین ساخت کہلاتا ہے جو الیکٹران اور پروٹان کے جفت قطب معیار اثر کے بیچ مقناطیسی باہم عمل سے پیدا ہوتا ہے اس تنظیم ی ڈھانچہ کو جدول 1.6 میں پیش کیا گیا ہے اس حصہ میں ہم غیر تابع وقت نظریہ اضطراب کی مثال کے طور پر ہائیڈروجن کی مہین ساخت پر غور کریں گے سوال ۶.۱۱:

ا. بوہر توانائیوں کو مہین ساخت مستقل اور الیکٹران کی ساکن توانائی mc^2 کی صورت میں لکھیں

ب. ϵ_0 ، e ، $\hbar$ اور c کی تجرباتی قیمتیں استعمال کیے بغیر مہین ساخت مستقل کی قیمت تلاش کریں تبصرہ پوری طبیعیات میں بلاشبہ مہین ساخت مستقل سب سے زیادہ خالص بے بعدی بنیادی عدد ہے یہ برقناطیسیت الیکٹران کا بار اضافیت روشنی کی رفتار اور کوانٹم میکانیات پلانک مستقل کے بنیادی مستقلات کے بیچ رشتہ بیان کرتا ہے اگر آپ جزو-ب حل کر پائیں یقیناً آپ کو نوبیل انعام سے نوازا جائے گا البتہ میرا مشورہ ہو گا کہ اس وقت اس پر بہت وقت ضائع نہ کریں بہت سارے انتہائی قابل لوگ ایسا کر کے ناکام ہو چکے ہیں

۶.۳.۱ اضافیتی تصحیح

ہیملٹنی کا پہلا جزو بظاہر حرکی توانائی کو ظاہر کرتا ہے

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \tag{۶.۴۴}$$

جس میں باضابطہ متبادل $\boldsymbol{p} \to (\hbar/i)\nabla^2$ پر کر کے درج ذیل عامل حاصل ہو گا

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \tag{۶.۴۵}$$

تاہم مساوات 44.6 حرکی توانائی کا کلاسیکی کلیہ ہے اضافیتی کلیہ درج ذیل ہے

$$T = \frac{mc^2}{\sqrt{1-(v/c)^2}} - mc^2 \tag{۶.۴۶}$$

جہاں پہلا جزو کل اضافیتی توانائی ہے جس میں مخفی توانائی شامل نہیں ہے اور جس سے ہمیں فی الحال غرض بھی نہیں ہے جبکہ دوسرا جزو ساکن توانائی ہے ان دونوں کے بیچ فرق کو حرکت سے منسوب کیا جا سکتا ہے ہمیں سمتی رفتار کی بجائے اضافیتی معیار حرکت

$$p = \frac{mv}{\sqrt{1-(v/c)^2}} \tag{۶.۴۷}$$

کی صورت میں T کو لکھنا ہو گا۔ دھیان رہے کہ

$$p^2c^2 + m^2c^4 = \frac{m^2v^2c^2 + m^2c^4[1-(v/c)^2]}{1-(v/c)^2} = \frac{m^2c^4}{1-(v/c)^2} = (T+mc^2)^2$$

ہو گا جس کی بنا درج ذیل ہو گا

$$T = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} - mc^2 \tag{۶.۴۸}$$

غیر اضافیتی حد $p \ll mc$ کی صورت میں حر کی توانائی کی اضافیتی مساوات تخفیف کے بعد کلاسیکی نتائج مساوات 44.6 دیتی ہے ایک چھوٹا عدد (p/mc) کی طاقتی تسلسل میں پھیلا کر درج ذیل حاصل ہو گا

$$T = mc^2\Big[\sqrt{1+\Big(\frac{p}{mc}\Big)^2}-1\Big] = mc^2\Big[1+\frac{1}{2}\Big(\frac{p}{mc}\Big)^2-\frac{1}{8}\Big(\frac{p}{mc}\Big)^4\cdots-1\Big]$$
$$= \frac{p^2}{2m}-\frac{p^4}{8m^3c^2}+\cdots. \tag{۶.۴۹}$$

ہیملٹنی کی کم سے کم رتبی اضافیتی تصحیح درج ذیل ہے

$$H'_r = -\frac{p^4}{8m^3c^2} \tag{۶.۵۰}$$

غیر مضطرب حال میں H' کی توقعاتی قیمت رتبہ اول نظریہ اضطراب میں E_n کی تصحیح ہو گی مساوات 9.6

$$E^1_r = \langle H'_r\rangle = -\frac{1}{8m^3c^2}\langle\psi|p^4\psi\rangle = -\frac{1}{8m^3c^2}\langle p^2\psi|p^2\psi\rangle \tag{۶.۵۱}$$

اب غیر مضطرب حالات کے لئے شروڈنگر مساوات کہتی ہے

$$p^2\psi = 2m(E-V)\psi \tag{۶.۵۲}$$

لہٰذا درج ذیل ہو گا

$$E^1_r = -\frac{1}{2mc^2}\langle(E-V)^2\rangle = -\frac{1}{2mc^2}[E^2-2E\langle V\rangle+\langle V^2\rangle] \tag{۶.۵۳}$$

اب تک یہ مکمل طور پر ایک عمومی نتیجہ ہے تاہم ہمیں ہائیڈروجن میں دلچسپی ہے جس کے لیے $-(1/4\pi\epsilon_0)e^2/r$ ہو گا

$$E^1_r = -\frac{1}{2mc^2}\Big[E^2_n+2E_n\Big(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\Big)\Big\langle\frac{1}{r}\Big\rangle+\Big(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\Big)^2\Big\langle\frac{1}{r^2}\Big\rangle\Big] \tag{۶.۵۴}$$

جہاں E_n زیر غور حال کی بوہر توانائی ہے یہ کام مکمل کرنے کی خاطر ہمیں غیر مضطرب حال ψ_{nlm} مساوات 89.4 میں $1/r$ اور $1/r^2$ کی توقعاتی قیمتیں درکار ہوں گی پہلا آسان ہے سوال 12.6 دیکھیں

$$\Big\langle\frac{1}{r}\Big\rangle = \frac{1}{n^2a} \tag{۶.۵۵}$$

جہاں a رداس بوہر مساوات 72.4 ہے دوسرا اتنا آسان نہیں ہے سوال 33.6 دیکھیں تاہم اس کا جواب درج ذیل ہے

$$\Big\langle\frac{1}{r^2}\Big\rangle = \frac{1}{(l+1/2)n^3a^2} \tag{۶.۵۶}$$

یوں درج ذیل ہو گا

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2}\Big[E_n^2 + 2E_n\Big(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\Big)\frac{1}{n^2a} + \Big(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\Big)^2\frac{1}{(l+1/2)n^3a^2}\Big]$$

یا مساوات 72.4 استعمال کرتے ہوئے a کو خارج کر کے باقی کو E_n مساوات 70.4 کی صورت میں لکھ کے درج ذیل حاصل ہو گا

$$E_r^1 = -\frac{(E_n)^2}{2mc^2}\Big[\frac{4n}{l+1/2} - 3\Big] \tag{۶.۵۷}$$

ظاہر ہے کہ اضافیتی تصحیح کی مقدار E_n سے تقریباً $E_n/mc^2 = 2\times10^{-5}$ گنا کم ہے

اگرچہ ہائیڈروجن جوہر بہت زیادہ انحطاطی ہے اس کے باوجود میں نے حساب کے دوران غیر انحطاطی نظریہ اضطراب استعمال کیا مساوات 51.6 یہاں اضطراب کروی تشاکلی ہے لہٰذا یہ L^2 اور L_z کا مقلوب ہو گا مزید کسی E_n کے n^2 حالات کے لئے ان (تمام) عاملین کے امتیازی تفاعلات کے منفرد امتیازی اقدار ہوں گے۔ یوں خوش قسمتی سے تفاعلات ψ_{nlm} اس مسئلہ کے موزوں حالات ہوں گے یا جیسا ہم کہتے ہیں n ، l اور m موزوں کوانٹم اعداد ہیں لہٰذا غیر انحطاطی نظریہ اضطراب کا استعمال درست تھا

سوال ۶.۱۲: مسئلہ وریل سوال 40.4 استعمال کرتے ہوئے مساوات 55.6 ثابت کریں

سوال ۶.۱۳: آپ نے سوال 43.4 میں حال ψ_{321} کے لیے r^s کی توقعاتی قیمت حاصل کی اپنے جواب کی تصدیق $s=0$ غیر اہم صفر $s=-1$ مساوات 55.6 $s=-2$ مساوات 56.6 اور $s=-3$ مساوات 64.6 کے لیے کریں $s=-7$ کی صورت میں کیا ہو گا اس پر تبصرہ کریں

سوال ۶.۱۴: یک بعدی ہارمونی مرتعش کی توانائی کی سطحوں کے لیے کم سے کم رتبی اضافیتی تصحیح تلاش کریں اشارہ: مثال 5.2 میں مستعمل ترکیب بروئے کار لائیں

سوال ۶.۱۵: دکھائیں کہ ہائیڈروجن حالات کے لیے $l=0$ لیتے ہوئے p^2 ہرمشی ہے لیکن p^4 ہرمشی نہیں ہے ان حالات کے لئے ψ متغیرات θ اور ϕ کا غیر تابع ہے لہٰذا درج ذیل ہو گا

$$p^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\Big(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\Big)$$

مساوات 13.4 تکمل بالحصص استعمال کرتے ہوئے درج ذیل دکھائیں

$$\langle f|p^2g\rangle = -4\pi\hbar^2\Big(r^2f\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}r} - r^2g\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}\Big)\Big|_0^\infty + \langle p^2f|g\rangle$$

تصدیق کیجئے گا کہ ψ_{n00} کے لیے، جو مبدا کے قریب درج ذیل ہو گا، سرحدی جزو صفر ہے۔

$$\psi_{n00} \sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(na)^{3/2}}e^{(-r/na)}$$

اب یہی کچھ p^4 کے لئے کر کے دیکھیں اور لکھائی کہ سرحدی اجزاء صفر نہیں ہونگے۔ درحقیقت درج ذیل ہو گا

$$\langle \psi_{n00} | p^4 \psi_{m00} \rangle = \frac{8\hbar^4}{a^4} \frac{(n-m)}{(nm)^{5/2}} + \langle p^4 \psi_{n00} | \psi_{m00} \rangle$$

۶.۳.۲ چکر و مدار ربط

مرکزہ کے گرد مدار میں الیکٹران کا تصور کریں الیکٹران کے نقطہ نظر سے پروٹان اس کے گرد گھومتا ہے شکل 7.6 مدار میں مثبت بار الیکٹران کے چھوکٹ میں مقناطیسی میدان پیدا کرتا ہے جو چکر کھاتے ہوئے الیکٹران پر معیار قوت پیدا کر کے الیکٹران کے مقناطیسی معیار اثر μ کو میدان کے ہم رخ بنانے کی کوشش کرتا ہے اس کی ہیملٹنی مساوات 157.4 درج ذیل ہو گی

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B} \tag{۶.۵۸}$$

ہمیں پروٹان کا مقناطیسی میدان اور الیکٹران کا جفت قطب معیار اثر $\boldsymbol{\mu}$ درکار ہو گا

پروٹان کا مقناطیسی میدان ہم الیکٹران کی نقطہ نظر سے پروٹان کو استمراری دائری رو تصور کر کے اس کے مقناطیسی میدان کو بایوٹ و سیوارٹ قانون سے حاصل کرتے ہیں

$$B = \frac{\mu_0 I}{2r}$$

جس میں موثر رو $I = e/T$ ہے جہاں e پروٹان کے بار کو اور T دائرے پر ایک چکر کے دوری عرصہ کو ظاہر کرتا ہے اس کے برعکس مرکزہ کے ساکن چھوکٹ میں الیکٹران کا مداری زاویائی معیار حرکت $L = rmv = 2\pi mr^2/T$ ہو گا مزید $\boldsymbol{B}$ اور $\boldsymbol{L}$ دونوں کا رخ ایک دوسرے جیسا ہو گا شکل 7.6 میں اوپر جانب لہٰذا درج ذیل لکھا جا سکتا ہے

$$\boldsymbol{B} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{mc^2 r^3} \boldsymbol{L} \tag{۶.۵۹}$$

جہاں میں نے $c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}$ استعمال کر کے μ_0 کی جگہ ϵ_0 استعمال کیا ہے

الیکٹران کا مقناطیسی جفت قطب معیار اثر: ایک چکر کھاتے بار کا مقناطیسی جفت قطب معیار اثر اس کے چکر زاویائی معیار حرکت سے تعلق رکھتا ہے ان کے بیچ تناسبی جزو ضربی مسکن مقناطیسی مثبت ہو گا جس کا سامنا ہم حصہ 2.4.4 میں کر چکے ہیں آئیں اس مرتبہ کلاسیکی برقی حرکیات استعمال کرتے ہوئے اسے اخذ کریں ایک ایسا بار q جس کی لپائی رداس r کے چھلا پر کی گئی ہو اور جو محور کے گرد دوری عرصہ T سے گھومتا ہو پر غور کریں شکل 8.6 اس چھلے کے مقناطیسی جفت قطب معیار اثر کی تعریف رو (q/T) ضرب رقبہ (πr^2) ہے

$$\mu = \frac{q\pi r^2}{T}$$

اگر چھلا کی کمیت m ہو جمودی معیار اثر mr^2 ضرب زاویائی سمتی رفتار $(2\pi/T)$ اس کا زاویائی معیار حرکت ہو گا

$$S = \frac{2\pi mr^2}{T}$$

اس تنظیم کے لیے ظاہر ہے کہ مسکن مقناطیسی نسبت $\mu/S = q/2m$ ہو گا دھیان رہے کہ یہ r اور T کا تابع نہیں ہے اگر میرے پاس کوئی زیادہ پیچیدہ شکل و صورت کا جسم ہو تا مثلاً ایک کرہ صرف اتنا ضروری ہے کہ اپنے محور کے گرد گھومنے سے اس جسم کی شکل پیدا ہو میں اس کو باریک چھلوں میں ٹکڑے کر کے تمام سے پیدا حصوں کا مجموعہ لے کر $\boldsymbol{\mu}$ اور $\boldsymbol{S}$ کی قیمت معلوم کر پاتا جب تک کمیت اور بار کی تقسیم ایک جیسی ہو تا کہ بار اور کمیت کا نسبت یکساں ہو ہر چھلے کا اور لہٰذا پوری جسم کا مسکن مقناطیسی نسبت ایک دوسرے جیسا ہو گا مزید $\boldsymbol{\mu}$ اور $\boldsymbol{S}$ کے رخ ایک دوسرے جیسے یا اگر بار منفی ہو تو ایک دونوں کے مخالف ہونگے لہٰذا درج ذیل ہو گا

$$\boldsymbol{\mu} = \left(\frac{q}{2m}\right)\boldsymbol{S}$$

یہ خالصتاً کلاسیکی حساب ہے درحقیقت الیکٹران کا مقناطیسی معیار اثر اس کے کلاسیکی قیمت کا دگنا ہے

$$\boldsymbol{\mu}_e = -\frac{e}{m}\boldsymbol{S} \tag{۶.۶۰}$$

ڈیراک نے الیکٹران کی اضافیتی نظریہ میں اضافی جزو ضربی 2 کی وجہ پیش کی ہے

ان تمام کو اکٹھے کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہو گا

$$H = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)\frac{1}{m^2c^2r^3}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$$

اس حساب میں ایک فریب سے کام لیا گیا ہے میں نے الیکٹران کے ساکن چھوکٹ میں تجزیہ کیا جو ایک غیر جمودی نظام ہے چونکہ الیکٹران مرکزہ کے گرد گھومتا ہے لہٰذا یہ اسراع پذیر ہو گا اس حساب میں مجرد حرکیات تصحیح جسے طامس استقبالی حرکت کہتے ہیں شامل کر کے قبول کیا جا سکتا ہے جو حساب میں جزو ضربی $1/2$ شامل کرتا ہے

$$H'_{so} = \left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0}\right)\frac{1}{m^2c^2r^3}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L} \tag{۶.۶۱}$$

یہ چکر و دائری باہم عمل ہے۔ ماسوائے دو تصحیح (الیکٹران کی ترمیم شدہ مسکن مقناطیسی نسبت اور طامس استقبالی حرکت جزو ضربی جو اتفاقاً ایک دوسرے کو کاٹتے ہیں) یہ وہی نتیجہ ہے جو آپ (بھولی بھالی) کلاسیکی نمونہ سے حاصل کرتے۔ طبعی طور پر یہ الیکٹران کے لمحاتی ساکن چھوکٹ میں پروٹان کی مقناطیسی میدان میں، چکر کاٹتے الیکٹران کے مقناطیسی جفت قطب معیار اثر پر قوت مروڑ کی بدولت ہے۔

اب کوانٹم میکانیات کی بات کرتے ہیں۔ چکر و دائری ربط کی صورت میں L اور S کے ساتھ ہیملٹنی غیر مقلوب ہو گا لہٰذا چکر اور دائری زاویائی معیار اثر علیحدہ علیحدہ بقائی نہیں رہتے ہیں سوال 16.6 دیکھیں البتہ H'_{so} مقلوب ہو گا L^2 ، S^2 اور کل زاویائی معیار حرکت کے ساتھ۔

$$\boldsymbol{J} \equiv \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S} \tag{۶.۶۲}$$

لہٰذا یہ مقداریں بقائی ی ہیں مساوات 71.3 دوسرے لفظوں میں L_z اور S_z کے امتیازی حالات نظریہ اضطراب میں استعمال کے لئے موزوں حالات نہیں ہیں جبکہ L^2 ، S^2 ، J^2 ،اور J_z کے امتیازی حالات موزوں حالات ہیں اب

$$J^2 = (\boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}) \cdot (\boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}) = L^2 + S^2 + 2\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S}$$

کی بنا

$$\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2) \tag{۶.۶۳}$$

ہو گا لہٰذا $\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S}$ کے امتیازی اقدار درج ذیل ہونگے

$$\frac{\hbar^2}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

یہاں یقیناً $S = 1/2$ ہے مزید $1/r^3$ کی توقعاتی قیمت سوال 35.6(ج) دیکھیں درج ذیل ہے

$$\langle 1/r^3 \rangle = \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)n^3a^3} \tag{۶.۶۴}$$

لہٰذا ہم درج ذیل اخذ کرتے ہیں

$$E^1_{so} = \langle H'_{so} \rangle = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{m^2c^2} \frac{(\hbar^2/2)[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)n^3a^3}$$

یا تمام کو E_n کی صورت میں لکھتے ہیں

$$E^1_{so} = \frac{(E_n)^2}{mc^2} \left\{ \frac{[j(j+1) - l(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)} \right\} \tag{۶.۶۵}$$

یہ ایک حیرت کن بات ہے کہ بالکل مختلف طبعی پہلوؤں کے باوجود اضافیتی تصحیح اور چکر و دائری ربط ایک جتنا رتبہ (E_n^2/mc^2) رکھتے ہیں ان دونوں کو جمع کر کے ہمیں مکمل مہین ساخت کا کلیہ سوال 17.6 دیکھیں حاصل ہوتا ہے

$$E^1_{fs} = \frac{(E_n)^2}{2mc^2}\left(3 - \frac{4n}{j+1/2}\right) \tag{۶.۶۶}$$

اس کو کلیہ بوہر کے ساتھ چھوڑ کر ہم ہائیڈروجن کی توانائی کی سطحوں کا عظیم نتیجہ حاصل کرتے ہیں جس میں مہین ساخت شامل ہے

$$E_{nj} = -\frac{13.6\,\text{eV}}{n^2}\Big[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\Big(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{2}\Big)\Big] \tag{۶.۶۷}$$

مہین ساخت l میں انحطاط کو توڑتا ہے یعنی کسی ایک n کیلئے l کی مختلف اجازتی قیمتیں ایک دوسرے جیسی توانائی کے حامل نہیں ہونگی تاہم اب بھی یہ j میں انحطاط برقرار رکھتا ہے شکل 9.6 دیکھیں دائری و چکر زاویائی معیار حرکت کے z جزو امتیازی اقدار m_l اور m_s اب موزوں کوانٹم اعداد نہیں ہونگے۔ ان مقداروں کی مختلف قیمتوں والے حالات کے خطی جوڑ ساکن حالات ہوں گے۔ موزوں کوانٹم اعداد n ، l ، s ، j ، اور m_j ہونگے

سوال ۶.۱۶: درج ذیل مقلب کی قیمتیں تلاش کریں (الف) $[\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S},\boldsymbol{L}]$، (ب) $[\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S},\boldsymbol{S}]$، (ج) $[\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S},\boldsymbol{J}]$، (د) $[\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S},L^2]$، (ہ) $[\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S},S^2]$، (و) $[\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S},J^2]$؛ اشارہ: $\boldsymbol{L}$ اور $\boldsymbol{S}$ زاویائی معیار حرکت کے بنیادی مقلبیت رشتوں مساوات 99.4 اور 134.4 کو مطمئن کرتے ہیں تاہم یہ ایک دوسرے کے ساتھ غیر مقلوب ہیں۔

سوال ۶.۱۷: اضافیتی تصحیح مساوات 57.6 اور چکر دائری ربط مساوات 65.6 سے مہین ساخت کلیہ مساوات 66.6 اخذ کریں اشارہ: دھیان رہے کہ $j = l \pm 1/2$ ہے مثبت علامت اور منفی علامت کو باری باری لے کر دیکھیں آپ دیکھیں گے کہ دونوں صورتوں میں آخری نتیجہ ایک دوسروں جیسا ہوگا

سوال ۶.۱۸: ہائیڈروجن کے موئی طیف کی سرخ بالمر لکیر نمایاں ہے جو $n = 3$ سے $n = 2$ میں منتقلی سے پیدا ہوتی ہے اس طیفی لکیر کا طول موج اور تعدد بوہر نظریہ سے تعین کریں مہین ساخت اس لکیر کو قریب قریب کئی لکیروں میں تقسیم کرتا ہے اب سوال یہ پیدا ہوتا ہے: لکیروں کی تعداد کیا ہو گی اور ان کے بیچ فاصلہ کتنا ہوگا اشارہ: پہلے قدم میں معلوم کریں کہ $n = 2$ سطح کتنی ذیلی سطحوں میں تقسیم ہوگا اور ہر ایک کے لیے eV میں E^1_{fs} تلاش کریں یہی کچھ $n = 3$ کے لیے کریں سطح توانائی کے شکل کا خاکہ بنا کر $n = 3$ سے $n = 2$ تک تمام ممکن منتقلی دکھائیں فوٹان کی صورت میں توانائی کا اخراج $(E_3 - E_2) + \Delta E$ ہوگا جہاں پہلا جزو سب میں مشترک جبکہ مہین ساخت کی بدولت ΔE کی قیمت ایک منتقلی سے دوسرے منتقلی بدلے گی۔ ہر منتقلی کے لئے ΔE کو eV میں تلاش کریں آخر میں انہیں فوٹان تعدد میں تبدیل کرکے ساتھ ساتھ طیفی لکیروں کے بیچ فاصلہ Hz کی صورت میں تعین کریں یہ غیر مضطرب لکیر اور ہر ایک طیفی لکیر کے بیچ تعددی فاصلہ نہیں ہوگا جو یقیناً قابل مشاہدہ نہیں ہے بلکہ یہ ہر لکیر اور اگلے لکیر کے بیچ تعددی فاصلہ ہوگا آپ کا جواب درج ذیل روپ میں ہونا چاہیے سرخ بالمر لکیر () لکیروں میں تقسیم ہوتا ہے بڑھتے تعدد کے لحاظ سے یہ (1) $(???)\ j =$ سے $j = (???)$، 2 $(???)\ j =$ سے $j = (???)$، ... ہونگے لکیر 1 اور لکیر 2 کے بیچ تعددی فاصلہ (???) Hz ہے لکیر 2 اور لکیر 3 کے بیچ فاصلہ ??? Hz ہے ...

سوال ۶.۱۹: نظریہ اضافت استعمال کیے بغیر ڈیراک مساوات سے ہائیڈروجن کی مہین ساخت کا ٹھیک ٹھیک کلیہ درج ذیل حاصل ہوتا ہے

$$E_{nj} = mc^2\Big\{\Big[1 + \Big(\frac{\alpha}{n-(j+1/2)+\sqrt{(j+1/2)^2-\alpha^2}}\Big)^2\Big]^{-1/2} - 1\Big\}$$

یہ ذہن میں رکھتے ہوئے کہ $1 \ll \alpha$ ہے اس کو a^4 رتبہ تک پھیلا کر دکھائیں کہ آپ مساوات 67.6 دوبارہ حاصل کرتے ہیں

۶.۴ زیمان اثر

ایک جوہر کو یکساں بیرونی مقناطیسی میدان $\boldsymbol{B}_{ext}$ میں رکھنے سے اس کی توانائی کی سطحوں میں تبدیلی پیدا ہوتی ہے اس مظہر کو زیمان اثر کہتے ہیں واحد ایک الیکٹران کے لیے اضطراب درج ذیل ہوگا

$$H'_z = -(\mu_1 + \mu_2) \cdot \boldsymbol{B}_{est} \tag{۶.۶۸}$$

جہاں

$$\mu_s = -\frac{e}{m}\boldsymbol{S} \tag{۶.۶۹}$$

الیکٹران چکر کے ساتھ وابستہ مقناطیسی جفت کتب معیار اثر اور

$$\mu_1 = -\frac{e}{2m}\boldsymbol{L} \tag{۶.۷۰}$$

مداری حرکت کے ساتھ وابستہ جفت کتب معیار اثر ہے یوں درج ذیل ہوگا

$$H'z = \frac{e}{2m}(\boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S}) \cdot \boldsymbol{B}_{est} \tag{۶.۷۱}$$

زیمان تقسیم کی فطرت فیصلہ کن حد تک اندرونی میدان مساوات 59.6 جو چکر مدار ربط پیدا کرتا ہے کے لحاظ سے بیرونی میدان کی طاقت پر منحصر ہوگا اگر $B_{int} \gg B_{ext}$ ہو تب مہین ساخت غالب ہوگا اور H' کو ایک چھوٹی اضطراب تصور کیا جا سکتا ہے جبکہ $B_{int} \ll B_{ext}$ کی صورت میں زیمان اثر غالب ہوگا اور مہین ساخت از خود اضطراب تصور کی جائے گی ان دو خطوں کے بیچ جہاں دونوں میدان مقلوب ہے ہمیں انحطاطی نظریہ اضطراب کی پوری قوت درکار ہوگی اور ہم پر لازم ہوگا کہ ہم ہیملٹنی کی متعلقہ حصے کو ہاتھ سے وتری بنائیں درج ذیل حصوں میں ہم ان تین صورتوں پر ہائیڈروجن کے لیے غور کریں گے سوال ۶.۲۰: مساوات 59.6 استعمال کرتے ہوئے ہائیڈروجن کی اندرونی میدان کی اندازاً قیمت تلاش کر کے بتائیں کہ طاقتور اور کمزور زیمان میدان کتنا ہوگا

۶.۴.۱ کمزور میدان زیمان اثر

اگر $B_{int} \gg B_{ext}$ ہو تب مہین ساخت مساوات 67.6 غالب ہوگی اور موزوں کوانٹم اعداد n ، l ، j ، اور m_j ہونگے تاہم چکر و مدار ربط کی موجودگی میں $\boldsymbol{L}$ اور $\boldsymbol{S}$ علیحدہ علیحدہ بقائی نہیں ہونگے لہٰذا m_l اور m_s موزوں کوانٹم اعداد نہیں ہونگے رتبہ اول نظریہ اضطراب میں زیمان توانائی میں زیمان تصحیح درج ذیل ہوگی

$$H_Z^1 = \langle nljm_j|H'_Z|nljm_j\rangle = \frac{e}{2m}\boldsymbol{B}_ext \cdot \langle \boldsymbol{L} + 2\boldsymbol{S}\rangle \tag{۶.۷۲}$$

اب $\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S} = \boldsymbol{J}+\boldsymbol{S}$ ہو گا بدقسمتی سے ہمیں $\boldsymbol{S}$ کی توقعاتی قیمت فوری طور پر معلوم نہیں ہے لیکن ہم درج ذیل طریقہ سے اسے جان سکتے ہیں کل زاویائی معیار حرکت $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$ ایک مستقل ہے شکل 10.6 اس مقررہ سمتیہ کے گرد $\boldsymbol{L}$ اور $\boldsymbol{S}$ تیزی سے استقبالی حرکت کرتے ہیں بالخصوص $\boldsymbol{J}$ پر $\boldsymbol{S}$ کی قائمہ تظلیل $\boldsymbol{S}$ کی وقتی اوسط قیمت ہو گا

$$\boldsymbol{S}_ave = \frac{(\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}}{j^2}\boldsymbol{J} \tag{۶.۷۳}$$

لیکن $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{J}-\boldsymbol{S}$ ہے لہٰذا $L^2 = J^2+S^2-2\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{S}$ ہو گا لہٰذا

$$\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J} = \frac{1}{2}(J^2+S^2-L^2) = \frac{\hbar^2}{2}[j(j+1)+s(s+1)-l(l+1)] \tag{۶.۷۴}$$

جس سے درج ذیل حاصل ہوتا ہے

$$\langle\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{S}\rangle = \langle\Big(1+\frac{\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}}{J^2}\Big)\boldsymbol{J}\rangle = \Big[1+\frac{j(j+1)-l(l+1)+3/4}{2j(j+1)}\Big]\langle\boldsymbol{J}\rangle \tag{۶.۷۵}$$

حچکور کو سائن میں بندر کن کولنڈے g جزو ضرب کہتے ہیں جس کو g_j سے ظاہر کیا جاتا ہے ہم محور z کو $\boldsymbol{B}_{ext}$ کے ساتھ رکھ سکتے ہیں تب درج ذیل ہو گا

$$E_Z^1 = \mu_B g_J B_{ext} m_j \tag{۶.۷۶}$$

جہاں

$$\mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m} = 5.788\times10^{-5}\,\mathrm{eV/T} \tag{۶.۷۷}$$

بوہر مقناطیسہ کہلاتا ہے مہین ساخت کا حصہ مساوات 67.6 اور زیمان کا حصہ مساوات 76.6 کا مجموعہ کل توانائی دے گا مثال کے طور پر زمینی حال $n = 1$، $l = 0$، $j = 1/2$ لہٰذا $g_j = 2$ دو سطحوں میں بٹ جائے گا

$$-13.6\,\mathrm{eV}(1+\alpha^2/4)\pm\mu_B B_{ext} \tag{۶.۷۸}$$

جہاں $m_j = 1/2$ کے لیے مثبت علامت اور $m_j = -1/2$ کے لیے منفی علامت استعمال ہو گی ان توانائیوں کو B_{ext} کے تفاعل کے طور پر شکل 11.6 ترسیم کیا گیا ہے سوال ۶.۲۱: آٹھ عدد $n = 2$ حالات $|2ljm_j\rangle$ پر غور کریں کمزور میدان زیمان بٹنے کی صورت میں ہر حال کی توانائی تلاش کر کے شکل 11.6 کی طرز کا خاکہ بنا کر دکھائیں B_{ext} بڑھانے سے توانائیاں کس طرح ارتقا کرتی ہے ہر خط کو نام دے کر اس کی ڈھلوان دکھائیں

۶.۴.۲ طاقتور میدان زیمان اثر

اگر $B_{ext} \gg B_{int}$ ہو تب زیمان اثر غالب ہو گا میدان B_{ext} کو z محور پر رکھ کر موزوں کوانٹم اعداد n ، l ، m_l ، اور m_s ہونگے جبکہ j اور m_j نہیں ہونگے چونکہ بیرونی قوت مروڑ کی صورت میں کل ضیائی معیار حرکت بقائی نہیں ہو گا جبکہ L_z اور S_z ہونگے زیمان ہیملٹنی

$$H'_Z = \frac{e}{2m}B_{ext}(L_z + 2S_z)$$

جبکہ غیر مضطرب توانائی درج ذیل ہو گی

$$E_{nmlms} = -\frac{13.6\,\text{electronvolt}}{n^2} + \mu_B B_{ext}(m_l + 2m_s) \tag{۶.۷۹}$$

مہین ساخت کو مکمل نظر انداز کرتے ہوئے یہی جواب ہو گا تاہم اس سے بہتر کر سکتے ہیں رتبہ اول نظریہ اضطراب میں ان سطحوں کی مہین ساخت تصحیح درج ذیل ہو گی

$$E^1_{fs} = \langle nlm_lm_s|(H'_r + H'_so)|\rangle nlm_lm_s\rangle \tag{۶.۸۰}$$

اضافیتی قصہ وہی ہو گا جو پہلے تھا مساوات 57.6 چکر و مدار جزو مساوات 61.6 کے لیے ہمیں درج ذیل درکار ہو گا

$$\langle \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}\rangle = \langle S_x\rangle\langle L_x\rangle + \langle S_y\rangle\langle L_y\rangle + \langle S_z\rangle\langle L_y\rangle = \hbar^2 m_l m_s \tag{۶.۸۱}$$

دھیان رہے کہ S_z اور L_z کہ امتیازی تفاعلات کے لیے $0 = \langle Ly\rangle = \langle L_x\rangle = \langle S_y\rangle = \langle S_x\rangle$ ہو گا ان تمام کو اکٹھے کر کے سوال 22.6 ہم درج ذیل اخذ کرتے ہیں

$$E^1_{fs} = \frac{13.6\,\text{eV}}{n^3}\alpha^2\Big\{\frac{3}{4n} - \Big[\frac{l(l+1) - m_lm_s}{l(l+1/2)(l+1)}\Big]\Big\} \tag{۶.۸۲}$$

چکور کو سائن کا جزو $l = 0$ کے لئے غیر تعین ہو گا یہاں اس کی درست قیمت ایک ہے سوال 24.6 دیکھیں زیمان حصہ مساوات 79.6 اور مہین ساخت حصہ مساوات 82.6 کا مجموعہ کل توانائی دے گا سوال ۶.۲۲: مساوات 80.6 سے آغاز کر کے مساوات 57.6، 61.6، 64.6، اور 81.6 استعمال کرتے ہوئے مساوات 82.6 اخذ کریں

سوال ۶.۲۳: آٹھ عدد $n = 2$ حالات $|2lm_jm_s\rangle$ پر غور کریں طاقتور میدان زیمان بانٹ کی صورت میں ہر حال کی توانائی تلاش کرے اپنے جواب کو بوہر توانائی l^2 کے راست متناسب مہین ساخت اور $\mu_B B_{ext}$ کے براہ راست متناسب زیمان حصہ کہ مجموعہ کی صورت میں لکھیں مہین ساخت کو مکمل طور پر نظر انداز کرتے ہوئے منفرد سطحوں کی تعداد کتنی ہو گی اور ان کے انحطاط کیا ہونگے

سوال ۶.۲۴: اگر $l = 0$ ہو تب $j = s$ ، $m_j = m_s$ ہو گا لہٰذا کمزور اور طاقتور میدانوں کے لیے موزوں حالات $(|nm_s\rangle)$ ایک دوسرے جیسے ہوں گے مساوات 72.6 سے E^1_Z اور مساوات 67.6 سے مہین ساخت توانائیاں تعین کر کے میدان کی طاقت سے قطع نظر $l = 0$ کیلئے زیمان اثر کا عمومی نتیجہ لکھیں دکھائیں کے درمیانی چکور کو سائن رکن کی قیمت ایک لیتے ہوئے طاقتور میدان کلیہ مساوات 82.6 یہی نتیجہ دے گا

جوابات

فرہنگ

allowed
26energies,
51argument,

Bessel
99function,spherical
107energy,binding
Bohr
106radius,
106formula,Bohr
25conditions,boundary

98term,centrifugal
83states,coherent
4collapses,
commutation
36relation,canonical
90relations,canonical
36commutator,
28complete,
77continuous,
90continuum,
coordinates
91spherical,
3interpretation,Copenhagen

75degenerate,
delta
28Kronecker,
Dirac
80orthonormality,
77discrete,
dispersion
54relation,

energy
22allowed,
31conservation,
13ensemble,
expectation
6value,

formula
16Broglie,De
Fourier
52transform,inverse
52transform,
Frobenius
45method,
function
59delta,Dirac

generalized
59distribution,
59function,
generating
50function,
generator
86space,intranslation
86time,intranslation
Gram-Schmidt
79process,orthogonalization

21Hamiltonian,
harmonic
25oscillator,