

کوانٹائی میکانیات

ایک تعارف

خالد حسان یوسفزئی

جامعہ کامیٹ، اسلام آباد

khalidyou safzai@comsats.edu.pk

عنوان

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

ix

۱	۱	تفاسل موج
۱	۱.۱	۱. مساوات شروڈنگر
۲	۱.۲	۲. شماراتی مفہوم
۵	۱.۳	۳. احتمال
۵	۱.۳.۱	۱. غیر مسلسل متغیرات
۹	۱.۳.۲	۲. استمراری متغیرات
۱۲	۱.۴	۴. معمولی زنی
۱۵	۱.۵	۵. معیار حرکت
۱۸	۱.۶	۶. اصول عدم یقینیت
۲۵	۲	غیر متایج وقت مساوات شروڈنگر
۲۵	۲.۱	۱. ساکن حالات
۳۱	۲.۲	۲. لامتناہی چوکور کنواں
۴۲	۲.۳	۳. ہارمونی سر تقش
۴۴	۲.۳.۱	۱. الجبرائی ترکیب
۵۳	۲.۳.۲	۲. تحلیلی ترکیب
۶۰	۲.۴	۴. آزاد ذرہ
۷۰	۲.۵	۵. ڈیلٹا تفاسل محفہ
۷۰	۲.۵.۱	۱. مقید حالات اور بجھراو حالات
۷۲	۲.۵.۲	۲. ڈیلٹا تفاسل کنواں
۸۱	۲.۶	۶. مستناہی چوکور کنواں
۹۷	۳	قواعد و ضوابط
۹۷	۳.۱	۱. ہسٹ فضا
۱۰۱	۳.۲	۲. قابل مشاہدہ
۱۰۱	۳.۲.۱	۱. ہر مشی عاملین

۱۰۳	تعیین حال	۳.۲.۲
۱۰۵	ہر مثنیٰ عمل کے امتیازی تفاسل	۳.۳
۱۰۶	غیر مسلسل طیف	۳.۳.۱
۱۰۸	استمراری طیف	۳.۳.۲
۱۱۱	متعمم شمار یاتی مفہوم	۳.۴
۱۱۵	اصول عدم یقینیت	۳.۵
۱۱۵	اصول عدم یقینیت کا ثبوت	۳.۵.۱
۱۱۸	کم سے کم عدم یقینیت کا موجدی اکٹھ	۳.۵.۲
۱۱۹	توانائی و وقت اصول عدم یقینیت	۳.۵.۳
۱۲۳	ڈیراک علاقیت	۳.۶
۱۳۷	تین البادی کوانٹائی میکانیات	۴
۱۳۷	کروی محدود میں مساوات شروع نمبر	۴.۱
۱۳۹	علیحدگی متغیرات	۴.۱.۱
۱۴۱	زاویائی مساوات	۴.۱.۲
۱۴۶	ردای مساوات	۴.۱.۳
۱۵۰	ہائیڈروجن جوہر	۴.۲
۱۵۱	ردای تفاسل موج	۴.۲.۱
۱۶۱	ہائیڈروجن کا طیف	۴.۲.۲
۱۶۴	زاویائی معیار حرکت	۴.۳
۱۶۴	امتیازی اقتدار	۴.۳.۱
۱۷۰	امتیازی تفاسلات	۴.۳.۲
۱۷۳	چکر	۴.۴
۱۸۱	مقناطیسی میدان میں ایک الیکٹران	۴.۴.۱
۱۸۷	زاویائی معیار حرکت کا مجموعہ	۴.۴.۲
۲۰۵	متنائل ذرات	۵
۲۰۵	دو ذروی نظام	۵.۱
۲۰۷	بوسن اور فرمیان	۵.۱.۱
۲۱۱	قوت مبادلہ	۵.۱.۲
۲۱۵	جوہر	۵.۲
۲۱۶	ہیلیم	۵.۲.۱
۲۱۹	دوری جدول	۵.۲.۲
۲۲۳	ٹھوس اجسام	۵.۳
۲۲۳	آزاد الیکٹران گیس	۵.۳.۱
۲۲۹	پٹی دار ساخت	۵.۳.۲
۲۳۶	کوانٹائی شمار یاتی میکانیات	۵.۴
۲۳۶	ایک مثال	۵.۴.۱
۲۳۹	عمومی صورت	۵.۴.۲

۲۴۲	سب سے زیادہ محتمل تشکیل	۵.۴.۳
۲۴۵	α اور β کی طبیعی اہمیت	۵.۴.۴
۲۴۹	سیاہ جسی طیف	۵.۴.۵
۲۵۵	غیر تابع وقت نظریہ اضطراب	۶
۲۵۵	غیر انخطاطی نظریہ اضطراب	۶.۱
۲۵۵	عمومی ضابطہ بندی	۶.۱.۱
۲۵۷	اول رتی نظریہ	۶.۱.۲
۲۶۱	دوم رتی توانائیاں	۶.۱.۳
۲۶۲	انخطاطی نظریہ اضطراب	۶.۲
۲۶۲	دوپڑتا انخطاط	۶.۲.۱
۲۶۷	بلند رتی انخطاط	۶.۲.۲
۲۷۲	ہائیڈروجن کا مہین ساخت	۶.۳
۲۷۳	اضافیتی تصحیح	۶.۳.۱
۲۷۶	چکر و مدار ربط	۶.۳.۲
۲۸۳	زبان اثر	۶.۴
۲۸۳	کمزور میدان زبان اثر	۶.۴.۱
۲۸۵	طاقتور میدان زبان اثر	۶.۴.۲
۲۸۷	درمیانہ میدان زبان اثر	۶.۴.۳
۲۸۹	نہایت مہین بخوارا	۶.۵
۲۹۹	تغیری اصول	۷
۲۹۹	نظریہ	۷.۱
۳۰۵	ہیلمی کا زمینی حال	۷.۲
۳۱۰	ہائیڈروجن سال باردار	۷.۳
۳۲۱	ونزل و کرامرس و برلوان تخمین	۸
۳۲۲	کلاسیکی خطہ	۸.۱
۳۲۷	سرنگ زنی	۸.۲
۳۳۱	کلیات پیوند	۸.۳
۳۴۵	تابع وقت نظریہ اضطراب	۹
۳۴۶	دو سطحی نظام	۹.۱
۳۴۶	مضطرب نظام	۹.۱.۱
۳۴۹	تابع وقت نظریہ اضطراب	۹.۱.۲
۳۵۱	سائنس اضطراب	۹.۱.۳
۳۵۳	اشعاعی اخراج اور انجذاب	۹.۲
۳۵۳	برقناطیسی امواج	۹.۲.۱
۳۵۶	انجذاب، تحرک شدہ اخراج اور خود بخود اخراج	۹.۲.۲
۳۵۸	غیر اتقاقی اضطراب	۹.۲.۳

۳۶۰	خود با خود احسراج	۹.۳
۳۶۰	آمنشائن عددی سر A اور B	۹.۳.۱
۳۶۲	ہیجان حال کا عرصہ حیات	۹.۳.۲
۳۶۵	قواعد انتخاب	۹.۳.۳
۳۷۵	حرارت ناگزیر تخمین	۱۰
۳۷۵	مسئلہ حرارت ناگزیر	۱۰.۱
۳۷۵	حرارت ناگزیر عمل	۱۰.۱.۱
۳۷۸	مسئلہ حرارت ناگزیر کا ثبوت	۱۰.۱.۲
۳۸۳	ہیت بیری	۱۰.۲
۳۸۳	گرگی عمل	۱۰.۲.۱
۳۸۵	ہندی ہیت	۱۰.۲.۲
۳۹۰	اہارو نوو یو ہم اثر	۱۰.۲.۳
۳۹۹	بکھراؤ	۱۱
۳۹۹	تعارف	۱۱.۱
۳۹۹	کلاسیکی نظریہ بکھراؤ	۱۱.۱.۱
۴۰۳	کوانٹائی نظریہ بکھراؤ	۱۱.۱.۲
۴۰۴	جبروی موج تجزیہ	۱۱.۲
۴۰۴	اصول و ضوابط	۱۱.۲.۱
۴۰۷	الایا عمل	۱۱.۲.۲
۴۱۰	میتقلات حیط	۱۱.۳
۴۱۳	بارن تخمین	۱۱.۴
۴۱۳	مساوات شرودنگر کی عملی روپ	۱۱.۴.۱
۴۱۷	بارن تخمین اول	۱۱.۴.۲
۴۲۱	تسلل بارن	۱۱.۴.۳
۴۲۵	پس نوشت	۱۲
۴۲۶	آمنشائن پوڈ لکیو روزن تضاد	۱۲.۱
۴۲۷	مسئلہ بل	۱۲.۲
۴۳۲	مسئلہ کلیہ	۱۲.۳
۴۳۳	شرودنگر کی ہلی	۱۲.۴
۴۳۴	کوانٹائی زینو تضاد	۱۲.۵
۴۳۷	جوابات	
۴۳۹	خطی الجبرا	۱
۴۳۹	سمتیات	۱.۱
۴۳۹	اندرونی ضرب	۲.۱
۴۴۰	قتالب	۳.۱

- ۴.۱ تبدیلی اساس ۴۴۰
- ۵.۱ امتیازی تفاعلات اور امتیازی اقتدار ۴۴۰
- ۶.۱ ہر مشی تباولے ۴۴۰

۴۴۱

فئرہنگ

میری پہلی کتاب کا دیباچہ

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

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

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

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

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

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

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

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

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

حنالد حنان یوسفزئی

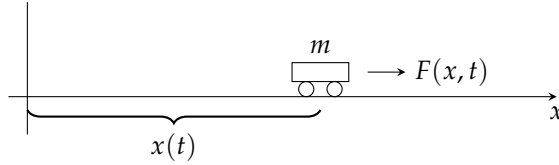
28 اکتوبر 2011ء

باب ۱

تفہم عمل موج

۱.۱ مساوات شرودنگر

فرض کریں محور x پر رہنے کا پابند ایک ذرہ جس کی کمیت m ہو، پر قوت $F(x, t)$ عمل کرتی ہے (شکل ۱.۱)۔ کلاسیکی میکانیات میں اس ذرے کا مقام $x(t)$ کسی بھی وقت t پر متعین کرنا درکار ہوتا ہے۔ ذرے کا مقام جاننے کے بعد ہم اس کا اسراع، سمتی رفتار $v = \frac{dx}{dt}$ ، معیار حرکت $p = mv$ یا حرکی توانائی $T = \frac{1}{2}mv^2$ یا کوئی اور حرکی متغیر جس میں ہم دلچسپی رکھتے ہوں، متعین کر سکتے ہیں۔ سوال پیدا ہوتا ہے کہ ہم $x(t)$ کیسے متعین کریں گے۔ ہم نیوٹن کا دوسرا قانون $F = ma$ بروئے کار لاتے ہیں۔ (بقائی نظام جو خوش قسمتی سے خوردبینی سطح پر واحد نظام ہے، میں قوت کو مخفی توانائی 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)۔ ابتدائی معلومات، جو عموماً لمحہ $t = 0$ پر سمتی رفتار یا مقام ہوں گے، استعمال کرتے ہوئے اس مساوات کے ذریعہ ہم $x(t)$ دریافت کر سکتے ہیں۔



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

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

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

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

حل کر کے حاصل کرتے ہیں جہاں i منفی ایک (-1) کا جذر اور \hbar پلانک متقل، بلکہ اصل پلانک متقل 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 مشاغل کردار ادا کرتی ہے۔ دی گئی ابتدائی معلومات (عموماً $\Psi(x, 0)$) استعمال کرتے ہوئے مساوات شرودنگر، مستقبل کے تمام اوقات کے لئے، $\Psi(x, t)$ کا تعین کرتی ہے، جیسے کلاسیکی میکانیات میں تمام مستقبل اوقات کے لئے وقت عہدہ نیوٹن $x(t)$ متعین کرتا ہے۔

۱.۲ شماریاتی مفہوم

تفاعل موج حقیقت میں کیا ہوتا ہے اور یہ جاننے ہوئے آپ حقیقت میں کیا کر سکتے ہیں؟ ایک ذرے کی خاصیت ہے کہ وہ ایک نقطے پر پایا جاتا ہو لیکن ایک تفاعل موج (جیسا کہ اس کے نام سے ظاہر ہے) فضا میں پھیلا ہوا پایا جاتا ہے۔ کسی بھی لمحے t پر یہ x کا تفاعل ہوگا۔ ایک تفاعل ایک ذرے کی حالت کو کس طرح بیان کر پائے گا، اس کا جواب تفاعل موج کا شماریاتی مفہوم^۴ پیش کر کے جناب بارن نے دیا جس کے تحت لمحے t پر نقطہ x پر ایک ذرہ پائے جانے کا احتمال $|\Psi(x, t)|^2$ ہوگا، بلکہ اس کا زیادہ درست روپ^۵ درج ذیل ہے۔

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

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

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

wave function^۲

Schrodinger align^۳

statistical interpretation^۴

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



شکل ۱.۲: ایک عمومی تفاعل موج۔ نقطہ a اور b کے بیچ ذرہ پایا جانے کا احتمال سایہ دار رقبہ دے گا۔ نقطہ A کے قریب ذرہ پایا جانے کا احتمال نسبتاً زیادہ ہو گا جبکہ B کے قریب ذرہ پایا جانے کا احتمال نہایت کم ہو گا۔

یوں کوانٹائی میکانیات میں عدم تعین کا عنصر پایا جائے گا۔ کوانٹائی میکانیات میں عدم تعین کا عنصر، طبیعیات اور فلسفہ کے ماہرین کے لیے مشکلات کا سبب بنتا رہا ہے جو انہیں اس سوچ میں مبتلا کرتا ہے کہ آیا یہ کائنات کی ایک حقیقت ہے یا کوانٹائی میکانی نظریے میں کمی کا نتیجہ۔

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

(1) حقیقتی پسند^۱ سوچ: ذرہ مقام C پر ہوتا ہے۔ یہ ایک معقول جواب ہے جس کی آئن سٹائن بھی وکالت کرتے تھے۔ اگر یہ درست ہو تب کوانٹائی میکانیات ایک نامکمل نظریہ ہو گی کیونکہ ذرہ دراصل نقطہ C پر ہی ہوتا اور کوانٹائی میکانیات ہمیں یہ معلومات فراہم کرنے سے متاثر رہی۔ حقیقت پسند سوچ رکھنے والوں کے مطابق عدم تعینیت فطرتاً نہیں پائی جاتی بلکہ یہ ہماری لاعلمی کا نتیجہ ہے۔ ان کے مطابق کسی لمحے پر ذرے کا مقام غیر معین نہیں ہوتا بلکہ یہ صرف تجربہ کرنے والے کو معلوم نہیں ہوتا۔ یوں Ψ مکمل کہانی بیان نہیں کرتا اور ذرے کو مکمل طور پر بیان کرنے کے لئے (خفیہ متغیرات^۲ کی صورت میں) مزید معلومات درکار ہوں گی۔

(2) تقلید پسند^۳ سوچ: ذرہ حقیقت میں کہیں پر بھی نہیں ہوتا۔ پیمائشی عمل ذرے کو مجبور کرتا ہے کہ وہ ایک مقام پر ”ظاہر ہو جائے“ (ہمیں اس بارے میں سوال کرنے کی اجازت نہیں کہ ذرہ مقام C کو کیوں منتخب کرتا ہے)۔ مشاہدہ وہ عمل ہے جو نہ صرف پیمائش میں خلل ڈالتا ہے بلکہ یہ پیمائشی نتیجہ بھی پیدا کرتا ہے۔ پیمائشی

^۱ indeterminacy

^۲ ظاہر ہے کوئی بھی پیمائشی آلہ کامل نہیں ہو سکتا ہے؛ میں صرف اتنا کہنا چاہتا ہوں کہ پیمائشی خلل کے اندر رہتے ہوئے یہ ذرہ نقطہ C کے قریب پایا گیا۔

^۳ realist

^۴ hidden variables

^۵ orthodox

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

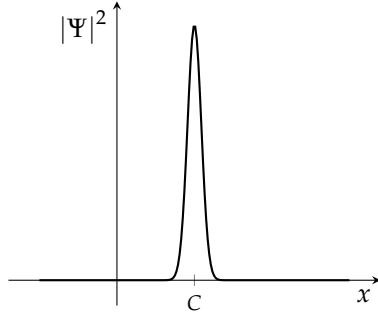
(3) انکاری^{۱۲} سوچ: جواب دینے سے گریز کریں۔ یہ سوچ اتنی بےوقوفانہ نہیں جتنی نظر آتی ہے۔ چونکہ کسی ذرے کا مقام جاننے کے لیے آپ کو ایک تجربہ کرنا ہو گا اور تجربے کے نتائج آنے تک وہ لمحہ ماضی بن چکا ہو گا۔ چونکہ کوئی بھی تجربہ ماضی کا حاصل نہیں بتا پاتا لہذا اس کے بارے میں بات کرنا بے معنی ہے۔

1964 تک تینوں طبعیات فکر کے حسی پائے جاتے تھے البتہ اس سال جان بل نے ثابت کیا کہ تجربے سے قبل ذرے کا مقام ٹھیک ہونے یا نہ ہونے کا تجربے پر متاثر مشاہدہ اثر پایا جاتا ہے (ظاہر ہے کہ ہمیں یہ مقام معلوم نہیں ہو گا)۔ اس ثبوت نے انکاری سوچ کو غلط ثابت کیا۔ اب حقیقت پسند اور تقلید پسند سوچ کے بیچ فیصلہ کرنا باقی ہے جو تجربہ کر کے کیا جاسکتا ہے۔ اس پر کتاب کے آخر میں بات کی جائے گی جب آپ کی عملی فکر اتنی بڑھ چکی ہو گی کہ آپ کو جان بل کی دلیل سمجھ میں آئے گی۔ یہاں اتنا بتانا کافی ہو گا کہ تجربہ بات جان بل کی تقلید پسند سوچ کی درستگی کی تصدیق کرتے ہیں^{۱۳}۔ 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 مخصوص عدد اختیار کرنے پر مجبور کرتے ہوئے ایک مخصوص نتیجہ پیدا کرتا ہے۔ یہ نتیجہ تفاعل موج کے عائد کردہ شرابیاتی وزن کی پابندی کرتا ہے۔

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

Copenhagen interpretation¹¹
agnostic¹²

^{۱۳} فہم پر یہ زیادہ مشالی ہے۔ چند نظریاتی اور تجرباتی مسائل باقی ہیں جن میں سے چند پر میں باب ۱۲ میں تبصرہ کروں گا۔ ایسے غیر معامی خفیہ متغیر نظریات اور دیگر بناؤں مثلاً متعدد دنیاؤں^{۱۵} جیسے تشریح موجود ہیں جن کی تینوں سوچوں کے ساتھ مطابقت نہیں ہے۔ بہر حال، فی الحال بہتر ہے کہ ہم کوانٹائی نظریے کی بنیاد سکیمیں اور بعد میں اس طرح کے مسائل پر فکر کریں۔
collapses¹⁴



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

ارتقاء پاتا ہے، اور دوسرا جس میں پیمائش Ψ کو فوراً ایک جگہ غیر استمراری طور پر منہدم کرتی ہے^{۱۵}۔

۱.۳.۱ احتمال

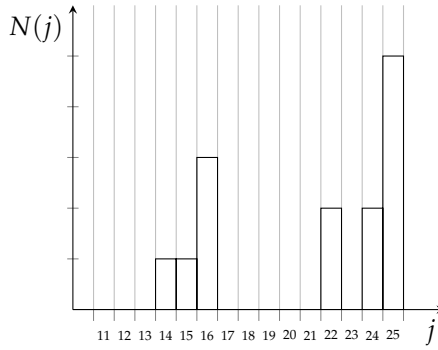
۱.۳.۱ غیر مسلسل تغیرات

چونکہ کوانٹائی میکانیٹ کی شماراتی تشریح کی حباتی ہے لہذا اس میں احتمال کلیدی کردار ادا کرتا ہے۔ اسی لیے میں اصل موضوع سے ہٹ کر نظریہ احتمال پر تبصرہ کرتا ہوں۔ ہمیں چند نئی علامات اور اصطلاحات سیکھنی ہوں گی جنہیں میں ایک سادہ مثال کی مدد سے واضح کرتا ہوں۔

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

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

^{۱۵} کوانٹائی میکانیٹ میں پیمائش کا کردار اتنا کلیدی اور حیران کن ہے کہ انسان سوچ میں پڑ جاتا ہے کہ پیمائش درحقیقت ہے کیا۔ کیا یہ خوردبینی (کوانٹائی) نظام اور کلاں بینی (کلاسیکی) پیمائشی آلات کے بیچ باہم عمل ہے (جیسے بوہر کہتے تھے)، یا اس کا تعلق مستقل نشانی چھوڑنے سے ہے (جیسے ہیزنبرگ مانتے تھے)، اور یا اس کا مد ہوش ”مشاہدہ کار“ کی مداخلت سے تعلق ہے (جیسے وگنر نے تجویز کیا)؟ میں اس کٹھن مسئلہ پر دوبارہ باب ۱۲ میں بات کروں گا: ابھی کے لئے ہم سادہ سوچ لے کر چلتے ہیں: پیمائش سے مراد ایک ایسا عمل ہے جو سائنس دان تجربہ گاہ میں فیٹ، گھڑی، وغیرہ استعمال کرتے ہوئے سرانجام دیتے ہیں۔



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

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

$$N(14) = 1$$

$$N(15) = 1$$

$$N(16) = 3$$

$$N(22) = 2$$

$$N(24) = 2$$

$$N(25) = 5$$

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

$$(1.۴) \quad N = \sum_{j=0}^{\infty} N(j)$$

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

سوال ۱: اگر ہم اس گروہ سے بلا منصوبہ ایک فرد منتخب کریں تو اس بات کا کیا احتمال ہوگا کہ اس فرد کی عمر 15 سال ہو؟ جواب: چودہ میں ایک امکان ہوگا کیونکہ کل 14 افراد ہیں اور ہر ایک فرد کے انتخاب کا امکان ایک جیسا ہے لہذا ایسا ہونے کا احتمال چودہ میں سے ایک ہوگا۔ اگر j عمر کے فرد کے انتخاب کا احتمال $P(j)$ ہو تو $P(14) = 1/14$ ، $P(15) = 1/14$ ، $P(16) = 3/14$ ، وغیرہ ہوگا۔ اس کا عمومی کلیہ درج ذیل ہوگا۔

$$(1.۵) \quad P(j) = \frac{N(j)}{N}$$

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

$$(1.۶) \quad \sum_{j=0}^{\infty} P(j) = 1$$

سوال 2: کوئی عمر سب سے زیادہ ^{۱۶} متعلقہ ہے؟ جواب: 25، چونکہ پانچ اشخاص اتنی عمر رکھتے ہیں جبکہ اس کے بعد ایک جیسی عمر کے لوگوں کی اگلی زیادہ تعداد تین ہے۔ عمومی طور پر سب سے زیادہ احتمال کا j وہی j ہوگا جس کے لئے $P(j)$ کی قیمت زیادہ سے زیادہ ہو۔

سوال 3: وسطانیہ ^{۱۷} عمر کیا ہے؟ جواب: چونکہ 7 لوگوں کی عمر 23 سے کم اور 7 لوگوں کی عمر 23 سے زیادہ ہے۔ لہذا جواب 23 ہوگا۔ (عمومی طور پر وسطانیہ j کی وہ قیمت ہوگی جس سے زیادہ اور جس سے کم قیمت کے نتائج کا احتمال ایک جیسا ہو۔)

سوال 4: ان کی اوسط ^{۱۸} عمر کتنی ہے؟ جواب:

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

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

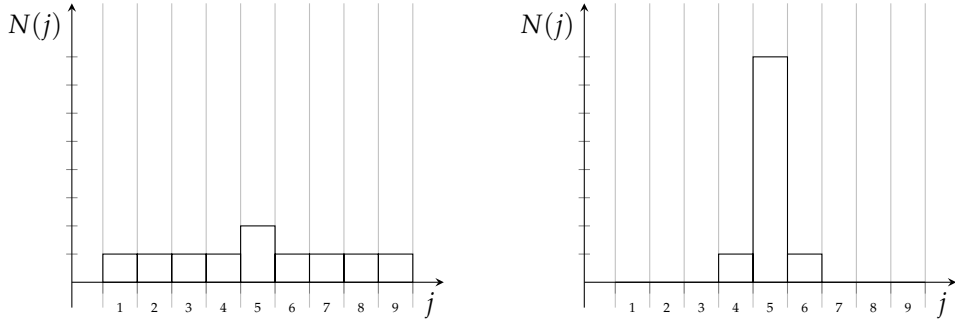
$$(1.۷) \quad \langle j \rangle = \frac{\sum jN(j)}{N} = \sum_{j=0}^{\infty} jP(j)$$

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۔ کوانٹائی میکانیات میں ہم عموماً اوسط قیمت میں دلچسپی رکھتے ہیں جس کو ^{۱۹} توقعاتی قیمتے کا نام دیا گیا ہے۔

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

$$(1.۸) \quad \langle j^2 \rangle = \sum_{j=0}^{\infty} j^2 P(j)$$

most probable^{۱۶}
median^{۱۷}
mean^{۱۸}
expectation value^{۱۹}



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

عمومی طور پر j کے کسی بھی تغاغل قیمت درج ذیل ہوگی۔

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

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

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

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

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 مجموعے کی علامت سے باہر لے جایا جاسکتا ہے۔) اس مسئلے سے چھٹکارا حاصل کرنے کے لئے آپ Δj کی مطلق قیمتوں کی اوسط لے سکتے ہیں لیکن Δj کی مطلق قیمتوں کے ساتھ کام کرنا مشکلات پیدا کرتا ہے۔ اس کی بجائے، منفی علامت سے نجات حاصل کرنے کی خاطر، ہم مربع لینے کے بعد اوسط حاصل کرتے ہیں۔

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

اس قیمت کو تقسیم کی تعبیر^{۲۰} کہتے ہیں جبکہ تغیریت کے جذر σ کو معیار^{۲۱} انحراف^{۲۱} کہتے ہیں۔ روایتی طور پر σ کو اوسط $\langle j \rangle$ کے گرد وسعت کی پیمائش مانا جاتا ہے۔ ہم تغیریت کا ایک چھوٹا مسئلہ پیش کرتے ہیں۔

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

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

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

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

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

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

۱.۳.۲ استمراری متغیرات

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

^{۲۰} variance
^{۲۱} standard deviation

اس کی عمر پوچھوں تو اس کا احتمال صفر ہو گا کہ اس کی عمر ٹھیک 16 سال 4 گھنٹے، 27 منٹ اور 3.37524 سیکنڈ ہو۔ یہاں اس کی عمر کے 16 اور 17 سال کے بیچ ہونے کے احتمال کی بات کرنا معقول ہو گا۔ بہت کم وقفے کی صورت میں احتمال وقفے کی لمبائی کے راست متناسب ہو گا۔ مثال کے طور پر 16 سال اور 16 سال دو دن کے بیچ عمر کا احتمال، 16 سال اور 16 سال ایک دن کے بیچ عمر کے احتمال کا دو گنا ہو گا۔ (سوائے ایسی صورت کے جب 16 سال قبل عین اسی دن کسی وجہ سے بہت زیادہ بچے پیدا ہوئے ہوں۔ ایسی صورت میں اس متاعدے کے اطلاق کے نقطہ نظر سے ایک یا دو دن کا وقفہ بہت لمبا وقفہ ہے۔ اگر زیادہ بچوں کی پیدائش کا دورانیہ چھ گھنٹے پر مشتمل ہو تب ہم ایک سیکنڈ یا زیادہ محفوظ رہنے کی خاطر، اس سے بھی کم دورانیہ کا وقفہ لیں گے۔ تکنیکی طور پر ہم لامتناہی کم وقفے کی بات کر رہے ہیں۔) لہذا ایوں 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^{۲۲} کہلاتا ہے۔ متناہی وقفہ a تا b کے بیچ x پائے جانے کا احتمال $\rho(x)$ کا کثمتل 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 وقتی فاصلوں پر دس لاکھ تصاویر کھینچی جاتی ہیں۔ ہر تصویر پر طے شدہ فاصلہ ناپا جاتا ہے۔ ان تمام فاصلوں کی اوسط قیمت کیا ہوگی؟ یعنی طے شدہ فاصلوں کی وقتی اوسط کیا ہوگی؟^{۲۳}

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

^{۲۲}probability density

^{۲۳}ایک ماہر شماریات کو شکوہ ہو گا کہ میں متناہی نمونے (جو یہاں دس لاکھ ہے) کی اوسط اور (پوری استمراریہ) پر "اوسط" میں منفرق نہیں کر پارہا۔ یہ تجربہ کرنے والے کے لئے معصیت پیدا کر سکتا ہے، خصوصاً جب نمونی جسامت چھوٹی ہو، تاہم یہاں مجھے صرف اصل اوسط سے عنبرض ہے، اور نمونی اوسط اس کی اچھی تحمین ہے۔

درج ذیل ہوگا۔

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

اس کی سستی 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 ہوگی۔

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

(اس وقفہ کے باہر کثافت احتمال صفر ہوگی۔)

ہم مساوات ۱.۱۶ استعمال کر کے اس نتیجے 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 ہم 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، جیسے کہ ہمیں متوقع تھتا۔

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

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

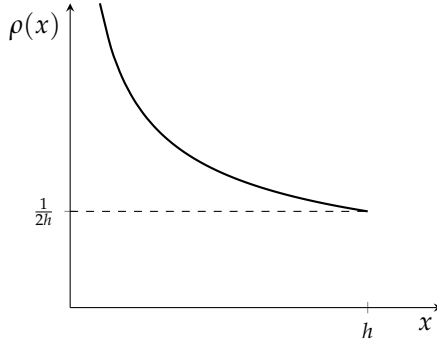
۱. اوسط کامریع $\langle z \rangle^2$ اور مربعوں کا اوسط $\langle z^2 \rangle$ تلاش کریں۔

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

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

سوال ۱.۲:

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



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

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

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

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

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

۱. مساوات ۱.۱۶ استعمال کرتے ہوئے A کی قیمت کا تعین کریں۔

ب. اوسط $\langle x \rangle$ ، مربعی اوسط $\langle x^2 \rangle$ اور معیاری انحراف σ تلاش کریں۔

ج. $\rho(x)$ کی ترسیم کا خاکہ بنائیں۔

۱.۴ معمولی زنی

ہم تفسر عمل موج کے شماراتی مفہوم (مساوات ۱.۳) پر دوبارہ غور کرتے ہیں، جس کے تحت لمحہ t پر ایک ذرے کا نقطہ x 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 شماراتی مفہوم بے معنی ہوگا۔

البتہ، یہ شرط آپ کے لیے پریشانی کا سبب ہونی چاہیے۔ تفاعل موج کا تعین مساوات شرودنگر کرتی ہے اور Ψ پر بیرونی شرائط مسلط کرنا صرف اس صورت میں جائز ہوگا جب ان دونوں میں اختلاف نہ پایا جاتا ہو۔ مساوات ۱.۱ پر نظر ڈالنے سے آپ دیکھ سکتے ہیں کہ اگر $\Psi(x, t)$ حل ہو تب $A\Psi(x, t)$ بھی حل ہوگا، جہاں A کوئی بھی (مخلوط) مستقل ہو سکتا ہے۔ اس طرح ہم نامعلوم ضربی مستقل کو یوں منتخب کر سکتے ہیں کہ مساوات ۱.۲۰ مطمئن ہو۔ اس عمل کو تفاعل موج کی معمول زنی^{۲۳} کہتے ہیں۔ ہم کہتے ہیں کہ تفاعل موج کی معمول زنی کریں۔ مساوات شرودنگر کے بعض حلوں کا مکمل لامتناہی ہوگا؛ ایسی صورت میں کوئی بھی ضربی مستقل اس کو 1 کے برابر نہیں کر سکتا۔ یہی کچھ مہمل حل $\Psi = 0$ کے لیے بھی درست ہوگا۔ ایسا تفاعل موج جو ناقابل معمول زنی^{۲۵} ہو کسی صورت ایک ذرے کو ظاہر نہیں کر سکتا، لہذا اس کو رد کیا جاتا ہے۔ طبعی طور پر پائے جانے والے حالات، مساوات شرودنگر کے مرصع مکالمہ^{۲۶} حل ہونگے۔^{۲۷}

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

یہ ایک اہم نقطہ ہے، لہذا ہم 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 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 ہے لہذا اس میں نے یہاں جزوی تفرق $\partial/\partial t$ استعمال کیا ہے۔ اصول ضرب کے تحت درج ذیل ہوگا۔

$$(1.22) \quad \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi$$

اب مساوات شرودنگر کہتی ہے کہ

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

normalization^{۲۴}

non-normalizable^{۲۵}

square-integrable^{۲۶}

^{۲۷} ظاہر ہے کہ $|x| \rightarrow \infty$ کی صورت میں $\Psi(x, t)$ کو $1/\sqrt{|x|}$ سے زیادہ تیز صفر تک پہنچنا ہوگا۔ معمول زنی صرف مخلوط عدد کے معیار کو درست کرتی ہے جبکہ اس کی ہیئت غنیر معین رہتی ہے۔ تاہم جیسے ہم جلد دیکھیں گے، موخر الذکر کی کوئی طبعی اہمیت نہیں پائی جاتی۔

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

$$(1.22) \quad \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V \Psi^*$$

ہوگا لہذا درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

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

مساوات ۱.۲۱ میں عمل کی قیمت اب صریح معلوم کی جاسکتی 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 قابل معمول زنی^{۲۸} ہونے کے لئے ضروری ہے کہ $x \rightarrow \pm \infty$ کرتے ہوئے $\Psi(x, t)$ صفر^{۲۹} کو پہنچتا 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؛ بلکہ $t = 0$ پر معمول شدہ تفاعل موج ہمیشہ کے لئے معمول شدہ رہے گا۔

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

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

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

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

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

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

ه. متغیر x کی توقعاتی قیمت کیا ہوگی؟

^{۲۸}normalizable

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

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

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

(ہم باب ۲ میں دیکھیں گے کہ کس طرح کا مخفی V^{30} ایسا تعامل موج پیدا کرتا ہے۔)

۱. تعامل موج Ψ کی معمول زنی کریں۔

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

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

۱.۵ معیار حرکت

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

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx \quad (1.28)$$

اس کا مطلب کیا ہے؟ اس کا ہر گز 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 بلا تعین ہے) اس قیمت پر تعامل موج کو سوزن پر منہدم کرے گی جو پیمائش سے حاصل ہوئی ہو، اس کے بعد (اگر جلد) دوسری پیمائش کی جائے تو دوبارہ وہی نتیجہ حاصل ہوگا۔ حقیقت میں $\langle x \rangle$ ان ذرات کی پیمائشوں کا اوسط ہوگا جو یکساں حال Ψ میں پائے جاتے ہوں۔ یوں یا تو آپ ہر پیمائش کے بعد کسی طرح اس ذرے کو دوبارہ ابتدائی حال Ψ میں لائیں گے یا آپ متعدد ذرات کے فرقہ کو ایک ہی حال Ψ میں لا کر 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 میں شیشہ کی بوتلیں کھڑی ہیں، اور ہر بوتل میں ایک ذرہ پایا جاتا ہے۔ تمام ذرات ایک جیسے (بوتل کے وسط کے لحاظ سے) حال Ψ میں پائے جاتے ہیں۔ ہر بوتل کے متعرب ایک طالب علم کھڑا ہے جس کے ہاتھ میں ایک فیتا ہے۔ جب اشارہ دیا جائے تو تمام طلبہ اپنے اپنے ذرے کا مقام ناپتے ہیں۔ ان نتائج کا مستطیلی ترسیم $|\Psi|^2$ کے لگ بھگ ہوگا، جبکہ ان کی اوسط قیمت تقریباً $\langle x \rangle$ ہوگی۔ (چونکہ ہم متناہی تعداد کے ذرات پر تجربہ کر رہے ہیں لہذا یہ توقع نہیں کی جاسکتی کہ جوابات عین درست حاصل ہوں گے، لیکن

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

چونکہ Ψ وقت اور مقام کا تابع ہے لہذا وقت گزرنے کے ساتھ ساتھ $\langle x \rangle$ تبدیل ہوگا۔ ہمیں اس کی سمتی رفتار جاننے میں دلچسپی ہو سکتی ہے۔ مساوات ۱.۲۵ اور ۱.۲۸ سے درج ذیل ^{۳۲} لکھا جاسکتا ہے۔

$$(1.29) \quad \frac{d\langle x \rangle}{dt} = \int x \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \int x \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx$$

مکمل بالخصوص ^{۳۳} کی مدد سے اس فقرے کی سادہ صورت حاصل کرتے ہیں۔

$$(1.30) \quad \frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m} \int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx$$

(میں نے یہاں $\frac{\partial x}{\partial x} = 1$ استعمال کیا اور سرحدی جزو کو اس بنا پر 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 نہ کہ ذرے کی سمتی رفتار۔ ابھی تک ہم جو کچھ دیکھ چکے ہیں اس سے ذرے کی سمتی رفتار دریافت نہیں کی جاسکتی۔ کوانٹائی میکانیات میں ذرے کی سمتی رفتار کا مفہوم واضح نہیں ہے۔ اگر پیمائش سے قبل ایک ذرے کا مقام بلا تعین ہو تب اس کی سمتی رفتار بھی بلا تعین ہوگی۔ ہم ایک مخصوص قیمت کا نتیجہ حاصل کرنے کے احتمال کی صرف بات کر سکتے ہیں۔ ہم Ψ جاننے ہوئے کثافت احتمال کی بناوٹ باب ۳ میں دیکھیں گے۔ اب کے لیے صرف اتنا جاننا کافی ہے کہ سمتی رفتار کی توقعاتی قیمت ذرے کے مقام کی توقعاتی قیمت کا تفرق ہوگی۔

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

^{۳۲} چیزوں کو صاف صاف رکھنے کی خاطر میں مکمل کی حدود نہیں لکھ رہا ہوں۔
^{۳۳} فٹ امودہ ضرب کے تحت

$$\frac{d}{dx}(fg) = f \frac{dg}{dx} + \frac{df}{dx} g$$

ہوگا، جس سے درج ذیل حاصل ہوتا ہے۔

$$\int_a^b f \frac{dg}{dx} dx = - \int_a^b \frac{df}{dx} g dx + fg|_a^b$$

یوں مکمل کی علامت کے اندر، آپ حاصل ضرب میں کسی ایک جزوے تفریق اتار کر دوسرے کے ساتھ چسپاں کر سکتے ہیں؛ اس کی قیمت آپ کو منفی علامت اور اضافی سرحدی جزو کی صورت میں ادا کرنی ہوگی۔

معادلات ۱.۳۱ ہمیں 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 انداز میں پیش کرتا ہوں۔

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

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

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

یہ سب بہت اچھا ہے لیکن دیگر متقداروں 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 حرکت کی 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 بُدی حرکت کے لئے زاویائی معیار حرکت نہیں پایا جاتا)۔ کسی بھی متقدار، مثلاً $Q(x, p)$ ، کی توقعاتی قیمت حاصل کرنے کے لیے ہم ہر p کی جگہ $\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ پُر کر کے حاصل عامل کو Ψ^* اور Ψ کے بیچ لکھ کر درج ذیل مکمل حاصل کرتے ہیں۔

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

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

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

momentum^{۳۴}
operator^{۳۵}

۳۴ ”عامل“ آپ کو ہدایت دیتی ہے کہ عامل کے بعد آنے والے تعادل کے ساتھ آپ کو کیا کرنا ہوگا۔ عامل مقام آپ سے کہتا ہے کہ آپ x سے ضرب دیں۔ عامل معیار حرکت کہتا ہے کہ x کے لحاظ سے تفریق لیں (اور نتیجہ کو $-i\hbar$ سے ضرب دیں)۔ اس کتاب میں تمام عاملین تفرقات $(d/dt, d^2/dt^2, \partial/\partial x, \partial^2/\partial x^2)$ وغیرہ (یا ضرب کار $i, 2, x^2$ ، وغیرہ)، اور یا ان دونوں کے ملاپ ہوں گے۔

حال Ψ میں ایک ذرے کی کسی بھی حرکی مقدار کی توقعاتی قیمت مساوات ۱.۳۶ سے حاصل ہوگی۔ مساوات ۱.۳۳ اور ۱.۳۵ اس کی دو مخصوص صورتیں ہیں۔ میں نے کوشش کی ہے کہ بوہر کی شارپاتی تشریح کو مد نظر رکھتے ہوئے، مساوات ۱.۳۶ قابل قبول نظر آئے، اگرچہ حقیقتاً یہ (کلاسیکی میکانیات کے لحاظ سے) کام کرنے کا اتنا نیا انداز ہے کہ بہتر ہوگا آپ اس کے استعمال کی مشق کریں؛ ہم (باب ۳ میں) اس کو زیادہ مضبوط نظریاتی بنیادوں پر قائم کریں گے۔ فی الحال آپ اس کو ایک مسئلہ تصور کر سکتے ہیں۔

سوال ۱.۶: آپ کیوں مساوات ۱.۲۹ کے وسطی فقرہ پر مکمل 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:

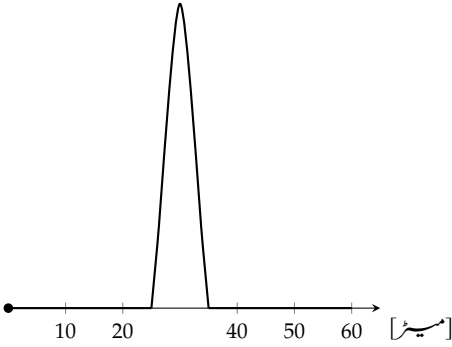
$$(1.38) \quad \frac{d\langle p \rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

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

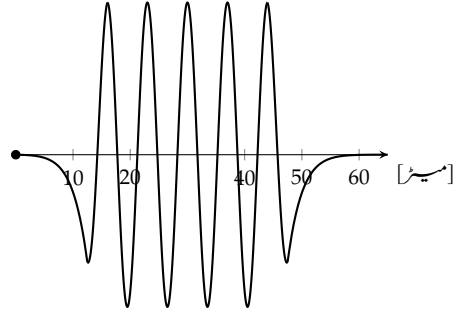
سوال ۱.۸: فرض کریں آپ مخفی توانائی کے ساتھ ایک مستقل جمع کرتے ہیں (مستقل سے میرا مراد ایسا مستقل ہے جو x اور t کا تابع نہ ہو)۔ کلاسیکی میکانیات میں یہ کسی بھی چیز پر اثر انداز نہیں ہوگا البتہ کوانٹائی میکانیات میں اس کے اثر پر غور کرنا باقی ہے۔ دکھائیں کہ تفاعل موج کو اب $e^{-iV_1/\hbar}$ ضرب کرتا ہے جو وقت کا تابع جزو ہے۔ اس کا کسی حرکی متغیر کی توقعاتی قیمت پر کیا اثر ہوگا؟

۱.۶ اصول عدم یقینیت

فرض کریں آپ ایک لمبی رسی کا بالیاں سر اوپر نیچے ہلا کر موج پیدا کرتے ہیں (شکل ۱.۷)۔ اب اگر پوچھا جائے کہ یہ موج ٹھیک کہاں پائی جاتی ہے تو آپ غالباً اس کا جواب دینے سے متاصر ہو گئے۔ موج کسی ایک جگہ نہیں بلکہ 60 میٹر لمبائی پر پائی جاتی ہے۔ اس کی بجائے اگر طول موج ^{۳۸} پوچھی جائے تو آپ اس کا معقول جواب دے سکتے ہیں: اس کا طول موج تقریباً 7 میٹر ہے۔ اس کے برعکس اگر آپ رسی کو ایک جھکادیں تو ایک نوکیلی موج پیدا ہوگی (شکل ۱.۸)۔ یہ موج دوری نہیں ہے لہذا اس کے طول موج کی بات کرنا بے معنی ہوگا۔ اب آپ طول موج بتانے سے متاصر 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 جاننے 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 تعین ہوں۔ تاہم ان صورتوں میں طول موج بہتر سے بہتر جانتے ہوئے مقام موج کم سے کم بتانا ممکن ہو گا یا پھر مقام بہتر سے بہتر جانتے ہوئے طول موج کم سے کم متبادل تعین ہوگا۔ فورسز تجزیہ کا ایک مسئلہ ان حقائق کو مضبوط بنیادوں پر کھڑا کرتا ہے۔ فی الحال میں صرف کیفی دلائل پیش کرنا چاہتا ہوں۔



شکل ۱.۸: اس موج کا مقام اچھا خاصہ معین جبکہ طول موج غیر معین ہے۔



شکل ۱.۹: اس موج کا طول موج اچھا خاصہ معین جبکہ مقام غیر معین ہے۔

یہ حقائق ہر موجی مظہر، بشمول کوانٹائی میکانیکی موج تفاعل، کے لیے درست ہیں۔ اب ایک ذرے کے Ψ کے طول موج اور معیار حرکت کا تعلق کلیہ ڈی بروگلی^{۳۹}

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

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

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

جہاں σ_x اور σ_p بالترتیب x اور p کے معیاری انحراف ہیں۔ یہ جناب ہیزنبرگ کا مشہور اصول عدم یقینیت^{۴۱} 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 نتائج کی طرح معیار حرکت کی پیمائش بھی ٹھیک ٹھیک نتائج دے گی۔ یہاں ”وسعت“ سے مراد یہ ہے کہ کیاں تیار کردہ نظاموں پر پیمائشیں بالکل ایک جیسے نتائج نہیں دیں گی۔ آپ چاہیں تو (Ψ کو نوکیلی بنا کر) ایسا

^{۳۹} De Broglie formula

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

^{۴۱} uncertainty principle

حال تیار کر سکتے ہیں جس پر مقام کی پیمائشیں متعین نتائج دیں لیکن ایسی صورت میں معیار حرکت کی پیمائشوں کے نتائج ایک دوسرے سے بہت مختلف ہوں گی۔ اس طرح آپ چاہیں تو (Ψ) کو ایک لمبی سائنس موج بن کر (ایسا حال تیار کر سکتے ہیں جس پر معیار حرکت کی پیمائشوں 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 ۱.۳۰ اور حقیقت ایک عدم مساوات ہے جس میں σ_x اور σ_p کی جماعت پر کوئی حد مقرر نہیں ہے۔ آپ Ψ کو ایک لمبی بلدار لکیر بن کر، جس میں بہت سارے امیڈ 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 مساوات شرودنگر 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 توسیع کے اولین ۲۵ ہندسوں (3, 1, 4, 1, 5, 9, ۰۰۰) پر غور کریں۔

۱. اس گروہ سے بلا منصوب ایک ہندسہ منتخب کیا جاتا ہے۔ صفر تا نو ہر 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 پیمائش کی خراب سوئی آزادانہ طور پر حرکت کرتی ہے۔ ہر جھٹکا کے بعد یہ اطراف سے گھڑا کر 0 اور π زاویوں کے بیچ آکر رہ جاتی ہے۔

۱. کثافت احتمال $\rho(\theta)$ کیا ہوگا؟ اشارہ: زاویہ θ اور $(\theta + d\theta)$ کے بیچ سوئی رکنے 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۔

سوال ۱.۱۲: ہم گزشتہ سوال کے رفتار پیماس کی سوئی پر دوبارہ بات کرتے ہیں تاہم اس مرتبہ ہم سوئی کے سر کے محدود (یعنی افقی) لکیر پر سوئی کے سایہ) میں ہم دلچسپی رکھتے ہیں۔

ا. $\rho(x)$ کی کثافت احتمال کیا ہوگی؟ x کے لحاظ سے $\rho(x)$ کو $-2r$ تا $+2r$ ترسیم کریں جہاں r سوئی کی لمبائی ہے۔ تصدیق کر لیں کہ کل احتمال 1 ہے۔ اشارہ: x اور $(x + dx)$ کے بیچ ψ کی موجودگی کا احتمال $\rho(x) dx$ ہے۔ آپ سوال ۱.۱۱ سے کسی مخصوص خطہ میں θ کا احتمال جانتے ہیں؛ سوال یہ ہے کہ $d\theta$ کا مطابقتی dx کیا ہوگا؟

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

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

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

ا. درج ذیل دکھائیں

$$\frac{dP_{ab}}{dt} = J(a, t) - J(b, t)$$

جہاں

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

ہے۔ $J(x, t)$ کی اکائی کیا ہوگی؟ تبصرہ: چونکہ J آپ کو بتاتا ہے کہ نقطہ x پر احتمال کس رفتار سے گزرتا ہے لہذا J کو رو احتمال^{۲۲} کہتے ہیں۔ اگر $P_{ab}(t)$ بڑھ رہا ہو تب خطہ کے ایک سر میں احتمال کے آمد خطہ کے دوسرے سر سے احتمال کے نکاس سے زیادہ ہوگا۔

ب. سوال ۱.۹ میں تفاعل موج کا احتمال ρ کیا ہوگا؟ (یہ زیادہ مسزیدار مثال نہیں ہے؛ بہتر مثال جلد پیش کی جائے گی۔)

سوال ۱.۱۵: فرض کریں آپ ایک غیر مستحکم ذرہ^{۲۳} کے بارے میں بات کرنا چاہیں جس کا خود بخود ٹکڑے ٹکڑے ہونے کا ”عصر حیات“ τ ہے۔ ایسی صورت میں کہیں پر ذرہ پایا جانے کا کل احتمال مستقل نہیں بلکہ وقت کے ساتھ (مکمل طور پر) وقت نہائی گئے گا۔ ہے۔

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

^{۲۲} probability current
^{۲۳} unstable particle

اس نتیجے کو (غیر نفیس طریقہ) سے حاصل کرتے ہیں۔ مساوات ۱.۲۳ میں ہم نے کہے بغیر فرض کیا کہ مخفی توانائی V ایک حقیقی مقدار ہے۔ یہ ایک معقول بات ہے تاہم اس سے مساوات ۱.۲۷ میں دی گئی بقا احتمال پیدا ہوتی ہے۔ آئیں V کو مخلوط تصور کر کے دیکھیں۔

$$V = V_0 - i\Gamma$$

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

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

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{2\Gamma}{\hbar} P$$

ب. $P(t)$ کے لیے حل کریں اور ذرے کا عرصہ حیات Γ کی صورت میں حاصل کریں۔

سوال ۱.۱۶: مساوات شروع ڈنگر کے کسی بھی دو عدد (متبادل معمول زنی) حل Ψ_1 ، Ψ_2 کے لئے درج ذیل ہوگا۔

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_1^* \Psi_2 dx = 0$$

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

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

۱. معمول زنی مستقل A تلاش کریں۔

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

ج. لمحہ $t = 0$ پر p کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔ دھیان رہے کہ آپ اس کو $P = m d\langle x \rangle / dt$ سے حاصل نہیں کر سکتے ہیں۔ ایسا کیوں ہے؟

د. x^2 کی توقعاتی قیمت دریافت کریں۔

ه. p^2 کی توقعاتی قیمت دریافت کریں۔

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

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

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

سوال ۱.۱۸: عمومی طور پر کوانٹائی میکانیات اس وقت کارآمد ہوگی جب ذرے کا ذی برونگی طول موج (h/p) نظام کی جسامت (d) سے زیادہ ہو۔ درجہ T (کیلون) پر حراری توازن میں ایک ذرہ کی اوسط حرکی توانائی درج ذیل ہوگی

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

جہاں k_B بولٹزمن مستقل ہے لہذا ذی برونگی طول موج درج ذیل ہوگا۔

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

ہم نے معلوم کرنا ہے کہ کونسا نظام کوانٹائی میکانیات اور کونسا کلاسیکی میکانیات سے حل ہوگا۔

ا. ٹھوس اجسام: فاصلہ حبال ٹھوس اجسام میں تقریباً $d = 0.3 \text{ nm}$ ہوتا ہے۔ وہ درجہ حرارت تلاش کریں جس پر ٹھوس جسم میں آزاد الیکٹران 35 کوانٹائی میکانی ہوں گے۔ وہ درجہ حرارت تلاش کریں جس سے کم درجہ حرارت پر جوہری مرکزہ کوانٹائی میکانی ہوں گے۔ (سوڈیم 23 کو مثال لیں۔) سبق: ٹھوس اجسام میں آزاد الیکٹران ہر صورت کوانٹائی میکانی ہوں گے جبکہ جوہری مرکزہ (تقریباً) کبھی بھی کوانٹائی میکانی نہیں ہوں گے۔ یہی کچھ مائع کے لیے بھی درست ہے (جہاں جوہروں کے بیچ فاصلے اتنا ہی ہوگا) ماسوائے 4 K سے کم درجہ حرارت پر موجود ہیلیم 4 کے لئے۔

ب. گیئس: میکانی دباؤ P پر کن درجہ حرارت پر کامل گیئس کے جوہر کوانٹائی میکانی ہوں گے۔ اشارہ: مثالی گیئس قانون $(PV = Nk_B T)$ استعمال کر کے جوہروں کے بیچ فاصلہ دریافت کریں۔ جواب: $T < (1/k_B)(h^2/3m)^{3/5} P^{2/5}$ ؛ ظاہر ہے ہم m کو چھوٹے سے چھوٹا اور P کو اتنا زیادہ چاہیں گے (کہ گیئس کو کوانٹائی میکانی خواص رکھے)۔ زمینی ہوا دباؤ پر ہیلیم کے اعداد پر کر کے نتیجہ حاصل کریں۔ کیا بیرونی فضا 38 میں (جہاں درجہ حرارت 3 K اور جوہروں کے بیچ فاصلہ تقریباً 1 cm ہے) ہائیڈروجن کوانٹائی میکانی ہوگا؟

³⁵ ٹھوس اجسام میں اندرونی الیکٹران کسی مخصوص مرکزہ سے جڑے ہوتے ہیں، اور ان کے لئے موزوں فاصلہ، جوہر کا رداس ہوگا۔ اس کے برعکس، بیرون ترین الیکٹران کبھی نہیں جڑے ہوتے ہیں، اور ان کے لئے فاصلہ حبال کو موزوں فاصلہ لیا جاسکتا ہے۔ یہ مسئلہ بیرونی الیکٹران کے لئے ہے۔

sodium 39
helium 4
outer space 38

باب ۲

غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر

۲.۱ ساکن حالات

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

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

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 شروڈنگر کو علیحدگی متغیرات^۲ کے طریقے سے حل کیا جاسکتا ہے، جو ماہرین 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۔ بظاہر، مساوات شروڈنگر کے کسی حل پر ایسی شرط مسلط کرنا درست نظر نہیں آتا ہے، تاہم حقیقت میں یوں حاصل کردہ حل بہت کارآمد ثابت ہوتے ہیں۔ مزید (جیسا کہ علیحدگی متغیرات کیلئے عموماً کیا جاتا ہے) ہم علیحدگی متغیرات سے

^۲ بار بار ”مخفی تو ثنائی تفاعل“ کہنا انسان کو تھکا دیتا ہے، لہذا لوگ V کو صرف ”مخفیہ“ چکارتے ہیں، اگرچہ ایسا کرنے سے برقی مخفیہ کے ساتھ عملی پیدا ہو سکتی ہے جو دراصل فی اکائی بار مخفی تو ثنائی ہوتی ہے۔
separation of variables

باب ۲. غیر تابَع وقت مساوات شرودنگر

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

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

ہوگا جو سادہ 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 φ 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 تفاضل صرف t کا تابع ہے جبکہ دایاں تفاضل صرف x کا تابع^۳ ہے۔ یاد رہے اگر V خود x اور t دونوں پر منحصر ہو تب ایسا نہیں ہوگا۔ صرف t تبدیل ہونے سے دایاں تفاضل کسی صورت تبدیل نہیں ہو سکتا ہے جبکہ بائیں اور دایاں تفاضل لازمی طور پر ایک دوسرے کے برابر ہیں، لہذا t تبدیل کرنے سے بائیں تفاضل بھی تبدیل نہیں ہوگا۔ اسی طرح صرف x تبدیل کرنے سے بائیں تفاضل تبدیل نہیں ہو سکتا ہے اور چونکہ دونوں اطراف لازماً ایک دوسرے کے برابر ہیں لہذا x تبدیل کرنے سے دایاں تفاضل 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^۴ کہتے ہیں جس کو ہم E سے ظاہر کرتے ہیں۔ یوں مساوات ۲.۳ کو

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

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

اور

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

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

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

^۳ دھیان رہے کہ اگر V خود x کے ساتھ ساتھ t کا بھی تفاضل ہو تا تب ایسا ممکن نہ ہوتا۔
separation constant

دونوں اطراف کو dt سے ضرب دیتے ہوئے اس کا مکمل لیں۔ یوں عمومی حل $Ce^{-iEt/\hbar}$ حاصل ہوگا۔ چونکہ ہم حاصل ضرب $\psi\phi$ میں دلچسپی رکھتے ہیں لہذا ہم مستقل C کو ψ میں ضم کر سکتے ہیں۔ یوں مساوات ۲.۴ کا حل درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

(1) یہ ساکن حالات^۱ ہیں۔ اگرچہ تفاعل موج خود:

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

وقت t کا تابع ہے لیکن کثافت احتمال:

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

وقت کا تابع نہیں ہے؛ تابعیت وقت مساوات میں سے ختم ہو جاتی ہے۔ یہی کچھ کسی بھی حشر کی متغیر کی توقعاتی قیمت کے حساب کرنے میں ہوگا۔ مساوات ۲.۶ تخفیف کے بعد درج ذیل صورت اختیار کر لے گی۔

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

ہر توقعاتی قیمت وقت میں مستقل ہوگی؛ ہم $\phi(t)$ کو نکال کر Ψ کی جگہ ψ استعمال کر کے وہی نتائج حاصل کر سکتے ہیں۔ اگرچہ بعض اوقات ψ کو ہی تفاعل موج پکارا جاتا ہے، لیکن ایسا کرنا حقیقتاً غلط ہے جس سے مسائل پیدا ہو سکتے ہیں۔ ضروری ہے کہ آپ یاد رکھیں کہ اصل تفاعل موج ہر صورت میں تابع وقت ہوگا۔ بالخصوص $\langle x \rangle$ مستقل ہوگا، لہذا (مساوات ۲.۳ کے تحت) $\langle p \rangle = 0$ ہوگا۔ ساکن حال میں کبھی کبھی کچھ نہیں ہوتا۔

(2) یہ غیر مبہم کل توانائی سے متعلق حالات ہوں گے۔ کلاسیکی میکانیات میں کل توانائی (حشر کی جمع مخفی) کو

^۱time-independent Schrodinger align
stationary states

معتدل معمول زنی حل کے لئے لازم ہے کہ E حقیقی ہو (موال ۲.۱-۲ اور یکھیں)۔

ہیملٹن^۸ کہتے ہیں جس کو H سے ظاہر کیا جاتا ہے۔

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

اس کا مطابقتی ہیملٹنی عامل، ضابطے کے تحت p کو $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ سے تبدیل کر کے $(\hbar/i)(\partial/\partial x)$ ، درج ذیل^۹ حاصل ہوگا۔

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

یوں غیر تابع وقت مساوات شرودنگر ۲.۵ درج ذیل روپ اختیار کر لے گی

$$(۲.۱۲) \quad \hat{H}\psi = E\psi$$

جس کے کل توانائی کی توقعاتی قیمت درج ذیل ہوگی۔

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

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

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

کی بنا پر درج ذیل ہوگا۔

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

یوں H کی تغیریت درج ذیل ہوگی۔

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

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

(3) عمومی حل و تابل علیحدگی حلوں کا نقطہ جوڑا^{۱۰} ہوگا۔ جیسا کہ ہم جلد دیکھیں گے، غیر تابع وقت مساوات شرودنگر (۲.۵) لامتناہی تعداد کے حل $(\psi_1(x), \psi_2(x), \psi_3(x), \dots)$ دے گی جہاں ہر ایک

^۸ Hamiltonian

^۹ جہاں ضابطہ فنی پیدا ہونے کی گنجائش ہو وہاں میں عامل پر ٹوپی^(^) کا نشان ڈال کر اس کو اس تغیر پذیر تغیر سے علیحدہ رکھوں گا جس کو یہ ظاہر کرتا ہو۔

^{۱۰} linear combination

حل کے ساتھ ایک علیحدگی مستقل (E_1, E_2, E_3, \dots) منسلک ہو گا لہذا ہر اجازتی توانائی کا ایک منفرد تفاعل موج پایا جائے گا۔

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

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

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

حقیقتاً تابع وقت مساوات شرودنگر 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 پوری کرتا ہو۔ آپ آنے والے حصوں میں دیکھیں گے کہ ہم کس طرح یہ سب کچھ کرتے ہیں۔ باب ۳ میں ہم اس کو زیادہ مضبوط بنیادوں پر کھڑا کر پائیں گے۔ بنیادی نقطہ یہ ہے کہ ایک مرتبہ غیر تابع وقت مساوات شرودنگر حل کرنے کے بعد آپ کے مسائل ختم ہو جاتے ہیں۔ یہاں سے تابع وقت مساوات شرودنگر کا عمومی حل حاصل کرنا آسان کام ہے۔

گزشتہ چار صفحات میں بہت کچھ کہہ چکا ہے۔ میں ان کو مختصراً اور مختلف نقطہ نظر سے دوبارہ پیش کرتا ہوں۔ میں آپ کے سامنے ایک عمومی مسئلہ رکھتا ہوں: آپ کو (غیر تابع وقت) مخفیہ $V(x)$ اور ابتدائی تفاعل موج $\Psi(x, 0)$ دیے گئے ہوں گے۔ آپ کو مستقبل کے تمام t کیلئے $\Psi(x, t)$ تلاش کرنا ہو گا۔ ایسا کرنے کی خاطر آپ تابع وقت مساوات شرودنگر (مساوات ۲.۱) حل کریں گے۔ پہلا قدم^{۱۳} یہ ہو گا کہ آپ غیر تابع وقت مساوات شرودنگر (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) ہو گی۔ تفاعل $\Psi(x, 0)$ تیار کرنے کی خاطر آپ ان حلوں کا خطی جوڑ لیں گے۔

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

allowed energy^{۱۱}

^{۱۲} تفاعلات $f_1(z)$ ، $f_2(z)$ ، وغیرہ کے خطی جوڑے مساوی درج ذیل روپ کاغیرہ ہے جہاں c_1 ، c_2 ، وغیرہ کوئی بھی (مختلط) مستقل ہو سکتے ہیں۔

$$f(z) = c_1 f_1(z) + c_2 f_2(z) + \dots$$

^{۱۳} بعض اوقات آپ تابع وقت مساوات شرودنگر کو بغیر علیحدگی متغیرات حل کر لیتے ہیں (سوال ۲.۴ اور سوال ۲.۵۰ دیکھیں)۔ تاہم ایسی صورتیں بہت کم پائی جاتی ہیں۔

باب ۲. غیر تابع وقت مساوات شرودنگر

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

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

چونکہ متابل 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 اب خود ساکن حالات ہوں گے، تاہم عمومی حل (مساوات ۲.۱۷) یہ خاصیت نہیں رکھتا؛ انفرادی ساکن حالات کی توانائیوں کے ایک دوسرے سے مختلف ہونے کی بنا پر $|\Psi|^2$ کا حساب کرتے ہوئے قوت نہائی ایک دوسرے کو حذف نہیں کرتے۔

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

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

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

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

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

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

(میں نے نتیجہ کی سادہ صورت حاصل کرنے کی خاطر کلیہ پولر $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ استعمال کیا۔) ظاہر ہے کہ کثافت احتمال زاویائی تعدد $(\frac{E_2 - E_1}{\hbar})$ کے ساتھ سائن نار تفاعل پذیر ہے لہذا یہ ہرگز ساکن حال نہیں ہوگا۔ لیکن دھیان رہے کہ (ایک دوسرے سے مختلف) توانائیوں کے تفاعل کے خطی جوڑنے یہ حرکت پیدا کی ہے۔
□

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

۱. مثال علیحدگی حلوں کے لئے علیحدگی مستقل E لازماً حقیقی ہوگا۔ اشارہ: مساوات ۲.۷ میں E کو $E_0 + i\Gamma$ لکھ کر (جہاں E اور Γ حقیقی ہیں)، دکھائیں کہ تمام t کے لئے مساوات ۱۱.۲۰ اس صورت کارآمد ہوگا جب Γ صفر ہو۔

ب. غیر تابع وقت تفاعل موج $\psi(x)$ ہر موقع پر حقیقی لیاجا سکتا ہے (جبکہ تفاعل موج $\Psi(x, t)$ لازماً مصلوط ہوتا ہے)۔ اس کا ہرگز یہ مطلب نہیں ہے کہ غیر تابع مساوات شرودنگر کا ہر حل حقیقی ہوگا؛ بلکہ غیر حقیقی حل پائے جانے کی صورت میں اس حل کو ہمیشہ، ساکن حالات کا (اقتی 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 مصلوط 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 $V(x)$ جفتے تفاعل^{۱۵} یعنی $V(-x) = V(x)$ تب $\psi(x)$ کو ہمیشہ جفت یا طاق لیاجا سکتا ہے۔ اشارہ: اگر کسی مخصوص E کے لئے $\psi(x)$ مساوات ۲.۵ کو مطمئن کرتا ہو تب $\psi(-x)$ بھی اس مساوات کو مطمئن کرے گا اور یوں ان کے جفت اور طاق خطی جوڑ $\psi(x) \pm \psi(-x)$ بھی اس مساوات کو مطمئن کریں گے۔

سوال ۲.۲: دکھائیں کہ غیر تابع وقت مساوات شرودنگر کے ہر اس حل کے لئے، جس کی معمول زنی کی جا سکتی ہو، E کی قیمت لازماً $V(x)$ کی کم سے کم قیمت سے زیادہ ہوگی۔ اس کا کلاسیکی مشاغل کیا 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 ستر $E < V$ کی صورت میں ψ اور اس کے دو گنتا تفرق کی علامتیں لازماً ایک جیسی ہوں گی؛ اب دلیل پیش کریں کہ ایسا تفاعل نا قابل معمول زنی ہوگا۔

۲.۲ لامستناہی چوکور کنواں

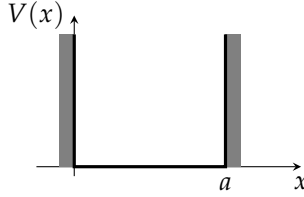
فرض کریں

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

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

^{۱۵} even function

باب ۲. غیر تاجع وقت مساوات شرودنگر



شکل ۲.۱: لامستثنائی چوکور کنواں مخفیہ (مساوات ۲.۱۹)

کنویں سے باہر $\psi(x) = 0$ ہوگا (لہذا ایساں ذرے کے پائے جانے کا احتمال صفر ہوگا)۔ کنویں کے اندر، جہاں $V = 0$ ہے، غیر تاجع وقت مساوات شرودنگر (مساوات ۲.۵) درج ذیل روپ اختیار کر لے گی۔

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

یعنی

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

(اس کو یوں لکھتے ہوئے میں خاموشی سے $E \geq 0$ فرض کرتا ہوں۔ ہم سوال ۲.۲ سے جان چکے ہیں کہ $E < 0$ سے بات نہیں بنے گی۔) مساوات ۲.۲۱ کا سیکی سادہ ہارمونک مرتفع^{۱۶} کی مساوات ہے جس کا عمومی حل درج ذیل ہے

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

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

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

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

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

^{۱۶} simple harmonic oscillator
^{۱۷} boundary conditions

ہے لہذا $B = 0$ پس

$$\psi(x) = A \sin kx \quad (۲.۲۴)$$

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

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

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

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

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

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

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

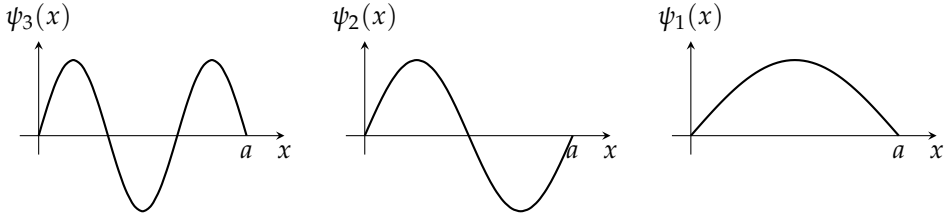
$$\int_0^a |A|^2 \sin^2(kx) dx = |A|^2 \frac{a}{2} = 1, \quad \implies \quad |A|^2 = \frac{2}{a}$$

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

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

جیسا کہ وعدہ تھا (ہر مثبت عدد صحیح n کے عوض ایک حل دے کر) غیر تابع وقت مساوات شرودنگر نے حلوں کا ایک لامستثنائی سلسلہ دیا ہے۔ ان میں سے اولین چند کو شکل ۲.۲ میں ترسیم کیا گیا ہے۔ یہ

^{۱۸} allowed
^{۱۹} دھیان رہے کہ غیر تابع وقت مساوات شرودنگر کو حل کرتے ہوئے سرحدی شرائط عائد کرنے سے اجبازتی توانائیوں کی کوانٹائی شرط محض تنہائی کی وجوہات کی بنا پر ابھرتا ہے۔



شکل ۲.۴: لامستناہی چوکور کنویں کے ابتدائی تین ساکن حالات (مساوات ۲.۲۸)۔

ایک دھانگے، جس کی لمبائی a ہو، پر بننے والی ساکن امواج کی طرح نظر آتے ہیں۔ تفاعل ψ_1 جو زمینی حالت^{۲۰} کہلاتا ہے کی توانائی کم سے کم ہے۔ باقی حالات جن کی توانائیاں n^2 کے براہ راست بڑھتی ہیں، متبجائز^{۲۱} کہلاتے ہیں۔ تفاعلات $\psi_n(x)$ چند اہم اور دلچسپ خواص رکھتے ہیں:

۱. کنواں کے وسط کے لحاظ سے یہ تفاعلات باری باری جفتے اور طاق ہیں۔ ψ_1 جفت ہے، ψ_2 طاق ہے، ψ_3 جفت ہے، وغیرہ وغیرہ۔^{۲۲}

ب. توانائی بڑھاتے ہوئے ہر اگلے حال کے عقدوں^{۲۳} (صفر مقام انقطاع^{۲۴}) کی تعداد میں ایک (1) کا اضافہ ہوگا۔ (چونکہ سروں پر پائے جانے والے صفر کو نہیں گن جاتا ہے لہذا) ψ_1 میں کوئی عقدہ نہیں ہے، ψ_2 میں ایک ہے، ψ_3 میں دو پائے جاتے ہیں، وغیرہ وغیرہ۔

ج. یہ تمام تفاعل درج ذیل معنوں میں باہم عمودوں^{۲۵} ہیں جہاں $m \neq n$ ہے۔

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

^{۲۰} ground state

^{۲۱} excited states

^{۲۲} اس تشکیلی کو زیادہ وضاحت سے پیش کرنے کی خاطر بعض مضنین کنویں کے مرکز کو مبدا پر رکھتے ہیں (یوں کنواں $-a$ تا $+a$ رکھا جاتا ہے)۔ تب جفت تفاعلات کو سائن جبکہ طاق تفاعلات کو سین ہوں گے۔ سوال ۲.۳۶ دیکھیں۔

^{۲۳} nodes

^{۲۴} zero-crossing

^{۲۵} orthogonal

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 ہوگی؛ (کیا آپ بتا سکتے ہیں کہ ایسی صورت میں دلیل کیوں نامتبادل قبول ہوگی؟) ایسی صورت میں معمولی زنی اس شکل کی قیمت 1 کر دے گا۔ درحقیقت، عمودیت اور معمولی زنی کو ایک فقرے میں سمجھا جاسکتا ہے:^{۲۶}

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

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

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

ہم کہتے ہیں کہ مذکورہ بالا (تمام) ψ معیار عمودی^{۲۸} ہیں۔

د. یہ مکمل^{۲۹} ہیں، جس سے مراد ہے کہ کسی بھی دوسرے تفاعل $f(x)$ کو ان کے خطی جوڑے بنایا جاسکتا ہے۔

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

میں تفاعلات $\sin \frac{n\pi x}{a}$ کی مکملیت کو یہاں ثابت نہیں کروں گا، البتہ اگر آپ اعلیٰ علم الاحصاء سے واقف

ہیں تو آپ پہچان سکتے ہیں کہ مساوات ۲.۳۲ اور کچھ نہیں بلکہ $f(x)$ کا فوریر تسلسل^{۳۰} ہے۔ یہ حقیقت، کہ ہر

تفاعل کو فوریر تسلسل کی صورت میں پھیلا کر لکھا جاسکتا ہے، بعض اوقات مسئلہ ڈرشلے^{۳۱} کہلاتا ہے۔^{۳۲}

^{۳۶} یہاں تمام ψ حقیقی ہیں لہذا ψ_m پر * ڈالنے کی ضرورت نہیں ہے، لیکن مستقبل کی ضرورتوں کا لحاظ کرتے ہوئے ایسا کرنا ایک اچھی عادت

ہے۔

^{۲۷} Kronecker delta

^{۲۸} orthonormal

^{۲۹} complete

^{۳۰} Fourier series

^{۳۱} Dirichlet's theorem

^{۳۲} تفاعل $f(x)$ میں مستثنائی تعداد کے عدم استمرار پائے جاسکتے ہیں۔

باب ۲. غیر تانج وقت مساوات شروڈنگر

کسی بھی دیے گئے تفاعل $f(x)$ کے لئے عددی سرون 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۔

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

(کرونیٹرڈیلٹا مجموعے میں تمام اجزاء کو ختم کر دے گا ماسوائے اس جزو کو جس کے لئے $n = m$ ہو۔) یوں تفاعل $f(x)$ کی توسیع کے n ویں جزو کا عددی سرون درج ذیل ہوگا۔^{۳۳}

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

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

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

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

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

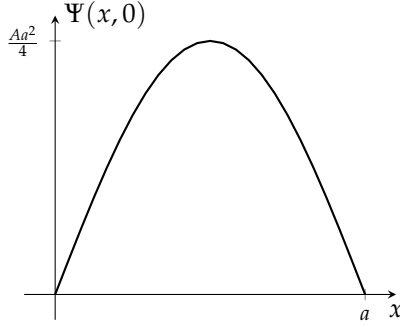
$$(۲.۳۶) \quad \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) e^{-i(n^2\pi^2\hbar/2ma^2)t}$$

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

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

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

^{۳۳} آپ یہاں فکلی متغیر کے لئے m یا n یا کوئی تیسرا حرف استعمال کر سکتے ہیں (بس اتنا خیال رکھیں کہ مساوات کی دونوں اطراف ایک ہی حرف استعمال کیا جائے)، اور ہاں یاد رہے کہ یہ حرف ”کسی مثبت عدد صحیح“ کو ظاہر کرتا ہے۔



شکل ۲.۳: ابتدائی تفاعل موج برائے مثال ۲.۲۔

فوریئر تسلسلے سے حاصل کیا جاسکتا ہے:

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \Psi(x, 0) dx \quad (2.34)$$

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

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

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

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

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

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

A متعین 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 تقابل عمل موج درج ذیل ہوگا (مساوات ۲.۳۶)۔

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

□

سر سری طور پر ہم کہتے ہیں کہ c_n ، ”تقابل عمل Ψ میں ψ_n کی مقدار” کو ظاہر کرتا ہے۔ بعض اوقات ہم کہتے ہیں کہ n ویں ساکن حال میں ایک ذرے کے پائے جانے کا احتمال $|c_n|^2$ ہے جو درست نہیں، چونکہ ذرہ حال Ψ میں ہے تاکہ حال ψ_n میں، ویسے بھی، تجربہ گاہ میں آپ کسی ایک ذرے کو کسی ایک مخصوص حال میں نہیں دیکھ پاتے بلکہ آپ کسی قابل مشاہدہ مقدار کی پیمائش کرتے ہیں، جس کا نتیجہ ایک عدد کی صورت میں سامنے آتا ہے۔ جیسا کہ آپ باب ۳ میں دیکھیں گے، توانائی کی پیمائش سے E_n قیمت حاصل ہونے کا احتمال $|c_n|^2$ ہو گا۔ (کوئی بھی پیمائش، ”احزاتی“ قیمتوں میں سے کوئی ایک قیمت دے گی، اسی لئے انہیں احزاتی قیمتیں کہتے ہیں، اور کوئی مخصوص قیمت E_n حاصل ہونے کا احتمال $|c_n|^2$ ہوگا۔)

یقیناً ان تمام احتمالات کا مجموعہ 1 ہونا چاہیے،

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

جس کا ثبوت Ψ کی عمود زنی سے حاصل ہوگا (چونکہ تمام c_n غیر تابع وقت ہیں لہذا میں $t = 0$ پر اس کا ثبوت پیش کرتا ہوں؛ اگر آپ کو اس سے تشویش ہو تو آپ باآسانی اس ثبوت کی تعیم کسی بھی t کے لئے 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 میں کرونیٹر ڈیلٹا جزو $m = n$ کو چنتا ہے۔)

مزید یہ کہ توانائی کی توقعاتی قیمت لازماً

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

ہوگی جس کی بلا واسطہ تصدیق کی جاسکتی ہے: غیر تابع وقت مساوات شرودنگر (مساوات ۲.۱۲) کہتی ہے کہ

$$(۲.۴۰) \quad H\psi_n = E_n\psi_n$$

لہذا

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

ہوگا۔ دھیان رہے کہ کسی ایک مخصوص توانائی کے حصول کا احتمال غیر تابع وقت ہوگا اور یوں H کی توقعاتی قیمت حتماً غیر تابع وقت ہوگی۔ کوانٹائی میکانیات میں یہ بتا توانائی کا ظہور ہے۔

مثال ۲.۳: ہم نے دیکھا کہ مثال ۲.۲ میں ابتدائی تف عمل موج (شکل ۲.۳) زمینی حال ψ_1 (شکل ۲.۲) کے ساتھ متربی مشابہت رکھتا ہے۔ یوں ہم توقع کریں 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 سرسل کردرج ذیل مشرق دیتے ہیں۔^{۳۵}

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

اس مثال میں توانائی کی توقعاتی قیمت

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

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

سوال ۲.۳: یہ دکھائیں کہ لامتناہی چوکور کنویں کے لئے $E = 0$ یا $E < 0$ کی صورت میں غیر تاجع وقت مساوات شرودنگر کا کوئی بھی متبادل قبول حل نہیں پایا جاتا۔ (یہ سوال ۲.۲ میں دیے گئے عمومی مسئلے کی ایک مخصوص صورت ہے، لیکن اس مرتبہ مساوات شرودنگر کو صریحاً حل کرتے ہوئے دکھائیں کہ آپ سرحدی شرائط کو پورا نہیں کر سکتے۔)

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

سوال ۲.۵: لامتناہی چوکور کنویں میں ایک ذرے کا ابتدائی تفاعل موج، پہلے دو ساکن حالات کے برابر حصوں کا مرکب ہے۔

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

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

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

^{۳۵} آپ درج ذیل تسلسل کی ریاضی کی کتاب سے دیکھ سکتے ہیں۔

$$\frac{1}{16} + \frac{1}{36} + \frac{1}{56} + \dots = \frac{\pi^6}{960}$$

$$\frac{1}{14} + \frac{1}{34} + \frac{1}{54} + \dots = \frac{\pi^4}{96}$$

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

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

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

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

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

یہاں ϕ کوئی منتقل 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: لامستثنای چوکور کنوئیں میں ایک ذرے کا ابتدائی تفاعل موج درج ذیل ہے۔^{۳۶}

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

ا. $\Psi(x, 0)$ کا خانہ کھینچیں اور منتقل A کی قیمت تعیین 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 ذرہ جس کی کمیت m ہے ابتدا ($t = 0$) میں لامستثنای چوکور کنوئیں (چوڑائی a) کے نصف بائیں حصے میں پایا جاتا ہے جہاں ہر نقطے پر اس کے ہونے کا امکان ایک جیسا ہے۔

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

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

^{۳۶} اصولی طور پر ابتدائی تفاعل موج کی شکل پر کوئی پابندی عائد نہیں ہوتی، جب تک کہ وہ متبادل معمول زنی ہے۔ بالخصوص، ضروری نہیں کہ $\Psi(x, 0)$ کا استمراری تفرق پایا جاتا ہو؛ بلکہ تفاعل کا خود استمراری ہونا بھی ضروری نہیں ہے۔ تاہم، اگر آپ $\langle H \rangle$ کی قیمت کو $\int \Psi(x, 0)^* H \Psi(x, 0) dx$ سے معلوم کرنا چاہیں گے تو آپ کو تکنیکی مشکلات کا سامن کرنا پڑے گا، اس لئے کہ $\Psi(x, 0)$ کا دوم تفرق بد معین ہے۔ سوال ۲.۹ میں ایسا کرنا اس لئے ممکن ہوا کہ عدم استمرار آخری سروں پر پائے گئے جہاں تفاعل خود صفر ہے۔ سوال ۲.۷ کی طرح کے مسائل کو حل کرنا آپ سوال ۲.۸ میں دیکھیں گے۔

باب ۲. غنیر تابع وقت مساوات شروڈنگر

سوال ۲.۹: لمحہ $t = 0$ پر مثال ۲.۲ کے تعامل موج کیلئے H کی توقعاتی قیمت ”پرانے دقیقہ نویسی طریقہ“:

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

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

۲.۳ ہارمونی مرتعش

کلاسیکی ہارمونی مرتعش ایک پلک دار اسپرنگ جس کا مقیاس پلک k ہو اور کمیت m پر مشتمل ہوتا ہے۔
کمیت کی حرکت قانون ہکے^{۳۷}

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

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

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

ہوگا جہاں

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

ارتعاش کا (زاویائی) تعدد ہے۔ مخفی توانائی

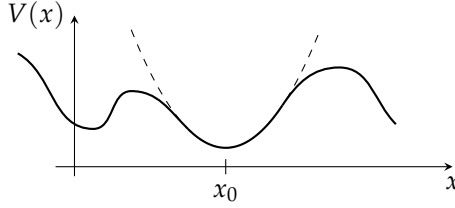
$$(۲.۴۲) \quad V(x) = \frac{1}{2} kx^2$$

ہوگی جس کی ترمیم قطع مکانی ہے۔

حقیقت میں کامل ہارمونی مرتعش نہیں پایا جاتا ہے۔ اگر آپ اسپرنگ کو زیادہ کھینچیں تو وہ ٹوٹ جائے گا اور
متانون ہک اس سے بہت پہلے غنیر کارآمد ہو چکا ہوگا۔ تاہم عملاً کوئی بھی مخفی، معنوی کم سے کم نقطہ کی پڑوس میں
تخمین قطع مکانی ہوگا (شکل ۲.۴)۔ مخفی توانائی $V(x)$ کے کم سے کم نقطہ x_0 کے لحاظ سے $V(x)$ کو ٹیلر تسلسل^{۳۸} کے لحاظ
سے پھیلا کر

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

^{۳۷}Hooke's law
^{۳۸}Taylor series



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

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

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

جو نقطہ x_0 پر ایک ایسی سادہ ہارمونی ارتعاش بیان کرتا ہے جس کا موثر مقیاس پلک $k = V''(x_0)$ ہو۔^{۳۹} یہی وہ وجہ ہے جس کی بنا پر سادہ ہارمونی سرعش اتنا اہم ہے: تقریباً ہر وہ ارتعاشی حرکت جس کا محیط کم ہو تخمیناً سادہ ہارمونی ہوگا۔

کوانٹائی میکانیات میں ہمیں مخفیہ

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

کے لیے مساوات شرودنگر 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 تابع وقت مساوات شرودنگر

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

حل کریں۔ اس مسئلے کو حل کرنے کے لیے دو بالکل مختلف طریقے اپنائے جاتے ہیں۔ پہلی میں تفرقی مساوات کو ”طقت کے بل بوتے پر“ **سلسلہ** ^{۴۰} کے ذریعے 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 کولم مخفیہ کے لیے حل تلاش کریں گے)۔ دوسری ترکیب ایک شیطانی الجبرائی تکنیک ہے جس میں **عالمیہ** ^{۴۱} استعمال ہوتے ہیں۔ میں آپ کی

^{۳۹} چونکہ ہم مندرجہ کر رہے ہیں کہ x_0 کم سے کم نقطہ ہے لہذا $V''(x_0) \geq 0$ ہوگا۔ صرف اس نایاب صورت میں ارتعاش تخمیناً ہارمونی ہوگا جب $V''(x_0) = 0$ ہو۔
^{۴۰} power series

باب ۲. غیر تاجع وقت مساوات شرودنگر

واقفیت پہلے الجبرائی تکنیک کے ساتھ پیدا کرتا ہوں جو زیادہ سادہ، زیادہ دلچسپ (اور حل جلدی دیتا) ^{۴۱} ہے۔ اگر آپ طبعی 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 ابتد 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 ہم ملٹیپلٹی

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

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

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

البتہ یہاں بات اتنی سادہ نہیں ہے چونکہ p اور x عاملین ہیں اور عاملین عموماً مقلوب ^{۴۲} نہیں ہوتے ہیں (یعنی آپ xp سے مراد px نہیں لے سکتے ہیں)۔ اس کے باوجود یہ ہمیں درج ذیل متبادلوں پر غور کرنے پر آمادہ کرتا ہے

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

(جہاں توسین 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 مقلوب ^{۴۳} کہتے ہیں اور جو ان کی آپس میں مقلوب نہ ہونے کی پیمائش ہے۔ عمومی طور پر عامل A اور عامل B کا مقلوب (جسے جو کور توسین میں لکھا ہے) درج ذیل ہوگا۔

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

^{۴۱} یہی تراکیب زاویائی معیار حرکت کے نظریہ (باب ۴) میں مستعمل ہیں اور انہیں عموماً دیتے ہوئے عمدہ تشاکل کو اٹانائی میکائیٹے کے جھنجھے کی وسعت جماعت کے لئے استعمال کیا جاسکتا ہے۔

commute^{۴۲}
commutator^{۴۳}

اس علاقیت کے تحت درج ذیل ہوگا۔

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

ہمیں x اور عددی p کا مقلب دریافت کرنا ہوگا۔ انتباہ: عاملین پر ذہنی کام کرنا عموماً غلطی کا سبب بنتا ہے۔ بہتر ہوگا 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۔

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

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

$$(۲.۵۱) \quad [x, p] = i\hbar$$

یہ خوب صورت نتیجہ جو بار بار سامنے آتا ہے باضابطہ مقلبتیے رشتہ^{۴۴} کہلاتا^{۴۵} ہے۔
اسے استعمال سے مساوات ۲.۴۹ درج ذیل روپ

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

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 جا سکتا اور دائیں ہاتھ اضافی $-\frac{1}{2}$ ہوگا۔ یاد رہے گاہاں 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۔

$$(۲.۵۵) \quad [a_-, a_+] = 1$$

^{۴۴}canonical commutation relation

^{۴۵}گہری نظر سے دیکھا جائے تو کوانٹائی میکانیات کے تمام ظلمات کا دار و مدار اس حقیقت پر ہے کہ معیام اور معیار حرکت آپس میں مقلوب نہیں ہیں۔ بعض مضغین باضابطہ مقلبتیے رشتہ کو مسلمہ لیتے ہوئے $p = (\hbar/i) d/dx$ اخذ کرتے ہیں۔

یوں ہیملٹنی کو درج ذیل بھی لکھا جاسکتا ہے۔

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

ہارمونی مرتعش کی مساوات شرودنگر^{۴۶} کو a_{\pm} کی صورت میں درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

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

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

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

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

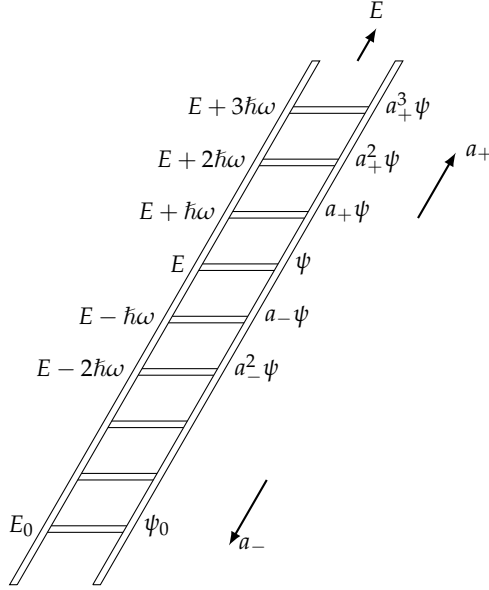
(میں نے دوسری لکیر میں مساوات ۲.۵۵ استعمال کرتے ہوئے $a_- a_+$ کی جگہ $a_+ a_- + 1$ استعمال کیا ہے۔ دھیان رہے اگرچہ a_+ اور a_- کی ترتیب اہمیت کا حامل ہے، a_{\pm} اور کسی بھی مستقل، مثلاً \hbar ، اور ω کی ترتیب اہم نہیں ہے۔ ایک عامل ہر مستقل کے ساتھ مقلوب ہوگا۔) اسی طرح حل $a_-\psi$ کی توانائی $(E -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

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

یوں ہم نے ایک ایسی خود کار ترکیب دریافت کر لی ہے جس سے، کسی ایک حل کو جاننے ہوئے، بالائی اور زیریں توانائی کے نئے حل دریافت کیے جاسکتے ہیں۔ چونکہ a_{\pm} کے ذریعے ہم توانائی میں اوپر چڑھ یا نیچے اتر سکتے ہیں لہذا انہیں ہم **عاملین سیر** چلاتے ہیں: a_+ **عامل** **رفعت**^{۴۸} اور a_- **عامل** **تقلیل**^{۴۹} ہے۔ عامل رفعت کو فعلی عامل اور عامل تقلیل کو تقلیلی عامل بھی پکارا جاتا ہے۔ حالات کی ”سیر“ کو شکل ۲.۵ میں دکھایا گیا ہے۔

^{۴۶} میں بار بار ”غیر تاجع وقت مساوات شرودنگر“ کہہ کر جھک گیا ہوں لہذا جہاں مستن سے واضح ہو کہ میں کس قسم کی مساوات کی بات کر رہا ہوں، میں اس کو ”مساوات شرودنگر“ چکادوں گا۔

^{۴۷} ladder operators
^{۴۸} raising operator
^{۴۹} lowering operator



شکل ۲.۵: ہارمونی سر تعش کے حالات کی ”سیڑھی“۔

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

(۲.۵۸)

$$a_- \psi_0 = 0$$

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 با آسانی حل کیا جاسکتا ہے:

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

(C مستقل ہے۔) لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

ہم اس کی معمول زنی ہمیں کرتے 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) مساوات شروڈنگر میں پر کر کے $\hbar\omega(a_+a_- + \frac{1}{2})\psi_0 = E_0\psi_0$ حاصل کرتے ہیں اور یہ جانتے ہوئے کہ $a_-\psi_0 = 0$ ہوگا درج ذیل حاصل کرتے ہیں۔

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

سیڑھی کے نچلا پایہ (جو کوانٹائی 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 امکان حالات دریافت کر سکتے ہیں۔ صریحاً ایسا کیے بغیر ہم تمام احبازاتی توانائیاں تعین کر پائے ہیں۔

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

۵۰ 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۔ غلطی یہ ہے ایسی صورت میں مساوات ۲.۱۷ طرز کی مساواتوں میں مجموعہ کی زیریں حد کو بھی تبدیل کیا جائے گا۔
۵۱ دھیان رہے کہ ہم اس ترکیب سے (قابل معمول زنی) تمام حل حاصل کرتے ہیں۔ اب اگر کسی وجہ کی بنا پر دیگر حل بھی پائے جاتے تب ہم عامل رفعت اور عامل تقلیل استعمال کرتے ہوئے دوسری سیڑھی حاصل کر سکتے ہیں، تاہم اس سیڑھی کے سب سے نچلے پایہ کو مساوات ۲.۵۸ مطابقت کرنا ہوگا، جس سے ہم لازماً مساوات ۲.۵۹ تک پہنچتے ہیں۔ یوں نچلے پایہ ایک جیسے ہوں گے لہذا دونوں سیڑھیاں درحقیقت یکساں ہوں گی۔

حل: ہم مساوات ۲.۶۱ استعمال کرتے ہیں۔

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= A_1 a_+ \psi_0 = \frac{A_1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \\ (2.62) \quad &= A_1 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}\end{aligned}$$

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

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

جیسا آپ دیکھ سکتے ہیں $A_1 = 1$ ہوگا۔

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

آپ الجبرائی طریقے سے ہیجان حالات کی معمول زنی کر سکتے ہیں لیکن اس کے لیے بہت محتاط 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۔

$$(2.63) \quad a_+ \psi_n = c_n \psi_{n+1}, \quad a_- \psi_n = d_n \psi_{n-1}$$

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 نکلمات کا موجود ہونا لازمی ہے، جس کا مطلب ہے کہ $\pm\infty$ پر $f(x)$ اور $g(x)$ کو لازمًا صفر پہنچنا ہوگا۔)

$$(2.64) \quad \int_{-\infty}^{\infty} f^*(a_{\pm}g) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (a_{\mp}f)^* g dx$$

(خطی الجبر کی زبان میں $a \mp$ اور $a \pm$ ایک دوسرے کے ہر مشق جوڑیہ دار^{۵۲} 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 پر 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۔

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} (a_{-} \psi_n)^* (a_{-} \psi_n) dx = |d_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{n-1}|^2 dx = n \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx$$

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۔

$$\psi_1 = a_{+} \psi_0, \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} a_{+} \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{+})^2 \psi_0,$$

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

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

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

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

لامستثنائی چوکور کنویں کے ساکن حالات کی طرح ہارمونی مرتقش 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 دو بار مساوات ۲.۶۴ استعمال کر کے پہلے a_+ اور بعد میں a_- اپنی جگہ سے ہلا کر اس کا ثبوت پیش کر سکتے ہیں۔

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

جب تک $m = n$ نہ ہو $\int \psi_m^* \psi_n dx$ لازماً صفر ہو گا۔ 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 $|c_n|^2$ ہو گا۔

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

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

اس مثال میں ہم x^2 میں دو بچے رکھتے ہیں:

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

ابھذا درج ذیل ہو گا۔

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

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

سوال ۲.۱۰:

۱. $\psi_2(x)$ تیار کریں۔

ب. ψ_0, ψ_1, ψ_2 کا خاکہ کھینچیں۔

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

سوال ۲.۱۱:

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

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

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

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

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

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

۱. 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 $\psi_2(x)$ دیں تو جواب کیا ہوتا؟ تصدیق کریں کہ اس تنازع عمل موج کے لیے مسئلہ ابہر نفسٹ (مساوات ۱.۳۸) مطمئن ہوتا ہے؟

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

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

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

۲.۳.۲ تخلیلی ترکیب

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

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

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

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

مساوات شرودنگر اب درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

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

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

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

ہم نے مساوات ۲.۴۲ کو حل کرنا ہوگا۔ ایسا کرتے ہوئے ہمیں K اور (E) کی ”اجب زنی“ قیمتیں بھی حاصل ہوں گی۔ ہم اس صورت سے شروع کرتے ہیں جہاں ξ کی قیمت (یعنی x کی قیمت) بہت بڑی ہو۔ ایسی صورت میں ξ^2 کی قیمت K کی قیمت سے بہت زیادہ ہوگی لہذا مساوات ۲.۴۲ درج ذیل روپ اختیار کرے گی

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

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

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

اس میں B کا جزو نام قابل معمول زنی ہے (چونکہ $|x| \rightarrow \infty$ کرنے سے اس کی قیمت بے متابوڑ ہوتی ہے)۔ طبعی طور پر قابل قبول حل درج ذیل متقارب صورت کا ہوگا۔

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

باب ۲. غیر تاجع وقت مساوات شروڈنگر

اس سے ہمیں خیال آتا ہے کہ ہمیں قوتِ ساحہ کو ”چھینا“ چاہیے،

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

اور توقع کرنی چاہیے کہ جو کچھ باقی رہ جائے، $h(\xi)$ ، اس کی صورت $\psi(\xi)$ سے سادہ ہو۔^{۵۳} ہم مساوات ۲.۷۷ کے تفروقات

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

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

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

ہم ترکیبے فروبنیوس^{۵۴} استعمال کرتے ہوئے مساوات ۲.۷۸ کا حل ξ کے طاقی تسلسل کی صورت میں حاصل کرتے ہیں۔

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

اس تسلسل کے جزو در جزو تفروقات

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

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 کر کے درج ذیل حاصل ہو گا۔

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

^{۵۳} اگرچہ ہم نے مساوات ۲.۷۷ لکھتے ہوئے تخمینے سے کام لیا، اس کے بعد باقی تمام بالکل ٹھیک ٹھیک ہے۔ تفروقی مساوات کے طاقی تسلسل حل میں متغیر ξ کی جزو کا چھینا معمولاً پہلا قدم ہوتا ہے۔

ط متقی تسل توسج کے یکتائی کی بنا پر ج کے ہر طاق کا عددی سر صفر ہوگا:

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

لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

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 ج کا جفت تفاعل ہے جو خود a_0 پر منحصر ہے اور

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

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

البتہ اس طرح حاصل حلوں میں سے کئی نا قابل معمول زنی ہوں گے۔ اس کی وجہ یہ ہے کہ j کی بہت بڑی قیمت کے لئے کلیہ توالی (تخمین) 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 متعارفی روپ^{۵۶} ہے جو ہم نہیں چاہتے۔ اس مشکل سے نکلنے کا ایک ہی طریقہ ہے۔ متبادل معمولی حل کے لئے لازم ہے کہ اس کا طاق 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 حضرت h تسلسل یا طاق h تسلسل اختتام پذیر ہوگا؛ جبکہ دوسرا لازماً ابتداء سے ہی صفر ہوگا؛ حضرت 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

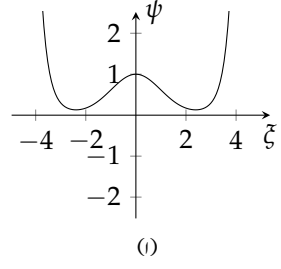
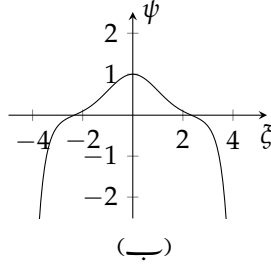
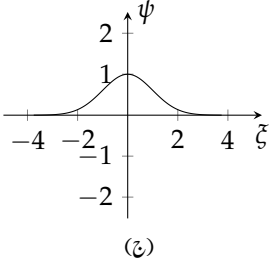
$$K = 2n + 1$$

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، مساوات شرودنگر کے طاق تسلسل حل کے ایک تکنیکی نقطہ سے حاصل ہوتی ہے۔ آئیں اسے ایک مختلف نقطہ نظر سے دیکھتے ہیں۔ یقیناً E کے کسی بھی قیمت کے لئے مساوات ۲.۷۰ کے حل ممکن ہیں (درحقیقت ہر E کے لیے اس کے دو خطی غیر متابع حل پائے جاتے ہیں)۔ تاہم ان میں سے زیادہ تر حل، بڑی x پر، بے متابو قوت نمائی بڑھتے ہیں جس کی بنا پر یہ متبادل معمولی حل ہوں گے۔ مثال کے طور پر فرض کریں ہم E کی کسی ایک احبازی قیمت سے معمولی کم قیمت (مثلاً $0.49 \hbar \omega$) لے کر حل کو ترسیم کرتے ہیں (شکل ۲.۶-۱)؛ اس کی دم لامتناہی کی طرف بڑھے گی۔ اب E کی قیمت کسی ایک احبازی قیمت سے معمولی زیادہ (مثلاً $0.51 \hbar \omega$) تصور کر کے حل کو ترسیم کرتے ہیں؛ اب حل کی دم^{۵۷} دوسری سمت میں لامتناہی کی طرف بڑھے گی (شکل ۲.۶-۲)۔ اگر ہم اس مقدار معلوم کی قیمت 0.49 اور 0.51 کے بیچ چھوٹے چھوٹے قدم لے کر تبدیل کریں تو ہر مرتبہ 0.50 سے گزرتے ہوئے حل کی دم الٹ (مخالف) طرف لامتناہی کی طرف بڑھے گی۔ ٹھیک 0.50 پر اس کی دم صفر کو پہنچ کر متبادل معمولی حل دے گی (شکل ۲.۶-۳)۔

^{۵۶} یہ حیرت کی بات نہیں کہ مساوات ۲.۸۱ میں بدحوہ حل بھی شامل ہے۔ یہ کلیہ تو اپنی ہر لحاظ سے مساوات شرودنگر کا معادل ہے لہذا اس میں لازماً دو دونوں متعارفی حل شامل ہوں گے جنہیں ہم نے مساوات ۲.۷۳ میں حاصل کیا۔
^{۵۷} ہم اس کو دم بلانے (wag the tail) کی ترکیب کہہ سکتے ہیں۔ جب بھی دم بلے، آپ حبان حبان کہ آپ احبازی توانائی پر سے گزرے ہیں۔



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

کلیہ توانی K کی اجزائی 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 (نہیں) $a_1 = 0$ لینا ہو گا تاکہ h خارج ہوں، اور مساوات ۲.۸۴ میں $j = 0$ سے $a_2 = 0$ حاصل ہوتا ہے:

$$h_0(\xi) = a_0$$

لہذا

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

(جو مساوئے معمول زنی، مساوات ۲.۵۹ دوبارہ دیتی ہے)۔ اسی طرح ہم $n = 1$ کے لیے $a_0 = 0$ لیں گے ^{۵۸}، اور مساوات ۲.۸۴ میں $j = 1$ سے $a_3 = 0$ حاصل ہو گا، لہذا

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

اور

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

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

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

^{۵۸} دھیان رہے کہ n کی ہر ایک قیمت کے لئے عددی سروں a_j کا ایک منسرد سلسلہ پایا جاتا ہے۔

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

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

اور

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

ہوں گے، وغیرہ وغیرہ۔ (سوال ۲.۱۰ کے ساتھ موازنہ کریں جہاں یہ آخری منتخب الجبرائی ترکیب سے حاصل کیا گیا۔) عمومی طور پر $h_n(\xi)$ متغیر ξ کا n درجی کشیرر کنی ہوگا، جو جفت عدد صحیح n کی صورت میں جفت طاقتوں کا اور طاق عدد صحیح n کی صورت میں طاق طاقتوں کا کشیرر کنی ہوگا۔ جب وضربی a_0 اور a_1 کے علاوہ یہ عین ہرمانٹ کشیرر کنی $H_n(\xi)$ ہیں ۵۹ ۔ جدول ۲.۱ میں اس کے چند ابتدائی ارکان پیش کیے گئے ہیں۔ روایتی طور پر اختیاری جب وضربیوں منتخب کیا جاتا ہے کہ ξ کے بلند تر طاقت کا عددی سر 2^n ہو۔ اس روایت کے تحت ہارمونی مرتعش کے معمول شدہ ۱۰ ساکن حالات درج ذیل ہوں گے

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

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

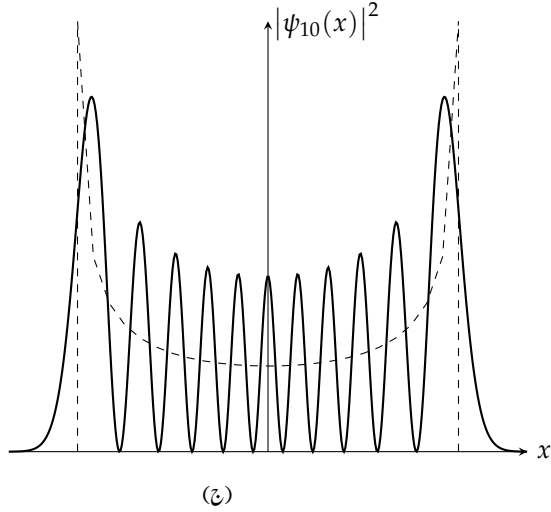
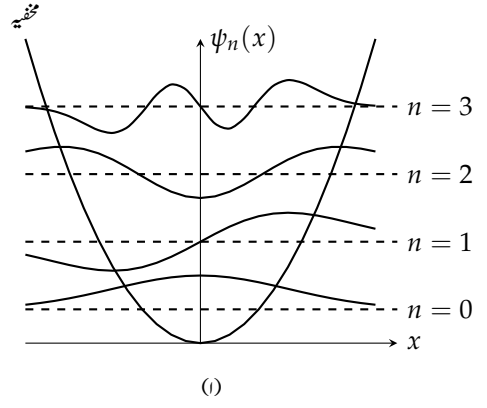
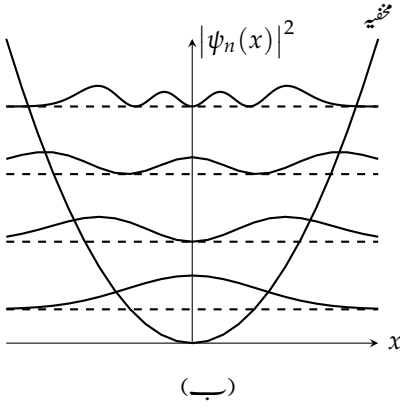
سوال ۲.۱۵: ہارمونی مرتعش کے زمینی حال میں کلاسیکی احبازتی خطے کے باہر ایک ذرہ کی موجودگی کا احتمال (تین با معنی ہندسوں تک) تلاش کریں۔ اشارہ: کلاسیکی طور پر ایک مرتعش کی توانائی $E = (1/2)ka^2$ ہوگی جہاں a جیلے ہے۔ یوں توانائی E کے مرتعش کا ”کلاسیکی احبازتی خطہ“ $\sqrt{2E/m\omega^2}$ تا $\sqrt{2E/m\omega^2}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

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

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

Hermite polynomials^{۵۹}

^{۱۰} ہرمانٹ کشیرر کنیوں پر سوال ۲.۱۷ میں مزید غور کیا گیا ہے۔
^{۱۱} میں یہاں معمولی زنی مستقامت حاصل نہیں کروں گا۔



شکل ۲: پارمونی سر تعش کے ابتدائی چار ساکن حالات۔

۱. کلیہ روڈریگیس^{۱۲} درج ذیل کہتا ہے۔

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

اس کو استعمال کر کے H_3 اور H_4 اخذ کریں۔

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

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

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

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

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

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

د. پیدا کار تفاعل^{۱۳} $e^{-z^2+2z\xi}$ کا $z=0$ پر n واں تفرق $H_n(\xi)$ ہوگا، یاد دوسرے لفظوں میں، درج ذیل تفاعل کے ٹیلر توسیع میں یہ $z^n/n!$ کا عددی سر ہوگا۔

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

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

۲.۴ آزاد ذرہ

ہم اب آزاد ذرہ (جس کے لیے پر جگہ $V(x) = 0$ ہوگا) پر غور کرتے ہیں جس سادہ ترین صورت ہونی چاہیے تھی۔ کلاسیکی طور پر اس سے مراد مستقل سمتی رفتار ہوگی، لیکن کوانٹائی میکانیات میں یہ مسئلہ حیران کن حد تک پیچیدہ اور پراسرار ثابت ہوتا ہے۔ غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر 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 چوکور کنویں (مساوات ۲.۲۱) کی مانند ہے جہاں (بھی) مخفی قوتہ 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 حبلہ عیاں ہوگی۔

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

لامتناہی چوکور کنویں کے برعکس، یہاں کوئی سرحدی شرائط نہیں پائے جاتے ہیں جو k (اور یوں E) کی ممکنہ قیمتوں پر کسی قسم کی پابندی عائد کرتے ہوں؛ لہذا آزاد ذرہ کسی بھی (مثبت) توانائی کا حامل 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^{۶۳} کی ایک اٹل قیمت کا یوں مطابقتی ہوگا کہ درج ذیل ہو۔

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

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 (انتہائی 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 ”سکن حالات“ حرکت کرتی امواج کو ظاہر کرتے ہیں، جن کی طول موج $\lambda = 2\pi/|k|$ ہوگا، اور کلیہ ڈی بروگلی (مساوات ۱.۳۹) کے تحت ان کا معیار حرکت درج ذیل ہوگا۔

$$(۲.۹۶) \quad p = \hbar k$$

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

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

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

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

ظاہری طور پر کوانٹائی میکانیکی تعامل موج اس ذرے کی نصف رفتار سے حرکت کرتا ہے جس کو یہ ظاہر کرتا ہے۔ اس نصف دیرمیں غور کریں گے۔ اس سے پہلے ایک زیادہ سنگین مسئلہ پر غور کرنا ضروری ہے۔ درج ذیل کے تحت یہ تعامل موج تا بل معمول زنی 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 طبیعی 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 کاہرگز یہ مطلب نہیں کہ متابل علیحدگی حل ہمارے کسی کام کے نہیں ہیں، کیونکہ یہ طبیعی مفہوم سے آزاد، ریاضیاتی کردار ادا کرتے ہیں۔ تاجع وقت مساوات شرودنگر کا عمومی حل اب بھی 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 مکمل ہوگا)۔

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

(ہم $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ کو اپنی آسانی کیلئے مکمل کے باہر نکالتے ہیں؛ مساوات ۲.۱۷ میں عددی سر c_n کی جگہ یہاں $\phi(k) dk$ ($1/\sqrt{2\pi}$) کردار ادا کرتا ہے۔) اب اس تعامل موج کی (موزوں $\phi(k)$ کیلئے) معمول زنی کی جاسکتی ہے۔ تاہم اس میں k کی قیمتوں کی سعت پائی جائے گی، لہذا توانائیوں اور رفتاروں کی بھی سعت پائی جائے گی۔ ہم اس کو موجی اکٹھے^{۹۵} کہتے ہیں۔^{۹۶}

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

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

wave packet^{۹۵}

سائنس امواج کی وسعت لامتناہی تک پہنچتی ہے اور یہ تا بل معمول زنی ہوتی ہیں۔ تاہم ایسی امواج کا خطی میل تباہ کن مداخلت پیدا کرتا ہے، جس کی بہت پر معتام ہندی اور معمول زنی ممکن ہوتی ہے۔

پر پورا اترتا ہوا $\psi(k)$ کیے تعین کیا جائے؟ یہ فوریرس تجزیہ کا کلاسیکی مسئلہ ہے جس کا جواب مسئلہ پلانشرال^{۶۷}:

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

پیش کرتا ہے (سوال ۲.۲۰ دیکھیں)۔ $F(k)$ کو $f(x)$ کا فوریر بدل^{۶۸} کہا جاتا ہے جبکہ $f(x)$ کو $F(k)$ کا الٹے فوریر بدل^{۶۹} کہتے ہیں (ان دونوں میں صرف قوت نسا کی علامت کا فرق پایا جاتا ہے)۔ ہاں، احبازتی تفاعل پر کچھ پابندی ضرور عائد ہے: مکمل کا موجود^{۷۰} ہونا لازم ہے۔ ہمارے مقاصد کے لئے، تفاعل $\Psi(x, 0)$ پر بذات خود معمول شدہ ہونے کی طبعی شرط مطابقت کرنا اس کی ضمانت دے گا۔ یوں آزاد ذرے کے عمومی کوانٹائی مسئلہ کا حل مساوات ۲.۱۰۰ ہو گا جہاں $\phi(k)$ درج ذیل ہو گا۔

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

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

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

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

حل: ہم پہلے $\Psi(x, 0)$ کی معمول زنی کرتے 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 ۲.۱۰۳ استعمال کرتے ہوئے $\psi(k)$ تلاش کرتے ہیں۔

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

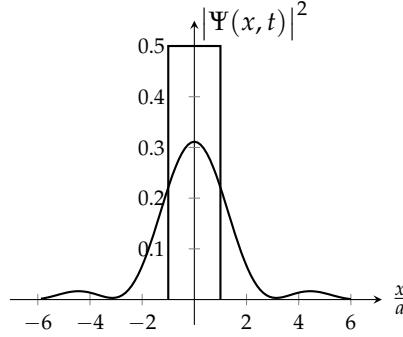
^{۶۷} Plancherel's theorem

^{۶۸} Fourier transform

^{۶۹} inverse Fourier transform

^{۷۰} تفاعل $f(x)$ پر عائد لازم اور کافی پابندی یہ ہے کہ $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx$ مستثنائی ہو۔ (ایسی صورت میں $\int_{-\infty}^{\infty} |F(k)|^2 dk$ بھی

مستثنائی ہو گا، اور حقیقتاً ان دونوں تعلقات کی قیمتیں ایک جتنی ہوں گی۔ Arfken کے حصہ 5.15 میں حاشیہ 24 دیکھیں۔)



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

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

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\pi\sqrt{2a}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(ka)}{k} e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} dk \quad (2.104)$$

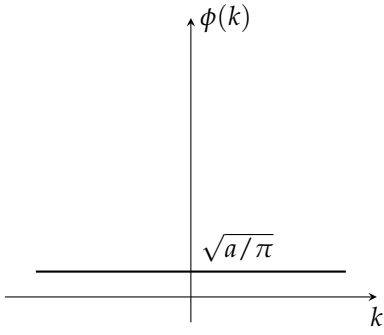
بد قسمتی سے اس عمل کو بنیادی تفاعل کی صورت میں حل کرنا ممکن نہیں ہے، تاہم اس کی قیمت کو اعدادی تراکیب سے حاصل کیا جاسکتا ہے (شکل ۲.۸)۔ ایسی بہت کم صورتیں حقیقتاً پائی جاتی ہیں جن کے لئے $\Psi(x, t)$ کا عمل (مساوات ۲.۱۰۰) صریحاً حل کرنا ممکن ہو۔ سوال ۲.۲۲ میں ایسی ایک بالخصوص خوبصورت مثال پیش کی گئی ہے۔

آئیں ایک تحدیدی صورت پر غور کریں۔ اگر a کی قیمت بہت کم ہو تب ابتدائی تفاعل موج خوبصورت مقامی نوکیلی صورت اختیار کرتی ہے (شکل ۲.۹)۔ ایسی صورت میں ہم چھوٹے زاویوں کے لئے تخمیناً $\sin ka \approx ka$ لکھ کر درج ذیل حاصل کرتے ہیں

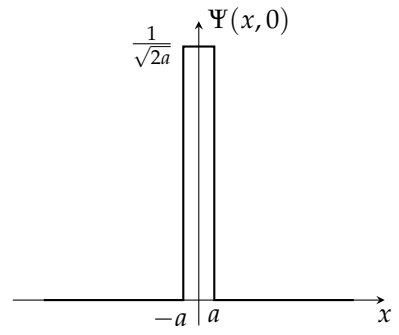
$$\phi(k) \approx \sqrt{\frac{a}{\pi}}$$

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

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

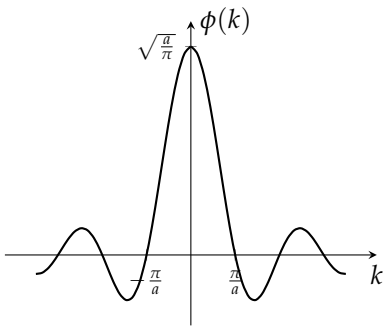


(ب)

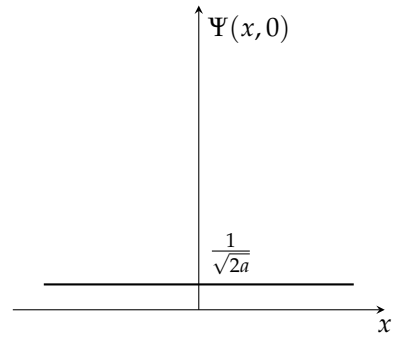


(۱)

شکل ۳.۹: چھوٹے a کے لئے مثال ۲.۶- (۱) $\Psi(x, 0)$ کی ترسیم؛ (ب) $\phi(k)$ کی ترسیم۔

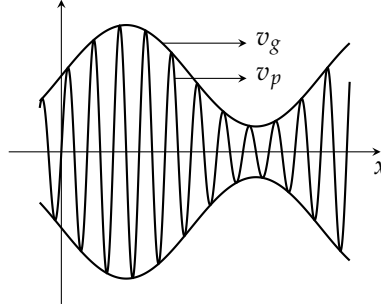


(ب)



(۱)

شکل ۳.۱۰: بڑی a کے لئے (۱) $\Psi(x, 0)$ کی ترسیم، (ب) $\phi(k)$ کی ترسیم (مثال ۲.۶)۔



شکل ۲.۱۱: موجی اکٹھ۔ ”علائف“ گروہی سمتی رفتار جبکہ لہر دوری سمتی رفتار سے حرکت کرتی ہے۔

اب $\sin z/z$ کی زیادہ سے زیادہ قیمت $z = 0$ پر پائی جاتی ہے جو گھٹ کر $z = \pm\pi$ (جو یہاں $k = \pm\pi/a$ کی صورت اختیار کرے گا) (شکل ۲.۱۰)۔ اس بار ذرے کی معیار حرکت اچھی طرح معین ہے جبکہ اس کا مقام صحیح طور پر معلوم نہیں ہے۔ □

آئیں اب اس تضاد پر دوبارہ بات کریں جس کا ذکر ہم پہلے کر چکے: جہاں مساوات ۲.۹۴ میں دیا گیا علیحدگی حل $\Psi_k(x, t)$ ، ٹھیک اس ذرہ کی رفتار سے حرکت نہیں کرتی ہے جس کو یہ نظر ظاہر کرتی ہے۔ حقیقتاً یہ مسئلہ وہیں پر ختم ہو گیا تھا جب ہم جان چکے کہ Ψ_k طبیعی طور پر متبادل حصول حل نہیں ہے۔ بحر حال آزاد ذرے کی تعامل موج (مساوات ۲.۱۰۰) میں سمونی سمتی رفتار کی معلومات پر غور کرنا دلچسپی کا باعث ہے۔ بنیادی تصور کچھ یوں ہے: سائن متفاعلات کا خطی میل جس کے حیظ کو ϕ ترمیم کرتا ہو (شکل ۲.۱۱) موجی اکٹھ ہوگا؛ یہ ”علائف“ میں ڈھانکے ہوئے ”لہروں“ پر مشتمل ہوگا۔ انفرادی لہر کی رفتار، جس کو دوری سمتی رفتار (v_p) کہتے ہیں، ہر گز ذرے کی سمتی رفتار کو ظاہر نہیں کرتی ہے بلکہ علائف کی رفتار، جس کو گروہی سمتی رفتار (v_g) کہتے ہیں، ذرے کی رفتار ہوگی۔ علائف کی سمتی رفتار لہروں کی فطرت پر منحصر ہوگی؛ یہ لہروں کی سمتی رفتار سے زیادہ، کم یا اس کے برابر ہو سکتی ہے۔ ایک دھاگے پر امواج کی گروہی سمتی رفتار اور دوری سمتی رفتار برابر ہوتی ہیں۔ پانی کی امواج کیلئے یہ دوری سمتی رفتار کی نصف ہوگی، جیسا آپ نے جھیل میں پتھر پھینک کر دیکھا ہوگا (اگر آپ پانی کی ایک مخصوص لہر پر نظر جمائے رکھیں تو آپ دیکھیں گے کہ، پیچھے سے آگے کی طرف بڑھتے ہوئے، آغاز میں اس لہر کا حیظ بڑھتا ہے جبکہ آخر میں آگے پیچھے کر اس کا حیظ گھٹ کر صفر ہو جاتا ہے؛ اس دوران یہ تمام بطور ایک مجموعہ نصف رفتار سے حرکت کرتا ہے۔) یہاں میں نے دکھانا ہوگا کہ کوانٹائی 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 جا رہا ہوں وہ کسی بھی موجی اکٹھ کیلئے، اس کے انتشاریہ رشتہ^۴ (ω کا متغیر k کے لحاظ سے کلیہ) سے قطع نظر، درست ہوگا۔ ہم فرض کرتے ہیں کہ کسی مخصوص قیمتی k_0 پر $\phi(k)$ نوکیلی صورت اختیار کرتا ہے۔ (ہم زیادہ وسعت کا k بھی لے سکتے ہیں لیکن ایسے موجی اکٹھ کے مختلف اجزاء مختلف رفتار سے حرکت کرتے ہیں جس کی بنا پر یہ 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 و متابل نظر انداز ہے لہذا ہم تعامل $\omega(k)$ کو اس نقطہ کے گرد ٹیلر تسلسل سے پھیلانے کا 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۔

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

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

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 مکمل ہے۔ یوں درج ذیل ہوگا۔

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

ماسوائے دوری 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:

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

باب ۲. غیر تاجع وقت مساوات شرودنگر

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

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

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

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

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

سوال ۲.۱۹: مساوات ۲.۹۴ میں دی گئی آزاد ذرے کے تفاعل موج کا احتمال رو J تلاش کریں (سوال 14.1 دیکھیں)۔ احتمال رو کے ہوا و کار کیا ہوگا؟

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

۱. مسئلہ ڈرشلے کہتا ہے کہ وقفہ $[-a, +a]$ پر کسی بھی تفاعل $f(x)$ کو فوریرسز تسلسل تو سب سے ظاہر کیا جا سکتا ہے:

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

دکھائیں کہ اس کو درج ذیل معادل روپ میں بھی لکھا 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. فوریرسز تسلسل کے عددی سروں کے حصول کی مساواتوں سے درج ذیل اخذ کریں۔

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

ج. n اور c_n کی جگہ نئے متغیرات $k = (\frac{n\pi}{a})$ اور $k = \sqrt{\frac{2}{\pi}} ac_n$ استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ
 حبزہ-۱ اور حبزہ-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 گی۔ اس کے باوجود حد $a \rightarrow \infty$ کی صورت میں ان دونوں کی ساخت مشابہت رکھتی ہیں۔

سوال ۳.۲۱: ایک آزاد ذرے کا ابتدائی تقاضا عمل موج درج ذیل ہے

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

جہاں A اور a مثبت حقیقی مستقل ہیں۔

ا. $\Psi(x, 0)$ کی معمول زنی کریں۔

ب. $\phi(k)$ تلاش کریں۔

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

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

سوال ۳.۲۲: گاؤس موج اکٹھا ایک آزاد ذرے کا ابتدائی تقاضا عمل موج درج ذیل ہے

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

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

ا. $\Psi(x, 0)$ کی معمول زنی کریں۔

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

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

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

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

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

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

وقت $t = 0$ پر $|\Psi|^2$ کا حاکہ (بطور x کا تفاعل) بنائیں۔ کسی بڑے t پر دوبارہ حاکہ 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۔

ه. 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 تفاعل مخفیہ

۲.۵.۱ مقید حالات اور بکھراو حالات

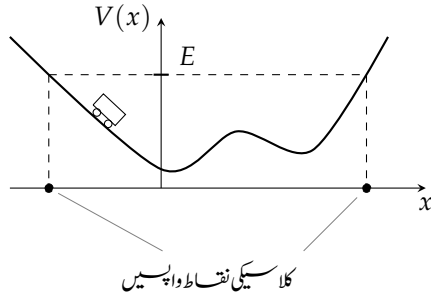
ہم غیر تابع وقت مساوات شرودنگر کے دو مختلف حل دیکھ چکے ہیں: لامتناہی چوکور کنواں اور ہارمونی سرقتش کے حل قابل معول زنی تھے اور انہیں غیر مسلسل اعشاریہ n کے لحاظ سے نام دیا جاتا ہے؛ آزاد ذرے کے لیے یہ قابل معول زنی ہیں اور انہیں استمراری متغیر k کے لحاظ سے نام دیا جاتا ہے۔ اول الذکر بذات خود طبعی طور پر قابل حصول حل کو ظاہر کرتے ہیں جبکہ موخر الذکر ایسا نہیں کرتے ہیں؛ تاہم دونوں صورتوں میں تابع وقت مساوات شرودنگر 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) عمل ہوگا۔ اس امتیاز کی طبعی اہمیت کیا ہے؟

کلاسیکی میکانیات میں یک بعدی غیر تابع وقت مخفیہ دو مکمل طور پر مختلف حرکات پیدا کر سکتی ہے۔ اگر $V(x)$ ذرے کی کل توانائی E سے دونوں جانب زیادہ بلند ہو (شکل ۲.۱۲-۱) تب یہ ذرہ اس مخفی توانائی کے کنویں میں ”پھنسا“ رہے گا: یہ **واپس** نقاط^{۷۳} کے بیچ آگے پیچھے حرکت کرتا رہے گا اور کنویں سے باہر نہیں نکل سکے گا (ماسوائے اس صورت میں کہ آپ اسے اضافی توانائی مہر اہم کریں جس کی ابھی ہم بات نہیں کر رہے ہیں)۔ ہم اسے مقید **حالت**^{۷۴} کہتے ہیں۔ اس کے برعکس اگر E ایک (یا دونوں) جانب $V(x)$ سے تجاوز کرے تب، لامتناہی سے آتے ہوئے، مخفی توانائی کے زیر اثر ذرہ اپنی رفتار کم یا زیادہ کرے گا اور اس کے بعد واپس لامتناہی کو لوٹے گا (شکل ۲.۱۲-۲)۔ (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**^{۷۵} کہتے ہیں۔ بعض مخفی توانائیاں صرف مقید حال پیدا کرتی ہیں (مثلاً ہارمونی سرقتش)؛ 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۔

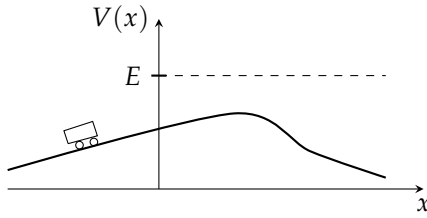
^{۷۳} turning points

^{۷۴} bound state

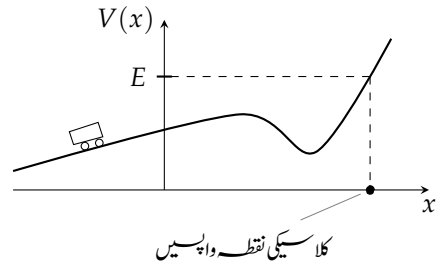
^{۷۵} scattering state



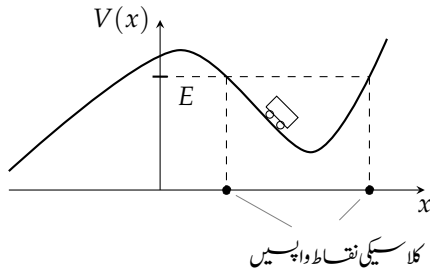
(i)



(ج)



(ب)



(د)

شکل ۲.۱۲: (i) مقید حال، (ب، ج) بچھراو حالات، (د) کلا سیکی مقید حال، لیکن کوانٹائی بچھراو حال۔

باب ۲. غیر تاج وقت مساوات شروڈنگر

مساوات شروڈنگر کے حلول کے دو اقسام ٹھیک انہیں مقید اور بکھراو حال کو ظاہر کرتی ہیں۔ کوانٹائی کے دائرہ کار میں یہ مندرجہ اس سے بھی زیادہ واضح ہے جہاں سرنگے زلف^{۷۷} (جس پر ہم کچھ دیر میں بات کریں گے) ایک ذرے کو کسی بھی مستثنای مخفیہ رکاوٹ کے اندر سے گزرنے دیتی ہے، لہذا مخفیہ کی قیمت صرف لامتناہی پر اہم ہوگی (شکل ۲.۱۲-د)۔

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

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

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

چونکہ $\pm\infty \rightarrow x$ پر لامتناہی چوکور کنویں اور ہارمونی سر تعش کی مخفی توانائیاں لامتناہی کو پہنچتی ہیں لہذا یہ صرف مقید حالات پیدا کرتی ہیں جبکہ آزاد ذرے کی مخفی توانائی ہر وقت پر صفر ہوتی ہے لہذا یہ صرف بکھراو حال^{۷۸} 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 تعامل کنواں

مبدأ پر لامتناہی کم چوڑائی اور لامتناہی بلند ایسا نوکیلا تعامل جس کا رقبہ اکائی ہو (شکل ۱3.2) ڈیلٹا تعامل^{۷۹} کہلاتا ہے۔

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

نقطہ $x = 0$ پر یہ تعامل مستثنای نہیں ہے لہذا تکنیکی طور پر اس کو تعامل کہنا غلط ہوگا (ریاضی دان اسے متعمم تعامل^{۸۰} یا متعمم تقسیم^{۸۱} 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 ہر ایک ڈیلٹا تعامل ہوگا)۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ $\delta(x - a)$ نقطہ a پر اکائی رقبہ کا نوکیلی تعامل ہوگا۔ چونکہ $\delta(x - a)$ اور ایک سادہ تعامل $f(x)$ کا

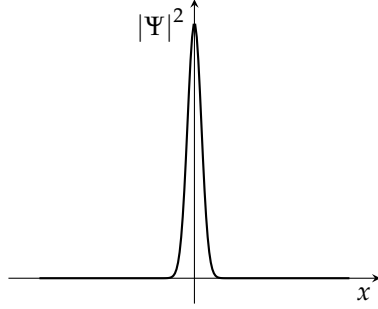
تunneling^{۷۷} آپ کو یہاں پر روشنی کا منہ ہو سکتا ہے کیونکہ عمومی مسئلہ جس کے لئے $E > V$ درکار ہے (سوال ۲.۲)، بکھراو حال، جو نامقابل معمول زنی ہیں، پر لاگو نہیں ہوگا۔ اگر آپ اس سے مطمئن نہیں ہیں تب $E \leq 0$ کے لئے مساوات شروڈنگر کو آزاد ذرہ کے لئے حل کر کے دیکھیں کہ اس کے خطی جوڑ بھی نامقابل معمول زنی ہیں۔ صرف مثبت مخفی توانائی حل مکمل سلسلہ دیں گے۔

Dirac delta function^{۷۹}

generalized function^{۸۰}

generalized distribution^{۸۱}

^{۸۲} ڈیلٹا تعامل کو ایسے مستطیل (یا مثلث) کی تحدیدی صورت تصور کیا جاسکتا ہے جس کی چوڑائی بہت درجہ کم اور قد بہت درجہ بڑھتا ہو۔



شکل ۲.۱۳: ڈیراک ڈیلٹا فنکشن (مساوات ۲.۱۱۱)

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

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

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

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

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

آئیں درج ذیل روپ کے مخفیہ پر غور کریں جہاں α ایک مثبت مستقل ہے۔^{۸۳}

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

یہ جان لینا ضروری ہے کہ (لامست نمانی چو کور کنویں کی مخفیہ کی طرح) یہ ایک مصنوعی مخفیہ ہے، تاہم اس کے ساتھ کام کرنا نہایت آسان ہے، اور جو کم سے کم تحلیلی پریشانیاں پیدا کیے بغیر، بنیادی نظریہ پر روشنی ڈالنے میں مددگار ثابت ہوتا ہے۔ ڈیلٹا فنکشن کنویں کے لیے مساوات شرودنگر 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۔

^{۸۳} ڈیلٹا فنکشن کی اکائی ایک بٹ السبائی ہے (مساوات ۲.۱۱۱ دیکھیں) لہذا α کا بُعد توانائی ضرب السبائی ہوگا۔

باب ۲. غیر تاج وقت مساوات شرودنگر

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 حقیقی ہوگا لہذا k حقیقی اور مثبت ہے۔)

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

مساوات ۲.۱۱۶ کا عمومی حل

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

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

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

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

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

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

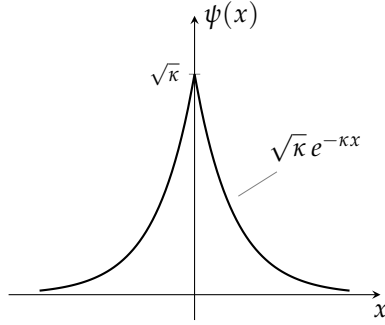
$$(۲.۱۲۱) \quad \begin{cases} 1. & \psi \text{ لازماً استمراری} \\ 2. & \frac{d\psi}{dx} \text{ استمراری، ماسوائے ان نقاط پر جہاں مخفی لامتناہی ہو} \end{cases}$$

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

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

تفاعل $\psi(x)$ کو شکل ۲.۱۴ میں ترسیم کیا گیا ہے۔ دوم سرحدی شرط ہمیں ایسا کچھ نہیں بتاتی ہے؛ (لا متناہی چوکور کنویں کی طرح) جوڑ پر مخفی لامتناہی ہے اور تفاعل کی ترسیل سے واضح ہے کہ $x = 0$ پر اس میں بل پایا جاتا ہے۔ مزید اب تک کی کہانی میں ڈیلٹا تفاعل کا کوئی کردار نہیں پایا گیا۔ ظاہر ہے کہ $x = 0$ پر ψ کے تفرق میں عدم استمراری ڈیلٹا تفاعل تعین 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۔

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



شکل ۲.۱۳: ڈیلتا فنکشنل مخفیہ (مساوات ۲.۱۲۲) کے لئے مقید حال فنکشنل موج۔

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

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

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

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

یہاں درج ذیل ہوگا (مساوات ۲.۱۲۲):

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

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 اجازتی 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 کی معمولی ذنی کرتے 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 فنکشن عمل کی ”زور“ α کے قطع نظر، ٹھیک ایک مقید حال دیتا ہے۔

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

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

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

جہاں

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

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

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

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

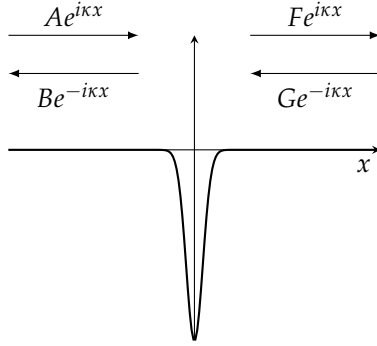
$$(۲.۱۳۲) \quad \psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx}$$

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

$$(۲.۱۳۳) \quad F + G = A + B$$

تفسیرات درج ذیل ہوں گے۔

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



شکل ۲.۱۵: ڈیٹا انتقال عمل کنویں سے بھراؤ۔

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

$$ik(F - G - A + B) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + B) \quad (2.132)$$

یا مختصراً:

$$F - G = A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta), \quad \beta \equiv \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \quad (2.135)$$

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

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

آمدی موج ^{۸۶} کا حیطہ A ، منعکس موج ^{۸۵} کا حیطہ B جبکہ ترسیل موج ^{۸۷} کا حیطہ F ہوگا۔ مساوات ۲.۱۳۳ اور ۲.۱۳۵ کو B اور F

incident wave ^{۸۶}
reflected wave ^{۸۵}
transmitted wave ^{۸۷}

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 جیٹ، F منعکس جیٹ، اور B ترسیلی جیٹ ہوں گے۔)

چونکہ کسی مخصوص مقام پر ذرے کی موجودگی کا احتمال $|\psi|^2$ ہوتا ہے لہذا آمدی ذرہ کے انعکاس کا تناسبی^{۸۷} احتمال درج ذیل ہوگا

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

جہاں R کو **شرح انعکاس**^{۸۸} 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**^{۸۹} 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 اور لہذا (مساوات ۲.۱۳۰ اور ۲.۱۳۵) E کے تفاعل ہوں گے۔

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

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

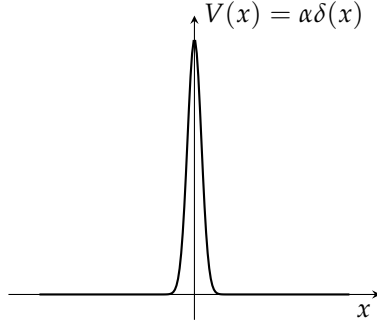
یہاں تک باقی سب ٹھیک ہے تاہم ایک اصولی مسئلہ باقی ہے جسے ہم نظر انداز نہیں کر سکتے ہیں۔ چونکہ بکھراؤ موج کے تفاعل ناقابل معمول زنی ہیں لہذا یہ کسی صورت بھی حقیقی ذرے کے حال کو ظاہر نہیں کر سکتے ہیں۔ تاہم ہم اس مسئلہ کا حل جانتے ہیں۔ جیسا ہم نے آزاد ذرہ کے لیے کیا تھا، ہمیں ساکن حالات کے ایسے خطی جوڑ تیار کرنے ہوں گے جو قابل معمول زنی ہوں۔ حقیقی طبعی ذرات کو یوں تیار کردہ موجی اکٹھے ظاہر کرے گا۔ یہ ظاہری طور پر سیدھا سادہ اصول ہے جو عملی استعمال میں پیچیدہ ثابت ہوتا ہے لہذا یہاں سے آگے مسئلہ کو کمپیوٹر کی مدد سے حل کرنا بہتر ہوگا۔^{۹۰} چونکہ

^{۸۷} یہ ناقابل معمول زنی تفاعل 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 پیراگراف میں اس پر مزید بات کی جائے گی۔

^{۸۸} reflection coefficient

^{۸۹} transmission coefficient

^{۹۰} توانوں اور رکاوٹوں سے موجی اکٹھے کے بکھراؤ کے اعدادی مطالعہ دلچسپ معلومات مندرجہ ذیل پر مبنی ہیں۔



شکل ۲.۱۶: ڈیلٹا تفاعل رکاوٹ۔

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

یہ ایک عجیب بات ہے کہ ہم اب اباب 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 (مادرات ۲.۱۳۱ اور ۲.۱۳۲ میں) ψ ایک مخلوط، غیر تابع وقت، ساکن تفاعل ہے جو (مستقل جیٹ کے ساتھ) دونوں اطراف لامتناہی تک پھیلا ہوا ہے۔ اس کے باوجود اس تفاعل پر موزوں سرحدی شرائط مل کر کے ہم ایک ذرہ (جسے مقامی موجی اکٹھ سے ظاہر کیا گیا ہو) کی مخفیہ سے انعکاس یا ترسیل کا احتمال تعین کر پاتے ہیں۔ اس ریاضیاتی کرامت کی وجہ میرے خیال میں یہ حقیقت ہے کہ ہم پوری فضا میں پھیلے ہوئے، حقیقتاً حقیر تابعیت وقت کے تفاعل موج کے خطی جوڑ لے کر ایک (حرکت پذیر) نقطہ کے گرد ایسا تفاعل موج تیار کر سکتے ہیں جس پر وقت کے لحاظ سے تفصیلاً غور کیا جاسکتا ہے (سوال ۲.۲۳)۔

متعلقہ مساوات جانتے ہوئے آئیں ڈیلٹا تفاعل رکاوٹ (شکل ۲.۱۶) کے مسئلہ پر غور کریں۔ ہمیں صرف α کی علامت تبدیل کرنی ہوگی۔ ظاہر ہے یہ تحدیدی حال کو ختم کرے گا (سوال ۲.۲)۔ دوسری جانب، شرح انعکاس اور شرح ترسیل جو α^2 پر منحصر ہیں تبدیل نہیں ہوں گے۔ کتنی عجیب بات ہے کہ ذرہ ایک رکاوٹ کے اندر سے یا ایک کنویں کے اوپر سے ایک جیسی آسانی کے ساتھ گزرتا ہے۔ کلاسیکی طور پر جیسا کہ آپ جانتے ہیں، ایک ذرہ کبھی بھی لامتناہی فاصلہ 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 بلند تر $E > V$ ہو تب $R = 0$ اور $T = 1$ ہوگا اور ذرہ ہر صورت رکاوٹ عبور کر پائے گا؛ اگر بلند تر $E < V$ ہو تب $R = 1$ اور $T = 0$ 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 بلند تر $E < V$ ہو تب بھی ایک ذرے کا مخفیہ عبور کرنے کا احتمال غیر صفر ہوگا۔ اس مظہر کو **سرنگے زنی**^۹ کہتے ہیں جس پر جدید برقیات کا بیشتر حصہ منحصر ہے اور جو خوردبین میں حیرت انگیز ترقی کا سبب بنا ہے۔ اس کے

^۹tunneling

باب ۲. غیر تاجع وقت مساوات شروڈنگر

برعکس بند $E > V$ کی صورت میں بھی ذرے کے انعکاس کا احتمال غیر صفر ہوگا؛ اگرچہ میں آپ کو کبھی بھی مشورہ نہیں دوں گا کہ چھت سے نیچے کودیں اور توقع رکھیں کہ کوانٹائی میکانیات آپ کی جان بچا پائے گی (سوال ۲.۳۵ دیکھیے گا)۔

سوال ۲.۲۳: درج ذیل کمالات کی قیمتیں تلاش کریں۔

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

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

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

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

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

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

ا. درج ذیل دکھائیں

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

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

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

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

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

سوال ۲.۲۵: عدم یقینیت کے اصول کو ۲.۱۴۹ کے تفاعل موج کے لئے پرکھیں۔ اشارہ چونکہ ψ کے تفرق کا $x = 0$ پر عدم استمرار پایا جاتا ہے لہذا $\langle p^2 \rangle$ کا حساب پیچیدہ ہوگا۔ سوال ۲.۲۴-ب کا نتیجہ استعمال کریں۔ جزوی جواب: $\langle p^2 \rangle = (ma/\hbar)^2$

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

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

تبصرہ: اس کلیہ دیکھ کر ایک عزت مند ریاضی دان پریشان ضرور ہوگا۔ اگرچہ $x = 0$ کے لئے یہ مکمل لامستثنائی ہے اور $x \neq 0$ کی صورت میں چونکہ مکمل ہمیشہ کے لئے ارتعاش پذیر رہتا ہے لہذا یہ (صفر یا کسی دوسرے عدد کو) مرکوز نہیں ہوتا ہے۔ اس کی پیوند کاری کے طریقے پائے جاتے ہیں (مثلاً، ہم $-L$ تا $+L$ مکمل لے کر، مساوات ۲.۱۴۴ کو، $L \rightarrow \infty$ کرتے ہوئے مستثنائی مکمل کی اوسط قیمت تصور کر سکتے ہیں)۔ یہاں دشواری کا سبب یہ ہے کہ مسئلہ پلانشرل کے (مربع تکاملیت) کی بنیادی شرط کو ڈیلٹا تفاعل مطمن نہیں کرتا ہے (صفحہ ۶۳ پر مربع تکاملیت کی شرط حاشیہ میں پیش کی گئی ہے)۔ اس کے باوجود مساوات ۲.۱۴۴ نہایت مددگار ثابت ہو سکتا ہے اگر اس کو احتیاط سے استعمال کیا جائے۔

سوال ۲.۲: درج ذیل حبڑواں ڈیلٹا تفاعل مخفیہ پر غور کریں جہاں α اور a مثبت مستقل ہیں۔

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

۱. اس مخفیہ کا خانہ کھینچیں۔

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

سوال ۲.۲۸: حبڑواں ڈیلٹا تفاعل کے مخفیہ (سوال ۲.۲) کے لئے شرح ترسیل تلاش کریں۔

۲.۶ مستثنائی چوکور کنواں

ہم آئندہ مشال کے طور پر مستثنائی چوکور کنویں کا مخفیہ

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

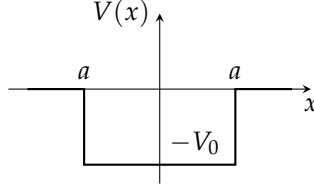
لیتے ہیں جہاں V_0 ایک (مثبت) مستقل ہے (شکل ۲.۱۷)۔ ڈیلٹا تفاعل کنویں کی طرح یہ مخفیہ مقید حالات (جہاں $E < 0$ ہوگا) کے ساتھ ساتھ بکھراؤ حالات (جہاں $E > 0$ ہوگا) بھی پیدا کرتا ہے۔ ہم پہلے مقید حالات پر غور کرتے ہیں۔

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

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

جہاں

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



شکل ۲.۱۷: مستطانی چوکور کنواں (مساوات ۲.۱۴۵)۔

حقیقی اور مثبت ہے۔ اس کا عمومی حل $\Psi(x) = Ae^{-kx} + Be^{kx}$ ہے لیکن $x \rightarrow -\infty$ کے صورت میں اس کا پہلا جزو بے فتابو بڑھتا ہے لہذا ہمیشہ طرح؛ مساوات ۲.۱۱۹ دیکھیں) طبی طور پر قابل قبول حل درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

جہاں l درج ذیل ہے۔

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

اگرچہ مقید حالات کے لئے E منفی ہے تاہم سرے $E > V$ کی بنا پر (سوال ۲.۲ دیکھیں) اس کو $-V_0$ سے بڑا ہونا ہو گا؛ لہذا l بھی حقیقی اور مثبت ہوگا۔ اس کا عمومی حل درج ذیل ہوگا^{۹۳}

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

جہاں C اور D اختیاری مستقلات ہیں۔ آخر میں، خط $x > a$ جہاں ایک بار پھر مخفیہ صفر ہے؛ عمومی حل $\psi(x) = Fe^{-kx} + Ge^{kx}$ ہوگا تاہم $x \rightarrow \infty$ کی صورت میں دوسرا جزو بے فتابو بڑھتا ہے لہذا قابل قبول حل درج ذیل ہوگا۔

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

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

^{۹۳} آپ چاہیں تو عمومی حل کو قوت نہائی روپ $(C'e^{ilx} + D'e^{-ilx})$ میں لکھ سکتے ہیں۔ اس سے بھی وہی اختیامی نتائج حاصل ہوں گے، تاہم تشکیلی مخفیہ کی بنا پر ہم جاننے ہیں کہ حل جفت یا طاق ہوں گے، اور \sin اور \cos کا استعمال اس حقیقت کو بجا واسطہ بروئے کار لا سکتا ہے۔

ہوں گے (سوال ۲.۱ ج۔) اس کا فائدہ یہ ہے کہ ہمیں صرف ایک جانب (مثلاً $a +$) پر سرحدی شرائط مطابقت کرنی ہوں گی؛ چونکہ $\psi(-x) = \pm \psi(x)$ ہے لہذا دوسری جانب کا حل ہمیں خود بخود حاصل ہوگا۔ میں جفت-جفت حل حاصل کرتا ہوں جبکہ آپ کو سوال ۲.۲۹ میں طاق حل تلاش کرنے کو کہا گیا ہے۔ \cos جفت ہے (جبکہ \sin طاق ہے) لہذا میں درج ذیل روپ کے حلوں کی تلاش میں ہوں۔

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

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

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

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

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

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

$$(۲.۱۵۴) \quad \kappa = l \tan(la)$$

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

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

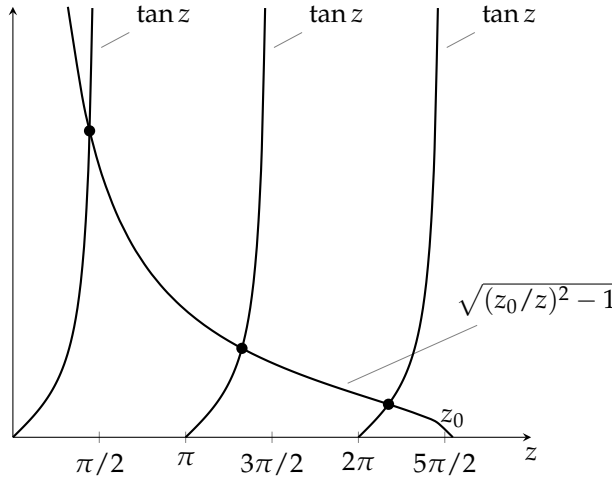
مساوات ۲.۱۴۶ اور ۲.۱۴۸ کے تحت $(\kappa^2 + l^2) = 2mV_0/\hbar^2$ ہوگا لہذا $\sqrt{z_0^2 - z^2} = \kappa a$ ہوگا اور مساوات ۲.۱۵۴ درج ذیل روپ اختیار کرے گی۔

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

یہ z (لہذا E) کی مادیاتی مساوات ہے جس کا متغیر z_0 ہے (جو کنویں کی ”جامت“ کی ناپ ہے)۔ اس کو اعدادی طریقہ سے کمپیوٹر کے ذریعے حل کیا جاسکتا یا $\tan z$ اور $\sqrt{(z_0/z)^2 - 1}$ کو ایک ساتھ ترسیم کر کے ان کے نقاط تقاطع لیتے ہوئے حل کیا جاسکتا ہے (شکل ۲.۱۸)۔ دو تحدیدی صورتیں زیادہ دلچسپی کے حامل ہیں۔

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

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



شکل ۲.۱۸: تریسی حل برائے مساوات ۲.۱۵۶ جہاں $z_0 = 8$ لیا گیا ہے (جفت حالات)۔

اب $E + V_0$ کنویں کی تہ سے زیادہ توانائی کو ظاہر کرتی ہے اور مساوات کا دایاں ہاتھ ہمیں $2a$ چوڑائی کے لامستثنائی چوکور کنویں کی توانائیاں دیتا ہے (مساوات ۲.۲۷ دیکھیں)؛ بلکہ n بیس طاق ہے لہذا توانائیوں کی نصف تعداد حاصل ہوگی۔ (جیسا آپ سوال ۲.۲۹ میں دیکھیں گے کل توانائیوں کی باقی نصف تعداد طاق تفاعل موج سے حاصل ہوگی۔) یوں $V_0 \rightarrow \infty$ کرنے سے مستثنائی چوکور کنواں سے لامستثنائی چوکور کنواں حاصل ہوگا؛ تاہم کسی بھی مستثنائی V_0 کی صورت میں مقید حالات کی تعداد مستثنائی ہوگی۔

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

اگر آپ ψ (مساوات ۲.۱۵۱) کی معمول زنی کرنے میں دلچسپی رکھتے ہیں (سوال ۲.۳۰) تو ایسا ضرور کریں جبکہ میں اب بکھراؤ حالات ($E > 0$) کی طرف بڑھنا چاہوں گا۔ بائیں ہاتھ جہاں $V(x) = 0$ ہے درج ذیل ہوگا

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

جہاں ہمیشہ کی طرح درج ذیل ہوگا۔

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

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

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

جہاں پہلے کی طرح درج ذیل ہوگا۔

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

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

$$(۲.۱۶۲) \quad \psi(x) = Fe^{ikx}$$

یہاں آمدی جیٹ A ، انعکاسی جیٹ B اور ترسیلی جیٹ F ہے۔^{۹۴}

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

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

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

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

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

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

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

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

ہم ان میں سے دو کو استعمال کرتے ہوئے C اور D حارج کر کے باقی دو کو B اور F کے لئے حل کر سکتے ہیں (سوال ۲.۳۲ دیکھیے گا)۔

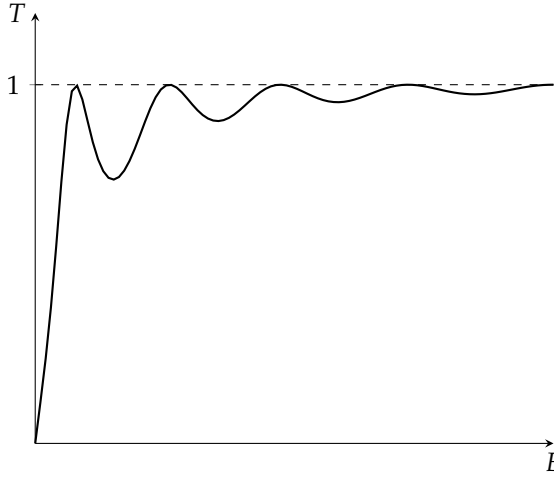
$$(۲.۱۶۷) \quad B = i \frac{\sin(2la)}{2kl} (l^2 - k^2) F$$

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

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

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

^{۹۴} مقید حالات کی صورت میں ہم نے طاق اور جفت تفصیلات تلاش کیے۔ ہم یہاں بھی ایسا کر سکتے ہیں، تاہم مسئلہ بچھراؤ میں امواج صرف ایک رخ سے آتے ہیں لہذا یہ مسئلہ ذاتی طور پر غیر متشکلی ہے اور سیاق و سباق کے لحاظ سے (حسرت پذیر امواج کے اظہار کے لئے) قوت نسبی علامت کا استعمال زیادہ موثر ہے۔



شکل ۲.۱۹: ترسیلی مستقل بطور توانائی کا تفاعل (مساوات ۲.۱۶۹)۔

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

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

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

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

جو عین لامستثنائی چوکر کنویں کی احبازتی توانائیاں ہیں۔ شکل ۲.۱۹ میں توانائی کے لحاظ سے T ترسیم کیا گیا ہے۔^{۹۵}

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

سوال ۲.۳۰: مساوات ۲.۱۵۱ میں دیے گئے $\psi(x)$ کی معمول زنی کر کے مستقل D اور F تعین کریں۔

سوال ۲.۳۱: ڈیراک ڈیلٹا تفاعل کو ایک ایسی مستطیل کی تحدیدی صورت تصور کیا جاسکتا ہے، جس کا رقبہ اکائی (1) رکھتے ہوئے اس کی چوڑائی صفر تک اور فت لامستثنائی تک پہنچائی جائے۔ دکھائیں کہ ڈیلٹا تفاعل کنواں (مساوات ۲.۱۱۴) لامستثنائی گہرا ہونے کے باوجود $0 \rightarrow z_0$ کی بسا پر ایک ”کمزور“ مخفیہ ہے۔ ڈیلٹا تفاعل مخفیہ کو مستثنائی چوکر کنویں کی تحدیدی صورت ایسے ہوئے اس کی مقید حال کی توانائی تعین کریں۔ تصدیق کریں کہ آپ

^{۹۵} اس حیرت کن مظہر کا مشاہدہ تجربہ گاہ میں بطور مرآہ اور وٹو لنڈا اثر (Ramsauer-Townsend effect) کیا گیا ہے۔

کا جواب مساوات ۲.۱۲۹ کے مطابق ہے۔ دکھائیں کہ موزوں حد کی صورت میں مساوات ۲.۱۶۹ کی تخفیف مساوات ۲.۱۴۱ دے گی۔

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

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

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

سوال ۲.۳۳: مستطیلی رکاوٹ (جسے خط $-a < x < a$ میں $V(x) = +V_0 > 0$ سے مساوات ۲.۱۴۵ دیتی ہے) کے لئے شرح ترسیل تعین کریں۔ تین صورتوں $E < V_0$ ، $E = V_0$ اور $E > V_0$ کو علیحدہ علیحدہ حل کریں۔ (آپ دیکھیں گے کہ رکاوٹ کے اندر تینوں صورتوں میں تغیر عمل موج ایک دوسرے سے مختلف ہوں گے۔) حبزوی جواب: $E < V_0$ کے لئے درج ذیل ہوگا۔^{۹۶}

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

سوال ۲.۳۴: درج ذیل سیڑھی مخفیہ پر غور کریں۔

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

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

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

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

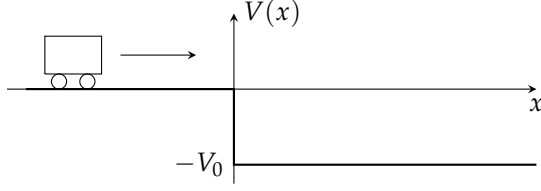
$$(۲.۱۷۲) \quad T = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}} \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

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

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

سوال ۲.۳۵: ایک ذرہ جس کی کمیت m اور حرکی توانائی $E > 0$ ہو مخفیہ کی ایک اچانک گہرائی (شکل ۲.۲۰) کی طرف بڑھتا ہے۔

^{۹۶} یہ سرنگ زنی کی ایک اچھی مثال ہے۔ کلاسیکی طور پر ذرہ رکاوٹ سے ٹکرانے کے بعد واپس لوٹے گا۔



شکل ۲.۲۰: عمودی چٹان سے بکھراؤ (سوال ۲.۳۵)۔

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

ب. میں نے مخفیہ کی شکل و صورت یوں پیش کی ہے گویا ایک گاڑی افقی چٹان سے نیچے گرنے والی ہے تاہم ایسی کھائی سے گاڑی کا ٹکراؤ واپس لوٹنے کا احتمال حبزو-۱ کے نتیجے سے بہت کم ہوگا۔ یہ مخفیہ کیوں ایک افقی چٹان کی صحیح ترجمانی نہیں کرتا ہے؟ اشارہ: شکل ۲.۲۰ میں جیسے ہی گاڑی نقطہ $x = 0$ پر سے گزرتی ہے، اس کی توانائی عدم استمرار کے ساتھ گر کر $-V_0$ ہو جاتی ہے؛ کیا یہ نیچے گرتے ہوئی گاڑی کے لیے درست ہوگا؟

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

مزید سوالات برائے باب ۲

سوال ۲.۳۶: عین مبداء پر $-a < x < +a$ کے بیچ لامتناہی چوکور کنویں کے اندر $V(x) = 0$ اور اس کے باہر $V(x) = \infty$ ہے۔ غیر تاجع وقت مساوات شرودنگر پر موزوں سرحدی شرائط مل کر کے اسے حل کریں۔ تصدیق کریں کہ آپ کی توانائیاں عین میری حاصل کردہ توانائیوں (مساوات ۲.۲۷) کے مطابق ہیں اور تصدیق کریں کہ میری ψ (مساوات ۲.۲۸) میں $(x+a)/2 \rightarrow x$ پر کر کے، موزوں معمول زنی سے آپ کی تمام ψ حاصل ہوتی ہیں۔ اپنے اولین تین حل ترسیم کریں اور ان کا موازنہ شکل ۲.۲ سے کریں۔ دھیان رہے کہ یہاں کنویں کی چوڑائی $2a$ ہے۔

سوال ۲.۳۷: لامتناہی چوکور کنویں (مساوات ۲.۱۹) میں ایک ذرے کا ابتدائی تغا عمل موج درج ذیل ہے۔

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

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

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

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

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

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

سوال ۲.۳۹:

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

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

ج. کس توانائی کیلئے یہ تجدیدی عرصہ ایک دوسرے کے برابر ہوں گے؟^{۹۸}

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

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

ا. اس کے مقید حلوں کی تعداد کیا ہوگی؟

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

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

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

ا. توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہے؟

^{۹۷} revival time

^{۹۸} غور طلب تفساد ہے کہ کلاسیکی اور کوانٹمی تجدیدی عرصوں کا ہر ایک دوسرے کے ساتھ کوئی تعلق نہیں پایا جاتا ہے (اور کوانٹمی تجدیدی عرصہ توانائی پر منحصر بھی نہیں ہے۔)

ب. مستقبل کے لمحہ T پر تفاعل موج درج ذیل ہوگا

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

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

سوال ۲.۴۲: درج ذیل نصف ہارمونی سرکش کی اجازتی توانائیاں تلاش کریں۔

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

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

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

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

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

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

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

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

سوال ۲.۴۵: ایسے دو یا دو سے زیادہ غیر تاجع وقت مساوات شرودنگر کے منفرد^{۹۹} حل جن کی توانائی E ایک جیسی ہو کو **انخطاطی**^{۱۰۰} کہتے ہیں۔ مثال کے طور پر آزاد ذرہ کے حال دوہری انخطاطی ہیں۔ ان میں سے ایک حل دائیں رخ اور دوسرا بائیں رخ حرکت کو ظاہر کرتا ہے۔ تاہم ہم نے ایسے کوئی انخطاطی حل نہیں دیکھے جو متابل معمول زنی ہوں اور یہ محض ایک اتفاق نہیں ہے۔ درج ذیل مسئلہ ثابت کریں: یک بُعدی مقید انخطاطی حال نہیں پائے جاتے ہیں۔^{۱۰۱} اشارہ:

^{۹۹} ایسے دو حل جن میں صرف جزو ضربی کا مندرق پایا جاتا ہو (جن میں، ایک مرتب معمول زنی کرنے کے بعد، صرف دوری جزو ϕ کا مندرق پایا جاتا ہو) درحقیقت ایک ہی حل کو ظاہر کرتے ہیں لہذا انہیں یہاں منفرد نہیں کہا جاسکتا ہے۔ یہاں ”منفرد“ سے مراد ”خطی طور پر غیر تاجع“ ہے۔
degenerate^{۱۰۰}

^{۱۰۱} عجیب! ہم باب ۳ میں دیکھیں گے، بلند ابعاد میں ایسی انخطاطی عام پائی جاتی ہیں۔ مندرج کریں کہ مخفی علیحدہ علیحدہ حصوں پر مشتمل نہیں ہے جن کے سچے نقطہ میں $V = \infty$ ہو۔ مثلاً دو تہی لامتناہی کنویں مقید انخطاطی حال دیں گے جہاں ذرہ ایک یا دوسرے کنویں میں پایا جائے گا۔

باب ۲. غیر تاجع وقت مساوات شرودنگر

دوسرے کے متضرب کھینچے گا یا انہیں ایک دوسرے سے دور رہنے پر مجبور کرے گا۔ (اگرچہ دوسرے کڑوں کے بیچ قوت دفع بھی پایا جاتا ہے تاہم اس کی بات یہاں نہیں کی جا رہی ہے۔)

سوال ۲.۳۸: آپ نے مساوات ۲.۳۹ کے تسلسل کا مجموعہ لیتے ہوئے سوال ۲.۷۲ میں توانائی کی توقعاتی قیمت تلاش کی جہاں حاشیہ میں آپ کو میں نے آگاہ کیا کہ اس کو $\langle H \rangle = \int \psi(x, 0)^* H \psi(x, 0) dx$ کے پرانے طریقے سے حاصل نہ کریں چونکہ $\psi(x, 0)$ کے پہلے تفرق میں عدم استمرار دوسرے تفرق کو پریشان کن بناتا ہے۔ حقیقت میں آپ مکمل بالخصوص کے ذریعے اسے حل کر سکتے تھے لیکن ڈیراک ڈیلٹا تفاعل اس طرح کے انوکھے مسائل حل کرنے کا ایک بہترین طریقہ فراہم کرتا ہے۔

ا. آپ سوال ۲.۷۲ میں $\psi(x, 0)$ کا پہلا تفرق حاصل کر کے اس کو سیدھی تفاعل $\theta(x - a/2)$ کی صورت میں لکھیں جسے مساوات ۲.۱۴۳ میں پیش کیا گیا ہے۔ (آخری سروں کی منکر نہ کریں، صرف اندرونی خطہ $0 < x < a$ کے لیے لکھیں۔)

ب. ابتدائی موجی تفاعل $\psi(x, 0)$ کے دوہرا تفرق کو سوال ۲.۲۴-ب کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے ڈیلٹا تفاعل کی صورت میں لکھیں۔

ج. مکمل $\int \psi(x, 0)^* H \psi(x, 0) dx$ کو حل کر کے اس کی قیمت حاصل کر کے تصدیق کریں کہ یہ وہی نتیجہ ہے جو آپ پہلے حاصل کر چکے ہیں۔

سوال ۲.۴۹:

ا. دکھائیں کہ ہارمونی سر تفرق کی مخفی توانائی (مساوات ۲.۴۳) کے لئے

$$\psi(x, t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} \left(x^2 + \frac{a^2}{2} (1 + e^{-2i\omega t}) + \frac{i\hbar t}{m} - 2axe^{-i\omega t} \right)}$$

تاجع وقت مساوات شرودنگر پر پورا اترتا ہے جہاں a ایک حقیقی مستقل ہے جس کا بُعد لمبائی ہے۔^{۱۰۲}

ب. $|\psi(x, t)|^2$ تلاش کریں اور موجی اکٹھ کی حرکت پر تبصرہ کریں۔

ج. $\langle x \rangle$ اور $\langle p \rangle$ کا حساب لگائیں اور دیکھیں آیا مسئلہ ابیر نفٹ (مساوات ۱.۳۸) پر یہ پورا اترتے ہیں۔

سوال ۲.۵۰: درج ذیل حرکت کرتے ہوئے ڈیلٹا تفاعل کنویں پر غور کریں

$$V(x, t) = -\alpha \delta(x - vt)$$

جہاں کنویں کی (غیر تغیر) سمتی رفتار کو v ظاہر کرتا ہے۔

ا. دکھائیں کہ تاجع وقت مساوات شرودنگر کا حل درج ذیل ہے

$$\psi(x, t) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x-vt|/\hbar^2} e^{-i[(E+(1/2)mv^2)t - mvx]/\hbar}$$

^{۱۰۲} تاجع وقت مساوات شرودنگر کے ٹیکہ بند روپ میں حل کی یہ ایک نایاب مثال ہے۔

جہاں $E = -m\alpha^2/2\hbar^2$ ساکن ڈیلٹا تفاعل کے مقید حال کی توانائی ہے۔ اشارہ: اس حل کو مساوات شرودنگر میں پُر کر کے آپ تصدیق کر سکتے ہیں۔ سوال ۲.۲۴۔ ب کا نتیجہ استعمال کریں۔

ب۔ اس حال میں ہیمیلٹن کی توقعاتی قیمت تلاش کر کے نتیجے پر تبصرہ کریں۔

سوال ۲.۵۱: درج ذیل مخفیہ پر غور کریں

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 a^2}{m} \operatorname{sech}^2(ax)$$

جہاں a ایک مثبت مستقل ہے۔

۱. اس مخفیہ کو ترسیم کریں۔

ب۔ تصدیق کریں کہ اس مخفیہ کا زمینی حال درج ذیل ہے

$$\psi_0(x) = A \operatorname{sech}(ax)$$

اور اس کی توانائی تلاش کریں۔ ψ_0 کی معمول زنی کر کے اس کی ترسیم کا حنا کہ بنائیں۔

ج۔ دکھائیں کہ درج ذیل تفاعل کسی بھی (مثبت) توانائی E کے لیے مساوات شرودنگر کو حل کرتا ہے (جہاں ہمیشہ کی طرح $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ ہے)۔

$$\psi_k(x) = A \left(\frac{ik - a \tanh(ax)}{ik + a} \right) e^{ikx}$$

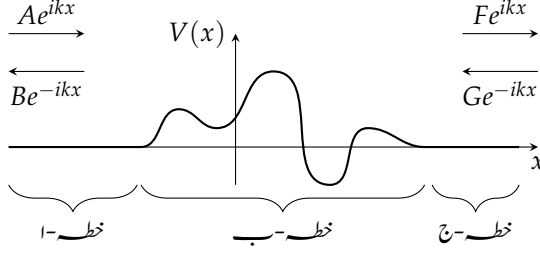
چونکہ $z \rightarrow -\infty$ سے $z \rightarrow -1$ $\tanh z$ ہوگا لہذا x کی بہت بڑی منفی قیمتوں کے لیے درج ذیل ہوگا

$$\psi_k(x) \approx A e^{ikx} \quad \text{بڑی منفی } x \text{ کے لیے}$$

جو e^{-ikx} کی عدم موجودگی کی بنا، بائیں سے آمد ایک موج کو ظاہر کرتا ہے جس میں کوئی انعکاسی موج نہیں پائی جاتی ہے۔ x کی بڑی مثبت قیمتوں کے لیے $\psi_k(x)$ کی متناوبی روپ کیا ہوگی؟ اس مخفیہ کے لیے R اور T کیا ہوں گے؟ تبصرہ: یہ بلا انعکاس مخفیہ^{۱۰۳} کی ایک بہت مشہور مثال ہے؛ ہر ذرہ، اس سے قطع نظر کہ اس کی توانائی کتنی ہے، اس مخفیہ سے سیدھا گزرتا ہے۔

سوال ۲.۵۲: **قالجہ**۔ بکھراؤ۔^{۱۰۴} امتیازی مخفیہ کے لیے بکھراؤ کا نظریہ ایک عمومی صورت اختیار کرتا ہے (شکل ۲.۲۲)۔ بائیں ہاتھ خطہ-۱ میں $V(x) = 0$ ہے لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \text{جہاں} \quad (۲.۱۴۳)$$



شکل ۲.۲۲: معتمی اختیاری مخفیہ (جو خط-۲ کے علاوہ $V(x) = 0$ ہے) سے بکھراؤ (سوال ۲.۵۲)۔

دائیں ہاتھ خط-۳ میں بھی $V(x) = 0$ ہے لہذا یہاں درج ذیل ہوگا

$$\psi(x) = Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} \quad (۲.۱۷۴)$$

ان دونوں کے بیچ خط-۲ میں مخفیہ جانے بغیر میں آپ کو ψ کے بارے میں کچھ نہیں بتا سکتا، تاہم چونکہ مساوات شرودنگر خطی اور دور تہی تفرقی ہے لہذا اس کا عمومی حل لازماً درج ذیل روپ کا ہوگا

$$\psi(x) = Cf(x) + Dg(x)$$

جہاں $f(x)$ اور $g(x)$ دو خطی غیر تانبہ مخصوص حل ہیں۔ یہاں چار عدد سرحدی شرائط ہوں گے جن میں سے دو خط-۱ اور B کو جوڑیں گے اور باقی دو خط-۲ اور C کو استعمال کر کے D کو حبانہ کرتے ہوئے باقی دو کو حل کر کے A اور G کی صورت میں B اور F تلاش کیے جاسکتے ہیں:

$$B = S_{11}A + S_{12}G, \quad F = S_{21}A + S_{22}G$$

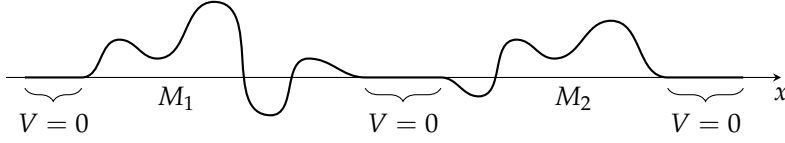
یہ چار عددی سر S_{ij} جو k (لہذا E) پر منحصر ہیں 2×2 متالب S دیتے ہیں جس کو قالب بکھراؤ^{۱۰۵} مختصر قالب S ^{۱۰۶} کہتے ہیں۔ متالب S آپ کو آمدی حیطوں (A اور G) کی صورت میں رخصتی حیطوں (B اور F) کی قیمت دیتا ہے:

$$\begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix} \quad (۲.۱۷۵)$$

بائیں سے بکھراؤ کی صورت میں $G = 0$ ہوگا لہذا انعکاسی اور ترسیلی شرح درج ذیل ہوں گی۔

$$R_I = \frac{|B|^2}{|A|^2} \Big|_{G=0} = |S_{11}|^2, \quad T_I = \frac{|F|^2}{|A|^2} \Big|_{G=0} = |S_{21}|^2 \quad (۲.۱۷۶)$$

scattering matrix^{۱۰۵}
S-matrix^{۱۰۶}



شکل ۲.۲۳: دو تہا حصوں پر مبنی مخفیہ (سوال ۲.۵۳)۔

دائیں سے بکھراؤ کی صورت میں $A = 0$ ہو گا لہذا درج ذیل ہوں گے۔

$$(۲.۱۷۷) \quad R_r = \frac{|F|^2}{|G|^2} \Big|_{A=0} = |S_{22}|^2, \quad T_r = \frac{|B|^2}{|G|^2} \Big|_{A=0} = |S_{12}|^2$$

۱. ڈیلٹا تفاعل کنویں (مساوات ۲.۱۱۳) کے لیے بکھراؤ کا متالاب S تیار کریں۔

ب. لامستثنائی چوکور کنویں (مساوات ۲.۱۳۵) کے لیے متالاب S تیار کریں۔ اشارہ: مسئلہ کی تشاکلی پن بروئے کار لائیں۔ نئے کام کی ضرورت نہیں ہوگی۔

سوال ۲.۵۳: **قابلہ ترسیلہ**۔ ۱۷۷-ا متالاب S (سوال ۲.۵۲) آپ کو رخصتی حیٹوں (B اور F) کو آمدی حیٹوں (A اور G) کی صورت میں پیش کرتا ہے (مساوات ۲.۱۷۵)۔ بعض اوقات ترسیلی متالاب M کے ساتھ کام کرنا زیادہ آسان ثابت ہوتا ہے جو مخفیہ کے دائیں جانب حیٹوں (F اور G) کو بائیں جانب حیٹوں (A اور B) کی صورت میں پیش کرتا ہے:

$$(۲.۱۷۸) \quad \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ m_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}$$

۱. متالاب S کے اجزاء کی صورت میں متالاب M کے چار اجزاء تلاش کریں۔ اسی طرح متالاب M کے چار اجزاء کی صورت میں متالاب S کے اجزاء تلاش کریں۔ مساوات ۲.۱۷۶ اور مساوات ۲.۱۷۷ میں دیے گئے R_r, T_r, R_l, T_l اور M کو متالاب کے ارکان کی صورت میں لکھیں۔

ب. فرض کریں آپ کے پاس ایک ایسا مخفیہ ہو جو دو تہا ٹکڑوں پر مشتمل ہو (شکل ۲.۲۳)۔ دکھائیں کہ اس پورے نظام کا M متالاب ان دو حصوں کے انفرادی M متالاب کا حاصل ضرب ہوگا۔

$$(۲.۱۷۹) \quad M = M_2 M_1$$

(ظاہر ہے کہ آپ دو سے زیادہ عدد انفرادی مخفیہ بھی استعمال کر سکتے تھے۔ یہی M متالاب کی اہمیت کا سبب ہے۔)

ج. نقطہ a پر (درج ذیل) واحد ایک ڈیلٹا تفاعل مخفیہ سے بکھراؤ کا M متالاب تلاش کریں۔

$$V(x) = -\alpha \delta(x - a)$$

د. جبزو-ب کا طریقہ استعمال کرتے ہوئے دوہرا ڈیٹا تقف عمل

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

کے لیے M متاثر تلاش کریں۔ اس مخفیہ کی ترسیمی شرح کیا ہوگی؟

سوال ۲.۵۴: دم ہلانے کی ترکیب سے ہارمونی سرعش کی زمینی حال توانائیوں کو پانچ معنی خیز ہندسوں تک تلاش کریں۔ یعنی K کو تبدیل کرتے ہوئے مساوات ۲.۴ کو اعدادی طریقہ سے یوں حل کریں کہ \hbar کی بڑی قیمت کے لیے حاصل تقف عمل موج صفر تک پہنچنے کی کوشش کرے۔ ماتھمیٹیکا میں درج ذیل پر کرنے سے ایسا ہوگا

$$\text{Plot}[\text{Evaluate}[u[x] /. \text{NDSolve}[u''[x] - (x^2 - K) * u[x] == 0, u[0] == 1, u'[0] == 0, \\ u[x], x, 10^{-8}, 10, \text{MaxSteps} \rightarrow 10\,000]], x, a, b, \text{PlotRange} \rightarrow c, d]$$

یہاں a, b ترسیم کی افقی سمت جبکہ c, d انتہائی سمت ہے (ابتدا $a = 0, b = 10, c = 0, d = 10$ سے کریں)۔ ہم جانتے ہیں کہ اس کا درست جواب $K = 1$ ہے لہذا آپ $K = 0.9$ سے شروع کر سکتے ہیں۔ تقف عمل موج کی ”دم“ پر نظر رکھیں۔ اب $K = 1.1$ لیں، آپ دیکھیں گے کہ دم دوسری طرف پلٹ جائے گی۔ ان دونوں کے بیچ کہیں درست حل موجود ہے۔ K کی قیمت کو درست قیمت کے دونوں اطراف متعریب سے متعریب لانے سے درست جواب حاصل ہوگا۔

سوال ۲.۵۵: دم ہلانے کا طریقہ (سوال ۲.۵۴) استعمال کرتے ہوئے ہارمونی سرعش کے ہیجان حال توانائی کو پانچ با معنی ہندسوں تک تلاش کریں۔ پہلی اور تیسری ہیجان حال کے لیے آپ کو $u[0] = 0$ اور $u'[0] = 1$ لینا ہوگا۔

سوال ۲.۵۶: دم ہلانے کی ترکیب سے لامتناہی چوکور کنویں کی اولین چار توانائیوں کی قیمتیں پانچ با معنی ہندسوں تک تلاش کریں۔ اشارہ: سوال ۲.۵۴ کی تعرقی مساوات میں درکار تبدیلیاں لائیں۔ اس بار آپ کو $u(1) = 0$ چاہتے ہیں۔

باب ۳

قواعد و ضوابط

۳.۱ ہلبرٹ فضا

گزشتہ دو ابواب میں سادہ ہارمونی نظاموں کے چند دلچسپ خواص ہماری نظروں سے گزرے۔ ان میں سے چند ایک مخصوص مخفیہ کے ”ناگہاں“ خدو حال تھے (مثلاً ہارمونی سر تعش میں توانائی کی سطح میں جفت و ناصلے) جبکہ باقی (مثلاً عدم یقینیت کا اصول اور ساکن حالات کی عمودیت) زیادہ عمومی معلوم ہوتے ہیں، جنہیں ایک ہی مرتبہ ثابت کرنا مفید ہوگا۔ اس کو مد نظر رکھتے ہوئے اس باب میں نظریہ کو زیادہ مضبوط روپ میں پیش کیا جائے گا۔ یہاں کوئی نئی بات نہیں کی جائے گی بلکہ مخصوص صورتوں میں دیکھے گئے خواص سے معقول نتائج اخذ کیے جائیں گے۔

کوانٹائی نظریہ کا دار و مدار تناسل موج اور عاملین کے تصور پر مبنی ہے۔ نظام کے حال کو تناسل موج ظاہر کرتا ہے جبکہ متابل مشاہدہ کو عاملین ظاہر کرتے ہیں۔ تناسل موج، ریاضیاتی طور پر، تصوراتی سمتیہ^۱ کی تعریفی شرائط پر پورے اترتے ہیں؛ جبکہ عاملین ان پر خطی متبادلہ^۲ کا عمل کرتے ہیں۔ یوں کوانٹائی میکانیات کی قدرتی زبان خطی الجبرا^۳ ہے۔

مجھے خدشہ ہے کہ یہاں مستعمل خطی الجبرا سے آپ واقف نہیں ہوں گے۔ سمتیہ $\langle \alpha |$ کو N بعدی فضا میں کسی مخصوص

^۱vectors

^۲linear transformations

^۳linear algebra

^۴آگے بڑھنے سے پہلے بہتر ہوگا کہ آپ ضمیمہ پڑھ کر خطی الجبرا سیکھیں۔

معیاری عمودی اساس کے لحاظ سے N عدد اجزاء $\{a_n\}$ سے ظاہر کرنا سادہ ترین ثابت ہوتا ہے۔

$$|\alpha\rangle \rightarrow \mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \quad (۳.۱)$$

دو سمتیات کا اندرونی ضرب^۵ $\langle\alpha|\beta\rangle$ (تین ابعادی نقطہ ضرب کو وسعت دیتے ہوئے) درج ذیل مخلوط عدد ہوگا۔

$$\langle\alpha|\beta\rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots + a_N^* b_N \quad (۳.۲)$$

خطی تبادلہ، T ، کو (کسی مخصوص اساس کے لحاظ سے) قوالبے^۶ سے ظاہر کیا جاتا ہے، جو تالیبی ضرب کے سادہ قواعد کے تحت سمتیات پر عمل کرتے (ہوئے نئے سمتیات پیدا کرتے) ہیں:

$$|\beta\rangle = T|\alpha\rangle \rightarrow \mathbf{b} = \mathbf{T} \mathbf{a} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} & \dots & t_{1N} \\ t_{21} & t_{22} & \dots & t_{2N} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ t_{N1} & t_{N2} & \dots & t_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} \quad (۳.۳)$$

کوانٹائی میکانیات میں پائے جانے والے ”سمتیات“ درحقیقت (زیادہ تر) تفاعلات ہوتے ہیں جو لامتناہی بُعدی فضا میں لیتے ہیں۔ انہیں N اجزائی تالیبی علامت سے ظاہر کرنا زیادہ ٹھیک نہیں ہوگا اور مستثنائی ابعاد میں سمجھ آنے والی ٹھیک وضاحتیں، لامتناہی ابعاد میں پریشان کن ثابت ہو سکتی ہیں۔ (اس کی بنیادی وجہ یہ ہے کہ مساوات ۳.۲ کا مستثنائی مجموعہ ہر صورت موجود ہوتا ہے، البتہ، لامتناہی مجموعہ یا مکمل، عدم سرکوزیت کا شکار ہو سکتا ہے، اور ایسی صورت میں اندرونی ضرب غیر موجود ہوگی لہذا اندرونی ضرب پر مبنی کوئی بھی دلیل مشکوک ہوگی۔) یوں اگرچہ خطی الجبرا کی اصطلاحات اور علامتیت سے آپ واقف ہوں گے، بہر حال ہوشیار رہنا بہتر ہوگا۔

متغیر x کے تمام تفاعلات مل کر سمتی فضا قائم کرتے ہیں، جو ہمارے مقصد کے لئے ضرورت سے زیادہ بڑی فضا ہے۔ کسی بھی ممکن طبعی حال کو ظاہر کرنے کے لیے لازم ہے کہ تفاعل موج Ψ معمول شدہ ہو:

$$\int |\Psi|^2 dx = 1$$

کسی مخصوص وقفہ پر تمام مربع متکامل تفاعلات^۷

$$f(x) \quad \text{جہاں} \quad \int_a^b |f(x)|^2 dx < \infty \quad \text{ہو} \quad (۳.۴)$$

inner product^۵
matrices^۶

ہمارے لئے حدود (a اور b) تقریباً ہر مرتبہ $\pm\infty$ ہوں گی، تاہم یہاں چیزوں کو زیادہ عمومی رکھنا بہتر ہوگا۔
square-integrable functions^۷

مسئلہ (۱) اس سے بہت چھوٹی) سمتی فضا قائم کرتے ہیں (سوال ۱.۳-۱ ادیکھیں)۔ ریاضی دان اسے $L_2(a, b)$ جبکہ ماہر طبیعیات اسے ہلبیرٹ فضا^۹ کہتے ہیں۔ یوں کو انسانی میکانیات میں

(۳.۵) تفاعلات موج ہلبیرٹ فضا میں لیتے ہیں۔

دو تفاعلات کے اندرونی ضربے کی تعریف درج ذیل ہے جہاں $f(x)$ اور $g(x)$ تفاعلات ہیں۔

$$(۳.۶) \quad \langle f|g \rangle \equiv \int_a^b f(x)^* g(x) dx$$

اگر f اور g دونوں مربع متکامل ہوں (یعنی دونوں ہلبیرٹ فضا میں پائے جاتے ہوں)، تب ہم ضمانت کے ساتھ کہہ سکتے ہیں کہ ان کی اندرونی ضرب موجود ہوگی (ساوات ۳.۶ کا مکمل ایک متناہی عدد^{۱۱} پر مرکوز ہوگا)۔ ایسا شواہد عدم مساوات^{۱۲} کے درج ذیل نگلی روپ^{۱۳} کے پیش نظر ہوگا۔

$$(۳.۷) \quad \left| \int_a^b f(x)^* g(x) dx \right| \leq \sqrt{\int_a^b |f(x)|^2 dx} \sqrt{\int_a^b |g(x)|^2 dx}$$

آپ تصدیق کر سکتے ہیں کہ مساوات ۳.۶ اندرونی ضرب کی تمام شرائط پر پوری اترتی ہے (سوال ۱.۳-ب)۔ بالخصوص درج ذیل مساوات میں ہم دیکھ سکتے ہیں۔

$$(۳.۸) \quad \langle g|f \rangle = \langle f|g \rangle^*$$

مزید $f(x)$ کی اپنے ہی ساتھ اندرونی ضرب

$$(۳.۹) \quad \langle f|f \rangle = \int_a^b |f(x)|^2 dx$$

Hilbert space^۹

۱۰. تکنیکی طور پر، ہلبیرٹ فضا سے مراد مکمل اندرونی ضرب فضا ہے، اور مربع متکامل تفاعلات کا ذخیرہ ہلبیرٹ فضا کی قطعاً ایک مثال ہے؛ درحقیقت، ہر متناہی ابعادی سمتی فضا ایک بے وقعت ہلبیرٹ فضا ہوگی۔ چونکہ L_2 کو انسانی میکانیات کا اکھاڑا ہے لہذا ماہر طبیعیات اسی کو "ہلبیرٹ فضا" کہتے ہیں۔ ویسے یہاں لفظ مکمل سے مراد یہ ہے کہ ہلبیرٹ فضا کے کسی بھی تفاعل کی کوئی ترتیب جس تفاعل پر مرکوز ہو، وہ اسی فضا میں پایا جائے۔ اس میں کوئی "سوراخ" نہیں پایا جاتا، جیسا کہ تمام حقیقی اعداد کے سلسلہ میں کوئی سوراخ نہیں پایا جاتا (اس کے برعکس، مثالاً، تمام کثیررکنیوں کی فضا میں اور تمام ناطق اعداد کے سلسلہ میں بقسینا سوراخ پائے جاتے ہیں)۔ فضا کی مکملیت کا تفاعل کے سلسلہ کی مکملیت کے ساتھ (ایک ہی لفظ استعمال کیے جانے کے باوجود) کوئی تعلق نہیں۔ تفاعلات کی مکملیت سے مراد یہ ہے کہ کسی بھی تفاعل کو ان تفاعلات کے خطی جوڑ کی صورت میں لکھا جاسکتا ہے۔
۱۱. باب ۲ میں بعض اوقات ہمیں محسوس ہوتا ہے کہ تفاعل کے ساتھ کام کرنا بڑا۔ ایسے تفاعلات ہلبیرٹ فضا سے باہر لیتے ہیں، اور جیسا آپ جلد دیکھیں گے، انہیں استعمال کرتے ہوئے ہمیں احتیاط کرنی ہوگی۔ ابھی کے لئے میں مندرجہ کر رہا ہوں کہ جن تفاعلات سے ہمیں واسطہ ہے وہ ہلبیرٹ فضا میں لیتے ہیں۔

Schwarz inequality^{۱۲}

۱۳. متناہی ابعادی سمتی فضا میں شواہد عدم مساوات $\langle \alpha|\alpha \rangle \langle \beta|\beta \rangle \geq |\langle \alpha|\beta \rangle|^2$ کو ثابت کرنا آسان ہے (صفحہ ۳۳۰ پر سوال ۲.۱ دیکھیں)۔ تاہم یہ ثبوت مندرجہ کر رہا ہے کہ جن تفاعلات سے ہمیں واسطہ ہے وہ ہلبیرٹ فضا میں پائے جاتے ہیں، جبکہ ہم یہاں اسی حقیقت کو ثابت کرنا چاہتے ہیں۔

حقیقی اور غیر منفی ہوگی؛ یہ صرف اس صورت^{۱۴} میں صفر ہوگی جب $f(x) = 0$ ہو۔

ایک تفاعل اس صورت میں معمول^{۱۵} شدہ کہلاتا ہے جب اس کی اپنی ہی ساتھ اندرونی ضرب ایک (1) کے برابر ہو؛ دو تفاعلات اس صورت میں عمودی^{۱۶} ہوں گے جب ان کی اندرونی ضرب صفر (0) ہو؛ اور تفاعلات کا سلسلہ $\{f_n\}$ اس صورت میں معیاری^{۱۷} عمودی^{۱۸} ہوگا جب تمام تفاعلات (درج ذیل دیکھیں) معمول شدہ اور باہمی عمودی ہوں۔

$$\langle f_m | f_n \rangle = \delta_{mn} \quad (۳.۱۰)$$

آخر میں، تفاعلوں کا ایک سلسلہ اس صورت میں مکمل^{۱۸} ہوگا جب (لمبرٹ فضا میں) ہر تفاعل کو ان کے خطی جوڑ کی صورت (درج ذیل دیکھیں) میں لکھا جاسکے۔

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n f_n(x) \quad (۳.۱۱)$$

معیاری عمودی تفاعلات $\{f_n(x)\}$ کے عددی سر، فوراً سر تسلل کے عددی سروں کی طرح حاصل کیے جاتے ہیں:

$$c_n = \langle f_n | f \rangle \quad (۳.۱۲)$$

جس کی تصدیق آپ خود کر سکتے ہیں۔ میں نے باب ۲ میں یہی اصطلاح استعمال کی تھی۔ (لا متناہی چوکور کنویں کے ساکن حالات) (مساوات ۲.۲۸) وقفہ $(0, a)$ پر مکمل معیاری عمودی سلسلہ دیتے ہیں؛ ہارمونی مرتعش کے ساکن حالات (مساوات ۲.۶۷ یا مساوات ۲.۸۵) وقفہ $(-\infty, \infty)$ پر مکمل معیاری عمودی سلسلہ دیتے ہیں۔

سوال ۳.۱:

ا. ظاہر کریں کہ تمام مربع متکا مسل تفاعلات کا سلسلہ مستحق فضا دے گا (صفحہ ۴۳۹ پر ضمیمہ ۱.۱ میں تعریف کا موازنہ کریں)۔ اشارہ: آپ نے دکھانا ہوگا کہ دو مربع متکا مسل تفاعلات کا مجموعہ خود مربع متکا مسل تفاعل ہوگا۔ مساوات ۳.۱۳ استعمال کریں۔ کیا تمام عمودی تفاعلات کا سلسلہ مستحق فضا ہوگا؟

ب. ظاہر کریں کہ مساوات ۳.۶ کا مکمل، اندرونی ضرب (ضمیمہ ۲.۱) کی تمام شرائط پر پورا اترتا ہے۔

^{۱۴} ایسے تفاعل کے لئے کیا کہا جاسکتا ہے جو چند مخصوص تنہا نقاط کے علاوہ ہر مقام پر صفر ہوں؟ اگرچہ تفاعل معدوم نہیں ہے لیکن مکمل (مساوات ۳.۹) اب بھی معدوم ہوگا۔ اگر آپ کو اس بات پر تشویش ہو تو آپ کو ریاضی پر حنی چاہیے۔ طبیعت میں ایسے سمجھیر تفاعلات نہیں پائے جاتے ہیں، تاہم لمبرٹ فضا میں ایسے دو تفاعلات، جن کے مربع مکمل برابر ہوں، کو معادل تصور کیا جاتا ہے۔ تکنیکی طور پر لمبرٹ فضا میں ترسیلات در حقیقت تفاعلات کی تعادل^{۱۹} جماعت کو ظاہر کرتی ہیں۔

normalized^{۱۵}

orthogonal^{۱۶}

orthonormal^{۱۷}

complete^{۱۸}

سوال ۳.۲:

۱. وقفہ $(0, 1)$ کے بیچ، متغیر v کے کس خط پر، تعامل $f(x) = x^v$ ہلبرٹ فضا میں پایا جاتا ہے؟ فرض کر لیں کہ v حقیقی تاہم ضروری نہیں کہ مثبت ہو۔

ب. کیا $v = \frac{1}{2}$ کی مخصوص صورت میں $f(x)$ ہلبرٹ فضا میں پایا جائے گا؟ تعامل $xf(x)$ کے بارے میں آپ کیا کہیں گے؟ تعامل $(\frac{d}{dx})f(x)$ کے بارے میں آپ کیا کہہ سکتے ہیں؟

۳.۲ قابل مشاہدہ

۳.۲.۱ ہر مشی عاملین

قابل مشاہدہ $Q(x, p)$ کی توقعاتی قیمت کو نہایت خوش اسلوبی سے اندرونی ضرب عملیات^۹:

$$\langle Q \rangle = \int \Psi^* \hat{Q} \Psi dx = \langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle \quad (۳.۱۳)$$

کی صورت میں پیش کیا جاسکتا ہے۔ اب پیش کش کا نتیجہ ہر صورت حقیقی ہوگا، لہذا بہت ساری پیش کشوں کی اوسط بھی حقیقی (درج ذیل دیکھیں) ہوگی۔

$$\langle Q \rangle = \langle Q \rangle^* \quad (۳.۱۴)$$

لیکن اندرونی ضرب کا مخلوط جوڑی دار ترتیب کو الٹ دیتا ہے (مساوات ۳.۸) لہذا ہماری مساوات درج ذیل ہو جائے گی

$$\langle \Psi | \hat{Q} | \Psi \rangle = \langle \hat{Q} | \Psi | \Psi \rangle^* \quad (۳.۱۵)$$

جو لازماً کسی بھی تعامل موج Ψ کے لئے درست ہوگی۔ یوں قابل مشاہدہ کو ظاہر کرنے والے عاملین میں درج ذیل اہم خاصیت پائی جاتی ہے۔

$$\langle f | \hat{Q} | f \rangle = \langle \hat{Q} | f | f \rangle \quad \text{تمام } f(x) \text{ کے لئے} \quad (۳.۱۶)$$

ایسے عاملین کو ہم ہر مشی^{۲۰} کہتے ہیں۔

^۹ یاد رہے کہ $\hat{p} = (\hbar/i) d/dx$ پر کر کے Q سے عامل \hat{Q} حاصل کیا جاتا ہے۔ یہ عاملین اس لحاظ سے فطری ہوتے ہیں کہ کسی بھی مخلوط عدد a اور b اور تعامل f اور g کے لئے $a\hat{Q}f(x) + b\hat{Q}g(x) = \hat{Q}[af(x) + bg(x)]$ ہوگا۔ یہ تمام تعاملات کی فضا پر خطی حسابہ (ضرب) قائم کرتے ہیں۔ اگرچہ بعض اوقات یہ ہلبرٹ فضا کے اندر کے تعامل کو باہر کے تعامل میں لے جاتے ہیں (سوال ۳.۲-ب)، اور ایسی صورت میں ہمیں عامل کے دائرہ کار پر پابندی عائد کرنے کی ضرورت پیش آ سکتی ہے۔

درحقیقت زیادہ تر کتابوں میں (درج ذیل) بظاہر زیادہ سخت شرط عامہ کی جاتی ہے۔

$$(۳.۱۷) \quad \langle f | \hat{Q}g \rangle = \langle \hat{Q}f | g \rangle \quad \text{تمام } f(x) \text{ اور تمام } g(x) \text{ کے لئے}$$

تاہم مختلف نظر آنے کے باوجود، جیسا آپ سوال ۳.۳ میں ثابت کریں گے، یہ شرط میری پیش کردہ تعریف (مساوات ۳.۱۶) کی عین معادل ہے۔ یوں جو تعریف آپ کو آسان لگتی ہو، آپ اسی کو استعمال کر سکتے ہیں۔ اصل نکتہ یہ ہے کہ ہر مشی عامل کو اندرونی ضرب کے اول یا دوم رکن پر لاگو کرنے سے نتیجہ تبدیل نہیں ہوتا، اور کو انشائی میکانیات میں ہر مشی عاملین اس لئے قدرتی طور پر رونما ہوتے ہیں کہ ان کی توقعاتی قیمتیں حقیقی ہوتی ہیں۔

$$(۳.۱۸) \quad \text{قابل مشاہدہ کو ہر مشی عاملین ظاہر کرتے ہیں۔}$$

آئیں اس کی تصدیق کرتے ہیں۔ مثلاً، کیا معیار حرکت کا عامل ہر مشی ہے؟

$$(۳.۱۹) \quad \langle f | \hat{p}g \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f^* \frac{\hbar}{i} \frac{dg}{dx} dx = \frac{\hbar}{i} f^* g \Big|_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{df}{dx} \right)^* g dx = \langle \hat{p}f | g \rangle$$

میں نے مکمل بالخصوص استعمال کیا ہے اور چونکہ $f(x)$ اور $g(x)$ مربع مکامل ہیں لہذا $\pm\infty$ پر ان دونوں کو صفر تک بانٹنا چاہیے^{۲۱} جس کی بنا پر مکمل میں سرحدی اجزاء کو رد کیا گیا ہے۔ آپ نے دیکھا کہ مکمل بالخصوص سے پیدا منفی کی علامت کو i کے مخلوط جوڑی دار سے حاصل منفی کی علامت ختم کرتی ہے۔ عامل d/dx (جس میں i نہیں پایا جاتا) غیر ہر مشی ہے اور یہ کسی بھی قابل مشاہدہ کو ظاہر نہیں کرتا۔

سوال ۳.۳: ظاہر کریں کہ اگر (ممبرتہ فضا میں) تمام تفاعل h کے لیے $\langle \hat{Q}h | h \rangle = \langle h | \hat{Q}h \rangle$ ہو تب تمام f اور g کے لیے $\langle f | \hat{Q}g \rangle = \langle \hat{Q}f | g \rangle$ ہوگا (یعنی مساوات ۳.۱۶ اور مساوات ۳.۱۷ میں ہر مشی کی تعریفات معادل ہیں)۔ اشارہ: پہلے $h = f + g$ اور بعد میں $h = f + ig$ لیں۔

سوال ۳.۴:

ا. دکھائیں کہ دو ہر مشی عاملین کا مجموعہ خود بھی ہر مشی ہوگا۔

ب. فرض کریں \hat{Q} ہر مشی ہے اور α ایک مخلوط عدد ہے۔ $\alpha \hat{Q}$ پر کیا شرائط عامہ کرنے سے $\alpha \hat{Q}$ بھی ہر مشی ہوگا؟

ج. دو ہر مشی عاملین کا حاصل ضرب کب ہر مشی ہوگا؟

د. دکھائیں کہ عامل مقام ($\hat{x} = x$) اور ہیمیلٹنی عامل ($\hat{H} = -(\hbar^2/2m) d^2/dx^2 + V(x)$) ہر مشی ہیں۔

^{۲۱} حقیقت میں ایسا ضروری نہیں ہے۔ جیسا میں نے باب ۱ میں ذکر کیا، ایسے گھمبیر تفاعلات پائے جاتے ہیں جو مربع مکامل ہونے کے باوجود لامتناہی پر صفر کو نہیں پہنچتے ہیں۔ اگرچہ ایسے تفاعلات طبعیات میں نہیں پائے جاتے، لیکن اگر آپ اس کے باوجود اس حقیقت کو نظر انداز نہیں کر سکتے تو ہم عاملین کے دائرہ کار کو یوں پابند کر دیتے ہیں کہ یہ شامل نہ ہوں۔ متناہی وقفے پر آپ کو سرحدی اجزاء پر زیادہ دھیان دینا ہوگا کیونکہ $(-\infty, \infty)$ پر ہر مشی عامل، $(0, \infty)$ یا $(-\pi, \pi)$ پر غیر ہر مشی ہو سکتا ہے۔ اگر آپ لامتناہی چوکور کنویں کے بارے میں سوچ رہے ہوں تب تصور کریں کہ تفاعلات موج لامتناہی لکسیر پائے جاتے ہیں؛ جو کسی وجہ سے $(0, a)$ کے باہر صفر ہیں۔

سوال ۳.۵: عامل \hat{Q} کا ہر مشی جوڑی دار^{۲۲} یا شریکے عامل^{۲۳} \hat{Q}^+ درج ذیل کو مطمئن کرتا ہے۔

$$\langle f | \hat{Q} g \rangle = \langle \hat{Q}^+ f | g \rangle \quad (\text{تمام } f \text{ اور } g \text{ کے لئے}) \quad (۳.۲۰)$$

یوں ہر مشی عامل اپنے ہر مشی جوڑی دار کے برابر $(\hat{Q} = \hat{Q}^+)$ گا۔

۱. x, i اور d/dx کے ہر مشی جوڑی دار تلاش کریں۔

ب. ہارمونی مرتعش کے عامل رفعت a_+ (مساوات ۲.۴۷) کا ہر مشی جوڑی دار تیار کریں۔

ج. دکھائیں کہ $(\hat{Q}\hat{R})^+ = \hat{R}^+\hat{Q}^+$ ہوگا۔

۳.۲.۲ تعیین حال

عام طور پر بالکل یکساں تیار کردہ نظاموں کے مندرجہ، جس میں تمام ψ ایک حال میں ہوں، پر قابل مشابہ Q کی پیمائش سے ہر مرتبہ ایک جیسے نتائج حاصل نہیں ہوں گے؛ یہ ہے کوانٹائی میکانیات کی عدم تعینیت^{۲۴}۔ سوال: کیا ایسا ممکن ہوگا کہ ہم کوئی ایسا حال تیار کریں جہاں Q کی ہر پیمائش کوئی مخصوص قیمت (جسے ہم q کہہ لیں) دے؟ اس کو آپ قابل مشابہ Q کا تعیین حال^{۲۵} کہہ سکتے ہیں۔ (درحقیقت، ہم ایسی ایک مثال دیکھ چکے ہیں: ساکن حالات، ہیملٹنی کے تعیین حالات ہیں؛ ساکن حال Ψ_n میں ایک ذرے کی کل توانائی کی پیمائش ہر صورت مطابقتی^{۲۶} ”اجبازتی“ توانائی E_n دیگی۔)

تعیین حال میں Q کا معیاری انحراف صفر ہوگا جسے درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$\sigma^2 = \langle (\hat{Q} - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle \Psi | (\hat{Q} - q)^2 \Psi \rangle = \langle (\hat{Q} - q) \Psi | (\hat{Q} - q) \Psi \rangle = 0 \quad (۳.۲۱)$$

(ا) اب اگر ہر پیمائش q دے تب ظاہر ہے کہ اوسط قیمت بھی q ہوگی: $\langle Q \rangle = q$ ۔ چونکہ \hat{Q} ہر مشی ہے لہذا $\hat{Q} - q$ بھی ہر مشی عامل ہوگا؛ اس حقیقت کو استعمال کرتے ہوئے میں نے اندرونی ضرب کے ایک جزو ضربی $(\hat{Q} - q)$ کو بائیں منتقل کیا ہے۔ تاہم ایسا واحد تعادل جس کی خود اپنے ساتھ اندرونی ضرب معدوم ہو جاتی ہو، 0 ہے، لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$\hat{Q}\Psi = q\Psi \quad (۳.۲۲)$$

یہ عامل \hat{Q} کی امتیازی قدر مساوات^{۲۷} ہے؛ \hat{Q} کا امتیازی تفاعل^{۲۸} Ψ اور مطابقتی امتیازی قدر^{۲۹} q ہے۔ یوں درج ذیل

hermitian conjugate^{۲۲}

adjoint^{۲۳}

ظاہر ہے، میں درست پیمائش کی بات کر رہا ہوں؛ کسی غلطی کی بنا پر غلط پیمائش کی بات نہیں کی جا رہی ہے، جس کو کوانٹائی

میکانیات سے نہیں جوا جاسکتا

determinate state^{۲۵}

eigenvalue equation^{۲۶}

eigenfunction^{۲۷}

eigenvalue^{۲۸}

ہوگا۔

(۳.۲۳) تعین حالات \hat{Q} کے امتیازی تفاعلات ہوں گے۔

ایسے حال پر Q کی پیمائش لازماً امتیازی متدر q دیگی۔

دھیان رہے کہ امتیازی متدر ایک عدد ہے (نہ کہ عامل یا تفاعل)۔ امتیازی تفاعل کو کسی مستقل سے ضرب دینے سے امتیازی تفاعل ہی حاصل ہوتا ہے، جس کی امتیازی متدر وہی ہوگی۔ صفر کو امتیازی تفاعل نہیں لیا جاسکتا؛ (ہم تعریفاً اس کو امتیازی تفاعلات میں شامل نہیں کرتے؛ ورنہ کسی بھی عامل \hat{Q} اور تمام q کے لیے $\hat{Q}0 = q0 = 0$ ہوگا جس کی بنا پر ہر عدد ایک امتیازی متدر ہوگا)۔ ہاں امتیازی متدر کے صفر ہونے میں کوئی قباحت نہیں ہے۔ کسی عامل کی تمام امتیازی اقدار کو اکٹھا کرنے سے اس عامل کا طیف^{۲۹} حاصل ہوگا۔ بعض اوقات دو (یا دو سے زیادہ) خطی غیر تابع امتیازی تفاعلات کی امتیازی متدر ایک جتنی ہوگی؛ ایسے طیف کو انخطاط^{۳۰} طیف کہا جاتا ہے۔

مشال کے طور پر، کل توانائی کے تعین حالات، ہیملٹنی کے امتیازی تفاعلات ہوں گے:

$$(۳.۲۴) \quad \hat{H}\psi = E\psi$$

جو بالکل غیر تابع وقت مساوات شرودنگر ہے۔ اس سیاق و سباق میں ہم امتیازی متدر کے لیے صرف E اور امتیازی تفاعل کے لیے (یونانی چھوٹا حرف) ψ استعمال کرتے ہیں (جس کے ساتھ $e^{-iEt/\hbar}$ چسپاں کر کے Ψ حاصل کیا جاسکتا ہے؛ جواب بھی H کا امتیازی تفاعل ہوگا)۔

مشال ۳: درج ذیل عامل پر غور کریں جہاں ϕ ، ہمیشہ کی طرح، دو البادی قطبی محدود کا متغیر ہے۔

$$(۳.۲۵) \quad \hat{Q} \equiv i \frac{d}{d\phi}$$

(یہ عامل سوال ۲.۳۶ میں کارآمد ثابت ہو سکتا تھا)۔ کیا \hat{Q} ہر مثنیٰ ہے؟ اس کے امتیازی تفاعلات اور امتیازی اقدار تلاش کریں۔

حل: یہاں ہم مستثنائی وقفے $0 \leq \phi \leq 2\pi$ پر تفاعلات $f(\phi)$ کے ساتھ کام کر رہے ہیں جہاں ϕ اور $\phi + 2\pi$ ایک ہی طبعی نقطے کو ظاہر کرتے ہیں لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۲۶) \quad f(\phi + 2\pi) = f(\phi)$$

تکمل بالخص استعمال کرتے ہوئے یہ نتیجہ ملے گا

$$\langle f | \hat{Q}g \rangle = \int_0^{2\pi} f^* \left(i \frac{dg}{d\phi} \right) d\phi = i f^* g \Big|_0^{2\pi} - \int_0^{2\pi} i \left(\frac{df^*}{d\phi} \right) g d\phi = \langle \hat{Q}f | g \rangle$$

لہذا \hat{Q} ہر مشی ہے (یہاں مساوات ۳.۲۶ کی بنا پر سرحدی جزو خارج ہو جائے گا)۔
امتیازی متدر مساوات:

$$(3.24) \quad i \frac{d}{d\phi} f(\phi) = q f(\phi)$$

کا عمومی حل درج ذیل ہوگا۔

$$(3.28) \quad f(\phi) = A e^{-iq\phi}$$

q کی ممکنہ قیمتیں کو مساوات ۳.۲۶ درج ذیل رہنے کا پابند بناتی ہے۔

$$(3.29) \quad e^{-iq2\pi} = 1 \Rightarrow q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

□

اس عامل کا طیف تمام صحیح اعداد پر مشتمل ہوگا اور یہ غیر انخطی ہے۔

سوال ۳.۶: عامل $\hat{Q} = d^2 / d\phi^2$ پر غور کریں جہاں (مثال ۳.۱ کی طرح) تفاعلات مساوات ۳.۲۶ پر پورا اترتے ہیں اور ϕ قطبی محدد میں انتمی زاویہ ہے۔ کیا \hat{Q} ہر مشی ہے؟ اس کے امتیازی تفاعلات اور امتیازی افتدار تلاش کریں۔ عامل \hat{Q} کا طیف تلاش کریں۔ کیا طیف انخطی ہے؟

۳.۳ ہر مشی عامل کے امتیازی تفاعل

یوں ہم ہر مشی عاملین کے امتیازی تفاعل (جو طبعی طور پر متابل مشاہدہ کے تعیین حالات ہیں) کی طرف متوجہ ہوتے ہیں۔ ان کے دو اقسام ہیں: اگر طیف غیر مسلسل^{۳۱} ہو (یعنی امتیازی افتدار الگ الگ ہوں) تب امتیازی تفاعلات ہلبرٹ فضا میں پائے جائیں گے اور یہ طبعی طور پر متابل حصول حالات ہوں گے۔ اگر طیف استمراری^{۳۲} ہو (یعنی امتیازی افتدار ایک پوری سعت کو بھرتے ہوں) تب امتیازی تفاعلات نا متابل معمول زنی ہوں گے اور یہ کسی بھی ممکن تفاعل موج کو ظاہر نہیں کر سکتے ہیں (اگرچہ ان کے خطی جوڑ، جن میں لازماً امتیازی افتدار کی ایک وسعت موجود ہوگی، متابل معمول زنی ہو سکتے ہیں)۔ کچھ عاملین کا صرف غیر مسلسل طیف ہوگا (مثلاً ہارمونی سر نقش کی ہیملٹنی)، کچھ کا صرف استمراری طیف ہوگا (مثلاً آزاد ذرے کی ہیملٹنی)، اور کچھ کا ایک حصہ غیر مسلسل اور دوسرا حصہ استمراری ہوگا (مثلاً مستحالی چو کو رکنویں کی ہیملٹنی)۔ ان میں غیر مسلسل صورت نہجاً زیادہ آسان ہے چونکہ ان کی متعلقہ اندرونی ضرب لازماً موجود ہوں گی؛ در حقیقت یہ مستحالی ابعادی نظریے (ہر مشی متالاب کے امتیازی سمتیات) سے بہت مشابہت رکھتا ہے۔ میں پہلے غیر مسلسل صورت کو اور اس کے بعد استمراری صورت کو دیکھوں گا۔

۳.۳.۱ غیر مسلسل طیف

ریاضیاتی طور پر ہر مشی عامل کے متبادل معمولی امتیازی تفاعل میں دو اہم خصوصیات پائے جاتے ہیں:

مسئلہ ۳.۱: ان کی امتیازی اقدار حقیقی ہوں گی۔

ثبوت: فرض کریں

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

ہو (یعنی \hat{Q} کا امتیازی تفاعل f اور امتیازی قدر q ہو) اور

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

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

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

(چونکہ q ایک عدد ہے لہذا اس کو مکمل سے باہر نکالا جاسکتا ہے، اور چونکہ اندرونی ضرب میں پہلا تفاعل مخلوط جوڑی دار ہے (مساوات ۳.۶) لہذا دائیں طرف q بھی جوڑی دار ہوگا)۔ تاہم $\langle f | f \rangle$ صفر نہیں ہو سکتا ہے (متانوں کے تحت $f(x) = 0$ امتیازی تفاعل نہیں ہو سکتا) لہذا $q = q^*$ یعنی q حقیقی ہوگا۔

□

یہ باعث اطمینان ہے: تعین حال میں ایک ذرے کے متبادل مشاہدہ کی پیشکش ایک حقیقی عدد دے گی۔

مسئلہ ۳.۲: منفرد امتیازی اقدار کے متعلقہ امتیازی تفاعلات عموماً ہوں گے۔

ثبوت: فرض کریں:

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

اور \hat{Q} ہر مشی ہو، تب $\langle f | \hat{Q}g \rangle = \langle \hat{Q}f | g \rangle$ ہوگا، لہذا

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

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

□

^{۳۳} یہ وہ موقع ہے جہاں ہم فرض کرتے ہیں کہ امتیازی تفاعلات ہلبرٹ فضا میں پائے جاتے ہیں۔ دوسری صورت میں اندرونی ضرب غیر موجود ہو سکتی ہے۔

یہی وجہ ہے کہ لامتناہی چوکور کنویں یا مثال کے طور پر ہارمونی سر تعیش کے امتیازی حالات عمودی ہیں؛ یہ مفرد امتیازی افتدار والے ہیملٹنی کے امتیازی تفاضلات ہیں۔ تاہم یہ خاصیت صرف انہیں یا ہیملٹنی کے لئے مخصوص نہیں بلکہ کسی بھی متابل مشاہدہ کے تعین حالات کی بھی ہوگی۔

بد قسمتی سے مسئلہ ۳.۲ ہمیں انخطاطی حالات ($q' = q$) کے بارے میں کوئی معلومات فراہم نہیں کرتا۔ تاہم، اگر دو (یا دو سے زیادہ) امتیازی حالات ایک جیسی امتیازی افتدار رکھتے ہوں، تب ان کا ہر خطی جوڑ بھی اسی امتیازی افتدار والا امتیازی حال ہوگا (سوال ۳.۱-۱) اور ہم گرام شمد ترکیب عمودیت^{۳۴} (صفحہ ۳۳۹ پر سوال ۱.۱) استعمال کرتے ہوئے ہر ایک انخطاطی ذیلی فضا میں عمودی امتیازی تفاضلات مرتب کر سکتے ہیں۔ اصولاً ایسا کرنا ہر صورت ممکن ہوگا، تاہم (اللہ کا شکر ہے) ہمیں عموماً ایسا کرنے کی ضرورت پیش نہیں آتی۔ یوں انخطاط کی صورت میں بھی ہم عمودی امتیازی تفاضلات منتخب کر سکتے ہیں، اور کوانٹائی میکانیات کے ضوابط طے کرتے ہوئے ہم فرض کریں گے کہ ہم ایسا کر چکے ہیں۔ یوں ہم فورسٹر کی ترکیب استعمال کر سکتے ہیں جو اسی تفاضلات کی معیاری عمودیت پر مبنی ہے۔

مستثنای بعدی سمتی فضا میں ہر مشی متالرب کے امتیازی سمتیے تیسری بنیادی خاصیت بھی رکھتے ہیں۔ یہ فضا کا احاطہ کرتے ہیں (یعنی ہر سمتیے کو ان کے خطی جوڑ کی صورت میں لکھا جاسکتا ہے)۔ بد قسمتی سے لامتناہی بعدی فضاوں میں اس خاصیت کے لئے ثبوت نہیں ہے۔ تاہم یہ خاصیت کوانٹائی میکانیات کے اندرونی ثبات کیلئے لازمی ہے، لہذا (ڈیراک کی طرح) ہم اسے ایک مسئلہ (بلکہ متابل مشاہدہ کو ظاہر کرنے والے ہر مشی عاملین پر عائد شرط) لیتے ہیں۔

مسئلہ: متابل مشاہدہ کے امتیازی تفاضلات مکمل ہوں گے: (ہلبرٹ فضا میں) ہر تفاضل کو ان کے خطی جوڑ کی صورت میں لکھا جاسکتا ہے۔^{۳۵}

سوال ۳.۷:

۱. فرض کریں کہ عامل \hat{Q} کے دو امتیازی تفاضلات $f(x)$ اور $g(x)$ ہیں اور ان دونوں کی امتیازی افتدار q ہے۔ دکھائیں کہ f اور g کا ہر خطی جوڑ خود \hat{Q} کا امتیازی تفاضل ہوگا اور اس کی امتیازی افتدار q ہوگی۔

ب. تصدیق کریں کہ $e^x = f(x)$ اور $e^{-x} = g(x)$ عامل d^2/dx^2 کے امتیازی تفاضلات ہیں اور ان کی امتیازی افتدار برابر ہے۔ تفاضل f اور g کے ایسے دو خطی جوڑ بنائیں جو وقفہ $(-1, 1)$ پر عمودی امتیازی تفاضلات ہوں۔

سوال ۳.۸:

۱. تصدیق کریں کہ مثال ۳.۱ میں ہر مشی عامل کی امتیازی افتدار حقیقی ہیں۔ دکھائیں کہ (مفرد امتیازی افتدار کے) امتیازی تفاضلات عمودی ہیں۔

ب. یہی کچھ سوال ۳.۶ کے عامل کے لیے کریں۔

^{۳۴}Gram-Schmidt orthogonalization process

^{۳۵}چند مخصوص صورتوں میں مکملیت کو ثابت کیا جاسکتا ہے (مثلاً ہم جانتے ہیں کہ مسئلہ ڈرشلے کے تحت، لامتناہی چوکور کنویں کے ساکن حالات مکمل ہیں)۔ صرف چند صورتوں میں متابل ثبوت بات کو مسئلہ کہنا درست نظر نہیں آتا لیکن مجھے اس سے بہتر اصطلاح نہیں ملی۔

۳.۳.۲ استمراری طیف

ہر مشی عامل کا طیف استمراری ہونے کی صورت میں عین ممکن ہے کہ ان کی اندرونی ضرب غیر موجود ہوں، لہذا مسئلہ ۳.۱ اور مسئلہ ۳.۲ کے ثبوت کارآمد نہیں ہوں گے اور امتیازی تفاعلات نا قابل معمول زنی ہوں گے۔ اس کے باوجود ایک لحاظ سے تین لازم خصوصیات (حقیقت، عمودیت اور کملیت) اب بھی کارآمد ہوں گی۔ اس پر اسرار صورت کو ایک مخصوص مثال کی مدد سے سمجھنا بہتر ہوگا۔

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

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

$$(۳.۳۰) \quad \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} f_p(x) = p f_p(x)$$

اس کا عمومی حل درج ذیل ہوگا۔

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

چونکہ p کی کسی بھی (مخلوط) قیمت کے لیے یہ مربع مکمل نہیں ہے؛ اس لئے ہلبرٹ فضا میں عامل معیار حرکت کا کوئی امتیازی تفاعل نہیں پایا جاتا۔ اس کے باوجود، اگر ہم حقیقی امتیازی افتدار تک اپنے آپ کو محدود رکھیں تو ہمیں متبادل ”معیاری عمودیت“ حاصل ہوتی ہے۔ سوال ۲.۲۴-الف اور ۲.۲۶ کو دیکھ کر درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۳۱) \quad \int_{-\infty}^{\infty} f_{p'}^*(x) f_p(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx = |A|^2 2\pi\hbar \delta(p-p')$$

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

$$(۳.۳۲) \quad f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

لہذا

$$(۳.۳۳) \quad \langle f_{p'} | f_p \rangle = \delta(p-p')$$

ہوگا جو حقیقی معیاری عمودیت (مساوات ۳.۱۰) کی یاد دلاتی ہے؛ یہ اشاریے استمراری متغیر ہیں، اور کرونیٹر ڈیلٹا ڈیراک ڈیلٹا بن گیا ہے؛ تاہم اس کے علاوہ یہ ایک جیسی نظر آتی ہیں۔ میں مساوات ۳.۳۳ کو ڈیراک معیاری عمودیت کہوں گا۔

سب سے اہم بات یہ ہے کہ یہ امتیازی تفاعلات مکمل ہیں اور ان کے مجموعے (مساوات ۳.۱۱) کی جگہ اب مکمل استعمال ہوتا ہے: کسی بھی (مربع مکمل) تفاعل $f(x)$ کو درج ذیل روپ میں لکھا جاسکتا ہے۔

$$(۳.۳۴) \quad f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) f_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) e^{ipx/\hbar} dp$$

تو سب سے زیادہ سہولت (جواب تفاعل $c(p)$ ہوگا) کو فوراً سرترکیب سے حاصل کیا جاتا ہے۔

$$(۳.۳۵) \quad \langle f_{p'} | f \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \langle f_{p'} | f \rangle dp = \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \delta(p - p') dp = c(p')$$

چونکہ یہ توسیع (مساوات ۳.۳۴) درحقیقت ایک فوراً سر تبدیل ہے لہذا انہیں مسئلہ پلانشرال (مساوات ۲.۱۰۲) سے بھی حاصل کیا جاسکتا ہے۔ □

معیار حرکت کے امتیازی تفاعلات (مساوات ۳.۳۲) سائن نہیں جن کا طول موج درج ذیل ہے۔

$$(۳.۳۶) \quad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

یہ وہ ڈی بروگلی کلیہ (مساوات ۱.۳۹) ہے جس کا ثبوت مناسب وقت پر پیش کرنے کا وعدہ میں نے کیا تھا۔ یہ کلیہ، ڈی بروگلی کے تصور سے زیادہ پر اسرار ہے، چونکہ ہم اب جانتے ہیں کہ حقیقت میں ایسا کوئی ذرہ نہیں پایا جاتا جس کا معیار حرکت تعین ہوں۔ ہاں ہم متبادل معمول زنی ایسا موجدی اکٹھ بن سکتے ہیں جس کے معیار حرکت کی سرعت مختصر سی ہوگی اور ڈی بروگلی کا تعلق اس پر لاگو ہوگا۔

ہم مثال ۳.۲ سے کیا سمجھیں؟ اگرچہ \hbar کا کوئی بھی امتیازی تفاعل بلبرٹ فضا میں نہیں رہتا، ان کا ایک مخصوص کنبہ (جن کی امتیازی افتدار حقیقی ہوں گی) متربی ”مضافات“ میں رہتا ہے اور یہ بظاہر متبادل معمول زنی ہے۔ یہ ممکن طبعی حالات کو ظاہر نہیں کرتے، لیکن اس کے باوجود کارآمد ثابت ہوتے ہیں (جیسا کہ ہم یک بعدی بکھراؤ کو پڑھتے ہوئے دیکھ چکے ہیں)۔^{۳۷}

مثال ۳.۳: عامل مقام کی امتیازی افتدار اور امتیازی تفاعلات تلاش کریں۔

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

$$(۳.۳۷) \quad x g_y(x) = y g_y(x)$$

یہاں (کسی بھی ایک امتیازی تفاعل کے لیے) y ایک مقررہ عدد، جبکہ x استمراری متغیر ہے۔ متغیر x کا ایک کون سا تفاعل ہوگا جس کی خاصیت یہ ہو کہ اسے x سے ضرب دینا، اس کو y سے ضرب دینے کے

^{۳۷} متغیر حقیقی امتیازی افتدار والے امتیازی تفاعلات کے بارے میں کیا کہا جاسکتا ہے؟ یہ نہ صرف متبادل معمول زنی ہے بلکہ $\pm\infty$ پر بے متابوڑ ہتے ہیں۔ اس خطے میں، جس کو میں ”مضافات“ کہہ چکا ہوں، اگرچہ تفاعلات کی اپنی (مستثنائی) اندرونی ضرب نہیں پائی جاتی، تاہم یہ بلبرٹ فضا میں تمام ارکان کے ساتھ اندرونی ضرب دیتے ہیں۔ لیکن ایسا \hbar کے ان امتیازی تفاعلات کے لئے درست نہیں ہوگا جن کی امتیازی افتدار غیر حقیقی ہوں۔ بالخصوص، میں دیکھا چکا ہوں کہ بلبرٹ فضا میں تفاعلات کے لئے عامل معیار حرکت ہر مشی ہوگا، اگرچہ اس کی دلیل پیش کرتے ہوئے (مساوات ۳.۱۹) میں) سرحدی جزو کو رد کیا گیا۔ (جب تک f بلبرٹ فضا میں پایا جاتا ہو) یہ رکن تب بھی صفر ہوگا جب \hbar کا امتیازی تفاعل g ہو جس کی امتیازی متدر حقیقی ہو، تاہم امتیازی متدر کا خیالی حصہ ہونے کی صورت میں ایسا نہیں ہوگا۔ اس نقطہ نظر سے ہر مخلوط عدد، عامل \hbar کی امتیازی متدر ہوگا، تاہم صرف حقیقی اعداد ہر مشی عامل \hbar کی امتیازی افتدار ہوں گے؛ باقی اعداد اس خطے سے باہر پائے جائیں گے جس میں \hbar ہر مشی ہو۔

مسترداؤف ہو؟ ظاہر ہے کہ ماسوائے نقطہ $x = y$ کے ایسی خاصیت والا تفاعل صفر ہی ہوگا؛ یہ ڈیراک ڈیلٹا تفاعل کے علاوہ اور کچھ نہیں۔

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

اس مرتبہ امتیازی قدر کو لازماً حقیقی ہونا چاہیے؛ امتیازی تفاعلات مربع متکامل نہیں ہیں، تاہم اب بھی یہ ڈیراک معیاری عمودیت پر پورا اترتے ہیں۔

$$(۳.۳۸) \quad \int_{-\infty}^{\infty} g_{y'}^* g_y(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y') \delta(x - y) dx = |A|^2 \delta(y - y')$$

اگر ہم $A = 1$ لیں تاکہ

$$(۳.۳۹) \quad g_y(x) = \delta(x - y)$$

ہو تب درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۴۰) \quad \langle g_{y'} | g_y \rangle = \delta(y - y')$$

یہ امتیازی تفاعلات بھی مکمل ہیں:

$$(۳.۴۱) \quad f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} c(y) g_y(x) dy = \int_{-\infty}^{\infty} c(y) \delta(x - y) dy,$$

جہاں درج ذیل ہوگا

$$(۳.۴۲) \quad c(y) = f(y)$$

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

اگر کسی ہر مشی عامل کا طیف استمراری ہو (جس کی امتیازی اقدار کو استمراری متغیر p یا یہاں پیش مثالوں میں y ، اور بعد ازاں عموماً z کا نام دیا جائے گا)، تو اس کے امتیازی تفاعلات ناقتابل معمول زنی ہوں گے، یہ ہلبرٹ فضا میں نہیں پائے جائیں گے اور کسی بھی ممکنہ طبعی حال کو ظاہر نہیں کریں گے؛ ہاں حقیقی امتیازی اقدار والے امتیازی تفاعلات ڈیراک معیاری عمودیت پر پورا اترتے ہیں اور مکمل ہوتے ہیں (وہاں مجموعے کی جگہ اب مکمل استعمال ہوگا)۔ خوش قسمتی سے ہمیں صرف اتنا ہی چاہیے تھا۔

سوال ۳.۹:

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

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

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

سوال ۳.۱۰: کیا لامستثنائی چوکور کنویں کا زمینی حال معیار حرکت کا امتیازی تفاعل ہے؟ اگر ایسا ہے تب اس کا معیار حرکت کیا ہوگا؟ اگر ایسا نہیں ہے تب ایسا کیوں نہیں ہے؟

۳.۴. متمم شماراتی مفہوم

ایک ذرے کا کسی مخصوص مقام پر پائے جانے کے احتمال کا حساب، اور کسی متابل مشاہدہ مقدار کی توقعاتی قیمت تعیین کرنا میں نے آپ کو باب ۱ میں دکھایا۔ باب ۲ میں آپ نے توانائی کی پیمائش کے ممکنہ نتائج اور ان کا احتمال حاصل کرنا سیکھا۔ میں اب متمم شماراتی مفہوم^{۳۸} پیش کر سکتا ہوں جس میں یہ تمام شامل ہیں اور جو ہمیں ہر پیمائش کے ممکنہ نتائج اور ان کا احتمال حاصل کرنے کے متابل بناتی ہے۔ متمم شماراتی مفہوم اور مساوات شرودنگر (جو وقت کے ساتھ تفاعل موج کی ارتقاء کے بارے میں ہمیں بتاتی ہے) کو انشائی میکانیات کی بنیاد ہے۔

متمم شماراتی مفہوم: حال $\Psi(x, t)$ میں ایک ذرے کی ایک متابل مشاہدہ $Q(x, P)$ کی پیمائش ہر صورت ہر مشی حاصل $\hat{Q}(x, -i\hbar d/dx)$ کی کوئی ایک امتیازی مقدار دے گی۔ اگر \hat{Q} کا طیف غیر مسلسل ہو تب معیاری عمودی امتیازی تفاعل $f_n(x)$ سے منسلک کوئی مخصوص امتیازی مقدار q_n کے حصول کا احتمال

$$|c_n|^2 \text{ ہوگا جہاں } c_n = \langle f_n | \Psi \rangle \text{ ہے۔} \quad (۳.۴۳)$$

استمراری طیف کی صورت میں جہاں امتیازی مقدار $q(z)$ حقیقی ہوں اور منسلک ڈیراک معیاری عمودی امتیازی تفاعلات $f_z(x)$ ہوں، سمت dz میں نتیجہ حاصل ہونے کا احتمال

$$|c(z)|^2 dz \text{ ہوگا جہاں } c(z) = \langle f_z | \Psi \rangle \text{ ہوگا۔} \quad (۳.۴۴)$$

پیمائشی عمل کے بنا پر تفاعل موج مطابقتی امتیازی حال پر منہدم^{۳۹} ہوتا ہے۔^{۴۰}

شماراتی مفہوم ان تمام تصورات سے یکسر مختلف ہے جو کلاسیکی طبیعیات میں پائے جاتے ہیں۔ اس کو ایک مختلف نقطہ نظر سے دیکھنا بہتر ہوگا: چونکہ ایک متابل مشاہدہ عامل کے امتیازی تفاعلات مکمل ہوں گے لہذا تفاعل موج کو ان کا ایک خطی جوڑ لکھا جاسکتا ہے۔

$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n f_n(x) \quad (۳.۴۵)$$

generalized statistical interpretation^{۳۸}
collapse^{۳۹}

^{۴۰} استمراری طیف کی صورت میں پیمائشی قیمت کے گرد و نواہ میں، پیمائشی آلہ کی حقیقت پر منحصر محدود سمت پر، تفاعل موج منہدم ہوگا۔

(اپنی آسانی کے لیے میں فرض کرتا ہوں کہ طیف غیر مسلسل ہے؛ اس دلیل کو با آسانی وسعت دے کر استمراری صورت کے لئے پیش کیا جاسکتا ہے۔) چونکہ امتیازی تفاعل معیاری عمودی ہیں لہذا ان کے عددی سر کو فورسٹر ترکیب سے حاصل کیا جاسکتا ہے۔^{۴۱}

$$(۳.۴۶) \quad c_n = \langle f_n | \Psi \rangle = \int f_n(x) \Psi(x, t) dx$$

کئی طور پر ” Ψ میں f_n کی مقدار“ کو c_n ظاہر کرتی ہے اور چونکہ کوئی ایک پیمائش \hat{Q} کی کوئی ایک امتیازی مقدار دے گی لہذا اہم توقع کرتے ہیں کہ اس مخصوص امتیازی مقدار q_n کے حصول کا احتمال Ψ میں ” f_n کی مقدار“ پر منحصر ہوگا۔ اب چونکہ احتمال کو تفاعل عمل موج کی مطلق قیمت کا مربع تعین کرتا ہے لہذا پیمائش کی ٹھیک ٹھیک قیمت $|c_n|^2$ ہوگی۔ متعمم شمار یاتی مفہوم کا یہ ایک اثر ہے۔^{۴۲}

ہاں (تمام ممکنہ نتائج کا) کل احتمال اکائی کے برابر ہوگا

$$(۳.۴۷) \quad \sum_n |c_n|^2 = 1$$

جو یقیناً تفاعل عمل موج کی معمول زنی کرنے سے حاصل ہوتا ہے۔

$$(۳.۴۸) \quad \begin{aligned} 1 = \langle \Psi | \Psi \rangle &= \left\langle \left(\sum_{n'} c_{n'} f_{n'} \right) \middle| \left(\sum_n c_n f_n \right) \right\rangle = \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n \langle f_{n'} | f_n \rangle \\ &= \sum_{n'} \sum_n c_{n'}^* c_n \delta_{n'n} = \sum_n c_n^* c_n = \sum_n |c_n|^2 \end{aligned}$$

اسی طرح تمام ممکنہ امتیازی مقدار کو انفرادی طور پر اس مقدار کے حصول کے احتمال کے ساتھ ضرب دے کر تمام کا مجموعہ لینے سے Q کی توقعاتی قیمت حاصل ہوگی۔

$$(۳.۴۹) \quad \langle Q \rangle = \sum_n q_n |c_n|^2.$$

یقیناً درج ذیل ہوگا

$$(۳.۵۰) \quad \langle Q \rangle = \langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \left\langle \left(\sum_{n'} c_{n'} f_{n'} \right) \middle| \left(\hat{Q} \sum_n c_n f_n \right) \right\rangle$$

^{۴۱} دھیان رہے کہ تابعیت وقت، جو یہاں مسئلہ خیز نہیں ہے، عددی سروں کا حصہ ہے۔ اس کو واضح رکھنے کی خاطر ہمیں $c_n(t)$ لکھنا چاہیے۔

^{۴۲} یہاں بھی احتیاط سے کام لیتے ہوئے میں یہ دعویٰ نہیں کرتا کہ ”اس ذرے کا حال f_n میں پائے جانے کا احتمال $|c_n|^2$ ہے۔“ یہ کہنا بالکل غلط ہوگا۔ صرف یہ کہنا درست ہوگا کہ ذرہ حال Ψ میں ہے۔ ہاں Q کی پیمائش سے قیمت q_n کے حصول کا احتمال $|c_n|^2$ ہوگا۔ ایسی پیمائش اس حال کو تفاعل عمل موج f_n پر منہدم کرتی ہے لہذا اہم کہہ سکتے ہیں کہ ایک ذرہ جو حال Ψ میں ہے، اس کا Q کی پیمائش کے بعد حال f_n میں ہونے کا احتمال $|c_n|^2$ ہے، وغیرہ وغیرہ، تاہم یہ ایک بالکل مختلف دعویٰ ہے۔

جسے $\hat{Q}f_n = q_n f_n$ کی بدولت درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(۳.۵۱) \quad \langle Q \rangle = \sum_{n'} \sum_n c_n^* c_n q_n \langle f_{n'} | f_n \rangle = \sum_{n'} \sum_n c_n^* c_n q_n \delta_{n' n} \sum_n q_n |c_n|^2.$$

کم از کم یہاں تک، چیزیں ٹھیک نظر آرہی ہیں۔

کیا ہم مقام کی پیمائش کی اصل شماریاتی مفہوم کو اس زبان میں پیش کر سکتے ہیں؟ جی ہاں؛ اگرچہ یہ توپ سے چومارنے والی بات ہوگی، آئیں اس کی تصدیق کرتے ہیں۔ حال Ψ میں ایک ذرے کے لیے x کی پیمائش لازماً عامل مقام کا کوئی ایک امتیازی فتر دے گا۔ ہم مثال ۳.۳ میں دیکھ چکے ہیں کہ ہر (حقیقی) عدد y متغیر x کا امتیازی فتر ہوگا، اور اس کا مطابقتی (ڈیراک معیاری عمودی) امتیازی تفاعل $\delta(x - y) = g_y(x)$ ہوگا۔ ظاہر اور ج ذیل ہوگا

$$(۳.۵۲) \quad c(y) = \langle g_y | \Psi \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - y) \Psi(x, t) dx = \Psi(y, t)$$

لہذا سعت dy میں نتیجہ حاصل ہونے کا احتمال $|\Psi(y, t)|^2$ ہوگا جو ٹھیک اصل شماریاتی مفہوم ہے۔

معیار حرکت کے لیے کیا ہوگا؟ ہم مثال ۳.۲ میں دیکھ چکے ہیں کہ عامل معیار حرکت کے امتیازی تفاعلات $f_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$ ہوں گے لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۵۳) \quad c(p) = \langle f_p | \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, t) dx$$

یہ اتنی اہم معتد ہے کہ ہم اسے ایک مخصوص نام سے پکارتے اور ایک مخصوص علامت سے ظاہر کرتے ہیں: اس کو معیار حرکت فضا تفاعل موج^۳ پکارا اور $\Phi(p, t)$ سے ظاہر کیا جاتا ہے۔ یہ درحقیقت (مقامی فضا) تفاعل موج $\Psi(x, t)$ کا فورسٹر بدل ہے جو مسئلہ پلانشرال کے تحت اس کا الٹ فورسٹر بدل ہے ہوگا۔

$$(۳.۵۴) \quad \Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, t) dx,$$

$$(۳.۵۵) \quad \Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} \Phi(p, t) dp,$$

متعمم شماریاتی مفہوم کے تحت سعت dp میں معیار حرکت کی پیمائش کے حصول کا احتمال درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۵۶) \quad |\Phi(p, t)|^2 dp$$

مثال ۳.۴: ایک ذرہ جس کی کمیت m ہے ڈیلٹا تفاعل کنواں $V(x) = -\alpha\delta(x)$ میں مقید ہے۔ معیار حرکت کی پیمائش کا $p_0 = m\alpha/\hbar$ سے بڑی قیمت دینے کا احتمال کیا ہے؟

حل: اس کا (مقامی فنکشن) تفاعل موج (مساوات ۲.۱۲۹) درج ذیل ہے (جہاں $E = -m\alpha^2/2\hbar^2$ ہے)۔

$$\Psi(x, t) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2} e^{-iEt/\hbar}$$

یوں معیار حرکی فنکشن تفاعل موج درج ذیل ہوگا۔

$$\Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} e^{-iEt/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar} e^{-m\alpha|x|/\hbar^2} dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{p_0^{3/2} e^{-iEt/\hbar}}{p^2 + p_0^2}$$

(میں نے مکمل کا حل جدول سے دیکھ کر لکھا ہے)۔ یوں احتمال درج ذیل ہوگا

$$\begin{aligned} \frac{2}{\pi} p_0^3 \int_{p_0}^{\infty} \frac{1}{(p^2 + p_0^2)^2} dp &= \frac{1}{\pi} \left[\frac{pp_0}{p^2 + p_0^2} + \tan^{-1} \left(\frac{p}{p_0} \right) \right] \Big|_{p_0}^{\infty} \\ &= \frac{1}{4} - \frac{1}{2\pi} = 0.0908 \end{aligned}$$

□

(اور یہاں بھی میں نے مکمل کا حل جدول سے دیکھ کر لکھا ہے)۔

سوال ۳.۱۱: ہارمونی سرکش کے زمینی حال میں ایک ذرے کی معیاری حرکی فنکشن تفاعل موج $\Phi(p, t)$ تلاش کریں۔ اس حال میں (اسی توانائی کے) ایک ذرہ کے p کی پیمائش کا کلاسیکی سمت کے باہر نتیجہ کا احتمال (دو یا معنی ہندسوں تک) کیا ہوگا؟ اشارہ: جواب کے عددی حصے کے لئے ”عمومی تقسیم“ یا ”تفاعل خنل“ کے جدول سے مدد لیں یا کمپیوٹر استعمال کریں۔

سوال ۳.۱۲: درج ذیل دکھائیں۔

$$(۳.۵۷) \quad \langle x \rangle = \int \Phi^* \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) \Phi dp.$$

اشارہ: دھیان رہے کہ $xe^{(ipx/\hbar)} = -i\hbar \left(\frac{d}{dp} \right) e^{(ipx/\hbar)}$ ہے۔

یوں معیار حرکی فنکشن میں عامل متعام $i\hbar \partial/\partial p$ ہوگا۔ عمومی طور پر درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۵۸) \quad \langle Q(x, p) \rangle = \begin{cases} \int \Psi^* \hat{Q} \left(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx, & \text{مقامی فنکشن میں} \\ \int \Phi^* \hat{Q} \left(-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p}, p \right) \Phi dp, & \text{معیار حرکی فنکشن میں} \end{cases}$$

اصولی طور پر آپ تمام حساب و کتاب مقامی فنکشن کی بجائے معیار حرکی فنکشن میں کر سکتے ہیں (اگرچہ ایسا کرنا عموماً اتنا آسان نہیں ہوگا)۔

۳.۵ اصول عدم یقینیت

میں نے عدم یقینیت کے اصول کو $\hbar/2$ کی صورت میں حصہ ۱.۶ میں بیان کیا جس کو آپ کئی سوالات حل کرتے ہوئے دیکھ چکے ہیں۔ تاہم اس کا ثبوت ہم نے ابھی تک پیش نہیں کیا ہے۔ اس حصہ میں ہم اصول عدم یقینیت کی عمومی صورت پیش کریں گے اور اس کے چند مضمرات جانیں گے۔ ثبوت کا دلیل خوبصورت ضرور ہے لیکن ساتھ ہی پیچیدہ بھی ہے لہذا اتوجہ رکھیں۔

۳.۵.۱ اصول عدم یقینیت کا ثبوت

کسی بھی متابل مشاہدہ A کے لیے درج ذیل ہوگا (مساوات 21.3):

$$\sigma_A^2 = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi \rangle = \langle f | f \rangle$$

جہاں $f \equiv (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi$ ہے۔ اسی طرح کسی دوسرے متابل مشاہدہ B کے لیے

$$\sigma_B^2 = \langle g | g \rangle \quad \text{ہوگا جہاں} \quad g \equiv (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi$$

یوں (شوارز عدم مساوات مساوات 7.3 کے تحت) درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۵۹) \quad \sigma_A^2 \sigma_B^2 = \langle f | f \rangle \langle g | g \rangle \geq |\langle f | g \rangle|^2$$

اب کسی بھی مخلوط عدد z کے لیے درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۶۰) \quad |z|^2 = [(\text{حقیقی}(z))^2 + [(\text{خیالی}(z))^2] \geq [(\text{خیالی}(z))^2] = \left[\frac{1}{2i} (z - z^*) \right]^2$$

یوں $z = \langle f | g \rangle$ لیتے ہوئے

$$(۳.۶۱) \quad \sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} [\langle f | g \rangle - \langle g | f \rangle] \right)^2$$

ہوگا لیکن $\langle f | g \rangle$ کو درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$\begin{aligned} \langle f | g \rangle &= \langle (\hat{A} - \langle A \rangle) \Psi | (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle = \langle \Psi | (\hat{A} - \langle A \rangle) (\hat{B} - \langle B \rangle) \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\hat{A} \hat{B} - \hat{A} \langle B \rangle - \hat{B} \langle A \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle) \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi | (\hat{A} \hat{B} \Psi) - \langle B \rangle \langle \Psi | \hat{A} \Psi \rangle - \langle A \rangle \langle \Psi | \hat{B} \Psi \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \langle \Psi | \Psi \rangle \\ &= \langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \\ &= \langle \hat{A} \hat{B} \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \end{aligned}$$

اسی طرح درج ذیل بھی لکھا جاسکتا ہے

$$\langle g|f\rangle = \langle \hat{B}\hat{A}\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$$

لہذا

$$\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle = \langle \hat{A}\hat{B}\rangle - \langle \hat{B}\hat{A}\rangle = \langle [\hat{A}, \hat{B}]\rangle,$$

ہوگا جہاں

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

ان دو عاملین کا مقابلہ ہے (مساوات ۲.۴۸ ہے)۔ نتیجتاً درج ذیل ہوگا۔

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle \right)^2 \quad (۳.۶۲)$$

یہ اصول عدم یقینیت^{۴۴} کی عمومی صورت ہے۔ آپ یہاں سوچ سکتے ہیں کہ اس مساوات کا دایاں ہاتھ منفی ہے؟ یقیناً ایسا نہیں ہے؛ دوہر مشی عاملین کے مقابلہ میں بھی i کا جذبہ پایا جاتا ہے جو اس مساوات میں موجود i کے ساتھ کٹ جاتا ہے۔^{۴۵}

مثال کے طور پر، فرض کریں مقام ($\hat{A} = x$) پہلا اور معیار حرکت ($\hat{B} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$) دوسرا تابل مشاہدہ ہے۔ ہم باب ۲ (مساوات ۲.۵۱) میں ان کا مقابلہ

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

حاصل کرچکے ہیں لہذا

$$\sigma_x^2 \sigma_p^2 \geq \left(\frac{1}{2i} i\hbar \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2$$

یا، چونکہ تعریف کی رو سے معیاری انحراف مثبت ہوتے ہیں، درج ذیل ہوگا۔

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (۳.۶۳)$$

یہ اصل ہیزنبرگ اصول عدم یقینیت ہے، جو زیادہ عمومی مسئلے کی ایک مخصوص صورت ہے۔

حقیقتاً ہر دو تابل مشاہدہ جوڑی جن کے عاملین غیر متقابل ہوں گے لیے ایک عدد ”اصول عدم یقینیت“ پایا جاتا ہے؛ ہم انہیں غیر ہم آہنگ قابل مشاہدہ^{۴۶} کہتے ہیں۔ غیر ہم آہنگ تابل مشاہدہ کے مشترکہ امتیازی تقاضا عمل نہیں پائے

uncertainty principle^{۴۴}

^{۴۵} یہ کہنا زیادہ درست ہوگا کہ دوہر مشی عاملین کا مقابلہ خود مخالف ہر مشی ($\hat{Q}^+ = -\hat{Q}$) ہوگا اور اس کی توقعاتی قیمت خیالی ہوگی (سوال ۳.۲۶)۔

incompatible observables^{۴۶}

جاتے؛ کم از کم ان کے مشترکہ امتیازی تفاعلات کا مکمل سلسلہ نہیں ہوگا (سوال ۳.۱۵ دیکھیں)۔ اس کے برعکس ہم آہنگ (مقلوب) متابل مشاہدہ کے مشترکہ امتیازی تفاعلات کا مکمل سلسلہ ممکن ہے۔^{۴۷}

مثال کے طور پر، (جیسا ہم باب ۴ میں دیکھیں گے) ہائیڈروجن جوہر کا ہیملٹنی، اس کی زاویائی معیار حرکت کی مقدار، اور زاویائی معیار حرکت کا z جزو باہمی ہم آہنگ متابل مشاہدہ ہیں، اور ہم ان تینوں کے بیک وقت امتیازی تفاعل تیار کر کے انہیں متعلقہ امتیازی افتدار کے لحاظ سے نام دیں گے۔ اس کے برعکس، چونکہ معتام اور معیار حرکت عاملین غیر ہم آہنگ ہیں لہذا معتام کا ایسا کوئی امتیازی تفاعل نہیں پایا جاتا جو معیار حرکت کا بھی امتیازی تفاعل ہو۔

یاد رہے کہ اصول عدم یقینیت کو انشائی نظریہ میں ایک اضافی مفروضہ نہیں ہے، بلکہ یہ شماراتی مفہوم کا ایک نتیجہ ہے۔ آپ تعجب سے پوچھ سکتے ہیں کہ تجربہ گاہ میں ہم ایک ذرے کا معتام اور معیار حرکت دونوں کیوں تعین نہیں کر سکتے ہیں؟ آپ یقیناً ایک ذرے کا معتام ناپ سکتے ہیں تاہم اس پیمائش سے تفاعل موج ایک نقطے پر نوکیلی صورت اختیار کرتے ہوئے منہدم ہوتا ہے، اور آپ (فوریسر نظریہ سے) جانتے ہیں کہ طول موج کی وسیع سمت نوکیلی تفاعل موج پیدا کرتی ہے، لہذا اس کے معیار حرکت کی وسعت بھی زیادہ ہو گی۔ اب اگر آپ ذرے کی معیار حرکت کی پیمائش کریں تو یہ حال ایک لمبی سائنس موج پر منہدم ہوگا، جس کا طول موج (اب) پوری طرح معین لیکن معتام پہلی پیمائش سے مختلف ہوگا۔^{۴۸} مسئلہ یہ ہے کہ دوسری پیمائش پہلی پیمائش کے نتیجے کو غیر متمثل کرتی ہے۔ صرف اس صورت دوسری پیمائش ذرے کے حال پر اثر انداز نہیں ہوگی جب تفاعل موج بیک وقت دونوں متابل مشاہدہ کا امتیازی حال ہو (ایسی صورت میں دوسری پیمائش سے کچھ بھی تبدیل نہیں ہوگا)۔ تاہم ایسا عموماً متب ممکن ہوگا جب دونوں متابل مشاہدہ ہم آہنگ ہوں۔

سوال ۳.۱۳:

۱. درج ذیل مماثل مقلوب ثابت کریں۔

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (3.14)$$

ب. درج ذیل دکھائیں۔

$$[x^n, p] = i\hbar nx^{n-1}$$

^{۴۷} یہ اس حقیقت کے ساتھ مطابقت رکھتا ہے کہ غیر متقابلوں کو ہیک وقت وتری نہیں بنایا جاسکتا ہے (یعنی، انہیں ایک حسی میٹابہ تبادلہ سے وتری نہیں بنایا جاسکتا ہے)، جبکہ مقلوب ہر متقابلوں کو ہیک وقت وتری بنایا جاسکتا ہے۔ حصہ ۵.۱ دیکھیں۔

^{۴۸} جناب بوہر کو یہ ڈھونڈنے میں کافی دشواری پیش آئی کہ (مثلاً) x کی پیمائش کی طرح اس سے قبل موجود p کی قیمت کو تباہ کرتی ہے۔ حقیقت یہ ہے کہ کسی بھی پیمائش کے لئے ضروری ہے کہ ذرے کو کسی طرح کریداجائے، مثلاً اس پر شعاع روشن کی جائے۔ تاہم ایسے نور یہ اس ذرے کو معیار حرکت منتقل کرتے ہیں جو آپ کے متابو میں نہیں ہے۔ اب آپ ذرے کا معتام جانتے ہیں لیکن اس کا معیار حرکت نہیں جانتے۔

ج. دکھائیں کہ زیادہ عمومی طور پر کسی بھی تفاعل $f(x)$ کے لئے درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۶۵) \quad [f(x), p] = i\hbar \frac{df}{dx}$$

سوال ۳.۱۴: مقام ($A = x$) میں عدم یقینیت اور توانائی ($B = p^2/2m + V$) میں عدم یقینیت کا درج ذیل اصول عدم یقینیت ثابت کریں۔

$$\sigma_x \sigma_H \geq \frac{\hbar}{2m} |\langle p \rangle|$$

ساکن حالات کیلئے یہ آپ کو کوئی زیادہ معلومات فراہم نہیں کرتا؛ ایسا کیوں ہے؟

سوال ۳.۱۵: دکھائیں کہ دو غیر مقلوب عاملین کے مشترکہ امتیازی تفاعلات کا مکمل سلسلہ نہیں پایا جاتا ہے۔ اشارہ: دکھائیں اگر \hat{P} اور \hat{Q} کے مشترکہ امتیازی تفاعلات کا مکمل سلسلہ پایا جاتا ہو، تب ہلبرٹ فضا میں کسی بھی تفاعل کیلئے $0 = [\hat{P}, \hat{Q}]f$ ہوگا۔

۳.۵.۲ کم سے کم عدم یقینیت کا موجی اکٹھ

ہم ہارمونی سرکش کی زمینی حال (سوال ۲.۱۱) اور آزاد ذرے کی گاوسی موجی اکٹھ (سوال ۲.۲۲) کے تفاعل موج دیکھ چکے ہیں جو مقام و معیار حرکت کی عدم یقینیت کی حد ($\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$) کو چھوتے ہیں۔ اس سے ایک دلچسپ سوال پیدا ہوتا ہے: کم سے کم عدم یقینیت کا سب سے زیادہ عمومی موجی اکٹھ کیا ہوگا؟ اصول عدم یقینیت کے ثبوت کے دلائل میں عدم مساوات دو نقطوں پر پیش آیا: مساوات ۳.۵۹ اور مساوات ۳.۶۰۔ ہم دونوں کو عدم مساوات کی بجائے مساوات لیتے ہوئے دیکھتے ہیں کہ Ψ کے بارے میں کیا معلومات فراہم ہوتی ہے۔

جب ایک تفاعل دوسرے تفاعل کا مضرب ہو: $g(x) = cf(x)$ ، جہاں c کوئی مخلوط عدد ہے تب شوارز عدم مساوات ایک مساوات بن جاتی ہے (سوال ۸.5 دیکھیں)۔ ساتھ ہی میں مساوات ۳.۶۰ میں z کے حقیقی جز کو رد کرتا ہوں؛ جب $0 = \text{حقیقی}(z)$ ہو، یعنی جب

$$\langle f|g \rangle_{\text{حقیقی}} = (c\langle f|f \rangle)_{\text{حقیقی}} = 0$$

ہو تب مساوات کی صورت پائی جائے گی۔ اب $\langle f|f \rangle$ یقیناً حقیقی ہے، لہذا مستقل c لازماً حالص خیالی ہوگا؛ جسے ہم ia لکھتے ہیں۔ یوں کم سے کم عدم یقینیت کیلئے لازم اور کافی شرط درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۶۶) \quad g(x) = ia f(x), \quad a_{\text{حقیقی}}$$

مقام و معیار حرکت اصول عدم یقینیت کیلئے یہ شرط درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$(۳.۶۷) \quad \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} - \langle p \rangle \right) \Psi = ia(x - \langle x \rangle) \Psi$$

جو متغیر x کے تغا عمل Ψ کا تفسر قی مساوات ہے۔ اس کا عمومی حل درج ذیل ہے (سوال ۳.۱۶)۔

$$\Psi(x) = Ae^{-a(x-\langle x \rangle)^2/2\hbar} e^{ip(x)/\hbar} \quad (۳.۶۸)$$

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ کم سے کم عدم یقینیت کا موجی اکھ در حقیقت گاوسی ہوگا اور جو دو مثالیں ہم دیکھ چکے ہیں وہ بھی گاوسی تھیں۔^{۴۹}

سوال ۳.۱۶: مساوات ۳.۶۸ کو $\Psi(x)$ کیلئے حل کریں۔ دھیان رہے کہ $\langle x \rangle$ اور $\langle p \rangle$ مستقلا ہیں۔

۳.۵.۳ توانائی و وقت اصول عدم یقینیت

مقام و معیار حرکت اصول عدم یقینیت کو عموماً درج ذیل روپ میں لکھا جاتا ہے۔

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (۳.۶۹)$$

یکساں تیار کردہ نظام کی بار بار پیمائش کے نتائج کے معیاری انحراف کو بعض اوقات لاپرواہی سے Δx (متغیر x کی ”عدم یقینیت“) لکھا جاتا ہے جو ایک کمزور علامت ہے۔ مساوات ۳.۶۹ کی طرح کا توانائی و وقت اصول عدم یقینیت^{۵۰} درج ذیل ہے۔

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} \quad (۳.۷۰)$$

چونکہ خصوصی نظریہ اضافت کی مقام و وقت چار سمتیات میں x اور t (بلکہ ct) اکٹھے شامل ہوتے ہیں، جبکہ توانائی و معیار حرکت چار سمتیات میں p اور E (بلکہ E/c) اکٹھے شامل ہوتے ہیں لہذا خصوصی نظریہ اضافت کے نقطہ نظر سے توانائی و وقت روپ کو مقام و معیار حرکت روپ کا نتیجہ تصور کیا جاسکتا ہے۔ یوں نظریہ اضافت میں مساوات ۳.۷۰ اور مساوات ۳.۶۹ ایک دوسرے کیلئے لازم و ملزوم ہیں۔ لیکن ہم اضافیتی کوانٹائی میکانیات نہیں کر رہے ہیں۔ مساوات شرودنگر صریحاً غیر اضافی ہے۔ یہ t اور x کو ایک جیسی اہمیت نہیں دیتی ہے (یہ بطور تفسر قی مساوات t میں یک رتبی جبکہ x میں دور تبی ہے)، اور مساوات ۳.۶۹ سے قطعاً مساوات ۳.۷۰ مراد نہیں لی جاسکتی ہے۔ میں اب توانائی و وقت اصول عدم یقینیت اخذ کرتا ہوں اور ایسا کرتے ہوئے کوشش کروں گا کہ آپ کو مطمئن کروں کہ مقام و معیار حرکت اصول عدم یقینیت کے ساتھ اسکی ظاہری مشابہت گمراہ کن ہے۔

اب مقام، معیار حرکت اور توانائی تمام تغیر پذیر متغیرات ہیں، جو کسی بھی وقت پر نظام کے متابل پیمائش خواص ہیں۔ تاہم (کم از کم غیر اضافی نظریہ میں) وقت تغیر پذیر متغیر نہیں ہے؛ آپ مقام اور توانائی کی

^{۴۹} دھیان رہے کہ صرف Ψ کو x کا تابع ہونا یہاں مسئلہ ہے؛ ”مستقلا“ a ، A ، $\langle x \rangle$ اور $\langle p \rangle$ تمام وقت کے تابع ہو سکتے ہیں، بلکہ Ψ کم سے کم صورت سے ارتقا کر سکتا ہے۔ میں صرف اشتاد عوی کرتا ہوں کہ اگر کسی لمحہ پر تغا عمل موج x کے لحاظ سے گاوسی ہو، تب (اس لمحہ پر) عدم یقینیت حاصل ضرب کم سے کم ہوگا۔

پیمائش کی طرح ایک ذرے کا وقت نہیں ناپ سکتے ہیں۔ وقت ایک غیر تابع متغیر ہے اور تغیر پذیر مقدار اس کے تفاسلات ہیں۔ بالخصوص توانائی و وقت اصول عدم یقینیت میں وقت کی متعدد پیمائشوں کی معیاری انحراف کو Δt ظاہر نہیں کرتا ہے؛ آپ کہہ سکتے ہیں (اور میں جلد اسکی زیادہ درست صورت پیش کروں گا) کہ یہ اس وقت کو ظاہر کرتا ہے جس میں نظام "کافی زیادہ" تبدیل ہوتا ہے۔

یہ دیکھنے کیلئے کہ نظام کتنی تیزی سے تبدیل ہوتا ہے، ہم وقت کے لحاظ سے کسی متبادل مشاہدہ $Q(x, p, t)$ کی توقعاتی قیمت کے تفرق کا حساب کرتے ہیں۔

$$\frac{d}{dt}\langle Q \rangle = \frac{d}{dt}\langle \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} | \hat{Q} \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi | \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi | \hat{Q} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle$$

اب مساوات شرودنگر درج ذیل کہتی ہے (جہاں $H = p^2/2m + V$ ہیمیلٹنی ہے)۔

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

یوں درج ذیل ہوگا۔

$$\frac{d}{dt}\langle Q \rangle = -\frac{1}{i\hbar}\langle \hat{H} \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle \Psi | \hat{Q} \hat{H} \Psi \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle$$

اب \hat{H} ہر مشی ہے لہذا $\langle \hat{H} \Psi | \hat{Q} \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{H} \hat{Q} \Psi \rangle$ اور یوں درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۷۱) \quad \frac{d}{dt}\langle Q \rangle = \frac{i}{\hbar}\langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} \right\rangle$$

یہ خود ایک دلچسپ اور کارآمد نتیجہ ہے (سوال ۳.۱۷ اور ۳.۳۱ دیکھیں)۔ عمومی صورت میں جہاں عامل صریحاً وقت کا تابع نہیں ہوگا، اسیہ کہتی ہے کہ توقعاتی قیمت کی تبدیلی کی شرح کو عامل اور ہیمیلٹنی کا مقابلہ تعین کرتا ہے۔ بالخصوص اگر \hat{H} اور \hat{Q} آپس میں متبادل تبدیل ہوں، تب $\langle Q \rangle$ مستقل ہوگا، اور اس نقطہ نظر سے Q بقائی مقدار ہوگا۔

اب مندرجہ کریں عمومی اصول عدم یقینیت (مساوات ۳.۶۲) میں ہم $A = H$ اور $B = Q$ لے کر مندرجہ کریں کہ Q صریحاً t کا تابع نہیں ہے۔ تب

$$\sigma_H^2 \sigma_Q^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle [\hat{H}, \hat{Q}] \rangle \right)^2 = \left(\frac{1}{2i} \frac{\hbar}{i} \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right)^2 = \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2 \left(\frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right)^2$$

ہوگا جس کو درج ذیل سادہ روپ میں لکھا جاسکتا ہے۔

$$(۳.۷۲) \quad \sigma_H \sigma_Q \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right|$$

اوقات کی صریحاً تابع عاملین بہت کم پائے جاتے ہیں لہذا عموماً $\partial \hat{Q} / \partial t = 0$ ہوگا۔ صریحاً تابعیت وقت کی مثال اسپن کی حناطر ایک ایسے ہارمونی مسر نقش کی محلی توانائی لیتے ہیں جس کے اسپرنگ کا مقباسب پلک تبدیل ہو رہا ہو (مثلاً درج حرارت تبدیل ہونے سے اسپرنگ زیادہ لمبکدار ہو جاتا ہو)؛ $Q = (1/2)m[\omega(t)]^2 x^2$

ہم $\sigma_H \equiv \Delta E$ اور درج ذیل تعریفات لیتے ہیں۔

$$(۳.۷۳) \quad \Delta t \equiv \frac{\sigma_Q}{|d\langle Q \rangle / dt|}$$

تب درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۷۴) \quad \Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

جو توانائی و وقت اصول عدم یقینیت ہے۔ یہاں Δt کی معنی کو دھیان دیں۔ چونکہ

$$\sigma_Q = \left| \frac{d\langle Q \rangle}{dt} \right| \Delta t,$$

ہے لہذا Δt اتنے وقت کو ظاہر کرتا ہے جتنے میں Q کی توقعاتی قیمت ایک معیاری انحراف کے برابر تبدیل ہو۔ بالخصوص Δt اس قابل مشاہدہ Q پر منحصر ہوگی جس پر آپ غور کر رہے ہوں؛ کسی ایک قابل مشاہدہ کی تبدیلی بہت تیز ہو سکتی ہے جبکہ دوسرے کی بہت سست ہو سکتی ہے۔ تاہم چھوٹی ΔE کی صورت میں تمام قابل مشاہدہ کی تبدیلی کی شرح بہت سست رفتار ہوگی؛ اس کو یوں بھی بیان کیا جاسکتا ہے کہ اگر ایک قابل مشاہدہ بہت تیزی سے تبدیل ہوتا ہو تب توانائی میں عدم یقینیت بہت زیادہ ہوگی۔

مثال ۳.۵: ساکن حال کی انتہائی صورت میں جہاں توانائی یکتا طور پر معین ہوگی، تمام توقعاتی قیمتیں وقت کے لحاظ سے مستقل ہوں گی ($\Delta E = 0 \Rightarrow \Delta t = \infty$)؛ جیسا ہم نے کچھ دیر پہلے (مساوات ۲.۹ میں) دیکھا۔ کچھ ہونے کے لیے ضروری ہے کہ کم از کم دو ساکن حالات کا خطی جوڑ لیا جائے، مثلاً درج ذیل۔

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

اگر a, b, ψ_1 اور ψ_2 حقیقی ہوں تب درج ذیل ہوگا۔

$$|\Psi(x, t)|^2 = a^2(\psi_1(x))^2 + b^2(\psi_2(x))^2 + 2a\psi_1(x)\psi_2(x) \cos\left(\frac{E_2 - E_1}{\hbar}t\right)$$

ایک ارتعاش کا دوری عرصہ $\tau = 2\pi\hbar / (E_2 - E_1)$ ہوگا۔ اندازاً بات کرتے ہوئے $\Delta E = E_2 - E_1$ اور $\Delta t = \tau$ لکھ کر درج ذیل لکھا جاسکتا ہے

$$\Delta E \Delta t = 2\pi\hbar$$

□

جو یقیناً $\geq \hbar/2$ ہے (ٹھیک ٹھیک حساب کے لیے سوال ۳.۱۸ دیکھیں)۔

مثال ۳.۶: کسی ایک مخصوص نقطہ سے آزاد ذرے کی موجی اکٹھ کتنی دیر میں گزرتی ہے (شکل ۳.۱)؟ کیفی طور پر

ہے، لہذا $E = p^2/2m$ ہوگا لیکن $\Delta t = \Delta x/v = m\Delta x/p$

$$\Delta E \Delta t = \frac{p\Delta p}{m} \frac{m\Delta x}{p} = \Delta x \Delta p$$



شکل ۳.۱: ایک آزاد ذرہ موجی اکٹھ نقطہ A کو پہنچتا ہے (مثال ۳.۶)۔

ہوگا جو مقام و معیار حرکت اصول عدم یقینیت کے تحت $\hbar/2 \geq$ ہوگا (ٹھیک ٹھیک حساب کے لیے سوال ۳.۱۹ دیکھیں)۔

□

مثال ۳.۷: ذرہ Δ تقریباً 10^{-23} سیکنڈ حیات رہنے کے بعد خود بخود ٹکڑے ہو جاتا ہے۔ اس کی کیمت کی تمام پیمائشوں کا مستطیلی ترسیل، جس کے شکل کا قوس دے گا جس کا وسط $1232 \text{ MeV}/c^2$ پر اور چوڑائی تقریباً $120 \text{ MeV}/c^2$ ہوگی (شکل ۳.۲)۔ ساکن صورت توانائی (mc^2) کیوں بعض اوقات 1232 سے زیادہ اور بعض اوقات اس سے کم حاصل ہوتی ہے؟ کیا یہ تجرباتی پیمائش کی حائل کے بنا پر ہے؟ جی نہیں کیوں کہ

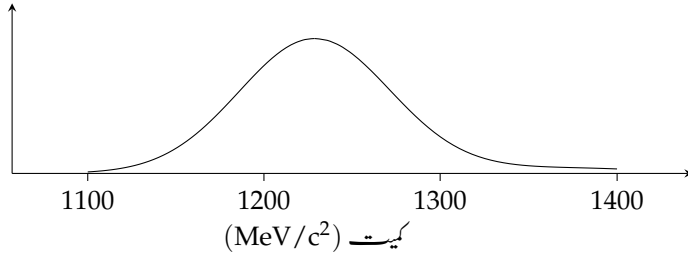
$$\Delta E \Delta t = \left(\frac{120}{2} \text{ MeV} \right) (10^{-23} \text{ s}) = 6 \times 10^{-22} \text{ MeV s}$$

ہے جبکہ $\hbar/2 = 3 \times 10^{-22} \text{ MeV s}$ ہے۔ یوں کیمت میں وسعت اتنا ہی کم ہے جتنا اصول عدم یقینیت اجازت دیتا ہے؛ اتنا کم عرصہ حیات کے ذرے کی کیمت پوری طرح معین نہیں ہو سکتی ہے۔^{۵۲} □

ان مثالوں میں ہم نے جزو Δt کے کئی مخصوص مطلب دیکھے: مثال ۳.۵ میں اس سے مراد طول موج تھا؛ مثال ۳.۶ میں اس سے مراد وہ دورانیہ تھا جس میں ایک ذرہ کسی نقطہ سے گزرتا ہے؛ مثال ۳.۷ میں یہ ایک غیر مستحکم ذرے کے عرصہ حیات کو ظاہر کرتا ہے۔ تاہم تمام صورتوں میں Δt اس دورانیہ کو ظاہر کرتا ہے جس میں نظام میں ”کافی زیادہ“ تبدیلی رونما ہو۔

عموماً کہا جاتا ہے کہ اصول عدم یقینیت کے بنا پر کوانٹائی میکینیات میں توانائی صحیح معنوں میں بقائی نہیں ہے، یعنی آپ کو اجازت ہے کہ آپ توانائی ΔE ”ادھار“ لے کر وقت $\Delta t \approx \hbar/(2\Delta E)$ کے اندر ”واپس“ کریں۔ توانائی کی بقا کی جتنی زیادہ خلاف ورزی ہو، اتنا وہ دورانیہ کم ہوگا جس کے دوران یہ خلاف ورزی رونما

^{۵۲} حقیقت میں مثال ۳.۷ میں غلط بیانی کی گئی ہے۔ آپ 10^{-23} سیکنڈ کو گھڑی پر ناپ نہیں سکتے ہیں، اور حقیقت میں اتنے کم عرصہ حیات کے ذرے کا عرصہ حیات ایسی کسی ترسیم سے بذریعہ اصول عدم یقینیت اخذ کیا جاتا ہے۔ تاہم، اگرچہ منطق اس رخ استعمال کی گئی ہے، ہمارا نقطہ درست ہے۔ مزید، اگر آپ مندرجہ کریں کہ Δ تقریباً ایک پروٹان (10^{-15} m) جتنا ہے، تب اس ذرے سے گزرنے کے لئے شعاع کو تقریباً 10^{-23} سیکنڈ درکار ہوں گے، اور یہ مندرجہ کرنا مشکل ہوگا کہ ذرے کا عرصہ حیات اس سے بھی کم ہو گا۔



شکل ۳.۲: کیت Δ کی پیمائشوں کی مستطیلی ترسیم (مثال ۳.۷)۔

ہو۔ اب توانائی و وقت اصول عدم یقینیت کے کئی حجاز مطلب لیے جاسکتے ہیں، تاہم یہ ان میں سے ایک نہیں ہے۔ ہمیں کوانٹائی میکینکس کہیں بھی توانائی کی بقا کی خلاف ورزی کی اجازت نہیں دیتی ہے اور نہ ہی مساوات ۳.۷۴ کے حصول میں کوئی ایسی اجازت شامل کی گئی۔ تاہم، حقیقت یہ ہے کہ اصول عدم یقینیت انتہائی زیادہ مضبوط ہے: اس کی عنایت استعمال کے باوجود نتائج زیادہ عنایت نہیں ہوتے ہیں، اور یہی وجہ ہے کہ ماہر طبیعیات عموماً اس کو استعمال کرتے ہوئے زیادہ محتاط نہیں رہتے۔

سوال ۳.۱۷: درج ذیل ذیل مخصوص صورتوں پر مساوات ۳.۷ کی اطلاق کریں۔

ا. $Q = 1$ ب. $Q = H$ ج. $Q = x$ د. $Q = p$

ہر ایک صورت میں مساوات ۱.۲، مساوات ۱.۳۳، مساوات ۱.۳۸ اور توانائی کی بقا (مساوات ۲.۳۹ کے بعد کا تبصرہ دیکھیں) کو مد نظر رکھتے ہوئے نتیجے پر بحث کریں۔

سوال ۳.۱۸: معیاری انحراف σ_H ، σ_x اور $d\langle x \rangle / dt$ کی ٹھیک ٹھیک قیمتوں کا حساب کرتے ہوئے سوال ۲.۵ کے تعادل موج اور متابل مشاہدہ x کے لیے توانائی و وقت اصول عدم یقینیت پر کھیں۔

سوال ۳.۱۹: معیاری انحراف σ_H ، σ_x اور $d\langle x \rangle / dt$ کی ٹھیک ٹھیک قیمتوں کا حساب کرتے ہوئے سوال ۲.۴۳ میں آزاد ذرے کی موجی اکٹھ اور متابل مشاہدہ x کے لیے توانائی و وقت اصول عدم یقینیت پر کھیں۔

سوال ۳.۲۰: دکھائیں کہ متابل مشاہدہ x کے لیے توانائی و وقت اصول عدم یقینیت، تنخفیف کے بعد سوال ۳.۱۴ کے اصول عدم یقینیت کا روپ اختیار کرتی ہے۔

۳.۶ ڈیراک علامتیت

دو ابعاد میں ایک سادہ سمتیہ **A** پر غور کریں (شکل ۳.۳-۱)۔ آپ اس سمتیہ کو کس طرح بیان کریں گے؟ سب سے آسان طریقہ یہ ہوگا کہ آپ x اور y محدود کا ایک کارٹیزی نظام متائم کر کے اس پر سمتیہ **A** کے



شکل ۳.۳: (ا) سمتیہ \mathbf{A} ، (ب) xy محدد سے لحاظ سے \mathbf{A} کے اجزاء، (ج) $x'y'$ محدد کے لحاظ سے \mathbf{A} کے اجزاء

اجزاء: $A_x = \hat{i} \cdot \mathbf{A}$ اور $A_y = \hat{j} \cdot \mathbf{A}$ وضع کریں (شکل ۳.۳-ب)۔ اب عین ممکن ہے کہ آپ کی بہن ایک مختلف کارٹیزی نظام قائم کرے جس کے محدد x' اور y' ہوں، وہ سمتیہ \mathbf{A} کے اجزاء $A'_x = \hat{i}' \cdot \mathbf{A}$ اور $A'_y = \hat{j}' \cdot \mathbf{A}$ پیش کرے گی (شکل ۳.۳-ج)۔ حقیقت میں آپ دونوں ایک ہی سمتیہ کو دو مختلف اساس $(\{\hat{i}, \hat{j}\})$ اور $(\{\hat{i}', \hat{j}'\})$ کی صورت میں بیان کر رہے ہیں۔ سمتیہ خود ”باہر فضا“ میں رہتا ہے اور کسی کے بھی قائم کردہ (اختیاری) محددی نظام کا تابع نہیں ہے۔

بہی کچھ کوانٹائی میکانیات میں ایک نظام کے حال کے لیے درست ہوگا۔ اس کو سمتیہ $|\mathcal{H}(t)\rangle$ سے ظاہر کیا جاسکتا ہے جو ”باہر بلبرٹ فضا“ میں رہتا ہے اور جسے ہم مختلف اساس کے لحاظ سے بیان کر سکتے ہیں۔ درحقیقت امتیازی تفاعل معام کی اساس میں $|\mathcal{H}\rangle$ کی توسیعی عددی سرموجی تفاعل $\Psi(x, t)$ ہوگا:

$$\Psi(x, t) = \langle x | \mathcal{H}(t) \rangle \quad (3.45)$$

(جہاں \hat{x} کے امتیازی تفاعل جس کی امتیازی قیمت x ہے کو سمتیہ $|x\rangle$ ظاہر کرتا ہے) ^{۵۳}، جبکہ معیار حرکت امتیازی تفاعل کی اساس میں $|\mathcal{H}\rangle$ کی وسعت، معام و معیار حرکت موجی تفاعل ہے:

$$\Phi(p, t) = \langle p | \mathcal{H}(t) \rangle \quad (3.46)$$

(جہاں \hat{p} کا امتیازی تفاعل جس کی امتیازی قیمت p ہے کو سمتیہ $|p\rangle$ ظاہر کرتا ہے)۔ ^{۵۴} ہم $|\mathcal{H}\rangle$ کی وسعت کو توانائی امتیازی تفاعل کی اساس میں بھی کر سکتے ہیں (یہاں اپنی آسانی کے لیے ہم غنیر مسلسل طیف فرض کر

^{۵۳} میں اس کو g_x (مساوات ۳.۳۹) نہیں کہنا چاہتا چونکہ وہ اس کی اساس معام میں روپ ہے، اور یہاں پورا مقصد کسی بھی مخصوص اساس سے چھڑکارا ہے۔ یقیناً میں نے پہلی مرتبہ بلبرٹ فضا کو، x پر، بطور مربع متکامل تفاعل کا سلسلہ متعارف کرتے ہوئے اس کو (اساس معام کا) پابند بنایا جو ایک امتناعی صورت ہے۔ میں چاہتا ہوں کہ آپ اس کو ایک تصوراتی سمتی فضا سمجھیں، جس کے ارکان کو کسی بھی اساس کے لحاظ سے ظاہر کیا جاسکتا ہے۔
^{۵۴} معامی فضا میں یہ $f_p(x)$ ہوگا (مساوات ۳.۳۲)۔

رہے ہیں):

$$(۳.۷۷) \quad c_n(t) = \langle n | \mathcal{H}(t) \rangle$$

(جہاں n کے \hat{H} کے n ویں امتیازی تفاعل کو سمتیہ $|n\rangle$ ظاہر کرتا ہے)؛ مساوات ۳.۴۶ تاہم یہ تمام ایک ہی حالت کو ظاہر کرتے ہیں؛ تفاعلات Ψ اور Φ ، اور عددی سروں کا سلسلہ $\{c_n\}$ ٹھیک ایک جیسی معلومات رکھتے ہیں؛ یہ ایک ہی سمتیہ کو ظاہر کرنے کے تین مختلف طریقے ہیں:

$$(۳.۷۸) \quad \begin{aligned} \Psi(x, t) &= \int \Psi(y, t) \delta(x - y) dy = \int \Phi(p, t) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} dp \\ &= \sum c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(x) \end{aligned}$$

(متبادل مشاہدہ کو ظاہر کرنے والے) عاملین خطی مبدل ہوتے ہیں جو ایک سمتیہ کا ”تبادلہ“ دوسری سمتیہ میں کرتے ہیں۔

$$(۳.۷۹) \quad |\beta\rangle = \hat{Q}|\alpha\rangle$$

بالکل سمتیت کی طرح جنہیں ایک مخصوص اساس $\{|e_n\rangle\}$ کے لحاظ سے ان کے اجزاء

$$(۳.۸۰) \quad \begin{aligned} |\alpha\rangle &= \sum_n a_n |e_n\rangle \quad \text{جہاں} \quad a_n = \langle e_n | \alpha \rangle \quad \text{ہے، اور} \\ |\beta\rangle &= \sum_n b_n |e_n\rangle \quad \text{جہاں} \quad b_n = \langle e_n | \beta \rangle \quad \text{ہے} \end{aligned}$$

سے ظاہر کیا جاتا ہے، عاملین کو (کسی مخصوص اساس کے لحاظ سے) ان کے **قالبی اراکان**^{۵۵}

$$(۳.۸۱) \quad \langle e_m | \hat{Q} | e_n \rangle \equiv Q_{mn}$$

سے ظاہر کیا جاتا ہے۔ اس علامت کو استعمال کرتے ہوئے مساوات ۳.۷۹ درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$(۳.۸۲) \quad \sum_n b_n |e_n\rangle = \sum_n a_n \hat{Q} |e_n\rangle$$

یا، سمتیہ $|e_m\rangle$ کے ساتھ اندرونی ضرب لیتے ہوئے

$$(۳.۸۳) \quad \sum_n b_n \langle e_m | e_n \rangle = \sum_n a_n \langle e_m | \hat{Q} | e_n \rangle$$

^{۵۵} میں مندرج کرتا ہوں کہ یہ اساس غیر مسلسل ہے؛ مسلسل اساس کی صورت میں n استمراری ہوگا اور مجموعہ کی جگہ نکلاتے ہوں گے۔

^{۵۶} matrix elements

^{۵۷} یہ اصطلاح مستثنائی ابعادی صورت سے متاثر ہو کر منتخب کی گئی ہے، تاہم اس ”فالب“ کے اراکین کی تعداد اب لامتناہی ہوگی (جن کی گنتی ناممکن بھی ہو سکتی ہے)۔

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$b_m = \sum_n Q_{mn} a_n \quad (۳.۸۴)$$

یوں اجزاء کے تبادلہ کے بارے میں متالہی ارکان معلومات فراہم کرتے ہیں۔

بعد میں ہمیں ایسے نظاموں سے واسطہ ہوگا جن کے خطی غیر تابع حالات کی تعداد متناہی عدد (N) ہوگا۔ سمیت $|\mathfrak{H}(t)\rangle$ ایسی صورت میں N ابعادی سٹی فضا میں رہتا ہے؛ جس کو (کسی دیے گئے اساس کے لحاظ سے)، (N) اجزاء کی قطار سے ظاہر کیا جاسکتا ہے جبکہ عاملین $(N \times N)$ سادہ متالب کاروپ اختیار کرتے ہیں۔ یہ سادہ ترین کوانٹائی نظام ہیں؛ جن میں لامتناہی آبادی سٹی فضا سے وابستہ باریکیاں نہیں پائی جاتی ہیں۔ ان میں سب سے آسان دو حالتی نظام ہے جس پر درج ذیل مثال میں غور کیا گیا ہے۔

مثال ۳.۸: تصور کریں کہ ایک نظام میں صرف دو (درج ذیل) خطی غیر تابع حالات ممکن ہیں۔^{۵۸}

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{اور} \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

سب سے زیادہ عمومی حال ان کا معمول شدہ خطی جوڑ

$$|\mathfrak{H}\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad \text{ہوگا جہاں} \quad |a|^2 + |b|^2 = 1 \quad \text{ہے۔}$$

ہیملٹنی کو ایک (ہر مشی) متالب کے روپ میں لکھا جاسکتا ہے؛ فرض کریں کہ اس کا مخصوص روپ درج ذیل ہے

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix}$$

جہاں g اور h حقیقی مستقل ہیں۔ اگر $(t = 0)$ پر یہ نظام حال $|1\rangle$ سے ابتدا کرے تب وقت t پر اس کا حال کیا ہوگا؟

حل: (تابع وقت) مساوات شرودنگر درج ذیل کہتی ہے۔

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\mathfrak{H}\rangle = H |\mathfrak{H}\rangle \quad (۳.۸۵)$$

ہمیشہ کی طرح ہم غیر تابع تابع شرودنگر

$$H |\mathfrak{H}\rangle = E |\mathfrak{H}\rangle \quad (۳.۸۶)$$

^{۵۸} یہاں ”مساوات“ کی نشان سے مراد ”ظاہر کرتا ہے“ لینا چاہیے، تاہم میرے خیال میں اس غیر رسمی علاقیت کے استعمال سے غلط فہمی پیدا ہونے کا کوئی امکان نہیں پایا جاتا ہے۔

کے حل سے ابتداء کرتے ہیں، یعنی ہم H کی امتیازی سمتیات اور امتیازی افتدار تلاش کرتے ہیں۔ امتیازی افتدار کی قیمت امتیازی مساوات تعین کرتی ہے۔

$$\begin{pmatrix} h-E & g \\ g & h-E \end{pmatrix} \text{مقطع} = (h-E)^2 - g^2 = 0 \Rightarrow h-E = \mp g \Rightarrow E_{\pm} = h \pm g$$

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ احبازتی توانائیاں $(h+g)$ اور $(h-g)$ ہیں۔ امتیازی سمتیات تعین کرنے کی خاطر ہم درج ذیل لکھتے ہیں

$$\begin{pmatrix} h & g \\ g & h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = (h \pm g) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \Rightarrow h\alpha + g\beta = (h \pm g)\alpha \Rightarrow \beta = \pm \alpha$$

لہذا معمول شدہ امتیازی سمتیات درج ذیل ہوں گے۔

$$|\mathcal{B}_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$$

اس کے بعد ابتدائی حال کو ہم ہیملٹنی کے امتیازی سمتیات کے خطی جوڑ کی صورت میں لکھتے ہیں۔

$$|\mathcal{B}(0)\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\mathcal{B}_{+}\rangle + |\mathcal{B}_{-}\rangle)$$

آخر میں ہم اس کے ساتھ معیاری تابعیت وقت جزو $e^{-iE_n t/\hbar}$ منسلک کرتے ہیں۔

$$\begin{aligned} |\mathcal{B}(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{-i(h+g)t/\hbar} |\mathcal{B}_{+}\rangle + e^{-i(h-g)t/\hbar} |\mathcal{B}_{-}\rangle] \\ &= \frac{1}{2} e^{-iht/\hbar} \left[e^{-igt/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + e^{igt/\hbar} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{1}{2} e^{-iht/\hbar} \begin{pmatrix} e^{-igt/\hbar} + e^{igt/\hbar} \\ e^{-igt/\hbar} - e^{igt/\hbar} \end{pmatrix} = e^{-iht/\hbar} \begin{pmatrix} \cos(gt/\hbar) \\ -i \sin(gt/\hbar) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

اگر آپ کو اس نتیجے پر شک ہو تو آپ اس کی جانچ پڑتال کر سکتے ہیں: کیا یہ تابع وقت مساوات شرودنگر کو مطمئن کرتا ہے؟ کیا یہ $t=0$ پر ابتدائی حال کے موافق ہے؟

یہ (دیگر چیزوں کے علاوہ) ارتعاش نیوٹرینو کا ایک سادہ نمونہ ہے جہاں $|1\rangle$ الیکٹران نیوٹرینو^{۹۰}، اور $|2\rangle$ میون نیوٹرینو^{۹۱} کو ظاہر کرتا ہے؛ اگر ہیملٹنی میں حلاف وتر جزو (g) غیر معدوم ہو تب وقت گزرنے کے ساتھ بار بار الیکٹران نیوٹرینو تبدیل ہو کر میون نیوٹرینو^{۹۲} میں اور میون نیوٹرینو واپس الیکٹران نیوٹرینو میں تبدیل ہوتا رہے گا۔ □

neutrino oscillations^{۹۰}
electron neutrino^{۹۰}
muon neutrino^{۹۱}

کوانٹائی میکانیات میں اندرونی ضرب کو ڈیراک علامتیں^{۱۲} سے ظاہر کیا جاتا ہے جو ٹکونی قوسین، \langle اور \rangle ، اور افقی لکیر $|$ پر مشتمل ہے۔ یوں کوانٹائی میکانیات میں ٹکونی قوسین کو قوسین نہیں بلکہ عاملین تصور کریں۔ اندرونی ضرب $\langle \alpha | \beta \rangle$ کو دو حصوں $\langle \alpha |$ اور $|\beta \rangle$ میں تقسیم کیا جاتا ہے جنہیں بالترتیب **تفاعل علیہ**^{۱۳} اور **سمتاویہ**^{۱۴} کہتے ہیں۔ ان میں سے موخر الذکر ایک سمتیہ ہے، مگر اول الذکر کیا ہے؟ یہ اس لحاظ سے سمتیات کا ایک خطی تفاعل ہے کہ اس کے دائیں جانب ایک سمتیہ چسپاں کرنے سے ایک (مخلوط) عدد حاصل ہوتا ہے جو اندرونی ضرب ہوگا۔ (ایک عامل کے ساتھ سمتیہ چسپاں کرنے سے دوسرا سمتیہ حاصل ہوتا ہے جبکہ ایک تفاعل علیہ کے ساتھ سمتیہ چسپاں کرنے سے ایک عدد حاصل ہوتا ہے۔) جیسا آپ دیکھیں گے کوانٹائی میکانیات میں تفاعل علیہ کو ایک متالِب اور سمتاویہ کو سمتیہ کی روپ میں لکھا جاتا ہے۔ ڈیراک علامتیت کو **تفاعل علیہ** و **سمتاویہ** علامتیں^{۱۵} بھی کہتے ہیں۔ ایک تفاعل علیہ سمتیہ میں تفاعل علیہ کو عمل لینے کی ہدایت تصور کیا جاسکتا ہے:

$$\langle f | = \int f^*[\dots] dx$$

جہاں چوکور قوسین $[\dots]$ میں وہ تفاعل پر کیا جائے گا جو تفاعل علیہ کے دائیں ہاتھ سمتاویہ میں موجود ہوگا۔ ایک مستناہی ابعاد سمتیہ فضا میں، جہاں سمتیات کو قطاروں

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad (۳.۸۷)$$

کی صورت میں بیان کیا گیا ہو، مطابقتی تفاعل علیہ ایک سمتیہ صف

$$\langle \alpha | = (a_1^* a_2^* \dots a_n^*) \quad (۳.۸۸)$$

ہوگا۔ تمام تفاعل علیہ کو اکٹھا کرنے سے دوسرا سمتیہ فضا حاصل ہوگا جس کو **دوہری فضا**^{۱۶} کہتے ہیں۔

تفاعل علیہ کی ایک علیحدہ وجود کا تصور ہمیں طاقتور اور خوبصورت علامتیت کا موقع فراہم کرتی ہے (اگرچہ اس کتاب میں اس سے فائدہ نہیں اٹھایا جائے گا)۔ مثال کے طور پر، اگر $|\alpha\rangle$ ایک معمول شدہ سمتیہ ہو، تب عامل

$$\hat{P} \equiv |\alpha\rangle \langle \alpha| \quad (۳.۸۹)$$

کسی بھی دوسرے سمتیہ کا حصہ اٹھاتا (منتخب کرتا) ہے جو $|\alpha\rangle$ کے ”ساتھ ساتھ“ پایا جاتا ہو:

$$\hat{P}|\beta\rangle = \langle \alpha | \beta \rangle |\alpha\rangle;$$

^{۱۲} Dirac notation

^{۱۳} bra

^{۱۴} ket

^{۱۵} bra-ket notation

^{۱۶} dual space

ہم اس کو $|\alpha\rangle$ کے احاطہ کیے گئے ایک بُدی ذیلی فضا پر عامل \hat{P} ^{۶۸}تخلیل کرتے ہیں۔ اگر $\{|e_n\rangle\}$ غیر مسلسل معیاری عمودی اساس،

$$\langle e_m | e_n \rangle = \delta_{mn} \quad (۳.۹۰)$$

ہو تب درج ذیل ہوگا

$$\sum_n |e_n\rangle \langle e_n| = 1 \quad (۳.۹۱)$$

(جو عامل مثال ہے)۔ چونکہ کسی بھی سمتیہ $|\alpha\rangle$ پر عمل کرتے ہوئے یہ عامل اساس $\{|e_n\rangle\}$ میں سمتیہ $|\alpha\rangle$ کی وسعت کو دوبارہ سے حاصل کرتا ہے۔

$$\sum_n |e_n\rangle \langle e_n | \alpha \rangle = |\alpha\rangle \quad (۳.۹۲)$$

اسی طرح اگر $\{|e_z\rangle\}$ ڈیراک معیاری عمود شدہ استمراری اساس

$$\langle e_z | e_{z'} \rangle = \delta(z - z') \quad (۳.۹۳)$$

ہو، تب درج ذیل ہوگا۔

$$\int |e_z\rangle \langle e_z| dz = 1 \quad (۳.۹۴)$$

ساوات ۳.۹۱ اور ساوات ۳.۹۴ مکملیت کو خوش اسلوبی سے بیان کرتے ہیں۔

سوال ۳.۲۱: دکھائیں کہ عاملین تخلیل یکے ^{۶۸}مافقی ہیں، یعنی ان کے لئے $\hat{P}^2 = \hat{P}$ ہوگا۔ \hat{P} کے امتیازی امتداد تعین کریں اور اس کے امتیازی سمتیات کے خواص بیان کریں۔

سوال ۳.۲۲: معیاری عمودی اساس $|1\rangle$ ، $|2\rangle$ ، $|3\rangle$ کا احاطہ کیے گئے تین بُدی فضا پر غور کریں۔ سمتاویہ $|\alpha\rangle$ اور سمتاویہ $|\beta\rangle$ درج ذیل ہیں۔

$$|\alpha\rangle = i|1\rangle - 2|2\rangle - i|3\rangle, \quad |\beta\rangle = i|1\rangle + 2|3\rangle$$

ا. $|\alpha\rangle$ اور $|\beta\rangle$ کو (دوہری اساس $|1\rangle$ ، $|2\rangle$ ، $|3\rangle$ کی صورت میں) تیار کریں۔

ب. $\langle\alpha|\beta\rangle$ اور $\langle\beta|\alpha\rangle$ تلاش کریں اور $\langle\alpha|\beta\rangle^* = \langle\beta|\alpha\rangle$ کی تصدیق کریں۔

ج. اس اساس میں عامل $|\alpha\rangle\langle\beta| \equiv \hat{A}$ کے نوار کان متالب تلاش کر کے متالب **A** تیار کریں۔ کیا یہ ہر مشی ہے؟

سوال ۳.۲۳: کسی دو سطحی نظام کا ہیملٹنی درج ذیل ہے

$$\hat{H} = E(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|)$$

جہاں $|1\rangle, |2\rangle$ معیاری عمودی اساس اور E ایسا عدد ہے جس کا بُعد توانائی کا ہے۔ اس کے امتیازی اقدار اور $|1\rangle$ اور $|2\rangle$ کے خطی جوڑ کی صورت میں معمول شدہ امتیازی تقاضا عمل تلاش کریں۔ اس اساس کے لحاظ سے \hat{H} کا تابل H کیا ہوگا؟

سوال ۳.۲۴: فرض کریں عامل \hat{Q} کے معیاری عمودی امتیازی تقاضات کا ایک مکمل سلسلہ درج ذیل ہے۔

$$\hat{Q}|e_n\rangle = q_n|e_n\rangle \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

دکھائیں کہ \hat{Q} کو اس کے طیفی تحلیل^{۱۹}

$$\hat{Q} = \sum_n q_n |e_n\rangle\langle e_n|$$

کی صورت میں لکھا جاسکتا ہے۔ اشارہ: تمام ممکنہ سمتیات پر عامل کے عمل سے عامل کو جانچ جاتا ہے لہذا کسی بھی سمتیہ $|\alpha\rangle$ کے لیے آپ کو درج ذیل دکھانا ہوگا۔

$$\hat{Q}|\alpha\rangle = \left\{ \sum_n q_n |e_n\rangle\langle e_n| \right\} |\alpha\rangle$$

مزید سوالات برائے باب ۳

سوال ۳.۲۵: لیٹمانڈر کثیر رکنیال^{۲۰} وقفہ $-1 \leq x \leq 1$ پر تقاضات $1, x, x^2$ اور x^3 کو گرام وشمڈ طریقہ کار سے معیاری عمود بنائیں (سوال 4A. دیکھیں)۔ عین ممکن ہے کہ آپ نتائج کو پچپان پائیں؛ (معیاری عمود زنی کے علاوہ)^{۲۱} لیٹمانڈر کثیر رکنیاں ہیں (جدول ۴.۱)۔

سوال ۳.۲۶: ایک خلاصہ ہر مشی^{۲۲} (یا مخرف ہر مشی^{۲۳}) عامل اپنے ہر مشی جوڑی دار کا منفی ہوتا ہے۔

$$\hat{Q}^\dagger = -\hat{Q} \quad (۳.۹۵)$$

^{۱۹}spectral decomposition

^{۲۰}لیٹمانڈر کو معلوم نہیں تھ کہ کوئی روایت بہتر ثابت ہوگی۔ انہوں نے مجموعی جبز و ضربیوں منتخب کیا کہ $x = 1$ پر تمام تقاضات 1 کے برابر ہوں؛ ہم اس بد قسمت انتخاب کی پیروی کرنے پر مجبور ہیں۔

^{۲۱}anti-hermitian

^{۲۲}skew-hermitian

۱. دکھائیں کہ خلاف ہر مشی عامل کی توقعاتی قیمت خیالی ہوگی۔

ب. دکھائیں کہ دو عدد ہر مشی عاملین کا مقابلہ خلاف ہر مشی ہوگا۔ دو عدد خلاف ہر مشی عاملین کے مقابل کے بارے میں کیا کہا جاسکتا ہے؟

سوال ۳.۲: ترتیب پیمائش: متبادل مشاہدہ A کو ظاہر کرنے والے عامل \hat{A} کے دو معمول شدہ امتیازی حالات ψ_1 اور ψ_2 ، جن کے امتیازی اقدار بالترتیب a_1 اور a_2 ہیں، پائے جاتے ہیں۔ متبادل مشاہدہ B کو ظاہر کرنے والے عامل \hat{B} کے دو معمول شدہ امتیازی حالات ϕ_1 اور ϕ_2 اور بالترتیب امتیازی اقدار b_1 اور b_2 ہیں۔ ان امتیازی حالات کا تعلق درج ذیل ہے۔

$$\psi_1 = (3\phi_1 + 4\phi_2)/5, \quad \psi_2 = (4\phi_1 - 3\phi_2)/5$$

۱. متبادل مشاہدہ A کی پیمائش a_1 قیمت دیتی ہے۔ اس پیمائش کے (فورا) بعد یہ نظام کس حال میں ہوگا؟

ب. اب اگر B کی پیمائش کی جائے تو کیا نتائج ممکن ہوں گے اور ان کے احتمال کیا ہوں گے؟

ج. متبادل مشاہدہ B کی پیمائش کے فوراً بعد دوبارہ A کی پیمائش کی جاتی ہے۔ نتیجہ a_1 حاصل کرنے کا احتمال کیا ہوگا؟ (دھیان رہے کہ اگر میں آپ کو B کی پیمائش کا نتیجہ بتاتا تب جواب بہت مختلف ہوتا۔)

سوال ۳.۲۸: لامتناہی چوکور کنویں کے n ویں ساکن حال کی معیار حرکت و فضا تعامل موج $\Phi_n(p, t)$ تلاش کریں۔ $|\Phi_1(p, t)|^2$ اور $|\Phi_2(p, t)|^2$ کو p کے تعامل کے طور پر ترسیم کریں (نقطہ $p = \pm n\pi\hbar/a$ پر خصوصی توجہ دیں)۔ $\Phi_n(p, t)$ کو استعمال کرتے ہوئے p^2 کی توقعاتی قیمت کا حساب لگائیں۔ اپنے جواب کا سوال ۳.۲۹ کے ساتھ موازنہ کریں۔

سوال ۳.۲۹: درج ذیل تعامل موج پر غور کریں

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2n\lambda}} e^{i2\pi x/\lambda}, & -n\lambda < x < n\lambda \\ 0, & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

جہاں n کوئی مثبت عدد صحیح ہے۔ اگرچہ وقفہ $-n\lambda < x < n\lambda$ پر یہ تعامل خالص ساکن ہے (جس کا طول موج λ ہے) تاہم چونکہ یہ تعامل لامتناہی تک ارتعاش جاری نہیں رکھتا لہذا اس کی معیار حرکت کی قیمتیں ایک سمت پر مشتمل ہوں گی۔ اس کا معیار حرکت و فضا تعامل موج $\Phi(p, 0)$ تلاش کریں۔ $|\Psi(x, 0)|^2$ اور $|\Phi(p, 0)|^2$ ترسیم کر کے (مرکزی چوٹی کے اطراف صغروں کے بیچ) چوڑائیاں ω_x اور ω_p تعین کریں۔ دیکھیں کہ $n \rightarrow \infty$ کا ان چوڑائیوں پر کیا اثر ہوگا؟ ω_x اور ω_p کو Δx اور Δp کی انداز قیمتیں لیتے ہوئے تصدیق کریں کہ اصول عدم یقینیت مطمئن ہوتا ہے۔ انتباہ: اگر آپ σ_p کا حساب کرنے کی کوشش کریں تو آپ کو حیرانی کا سامن ہوگا۔ کیا آپ اس مسئلے کی وجہ بتلا سکتے ہیں؟

سوال ۳.۳۰: درج ذیل مندرجہ ذیل

$$\Psi(x, 0) = \frac{A}{x^2 + a^2}$$

جہاں A اور a مستقلات ہیں۔

۱. $\Psi(x, 0)$ کی معمولی ذنی کرتے ہوئے A تعین کریں۔

ب. (لحہ $t = 0$ پر) $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ اور σ_x تلاش کریں۔

ج. معیار حرکت و فضا تفاعل موج $\Phi(p, 0)$ تلاش کریں اور تصدیق کریں کہ یہ معمولی شدہ ہے۔

د. $\Phi(p, 0)$ استعمال کرتے ہوئے (لحہ $t = 0$ پر) $\langle p \rangle$ اور σ_p کا حساب کریں۔

ه. اس حال کے لیے ہیزنبرگ اصول عدم یقینیت کو جانچیں۔

سوال ۳.۳۱: مسئلہ ورلڈ۔ درج ذیل مساوات ۱.۳ کی مدد سے دکھائیں

$$(۳.۹۶) \quad \frac{d}{dt} \langle xp \rangle - 2 \langle T \rangle = \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle$$

جہاں T حرکی توانائی ($H = T + V$) ہے۔ ساکن حال میں بایاں ہاتھ صفر ہوگا (ایسا کیوں ہے؟) لہذا درج ذیل ہو گا۔

$$(۳.۹۷) \quad 2 \langle T \rangle = \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle$$

اس کو مسئلہ ورلڈ کہتے ہیں۔ ہارمونی سر قش کے ساکن حالات کے لیے اس مسئلہ کو استعمال کرتے ہوئے ثابت کریں کہ $\langle T \rangle = \langle V \rangle$ ہوگا اور تصدیق کریں کہ یہ سوال ۲.۱۱ اور سوال ۲.۱۲ میں آپ کے نتائج کے ہم آہنگ ہے۔

سوال ۳.۳۲: توانائی و وقت کی عدم یقینیت کے اصول کا ایک دلچسپ روپ $\Delta t = \tau / \pi$ ہے جہاں ابتدائی حال $\Psi(x, 0)$ کے عمودی حال تک $\Psi(x, t)$ کی ارتقا کے لیے درکار وقت τ ہے۔ دو (معیاری عمودی) ساکن حالات کے برابر حصوں پر مشتمل (اختیاری) مخفیہ کا تفاعل موج $\Psi(x, 0) = 1/\sqrt{2} [\psi_1(x) + \psi_2(x)]$ استعمال کرتے ہوئے اس کی چپاچ پڑتال کریں۔

سوال ۳.۳۳: ہارمونی سر قش کے ساکن حالات کی (معیاری عمودی) اساس (مساوات ۲.۶۷) میں متالابی ارکان $\langle n|x|n' \rangle$ اور $\langle n|p|n' \rangle$ تلاش کریں۔ آپ سوال ۲.۱۲ میں متالابی و تری رکن $n = n'$ دریافت کر چکے ہیں؛ وہی ترکیب موجودہ عمومی مسئلے میں استعمال کریں۔ متعلقہ (لامستثنیٰ) متالاب \mathbf{X} اور \mathbf{P} مرتب کریں۔ دکھائیں کہ اس اساس میں $\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + \frac{m\omega^2}{2} \mathbf{X}^2$ و تری ہوگا۔ کیا اس کے و تری ارکان آپ کے توقع کے مطابق ہیں؟ جسزوی جواب:

$$(۳.۹۸) \quad \langle n|x|n' \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n'} \delta_{n,n'-1} + \sqrt{n} \delta_{n',n-1})$$

سوال ۳.۳۴: ایک ہارمونی مرتعش ایسے حال میں ہے کہ اس کی توانائی کی پیمائش، ایک جتنے احتمال کے ساتھ، $(1/2)\hbar\omega$ یا $(3/2)\hbar\omega$ دے گی۔ اس حال میں $\langle p \rangle$ کی زیادہ سے زیادہ ممکن قیمت کیا ہوگی؟ اگر لمحہ $t = 0$ پر اس کی قیمت (یہی زیادہ سے زیادہ قیمت) ہو تب $\Psi(x, t)$ کیا ہوگا؟

سوال ۳.۳۵: 35-3 ہارمونی مرتعش کے اتساقی حالات۔ ہارمونی مرتعش کے ساکن حالات $\psi_n(x) = |n\rangle$ ، مساوات ۲.۶۷ میں صرف $n = 0$ عین عدم یقینیت کی حد $\sigma_x \sigma_p = \hbar/2$ پر ٹیٹھتا ہے؛ جیسا آپ سوال ۲.۱۲ میں معلوم کر چکے ہیں عمومی طور پر $\sigma_x \sigma_p = (2n + 1)\hbar/2$ ہوگا۔ تاہم چند خطی جوڑ (جنہیں اتساقی حالات^{۷۵} کہتے ہیں) بھی عدم یقینیت کے حاصل ضرب کو کم سے کم بناتے ہیں۔ ہم دیکھتے ہیں کہ یہ عامل تقلیل^{۷۶} کے امتیازی تفاعل ہوں گے

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

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

ا. حال $|\alpha\rangle$ میں $\langle x \rangle$ ، $\langle x^2 \rangle$ ، $\langle p \rangle$ ، $\langle p^2 \rangle$ دریافت کریں۔ اشارہ: مشال ۲.۵ کی ترکیب استعمال کریں اور یاد رکھیں کہ a_- کا ہر مٹی جوڑی دار a_+ ہے۔ فرض نہ کریں کہ α حقیقی ہوگا۔

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

ج. کسی بھی دوسرے تفاعل موج کی طرح، اتساقی حال کو توانائی امتیازی حالات کی وسعت

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

لکھا جاسکتا ہے۔ دکھائیں کہ توسیعی عددی سر درج ذیل ہوں گے۔

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

د. $|\alpha\rangle$ کی معمول زنی کرتے ہوئے c_0 تعین کریں۔ جواب: $e^{-|\alpha|^2/2}$

ه. اس کے ساتھ تابعیت وقت

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

^{۷۵} coherent states

^{۷۶} عامل رفعت کے متبادل معمول زنی امتیازی حالات نہیں پائے جاتے۔

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

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

یوں اتناقی حال ہمیشہ اتناقی حال ہی رہے گا اور عدم یقینیت کے حاصل ضرب کو کم سے کم کرتا رہے گا۔
و. کیا زمینی حال $|n=0\rangle$ خود اتناقی حال ہوگا؟ اگر ایسا ہو تب امتیازی قدر کیا ہوگا۔

سوال ۳.۳۶: مبسوط اصول عدم یقینیت۔ متعمم اصول عدم یقینیت (مساوات ۳.۶۲) درج ذیل کہتا ہے

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

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

۱. دکھائے کہ اس کو زیادہ مستحکم بنا کر درج ذیل روپ میں لکھا جاسکتا ہے

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \frac{1}{4} (\langle C \rangle^2 + \langle D \rangle^2) \quad (۳.۹۹)$$

جہاں $\hat{D} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} - 2\langle A \rangle \langle B \rangle$ ہوگا۔ اشارہ: مساوات ۳.۶۰ میں z کا حقیقی جزو $\text{Re}(z)$ جزو لیں۔

ب. مساوات ۳.۹۹ کو $A = B$ صورت کے لئے جانچیں (چونکہ اس صورت میں $C = 0$ ہے لہذا معیاری عدم یقینیت اصول یہاں بے وقعت ہے؛ بد قسمتی سے عدم یقینیت کا مبسوط اصول بھی زیادہ مددگار ثابت نہیں ہوتا ہے)۔

سوال ۳.۳۷: ایک نظام جو تین سطحی ہے کا ہیلٹنی درج ذیل متابل دیتا ہے

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

جہاں a, b اور c حقیقی اعداد ہیں۔

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

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

ب. اگر اس نظام کا ابتدائی حال درج ذیل ہو تب $|\mathcal{H}(t)\rangle$ کیس ہوگا؟

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

سوال ۳۸:۳: ایک تین سطحی نظام کا ہیملٹنی درج ذیل متاسب ظاہر کرتا ہے۔

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

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

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

جہاں ω ، λ اور μ حقیقی مثبت اعداد ہیں۔

۱. \mathbf{H} ، \mathbf{A} اور \mathbf{B} کے امتیازی افتدار اور (معمول شدہ) امتیازی سمتیات تلاش کریں۔

ب. یہ نظام عمومی حال

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

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

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

سوال ۳۹:۳:

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

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

(جہاں x_0 کوئی بھی مستقل منسلک ہو سکتا ہے)۔ اسی کی بنا پر \hat{p}/\hbar کو فضا میں انتقال کا پیدا کار \hat{Q} کہتے ہیں۔ تبصرہ: عامل کی قوت نما کی تعریف درج ذیل طاقتی تسلسل تو سچ دیتا ہے۔

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

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

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

(جہاں t_0 کوئی بھی مستقل وقت ہو سکتا ہے)؛ اسی بنا پر $\hat{H}/\hbar - \hat{Q}$ کو وقت میں انتقال کا پیدا کار \hat{Q} کہتے ہیں۔

ج۔ دکھائیں لمحہ $t + t_0$ پر حرکی متغیر $Q(x, p, t)$ کی توقعاتی قیمت درج ذیل لکھی جاسکتی ہے۔^۹

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

اس کو استعمال کرتے ہوئے مساوات ۳.۷ حاصل کریں۔ اشارہ: $t_0 = \int dt$ میں پہلے رتبہ تک پھیلائیں۔

سوال ۳.۴۰:

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

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

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

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

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

^۹ generator of translation in space

^۸ generator of translation in time

^۹ بالخصوص $t = 0$ لے کر، t_0 کی زیر نوشتہ میں صفر لکھے بغیر

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

ہوگا جہاں $\hat{U} \equiv e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ ہے۔ یوں Q کی توقعاتی قیمت کا حساب کرتے ہوئے آپ \hat{Q} کو $\Psi(x, t)$ اور $\Psi(x, 0)$ میں لپیٹ کر (تالیفیت وقت کو تقبلاً عمل موج کا حصہ بنا کر) لکھ سکتے ہیں، جیسا ہم کرتے رہے ہیں، یا $\hat{U}^{-1} \hat{Q} \hat{U}$ کو $\Psi(x, 0)$ اور $\Psi(x, 0)$ میں لپیٹ کر (تالیفیت وقت کو عامل کا حصہ بنا کر) لکھ سکتے ہیں۔ اول الذکر کو شرودنگر نقطہ نظر جبکہ موخر الذکر کو ہیبرنر نقطہ نظر کہتے ہیں۔

باب ۴

تین ابعادی کوانٹائی میکانیات

۴.۱. کروئی محدود میں مساوات شرودنگر

تین ابعاد تک توسیع باآسانی کی جاسکتی ہے۔ مساوات شرودنگر

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

کہتی ہے کہ معیاری طریقہ کار کا اطلاق (x کے ساتھ ساتھ y اور z پر بھی) کرتے ہوئے:

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

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 اُدرج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

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

یوں درج ذیل ہوگا

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

اچھا کلاسیکی متبادل مشاہدہ اور اعمال میں مندرج کرنا دشوار ہو، وہاں میں عامل پر ”ٹوٹی“ نشان بناتا ہوں۔ اس باب میں ایسا کوئی موقع نہیں پایا جاتا جہاں ان کی پہچان مشکل ہو لہذا ایہاں سے عاملین پر ”ٹوٹی“ 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 لاپلاسیا 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 فصا پر لینا ہوگا۔ اگر مخفیہ وقت کے 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 فصائی تفاعل موج ψ_n غیر تابع وقت مساوات شرودنگر

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

کو مطمئن کرتا ہے۔ تابع وقت مساوات شرودنگر 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 دیے تا ہو تب مساوات ۴.۹ میں مجموعہ کی بجائے مکمل ہوگا۔)

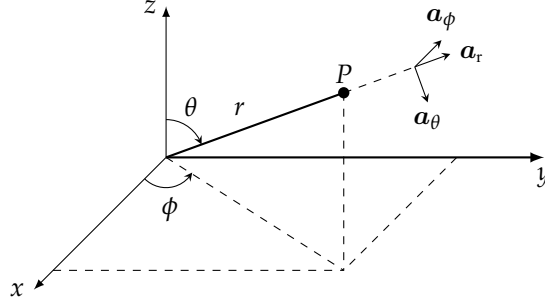
سوال ۴.۱:

۱. عاملین \mathbf{r} اور \mathbf{p} کے تمام باضابطہ مقابلیتے رشتے^۴: $[x, y]$ ، $[x, p_y]$ ، $[x, p_x]$ ، $[p_y, p_z]$ ، وغیرہ وغیرہ، حاصل کریں۔

جواب:

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

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



شکل ۴.۱: کروی محدود: رداس r ، قطبی زاویہ θ ، اور استی زاویہ ϕ ہیں۔

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

$$(۴.۱۱) \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = \langle -\nabla V \rangle \quad \text{اور} \quad \frac{d}{dt} \langle r \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle$$

(ان میں سے ہر ایک درحقیقت تین مساوات کو ظاہر کرتی ہے۔ ایک مساوات ایک جسم کے لیے ہوگی۔) اشارہ: پہلے تصدیق کر لیں کہ مساوات ۴.۱۱ تین ابعاد کے لیے بھی کارآمد ہے۔

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

جواب:

$$(۴.۱۲) \quad \sigma_x \sigma_{p_x} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \sigma_y \sigma_{p_y} \geq \frac{\hbar}{2}, \quad \sigma_z \sigma_{p_z} \geq \frac{\hbar}{2}$$

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

۴.۱.۱ علیحدگی متغیرات

عموماً مخفیہ صرف مبداءے فاصلہ کا تفاعل ہوگا۔ ایسی صورت میں کروی محدود (r, θ, ϕ) کا استعمال بہتر ثابت ہوگا (شکل ۴.۱)۔ کروی محدود میں لاپلاسی درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$(۴.۱۳) \quad \nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right)$$

یوں کر وہی محدود میں غیر تابع وقت مساوات شروڈنگر درج ذیل ہوگی۔

$$(۴.۱۴) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) \right] + V\psi = E\psi$$

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

$$(۴.۱۵) \quad \psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi)$$

اس کو مساوات ۴.۱۴ 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 کے $-2mr^2/\hbar^2$ 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 کے اندر جزو 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 $\ell(\ell + 1)$ روپ میں لکھتے ہیں جس کی وجہ کچھ دیر میں واضح ہوگی۔^۶

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

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

سوال ۴.۲: کارتیسی محدود میں علیحدگی متغیرات استعمال کرتے ہوئے لامتناہی کئی کواں (یاؤبہ میں ایک ذرہ):

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

حل کریں۔

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

۱. ساکن حالات اور ان کی مطابقتی توانائیاں دریافت کریں۔

ب۔ بڑھتی توانائی کے لحاظ سے انفرادی توانائیوں کو E_1 ، E_2 ، E_3 ، وغیرہ، سے ظاہر کر کے E_1 تا E_6 تلاش کریں۔ ان کی انخطائیت (یعنی ایک ہی توانائی کے مختلف حلوں کی تعداد) معلوم کریں۔ تبصرہ: ایک بُجری صورت میں انخطائی مقید حالات نہیں پائے جاتے ہیں (سوال ۲.۴۵)، تاہم تین ابعادی صورت میں یہ کثرت سے پائے جاتے ہیں۔

ج۔ توانائی E_{14} کی انخطائیت کیا ہے اور یہ صورت کیوں دلچسپ ہے؟

۴.۱.۲ زاویائی مساوات

مساوات ۴.۱.۱ 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۔

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

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

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

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

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

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

متغیر ϕ کی مساوات زیادہ آسان ہے۔

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

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

[درحقیقت دو حل پائے جاتے ہیں: $e^{im\phi}$ اور $e^{-im\phi}$ ، تاہم m کو منفی ہونے کی اجازت دے کر ہم موخہ الزکر 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 محفّی لازمًا حقیقی ہوں گے لہذا برقی حرکیات میں سمتی تفاعل (Φ) کو سائن اور کوسائن کی صورت میں لکھا جاتا ہے نہ کہ قوت نسائی صورت میں۔ کوانٹائی میکانیات میں ایسی کوئی پابندی نہیں پائی جاتی ہے اور قوت نسائی کے ساتھ کام کرنا زیادہ آسان ہوتا ہے۔] اب جب بھی ϕ کی قیمت میں 2π کا اضافہ آئے، ہم فضا میں واپس اسی نقطہ پر پہنچتے ہیں (شکل ۴.۱ دیکھیں) لہذا درج ذیل شرط^۸ عائد کی جاسکتی ہے۔

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

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

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

ساوات θ

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

اتنی سادہ نہیں ہے۔ اس کا حل درج ذیل ہے

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

جہاں P_ℓ^m شریک لیجینڈر تفاعل^۹ ہے جس کی تعریف درج ذیل ہے

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

اور ℓ ویں لیجینڈر کشیر رکنی کو $P_\ell(x)$ ظاہر کرتا ہے^{۱۰} جس کی تعریف کلیہ روڈریگیز^{۱۱}:

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

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

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = \frac{1}{2} \frac{d}{dx} (x^2 - 1) = x,$$

$$P_2(x) = \frac{1}{4 \cdot 2} \left(\frac{d}{dx} \right)^2 (x^2 - 1)^2 = \frac{1}{2} (3x^2 - 1)$$

جدول ۴.۱ میں ابتدائی چند لیجینڈر کشیر رکنیاں پیش کی گئی ہیں۔ جیسا کہ نام سے ظاہر ہے، $P_\ell(x)$ متغیر x کی

^۸ یہ بظاہر سادہ شرط اتنی سادہ نہیں ہے۔ یاد رہے کہ m کی قیمت سے قطع نظر، احتمال ثنائیت $(|\Phi|^2)$ ایک قیمتی ہے۔ ہم حصہ ۴.۳ میں ایک مختلف طریقہ سے، زیادہ پر زور دلیل پیش کر کے m پر عائد شرط حاصل کریں گے۔

^۹ associated Legendre function
^{۱۰} دھیان رہے کہ $P_\ell^{-m} = P_\ell^m$ ہوگا۔
^{۱۱} Rodrigues formula

جدول ۴.۱: چند ابتدائی لیڈنڈر کثیررکنیاں $P_\ell(x)$ ۔ (۱) تنفسی روپ، (ب) تریات۔



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

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

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

$$P_2^2(x) = (1-x^2) \left(\frac{d}{dx} \right)^2 \left[\frac{1}{2}(3x^2 - 1) \right] = 3(1-x^2),$$

وغیرہ وغیرہ۔ (ب) ہمیں $P_\ell^m(\cos \theta)$ چاہیے اور چونکہ $\sin \theta = \sqrt{1-\cos^2 \theta}$ ہوتا ہے لہذا $P_\ell^m(\cos \theta)$ 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 لیڈنڈر تنفسیات پیش کیے گئے ہیں۔

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

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

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

کروی محمد میں جمعی رکن درج ذیل ہوگا

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

جدول ۴.۲: چند شریک لیٹنڈر تفاسلات $P_\ell^m(\cos \theta)$: (۱) تفاسلی روپ، (ب) ترسیات برائے $r = P_\ell^m(\cos \theta)$ (ان ترسیات میں r آپ کو θ رخ تفاسلی کی کل مقدار دیتا ہے؛ ان اشکال کو z محور کے گرد گھمائیے۔)



لہذا معمول زنی شرط (مساوات ۴.۱) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

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

یہاں R اور Y کی علیحدہ علیحدہ معمول زنی کرنا زیادہ آسان ثابت ہوتا ہے۔

$$(۴.۳۱) \quad \int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = 1 \quad \text{اور} \quad \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1$$

معمول شدہ زاویائی موجی تفاسلات ^{۱۲} کو ^{۱۳} ہارمونیاں کہتے ہیں:

$$(۴.۳۲) \quad Y_\ell^m(\theta, \phi) = \epsilon \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{4\pi(\ell+|m|)!}} e^{im\phi} P_\ell^m(\cos \theta)$$

جہاں $m \geq 0$ کے لئے $\epsilon = (-1)^m$ اور $m \leq 0$ کے لئے $\epsilon = 1$ ہوگا۔ جیسا کہ ہم بعد میں ثابت کریں گے، ^{۱۴} m کی علامت کا انتخاب کیا گیا ہے۔ دھیان رہے کہ $Y_\ell^{-m} = (-1)^m (Y_\ell^m)^*$ ہوگا۔

$$(۴.۳۳) \quad \int_0^{2\pi} \int_0^\pi [Y_\ell^m(\theta, \phi)]^* [Y_{\ell'}^{m'}(\theta, \phi)] \sin \theta d\theta d\phi = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

^{۱۲} معمول زنی مستقل کو سوال ۴.۵۴ میں حاصل کیا گیا ہے؛ نظریہ زاویائی معیار حرکت میں مستعمل علاقیت کے ساتھ ہم آہنگی کی خاطر ϵ (جس کی قیمت 1 یا -1 ہوگی) کی علامت کا انتخاب کیا گیا ہے۔ دھیان رہے کہ $Y_\ell^{-m} = (-1)^m (Y_\ell^m)^*$ ہوگا۔
^{۱۳} spherical harmonics

جدول ۴.۳: ابتدائی چند کروی ہارمونیات، $Y_\ell^m(\theta, \phi)$

$$\begin{aligned} Y_2^{\pm 2} &= \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} & Y_0^0 &= \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2} \\ Y_3^0 &= \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) & Y_1^0 &= \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \\ Y_3^{\pm 1} &= \mp \left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\phi} & Y_1^{\pm 1} &= \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\phi} \\ Y_3^{\pm 2} &= \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\phi} & Y_2^0 &= \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1) \\ Y_3^{\pm 3} &= \mp \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\phi} & Y_2^{\pm 1} &= \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \end{aligned}$$

جدول ۴.۳ میں چند ابتدائی کروی ہارمونیات پیش کیے گئے ہیں۔ تاریخی وجوہات کی بنا پر ℓ کو **انٹینسٹی** کو **انٹینسٹی** **عدد** 14 جب کہ m کو **مقناطیسی** کو **انٹینسٹی** **عدد** 15 کہتے ہیں۔ سوال ۴.۳: مساوات ۴.۲۸، ۴.۲۹ اور ۴.۳۲ استعمال کر کے Y_2^1 اور Y_0^0 تیار کریں۔ تصدیق کریں کہ یہ معمول شدہ اور عمودی ہیں۔ سوال ۴.۴: دکھائیں کہ $\ell = m = 0$ کے لئے

$$\Theta(\theta) = A \ln[\tan(\theta/2)]$$

مساوات θ (مساوات ۴.۲۵) کو مطمئن کرتی ہے۔ یہ (دو) نامتابل متجول دو سرا حاصل ہے؛ اس میں کیا حشرابی ہے؟

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

سوال ۴.۶: کلیہ روڈریگیس سے ابتدا کر کے لیٹنڈر کشیر رکنیوں کی معیاری عمودیت کی شرط:

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

اخذ کریں۔ (اشارہ: مکمل بالخصوص استعمال کریں۔)

۴.۱.۳ رداسی مساوات

دھیان رہے کہ تمام کردی تشکیلی 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۔

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

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

$$(۴.۳۶) \quad u(r) \equiv rR(r)$$

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۔

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

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

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

جس میں $(\hbar^2/2m)[\ell(\ell + 1)/r^2]$ اضافی جزو پایا جاتا ہے جو مرکز گریز جزو^{۱۹} کہلاتا ہے۔ یہ کلاسیکی میکانیات کے مرکز گریز (مجازی) قوت کی طرح، ذرہ کو (مبداسے دور) باہر جانے دھکیلتا ہے۔ یہاں معمول زنی شرط (مساوات ۴.۳۱) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

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

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

مثال ۴.۱: درج ذیل لامتناہی کردی کنویں^{۲۰} پر غور کریں۔

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

^{۱۶} radial equation

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

^{۱۸} effective potential

^{۱۹} centrifugal term

^{۲۰} infinite spherical well

اس کے تفاعلات موج اور اجزائی توانائیاں تلاش کریں۔

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

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

جہاں ہمیشہ کی طرح درج ذیل ہوگا۔

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

ہم نے اس مساوات کو، سرحدی شرط $u(a) = 0$ مطابقت کے، حل کرنا ہے۔ سب سے آسان صورت $\ell = 0$ 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 $r \rightarrow 0$ کی صورت میں $[\cos(kr)]/r$ بے متناہی 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 اجزائی توانائیاں درج ذیل ہوں گی

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

جو عین یک بعدی لامتناہی چکور کنویں کی توانائیاں ہیں (مساوات ۲.۲۷)۔ $u(r)$ کی معمولی زنی کرنے سے $A = \sqrt{2/a}$ حاصل ہوگا۔ زاویائی جزو $Y_0^0(\theta, \phi) = 1/\sqrt{4\pi}$ ہے لہذا اس کی شمولیت یہاں ایک تفسیر سا کام ہے) کو ساتھ منسلک کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہوگا۔

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

[دھیان کیجیے کہ ساکن حالات کے نام تین کو اٹھائی اعداد n ، ℓ اور m استعمال کر کے رکھے جاتے ہیں:

$$\psi_{nm\ell}(r, \theta, \phi); \text{ جبکہ توانائی، } E_{n\ell}, \text{ صرف } n \text{ اور } \ell \text{ پر منحصر ہوگی۔}]$$

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

$$(۴.۴۵) \quad u(r) = A r j_\ell(kr) + B n_\ell(kr).$$

^{۲۱} درحقیقت ہم صرف اتنا چاہتے ہیں کہ تفاعل موج متناہی معمولی زنی ہو؛ یہ ضروری نہیں کہ یہ مستناہی ہو: مساوات ۴.۳۱ میں r^2 کی بنیاد پر مبادا $R(r) \sim 1/r$ متناہی معمولی زنی ہے۔
quantum numbers^{۲۲}

جدول ۴.۴: ابتدائی چند کروئی بیسل اور نیومن تفاعلات، $j_n(x)$ اور $n_\ell(x)$ ؛ چھوٹی x کے لئے مقترابی روپ۔

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

بہت جانا پہچانا نہیں ہے جہاں $j_\ell(x)$ رتبہ ℓ کا کروئی بیسل تفاعل^{۲۲} ہے اور $n_\ell(x)$ رتبہ ℓ کا کروئی نیومن تفاعل^{۲۳} ہے جن کی تعریفات درج ذیل ہیں۔

$$(۴.۴۶) \quad j_\ell(x) \equiv (-x)^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \frac{\sin x}{x}; \quad n_\ell(x) \equiv -(-x)^\ell \left(\frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^\ell \frac{\cos x}{x}$$

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

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

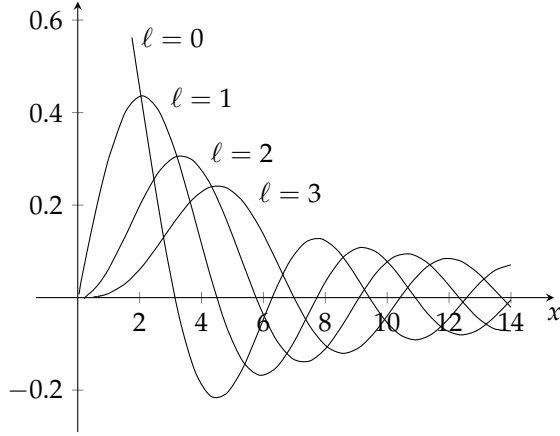
جدول ۴.۴ میں ابتدائی چند کروئی بیسل اور نیومن تفاعلات پیش کیے گئے ہیں۔ متغیر x کی چھوٹی قیمت کے لئے جہاں

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

ہوں گے، درج ذیل ہوں گے، وغیرہ وغیرہ۔

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

^{۲۲}spherical Bessel function
^{۲۳}spherical Neumann function



شکل ۳.۲: ابتدائی چار کروی بیل تناسلات۔

دھیان رہے کہ مبدأ پر بیل تناسلات مستثنیٰ ہیں جبکہ مبدأ پر نیومن تناسلات بے فتابوڑھتے ہیں۔ یوں ہمیں لازماً $B_\ell = 0$ منتخب کرنا ہوگا لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$R(r) = A j_\ell(kr) \quad (۳.۴۷)$$

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

$$j_\ell(ka) = 0 \quad (۳.۴۸)$$

یعنی ℓ رتبی کروی بیل تناسل کا (ka) ایک صفر ہوگا۔ اب بیل تناسلات ارتعاشی ہیں (شکل ۳.۲ دیکھیں)؛ ہر ایک کے لامتناہی تعداد صفر پائے جاتے ہیں۔

تاہم (ہماری بد قسمتی سے) یہ ایک جیسے فاصلوں پر نہیں پائے جاتے (جیسا کہ نقاط $n\pi$ ، وغیرہ پر)؛ انہیں اعدادی تراکیب سے حاصل کرنا ہوگا۔ بہر حال سرحدی شرط کے تحت درج ذیل ہوگا

$$k = \frac{1}{a} \beta_{n\ell} \quad (۳.۴۹)$$

جہاں $\beta_{n\ell}$ رتبہ ℓ کروی بیل تناسل کا n واں صفر ہوگا۔ یوں احبازتی توانائیاں

$$E_{n\ell} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \beta_{n\ell}^2. \quad (۳.۵۰)$$

اور تناسلات موج ذیل ہوں گے

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = A_{n\ell} j_\ell(\beta_{n\ell} r/a) Y_\ell^m(\theta, \phi). \quad (۳.۵۱)$$

جہاں مستقل A_{n1} کا تھین معمول زنی سے کیا جاتا ہے۔ چونکہ ℓ کی ہر ایک قیمت کے لئے m کی $(2\ell + 1)$ مختلف قیمتیں پائی جاتی ہیں لہذا توانائی کی ہر سطح $(2\ell + 1)$ گنا انحطاطی ہوگی (مساوات ۴.۲۹ دیکھیں)۔ □

سوال ۴.۷:

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 تخمینہ کلیات اخذ کریں۔ تصدیق کریں کہ یہ مبدا پر جلتا بوجڑھتے ہیں۔

سوال ۴.۸:

ا. تصدیق کریں کہ $V(r) = 0$ اور $\ell = 1$ کے لئے $Arj_\ell(kr)$ رداسی مساوات کو مطمئن کرتا ہے۔

ب. لامستناہی کروئی کنویں کیلئے $\ell = 1$ کی صورت میں اجبازتی توانائیاں ترسیم کی مدد سے تعین کریں۔ دکھائیں کہ n کی بڑی قیمت کے لئے $E_{n1} \approx (\hbar^2 \pi^2 / 2ma^2)(n + 1/2)^2$ 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 کمیت m ہے کو مستناہی کروئی کنواں:

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

میں رکھا جاتا ہے۔ اس کا زمینی حال، $\ell = 0$ کے لئے، رداسی مساوات کے حل سے حاصل کریں۔ دکھائیں کہ $V_0 a^2 < \pi^2 \hbar^2 / 8m$ 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 مبدا پر تصور کر سکتے ہیں)۔ ان دونوں کے مخالف بار کے بیچ قوت کشش پائی جاتی ہے جو انہیں اکٹھے رکھتی ہے (شکل ۴.۳ دیکھیں)۔ وٹانون کولمب کے تحت مخفی توانائی (بین الاقوامی اکائیوں میں) درج ذیل ہوگی

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



شکل ۴.۳: ہائیڈروجن جوہر

لہذا درج ذیل روپ اختیار کرے گی۔

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

ہم نے اس مساوات کو $u(r)$ کے لئے حل کر کے احبازتی توانائیاں E تعین کرنی ہیں۔ ہائیڈروجن جوہر کا حل نہایت اہم ہے لہذا میں اس کو، ہارمونی سرکش کے تحلیلی 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۔) کولمب محفہ، مساوات ۴.۵۲، $E > 0$ کے لئے، استمراریہ حالات، جو ایلیکٹران 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 موخر الذکر میں ہے۔

۴.۲.۱ رداسی تفاعل موج

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

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

مساوات ۴.۵۳ کو E سے تقسیم کرنے سے

$$\frac{1}{\kappa^2} \frac{d^2 u}{dr^2} = \left[1 - \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa} \frac{1}{(kr)} + \frac{\ell(\ell+1)}{(\kappa r)^2} \right] u$$

حاصل ہوگا جس کو دیکھ کر ہمیں خیال آتا ہے کہ ہم درج ذیل علامتیں متعارف کریں

$$(۴.۵۵) \quad \rho \equiv \kappa r, \quad \rho_0 \equiv \frac{me^2}{2\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa}$$

لہذا درج ذیل لکھا جائے گا۔

$$(۴.۵۶) \quad \frac{d^2 u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] u$$

اس کے بعد ہم حالات کے مفتار بیروپ 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

$$(۴.۵۷) \quad u(\rho) = Ae^{-\rho} + Be^{\rho}$$

تاہم ($\rho \rightarrow \infty$ کی صورت میں) e^{ρ} بے متابو بڑھتا ہے لہذا ہمیں $B = 0$ لینا ہوگا۔ یوں ρ کی بڑی قیمتوں کے لیے درج ذیل ہوگا۔

$$(۴.۵۸) \quad u(\rho) \sim Ae^{-\rho}$$

اس کے برعکس $\rho \rightarrow 0$ کی صورت میں مرکز گریز جزو غالب ہوگا؛^{۲۵} لہذا تخمیناً درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} u$$

جس کا عمومی حل (تصدیق کیجیے) درج ذیل ہوگا

$$u(\rho) = C\rho^{\ell+1} + D\rho^{-\ell}$$

تاہم ($\rho \rightarrow 0$ کی صورت میں) $\rho^{-\ell}$ بے متابو بڑھتا ہے لہذا $D = 0$ ہوگا۔ یوں ρ کی چھوٹی قیمتوں کے لیے درج ذیل ہوگا۔

$$(۴.۵۹) \quad u(\rho) \sim C\rho^{\ell+1}$$

اگلے قدم پر مفتار بیروپ کو چھیلنے کی خاطر نیا فن عمل $v(\rho)$:

$$(۴.۶۰) \quad u(\rho) = \rho^{\ell+1} e^{-\rho} v(\rho)$$

^{۲۵} دلیل $\ell = 0$ 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۔

اس امید سے متعارف کرتے ہیں کہ $u(\rho)$ سے زیادہ سادہ ہوگا۔ ابتدائی نتائج

$$\frac{du}{d\rho} = \rho^\ell e^{-\rho} \left[(\ell + 1 - \rho)v + \rho \frac{dv}{d\rho} \right]$$

اور

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} = \rho^\ell e^{-\rho} \left\{ \left[-2\ell - 2 + \rho + \frac{\ell(\ell + 1)}{\rho} \right] v + 2(\ell + 1 - \rho) \frac{dv}{d\rho} + \rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} \right\}$$

خوش آئین نظر نہیں آتے ہیں۔ اس طرح $v(\rho)$ کی صورت میں رداسی مساوات (مساوات ۴.۵۶) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$\rho \frac{d^2 v}{d\rho^2} + 2(\ell + 1 - \rho) \frac{dv}{d\rho} + [\rho_0 - 2(\ell + 1)]v = 0 \quad (۴.۶۱)$$

آخر میں ہم فرض کرتے ہیں کہ حل، $v(\rho)$ ، کو ρ کا متقی تسلسل لکھا جاسکتا ہے۔

$$v(\rho) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j \quad (۴.۶۲)$$

ہمیں عددی سر (c_0, c_1, c_2, \dots وغیرہ) تلاش کرنے ہوں گے۔ جبزودر جبزود تفرق 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 ”فرضی 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 نیا مجموعہ $-1 = j$ سے کیوں شروع نہیں کیا گیا؛ تاہم جبزود ضربی $(j + 1)$ اس جبزو کو ختم کرتا ہے لہذا، ہم صفر 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۔

$$\sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) c_{j+1} \rho^j + 2(\ell + 1) \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) c_{j+1} \rho^j - 2 \sum_{j=0}^{\infty} j c_j \rho^j + [\rho_0 - 2(\ell + 1)] \sum_{j=0}^{\infty} c_j \rho^j = 0$$

ایک حبیبی طاقتوں کے عددی سروں کو مساوی رکھتے ہوئے

$$j(j+1)c_{j+1} + 2(\ell+1)(j+1)c_{j+1} - 2jc_j + [\rho_0 - 2(\ell+1)]c_j = 0$$

یا

$$(۴.۶۳) \quad c_{j+1} = \left\{ \frac{2(j+\ell+1) - \rho_0}{(j+1)(j+2\ell+2)} \right\} c_j$$

ہوگا۔ یہ کلیہ توانی عددی سر تعین کرتے ہوئے تعامل $v(\rho)$ تعین کرتا ہے۔ ہم c_0 سے شروع کر کے (جو) مجموعی مستقل کاروپ اختیار کرتا ہے جسے آخر میں معمولی 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۔^{۲۶}

آئیں j کی بڑی قیمت (جو ρ کی بڑی قیمت کی مطابقتی ہوگی جہاں بلند طاقتیں غالب ہوں گی) کے لئے عددی سروں کی صورت دیکھیں۔ یہاں کلیہ توانی درج ذیل کہتا ہے۔^{۲۷}

$$c_{j+1} \cong \frac{2j}{j(j+1)} c_j = \frac{2}{j+1} c_j$$

ایک لمحے کے لیے فرض کریں کہ یہ بالکل ٹھیک ٹھیک رشتہ ہے۔ تب

$$(۴.۶۴) \quad c_j = \frac{2^j}{j!} c_0$$

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

$$(۴.۶۵) \quad u(\rho) = c_0 \rho^{\ell+1} e^{\rho}$$

^{۲۶} آپ پوچھ سکتے ہیں: طاقتی تسلسل کی ترکیب $u(\rho)$ پری کیوں لاگو نہیں کی گئی؟ اس ترکیب کے اطلاق سے قبل متغیر ρ کیوں (حبز و ضربی کی صورت میں) باہر نکالا گیا؟ درحقیقت اس کی وجہ نتائج کی خوبصورتی ہے۔ حبز و ضربی $\rho^{\ell+1}$ باہر نہ نکالنے سے تسلسل کے ابتدائی اجزاء صفر ہوں گے (پہلا غیر صفر عددی سر $c_{\ell+1}$ ہوگا)؛ $\rho^{\ell+1}$ باہر نہ نکالنے سے تسلسل کا پہلا حبز ρ^0 حاصل ہوگا۔ اس کے برعکس حبز و ضربی $e^{-\rho}$ باہر نکالتا زیادہ ضروری ہے؛ اسے باہر نہ نکالنے سے c_{j+2} ، c_{j+1} اور c_j پر مشتمل تین اجزائی کلیہ توانی حاصل ہوتا ہے (کر کے دیکھیں!) جس کے ساتھ کام کرنا زیادہ مشکل ثابت ہوتا ہے۔

^{۲۷} آپ پوچھ سکتے ہیں: شمار کنندہ میں $\rho_0 - 2(\ell+1)$ اور نسب نامہ میں $2\ell+2$ رد کرنے کی طرح $1+j$ میں 1 کیوں رد نہیں کیا جاتا؟ اس تخمین میں ایسا کیا 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 تھا۔

جو ρ کی بڑی قیمتوں کے لیے بے متابو بڑھتا ہے۔ مثبت قوت مساوی غیر پسندیدہ متغیراتی رویہ دیتا ہے جو مساوات ۴.۵۷ میں پایا گیا۔ (درحقیقت متغیراتی حل بھی رداسی مساوات کے حبانز حل ہیں البتہ ہم ان میں دلچسپی نہیں رکھتے کیونکہ یہ نامقابل معمول زنی ہیں۔) اس المیہ سے نجات کا صرف ایک ہی راستہ ہے؛ تسلسل کو کہیں نہ کہیں اختتام پذیر ہونا ہوگا۔ لازمی طور پر ایک ایسا زیادہ سے زیادہ عدد صحیح، j بند زج، پایا جائے گا جس پر درج ذیل ہو۔

$$c_{(j+1)} = 0 \quad (۴.۶۶)$$

(یوں کلیہ تواری کے تحت باقی تمام (زیادہ بند) عددی سر صفر ہوں گے۔) مساوات ۴.۶۳ سے ظاہر ہے کہ درج ذیل ہوگا۔

$$2(j+1) - \rho_0 = 0$$

صدر کو انتائی عدد^{۲۸}

$$n \equiv j + 1 \quad (۴.۶۷)$$

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 ^{۲۹}بوہر ہے جو غالباً پورے کوانٹائی میکانیات میں اہم ترین نتیجہ ہے۔ جناب بوہر نے ۱۹۱۳ء میں، نامقابل استعمال کلاسیکی طبیعیات اور نیم کوانٹائی میکانیات کے ذریعہ اس کلیہ کو اخذ کیا۔ مساوات شرودنگر ۱۹۲۴ء میں منظر عام پر آئی۔ 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

$$(۴.۷۲) \quad a \equiv \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \times 10^{-10} \text{ m}$$

رداس بولہر^{۳۰} کہلاتا ہے۔ یوں (مساوات ۴.۵۵ دوبارہ استعمال کرتے ہوئے) درج ذیل ہوگا۔

$$(۴.۷۳) \quad \rho = \frac{r}{an}$$

ہائیڈروجن جوہر کے فضائی تقاضات موج کے نام تین کوانٹائی اعداد (n, l اور m) استعمال کر کے رکھے جاتے ہیں

$$(۴.۷۴) \quad \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$$

جہاں مساوات ۴.۳۶ اور ۴.۶۰ کو دیکھتے ہوئے

$$(۴.۷۵) \quad R_{nl}(r) = \frac{1}{r} \rho^{\ell+1} e^{-\rho} v(\rho)$$

ہوگا جبکہ $v(\rho)$ متغیر ρ میں درجہ $n - \ell - 1$ = j کا کثیررکنی ہوگا، جس کے عددی سر درجہ ذیل کلیہ توالی دے گا (اور پورے تقاضے کی معمول زنی کرنا باقی ہے)۔

$$(۴.۷۶) \quad c_{j+1} = \frac{2(j + \ell + 1 - n)}{(j + 1)(j + 2\ell + 2)} c_j$$

زمینی حالت^{۳۲} (یعنی کم سے کم توانائی کے حال) کے لیے $n = 1$ ہوگا؛ طبعی مستقلات کی قیمتیں پر کرتے ہوئے درجہ ذیل حاصل ہوگا۔

$$(۴.۷۷) \quad E_1 = - \left[\frac{m}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon} \right)^2 \right] = -13.6 \text{ eV}$$

ظاہر ہوا کہ ہائیڈروجن کی بند شدہ توانائی^{۳۳} (زمینی حال میں الیکٹران کو درکار توانائی کی وہ معتد ار جوہر کو باردارہ بنائے) 13.6 eV ہے۔ مساوات ۴.۶ کے تحت $\ell = 0$ لہذا $m = 0$ ہوگا (مساوات ۴.۲۹ دیکھیے) یوں درجہ ذیل ہوگا۔

$$(۴.۷۸) \quad \psi_{100}(r, \theta, \phi) = R_{10}(r)Y_0^0(\theta, \phi)$$

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۔

$$(۴.۷۹) \quad R_{10}(r) = \frac{c_0}{a} e^{-r/a}$$

^{۳۰} Bohr radius

^{۳۱} رداس بولہر 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۔

^{۳۲} ground state

^{۳۳} binding energy

اس کی مساوات ۴.۳ کے تحت معمول زنی کرنے 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 حالت درج 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، بلکہ حالات کی بندشی توانائی ہے کیونکہ $\ell = 0$ ہو سکتا ہے (جس میں $m = 0$ ہوگا) یا $\ell = 1$ ہو سکتا ہے (جس کے لئے m کی قیمت $-1, 0$ یا $+1$ ہوگی)؛ یوں چار مختلف حالات کی یہی توانائی ہوگی۔ کلیہ توانائی (مساوات ۴.۷۶) کے لئے $\ell = 0$ 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۔

$$R_{20}(r) = \frac{c_0}{2a} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a} \quad (۴.۸۲)$$

[دھیان رہے کہ مختلف کوانٹائی اعداد ℓ اور n کے لئے توسیعی عددی سر $\{c_j\}$ مکمل طور پر مختلف ہونگے۔] کلیہ توانائی $\ell = 1$ کی صورت میں پہلے جزو پر تسلسل کو اختتام پذیر کرتا ہے؛ $v(\rho)$ ایک مستقل ہوگا لہذا درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$R_{21}(r) = \frac{c_0}{4a^2} r e^{-r/2a} \quad (۴.۸۳)$$

(ہر منفرد صورت میں c_0 معمول زنی سے تعین ہوگا سوال ۴.۱۱ دیکھیں)۔

کسی بھی اختیاری n کے لئے (مساوات ۴.۶۷ سے ہم آہنگ) ℓ کی ممکنہ قیمتیں درج ذیل ہوں گی

$$\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (۴.۸۴)$$

جبکہ ہر ℓ کے لئے m کی ممکنہ قیمتوں کی تعداد $(2\ell + 1)$ ہوگی (مساوات ۴.۲۹)؛ لہذا E_n سطح توانائی کی کل انخطائیت درج ذیل ہوگی۔

$$d(n) = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2 \quad (۴.۸۵)$$

جدول ۴.۵: ابتدائی چند لاگنچ کشیر رکنیاں، $L_q(x)$

$$\begin{aligned}
 L_0 &= 1 \\
 L_1 &= -x + 1 \\
 L_2 &= x^2 - 4x + 2 \\
 L_3 &= -x^3 + 9x^2 - 18x + 6 \\
 L_4 &= x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24 \\
 L_5 &= -x^5 + 25x^4 - 200x^3 + 600x^2 - 600x + 120 \\
 L_6 &= x^6 - 36x^5 + 450x^4 - 2400x^3 + 5400x^2 - 4320x + 720
 \end{aligned}$$

جدول ۴.۶: ابتدائی چند شریک لاگنچ کشیر رکنیاں، $L_{q-p}^p(x)$

$$\begin{array}{ll}
 L_0^2 = 2 & L_0^0 = 1 \\
 L_1^2 = -6x + 18 & L_1^0 = -x + 1 \\
 L_2^2 = 12x^2 - 96x + 144 & L_2^0 = x^2 - 4x + 2 \\
 L_0^3 = 6 & L_0^1 = 1 \\
 L_1^3 = -24x + 96 & L_1^1 = -2x + 4 \\
 L_2^3 = 60x^2 - 600x + 1200 & L_2^1 = 3x^2 - 18x + 18
 \end{array}$$

کشیر رکنی $v(\rho)$ (جو مساوات ۴.۷۶ کے کلیہ توالی 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

$$(۴.۸۶) \quad v(\rho) = L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(2\rho)$$

جہاں

$$(۴.۸۷) \quad L_{q-p}^p(x) \equiv (-1)^p \left(\frac{d}{dx} \right)^p L_q(x)$$

ایک شریک لاگنچ کشیر رکنی^{۳۴} ہے جبکہ

$$(۴.۸۸) \quad L_q(x) \equiv e^x \left(\frac{d}{dx} \right)^q (e^{-x} x^q)$$

q ویں لاگنچ کشیر رکنی^{۳۵} ہے۔^{۳۶} (جدول ۴.۵) میں چند ابتدائی لاگنچ کشیر رکنیاں پیش کی گئی ہیں؛ جدول ۴.۶ میں

^{۳۴} associated Laguerre polynomial

^{۳۵} Laguerre polynomial

^{۳۶} دیگر علامتوں کی طرح ان کے لئے بھی کئی علامتیں استعمال کی جاتی ہیں۔ میں نے سب سے زیادہ مقبول علامتیں استعمال کی ہیں۔

جدول ۷.۴: ہائیڈروجن کے ابتدائی چند رداسی تقاسمات، $R_{n\ell}(r)$

$$R_{10} = 2a^{-3/2}e^{-r/a}$$

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{2}\frac{r}{a}\right)e^{-r/2a}$$

$$R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}}a^{-3/2}\frac{r}{a}e^{-r/2a}$$

$$R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{2}{3}\frac{r}{a} + \frac{2}{27}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)e^{-r/3a}$$

$$R_{31} = \frac{8}{27\sqrt{6}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{6}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)e^{-r/3a}$$

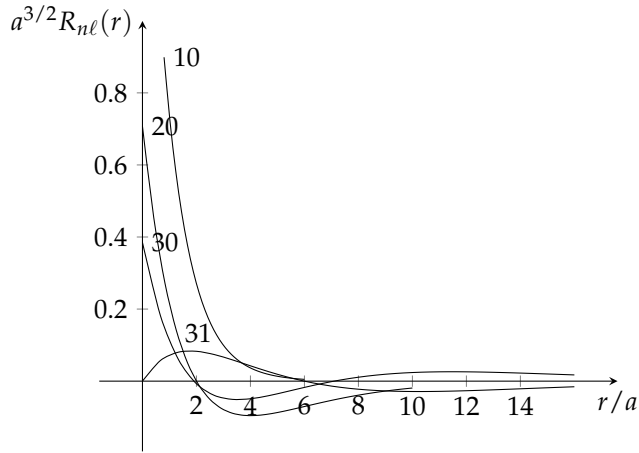
$$R_{32} = \frac{4}{81\sqrt{30}}a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^2e^{-r/3a}$$

$$R_{40} = \frac{1}{4}a^{-3/2}\left(1 - \frac{3}{4}\frac{r}{a} + \frac{1}{8}\left(\frac{r}{a}\right)^2 - \frac{1}{192}\left(\frac{r}{a}\right)^3\right)e^{-r/4a}$$

$$R_{41} = \frac{\sqrt{5}}{16\sqrt{3}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{4}\frac{r}{a} + \frac{1}{80}\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)\left(\frac{r}{a}\right)e^{-r/4a}$$

$$R_{42} = \frac{1}{64\sqrt{5}}a^{-3/2}\left(1 - \frac{1}{12}\frac{r}{a}\right)\left(\frac{r}{a}\right)^2e^{-r/4a}$$

$$R_{43} = \frac{1}{768\sqrt{35}}a^{-3/2}\left(\frac{r}{a}\right)^3e^{-r/4a}$$



شکل ۴.۴: چند ابتدائی ہائیڈروجن رداسی تقاسمات موج $R_{n\ell}(r)$ کی تریات۔

چند ابتدائی شریک لاگج کشیر رکنیاں پیش کی گئی ہیں؛ جدول ۴.۷ میں چند ابتدائی ردائی تفاعلات موج پیش کئے گئے ہیں جنہیں شکل ۴.۴ میں ترسیم کیا گیا ہے۔ ہائیڈروجن کے معمول شدہ تفاعلات موج درجہ ذیل ہیں۔

$$(۴.۸۹) \quad \psi_{n\ell m} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}} e^{-r/na} \left(\frac{2r}{na}\right)^\ell [L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(2r/na)] Y_\ell^m(\theta, \phi)$$

یہ تفاعلات خوفناک نظر آتے ہیں لیکن شکوہ نہ کیجیے؛ یہ اُن چند حقیقی نظاموں میں سے ایک ہے جن کا بند روپ میں ٹھیک ٹھیک حل حاصل کرنا ممکن ہے۔ دھیان رہے، اگرچہ تفاعلات موج تینوں کوانٹائی اعداد کے تابع ہیں، توانائیوں (مساوات ۴.۷۰) کو صرف n تعین کرتا ہے۔ یہ کولب توانائی کی ایک مخصوص خاصیت ہے؛ آپ کو یاد ہو گا کہ کروی کنویں میں توانائیاں ℓ پر منحصر تھیں (مساوات ۴.۵۰)۔ تفاعلات موج باہمی عمومی

$$(۴.۹۰) \quad \int \psi_{n\ell m}^* \psi_{n'\ell' m'} r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi = \delta_{nn'} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

ہیں۔ یہ کروی ہارمونیاں کی عمودیت (مساوات ۴.۳۳) اور ($n \neq n'$) کی صورت میں H کی منفرد امتیازی افتدار کے امتیازی تفاعل ہونے کی بنا پر ہے۔

ہائیڈروجن تفاعلات موج کی تصویر کشی آسان کام نہیں ہے۔ ماہر کیما ان کے ایسے کثافتی اشکال بناتے ہیں جن کی چمک $|\psi|^2$ کا راست متناسب ہوتی ہے (شکل 5.4)۔ زیادہ معلومات مستقل کثافت احتمال کی سطحوں (شکل 6.4) کے اشکال دیتی ہیں (جنہیں پڑھنا نسبتاً مشکل ہو گا)۔

سوال ۴.۱۰: کلیہ توانائی (مساوات ۴.۷۶) استعمال کرتے ہوئے تفاعل موج R_{30} ، R_{31} اور R_{32} حاصل کریں۔ ان کی معمول زنی کرنے کی ضرورت نہیں۔

سوال ۴.۱۱:

ا. مساوات ۴.۸۲ میں دیے گئے R_{20} کی معمول زنی کر کے ψ_{200} تیار کریں۔

ب. مساوات ۴.۸۳ میں دیے گئے R_{21} کی معمول زنی کر کے ψ_{211} ، ψ_{210} اور ψ_{21-1} تیار کریں۔

سوال ۴.۱۲:

ا. مساوات ۴.۸۸ استعمال کرتے ہوئے ابتدائی چار لاگج کشیر رکنیاں حاصل کریں۔

ب. مساوات ۴.۸۶، ۴.۸۷ اور ۴.۸۸ استعمال کرتے ہوئے $n = 5$ ، $\ell = 2$ کی صورت میں $v(\rho)$ تلاش کریں۔

ج. کلیہ توانائی (مساوات ۴.۷۶) استعمال کرتے ہوئے $n = 5$ ، $\ell = 2$ کی صورت میں $v(\rho)$ تلاش کریں۔

سوال ۴.۱۳:

ا. ہائیڈروجن جوہر کے زمینی حال میں الیکٹران کے لیے $\langle r \rangle$ اور $\langle r^2 \rangle$ تلاش کریں۔ اپنے جواب کو رداس بوہر کی صورت میں لکھیں۔

ب. ہائیڈروجن جوہر کے زمینی حال میں الیکٹران کے لیے $\langle x \rangle$ اور $\langle x^2 \rangle$ تلاش کریں۔ اشارہ: آپکو کوئی نیا فنکشن حاصل کرنے کی ضرورت نہیں۔ دھیان رہے کہ $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ ہوگا، اور از زمینی حال میں تشکلی کو بروئے کار لائیں۔

ج. حال $n = 2, \ell = 1, m = 1$ کے لیے $\langle x^2 \rangle$ تلاش کریں۔ انتباہ: یہ حال x, y اور z کے لحاظ سے تشکلی نہیں ہے۔ یہاں $x = r \sin \theta \cos \phi$ استعمال کرنا ہوگا۔

سوال ۴.۱۴: ہائیڈروجن کے زمینی حال میں r کی کون سی قیمت زیادہ محتمل ہوگی۔ (اس کا جواب صفر نہیں ہے!) اشارہ: آپکو پہلے معلوم کرنا ہوگا کہ r اور $r + dr$ کے بیچ الیکٹران پائے جانے کا احتمال کیا ہوگا۔

سوال ۴.۱۵: ہائیڈروجن جوہر ساکن حال $n = 2, \ell = 1, m = 1$ اور $n = 2, \ell = 1, m = -1$ کے درج ذیل خطی مجموعے سے ابتداء کرتا ہے۔

$$\Psi(r, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{211} + \psi_{21-1})$$

ا. حال $\Psi(r, t)$ تیار کریں۔ اس کی سادہ ترین صورت حاصل کریں۔

ب. مخفی توانائی کی توقعاتی قیمت $\langle V \rangle$ تلاش کریں۔ (کیا یہ t کی تابع ہوگی؟) اصل کلیہ اور عددی جواب کو الیکٹران وولٹ تصویرت میں پیش کریں۔

۴.۲.۲ ہائیڈروجن کا طیف

اصولی طور پر ایک ہائیڈروجن جوہر جو ساکن حال $\psi_{n\ell m}$ میں پایا جاتا ہو ہمیشہ کے لیے اسی حال میں رہے گا۔ تاہم اس کو (دوسرے جوہر کے ساتھ ٹکرا کر یا اس پر روشنی ڈال کر) چھیڑنے سے الیکٹران کسی دوسرے ساکن حال میں **تحویل** ^{۳۷} کر سکتا ہے۔ یہ توانائی جذب کر کے زیادہ توانائی حال منتقل ہو سکتا ہے یا (عموماً برقی طبعی نوریہ کے اخراج سے) توانائی خارج کر کے کم توانائی حال منتقل ہو سکتا ہے۔ ^{۳۸} عملاً ایسی چھیڑ خانیاں ہر وقت پائی جاتیں گی لہذا تحویل (جنہیں ”کوانٹائی چھلانگ“ کہتے ہیں) مستقل طور پر ہوتے رہیں گے، جن کی بنا پر ہائیڈروجن سے ہر وقت روشنی (نوریہ) خارج ہوگی جس کی توانائی ابتدائی اور اختتامی حالات کی توانائیوں کے فرق

$$E_\gamma = E_i - E_f = -13.6 \text{ eV} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) \quad (۴.۹۱)$$

کے برابر ہوگا۔

^{۳۷} transition
^{۳۸} فطرۃً، اس میں تابع وقت باہم عمل پایا جائے گا جس کی تفصیل باب ۹ میں پیش کی جائے گی۔ یہاں اصل عمل حبان ضروری نہیں ہے۔

اب کلیہ پلانک^{۴۹} کے تحت نوریہ کی توانائی اس کے تعدد کے راست تناسب ہوگی:

$$E_{\gamma} = h\nu \quad (۴.۹۲)$$

جبکہ طول موج $\lambda = c/\nu$ ہے لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (۴.۹۳)$$

جہاں

$$R \equiv \frac{m}{4\pi c \hbar^3} \left(\frac{e^2}{4\pi \epsilon_0} \right)^2 = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} \quad (۴.۹۴)$$

رڈبرگ مستقل^{۴۱} کہلاتا ہے۔ مساوات ۴.۹۳ ہائیڈروجن کے طیف کا کلیہ رڈبرگ^{۴۲} ہے۔ یہ کلیہ انیسویں صدی میں تجرباتی طور پر اخذ کیا گیا۔ نظریہ بوہر کی سب سے بڑی فتح اس کلیے کا حصول ہے جو تدرت کے بنیادی منتقات کی صورت میں R کی قیمت دیتا ہے۔ زمینی حال ($n_f = 1$) میں تحویل، بالائے بصری خطہ میں پائے جاتے ہیں جنہیں طیف پیمائی کارلیماض تسلسل^{۴۳} کہتے ہیں۔ پہلی ہیجان حال ($n_f = 2$) میں تحویل، دکھائی دینے والے خطہ میں روشنی پیدا کرتے ہیں جسے بالمر تسلسل^{۴۴} کہتے ہیں۔ اسی طرح $n_f = 3$ میں تحویل، پاشن تسلسل^{۴۵} دیتے ہیں جو زیر بصری شعاع ہے، وغیرہ وغیرہ (شکل ۴.۵ دیکھیں)۔ (رہائشی حرارت پر زیادہ تر ہائیڈروجن جوہر زمینی حال میں ہونگے؛ احسن راہی طیف حاصل کرنے کی خاطر آپکو پہلے مختلف ہیجان حالات میں الیکٹران آباد کرنے ہوں گے؛ ایسا عموماً گیس میں برقی شعلہ پیدا کر کے کیا جاتا ہے۔)

سوال ۴.۱۶: ہائیڈروجنی جوہر^{۴۶} Z پروٹان کے مرکزہ کے گرد طواف کرتے ہوئے ایک الیکٹران پر مشتمل ہے۔ (از خود ہائیڈروجن میں $Z = 1$ جبکہ باردارہ ہیلیم^{۴۷} میں $Z = 2$ اور دہری باردارہ^{۴۸} میں $Z = 3$ ہوگا، وغیرہ وغیرہ)۔ ہائیڈروجن جوہر کی بوہر توانائیاں $E_n(Z)$ ، ہندشی توانائی $E_1(Z)$ ، رداس بوہر $a(Z)$ ، اور رڈبرگ مستقل $R(Z)$ تعین کریں۔ (اپنے جوابات کو ہائیڈروجن کی متعلقہ قیمتوں کے لحاظ سے پیش کریں)۔ برقت طیفی طیف کے کس

Planck's formula^{۴۹}

نور^{۵۰} درحقیقت برقت طیفی احسن راہ کا ایک کوانٹائی ہے۔ یہ ایک اضافیتی چیز ہے جس پر غیر اضافی کوانٹائی میکانیات متاثر استعمال نہیں ہے۔ اگرچہ ہم چند مواقع پر نوریہ کی بات کرتے ہوئے کلیہ پلانک سے اس کی توانائی حاصل کریں گے، یاد رہے کہ اس کا اس نظریہ سے کوئی تعلق نہیں جس پر ہم بات کر رہے ہیں۔

Rydberg constant^{۴۱}

Rydberg formula^{۴۲}

Lyman series^{۴۳}

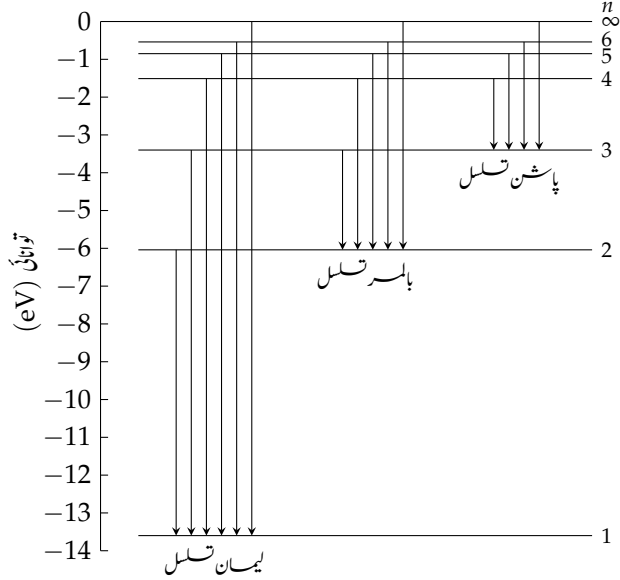
Balmer series^{۴۴}

Paschen series^{۴۵}

hydrogenic atom^{۴۶}

Helium^{۴۷}

Lithium^{۴۸}



شکل ۵.۴: ہائیڈروجن طیف میں سطحوں توانائیاں اور تھوہیات۔

خطے میں $Z = 2$ اور $Z = 3$ کی صورت میں لیمان تسلسل پائے جائیں گے؟ اشارہ: کسی نے حساب کی ضرورت نہیں ہے؛ مخفیہ (مساوات ۴.۵۲) میں $e^2 \rightarrow Ze^2$ ہوگا لہذا تمام نتائج میں بھی یہی کچھ پر کرنا ہوگا۔

سوال ۱.۴: زمین اور سورج کو ہائیڈروجن جوہر کا متبادل تجاذبی نظام تصور کریں۔

ا. مساوات ۴.۵۲ کی جگہ مخفی توانائی تعادل کیا ہوگا؟ (زمین کی کمیت m جبکہ سورج کی کمیت M لیں۔)

ب. اس نظام کا ”رداس بوجہ“ a_g کیا ہوگا؟ اس کی عددی قیمت تلاش کریں۔

ج. تجاذبی کلیہ بوجہ لکھ کر رداس r_0 کے مدار میں سیارہ کے کلاسیکی توانائی کو E_n کے برابر رکھ کر دکھائیں کہ $n = \sqrt{r_0/a_g}$ ہوگا۔ اس سے زمین کے کوانٹائی عدد n کی اندازاً قیمت تلاش کریں۔

د. فرض کریں زمین اگلی نچلی سطح $(n - 1)$ میں تحویل کرتی ہے۔ کتنی توانائی کا اخراج ہوگا؟ جواب حوالہ میں دیں۔

۔ خارج نوریہ (یا زیادہ ممکنہ طور پر گریوٹاؤن^{۴۹}) کا طول موج کیا ہوگا؟ (اپنے جواب کو نوری سالوں میں پیش کریں۔

کیا یہ حیرت انگیز نتیجہ محض ایک اتفاق ہے۔)

۴.۳ زاویائی معیار حرکت

ہم دیکھ چکے ہیں کہ ہائیڈروجن جوہر کے ساکن حالات کو تین کوانٹائی اعداد n ، ℓ اور m کے لحاظ سے نام دیا جاتا ہے۔ صدر کوانٹائی عدد (n) حال کی توانائی تعیین کرتا ہے (مساوات ۴.۷۰)؛ ہم دیکھیں گے کہ ℓ اور m مدارچی زاویائی معیار حرکت سے تعلق رکھتے ہیں۔ کلاسیکی نظریہ میں وسطی قوتیں، توانائی اور معیار حرکت بنیادی بقائی مقداریں ہیں، اور یہ حیرت کی بات نہیں کہ کوانٹائی میکانیات میں زاویائی معیار حرکت (اس سے بھی زیادہ) اہمیت رکھتا ہے۔

کلاسیکی طور پر (مبدأ کے لحاظ سے) ایک ذرہ کی زاویائی معیار حرکت درج ذیل کلیہ دیتا ہے

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (۴.۹۵)$$

جس کے تحت درج ذیل ہوگا۔

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x \quad (۴.۹۶)$$

ان کے متعلقہ کوانٹائی عاملین معیاری نسخہ $p_z \rightarrow -i\hbar\partial/\partial z$ ، $p_y \rightarrow -i\hbar\partial/\partial y$ ، $p_x \rightarrow -i\hbar\partial/\partial x$ سے حاصل ہوں گے۔ باب ۲ میں ہم نے ہارمونی سرکش کے احبازی توانائیوں کو خالص الجبرائی ترکیب سے حاصل کیا۔ اگلے حصہ میں الجبرائی ترکیب استعمال کرتے ہوئے زاویائی معیار حرکت عاملین کے امتیازی افتدار حاصل کیے جائیں گے۔ یہ ترکیب، عاملین کے مقلبت تعلقات پر مبنی ہے۔ اس کے بعد ہم امتیازی تفاسلات حاصل کریں گے جو زیادہ دشوار کام ہے۔

۴.۳.۱ امتیازی افتدار

عاملین L_x اور L_y آپس میں غیر مقلوب ہیں۔ درحقیقت درج ذیل ہوگا۔^{۵۰}

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] \\ &= [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z] \end{aligned} \quad (۴.۹۷)$$

باضابطہ مقلبت رشتوں (مساوات ۴.۱۰) سے ہم جانتے ہیں کہ صرف x اور p_x ، y اور p_y ، z اور p_z عاملین غیر مقلوب ہیں۔ یوں درمیانے دو احبزاء حذف ہوں گے اور درج ذیل رہ جائے گا۔

$$[L_x, L_y] = yp_x[p_z, z] + xp_y[z, p_z] = i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar L_z \quad (۴.۹۸)$$

ہم $[L_y, L_z]$ یا $[L_z, L_x]$ بھی تلاش کر سکتے تھے، تاہم انہیں علیحدہ علیحدہ معلوم کرنے کی ضرورت نہیں ہے؛ ہم اشاریہ کی چکری ادل بدل ($x \rightarrow y, y \rightarrow z, z \rightarrow x$) سے فوراً درج ذیل لکھ سکتے ہیں

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z; \quad [L_y, L_z] = i\hbar L_x; \quad [L_z, L_x] = i\hbar L_y \quad (۴.۹۹)$$

^{۵۰} کوانٹائی میکانیات میں تمام عاملین و تانوں جزئین تقسیم: $(B + C) = AB + AC$ پر پورا اترتے ہیں (صفحہ ۷۷ پر حاشیہ ۳۶ دیکھیں)۔ بالخصوص $[A, B + C] = [A, B] + [A, C]$ ہوگا۔

جو زاویائی معیار حرکت کی بنیاد پر مقلبتی رشتے^{۵۱} ہیں جن سے باقی سب کچھ اخذ ہوتا ہے۔

دھیان رہے کہ L_x ، L_y اور L_z غیر ہم آہنگ و متبادل مشاہدہ ہیں۔ متعمم اصول عدم یقینیت (مساوات ۳.۶۲) کے تحت

$$\sigma_{L_x}^2 \sigma_{L_y}^2 \geq \left(\frac{1}{2i} \langle i\hbar L_z \rangle \right)^2 = \frac{\hbar^2}{4} \langle L_z \rangle^2$$

یا

$$(۴.۱۰۰) \quad \sigma_{L_x} \sigma_{L_y} \geq \frac{\hbar}{2} |\langle L_z \rangle|$$

ہوگا۔ یوں ایسے حالات کی تلاش جو L_x اور L_y کے بیک وقت امتیازی تفاعلات ہوں بے مقصد ہوگا۔ اس کے برعکس کل زاویائی معیار حرکت کا مربع:

$$(۴.۱۰۱) \quad L^2 \equiv L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$$

عامل L_x کے ساتھ مقلوب ہے۔

$$\begin{aligned} [L^2, L_x] &= [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \\ &= L_y [L_y, L_x] + [L_y, L_x] L_y + L_z [L_z, L_x] + [L_z, L_x] L_z \\ &= L_y (-i\hbar L_z) + (-i\hbar L_z) L_y + L_z (i\hbar L_y) + (i\hbar L_y) L_z \\ &= 0 \end{aligned}$$

(مطالب کی سادہ روپ حاصل کرنے کے لیے میں نے مساوات ۳.۶۲ استعمال کیا؛ یہ بھی یاد رہے کہ ہر عامل اپنے آپ کے ساتھ مقلوب ہوگا) اس سے آپ اخذ کر سکتے ہیں کہ L_y اور L_z کے ساتھ بھی L^2 مقلوب ہوگا

$$(۴.۱۰۲) \quad [L^2, L_x] = 0, \quad [L^2, L_y] = 0, \quad [L^2, L_z] = 0$$

یا مختصر اور ج ذیل ہوگا۔

$$(۴.۱۰۳) \quad [L^2, \mathbf{L}] = 0$$

اس طرح \mathbf{L} کے ہر جزو کے ساتھ L^2 ہم آہنگ ہوگا اور ہم L^2 کا (مثلاً) L_z کے ساتھ بیک وقت امتیازی حالات

$$(۴.۱۰۴) \quad L^2 f = \lambda f \quad \text{اور} \quad L_z f = \mu f$$

^{۵۱} fundamental commutation relations

تلاش کرنے کی امید رکھ سکتے ہیں۔ ہم نے حصہ ۲.۳.۱ میں ہارمونی سر تعش پر سیدھی عامل کی ترکیب استعمال کی۔ اس طرح کی ترکیب یہاں بھی استعمال کرتے ہیں۔ یہاں ہم درج ذیل لیتے ہیں۔

$$L_{\pm} \equiv L_x \pm iL_y \quad (۴.۱۰۵)$$

L_z کے ساتھ مقاب درج ذیل ہوگا

$$[L_z, L_{\pm}] = [L_z, L_x] \pm i[L_z, L_y] = i\hbar L_y \pm i(-i\hbar L_x) = \pm\hbar(L_x \pm iL_y)$$

لہذا

$$[L_z, L_{\pm}] = \pm\hbar L_{\pm} \quad (۴.۱۰۶)$$

اور، ظاہر ہے کہ درج ذیل ہوگا۔

$$[L^2, L_{\pm}] = 0 \quad (۴.۱۰۷)$$

میں دعویٰ کرتا ہوں کہ اگر L^2 اور L_z کا امتیازی تف عمل f ہو تب $L_{\pm}(f)$ بھی ان کا امتیازی تف عمل ہوگا: مساوات ۴.۱۰۷ درج ذیل کہتی ہے

$$L^2(L_{\pm}f) = L_{\pm}(L^2f) = L_{\pm}(\lambda f) = \lambda(L_{\pm}f) \quad (۴.۱۰۸)$$

لہذا اسی امتیازی مقدار λ کے لیے $L_{\pm}f$ بھی L^2 کا امتیازی تف عمل ہوگا، اور مساوات ۴.۱۰۶ درج ذیل کہتی ہے

$$\begin{aligned} L_z(L_{\pm}f) &= (L_zL_{\pm} - L_{\pm}L_z)f + L_{\pm}L_zf = \pm\hbar L_{\pm}f + L_{\pm}(\mu f) \\ &= (\mu \pm \hbar)(L_{\pm}f) \end{aligned} \quad (۴.۱۰۹)$$

لہذا نئے امتیازی مقدار $\mu \pm \hbar$ کے لیے L_z کا $L_{\pm}f$ امتیازی تف عمل ہوگا۔ ہم L_+ کو عامل L_+ ^{۵۲} کہتے ہیں چونکہ یہ L_z کے امتیازی مقدار کو \hbar بڑھاتا ہے جبکہ L_- عامل L_- ^{۵۳} کہلاتا ہے چونکہ یہ امتیازی قیمت کو \hbar کم کرتا ہے۔

یوں ہمیں λ کی کسی ایک قیمت کے لیے، حالات کی ایک سیدھی ملتی ہے، جس کا ہر پایہ متر ہی پایہ سے L_z کی امتیازی مقدار کے لحاظ سے \hbar کی ایک اکائی فاصلہ پر ہوگا (شکل ۴.۶)۔ سیدھی چڑھنے کی خاطر ہم عامل رفت کا اطلاق کرتے ہیں جبکہ سیدھی اترنے کی خاطر ہم عامل تقلیل لاگو کرتے ہیں۔ تاہم یہ عمل ہمیشہ کے لئے برقرار نہیں رہ سکتا ہے۔ ہم آخر کار ایک ایسے حال تک پہنچے گے جس کا z جزو کل سے زیادہ ہوگا جو ایک ناممکن صورت ^{۵۴} ہے۔ لازماً سیدھی کا ایسا "بالا ترین پایہ" f_t ، پایا جائے گا جو درج ذیل کو مطمئن ^{۵۵} کرے گا۔

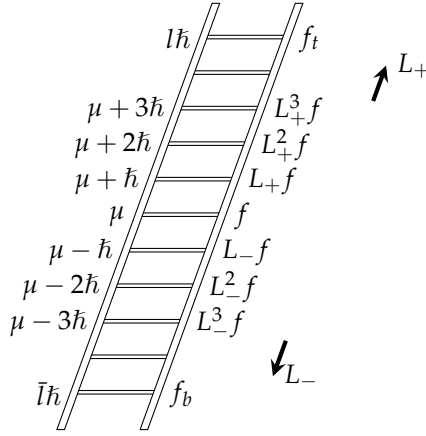
$$L_+f_t = 0 \quad (۴.۱۱۰)$$

منظر ض کریں اس بالاترین پایہ پر L_z کی امتیازی قیمت $\hbar\ell$ ہو (حرف "ℓ" کی مناسبت آپ پر حبلہ آیا ہوں

raising operator^{۵۲}
lowering operator^{۵۳}

^{۵۲} بانٹا بطور پر $\langle L^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle$ ہوگا، لیکن $\langle L^2 \rangle = \langle f|L_x^2f \rangle = \langle L_xf|L_xf \rangle \geq 0$ ہے (اور L_y کے لئے بھی ایسا ہی ہوگا) لہذا $\lambda = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \mu^2 \geq \mu^2$ ہوگا۔

^{۵۵} درحقیقت، ہم صرف اتنا اخذ کر سکتے ہیں کہ L_+f_t ناقابل معمول زنی ہے؛ اس کا معیار ضرر کی بجائے لامتناہی ہو سکتا ہے۔ سوال ۴.۱۸ میں اس پر غور کیا گیا ہے۔



شکل ۴.۶: زاویائی معیار حرکت حالات کی ”سیڑھی“۔

گی۔

$$(۴.۱۱۱) \quad L_z f_t = \hbar \ell f_t; \quad L^2 f_t = \lambda f_t$$

اب درج ذیل ہوگا

$$\begin{aligned} L_{\pm} L_{\mp} &= (L_x \pm iL_y)(L_x \mp iL_y) = L_x^2 + L_y^2 \mp i(L_x L_y - L_y L_x) \\ &= L^2 - L_z^2 \mp i(\hbar L_z) \end{aligned}$$

یاد دوسرے الفاظ میں درج ذیل ہوگا۔

$$(۴.۱۱۲) \quad L^2 = L_{\pm} L_{\mp} + L_z^2 \mp \hbar L_z$$

یوں

$$L^2 f_t = (L_- L_+ + L_z^2 + \hbar L_z) f_t = (0 + \hbar^2 \ell^2 + \hbar^2 \ell) f_t = \hbar^2 \ell(\ell + 1) f_t$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۴.۱۱۳) \quad \lambda = \hbar^2 \ell(\ell + 1)$$

یہ ہمیں L_z کی امتیازی قدر کی زیادہ سے زیادہ قیمت کی صورت میں L^2 کی امتیازی قدر دیتی ہے۔

ساتھ ہی، اسی وجہ کی بنا، سیڑھی کا نچلا ترین پایہ f_b بھی پایا جائے گا جو درج ذیل کو مطمئن کرے گا۔

$$(۴.۱۱۴) \quad L_- f_b = 0$$

فرض کریں اس نچلے ترین پایہ پر L_z کا امتیازی مقدار $\hbar\bar{\ell}$ ہو:

$$L_z f_b = \hbar\bar{\ell} f_b; \quad L^2 f_b = \lambda f_b \quad (۴.۱۱۵)$$

مسوات ۴.۱۱۳ استعمال کرتے ہوئے

$$L^2 f_b = (L_+ L_- + L_z^2 - \hbar L_z) f_b = (0 + \hbar^2 \bar{\ell}^2 - \hbar^2 \bar{\ell}) f_b = \hbar^2 \bar{\ell}(\bar{\ell} - 1) f_b$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$\lambda = \hbar^2 \bar{\ell}(\bar{\ell} - 1) \quad (۴.۱۱۶)$$

مسوات ۴.۱۱۳ اور مسوات ۴.۱۱۶ کا موازنہ کرنے سے $\bar{\ell}(\bar{\ell} - 1) = \ell(\ell + 1)$ ہوگا لہذا $\bar{\ell} = \ell + 1$ ہوگا جو بے معنی ہے، چونکہ نچلے ترین پایہ، بالاترین پایہ سے بلند نہیں ہو سکتا (یاد رہے ذیل ہوگا۔)

$$\bar{\ell} = -\ell \quad (۴.۱۱۷)$$

ظاہر ہے کہ L_z کے امتیازی مقدار $m\hbar$ ہونگے، جہاں m (اس حرف کی مناسبت آپ پر جلد عیاں ہو گی) کی قیمت N عدد صحیح قدم لیتے ہوئے $-\ell$ تا $+\ell$ ہوگی۔ بالخصوص آپ دیکھ سکتے ہیں کہ $\ell = -\ell + N$ یعنی $\ell = N/2$ ہوگا، لہذا ℓ لازماً عدد صحیح یا نصف عدد صحیح ہوگا۔ امتیازی تعلقات کی تصویر کشی اعداد ℓ اور m کرتے ہیں:

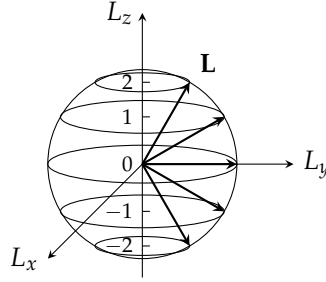
$$L^2 f_\ell^m = \hbar^2 \ell(\ell + 1) f_\ell^m; \quad L_z f_\ell^m = \hbar m f_\ell^m \quad (۴.۱۱۸)$$

جہاں درج ذیل ہونگے۔

$$\ell = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots; \quad m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell \quad (۴.۱۱۹)$$

ℓ کی کسی ایک قیمت کے لیے m کی $2\ell + 1$ مختلف قیمتیں ہوں گی (یعنی سیدھی کے $2\ell + 1$ پائے ہونگے)۔

بعض اوقات اس نتیجہ کو شکل ۷ کی طرز پر ظاہر کیا جاتا ہے (جو $2 = \ell$ کے لیے دکھایا گیا ہے)۔ یہاں تیسرے نشان کمانہ زاویائی معیار حرکت کو ظاہر کرتے ہیں؛ ان تمام کی لمبائیاں \hbar کی اکائیوں میں $\sqrt{\ell(\ell + 1)}$ ہوگی جو (یہاں $\sqrt{6} = 2.45$ ہے) جبکہ ان کے z اجزاء m کی اجازتی قیمتیں $2, 1, 0, -1, -2$ (ماسوائے 0) ہیں۔ دھیان رہے کہ ان سمتیات کے مقدار (یعنی کردہ کار داس)، z حبزوں کی زیادہ سے زیادہ قیمت سے بڑا ہے! (ماسوائے 0) کی ”حقیر“ صورت میں، عموماً $\sqrt{\ell(\ell + 1)} > \ell$ ہوگا۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ آپ زاویائی معیار حرکت کو سیدھا z رخ نہیں رکھ سکتے ہیں۔ پہلی نظر میں یہ ایک نامعقول بات نظر آتی ہے۔ ”اب میں z محدود کو زاویائی معیار حرکت سمتیہ کے رخ منتخب نہیں کر سکتا ہوں؟“ اب ایسا کرنے کی خاطر آپ کو تینوں اجزاء بیک وقت معلوم ہونے چاہیے ہیں جبکہ اصول عدم یقینیت (مسوات ۴.۱۰۰) کہتی ہے کہ یہ ناممکن ہے۔ چلو مان لیا لیکن کیا یہ بھی ممکن نہیں ہے کہ میں اتفاقی z محدود کو L کے رخ منتخب کر لوں؟ بالکل نہیں! آپ بنیادی نکتہ نہیں سمجھ پاتے ہیں۔ ایسا نہیں ہے کہ محض آپ L کے تینوں اجزاء نہیں جانتے



شکل ۷: زاویائی معیار حرکت حالات (برائے $\ell = 2$)۔

ہیں بلکہ ایک ذرے کا تعین زاویائی معیار حرکت سمتیہ ہو ہی نہیں سکتا ہے؛ جیسا کہ اس کا مقام اور معیار حرکت بیک وقت تعین نہیں ہو سکتے ہیں۔ اگر L_z کی قیمت ہمیں ٹھیک ٹھیک معلوم ہو تب L_x اور L_y ہم نہیں جان سکتے ہیں شکل ۷، m میں سمتیات گسراہ کن ہیں؛ بہتر ہوتا کہ خطوط عرض بلند پر ان کی اسپائی کی حباتی جو یہ ظاہر کرتی کہ L_x اور L_y بلا تعین ہیں۔

میں امید کرتا ہوں کہ میں آپ کو متاثر کرنے میں کامیاب ہوا ہوں گا۔ زاویائی معیار حرکت کے بنیادی مقابلیت رشتوں (مساوات ۴.۹۹) سے آغاز کرتے ہوئے ہم نے، صرف الجبرائی تراکیب استعمال کر کے، امتیازی تفاعلات دیکھے بغیر، L^2 اور L_z کے امتیازی افتدار تعین کیے۔ آئیں اب امتیازی تفاعلات تیار کریں؛ جو آپ دیکھیں گے اتنا آسان نہیں ہوگا۔ میں کانٹے کی بات $Y_\ell^m = f_\ell^m$ سے شروع کرتا ہوں؛ L^2 اور L_z کے امتیازی تفاعلات وہی کروہار مونیات ہیں جنہیں ایک دوسری راہ پر چلتے ہوئے ہم نے حصہ ۴.۱.۲ میں حاصل کیا (یہی وجہ ہے کہ میں نے حرف ℓ اور m استعمال کیے)۔ اب میں آپ کو بتا سکتا ہوں کہ کروہار مونیات کیوں عمودی ہیں۔ یہ الگ تھلگ امتیازی افتدار کے ہر مشی عاملین (L^2 اور L_z) کے امتیازی تفاعلات ہیں (حصہ ۳.۱.۳ میں مسئلہ ۳.۲)۔

سوال ۴.۱۸: عامل رفت اور عامل تقلیل m کی قیمت ایک (1) سے تبدیل کرتے ہیں

$$(۴.۱۲۰) \quad L_{\pm} f_\ell^m = (A_\ell^m) f_\ell^{m \pm 1}$$

جہاں A_ℓ^m کوئی مستقل ہے۔ سوال: امتیازی تفاعلات کی معمول زنی کرنے کی خاطر A_ℓ^m کیا ہوگا؟ اشارہ: پہلے دکھائیں کہ L_{\pm} اور L_{\mp} ایک دوسرے کے ہر مشی جوڑی دار ہیں (چونکہ L_x اور L_y قابل مشاہدہ ہیں، آپ فرض کر سکتے ہیں یہ ہر مشی ہوں گے لیکن آپ چاہیں تو اس کی ثابت کر سکتے ہیں)؛ اور اس کے بعد مساوات ۴.۱۱۲ استعمال کریں۔ جواب:

$$(۴.۱۲۱) \quad A_\ell^m = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1) - m(m \pm 1)} = \hbar \sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)}$$

دیکھیں گے سیڑھی کی بلند ترین اور نچلے ترین پائپ پر کیا ہوگا (جب آپ f_ℓ^ℓ یا $f_\ell^{-\ell}$ پر L_{-} لاگو کرتے ہیں)۔

سوال ۴.۱۹:

باب ۴. تین ابعادی کوانٹائی میکانیات

۱. مقام اور معیار حرکت کی باضابطہ مقلبت رشتوں (مساوات ۴.۱۰) سے آغاز کرتے ہوئے درج ذیل مقابلہ حاصل کریں۔

$$(۴.۱۲۲) \quad \begin{aligned} [L_z, x] &= i\hbar y, & [L_z, y] &= -i\hbar x, & [L_z, z] &= 0, \\ [L_z, p_x] &= i\hbar p_y, & [L_z, p_y] &= -i\hbar p_x, & [L_z, p_z] &= 0 \end{aligned}$$

ب. ان نتائج کو استعمال کرتے ہوئے مساوات ۴.۹۶ سے حاصل کریں۔

ج. مقابلہ $[L_z, r^2]$ اور $[L_z, p^2]$ کی قیمتیں (جہاں $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ اور $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$) ہیں تلاش کریں۔

د. اگر V صرف r کا تابع ہو تب دکھائیں کہ ہیملٹن $H = (p^2/2m) + V$ زاویائی عمل L کے تینوں اجزاء کے ساتھ مقلوبی ہوگا۔ یوں H ، L^2 اور L_z باہمی ہم آہنگ متبادل مشاہدہ ہوں گے۔

سوال ۴.۲۰:

۱. دکھائیں کہ مخفی $V(r)$ میں ایک ذرے کی مدار چلی زاویائی معیار حرکت L کی توقعاتی قیمت کی شرح تبدیلی اس کے قوت سرور کی توقعاتی قیمت کے برابر ہوگی

$$\frac{d}{dt} \langle L \rangle = \langle N \rangle$$

جہاں درج ذیل ہے۔

$$N = \mathbf{r} \times (-\nabla V)$$

(یہ مسئلہ اہر نفٹ کا مشغل گھومتا تعلق ہے۔)

ب. دکھائیں کہ کسی بھی کردی تشاکلی مخفی کے لیے $d\langle L \rangle / dt = 0$ ہوگا۔ (یہ زاویائی معیار حرکت کے بٹا کا کوانٹائی میکانی روپ ہے۔)

۴.۳.۲ امتیازی تفاعلات

ہمیں سب سے پہلے L_x ، L_y اور L_z کو کردی محدود میں لکھنا ہوگا اب $\mathbf{L} = (\hbar/i)(\mathbf{r} \times \nabla)$ ہے جبکہ کردی محدود میں ڈھلوان درج ذیل ہوگا

$$(۴.۱۲۳) \quad \nabla = \mathbf{a}_r \frac{\partial}{\partial r} + \mathbf{a}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \mathbf{a}_\phi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

جہاں $\mathbf{r} = r \mathbf{a}_r$ ہے۔ یوں درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{i} \left[r(\mathbf{a}_r \times \mathbf{a}_r) \frac{\partial}{\partial r} + (\mathbf{a}_r \times \mathbf{a}_\theta) \frac{\partial}{\partial \theta} + (\mathbf{a}_r \times \mathbf{a}_\phi) \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right]$$

۱.۴.۳. زاویائی معیار حرکت
 اب $(\mathbf{a}_r \times \mathbf{a}_\phi) = -\mathbf{a}_\theta$ اور $(\mathbf{a}_r \times \mathbf{a}_\theta) = \mathbf{a}_\phi$ ، $(\mathbf{a}_r \times \mathbf{a}_r) = 0$ ہوگا۔
 (شکل ۱.۴) لہذا درج ذیل

$$(۳.۱۲۴) \quad \mathbf{L} = \frac{\hbar}{i} \left(\mathbf{a}_\phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \mathbf{a}_\theta \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

اکائی سمتیات \mathbf{a}_θ اور \mathbf{a}_ϕ کو ان کے کارتیسی اجزاء میں لکھتے ہیں۔

$$(۳.۱۲۵) \quad \mathbf{a}_\theta = (\cos \theta \cos \phi) \mathbf{i} + (\cos \theta \sin \phi) \mathbf{j} - (\sin \theta) \mathbf{k}$$

$$(۳.۱۲۶) \quad \mathbf{a}_\phi = -(\sin \phi) \mathbf{i} + (\cos \phi) \mathbf{j}$$

یوں

$$\mathbf{L} = \frac{\hbar}{i} \left[(-\sin \phi \mathbf{i} + \cos \phi \mathbf{j}) \frac{\partial}{\partial \theta} - (\cos \theta \cos \phi \mathbf{i} + \cos \theta \sin \phi \mathbf{j} - \sin \theta \mathbf{k}) \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right]$$

ہوگا ظاہر ہے درج ذیل ہوں گے۔

$$(۳.۱۲۷) \quad L_x = \frac{\hbar}{i} \left(-\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cos \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$(۳.۱۲۸) \quad L_y = \frac{\hbar}{i} \left(+\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \sin \phi \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$(۳.۱۲۹) \quad L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

ہمیں عامل رفت اور عامل تقصیل بھی درکار ہوں گے:

$$L_{\pm} = L_x \pm iL_y = \frac{\hbar}{i} \left[(-\sin \phi \pm i \cos \phi) \frac{\partial}{\partial \theta} - (\cos \phi \pm i \sin \phi) \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right]$$

تہم $\cos \phi \pm i \sin \phi = e^{\pm i\phi}$ لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۳.۱۳۰) \quad L_{\pm} = \pm \hbar e^{\pm i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \pm i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

بالخصوص (سوال ۱-۴.۲۱) درج ذیل

$$(۳.۱۳۱) \quad L_+ L_- = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + i \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

لہذا (سوال ۴.۲۱-ب) درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$L^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad (۴.۱۳۲)$$

ہم اب $f_\ell^m(\theta, \phi)$ تعین کر سکتے ہیں۔ یہ L^2 کا امتیازی تقاضا عمل ہے، جس کا امتیازی قدر $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ ہے۔

$$L^2 f_\ell^m = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] f_\ell^m = \hbar^2 \ell(\ell + 1) f_\ell^m$$

یہ ٹھیک ”زاویائی مساوات“ (مساوات ۴.۱۸) ہے۔ ساتھ ہی یہ L_z کا امتیازی تقاضا عمل بھی ہے جہاں اس کا امتیازی قدر $m\hbar$ ہوگا:

$$L_z f_\ell^m = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \phi} f_\ell^m = \hbar m f_\ell^m$$

جو انتہائی مساوات (مساوات ۴.۲۱) کا معادل ہے۔ ہم ان مساوات کا نظام حل کر چکے ہیں۔ ان کا معمول شدہ نتیجہ $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ ہے۔ اس سے ہم یہ نتیجہ اخذ کرتے ہیں کہ L^2 اور L_z کے امتیازی تقاضا عملات Y_ℓ^m ہارمونیات ہوں گے۔ حصہ ۴.۱ میں علیحدگی متغیرات کی ترکیب سے مساوات شرودنگر حل کرتے ہوئے ہم انخابانے میں تین مقبولی عاملین H اور L^2 کے بیک وقت امتیازی تقاضا عملات تیار کر رہے تھے۔

$$H\psi = E\psi, \quad L^2\psi = \hbar^2 \ell(\ell + 1)\psi, \quad L_z\psi = \hbar m\psi \quad (۴.۱۳۳)$$

ہم مساوات ۴.۱۳۲ استعمال کرتے ہوئے مساوات مساوات شرودنگر ۴.۱۴ کو مختصر درج ذیل لکھ سکتے ہیں۔

$$\frac{1}{2mr^2} \left[-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + L^2 \right] \psi + V\psi = E\psi$$

یہاں ایک دلچسپ صورتحال پیدا ہوتا ہے۔ علیحدگی متغیرات کی ترکیب سے امتیازی تقاضا عملات کی صرف عدد صحیح ℓ قیمتیں (مساوات ۴.۲۹) حاصل ہونیں جبکہ زاویائی معیار حرکت کا الجبرائی نظریہ، ℓ کی (اور) لہذا m کی نصف عدد صحیح قیمتیں (مساوات ۴.۱۱۹) دیتی ہے۔ آپ کا خیال ہوگا کہ نصف عدد صحیح نتائج غیر ضروری ہیں، لیکن جیسا آپ اگلے حصوں میں دیکھیں گے، یہ انتہائی زیادہ اہمیت کا حامل نتیجہ ہے۔

سوال ۴.۲۱:

۱. مساوات ۴.۱۳۰ سے مساوات ۴.۱۳۱ اخذ کریں۔ اشارہ: آزمائشی تقاضا عمل استعمال نہ کرنے سے غلط نتائج حاصل ہو سکتے ہیں لہذا اس کو ضرور استعمال کریں۔

ب. مساوات ۴.۱۲۹ اور مساوات ۴.۱۳۱ سے مساوات ۴.۱۳۲ اخذ کریں۔ اشارہ: مساوات ۴.۱۱۲ استعمال کریں۔

سوال ۴.۲۲:

۱. حاب کیے بغیر بتائیں $L + Y_\ell^1$ کیا ہوگا؟

ب. مساوات ۴.۱۳۰ کے ساتھ جزو-اکا نتیجہ اور یہ جانئے ہوئے کہ $\hbar l Y_\ell^l = L_z Y_\ell^l$ ہوگا، $Y_\ell^l(\theta, \phi)$ کی قیمت معمول زنی مستقل تک تلاش کریں۔

ج. بلا واسطہ عمل کے ذریعہ معمول زنی مستقل تعین کریں۔ اپنے حتمی نتیجے کا سوال ۴.۵ کے نتیجے کے ساتھ موازنہ کریں۔

سوال ۴.۲۳: آپ نے سوال ۴.۳ میں درج ذیل دکھایا۔

$$Y_2^1(\theta, \phi) = -\sqrt{15/8\pi} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$$

عامل رفت کا $Y_2^2(\theta, \phi)$ پر اطلاق کریں۔ معمول زنی کے لیے مساوات ۴.۱۲۱ استعمال کریں۔

سوال ۴.۲۴: بغیر کمیت کا ایک ڈنڈا جس کی لمبائی a ہے، کے دونوں سروں پر کمیت m کے ذرات باندھے ہوئے ہیں۔ یہ نظام اپنے وسط کے گرد آزادی سے تین بُعدی حرکت کر سکتا ہے (جبکہ نظام کا وسط از خود حرکت نہیں کرتا)۔

۱. دکھائیں کہ اس بے پلکے پھر کی ψ کی اجازتی توانائیاں درج ذیل ہوں گی۔

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

اشارہ: پہلے (کلاسیکی) توانائیوں کو کل زاویائی معیار حرکت کی صورت میں لکھیں۔

ب. اس نظام کی معمول شدہ امتیازی تفاعلات کیا ہوں گے؟ اس نظام کی n وی توانائی سطح کی انعطافیت کیا ہوگی؟

۴.۴ چکر

کلاسیکی میکانیات میں بے پلکے جسم کے زاویائی معیار حرکت کے دو اقسام پائے جاتے ہیں: پہلی قسم، کمیت کے مرکز کی حرکت کے ساتھ وابستہ ہے جسے $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ کہتے ہیں جبکہ دوسری قسم پھر $\vec{S} = I\vec{\omega}$ کہلاتا ہے جو مرکز کمیت کے گرد حرکت سے وابستہ ہے۔ مثال کے طور پر سورج کے گرد سالانہ مدار کی ہنر پر زمین کا مدار چلی زاویائی معیار حرکت ہوگا، جبکہ شمال و جنوب محور کے گرد، روزانہ چکر کی ہنر پر اس کا چکر کی زاویائی معیار حرکت ہوگا۔ کلاسیکی نقطہ نظر کے لحاظ سے یہ مندرجہ محض ہماری آسانی کے لئے ہے، چونکہ حقیقتاً، ہر ہتھر ہر پہاڑ، ہر سمندر، وغیرہ، جن پر زمین مشتمل ہے، کا زمین کے محور کے گرد انفرادی ”مداری“ زاویائی معیار حرکت کا مجموعہ \vec{S} کے برابر ہوگا۔ کوانٹائی میکانیات میں اس کا معادل پایا جاتا ہے، تاہم یہاں ایک حتمی طور پر بنیادی مندرجہ پایا جاتا ہے۔ مرکزہ کے گرد (ہائیڈروجن کی صورت میں) الیکٹران کے طواف کی ہنر پر مدار چلی زاویائی معیار حرکت (جسے کرومی ہارمونیات بیان کرتے ہیں) کے ساتھ ساتھ، الیکٹران زاویائی معیار

rigid rotor^{۵۷}
orbital^{۵۸}
spin^{۵۹}

حرکت کی ایک دوسری روپ بھی رکھتا ہے، جس کا نصف میں حرکت کے ساتھ کوئی تعلق نہیں پایا جاتا ہے (اور یوں اس کو معتم کے متغیرات r اور θ سے بیان نہیں کیا جاسکتا ہے) تاہم یہ کلاسیکی چکر کی مانند ہے (لہذا اسے ہم اسی لفظ سے پکارتے ہیں)۔ یہ مماثلت یہی پر ختم ہو جاتی ہے: الیکٹران (جہاں تک ہم جانتے ہیں) ایک بے ساخت (یعنی بغیر ٹکڑوں کے) نقطہ ذرا ہے، لہذا اس کی چکری زاویائی معیار حرکت کو الیکٹران کے ٹکڑوں کے مدارچی زاویائی معیار حرکت میں تقسیم نہیں کیا جاسکتا ہے (سوال ۲۵: ۴، دیکھیں)۔ یہاں اتنا کہنا کافی ہوگا کہ بنیادی ذرات غیر غلطی^{۶۰} زاویائی معیار حرکت L کے ساتھ ساتھ غلطی^{۶۱} زاویائی معیار حرکت S بھی رکھتے ہیں۔

چکر کا الجبرائی نظریہ ہو بہو مدارچی زاویائی معیار حرکت کے نظریہ کی مانند ہے۔ ہم باضابطہ مقلبت رشتوں^{۶۲} سے شروع کرتے ہیں۔

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z, \quad [S_y, S_z] = i\hbar S_x, \quad [S_z, S_x] = i\hbar S_y \quad (۴.۱۳۴)$$

یوں (پہلے کی طرح) S^2 اور S_z کے امتیازی تفاعلات درج ذیل تعلقات^{۶۳}

$$S^2 |sm\rangle = \hbar^2 s(s+1) |sm\rangle; \quad S_z |sm\rangle = \hbar m |sm\rangle \quad (۴.۱۳۵)$$

اور

$$S_{\pm} |sm\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)} |s(m \pm 1)\rangle \quad (۴.۱۳۶)$$

کو مطمئن کرتے ہیں جہاں $S_{\pm} \equiv S_x \pm iS_y$ ہے۔ تاہم یہاں امتیازی سمتیات θ اور ϕ کے تفاعل نہیں ہیں (لہذا یہ کروہی ہارمونیات نہیں ہونگے اور ہم کوئی ایسی معلوم نہیں رکھتے جس کی بنیاد پر ہم s اور m کی نصف عدد صحیح قیمتوں

$$(۴.۱۳۷)$$

کو مقبول نہ کریں۔

ہم دیکھتے ہیں کہ ہر بنیادی ذرے کے s کی ایک مخصوص اور نامتناہل تبدیل قیمت ہوتی ہے جسے اس (مخصوص نسل کا) چکر^{۶۴} کہتے ہیں: π میڈان کا چکر 0 ہے؛ الیکٹران کا چکر $1/2$ ؛ پروٹان کا چکر 1؛ ڈیٹ کا چکر $3/2$ ؛ گریوٹان کا چکر 2؛ وغیرہ

extrinsic^{۶۵}
intrinsic^{۶۶}

^{۶۴} ہم انہیں نظریہ چکر کے اصول موضوعہ لیتے ہیں؛ مداری زاویائی معیار حرکت کے مثال کلیات (مساوات ۹۹: ۴) کو عاملین کے معلوم روپ (مساوات ۹۶: ۴) سے اخذ کیا گیا تھا۔ زیادہ نفیس انداز میں ان دونوں کو تین ابعاد میں گھماؤ کے عدم تفسیریت سے حاصل کیا جاسکتا ہے۔ یقیناً، یہ تین بنیادی مخلوطی رشتے ہر قسم کے زاویائی معیار حرکت کے لئے درست ہوں گے، چاہے وہ چکری، مداری، یا مرکب جسم کا مجموعی زاویائی معیار حرکت ہو جس میں کچھ چکر اور کچھ مداری تفاعلات شامل ہوں گے۔

^{۶۵} چونکہ چکر کے امتیازی حالات، تفاعلات نہیں ہیں؛ میں ان کے لئے ”ستادہ“ عملیات استعمال کروں گا۔ (میں حصہ ۴.۳ میں بھی یہی کرتے ہوئے Y_{ℓ}^m کو $|\ell m\rangle$ لکھ سکتا تھا، تاہم سیاق و سباق کے نقطہ نظر سے وہاں تفاعلی روپ زیادہ بہتر تھی۔) مجھے حروف کی کمی کا سامنا ہے لہذا میں S_z کے امتیازی قدر کے لئے m استعمال کروں گا، جیسا میں نے L_z کے لئے بھی کیا (بعض معضنین، مکمل وضاحت کی خاطر اس معتم پر انہیں m_{ℓ} اور m_s لکھتے ہیں)۔

spin^{۶۷}

وغیرہ۔ اس کے برعکس، (مثلاً ہائیڈروجن جوہر میں ایک الیکٹران کا) مدار چکی زاویائی معیار حرکت کو انشائی عدد l کوئی بھی عدد صحیح قیمت کا حاصل ہو سکتا ہے، جو نظام چھیڑنے سے تبدیل ہو کر کسی ایک عدد صحیح سے کوئی دوسرا عدد صحیح ہو گا۔ تاہم کسی بھی ذرے کا s اٹل ہو گا، جس کی بنا پر نظریہ چکر نسبتاً ادہ ہے۔^{۶۵}

سوال ۴.۲۵: اگر الیکٹران ایک کلاسیکی ٹھوس کرہ ہوتا جس کا رداس

$$r_c = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2} \quad (۴.۱۳۸)$$

(الیکٹران کے برقی میدان کی توانائی کو الیکٹران کی کیت کا جواز لیتے ہوئے، آہنشان کلیہ $E = mc^2$ سے کلاسیکی الیکٹران رداس^{۶۶}، r_c ، حاصل کیا جاتا ہے۔) اور زاویائی معیار حرکت $(1/2)\hbar$ ہوتا، تب ”خط استوا“ پر کسی نقطے کی رفتار (ms^{-1} میں) تلاش کریں۔ کیا حاصل جواب معنی خیز ہے؟ (در حقیقت، تجربات سے ثابت ہے کہ الیکٹران کا رداس r_c سے بہت کم ہے، جو اس نتیجہ کو مزید عنط مراد دیتا ہے۔)

1/2 چکر

سادہ مادہ (پروٹان، نیوٹران، الیکٹران) کے ساتھ ساتھ کوارک^{۶۷} اور تمام لپٹان^{۶۸} کیلئے $s = \frac{1}{2}$ ہو گا لہذا یہی اہم ترین صورت ہے۔ مزید 1/2 چکر سمجھنے کے بعد، زیادہ چکر کے ضوابط دریافت کرنا نسبتاً آسان کام ہے۔ صرف ”دو“ امتیازی تفاسلات پائے جاتے ہیں: پہلا $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ (یا غیر رسمی طور پر \uparrow) ہے جو ہم میڈان چکر^{۶۹} چکارا جاتا ہے اور دوسرا $(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ ہے جو مخالف میڈان چکر^{۷۰} \downarrow کہلاتا ہے۔ انہیں کو اس سمتیات لیتے ہوئے 1/2 چکر ذرے کے عمومی حال کو دور کئی متالب قطار (یا چکر کارا^{۷۱}) سے ظاہر کیا جاسکتا ہے:

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\chi_+ + b\chi_- \quad (۴.۱۳۹)$$

^{۶۵} یقیناً، ریاضیات کے نقطہ نظر سے 1/2 چکر، غیر حقیر سادہ ترین ممکنہ کو انشائی نظام ہو سکتا ہے، چونکہ یہ صرف دو اس حالات دیتا ہے۔ پیچیدگیوں اور باریکیوں سے لیں لامتناہی ابعادی ہلبرٹ فضا کی بجائے، ہم سادہ دو بُعدی سمتی فضا میں کام کرتے ہیں؛ غیر مانوس تقریبی مساوات اور ترتیب تفاسلات کی بجائے، ہمارا واسطہ 2×2 متالب اور 2 رکنی سمتیات سے ہوتا ہے۔ اسی لئے بعض مصنفین کو انشائی مکانیات کا آغاز چکر کے مطالعے سے کرتے ہیں۔ ہاں، ریاضیاتی سادگی سے تصوراتی غور و فکر میں مداخلت پیدا ہوتی ہے جس کو میں پسند نہیں کرتا ہوں۔

^{۶۶} classical electron radius

^{۶۷} quarks

^{۶۸} leptons

^{۶۹} spin up

^{۷۰} spin down

^{۷۱} spinor

جہاں

$$\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (۴.۱۴۰)$$

ہم میدان چکر کو ظاہر کرتا ہے اور

$$\chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (۴.۱۴۱)$$

مخالف میدان چکر کو ظاہر کرتا ہے۔

ساتھ ہی، عاملین چکر 2×2 متال ہوں گے، جنہیں حاصل کرنے کی خاطر ہم ان کا اثر χ_+ اور χ_- پر دیکھتے ہیں۔ مساوات ۴.۱۳۵ درج ذیل کہتی ہے۔

$$\mathbf{S}^2 \chi_+ = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_+ \quad \text{اور} \quad \mathbf{S}^2 \chi_- = \frac{3}{4} \hbar^2 \chi_- \quad (۴.۱۴۲)$$

ہم \mathbf{S}^2 کو (اب تک) نامعلوم ارکان کا متالب

$$\mathbf{S}^2 = \begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix}$$

لکھ کر مساوات ۴.۱۴۲ کی بائیں مساوات کو درج ذیل لکھ سکتے ہیں

$$\begin{pmatrix} c \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{4} \hbar^2 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{یا} \quad \begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} \hbar \\ 0 \end{pmatrix}$$

لہذا $c = \frac{3}{4} \hbar^2$ اور $e = 0$ ہوگا۔ مساوات ۴.۱۴۲ کی دائیں مساوات کے تحت

$$\begin{pmatrix} d \\ f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{3}{4} \hbar^2 \end{pmatrix} \quad \text{یا} \quad \begin{pmatrix} c & d \\ e & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

لہذا $d = 0$ اور $f = \frac{3}{4} \hbar^2$ ہوگا۔ یوں درج ذیل ہوگا۔

$$\mathbf{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (۴.۱۴۳)$$

اسی طرح

$$\mathbf{S}_z \chi_+ = \frac{\hbar}{2} \chi_+, \quad \mathbf{S}_z \chi_- = -\frac{\hbar}{2} \chi_-, \quad (۴.۱۴۴)$$

سے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$(۴.۱۴۵) \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ساتھ ہی، مساوات ۴.۱۳۶ ذیل کہتی ہے

$$S_+ \chi_- = \hbar \chi_+, \quad S_- \chi_+ = \hbar \chi_-, \quad S_+ \chi_+ = S_- \chi_- = 0,$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۴.۱۴۶) \quad S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

اب چونکہ $S_{\pm} = S_x \pm i S_y$ ہے لہذا $S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)$ اور $S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-)$ ہوں گے اور یوں درج ذیل ہوگا۔

$$(۴.۱۴۷) \quad S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

چونکہ S_x, S_y, S_z تینوں میں $\hbar/2$ کا جزو ضربی پایا جاتا ہے لہذا انہیں زیادہ صاف روپ $S = \frac{\hbar}{2} \sigma$ میں لکھا جاسکتا ہے جہاں درج ذیل ہوں گے۔

$$(۴.۱۴۸) \quad \sigma_x \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

یہ پالہ قالجے چکر^۴ دھیان رکھیں کہ S_x, S_y, S_z اور S^2 تمام ہر مثنیٰ ہیں (جیسا کہ انہیں ہونا بھی چاہیے کیونکہ یہ متبادل مشاہدہ کو ظاہر کرتے ہیں)۔ اس کے برعکس S_+ اور S_- غیر ہر مثنیٰ ہیں؛ یہ نامتبادل مشاہدہ ہیں۔ یقیناً S_z کے امتیازی چکر کار درج ذیل ہوں گے۔

$$(۴.۱۴۹) \quad \chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (+\frac{\hbar}{2} \text{ امتیازی قدر}); \quad \chi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (-\frac{\hbar}{2} \text{ امتیازی قدر})$$

عمومی حال χ (مساوات ۴.۱۳۹) میں ایک ذرہ کی S_z کی پیمائش، $|a|^2$ احتمال کے ساتھ $\hbar/2$ یا $|b|^2$ احتمال کے ساتھ $-\hbar/2$ دے سکتی ہے۔ چونکہ صرف یہی ممکنات ہیں لہذا درج ذیل ہوگا (یعنی چکر کار لازماً معمول شدہ ہوگا)۔^۵

$$(۴.۱۵۰) \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$$

^۴Pauli spin matrices

^۵لوگ عموماً کہتے ہیں کہ ہم میدان ذرہ ہونے کا احتمال $|a|^2$ ہے۔ ایسا کہنا درست نہیں۔ درحقیقت انہیں کہنا چاہئے ہیں کہ اگر S_z کی پیمائش کی جائے تب $\frac{\hbar}{2}$ نتیجہ حاصل ہونے کا احتمال $|a|^2$ ہوگا۔ (صفحہ ۱۱۲ پر حاشیہ ۴۲ دیکھیں۔)

تاہم اس کی بجائے آپ S_x کی پیمائش کر سکتے ہیں۔ اس کے کیا نتائج اور ان کے انفرادی احتمالات کیا ہونگے؟ عمومی شماریاتی مفہوم کے تحت ہمیں S_x کے امتیازی افتدار اور امتیازی چکرکار جاننے ہوں گے۔ امتیازی مساوات درج ذیل ہے۔

$$\begin{vmatrix} -\lambda & \hbar/2 \\ \hbar/2 & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \implies \lambda^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \implies \lambda = \pm \frac{\hbar}{2}$$

یہ ہرگز حیرت کی بات نہیں کہ S_x کی ممکنہ قیمتیں وہی ہیں جو S_z کی ہیں۔ امتیازی چکرکار کو ہمیشہ کی طور پر حاصل کرتے ہیں:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \pm \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} \beta \\ \alpha \end{pmatrix} = \pm \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}$$

لہذا $\beta = \pm \alpha$ ہوگا۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ S_x کے (معمول شدہ) امتیازی چکرکار درج ذیل ہوں گے۔

$$(۴.۱۵۱) \quad \chi_+^{(x)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, (+\frac{\hbar}{2} \text{ امتیازی قدر}); \quad \chi_-^{(x)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, (-\frac{\hbar}{2} \text{ امتیازی قدر})$$

بطور ہر مشقی مثال کے امتیازی سمتیات یہ فضا کا احاطہ کرتے ہیں؛ عمومی چکرکار χ (مساوات ۴.۱۳۹) کو ان کا خطی مجموعہ لکھا جاسکتا ہے۔

$$(۴.۱۵۲) \quad \chi = \left(\frac{a+b}{\sqrt{2}}\right) \chi_+^{(x)} + \left(\frac{a-b}{\sqrt{2}}\right) \chi_-^{(x)}$$

اگر آپ S_x کی پیمائش کریں تب $+\hbar/2$ کے حصول کا احتمال $|a+b|^2/2$ اور $-\hbar/2$ کے حصول کا احتمال $|a-b|^2/2$ ہوگا۔ (تصدیق کیجیے کہ ان احتمالات کا مجموعہ 1 کے برابر ہے۔)

مثال ۴.۲: فرض کریں $\frac{1}{2}$ چکرکار ایک ذرہ درج ذیل حال میں ہے۔

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1+i \\ 2 \end{pmatrix}$$

بتائیں کہ S_z اور S_x کی پیمائش کرتے ہوئے $+\hbar/2$ اور $-\hbar/2$ حاصل کرنے کے احتمالات کیا ہونگے۔

حل: یہاں $a = (1+i)\sqrt{6}$ اور $b = \frac{2}{\sqrt{6}}$ ہے لہذا S_z کیلئے $+\hbar/2$ کے حصول کا احتمال

$$\left| \frac{1+i}{\sqrt{6}} \right|^2 = \frac{1}{3}$$

جبکہ $\frac{\hbar}{2}$ - حاصل کرنے کا احتمال

$$\left| \frac{2}{\sqrt{6}} \right|^2 = \frac{2}{3}$$

ہوگا۔ اسی طرح S_x کیلئے $+\frac{\hbar}{2}$ کے حصول کا احتمال $5/6 = \left| (3+i)/\sqrt{6} \right|^2 (1/2)$ جبکہ $-\frac{\hbar}{2}$ کے حصول کا احتمال $1/6 = \left| (-1+i)/\sqrt{6} \right|^2 (1/2)$ ہوگا۔ اتفاقیاً S_x کی توقعاتی قیمت درج ذیل ہے

$$\frac{5}{6} \left(+\frac{\hbar}{2} \right) + \frac{1}{6} \left(-\frac{\hbar}{2} \right) = \frac{\hbar}{3}$$

جس کو ہم بلا واسطہ درج ذیل طریقے سے بھی حاصل کر سکتے ہیں۔

$$\langle S_x \rangle = \chi^\dagger \mathbf{S}_x \chi = \begin{pmatrix} \frac{1-i}{\sqrt{6}} & \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} \\ \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1+i}{\sqrt{6}} \\ \frac{2}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{3}$$

□

میں آپ کو $1/2$ چکر سے متعلق ایک مندرجہ ذیل تجربے سے گزارتا ہوں جو ان تصورات کی وضاحت کرتا ہے جن پر باب ۱ میں تبصرہ کیا گیا۔ مندرجہ ذیل ہم ایک ذرہ سے آغاز کرتے ہیں جو حال ψ_+ میں پایا جاتا ہے۔ اب اگر کوئی سوال پوچھے، ”اس ذرے کے زاویائی چکری معیار حرکت کا z جزو کیا ہے؟“، ہم پورے یقین کے ساتھ جواب دے سکتے ہیں کہ اس کا جواب $+\hbar/2$ ہے؛ چونکہ S_z کی پیمائش لازماً یہی قیمت دے گی۔ اب اگر اس کے بجائے، پوچھنے والا سوال کرے، ”اس ذرے کے چکری زاویائی معیار حرکت کا x جزو کیا ہوگا؟“، تب ہم کہنے پر مجبور ہونگے کہ S_x کی پیمائش سے $+\hbar/2$ یا $-\hbar/2$ کے حصول کا احتمال آدھا آدھا ہے۔ اگر سوال پوچھنے والا کلاسیکی ماہر طبیعیات یا (حصہ ۱.۲ کے نقطہ نظر سے) ”حقیقت پسند“ ہو تب وہ اس جواب کو نا کافی بلکہ غیر متعلقہ سمجھے گا: ”کیا آپ کہنا چاہتے ہیں کہ آپ کو اس ذرے کا حقیقی حال معلوم نہیں ہے؟“ نہیں میں نے ایسا نہیں کہا! مجھے ذرے کا حال ٹھیک ٹھیک معلوم ہے جو ψ_+ ہے۔ ”تب ایسا کیوں ہے کہ آپ مجھے اس کے چکر کا x جزو نہیں بتا سکتے ہیں؟“ اس لیے کہ اس کے چکر کا کوئی مخصوص x جزو نہیں پایا جاتا ہے۔ یقیناً، ایسا ہی ہونا چاہیے، اگر S_x اور S_z کی واضح قیمتیں ہوں تب اصول عدم یقینیت مطمئن نہیں ہوگا۔

یہ سنتے ہی سوال کرنے والا ذرے کے چکر کا x جزو خود پیمائش کرتا ہے؛ مندرجہ ذیل وہ $+\hbar/2$ قیمت حاصل کرتا ہے۔ (وہ خوشی سے چلا اٹھتا ہے) ”اس ذرے کی S_x قیمت ٹھیک $+\hbar/2$ ہے۔“ جی آپ درست فرما رہے ہیں، اب اس کی یہی قیمت ہے؛ جس سے یہ بالکل ثابت نہیں ہوتا کہ تجربے سے قبل اس کی یہی قیمت تھی۔“ ظاہر ہے، آپ بال کی کھال اتار رہے ہو۔ اور ہاں، آپ کے عدم یقینیت اصول کا کیا بسنا؟ میں اب S_x اور S_z دونوں کو حبا نت ہوں۔ ”جی نہیں آپ انہیں نہیں جانتے ہیں: آپ نے پیمائش کے دوران ذرے کا حال تبدیل کر دیا ہے۔ اب وہ $\chi_+^{(x)}$ میں ہے اور آپ اس کے S_x کی قیمت جانتے ہیں جبکہ S_z کی قیمت نہیں جانتے ہیں۔“ لیکن

S_x کی پیمائش کے دوران میں نے پوری کوشش کی کہ ذرے کا سکون خراب نہ ہو۔ ”اچھا اگر آپ میری بات پر یقین نہیں کرتے ہیں تو خود تصدیق کیجیے۔ آپ S_z کی پیمائش کریں اور دیکھیں نتیجہ کیا حاصل ہوتا ہے۔ (عین ممکن ہے کہ $\hbar/2$ حاصل ہو؛ جو میرے لیے شرمندگی کا باعث ہوگا؛ تاہم اس پورے عمل کو بار بار سرانجام دینے سے نصف مرتبہ $\hbar/2$ - حاصل ہوگا۔)

ایک عام آدمی، فلسفی یا کلاسیکی ماہر طبیعیات کے لئے ایسا فہم: ”اس ذرے کا ٹھیک ٹھیک معیار (یا معیار حرکت یا چکر زائوی معیار حرکت کا x جزو، وغیرہ) نہیں پایا جاتا ہے“، ایک گول مول جواب ہے جو آپ کی نااہلی کے سوا کچھ نظر نہیں آتا۔ حقیقت میں ایسا بالکل نہیں ہے۔ تاہم، اس کے اصل معنی، کسی ایسے شخص کو سمجھانا جس نے کوانٹائی میکانیات کا گہرا مطالعہ نہ کیا ہو، تقریباً ناممکن ہے۔ اگر آپ کی عقل دنگ رہ گئی ہو (اگر آپ کی عقل دنگ نہیں رہی تب اس کا مطلب ہوگا کہ آپ کو کوئی بات سمجھ ہی نہیں آئی) تب $1/2$ چکر نظام پر دوبارہ غور کریں جو کوانٹائی میکانیات کی تصوراتی پیچیدگیوں کو جاننے کی سادہ ترین مثال ہے۔

سوال ۴.۲۶:

ا. تصدیق کیجیے گا کہ چکری متالاب (مساوات ۴.۱۴۵ اور مساوات ۴.۱۴۷) زاویائی معیار حرکت کے بنیادی مقلبت رشتوں (مساوات ۴.۱۳۴) کو مطمئن کرتے ہیں۔

ب. دکھائیں کہ پالی چکری متالاب (مساوات ۴.۱۴۸) متاعده ضرب

$$\sigma_j \sigma_k = \delta_{jk} + i \sum_{\ell} \epsilon_{jkl} \sigma_{\ell} \quad (۴.۱۵۳)$$

کو مطمئن کرتا ہے جہاں اشاریہ x, y اور z کو ظاہر کرتے ہیں، اور ϵ_{jkl} علامت لوہے و چوتھا^۴ ہے، جس کی قیمت $123 = jkl$ یا 231 یا 312 کی صورت میں $+1$ جبکہ $132 = jkl$ یا 213 یا 321 کی صورت میں -1 اور دیگر صورت 0 ہوگی۔

سوال ۴.۲۷: ایک الیکٹران درج ذیل چکری حال میں ہے۔

$$\chi = A \begin{pmatrix} 3i \\ 4 \end{pmatrix}$$

ا. معمولی ذنی مستقل A تعین کریں۔

ب. S_x, S_y اور S_z کی توقعاتی قیمتیں تلاش کریں۔

ج. ”عدم یقینیت“ $\sigma_{S_x}, \sigma_{S_y}$ اور σ_{S_z} تلاش کریں۔ (دھیان رہے یہاں σ سے مراد معیار انحراف ہے ناکہ پالی متالاب!)۔

د. تصدیق کیجیے گا کہ آپ کے نتائج تینوں اصول عدم یقینیت (مساوات ۴.۱۰۰ اور اس کے چکر دار ترتیبی مرتب اجتماعات جہاں L کی جگہ S ہوگا) کے عین مطابق ہیں۔

سوال ۴.۲۸: سب سے زیادہ عمومی معمول شدہ چکر کار χ (مساوات ۴.۱۳۹) کے لیے $\langle S_x \rangle$ ، $\langle S_y \rangle$ ، $\langle S_z \rangle$ ، $\langle S_x^2 \rangle$ ، $\langle S_y^2 \rangle$ ، اور $\langle S_z^2 \rangle$ تلاش کریں۔ تصدیق کیجیے کہ $\langle S_x^2 \rangle + \langle S_y^2 \rangle + \langle S_z^2 \rangle = \langle S^2 \rangle$ ہے۔
سوال ۴.۲۹:

۱. S_y کے امتیازی افتدار اور امتیازی چکر کار تلاش کریں۔

ب. عمومی حال χ (مساوات ۴.۱۳۹) میں پائے جانے والے ذرے کے S_y کی پیمائش سے کیا قیمتیں متوقع ہیں اور ہر قیمت کا احتمال کیا ہوگا؟ تصدیق کیجیے گا کہ تمام احتمال کا مجموعہ 1 ہے۔ دھیان رہے کہ a اور b غیر حقیقی ہو سکتے ہیں!

ج. S_y^2 کی پیمائش سے کیا قیمتیں متوقع ہیں اور ان کے احتمالات کیا ہوں گے؟

سوال ۴.۳۰: کسی اختیاری رخ a_r کے ہم رہ چکر کی زاویائی معیار حرکت کے اجزاء کا متالب S_r تیار کریں۔ کروی محدد استعمال کریں جہاں درج ذیل ہوگا۔

(۴.۱۵۴)

$$a_r = \sin \theta \cos \phi i + \sin \theta \sin \phi j + \cos \theta k$$

متالب S_r کے امتیازی افتدار اور (معمول شدہ) امتیازی چکر کار تلاش کریں۔ جواب:

$$(۴.۱۵۵) \quad \chi_+^{(r)} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}; \quad \chi_-^{(r)} = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \sin(\theta/2) \\ -\cos(\theta/2) \end{pmatrix};$$

چونکہ آپ مرضی کے دوری حبز و ضرب، مثلاً $e^{i\phi}$ ، سے ضرب دے سکتے ہو لہذا آپ کا جواب کچھ مختلف ہو سکتا ہے۔

سوال ۴.۳۱: ایک ذرہ جس کا چکر ایک (1) ہے کے لیے چکر کی متالب (S_x ، S_y اور S_z) تیار کریں۔ اشارہ: S_z کے کتنے امتیازی حالات ہوں گے؟ ہر (ان) حال پر S_+ ، S_z اور S_- کا عمل تعین کریں۔ نصاب میں 1/2 چکر کے لیے مستعمل ترکیب استعمال کریں۔

۴.۴.۱ مقناطیسی میدان میں ایک الیکٹران

چکر کا ٹیٹا ہوا بار دار ذرہ، مقناطیسی جفت قطب قائم کرتا ہے۔ اس کا مقناطیسی جفت قطبی معیار اثر μ ، ذرے کی چکر کی زاویائی معیار حرکت S کا راست متناسب ہوگا:

(۴.۱۵۶)

$$\mu = \gamma S$$

باب ۴. تین ابعادی کوانٹائی میکانیات

جہاں تناسبی مستقل γ **مگنٹون مقناطیسی نسبت**^{۷۶} کہلاتا ہے۔ مقناطیسی میدان B میں رکھے گئے مقناطیسی جفت قطب پر قوت سرورڈ $\mu \times B$ عمل کرتی ہے جو (مقناطیسی قطب نما کی سوئی طرح) اس کو میدان کے متوازی لانے کی کوشش کرتی ہے۔ اس قوت سرورڈ کے ساتھ وابستہ توانائی درج ذیل ہوگی۔

$$H = -\mu \cdot B \quad (۴.۱۵۷)$$

لہذا مقناطیسی میدان B میں، ایک مقام پر ساکن^{۷۸}، باردار چکر کھاتے ہوئے ذرے کی ہیمیلٹنی درج ذیل ہوگی۔

$$H = -\gamma B \cdot S \quad (۴.۱۵۸)$$

مثال ۴.۳: لارمر استقبالی حرکت^{۷۹}: فرض کریں z رخ یکساں مقناطیسی میدان

$$B = B_0 k \quad (۴.۱۵۹)$$

میں $1/2$ چکر کا ساکن ذرہ پایا جاتا ہے۔ متوالی روپ میں ہیمیلٹنی (مساوات ۴.۱۵۸) درج ذیل ہوگی۔

$$H = -\gamma B_0 S_z = -\frac{\gamma B_0 \hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (۴.۱۶۰)$$

ہیمیلٹنی H کے امتیازی حالات وہی ہوں گے جو S_z کے تھے:

$$\begin{cases} \chi_+, & E_+ = -(\gamma B_0 \hbar)/2 \\ \chi_-, & E_- = +(\gamma B_0 \hbar)/2 \end{cases} \quad (۴.۱۶۱)$$

کلاسیکی صورت کی طرح یہاں بھی کم سے کم توانائی اس صورت ہوگی جب جفت قطب معیار اثر، مقناطیسی میدان کا متوازی ہو۔

چونکہ ہیمیلٹنی غنیر تابع وقت ہے لہذا تابع وقت مساوات شروڈنگر

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = H \chi \quad (۴.۱۶۲)$$

^{۷۶} gyromagnetic ratio

^{۷۷} کلاسیکی طور پر ایک جسم، جس میں بار q اور کمیت m کی تقسیم یکساں ہو، کی مسکن مقناطیسی نسبت $q/2m$ ہوگی۔ چند وجوہات کی بنا، جن کی وضاحت صرف کوانٹائی نظریہ سے ممکن ہے، الیکٹران کی مسکن مقناطیسی نسبت کی قیمت کلاسیکی قیمت کے (تقریباً) ٹھیک دگنی ہے۔ ($\gamma = -e/m$)

^{۷۸} اگر ذرہ کو حرکت کی اجازت ہو، تب حرکی توانائی پر بھی نظر رکھنی ہوگی، اور مزید اس کو قوت لورنز ($q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$) کا بھی سامنا ہوگا، جس کو غنی توانائی تقا عمل سے حاصل نہیں کیا جاسکتا ہے، لہذا اس کو (اب تک متعارف) مساوات شروڈنگر میں نسب نہیں کیا جاسکتا ہے۔ اس صورت کو غننے کا طریقہ میں جلد پیش کروں گا (سوال ۴.۵۹)۔ تاہم ابھی تصور کریں کہ ذرہ گھوم سکتا ہے لیکن دیگر صورت ساکن ہے۔

^{۷۹} Larmor precession

کے عمومی حل کو ساکن حالات کی صورت میں لکھ جاسکتا ہے:

$$\chi(t) = a\chi_+ e^{-iE_+ t/\hbar} + b\chi_- e^{-iE_- t/\hbar} = \begin{pmatrix} ae^{i\gamma B_0 t/2} \\ be^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix}$$

مستقلات a اور b کو ابتدائی معلومات:

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

سے حاصل کیا جاتا ہے (یقیناً $|a|^2 + |b|^2 = 1$ ہوگا)۔ ہم ان مستقلات کو

$$a = \cos(\alpha/2), \quad b = \sin(\alpha/2)$$

لکھ سکتے ہیں^{۸۰} جہاں α ایک مقررہ زاویہ ہے جس کی اہمیت جلد عیاں ہوگی۔ یوں درج ذیل ہوگا۔

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2)e^{i\gamma B_0 t/2} \\ \sin(\alpha/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix} \quad (۴.۱۶۳)$$

آئیں S کی توقعاتی قیمت بطور تفعل وقت حاصل کریں:

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \chi(t)^\dagger \mathbf{S}_x \chi(t) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} & \sin(\alpha/2)e^{i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix} \\ &\times \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2)e^{i\gamma B_0 t/2} \\ \sin(\alpha/2)e^{-i\gamma B_0 t/2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\hbar}{2} \sin \alpha \cos(\gamma B_0 t) \end{aligned} \quad (۴.۱۶۴)$$

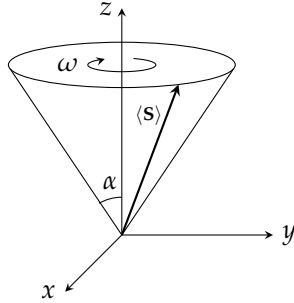
اسی طرح

$$\langle S_y \rangle = \chi(t)^\dagger \mathbf{S}_y \chi(t) = -\frac{\hbar}{2} \sin \alpha \sin(\gamma B_0 t) \quad (۴.۱۶۵)$$

اور درج ذیل ہوگا۔

$$\langle S_z \rangle = \chi(t)^\dagger \mathbf{S}_z \chi(t) = \frac{\hbar}{2} \cos \alpha \quad (۴.۱۶۶)$$

^{۸۰} یہاں a اور b کو حقیقی فرض کیا گیا ہے۔ آپ چاہیں تو مخلوط صورت کے لئے بھی ایسی مساواتیں ڈھونڈ سکتے ہیں، جو t کے ساتھ محض ایک مستقل جمع کرتا ہے۔



شکل ۴.۸: یکساں مقناطیسی میدان میں $\langle S \rangle$ کی استقبالی حرکت۔

کلاسیکی صورت کی طرح (شکل ۴.۸) محور z کے ساتھ $\langle S \rangle$ مستقل زاویہ α پر رہتے ہوئے محور کے گرد لارمر تعدد^{۸۱}

$$\omega = \gamma B_0 \quad (۴.۱۶۷)$$

سے استقبالی حرکت کرتا ہے۔ یہ حیرت کی بات نہیں ہے؛ مسئلہ اہر نفٹ (کی وہ صورت جسے سوال ۴.۲۰ میں اخذ کیا گیا) ضمانت دیتا ہے کہ کلاسیکی قوانین کے تحت $\langle S \rangle$ ارتقا پائے گا۔ بہرحال اس عمل کو ایک مخصوص سیاق کو سابق میں دیکھنا اچھا لگا۔ □

مثال ۴.۴: تجربہ شٹراخ و گرلاخ^{۸۲} ایک غیر یکساں مقناطیسی میدان میں ایک مقناطیسی جفت قطب پر نہ صرف قوت مرد و بلکہ قوت^{۸۳}:

$$F = \nabla(\mu \cdot B) \quad (۴.۱۶۸)$$

بھی پایا جاتا ہے۔ اس قوت کو استعمال کرتے ہوئے کسی مخصوص سمت بند چپکے ذرہ کو درج ذیل طریقے سے علیحدہ کیا جاسکتا ہے۔ فرض کریں نسبتاً بھاری تعدیلی^{۸۵} جوہروں کی شعاع y رخ حرکت کرتے ہوئے ایک غیر یکساں مقناطیسی میدان:

$$B(x, y, z) = -\alpha x i + (B_0 + \alpha z) k \quad (۴.۱۶۹)$$

کے خطے سے گزرتی ہے (شکل ۴.۹)، جہاں B_0 ایک طاقتور یکساں میدان ہے جبکہ مستقل α میدان کی یکانیت سے معمولی انحراف کو ظاہر کرتا ہے۔ (حقیقت میں ہمیں صرف z حبزوں سے عرض ہے، لیکن بد قسمتی

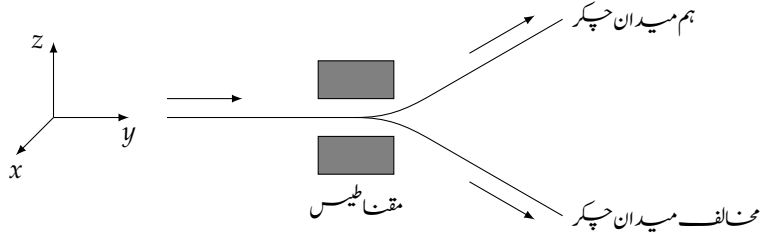
^{۸۱}Larmor frequency

^{۸۲}کلاسیکی صورت میں صرف توقعاتی قیمت نہیں بلکہ زاویائی معیار حرکت سمیت بھی مقناطیسی میدان میں لارمر تعدد سے استقبالی حرکت کرتا ہے۔

^{۸۳}Stern-Gerlach experiment

^{۸۴}توانائی (مساوات ۴.۱۵۷) کی منفی واصلوں کے برابر قوت F ہوگی۔

^{۸۵}ہم تعدیلی جوہر کا انتخاب کر کے قوت اور ذریعہ بنا پر شعاع کے جھکنے سے چپکارا حاصل کرتے ہیں، اور بھاری جوہر اس لئے لیتے ہیں تاکہ ہم معنای موثری اکٹھے مرتب کر کے حرکت کو کلاسیکی تصور کر سکیں۔ عملاً، شٹراخ و گرلاخ تجربہ، آزاد الیکٹران کی شعاع کے لئے کارآمد نہیں ہوگا۔



شکل ۴.۹: سٹرن و گراخ آلہ۔

سے ایسا ممکن نہیں ہوگا؛ چونکہ برقناطیسی متانوں $\nabla \cdot B = 0$ کے تحت آپ چاہیں یا نہ چاہیں x جزو بھی پایا جائے گا۔ ان جوہروں پر قوت درج ذیل ہوگی۔

$$F = \gamma \alpha (-S_x i + S_z k)$$

تاہم B_0 کے گرد لار مسرہ استقبالی حرکت کی بنا، S_x تیزی سے ارتعاش کرتے ہوئے صفر اوسط قیمت دے گا، لہذا z رخ حالص قوت درج ذیل ہوگی

$$F_z = \gamma \alpha S_z \quad (۴.۱۷۰)$$

اور شعاع کے چکری زاویائی معیار حرکت کے z جزو کی تناسب سے شعاع اوپر یا نیچے کی طرف جھکے گی۔ کلاسیکی طور پر (چونکہ S_z کو انشادہ نہیں ہوگا) ہم توقع کرتے کہ z محور پر شعاع کی لپائی پائی جاتی جبکہ حقیقت شعاع $2s + 1$ علیحدہ علیحدہ شعاعوں میں تقسیم ہو کر زاویائی معیار حرکت کے کوانٹائی کا خوبصورت مظاہرہ کرتی ہے۔ (چاندی کو مثال بناتے ہوئے، چونکہ چاندی کے جوہر میں اندر جانب تمام الیکٹران جوڑیوں کی صورت میں یوں پائے جاتے ہیں کہ ان کے چکر اور مدار پچی زاویائی معیار حرکت ایک دوسرے کو منسوخ کرتے ہیں، لہذا صرف بیرونی اکیلے الیکٹران کا چکر $s = 1/2$ ہی جوہر کا چکر ہوگا۔ یوں شعاع دو ٹکڑوں میں تقسیم ہوگی۔)

اب بالکل آخری قدم تک یہ دلیل حالصت کلاسیکی بحث جبکہ کوانٹائی میکینکات میں ”قوت“ کی کوئی جگہ نہیں پائی جاتی ہے، لہذا اسی مسئلہ کو درج ذیل نقطہ نظر سے دیکھنا زیادہ بہتر ہوگا۔ ہم اس عمل کو اس حوالہ چھو کٹ کے نقطہ نظر سے دیکھتے ہیں جو شعاع کے ساتھ ساتھ چلتا ہو۔ اس چھو کٹ میں ہیملٹنی صفر سے آغاز کرتے ہوئے وقت T (جس دوران ذرا مقناطیسی میدان سے گزرتا ہے) کے لیے بیدار ہو کر واپس گہری نیند سو جاتا ہے۔

$$H(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ -\gamma(B_0 + \alpha z)S_z & 0 \leq t \leq T \\ 0 & t > T \end{cases} \quad (۴.۱۷۱)$$

(جیسے ہم بتا چکے ہیں اس مسئلہ میں B کے x جزو کا کوئی کردار نہیں ہے لہذا میں اس تکلیف دہ جزو کو نظر انداز کرتا ہوں۔) فرض کریں جوہر کا چکر $1/2$ ہے اور یہ درج ذیل حال سے آغاز کرتا ہے۔

$$\chi(t) = a\chi_+ + b\chi_- \quad t \leq 0$$

ہیملٹنی کی بیداری کے دوران $\chi(t)$ ہمیشہ کی طرح ارتقا پاتا ہے

$$\chi(t) = a\chi_+ e^{-iE_+ t/\hbar} + b\chi_- e^{-iE_- t/\hbar} \quad 0 \leq t \leq T$$

جہاں (مساوات ۴.۱۶۱ کے تحت)

$$E_{\pm} = \mp \gamma(B_0 + \alpha z) \frac{\hbar}{2} \quad (۴.۱۶۲)$$

ہوگا لہذا ($t \geq T$ کے لیے) یہ درج ذیل حال اختیار کرے گا۔

$$\chi(t) = \left(a e^{i\gamma T B_0/2} \chi_+ \right) e^{i(\alpha\gamma T/2)z} + \left(b e^{-i\gamma T B_0/2} \chi_- \right) e^{-i(\alpha\gamma T/2)z} \quad (۴.۱۶۳)$$

ان دونوں اجزاء کا اب z رخ میں معیار حرکت پایا جاتا ہے (مساوات ۴.۳۲ دیکھیں)؛ ہم میدان جزو کا معیار حرکت درج ذیل ہوگا

$$p_z = \frac{\alpha\gamma T\hbar}{2} \quad (۴.۱۶۴)$$

اور یہ مثبت z رخ حرکت کرے گا؛ مخالف میدان جزو کا معیار حرکت الٹ ہے اور یہ منفی z رخ حرکت کرے گا۔ یوں پہلے کی طرح شعاع دو حصوں میں تقسیم ہوگی۔ (چونکہ یہاں $S_z = \hbar/2$ اور $p_z = F_z T$ ہے لہذا مساوات ۴.۱۶۴ پہلے حاصل کردہ نتیجہ (مساوات ۴.۱۶۰) کے مطابق ہے۔)

کوانٹائی میکانیات کے فلسفہ میں شٹرن و گراخ تجربہ نے کلیدی کردار ادا کیا ہے۔ اس کے ذریعے کوانٹائی حالات تیار کیے جاتے ہیں اور یہ ایک مخصوص قسم کی کوانٹائی پیمائشوں پر روشنی ڈالنے کا ایک بہترین نمونہ ہے۔ ہم بیٹھے بیٹھے یہ فرض کر لیتے ہیں کہ ہم نظام کا ابتدائی حال جانتے ہیں (جس سے مساوات شرودنگر کے ذریعے مستقبل کا حال جانا جاسکتا ہے)؛ تاہم، یہاں سوال پیدا ہوتا ہے کہ ہم ایک نظام کو کسی مخصوص حال میں ابتدائی طور پر کس طرح لاتے ہیں۔ آپ کسی مخصوص چکر کے جوہروں کی شعاع تیار کرنے کی حنا طر غیر تقطیب شدہ شعاع کو شٹرن و گراخ مقناطیس سے گزار کر اجنبی شعاعوں میں سے وہ شعاع منتخب کرتے ہیں جو آپ کے مطلب کی ہو۔ اسی طرح اگر اسی طرح اگر آپ جوہر کے چکر کا z جزو جاننا چاہیں تب آپ انہیں شٹرن و گراخ آلہ سے گزار کر دیکھتے ہیں کہ یہ بطور ہم میدان یا مخالف میدان شعاع خارج ہوتے ہیں۔ میں یہ دعویٰ نہیں کرتا کہ اس مقصد کے حصول کا یہ عمل سب سے بہتر طریقہ ہے، لیکن اتنا ضرور کہنا چاہوں گا کہ حالات کی تیاری اور پیمائش کے بارے میں سوچنے کی یہ ایک سادہ مثال ہے۔ □

سوال ۴.۳۲: لارمر استقبالی حرکت کی مثال ۴.۳ میں:

۱. وقت t پر چکری زاویائی معیار حرکت کی x رخ جزو کا پیمائشی نتیجہ $\hbar/2$ حاصل کرنے کا احتمال کیا ہوگا؟

ب. y رخ کے لیے اسی سوال کا جواب کیا ہوگا؟

ج. z رخ اسی سوال کا جواب کیا ہوگا؟

سوال ۴.۳۳: ایک ارتعاشی مقناطیسی میدان

$$B = B_0 \cos(\omega t) \mathbf{k}$$

جہاں B_0 اور ω مستقل ہیں، میں ایک الیکٹران ساکن پایا جاتا ہے۔

۱. اس نظام کا ہیملٹنی و تابل تیار کریں۔

ب. محور x کے لحاظ سے وقت $t = 0$ پر یہ الیکٹران ہم میدان حال (یعنی $\chi_+^{(x)}(0) = \chi_+^{(x)}$) سے آغاز کرتا ہے۔ مستقبل کسی بھی وقت کے لیے $\chi(t)$ تعین کریں۔ دھیان رہے کہ یہ ہیملٹنی تانبہ وقت ہے، لہذا آپ ساکن حالات سے $\chi(t)$ حاصل نہیں کر سکتے ہیں۔ خوش قسمتی سے آپ تانبہ وقت مساوات شرودنگر (مساوات ۴.۱۶۲) کو بلا واسطہ حل کر سکتے ہیں۔

ج. S_x کی پیمائش سے $\hbar/2$ نتیجہ حاصل ہونے کا احتمال کیا ہوگا؟ جواب:

$$\sin^2 \left(\frac{\gamma B_0}{2\omega} \sin(\omega t) \right)$$

د. S_x کو مکمل الش کرنے کے لیے کم سے کم درکار میدان (B_0) کتنا ہوگا؟

۴.۴.۲ زاویائی معیار حرکت کا مجموعہ

فرض کریں ہمارے پاس $1/2$ چکر کے دو ذرات، مثلاً، ہائیڈروجن کے زمینی حال^{۸۶} میں ایک الیکٹران اور ایک پروٹان، پائے جاتے ہیں۔ ان میں سے ہر ایک ہم میدان یا مخالف میدان ہو سکتا ہے لہذا اکل چار ممکنات ہوں گی:^{۸۷}

$$(\uparrow\uparrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow, \downarrow\downarrow) \quad (۴.۱۷۵)$$

جہاں پہلا تیسر کا نشان (یعنی بیاں تیسر) الیکٹران کو جبکہ دوسرا (یعنی دایاں) تیسر کا نشان پروٹان کو ظاہر کرتا ہے۔ سوال: اس جوہر کا کل زاویائی معیار حرکت کیا ہوگا؟ ہم درج ذیل فرض کرتے ہیں۔

$$\mathbf{S} \equiv \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)} \quad (۴.۱۷۶)$$

^{۸۶} میں انہیں زمینی حال میں اس مقصد سے رکھتا ہوں کہ تاؤمدارچی زاویائی معیار حرکت ہو اور تاہی ہمیں اس کے بارے میں فکر منہ ہونے کی ضرورت ہو۔

^{۸۷} یہ کہنا زیادہ درست ہوگا کہ ہر ایک ذرہ ہم میدان اور مخالف میدان کا خطی مجموعہ ہوگا، اور مرکب نظام ان چار حالات کا خطی مجموعہ ہوگا۔

ان چار مرکب حالات میں سے ہر ایک، S_z کا امتیازی حال ہوگا: ان کے z اجزاء ایک دوسرے کے ساتھ سادہ طریقے سے جمع ہوتے ہیں:

$$\begin{aligned} S_z \chi_1 \chi_2 &= (S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) \chi_1 \chi_2 = (S_z^{(1)} \chi_1) \chi_2 + \chi_1 (S_z^{(2)} \chi_2) \\ &= (\hbar m_1 \chi_1) \chi_2 + \chi_1 (\hbar m_2 \chi_2) = \hbar (m_1 + m_2) \chi_1 \chi_2 \end{aligned}$$

دیتے ہیں۔ یاد رہے $S^{(1)}$ صرف χ_1 پر عمل کرتا ہے اور $S^{(2)}$ صرف χ_2 پر عمل کرتا ہے۔ یہ علاقیت زیادہ خوبصورت نہیں ہے لیکن اپنا کام کر پاتی ہے۔ یوں مرکب نظام کا کوانٹائی عدد m یہاں $m_1 + m_2$ ہوگا:

$$\begin{aligned} \uparrow\uparrow: \quad m &= m_{s1} + m_{s2} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1 \\ \uparrow\downarrow: \quad m &= m_{s1} + m_{s2} = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0 \\ \downarrow\uparrow: \quad m &= m_{s1} + m_{s2} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 0 \\ \downarrow\downarrow: \quad m &= m_{s1} + m_{s2} = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = -1 \end{aligned}$$

پہلی نظر میں یہ ٹھیک معلوم نہیں ہوتا ہے: m کو چاہیے کہ $-s$ تا $+s$ عدد صحیح قدموں کے لحاظ سے بڑھے؛ ایسا لگتا ہے کہ $s = 1$ ہے لیکن یہاں ایک ”اضافی“ حال جس کا $m = 0$ ہے بھی پایا جاتا ہے۔ اس الجھن سے نکلنے کی خاطر ہم مساوات ۴.۱۴۶ استعمال کرتے ہوئے $\uparrow\uparrow$ حال پر عامل تقلیل $S_- = S_-^{(1)} + S_-^{(2)}$ لاگو کرتے ہیں۔

$$\begin{aligned} S_-(\uparrow\uparrow) &= (S_-^{(1)} \uparrow) \uparrow + \uparrow (S_-^{(2)} \uparrow) \\ &= (\hbar \downarrow) \uparrow + \uparrow (\hbar \downarrow) = \hbar (\downarrow\uparrow + \uparrow\downarrow) \end{aligned}$$

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ $s = 1$ کے تین حالات (sm) علامتی روپ میں درج ذیل ہونگے۔

$$(۴.۱۷۷) \quad \left\{ \begin{array}{l} |11\rangle = \uparrow\uparrow \\ |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) \\ |1-1\rangle = \downarrow\downarrow \end{array} \right\} \quad s = 1 \text{ (سہ تا)}$$

(تصدیق کی خاطر $|10\rangle$ پر عامل تقلیل کا اطلاق کر کے دیکھیں؛ آپ کو کیا حاصل ہونا چاہیے؟ سوال ۴.۳۴-۴.۳۵ دیکھیں۔) اسی بنا پر اسے سہ تا^{۸۸} ملاپ کہتے ہیں۔ ساتھ ہی، وہ عمودی حال جس کا $m = 0$ ہو $s = 0$ کا حامل ہوگا۔

$$(۴.۱۷۸) \quad \{|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)\} \quad s = 0 \text{ (یک تا)}$$

اس حال پر عامل رفعت یا عامل تقلیل کے اطلاق سے صفر حاصل ہوگا (سوال ۴.۴.۳-ب دیکھیں۔) یوں میں دعویٰ کرتا ہوں کہ $1/2$ چکر کے دو ذرات کا کل چکر ایک (1) یا صفر (0) ہوگا، جو اس پر منحصر ہوگا کہ آیا وہ سہ تاییک تا تنظیم اختیار کرتے ہیں۔ اس کی تصدیق کی خاطر مجھے ثابت کرنا ہوگا کہ سہ تاحالات، S^2 کے امتیازی سمتیات ہیں جن کا امتیازی قدر $2\hbar^2$ ہے، اور ایک تاحالات، S^2 کا وہ امتیازی سمتیہ ہے جس کا امتیازی قدر صفر ہے۔ اب درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(۴.۱۷۹) \quad S^2 = (\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}) \cdot (\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}) = (S^{(1)})^2 + (S^{(2)})^2 + 2\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)}$$

ساوات ۴.۱۴۵ اور مساوات ۴.۱۴۷ سے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} (\uparrow\downarrow) &= (S_x^{(1)} \uparrow)(S_x^{(2)} \downarrow) + (S_y^{(1)} \uparrow)(S_y^{(2)} \downarrow) + (S_z^{(1)} \uparrow)(S_z^{(2)} \downarrow) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2} \downarrow\right) \left(\frac{\hbar}{2} \uparrow\right) + \left(\frac{i\hbar}{2} \downarrow\right) \left(\frac{-i\hbar}{2} \uparrow\right) + \left(\frac{\hbar}{2} \uparrow\right) \left(\frac{-\hbar}{2} \downarrow\right) \\ &= \frac{\hbar^2}{4} (2 \downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow) \end{aligned}$$

اسی طرح درج ذیل بھی ہوگا۔

$$\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} (\downarrow\uparrow) = \frac{\hbar^2}{4} (2 \uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow)$$

یوں

$$(۴.۱۸۰) \quad \mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} |10\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\sqrt{2}} (2 \downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow + 2 \uparrow\downarrow - \downarrow\uparrow) = \frac{\hbar^2}{4} |10\rangle$$

اور

$$(۴.۱۸۱) \quad \mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} |00\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \frac{1}{\sqrt{2}} (2 \downarrow\uparrow - \uparrow\downarrow - 2 \uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow) = -\frac{3\hbar^2}{4} |00\rangle$$

ہو گئے۔

ساوات ۴.۱۷۹ پر دوبارہ غور کرتے ہوئے (اور مساوات ۴.۱۴۲ استعمال کر کے) ہم اخذ کرتے ہیں کہ

$$(۴.۱۸۲) \quad S^2 |10\rangle = \left(\frac{3\hbar^2}{4} + \frac{3\hbar^2}{4} + 2\frac{\hbar^2}{4}\right) |10\rangle = 2\hbar^2 |10\rangle$$

ہے لہذا $|10\rangle$ یقیناً S^2 کا امتیازی حال ہوگا جس کا امتیازی قدر $2\hbar^2$ ہوگا؛ اور

$$(۴.۱۸۳) \quad S^2 |00\rangle = \left(\frac{3\hbar^2}{4} + \frac{3\hbar^2}{4} - 2\frac{3\hbar^2}{4}\right) |00\rangle = 0$$

ہے لہذا $|00\rangle$ یقیناً S^2 کا امتیازی حال ہوگا جس کا امتیازی قدر 0 ہوگا۔ (میں آپ کے لئے سوال ۴.۳۴-ج چھوڑتا ہوں، جہاں آپ نے تصدیق کرنی ہوگی کہ $|11\rangle$ اور $|1 - 1\rangle$ موزوں امتیازی قدر کے، S^2 کے امتیازی تفاعلات ہیں۔)

ہم نے $1/2$ چپکر اور $1/2$ چپکر کو ملا کر 1 چپکر اور 0 چپکر حاصل کیا، جو ایک بڑے مسئلے کی سادہ ترین مثال ہے: اگر آپ s_1 چپکر اور s_2 چپکر کو ملائیں تب کل چپکریں s کیا حاصل ہونگے؟^{۸۹} اس کا جواب ۹۰ ہے کہ عدد صحیح قدم لیتے ہوئے $(s_1 + s_2)$ سے $s_2 > s_1$ کی صورت میں $(s_2 - s_1)$ تک؛ اور $s_1 > s_2$ کی صورت میں $(s_1 - s_2)$ تک، نیچے آتے ہوئے ہر چپکر:

$$(۴.۱۸۴) \quad s = (s_1 + s_2), (s_1 + s_2 - 1), (s_1 + s_2 - 2), \dots, |s_1 - s_2|$$

حاصل ہوگا۔ (اندازاً بات کرتے ہوئے، زیادہ سے زیادہ کل چپکر اس صورت حاصل ہوگا جب انفرادی چپکر ایک دوسرے کے متوازی ایک رخ صنف بند ہوں، اور کم سے کم اس صورت ہوگا جب یہ ایک دوسرے کے مخالف رخ صنف بند ہوں۔) مثال کے طور پر، اگر آپ $3/2$ چپکر کے ایک ذرہ کے ساتھ 2 چپکر کا ایک ذرہ ملائیں تب آپ کو $7/2$ ، $5/2$ ، $3/2$ ، یا $1/2$ کل چپکر حاصل ہو سکتا ہے جو تفکیک پر منحصر ہوگا۔ دوسری مثال پیش کرتا ہوں: حال ψ_{nlm} کے ایک ہائیڈروجن جوہر کے الیکٹران کا خالص زاویائی معیار حرکت (چپکر جمع مدار پٹی) $l + 1/2$ یا $l - 1/2$ ہوگا؛ اب اگر آپ پروٹان کے چپکر کو بھی شامل کریں، تب جوہر کا کل زاویائی معیار حرکت کوانٹائی عدد $l + 1$ ، l ، یا $l - 1$ ہوگا (جہاں l کو دو منفرد طریقوں سے حاصل کیا جاسکتا ہے، جس کا انحصار اس بات پر ہوگا کہ آیا کہ الیکٹران خود $l + 1/2$ یا $l - 1/2$ تفکیک میں ہے)۔

(چونکہ z اجزاء آپس میں جمع ہوتے ہیں، لہذا صرف وہ مرکب حالات جن کے لئے $m_1 + m_2 = m$ ہو حصہ ڈال سکتے ہیں، لہذا) مجموعی حال $|sm\rangle$ جس کا کل چپکر s ہو اور z جزو m ہو، مرکب حالات $|s_1 m_1\rangle |s_2 m_2\rangle$ کا خطی مجموعہ:

$$(۴.۱۸۵) \quad |sm\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s} |s_1 m_1\rangle |s_2 m_2\rangle$$

ہوگا۔ مساوات ۴.۱۷۷ اور مساوات ۴.۱۷۸ اس عمومی روپ کے دو مخصوص صورت ہیں جہاں $s_1 = s_2 = 1/2$ ہے (میں نے یہاں غیر رسمی علامت $\uparrow = |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$ ، $\downarrow = |\frac{1}{2} (-\frac{1}{2})\rangle$ استعمال کیا ہے)۔ مستقالات $C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s}$ کو **کلیش و گورڈن عددی سر**^{۹۱} کہتے ہیں۔ جدول ۴.۸ میں ان کی چند سادہ مثالیں پیش کی گئی ہے۔ مثال کے طور پر 2×1 جدول کے سایہ دار قطار میں درج ذیل پیش کیا گیا ہے۔

$$|30\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} |21\rangle |1 - 1\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}} |20\rangle |10\rangle + \frac{1}{\sqrt{5}} |2 - 1\rangle |11\rangle$$

بالخصوص، اگر ایک ڈب میں (2 چپکر اور 1 چپکر کے) ساکن ذرات پائیں جاتے ہوں جن کا کل چپکر 3، اور z جزو 0 ہو تب $S_z^{(1)}$ کی پیمائش $1/5$ احتمال کے ساتھ \hbar یا $3/5$ احتمال کے ساتھ 0 یا $1/5$ احتمال کے

^{۸۹} میں یہاں چپکروں کی بات کر رہا ہوں، تاہم ان میں سے کوئی ایک (یادوں) مدار پٹی زاویائی معیار حرکت بھی ہو سکتے ہیں (جن کے لئے، البتہ، ہم حرف l استعمال کرتے)۔

^{۹۰} ثبوت کے لئے آپ کو اصل نصاب دیکھنا ہوگا۔

Clebsch-Gordon coefficients^{۹۱}

ساتھ \hbar - قیمت دے سکتی ہے۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ احتمالات کا مجموعہ 1 ہے۔ (کلیش و گورڈن جدول کے کسی بھی قطار کے سر مجموعوں کا مجموعہ 1 ہوگا۔)
ان جدول کو الٹ کر کے

$$|s_1 m_1\rangle |s_2 m_2\rangle = \sum_s C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s} |sm\rangle \quad (۴.۱۸۶)$$

بھی استعمال کیا جاسکتا ہے۔ مثال کے طور پر $3/2 \times 1$ جدول میں سب دار صف درج ذیل کہتی ہے۔

$$|\frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle |10\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}}|\frac{5}{2}\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{15}}|\frac{3}{2}\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$$

اگر آپ ایک ڈبلے میں $3/2$ چکر اور 1 چکر کے دو ذرات رکھیں اور آپ جانتے ہوں کہ پہلے کے لیے $m_1 = 1/2$ اور دوسرے کے لیے $m_2 = 0$ ہے (m لازماً $1/2$ ہوگا) اور آپ کل چکر s کی پیشکش کریں تب آپ ($3/5$ احتمال کے ساتھ) $5/2$ یا ($1/15$ احتمال کے ساتھ) $3/2$ یا ($1/3$ احتمال کے ساتھ) $1/2$ حاصل کر سکتے ہیں۔ اب بھی احتمالات کا مجموعہ 1 ہوگا (کلیش و گورڈن جدول میں ہر صف کے مربع کا مجموعہ 1 ہوگا)۔

یہاں آپ کا کوئی تصور نہیں ہوگا اگر آپ کو یہ سب کچھ صوفیانہ اعداد و شمار نظر آنے لگا ہو۔ ہم اس کتاب میں کلیش و گورڈن عددی سر کو زیادہ استعمال نہیں کریں گے۔ میں صرف چاہتا ہوں کہ آپ ان سے واقف ہوں۔ ریاضیات کے نقطہ نظر سے یہ سب کچھ عملی گروہی نظریہ کا حصہ ہے۔

سوال ۴.۴.۴:

- ساوات ۴.۱۷۷ میں دیے گئے $|10\rangle$ پر S_- کا اطلاق کر کے تصدیق کیجیے کہ $\sqrt{2}\hbar|1-1\rangle$ حاصل ہوگا۔
- ساوات ۴.۱۷۸ میں $|00\rangle$ پر S_{\pm} کا اطلاق کر کے تصدیق کیجیے کہ 0 حاصل ہوگا۔
- دکھائی کہ $|11\rangle$ اور $|1-1\rangle$ (جنہیں ساوات ۴.۱۷۷ میں پیش کیا گیا ہے) S^2 کے موزوں امتیازی فتروں والے امتیازی تفاعلات ہیں۔

سوال ۴.۴.۵: کوارک^{۹۳} کا چکر $1/2$ ہے۔ تین کوارک کے مسل کر ایک **پیریاڈ**^{۹۴} مرتب کرتے ہیں (مثلاً پروٹان یا نیوٹران)؛ دو کوارک کے (بلکہ یہ کہنا زیادہ درست ہوگا کہ ایک کوارک اور ایک ضد کوارک) مسل کر ایک **میزاڈ**^{۹۵} مرتب کرتے ہیں (مثلاً **پایاڈ**^{۹۶} یا **کایاڈ**^{۹۷})۔ فرض کریں یہ کوارک کے زمینی حال میں ہیں (الہذا ان کا مداری زاویائی معیار حرکت صفر ہوگا)۔

۱. بیسیران کے کیا ممکن چکر ہونگے؟

group theory^{۹۸}
quark^{۹۳}
baryon^{۹۴}
meson^{۹۵}
pion^{۹۶}
kion^{۹۷}

ب. میڈان کے کیا ممکنہ چکر ہونگے؟

سوال ۴.۳۶:

ا. چکر 1 کا ایک ساکن ذرہ اور چکر 2 کا ایک ساکن ذرہ اس تفکیک میں پائے جاتے ہیں کہ ان کا کل چکر 3، اور z جزو \hbar ہے۔ چکر 2 ذرہ کے زاویائی معیار حرکت کے z جزو کی پیمائش سے کیا قیمتیں حاصل ہو سکتی ہیں اور ہر ایک قیمت کا احتمال کیا ہوگا؟

ب. ہائیڈروجن جوہر کے حال ψ_{510} میں ایک مخالف میدان الیکٹران پایا جاتا ہے۔ اگر آپ (پروٹان کے چکر کو شامل کئے بغیر) صرف الیکٹران کے کل زاویائی معیار حرکت کے مربع کی پیمائش کر سکیں، تب کیا قیمتیں حاصل ہو سکتی ہیں اور ان کا افسردہ احتمال کیا ہوگا؟

سوال ۴.۳: S^2 اور $S_z^{(1)}$ کا مقلوب تعین کریں (جہاں $\mathbf{S} \equiv \mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}$ ہوگا)۔ اپنے نتیجہ کو عمومیّت دیتے ہوئے درج ذیل دکھائیں۔

$$[S^2, S_z^{(1)}] = 2i\hbar(\mathbf{S}^{(1)} \times \mathbf{S}^{(2)}) \quad (۴.۱۸۷)$$

تبصرہ: میں یہاں بتانا چاہوں گا کہ چونکہ $S_z^{(1)}$ اور S^2 آپس میں غیر مقلوبی ہیں لہذا ہم ایسے حالات حاصل کرنے سے متاصر ہو گئے جو دونوں کے بیک وقت امتیازی سمتیات ہوں۔ ہمیں S^2 کے امتیازی حالات تیار کرنے کی خاطر $S_z^{(1)}$ کے امتیازی حالات کے خطی مجموعے درکار ہونگے۔ (مساوات ۴.۱۸۵ میں) کلیبش و گورڈن عددی سریبی کچھ کرتے ہیں۔ ساتھ ہی مساوات ۴.۱۸۷ سے ہم کہہ سکتے ہیں کہ S^2 کے ساتھ مجموعہ $\mathbf{S}^{(1)} + \mathbf{S}^{(2)}$ مقلوبی ہوگا، جو ہماری معلومات (مساوات ۴.۱۰۳) کی ایک مخصوص صورت ہے۔

اضافی سوالات برائے باب ۴

سوال ۴.۳۸: ایک ایسے تیز ابعادی ہارمونک ارتعاش^{۹۸} پر غور کریں جس کا مخفیہ درج ذیل ہے۔

$$V(r) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \quad (۴.۱۸۸)$$

ا. کارٹیزی محدود میں علیحدگی متغیرات استعمال کرتے ہوئے اس کو تین یک بُعدی مرتعش میں تبدیل کر کے، موخر الذکر کے بارے میں اپنی معلومات استعمال کرتے ہوئے، احبازتی توانائیاں تعین کریں۔ جواب:

$$E_n = (n + 3/2)\hbar\omega \quad (۴.۱۸۹)$$

ب. E_n کی انخطاطیت $d_{(n)}$ تعین کریں۔

سوال ۴.۳۹: چونکہ (مساوات ۴.۱۸۸ میں دیا گیا) تین ابعادی ہارمونی سر تعیش مختلفہ کردی تشاکلی ہے لہذا اس کی مساوات شر وڈنگر کو کار تیزی محدود کے علاوہ کردی محدود میں بھی علیحدگی متغیرات سے حل کیا جاسکتا ہے۔ ط مستقی تسل کی ترکیب استعمال کرتے ہوئے ردای مساوات حل کریں۔ عددی سروں کا کلیہ توالی حاصل کرتے ہوئے اجبازتی توانائیاں تعیین کریں۔ اپنے جواب کی تصدیق مساوات ۴.۱۸۹ کے ساتھ کریں۔

سوال ۴.۴۰:

ا. (ساکن حالات کے لئے) درج ذیل تین ابعادی مسئلہ وریل^{۹۹} ثابت کریں۔

$$2\langle T \rangle = \langle \mathbf{r} \cdot \nabla V \rangle \quad (۴.۱۹۰)$$

اشارہ: سوال ۳.۳۱ دیکھیے گا۔

ب. مسئلہ وریل کو ہائیڈروجن کے لیے استعمال کرتے ہوئے درج ذیل دکھائیں۔

$$\langle T \rangle = -E_n; \quad \langle V \rangle = 2E_n \quad (۴.۱۹۱)$$

ج. مسئلہ وریل کو (سوال ۴.۳۸ کے) تین ابعادی ہارمونی سر تعیش پر لاگو کر کے درج ذیل دکھائیں۔

$$\langle T \rangle = \langle V \rangle = E_n/2 \quad (۴.۱۹۲)$$

سوال ۴.۴۱: اس سوال کو صرف اس صورت میں حل کرنے کی کوشش کریں اگر آپ سمتی علم الاحصاء سے واقف ہوں۔ سوال ۴.۱۴ کو عمومیت دیتے ہوئے تین ابعادی رواج^{۱۰۰} کی درج ذیل تعریف پیش کی جاتی ہے۔

$$\mathbf{J} \equiv \frac{i\hbar}{2m} (\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi) \quad (۴.۱۹۳)$$

ا. دکھائے کہ \mathbf{J} استمراری مساوات^{۱۰۱}:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = -\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 \quad (۴.۱۹۴)$$

کو مطمئن کرتا ہے جو مقامی بقا احتمال^{۱۰۲} کو بیان کرتی ہے۔ یوں (مسئلہ پھیلاؤ کے تحت) درج ذیل ہوگا

$$\int_S \mathbf{J} \cdot d\mathbf{a} = -\frac{d}{dt} \int_V |\Psi|^2 d^3 r \quad (۴.۱۹۵)$$

جہاں V ایک مقررہ حجم اور S اس کی سرحدی سطح ہے۔ دوسرے الفاظ میں، کسی سطح سے احتمال کا اخراج، اس بند حجم میں ذرہ پائے جانے کے احتمال میں کمی کے برابر ہوگا۔

^{۹۹} three-dimensional virial theorem

^{۱۰۰} probability current

^{۱۰۱} continuity equation

^{۱۰۲} conservation of probability

ب۔ حال $n = 2$ ، $\ell = 1$ ، $m = 1$ میں پائے جانے والے ہائیڈروجن کے لیے J تلاش کریں۔ جواب:

$$\frac{\hbar}{64\pi m a^5} r e^{-r/a} \sin \theta \alpha_\phi$$

ج۔ اگر ہم کمیت کے ہسٹوگرام mJ سے ظاہر کریں تب زاویائی معیار حرکت درج ذیل ہوگا۔

$$L = m \int (\mathbf{r} \times \mathbf{J}) d^3 r$$

اس کو استعمال کرتے ہوئے حال ψ_{211} کے لیے L_z کا حساب کر کے نتیجہ پر تبصرہ کریں۔

سوال ۴.۴۲: (غیر تاحق وقت) معیار حرکت ψ_{211} فضا تفاعل موج ψ_{211} کی تعریف تین ابعاد میں مساوات ۴.۵۴ کی قدرتی عمومیت سے پیش کرتے ہیں۔

$$\phi(\mathbf{p}) \equiv \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int e^{-i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r})/\hbar} \psi(\mathbf{r}) d^3 r \quad (۴.۱۹۶)$$

ا۔ زمینی حال میں ہائیڈروجن (مساوات ۴.۸۰) کے لیے معیار حرکت ψ_{211} فضا تفاعل موج تلاش کریں۔ اشارہ: ρ کی قدرتی عمومیت سے پیش کرتے ہوئے قطبی محور کو p کے رخ رکھیں اور θ کا مکمل پہلے حاصل کریں۔ جواب:

$$\phi(p) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2a}{\pi} \right)^{3/2} \frac{1}{[1 + (ap/\hbar)^2]^2} \quad (۴.۱۹۷)$$

ب۔ تصدیق کیجیے گا کہ $\phi(\mathbf{p})$ معمول شدہ ہے۔

ج۔ زمینی حال میں ہائیڈروجن کے لیے $\psi(\mathbf{p})$ استعمال کرتے ہوئے $\langle p^2 \rangle$ کا حساب لگائیں۔

د۔ اس حال میں حرکت توانائی کی توقعاتی قیمت کیا ہوگی؟ اپنے جواب کو E_1 کی مضرب کی صورت میں لکھ کر تصدیق کریں کہ یہ مسئلہ ریل (مساوات ۴.۱۹۱) کا ہلکا تھا ہے۔

سوال ۴.۴۳:

ا۔ حال $n = 3$ ، $\ell = 2$ ، $m = 1$ میں ہائیڈروجن کے لیے فضائی تفاعل موج (ψ) تیار کریں۔ اپنی جواب کو صرف r ، θ ، ϕ اور a (رداس بوجہ) کے تفاعل کی صورت میں لکھیں۔ کسی دوسرے متغیر ρ ، z ، وغیرہ) یا تفاعل (Y, v) ، وغیرہ) یا مستقلات (A, c_0) ، وغیرہ) یا تفرقات استعمال کرنے کی اجازت نہیں ہے (ہاں π اور e 2، وغیرہ استعمال کیے جاسکتے ہیں)۔

ب۔ r ، θ اور ϕ کے لحاظ سے موزوں کلمات حاصل کر کے تصدیق کریں کہ یہ تفاعل موج معمول شدہ ہے۔

ج۔ اس حال میں r^s کی توقعاتی قیمت تلاش کریں۔ s کی کس سمت (مثبت اور منفی) کے لیے جواب مستثنی ہوگا؟

سوال ۴.۴:

۱. حال $n = 4$ ، $\ell = 3$ ، $m = 3$ کے لیے ہائیڈروجن کا تفاعل موج تیار کریں۔ اپنے جواب کو r ، θ اور ϕ کا تفاعل لکھیں۔

ب. اس حال میں r کی توقعاتی قیمت کیا ہوگی؟ (عملیات کو جدول سے دیکھنے کی اجازت ہے۔)

ج. اس حال میں ایک جوہر کے متبادل مشاہدہ $L_x^2 + L_y^2$ کی پیمائش سے کیا قیمت (یا قیمتیں) متوقع ہے اور ہر ایک کا انحصار دی احتمال کیا ہوگا؟

سوال ۴.۵: ہائیڈروجن کے زمینی حال میں، مرکزہ کے اندر الیکٹران پایا جانے کا احتمال کیا ہوگا؟

۱. پہلے فرض کرتے ہوئے کہ تفاعل موج (مساوات ۴.۸۰) $r = 0$ تک درست ہے اور مرکزہ کا رداس b لیتے ہوئے بالکل ٹھیک جواب حاصل کریں۔

ب. اپنے جواب کو ایک چھوٹے عدد $\epsilon \equiv 2b/a$ کے طاقتی تسلسل کے روپ میں لکھ کر دکھائیں کہ کم سے کم رتبہ جزو کبی: $P \approx (4/3)(b/a)^3$ ہوگا۔ دکھائیں کہ $b \ll a$ کی صورت میں (جیسا کہ ہے) یہ تخمین موزوں ہوگی۔

ج. اس کے برعکس ہم فرض کر سکتے ہیں کہ مرکزہ کے (نہایت چھوٹے) حجم میں $\psi(r)$ تقریباً مستقل ہوگا لہذا $P \approx (4/3)\pi b^3 |\psi(0)|^2$ لیا جاسکتا ہے۔ تصدیق کیجیے گا کہ اب بھی وہی جواب حاصل ہوگا۔

د. $b \approx 10^{-15} \text{ m}$ اور $a \approx 0.5 \times 10^{-10} \text{ m}$ لیتے ہوئے P کی اندازاً اعدادی قیمت حاصل کریں۔ یہ الیکٹران کا، اندازاً وہ وقت ہوگا جو وہ مرکزہ کے اندر گزارتا ہے۔

سوال ۴.۶:

۱. کلیہ تواری (مساوات ۴.۷۶) استعمال کرتے ہوئے تصدیق کریں کہ $\ell = n - 1$ کی صورت میں رداسی تفاعل موج درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$R_n(n-1) = N_n r^{n-1} e^{-r/na}$$

بلاواسطہ عمل کرتے ہوئے مستقل معمول زنی N_n تعین کریں۔

ب. حال $\psi_n(n-1)m$ روپ کے حالات کے لیے $\langle r \rangle$ اور $\langle r^2 \rangle$ کا حساب لگائیں۔

ج. دکھائیں کہ ان حالات کی $r(\sigma_r)$ میں ”عدم یقینیت“ $\langle r \rangle / \sqrt{2n+1}$ ہوگی۔ دھیان رہے کہ n بڑھانے سے r میں نسبتی وسعت گھٹتی ہے (یوں n کی بڑی قیمت کے لیے یہ نظام کلاسیکی نظر آنا شروع ہوتا ہے، جس میں دائری مدار پہچانے جاسکتے ہیں)۔ رداسی تفاعل امواج کا خاکہ، n کی کئی قیمتوں کے لیے، بناتے ہوئے اس نکتہ کی وضاحت کریں۔

سوال ۴.۷: ہم مکافض طیفی خطوط: کلیہ رڈبرگ (مساوات ۴.۹۳) کے تحت ابتدائی اور اختتامی حالات کے

صدر کوانٹائی اعداد ہائیڈروجن طیف کے لکیر کا طول موج تعین کرتے ہیں۔ ایسی دو منفرد جوڑیاں $\{n_i, n_f\}$ تلاش

کریں جو λ کی ایک ہی قیمت دیتے ہوں، مثلاً $\{6851, 6409\}$ اور $\{15283, 11687\}$ ایسا کرتے ہیں۔ آپ کو ان کے علاوہ جوڑیاں تلاش کرنی ہوں گی۔

سوال ۴.۴۸: متبادل مشاہدہ $A = x^2$ اور $B = L_z$ پر غور کریں۔

ا. $\sigma_A \sigma_B$ کے لیے عدم یقینیت کا اصول تیار کریں۔

ب. حال $\psi_{n\ell m}$ میں ہائیڈروجن کے لیے σ_B کی قیمت معلوم کریں۔

ج. اس حال میں $\langle xy \rangle$ کے بارے میں آپ کیا نتیجہ اخذ کرتے ہیں۔

سوال ۴.۴۹: ایک الیکٹران درج ذیل چکری حال میں ہے۔

$$\chi = A \begin{pmatrix} 1 - 2i \\ 2 \end{pmatrix}$$

ا. χ کی معمول زنی کرتے ہوئے مستقل A تعین کریں۔

ب. اس الیکٹران کے S_z کی پیمائش سے کیا قیمتیں متوقع ہیں اور ہر قیمت کا انحصار ادی احتمال کیا ہوگا؟ S_z کی توقعاتی قیمت کیا ہوگی؟

ج. اس الیکٹران کے S_x کی پیمائش کی بجائے تو کیا قیمتیں متوقع ہوں گی اور ہر قیمت کا انحصار ادی احتمال کیا ہوگا؟ S_x کی توقعاتی قیمت کیا ہوگی؟

د. اس الیکٹران کے S_y کی پیمائش سے کیا قیمتیں متوقع ہیں اور ان قیمتوں کا انحصار ادی احتمال کیا ہوگا؟ S_y کی توقعاتی قیمت کیا ہوگی؟

سوال ۴.۵۰: فرض کریں ہم جانتے ہیں کہ $1/2$ چکر کے دو ذرات یکساں تنظیم (۴.۱۷۸) میں پائے جاتے ہیں۔ مان لیں کہ اکائی سمتیہ \mathbf{a}_a کے رخ ذرہ ۱ کے چکری زاویائی معیار حرکت کا جزو $S_a^{(1)}$ ہے۔ اسی طرح مان لیں کہ اکائی سمتیہ \mathbf{a}_b کے رخ ذرہ ۲ کے چکری زاویائی معیار حرکت کا جزو $S_b^{(2)}$ ہے۔ درج ذیل دکھائیں جہاں \mathbf{a}_a اور \mathbf{a}_b کے بیچ زاویہ θ ہے۔

$$\langle S_a^{(1)} S_b^{(2)} \rangle = -\frac{\hbar^2}{4} \cos \theta \quad (۴.۱۹۸)$$

سوال ۴.۵۱:

ا. کلیش گورڈن عددی سرکو، $s_1 = 1/2$ اور s_2 کچھ بھی لیتے ہوئے، حاصل کریں۔ اشارہ: آپ درج ذیل میں A اور B عددی سروں کی وہ قیمت تلاش کرنا چاہتے ہیں جن کے لیے S^2 کا امتیازی حال $|sm\rangle$ ہو۔

$$|sm\rangle = A \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle |s_2(m - \frac{1}{2})\rangle + B \left| \frac{1}{2} (-\frac{1}{2}) \right\rangle |s_2(m + \frac{1}{2})\rangle$$

مسوالت ۴.۱۷۹ تا مسوالت ۴.۱۸۲ کی ترکیب استعمال کریں۔ اگر آپ یہ جاننے سے متاثر ہوں کہ (مثلاً) $S_x^{(2)}$ حال $|s_2 m_2\rangle$ کو کیا کرتا ہے، تب مسوالت ۴.۱۳۶ سے رجوع کریں اور مسوالت ۴.۱۴۷ سے قبل جملہ دوبارہ پڑھیں۔ جواب:

$$A = \sqrt{\frac{s_2 \pm m + 1/2}{2s_2 + 1}}; \quad B = \pm \sqrt{\frac{s_2 \mp m + 1/2}{2s_2 + 1}}$$

جہاں $s = s_2 \pm 1/2$ علامتیں تعین کرتا ہے۔

ب. اس عمومی نتیجے کی تصدیق جدول ۴.۸ میں تین یا چار اندراج کے لئے کریں۔

سوال ۴.۵۲: (ہمیشہ کی طرح S_z کی امتیازی حالات کو اساس لیتے ہوئے) $3/2$ چکر ذرہ کے لیے متالاب S_x تلاش کریں۔ امتیازی مسوالت حل کرتے ہوئے S_x کے امتیازی امتداد معلوم کریں۔

سوال ۴.۵۳: مسوالت ۴.۱۴۵ اور مسوالت ۴.۱۴۷ میں $1/2$ چکر، سوال ۴.۳۱ میں 1 چکر، اور سوال ۴.۵۲ میں $3/2$ چکر کے متالابوں کی بات کی گئی۔ ان نتائج کو عمومیت دیتے ہوئے اختیاری s چکر کے لیے چکر متالاب تلاش کریں۔ جواب:

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} s & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s-1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & s-2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -s \end{pmatrix}$$

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & b_s & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ b_s & 0 & b_{s-1} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & b_{s-1} & 0 & b_{s-2} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_{s-2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & b_{-s+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & b_{-s+1} & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -ib_s & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ ib_s & 0 & -ib_{s-1} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & ib_{s-1} & 0 & -ib_{s-2} & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & ib_{s-2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -ib_{-s+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & ib_{-s+1} & 0 \end{pmatrix}$$

جہاں $b_j \equiv \sqrt{(s+j)(s+1-j)}$ ہے۔

سوال ۴.۵۴: کروئی ہارمونیات کے لیے معمول زنی ضربیہ درج ذیل طریقے سے حاصل کریں۔ ہم حصہ ۴.۱.۲ سے درج ذیل جانتے ہیں۔

$$Y_\ell^m = B_\ell^m e^{im\phi} P_\ell^m(\cos \theta)$$

آپ کو جبزو B_ℓ^m تعین کرنا ہوگا (جس کی قیمت تلاش کیے بغیر میں نے ذکر مساوات ۴.۳۲ میں کیا)۔ مساوات ۴.۱۲۰، مساوات ۴.۱۲۱، اور مساوات ۴.۱۳۰ استعمال کرتے ہوئے B_ℓ^m کی صورت میں B_ℓ^{m+1} کا کلیہ توالی دریافت کریں۔ اس کو m کے ریاضی ماخوذ کی ترکیب سے حل کرتے ہوئے B_ℓ^m کو مجموعی مستقل $C(\ell)$ تک حل کریں۔ آخر میں سوال ۴.۲۲ کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے اس مستقل کی قیمت تلاش کریں۔ شریک لیونڈر تفاعل کے تفرق کا درج ذیل کلیہ مددگار ثابت ہو سکتا ہے:

$$(1 - x^2) \frac{dP_\ell^m}{dx} = \sqrt{1 - x^2} P_\ell^{m+1} - mx P_\ell^m \quad (۴.۱۹۹)$$

سوال ۴.۵۵: ہائیڈروجن جوہر میں ایک الیکٹران درج ذیل چکر اور فضائی حال کے ملاپ میں پایا جاتا ہے۔

$$R_{21}(\sqrt{1/3}Y_1^0\chi_+ + \sqrt{2/3}Y_1^1\chi_-)$$

۱. مدارچی زاویائی معیار حرکت کے مربع (L^2) کی پیمائش سے کیا قیمتیں حاصل ہو سکتی ہیں؟ ہر قیمت کا انفرادی احتمال کیا ہوگا؟

ب. یہی کچھ مدارچی زاویائی معیار حرکت کے z جبزو (L_z) کے لیے معلوم کریں۔

ج. یہی کچھ چکری زاویائی معیار حرکت کے مربع (S^2) کے لیے معلوم کریں۔

د. یہی کچھ چکری زاویائی معیار حرکت کے z جبزو (S_z) کے لیے کریں۔ کل زاویائی معیار حرکت $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ لیں۔

ه. آپ J^2 کی پیمائش کرتے ہیں۔ آپ کیا قیمتیں حاصل کر سکتے ہیں ان کا انفرادی احتمال کیا ہوگا؟

و. یہی کچھ J_z کے لیے معلوم کریں۔

ز. آپ ذرے کے مقام کی پیمائش کرتے ہیں۔ اس کی r ، θ ، ϕ پر پائے جانے کی کثافت احتمال کیا ہوگی؟

ح. آپ چکر کا z جبزو اور منبع سے فاصلہ کی پیمائش کرتے ہیں (یاد رہے کہ یہ ہم آہنگ و متابل مشاہدہ ہیں)۔

ایک ذرے کا رداس r پر اور ہم میدان ہونے کی کثافت احتمال کیا ہوگی؟

سوال ۴.۵۶:

۱. دکھائیں کہ ایک تفاعل $f(\phi)$ جس کو ٹیلر تسلسل میں پھیلا یا جاسکتا ہے، کے لیے درج ذیل ہوگا

$$f(\phi + \varphi) = e^{\frac{iL_z\varphi}{\hbar}} f(\phi)$$

(جہاں φ اختیاری زاویہ ہے)۔ اسی کی بنا پر L_z / \hbar کو z کے گرد گھومنے کا پیدا کار ^{۱۰۴} کہتے ہیں۔ اشارہ: مساوات ۴.۱۲۹ استعمال کریں اور سوال ۳.۳۹ سے مدد لیں۔ زیادہ عمومی $L \cdot a_n / \hbar$ ہو گا جو a_n رخ گھومنے کا پیدا کار ہے، یعنی $e^{i(L \cdot a_n \varphi / \hbar)}$ محور a_n کے گرد (دائیں ہاتھ سمت میں) زاویہ φ گھومنے کا اثر پیدا کرتا ہے۔ چپکر کی صورت میں گھومنے کا پیدا کار $S \cdot a_n / \hbar$ ہو گا۔ بالخصوص $1/2$ چپکر کے لیے

$$\chi' = e^{i(\sigma \cdot a_n) \varphi / 2} \chi \quad (۴.۲۰۰)$$

ہمیں چپکر کاروں کے گھومنے کے بارے میں بتاتی ہے۔

ب. محور x کے لحاظ سے 180° گھومنے کو ظاہر کرنے والا (2×2) متالب تیار کریں اور دکھائیں کہ یہ ہماری توقعات کے عین مطابق، ہم میدان (χ_+) کو خلاف میدان (χ_-) میں تبدیل کرتا ہے۔

ج. محور y کے لحاظ سے 90° گھومنے والا متالب تیار کریں اور (χ_+) پر اس کا اثر دیکھیں؟

د. محور z کے لحاظ سے 360° زاویہ گھومنے کو ظاہر کرنے والا متالب تیار کریں۔ کیا جواب آپ کی توقعات کے مطابق ہے؟ ایسا نہ ہونے کی صورت میں اس کی مضمرات پر تبصرہ کریں۔

ه. درج ذیل دکھائیں۔

$$e^{i(\sigma \cdot a_n) \varphi / 2} = \cos(\varphi/2) + i(a_n \cdot \sigma) \sin(\varphi/2) \quad (۴.۲۰۱)$$

سوال ۴.۵۷: زاویائی معیار حرکت کے بنیادی مقلبت رشتے (مساوات ۴.۹۹) امتیازی اقدار کی (عدد صحیح قیمتوں کے ساتھ ساتھ) نصف عدد صحیح قیمتوں کی اجازت دیتے ہیں، جبکہ مدارچی زاویائی معیار حرکت کی صرف عدد صحیح قیمتیں پائی جاتی ہیں۔ خصوصی روپ $L = r \times p$ پر ضرور کوئی اضافی شرط مسلط ہے جو نصف عددی قیمتوں کو حنا رنج کرتی ہے۔ ہم متقل a جس کا بُعد لمبائی ہو (مثلاً، ہائیڈروجن پر بات کرتے ہوئے رداس بواہر) لیتے ہوئے درج ذیل عاملین متعارف کرتے ہیں۔

$$q_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}[x + (a^2/\hbar)p_y]; \quad p_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}[p_x - (\hbar/a^2)y];$$

$$q_2 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}[x - (a^2/\hbar)p_y]; \quad p_2 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}[p_x + (\hbar/a^2)y]$$

ا. تصدیق کیجیے کہ $[q_1, p_1] = [q_2, p_2] = i\hbar$ ؛ $[q_1, q_2] = [p_1, p_2] = 0$ ہیں۔ یوں مقام اور معیار حرکت کی باضابطہ مقلبت رشتوں کو تمام q اور p مطمئن کرتے ہیں اور اشاریہ 1 کے عاملین اشاریہ 2 کے عاملین کے ہم آہنگ ہیں۔

ب. درج ذیل دکھائیں۔

$$L_z = \frac{\hbar}{2a^2}(q_1^2 - q_2^2) + \frac{a^2}{2\hbar}(p_1^2 - p_2^2)$$

generator of rotation^{۱۰۴}

ج. تصدیق کیجیے کہ ایسا ہارمونی سر تعش جس کی کیت $m = \hbar/a^2$ اور تعدد $\omega = 1$ ہو کے لیے $L_z = H_1 - H_2$ ہوگا جہاں H ہیمیلٹنی ہیں۔

د. ہم جانے ہیں ہارمونی سر تعش ہیمیلٹنی کے امتیازی افتدار $(n + 1/2)\hbar\omega$ ہیں جہاں $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ہوگا (حصہ ۲.۳.۱ کے الجبرائی نظریہ میں ہیمیلٹنی کے روپ اور باضابطہ مقلبت رشتوں سے یہ اخذ کیا گیا)۔ اس کو استعمال کرتے ہوئے اخذ کریں کہ L_z کے امتیازی افتدار لازمًا عدد صحیح ہوں گے۔

سوال ۵۸: عمومی حال (مساوات ۴.۱۳۹) میں $1/2$ چکر کے S_z اور S_y کی کم سے کم عدم یقینیت کے لئے شرط معلوم کریں (یعنی، فقرہ $|\langle S_z \rangle| \geq (\hbar/2)\sigma_{S_x}\sigma_{S_y}$ میں مساوی (=) صورت تلاش کریں)۔ جواب: عمومیت کھوئے بغیر ہم a کو حقیقی منتخب کر سکتے ہیں؛ تب عدم یقینیت کی کم سے کم قیمت اس صورت حاصل ہو گی جب b حناص حقیقی یا حناص خیالی ہو۔

سوال ۵۹: کلاسیکی برقی حرکیات میں ایک ذرہ، جس کا بار q ہو اور جو برقی میدان E اور مقناطیسی میدان B میں سمتی رفتار v کے ساتھ حرکت کرتا ہو، پر قوت عمل کرتا ہے جسے لورینز قوت کا قانون^{۱۰۵}:

$$F = q(E + v \times B) \quad (۴.۲۰۲)$$

پیش کرتا ہے۔ اس قوت کو کسی بھی غیر سمتی مخفی توانائی تلف عمل کی ڈھلوان کی صورت میں نہیں لکھا جاسکتا ہے لہذا مساوات شرودنگر اپنی اصلی روپ (مساوات ۱.۱) میں اس کو قبول نہیں کر سکتی ہے۔ تاہم اس کا نفیس روپ:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (۴.۲۰۳)$$

کوئی مسئلہ نہیں کھڑا کرتا ہے۔ کلاسیکی ہیمیلٹنی درج ذیل ہوگی

$$H = \frac{1}{2m}(p - qA)^2 + q\phi \quad (۴.۲۰۴)$$

جہاں A سمتی مخفیہ ($B = \nabla \times A$) اور ϕ غیر سمتی مخفیہ ($E = -\nabla\phi - \partial A/\partial t$) ہے، لہذا مساوات شرودنگر (باضابطہ متبادل $((\hbar/i)\nabla \rightarrow p)$ پر کر کے) درج ذیل لکھی جاسکتی ہے۔

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - qA \right)^2 + q\phi \right] \Psi \quad (۴.۲۰۵)$$

۱. درج ذیل دکھائیں۔

$$\frac{d\langle r \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle (p - qA) \rangle \quad (۴.۲۰۶)$$

ب. ہمیشہ کی طرح (مساوات ۱.۳۲ دیکھیں) ہم $\frac{d\langle \mathbf{r} \rangle}{dt}$ کو $\langle \mathbf{v} \rangle$ لیتے ہیں۔ درج ذیل دکھائیں۔

$$(۴.۲۰۷) \quad m \frac{d\langle \mathbf{v} \rangle}{dt} = q \langle \mathbf{E} \rangle + \frac{q}{2m} \langle (\mathbf{p} \times \mathbf{B} - \mathbf{B} \times \mathbf{p}) \rangle - \frac{q^2}{m} \langle (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \rangle$$

ج. بالخصوص موجی اکٹھ کے حجم پر یکساں \mathbf{E} اور \mathbf{B} میدانوں کی صورت میں درج ذیل دکھائیں۔

$$(۴.۲۰۸) \quad m \frac{d\langle \mathbf{v} \rangle}{dt} = q(\mathbf{E} + \langle \mathbf{v} \rangle \times \mathbf{B})$$

اس طرح $\langle \mathbf{v} \rangle$ کی توقعاتی قیمت عین لورینز قوت کی مساوات کے تحت حرکت کرے گی، جیسا ہم مسئلہ ہر نفٹ کے تحت توقع کر سکتے تھے۔

سوال ۴.۶۰: [پس منظر جاننے کے لیے سوال ۴.۵۹ پر نظر ڈالیں۔] فرض کریں

$$\mathbf{A} = \frac{B_0}{2}(x\mathbf{j} - y\mathbf{i}) \quad \text{اور} \quad \varphi = Kz^2$$

یہیں جہاں B_0 اور K مستقلات ہیں۔

ا. میدان \mathbf{E} اور \mathbf{B} تلاش کریں۔

ب. ان میدان اس ذرہ کے امتیازی تفاعلات اور اجبازتی توانائیاں تلاش کریں جس کی کیت m اور بار q ہو۔ جواب:

$$(۴.۲۰۹) \quad E(n_1, n_2) = (n_1 + \frac{1}{2})\hbar\omega_1 + (n_2 + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad (n_1, n_2 = 0, 1, 2, 3, \dots)$$

جہاں $\omega_1 \equiv qB_0/m$ اور $\omega_2 \equiv \sqrt{2qKm}$ ہیں۔ تبصرہ: $K = 0$ کی صورت میں یہ سائیکلوٹرائز حرکت^{۱۰۶} اکوانٹائی مشاں ہوگا؛ کلاسیکی سائیکلوٹرائز تعدد ω_1 ہوگا اور یہ z رخ میں آزاد ذرہ ہوگا۔ اجبازتی توانائیاں $(n_1 + \frac{1}{2})\hbar\omega_1$ لٹو سطیوں^{۱۰۷} اکہلاتی ہیں۔

سوال ۴.۶۱: [پس منظر جاننے کی خاطر سوال ۴.۵۹ پر نظر ڈالیں۔] کلاسیکی برقی حرکیات میں محفے \mathbf{A} اور φ یکتا طور پر تعین نہیں کیے جاسکتے ہیں؛ طبعی متداریں میدان \mathbf{E} اور \mathbf{B} ہوں گے۔ ا. دکھائیں کہ محفے

$$(۴.۲۱۰) \quad \varphi' \equiv \varphi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \quad \mathbf{A}' \equiv \mathbf{A} + \nabla \Lambda$$

(جہاں Λ معتام اور وقت کا ایک اختیاری حقیقی تفاعل ہے) بھی وہی میدان دیتے ہیں جو φ اور \mathbf{A} دیتے ہیں۔ مساوات ۴.۲۱۰ ماپے متبادلہ^{۱۰۸} اکہلاتی ہے اور ہم کہتے ہیں کہ یہ نظریہ ماپے غیر متغیر^{۱۰۹} ہے۔

^{۱۰۶}cyclotron motion

^{۱۰۷}Landau Levels

^{۱۰۸}gauge transformation

^{۱۰۹}gauge invariant

ب. کوانٹائی میکانیات میں مخفیہ کارکردار زیادہ براہ راست پایا جاتا ہے اور ہم جاننا چاہیں گے کہ آیا یہ نظریہ ماپ غیر متغیر رہتا ہے یا نہیں۔ دکھائیں کہ ماپ تبادلہ مخفیے φ' اور A لیتے ہوئے درج ذیل

$$\Psi' \equiv e^{iq\Lambda/\hbar}\Psi \quad (۴.۲۱۱)$$

مساوات شرودنگر (مساوات ۴.۲۰۵) کو مطمئن کرتا ہے۔ چونکہ Ψ اور Ψ' میں صرف یقینی جزو ضربی کا منفرق پایا جاتا ہے لہذا یہ ایک ہی طبعی حال^{۱۰} کو ظاہر کرتے ہیں اور یوں یہ نظریہ ماپ غیر متغیر ہوگا (مزید معلومات کے لیے حصہ ۱۰.۲.۳ سے رجوع کیجیے)۔

^{۱۰} یعنی $\langle \mathbf{r} \rangle$ ، $d\langle \mathbf{r} \rangle / dt$ ، وغیرہ تبدیل نہیں ہوں گے۔ چونکہ Λ معتمد کا تابع ہے، $\langle \mathbf{p} \rangle$ (جس کا \mathbf{p} کو عامل $(\hbar/i)\nabla$ ظاہر کرتا ہے) تبدیل ہوگا، تاہم جیسا ہم نے مساوات ۴.۲۰۶ میں دیکھا، \mathbf{p} موجودہ سیاق و سباق میں میکانی معیار حرکت ($m\mathbf{v}$) کو ظاہر نہیں کرتا ہے (گراؤنڈ میکانیات میں اس کو باضابطہ معیار حرکت کہتے ہیں)۔

باب ۵

متماثل ذرات

۵.۱ دو ذروی نظام

ایک ذرے کے لیے (فی الحال چکر کو نظر انداز کرتے ہوئے) $\psi(r, t)$ فضائی محدود، r ، اور وقت t کا تعین ہوگا۔ دو ذروی نظام کا حال پہلے ذرے کے محدود، (r_1) ، دوسرے ذرے کے محدود، (r_2) ، اور وقت کا تاجع ہوگا۔

$$(۵.۱) \quad \psi(r_1, r_2, t)$$

یہ وقت کے لحاظ سے (ہمیشہ کی طرح) مساوات شرودنگر

$$(۵.۲) \quad i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$$

کے تحت ارتقا کرے گا، جہاں H مکمل نظام کا ہیملٹنی ہے۔

$$(۵.۳) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(r_1, r_2, t)$$

(ذره 1 اور ذره 2 کے محدود کے لحاظ سے تعریفات کو، ∇ کے زیر نوشت میں، بالترتیب 1 اور 2 سے ظاہر کیا گیا ہے۔) ذره 1 کا حجم $d^3 r_1$ اور ذره 2 کا حجم $d^3 r_2$ میں پائے جانے کا احتمال درج ذیل ہوگا:

$$(۵.۴) \quad |\psi(r_1, r_2, t)|^2 d^3 r_1 d^3 r_2$$

جہاں شماریاتی مفہوم معمول کے مطابق کارآمد ہوگا۔ ظاہر ہے کہ ψ کی معمول زنی درج ذیل کے تحت کرنی ہوگی۔

$$(۵.۵) \quad \int |\psi(r_1, r_2, t)|^2 d^3 r_1 d^3 r_2 = 1$$

غیر تابع وقت مخفیہ کے لیے علیحدگی متغیرات سے حلوں کا مکمل سلسلہ:

$$(۵.۶) \quad \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{-iEt/\hbar}$$

حاصل ہوگا جہاں فنکشنی تفاعل موج (ψ) غیر تابع وقت مساوات شرودنگر:

$$(۵.۷) \quad -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 \psi + V\psi = E\psi$$

کو مطمئن کرتا ہے جس میں E نظام کی کل توانائی ہے۔

سوال ۵.۱: عام طور پر باہم عمل مخفیہ کا انحصار صرف دو ذرات کے بیچ سمتیہ $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ پر ہوگا۔ ایسی صورت میں متغیرات \mathbf{r}_1 اور \mathbf{r}_2 کی جگہ نئے متغیرات \mathbf{r} اور (مرکز کیت) $\mathbf{R} \equiv \frac{(m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2)}{m_1 + m_2}$ کے استعمال سے مساوات شرودنگر دو حصوں میں علیحدہ ہوگی۔

۱. درج ذیل دکھائیں

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_1 &= \mathbf{R} + \frac{\mu}{m_1} \mathbf{r}, & \mathbf{r}_2 &= \mathbf{R} - \frac{\mu}{m_2} \mathbf{r} \\ \nabla_1 &= \frac{\mu}{m_2} \nabla_R + \nabla_r, & \nabla_2 &= \frac{\mu}{m_1} \nabla_R - \nabla_r \end{aligned}$$

جہاں

$$(۵.۸) \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

نظام کی تخفیف شدہ کمیت ہے۔

ب. دکھائیں کہ (غیر تابع وقت) مساوات شرودنگر درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$-\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \nabla_R^2 \psi - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 \psi + V(\mathbf{r})\psi = E\psi$$

ج. متغیرات کو $\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi_R(\mathbf{R})\psi_r(\mathbf{r})$ لیتے ہوئے علیحدہ کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ ψ_R ایک ذروی مساوات شرودنگر، جس میں کیت m کی بجائے کل کیت $(m_1 + m_2)$ ، مخفیہ صفر ہو اور نظام کی توانائی E_R ہو، کو مطمئن کرتا ہے، جبکہ ψ_r ایک ذروی مساوات شرودنگر، جس میں کیت m کی بجائے تخفیف شدہ کیت، مخفیہ $V(\mathbf{r})$ اور توانائی E_r ہو، کو مطمئن کرتا ہے۔ کل توانائی ان کا مجموعہ: $E = E_R + E_r$ ہوگا۔ اس سے ہمیں یہ معلوم ہوتا ہے کہ مرکز کیت ایک آزاد ذرہ کی مانند حرکت کرتا ہے اور (ذرہ 1 کے لحاظ سے ذرہ 2 کی) نسبتی حرکت۔ ایسی ہوگی جیسا مخفیہ V میں تخفیف شدہ کیت کا ایک ذرہ کرتا ہے۔ کلاسیکی میکانیات میں بالکل یہی تحلیل ہوگی، جو دو جسمی مسئلہ کو معادل یک جسمی مسئلہ میں تبدیل کرتی ہے۔

سوال ۵.۲: یوں ہائیڈروجن کے مرکزہ کی حرکت کو درست کرنے کے لیے ہم الیکٹران کی کمیت کی جگہ تخفیف شدہ کمیت استعمال کرتے ہیں (سوال ۵.۱)۔

ا. ہائیڈروجن کی بندشی توانائی (مساوات ۴.۷) جاننے کی خاطر μ کی جگہ m استعمال کرنے سے پیدا ہونے والا فرق (دو یا معنی ہندسوں تک) تلاش کریں۔

ب. ہائیڈروجن اور ڈیوٹیریم کے لیے سرخ بالمر لکیریوں ($n = 2 \rightarrow n = 3$) کے طول موج کے بیچ فاصلہ (منسوق) تلاش کریں۔

ج. پازٹرونیم^۲ کی بندشی توانائی تلاش کریں۔ پروٹان کی جگہ ضد الیکٹران رکھنے سے پازٹرونیم پیدا ہوگا۔ ضد الیکٹران کی کمیت الیکٹران کی کمیت کے برابر جبکہ اس کا بار الیکٹران کے بار کے مخالف ہے۔

د. فرض کریں آپ **میونیٹ** ہائیڈروجن^۳ (جس میں الیکٹران کی جگہ ایک میون ہوگا) کی وجودیت کی تصدیق کرنا چاہتے ہیں۔ میون کا بار الیکٹران کے بار کے برابر ہے، تاہم اس کی کمیت الیکٹران سے 206.77 گنا زیادہ ہے۔ آپ ”ایمان α “ لکیر ($n = 1 \rightarrow n = 2$) کے لیے کس طول موج پر نظر رکھیں گے؟

سوال ۵.۳: کلورین کے دو ذراتی ہم جب Cl^{35} اور Cl^{37} پائے جاتے ہیں۔ دکھائیں کہ HCl کارلزشی طیف متغیرب متغیرب جوڑیوں پر مشتمل ہوگا جن میں فاصلہ $\Delta\nu = 7.51 \times 10^{-4} \nu$ ہوگا جہاں ν حار جی نورب کا تعدد ہے۔ (اشارہ: اس کو ایک ہارمونی سرقتش تصور کریں جہاں $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ ہوگا، جہاں μ تخفیف شدہ کمیت۔) مساوات ۵.۸ ہے، جبکہ دونوں ہم جہاں k ایک جیسا تصور کریں۔

۵.۱.۱ بوسن اور فرمیان

فرض کریں ذرہ 1 (یک ذروی) حال $\psi_a(r)$ اور ذرہ 2 حال $\psi_b(r)$ میں پائے جاتے ہیں۔ (یاد رہے، میں یہاں چکر کو نظر انداز کر رہا ہوں۔) ایسی صورت میں $\psi(r_1, r_2)$ سادہ حاصل ضرب ہوگا۔^۴

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_a(r_1)\psi_b(r_2) \quad (۵.۹)$$

ہم یہاں فرض کر رہے ہیں ان ذرات کو علیحدہ علیحدہ پہچانا جاسکتا ہے؛ ورنہ یہ کہنا کہ ذرہ 1 حال ψ_a اور ذرہ 2 حال ψ_b میں ہے، بے معنی ہوگا؛ ہم صرف اتنا کہہ پاتے کہ ایک ذرہ حال ψ_a اور دوسرا ذرہ حال ψ_b میں پایا جاتا ہے، تاہم ہم نہیں جانتے کہ کونسا ذرہ کس حال میں ہے۔ کلاسیکی میکانیات میں یہ ایک بے

positronium^۲
muonic hydrogen^۳

در حقیقت، ضروری نہیں کہ ہر دو ذروی تقابلی عمل موج دو ایک ذروی تقابلات موج کا حاصل ضرب ہو۔ ایسے حال جنہیں ہم **عالم** (entangled states) کہتے ہیں کو اس طرح دو حصوں میں علیحدہ نہیں کیا جاسکتا ہے۔ تاہم اگر ذرہ 1 حال a اور ذرہ 2 حال b میں ہوں، تب دو ذروی حال حاصل ضرب ہوگا۔ میں جانتا ہوں، آپ سوچ رہے ہیں: ”ذرہ 1 کیسے کسی حال میں اور ذرہ 2 کسی دوسرے حال میں نہیں ہوں گے؟“ اس کی کلاسیکی مثال ایک تاحکری تشاکل ہے (مساوات ۴.۱۷۸)؛ میں آپ کو اکیلے ذرہ 1 کا حال نہیں بتا سکتا ہوں، چونکہ یہ ذرہ 2 کے حال کے ساتھ ہمبستہ ہے۔ اگر 2 کی پیمائش کی جائے اور نتیجہ ہم میدان چکر ہو تب 1 ہم میدان چکر اور 2 مخالف میدان چکر ہوگا۔

و تو فضا نہ اعتراض ہوگا: اصولاً ایک ذرے کو سرخ رنگ اور دوسرے کو نیلا رنگ دے کر آپ انہیں ہر وقت پہچان سکتے ہیں۔ کوانٹائی میکانیات میں صورتحال بنیادی طور پر مختلف ہے: آپ کسی الیکٹران کو سرخ رنگ نہیں دے سکتے اور نہ ہی اس پر کوئی پرچی چسپاں کر سکتے ہیں۔ حقیقت یہ ہے کہ تمام الیکٹران بالکل متماثل ہوتے ہیں جبکہ کلاسیکی اشیاء میں اتنی یکسانیت کبھی نہیں ہوتی۔ ایسا نہیں ہے کہ ہم الیکٹرانوں کو پہچاننے سے قاصر ہیں بلکہ حقیقت یہ ہے کہ ”یہ“ الیکٹران اور ”وہ“ الیکٹران کہنا کوانٹائی میکانیات میں بے معنی ہیں؛ ہم صرف ”ایک“ الیکٹران کی بات کر سکتے ہیں۔

ایسے ذرات کی موجودگی کو، جو اصولاً غیر ممیز ہوتے ہیں، کوانٹائی میکانیات خوش اسلوبی سے سمجھتی ہے: ہم ایسا غیر مشروط تقاضا عمل موج تیار کرتے ہیں جو یہ بات نہیں کرتا کہ کون ذرہ کس حال میں ہے۔ ایسا درج ذیل دو طریقوں سے کرنا ممکن ہے۔

$$(۵.۱۰) \quad \psi_{\pm}(r_1, r_2) = A[\psi_a(r_1)\psi_b(r_2) \pm \psi_b(r_1)\psi_a(r_2)]$$

یوں یہ ذرہ دو اقسام کے متماثل ذرات کا حاصل ہوگا: ^۵بوسن جن کے لئے ہم مثبت علامت استعمال کرتے ہیں اور ^۶فرمیاؤں جن کے لئے ہم منفی علامت استعمال کرتے ہیں۔ بوسن کی مثالیں نوریہ اور میوزون ہیں جبکہ فرمیان کی مثالیں پروٹان اور الیکٹران ہیں۔ ایسا ہے کہ

$$(۵.۱۱) \quad \left. \begin{array}{l} \text{عدد صحیح چکر کے تمام ذرات۔ بوسن جبکہ} \\ \text{نصف عدد صحیح چکر کے تمام ذرات فرمیان ہوں گے۔} \end{array} \right\}$$

چکر اور شماریات کے مابین یہ تعلق (جیسا کہ ہم دیکھیں گے، فرمیان اور بوسن کے شماریاتی خواص ایک دوسرے سے بہت مختلف ہوتے ہیں) کو اضافی کوانٹائی میکانیات میں ثابت کیا جاسکتا ہے؛ تفسیر اضافی نظریہ میں اس کو ایک مسلمہ لیا جاتا ہے۔^۷

اس سے بالخصوص ہم اخذ کر سکتے ہیں کہ دو متماثل فرمیان (مثلاً دو الیکٹران) ایک ہی حال کے ممکن نہیں ہو سکتے۔ اگر $\psi_a = \psi_b$ ہو تب

$$\psi_{-}(r_1, r_2) = A[\psi_a(r_1)\psi_a(r_2) - \psi_a(r_1)\psi_a(r_2)] = 0$$

کی بنا پر کوئی تقاضا عمل موج^۸ نہیں ہوگا۔ یہ مشہور نتیجہ **پالے اصول** مناعیت کہلاتا ہے۔ یہ کوئی عجیب مفروضہ نہیں جو صرف الیکٹران پر لاگو ہوتا ہو، بلکہ یہ دوزوی تقاضا عمل موج کی تیاری کے قواعد کا ایک نتیجہ ہے، جس کا اطلاق تمام متماثل فرمیان پر ہوگا۔

^۵bosons
^۶fermions

^۷اضافیت کے اثرات۔ یہاں پائے جہانا عجیب سی بات ہے۔

^۸یاد رہے کہ میں چکر کو نظریہ انداز کر رہا ہوں؛ اگر آپ کو اس سے الجھن ہو (کیوں کہ بغیر چکر فرمیان خود ایک تضاد ہے)، مندرجہ کریں تمام الیکٹران کے چکر ایک جیسے ہیں۔ میں جہلہ چکر کو بھی شامل کروں گا۔

^۹Pauli exclusion principle

میں نے دلائل پیش کرنے کے نقطہ نظر سے فرض کیا تھا کہ ایک ذرہ حال ψ_a اور دوسرا حال ψ_b میں پایا جاتا ہے، تاہم اس مسئلہ کو زیادہ عمومی (اور زیادہ نفیس) طریقے سے وضع کیا جاسکتا ہے۔ ہم عامل مبادلہ P ، متعارف کرتے ہیں جو دو ذرات کا باہمی مبادلہ کرتا ہے۔

$$Pf(r_1, r_2) = f(r_2, r_1) \quad (5.12)$$

صاف ظاہر ہے کہ $P^2 = 1$ ہوگا لہذا (تصدیق کریں کہ) P کی امتیازی امتداد ± 1 ہوں گی۔ اب اگر یہ دونوں ذرات متماثل ہوں، تب لازماً ہیملٹنی ان کے ساتھ ایک جیسا رویہ برتے گا: $m_1 = m_2$ اور $V(r_1, r_2) = V(r_2, r_1)$ ۔ اس طرح P اور H ہم آہنگ متبادل مشاہدہ ہوں گے:

$$[P, H] = 0 \quad (5.13)$$

لہذا ہم دونوں کے بیک وقت امتیازی حالات کے تفاسلوں کا مکمل سلسلہ معلوم کر سکتے ہیں۔ دوسرے لفظوں میں ہم زیر مبادلہ، مساوات شروڈنگر کے ایسے حل تلاش کر سکتے ہیں جو یا تشاکلی (امتیازی عدد $+1$) یا غیر تشاکلی (امتیازی عدد -1) ہوں۔

$$\psi(r_1, r_2) = \pm \psi(r_2, r_1) \quad (5.14)$$

مزید، ایک نظام جو اس طرح کے حال سے آغاز کرے، اسی حال میں برقرار رہتا ہے۔ متماثل ذرات کا نیافت عدد (جس کو میں ضرورتاً **تشاکلیت** کہتا ہوں) کے تحت تقاسم عمل مون کو مساوات ۵.۱۴ پر صرف پورا اترنے کی اجازت نہیں بلکہ اس پر لازم ہے کہ وہ اس مساوات کو مطمئن کرتا ہو؛ بوسن کے لئے مثبت علامات اور فرمیان کے لئے منفی علامات ہوگی۔^{۱۲} یہ ایک عمومی فترہ ہے جس کی ایک مخصوص صورت مساوات ۵.۱۰ ہے۔

مثال ۵.۱: فرض کریں ایک لامتناہی چوکور کنویں (۲.۲) میں کیمیت m کے باہم غیر متعامل دو ذرات (جو ایک دوسرے کے اندر سے گزر سکتے ہوں) پائے جاتے ہیں؛ آپکو منکر کرنے کی ضرورت نہیں کہ عملاً ایسا کیسے کیا جاسکتا ہے ایک ذروی حالات درج ذیل ہوں گے (جہاں اپنی سہولت کے لئے ہم $K \equiv \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ لیتے ہیں)۔

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad E_n = n^2 K$$

exchange operator^{۱۰}
symmetrization requirement^{۱۱}

^{۱۲} بعض اوقات اشارہ دیا جاتا ہے کہ P اور H کے باہمی متعلق ہونا ضرورتاً تشاکلیت (مساوات ۵.۱۴) کی پشت پر ہے۔ یہ بالکل غلط ہے؛ ہم دو متبادل ممیز ذرات (مثلاً ایک الیکٹران اور ایک ضد الیکٹران) کا ایسا نظام تصور کر سکتے ہیں جس کا ہیملٹنی تشاکلی ہو، جس کے باوجود تقاسم عمل مون کا تشاکلی (یا غیر تشاکلی) ہونے کی ضرورت نہیں پائی جاتی۔ اس کے برعکس متماثل ذرات کو لازماً تشاکلی یا غیر تشاکلی حالات کا مکمل ہونا ہوگا، اور یہ بالکل نیابتی امتداد ہے؛ جو مساوات شروڈنگر اور شماریاتی مفہوم جتنی اہمیت کا حامل ہے۔ اب، ایسا ضروری نہیں تھا کہ متماثل ذرات پائے جاتے؛ ایسا ہو سکتا تھا کہ ہر دو ذروں کے بیچ تمیز کرنا ممکن ہوتا۔ کوانٹائی میکانیات متماثل ذرات کے امکان کی اجازت دیتی ہے، اور فترت نے اس موقع کو ہاتھ سے جانے نہیں دیا۔ مجھے کوئی شکوہ نہیں ہے، چونکہ اس سے چیزیں نہایت آسان ہو جاتی ہیں!

باب ۵: متماثل ذرات

متماثل ممیز ذرات کی صورت میں، جب ذرہ 1 حال n_1 میں اور ذرہ 2 حال n_2 میں ہو، مرکب تقاعسل موج سادہ حاصل ضرب:

$$\psi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \psi_{n_1}(x_1) \psi_{n_2}(x_2), \quad E_{n_1 n_2} = (n_1^2 + n_2^2)K.$$

ہوگا۔ مثال کے طور پر زمینی حال:

$$\psi_{11} = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right), \quad E_{11} = 2K$$

ہوگا، اور پہلا ہیجان حال دو چند انحطاطی:

$$\psi_{12} = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right), \quad E_{12} = 5K,$$

$$\psi_{21} = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right), \quad E_{21} = 5K$$

ہوگا، وغیرہ، وغیرہ۔ دونوں ذرات متماثل بوسن ہونے کی صورت میں زمینی حال تبدیل نہیں ہوگا، تاہم پہلا ہیجان حال:

$$\frac{\sqrt{2}}{a} \left[\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right) \right]$$

(جس کی توانائی اب بھی $5K$ ہوگی) غیر انحطاطی ہوگا۔ اور اگر ذرات متماثل فرمیون ہوں، تب $2K$ توانائی کا کوئی بھی حال نہیں ہوگا؛ زمینی حال جس کی توانائی $5K$ ہوگی درج ذیل ہوگا۔

$$\frac{\sqrt{2}}{a} \left[\sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right) - \sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{\pi x_2}{a}\right) \right],$$

□

سوال ۵.۴:

ا. اگر ψ_a اور ψ_b عمودی ہوا اور دونوں معمول شدہ ہوں، تب مساوات ۵.۱۰ میں مستقل A کیا ہوگا؟

ب. اگر $\psi_a = \psi_b$ ہو (اور یہ معمول شدہ ہوں)، تب A کیا ہوگا؟ (یہ صورت صرف بوسن کیلے ممکن ہے۔)

سوال ۵.۵:

ا. لامتناہی چوکور کنویں میں باہم غیر متعاضل دو متماثل ذرات کا ہیملٹنی لکھیں۔ تصدیق کریں کہ مثال ۵.۱ میں دیے گئے فرمیون کے زمینی حال H کا مناسب امتیازی فتر والا امتیازی تقاعسل ہوگا۔

ب. مثال ۵.۱ میں دیے گئے ہیجان حالات سے اگلے دو تقاعسل موج اور توانائیاں، تینوں صورتوں (متماثل ممیز، متماثل بوسن، متماثل فرمیون) میں ہر ایک کے لئے حاصل کریں۔

۵.۱.۲ قوت مبادلہ

میں ایک سادہ یک بُعدی مثال کے ذریعہ آپ کو ضرورت تشاکلیت کی وضاحت کرنا چاہتا ہوں۔ فرض کریں ایک ذرہ حال $\psi_a(x)$ میں اور دوسرا حال $\psi_b(x)$ میں ہے، اور یہ دونوں حالات عمودی اور معمول شدہ ہیں۔ اگر دونوں ذرات متبادل ممیز ہوں، اور ذرہ 1 حال ψ_a میں ہو تب ان کا مجموعی تفعل موج

$$\psi(x_1, x_2) = \psi_a(x_1)\psi_b(x_2) \quad (۵.۱۵)$$

ہوگا: اگر یہ متبادل بوسن ہوں تب ان کا مرکب تفعل موج (معمول زنی کے لئے سوال ۵.۴ دیکھیں) درج ذیل ہوگا

$$\psi_+(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) + \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)] \quad (۵.۱۶)$$

اور اگر یہ متبادل فرمیون ہوں تب درج ذیل ہوگا۔

$$\psi_-(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)] \quad (۵.۱۷)$$

آئیں ان ذرات کے بیچ فاصلہ علیحدگی کے سرچ کی توقعاتی قیمت معلوم کریں۔

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - 2\langle x_1 x_2 \rangle \quad (۵.۱۸)$$

صورتے اول: قابل ممیز ذرات۔ مساوات ۵.۱۵ میں دیے گئے تفعل موج کے لئے

$$\langle x_1^2 \rangle = \int x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x^2 \rangle_a$$

(یک ذروی حال ψ_a میں x^2 کی توقعاتی قیمت)،

$$\langle x_2^2 \rangle = \int |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2^2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x^2 \rangle_b$$

اور

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \int x_1 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b$$

ہوں گی۔ یوں اس صورت درج ذیل ہوگا۔

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_d = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \quad (۵.۱۹)$$

(انتفاقی جواب ذرہ 1 حال ψ_b میں اور ذرہ 2 حال ψ_a میں ہونے کی صورت میں بھی حاصل ہوتا ہے۔)

صورتے دوم: متماثل ذرات۔ مساوات ۵.۱۶ اور مساوات ۵.۱۷ کے قساعات موج کے لئے

$$\begin{aligned}\langle x_1^2 \rangle &= \frac{1}{2} \left[\int x_1^2 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 \right. \\ &\quad + \int x_1^2 |\psi_b(x_1)|^2 dx_1 \int |\psi_a(x_2)|^2 dx_2 \\ &\quad \pm \int x_1^2 \psi_a(x_1)^* \psi_b(x_1) dx_1 \int \psi_b(x_2)^* \psi_a(x_2) dx_2 \\ &\quad \left. \pm \int x_1^2 \psi_b(x_1)^* \psi_a(x_1) dx_1 \int \psi_a(x_2)^* \psi_b(x_2) dx_2 \right] \\ &= \frac{1}{2} [\langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b \pm 0 \pm 0] = \frac{1}{2} (\langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b)\end{aligned}$$

اور بالکل اسی طرح درج ذیل ہوگا۔

$$\langle x_2^2 \rangle = \frac{1}{2} (\langle x^2 \rangle_b + \langle x^2 \rangle_a)$$

(ظاہر ہے $\langle x_2^2 \rangle = \langle x_1^2 \rangle$ ہوگا کیونکہ آپ ان میں تمیز نہیں کر سکتے۔)

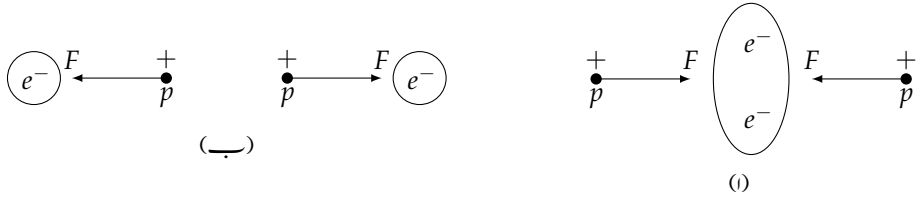
$$\begin{aligned}\langle x_1 x_2 \rangle &= \frac{1}{2} \left[\int x_1 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 \right. \\ &\quad + \int x_1 |\psi_b(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_a(x_2)|^2 dx_2 \\ &\quad \pm \int x_1 \psi_a(x_1)^* \psi_b(x_1) dx_1 \int x_2 \psi_b(x_2)^* \psi_a(x_2) dx_2 \\ &\quad \left. \pm \int x_1 \psi_b(x_1)^* \psi_a(x_1) dx_1 \int x_2 \psi_a(x_2)^* \psi_b(x_2) dx_2 \right] \\ &= \frac{1}{2} (\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b + \langle x \rangle_b \langle x \rangle_a \pm \langle x \rangle_{ab} \langle x \rangle_{ba} \pm \langle x \rangle_{ba} \langle x \rangle_{ab}) \\ &= \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \pm |\langle x \rangle_{ab}|^2\end{aligned}$$

جہاں درج ذیل ہے۔

$$(5.20) \quad \langle x \rangle_{ab} \equiv \int x \psi_a(x)^* \psi_b(x) dx$$

ظاہر ہے کہ درج ذیل ہوگا۔

$$(5.21) \quad \langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{\pm} = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2 \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \mp 2 |\langle x \rangle_{ab}|^2$$



شکل ۱.۵: شریک گرہنی بندھ کی نقشہ کشی: (ا) تشاکلی تفکیک قوت کشش پیدا کرتی ہے، (ب) خلاف تشاکلی تفکیک قوت دفع پیدا کرتی ہے۔

ساوات ۱۹.۵ اور مساوات ۲۱.۵ کا موازنہ کرتے ہوئے ہم دیکھ سکتے ہیں کہ منفرق صرف آخری جزو میں پایا جاتا ہے۔

$$(۵.۲۲) \quad \underbrace{\langle (\Delta x)^2 \rangle_{\pm}}_{\text{متماثل}} = \underbrace{\langle (\Delta x)^2 \rangle_d}_{\text{متماثل میسر}} \underbrace{\mp 2|\langle x \rangle_{ab}|^2}_{\text{منفرق}}$$

متماثل میسر ذرات کے لحاظ سے متماثل بوسن (بالائی علامتیں) ایک دوسرے کے نسبتاً متریب جبکہ متماثل منفرمیان (زیریں علامتیں) ایک دوسرے سے نسبتاً دور ہوں گے (جہاں ذرات ایک جیسے دو حالات میں ہوں)۔ دھیان رہے کہ جب تک یہ دو تفاعلات موج ایک دوسرے پر منطبق نہ ہوں، $\langle x \rangle_{ab}$ صفر ہوگا (غیر صفر $\psi_b(x)$ کی صورت میں جب بھی $\psi_a(x)$ صفر ہو تب مساوات ۲۰.۵ میں عمل کی قیمت صفر ہوگی)۔ یوں اگر کراچی میں ایک جوہر کے اندر الیکٹران کو ψ_a سے ظاہر کیا گیا ہو، جبکہ صوابی (میرے آبائی ضلع) میں ایک جوہر کے اندر الیکٹران کو ψ_b سے ظاہر کیا گیا ہو، تب تفاعل موج کو غیر تشاکلی بنانے یا نہ بنانے سے کوئی منفرق نہیں پڑے گا۔ یوں عملی نقطہ نظر سے ایسے الیکٹران جن کے تفاعلات موج غیر منطبق ہوں، ان کو آپ متماثل میسر تصور کرنے کا ڈھونگ رہا سکتے ہیں۔ (یقیناً اسی کی بنا پر ماہر طبیعیات اور کیمیا دان آگے بڑھ سکتے ہیں چونکہ اصولاً کائنات میں ہر ایک الیکٹران باقی تمام کے ساتھ، ان کے تفاعلات موج کی عدم تشاکلیت کے ذریعہ، جڑا ہے اور اگر یہ واقعی اہمیت کا حامل ہوتا تب تمام کائنات کے الیکٹرانوں کی بات کے بغیر ہم کسی ایک الیکٹران کی بات کرنے سے قاصر ہوتے!)

دلچسپ صورت تب پیدا ہوتی ہے جب ان کے تفاعلات موج حبزوی منطبق ہوں۔ ایسی صورت میں نظام کا رویہ کچھ یوں ہوگا جیسے متماثل بوسن کے بیچ ”قوت کشش“ پائی جاتی ہو، جو انہیں متریب کھینچتی ہے، اور متماثل منفرمیان کے بیچ ”قوت دفع“ پائی جاتی ہو، جو انہیں ایک دوسرے سے دور دھکا دیتی ہے (یاد رہے کہ ہم فی الحال چکر کو نظر انداز کر رہے ہیں)۔ ہم اس کو قوت مبادلہ^{۱۳} کہتے ہیں اگرچہ یہ حقیقتاً ایک قوت نہیں ہے؛ کوئی بھی چیز ان ذرات کو دھکیل نہیں رہی ہے؛ یہ صرف ضرورت تشاکلیت کا ہمدی نتیجہ ہے۔ ساتھ ہی یہ کوانٹائی میکانی مظہر ہے جس کا کلاسیکی میکانیات میں کوئی مائل نہیں پایا جاتا۔ بہر حال اس کے دور رس نتائج پائے جاتے ہیں۔ مثلاً، ہائیڈروجن سالہ (H₂) پر غور کریں۔ اندازاً بات کرتے ہوئے، جوہری زمینی حال (مساوات ۲۰.۸) جس کا مرکز مرکزہ 1 پر واقع ہے، میں ایک الیکٹران اور جوہری زمین حال جس کا مرکز مرکزہ 2

^{۱۳} exchange force

پرواقع ہے، میں ایک الیکٹران پر زمینی حال مشتمل ہوگا۔ اگر الیکٹران بوسن ہوتے تب ضرورت تشاکلیت (یا "قوت مبادلہ"، اگر آپ اسے پسند کرتے ہیں) کو شش کرتی ہے کہ دونوں پروٹان کے بیچ الیکٹرانوں کو جمع کرے (شکل ۵.۱-۱)۔ نتیجتاً منفی بار کا انبار دونوں پروٹان کو اندر کی طرف ایک دوسرے کی جانب کھینچتا ہے، جو شریکے گریفٹ ہندھ^{۱۳} کا سبب بنتا۔^{۱۵} بد قسمتی سے الیکٹران درحقیقت مندرمیان ہیں نہ کہ بوسن جس کی بنا پر منفی بار اطراف پر انبار ہوگا (شکل ۵.۱-ب) جو سالہ کو ٹکڑے ٹکڑے کر دے گا!

ذرات کی گاہ! ہم اب تک چکر کو نظر انداز کرتے رہے ہیں۔ الیکٹران کا مقناطی تفاعل موج اور چکر دار (جو الیکٹران کے چکر کی سمت بندی کو بیان کرتا ہے) مل کر اس کا (درج ذیل) مکمل حال دیں گے۔^{۱۶}

(۵.۲۳)

$$\psi(\mathbf{r})\chi(s)$$

دو الیکٹران حال مرتب کرتے ہوئے ہمیں مبادلہ کے لحاظ سے صرف فضائی جزو کو عدم تشاکلی نہیں بلکہ مکمل حال کو عدم تشاکلی بنانا ہوگا۔ مرکب چکری حالات (مساوات ۴.۱۷ اور مساوات ۴.۱۷۸) پر نظر ڈالتے ہوئے ہم دیکھتے ہیں کہ ایک تاملاپ خلاف تشاکلی ہے (ابنذا اس کو تشاکل فضائی تفاعل کے ساتھ جوڑنا ہوگا) جبکہ تینوں نہ تاحالات تشاکلی ہیں (ابنذا انہیں خلاف تشاکل فضائی تفاعل کے ساتھ منسلک کرنا ہوگا)۔ ظاہر ہے کہ یوں ایک تاحال بندھ پیدا کرے گا جبکہ نہ تاحال خلاف بندھ ہوگا۔ یقیناً کیمیا دان ہمیں بتاتے ہیں کہ شریک گریفٹ ہندھ کے لئے ضروری ہے کہ دونوں الیکٹران ایک تاحال کے مکین ہوں اور ان کا کل چکر صفر ہو۔^{۱۷}

سوال ۵.۲: لامتناہی پوکر کنویں میں دو غیر متعامل ذرات جن میں سے ہر ایک کی کیت m ہے پائے جاتے ہیں۔ ان میں سے ایک حال ψ_n (مساوات ۲.۲۸) اور دوسرا حال ψ_ℓ ($\ell \neq n$) میں ہے۔ $\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle$ کا حساب اس صورت لگائیں جب (الف) ذرات غیر متقابل ممیز ہوں، (ب) ذرات متقابل بوسن ہوں اور (ج) ذرات متقابل مندرمیان ہوں۔

سوال ۵.۷: فرض کریں آپ کے پاس تین ذرات ہیں جن میں سے ایک حال ψ_a ، دوسرا حال ψ_b ، اور تیسرا حال ψ_c میں پایا جاتا ہے۔ حالات ψ_a ، ψ_b ، اور ψ_c کو معیاری عمودی تصور کرتے ہوئے (مساوات ۵.۱۶، ۵.۱۷ اور ۵.۱۸ کی طرز پر) تین ذرہ حالات تیار کریں جو (الف) متقابل ممیز ذرات، (ب) متقابل بوسن اور (ج) متقابل مندرمیان کو ظاہر کرتے ہوں۔ یاد رہے کہ کسی بھی دو ذرات کی جوڑی کے باہمی مبادلہ کے لحاظ سے (ب) کو مکمل طور پر تشاکلی ہونا ہوگا، جبکہ (ج) کو مکمل طور پر خلاف تشاکلی ہونا ہوگا۔ تبصرہ: مکمل طور پر خلاف تشاکلی تفاعلات موج تیار کرنے کا ایک بہترین طریقہ پایا جاتا ہے۔^{۱۸} مقلع سلیر^{۱۸} تیار کریں جس کی پہلی صف $\psi_a(x_1)$ ، $\psi_b(x_1)$

covalent bond^{۱۹}

^{۱۵} مسراکزہ کے بیچ شراکتی الیکٹران جمع ہو کر جوہروں کو مشرب کھینچ کر شریک گریفٹ ہندھ پیدا کرتے ہیں۔ اس کے لئے دو عدد الیکٹران لازمی نہیں۔ ہم حصہ ۷.۳ میں صرف ایک الیکٹران پر مبنی شریک گریفٹ ہندھ دیکھیں گے۔

^{۱۶} چکر اور مقام کے بیچ عدم ارتباط کی صورت میں ہم فرض کر سکتے ہیں کہ چکر اور فضائی محدود میں حال کو علیحدہ کرنا ممکن ہے۔ اس سے مسرا دیہ ہے کہ ہم میدان چکر حاصل کرنے کا احتمال، ذرے کے مقام پر منحصر نہیں ہوگا۔ ارتباط کی موجودگی میں عمومی حال، سوال ۵.۵ کی طرز پر، خطی ملاپ $\psi_+(r) + \psi_-(r)$ کا روپ اختیار کرے گا۔

^{۱۷} اے اعلیٰ میں ہم عموماً کہتے ہیں کہ الیکٹران ایک دوسرے کے مختلف صنف بند ہیں (ایک ہم میدان اور دوسرا خلاف میدان)۔ یہ ضرورت سے زیادہ سادہ صورت ہوگی چونکہ یہی کچھ $m = 0$ نہ تاحال کے بارے میں بھی کہا جاسکتا ہے۔ درست فقرہ یہ ہوگا: "دو ایک تاشکیل میں ہیں۔"

Slater determinant^{۱۸}

، $\psi_c(x_1)$ ، وغیرہ ہوگی، اس کی دوسری صنف $\psi_a(x_2)$ ، $\psi_b(x_2)$ ، $\psi_c(x_2)$ ، وغیرہ ہوگی اور اسی طرح اس کے باقی صنف ہوں گے (یہ طریقہ کسی بھی تعداد کے ذرات کیلئے کارآمد ہے)۔

۵.۲ جوہر

ایک معادل جوہر جس کا جوہری عدد Z ہو، ایک بھاری مرکزہ جس کا بار Ze ہو اور جس کو (کمیت m اور بار e کے) Z الیکٹران گھیرتے ہوں پر مشتمل ہوگا۔ اس نظام کا ہیمیلٹنی درج ذیل ہوگا۔^{۱۹}

$$(۵.۲۴) \quad H = \sum_{j=1}^Z \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_j^2 - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{Ze^2}{r_j} \right\} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right) \sum_{j \neq k}^Z \frac{e^2}{|r_j - r_k|}$$

قوسین میں بند جزو، مرکزہ کے برقی میدان میں j ویں الیکٹران کی حرکت کی توانائی جمع مخفی توانائی کو ظاہر کرتا ہے؛ دوسرا مجموعہ (جو مساوی $k = j$ ، تمام j اور k پر لیا گیا ہے) الیکٹرانوں کی باہمی قوت دفع سے وابستہ مخفی توانائی کو ظاہر کرتا ہے (جہاں $\frac{1}{2}$ اس حقیقت کو درست کرتا ہے کہ مجموعہ لیتے ہوئے ہر جوڑی کو دوبار گنا گیا ہے)۔ ہمیں تقاضا عمل موج $\psi(r_1, r_2, \dots, r_Z)$ کیلئے درج ذیل مساوات ضرور ڈنگر:

$$(۵.۲۵) \quad H\psi = E\psi$$

حل کرنی ہوگی۔ البتہ الیکٹران متناثر فرم میان ہیں، لہذا، تمام حل متبادل قبول نہیں ہوں گے: صرف وہ حل متبادل قبول ہوں گے جن میں مکمل حال (مقام اور چکر):

$$(۵.۲۶) \quad \psi(r_1, r_2, \dots, r_Z) \chi(s_1, s_2, \dots, s_Z),$$

کسی بھی دو الیکٹران کے باہمی مبادلہ کے لحاظ سے خلاف تشاکلی ہو۔ بالخصوص کوئی بھی دو الیکٹران ایک ہی حال کے ممکن نہیں ہو سکتے ہیں۔

بد قسمتی سے مساوات ضرور ڈنگر کو مساوات ۵.۲۴ میں دی گئی ہیمیلٹنی کے لئے، مساوی سادہ ترین صورت $Z = 1$ (ہائیڈروجن)، ٹھیک حل نہیں کیا جاسکتا ہے (کم از کم آج تک کوئی بھی ایسا نہیں کر پایا ہے)۔ عملاً ہمیں پیچیدہ تخمینی تراکیب استعمال کرنے ہوں گے۔ ان میں سے چند ایک تراکیب پر اگلے ابواب میں غور کیا جائے گا: ابھی میں الیکٹران کی قوت دفع کو مکمل نظر انداز کرتے ہوئے حلوں کا کئی تجزیہ پیش کرنا چاہوں گا۔ حصہ ۵.۲.۱ میں ہم ہیلیم کے زمینی حال اور ہیجان حالات پر غور کریں گے جبکہ حصہ ۵.۲.۲ میں ہم زیادہ بڑے جوہر کے زمینی حالات پر غور کریں گے۔

^{۱۹} مرکزہ کو ساکن تصور کیا گیا ہے۔ مرکزہ کی حرکت کو تخفیف شدہ کمیت (سوال ۵.۱) کے ذریعہ شامل کرنا صرف دو جسی نظام کے لئے ممکن ہے؛ خوش قسمتی سے مرکزہ کی کمیت الیکٹران کی کمیت سے اتنی زیادہ ہوتی ہے کہ درکار درستگی، ہائیڈروجن کے لئے بھی، متبادل نظر انداز ہوتی ہے (سوال ۵.۲-۵.۱ دیکھیں)، اور زیادہ بھاری جوہروں کے لئے یہ مزید کم ہوگی۔ مرکزہ کی مستحالی جسامت، اضافیتی درستگیاں اور الیکٹران چکر کے ساتھ وابستہ مقناطیسی باہم عمل کے زیادہ دلچسپ اثرات پائے جاتے ہیں۔ ان پر آنے والے ابواب میں غور کیا جائے گا، تاہم یہ تمام ”خالص کولب“ جوہر، جسے مساوات ۵.۲۴ بیان کرتی ہے، میں انتہائی چھوٹی درستگیاں ہیں۔

سوال ۵.۸: فرض کریں مساوات ۵.۲۴ میں دی گئی ہیمیلٹنی کے لیے آپ مساوات شرودنگر (مساوات ۵.۲۵) کا حل $(\psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_Z))$ حاصل کر سکتے ہیں۔ آپ اسے ایک ایسا مکمل تشاکلی تفاعل اور ایک مکمل حائل تشاکلی تفاعل کس طرح بنائیں گے جو مساوات شرودنگر کو اسی توانائی کے معطین کرتا ہو۔

۵.۲.۱ ہیلیم

ہائیڈروجن کے بعد سب سے سادہ جوہر ہیلیم ($Z = 2$) ہے۔ اس کا ہیمیلٹنی

(۵.۲۷)

$$H = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2e^2}{r_1} \right\} + \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2e^2}{r_2} \right\} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|r_1 - r_2|}$$

(۲e مرکزہ کے) دو ہائیڈروجنی ہیمیلٹنی، ایک الیکٹران 1 اور ایک الیکٹران 2، کے ساتھ دو الیکٹران کے بیچ توانائی دفع پر مشتمل ہوگا۔ یہ آخری جزو ہماری پریشانیوں کا سبب بنتا ہے۔ اس کو نظر انداز کرتے ہوئے مساوات شرودنگر متابل علیحدگی ہوگی اور اس کے حلوں کو نصف بوہر داس (مساوات ۴.۷۲) اور چارگن بوہر توانائیوں (مساوات ۴.۷۰) [و جب سمجھ نہ آنے کی صورت میں سوال ۴.۱۶ پر دوبارہ نظر ڈالیں] کے ہائیڈروجن تفاعلات موج کے حاصل ضرب:

(۵.۲۸)

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_{n\ell m}(r_1) \psi_{n'\ell' m'}(r_2)$$

کی صورت میں لکھا جاسکتا ہے۔ کل توانائی درج ذیل ہوگی جہاں $E_n = -13.6/n^2 \text{ eV}$ ہوگا۔

(۵.۲۹)

$$E = 4(E_n + E_{n'})$$

بالخصوص زمینی حال

(۵.۳۰)

$$\psi_0(r_1, r_2) = \psi_{100}(r_1) \psi_{100}(r_2) = \frac{8}{\pi a^3} e^{-2(r_1+r_2)/a}$$

ہوگا (مساوات ۴.۸۰ دیکھیں) اور اس کی توانائی درج ذیل ہوگی۔

(۵.۳۱)

$$E_0 = 8(-13.6 \text{ eV}) = -109 \text{ eV}$$

چونکہ ψ_0 تشاکلی تفاعل ہے لہذا چپکری حال کو حائل تشاکلی ہونا ہوگا اور یوں ہیلیم کا زمینی حال ایک تاشکیل میں ہوگا، جس میں چپکری حال کے ”مخالف صفت بند“ ہوں گے۔ یقیناً حقیقت میں ہیلیم کا زمینی حال ایک تاشکی ہے، تاہم اس کی تجرباتی حاصل توانائی -78.975 eV ہے جو مساوات ۵.۳۱ سے کافی مختلف ہے۔ یہ زیادہ حیرت کی بات نہیں ہے: ہم نے الیکٹران کی توانائی دفع کو مکمل طور پر نظر انداز کیا جو چھوٹی

مقدار نہیں ہے۔ یہ ایک مثبت مقدار (مساوات ۵.۲۷ دیکھیں) ہے جس کو شامل کرتے ہوئے کل توانائی کم ہو کر 109 eV کی بجائے 79 eV ہو جائے گی (سوال ۵.۱۱ دیکھیں)۔

ہیلیم کے ہیجان حالات:

$$\psi_{nlm}\psi_{100} \quad (۵.۳۲)$$

ہائیڈروجنی زمینی حال میں ایک الیکٹران اور ہیجان حال میں دوسرے الیکٹران، پر مشتمل ہوگا۔ [دونوں الیکٹران کو ہیجان حالات میں ڈالنے سے ایک الیکٹران فوراً زمینی حال میں واپس گر کر توانائی خارج کرتا ہے، جو دوسرے الیکٹران کو جوہر سے باہر استمراریہ ($E > 0$) میں دھکیلتا ہے، اور یوں ایک آزاد الیکٹران اور ہیلیم باردار (He^+) حاصل ہوگا۔ یہ بذات خود ایک دلچسپ نظام ہے جس پر ہم یہاں بات نہیں کر رہے ہیں؛ سوال ۵.۹ دیکھیں] ہم ہمیشہ کی طرح تشاکلی اور خلاف تشاکلی ملاپ تیار کر سکتے ہیں (مساوات ۵.۱۰)؛ اول الذکر خلاف تشاکلی چکر تشکیل (یک تا) کے ساتھ جائے گا، جنہیں نزد ہیلیم^{۲۰} کہتے ہیں، جبکہ موخر الذکر کو تشاکلی چکر تشکیل (سہ تا) درکار ہوگی اور انہیں ہیلیم پر سٹے^{۲۱} کہتے ہیں۔ زمینی حال لازماً نزد ہیلیم ہوگا؛ جبکہ ہیجان حالات دونوں روپ میں پائے جاتے ہیں۔ جیسا ہم نے حصہ ۵.۱.۲ میں دریافت کیا، تشاکلی فصائی حال الیکٹرانوں کو متعرب لاتا ہے، جس کی بنا پر ہم توقع کرتے ہیں کہ نزد ہیلیم کی باہم متعامل توانائی زیادہ ہوگی، اور یقیناً تجربات سے تصدیق ہوتی ہے کہ ہیلیم پرست کے لحاظ سے نزد ہیلیم حالات کی توانائی زیادہ ہے (شکل ۵.۲ دیکھیں)۔

سوال ۵.۹:

ا. فرض کریں کہ آپ ہیلیم جوہر کے دونوں الیکٹران کو $n = 2$ حال میں رکھتے ہیں؛ خارجی الیکٹران کی توانائی کیا ہوگی؟

ب. ہیلیم باردار He^+ کے طیف پر (مستداری) تجزیہ کریں۔

سوال ۵.۱۰: ہیلیم کی توانائیوں کی سطح پر درج ذیل صورت میں (کیفی) تجزیہ کریں۔ (ا) اگر الیکٹران متقابل بوسن ہوتے، (ب) اگر الیکٹران متقابل ممیز ذرات ہوتے (لیکن ان کی کمیت اور بار ایک جیسے ہوں)۔ فرض کریں کہ الیکٹران کا چکر اب بھی $\frac{1}{2}$ ہے لہذا چکر کی تھیلیات یک تا اور سہ تا ہوں گے۔

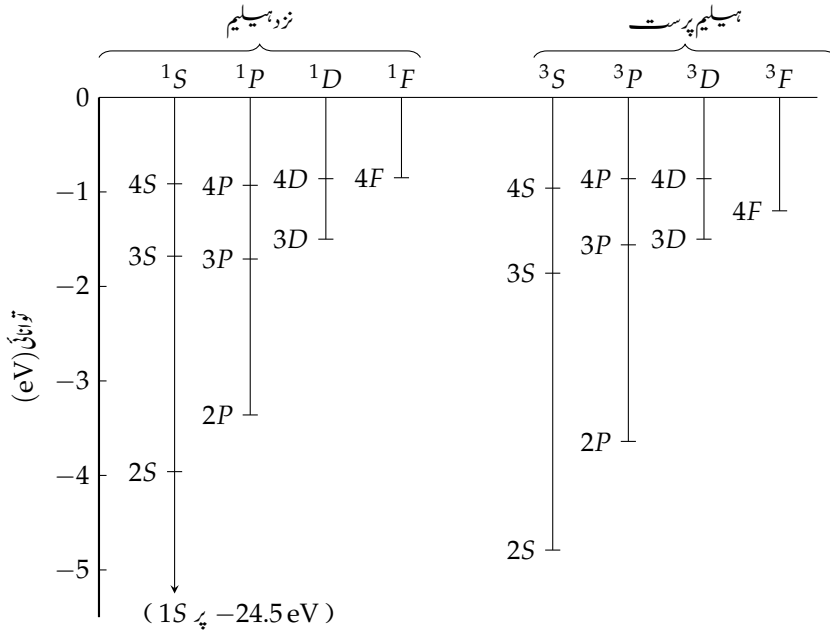
سوال ۵.۱۱:

ا. مساوات ۵.۳۰ میں دیے گئے حال ψ_0 کیلئے $\langle (1/r_1 - 1/r_2) \rangle$ کا حساب لگائیں۔ اشارہ: کرودی محدود استعمال کرتے ہوئے قطبی محور کو r_1 پر رکھیں تاکہ

$$|r_1 - r_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_2}.$$

ہو۔ پہلے r_2 کا مکمل حل کریں۔ زاویہ θ_2 کے لحاظ سے مکمل آسان ہے، بس مثبت جذر لینا یاد رکھیں۔ آپ کو r_2 مکمل دو ٹکڑوں میں تقسیم کرنا ہوگا؛ پہلا 0 سے r_1 تک اور دوسرا r_1 سے ∞ تک۔ جواب: $\frac{5}{4a}$

parahelium^{۲۰}
orthohelium^{۲۱}



شکل ۵.۲: ہیلیم کی توانائیوں کے سطح (علاقیت کی وضاحت حصہ ۵.۲.۲ کی گئی ہے)۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ نزد ہیلیم کی توانائیاں مطابقتی ہیلیم پرست سے زیادہ ہیں۔ انتہائی پیچیدہ باردارہ ہیلیم کے زمینی حال $(\text{He}^+ : 4 \times (-13.6)\text{eV} = -54.4\text{eV})$ کے لحاظ سے ہیں؛ کسی بھی حال کی کل توانائی جاننے کی خاطر 54.4eV منفی کریں۔

ب۔ جزو-۱ کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے ہیلیم کے زمینی حال میں الیکٹران کی باہمی متعادل توانائی کا اندازہ لگائیں۔ اپنے جواب کو الیکٹران وولٹ کی صورت میں پیش کریں اور اس کو E_0 (مساوات ۵.۳۱) کے ساتھ جمع کر کے زمینی حال توانائی کی بہتر تخمینہ حاصل کریں۔ اس کا موازنہ تجرباتی قیمت کے ساتھ کریں۔ (دھیان رہے کہ اب بھی آپ تخمینہ تفاعل موج کے ساتھ کام کر رہے ہیں، لہذا آپ کا جواب ٹھیک تجرباتی جواب نہیں ہوگا۔)

۵.۲.۲ دوری جدول

بھاری جوہروں کے زمینی حال الیکٹران کی تفصیل تقریباً اسی طرح جوڑ کر حاصل کیے جاتے ہیں۔ پہلی تخمینہ میں (انکی باہمی توانائی دفع کو مکمل نظر انداز کرتے ہوئے) ہار Z_e کے مرکزہ کے کولمب مخفیہ میں یک ذروی ہائیڈروجنی حالات (n, ℓ, m) ، جنہیں مدارچے^{۲۲} کہتے ہیں، کے انفرادی الیکٹران ممکن ہوں گے۔ اگر الیکٹران بوسن (یا تابل ممیز ذرات) ہوتے تب یہ زمینی حال $(1, 0, 0)$ میں گر جاتے اور یکساں اتنا دلچسپ نہ ہوتا۔ حقیقت میں الیکٹران متماثل فرمیان ہیں، جن پر پالی اصول منعیت لاگو ہوتا ہے، لہذا کسی ایک مدارچہ کے صرف دو الیکٹران ممکن ہو سکتے ہیں (ایک ہم میدان اور ایک خلاف میدان؛ بلکہ یہ کہنا زیادہ بہتر ہوگا، کہ یک تافکلیل حال میں)۔ کسی بھی n کی قیمت کے لئے n^2 ہائیڈروجنی تفاعلات موج پائے جاتے ہیں (جن میں سے ہر ایک کی توانائی E_n ہوگی)، یوں $n = 1$ خول^{۲۳} میں دو الیکٹرانوں کی جگہ ہوگی، $n = 2$ خول میں آٹھ، $n = 3$ میں اٹھارہ، اور n ویں خول میں $2n^2$ الیکٹرانوں کی جگہ ہوگی۔ کیفی طور پر بات کرتے ہوئے دوری جدول^{۲۴} کے افقی صف، ہر ایک انفرادی خول کو بھرنے کے مترادف ہے (اگرچہ یہ پوری کہانی نہیں ہے؛ اگر ایسا ہوتا، انکی لمبائیاں 2، 8، 18، 32، 50، وغیرہ ہوتیں تاکہ 2، 8، 18، 8، 18، وغیرہ؛ ہم جلد دیکھیں گے کہ الیکٹران کا باہم دفع اس شمار کو کس طرح خراب کرتا ہے)۔

ہیلیم میں، $n = 1$ خول بھرا ہوگا، لہذا اگلے جوہر لتھیم ($Z = 3$) کو $n = 2$ خول میں ایک الیکٹران رکھنا ہوگا۔ اب $n = 2$ کے لئے $\ell = 0$ یا $\ell = 1$ ہو سکتا ہے؛ تیسرا الیکٹران ان میں سے کس ایک کا انتخاب کرے گا؟ (چونکہ جوہر توانائی n پر منحصر ہوتی ہے تاکہ ℓ پر) لہذا الیکٹران کا باہمی عمل نہ ہونے کی صورت میں ان دونوں کی توانائی ایک جیسی ہوگی۔ تاہم درج ذیل وجہ کی بنا پر الیکٹران کی توانائی دفع ℓ کی کم سے کم قیمت کی طرف داری کرتی ہے۔ زاویائی معیار حرکت الیکٹران کو بیرونی رخ دھکیلنے کی کوشش کرتا ہے اور الیکٹران جتنا زیادہ مرکزہ سے دور ہوگا اتنا مرکزہ، اندرونی الیکٹرانوں کے زیادہ پھلے^{۲۵} پر وہ^{۲۵} ہو کر اوچھل ہوگا۔ (اندازاً بات کرتے ہوئے ہم کہہ سکتے ہیں کہ اندرونی الیکٹران کو مرکزہ کا پورا بار Z_e ”نظر“ آتا ہے جب کہ بیرونی الیکٹران کو مشکل سے e سے کچھ زیادہ بار نظر آتا ہے۔) یوں کسی بھی ایک خول میں کم سے کم توانائی کا حال (یعنی دوسرے لفظوں میں سب سے سخت مقید الیکٹران) $\ell = 0$ ہوگا، اور بڑھتے ℓ کے ساتھ توانائی بڑھے گی۔ اس طرح لتھیم میں تیسرا الیکٹران مدارچہ $(2, 0, 0)$ کا مکین ہوگا۔ اگلا جوہر (بیریلیم جس کا $Z = 4$ ہے) بھی اسی حال میں ہوگا (پس اس کا چکر ”الٹ رخ“ ہوگا) لیکن بوران ($Z = 5$)

orbitals^{۲۲}
shell^{۲۲}
periodic table^{۲۲}
screened^{۲۵}

کو $l = 1$ استعمال کرنا ہوگا۔

اسی طرح چلتے ہوئے ہم نیون ($Z = 10$) کو پہنچتے ہیں جہاں $n = 2$ خول مکمل بھرا ہوگا اور ہم دوری جدول کی اگلی صف کو پہنچ کر $n = 3$ خول کو بھرنا شروع کرتے ہیں۔ اس صف کے آغاز میں دو جوہر (سوڈیم اور کلسیم) کا $l = 0$ ہے اور اس کے بعد (سلور^{۲۶} سے آرگن تک) چھ ایسے جوہر ہیں جن کا $l = 1$ ہوگا۔ آرگن کے بعد ہم ”توقع“ کرتے ہیں کہ دس ایسے جوہر پائے جائیں گے جن کے لیے $n = 3$ اور $l = 2$ ہوگا؛ البتہ یہاں پہنچ کر اندرونی الیکٹران کا مرکزہ کو پس پردہ کرنے کا اثر اشد زور پکڑتا ہے کہ اگلا خول بھی اس کے نظر ہو جاتا ہے (یعنی یہ خول بھی اوجھل ہو جاتا ہے) لہذا اپوناٹیم ($Z = 19$) اور کلسیم ($Z = 20$)، $n = 3$ ، $l = 2$ کی بجائے $n = 4$ ، $l = 0$ منتخب کرتے ہیں۔ اس کے بعد ہم دوبارہ نیچے اتر کر $n = 3$ اور $l = 2$ (اسکینڈیم تا جیست)، اور اس کے بعد $n = 4$ ، $l = 1$ (گیلیئم تا کرپٹان) اٹھاتے ہیں، اور یہاں پہنچ کر ہم دوبارہ قبل از وقت اگلی صف ($n = 5$) میں چھلانگ لگا کر بعد میں $n = 4$ خول کے $l = 2$ اور $l = 3$ بھرتے ہیں۔

یہاں جوہری حالات کے تسمیہ جس کو تمام کیمیادان اور ماہر طبیعیات استعمال کرتے ہیں پر تبصرہ کرنا ضروری ہوگا۔ اس کی وجہ شاید صرف انیسویں صدی کے طیف پیمائی کاروں کو معلوم ہوگی کہ $l = 0$ کو کیوں s کہتے ہیں، $l = 1$ کو p ، $l = 2$ کو d ، اور $l = 3$ کو کیوں f کہتے ہیں؛ میرے خیال سے اس کے بعد وہ سیدھی راہ پر آگئے اور انہوں نے لاطینی حروف تہجی کے تحت (g, h, i, j کو نظر انداز کرتے ہوئے، k, l ، وغیرہ) نام دیے۔ کسی ایک الیکٹران کے حال کو nl کی جوڑی ظاہر کرتی ہے جہاں n (عدد) حال کو اور (s حرف) l مدارچی زاویائی معیار حرکت کو ظاہر کرتا ہے، کوانٹائی عدد m کا ذکر نہیں کیا جاتا لیکن قوت نما میں حال کے ممکن الیکٹرانوں کی تعداد لکھی جاتی ہے۔ یوں درج ذیل تفصیل

$$(5, 3) \quad (1s)^2 (2s)^2 (2p)^2$$

کہتی ہے کہ مدار $(1, 0, 0)$ میں دو الیکٹران، مدار $(2, 0, 0)$ میں دو الیکٹران جبکہ مدار $(2, 1, 1)$ ، $(2, 1, 0)$ اور $(2, 1, -1)$ کے کسی ملاپ میں دو الیکٹران پائے جاتے ہیں۔ یہ درحقیقت کاربن کا زمینی حل ہے۔

اس مثال میں دو الیکٹران ایسے ہیں جن کا مدارچی زاویائی معیار حرکت کوانٹائی عدد ایک (1) ہے، لہذا کل مدارچی زاویائی معیار حرکت کوانٹائی عدد L (چھوٹے l کی بجائے بڑا L جو انفرادی ذرہ کی نہیں بلکہ کل کو ظاہر کرتا ہے) 2، 1، یا 0 ہو سکتا ہے۔ ساتھ ہی، $(1s)$ کے دو الیکٹران ایک دوسرے کے ساتھ یک تاحال بندھن میں ہیں اور ان کا کل چکر صفر ہوگا؛ یہی کچھ $(2s)$ کے دو الیکٹران کے لئے بھی ہوگا، لیکن $(2p)$ کے دو الیکٹران یا تو یک تانظام اور یا سہ تانظام میں ہوں گے۔ یوں کل چکر کوانٹائی عدد S (کل کو ظاہر کرنے کے لئے یہاں بھی بڑا حرف استعمال ہوگا) 1 یا 0 ہو سکتا ہے۔ ظاہر ہے کہ میزبان کل (مدارچی جمع چکر) J کی قیمت 3، 2، 1، یا 0 ہو سکتی ہے۔ کسی ایک جوہر کے لئے ان کل قیمتوں کو قواعد ہنڈ^{۲۸} (سوال ۵.۱۳ دیکھیں) سے حاصل کیا جاسکتا ہے۔ نتیجہ کو درج ذیل علامتی

aluminium^{۲۹}

۲۹ خول $n = 1$ کا نام K ، $n = 2$ کا نام L ، $n = 3$ کا نام M ، وغیرہ رکھے گئے۔ خولوں کے نام M سے شروع ہو کر لاطینی حروف تہجی کے ترتیب سے ہیں۔
Hund's Rules^{۲۸}

روپ میں لکھا جاسکتا ہے

$$L_J^{2S+1} \quad (۵.۳۴)$$

(جہاں S اور J اعداد جبکہ L (جو کل کوٹا ہر کرتا ہے) بڑا حرف ہوگا۔ کاربن کا زمینی حال 3P_0 ہے؛ اس کا کل چکر 1 ہے (جس کی بنا پر 3 لکھا گیا ہے)، کل مداریتی زاویائی معیار حرکت 1 ہے (لہذا P لکھا گیا ہے) اور میزان کل زاویائی معیار حرکت صفر ہے (لہذا 0 لکھا گیا ہے)۔ جدول ۱.۵ میں دوری جدول کے ابتدائی چار صف کے لئے انفرادی تھیلیات اور کل زاویائی معیار حرکت مساوات ۵.۳۴ کی روپ میں پیش کئے گئے ہیں۔^{۲۹}

سوال ۵.۱۲:

ا. دوری جدول کے ابتدائی دو صف (یون تک) کے لئے مساوات ۵.۳۴ کے روپ میں الیکٹران تھیلیات پیش کر کے ان کی تصدیق جدول ۱.۵ کے ساتھ کریں۔

ب. ابتدائی چار عناصر کے لئے مساوات ۵.۳۴ کے روپ میں مطابقتی کل زاویائی معیار حرکت تلاش کریں۔ بوران، کاربن اور نائسیٹروجن کے لئے تمام ممکنات پیش کریں۔

سوال ۵.۱۳:

ا. **ہض کا پہلا قاعدہ**^{۳۰} کہتا ہے کہ باقی چیزیں ایک جیسی ہونے کی صورت میں وہ حال جس کا کل چکر S زیادہ سے زیادہ ہو، کی توانائی کم سے کم ہوگی۔ ہیلیم کے بچبان حالات کے لیے یہ کیا پیشگوئی کرتا ہے۔

ب. **ہض کا دوسرا قاعدہ**^{۳۱} کہتا ہے کہ کسی ایک چکر کی صورت میں مجموعی طور پر خلاف تشاکلیت پر پورا اترتا ہو وہ حال جس کا زیادہ سے زیادہ کل مداریتی زاویائی معیار حرکت L ہو، کی توانائی کم سے کم ہوگی۔ کاربن کے لئے $L = 2$ کیوں نہیں ہے؟ اشارہ یاد رہے کہ ”سیڑھی کا بالائی سر“ ($M_L = L$) تشاکلی ہے۔

ج. **ہض کا تیسرا قاعدہ**^{۳۲} کہتا ہے کہ اگر ایک ذیلی خول (n, ℓ) نصف سے زیادہ بھرا نا ہو، تب کم سے کم توانائی کی سطح کے لئے $|L - S| = J$ ہوگا؛ اگر یہ نصف سے زیادہ بھرا ہو تب $J = L + S$ کی توانائی کم سے کم ہوگی۔ اس حقیقت کو استعمال کرتے ہوئے سوال ۵.۱۲۔ ب میں بوران کے مسئلہ سے شک دور کریں۔

د. قواعد بن کے ساتھ یہ حقیقت استعمال کرتے ہوئے کہ تشاکلی چکری حال کے ساتھ خلاف تشاکل مقام حال (اور خلاف تشاکل مقام حال کے ساتھ تشاکلی چکری حال) استعمال ہوگا، سوال ۵.۱۲۔ ب میں کاربن اور نائسیٹروجن میں درپیش مشکلات سے چھکارا حاصل کریں۔ اشارہ: کسی بھی حال کی تشاکلی جاننے کی خاطر ”سیڑھی کے بالائی سر“ کو دیکھیں۔

سوال ۵.۱۴: (دوری جدول کے چھٹے صف میں عنصر 66) ڈسپروزیم کا زمینی حال 5I_8 ہے۔ اس کے کل چکر، کل مدارچے، اور میزان کل زاویائی معیار حرکت کے کوانٹائی اعداد کیا ہوں گے؟ ڈسپروزیم کے الیکٹران تشکیل کا حنا کہ تجویز کریں۔

^{۲۹} کرپٹان، عنصر 36 کے بعد، صورت حال زیادہ پیچیدہ ہو جاتی ہے (حالات کے ترتیب میں مہین ساخت زیادہ بڑا کردار ادا کرنے لگتا ہے) لہذا یہ صف پر جگہ کی نہیں تھی جس کی وجہ سے جدول کو یہاں اختتام پذیر کیا گیا۔

^{۳۰} Hund's first rule

^{۳۱} Hund's second rule

^{۳۲} Hund's third rule

جدول ۱.۵: دوری جدول کے اولین چار قطاروں کے الیکٹران تشکیلات

تفصیل	عنصر	Z
$^2S_{1/2}$ (1s)	H	1
1S_0 (1s) ²	He	2
$^2S_{1/2}$ (He)(2s)	Li	3
1S_0 (He)(2s) ²	Be	4
$^2P_{1/2}$ (He)(2s) ² (2p)	B	5
3P_0 (He)(2s) ² (2p) ²	C	6
$^4S_{3/2}$ (He)(2s) ² (2p) ³	N	7
3P_2 (He)(2s) ² (2p) ⁴	O	8
$^2P_{3/2}$ (He)(2s) ² (2p) ⁵	F	9
1S_0 (He)(2s) ² (2p) ⁶	Ne	10
$^2S_{1/2}$ (Ne)(3s)	Na	11
1S_0 (Ne)(3s) ²	Mg	12
$^2P_{1/2}$ (Ne)(3s) ² (3p)	Al	13
3P_0 (Ne)(3s) ² (3p) ²	Si	14
$^4S_{3/2}$ (Ne)(3s) ² (3p) ³	P	15
3P_2 (Ne)(3s) ² (3p) ⁴	S	16
$^2P_{3/2}$ (Ne)(3s) ² (3p) ⁵	Cl	17
1S_0 (Ne)(3s) ² (3p) ⁶	Ar	18
$^2S_{1/2}$ (Ar)(4s)	K	19
1S_0 (Ar)(4s) ²	Ca	20
$^2D_{3/2}$ (Ar)(4s) ² (3d)	Sc	21
3F_2 (Ar)(4s) ² (3d) ²	Ti	22
$^4F_{3/2}$ (Ar)(4s) ² (3d) ³	V	23
7S_3 (Ar)(4s)(3d) ⁵	Cr	24
$^6S_{5/2}$ (Ar)(4s) ² (3d) ⁵	Mn	25
5D_4 (Ar)(4s) ² (3d) ⁶	Fe	26
$^4F_{9/2}$ (Ar)(4s) ² (3d) ⁷	Co	27
3F_4 (Ar)(4s) ² (3d) ⁸	Ni	28
$^2S_{1/2}$ (Ar)(4s)(3d) ¹⁰	Cu	29
1S_0 (Ar)(4s) ² (3d) ¹⁰	Zn	30
$^2P_{1/2}$ (Ar)(4s) ² (3d) ¹⁰ (4p)	Ga	31
3P_0 (Ar)(4s) ² (3d) ¹⁰ (4p) ²	Ge	32
$^4S_{3/2}$ (Ar)(4s) ² (3d) ¹⁰ (4p) ³	As	33
3P_2 (Ar)(4s) ² (3d) ¹⁰ (4p) ⁴	Se	34
$^2P_{3/2}$ (Ar)(4s) ² (3d) ¹⁰ (4p) ⁵	Br	35
1S_0 (Ar)(4s) ² (3d) ¹⁰ (4p) ⁶	Kr	36

۵.۳. ٹھوس اجسام

ٹھوس حال میں ہر جوہر کے بیرونی ڈھیلے مقید گرنی ۳۳ الیکٹران میں سے چند ایک علیحدہ ہو کر کسی مخصوص ”موروثی“ مرکزہ کے کولب میدان سے آزاد، تمام قسملی حبال کے مخفیہ کے زیر اثر حرکت کرتے ہیں۔ اس حصہ میں ہم دو انتہائی سادہ نمونوں پر غور کریں گے: پہلا نمونہ سمرفلڈ کا الیکٹران گیس نظر ہے جس میں (سرحد کے علاوہ) باقی تمام قوتوں کو نظر انداز کیا جاتا ہے اور ان الیکٹران کو (لامستثنیٰ) چوکور کنویں کے تین ابعادی مثال کی طرح ڈبلے میں آزاد ذرات تصویر کیا جاتا ہے؛ اور دو سمرانمونہ نظریہ بلون ہے جو الیکٹران کے باہمی دفع کو نظر انداز کرتے ہوئے باقاعدگی سے ایک جتنے فاصلے پر مثبت بار کے مرکزہ کی قوت کشش کو دوری مخفیہ سے ظاہر کرتا ہے۔ یہ نمونے ٹھوس اجسام کی کوانٹائی نظریہ کی طرف پہلے لڑکھڑاتے قدم ہیں، لیکن اس کے باوجود یہ ”جمود“ کے حصول میں پالی حصول مناعت کے گہرے کردار پر اور موصل، غیر موصل اور نیم موصل کی حیرت کن برقی خواص پر روشنی ڈالنے میں مدد دیتے ہیں۔

۵.۳.۱ آزاد الیکٹران گیس

فرض کرے ایک ٹھوس جسم مستطیل شکل کا ہے جس کے اضلاع ℓ_x ، ℓ_y اور ℓ_z ہیں اور اس جسم کے اندر الیکٹران پر کوئی قوت اثر انداز نہیں ہوتی، ماسوائے نامتابل گزر دیواروں کے۔

$$(۵.۳۵) \quad V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & 0 < x < \ell_x, \quad 0 < y < \ell_y, \quad 0 < z < \ell_z \\ \infty & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

ساوات شرودنگر،

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E \psi$$

کار تیزی محدود میں علیحدہ ہوتی ہے: $\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z)$ جہاں

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 X}{dx^2} = E_x X; \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Y}{dy^2} = E_y Y; \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 Z}{dz^2} = E_z Z$$

اور $E = E_x + E_y + E_z$ ہوں گے۔ اب

$$k_x \equiv \frac{\sqrt{2mE_x}}{\hbar}, \quad k_y \equiv \frac{\sqrt{2mE_y}}{\hbar}, \quad k_z \equiv \frac{\sqrt{2mE_z}}{\hbar}$$

لکھ کر درج ذیل عمومی حل حاصل ہوں گے۔

$$\begin{aligned} X(x) &= A_x \sin(k_x x) + B_x \cos(k_x x), & Y(y) &= A_y \sin(k_y y) + B_y \cos(k_y y), \\ Z(z) &= A_z \sin(k_z z) + B_z \cos(k_z z) \end{aligned}$$

سرحدی شرائط کے تحت $X(0) = Y(0) = Z(0) = 0$ لہذا $B_x = B_y = B_z = 0$ اور
 $X(\ell_x) = Y(\ell_y) = Z(\ell_z) = 0$ ہوں گے اور یوں

$$(۵.۳۶) \quad k_x \ell_x = n_x \pi, \quad k_y \ell_y = n_y \pi, \quad k_z \ell_z = n_z \pi$$

ہوں گے جہاں ہر n ایک مثبت عدد صحیح ہوگا۔

$$(۵.۳۷) \quad n_x = 1, 2, 3, \dots, \quad n_y = 1, 2, 3, \dots, \quad n_z = 1, 2, 3, \dots$$

(معمول شدہ) تناسبات موج:

$$(۵.۳۸) \quad \psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{8}{\ell_x \ell_y \ell_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{\ell_x} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{\ell_y} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{\ell_z} z\right)$$

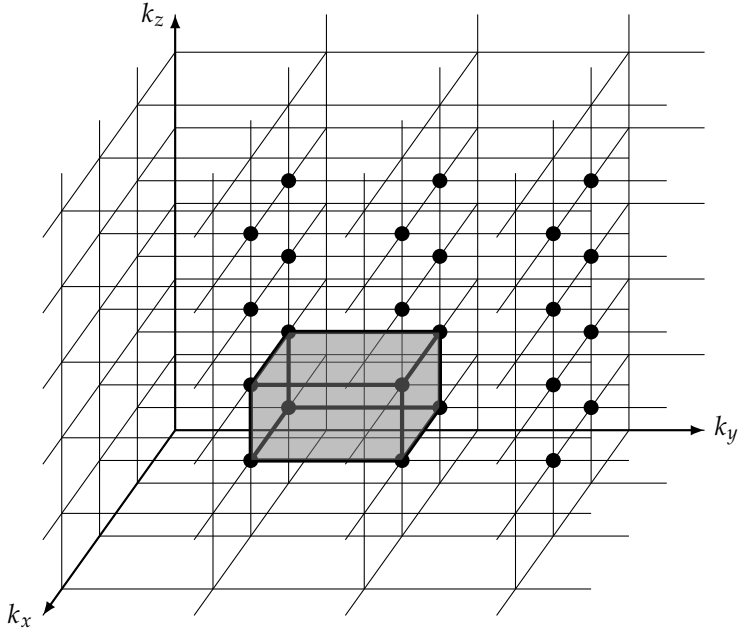
ہوں گے اور احباب زنی توانائیاں:

$$(۵.۳۹) \quad E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{\ell_x^2} + \frac{n_y^2}{\ell_y^2} + \frac{n_z^2}{\ell_z^2} \right) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

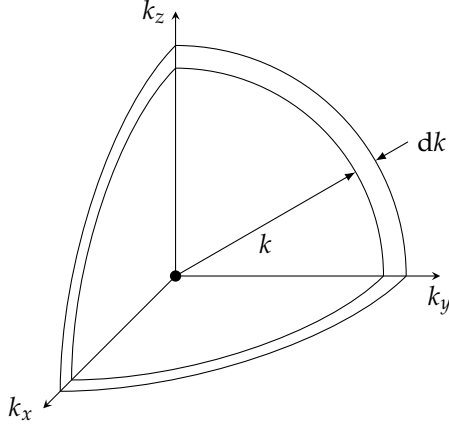
ہوں گی، جہاں سمتیہ موج $\mathbf{k} \equiv (k_x, k_y, k_z)$ کی مقدار k ہے۔

ایک تین ابعادی فضا جس کے محور k_x ، k_y ، k_z ہوں کا تصور کریں جس میں

$$\begin{aligned} k_x &= \frac{\pi}{\ell_x}, \frac{2\pi}{\ell_x}, \frac{3\pi}{\ell_x}, \dots \\ k_y &= \frac{\pi}{\ell_y}, \frac{2\pi}{\ell_y}, \frac{3\pi}{\ell_y}, \dots \\ k_z &= \frac{\pi}{\ell_z}, \frac{2\pi}{\ell_z}, \frac{3\pi}{\ell_z}, \dots \end{aligned}$$



شکل ۵.۳: آزاد الیکٹران گیس۔ حال کا ہر نقطہ تقاطع ایک ساکن حال کو ظاہر کرتا ہے۔ ایک ”ڈبا“ کو سیاہ دکھایا گیا ہے۔ ایک ڈبے کے لئے ایک حال پایا جاتا ہے۔



شکل ۵.۲: کروی خول کا k فضا میں ایک مٹھن۔

پرسیدھی سطحیں پائے جاتی ہیں؛ اس فضا میں ہر انفرادی نقطہ تقاطع، منفرد ایک ذرا سا کن حال دیگا (شکل ۵.۳)۔ اس حال کا ہر خانہ، اور یوں ہر حال، k فضا میں درج ذیل حجم گھیرے گا، جہاں پورے جسم کا حجم $V \equiv \ell_x \ell_y \ell_z$ ہے۔

$$(۵.۴۰) \quad \frac{\pi^3}{\ell_x \ell_y \ell_z} = \frac{\pi^3}{V}$$

فرض کریں مادہ کے ایک ٹکڑا میں N جوہر پائے جاتے ہوں اور ہر جوہر اپنے حصہ کے q آزاد الیکٹران دیتا ہو۔ (عملاً، کسی بھی کلاں بین جامت کے چیز کے لئے N کی قیمت بہت بڑی ہوگی، جس کی گنتی ایوگا درو عدد میں کی جائے گی؛ جبکہ q ایک چھوٹا عدد مثلاً 1 یا 2 ہوگا۔) اگر الیکٹران بوسن (یا متماثل ممیز ذرات) ہوتے تب وہ زمینی حال ψ_{111} میں سکونیت^{۳۵} اختیار کرتے۔ تاہم حقیقت میں الیکٹران متماثل مندرمیان ہیں جن پر پالی اصول مناعت کا اطلاق ہوتا ہے، لہذا کسی بھی حل کے صرف دو الیکٹران مکین ہو سکتے ہیں۔ یوں یہ الیکٹران k فضا میں رداس k_F کے کرہ کا ایک مٹھن^{۳۶} بھرتے ہیں؛ اس رداس کو اس حقیقت سے تعین کیا جاسکتا ہے کہ الیکٹران کے ہر ایک جوڑے کو $\frac{\pi^3}{V}$ حجم درکار ہوگا (مادات ۵.۴۰)۔

$$\frac{1}{8} \left(\frac{4}{3} \pi k_F^3 \right) = \frac{Nq}{2} \left(\frac{\pi^3}{V} \right)$$

^{۳۵} میں یہاں فرض کر رہا ہوں کہ ایسا کوئی حراری یا دیگر اضطرار نہیں پایا جاتا جو ٹھوس جسم کو مجموعی زمینی حال سے اٹھاتا ہو۔ میں ”ٹھنڈے“ ٹھوس جسم کی بات کر رہا ہوں، اگرچہ جیسا آپ سوال ۵.۱۶-۵.۱۷ میں دیکھیں گے، ٹھوس اجسام، رہائش درجہ حرارت سے بہت زیادہ درجہ حرارت پر بھی موجودہ نقطہ نظر سے ”ٹھنڈے“ ہوتے ہیں۔

^{۳۶} کیونکہ، N بہت بڑا عدد ہے لہذا ہمیں حال کے اصل دیتی سطح اور کرہ کی اس ہموار سطح میں مندرق کرنے کی ضرورت نہیں جو اس کو تختہ نما ظاہر کرتا ہے۔

یوں

$$k_F = (3\rho\pi^2)^{\frac{1}{3}} \quad (۵.۴۱)$$

ہوگا جہاں

$$\rho \equiv \frac{Nq}{V} \quad (۵.۴۲)$$

کثافت آزاد الیکٹرانز^۴ (اکائی حجم میں آزاد الیکٹران کی تعداد) ہے۔

k فضا میں آباد حالات (الیکٹران ان کے ممکن ہیں) اور غیر آباد حالات (الیکٹران ان کے ممکن نہیں ہیں) کی سرحد کو فرمی سطح^۵ کہتے ہیں (جس کی بنا پر زیر نوشت میں F لکھا گیا)۔ اس سطح پر طاقتی توانائی کو فرمی توانائی^۶ E_F کہتے ہیں۔ آزاد الیکٹران گیس کے لئے درج ذیل ہوگا۔

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\rho\pi^2)^{\frac{2}{3}} \quad (۵.۴۳)$$

الیکٹران گیس کی کل توانائی کو درج ذیل طریقے سے حاصل کیا جاسکتا ہے: ایک خول جس کی موٹائی dk شکل ۵.۴ ہو گا

$$\frac{1}{8} (4\pi k^2) dk$$

ہوگا، لہذا اس خول میں الیکٹران حالات کی تعداد درج ذیل ہوگی۔

$$\frac{2[(1/2)\pi k^2 dk]}{(\pi^3/V)} = \frac{V}{\pi^2} k^2 dk$$

ان میں سے ہر ایک حال کی توانائی $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (مساوات ۵.۴۹) ہے لہذا خول کی توانائی

$$dE = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{V}{\pi^2} k^2 dk \quad (۵.۴۴)$$

اور کل توانائی درج ذیل ہوگی۔

$$E_{\text{کل}} = \frac{\hbar^2 V}{2\pi^2 m} \int_0^{k_F} k^4 dk = \frac{\hbar^2 k_F^5 V}{10\pi^2 m} = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 Nq)^{5/3}}{10\pi^2 m} V^{-2/3} \quad (۵.۴۵)$$

free electron density^۴
Fermi surface^۵
Fermi energy^۶

کوانٹائی میکانی توانائی کا کردار کچھ ایسا ہی ہے جیسا سادہ گیس میں اندرونی حرارتی توانائی (U) کا ہوتا ہے۔ بالخصوص یہ دیواروں پر ایک دباؤ پیدا کرتا ہے اور اگر ڈبلے کے حجم میں dV کا اضافہ ہو تب کل توانائی میں درج ذیل کمی رونما ہوگی

$$dE_{\text{کل}} = -\frac{2}{3} \frac{\hbar^2 (3\pi^2 Nq)^{5/3}}{10\pi^2 m} V^{-5/3} dV = -\frac{2}{3} E_{\text{کل}} \frac{dV}{V}$$

جو سیرن پر کوانٹائی دباؤ P کا کیا ہوا کام ($dW = P dV$) ہوگا۔ ظاہر ہے کہ درج ذیل ہوگا۔

$$P = \frac{2}{3} \frac{E_{\text{کل}}}{V} = \frac{2}{3} \frac{\hbar^2 k_F^5}{10\pi^2 m} = \frac{(3\pi^2)^{2/3} \hbar^2}{5m} \rho^{5/3} \quad (۵.۴۶)$$

یہ اس سوال کا جزوی جواب ہے کہ ایک ٹھنڈا ٹھوس جسم اندر کی طرف منہدم کیوں نہیں ہو جاتا: ایک اندرونی کوانٹائی میکانی دباؤ توازن برقرار رکھتا ہے جس کا الیکٹران کے باہمی دفع (جنہیں ہم نظر انداز کر چکے ہیں) یا حرارتی حرکت (جس کو ہم خارج کر چکے ہیں) کے ساتھ کوئی تعلق نہیں ہے، بلکہ جو متماثل مندرمیان کی ضرورت خلاف تشاکلیت سے پیدا ہوتا ہے۔ اس کو بعض اوقات **انخطاطی دباؤ**^{۴۱} کہتے ہیں اگرچہ ”منعستی دباؤ“ بہتر اصطلاح ہوگی۔^{۴۱}

سوال ۵.۱۵: ایک آزاد الیکٹران کی اوسط توانائی $\frac{E_{\text{کل}}}{Nq}$ کو مندری توانائی کی نسبت کی صورت میں لکھیں۔ جواب: $\frac{3}{5} E_F$

سوال ۵.۱۶: تانبے کی کثافت 8.96 g cm^{-3} ہے جبکہ اس کا جوہری وزن 63.5 g mol^{-1} ہے۔

۱. مساوات ۵.۴۳ استعمال کر کے $q = 1$ لیتے ہوئے تانبے کی مندری توانائی کا حساب لگا کر نتیجہ کو الیکٹران وولٹ کی صورت میں لکھیں۔

ب. الیکٹران کی مطابقتی سمتی رفتار کیا ہوگی؟ اشارہ: $\left(\frac{1}{2}\right)mv^2 = E_F$ لیں۔ کیا تانبے میں الیکٹران کو غنیر اضافیتی تصور کرنا خطرے سے باہر ہوگا؟

ج. تانبے کے لئے کس درجہ حرارت پر امتیازی حرارتی توانائی ($k_B T$) جہاں k_B بولٹزمن مستقل اور T کیلون حرارت ہے، مندری توانائی کے برابر ہوگی؟ تبصرہ: اس کو **فرم** درجہ حرارت^{۴۲} کہتے ہیں۔ جب تک اصل درجہ حرارت مندری درجہ حرارت سے کافی کم ہو مادہ کو ”ٹھنڈا“ تصور کیا جاسکتا ہے اور اس میں الیکٹران خپلے ترین قابل پہنچ حال میں ہوں گے۔ کیونکہ تانبہ 1356 K پر پگھلتا ہے لہذا ٹھوس تانبہ ہر صورت ٹھنڈا ہوگا۔

د. الیکٹران گیس نمونہ میں تانبے کے لئے انخطاطی دباؤ (مساوات ۵.۴۶) کا حساب لگائیں۔

degeneracy pressure^{۴۳}

^{۴۱} ہم نے مساوات ۵.۴۱، مساوات ۵.۴۳، مساوات ۵.۴۵، اور مساوات ۵.۴۶ لامتناہی مستطیل جسم کے لئے اخذ کیے، تاہم یہ کسی بھی شکل کے ہر اس جسم کے لئے درست ہیں جس میں ذرات کی تعداد بہت زیادہ ہو۔

Fermi temperature^{۴۲}

سوال ۵.۱۷: کسی جسم پر دباؤ میں معمولی کمی اور نتیجتاً حجم میں نسبتی اضافہ کے تناسب کو جیم مقیاس^{۳۳} کہتے ہیں۔

$$B = -V \frac{dP}{dV}$$

دکھائیں کہ آزاد الیکٹران نمونہ میں $B = \frac{5}{3}P$ ہوگا اور سوال ۵.۱۶- دکا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے تانبے کے لئے جیم مقیاس کی اندازاً قیمت تلاش کریں۔ تبصرہ: تجربے سے حاصل قیمت $13.4 \times 10^{10} \text{ N m}^{-2}$ ہے؛ مکمل درست جواب کی توقع نہ کریں، کیونکہ ہم نے الیکٹران مرکزہ اور الیکٹران الیکٹران قوتوں کو نظر انداز کیا ہے! حقیقت میں یہ حیرانی کی بات ہے کہ حساب سے حاصل نتیجہ حقیقت کے اتنا قریب ہے۔

۵.۳.۲ پٹی دار ساخت

ہم آزاد الیکٹران نمونہ میں منظم وناصلوں پر ساکن مثبت بار کے مراکزہ کی الیکٹرانوں پر قوت کو شامل کر کے بہتر نمونہ حاصل کرتے ہیں۔ ٹھوس اجسام کاروبنایاں حد تک اس حقیقت پر مبنی ہے کہ اس کا مخفیہ دوری ہوتا ہے۔ مخفیہ کی حقیقی شکل مادہ کی تفصیلی رویہ میں کردار ادا کرتی ہے۔ یہ عمل دیکھنے کی خاطر میں سادہ ترین نمونہ تیار کرتا ہوں جسے ایک بُعدی ڈیاکے^{۳۴} کہتے ہیں اور جو برابر وناصلوں پر ڈیٹا تناسل سوزنات پر مشتمل ہوتا ہے (شکل ۵.۵)۔^{۳۵} لیکن اس سے پہلے میں ایک طاقتور مسئلہ پیش کرتا ہوں جو دوری مخفیہ کے مسائل کا حل نہایت آسان بناتا ہے۔

دوری مخفیہ سے مراد ایسا مخفیہ ہے جو کسی مستقل فاصلہ a کے بعد اپنے آپ کو دہراتا ہو۔

(۵.۴۷)

$$V(x+a) = V(x)$$

مسئلہ بلوخ^{۳۶} کہتا ہے کہ دوری مخفیہ کے لئے مساوات شرودنگر،

(۵.۴۸)

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

کے حل سے مراد وہ تناسل ایسا جاسکتا ہے جو درج ذیل شرط کو مطمئن کرتا ہو

(۵.۴۹)

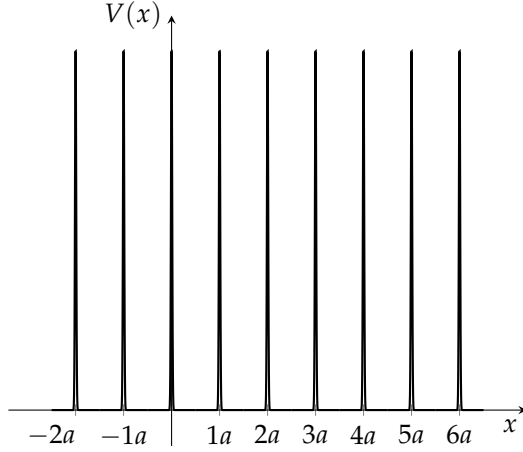
$$\psi(x+a) = e^{iKa} \psi(x)$$

bulk modulus^{۳۳}

Dirac comb^{۳۴}

^{۳۵} ڈیٹا تناسل مساوات کو نیچے رخ رکھنا زیادہ ٹھیک ہوتا، جو مراکزہ کے قوت کشش کو ظاہر کرتے؛ تاہم، ایسا کرنے سے مثبت توانائی حل کے ساتھ ساتھ منفی توانائی حل بھی حاصل ہوتے ہیں جس کی بنا پر حساب کرنا زیادہ مشکل ہو جاتا ہے (سوال ۵.۲۰ دیکھیں)۔ ہم یہاں مخفیہ کی دوریت کے اثرات میں دلچسپی رکھتے ہیں؛ بظاہر کم معقول شکل منتخب کر کے مسئلہ کا حل آسان ہوتا ہے؛ آپ تصور کر سکتے ہیں کہ مراکزہ $\pm 3a/2$ ، $\pm a/2$ ، وغیرہ پر پائے جاتے ہیں۔

Bloch's theorem^{۳۶}



شکل ۵.۵: ذرات ایک کنگھی (مساوات ۵.۵۷)۔

جہاں K ایک مستقل ہے (یہاں ”مستقل“ سے مراد ایسا تفاعل ہے جو x کا تابع نہیں ہے؛ اگرچہ یہ E کا تابع ہو سکتا ہے)۔

ثبوت: مان لیں کہ D ایک ”ہٹاؤ“ عامل ہے:

$$(۵.۵۰) \quad Df(x) = f(x+a)$$

دوری مخفیہ مساوات ۵.۴۷ کی صورت میں D ہیملٹنی کا مقلوبی ہوگا:

$$(۵.۵۱) \quad [D, H] = 0$$

لہذا ہم H کے ایسے امتیازی تفاعلات چن سکتے ہیں جو یک وقت D کے امتیازی تفاعلات بھی ہوں:

$$D\psi = \lambda\psi$$

$$(۵.۵۲) \quad \psi(x+a) = \lambda\psi(x)$$

یہاں λ کسی صورت صفر نہیں ہو سکتا (اگر ایسا ہو تب چونکہ مساوات ۵.۵۲ تمام x کے لئے مطمئن ہوگا لہذا ہمیں $\psi(x) = 0$ ملے گا جو بال مقبول امتیازی تفاعل نہیں ہے)؛ کسی بھی غیر صفر مغلوط عدد کی طرح، اس کو قوت نئی روپ میں لکھا جاسکتا ہے:

$$(۵.۵۳) \quad \lambda = e^{iKa}$$

جہاں K ایک مستقل ہوگا۔

□

اس مقام پر مساوات ۵.۵۳ امتیازی وندر λ لکھنے کا ایک انوکھا طریقہ ہے، لیکن ہم جلد دیکھیں گے کہ K ”حقیقی“ ہے اور یوں اگر چہ $\psi(x)$ خود غصیر دوری ہے $|\psi(x)|^2$:

$$|\psi(x+a)|^2 = |\psi(x)|^2 \quad (۵.۵۴)$$

دوری ہوگا، جیسا کہ ہم توقع کرتے آئے ہیں۔^۴

اب ظاہر ہے کہ کوئی بھی ٹھوس جسم ہمیشہ کے لئے چلتا نہیں جانے گا بلکہ کہیں نہ کہیں اس کی سرحد پائی جانے گی جو $V(x)$ کی دوریت کو ختم کرتے ہوئے مسئلہ بلوخ کو ناکارہ بنا دے گی۔ تاہم کسی بھی کلاں بین متلم میں کئی ایوگا درو عدد کے برابر جوہر پائے جائیں گے، اور ہم فرض کر سکتے ہیں کہ ٹھوس جسم کی سطح سے بہت دور، الیکٹران پر سطحی اثرات بل نظر انداز ہوگا۔ ہم مسئلہ بلوخ کو کارآمد رکھنے کی خاطر x کو ایک دائرے پر رکھتے ہیں تاکہ اس کا سر، بہت بڑی تعداد $N \approx 10^{23}$ دوری فاصلوں کے بعد، اس کے دم پر پایا جاتا ہو؛ باضابطہ طور پر ہم درج ذیل سرحدی شرط عائد کرتے ہیں۔

$$\psi(x + Na) = \psi(x) \quad (۵.۵۵)$$

یوں (مساوات ۵.۴۹ کے تحت) درج ذیل ہوگا

$$e^{iNka} \psi(x) = \psi(x)$$

لہذا $e^{iNka} = 1$ یا $Nka = 2\pi n$ ہوگا جس کے تحت درج ذیل ہوگا۔

$$K = \frac{2\pi n}{Na}, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (۵.۵۶)$$

(درج بالا مساوات میں حقیقتاً $n = 0, 1, 2, \dots, N-1$ ہوگا؛ تفصیل کے لئے مساوات ۵.۶۶ کے نیچے پیراگراف پڑھیں۔) موجودہ صورت میں K لازماً حقیقی ہوگا۔ مسئلہ بلوخ کی افادیت یہ ہے کہ ہمیں صرف ایک خانہ (مثلاً $0 \leq x < a$) کے وقفہ پر مسئلہ شرودنگر حل کرنا ہوگا؛ مساوات ۵.۴۹ کی بار بار اطلاق سے باقی تمام جگہوں کے لئے حل حاصل ہوگا۔

اب فرض کریں کہ مخفیہ درحقیقت (درج ذیل) نوکیلی ڈیٹا انفاسل سوزنات (ڈیراک کنگھی) پر مشتمل ہو۔

$$V(x) = \alpha \sum_{j=0}^{N-1} \delta(x - ja) \quad (۵.۵۷)$$

(شکل ۵.۵ میں آپ تصور کریں گے کہ محور x کو یوں دائروی شکل میں لپیٹا گیا ہے کہ N ویں سوزن درحقیقت نقطہ $x = -a$ پر پائی جاتی ہے۔) اگرچہ یہ حقیقت پسند نمونہ نہیں ہے، لیکن یاد رہے، ہمیں دوریت کے اثرات

^۴ یقیناً، آپ دلیل کو اس کے مساوات ۵.۵۴ سے آواز کرتے ہوئے مسئلہ بلوخ ثابت کرنا چاہیں گے۔ ایسا کرنا ممکن نہیں ہے، کیونکہ مساوات ۵.۴۹ کے یقینی جزو ضربی کو x کا انفاسل ہونے کی اجازت صرف مساوات ۵.۵۴ دیتا ہے۔

میں صرف دلچسپی ہے؛ کلاسیکی کرانگلے ویلنٹ نمونہ^{۲۸} میں دہراتا ہوا مستطیل مخفیہ استعمال کیا گیا، جو اب بھی بہت سے مصنفین کا پسندیدہ مخفیہ ہے۔ خط $(0 < x < a)$ میں مخفیہ صفر ہوگا لہذا

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

یا

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

ہوگا جہاں ہمیشہ کہ طرح درج ذیل ہوگا۔

$$(۵.۵۸) \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar},$$

اس کا عمومی حل درج ذیل ہے۔

$$(۵.۵۹) \quad \psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad (0 < x < a).$$

مسئلہ بلوخ کے تحت مبداء کے بائیں جانب پہلے خنات میں تفعل موج درج ذیل ہوگا۔

$$(۵.۶۰) \quad \psi(x) = e^{-iKa} [A \sin k(x+a) + B \cos k(x+a)], \quad (-a < x < 0).$$

نقطہ $x = 0$ پر ψ لازماً استمراری ہوگا لہذا

$$(۵.۶۱) \quad B = e^{-iKa} [A \sin(ka) + B \cos(ka)]$$

ہوگا؛ اس کے تفرق میں ڈیلٹا تفعل کی زور کے براہ راست متناسب عدم استمرار پایا جائے گا (مداوات ۲.۱۲، جس میں α کی علامت الٹ ہوگی، چونکہ یہاں کنووں کی بجائے سوزنات پائے جاتے ہیں):

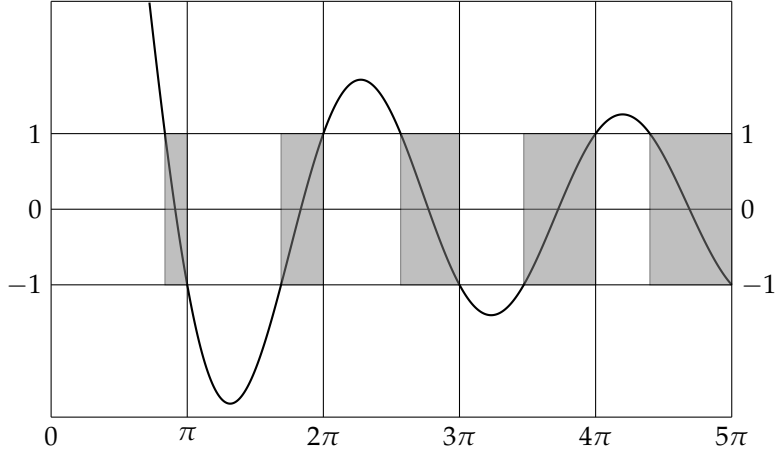
$$(۵.۶۲) \quad kA - e^{-iKa} k[A \cos(ka) - B \sin(ka)] = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} B$$

مداوات ۵.۶۱ کو $A \sin(ka)$ کے لئے حل کرتے ہیں۔

$$(۵.۶۳) \quad A \sin(ka) = [e^{iKa} - \cos(ka)] B$$

اس کو مداوات ۵.۶۲ میں پڑ کر کے اور k_B کو منسوخ کرتے ہوئے

$$[e^{iKa} - \cos(ka)][1 - e^{-iKa} \cos(ka)] + e^{-iKa} \sin^2(ka) = \frac{2m\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ka)$$



شکل ۵.۶: تفاعل $f(z)$ (مساوات ۵.۶۱ کو $\beta = 10$ کے لئے ترسیم کر کے اجبازتی پٹیاں (سایہ دار) دکھائی گئی ہیں جن کے بیچ ممنوعہ درز (جہاں $|f(z)| > 1$ ہوگا) پائے جاتے ہیں۔

حاصل ہوگا جس سے درج ذیل سادہ روپ حاصل ہوتا ہے۔

$$(۵.۶۳) \quad \cos(Ka) = \cos(ka) + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ka)$$

یہ وہ بنیادی نتیجہ ہے جس سے باقی سب کچھ اخذ ہوتا ہے۔ کرائنگ و پٹی مخفیہ کے لئے کلیہ زیادہ پیچیدہ ہوگا، لیکن جو خدوخال ہم دیکھنے حارے ہیں، وہی اس میں بھی پائے جاتے ہیں۔

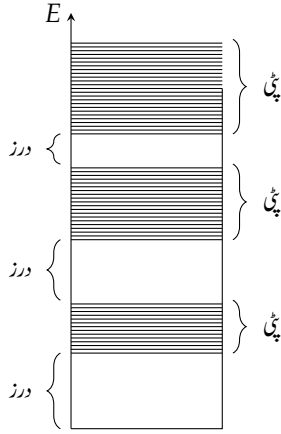
مساوات ۵.۶۳ متغیر k کی ممکنہ قیمتیں، لہذا اجبازتی توانائیاں تعین کرتی ہے۔ علاقیت کو سادہ بنانے کی عنصر سے ہم درج ذیل لکھتے ہیں

$$(۵.۶۵) \quad z \equiv ka, \quad \beta \equiv \frac{m\alpha a}{\hbar^2}$$

جس سے مساوات ۵.۶۳ کا دایاں ہاتھ درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$(۵.۶۶) \quad f(z) \equiv \cos(z) + \beta \frac{\sin(z)}{z}$$

مستقل β ، ڈیٹ تفاعل کے ”زور“ کا، بے بعدی ناپ ہے۔ شکل ۵.۶ میں میں نے $\beta = 10$ کے لئے $f(z)$ کو ترسیم کیا ہے۔ یہاں دیکھنے کی اہم بات یہ ہے کہ $f(z)$ سے $(-1, +1)$ سے باہر بھٹکتا ہے، اور چونکہ $|\cos(Ka)|$ کی قیمت کسی صورت بھی 1 سے تجاوز نہیں کر سکتی ہے، لہذا ایسے خطوں میں مساوات



شکل ۵.۷: دوری مخفیہ کی احبازتی توانائیاں بنیادی طور پر استمراری پٹیاں پیدا کرتی ہیں۔

۵.۶۴ کا حل نہیں پایا جائے گا۔ یہ درز^۹ ممنوع توانائیوں کو ظاہر کرتی ہیں؛ انکے بیچ احبازتی توانائیوں کی پٹیاں^{۱۰} پائی جاتی ہیں۔ مساوات ۵.۵۶ کے تحت، $Ka = \frac{2\pi n}{N}$ ہوگا، جہاں N ایک بہت بڑا عدد ہے، لہذا n کوئی بھی عدد صحیح ہو سکتا ہے۔ یوں کسی ایک پٹی میں تقریباً ہر توانائی احبازتی ہوگی۔ آپ تصور میں شکل ۵.۶ پر $\cos(\frac{2\pi n}{N})$ قیمت کے فاصلوں پر $+1$ (یعنی $n = 0$) سے لے کر نیچے -1 (یعنی $n = \frac{N}{2}$) تک اور واپس تقریباً $+1$ (یعنی $n = N - 1$) تک (جہاں بلوغت جزو ضربی e^{iKa} دوبارہ چکر شروع کرتا ہے لہذا n کو مزید بڑھانے سے کوئی نیا حل حاصل نہیں ہوگا) لکیریں کھینچ کر دیکھ سکتے ہیں۔ ہر لکیر کا $f(z)$ کے ساتھ تقاطع، ایک احبازتی توانائی دیگا۔ ظاہر ہے کہ ہر پٹی میں N حالات پائے جاتے ہیں، جو ایک دوسرے کے اتنے تقریباً متفرق ہیں کہ عموماً مقصد کے لئے ہم فرض کر سکتے ہیں کہ یہ ایک استمراریہ پیدا کرتے ہیں (شکل ۵.۷)۔ (یوں مساوات ۵.۵۶ میں $n = 0, \pm 1, \dots$ کی بجائے $n = 0, 1, \dots, N - 1$ ہوگا۔)

اب تک ہم نے اپنے مخفیہ میں صرف ایک الیکٹران رکھا ہے۔ حقیقت میں Nq الیکٹران ہوں گے، جہاں ہر ایک جوہر q تعداد کے آزاد الیکٹران مہیا کرے گا۔ پالی اصول مناعت کے بنا پر صرف دو الیکٹران کسی ایک فضا کی حالت کے ممکن ہو سکتے ہیں، یوں $q = 1$ کی صورت میں یہ زمینی حال میں پہلی پٹی کو آدھا بھریں گے، اگر $q = 2$ ہو تب یہ پہلی پٹی کو مکمل بھریں گے، اگر $q = 3$ ہو تب یہ دوسری پٹی کو آدھا بھریں گے، وغیرہ وغیرہ۔ (تین ابعاد میں، اور زیادہ حقیقی مخفیہ کی صورت میں، پٹیوں کی ساخت زیادہ پیچیدہ ہو سکتی ہے، لیکن احبازتی پٹیاں جن کے بیچ ممنوع درز پائے جاتے ہوں، تب بھی ہوگا؛ دوری مخفیہ کی نشانی ہی پٹی دار ساخت ہے۔)

اب اگر ایک پٹی مکمل طور پر بھری ہوئی ہو، ممنوع خطے سے گزر کر اگلی پٹی تک چھلانگ کے لئے ایک الیکٹران کو

نسبتاً زیادہ توانائی درکار ہوگی؛ ایسا مادہ برقی طور پر غیر موصل^{۵۱} ہوگا۔ اس کے برعکس اگر ایک پٹی پوری طرح بھری نہ ہو تب ایک الیکٹران کو ہیبان^{۵۲} کرنے کے لئے بہت کم توانائی درکار ہوگی؛ اس طرح کا مادہ عموماً موصل^{۵۳} ہوگا۔ ایک غیر موصل میں، زیادہ یا کم q والے، چند جوہر کی ملاوٹ^{۵۴} سے، اگلی بالا پٹی میں چند اضافی الیکٹران آجاتے ہیں یا سابقہ بھری پٹی میں چند خول^{۵۵} پیدا ہو جاتے ہیں؛ ان دونوں صورتوں میں ایک کمزور برقی رو گزر سکتا ہے؛ ایسے اشیاء نیم موصل^{۵۶} کہلاتے ہیں۔ آزاد الیکٹران نمونہ میں تمام ٹھوس اجسام کو لازماً اچھا موصل ہونا ہوگا چونکہ انکے اجزائی توانائیوں کے طیف میں کوئی بڑا وقفہ نہیں پایا جاتا ہے۔ قدرت میں پائے جانے والے ٹھوس اجسام کی برقی موصلیت میں اتنے زیادہ فرق صرف پٹی دار نظریہ کی مدد سے سمجھا سکتا ہے۔

سوال ۵.۱۸:

ا. مساوات ۵.۵۹ اور مساوات ۵.۶۳ استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ دوری ڈیٹا تفاعل مخفیہ میں ایک ذرے کا تفاعل موج درج ذیل روپ میں لکھا جاسکتا ہے۔

$$\psi(x) = C[\sin(kx) + e^{-iKa} \sin k(a-x)], (0 \leq x \leq a).$$

(معمول زنی مستقل C تعین کرنے کی ضرورت نہیں ہے۔)

ب. البتہ پٹی کے بالائی سرپر جہاں z مستقل π کا عدد صحیح مضرب ہوگا (شکل ۵.۶) سے (الف) $\psi(x) = 0$ حاصل ہوگا۔ ایسی صورت میں درست تفاعل موج تلاش کریں۔ دیکھیں کہ ہر ایک ڈیٹا تفاعل پر ψ کو کیا ہوتا ہے؟

سوال ۵.۱۹: پہلی اجزائی پٹی کی تہ پر، $\beta = 10$ کی صورت میں توانائی کی قیمت، تین با معنی ہندسوں تک، تلاش کریں۔ دلائل پیش کرتے ہوئے $\frac{\alpha}{a} = 1 \text{ eV}$ تصور کریں۔

سوال ۵.۲۰: فرض کریں ہم ڈیٹا تفاعل سوزنات کے بجائے ڈیٹا تفاعل کنودوں پر غور کر رہے ہیں (یعنی مساوات ۵.۵۷ میں α کی علامت الٹ ہے)۔ ایسی صورت میں شکل ۵.۶ اور شکل ۵.۷ طرز کے اشکال بن کر تجزیہ کریں۔ مثبت توانائی حلوں کے لئے آپ کو کوئی نیا حساب کرنے کی ضرورت نہیں ہے (بس مساوات ۵.۶۶ میں موزوں تبدیلیاں لائیں)، لیکن منفی توانائی حلوں کے لئے آپ کو کام کرنا ہوگا؛ اور انہیں ترسیم پر شامل کرنا مت بھولیں (جواب منفی z تک وسیع ہوگا)۔ پہلی اجزائی پٹی میں کتنے حالات ہونگے؟

سوال ۵.۲۱: دکھائیں کہ مساوات ۵.۶۴ سے متعین زیادہ تر توانائیاں دوہری انحطاطی ہیں۔ کونسی توانائیاں ایسی نہیں ہیں؟ اشارہ: $N = 1, 2, 3, 4, \dots$ لیتے ہوئے دیکھیں کیا ہوتا ہے۔ ایسی ہر صورت میں $\cos(Ka)$ کی کیا ممکن قیمتیں ہوں گی؟

insulator^{۵۱}

۵۲ غیر مکمل بھری پٹی میں الیکٹران کی موجودہ توانائی سے معمولی زیادہ توانائی والا حال دستیاب ہوگا جس میں الیکٹران ہیبان ہو کر داخل ہو سکتا

ہے۔

conductor^{۵۳}

dope^{۵۴}

hole^{۵۵}

semiconductors^{۵۶}

۵.۴ کوانٹائی شماریاتی میکانیات

مطلق صفر حرارت پر ایک طبعی نظام اپنی کم سے کم اجازتی توانائی تکمیل کا مکین ہوگا۔ درجہ حرارت بڑھانے سے بلا منصوبہ حراری سرگرمیوں کی بنا پر یجبانی حالات بھرنے شروع ہونگے، جس سے درج ذیل سوال پیدا ہوتا ہے: اگر درجہ حرارت T پر، حراری توازن میں ایک بڑی تعداد N ذرات پائے جاتے ہوں، تب اس کا کیا احتمال ہوگا کہ ایک ذرہ جس کو بلا منصوبہ منتخب کیا گیا ہو، کی توانائی بالخصوص E_j ہوگی؟ دھیان رہے کہ اس "احتمال" کا کوانٹائی عدم تعینیت کے ساتھ کوئی تعلق نہیں ہے؛ بالکل یہی سوال کلاسیکی شماریاتی میکانیات میں بھی کھڑا ہوتا ہے۔ ہمیں احتمالی جواب اس لئے منظور ہوگا کہ جن ذرات کی ہم بات کر رہے ہیں انکی تعداد اتنی زیادہ ہوگی کہ کسی بھی صورت میں ہر ایک پر علیحدہ علیحدہ نظر رکھنا ممکن نہیں ہوگا، چاہے متشائل میکانیات تعینی ہو یا نہ ہو۔

شماریاتی میکانیات کا بنیادی مفروضہ یہ ہے کہ حراری توازن^{۵۷} میں ایک جیسی کل توانائی، E ، والا ہر منفرد حال ایک جتنا مختل ہوگا۔ بلا واسطہ حراری حرکت کی بنا پر توانائی ایک ذرہ سے دوسرے ذرہ، اور ایک روپ (حرکی، گردشی، لرزشی، وغیرہ) سے دوسری روپ میں مسلسل منتقل ہوگی لیکن (بیرونی مداخلت کی عدم موجودگی میں) بقا توانائی کی بنا پر کل مقررہ ہوگا۔ یہاں (بہت گہرا اور قابل سوچ) مفروضہ یہ ہے کہ توانائی کی مقررہ تقسیم کسی مخصوص حال کو ترجیح نہیں دیتی۔ درجہ حرارت^{۵۸}، T ، حراری توازن میں ایک نظام کی کل توانائی کی ایک پیشانہ ہے۔ ان منفرد حالات کی گنتی میں کوانٹائی میکانیات ایک نئی پیچیدگی پیدا کرتی ہے (تاہم حالات غیر مسلسل ہوتے ہیں جس کی بنا پر یہ کلاسیکی نظریہ کی گنتی سے زیادہ آسان ہوگا)، اور گنتی کا انحصار اس بات پر ہوگا کہ آیا ذرات متماثل ممیز، متشائل بوسن یا متشائل فرمیان ہیں۔ ان کے دلائل نسبتاً سیدھے لیکن ریاضی کافی گہری ہے لہذا میں ایک انتہائی سادہ مثال سے شروع کرتا ہوں تاکہ آپ بنیادی حقائق سمجھ سکیں۔

۵.۴.۱ ایک مثال

فرض کریں ہمارے پاس ایک بُعدی لامتناہی چوکور کنویں (حصہ ۲.۲) میں، کمیت m والے، صرف تین باہم غیر متشائل ذرات پائے جاتے ہیں۔ کل توانائی درج ذیل ہوگی (مساوات ۲.۲۷ دیکھیں)

$$(۵.۶۷) \quad E = E_A + E_B + E_C = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_A^2 + n_B^2 + n_C^2)$$

جہاں n_A ، n_B اور n_C مثبت عدد صحیح ہوں گے۔ ہم $E = 363 \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \right)$ یعنی

$$(۵.۶۸) \quad n_A^2 + n_B^2 + n_C^2 = 363$$

لیتے ہوئے تبصرہ جاری رکھتے ہیں۔ جیسے آپ تصدیق کر سکتے ہیں، تین مثبت عدد صحیح اعداد کے تیسرے ایسے ملاپ پائے جاتے ہیں جن کے مربعوں کا مجموعہ 363 ہو: تینوں اعداد 11 ہو سکتے ہیں، دو اعداد 13 اور ایک 5 (جو تین مرتبہ اجتماعات میں پایا جائے گا)، ایک عدد 19 اور دو 1 (یہاں بھی تین مرتبہ اجتماعات

^{۵۷} thermal equilibrium
^{۵۸} temperature

ہوں گے) یا ایک عدد 17، ایک 7 اور ایک 5 (چھ مرتب اجتماعات) ہو سکتے ہیں۔ یوں (n_A, n_B, n_C) درج ذیل میں سے ایک ہوگا۔

$$(11, 11, 11), \\ (13, 13, 5), (13, 5, 13), (5, 13, 13), \\ (1, 1, 19), (1, 19, 1), (19, 1, 1), \\ (5, 7, 17), (5, 17, 7), (7, 5, 17), (7, 17, 5), (17, 5, 7), (17, 7, 5)$$

اگر یہ ذرات متماثل میسر ہوں، تب ان میں سے ہر ایک کسی ایک منفرد کوانٹائی حال کو ظاہر کرے گا، اور شماریاتی میکانات کے بنیادی مفروضے کے تحت، حراری توازن^{۵۹} میں یہ سب برابر محتمل ہوں گے۔ لیکن میں اس میں دلچسپی نہیں رکھتا ہوں کہ کونسا ذرہ کس (یک ذروی) حال میں پایا جاتا ہے، بلکہ میں یہ جاننا چاہتا ہوں کہ ہر ایک حال میں کل کتنے ذرات پائے جاتے ہیں؛ جس کو حال ψ_n کی تعداد مکینز^{۶۰} N_n کہتے ہیں۔ ہم اس 3 ذروی حال کے تمام تعداد مکین کے اجتماع کو تشکیل^{۶۱} کہتے ہیں۔ اگر تینوں حال ψ_{11} میں ہوں تب تشکیل درج ذیل ہوگا

$$(0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 3, 0, 0, 0, 0, 0, 0, \dots) \quad (۵.۶۹)$$

(یعنی $N_{11} = 3$ ہے اور باقی تمام صفر ہیں)۔ اگر دو حال ψ_{13} میں اور ایک ψ_5 میں ہو، تب تشکیل درج ذیل ہوگا

$$(0, 0, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 2, 0, 0, 0, \dots) \quad (۵.۷۰)$$

(یعنی $N_5 = 1$ ، $N_{13} = 2$ ، اور باقی تمام صفر ہوں گے)۔ اگر دو ψ_1 میں اور ایک ψ_{19} میں ہو تب تشکیل درج ذیل ہوگا

$$(2, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, \dots) \quad (۵.۷۱)$$

(یعنی $N_1 = 2$ ، $N_{19} = 1$ اور باقی تمام صفر ہوں گے)۔ اور اگر ایک ذرہ ψ_5 میں، ایک ψ_7 میں اور ایک ψ_{17} میں ہو تب تشکیل درج ذیل ہوگا

$$(0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, \dots) \quad (۵.۷۲)$$

(یعنی $N_5 = N_7 = N_{17} = 1$ اور باقی تمام صفر ہوں گے)۔ ان تمام میں، آخری تشکیل زیادہ محتمل ہوگی، چونکہ اس کو چھ مختلف طریقوں سے حاصل کیا جاسکتا ہے، جبکہ درمیانی دو کو تین طریقوں سے اور پہلی کو صرف ایک طریقے سے حاصل کیا جاسکتا ہے۔

^{۵۹} غیر متماثل ذرات کس طرح حراری توازن برقرار رکھتے ہیں؟ میں اس کے بارے میں سوچنا نہیں چاہوں گا؛ حقیقتاً، توانائی کی مستمری تقسیم ذرات کے باہم عمل سے ہی ممکن ہوگی۔ ہم فرض کر سکتے ہیں کہ ذرات کا باہم عمل اتنا کمزور ہے کہ اگر چہ یہ (لے عرصہ کی صورت میں) حراری توازن پیدا کرتا ہے، تاہم یہ اتنا کمزور ہے کہ نظام کے ساکن حالات اور احباباتی توانائیوں پر متاثر نہیں ڈالتا ہے۔

^{۶۰} occupation number
^{۶۱} configuration

میں اب دوبارہ اپنے اصل سوال پر آتا ہوں کہ بلا واسطہ تین ذرات منتخب کرتے ہوئے کوئی مخصوص (اجزائی) توانائی E_n حاصل کرنے کا احتمال (P_n) کیا ہوگا؟ توانائی E_1 صرف اس صورت حاصل ہوگی جب وہ تیسری تشکیل (مادات ۵.۷) میں ہو؛ اس تشکیل میں نظام ہونے کا اتفاق 13 میں سے 3 ہے، اور اس تشکیل میں E_1 کے حصول کا احتمال $\frac{2}{3}$ ہے لہذا $P_1 = \frac{3}{13} \times \frac{2}{3} = \frac{2}{13}$ ہوگا۔ آپ E_5 کو تشکیل 2 (مادات ۵.۷) سے 13 میں سے 3 امکان اور احتمال $\frac{1}{3}$ یا تشکیل 4 (مادات ۵.۷) سے 13 میں سے 6 امکان اور احتمال $\frac{1}{3}$ کے ساتھ حاصل کر سکتے ہیں، لہذا $P_5 = \frac{3}{13} \times \frac{1}{3} + \frac{6}{13} \times \frac{1}{3} = \frac{3}{13}$ ہوگا۔ آپ E_7 کو صرف تشکیل 4 سے حاصل کر سکتے ہیں اور $P_7 = \frac{6}{13} \times \frac{1}{3} = \frac{2}{13}$ ہوگا۔ اسی طرح E_{11} صرف پہلی تشکیل (مادات ۵.۷) سے 13 میں سے 1 امکان اور احتمال ایک (1) کے ساتھ حاصل ہوگا، لہذا $P_{11} = \frac{1}{13}$ ہوگا۔ اسی طرح $P_{13} = \frac{3}{13} \times \frac{2}{3} = \frac{2}{13}$ ، $P_{17} = \frac{6}{13} \times \frac{1}{3} = \frac{2}{13}$ اور $P_{19} = \frac{3}{13} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{13}$ ہوں گے۔ انکی تصدیق درج ذیل سے ہوگی۔

$$P_1 + P_5 + P_7 + P_{11} + P_{13} + P_{17} + P_{19} = \frac{2}{13} + \frac{3}{13} + \frac{2}{13} + \frac{1}{13} + \frac{2}{13} + \frac{2}{13} + \frac{1}{13} = 1$$

یہ متماثل ممیز ذرات کے لئے تھا۔ اس کی بجائے اگر ذرات متماثل منرمیان ہوتے، ضرورت خلاف تشاکلیت (اپنی آسانی کے لئے چکر کو نظر انداز کرتے ہوئے، یا اگر آپ چاہیں تو، یہ تصور کرتے ہوئے کہ تمام ایک جیسے چکر کی حال میں ہیں) کی بنا پر پہلی تین تشکیلات (جو دو ذرات کو، یا اس سے بھی بری صورت میں تین ذرات کو، ایک ہی حال میں ڈالتے ہیں) ناممکن ہوں گی، اور چوتھی تشکیل میں صرف ایک حال ہوگا (سوال ۵.۲۲-الف دیکھیں)۔ متماثل منرمیان کے لئے $P_5 = P_7 = P_{17} = \frac{1}{3}$ ہوگا اور اب بھی احتمالات کا مجموعہ ایک (1) ہے۔ اس کے برعکس، اگر ذرات متماثل بوسن ہوتے تو ضرورت تشاکلیت ہر تشکیل میں ایک حال کی اجازت دیتا (سوال ۵.۲۲-ب دیکھیں)، لہذا $P_1 = \frac{1}{4} \times \frac{2}{3} = \frac{1}{6}$ ، $P_5 = \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} + \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{6}$ ، $P_7 = \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{12}$ ، $P_{11} = \frac{1}{4} \times 1 = \frac{1}{4}$ ، $P_{13} = \frac{1}{4} \times \frac{2}{3} = \frac{1}{6}$ ، $P_{17} = \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{12}$ اور $P_{19} = \frac{1}{4} \times \frac{1}{3} = \frac{1}{12}$ ہمیشہ کی طرح احتمالات کا مجموعہ ایک (1) ہے۔

اس مثال کا مقصد آپ کو یہ دکھانا تھا کہ حالات کی شمار کس طرح ذرات کی قسم پر منحصر ہوتی ہے۔ ایک لحاظ سے حقیقی صورت، جہاں N ایک بہت بڑا عدد ہوگا، سے یہ مثال زیادہ پیچیدہ تھی۔ چونکہ N کی قیمت بڑھانے سے زیادہ محتمل تشکیل (جو متماثل ممیز ذرات کے لئے اس مثال میں $N_5 = N_7 = N_{17} = 1$ ہے) پایا جانے کا امکان اتنا زیادہ ہو جائے گا کہ کسی بھی شماریاتی مقاصد کے لئے باقی تمام امکانات کو رد کیا جاسکتا ہے۔^{۲۲} توازن کی صورت میں انفرادی ذروی توانائیوں کی تقسیم، انکی زیادہ سے زیادہ محتمل تشکیل میں تقسیم ہے۔ (اگر $N = 3$ کے لئے یہ درست ہوتا، جو کہ یہ نہیں ہے، ہم متماثل ممیز ذرات کے لئے $P_5 = P_7 = P_{17} = \frac{1}{3}$ اخذ کرتے۔) میں حصہ ۵.۴.۳ میں اس نقطہ پر دوبارہ آؤں گا لیکن اس سے پہلے گسٹنکی کی ترکیب کو عموماً دیتے ہیں۔

سوال ۵.۲۲:

۱. حال ψ_5 میں ایک، حال ψ_7 میں ایک، اور حال ψ_{17} میں ایک متماثل تین منرمیان کا مکمل خلاف تشاکلی تقاسم عمل موج $\psi(x_A, x_B, x_C)$ تیار کریں۔

^{۲۲} بڑے اعداد کی شماریات کا یہ ایک حیرت کن اور غیر متوقع حقیقت ہے۔

ب. تین متماثل بوسن کے لئے مکمل تشاکلی تفاعل موج $\psi(x_A, x_B, x_C)$ درج ذیل صورتوں میں تیار کریں (۱) تینوں حال ψ_{11} میں ہوں، (ب) اگر دو ψ_1 اور ایک ψ_{19} میں ہو، (ج) اگر ایک حال ψ_5 ایک حال ψ_7 اور ایک حال ψ_{17} میں ہو۔

سوال ۵.۲۳: فرض کریں ایک بُعدی ہارمونی ارتعاشی مخفیہ میں آپ کے پاس تین باہم غیر متعامل ذرات، حراری توازن میں پائے جاتے ہوں، جن کی کل توانائی $E = \frac{9}{2} \hbar \omega$ ہے۔

ا. اگر یہ (ایک جیسی کیمیت کے) متماثل ممیز ذرات ہوں تب انکی تعداد مکین کی کتنی شکلیات ہوں گی اور ہر ایک کے لئے کتنے منفرد (تین ذروی) حالات ہوں گے؟ سب سے زیادہ محتمل تفکیک کیسا ہوگی؟ اگر آپ ایک ذرہ بلا منصوب منتخب کر کے اسکی توانائی کی پیشانہ کریں تو کیا قیمتیں متوقع ہوں گی اور ہر ایک کا احتمال کیسا ہوگا؟ سب سے زیادہ محتمل توانائی کیسا ہوگی؟

ب. یہی کچھ متماثل منرمیان کے لئے کریں (چکر کو نظر انداز کریں جیسا ہم نے حصہ ۵.۴.۱ میں کیا)۔

ج. یہی کچھ (چکر کو نظر انداز کرتے ہوئے) متماثل بوسن کے لئے کریں۔

۵.۴.۲ عمومی صورت

اب ایک ایسے اختیاری مخفیہ پر غور کرتے ہیں جس کی ایک ذروی توانائیاں E_1, E_2, E_3, \dots اور انحطاط d_1, d_2, \dots, d_3 ہوں (یعنی توانائی E_n کے d_n منفرد یک ذروی حالات ہیں)۔ فرض کریں ہم (ایک جیسی کیمیت کے) N ذرات کو اس مخفیہ میں رکھتے ہیں؛ ہم تفکیک (N_1, N_2, N_3, \dots) میں دلچسپی رکھتے ہیں جس میں N_1 ذرات کی توانائی E_1 ، N_2 ذرات کی توانائی E_2 ، وغیرہ ہوگی۔ سوال: ایسا کتنے مختلف طریقوں سے کیا جاسکتا ہے (بلکہ یہ کہنا زیادہ درست ہوگا کہ اس مخصوص تفکیک کے مطابق کتنے منفرد حالات ہوں گے)؟ اس کے جواب $Q(N_1, N_2, N_3, \dots)$ کا انحصار اس بات پر ہوگا کہ آیا ذرات متماثل ممیز، متماثل منرمیان، یا متماثل بوسن ہیں، لہذا ہم ان تین صورتوں پر علیحدہ علیحدہ غور کرتے ہیں۔

ہم پہلے یہ فرض کرتے ہیں کہ ذرات متماثل ممیز ہیں۔ دستیاب کل N ذرات میں سے کتنے طریقوں سے N_1 منتخب کر کے پہلے ”نوکرے“ میں رکھے جاسکتے ہیں؟ جواب: N مثالی عدد ^{۳۳}:

$$(۵.۴۳) \quad \binom{N}{N_1} \equiv \frac{N!}{N_1!(N - N_1)!}$$

N_1 کو N میں سے منتخب کرتا ہے۔ پہلا ذرہ N مختلف طریقوں سے منتخب کیا جاسکتا ہے، جس کے بعد $(N - 1)$ ذرات رہ جاتے ہیں لہذا دوسرے ذرے کے انتخاب کے $N - 1$ مختلف طریقے ہوں گے، وغیرہ۔

$$N(N - 1)(N - 2) \dots (N - N_1 + 1) = \frac{N!}{(N - N_1)!}$$

لیکن یہ N_1 ذرات کے $N_1!$ مختلف مرتب اجتماعات کو علیحدہ علیحدہ گنتا ہے جبکہ ہمیں اس سے کوئی دلچسپی نہیں کے عدد 37 کو پہلے انتخاب میں یا 29 ویں انتخاب میں منتخب کیا گیا؛ لہذا ہم $N_1!$ سے تقسیم کرتے ہیں جس سے مساوات ۵.۳ حاصل ہوتا ہے۔ اب پہلے ٹوکرے کے اندر ان N_1 ذرات کو کتنے مختلف طریقوں سے رکھا جاسکتا ہے؟ چونکہ پہلے ٹوکرے میں d_1 حالات ہیں لہذا ہر ایک ذرے کو d_1 مختلف طریقوں سے چننا جاسکتا ہے؛ یوں کل ممکنات $(d_1)^{N_1}$ ہوں گے۔ اس طرح ایک ٹوکرہ، جس میں d_1 منفرد حق انتخاب ہوں، میں کل آبادی N میں سے N_1 ذرات منتخب کر کے رکھنے کی تعداد درج ذیل ہوگی۔

$$\frac{N!d_1^{N_1}}{N_1!(N - N_1)!}$$

دوسرے ٹوکرے میں صرف $(N - N_1)$ ذرات ہونے کے علاوہ بالکل ایسا ہی ہوگا:

$$\frac{(N - N_1)!d_2^{N_2}}{N_2!(N - N_1 - N_2)!}$$

وغیرہ وغیرہ۔ اس طرح درج ذیل ہوگا

$$\begin{aligned} Q(N_1, N_2, N_3, \dots) &= \frac{N!d_1^{N_1}}{N_1!(N - N_1)!} \frac{(N - N_1)!d_2^{N_2}}{N_2!(N - N_1 - N_2)!} \frac{(N - N_1 - N_2)!d_3^{N_3}}{N_3!(N - N_1 - N_2 - N_3)!} \dots \\ (5.43) \quad &= N! \frac{d_1^{N_1} d_2^{N_2} d_3^{N_3} \dots}{N_1! N_2! N_3! \dots} = N! \prod_{n=1}^{\infty} \frac{d_n^{N_n}}{N_n!} \end{aligned}$$

(یہاں رک کر حصہ ۵.۴.۱ میں دیے گئے مثال کے لئے اس نتیجے کی تصدیق کریں۔ سوال ۵.۲۴ دیکھیں)

متماثل مندرمیان کے لئے یہ مسئلہ نسبتاً بہت آسان ہے۔ چونکہ یہ غیر ممیز ہیں لہذا اس سے کوئی منفرق نہیں پڑتا کہ کون سے ذرات کن حالات میں ہیں؛ ضرورت خلاف تشاکلیت کے تحت ایک مخصوص یک ذروی حالات کے سلسلہ کو بھرنے کے لئے صرف ایک N ذروی حال ہوگا۔ مزید واحد ایک ذرہ کسی ایک حال کو بھر سکتا ہے۔ لہذا n ویں ٹوکرہ میں N_n بھرے حالات کو منتخب کرنے کے

$$\binom{d_n}{N_n}$$

طریقے^{۱۴} ہوں گے۔ اس طرح درج ذیل ہوگا

$$(5.45) \quad Q(N_1, N_2, N_3, \dots) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{d_n!}{N_n!(d_n - N_n)!}$$

^{۱۴} ظاہر ہے کہ $N_n > d_n$ کی صورت میں یہ مندر ہوگا، جو منفی عدد صحیح کے عدد ضرب کو لامتناہی تصور کرنے سے ہوگا۔

(اس کی تصدیق حصہ ۵.۴.۱ میں دیے گئے مثال کے لئے کریں۔ سوال ۵.۲۴ دیکھیں)۔

متناثر بوسن کے لیے یہ حساب سب سے مشکل ہوگا۔ یہاں ضرورت تشاکلیت کے تحت ایک ذروی حالات کے ایک مخصوص سلسلہ کو بھرنے کا صرف ایک N ذروی حال ہوگا، تاہم اس مرتبہ ایک ذروی حال کو بھرنے کے لئے ذرات کی تعداد پر پابندی عائد نہیں ہوگی۔ یہاں n ویں ٹوکرے کیلئے سوال یہ ہوگا: ہم متناثر N_n ذرات کو d_n مختلف خانوں میں کس طرح رکھ سکتے ہیں؟ غیر مرتبہ اجتماعات کے اس سوال کو حل کرنے کے کئی طریقے ہیں۔ ایک دلچسپ طریقہ درج ذیل ہے: ہم ذرہ کو نقطہ اور خانوں کو صلیب سے ظاہر کرتے ہیں؛ یوں مثال کے طور پر، $d_n = 5$ اور $N_n = 7$ کی صورت میں

$$\bullet \quad \bullet \quad \times \quad \bullet \quad \times \quad \bullet \quad \bullet \quad \bullet \quad \times \quad \bullet \quad \times$$

یہ ظاہر کرے گا کہ پہلے حال میں دو ذرات، دوسرے حال میں ایک ذرہ، تیسرے میں تین، چوتھے میں ایک، اور پانچویں میں کوئی ذرہ نہیں پایا جاتا۔ دھیان رہے کہ نقطوں کی تعداد N_n اور صلیبوں کی تعداد $d_n - 1$ ہے (جو ان نقطوں کو d_n گروہ میں خانہ بند کرتے ہیں)۔ اگر ان انفرادی نقطوں اور صلیبوں کو نام دیے جاتے تب انہیں $(N_n + d_n - 1)!$ مختلف طریقوں سے رکھا جاسکتا تھا۔ تاہم ہمارے لئے تمام نقطے ایک جیسے ہیں؛ اور ان کو $(N_n)!$ مختلف) مرتبہ اجتماعات کی صورت میں لکھنے سے حال تبدیل نہیں ہوتا۔ اسی طرح تمام صلیب معادل ہیں اور انہیں $(d_n - 1)!$ مختلف) مرتبہ اجتماعات لکھنے سے کچھ بھی تبدیل نہیں ہوگا۔ یوں N ویں ٹوکرے میں d_n ایک ذروی حالات کو N_n ذرات مختص کرنے کے درج ذیل مندر طریقہ ہونگے

$$(5.49) \quad \frac{(N_n + d_n - 1)!}{N_n!(d_n - 1)!} = \binom{N_n + d_n - 1}{N_n}$$

جس کی بنا پر ہم درج ذیل اخذ کرتے ہیں۔

$$(5.49) \quad Q(N_1, N_2, N_3, \dots) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{(N_n + d_n - 1)!}{N_n!(d_n - 1)!}$$

(اس کی تصدیق حصہ ۵.۴.۱ میں دیے گئے مثال کے لئے کریں۔ سوال ۵.۲۴ دیکھیں)۔

سوال ۵.۲۴: حصہ ۵.۴.۱ میں دیے گئے مثال کے لئے مساوات ۵.۴۳، مساوات ۵.۴۵ اور مساوات ۵.۴۷ کی تصدیق کریں۔

سوال ۵.۲۵: مساوات ۵.۴۶ کو الگراچی ماخوذ کی مدد سے حاصل کریں۔ غیر مرتبہ اجتماعات کا سوال درج ذیل ہوگا: آپ d ٹوکرے میں N متناثر گیندوں کو کتنے مختلف طریقوں سے رکھ سکتے ہیں (یہاں زیر نوشتہ میں n کو نظر انداز کریں)؟ آپ تمام کے تمام N کو تیسرے ٹوکرے میں رکھ سکتے تھے، یا ایک کو پانچویں اور باقیوں کو دوسرے ٹوکرے میں، یا دو کو پہلے اور تین کو تیسرے ٹوکرے میں اور باقی کو ساتویں ٹوکرے میں، وغیرہ، رکھ سکتے تھے۔ اس کو صریحاً $N = 1$ ، $N = 2$ ، $N = 3$ ، اور $N = 4$ کے لئے حاصل کریں؛ یہاں تک پہنچ کر آپ عمومی کلیہ اخذ کر پائیں گے۔

۵.۴.۳ سب سے زیادہ ممکنہ تشکیل

حراری توازن میں ہر وہ حال جس کی کل توانائی E اور ذروی عدد N ہو ایک جتنا ممکن ہوگا۔ یوں سب سے زیادہ ممکنہ تشکیل N_1, N_2, N_3, \dots وہ ہوگا جس کو سب سے زیادہ مختلف طریقوں سے حاصل کرنا ممکن ہو؛ یہ وہ مخصوص تشکیل ہوگی جو جس کے لئے

$$\sum_{n=1}^{\infty} N_n = N \quad (5.48)$$

اور

$$\sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n = E \quad (5.49)$$

پر پورا اترے ہوئے $Q(N_1, N_2, N_3, \dots)$ کی قیمت سے زیادہ ہو۔

زیر شرائط $f_1(x_1, x_2, x_3, \dots) = 0$ ، وغیرہ، متعدد متغیرات کے ایک تفاعل $F(x_1, x_2, x_3, \dots)$ کی زیادہ سے زیادہ قیمت لگرائج مضرب^{۱۵} کی ترکیب سے با آسانی حاصل ہوتی ہے۔ ہم ایک نیا تفاعل

$$G(x_1, x_2, x_3, \dots, \lambda_1, \lambda_2, \dots) \equiv F + \lambda_1 f_1 + \lambda_2 f_2 + \dots \quad (5.40)$$

متعارف کر کے اس کے تمام تفسیرات کو صفر کے برابر رکھتے ہیں

$$\frac{\partial G}{\partial x_n} = 0; \quad \frac{\partial G}{\partial \lambda_n} = 0 \quad (5.41)$$

موجودہ صورت میں Q کی بجائے Q کے لوگار تھم کے ساتھ کام کرنا زیادہ آسان ثابت ہوتا ہے؛ جو حاصل ضرب کو مجموعہ میں تبدیل کرتا ہے۔ چونکہ لوگار تھم اپنے دلیل کا یکسر تفاعل ہے، لہذا Q کی زیادہ سے زیادہ قیمت اور $\ln(Q)$ کی زیادہ سے زیادہ قیمت ایک ہی نقطہ پر پائی جائیں گی۔ لہذا تفاعل Q کے لئے ہم مساوات ۵.۸۰ میں Q کی بجائے $\ln(Q)$ لکھتے ہیں:

$$G \equiv \ln(Q) + \alpha \left[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n \right] + \beta \left[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n \right] \quad (5.42)$$

جہاں α اور β گرائج مضرب (λ_1 اور λ_2) ہیں (اور چوکور قوسین مساوات ۵.۴۸ اور مساوات ۵.۴۹ میں دیے گئے شرط ہیں)۔ α اور β کے لحاظ سے تفسیرات کو صفر کے برابر رکھنے سے محض (مساوات ۵.۴۸ اور مساوات ۵.۴۹ میں دی گئے) پابندیاں دوبارہ حاصل ہوتی ہیں؛ یوں N_n کے لحاظ سے تفرق کو صفر کے برابر رکھنا باقی ہے۔

اگر ذرات متماثل ممیز ہوں، تب مساوات ۵.۷۴ ہمیں Q دے گی، لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(5.83) \quad G = \ln(N!) + \sum_{n=1}^{\infty} [N_n \ln(d_n) - \ln(N_n!)] \\ + \alpha \left[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n \right] + \beta \left[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n \right]$$

ہم متعلقہ تعداد مکین (N_n) کو بہت بڑا تصور کرتے ہوئے سٹرلنگ کے تخمینہ^{۲۶}:

$$(5.84) \quad \ln(z!) \approx z \ln(z) - z \quad z \ll 1$$

بروئے کار لاتے ہوئے^{۲۷} درج ذیل لکھتے ہیں۔

$$(5.85) \quad G \approx \sum_{n=1}^{\infty} [N_n \ln(d_n) - N_n \ln(N_n) + N_n - \alpha N_n - \beta E_n N_n] \\ + \ln(N!) + \alpha N + \beta E$$

یوں درج ذیل ہوگا۔

$$(5.86) \quad \frac{\partial G}{\partial N_n} = \ln(d_n) - \ln(N_n) - \alpha - \beta E_n$$

اس کو صفر کے برابر رکھ کر N_n کے لیے حل کرتے ہوئے ہم متماثل ممیز ذرات کی سب سے زیادہ محتمل تعداد مکین کی قیمتیں حاصل کرتے ہیں۔

$$(5.87) \quad N_n = d_n e^{-(\alpha + \beta E_n)}$$

اگر ذرات متماثل منبر میان ہوں تب Q کی قیمت مساوات ۵.۷۵ دیگی لہذا درج ذیل ہوگا

$$(5.88) \quad G = \sum_{n=1}^{\infty} \{ \ln(d_n!) - \ln(N_n!) - \ln[(d_n - N_n)!] \} \\ + \alpha \left[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n \right] + \beta \left[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n \right]$$

^{۲۶} Stirling's approximation

سٹرلنگ قسمل کے مزید اجزاء مفاسل کرتے ہوئے سٹرلنگ تخمینہ کو مزید بہتر بنایا جاسکتا ہے، تاہم ہماری ضرورت اولین دو اجزاء لینے سے پوری ہو جاتی ہے۔ اگر حصہ ۵.۴.۱ کی طرح، متعلقہ تعداد مکین بہت زیادہ نہ ہوں، تب شماریاتی میکانیات کارآمد نہیں ہو گی۔ یہاں ہمارا مقصد یہی ہے کہ تعداد واقعی زیادہ ہو کہ شماریاتی پیش گوئی متماثل اعتماد ہو۔ یقیناً ایسے ایک ذروی حالات ضرور ہوں گے جن کی توانائی انتہائی زیادہ ہوگی اور جو بھسرے نہیں ہوں گے؛ ہماری خوش قسمتی ہے کہ سٹرلنگ تخمینہ $z = 0$ کے لئے بھی کارآمد ہے۔ میں نے لفظ ”متعلقہ“ استعمال کرتے ہوئے ان غیر مطلوب حالات کو مفاسل نہیں کیا ہے جو حاشیہ پر رہتے ہوں اور جن کے لئے N_n نہ تو بہت زیادہ ہو اور نہ ہی صفر ہو۔

یہاں ہم N_n کی قیمت بہت بڑی تصور کرنے کے ساتھ ساتھ $d_n \gg N_n$ بھی ^{۱۸}فرض کرتے ہیں لہذا سٹرلنگ تخمینہ دونوں اجزاء کے لیے قابل استعمال ہوگی۔ ایسی صورت میں

$$G \approx \sum_{n=1}^{\infty} \left[\ln(d_n!) - N_n \ln(N_n) + N_n - (d_n - N_n) \ln(d_n - N_n) \right. \\ \left. + (d_n - N_n) - \alpha N_n - \beta E_n N_n \right] + \alpha N + \beta E \quad (۵.۸۹)$$

اور درج ذیل ہوگا۔

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = -\ln(N_n) + \ln(d_n - N_n) - \alpha - \beta E_n \quad (۵.۹۰)$$

اس کو صفر کے برابر رکھتے ہوئے N_n کے لیے حل کر کے ہم متماثل مندرمیان کی تعداد مکینوں کی سب سے زیادہ متماثل تعداد مکین N_n کی قیمتیں حاصل کرتے ہیں۔

$$N_n = \frac{d_n}{e^{(\alpha + \beta E_n)} + 1} \quad (۵.۹۱)$$

آخر میں اگر ذرات متماثل بوسن ہوں تب Q کی قیمت مساوات ۵.۷۷ دی گئی اور درج ذیل ہوگا۔

$$G = \sum_{n=1}^{\infty} \{ \ln[(d_n!)] - \ln(N_n!) - \ln[(d_n - N_n)!] \} \\ + \alpha \left[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n \right] + \beta \left[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n \right] \quad (۵.۹۲)$$

یہاں بھی ہمیشہ کی طرح $1 \gg N_n$ فرض کرتے ہوئے سٹرلنگ تخمینہ استعمال کرتے ہوئے

$$G \approx \sum_{n=1}^{\infty} \{ (N_n + d_n - 1) \ln(N_n + d_n - 1) - (N_n + d_n - 1) - N_n \ln(N_n) \\ + N_n - \ln[(d_n - 1)!] - \alpha N_n - \beta E_n N_n \} + \alpha N + \beta E \quad (۵.۹۳)$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$\frac{\partial G}{\partial N_n} = \ln(N_n + d_n - 1) - \ln(N_n) - \alpha - \beta E_n \quad (۵.۹۴)$$

^{۱۸} ایک بُعد میں توانائیاں غیر انعطافی ہوں گی (سوال ۲.۴۵ دیکھیں)، لیکن تین ابعاد میں n بڑھنے سے d_n عموماً بہت تیزی سے بڑھتا ہے (مثلاً ہائیڈروجن کے لئے $d_n = n^2$ ہے)۔ یوں زیادہ تر بھروسے حالات کے لئے $d_n \gg 1$ فرض کرنا غیر معقول نہیں ہوگا۔ اس کے برعکس، مطلق صفر درج حرارت کے قریب، d_n کی قیمت کسی صورت بھی N_n سے بہت زیادہ نہیں ہوگی، مندرجہ بالا تمام حالات بھروسے ہوں گے لہذا $d_n = N_n$ ہوگا۔ یہاں بھی ہمیں یہ حقیقت مدد کرنی ہے کہ سٹرلنگ کلیہ $z = 0$ کے لئے کارآمد ہے۔

اس کو مضرب کے برابر رکھ کر N_n کے لئے حل کرتے ہوئے ہم متماثل بوسن کی تعداد مکینوں کی سب سے زیادہ محتمل قیمتیں تلاش کرتے ہیں۔

$$N_n = \frac{d_n - 1}{e^{(\alpha + \beta E_n)} - 1} \quad (۵.۹۵)$$

(مضربان کے لئے مستعمل تخمین کے ساتھ ثبات کی خاطر شمار کنندہ میں 1 کو نظر انداز کیا جاسکتا ہے؛ میں یہاں سے آگے ایسا ہی کروں گا۔)

سوال ۵.۲۶: $(x/a)^2 + (y/b)^2 = 1$ کے اندر سب سے بڑے رقبے کا ایسا مستطیل جس کے اضلاع محور کے متوازی ہوں، لگراں مضرب کی ترکیب سے تلاش کریں۔ یہ زیادہ سے زیادہ رقبہ کتنا ہوگا؟
سوال ۵.۲۷:

ا. $z = 10$ کے لیے سٹرلنگ تخمین میں فی صد سہو کتنی ہوگی؟

ب. سہو کو ایک فی صد سے کم رکھنے کیلئے عدد صحیح z کی کم سے کم قیمت کیا ہوگی؟

۵.۴.۴ α اور β کی طبعی اہمیت

لگراں مضرب کی کہانی میں ذرات کی کل تعداد اور کل توانائی سے بالترتیب منسلک مقدار معلوم α اور β پائے گئے۔ ریاضیاتی طور پر تعداد ممکن (ساوات ۵.۸۷، ساوات ۵.۹۱، اور ساوات ۵.۹۵) کو واپس ملط شرائط (ساوات ۵.۷۸ اور ساوات ۵.۷۹) میں پر کرتے ہوئے انہیں تعین کیا جاتا ہے۔ البتہ کسی مخفیہ کے لیے مجموعہ کے حصول کے لئے ہمیں اجبازتی توانائیاں (E_n) اور ان کی انحطاط (d_n) کا معلوم ہونا ضروری ہے۔ میں سہ ابعادی لامستناہی چو کور کنویں میں ایک جتنی کیت کی بہت بڑی تعداد کے باہم غیر متعامل ذرات کی کامل گیلیہ^{۶۹} کی مثال لیتے ہوئے آپ کو اس ترکیب سے متعارف کرتا ہوں۔ اس سے ہم پر α اور α کی طبعی مفہوم عیاں ہوگی۔
ہم نے حصہ ۵.۳.۱ میں اجبازتی توانائیاں (ساوات ۵.۳۹):

$$E_k = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (۵.۹۶)$$

اخذکیں جہاں درج ذیل ہوتا۔

$$\mathbf{k} = \left(\frac{\pi n_x}{\ell_x}, \frac{\pi n_y}{\ell_y}, \frac{\pi n_z}{\ell_z} \right)$$

پہلے کی طرح، یہاں بھی ہم مجموعہ کو عمل میں بدلتے ہیں، جہاں \mathbf{k} ایک استمراری متغیر ہے، اور جہاں k فص π^3/V حجم میں ایک حال (یا، چکر s کی صورت میں، $2s + 1$ حالات) پائے جاتے ہیں۔ مٹن اول

^{۶۹} ideal gas

میں کر دی خولوں کو ”ٹوکریاں“ تصور کرتے ہوئے (شکل ۵.۴ دیکھیں) ”انحطاط“ (یعنی ہر ٹوکریے میں حالات کی تعداد) درج ذیل ہوگی۔

$$d_k = \frac{1}{8} \frac{4\pi k^2 dk}{8(\pi^3/V)} = \frac{V}{2\pi^2} k^2 dk \quad (۵.۹۷)$$

قابل ممیز ذرات (مساوات ۵.۸۷) کیلئے پہلی عائد پابندی (مساوات ۵.۸۸) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$N = \frac{V}{2\pi^2} e^{-\alpha} \int_0^\infty e^{-\beta \hbar^2 k^2 / 2m} k^2 dk = V e^{-\alpha} \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{3/2}$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$e^{-\alpha} = \frac{N}{V} \left(\frac{2\pi\beta\hbar^2}{m} \right)^{3/2} \quad (۵.۹۸)$$

دوسری عائد شرط (مساوات ۵.۹۹) درج ذیل کہتی ہے

$$E = \frac{V}{2\pi^2} e^{-\alpha} \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty e^{-\beta \hbar^2 k^2 / 2m} k^4 dk = \frac{3V}{2\beta} e^{-\alpha} \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{3/2}$$

جس میں مساوات ۵.۹۸ سے $e^{-\alpha}$ پر کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$E = \frac{3N}{2\beta} \quad (۵.۹۹)$$

(اگر آپ مساوات ۵.۹۷ میں چپکری جزو ضربی، $2s + 1$ ، شامل کرتے تو وہ یہاں پہنچ کر حذف ہو جاتا ہے، لہذا مساوات ۵.۹۹ تمام چپکری کے لیے درست ہوگی۔)

یہ نتیجہ (مساوات ۵.۹۹) ہمیں درجہ حرارت T پر ایک جوہر کی اوسط حرکی توانائی کے کلاسیکی کلیہ:

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{2} k_B T \quad (۵.۱۰۰)$$

کی یاد دلاتی ہے، جہاں k_B بولٹزمن مستقل ہے۔ یہ ہمیں β اور حرارت کے درمیان درج ذیل تعلق پر آمادہ کرتا ہے۔

$$\beta = \frac{1}{k_B T} \quad (۵.۱۰۱)$$

یہ ثابت کرنے کے لیے کہ یہ تعلق صرف تین ابعادی لامتناہی چوکور کنویں میں موجود ممیز ذرات کے لئے نہیں بلکہ عمومی نتیجہ ہے ہمیں دکھانا ہوگا کہ، مختلف اشیاء کے لئے، جو ایک دوسرے کے ساتھ حراری توازن میں ہوں، β کی قیمت ایک جیسی ہے۔ یہ دلیل کئی کتابوں میں پیش کی گئی ہے، جس کو میں یہاں پیش نہیں کروں گا؛ بلکہ میں مساوات ۵.۱۰۱ کو T کی تعریف مان لیتا ہوں۔

روایتی طور پر α (جو مساوات ۵.۹۸ کی خصوصی صورت سے ظاہر ہے کہ T کا تعلق ہے) کی جگہ کیمیاوی پتہ^{۴۰}:

$$\mu(T) \equiv -\alpha k_B T \quad (۵.۱۰۲)$$

استعمال کر کے مساوات ۵.۸۷، مساوات ۵.۹۱، اور مساوات ۵.۹۵ کو دوبارہ یوں لکھا جاتا ہے کہ یہ توانائی ϵ کے کسی ایک مخصوص (یک ذروی) حال میں ذرات کی سب سے زیادہ محتمل عدد دے (کسی ایک توانائی کے حاصل ذرات کی تعداد سے اس توانائی کے حاصل کسی مخصوص حال میں ذرات کی تعداد حاصل کرنے کے حوالہ صرف اس حال کے انحطاط سے تقسیم کرنا ہوگا)۔

$$n(\epsilon) = \begin{cases} e^{-(\epsilon-\mu)/k_B T} & \text{میکسویل بولٹزمن} \\ \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} + 1} & \text{فسری وڈیراک} \\ \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} - 1} & \text{بوس و آئنسٹائن} \end{cases} \quad (۵.۱۰۳)$$

قابل مسمیز ذرات پر میکسویل، بولٹزمن تقسیم^{۴۱}، متعلق فیرمیان پر فرم^{۴۲} و ڈیراک تقسیم^{۴۳} اور متعلق بوسن پر بوس^{۴۴} و آئنسٹائن تقسیم^{۴۵} کا اطلاق ہوگا۔

فسری وڈیراک تقسیم $T \rightarrow 0$ کے لئے خصوصی طور پر سادہ رویہ رکھتی ہے:

$$e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} \rightarrow \begin{cases} 0, & \epsilon < \mu(0) \\ \infty, & \epsilon > \mu(0) \end{cases}$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

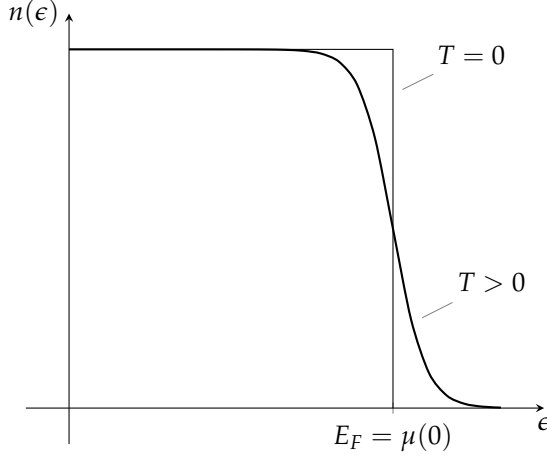
$$n(\epsilon) \rightarrow \begin{cases} 1, & \epsilon < \mu(0) \\ 0, & \epsilon > \mu(0) \end{cases} \quad (۵.۱۰۴)$$

توانائی $\mu(0)$ تک تمام حالات بھرے ہوں گے جبکہ اس سے زیادہ توانائی کے تمام حالات خالی ہوں گے (شکل ۵.۸)۔ ظاہر ہے کہ مطلق صفر حرارت پر کیمیاوی پتہ عین فوسری توانائی ہوگی۔

$$\mu(0) = E_F \quad (۵.۱۰۵)$$

درج حرارت بڑھنے سے بھرے حالات اور خالی حالات کے بیچ غیر استمراری سرحد کو فوسری ڈیراک تقسیم استمراری بناتا ہے، جو شکل ۵.۸ میں دائری منحنی سے ظاہر ہے۔

^{۴۰} chemical potential
^{۴۱} Maxwell-Boltzmann distribution
^{۴۲} Fermi-Dirac distribution
^{۴۳} Bose-Einstein distribution



شکل ۵.۸: فیرمی وڈیراک تقسیم برائے $T = 0$ اور صفر سے کچھ زیادہ T کے لئے۔

ہم متماثل ممیز ذرات کی کامل گیس کی مثال پر دوبارہ لوٹتے ہیں جہاں ہم نے دیکھا کہ حرارت T پر کل توانائی (مساوات ۵.۹۹) درج ذیل ہوگی

$$(۵.۱۰۶) \quad E = \frac{3}{2} N k_B T$$

جبکہ (مساوات ۵.۹۸ کے تحت) کیمیائی پوٹنشل درج ذیل ہوگا۔

$$(۵.۱۰۷) \quad \mu(T) = k_B T \left[\ln \left(\frac{N}{V} \right) + \frac{3}{2} \ln \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_B T} \right) \right]$$

میں مساوات ۵.۸۷ کی بجائے مساوات ۵.۹۱ اور مساوات ۵.۹۵ استعمال کرتے ہوئے متماثل فیرمی ذرات اور متماثل بوسن کی کامل گیس کے لئے مطابقتی کلیات حاصل کرنا چاہوں گا۔ پہلی عائد پابندی (مساوات ۵.۷۸) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$(۵.۱۰۸) \quad N = \frac{V}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^2}{e^{[(\hbar^2 k^2 / 2m) - \mu] / k_B T} \pm 1} dk$$

جہاں مثبت علامت فیرمی ذرات کو اور منفی علامت بوسن کو ظاہر کرتی ہے دوسری عائد پابندی (مساوات ۵.۷۹) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$(۵.۱۰۹) \quad E = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty \frac{k^4}{e^{[(\hbar^2 k^2 / 2m) - \mu] / k_B T} \pm 1} dk$$

ان میں سے پہلی $\mu(T)$ اور دوسری $E(T)$ تعین کرتی ہے (موخر الذکر سے، مثلاً، ہم مخصوص حراری استعداد $C = \partial E / \partial T$ حاصل کرتے ہیں)۔ بد قسمتی سے ان نکلات کو بنیادی تفاسلات کی صورت میں حل کرنا ممکن نہیں ہے اور میں انہیں آپ کے لئے غور کرنے کے لئے چھوڑتا ہوں (سوال ۵.۲۸ اور سوال ۵.۲۹ دیکھیں)۔

سوال ۵.۲۸: مطلق صفر درجہ حرارت پر متنازل مندرمیان کے لیے ان نکلات (مساوات ۵.۱۰۸ اور مساوات ۵.۱۰۹) کی قیمتیں حاصل کریں۔ اپنے نتائج کا موازنہ مساوات ۵.۴۳ اور مساوات ۵.۴۵ کے ساتھ کریں۔ (دھیان رہے کہ مساوات ۵.۱۰۸ اور مساوات ۵.۱۰۹ میں الیکٹرانوں کے لیے 2 اضافی حبز و ضربی پایا جاتا ہے جو چپکری اخطاط کو ظاہر کرتا ہے۔)

سوال ۵.۲۹:

۱. بوسن کے لیے دکھائیں کہ کیمیائی پختہ ہر صورت میں کم سے کم اجبازتی توانائی سے کم ہوگا۔ اشارہ: $n(\epsilon)$ منفی نہیں ہو سکتا ہے۔

ب. بالخصوص تمام T کے لیے، کامل بوس گیس کے لیے $\mu(T) < 0$ ہوگا۔ ایسی صورت میں N اور V کو مستقل تصور کرتے ہوئے دکھائیں کہ T کم کرنے سے $\mu(T)$ یکسر بڑھے گا۔ اشارہ: منفی علامت لیتے ہوئے مساوات ۵.۱۰۸ پر غور کریں۔

ج. حرارت T کم کرتے ہوئے اس وقت ایک بحر ان (جسے بوس انجماد^۴ کہتے ہیں) پیدا ہوتا ہے جب $\mu(T)$ صفر کو پہنچتا ہے۔ مکمل کی قیمت، $\mu = 0$ کے لیے، حاصل کرتے ہوئے اس فنصل حرارت کا کلیہ اخذ کریں جس پر ایسا ہوگا۔ اس فنصل حرارت سے نیچے ذرات زمینی حال میں جمع ہو جائیں گے لہذا غیر مسلسل مجموعے (مساوات ۵.۷۸) کی جگہ استمراری مکمل (مساوات ۵.۱۰۸) کا استعمال بے معنی ہو جائے گا۔ اشارہ:

$$(۵.۱۱۰) \quad \int_0^\infty \frac{x^{s-1}}{e^x - 1} dx = \Gamma(s) \zeta(s)$$

جہاں Γ کو یولر کا گاما تعلق^۵ اور ζ کو ریماں زیتا تعلق^۶ کہتے ہیں۔ ان کی موزوں اعدادی قیمتیں جدول سے دیکھیں۔

د. ہیلیم ^4He کی حرارت فنصل تلاش کریں۔ اس درجہ حرارت پر اس کی کثافت 0.15 g cm^{-3} ہوگی۔ تبصرہ: ہیلیم کی تجرباتی فنصل کی قیمت 2.17 K ہے۔

۵.۴.۵ سیاہ جسمی طیف

نور (برقناطیسی میدان کے کوانٹا) چپکر 1 کے متنازل بوسن ہیں، تاہم یہ بے کیت ذرات لہذا خلتی طور پر اضافیتی ہیں۔ ہم درج ذیل چار دعوے، جو غیر اضافیتی کوانٹائی میکانیات کا حصہ نہیں ہیں، قبول کر کے انہیں یہاں شامل کر سکتے ہیں۔

^۴Bose condensation

^۵gamma function

^۶Riemann zeta function

۱. نوریہ کی تعداد اور توانائی کا تعلق کلیہ پلانک $E = h\nu = \hbar\omega$ دیتا ہے۔
 ۲. عدد موج k اور تعدد کا تعلق $\omega/c = k = 2\pi/\lambda$ ہے جہاں c روشنی کی رفتار ہے۔
 ۳. صرف دو چپکری حالات ہو سکتے ہیں (کووانٹائی عدد m کی قیمت $+1$ یا -1 ہو سکتی ہے، تاہم یہ 0 نہیں ہو سکتی۔
 ۴. نوریوں کی تعداد بقائی مقدار نہیں ہے؛ درجہ حرارت بڑھانے سے (فی اکائی حجم) نوریوں کی تعداد بڑھتی ہے۔
- حبزو 4 کی موجودگی میں، پہلی عائد پابندی (ساوات ۵.۷۸) کا اطلاق نہیں ہوگا۔ ہم ساوات ۵.۸۲ اور اس کے بعد آنے والی مساواتوں میں $0 \rightarrow \alpha$ لے کر اس شرط کو ختم کر سکتے ہیں۔ یوں نوریہ کے لیے سب سے زیادہ محتمل تعداد مکین (ساوات ۵.۹۵) درج ذیل ہوگی۔

$$(5.111) \quad N_\omega = \frac{d_k}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

ایک ڈبہ جس کا حجم V ہو، میں آزاد نوریوں کے لیے d_k کی قیمت، ساوات ۵.۹۷ کو چکر (حبزو 3) کی بنا پر 2 سے ضرب دے کر حاصل ہوگی، جس کو k (حبزو 2) کی بجائے ω کی صورت میں لکھتے ہیں۔

$$(5.112) \quad d_k = \frac{V}{\pi^2 c^3} \omega^3 d\omega$$

یوں تعددی سعت $d\omega$ میں کثافت توانائی $N_\omega \hbar\omega / V$ کی قیمت $\rho(\omega) d\omega$ ہوگی جہاں $\rho\omega$ درج ذیل ہے۔

$$(5.113) \quad \rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3 (e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)}$$

یہ سیاہ جسم طیف^{۷۸} کے لئے پلانک کا مشہور کلیہ ہے جو برقیاتی میدان کی، حرارت T پر توازن کی صورت میں، فی اکائی حجم فی اکائی تعدد، توانائی دیتا ہے۔ اس کو تین مختلف حرارتوں پر شکل ۵.۹ میں ترسیم کیا گیا ہے۔

سوال ۵.۳۰:

۱. ساوات ۵.۱۱۳ استعمال کرتے ہوئے طول موج کی سعت $d\lambda$ میں کثافت توانائی تعین کریں۔ اشارہ:

$$\rho(\omega) d\omega = \bar{\rho}(\lambda) d\lambda$$

لے کر $\bar{\rho}(\lambda)$ کے لیے حل کریں۔

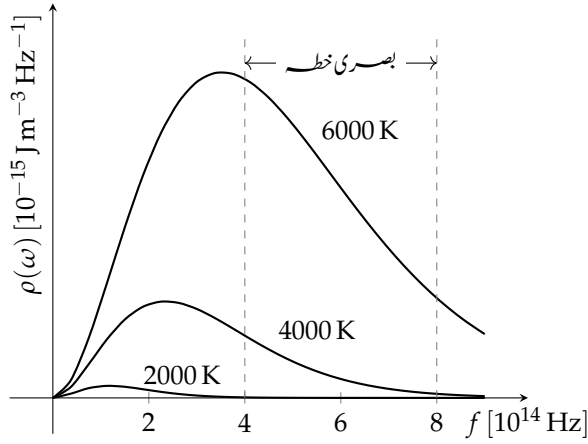
ب. اس طول موج کے لئے، جس پر سیاہ جسمی کثافت توانائی زیادہ سے زیادہ ہو، **وائن قانون ہٹاؤ**^{۷۹}

$$(5.114) \quad \lambda_{\text{بندتر}} = \frac{2.90 \times 10^{-3} \text{ mK}}{T}$$

^{۷۸} درحقیقت۔ ہمیں اس کلیہ سے کچھ لینا دینا نہیں چوتے یہ (غیر اضافیتی) مساوات شرودنگر سے حاصل ہوا؛ خوش قسمتی سے اضافیتی صورت میں بھی انحطاط ٹھیک یہی ہے۔

^{۷۹} blackbody spectrum

^{۷۹} Wien displacement law



شکل ۵.۹: سیاہ جسمی اخراج کے لئے کلیہ پلانک، مساوات ۵.۱۱۳۔

اخذ کریں۔ اشارہ: آپ کو کیلو لیٹر یا کمپیوٹر کی استعمال سے مساوات $(5 - x) = 5e^{-x}$ حل کر تین بامعنی ہندسوں تک اعدادی جواب حاصل کرنا ہوگا۔

سوال ۵.۳۱: سیاہ جسمی اخراج میں کل کثافت توانائی کا سٹیفن بولٹزمنز کلیہ: σ

$$(۵.۱۱۵) \quad \frac{E}{V} = \left(\frac{\pi^2 k_B^4}{15 \hbar^3 c^3} \right) T^4 = (7.57 \times 10^{-16} \text{ J m}^{-3} \text{ K}^{-4}) T^4$$

اخذ کریں۔ اشارہ: مساوات ۵.۱۱۰ استعمال کرتے ہوئے مکمل کی قیمت تلاش کریں۔ یاد رہے کہ $\zeta(4) = \pi^4/90$ ہوگا۔

اضافی سوالات برائے باب ۵

سوال ۵.۳۲: فرض کریں ایک بُعدی ہارمونی ارتعاشی مخفیہ (مساوات ۲.۴۳) میں کیت m کے دو غیر متعامل ذرات پائے جاتے ہیں۔ فرض کریں ان میں سے ایک زمینی حال اور دوسرا پہلے ہیجان حال میں پایا جاتا ہے۔ درج ذیل صورتوں میں $\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle$ کا حساب کریں۔ (الف) ذرات متماثل ممیز ہیں، (ب) یہ متماثل بوسن ہیں، (ج) یہ متماثل فرمیان ہیں۔ چکر کو نظر انداز کریں (اگر آپ ایسا نہیں کرنا چاہتے تو دونوں کو ایک ہی چکر کی حال میں تصور کریں)۔

سوال ۵.۳۳: فرض کریں آپ کے پاس تین ذرات اور تین منفرد یک ذروی حالات $(\psi_a(x), \psi_b(x))$ اور $(\psi_c(x))$ دستیاب ہیں۔ درج ذیل صورتوں میں کتنے (مختلف) تین ذروی حالات تیار کیے جاسکتے ہیں؟ (الف)

ذرات متناثر میسر ہیں، (ب) یہ متناثر بوسن ہیں، (ج) یہ متناثر مندرمیان ہیں۔ (ضروری نہیں کہ ذرات مختلف حالات میں ہوں؛ قابل ممیز ذرات کی صورت میں $\psi_a(x_1)\psi_a(x_2)\psi_a(x_3)$ ایک ممکن صورت ہو سکتا ہے۔)

سوال ۵.۳۴: دو البادی لامتناہی چوکور کنویں میں غیر متعادل الیکٹرانوں کی مندرمی توانائی کا حساب کریں۔ فی اکائی رقبہ آزاد الیکٹرانوں کی تعداد σ لیں۔

سوال ۵.۳۵: ایک مخصوص قسم کے سرد ستارے (جنہیں سفید بونا^۸ کہتے ہیں) کو تجاذبی انہدام سے الیکٹرانوں کی انحطاطی دباؤ (مساوات ۵.۳۶) روکتا ہے۔ مستقل کشاف مندرم کر تے ہوئے، ایسے جسم کا رداس R درج ذیل طریقے سے دریافت کیا جاسکتا ہے۔

ا. کل الیکٹران توانائی (مساوات ۵.۳۵) کو رداس، مرکزیو (پروٹان جمع نیوٹران) کی تعداد N ، فی مرکزیو الیکٹران کی تعداد q ، اور الیکٹران کی کیت m کی صورت میں لکھیں۔

ب. یکساں کشاف کے کرہ کی تجاذبی توانائی تلاش کریں۔ اپنے جواب کو (عالمگیر تجاذبی مستقل) G ، R ، N ، اور ایک مرکزیو کی کیت M کی صورت میں لکھیں۔ یاد رہے کہ تجاذبی توانائی منفی ہے۔

ج. وہ رداس معلوم کریں جس پر حبزو-الف اور حبزو-ب کی مجموعی توانائی کم سے کم ہو۔ جواب:

$$R = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2 q^{5/3}}{GmM^2 N^{1/3}}$$

(کل کیت بڑھنے سے رداس گھٹتا ہے!) مساوائے N کے، تمام متقلات کی قیمتیں پر کریں اور $q = 1/2$ لیں (حقیقت میں، جوہری عدد بڑھنے سے q کی قیمت معمولی کم ہوتی ہے، لیکن ہمارے مقصد کے لئے یہ کافی ٹھیک ہے۔) جواب: $R = 7.6 \times 10^{25} N^{-1/3}$

د. سورج کے برابر کیت کے سفید بونا کا رداس، گلو میٹروں میں، دریافت کریں۔

ه. الیکٹران کی ساکن توانائی کے ساتھ، حبزو-د میں سفید بونا کی مندرمی توانائی (الیکٹران وولٹ میں تعین کرتے ہوئے) کا موازنہ کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ یہ نظام اضافیت کے بہت قریب ہے (سوال ۵.۳۶ دیکھیں)۔

سوال ۵.۳۶: ہم کلاسیکی حرکی توانائی $E = p^2/2m$ میں اضافیتی کلیہ $E = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} - m_0 c^2$ پر کرتے ہوئے آزاد الیکٹران گیس نظریہ (حصہ ۵.۳.۱) کو اضافیتی دائرہ کار تک وسعت دے سکتے ہیں۔ معیار حرکت اور سمتیہ موج کا تعلق ہمیشہ کی طرح $\hbar k = p$ ہوگا۔ بالخصوص انتہائی اضافیتی حد میں $E \approx pc = \hbar ck$ ہوگا۔

ا. مساوات ۵.۳۴ میں $\hbar^2 k^2 / 2m$ کی جگہ بالائے اضافیتی فقترہ، $\hbar ck$ ، پر کر کے E حاصل کریں۔

ب. بالائے اضافیتی الیکٹران گیس کی صورت میں سوال ۵.۳۵ کے حبزو-الف اور حبزو-ب کو دوبارہ حل کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ، R سے قطع نظر، کوئی مستحکم کم سے کم قیمت نہیں پائی جاتی؛ اگر کل توانائی مثبت ہو تب انحطاطی

قوتیں تجاذبی قوتوں سے تجاذب کرتی ہیں، جس کی بنا پر ستارہ پھولے گا، اس کے برعکس اگر کل توانائی منفی ہو تب تجاذبی قوتیں جیتی ہیں، جس کی بنا پر ستارہ منہدم ہوگا۔ مرکز دبیہ کی وہ فاصلہ تعداد، N_c ، معلوم کریں جس کے لیے $N > N_c$ پر تجاذبی انہدام واقع ہوگا۔ اس کو چندر شیکھر حد^{۸۲} کہتے ہیں۔ جواب: 2.4×10^{57} ۔ مطابقتی ستارہ کی کیمت کیا ہوگی (اپنے جواب کو سورج کی کیمت کے مضرب کے صورت میں لکھیں)۔ اس سے بھاری ستارے سفید بونا نہیں بنتے، بلکہ مزید منہدم ہو کر (اگر حالات درست ہوں) نیوٹرائز ستارے^{۸۳} بنتے ہیں۔

ج. انتہائی زیادہ کثافت پر، مخالفے بیٹا تحلیل^{۸۴}، $e^- + p^+ \rightarrow n + \bar{\nu}$ ، تقریباً تمام پروٹان اور الیکٹران کو نیوٹران میں بدلتا ہے (جس کی بنا پر نیوٹرینو خارج ہوتے ہیں جو ساتھ توانائی لے کر جاتے ہیں)۔ آخر کار نیوٹران انخطاطی دباؤ انہدام کو روکتا ہے، جیسا کہ سفید بونا میں الیکٹران انخطاطی قوتیں کرتی ہیں (سوال ۵.۳۵ دیکھیں)۔ سورج کے برابر کیمت کے نیوٹران ستارہ کا رداس تلاش کریں۔ ساتھ ہی (نیوٹران) منبری توانائی کا حساب کر کے، اس کا ساکن نیوٹران کی توانائی کے ساتھ موازنہ کریں۔ کیا نیوٹران ستارہ کو غمیرا اضافیتی تصور کیا جاسکتا ہے؟

سوال ۵.۳:

۱. تین ابعادی ہارمونی ارتعاشی مخفیہ (سوال ۴.۳۸) میں متبادل میسز ذرات کا کیمپادی مخفیہ اور کل توانائی تلاش کریں۔ اشارہ: یہاں مساوات ۵.۷۸ اور مساوات ۵.۷۹ میں دیے گئے مجموعوں کی قیمتیں ٹھیک ٹھیک حاصل کی جاسکتی ہیں؛ ہمیں لامستثنائی چوکور کنویں کی مثال میں مکمل کی تخمینی قیمت پر ہمیں گزارہ کرنا پڑا ہٹ؛ یہاں ایسا کرنے کی ضرورت نہیں۔ ہندسہ تسلسل^{۸۵}

$$(۵.۱۱۲) \quad \frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n$$

کا تفرق لینے سے

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{x}{1-x} \right) = \sum_{n=1}^{\infty} (n+1)x^n$$

حاصل ہوگا۔ اسی طرح بلند تفرقات حاصل کیے جاسکتے ہیں۔ جواب:

$$(۵.۱۱۷) \quad E = \frac{3}{2} N \hbar \omega \left(\frac{1 + e^{-\hbar \omega / k_B T}}{1 - e^{-\hbar \omega / k_B T}} \right)$$

ب. تحدیدی حد $k_B T \ll \hbar \omega$ پر تبصرہ کریں۔

ج. مسئلہ مساوی خانہ بندی^{۸۶} کی روشنی میں کلاسیکی حد $\hbar\omega \gg k_B T$ پر تبصرہ کریں۔ تین ابعادی ہارمونی
مربع میں ایک ذرے کے درجات آزادی^{۸۷} کتنے ہوں گے؟

باب ۶

غیر تابع وقت نظریہ اضطراب

۶.۱ غیر انخطاطی نظریہ اضطراب

۶.۱.۱ عمومی ضابطہ بندی

فرض کریں ہم کسی مخفیہ (مثلاً ایک بُعدی لامتناہی چوکور کنویں) کے لئے غیر تابع وقت مساوات شروع کرتے ہیں:

$$(۶.۱) \quad H^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0$$

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

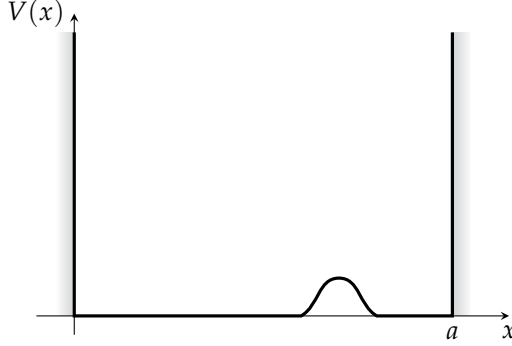
$$(۶.۲) \quad \langle \psi_n^0 | \psi_m^0 \rangle = \delta_{nm}$$

اور ان کی مطابقتی امتیازی اقدار E_n^0 حاصل کرتے ہیں۔ اب ہم مخفیہ میں معمولی اضطراب پیدا کرتے ہیں (مثلاً کنویں کی تہہ میں ایک چھوٹا موڑ ڈال کر؛ شکل ۶.۱) ہم نئے امتیازی تفاعلات اور امتیازی اقدار جاننا چاہیں گے

$$(۶.۳) \quad H \psi_n = E_n \psi_n$$

تاہم ہماری خوش قسمتی کے علاوہ ایسی کوئی وجہ نہیں پائی جاتی کہ ہم اس پیچیدہ مخفیہ کے لیے مساوات شروع نہ کر سکیں۔ ٹھیک ٹھیک حل کر پائیں۔ نظریہ اضطراب، غیر مضطرب صورت کے معلوم ٹھیک ٹھیک حلوں کو لے کر، قدم قدم چلتے ہوئے مضطرب مسئلے کے تخمینی حل دیتا ہے۔ ہم نئے ہیملٹنی کو دو اجزاء کا مجموعہ:

$$(۶.۴) \quad H = H^0 + \lambda H'$$



شکل ۶.۱: لامتناہی چوکور کنویں میں معمولی اضطراب

لکھ کر آغاز کرتے ہیں، جہاں H' اضطراب ہے (زیر بالا میں 0 ہمیشہ غیر مضطرب مقدار کو ظاہر کرتا ہے)۔ ہم وقتی طور پر λ کو ایک چھوٹا عدد تصور کرتے ہیں؛ بعد میں اس کی قیمت کو بڑھا کر ایک (1) کر دی جائے گی، اور H اصل ہیملٹنی ہوگی۔ اگلے قدم میں، ہم ψ_n اور E_n کو λ کی وقتی تسلسل کے صورت میں لکھتے ہیں۔

$$(۶.۵) \quad \psi_n = \psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots$$

$$(۶.۶) \quad E_n = E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots$$

یہاں n ویں امتیازی مقدار کی قیمت میں **اولیٰ رتبہ** تصحیح کو E_n^1 ظاہر کرتا ہے جبکہ n ویں امتیازی تفاعل میں **اولیٰ رتبہ** تصحیح کو ψ_n^1 ظاہر کرتا ہے؛ اسی طرح E_n^2 اور ψ_n^2 دوم رتبہ تصحیح ہوں گی، وغیرہ۔ مساوات ۶.۵ اور مساوات ۶.۶ کو مساوات ۶.۳ میں پُر کر کے

$$\begin{aligned} (H^0 + \lambda H')[\psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots] \\ = (E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots)[\psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots] \end{aligned}$$

یا λ کے ایک جیسے طاقتوں کو اکٹھا لکھ کر (درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$\begin{aligned} H^0 \psi_n^0 + \lambda (H^0 \psi_n^1 + H' \psi_n^0) + \lambda^2 (H^0 \psi_n^2 + H' \psi_n^1) + \dots \\ = E_n^0 \psi_n^0 + \lambda (E_n^0 \psi_n^1 + E_n^1 \psi_n^0) + \lambda^2 (E_n^0 \psi_n^2 + E_n^1 \psi_n^1 + E_n^2 \psi_n^0) + \dots \end{aligned}$$

مستمر رتبہ (λ^0) کی صورت میں اس سے $H^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0$ حاصل ہوتا ہے، جو نئی مساوات نہیں ہے (مساوات ۶.۱)۔ رتبہ اول (λ^1) تک درج ذیل ہوگا۔

$$(۶.۷) \quad H^0 \psi_n^1 + H' \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^1 + E_n^1 \psi_n^0$$

ہمیشہ کی طرح، وقتی تسلسل پھیلاؤ کی یکتائی ضمانت دیتی ہے کہ ایک جسمی طاقت کے عددی سر ایک جیتے ہوں گے۔

رتبہ دوم (λ^2) تک درج ذیل ہوگا

$$(۶.۸) \quad H^0 \psi_n^2 + H' \psi_n^1 = E_n^0 \psi_n^2 + E_n^1 \psi_n^1 + E_n^2 \psi_n^0$$

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

۶.۱.۲ اول رتبی نظریہ

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

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

تاہم H^0 ہر مشی ہے لہذا

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

ہوگا، جو دائیں ہاتھ کے پہلے جزو کو حذف کرے گا۔ مزید $\langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = 1$ کی بنا پر درج ذیل ہوگا۔^۲

$$(۶.۹) \quad E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle$$

یہ رتبہ اول نظریہ اضطراب کا بنیادی نتیجہ ہے؛ بلکہ عملاً یہ پوری کوانٹائی میکانیات میں غالب سب سے اہم مساوات ہے۔ یہ کہتی ہے کہ غیر مضطرب حال میں اضطراب کی توقعاتی قیمت، توانائی کی اول رتبی تصحیح ہوگی۔

مثال ۶.۱: لامتناہی چوکور کنویں کے غیر مضطرب تفاعلات موج (مساوات ۲.۲۸) درج ذیل ہیں۔

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

فرض کریں ہم کنویں کی ”تہ“ (زمین) کو مستقل مقدار V_0 اوپر اٹھاتے ہوئے اس نظام کو مضطرب کرتے ہیں (شکل ۶.۲)۔ توانائیوں میں رتبہ اول تصحیح تلاش کریں۔

حل: یہاں $H' = V_0$ ہوگا لہذا n ویں حال کی توانائی میں رتبہ اول تصحیح درج ذیل ہوگی۔

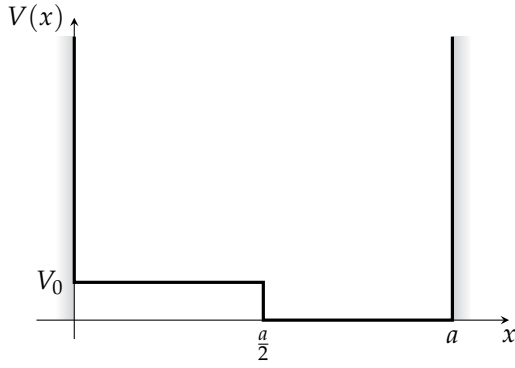
$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | V_0 | \psi_n^0 \rangle = V_0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = V_0$$

یوں تصحیح شدہ توانائیوں کی سطحیں $E_n \cong E_n^0 + V_0$ ہوں گی؛ جی ہاں، تمام V_0 مقدار اوپر اٹھتی ہیں۔ یہاں حیرانگی کی بات صرف یہ ہے کہ رتبہ اول نظریہ بالکل ٹھیک جواب دیتا ہے۔ یوں ظاہر ہے کہ مستقل اضطراب کی

^۲ موجودہ سیاق و سباق میں $\langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle$ یا $\langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle$ (جس میں انتہائی لکیری شامسل کی گئی ہے) لکھنے میں کوئی مندرج نہیں، چونکہ ہم حال کو نفس عمل موج کے لحاظ سے ”نام“ دیتے ہیں۔ لیکن مومنہ الذکر علامتی اظہار زیادہ بہتر ہے، چونکہ یہ ہمیں اس روایت سے آزاد کرتا ہے۔



شکل ۶.۲: پورے کنوئیں میں مستقل اضطراب



شکل ۶.۳: نصف کنوئیں میں مستقل اضطراب

صورت میں تمام بلند رتبی تصحیح صفر ہوں گی۔ اس کے برعکس کنوئیں کی نصف چوڑائی تک اضطراب کی وسعت کی صورت (شکل ۶.۳) میں درج ذیل ہوگا۔

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

اب توانائی کی ہر سطح $\frac{V_0}{2}$ اوپر اٹھتی ہے۔ یہ غالباً بالکل ٹھیک نتیجہ نہیں، تاہم اول رتبی تخمین کے نقطہ نظر سے معقول ہے۔

□

کیساں کوئی میچیز لامستناہی چو کو رکنوں کی خصوصیات پر منحصر نہیں ہے، البتہ اپنی کچھ کسی بھی مخفیہ کے لیے مستقل اضطراب کی صورت میں درست ہوگا۔

مساوات ۶.۹ ہمیں توانائی کی اول رتبہ تصحیح دیتا ہے؛ تفاعل موج کے لئے اول رتبہ تصحیح حاصل کرنے کی ضرورت ہے ہم مساوات ۶.۷ کو درج ذیل روپ میں لکھتے ہیں۔

$$(H^0 - E_n^0)\psi_n^1 = -(H' - E_n^1)\psi_n^0 \quad (۶.۱۰)$$

چونکہ اس کا دایاں ہاتھ ایک معلوم تفاعل ہے، لہذا یہ ψ_n^1 کی غیر متجانس تفرقی مساوات ہے۔ اب غیر مضطرب تفاعلات موج ایک مکمل سلسلہ دیتے ہیں، لہذا (کسی بھی تفاعل کی طرح) ψ_n^1 کو ان کا خطی جوڑ:

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

لکھا جاسکتا ہے۔ اگر ψ_n^1 مساوات ۶.۱۰ کو مطمئن کرتے ہوں تب کسی بھی مستقل α کے لیے $(\psi_n^1 + \alpha \psi_n^0)$ بھی اس مساوات کو مطمئن کریں گے، لہذا ہم جزو ψ_n^0 کو منفی کر سکتے ہیں؛ ایسا ہی کرتے ہوئے مساوات ۶.۱۱ کے مجموعہ میں $m = n$ شامل نہیں کیا گیا۔ عددی سر $c_m^{(n)}$ تعین کر کے ہم مسئلہ حل کر سکتے ہیں۔

ہم مساوات ۶.۱۰ میں مساوات ۶.۱۱ پُر کرتے ہوئے، اور یہ جاننے ہوئے کہ غیر مضطرب مساوات شرودنگر (مساوات ۶.۱) کو ψ_m^0 مطمئن کرتے ہیں درج ذیل حاصل کرتے ہیں۔

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

اس کا ψ_l^0 کے ساتھ اندرونی ضرب لیتے ہیں۔

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

اگر $l = n$ ہو تب باایاں ہاتھ صفر ہوگا اور ہمیں دوبارہ مساوات ۶.۹ ملتی ہے؛ اگر $l \neq n$ ہو تو

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

یا

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

ہوگا، لہذا درج ذیل حاصل ہوگا۔

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

جب تک غیر مضطرب توانائی طیف غیر انحطاطی ہو، نسب نہ کوئی مسئلہ کھڑا نہیں کرتا (چونکہ کسی بھی عددی سر کے لئے $m = n$ نہیں ہوگا)۔ ہاں اگر دو غیر مضطرب حالات کی توانائیاں ایک جتنی ہوں (مساوات ۶.۱۲ کے نسب نہ میں صفر پایا جائے گا) تب نسب نہ ہمیں مصیبت میں ڈالتا ہے؛ ایسی صورت میں انحطاطی نظریہ اضطراب کی ضرورت پیش آئے گی، جس پر حصہ ۶.۲ میں غور کیا جائے گا۔

یوں اول رتبی نظریہ اضطراب مکمل ہوتا ہے۔ توانائی کی اول رتبی تصحیح، E_n^1 ، مساوات ۶.۹ دیتی ہے، اور تفاعل موج کی اول رتبی تصحیح، ψ_n^1 ، مساوات ۶.۱۳ دیتی ہے۔ میں آپ کو یہاں یہ ضرورت ناپا ہوں گا کہ اگرچہ نظریہ اضطراب عموماً توانائیوں کی انتہائی درست قیمتیں دیتا ہے (یعنی $E_n^0 + E_n^1$ اصل قیمت E_n کے بہت قریب ہوگی)، اس سے حاصل تفاعلات موج عموماً افسوس کن ہوتے ہیں۔

سوال ۶.۱: فرض کرے ہم لامتناہی چوکور کنویں کے وسط میں δ تفاعل عملی موڑا:

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

ڈالتے ہیں، جہاں α ایک مستقل ہے۔

ا. احبازتی توانائیوں کی اول رتبی تصحیح تلاش کریں۔ بتائیں جفت n کی صورت میں توانائیاں کیوں مضطرب نہیں۔

ب. زمینی حال کی تصحیح، ψ_1^1 ، کی اتساع (مساوات ۶.۱۳) کے ابتدائی تین غیر صفر اجزاء تلاش کریں۔

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

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

جہاں $\omega = \sqrt{k/m}$ کلاسیکی تعدد ہے۔ اب فرض کریں مقیاس پلکے میں معمولی تبدیلی رونما ہوتی ہے: $k \rightarrow (1 + \epsilon)k$ (جس سے اسپرنگ کی پلکے کم ہوگی)۔

ا. نئی توانائیوں کی بالکل ٹھیک ٹھیک قیمتیں حاصل کریں (جو یہاں ایک آسان کام ہے)۔ اپنے کلیہ کو دوم رتبہ تک ϵ کی قوتیں تسلسل میں پھیلائیں۔

ب. اب مساوات ۶.۹ استعمال کرتے ہوئے توانائی میں اول رتبی اضطراب کا حساب لگائیں۔ یہاں H' کیا ہوگا؟ اپنے نتیجے کا جزو-۱ کے ساتھ موازنہ کریں۔ اشارہ: یہاں کسی نئے مکمل کی قیمت کے حصول کی ضرورت اور نہ احبازت ہے۔

سوال ۶.۳: ایک لامتناہی چوکور کنویں (مساوات ۲.۱۹) میں دو یکساں بوسن رکھے جاتے ہیں۔ یہ مخفیہ

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

(جہاں V_0 ایک مستقل جس کا بُعد توانائی ہے اور a کنویں کی چوڑائی ہے) کے ذریعے ایک دوسرے پر بہت معمولی اثر انداز ہوتے ہیں۔

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

ب. زمینی حال اور پہلے ہیجان حال کی توانائیوں پر ذرات کے باہمی اثر کا تخمینہ اول رتبہ نظریہ اضطراب سے دریافت کریں۔

۶.۱.۳ دوم رتبہ توانائیاں

اسی طرح بڑھتے ہوئے، ہم ψ_n^0 اور دور تہی مساوات (مساوات ۶.۸) کا اندرونی ضرب لیتے ہیں۔

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

یہاں بھی ہم H^0 کے ہر مشین کو بروئے کار لاتے ہیں:

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

لہذا بائیں ہاتھ کا پہلا جزو دائیں ہاتھ کے پہلے جزو کے ساتھ کٹ جائے گا۔ ساتھ ہی $\langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = 1$ ہے لہذا E_n^2 کا درج ذیل کلیہ حاصل ہوتا ہے۔

$$(۶.۱۴) \quad E_n^2 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^1 \rangle - E_n^1 \langle \psi_n^0 | \psi_n^1 \rangle$$

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

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

ہوگا جس کی بنا پر

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

یا

$$(۶.۱۵) \quad E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0}$$

ہوگا۔ یہ دور تہی نظریہ اضطراب کا بنیادی نتیجہ ہے۔

باب ۶. غیر تابَع وقت نظریہ اضطراب

اگرچہ ہم اسی طرح آگے بڑھتے ہوئے تفاعل موج (ψ_n^2) کی دوم رتبہ تصحیح، توانائی کی سوم رتبہ تصحیح، وغیرہ حاصل کر سکتے ہیں، لیکن عملاً اس ترکیب کو صرف مساوات ۶.۱۵ تک استعمال کرنا سودمند ہوگا۔^۵

سوال ۶.۴:

۱. توانائیوں کی دوم رتبہ تصحیح (E_n^2)، سوال ۶.۱ کے مخفیہ کے لیے تلاش کریں۔ تبصرہ: آپ تسلسل کا مجموعہ صریحاً حاصل کر کے طاق n کیلئے $2m(\alpha/\pi\hbar n)^2$ حاصل کر سکتے ہیں۔

ب. زمینی حال توانائی کے لئے دوم رتبہ تصحیح (E_n^2)، سوال ۶.۲ کے مخفیہ کے لیے تلاش کریں۔ تصدیق کریں کہ آپ کا نتیجہ بالکل درست نتیجے کے مطابق ہے۔

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

۱. دکھائیں کہ توانائیوں کی دو سطحوں میں کوئی اول رتبہ تبدیلی پیدا نہیں ہوگی۔ دور رتبہ تصحیح تلاش کریں۔ اشارہ: سوال ۳.۳۳ دیکھیں۔

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

۶.۲ انحطاطی نظریہ اضطراب

اگر غیر مضطرب حالات انحطاطی ہوں؛ یعنی، دو (یا دو سے زیادہ) منفرد حالات (ψ_a^0 اور ψ_b^0) کی توانائیاں ایک جیسی ہوں، تب سادہ نظریہ اضطراب غیر کارآمد ہوگا، چونکہ $c_a^{(b)}$ (مساوات ۶.۱۲) اور E_a^2 (مساوات ۶.۱۵) بے فتاویٰ بڑھتے ہیں (ماسوائے اس صورت میں جب شمار کنندہ صفر ہو: $\langle \psi_a^0 | H' | \psi_b^0 \rangle = 0$)؛ اس پوشیدہ صورت کو ہم بعد میں استعمال کریں گے۔ یوں انحطاطی صورت میں ہمیں توانائیوں کی اول رتبہ تصحیح (مساوات ۶.۹) پر بھی یقین نہیں کرنا چاہیے اور ہمیں مسئلے کا کوئی دوسرا حل ڈھونڈنا ہوگا۔

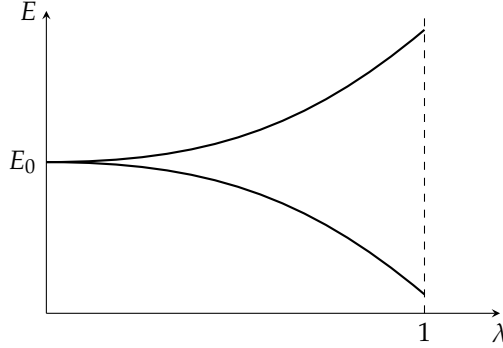
۶.۲.۱ دو پڑتا انحطاط

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

$$(۶.۱۶) \quad H^0 \psi_a^0 = E^0 \psi_a^0, \quad H^0 \psi_b^0 = E^0 \psi_b^0, \quad \langle \psi_a^0 | \psi_b^0 \rangle = 0$$

^۵ مختصر انداز لکھائی میں $\Delta_{mn} \equiv E_m^0 - E_n^0$ اور n ویں توانائی کی پہلی تین تصحیح درج ذیل ہوں گی۔

$$E_n^1 = V_{nn}, \quad E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{\Delta_{nm}}, \quad E_n^3 = \sum_{l, m \neq n} \frac{V_{nl} V_{lm} V_{mn}}{\Delta_{nl} \Delta_{nm}} - V_{nn} \sum_{m \neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{\Delta_{nm}^2}$$



شکل ۶.۲: انخطاط کا حالت پذیرے اضطراب۔

دھیان رہے کہ ان حالات کا ہر خطی جوڑ

(۶.۱۷)

$$\psi^0 = \alpha \psi_a^0 + \beta \psi_b^0$$

بھی H^0 کا امتیازی حال ہو گا اور اس کی امتیازی قدر E^0 بھی وہی ہو گی۔

(۶.۱۸)

$$H^0 \psi^0 = E^0 \psi^0$$

عام طور پر اضطراب (H') انخطاط کو ”توڑے“ (یا ”منسوخ“ کرے) گا: جیسے جیسے ہم λ کی قیمت (0 سے 1 کی طرف) بڑھاتے ہیں مشترک غیر مضطرب توانائی E^0 دو ٹکڑوں میں تقسیم ہوگی (شکل ۶.۲)۔ مخالف رخ چلتے ہوئے اگر ہم اضطراب کو بند (یعنی صفر) کر دیں تب ”بالائی“ حال کی تخفیف، ψ_a^0 اور ψ_b^0 کے ایک خطی جوڑ میں جبکہ ”زیریں“ حال کی تخفیف کسی دوسرے عمودی خطی جوڑ میں ہو گا، تاہم ہم قبل از وقت نہیں جان سکتے کہ یہ ”موزوں“ خطی جوڑ کیا ہوں گے۔ چونکہ ہم غیر مضطرب حالات نہیں جانتے، لہذا ہم اول رتبی توانائیوں (مساوات ۶.۹) کا حاب نہیں کر سکتے۔

اسی لیے، ہم ان ”موزوں“ غیر مضطرب حالات کو فی الحال عمومی روپ (مساوات ۶.۱۷) میں لکھتے ہیں، جہاں α اور β متبادل تغیر ہوں گے۔ ہم مساوات شروع کر

(۶.۱۹)

$$H\psi = E\psi$$

کو $H = H^0 + \lambda H'$ اور

(۶.۲۰)

$$E = E^0 + \lambda E^1 + \lambda^2 E^2 + \dots, \quad \psi = \psi^0 + \lambda \psi^1 + \lambda^2 \psi^2 + \dots$$

باب ۶. غیر تانج وقت نظریہ اضطراب

کیلئے حل کرنا چاہتے ہیں۔ انہیں مساوات ۶.۱۹ میں ڈال کر (ہمیشہ کی طرح) λ کی ایک جیسی طاقتیں اکٹھی کر کے درج ذیل حاصل کرتے ہیں۔

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

اب $H^0\psi^0 = E^0\psi^0$ (مساوات ۶.۱۸) کی بنا پر اولین اجزاء ایک دوسرے کے ساتھ کٹ جائیں گے، جبکہ λ^1 رتبہ کے لیے درج ذیل ہوگا۔

$$(۶.۲۱) \quad H^0\psi^1 + H'\psi^0 = E^0\psi^1 + E^1\psi^0$$

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 ہر مشی ہے، لہذا بائیں ہاتھ پہلا جبز و دائیں ہاتھ کے پہلے جبز کے ساتھ کٹ جائے گا۔ مساوات ۶.۱۷ کو استعمال کرتے ہوئے اور معیاری عمودیت کی شرط (مساوات ۶.۱۶) کو بروئے کار لاتے ہوئے

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

یا مختصراً

$$(۶.۲۲) \quad \alpha W_{aa} + \beta W_{ab} = \alpha E^1$$

حاصل ہوگا جہاں درج ذیل ہوگا۔

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

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

$$(۶.۲۴) \quad \alpha W_{ba} + \beta W_{bb} = \beta E^1$$

دھیان رہے کہ (اصولاً) ہمیں تمام W معلوم ہیں، چونکہ یہ غیر مضطرب تفاعلات موج ψ_a^0 اور ψ_b^0 کے لحاظ سے H' کے ارکان متالاب ہیں۔ مساوات ۶.۲۴ کو W_{ab} سے ضرب دے کر، مساوات ۶.۲۲ استعمال کرتے ہوئے βW_{ab} کو خارج کر کے، درج ذیل حاصل ہوگا۔

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

غیر صفر α کی صورت میں مساوات ۶.۲۵ ہمیں E^1 کی مساوات دیگی۔

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

دو درجہ کلیہ استعمال کرتے ہوئے اور (مساوات ۶.۲۳ سے) جانتے ہوئے کہ $W_{ba} = W_{ab}^*$ ہوگا، ہم درج ذیل اخذ کرتے ہیں۔

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

یہ انخطاطی نظریہ اضطراب کا بنیادی نتیجہ ہے، جہاں دو جبزدو مضطرب توانائیاں ہیں۔

لیکن صفر α کی صورت میں کیا ہوگا؟ ایسی صورت میں $\beta = 1$ ہوگا، لہذا مساوات ۶.۲۲ کے تحت $W_{ab} = 0$ اور مساوات ۶.۲۴ کے تحت $E^1 = W_{bb}$ ہوگا۔ یہ درحقیقت عمومی نتیجہ (مساوات ۶.۲۷) 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 غیر انخطاطی نظریہ اضطراب سے حاصل ہوتے (مساوات ۶.۹)۔ یہ محض ہماری خوش قسمتی ہے: حالات ψ_a^0 اور ψ_b^0 پہلے سے ”موزوں“ خطی جوڑتھے۔ کیا اچھا ہوتا، اگر ہم آغاز سے ہی ”موزوں“ حالات جان پاتے؛ تب ہم غیر انخطاطی 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 ہر مشی عامل ہے، جو H^0 اور H' کے ساتھ مقلوبی ہے۔ اگر H^0 کے انخطاطی امتیازی تفاعلات ψ_a^0 اور ψ_b^0 عامل A کے بھی امتیازی تفاعلات ہوں، جن کے منفرد امتیازی امثدار 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 (لہذا ψ_a^0 اور ψ_b^0 نظریہ اضطراب میں متابل استعمال، ”موزوں“ حالات ہوں گے)۔

ثبوت: ہم فرض کر چکے کہ $[A, H'] = 0$ ہوگا لہذا 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 لہذا $W_{ab} = 0$ ہوگا۔

سلیقہ: اگر آپ کا سامنا انخطاطی حالات سے ہو، ایسا ہر مشی عامل A تلاش کرنے کی کوشش کریں جو H^0 اور H' کے ساتھ مقلوبی ہو؛ H^0 اور A کے بیک وقت امتیازی تفاعلات کو غیر مضطرب حالات منتخب کر کے سادہ اول رتبہ نظریہ اضطراب بروئے کار لائیں۔ ایسے عامل کی تلاش میں ناکامی کی صورت میں آپ کو مساوات ۶.۲۷ استعمال کرنا ہوگا، جس کی ضرورت عملاً کم ہی پڑتی ہے۔

□

سوال ۶.۶: دو ”موزوں“ غیر مضطرب حالات

$$\psi_{\pm}^0 = \alpha_{\pm} \psi_a^0 + \beta_{\pm} \psi_b^0$$

لیں، جہاں α_{\pm} اور β_{\pm} کو (معمول زنی تک) مساوات ۶.۲۲ (یا مساوات ۶.۲۳) تحسین کرتا ہے۔ صریحاً درج ذیل دکھائیں۔

$$1. \quad \psi_{\pm}^0 \text{ عمودی ہیں: } (\langle \psi_{+}^0 | \psi_{-}^0 \rangle = 0) ;$$

$$2. \quad \langle \psi_{+}^0 | H' | \psi_{-}^0 \rangle = 0$$

$$3. \quad \langle \psi_{\pm}^0 | H' | \psi_{\pm}^0 \rangle = E_{\pm}^1 \text{ جہاں } E_{\pm}^1 \text{ کی قیمت مساوات ۶.۲۷ دیتی ہے۔}$$

سوال ۶.۷: فرض کرے ایک ذرہ، جس کی کمیت m ہے، ایک بندیک بُدی تار، جس کی لمبائی L ہے، پر آزادی سے حرکت کرتا ہے (سوال ۲.۴۶)۔

۱. دکھائیں کہ ساکن حالات کو درج ذیل روپ میں لکھا جاسکتا ہے

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

جہاں $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ اور اجازتی توانائیاں درج ذیل ہوں گی۔

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

دھیان رہے کہ زمینی حال ($n = 0$) کے علاوہ تمام حالات دہرے انحطاطی ہیں۔

ب. فرض کریں ہم اب اضطراب

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

متعارف کرتے ہیں جہاں $L \ll a$ ہے۔ (یہ $x = 0$ پر مخفیہ میں ایک ٹوپا پیدا کرتا ہے، گویا تار کو سروڑ کر پکڑ بسایا گیا ہو۔) مساوات ۶.۲۷ استعمال کرتے ہوئے E_n کی اول رتبی تصحیح تلاش کریں۔ اشارہ: چونکہ H' خطہ $-a < x < a$ کے باہر تقریباً صفر ہے اور $a \ll L$ ہے لہذا انکمل کی قیمت حاصل کرتے وقت انکمل کی حدود کو $\pm L/2$ کی بجائے $\pm \infty$ رکھیں۔

ج. اس مسئلہ کے لئے ψ_n اور ψ_{-n} کے ”موزوں“ خطی جوڑ کیا ہوں گے؟ دکھائے کہ ان حالات کو لے کر، مساوات ۶.۹ استعمال کرتے ہوئے، اول رتبی تصحیح حاصل ہوگی۔

د. ایسا ہر مشی عامل A تلاش کریں جو مسئلہ کے شرائط پر پورا اترتا ہو، اور دکھائیں کہ H^0 اور A کے بیک وقت امتیازی حالات ٹھیک وہی ہیں جنہیں آپ نے جزو-ج میں استعمال کیا۔

۶.۲.۲. بلند رتبہ انخطاط

گزشتہ حصہ میں انخطاط کو دو پڑتا تصور کیا گیا، تاہم ہم دیکھ سکتے ہیں کہ اس ترکیب کو کس طرح عمومی بنایا جا سکتا ہے۔ مساوات ۶.۲۲ اور مساوات ۶.۲۴ کو ہم متالبی روپ میں لکھتے ہیں۔

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

ظاہر ہے کہ W E^1 ، متالب کے امتیازی افتدار ہیں۔ مساوات ۶.۲۶ اس متالب کی امتیازی مساوات ہے، اور غیر مضطرب حالات کے ”موزوں“ خطی جوڑ W کے امتیازی سمتیات ہیں۔

ہم n پڑتا انخطاط کی صورت میں $n \times n$ متالب:

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

کے امتیازی افتدار تلاش کرتے ہیں۔ الجبرائی زبان میں ”موزوں“ غیر مضطرب تفاعلات موج کی تلاش سے مراد انخطاطی ذیلی فضا میں ایسی اساس تیار کرنا ہے جو متالب W کو وتری بناتی ہو۔ یہاں بھی اگر آپ ایسا عامل A تلاش کر سکیں، جو H' کا مقولہ ہو، اور A اور H' کے بیک وقت امتیازی تفاعلات استعمال کر سکیں تو متالب W خود بخود وتری ہوگا، لہذا آپ کو امتیازی مساوات حل کرنے کی ضرورت پیش نہیں آئی گی۔^۷ (اگر آپ کو میری دو پڑتا انخطاط کو عمومیت دیتے ہوئے n پڑتا انخطاط پر یقین نہ ہو تو سوال ۶.۱۰ حل کر کے اپنی تسلی کر لیں۔)

مشال ۶.۲: تین ابعادی لامتناہی کعبی کنوین (سوال ۴.۲):

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

پر غور کریں۔ ساکن حالات درج ذیل ہیں

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

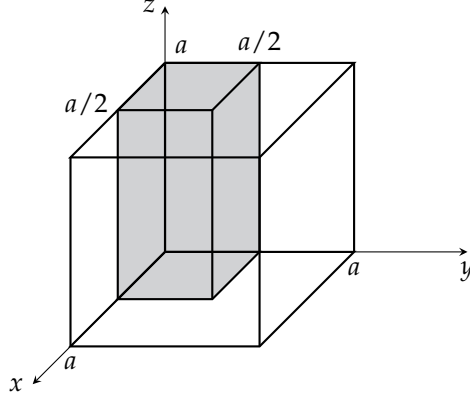
جہاں n_x ، n_y اور n_z مثبت عدد صحیح ہیں۔ ان کی مطابقتی احبازتی توانائیاں درج ذیل ہیں۔

$$(۶.۳۲) \quad E_{n_x n_y n_z}^0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

دھیان رہے کہ زمینی حال (ψ_{111}) غیر انخطاطی ہے جس کی توانائی درج ذیل ہے۔

$$(۶.۳۳) \quad E_1^0 \equiv 3 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

^۷ انخطاطی نظریہ اضطراب، درحقیقت، ہئملٹنی کے انخطاطی حصہ کو وتری بنانے کے مترادف ہے۔ قواعد کا وتری بنانا (اور مقولہ قواعد کا ہیکو وقت وتری بنانا) خیمہ کے حصہ ۵ میں سکھایا گیا ہے۔



شکل ۶.۵: سایہ دار خطہ میں مخفیہ کو اضطراب مقدار V_0 بڑھاتا ہے۔

تاہم پہلا ہیجان حال (تہہ) انخطاطی ہے:

$$(۱.۳۳) \quad \psi_a \equiv \psi_{112}, \quad \psi_b \equiv \psi_{121}, \quad \psi_c \equiv \psi_{211}$$

اور ان تینوں کی توانائی:

$$(۱.۳۵) \quad E_1^0 \equiv 3 \frac{\pi^2 \hbar^2}{ma^2}$$

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

$$(۱.۳۶) \quad H' = \begin{cases} V_0, & 0 < x < a/2, 0 < y < a/2 \\ 0, & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

جو ڈبل کے ایک چوتھائی حصہ میں مخفیہ کو V_0 مقدار بڑھاتا ہے (شکل ۶.۵)۔ زمینی حال توانائی کی ایک رتبہ تصحیح مساوات ۶.۹ دیتی ہے:

$$\begin{aligned} E_0^1 &= \langle \psi_{111} | H' | \psi_{111} \rangle \\ &= \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}y\right) dy \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz \\ (۱.۳۷) \quad &= \frac{1}{4} V_0 \end{aligned}$$

جو ہمارے توقعات کے عین مطابق ہے۔

اول ہیجان حال جاننے کے لیے ہمیں انخطاطی نظریہ اضطراب کی پوری صلاحیت درکار ہوگی۔ پہلے قدم میں ہم \mathbf{W} تیار کرتے ہیں۔ اس کے وتر کی ارکان وہی ہونگے جو زمینی حال کے ہیں (سوائے اس بات کے، کہ ان میں

سے ایک سائن کا دلیل دگن ہے؛ آپ درج ذیل کی تصدیق کر سکتے ہیں۔

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

غیروتزی ارکان زیادہ دلچسپ ہیں۔

$$W_{ab} = \left(\frac{2}{a}\right)^3 V_0 \int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right) dx \\ \times \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{\pi}{a}y\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) dy \int_0^a \sin\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}z\right) dz$$

تاہم z تکمل صفر ہوگا (جیسا W_{ac} کے لیے بھی ہوگا)، لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

انفرض

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

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

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

والب \mathbf{W} بلکہ $4\mathbf{W}/V_0$ جس کے ساتھ کام کرنا زیادہ آسان ہے کی امتیازی مساوات (ضمیمہ ۵.۱ کے تحت):

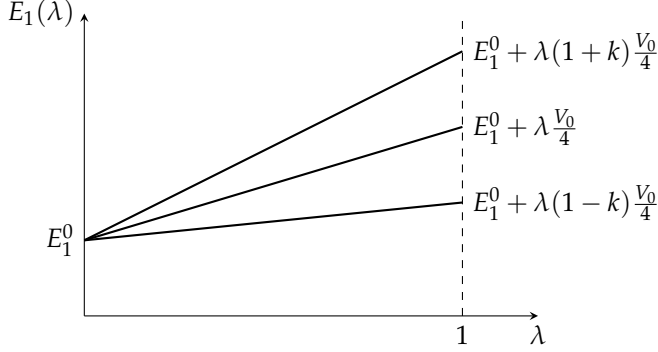
$$\begin{vmatrix} 1-w & 0 & 0 \\ 0 & 1-w & \kappa \\ 0 & \kappa & 1-w \end{vmatrix}$$

یعنی

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

ہوگی جس کی امتیازی افتد درج ذیل ہوگی۔

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



شکل ۶.۶: انحطاط کا اختتام (برائے مثال 39.6)۔

یوں λ کے اول رتبہ تک درج ذیل ہوگا

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

جہاں E_1^0 (مشترکہ) غیر مضطرب توانائی (مساوات ۶.۳۵) ہے۔ یہ اضطراب، توانائی E_1^0 کو تین منفرد توانائیوں کی سطحوں میں تقسیم کر کے انحطاط حتم کرتا ہے (شکل ۶.۶ دیکھیں)۔ اگر ہم بھول کر اس مسئلے کو غیر انحطاطی نظریہ اضطراب سے حل کرتے تب ہم اخذ کرتے کہ اول رتبہ تصحیح (مساوات ۶.۹) تینوں حالات کے لئے ایک جتنی اور $V_0/4$ کے برابر ہوتی جو درحقیقت صرف درمیانے حال کے لیے درست ہے۔

مزید ”موزوں“ غیر مضطرب حالات درج ذیل روپ کے خطی جوڑ ہو گئے

$$(۶.۴۰) \quad \psi^0 = \alpha\psi_a + \beta\psi_b + \gamma\psi_c$$

جہاں عددی سر (α, β, γ) متالب \mathbf{W} کے امتیازی سمتیات ہیں۔

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

ہمیں $w = 1$ کے لیے $\alpha = 1, \beta = \gamma = 0$ ؛ جبکہ $w = 1 \pm \kappa$ کے لیے $\alpha = 0, \beta = \pm\gamma = 1/\sqrt{2}$ ۔

حاصل ہوتے ہیں۔ (میں نے انہیں معمول شدہ کیا ہے۔) یوں ”موزوں“ حالات درج ذیل ہونگے۔^۸

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

□

سوال ۶.۸: لامتناہی کعبی کنویں (مسواۃ ۶.۳۰) میں نقطہ $(a/4, a/2, 3a/4)$ پر ڈیٹا تفاسلی ”موڑا“:

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

رکھ کر کنویں کو مضطرب کیا جاتا ہے۔ زمینی حال اور (تہرا انخطاطی) اول ہیجان حال کی توانائیوں میں اول رتبی تصحیح کتنی ہوگی؟

سوال ۶.۹: ایک ایسے کوانٹائی نظام پر غور کریں جس میں صرف ”تین“ خطی غیر تاجع حالات پائے جاتے ہوں۔ فرض کریں متالبی 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. متالب \mathbf{H} کے ٹھیک ٹھیک امتیازی اقدار کے لئے حل کریں۔ ہر ایک کو ϵ کی صورت میں دوم رتبہ تک طاقتی تسلسل کی روپ میں پھیلائیں۔

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

^۸ یہ جاننے ہوئے کہ H' کے ساتھ، x اور y کو آپس میں تبدیل کرنے والا عامل، P_{xy} منقلب ہے، ہم اس نتیجے کو قیاس معلوم کر سکتے تھے۔ اس کے امتیازی اقدار (زیر تبدیلی جفت تصاعلوں کے لئے) $+1$ اور (طاق تصاعلات کے لئے) -1 ہے۔ یہاں ψ_a پہلے سے جفت ہے، $(\psi_b + \psi_c)$ جفت اور $(\psi_b - \psi_c)$ طاق ہے۔ یہ فیصلہ کن نہیں ہے، چونکہ جفت حالات کا ہر ایک خطی جوڑ جفت ہوگا۔ لیکن، اگر ہم عامل Q بھی استعمال کریں، جو z کو $a - z$ منتقل کرتا ہو، اور یہ جاننے ہوں کہ ψ_a ایسا امتیازی تصاعل ہے جس کی امتیازی قدر -1 ہے اور باقی دو امتیازی تصاعلات کی امتیازی قدر $+1$ ہے، اب ہم دور ہو جاتا ہے۔ یہاں عاملین P_{xy} اور Q مل کر، حصہ ۶.۲.۱ میں پیش کئے گئے مسئلہ میں A کا کردار ادا کرتے ہیں۔

د. دو ابتدا میں انخطائی امتیازی اقدار کی اول رتبی تصحیح کو انخطائی نظریہ اضطراب سے تلاش کریں۔ ٹھیک ٹھیک نتائج کے ساتھ موازنہ کریں۔

سوال ۶.۱۰: میں دعویٰ چکا ہوں کہ n پڑتا انخطائی توانائی کی اول رتبی تصحیح، W کی امتیازی اقدار ہوں گی۔ میں نے اس دعویٰ کی وجہ یہ پیش کی کہ یہ $n = 2$ صورت کی ”قدرتی“ عمومیت ہے۔ اس کو ثابت کرنے کے لئے، حصہ ۶.۲.۱ کے قدموں پر چل کر، درج ذیل سے آغاز کر کے

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

(مساوات ۶.۱۷ کو عمومیت دیتے ہوئے) دکھائیں کہ مساوات ۶.۲۲ کے مسائل کا مفہوم W کی امتیازی قدر مساوات لی جاسکتی ہے۔

۶.۳ ہائیڈروجن کا مہین ساخت

ہائیڈروجن جوہر (حصہ ۴.۲) کے مطالعہ کے دوران ہم نے ہیملٹنی درج ذیل لی

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (۶.۴۲)$$

(جو الیکٹران کی حرکی توانائی جمع کو لب مخفی توانائی ہے)۔ تاہم یہ مکمل کہانی نہیں ہے۔ ہم m کی بجائے تخفیف شدہ کیت (سوال ۵.۱) استعمال کر کے ہیملٹنی میں حرکت مرکزہ کا اثر شامل کرنا سیکھ چکے ہیں۔ زیادہ اہم مہین ساخت^۹ ہے، جو درحقیقت دو منفرد وجوہات، اضافی تصحیح^{۱۰} اور چکرو مدار ربط^{۱۱} کی بنا پر پیدا ہوتی ہے۔ پھر توانائیوں (مساوات ۴.۷۰) کے لحاظ سے مہین ساخت، α^2 حبز ضربی کم، نہایت چھوٹا اضطراب ہے، جہاں

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

مہین ساخت مستقل^{۱۲} کہلاتا ہے۔ اس سے بھی (مزید α حبز ضربی) چھوٹا لیمبرے انتقال^{۱۳} ہے، جو برقی میدان کی کوانٹائزیشن سے وابستہ ہے، اور اس سے مزید ایک رتبہ کم، نہایت مہین ساخت^{۱۴} کہلاتی ہے، جو الیکٹران اور پروٹان کے جفت قطب معیار اثر کے بیچ مقناطیسی باہم عمل سے پیدا ہوتا ہے۔ اس تنظیمی ڈھانچہ کو جدول ۶.۱ میں پیش کیا گیا ہے۔ موجودہ حصہ میں ہم غیر تاجع وقت نظریہ اضطراب کی مثال کے طور پر ہائیڈروجن کی مہین ساخت پر غور کریں گے۔ سوال ۶.۱۱:

fine structure^۹
relativistic correction^{۱۰}
spin-orbit coupling^{۱۱}
fine structure constant^{۱۲}
Lamb shift^{۱۳}
hyperfine structure^{۱۴}

جدول ۶.۱: ہائپر روجن کی بوہر توانائیوں میں تصحیح کی درجہ بندی۔

$\alpha^2 mc^2$	کارتبہ	بوہر توانائی:
$\alpha^4 mc^2$	کارتبہ	مہین ساخت:
$\alpha^5 mc^2$	کارتبہ	لیب انتتال:
$(m/m_p)\alpha^4 mc^2$	کارتبہ	نہایت مہین ساخت:

۱. بوہر توانائیوں کو مہین ساخت مستقل اور الیکٹران کی ساکن توانائی (mc^2) کی صورت میں لکھیں۔

ب۔ (ϵ_0, e, \hbar, c کی تجرباتی قیمتیں استعمال کیے بغیر) مہین ساخت مستقل کی قیمت بنیادی اصول استعمال کرتے ہوئے تلاش کریں۔ تبصرہ: پوری طبیعیات میں بلاشبہ مہین ساخت مستقل سب سے زیادہ حناص (بے بُعدی) بنیادی عدد ہے۔ یہ برقناطیسیت (الیکٹران کا بار)، اضافیت (روشنی کی رفتار) اور کوانٹائی میکانیات (پلانک مستقل) کے بنیادی مستقلات کے پیچ رشتہ بیان کرتا ہے۔ اگر آپ حبزو-ب حل کر پائیں، یقیناً آپ کو نوہیل انعام سے نوازا جائے گا۔ البتہ میرا مشورہ ہوگا کہ اس پر زیادہ وقت ضائع نہ کریں؛ (اب تک) بہت سارے انتہائی قابل لوگ ایسا کر کے ناکام ہو چکے ہیں۔

۶.۳.۱ اضافیتی تصحیح

ہیملٹنی کا پہلا حبزو بظاہر حرکی توانائی کو ظاہر کرتا ہے

$$(۶.۴۴) \quad T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

جس میں باضابطہ متبادل $\nabla^2 \rightarrow (\hbar/i) \nabla^2$ پر کر کے درج ذیل عامل حاصل ہوگا۔

$$(۶.۴۵) \quad T = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

تاہم مساوات ۶.۴۴ حرکی توانائی کا کلاسیکی کلیہ ہے؛ اضافیتی کلیہ درج ذیل ہے

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

جہاں پہلا حبزو کل اضافیتی توانائی ہے (جس میں مخفی توانائی شامل نہیں ہے، اور جس سے ہمیں فی الحال عنرض بھی نہیں ہے)، جبکہ دوسرا حبزو ساکن توانائی ہے؛ ان کے فرق کو حرکت سے منسوب کیا جاسکتا ہے۔

ہمیں سمتی رفتار کی بجائے (اضافیتی) معیار حرکت

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

کی صورت میں T کو لکھنا ہوگا۔ دھیان رہے کہ

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

لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

غیر اضافیتی حد $mc \ll p$ کی صورت میں حرکی توانائی کی اضافیتی مساوات تخفیف کے بعد کلاسیکی نتیجہ (مساوات ۶.۴۴) دیتی ہے؛ ایک چھوٹے عدد (p/mc) کی طاقتی تسلسل میں پھیلا کر درج ذیل حاصل ہوگا۔

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

ظاہر ہے کہ ہیمیلٹنی کی سب سے کم رتبہ ۱۵ اضافیتی تصحیح درج ذیل ہے۔

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

غیر مضطرب حال میں H' کی توقعاتی قیمت رتبہ اول نظریہ اضطراب میں E_n کی تصحیح ہوگی (مساوات ۶.۹)۔

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

اب (غیر مضطرب حالات کے لئے) مساوات شروڈنگر کہتی ہے کہ

$$(۶.۵۲) \quad p^2 \psi = 2m(E - V)\psi$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔^{۱۶}

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

^{۱۵} چونکہ ہائیڈروجن میں الیکٹران کی حرکی توانائی کا رتبہ 10 eV ہے، جو اس کی ساکن توانائی (511 000 eV) سے بہت کم ہے، لہذا ہائیڈروجن جوہر بنیادی طور پر غیر اضافیتی ہے اور یوں ہم صرف سب سے کم رتبہ تصحیح رکھ سکتے ہیں۔ مساوات ۶.۴۹ میں p اضافیتی معیار حرکت (مساوات ۶.۴۷) ہے تاکہ کلاسیکی معیار حرکت (mv) ۔ ہم مساوات ۶.۵۰ میں اب کوانشائی عامل $-i\hbar\nabla$ کے ساتھ اول الذکر منسلک کرتے ہیں۔

^{۱۶} ایسا، ہم نے p^2 اور $(E - V)$ کی ہر مشی بن استعمال کی جو درست نہیں ہے۔ درحقیقت ان حالات کے لئے جن کا $\ell = 0$ ہو عامل p^4 غیر ہر مشی ہوگا (سوال ۶.۱۵)، اور مساوات ۶.۵۰ پر $\ell = 0$ کی صورت میں (نظریہ اضطراب کا اطلاق ٹکے سے حثالی نہیں ہوگا۔ خوش قسمتی سے، ہمیں ٹھیک ٹھیک جواب معلوم ہے؛ جسے (غیر اضافیتی) مساوات شروڈنگر کی بجائے (اضافیتی) مساوات ڈیراک استعمال کرتے ہوئے حاصل کیا جاسکتا ہے، اور جو یہاں سرسری انداز میں حاصل نتیجہ کی تصدیق کرتا ہے (سوال ۶.۱۹ دیکھیں)۔

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

$$(۶.۵۴) \quad E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2} \left[E_n^2 + 2E_n \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \right]$$

جہاں E_n زیر غور حال کی بوہر توانائی توانائی ہے۔

یہ کام مکمل کرنے کی خاطر، ہمیں (غیر مضطرب) حال $\psi_{n\ell m}$ (مساوات ۴.۸۹) میں $1/r$ اور $1/r^2$ کی توقعاتی قیمتیں درکار ہوں گی۔ ان میں سے پہلا دریافت کرنا آسان ہے (سوال ۶.۱۲ دیکھیں):

$$(۶.۵۵) \quad \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2 a}$$

جہاں a رداس بوہر (مساوات ۴.۷۲) ہے۔ دوسرا اتنا آسان نہیں ہے (سوال ۶.۳۳ دیکھیں)، تاہم اس کا جواب درج ذیل ہے۔^{۱۷}

$$(۶.۵۶) \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{(\ell + 1/2)n^3 a^2}$$

یوں درج ذیل ہوگا

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

یا (مساوات ۴.۷۲ استعمال کرتے ہوئے) a کو خارج کر کے، (مساوات ۴.۷۰ استعمال کر کے) تمام کو E_n کی صورت میں لکھ کے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$(۶.۵۷) \quad E_r^1 = -\frac{(E_n)^2}{2mc^2} \left[\frac{4n}{\ell + 1/2} - 3 \right]$$

ظاہر ہے کہ اضافیتی تصحیح کی مقدار E_n سے تقریباً 2×10^{-5} E_n/mc^2 جزو ضربی کم ہے۔

اگرچہ ہائیڈروجن جوہر بہت زیادہ انحطاطی ہے، میں نے حساب کے دوران غیر انحطاطی نظریہ اضطراب استعمال کیا (مساوات ۶.۵۱)۔ لیکن یہاں اضطراب کروئی تشاکلی ہے، لہذا یہ L^2 اور L_z کا مقلوب ہوگا۔ مزید کسی E_n کے n^2 حالات کے لئے ان (ایک ساتھ تمام) عاملین کے امتیازی تفاعلات کی منفرد امتیازی مقدار ہوں گی۔ یوں خوش قسمتی سے، تفاعلات $\psi_{n\ell m}$ اس مسئلہ کے ”موزوں“ حالات ہوں گے (یا جیسا ہم کہتے ہیں ℓ ، اور m موزوں کو اٹھائے اعداد^{۱۸})، لہذا غیر انحطاطی نظریہ اضطراب کا استعمال فائدہ رست ہوتا (حصہ ۶.۲.۱ کے آخر میں سبق دیکھیں)۔

^{۱۷} متغیر r کے کسی بھی طاقت کی توقعاتی قیمت کا عمومی گلیہ موجود ہے۔
^{۱۸} good quantum numbers

سوال ۶.۱۲: مسئلہ وریل (سوال ۴.۴۰) استعمال کرتے ہوئے مساوات ۶.۵۵ ثابت کریں۔

سوال ۶.۱۳: آپ نے سوال ۴.۴۳ میں حال ψ_{321} میں r^s کی توقعاتی قیمت حاصل کی۔ اپنے جواب کی تصدیق $s = 0$ (حقیر کام)، $s = -1$ (مساوات ۶.۵۵)، $s = -2$ (مساوات ۶.۵۶)، اور $s = -3$ (مساوات ۶.۶۴) کے لیے کریں۔ اس پر تبصرہ کریں کہ $s = -7$ کی صورت میں کیا ہوگا۔

سوال ۶.۱۴: ایک بُدی ہارمونی سرعش کی توانائی کی سطحوں کے لیے (سب سے کم رتبہ) اضافیتی تصحیح تلاش کریں۔ اشارہ: مشال ۲.۵ میں متعل ترکیب بروئے کار لائیں۔

سوال ۶.۱۵: دکھائیں کہ ہائیڈروجن حالات کے لیے $\ell = 0$ لیتے ہوئے p^2 ہر مشی اور p^4 غیر ہر مشی ہے۔ ایسے حالات کے لئے ψ ، متغیرات θ اور ϕ کا غیر تاجع ہے، لہذا درج ذیل ہوگا (مساوات ۴.۱۳)۔

$$p^2 = -\frac{\hbar^2}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right)$$

تکمل بالخص استعمال کرتے ہوئے درج ذیل دکھائیں۔

$$\langle f | p^2 g \rangle = -4\pi\hbar^2 \left(r^2 f \frac{dg}{dr} - r^2 g \frac{df}{dr} \right) \Big|_0^\infty + \langle p^2 f | g \rangle$$

تصدیق کریں کہ ψ_{n00} کے لیے، جو مبداء کے متریب درج ذیل ہوگا، سرحدی جزو صفر ہے۔

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

اب یہی کچھ p^4 کے لئے کر کے دیکھیں، اور دکھائیں کہ سرحدی اجزاء صفر نہیں ہونگے۔ درحقیقت درج ذیل ہوگا۔

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

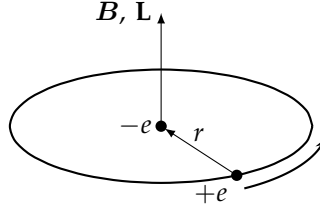
۶.۳.۲ چپکرومدار رابط

سرکڑہ کے گرد مدار میں الیکٹران کا تصور کریں؛ الیکٹران کے نقطہ نظر سے پروٹان اس کے گرد گھومتا ہے (شکل ۶.۷)۔ مدار میں مثبت بار الیکٹران کے چھوٹے میں مقناطیسی میدان B پیدا کرتا ہے، جو چپکر کھاتے ہوئے الیکٹران پر قوت سرور پیدا کر کے الیکٹران کے مقناطیسی معیار اثر (μ) کو میدان کے ہم رخ بنانے کی کوشش کرتا ہے۔ اس کی ہیملٹنی (مساوات ۴.۱۵) درج ذیل ہے۔

(۶.۵۸)

$$H = -\mu \cdot B$$

ہمیں پروٹان کا مقناطیسی میدان (B) اور الیکٹران کا جفت قطب معیار اثر (μ) درکار ہوگا۔



شکل ۶.۷: الیکٹران کے نقطہ نظر سے ہائیڈروجن جوہر۔

پروٹان کا مقناطیسی میدان۔ ہم (الیکٹران کے نقطہ نظر سے) پروٹان کو استمراری دائری رو (شکل ۶.۷) تصور کر کے، اس کے مقناطیسی میدان کو باؤٹ و سیوارٹ متانوں سے حاصل کرتے ہیں:

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

جس میں موثر رو $I = e/T$ ہے، جہاں e پروٹان کا بار، اور T دائرے پر ایک چکر کا دوری عرصہ ہے۔ اس کے برعکس، $L = rmv = 2\pi mr^2/T$ (مركزہ کے ساکن چھوٹے میں) الیکٹران کا مدار کی زاویائی معیار حرکت ہوگا۔ مزید، B اور L دونوں کا رخ ایک جیسا ہوگا (شکل ۶.۷ میں اوپر جانب)، لہذا

$$B = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{mc^2 r^3} L \quad (۶.۵۹)$$

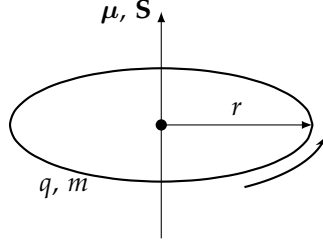
لکھا جاسکتا ہے (جہاں میں نے $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ استعمال کر کے μ_0 کی جگہ ϵ_0 استعمال کیا ہے)۔

الیکٹران کا مقناطیسی جفت قطب معیار حرکت۔ چکر کھاتے بار کا مقناطیسی جفت قطب معیار اثر، اس کے (چکری) زاویائی معیار حرکت سے تعلق رکھتا ہے؛ ممکن مقناطیسی نسبت (جسے ہم حصہ ۴.۴.۱ میں دیکھ چکے ہیں)، ان کے بیچ تناسبی جزو ضربی ہوگا۔ آئیں اس مرتبہ، کلاسیکی برقی حرکیات استعمال کرتے ہوئے، اسے اخذ کرتے ہیں۔ ایک ایسا بار q جس کی لمبائی r کے چلا پر کی گئی ہو، اور جو محور کے گرد دوری عرصہ T سے گھومتا ہو، پر غور کریں (شکل ۶.۸)۔ اس چھلے کے مقناطیسی جفت قطب معیار اثر کی تعریف، رو (q/T) ضرب رقبہ (πr^2) ہے۔

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

اگر چھلے کی کیت m ہو، جمودی معیار اثر (mr^2) ضرب زاویائی سمتی رفتار $(2\pi/T)$ اس کا زاویائی معیار حرکت، S ، ہوگا۔

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



شکل ۶.۸: بار کا چھلا جو اپنے محور کے گرد گھوم رہا ہے۔

اس تفکیک کے لیے ظاہر ہے کہ ممکن مقناطیسی نسبت $\mu/S = q/2m$ ہوگا۔ دھیان رہے کہ یہ r (اور T) کا تابع نہیں ہے۔ اگر میرے پاس کوئی زیادہ پیچیدہ شکل کا جسم ہوتا، مثلاً ایک کرہ (صرف اتنا ضروری ہے کہ یہ اپنے محور کے گرد گھومتا ہو) شکل طواف ہو، میں اس کو باریک چھلوں میں نکلنے کے، تمام چھلوں کی پیداوار کی مجموعہ لے کر μ اور S کی قیمتیں معلوم کر پاتا۔ جب تک کیت اور بار کی تقسیم ایک جیسی ہو (تاکہ بار اور کیت کی نسبت یکساں ہو)، ہر چھلے کا اور لہذا پورے جسم کا ممکن مقناطیسی نسبت ایک جیسا ہوگا۔ مزید، μ اور S کے رخ ایک جیسے (یا اگر بار منفی ہو تو ایک دونوں کے مخالف) ہوں گے، لہذا درج ذیل ہوگا۔

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

یہ حالصاً کلاسیکی حساب ہے، درحقیقت، الیکٹران کا مقناطیسی معیار اثر اس کی کلاسیکی قیمت کا دگنا ہے۔

$$\mu_e = -\frac{e}{m} S \quad (۶.۹۰)$$

ڈیراک نے الیکٹران کی (اپنے) اضافیتی نظریہ میں ”اضافی“ حوضی 2 کی وجہ پیش کی ہے۔^{۱۹} ان تمام کو اکٹھے کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہوگا۔

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

اس حساب میں ایک مندرجہ سے کام لیا گیا ہے: میں نے الیکٹران کے ساکن چھوٹے میں تجزیہ کیا، جو ایک غیر جمودی نظام ہے؛ چونکہ الیکٹران مرکزہ کے گرد گھومتا ہے، لہذا یہ چھوٹے اسراع

^{۱۹} ہم دیکھ چکے ہیں کہ الیکٹران کو محور کے گرد چکر کاہتا ہوا کرہ تصور کرنا، خطرے سے باہر نہیں ہے (سوال ۳.۲۵ دیکھیں)، اور یہ حیرت کی بات نہیں کہ سادہ لوح کلاسیکی نمونہ، ممکن مقناطیسی نسبت کی علاقہ قیمت دیتا ہے۔ کلاسیکی توقعات سے حاصل قیمت کو g حوضی کہتے ہیں: $\mu = g(q/2m)S$ ، لہذا نظریہ ذرا کم میں g حوضی کی قیمت ٹھیک 2 ہے۔ لیکن کوٹائی برقی حرکیات اس میں معمولی تصحیح دیتی ہے: بے ضابطہ مقناطیسی معیار اثر، g_e ، کی قیمت دراصل $2.002 \dots = 2 + (\alpha/\pi) + \dots$ ہے۔ اس کا حساب اور اس کی پیدائش (جو آپس میں شاندار حتمیت تک متفق ہیں) بیسویں صدی طبیعیات کی اہم ترین کامیابیوں میں سے ایک ہے۔

پذیر ہوگا۔ اس حساب میں مجبوراً حرکت تصحیح، جسے طامس استقبال حرکت^{۲۰} کہتے ہیں، شامل کر کے مقبول کیا جاسکتا ہے، جو حساب میں جبز و ضربی 1/2 شامل کرتا ہے۔^{۲۲}

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

یہ چکر و مدار باہم علی^{۲۳} ہے؛ ماسوائے دو تصحیح (الیکٹران کی ترمیم شدہ مسکن مقناطیسی نسبت اور طامس استقبال حرکت جبز و ضربی جو اتفاقیاً ایک دوسرے کو کاٹتے ہیں) کے، یہ وہی نتیجہ ہے جو آپ سادہ لوح کلاسیکی نمونے سے حاصل کرتے ہیں۔ طبعی طور پر، یہ الیکٹران کے لحاقی ساکن چھوٹے مسکن، چکر کاٹتے ہوئے الیکٹران کے مقناطیسی جفت قطب معیار اثر پر، پروٹان کے مقناطیسی میدان کی قوت سروڑ کے بدولت ہے۔

اب کوانٹائی میکانیات کی بات کرتے ہیں۔ چکر و دائری ربط کی صورت میں \mathbf{L} اور \mathbf{S} کے ساتھ ہیلنٹی غیر مقلوب ہوگا، لہذا اچکر اور مداری زاویائی معیار اثر علیحدہ علیحدہ بقائی نہیں ہوں گے (سوال ۶.۱۶ دیکھیں)۔ البتہ، L^2 ، S^2 اور کل زاویائی معیار حرکت:

$$\mathbf{J} \equiv \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (۶.۶۲)$$

کے ساتھ H'_{so} مقلوب ہوگا، لہذا یہ مقداریں بقائی ہوں گی (مساوات ۳.۷۱ اور اس کے نیچے پیراگراف دیکھیں)۔ دوسرے لفظوں میں، L_z اور S_z کے امتیازی حالات نظریہ اضطراب میں استعمال کے لئے ”موزوں“ حالات نہیں ہیں، جبکہ L^2 ، S^2 ، J^2 ، اور J_z کے امتیازی حالات ”موزوں“ حالات ہیں۔ اب

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

کی بنا پر

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

ہوگا لہذا $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ کی امتیازی افتداری درج ذیل ہوں گی۔

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

Thomas precession^{۲۴}

^{۲۰} سوچنے کا ایک انداز یہ ہوگا کہ آپ تصور کریں کہ الیکٹران مستمر انداز میں ایک ساکن نظام سے دوسرے ساکن نظام میں متدم رکھتا ہے؛ ان لوہے سنز تبادلہ کے مجبوری اثر کو طامس استقبال حرکت بیان کرتا ہے۔ ہم تجربہ گاہ کی چھوٹے مسکن، جہاں پروٹان ساکن ہے، رہ کر اس پوری مصیبت سے مخبرات حاصل کر سکتے تھے۔ ایسی صورت میں، پروٹان کا میدان حنا لہت برقی ہوگا، اور آپ سوچ سکتے ہیں کہ یہ الیکٹران پر قوت سروڑ کیسا پیدا کرتا ہے۔ حقیقت یہ ہے کہ حرکت پذیر مقناطیسی جفت قطب، برقی جفت قطب معیار اثر اختیار کرتا ہے، اور تجربہ گاہ کے چھوٹے مسکن سروڑ کے برقی میدان اور الیکٹران کے برقی جفت قطب معیار اثر کے بیچ باہم عمل، چکر و مداری ربط کا باعث بنتا ہے۔ چونکہ اس تجزیہ کے لئے زیادہ پیچیدہ برقی حرکت درکار ہوگا لہذا بستر یہی ہے کہ ہم الیکٹران کے ساکن چھوٹے مسکن کام کریں جہاں طبعی پرسلو زیادہ واضح ہے۔

^{۲۲} بہ نسبت زیادہ درست ہوگا کہ طامس استقبال حرکت g جبز و ضربی سے 1 منفی کرتا ہے۔

spin-orbit interaction^{۲۳}

باب ۶. غیر تابع وقت نظریہ اضطراب

یہاں یقیناً $s = 1/2$ ہے۔ مزید $1/r^3$ کی توقعاتی قیمت (سوال ۲.۳۵-ج، دیکھیں)

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{\ell(\ell + 1/2)(\ell + 1)n^3 a^3} \quad (۲.۶۳)$$

ہے، لہذا

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

یا، تمام کو E_n کی صورت میں لکھتے ہوئے، درج ذیل اخذ کرتے ہیں۔^{۲۴}

$$E_{so}^1 = \frac{(E_n)^2}{mc^2} \left\{ \frac{n[j(j+1) - \ell(\ell+1) - 3/4]}{\ell(\ell + 1/2)(\ell + 1)} \right\} \quad (۲.۶۵)$$

یہ ایک حیرت کن بات ہے کہ، بالکل مختلف طبعی پہلوؤں کے باوجود، اضافیتی تصحیح (مساوات ۲.۵۷) اور چکر و مدار ربط (مساوات ۲.۶۵) ایک جتنا رتبہ (E_n^2/mc^2) رکھتے ہیں۔ انہیں جمع کر کے، ہمیں مکمل مہین ساخت کلیہ:

$$E_{fs}^1 = \frac{(E_n)^2}{2mc^2} \left(3 - \frac{4n}{j + 1/2} \right) \quad (۲.۶۶)$$

(سوال ۲.۱۷ دیکھیں) حاصل ہوتا ہے۔ اسے کلیہ بوہر کے ساتھ ملا کر، ہم ہائیڈروجن توانائی سطحوں کا عظیم نتیجہ:

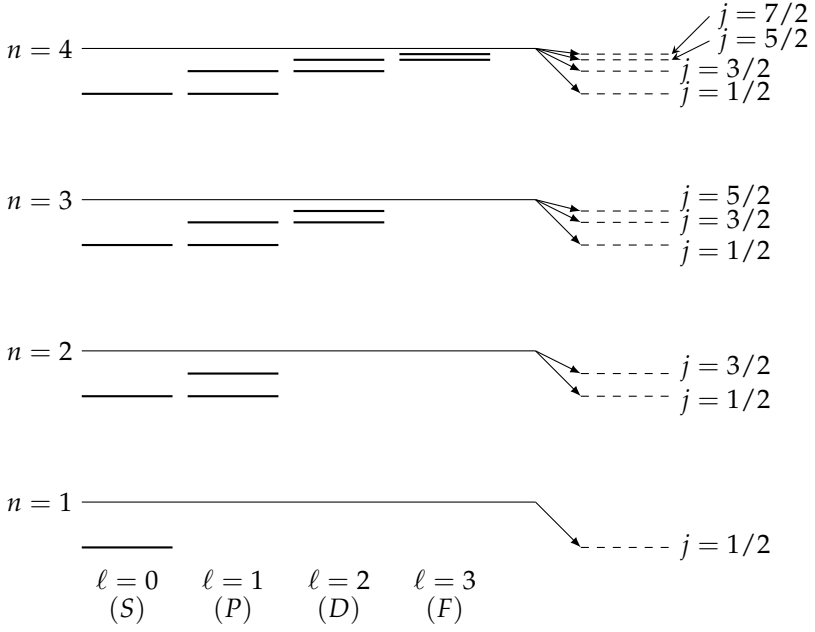
$$E_{nj} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{2} \right) \right] \quad (۲.۶۷)$$

حاصل کرتے ہیں، جس میں مہین ساخت شامل ہے۔

مہین ساخت ℓ میں انحطاط توڑتی ہے (یعنی کسی ایک n کیلئے، ℓ کی مختلف اجزائی قیمتیں ایک جیسی توانائی کے حامل نہیں ہونگی)، تاہم اب بھی یہ j میں انحطاط برقرار رکھتی ہے (شکل ۲.۹ دیکھیں)۔ مدارچی اور چکری زاویائی معیار حرکت کے z جزو امتیازی افتدار (m_ℓ اور m_s) اب ”موزوں“ کوانٹائی اعداد نہیں ہونگے؛ ان متداروں کی مختلف قیمتوں والے حالات کے خطی جوڑ ساکن حالات ہوں گے؛ ”موزوں“ کوانٹائی اعداد n ، ℓ ، s ، j اور m_j ہونگے۔^{۲۵}

^{۲۴} یہاں بھی، $\ell = 0$ کی صورت میں ہمیں مسئلہ درجیش ہوگا، چونکہ ہم بلاہر عنصر سے تقسیم کرتے ہیں۔ ساتھ ہی، اس صورت میں $j = s$ کی بنا پر، شمار کنندہ بھی عنصر ہے، لہذا مساوات ۲.۶۵ بلا تفسین ہوگا۔ طبعی بنیادوں پر $\ell = 0$ کی صورت میں چکر و مدار ربط ہونائی نہیں چاہیے۔ اس اہام کو دور کرنے کا ایک طریقہ یہ ہے کہ ہم جزو ڈاروٹ متعارف کریں۔ غیر متوقع طور پر، اگرچہ اضافیتی تصحیح (مساوات ۲.۵۷) اور چکر و مدار ربط (مساوات ۲.۶۵) دونوں $\ell = 0$ کی صورت میں ٹک سے مبرا نہیں ہیں، ان کا مجموعہ (مساوات ۲.۶۶) تمام ℓ کے لئے درست ہے (سوال ۲.۱۹ دیکھیں)۔

^{۲۵} کسی ℓ اور s کے لئے، $|jm_j\rangle$ کو $|m_\ell\rangle|sm_s\rangle$ کا خطی جوڑ لکھنے کی خاطر ہمیں مناسب کلیش و گورڈن عددی سر (مساوات ۳.۱۸۵) استعمال کرنے ہوں گے۔



شکل ۶.۹: ہائیڈروجن کی سطحیں توانائی، جن میں مہین ساخت شامل ہے (درست پیمانہ کے مطابق نہیں ہے)۔

سوال ۶.۱۶: درج ذیل مقاب کی قیمتیں تلاش کریں۔ (الف) $[L \cdot S, L]$ ، (ب) $[L \cdot S, S]$ ، (ج) $[L \cdot S, J]$ ، (د) $[L \cdot S, L^2]$ ، (ه) $[L \cdot S, S^2]$ ، (و) $[L \cdot S, J^2]$ ؛ اشارہ: L اور S زاویائی معیار حرکت کے بنیادی مقابیت رشتوں (مساوات ۴.۹۹ اور مساوات ۴.۱۳۴) کو مطمئن کرتے ہیں، لیکن یہ ایک دوسرے کے ساتھ مقلوب ہیں۔

سوال ۶.۱۷: اضافیتی تصحیح (مساوات ۶.۵۷) اور چپک و مدار رابط (مساوات ۶.۶۵) سے مہین ساخت کلب (مساوات ۶.۶۶) اخذ کریں۔ اشارہ: دھیان رہے کہ $j = \ell \pm 1/2$ (مساوات ۶.۶۲) ہے؛ مثبت اور منفی علامت کو باری باری لیں، آپ دیکھیں گے کہ دونوں صورتوں میں ایک جیا نتیجہ حاصل ہوگا۔

سوال ۶.۱۸: ہائیڈروجن طیف کے مرکزی خطے میں سرخ بالمر لکیر نمایاں ترین ہے، جو $n = 3$ سے $n = 2$ میں منتقلی سے پیدا ہوتی ہے۔ سب سے پہلے، اس طیفی لکیر کا طول موج اور تعدد دوہر نظریہ سے تعین کریں۔ مہین ساخت اس لکیر کو متعریب متعریب کئی لکیروں میں تقسیم کرتی ہے؛ اب ایک سوال پیدا ہوتا ہے: لکیروں کی تعداد کیا ہوگی اور ان کے بچ فاصلہ کتنا ہوگا؟ اشارہ: پہلے قدم میں، معلوم کریں کہ $n = 2$ سطح کتنے ذیلی سطحوں میں تقسیم ہوگا، اور ہر ایک کے لیے، eV میں، E_{fs}^1 تلاش کریں۔ یہی کچھ $n = 3$ کے لیے کریں۔ سطح توانائی کے شکل کا خاکہ بن کر $n = 3$ سے $n = 2$ تک تمام ممکنہ منتقلی دکھائیں۔ توانائی کا اخراج (نوریہ کی صورت میں) $(E_3 - E_2) + \Delta E$ ہوگا، جہاں پر صاحبزوب میں مشترک جبکہ (مہین ساخت کی پیدا) ΔE کی قیمت ہر منتقلی کے لئے بدلے گی۔ ہر منتقلی کے لئے ΔE کو (eV میں) تلاش کریں۔ آخر میں، تعدد نوریہ میں تبدیل کر کے، ساتھ ساتھ طیفی لکیروں کے بچ فاصلہ (Hz کی صورت میں) تعین کریں؛ یہ ہر لکیر اور غیر مضطرب لکیر کے بچ تعددی فاصلہ نہیں (جو یقیناً، قابل مشاہدہ نہیں)، بلکہ یہ ہر لکیر اور اس سے اگلی لکیر کے بچ 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 لکیر $j = (???)$ سے $j = (???)$ ، ... ہو گئے۔ لکیر 1 اور لکیر 2 کے بچ تعددی فاصلہ (???) Hz ہے، لکیر 2 اور لکیر 3 کے بچ فاصلہ ??? Hz ہے، ...۔“

سوال ۶.۱۹: مساوات ڈیراک سے (نظریہ اضافت استعمال کیے بغیر) ہائیڈروجن کے مہین ساخت کا ٹھیک ٹھیک کلب درج ذیل حاصل ہوتا ہے۔

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

اس کو (یہ جانتے ہوئے کہ $\alpha \ll 1$ ہے) a^4 رتبہ تک پھیلا کر دکھائیں کہ مساوات ۶.۶۷ حاصل ہوتا ہے۔

۶.۴. زیرمان اثر

ایک جوہر کو یکساں بیرونی مقناطیسی میدان B بیرونی B میں رکھنے سے، اس کی توانائی سطحوں میں تبدیلی پیدا ہوتی ہے۔ اس مظہر کو **زیرمان اثر**^{۲۶} کہتے ہیں۔ واحد ایک الیکٹران کے لیے اضطراب درج ذیل ہوگا

$$H'_z = -(\mu_\ell + \mu_s) \cdot B \quad \text{بیرونی} \quad (۶.۶۸)$$

جہاں

$$\mu_s = -\frac{e}{m} S \quad (۶.۶۹)$$

الیکٹران چکر کے ساتھ وابستہ مقناطیسی جفت قطب معیار اثر، اور

$$\mu_{ell} = -\frac{e}{2m} L \quad (۶.۷۰)$$

مداری حرکت کے ساتھ وابستہ جفت قطب معیار اثر ہے۔ μ_{ell} یوں درج ذیل ہوگا۔

$$H'_z = \frac{e}{2m} (L + 2S) \cdot B \quad \text{بیرونی} \quad (۶.۷۱)$$

زیرمان تقسیم کی فطرت فیصلہ کن حد تک اندرونی میدان (مساوات ۶.۵۹)، جو چکر و مدار رابطہ پیدا کرتا ہے، کے لحاظ سے بیرونی میدان کی طاقت پر منحصر ہوگی۔ اگر اندرونی $B \ll$ بیرونی B ہو تب مہین ساخت غالب ہوگی، اور H' کو ایک چھوٹا اضطراب تصور کیا جاسکتا ہے، جبکہ اندرونی $B \gg$ بیرونی B کی صورت میں زیرمان اثر غالب ہوگا، اور مہین ساخت اضطراب تصور کی جائے گی۔ ان خطوں کے بیچ، جہاں دونوں میدان مد معتمیل ہوں گے، ہمیں انحطاطی نظریہ اضطراب کی پوری قوت درکار ہوگی، اور ہیملٹنی کے متعلقہ حصے کو ”ہاتھ سے“ وتری بنانا لازم ہوگا۔ درج ذیل حصوں میں ہائیڈروجن کے لئے ہم ان تینوں صورتوں پر غور کریں گے۔

سوال ۶.۲۰: ہائیڈروجن کی اندرونی میدان کی اندازاً قیمت، مساوات ۶.۵۹ استعمال کرتے ہوئے، تلاش کر کے ”طفتور“ اور ”مکزور“ زیرمان میدان کی متداری تصویر کشی کریں۔

۶.۴.۱ کمزور میدان زیرمان اثر

اگر اندرونی $B \ll$ بیرونی B ہو تب مہین ساخت (مساوات ۶.۶۷) غالب ہوگی، اور ”موزوں“ کوانٹائی اعداد n ، ℓ ، j ، اور m_j ہو گئے (تاہم، چکر و مدار ربط کی موجودگی میں L اور S علیحدہ علیحدہ بتائی نہیں ہو گئے، لہذا m_ℓ اور m_s)

^{۲۶} Zeeman effect

^{۲۷} مداری حرکت کے لئے کلاسیکی قیمت $(q/2m)$ ہی مسکن مقناطیسی نسبت ہوگی؛ صرف چکر کی صورت میں 2 کا ”انسانی“ حیزو ضربی پلا جاسکتا ہے۔

باب ۶. غیر تابع وقت نظریہ اضطراب

”موزوں“ کو انشائی اعداد نہیں ہونگے۔^{۲۸} تب اول نظریہ اضطراب میں توانائی میں زمین تصحیح درج ذیل ہوگی۔

$$(۶.۷۲) \quad E_Z^1 = \langle n\ell jm_j | H_Z' | n\ell jm_j \rangle = \frac{e}{2m} B_{\text{بیرونی}} \cdot \langle L + 2S \rangle$$

اب $J + S = L + 2S$ ہوگا۔ بد قسمتی سے، ہمیں S کی توقعاتی قیمت فوری طور پر معلوم نہیں ہے۔ لیکن ہم درج ذیل طریقے سے اسے جان سکتے ہیں: کل زاویائی معیار حرکت $J = L + S$ ایک مستقل ہے (شکل ۶.۱۰)؛ اس مقررہ سمتیہ کے گرد L اور S تیزی سے استقبالی حرکت کرتے ہیں۔ بالخصوص، J پر S کی متاثرہ تظلیل، S کی (ومتقی) اوسط قیمت:

$$(۶.۷۳) \quad S_{\text{اوسط}} = \frac{(S \cdot J)}{J^2} J$$

ہوگی۔ لیکن $L = J - S$ ہے، لہذا $L^2 = J^2 + S^2 - 2J \cdot S$

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

ہوگا، جس سے درج ذیل حاصل ہوتا ہے۔

$$(۶.۷۵) \quad \langle L + 2S \rangle = \left\langle \left(1 + \frac{S \cdot J}{J^2}\right) J \right\rangle = \left[1 + \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) + 3/4}{2j(j+1)}\right] \langle J \rangle$$

چونکہ کورنوسین میں بندرکن کو لنڈے g جو ضربے^{۲۹} کہتے ہیں جس کو g_J سے ظاہر کیا جاتا ہے۔

ہم محور Z کو بیرونی B کے ساتھ ساتھ رکھ سکتے ہیں؛ تب

$$(۶.۷۶) \quad E_Z^1 = \mu_B g_J B_{\text{بیرونی}} m_j$$

ہوگا، جہاں

$$(۶.۷۷) \quad \mu_B \equiv \frac{e\hbar}{2m} = 5.788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$$

یوہر مقناطیہ^{۳۰} کہلاتا ہے۔ مہین ساخت (مساوات ۶.۶۷) اور زمینان (مساوات ۶.۷۶) حصوں کا مجموعہ کل توانائی دے گا۔ مثال کے طور پر، زمینی حال ($n = 1$ ، $\ell = 0$ ، $j = 1/2$ ، لہذا $g_J = 2$) دو سطحوں:

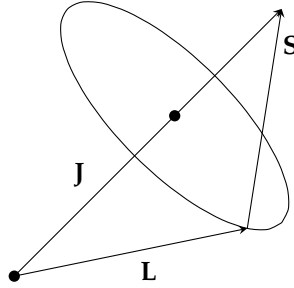
$$(۶.۷۸) \quad \underbrace{-13.6 \text{ eV}(1 + \alpha^2/4)}_{\text{مساوات ۶.۶۷}} \pm \underbrace{\mu_B B_{\text{بیرونی}}}_{\text{مساوات ۶.۷۶}}$$

میں بٹ جباے گا، جہاں $m_j = 1/2$ کے لیے مثبت علامت اور $m_j = -1/2$ کے لیے منفی علامت استعمال ہوگی۔ ان توانائیوں کو (بیرونی B کے تفاعل کے طور پر) شکل ۶.۱۱ میں ترسیم کیا گیا ہے۔

^{۲۸} یہاں ایک اضطراب (زمینان بنوارا) کے اوپر دوسرا اضطراب (مہین ساخت) انبار ہے۔ ”موزوں“ کو انشائی اعداد وہ ہوں گے جو غالب اضطراب، جو موجودہ مسئلہ میں مہین ساخت ہے، کے لئے درست ہوں۔ ثانوی اضطراب (زمینان بنوارا) J_z میں، جہاں حصہ ۶.۲.۱ میں پیش کئے گئے مسئلہ میں عامل A کا کردار ادا کرتا ہے، باقی اخطا اٹھاتا ہے۔ عامل J_z تکنیکی لحاظ سے H_Z' کے ساتھ غیر متعلق ہے، تاہم مساوات ۶.۷۳ کی ومتقی اوسط نقطہ نظر سے یہ متعلق ہوں گے۔

^{۲۹} Lande g-factor

^{۳۰} Bohr magneton



شکل ۶.۱۰: چکر و مدار رابط کی عدم موجودگی میں L اور S علیحدہ علیحدہ بقائی نہیں ہوں گے؛ یہ اٹل کل زاویائی معیار حرکت J کے گرد استقبالی حرکت کرتے ہیں۔

سوال ۶.۲۱: آٹھ عدد $n = 2$ حالات $|2\ell jm_j\rangle$ پر غور کریں۔ کمزور میدان زمین بنوارے کی صورت میں ہر ایک حال کی توانائی تلاش کر کے شکل ۶.۱۱ کی طرز کا خاکہ بنا کر دکھائیں۔ بیرونی B بڑھانے سے توانائیاں کس طرح ارتقا کرتی ہے۔ ہر خط کو نام دے کر اس کی ڈھلوان دکھائیں۔

۶.۴.۲ طاقتور میدان زمین اثر

اگر اندرونی $B \gg$ بیرونی B ہو، تب زمین اثر غالب ہوگا؛^۳ میدان بیرونی B کو z محور پر رکھ کر ”موزوں“ کوانٹائی اعداد n, ℓ, m_ℓ اور m_s ہونگے (جبکہ j اور m_j نہیں ہونگے، چونکہ بیرونی قوت مسروڑ کی صورت میں کل زاویائی معیار حرکت بقائی نہیں ہوگا، جبکہ L_z اور S_z بقائی ہونگے)۔ زمین ہیملٹنی

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

ہوگا، جبکہ ”غیر مضطرب“ توانائیاں درج ذیل ہوں گی۔

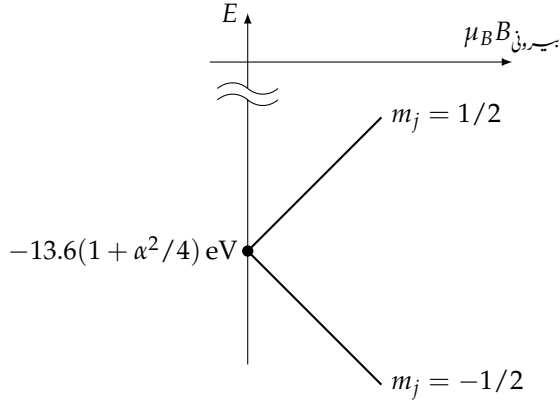
$$(۶.۷۹) \quad E_{n\ell m_s} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} + \mu_B B_{\text{بیرونی}} (m_\ell + 2m_s)$$

مہین ساخت کو مکمل نظر انداز کرتے ہوئے یہی جواب ہوگا۔ تاہم ہم اس سے بہتر جواب حاصل کر سکتے ہیں۔

رتبہ اول نظریہ اضطراب میں ان سطحوں کی مہین ساخت تصحیح درج ذیل ہوگی۔

$$(۶.۸۰) \quad E_{fs}^1 = \langle n\ell m_\ell m_s | (H'_r + H'_{so}) | n\ell m_\ell m_s \rangle$$

^۳ یہی صورت میں زمین اثر کو پاشی و پیکے اثر بھی کہتے ہیں۔



شکل ۶.۱۱: ہائیڈروجن کے زمینی حال کا کمزور میدان میں انی زمین بٹوارا، بالائی لکیر ($m_j = 1/2$) کی ڈھلوان 1 ہے؛ نچلی لکیر ($m_j = -1/2$) کی ڈھلوان -1 ہے۔

اضافیتی حصہ وہی ہوگا جو پہلے تھا (مساوات ۶.۵۷)؛ چپکرومدار جبزو (مساوات ۶.۶۱) کے لیے ہمیں

$$(۶.۸۱) \quad \langle \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \rangle = \langle S_x \rangle \langle L_x \rangle + \langle S_y \rangle \langle L_y \rangle + \langle S_z \rangle \langle L_z \rangle = \hbar^2 m_\ell m_s$$

درکار ہوگا (یاد رہے S_z اور L_z کے امتیازی تشابہات کے لیے $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = \langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$ ہوگا)۔ ان تمام کو اکٹھے کر کے (سوال ۶.۲۲) ہم درج ذیل اخذ کرتے ہیں۔

$$(۶.۸۲) \quad E_{fs}^1 = \frac{13.6 \text{ eV}}{n^3} \alpha^2 \left\{ \frac{3}{4n} - \left[\frac{\ell(\ell+1) - m_\ell m_s}{\ell(\ell+1/2)(\ell+1)} \right] \right\}$$

(چو کورتوسین میں جبزو، $\ell = 0$ کے لئے بلا تعین ہے؛ اس صورت میں اس کی درست قیمت 1 ہے؛ سوال ۶.۲۴ دیکھیں)۔ زمین (مساوات ۶.۷۹) اور مہین ساخت (مساوات ۶.۸۲) حصوں کا مجموعہ کل توانائی دے گا۔

سوال ۶.۲۲: مساوات ۶.۸۰ سے آغاز کر کے مساوات ۶.۵۷، مساوات ۶.۶۱، مساوات ۶.۶۳، اور مساوات ۶.۸۱ استعمال کرتے ہوئے مساوات ۶.۸۲ اخذ کریں۔

سوال ۶.۲۳: آٹھ عدد $n = 2$ حالات $|2\ell m_\ell m_s\rangle$ پر غور کریں۔ طاقتور میدان زمین بٹوارا کی صورت میں ہر حال کی توانائی تلاش کریں۔ اپنے جواب کو بوہر توانائی، (α^2 کے راست متناسب) مہین ساخت، اور $\mu_B B$ کے راست متناسب) زمین حصہ کے مجموعہ کی صورت میں لکھیں۔ مہین ساخت کو مکمل طور پر نظر انداز کرتے ہوئے، منفرد سطحوں کی تعداد کتنی ہوگی، اور ان کے انحطاط کیا ہوں گے؟

سوال ۶.۲۴: اگر $\ell = 0$ ہو، تب $j = s$ ، $m_j = m_s$ ہوگا، اور کمزور اور طاقتور دونوں میدانوں کے لیے موزوں حالات ($|nm_s\rangle$) ایک جیسے ہوں گے۔ (مساوات ۶.۷۲ سے) E_Z^1 اور (مساوات ۶.۶۷ سے) مہین ساخت

توانائیاں تعین کر کے، میدان کی طاقت سے قطع نظر، $\ell = 0$ زمین اثر کا عمومی نتیجہ لکھیں۔ دکھائیں کہ چوکور قوسین رکن کی قیمت 1 لیتے ہوئے، طاقتور میدان کلیہ (مساوات ۶.۸۲) یہی نتیجہ دے گا۔

۶.۴.۳ درمیانہ میدان زمین اثر

درمیانہ میدان کی صورت میں H'_Z اور H'_{fs} غالب ہوگا، اہلذا ہمیں دونوں کو، ایک نظر سے دیکھ کر، پوہر ہیملٹنی (مساوات ۶.۴۲) کے اضطراب تصور کرنا ہوگا۔

$$H' = H'_Z + H'_{fs} \quad (۶.۸۳)$$

میں $n = 2$ صورت پر اپنی توجہ محدود رکھ کر، ان حالات کو، جن کی تصویر کشی ℓ ، j ، اور m_j کرتے ہیں، ۳۲ اخطاطی نظریہ اضطراب کی اساس لیتا ہوں۔ کلیش و گورڈن عددی سر (سوال ۴.۵۱ یا جدول ۴.۸) استعمال کرتے ہوئے $|jm_j\rangle$ کو $|sm_s\rangle | \ell m_\ell \rangle$ کا خطی جوڑ لکھ کر، درج ذیل ہوگا۔

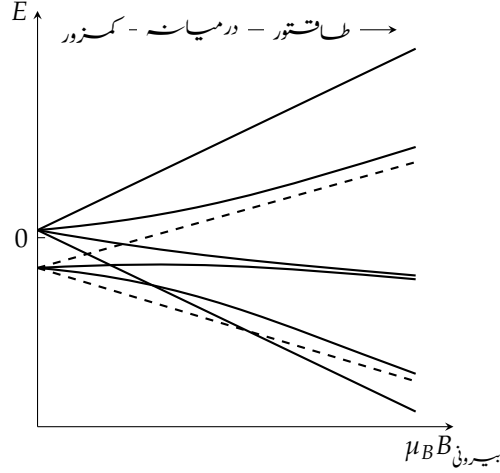
$$\ell = 0 \begin{cases} \psi_1 \equiv |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle = |00\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \\ \psi_2 \equiv |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle = |00\rangle |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle \end{cases}$$

$$\ell = 1 \begin{cases} \psi_3 \equiv |\frac{3}{2} \frac{3}{2}\rangle = |11\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle \\ \psi_4 \equiv |\frac{3}{2} \frac{-3}{2}\rangle = |1-1\rangle |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle \\ \psi_5 \equiv |\frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{2/3}|10\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{1/3}|11\rangle |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle \\ \psi_6 \equiv |\frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle = -\sqrt{1/3}|10\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{2/3}|11\rangle |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle \\ \psi_7 \equiv |\frac{3}{2} \frac{-1}{2}\rangle = \sqrt{1/3}|1-1\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{2/3}|10\rangle |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle \\ \psi_8 \equiv |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle = -\sqrt{2/3}|1-1\rangle |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{1/3}|10\rangle |\frac{1}{2} \frac{-1}{2}\rangle \end{cases}$$

اس اساس میں H'_{fs} کے تمام غیر صفر و تالبی ارکان، جنہیں مساوات ۶.۶۶ دیتی ہے، وتر پر ہوں گے؛ H'_Z کے چار غیر وتری ارکان پائے جاتے ہیں، اور مکمل متالب W (سوال ۶.۲۵ دیکھیں) درج ذیل ہوگا

$$\begin{pmatrix} 5\gamma - \beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5\gamma + \beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma - 2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma + 2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma - \frac{2}{3}\beta & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 5\gamma - \frac{1}{3}\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma + \frac{2}{3}\beta & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 5\gamma + \frac{1}{3}\beta \end{pmatrix}$$

۳۲ آپ چاہیں تو ℓ ، m_ℓ ، m_s حالات استعمال کر سکتے ہیں، جو H'_Z کے متالبی ارکان کا حصول آسان لیکن H'_{fs} کا زیادہ مشکل بناتے ہیں؛ متالب W زیادہ پیچیدہ ہوگا، لیکن امتیازی امتداد (جو اساس کی تابع نہیں) دونوں صورتوں میں ایک جیسی ہوں گی۔



شکل ۶.۱۲: کمزور، درمیانہ اور طفتور میدان میں ہائیڈروجن کے $n = 2$ حال کا زیرِ تابَع ہونا۔

جہاں درج ذیل ہوں گے۔

$$\gamma \equiv (\alpha/8)^2 13.6 \text{ eV} \quad \text{اور} \quad \beta \equiv \mu_B B$$

ابتدائی چار امتیازی اقدار پہلے سے وتر پرد کھائے گئے ہیں؛ اب صرف دو 2×2 ڈیول کی امتیازی اقدار تلاش کرنا باقی ہے۔ ان میں سے پہلی کی امتیازی مساوات درج ذیل ہے

$$\lambda^2 - \lambda(6\gamma - \beta) + \left(5\gamma^2 - \frac{11}{3}\gamma\beta\right) = 0$$

جس سے دو درجی کلیہ درج ذیل امتیازی اقدار دے گا۔

$$(۶.۸۳) \quad \lambda_{\pm} = -3\gamma + (\beta/2) \pm \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + (\beta^2/4)}$$

دوسرے ڈبلے کی امتیازی اقدار بھی مساوات دے گی، لیکن اس میں β کی علامت الٹ ہوگی۔ ان آٹھ توانائیوں کو جدول ۶.۲ میں پیش کیا گیا ہے، اور شکل ۶.۱۲ میں B کے لحاظ سے ترسیم کیا گیا ہے۔
ضرر میدان حد ($\beta = 0$) میں یہ گھٹ کر مہین ساخت قیمتیں دیتی ہیں؛ کمزور میدان ($\beta \ll \gamma$) میں یہ سوال ۶.۲۱ میں حاصل نتائج دیتی ہیں؛ طفتور میدان ($\beta \gg \gamma$) میں سوال ۶.۲۳ کے نتائج حاصل ہوتے ہیں (دھیان رہے، جیسا سوال ۶.۲۳ میں پیشگوئی کی گئی، بہت زیادہ طفتور میدانوں میں پانچ منفرد سطح توانائی پر ارتکاز ہوگا)۔

سوال ۶.۲۵: قواعد H'_Z اور H'_{f_s} کے ارکان دریافت کر کے، $n = 2$ کے لئے، متن میں دیا گیا متالاب W مرتب کریں۔

جدول ۶.۲: مہین ساخت اور زمین بٹوارا کے ساتھ، ہائیڈروجن کے $n = 2$ حالات کی سطحیں توانائی۔

$$\epsilon_1 = E_2 - 5\gamma + \beta$$

$$\epsilon_2 = E_2 - 5\gamma - \beta$$

$$\epsilon_3 = E_2 - \gamma + 2\beta$$

$$\epsilon_4 = E_2 - \gamma - 2\beta$$

$$\epsilon_5 = E_2 - 3\gamma + \beta/2 + \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4}$$

$$\epsilon_6 = E_2 - 3\gamma + \beta/2 - \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4}$$

$$\epsilon_7 = E_2 - 3\gamma - \beta/2 + \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4}$$

$$\epsilon_8 = E_2 - 3\gamma - \beta/2 - \sqrt{4\gamma^2 + (2/3)\gamma\beta + \beta^2/4}$$

سوال ۶.۲۶: ہائیڈروجن کے $n = 3$ حالات کے لیے کمزور، طاقوتور اور درمیانے میدان خطوں کے لیے زمین اثر کا تجزیہ کریں۔ (جدول ۶.۲ کی طرز پر) توانائیوں کا جدول تیار کر کے، انہیں (شکل ۶.۱۲ کی طرح) بیرونی میدان کے تقاعلات کے طور پر ترسیم کریں، اور تصدیق کریں کہ درمیانے میدان نتائج دو تحدیدی صورتوں میں گھٹ کر درست بنتی دیتی ہیں۔

۶.۵ نہایت مہین بٹوارا

پروٹان خود ایک مقناطیسی جفت قطب ہے، اگرچہ نسب نامہ میں بڑی کیفیت کی بنا پر اس کا جفت قطب معیار اثر، الیکٹران کے جفت قطب معیار اثر سے بہت کم ہوگا (مساوات ۶.۶۰)۔

$$(۶.۸۵) \quad \mu_p = \frac{g_p e}{2m_p} \mathbf{S}_p, \quad \mu_e = -\frac{e}{m_e} \mathbf{S}_e$$

(پروٹان تین کوارکوں پر مشتمل مخلوط ساخت کا ذرہ ہے، اور اس کی ممکن مقناطیسی نسبت الیکٹران کی ممکن مقناطیسی نسبت کی طرح سادہ نہیں، اسی لئے g جزو ضربی کو g_p لکھا گیا ہے، جس کی پیمائشی قیمت 5.59 ہے جو الیکٹران کی قیمت (2) سے مختلف ہے۔) کلاسیکی برقی حرکیات کے تحت، جفت قطب μ درج ذیل مقناطیسی میدان پیدا کرتا ہے۔^{۲۳}

$$(۶.۸۶) \quad \mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} [3(\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{a}_r) \mathbf{a}_r - \boldsymbol{\mu}] + \frac{2\mu_0}{3} \boldsymbol{\mu} \delta^3(\mathbf{r})$$

^{۲۳} اگر آپ مساوات ۶.۸۶ میں مستعمل ڈیلٹا فنکشن علی جزو سے واقف نہیں، جفت قطب کو چپکے کاہتا ہو بار دار کر دی خول تصور کر کے، μ کو برقرار رکھ کر (داس کو مضمر تک اور بار کولا مستثنیٰ تک) پھنپا کر، آپ اس کو اخذ کر سکتے ہیں۔

باب ۶. غیر تابع وقت نظریہ اضطراب

یوں، پروٹان کے مقناطیسی جفت قطب معیار اثر سے پیدا مقناطیسی میدان میں الیکٹران کا ہیمیلٹنی درج ذیل ہوگا (مساوات ۶.۵۸)۔

$$(۶.۸۷) \quad H'_{hf} = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e} \frac{[3(\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{a}_r)(\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{a}_r) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e]}{r^3} + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3m_p m_e} \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \delta^3(\mathbf{r})$$

نظریہ اضطراب کے تحت توانائی کی اول رتبہ تخفیف (مساوات ۶.۹) اضطرابی ہیمیلٹنی کی توقعاتی قیمت ہوگی۔

$$(۶.۸۸) \quad E^1_{hf} = \frac{\mu_0 g_p e^2}{8\pi m_p m_e} \left\langle \frac{3(\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{a}_r)(\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{a}_r) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e}{r^3} \right\rangle + \frac{\mu_0 g_p e^2}{3m_p m_e} \langle \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \rangle |\psi(0)|^2$$

زمینی حال میں (یا کسی دوسری ایسے حال میں جس میں $\ell = 0$ ہو) تفاعل موج کر دی تشکیلی ہوگا، اور پہلی توقعاتی قیمت صفر ہوگی (سوال ۶.۲۷ دیکھیں)۔ مزید، مساوات ۶.۸۰ کے تحت $|\psi_{100}(0)|^2 = 1/(\pi a^3)$ ہوگا، لہذا زمینی حال میں درج ذیل ہوگا۔

$$(۶.۸۹) \quad E^1_{hf} = \frac{\mu_0 g_p e^2}{3\pi m_p m_e a^3} \langle \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e \rangle$$

چونکہ اس میں دو چپکروں کے بیچ ضرب نقطہ پائی جاتی ہے، لہذا اس کو چکر چکر ربط $\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ پایا جاتا ہے)۔

چکر چکر ربط کی موجودگی میں، انفرادی چکری زاویائی معیار اثر بقائی نہیں رہتے؛ ”موزوں“ حالات، کل چکر:

$$(۶.۹۰) \quad \mathbf{S} \equiv \mathbf{S}_e + \mathbf{S}_p$$

کے امتیازی سمتیات ہوں گے۔ پہلے کی طرح، ہم اس کا سرچ لے کر درج ذیل حاصل کرتے ہیں۔

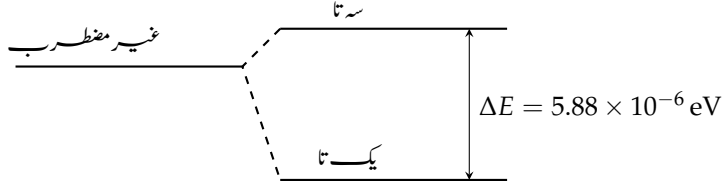
$$(۶.۹۱) \quad \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e = \frac{1}{2}(S^2 - S_e^2 - S_p^2)$$

اب الیکٹران اور پروٹان دونوں کا چکر $\frac{1}{2}$ ہے، لہذا $S_p^2 = S_e^2 = (3/4)\hbar^2$ ہوگا۔ یہ تاحال (تمام چکر ”ہم متوازی“) میں کل چکر 1 ہوگا، لہذا $S^2 = 2\hbar^2$ ہوگا؛ یک تاحال میں کل چکر 0، لہذا $S^2 = 0$ ہوگا۔ یوں درج ذیل ہوگا۔

$$(۶.۹۲) \quad E^1_{hf} = \frac{4g_p \hbar^4}{3m_p m_e^2 c^2 a^4} \begin{cases} +1/4, & (\text{سہ تا}) \\ -3/4, & (\text{یک تا}) \end{cases}$$

چکر چکر ربط، زمینی حال کے چکری انحطاط کو توڑ کر سہ تا تفکیک کو اٹھاتا جبکہ یک تا تفکیک کو دباتا ہے (شکل ۶.۱۳)۔ ظاہر ہے کہ ان کے بیچ درج ذیل ہوگا۔

$$(۶.۹۳) \quad \Delta E = \frac{4g_p \hbar^4}{3m_p m_e^2 c^2 a^4} = 5.88 \times 10^{-6} \text{ eV}$$



شکل ۶.۱۳: ہائیڈروجن کے زمینی حال کا نہایت مہین ہوارا۔

سہ تا حال سے یک تا حال منتقلی کی بنا پر خارج نوریہ کا تعدد

$$\nu = \frac{\Delta E}{h} = 1420 \text{ MHz} \quad (۶.۹۴)$$

ہوگا، اور اس کا مطابقتی طول موج $c/\nu = 21 \text{ cm}$ ہوگا، جو خورد موج خطہ میں پایا جاتا ہے۔ یہ وہ مشہور 21 سینٹی میٹر لکیر^{۳۶} ہے جو کائنات میں اخراج کی صورت میں ہر طرف پائی جاتی ہے۔

سوال ۶.۲: فرض کریں a اور b دو مستقل سمتیات ہیں۔ درج ذیل دکھائیں

$$\int (a \cdot a_r)(b \cdot a_r) \sin \theta \, d\theta \, d\phi = \frac{4\pi}{3}(a \cdot b) \quad (۶.۹۵)$$

(کمل ہمیشہ کی طرح سمت $0 < \theta < \pi$ ، $0 < \phi < 2\pi$ پر کر لیا گیا ہے)۔ اس نتیجے کو استعمال کرتے ہوئے ان حالات کے لئے جن کے لیے $l = 0$ ہو، درج ذیل دکھائیں۔

$$\left\langle \frac{3(\mathbf{S}_p \cdot \mathbf{a}_r)(\mathbf{S}_e \cdot \mathbf{a}_r) - \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_e}{r^3} \right\rangle = 0$$

اشارہ: $\mathbf{a}_r = \sin \theta \cos \phi \mathbf{i} + \sin \theta \sin \phi \mathbf{j} + \cos \theta \mathbf{k}$

سوال ۶.۲۸: ہائیڈروجن گلیب میں موزوں ترمیم کرتے ہوئے، درج ذیل کے لیے زمینی حال کی نہایت مہین ساخت تعین کریں: (الف) میونی ہائیڈروجن^{۳۷} (جس میں الیکٹران کے بجائے میون ہوگا، جس کا بار اور g حبزو ضربی، بالستریب، الیکٹران کے بار اور g حبزو ضربی کے برابر، لیکن کیت 207 گنا زیادہ ہے)، (ب) پازیٹرانیم^{۳۸} جس میں پروٹان کی جگہ ضد الیکٹران ہوگا، جس کی کیت اور g حبزو ضربی، بالستریب، الیکٹران کی کیت اور g حبزو ضربی ہیں، لیکن بار کی علامت الٹ ہے)، (ج) میونیئم^{۳۹} (جس میں پروٹان کی جگہ ضد میون ہوگا، جس

^{۳۶} spin-spin coupling
^{۳۷} energy gap
^{۳۸} 21-centimeter line
^{۳۹} muonic hydrogen
^{۴۰} positronium
^{۴۱} muonium

کی کیت اور g جزو ضربی عین میون کے برابر، لیکن بار الٹ ہے۔ اشارہ یاد رہے کہ ان عجیب ”جوہروں“ کا رداس بوہر حاصل کرتے وقت تخفیف شدہ کیت (سوال ۱۵) استعمال کی جانی گی۔ دیکھایا گیا ہے کہ پازیٹرونیم کے لئے حاصل جواب $(4.85 \times 10^{-4} \text{ eV})$ ، تجرباتی حاصل قیمت $(8.41 \times 10^{-4} \text{ eV})$ سے بہت مختلف ہے؛ اتنے زیادہ مشرق کی وجہ نہ ملو گے جوڑا $e^+ + e^- \rightarrow \gamma + \gamma$ ہے، جو اضافی $(3/4)\Delta E$ حصہ ڈالتا ہے، اور جو سادہ ہائیڈروجن، میونی ہائیڈروجن، اور میونیئم میں (نکال رہے کہ) نہیں ہوگا۔

اضافی سوالات برائے باب ۶

سوال ۶.۲۹: مرکزہ کی مستحالی جامت کی بنا پر ہے ہائیڈروجن کی زمینی حال توانائی میں تصحیح کی اندازا قیمت تلاش کریں۔ پروٹان کو رداس b کایکاں بار دار کروی خول تصور کریں، یوں خول کے اندر الیکٹران کی مخفی توانائی مستقل، $-e^2/4\pi\epsilon_0 b$ ہوگی؛ یہ زیادہ درست نہیں ہے، لیکن یہ سادہ ترین نمونہ ہے، جس سے ہمیں مقدار کارتبہ ٹھیک دے گا۔ اپنے نتیجے کو چھوٹی مقدار معلوم (b/a) کے طاقتی تسلسل توسیع میں لکھ کر، جہاں a رداس بوہر ہے، صرف ابتدائی جزو رکھ کر، درج ذیل روپ میں جواب حاصل کریں۔

$$\frac{\Delta E}{E} = A(b/a)^n$$

آپ نے مستقل A اور طاقت n کی قیمتیں تعین کرنی ہیں۔ آخر میں $10^{-15} \text{ m} \approx b$ (جو تقریباً پروٹان کا رداس ہے) پر کر کے اصل عدد تلاش کریں۔ اس کا موازنہ مہین ساخت اور نہایت مہین ساخت کے ساتھ کریں۔

سوال ۶.۳۰: ہم ست تین ابعادی ہارمونی مرکزہ (سوال ۶.۳۸) پر غور کریں۔ اضطراب

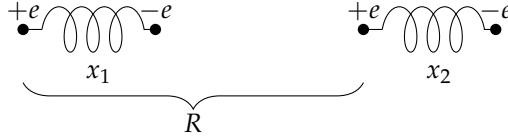
$$H' = \lambda x^2 y z$$

(جہاں λ ایک مستقل ہے) کے، درج ذیل پر، (رتبہ اول) اثر پر بحث کریں۔

۱. زمینی حال؛

ب. (تہرہ انخطاطی) پہلا ہیجان حال۔ اشارہ: سوال ۱۲.۱۲ اور سوال ۳.۳۳ کے جوابات استعمال کریں۔

سوال ۶.۳۱: **وضو و السہ باہم عمل**۔ دو ایسے جوہر پر غور کریں جن کے بیچ فاصلہ R ہو۔ چونکہ دونوں برقی معادل ہیں، لہذا آپ فرض کر سکتے ہیں کہ ان کے بیچ کوئی قوت نہیں پائی جاتی، تاہم متقابل تقطیب ہونے کی صورت میں ان کے بیچ کمزور قوت کشش پائی جاتی گی۔ اس نظام کی نمونہ کشی کرنے کی خاطر، جوہر کو (کیت m ، بار $-e$) کا ایک الیکٹران جو (بار $+e$) کے مرکزہ کے ساتھ ایک اسپرنگ (جس کا مقیاس پک k ہے) سے جڑا ہوا تصور کریں (شکل ۶.۱۳)۔ ہم فرض کرتے ہیں کہ مرکزہ بھاری ہونے کے بنا پر غیر متحرک یعنی ساکن ہوں گے۔ اس



شکل ۶.۱۳: دو متماثل تنظیم فیزیکی جوہر (سوال ۶.۳۱)۔

غیر مضطرب نظام کی ہیملٹنی درج ذیل ہوگی۔

$$(۶.۹۶) \quad H^0 = \frac{1}{2m} p_1^2 + \frac{1}{2} k x_1^2 + \frac{1}{2m} p_2^2 + \frac{1}{2} k x_2^2$$

ان جوہروں کے بیچ کولمب باہم عمل درج ذیل ہوگا۔

$$(۶.۹۷) \quad H' = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{R+x_1} - \frac{e^2}{R-x_2} + \frac{e^2}{R+x_1-x_2} \right)$$

۱. مساوات ۶.۹۷ کی تفصیل پیش کریں۔ فاصلہ R سے $|x_1|$ اور $|x_2|$ کی قیمتوں کو بہت کم تصور کرتے ہوئے درج ذیل دکھائیں۔

$$(۶.۹۸) \quad H' \cong -\frac{e^2 x_1 x_2}{2\pi\epsilon_0 R^3}$$

ب. دکھائیں کہ کل ہیملٹنی (مساوات ۶.۹۶ جمع مساوات ۶.۹۸) دو پارامونی مرتعش ہیملٹنیوں:

$$(۶.۹۹) \quad H = \left[\frac{1}{2m} p_+^2 + \frac{1}{2} \left(k - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} \right) x_+^2 \right] + \left[\frac{1}{2m} p_-^2 + \frac{1}{2} \left(k + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} \right) x_-^2 \right]$$

میں زیر تبدیلی متغیرات:

$$(۶.۱۰۰) \quad p_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} (p_1 \pm p_2) \quad \text{اور نتیجتاً} \quad x_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 \pm x_2)$$

علیحدہ علیحدہ ہوگی۔

ج. ظاہر ہے کہ اس ہیملٹنی کی زمینی حال توانائی درج ذیل ہوگی۔

$$(۶.۱۰۱) \quad \omega_{\pm} = \sqrt{\frac{k \mp (e^2/4\pi\epsilon_0 R^3)}{m}} \quad \text{جہاں} \quad E = \frac{1}{2} \hbar (\omega_+ + \omega_-)$$

باب ۶. غیر تابع وقت نظریہ اضطراب

کولم باہم عمل کے بغیر $E_0 = \hbar\omega_0$ ہوتی، جہاں $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ ہے۔ یہ فرض کرتے ہوئے کہ $k \gg (e^2/4\pi\epsilon_0 R^3)$ درج ذیل دکھائیں۔

$$(۶.۱۰۲) \quad \Delta V \equiv E - E_0 \cong -\frac{\hbar}{8m^2\omega_0^3} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{R^6}$$

ماخوذ: دو جوہروں کے پھشکشی مخفیہ پایا جاتا ہے، جو ان کے پھشکصلہ کے چھپی طاقت کے تغیر معکوس ہے۔ یہ دو معادل جوہروں کے پھشکصلہ دروازہ باہم عمل^{۴۱} ہے۔

د. یہی حاب دور تہی نظریہ اضطراب استعمال کرتے ہوئے دوبارہ کریں۔ اشارہ: غیر مضطرب حالات کا روپ $\psi_{n1}(x_1)\psi_{n2}(x_2)$ ہوگا، جہاں $\psi_n(x)$ یک ذروی سر تقش تف عمل موج ہے جس میں کیفیت m اور مقیاس پلک k ہوگا؛ مساوات ۶.۹۸ میں دی گئی اضطراب کے لیے زمینی حال توانائی کی دور تہی تصحیح ΔV ہوگی (دھیان رہے کہ اول رتہ تصحیح صفر ہے)۔

سوال ۶.۳۲: فرض کریں، ایک مخصوص کوانٹائی نظام کی ہیملٹنی H ، کسی مقدار معلوم λ کی تف عمل ہے؛ $H(\lambda)$ کی امتیازی افتد ار کو $E_n(\lambda)$ ، اور امتیازی تف عملات کو $\psi_n(\lambda)$ لیں۔ مسئلہ فائنمنز و ہلن^{۴۲} درج ذیل کہتا ہے^{۴۳}

$$(۶.۱۰۳) \quad \frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle \psi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \psi_n \right\rangle$$

(جہاں E_n کو غیر انخطاطی تصور کریں، یا؛ اگر انخطاطی ہو تب، تمام ψ_n کو انخطاطی امتیازی تف عملات کے ”موزوں“ خطی جوڑ تصور کریں)۔

ا. مسئلہ فائنمنز و ہلن ثابت کریں۔ اشارہ: مساوات ۶.۹ استعمال کریں۔

ب. اس کا اطلاق یک بُعدی ہارمونی سر تقش پر درج ذیل صورتوں میں کریں۔

۱. $\lambda = \omega$ لیں (جو V کی توقعاتی قیمت کا کلیہ دے گا)،

۲. $\lambda = \hbar$ لیں (جو $\langle T \rangle$ دے گا)، اور

۳. $\lambda = m$ لیں (جو $\langle T \rangle$ اور $\langle V \rangle$ کا رشتہ دے گا)۔

اپنے جوابات کا سوال ۱۲.۱۲ اور مسئلہ وریل کی پیشگوئیوں (سوال ۳.۳۱) کے ساتھ موازنہ کریں۔

سوال ۶.۳۳: مسئلہ فائنمنز و ہلن (سوال ۶.۳۲) استعمال کرتے ہوئے ہائیڈروجن کے لئے $1/r$ اور $1/r^2$ کی توقعاتی قیمتیں

^{۴۱} Van der Waals interaction

^{۴۲} Feynmann-Hellmann theorem

^{۴۳} فائنمنز نے مساوات ۶.۱۰۳ اپنی اعلیٰ تعلیم کے دوران اخذ کی، جبکہ ہلن اسی مسئلہ کو چار سال قبل ایک غیر مشہور روسی حبریدہ میں کر چکے تھے۔

تسین کی حساباتی ہیں۔ رداسی تفاسلات موج (ساوات ۴.۵۳) کی موثر ہیلٹنی درج ذیل ہے

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

اور امتیازی افتدار (جنہیں ℓ کی صورت میں لکھا گیا ہے) ۴۴ درج ذیل ہیں (ساوات ۴.۷۰)۔

$$E_n = -\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2(j_{بند} + \ell + 1)^2}$$

ا. مسئلہ نمونہ ولن میں $e = \lambda$ لیتے ہوئے $\langle 1/r \rangle$ تلاش کریں۔ اپنے نتیجے کی تصدیق ساوات ۶.۵۵ سے کریں۔

ب. $\ell = \lambda$ لیتے ہوئے $\langle 1/r^2 \rangle$ تلاش کریں۔ اپنے نتیجے کی تصدیق ساوات ۶.۵۶ سے کریں۔

سوال ۶.۳۴: رشتہ کرامر^{۴۵}

$$(۶.۱۰۴) \quad \frac{s+1}{n^2} \langle r^s \rangle - (2s+1)a \langle r^{s-1} \rangle + \frac{s}{4} [(2\ell+1)^2 - s^2] a^2 \langle r^{s-2} \rangle = 0$$

ثابت کریں؛^{۴۶} یہ ہائیڈروجن کے حال $\psi_{n\ell m}$ میں الیکٹران کے لئے، r کی تین مختلف طاقتوں ($s-1$ ، s اور $s+1$) کے توقعاتی قیمتوں کا تعلق پیش کرتا ہے۔ اشارہ: رداسی ساوات (ساوات ۴.۵۳) کو درج ذیل روپ میں لکھ کر

$$u'' = \left[\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2}{ar} + \frac{1}{n^2 a^2} \right] u$$

$\int (ur^s u'') dr$ کو $\langle r^s \rangle$ ، $\langle r^{s-1} \rangle$ ، $\langle r^{s-2} \rangle$ کی صورت میں لکھیں۔ اس کے بعد مکمل بالخص کے ذریعہ دہرے تفرق کو گھٹائیں۔ دکھائیں کہ

$$\int (ur^s u') dr = -(s/2) \langle r^{s-1} \rangle$$

$$\int (u' r^s u') dr = -[2/(s+1)] \int (u'' r^{s+1} u') dr \quad \text{اور}$$

ہوں گے۔ یہاں سے آگے چلیں۔

سوال ۶.۳۵:

^{۴۴} جب دو-ب میں ہم ℓ کو استمراری متغیر تصور کرتے ہیں؛ یوں ساوات ۴.۶۷، جس میں $j_{بند}$ جولا زماعدد صحیح ہوگا ایک مستقل ہے، کے تحت n متغیر ℓ کا تعلق عمل ہوگا۔ ایسا دور کرنے کی غرض سے میں نے n کو خارج کیا تاکہ ℓ پر تابعیت واضح ہو۔

^{۴۵} Kramers' relation

^{۴۶} اس تعلق کو رشتہ پتر کے بھی کہتے ہیں۔

باب ۶. غیر تابع وقت نظریہ اضطراب

ا. رشتہ کرامرس (مساوات ۶.۱۰۴) میں $s = 0$ ، $s = 1$ ، $s = 2$ اور $s = 3$ ڈال کر $\langle r^{-1} \rangle$ ، $\langle r \rangle$ ، $\langle r^2 \rangle$ اور $\langle r^3 \rangle$ کے کلیات حاصل کریں۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ اس طرح چلتے ہیں کسی بھی مثبت طاقت کے کلیات دریافت کیے جاسکتے ہیں۔

ب. البتہ، مخالف رخ چلتے ہوئے آپ کو ایک مسئلہ درپیش ہوگا۔ آپ $s = -1$ ڈال کر دیکھ سکتے ہیں کہ صرف $\langle r^{-2} \rangle$ اور $\langle r^{-3} \rangle$ کا رشتہ حاصل ہوتا ہے۔

ج. اگر آپ کسی دوسرے طریقے سے $\langle r^{-2} \rangle$ دریافت کر پائیں، تب آپ رشتہ کرامرس استعمال کر کے باقی تمام مخفی قوتوں کے لئے کلیات دریافت کر سکتے ہیں۔ مساوات ۶.۵۶ (جو سوال ۶.۳۳ میں اخذ کی گئی ہے) استعمال کرتے ہوئے $\langle r^{-3} \rangle$ تعین کریں، اور اپنے نتیجہ کی تصدیق مساوات ۶.۶۴ کے ساتھ کریں۔

سوال ۶.۳۶: جوہر کو یکساں بیرونی برقی میدان E بیرونی E میں رکھنے سے اس کی سطحیں توانائی اپنی جگہ سے سرک جاتی ہیں، جسے مشارکے اثر^۴ کہتے ہیں (اور جو زیمن اثر کا برقی مثال ہے)۔ اس سوال میں ہم ہائیڈروجن کے $n = 1$ اور $n = 2$ حالات کے لئے مشارک اثر کا تجزیہ کرتے ہیں۔ فرض کریں میدان z رخ ہے، لہذا الیکٹران کی مخفی توانائی درج ذیل ہوگی۔

$$H'_S = eE z = eE r \cos \theta \quad \text{بیرونی } z = eE r \cos \theta$$

اس کو بوہر ہیملٹنی (مساوات ۶.۴۲) میں اضطراب تصور کریں۔ (اس مسئلہ میں چپکر کا کوئی کردار نہیں ہے، لہذا اسے نظر انداز کریں، اور مہین ساخت کو نظر انداز کریں۔)

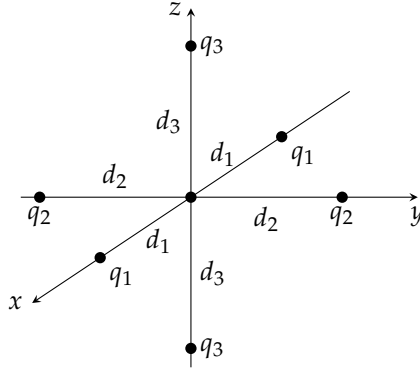
ا. دکھائیں کہ اول رتبہ میں زمینی حال توانائی اس اضطراب سے اثر انداز نہیں ہوتی۔

ب. پہلا ہیجان حال 4 پڑتا اخطاطی: ψ_{200} ، ψ_{211} ، ψ_{210} ، ψ_{21-1} ہے۔ اخطاطی نظریہ اضطراب استعمال کرتے ہوئے، توانائی کی اول رتبہ تصحیح تعین کریں۔ توانائی E_2 کا پورا کتنے سطحوں میں ہوگا؟

ج. درج بالا حبزوں-ب میں ”موزوں“ تفاعلات موج کیا ہونگے؟ ہر ایک ”موزوں“ حال میں برقی جفت قطب معیار اثر ($p_e = -er$) کی توقعاتی قیمت معلوم کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ نتائج لاگو کیے گئے میدان کے تابع نہیں ہیں؛ ظاہر ہے کہ پہلے ہیجان حال میں ہائیڈروجن ایک دائمی برقی جفت قطب معیار اثر کا حامل ہوگا۔

اشارہ: اس سوال میں بہت سارے نکلات پائے جاتے ہیں، تاہم تقریباً تمام کی قیمت صفر ہے۔ اس لئے حساب سے قبل غور کریں، اگر ϕ مکمل صفر ہو تو r اور θ نکلات حل کرنے کی ضرورت نہیں ہوگی۔ اگر ϕ مکمل صفر ہو، r اور θ نکلات کا حساب کرنا بے معنی ہوگا! حبزوی جواب: بیرونی $W_{13} = W_{31} = -3eaE$ ؛ باقی تمام ارکان صفر ہیں۔

سوال ۶.۳۷: ہائیڈروجن کے $n = 3$ حالات کے لئے مشارک اثر (سوال ۶.۳۶) پر غور کرتے ہیں۔ ابتدائی طور پر (پہلے کی طرح، چپکر کو نظر انداز کرتے ہوئے) نو اخطاطی حالات $\psi_{3\ell m}$ ہونگے، اور اب ہم z رخ برقی میدان چالو کرتے ہیں۔



شکل ۶.۱۵: ہائیڈروجن جوہر کے گرد چھ نقطی بار (متملی حبال کا ایک سادہ نمونہ؛ سوال ۶.۳۹)۔

ا. اضطرابی ہیملٹنی کو ظہر کرنے والا 9×9 متالب تیار کریں۔ حبزوی جواب:

$$\langle 300|z|310 \rangle = -3\sqrt{6}a, \quad \langle 310|z|320 \rangle = -3\sqrt{3}a, \quad \langle 31 \pm 1|z|32 \pm 1 \rangle = -(9/2)a$$

ب. امتیازی افتدار اور اکتے انخطاط دریافت کریں۔

سوال ۶.۳۸: ڈیوٹریم^{۳۸} کے زمینی حال ($n = 1$) میں نہایت مہین منتقلی کی بدولت حنارج نور یہ کا طول موج، سٹئی میسرؤں میں، تلاش کریں۔ ڈیوٹریم در حقیقت ”بھاری“ ہائیڈروجن ہے، جس کے مرکز میں ایک اضافی نیوٹران پایا جاتا ہے؛ پروٹان اور نیوٹران کی بندش سے ڈیوٹریم^{۳۹} پیدا ہوتا ہے، جس کا چکر 1 اور مقناطیسی معیار اثر

$$\mu_d = \frac{g_d e}{2m_d} S_d$$

ہے؛ ڈیوٹریم کا g حبزوضربی 1.71 ہے۔

سوال ۶.۳۹: ایک قلم میں متریبی بارداریہ کے برقی میدان جوہر کی سطحیں توانائی کو مضطرب کرتے ہیں۔ سادہ نمونہ کے طور پر (شکل ۶.۱۵)، فرض کریں ہائیڈروجن جوہر کے گرد نقطی بار کی تین جوڑیاں پائی جاتی ہیں۔ (چونکہ چکر اس سوال سے غیر متعلقہ ہے، لہذا اسے نظر انداز کریں۔)

ا. فرض کریں d_1, r, d_2, r, d_3 اور $r \ll d_3$ ہے۔ دکھائیں:

$$H' = V_0 + 3(\beta_1 x^2 + \beta_2 y^2 + \beta_3 z^2) - (\beta_1 + \beta_2 + \beta_3)r^2,$$

جہاں درج ذیل ہیں۔

$$\beta_i \equiv -\frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i}{d_i^3}, \quad V_0 = 2(\beta_1 d_1^2 + \beta_2 d_2^2 + \beta_3 d_3^2)$$

deuterium^{۳۸}
deuteron^{۳۹}

ب. زمینی حال توانائی کی اول رتبی تصحیح تلاش کریں۔

ج. پہلے ہجبان حالات ($n = 2$) کی توانائی کے اول رتبی تصحیح تلاش کریں۔ درج ذیل صورتوں میں اس چار پڑتا انخطاطی نظم کا بنوا رکھنے سطحوں میں ہوگا؟

۱. کعبہ تشاکل^{۵۰}، $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3$ ؛

۲. چوزاویہ تشاکل^{۵۱}، $\beta_1 = \beta_2 \neq \beta_3$ ؛

۳. قائمہ معینہ^{۵۲} تشاکل کی عمومی صورت (جس میں تینوں مختلف ہوں گے)۔

سوال ۶.۴۰: بعض اوقات ψ_1^1 کو غیر مضطرب تفاعلات موج (مساوات ۶.۱۱) میں پھیلائے بغیر مساوات ۶.۱۰ کو بلا واسطہ حال کرنا ممکن ہوتا ہے۔ اسکی دو خوبصورت مثالیں درج ذیل ہیں۔

۱. ہائیڈروجن کے زمینی حال میں شٹارک اثر۔

۲. یکساں بیرونی برقی میدان E کی صورت میں ہائیڈروجن کے زمینی حال کا اول رتبی تصحیح تلاش کریں (سوال ۶.۳۶؛ شٹارک اثر دیکھیں)۔ اشارہ: حل کا درج ذیل روپ

$$(A + Br + Cr^2)e^{-r/a} \cos \theta$$

استعمال کر کے دیکھیں؛ آپ نے مستقالات A ، B ، اور C کی ایسی قیمتیں تلاش کرنی ہیں جو مساوات ۶.۱۰ کو مطمئن کرتی ہوں۔

۲. زمینی حال توانائی کی دوم رتبی تصحیح مساوات ۶.۱۴ کی مدد سے تعین کریں (جیسا اپنے سوال ۶.۳۶-الف میں دیکھا اول رتبی تصحیح صفر ہوگی)۔ جواب: $-m(3a^2 e E / 2\hbar)^2$ بیرونی

ب. اگر پروٹان کا برقی جفت قطب معیار اثر p ہوتا، تو ہائیڈروجن میں الیکٹران کی مخفی توانائی درج ذیل مقدار سے مضطرب ہوتی۔

$$H' = \frac{ep \cos \theta}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

۱. زمینی حال تفاعل موج کی اول رتبی تصحیح کو مساوات ۶.۱۰ حل کر کے تلاش کریں۔

۲. دکھائیں کہ اس رتبہ تک جو ہر کامل برقی جفت قطب معیار اثر (حیرت کی بات ہے) صفر ہے۔

۳. زمینی حال توانائی کی دوم رتبی تصحیح مساوات ۶.۱۴ سے تعین کریں۔ اول رتبی تصحیح کتنی ہوگی؟

^{۵۰}cubic symmetry
^{۵۱}tetragonal symmetry
^{۵۲}orthorhombic symmetry

باب ۷

تغیری اصول

۷.۱ نظریہ

فرض کریں آپ ایک نظام، جسے ہیمیلٹنی H بیان کرتی ہو، کی زمینی حال توانائی E_{gs} کا حساب کرنا چاہتے ہیں لیکن آپ (غیر تابع وقت) مساوات شروڈنگر حل نہیں کر پاتے۔ اصول تغیرتے آپ کو E_{gs} کی بالائی حد بندی دیتا ہے، اور بعض اوقات آپ کو صرف اسی سے عرض ہوگا، اور عموماً، ہوشیاری سے کام لیتے ہوئے آپ بالکل ٹھیک قیمت کے مترب قیمت حاصل کر سکیں گے۔ آئیں اس کا استعمال دیکھیں: کوئی ایک معمول شدہ تفاعل ψ لیں۔ میں درج ذیل دعویٰ کرتا ہوں:

$$(۷.۱) \quad E_{gs} \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \equiv \langle H \rangle$$

یعنی کسی بھی (مکمل طور پر غلط) حال ψ میں H کی توقعاتی قیمت کی تخمین، زمینی حال توانائی سے زیادہ ہوگی۔ یقیناً، اگر ψ اتفاقیہ جان حالات میں سے ایک ہو، تب $\langle H \rangle$ کی قیمت E_{gs} سے تجاوز کرے گی؛ (جبانے والا) اصل نقطہ یہ ہے کہ کسی بھی تفاعل ψ کے لیے یہ درست ہوگا۔

ثبوت: چونکہ H کے (نامعلوم) امتیازی تفاعلات مکمل سلسلہ دیتے ہیں، لہذا ہم ψ کو ان کا خطی جوڑ:

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad \text{جہاں} \quad \psi = \sum_n c_n \psi_n$$

ہے لکھ سکتے ہیں۔ چونکہ ψ معمول شدہ ہے، لہذا درج ذیل ہوگا

$$1 = \langle \psi | \psi \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m \left| \sum_n c_n \psi_n \right. \right\rangle = \sum_m \sum_n c_m^* c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n |c_n|^2$$

variational principle^۱

^۲ اگر ہیمیلٹنی متغیر حالات کے ساتھ بخیر حالات کا بھی حاصل ہو، تب ہمیں مجموعہ کے ساتھ عمل بھی درکار ہوگا، تاہم باقی دلیل یہی رہی

گی۔

باب ۷. تغیری اصول

(جہاں فرض کیا گیا ہے کہ امتیازی تفاعلات معیاری عمود شدہ ہیں: $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}$)۔ ساتھ ہی درج ذیل ہوگا۔

$$\langle H \rangle = \left\langle \sum_m c_m \psi_m \middle| H \sum_n c_n \psi_n \right\rangle = \sum_m \sum_n c_m^* E_n c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2$$

لیکن تعریف کی رو سے، زمینی حال توانائی کم سے کم امتیازی قیمت ہوگی، لہذا $E_{gs} \leq E_n$ ہوگا، جس کے تحت درج ذیل ہوگا۔

$$\langle H \rangle \geq E_{gs} \sum_n |c_n|^2 = E_{gs}$$

ہم یہی ثابت کرنا چاہتے تھے۔

□

مثال ۷.۱: فرض کریں ہم ایک بُعدی ہارمونی مرتعش:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

کی زمینی حال توانائی جاننا چاہتے ہیں۔ یقیناً، ہم اس کا ٹھیک ٹھیک جواب جانتے ہیں (مساوات ۲.۶): $E_{gs} = (1/2) \hbar \omega$ ؛ جس سے اس ترکیب کو پرکھ جاسکتا ہے۔ ہم گاوسی تفاعل:

$$(۷.۲) \quad \psi(x) = A e^{-bx^2}$$

کو اپنا ”آزمائشی“ تفاعل موج منتخب کرتے ہیں، جہاں b ایک مستقل ہے، اور A کو معمول زنی

$$(۷.۳) \quad 1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2bx^2} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{2b}} \Rightarrow A = \left(\frac{2b}{\pi}\right)^{1/4}$$

تعیین کرتی ہے۔ اب

$$(۷.۴) \quad \langle H \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$$

ہے، جبکہ یہاں

$$(۷.۵) \quad \langle T \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-bx^2} \frac{d^2}{dx^2} (e^{-bx^2}) dx = \frac{\hbar^2 b}{2m}$$

اور

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2bx^2} x^2 dx = \frac{m \omega^2}{8b}$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۷.۶) \quad \langle H \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} + \frac{m \omega^2}{8b}$$

مساوات ۷.۱ کے تحت کسی بھی b کے لئے یہ E_{gs} سے تجاویز کرے گا؛ تخت سے سخت حد بندی کی خاطر ہم $\langle H \rangle$ کی کم سے کم قیمت تلاش کرتے ہیں:

$$\frac{d}{db} \langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{m \omega^2}{8b^2} = 0 \Rightarrow b = \frac{m \omega}{2\hbar}$$

اس کو واپس $\langle H \rangle$ میں پر کرتے ہوئے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$(۷.۷) \quad \langle H \rangle_{\text{مستقر}} = \frac{1}{2} \hbar \omega$$

یہاں ہم بالکل ٹھیک زمینی حال توانائی حاصل کر پائے ہیں، جو حیرانی کی بات نہیں، چونکہ میں نے (انتفاض) ایسا آزمائشی تقاضا منتخب کیا جس کا روپ ٹھیک اصل زمینی حال (مساوات ۲.۵۹) کی طرح ہے۔ تاہم، گاوسی کے ساتھ کام کرنا انتہائی آسان ثابت ہوتا ہے، لہذا یہ ایک مقبول آزمائشی تقاضا عمل ہے، اور وہاں بھی استعمال کیا جاتا ہے جہاں اصل زمینی حال کے ساتھ اس کی کوئی مشابہت نہ ہو۔ □

مثال ۷.۲: فرض کرے ہم ڈیلٹا تقاضا مخفیہ:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \alpha \delta(x)$$

کی زمینی حال توانائی جاننا چاہتے ہیں۔ ہمیں ٹھیک جواب (مساوات ۲.۱۲۹): $E_{gs} = -m\alpha^2/2\hbar^2$ یہاں بھی معلوم ہے۔ پہلے کی طرح، ہم گاوسی آزمائشی تقاضا عمل (مساوات ۷.۲) کا انتخاب کرتے ہیں۔ ہم معمول زنی کر چکے ہیں، اور $\langle T \rangle$ کا حساب کر چکے ہیں؛ ہمیں صرف درج ذیل درکار ہے۔

$$\langle V \rangle = -\alpha |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2bx^2} \delta(x) dx = -\alpha \sqrt{\frac{2b}{\pi}}$$

ظاہر ہے

$$(۷.۸) \quad \langle H \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2m} - \alpha \sqrt{\frac{2b}{\pi}}$$

اور ہم جانتے ہیں کہ یہ تمام b کے لیے E_{gs} سے تجاوز کرے گا۔ اس کی کم سے کم قیمت تلاش کرتے ہیں

$$\frac{d}{db} \langle H \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} - \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi b}} = 0 \Rightarrow b = \frac{2m^2 \alpha^2}{\pi \hbar^4}$$

لہذا

$$(۷.۹) \quad \langle H \rangle_{\text{کمتر}} = -\frac{m\alpha^2}{\pi \hbar^2}$$

□

ہوگا، جو یقیناً E_{gs} سے معمولی زیادہ ہے (چونکہ $\pi > 2$ ہے)۔

میں نے کہا آپ کسی بھی (معمول شدہ) آزمائشی تفعل ψ کا انتخاب کر سکتے ہیں، جو ایک لحاظ سے درست ہے۔ البتہ، غیر استمراری تفعلات کے دہرائے تفرق (جو $\langle T \rangle$ کی قیمت حاصل کرنے کے لیے درکار ہوگا) کو معنی خیز مطلب مختص کرنے کے لیے انوکھے چال چلتا ہوگا۔ ہاں، اگر آپ محتاط رہیں تو، استمراری تفعلات جن میں بل پائے جاتے ہوں کا استعمال نہ بننا آسان ہے۔ اگلی مثال میں ان سے نمٹنا دکھایا گیا ہے۔^۳

مثال ۷.۳: آزمائشی ”سکونی“ تفعل موج (شکل ۷.۱):

$$(۷.۱۰) \quad \psi(x) = \begin{cases} Ax & 0 \leq x \leq a/2 \\ A(a-x) & a/2 \leq x \leq a \\ 0 & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

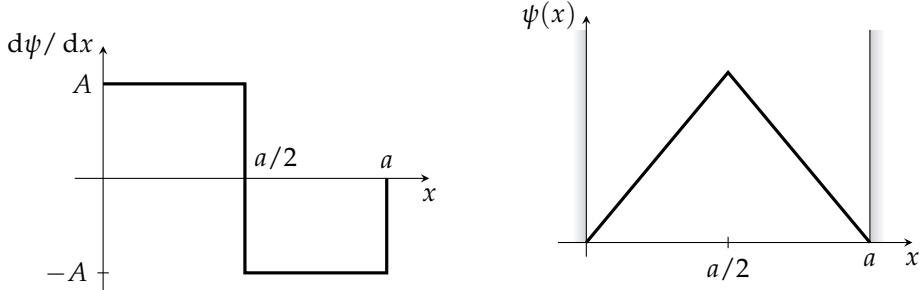
استعمال کرتے ہوئے ایک بُعدی لامتناہی چوکور کنویں کی زمینی حال توانائی کی بالائی حد بندی تلاش کریں، جہاں A معمولی زنی سے تعین کیا جائے گا۔

$$(۷.۱۱) \quad 1 = |A|^2 \left[\int_0^{a/2} x^2 dx + \int_{a/2}^a (a-x)^2 dx \right] = |A|^2 \frac{a^3}{12} \Rightarrow A = \frac{2}{a} \sqrt{\frac{3}{a}}$$

جیسا کہ شکل ۷.۲ میں دکھایا گیا ہے یہاں درج ذیل ہوگا۔

$$\frac{d\psi}{dx} = \begin{cases} A & 0 < x < a/2 \\ -A & a/2 < x < a \\ 0 & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

^۳ ایسا تفعل (مثلاً گاوسی) جو کنویں سے باہر سرکنا ہوا استعمال کرنا بے مقصد ہے، چونکہ آپ $\langle V \rangle$ حاصل کرتے ہیں اور مساوات ۷.۱۱ کچھ نہیں بتاتی۔



شکل ۱.۷: لامستناہی چوکور کنواں کے لئے آزمائشی ٹکونی
تف عمل موج (مساوات ۷.۱۰)۔

سیدھی تف عمل کا تفرق ایک ڈیلٹا تف عمل ہے (سوال ۲.۲۴-ب دیکھیں):

$$(۷.۱۲) \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = A\delta(x) - 2A\delta(x - a/2) + A\delta(x - a)$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۷.۱۳) \quad \begin{aligned} \langle H \rangle &= -\frac{\hbar^2 A}{2m} \int [\delta(x) - 2\delta(x - a/2) + \delta(x - a)] \psi(x) dx \\ &= -\frac{\hbar^2 A}{2m} [\psi(0) - 2\psi(a/2) + \psi(a)] = \frac{\hbar^2 A^2 a}{2m} = \frac{12\hbar^2}{2ma^2} \end{aligned}$$

ٹھیک زمینی حال توانائی $E_{gs} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ (مساوات ۲.۲۷) ہے، لہذا یہ مسئلہ کارآمد ہے ($12 > \pi^2$)۔ □

اصول تغیریت انتہائی طاقتور اور استعمال کے نقطہ نظر سے شرمناک حد تک آسان ہے۔ کسی پیچیدہ سالہ کی زمینی حال توانائی جاننے کے لئے ماہر کیمیا متعدد مقدار معلوم والا آزمائشی تف عمل موج منتخب کر کے ان مقدار معلوم کی قیمتیں تبدیل کرتے ہوئے $\langle H \rangle$ کی سب سے کم ممکن قیمت تلاش کرتا ہے۔ اصل تف عمل موج کے ساتھ ψ کی کوئی مشابہت نہ ہونے کی صورت میں بھی آپ کو E_{gs} کی حیرت کن حد تک درست قیمت حاصل ہوگی۔ ظاہر ہے، اگر آپ ψ کو اصل تف عمل کے جتنا زیادہ متعرب منتخب کر پائیں، اتنا بہتر ہوگا۔ اس ترکیب کے ساتھ صرف ایک مسئلہ ہے: آپ کبھی بھی نہیں جان سکتے کہ آپ ہدف کے کتنے متعرب ہیں؛ آپ صرف بالائی حدودی جان پاتے ہو۔^۴ مزید، اس روپ میں یہ ترکیب صرف زمینی حال کے لیے کارآمد ہے (البتہ سوال ۷.۴ دیکھیں)۔

^۴ عملاً یہ بہت بڑا مسئلہ نہیں اور بعض اوقات درستگی کا اندازہ لگایا جاسکتا ہے۔ زمینی حال ہیلم کوئی یا معنی ہندسوں تک اس طرح حل کیا گیا ہے۔

سوال ۷.۱: درجہ ذیل مخفیہ کی زمینی حال توانائی جاننے کے لئے گاوسی آزمائشی تفاعل (مساوات ۷.۲) کی سب سے کم بالائی حد بندی تلاش کریں۔

$$V(x) = \alpha |x| \quad ; \quad \text{خطی مخفیہ}$$

$$V(x) = \alpha x^4 \quad \text{چو طاق ت مخفیہ}$$

سوال ۷.۲: ایک بُعدی ہارمونی سر تفاعل کے E_{gs} کی بہترین حد بندی درج ذیل روپ کا آزمائشی تفاعل عمل موج

$$\psi(x) = \frac{A}{x^2 + b^2}$$

استعمال کر کے تلاش کریں، جہاں A معمول زنی سے تعین ہوگا اور b قابل تبدیل مقدار معلوم ہے۔

سوال ۷.۳: ڈیلٹا تفاعل مخفیہ $V(x) = -\alpha \delta(x)$ کی E_{gs} کی بہترین بالائی حد بندی کو ٹکونی آزمائشی تفاعل عمل (مساوات ۷.۱۰، لیکن جس کا وسط مبداء پر ہو) استعمال کر کے تلاش کریں۔ یہاں a قابل تبدیل مقدار معلوم ہے۔

سوال ۷.۴:

۱. اصول تغیریت کا درجہ ذیل ضمنی نتیجہ ثابت کریں: اگر $\langle \psi | \psi_{gs} \rangle = 0$ ہو، تب $\langle H \rangle \geq E_{fe}$ ہوگا، جہاں پہلے ہیجان حال کی توانائی E_{fe} ہے۔

یوں، اگر ہم کسی طرح ایسا آزمائشی تفاعل تلاش کر سکیں جو اصل زمینی حال کو عمودی ہو، تب ہم پہلے ہیجان حال کی بالائی حد بندی جان سکیں گے۔ چونکہ ہم زمینی حال تفاعل ψ_{gs} (غالباً) نہیں جانتے، لہذا عموماً یہ کہنا مشکل ہوگا کہ ψ ہمارے آزمائشی تفاعل ψ_{gs} کو عمودی ہوگا۔ ہاں، اگر x کے لحاظ سے مخفیہ $V(x)$ جفت تفاعل ہو، تب زمینی حال بھی جفت ہوگا، اور یوں کوئی بھی طاق آزمائشی تفاعل خود بخود اس ضمنی نتیجہ کے شرط پر پورا اترے گا۔

ب. آزمائشی تفاعل:

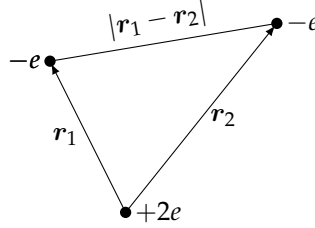
$$\psi(x) = A x e^{-bx^2}$$

استعمال کرتے ہوئے ایک بُعدی ہارمونی سر تفاعل کے پہلے ہیجان حال کی بہترین بالائی حد بندی تلاش کریں۔

سوال ۷.۵:

۱. اصول تغیریت استعمال کر کے ثابت کریں کہ رتبہ اول غیر انخطاطی نظریہ اضطراب ہر صورت زمینی حال توانائی کی قیمت سے تجاوز کرے گا (یا کم از کم کبھی بھی اس سے کم قیمت نہیں دے گا)۔

ب. آپ حبز و الف جاننے ہوئے توقع کریں گے کہ زمینی حال کی دو تہی تصحیح لازماً منفی ہوگی۔ مساوات ۶.۱۵ کا معائنہ کرتے ہوئے تصدیق کریں کہ ایسا ہی ہوگا۔



شکل ۷.۳: ہیلیم جوہر۔

۷.۲ ہیلیم کا زمینی حال

ہیلیم جوہر (شکل ۷.۳) کے مرکزہ میں دو پروٹان (اور دو نیوٹران جو ہمارے مقصد سے غیر متعلقہ ہیں) پائے جاتے ہیں اور مرکزہ کے گرد مدار میں دو الیکٹران حرکت کرتے ہیں۔ (مہین ساخت اور باریک تصحیح نظر انداز کرتے ہوئے) اس نظام کی ہیملٹنی درج ذیل ہوگی۔

$$(۷.۱۴) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{|r_1 - r_2|}\right)$$

ہم نے زمینی حال توانائی E_{gs} کا حساب کرنا ہے۔ طبعی طور پر یہ دونوں الیکٹران اکھاڑنے کے لیے درکار توانائی کو ظاہر کرتی ہے۔ (E_{gs} جاننے ہوئے، ہم ایک الیکٹران اکھاڑنے کے لیے درکار ”بارداریتی توانائی“ معلوم کر سکتے ہیں (سوال ۷.۶ دیکھیں)۔ تجربہ گاہ میں ہیلیم کی زمینی حل توانائی کی قیمت کی پیمائش انتہائی زیادہ درستگی تک کی گئی ہے۔

$$(۷.۱۵) \quad E_{gs} = -78.975 \text{ eV} \quad (\text{تجرباتی})$$

ہم نظریہ سے اس عدد کو حاصل کرنا چاہیں گے۔

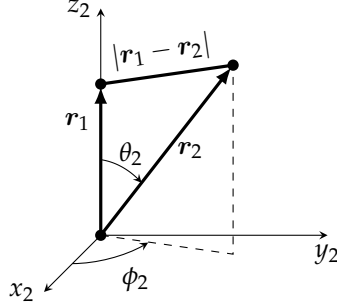
یہ تجسس کی بات ہے کہ ابھی تک اتنے سادہ اور اہم مسئلے کا ٹھیک حل نہیں ڈھونڈا جا سکا ہے۔^۵ الیکٹران دفع:

$$(۷.۱۶) \quad V_{ee} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_1 - r_2|}$$

مسئلہ پیدا کرتا ہے۔ اس جزو کو نظر انداز کرنے سے H دو ہائیڈروجن ہیملٹنیوں میں علیحدہ علیحدہ ہوتا ہے (تاہم مرکزہ بار e کی بجائے $2e$ ہوگا)؛ ٹھیک ٹھیک حل ہائیڈروجنی تفاعلات موج کا حاصل ضرب:

$$(۷.۱۷) \quad \psi_0(r_1, r_2) \equiv \psi_{100}(r_1)\psi_{100}(r_2) = \frac{8}{\pi a^3} e^{-2(r_1+r_2)/a}$$

^۵ہیلیم کے کئی خرد و خال والے، ایسے تین جسی مسئلے پائے جاتے ہیں جن کا ٹھیک ٹھیک حل حاصل کیا جا سکتا ہے، تاہم ان میں صحیح غیر کولب ہیں (سوال ۷.۱۷ دیکھیں)۔



شکل ۷.۴: محدود کا انتخاب برائے r_2 مکمل (مساوات 20.7)۔

ہوگا، اور توانائی $8E_1 = -109 \text{ eV}$ الیکٹران وولٹ (مساوات ۵.۳۱) ہوگی۔^۱ یہ -79 eV سے بہت مختلف ہے، تاہم یہ ابھی ابتدائی ہے۔

ہم ψ_0 کو آزمائشی تفاع عمل موج لے کر E_{gs} کی بہتر تخمین اصول تغیریت سے حاصل کرتے ہیں۔ چونکہ یہ ہیملٹنی کے زیادہ تر حصے کا امتیازی تفاع عمل ہے:

$$H\psi_0 = (8E_1 + V_{ee})\psi_0 \quad (۷.۱۸)$$

لہذا یہ بہت بہتر انتخاب ہے۔ یوں درج ذیل ہوگا

$$\langle H \rangle = 8E_1 + \langle V_{ee} \rangle \quad (۷.۱۹)$$

جہاں درج ذیل ہے۔^۲

$$\langle V_{ee} \rangle = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{8}{\pi a^3} \right)^2 \int \frac{e^{-4(r_1+r_2)/a}}{|r_1 - r_2|} d^3r_1 d^3r_2 \quad (۷.۲۰)$$

میں r_2 مکمل پہلے حل کرتا ہوں؛ اس مقصد کے لئے r_1 مقررہ ہوگا، اور ہم r_2 محدودی نظام کو یوں رکھتے ہیں کہ اس کا قطبی محور r_1 پر پایا جاتا ہو (شکل ۷.۴)۔ وٹانوں کو سائن کے تحت

$$|r_1 - r_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2 \cos \theta_2} \quad (۷.۲۱)$$

^۱ یہاں a سادہ داس یو ہے اور n ویں یوہر توانائی $E_n = -13.6/n^2 \text{ eV}$ ہے؛ یاد رہے کہ ایک مرکزہ جس کا جوہری عدد Z ہو، کے لئے $E_n \rightarrow Z^2 E_n$ اور $a \rightarrow a/Z$ ہوں گے (سوال ۴.۱۶)۔ مساوات ۷.۱۷ کے ساتھ وابستہ چپکری تشکیل غیر تاشکی (یک تاشکی) ہوگی۔
^۲ آپ $V_{ee} = H'$ لیتے ہوئے مساوات ۷.۲۰ کا مفہوم اول رتبہ نظریہ اضطراب لے سکتے ہیں۔ میں اس کو اس ترکیب کا غلط استعمال سمجھتا ہوں، چونکہ یہاں اضطراب اور غیر مضطرب ہیملٹنی ہم پلہ ہیں۔ اس وجہ سے میں اس کو تغیریتی حساب تصور کرتا ہوں، جس میں ہم E_{gs} کی بالائی حدود کی تلاش کرتے ہیں۔

ابھذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۷.۲۲) \quad I_2 \equiv \int \frac{e^{-4r^2/a}}{|r_1 - r_2|} d^3 r_2 = \int \frac{e^{-4r^2/a}}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_2}} r_2^2 \sin \theta_2 dr_2 d\theta_2 d\phi_2$$

متغیر ϕ_2 کا (نسایت آسان) مکمل 2π دے گا؛ متغیر θ_2 کا مکمل درج ذیل ہوگا۔

$$\begin{aligned} \int_0^\pi \frac{\sin \theta_2}{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_2}} d\theta_2 &= \left. \frac{\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos \theta_2}}{r_1 r_2} \right|_0^\pi \\ &= \frac{1}{r_1 r_2} \left(\sqrt{r_1^2 + r_2^2 + 2r_1 r_2} - \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2} \right) \\ (۷.۲۳) \quad &= \frac{1}{r_1 r_2} [(r_1 + r_2) - |r_1 - r_2|] = \begin{cases} 2/r_1 & r_2 < r_1 \\ 2/r_2 & r_2 > r_1 \end{cases} \end{aligned}$$

یوں درج ذیل ہوگا۔

$$\begin{aligned} I_2 &= 4\pi \left(\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} e^{-4r_2/a} r_2^2 dr_2 + \int_{r_1}^\infty e^{-4r_2/a} r_2 dr_2 \right) \\ (۷.۲۴) \quad &= \frac{\pi a^3}{8r_1} \left[1 - \left(1 + \frac{2r_1}{a} \right) e^{-4r_1/a} \right] \end{aligned}$$

اس طرح $\langle V_{ee} \rangle$ درج ذیل ہوگا۔

$$\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left(\frac{8}{\pi a^3} \right) \int \left[1 - \left(1 + \frac{2r_1}{a} \right) e^{-4r_1/a} \right] e^{-4r_1/a} r_1 \sin \theta_1 dr_1 d\theta_1 d\phi_1$$

زاویائی کمالات 4π دیں گے، جبکہ r_1 مکمل درج ذیل ہوگا۔

$$\int_0^\infty \left[r e^{-4r/a} - \left(r + \frac{2r^2}{a} \right) e^{-8r/a} \right] dr = \frac{5a^2}{128}$$

یوں، آخر کار

$$(۷.۲۵) \quad \langle V_{ee} \rangle = \frac{5}{4a} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) = -\frac{5}{2} E_1 = 34 \text{ eV}$$

جس کی بنا پر درج ذیل ہوگا۔

$$(۷.۲۶) \quad \langle H \rangle = -109 \text{ eV} + 34 \text{ eV} = -75 \text{ eV}$$

یہ جواب زیادہ برا نہیں ہے (یاد رہے، تجرباتی قیمت 79 eV ہے)۔ تاہم ہم اس سے بہتر جواب حاصل کر سکتے ہیں۔

ہم ψ_0 (جو دو الیکٹرانوں کو یوں تصور کرتا ہے جیسے یہ ایک دوسرے پر بالکل اثر انداز نہیں ہوتے) سے بہتر زیادہ حقیقت پسند آزمائشی تفاعل سوچ سکتے ہیں۔ ایک الیکٹران کے دوسرے الیکٹران پر اثر کو مکمل نظر انداز کرنے کی بجائے، ہم ایک الیکٹران کو اوسط منفی بار کا بادل تصور کرتے ہیں، جو مرکزہ کو جزوی طور پر سپر (پناہ) کرتا ہے، جس کی بنا پر دوسرے الیکٹران کو موثر مرکزہ بار (Z) کی قیمت 2 سے کچھ کم نظر آتی ہے۔ یہ تصور ہمیں آمادہ کرتی ہے کہ ہم درج ذیل روپ کا آزمائشی تفاعل استعمال کریں۔

$$\psi_1(r_1, r_2) = \frac{Z^3}{\pi a^3} e^{-Z(r_1+r_2)/a} \quad (۷.۲۷)$$

ہم Z کو تغیری متغیر معلوم تصور کر کے اس کی وہ قیمت منتخب کرتے ہیں جو H کی قیمت کم تر بناتی ہو (دھیان رہے کہ تغیریت ترکیب میں کبھی بھی ہیملٹنی تبدیل نہیں کی جاتی؛ ہیلمی کی ہیملٹنی مساوات ۷.۱۳ دیتی ہے اور دیتی رہے گی۔ البتہ ہیملٹنی کی تخمینی قیمت کے بارے میں سوچ کر بہتر آزمائشی تفاعل موج حاصل کرنا چاہنا ہے)۔

یہ تفاعل موج اس ”غیر مضطرب“ ہیملٹنی (الیکٹران دفع نظر انداز کیا گیا ہے) کا امتیازی حال ہے جس کے کولمب اجزاء میں 2 کی بجائے Z ہے۔ اس کو ذہن میں رکھتے ہوئے، ہم H (مساوات ۷.۱۳) کو درج ذیل روپ میں لکھتے ہیں۔

$$\begin{aligned} (۷.۲۸) \quad H = & -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2} \right) \\ & + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{(Z-2)}{r_1} + \frac{(Z-2)}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|} \right) \end{aligned}$$

نہاں ہے کہ H کی تحقیقاتی قیمت درج ذیل ہوگی۔

$$(۷.۲۹) \quad \langle H \rangle = 2Z^2 E_1 + 2(Z-2) \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + \langle V_{ee} \rangle$$

یہاں $\langle 1/r \rangle$ سے مراد (یک ذروی) ہائیڈروجنی زمینی حال ψ_{100} (جس میں مرکزہ بار Z ہو) میں $1/r$ کی توقعاتی قیمت ہے؛ مساوات ۶.۵۵ کے تحت درج ذیل ہوگا۔

$$(۷.۳۰) \quad \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{a}$$

یہاں بھی V_{ee} کی توقعاتی قیمت وہی ہوگی جو پہلے تھی (مساوات ۷.۲۵)، لیکن اب ہم $Z = 2$ کی بجائے اختیاری Z استعمال کرنا چاہتے ہیں؛ لہذا ہم a کو $2/Z$ سے ضرب دیتے ہیں۔

$$(۷.۳۱) \quad \langle V_{ee} \rangle = \frac{5Z}{8a} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) = -\frac{5Z}{4} E_1$$

ان تمام کو اکٹھے کر کے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$(۷.۳۲) \quad \langle H \rangle = [2Z^2 - 4Z(Z - 2) - (5/4)Z] E_1 = [-2Z^2 + (27/4)Z] E_1$$

اصول تغیریت کے تحت Z کی کسی بھی قیمت کے لیے یہ مقدار E_{gs} سے تجاوز کرے گی۔ بالائی حد بندی کی سب سے کم قیمت تب پائی جائے گی جب $\langle H \rangle$ کی قیمت کم تر ہو:

$$\frac{d}{dZ} \langle H \rangle = [-4Z + (27/4)] E_1 = 0$$

جس سے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$(۷.۳۳) \quad Z = \frac{27}{16} = 1.69$$

یہ ایک معقول منتخب نظر آتا ہے؛ جو کہتا ہے دوسرا الیکٹران مرکزہ کو سپر کرتا ہے جس کی بنا پر مرکزہ کا موثر بار 2 کی بجائے 1.69 نظر آتا ہے۔ اس قیمت کو Z لیتے ہوئے درج ذیل ہوگا۔

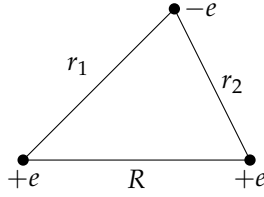
$$(۷.۳۴) \quad \langle H \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} \right)^6 E_1 = -77.5 \text{ eV}$$

مثال تبدیل مقدار معلوم کی تعداد بڑھا کر، زیادہ پیچیدہ آزمائشی تفاعل موج استعمال کرتے ہوئے، ہیلیم کی زمینی حال توانائی کو اس طرح انتہائی زیادہ درستگی تک حاصل کیا گیا ہے۔ ہم اصل جواب کے دو فی صد سے بھی کم قریب ہیں، لہذا اس کو یابی پر چھوڑتے ہیں۔^۸

سوال ۷.۶: ہیلیم کی زمینی حال توانائی $E_{gs} = -79 \text{ eV}$ لیتے ہوئے باردار پتی توانائی (صرف ایک الیکٹران اکھاڑنے کے لیے درکار توانائی) کا حساب کریں۔ اشارہ: پہلے ہیلیم باردار He^+ ، جس کے مرکزہ کے گرد صرف ایک الیکٹران مدار میں حرکت کرتا ہے، کی زمینی حال توانائی تلاش کریں؛ اس کے بعد دونوں توانائیوں کا فرق لیں۔

سوال ۷.۷: اس حصے میں متحمل ترکیبات کا اطلاق H^- اور Li^+ باردار یہ پر کریں (جن میں ہیلیم کی طرح دو الیکٹران پائے جاتے ہیں، لیکن مرکزہ کی بار بالستریب $Z = 1$ اور $Z = 3$ ہیں)۔ ایک ایک باردار یہ کا موثر (جزوی سپر شدہ) مرکزہ کی بار تلاش کر کے، E_{gs} کی بہترین بالائی حد بندی تعین کریں۔ تبصرہ: باردار یہ H_- کی صورت میں آپ دیکھیں گے کہ $\langle H \rangle > -13.6 \text{ eV}$ ہے، جس کے تحت مفید حال نہیں ہوگا، چونکہ توانائی کے نقطہ نظر سے زیادہ بہتر صورتحال یہ ہوگی کہ ایک الیکٹران نکل کر اڑ جائے اور پیچھے معادل ہائیڈروجن جو ہر چھوڑے۔ یہ حیرت کی بات نہیں چونکہ ہیلیم کے لحاظ سے مرکزہ کے ساتھ الیکٹران کی قوت کشش کم ہے، اور الیکٹران کی باہم قوت دفع جو ہر کو توڑنا چاہتی ہے۔ البتہ، حقیقت میں یہ سب غلط ہے۔ زیادہ نفیس آزمائشی تفاعل (سوال ۷.۲۰ دیکھیں) استعمال کرتے ہوئے دکھایا جاسکتا ہے کہ $E_{gs} < -13.6 \text{ eV}$ ہے، لہذا مفید

^۸ ایسا آزمائشی تفاعل، جو زمینی حال کو عموماً ہی ہو، منتخب کر کے ہیلیم کا پہلا ایجنان حال اسی طرح حاصل کیا جاسکتا ہے۔



شکل ۷.۵: ہائیڈروجن سالمہ بارداریہ، H_2^+

حال موجود ہو گا۔ تاہم، یہ بمشکل مقید ہے، اور ہیجان حال نہیں پائے جاتے، اور یوں H^- کا کوئی غیر مسلسل طیف نہیں پایا جاتا (تمام استمراریہ سے اور استمراریہ میں ہوں گے)۔ نتیجتاً، تجربہ گاہ میں اس کا مطالعہ کرنا دشوار ہوتا ہے، اگرچہ سورج کی سطح پر یہ وافر مقدار میں پائے جاتے ہیں۔

۷.۳ ہائیڈروجن سالمہ بارداریہ

اصول تغیریت کا ایک اور کلاسیکی استعمال ہائیڈروجن سالمہ بارداریہ، H_2^+ ، جو دو پروٹان کے کولمب میدان میں ایک الیکٹران پر مشتمل ہے، کا معائنہ ہے (شکل ۷.۵)۔ میں فی الوقت فرض کرتا ہوں کہ دونوں پروٹان کا مقام مقصورہ، اور ان کے بیچ فاصلہ R ہے، اگرچہ اس حساب کا ایک دلچسپ ذیلی نتیجہ R کی اصل قیمت ہوگی۔ ہیملٹنی درجہ ذیل ہے

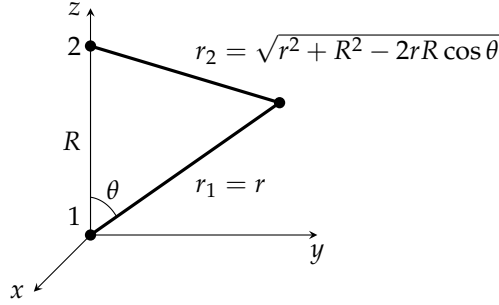
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) \quad (۷.۳۵)$$

جہاں الیکٹران سے متعلقہ پروٹان تک فاصلے r_1 اور r_2 ہیں۔ ہمیشہ کی طرح ہم کوشش کریں گے کہ ایک معقول آزمائشی تفاعل موج منتخب کر کے زمینی حال توانائی کی حد بندی اصول تغیریت سے دریافت کریں۔ (در حقیقت، ہماری دلچسپی یہ جاننے میں ہے کہ آیا اس نظام میں بندھن پیدا ہوگی؛ یعنی کیا ایک معادل ہائیڈروجن جوہر جمع ایک آزاد پروٹان سے اس نظام کی توانائی کم ہوگی۔ اگر ہمارا آزمائشی تفاعل موج دکھائے کہ مقید حال پایا جاتا ہے، اس سے بہتر آزمائشی تفاعل اس بندھ کو صرف زیادہ طاقتور بنا سکتا ہے۔)

آزمائشی تفاعل موج تیار کرنے کی حنا طرہ فرض کریں کہ زمینی حال (مساوات ۴.۸۰)

$$\psi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} e^{-r/a} \quad (۷.۳۶)$$

میں ہائیڈروجن جوہر کے قریب فاصلہ R پر، دوسرا پروٹان ”لامتناہی“ سے لا کر رکھتے ہوئے بارداریہ پیدا کیا جاتا ہے۔ اگر داس بوجہ سے R کافی زیادہ ہو تب الیکٹران کا تفاعل موج غالباً زیادہ تبدیل نہیں ہوگا۔ تاہم ہم دونوں پروٹان کو ایک نظر سے دیکھنا چاہیں گے، لہذا دونوں کے ساتھ الیکٹران کی وابستگی کا احتمال ایک جیسا ہوگا۔ یوں ہم



شکل ۷.۶: مقدار I کے حساب کی خاطر محدود (مساوات ۷.۳۹)۔

آمادہ ہوتے ہیں کہ درج ذیل روپ کا آزمائشی تنفس عمل استعمال کریں۔

$$(۷.۳۷) \quad \psi = A[\psi_0(r_1) + \psi_0(r_2)]$$

(چونکہ ہم سال باقی تنفس عمل موج کو جو ہری مدار چوں کا خطی جوڑ لکھتے ہیں لہذا ماہر کو انسانی کیب اس کو جوہری مدار چوں کے خطی جوڑ ترکیب^۹ کہتے ہیں۔)

پہلا کام آزمائشی تنفس عمل کی معمول زنی ہے۔

$$(۷.۳۸) \quad 1 = \int |\psi|^2 d^3 r = |A|^2 \left[\int |\psi_0(r_1)|^2 d^3 r + \int |\psi_0(r_2)|^2 d^3 r + 2 \int \psi_0(r_1) \psi_0(r_2) d^3 r \right]$$

پہلے دو نکلات 1 ہیں (چونکہ ψ_0 معمول شدہ ہے): تیسرا زیادہ پیچیدہ ہے۔ درج ذیل لیں۔

$$(۷.۳۹) \quad I \equiv \langle \psi_0(r_1) | \psi_0(r_2) \rangle = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-(r_1+r_2)/a} d^3 r$$

ایسا مدی نظام کھڑا کر کے، جس کے مباد پر پروٹان 1 اور z محور پر R فاصلے پر پروٹان 2 ہو (شکل ۷.۶)،

$$(۷.۴۰) \quad r_1 = r \quad \text{اور} \quad r_2 = \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta}$$

ہوں گے لہذا اور جہ ہوگا۔

$$(۷.۴۱) \quad I = \frac{1}{\pi a^3} \int e^{-r/a} e^{-\frac{\sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta}}{a}} r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$$

متغیر ϕ کا (نہایت آسان) مکمل 2π دے گا۔ متغیر θ کا مکمل کرنے کی خاطر درج ذیل لیں۔

$$y \equiv \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta} \Rightarrow d(y^2) = 2y dy = 2rR \sin \theta d\theta$$

تب درج ذیل ہوگا۔

$$\begin{aligned} \int_0^\pi e^{-\frac{\sqrt{r^2 + R^2 - 2rR \cos \theta}}{a}} \sin \theta d\theta &= \frac{1}{rR} \int_{|r-R|}^{r+R} e^{-y/a} y dy \\ &= -\frac{a}{rR} \left[e^{-(r+R)/a} (r+R+a) - e^{-|r-R|/a} (|r-R|+a) \right] \end{aligned}$$

اب مکمل r با آسانی حل ہوگا۔

$$\begin{aligned} I = \frac{2}{a^2 R} \left[-e^{-R/a} \int_0^\infty (r+R+a) e^{-2r/a} r dr + e^{-R/a} \int_0^R (R-r+a) r dr \right. \\ \left. + e^{R/a} \int_R^\infty (r-R+a) e^{-2r/a} r dr \right] \end{aligned}$$

ان عملیات کی قیمتوں کے حساب کے بعد الجبرائی تسہیل سے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$(۷.۴۲) \quad I = e^{-R/a} \left[1 + \left(\frac{R}{a} \right) + \frac{1}{3} \left(\frac{R}{a} \right)^2 \right]$$

ہم I کو ڈھانپائی مکمل کہتے ہیں؛ جو $\psi_0(r_1)$ کے $\psi_0(r_2)$ پر چپڑھنے کی مقدار کی پیشکش ہے (دھیان رہے کہ $R \rightarrow 0$ کی صورت میں یہ 1 کو، اور $R \rightarrow \infty$ کی صورت 0 کو پہنچاتا ہے) ڈھانپائی مکمل I کی صورت میں مستقل معمول زنی (مساوات ۷.۳۸) درج ذیل ہوگا۔

$$(۷.۴۳) \quad |A|^2 = \frac{1}{2(1+I)}$$

اس کے بعد ہمیں آزمائشی حال ψ میں H کی توقعاتی قیمت کا حساب کرنا ہوگا۔ یاد رہے کہ

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right) \psi_0(r_1) = E_1 \psi_0(r_1)$$

ہوگا (جہاں $E_1 = -13.6 \text{ eV}$ جوہری ہائیڈروجن کی زمینی حال توانائی ہے)؛ اور r_1 کی جگہ r_2 کے لئے بھی ایسا ہی ہو گا؛ لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$\begin{aligned} H\psi &= A \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \right] [\psi_0(r_1) + \psi_0(r_2)] \\ &= E_1 \psi - A \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left[\frac{1}{r_2} \psi_0(r_1) + \frac{1}{r_1} \psi_0(r_2) \right] \end{aligned}$$

یوں H کی توقعاتی قیمت درجہ ذیل ہوگی۔

$$(۷.۴۴) \quad \langle H \rangle = E_1 - 2|A|^2 \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \left[\langle \psi_0(r_1) \left| \frac{1}{r_2} \right| \psi_0(r_1) \rangle + \langle \psi_0(r_1) \left| \frac{1}{r_1} \right| \psi_0(r_2) \rangle \right]$$

میں آپ کے لئے باقی دو مقدار جو بلا واسطہ تکمل^{۱۱}:

$$(۷.۴۵) \quad D \equiv a \langle \psi_0(r_1) \left| \frac{1}{r_2} \right| \psi_0(r_1) \rangle$$

اور مبادلہ تکمل^{۱۲}:

$$(۷.۴۶) \quad X \equiv a \langle \psi_0(r_1) \left| \frac{1}{r_1} \right| \psi_0(r_2) \rangle$$

کہلاتے ہیں، حل کرنے کے لئے چھوڑتا ہوں۔ بلا واسطہ تکمل کا نتیجہ:

$$(۷.۴۷) \quad D = \frac{a}{R} - \left(1 + \frac{a}{R} \right) e^{-2R/a}$$

اور مبادلہ تکمل کا نتیجہ درجہ ذیل ہے (سوال ۷.۸ دیکھیں)۔

$$(۷.۴۸) \quad X = \left(1 + \frac{R}{a} \right) e^{-R/a}$$

ان تمام نتائج کو اکٹھے کرتے ہوئے اور (مساوات ۷.۴۰ اور مساوات ۷.۴۲) یاد کرتے ہوئے کہ $E_1 = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2a}$ ہے، ہم درجہ ذیل اخذ کرتے ہیں۔

$$(۷.۴۹) \quad \langle H \rangle = \left[1 + 2 \frac{(D + X)}{(1 + I)} \right] E_1$$

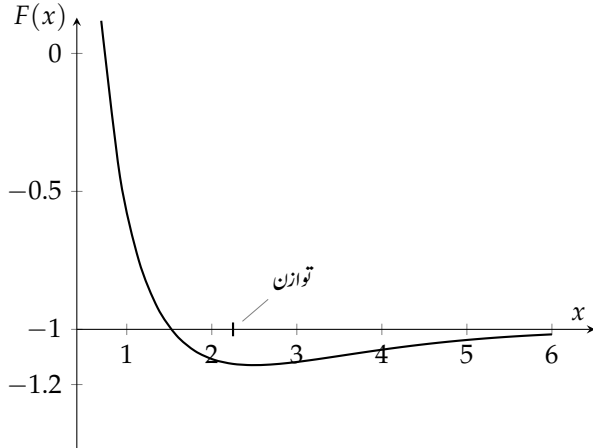
اصول تغیریت کے تحت، زمینی حال توانائی $\langle H \rangle$ سے کم ہوگی۔ یقیناً، یہ صرف الیکٹران کی توانائی ہے؛ اس کے علاوہ پروٹان پروٹان دفع سے وابستہ مخفی توانائی:

$$(۷.۵۰) \quad V_{pp} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R} = -\frac{2a}{R} E_1$$

بھی پائی جاتی ہے۔ یوں نظام کی کل توانائی ($-E_1$ کی اکائیوں میں)، $x \equiv R/a$ کا تناسب لکھتے ہوئے، درجہ ذیل سے کم ہوگی۔

$$(۷.۵۱) \quad F(x) = -1 + \frac{2}{x} \left\{ \frac{(1 - (2/3)x^2)e^{-x} + (1 + x)e^{-2x}}{1 + (1 + x + (1/3)x^2)e^{-x}} \right\}$$

direct integral^{۱۱}
exchange integral^{۱۲}



شکل ۷.۷: تفاعل $F(x)$ (مساوات ۷.۵۱) کی ترسیم مقید حال کی موجودگی دکھاتی ہے (بوبر رداس کی اکائیوں میں x دو پروٹان کے بیچ فاصلہ ہے)۔

اس تفاعل کو شکل ۷.۷ میں ترسیم کیا گیا ہے۔ اس ترسیم کا کچھ حصہ -1 سے نیچے ہے، جہاں معادل جوہر جمع ایک آزاد پروٹان کی توانائی (-13.6 eV) سے کم ہے، لہذا اس نظام میں بندہ پیدا ہوگا۔ یہ ایک شریک گرضتی بندہ ہوگا، جہاں الیکٹران دونوں پروٹان کا برابر شریک ہوگا۔ پروٹان کے بیچ توازنی فاصلہ تقریباً 2.4 رداس بوبر، یعنی 0.13 nm ہے (تجرباتی قیمت 0.106 nm ہے)۔ بندشی توانائی کے حساب سے حاصل قیمت 1.8 eV ، جبکہ پیشانی قیمت 2.8 eV ہے (اصول تغیریت ہمیشہ زمینی حال توانائی سے تجاوز کرتا ہے، لہذا یہ طاقت بندہ کی کم قیمت دے گا؛ بہر حال اس کی فنکشن کریں: یہاں اہم نقطہ یہ ہے کہ بندہ پایا جاتا ہے؛ بہتر تغیری تفاعل اس مخفیہ کو مزید گہرا بنائے گا۔

سوال ۷.۸: بلا واسطہ مکمل D اور مبادلہ مکمل X مساوات ۷.۴۵ اور مساوات ۷.۴۶ کی قیمتیں تلاش کریں۔ اپنے جوابات کا موازنہ مساوات ۷.۴۷ اور مساوات ۷.۴۸ کے ساتھ کریں۔

سوال ۷.۹: فرض کریں ہم نے آزمائشی تفاعل موج (مساوات ۷.۳۷) میں منفی علامت استعمال کی ہوئی۔

$$\psi = A[\psi_0(r_1) - \psi_0(r_2)] \quad (7.52)$$

کوئی نیا مکمل حل کے بغیر (مساوات ۷.۵۱ کا مکمل) $F(x)$ معلوم کر کے ترسیم کریں۔ دکھائیں کہ ایسی صورت میں بندہ پیدا ہونے کا کوئی ثبوت نہیں ملتا۔^۳ (چونکہ اصول تغیریت صرف بالائی حد بندی دیتا ہے، لہذا اس سے یہ ثابت نہیں ہوگا کہ ایسے حال میں بندہ نہیں پایا جائے گا، تاہم اس سے زیادہ امید بھی نہیں کرنی

^۳ بندہ اس صورت پیدا ہوتا ہے جب دو پروٹان کے بیچ رہنے کو الیکٹران ترجیح دیتا ہو، اور ان کے بیچ کر یہ دونوں پروٹان کو اندر جانب کھینچتا ہے۔ لیکن طاق خطی جوڑ (مساوات ۷.۵۲) کا وسط میں عقدہ پایا جاتا ہے، لہذا حیرانی کی بات نہیں کہ یہ تشکیل پروٹان کو ایک دوسرے سے دور کرتی ہے۔

چاہیے۔) تبصرہ: درحقیقت درجب ذیل روپ کے ہر تفاعل

$$\psi = A[\psi_0(r_1) + e^{i\phi}\psi_0(r_2)] \quad (۷.۵۳)$$

کی خاصیت یہ ہے کہ الیکٹران دونوں پروٹان کے ساتھ برابر کا وابستگی رکھتا ہے۔ تاہم، چونکہ باہمی اول بدل $P : r_1 \leftrightarrow r_2$ کی صورت میں ہیملٹنی (مساوات ۷.۳۵) غیر متغیر ہے، لہذا اس کے امتیازی تفاعلات کو یک وقت P کے امتیازی تفاعلات چنا جاسکتا ہے۔ امتیازی قدر $+1$ کے ساتھ مثبت علامت (مساوات ۷.۳۷) اور امتیازی قدر -1 کے ساتھ منفی علامت (مساوات ۷.۵۲) ہوگی۔ زیادہ عمومی صورت (مساوات ۷.۵۳) کے استعمال سے مزید فائدہ نہیں ہوگا؛ آپ چاہیں تو اسے استعمال کر کے دیکھ سکتے ہیں۔

سوال ۷.۱۰: نقطہ توازن پر $F(x)$ کے دوہرا تفرق سے ہائیڈروجن سالمہ باردار یہ (حصہ ۲.۳ دیکھیں) میں دونوں پروٹان کے ارتعاش کی قدرتی تعدد (ω) کی اندازاً قیمت تلاش کی جاسکتی ہے۔ اگر اس مرتعش کی زمینی حال توانائی $(\hbar\omega/2)$ نظام کی بندشی توانائی سے زیادہ ہو، تب نظام بکھر کر ٹوٹ جائے گا۔ دکھائیں کہ حقیقت میں مرتعش توانائی اتنی کم ہے کہ ایسا کبھی بھی نہیں ہوگا، اور ساتھ ہی مقید لرزشی سطحوں کی اندازاً تعدد اور دریافت کریں۔ تبصرہ: آپ تحلیلی طور پر کم سے کم نقطہ، یا اس نقطہ پر دوہرا تفرق حاصل نہیں کر پائیں گے۔ اعدادی طریقہ یا کمپیوٹر کی مدد سے ایسا کریں۔

اضافی سوالات برائے باب ۷

سوال ۷.۱۱:

۱. درج ذیل روپ کا آزمائشی تفاعل موج

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos(\pi x/a) & -a/2 < x < a/2 \\ 0 & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

استعمال کرتے ہوئے ایک بُدی ہارمونی مرتعش کی زمینی حال توانائی کی حد بندی تلاش کریں۔ متغیر a کی ”بہترین“ قیمت کیا ہوگی؟ سمجھ $\langle H \rangle$ کا موازنہ اصل توانائی سے کریں۔ تبصرہ: آزمائشی تفاعل میں $\pm a/2$ پر ایک ”بل“ (غیر استمراری تفرق) پایا جاتا ہے؛ کیا آپ کو اس سے نمٹنا ہوگا، جیسا مجھے مثال ۷.۳ میں کرنا پڑا؟

ب. وقفہ $(-a, a)$ پر $\psi(x) = B \sin(\pi x/a)$ استعمال کرتے ہوئے پہلے ہیجان حال کی حد بندی تلاش کریں۔ اپنے جواب کا اصل جواب سے موازنہ کریں۔

سوال ۷.۱۲:

۱. درج ذیل آزمائشی تفاعل موج

$$\psi(x) = \frac{A}{(x^2 + b^2)^n}$$

باب ۷. تغیری اصول

جہاں n اختیاری مستقل ہے، استعمال کرتے ہوئے سوال ۷.۲ کو عمومیّت دیں۔ جبزوی جواب: مقدار معلوم b کی بہترین قیمت درج ذیل دے گی۔

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left[\frac{n(4n-1)(4n-3)}{2(2n+1)} \right]^{1/2}$$

ب. ہارمونی سرعش کے پہلے ہیجان حال کی بالائی حد بندی کی سب سے کم قیمت درج ذیل آزمائشی تفاعل استعمال کرتے ہوئے معلوم کریں۔

$$\psi(x) = \frac{Bx}{(x^2 + b^2)^n}$$

جبزوی جواب: مقدار معلوم b کی بہترین قیمت درج ذیل دے گی۔

$$b^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left[\frac{n(4n-5)(4n-3)}{2(2n+1)} \right]^{1/2}$$

ج. آپ دیکھیں گے کہ $n \rightarrow \infty$ سے حد بندیاں بالکل ٹھیک تو انائیوں تک پہنچتی ہیں۔ ایسا کیوں ہے؟ اشارہ: آزمائشی تفاعلات موج کو $n=2$ ، $n=3$ اور $n=4$ کے لیے ترسیم کرتے ہوئے ان کا موازنہ اصل تفاعلات موج (مساوات ۱۲.۵۹ اور مساوات ۲.۶۲) کے ساتھ کریں۔ تحلیلی طور پر ایسا کرنے کی خاطر درج ذیل مثال سے آغاز کریں۔

$$e^z = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{z}{n} \right)^n$$

سوال ۷.۱۳: ہائیڈروجن کے زمینی حال کی سب سے کم حد بندی، گاوسی آزمائشی موج تفاعل:

$$\psi(r) = Ae^{-br^2}$$

استعمال کرتے ہوئے تلاش کریں، جہاں A معمول زنی سے تعین ہوگا، جبکہ b متبادل تبدیل مقدار معلوم ہے۔ جواب: -11.5 eV

سوال ۷.۱۴: اگر نوریہ کی کیفیت غیر صفر ($m_\gamma \neq 0$) ہوتی تب مخفیہ کی جگہ یوکاوا مخفیہ:^{۱۴}

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^{-\mu r}}{r} \quad (۷.۵۴)$$

استعمال ہوتا، جہاں $\mu = m_\gamma c / \hbar$ ہے۔ اپنی مرضی کا آزمائشی تفاعل موج استعمال کرتے ہوئے اس مخفیہ کے "ہائیڈروجن" جوہر کی بندی توانائی کی اندازہ قیمت معلوم کریں۔ آپ $1 \ll \mu a$ لیں اور اپنے جواب کو $(\mu a)^2$ رتبہ درستگی تک لکھیں۔

سوال ۱۵: مندرجہ ذیل آپکو ایسا کوانٹائی نظام دیا جاتا ہے جس کا ہیملٹنی H_0 صرف دو امتیازی حالات ψ_a (جس کی توانائی E_a ہے) اور ψ_b (جس کی توانائی E_b ہے) کا حامل ہے۔ یہ حالات عمودی معمول شدہ اور غیر انعطافی ہیں (دونوں توانائیوں میں E_a کو کم تصور کریں)۔ اب ہم اضطراب H' جس کے متعلق ارکان درج ذیل ہیں چالو کرتے ہیں، جہاں h کوئی مخصوص مستقل ہے۔

$$(۷.۵۵) \quad \langle \psi_a | H' | \psi_a \rangle = \langle \psi_b | H' | \psi_b \rangle = 0; \quad \langle \psi_a | H' | \psi_b \rangle = \langle \psi_b | H' | \psi_a \rangle = h$$

- مضطرب ہیملٹنی کی امتیازی امداد کی ٹھیک ٹھیک قیمتیں تلاش کریں۔
- دوم رتبہ نظریہ اضطراب استعمال کرتے ہوئے مضطرب نظام کی توانائیوں کی اندازاً قیمت معلوم کریں۔
- مضطرب نظام کی زمینی حال توانائی کی اندازاً قیمت درج ذیل روپ کا آزمائشی تفاعل، جہاں ϕ متبادل تبدیل مقدار معلوم ہے

$$(۷.۵۶) \quad \psi = (\cos \phi) \psi_a + (\sin \phi) \psi_b$$

- استعمال کر کے اصول تغیریت سے حاصل کریں۔ تبصرہ: خطی جوڑیوں لکھنے سے ψ لازماً معمول شدہ ہوگا۔
- اپنے جوابات کا جزو الف، ب، اور ج کے ساتھ موازنہ کریں۔ یہاں اصول تغیریت اتنا زیادہ درست کیوں ہے؟
- سوال ۱۶: ہم سوال ۱۵ میں تیار کی گئی ترکیب کی مثال کے طور پر، یکساں مقناطیسی میدان $B = B_z \hat{k}$ میں ایک ساکن الیکٹران پر غور کرتے ہیں، جس کی ہیملٹنی (ساوات ۳.۱۵۸) درج ذیل ہوگی۔

$$(۷.۵۷) \quad H_0 = \frac{eB_z}{m} S_z$$

امتیازی چکرکار χ_a اور χ_b اور ان کی مطابقتی توانائیاں E_a اور E_b ساوات ۳.۱۶۱ میں دی گئی ہیں۔ اب ہم x رخ درج ذیل روپ کے یکساں میدان

$$(۷.۵۸) \quad H' = \frac{eB_x}{m} S_x$$

- کا اضطراب چالو کرتے ہیں۔
- اضطراب H' کے متعلق ارکان تلاش کر کے تصدیق کریں کہ ان کی ساخت ساوات ۷.۵۵ کی طرح ہے۔ یہاں h کیا ہوگا؟
- دوم رتبہ نظریہ اضطراب میں نئی زمینی حال توانائی کو سوال ۱۵.۷-ب کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے تلاش کریں۔
- زمینی حال توانائی کی اصول تغیریت حد بندی، سوال ۱۵.۷-ج کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے معلوم کریں۔

سوال ۷.۱۷: اگر چہ ہیلیم کے لیے مساوات شرودنگر کا اصل حل تلاش نہیں کیا جاسکتا، ایسے ”ہیلیم نم“ نظام پائے جاتے ہیں جن کے اصل حل پائے جاتے ہیں۔ اس کی ایک سادہ مثال ”ربڑی ہیلیم“ ہے جس میں کولمب قوتوں کی بجائے متوازن ہلکے کی درج ذیل قوتیں استعمال کی جاتی ہیں۔

$$(۷.۵۹) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(r_1^2 + r_2^2) - \frac{\lambda}{4}m\omega^2|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2$$

۱. دکھائیں کہ \mathbf{r}_2 ، \mathbf{r}_1 کی بجائے متغیرات

$$(۷.۶۰) \quad \mathbf{u} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2), \quad \mathbf{v} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$$

استعمال کرنے سے ہیملٹنی دو علیحدہ علیحدہ تین البادی ہارمونی سرعشتات:

$$(۷.۶۱) \quad H = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_u^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 u^2 \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_v^2 + \frac{1}{2}(1-\lambda)m\omega^2 v^2 \right]$$

میں تقسیم ہوگی۔

ب. اس نظام کی اصل زمینی حال توانائی کیا ہوں گی؟

ج. اصل حل نہ جاننے کی صورت میں ہم ہیملٹنی کی اصل صورت (مساوات ۷.۵۹) پر حصہ ۷.۲ کی ترکیب استعمال کرنا چاہیں گے۔ ایسا (سپر کرنے کو نظر انداز کرتے ہوئے) ہوئے کریں۔ اپنے نتیجے کا اصل جواب کے ساتھ موازنہ کریں۔ جواب: $\langle H \rangle = 3\hbar\omega(1 - \lambda/4)$

سوال ۷.۱۸: ہم نے سوال ۷.۷ میں دیکھا کہ سپر مہیا کرتا ہوا آزمائشی تفاعل (مساوات ۷.۲۷) جو ہیلیم کے لئے عمدہ ثابت ہوا، منفی ہائیڈروجن باردار یہ میں مقید حال کی تصدیق کرنے کے لیے کافی نہیں ہے۔ چند ریشیکھرنے درج ذیل روپ کا آزمائشی تفاعل کیا

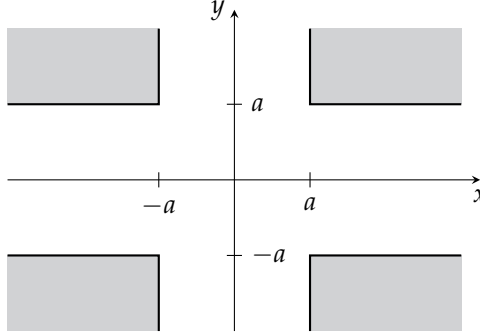
$$(۷.۶۲) \quad \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \equiv A[\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) + \psi_2(r_1)\psi_1(r_2)]$$

جہاں درج ذیل ہیں۔

$$(۷.۶۳) \quad \psi_1(r) \equiv \sqrt{\frac{Z_1^3}{\pi a^3}} e^{-Z_1 r/a}, \quad \psi_2(r) \equiv \sqrt{\frac{Z_2^3}{\pi a^3}} e^{-Z_2 r/a}$$

یعنی، انہوں نے دو مختلف سپر اجزائے ضربی کی اجازت دی، جہاں ایک الیکٹران کو مرکزہ کے قریب اور دوسرے کو مرکزہ سے دور تصور کیا گیا۔ (چونکہ الیکٹران متماثل ذرات ہیں، لہذا افصائی تفاعل موج کو باہمی مبادلہ کے لحاظ سے لازماً تشابہ بنانا ہوگا۔ چپکری حال، جس کا موجودہ حساب میں کوئی کردار نہیں، خلاف تشابہ ہے۔) دکھائیں کہ قابل تبدیل مقدار معلوم Z_1 اور Z_2 کی قیمتوں کو سوچ سمجھ کر منتخب کرنے سے $\langle H \rangle$ کی قیمت -13.6 eV سے کم حاصل کی جاسکتی ہے۔ جواب:

$$\langle H \rangle = \frac{E_1}{x^6 + y^6} \left(-x^8 + 2x^7 + \frac{1}{2}x^6y^2 - \frac{1}{2}x^5y^2 - \frac{1}{8}x^3y^4 + \frac{11}{8}xy^6 - \frac{1}{2}y^8 \right)$$



شکل ۸.۷: صلیبی خطہ برائے سوال 20.7

جہاں $x \equiv Z_1 + Z_2$ اور $y \equiv 2\sqrt{Z_1 Z_2}$ ہیں۔ چندر شیکھر نے $Z_1 = 1.039$ (چونکہ یہ 1 سے بڑا ہے، لہذا اس کو موثر مرکزوی بار تصور نہیں کیا جاسکتا ہے، تاہم اس کے باوجود اس کو آزمائشی تلف عمل موج مقبول کیا جاسکتا ہے) اور $Z_2 = 0.283$ استعمال کیے۔

سوال ۷.۱۹: مرکزوی اختلاط برقرار رکھنے میں بنیادی مسئلہ، دو ذرات (مثلاً دو ڈیوٹیران) کو ایک دوسرے کے اتنے متریب لانا ہے، کہ کولمب قوت دفع پر ان کے بیچ (متریب اثر) کششی مرکزوی قوتیں سبقت لے جائیں۔ ہم ذرات کو شاندار درجہ حرارت تک گرم کر کے، بلا منصوب تصادم کے ذریعے انہیں ایک دوسرے کے متریب زبردستی لاسکتے ہیں۔ دوسری تجویز **میونز علی انگیز**^{۱۵} ہے، جس میں ہم پروٹان کی جگہ ڈیوٹیران اور الیکٹران کی جگہ میون رکھ کر ”ہائیڈروجن سالہ بارداریہ“ تیار کرتے ہیں۔ اس ساخت میں ڈیوٹیران کے بیچ توازنی فاصلے کی پیشگوئی کریں، اور سمجھائیں کہ اس مقصد کی حتمی طرہ الیکٹران سے میون کیوں بہتر ثابت ہوگا۔

سوال ۷.۲۰: **کوانٹائی نقطہ**^{۱۶} فرض کریں ایک ذرے کو شکل ۸.۷ میں دکھائے گئے دو ابعادی صلیبی خطہ پر حرکت کرنے کا پابند بنایا جاتا ہے۔ صلیب کی ”شاخیں“ لامتناہی تک پہنچتی ہیں۔ صلیب کے اندر مخفیہ مضمر جبکہ باہر سایہ دار خطوں میں لامتناہی ہے۔ حیرانی کی بات ہے کہ یہ تفکیک مثبت توانائی مقید حال کی حسی ہے۔^{۱۷}

۱. دکھائیں کہ سب سے کم توانائی جو لامتناہی کی طرف حرکت کر سکتی ہے درج ذیل ہے:

$$E_{\text{دہیر}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$$

اس سے کم توانائی کا حاصل لازماً مقید حال ہوگا۔ اشارہ: ایک شان پر بہت دور (مثلاً $a \gg x$) چپل کر، مساوات شرودنگر کو علیحدگی متغیرات سے حل کریں؛ اگر تلف عمل موج لامتناہی کی جانب حرکت

^{۱۵} muon catalysis
^{۱۶} quantum dots

^{۱۷} کوانٹائی سرنگ زنی کی موجودگی میں، کلاسیکی مقید حال غیر مقید ہو جاتا ہے؛ یہاں اس کے الٹ ہے: کلاسیکی غیر مقید حال، کوانٹائی میکانیکی مقید ہے۔

کرتا ہو، تب تابعیت x کاروپ لازماً $e^{ik_x x}$ ہوگا، جہاں $k_x > 0$ ہے۔

ب. اب اصول تغیریت استعمال کرتے ہوئے دکھائیں کہ زمینی حال کی توانائی، E سے کم ہے۔ درج ذیل آزمائشی تفاعل موج استعمال کریں۔

$$\psi(x, y) = A \begin{cases} (1 - |xy|/a^2)e^{-\alpha} & |x| \leq a \text{ اور } |y| \leq a \\ (1 - |x|/a)e^{-\alpha|y|/a} & |x| \leq a \text{ اور } |y| > a \\ (1 - |y|/a)e^{-\alpha|x|/a} & |x| > a \text{ اور } |y| \leq a \\ 0 & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

اس کی معمول زنی کر کے A کا تعین کریں، اور H کی توقعاتی قیمت کا حساب لگائیں۔ جواب:

$$\langle H \rangle = \frac{3\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{\alpha^2 + 2\alpha + 3}{6 + 11\alpha} \right)$$

اب α کے لحاظ سے کم ترین قیمت تلاش کر کے دکھائیں کہ نتیجہ، E سے کم ہے۔ صلیب کی تشاکل سے پورا فائدہ اٹھائیں؛ آپکو کھلے خطہ کے صرف $1/8$ حصے پر مکمل لینا ہوگا؛ باقی سات نکملات بھی یہی جواب دیں گے۔ البتہ دھیان رہے کہ، اگرچہ آزمائشی تفاعل موج استمراری ہے، اس کے تفروقات غیر استمراری ہیں؛ ”رکاوٹی لکیریں“ $x = 0$ ، $y = 0$ ، $x = \pm a$ اور $y = \pm a$ پر پائی جاتی ہیں جہاں آپکو مشال ۷.۳ کی ترکیب کا سہارا لینا ہوگا۔

باب ۸

ونٹزل وکرامرس وبرلوان تخمین

ونٹزل وکرامرس وبرلوان ترکیب سے غیر تابع وقت مساوات شرودنگر کی یک بُعدی تخمینہ حل حاصل کیے جاسکتے ہیں (اسی بنیادی تصور کا اطلاق کئی دیگر تفسیقی مساوات پر اور بالخصوص تین ابعاد میں مساوات شرودنگر کی رداسی حصے پر کیا جاسکتا ہے)۔ یہ مقید حال توانائیوں اور مخفی رکاوٹ سے گزرنے کی سرنگ زنی شرح کے حساب میں خصوصاً مفید ثابت ہوتا ہے۔

اس کا بنیادی تصور درج ذیل ہے: فرض کریں ایک ذرہ جس کی توانائی E ہو ایک ایسے خطے میں حرکت کرتا ہے جہاں مخفی $V(x)$ مستقل ہو۔ تفاعل موج، $E > V$ کی صورت میں، درج ذیل روپ کا ہوگا۔

$$\psi(x) = Ae^{\pm ikx}, \quad k \equiv \frac{\sqrt{2m(E - V)}}{\hbar}$$

دائیں رخ حرکت کرتے ہوئے ذرہ کے لئے مثبت علامت جبکہ بائیں رخ کے لئے منفی علامت استعمال ہوگا (یقیناً ان دونوں کا خطی جوڑ ہمیں عمومی حل دیگا)۔ یہ تفاعل موج ارتعاشی ہے، جس کا طول موج $(\lambda = 2\pi/k)$ اٹل اور حیطہ (A) غیر تغیری ہے۔ اب فرض کریں $V(x)$ مستقل نہیں، بلکہ λ کے لحاظ سے بہت آہستہ تبدیل ہوتا ہو، لہذا کئی مکمل طول موج پر مخفیہ مستقل تصور کیا جاسکتا ہو۔ ایسی صورت میں ہم کہہ سکتے ہیں کہ ψ عملائن نہ ہوگا، تاہم اس کا طول موج اور حیطہ x کے ساتھ آہستہ آہستہ تبدیل ہوں گے۔ یہی ونٹزل وکرامرس وبرلوان تخمین کے تصور کی بنیاد ہے۔ درحقیقت، یہ x پر دو مختلف طرز کے تابعیت کی بات کرتا ہے: تیز ارتعاشات، اور ان کے طول موج اور حیطہ میں آہستہ آہستہ تبدیلی۔

اسی طرح، $E < V$ (جہاں V مستقل ہے) کی صورت میں ψ قوت نہائی ہوگا۔

$$\psi(x) = Ae^{\pm \kappa x}, \quad \kappa \equiv \frac{\sqrt{2m(V - E)}}{\hbar}$$

WKB (Wentzel, Kramers, Brillouin)¹

اور اگر $V(x)$ مستقل نہ ہو، بلکہ $1/\kappa$ کے لحاظ سے آہستہ آہستہ تبدیل ہوتا ہو، تب حل عملاً قوت نہائی ہوگا، البتہ A اور κ اب x کے تفاعل ہوں گے جو آہستہ آہستہ تبدیل ہوں گے۔

یہ پورا قصہ کلاسیکی نقطہ والپیڈ^۲، جہاں $V \approx E$ ہو، کے مترسی پڑوس میں ناکامی کا شکار ہوگا۔ چونکہ یہاں λ (یا $1/\kappa$) لامتناہی تک بڑھتا ہے، اور ہم یہ نہیں کہہ سکتے کہ $V(x)$ مقابلے میں ”آہستہ آہستہ“ تبدیل ہوتا ہے۔ جیسا ہم دیکھیں گے، اس تخمین میں نقاط واپس سے نمٹنا دشوار ترین ہوگا، اگرچہ آخری نتائج بہت سادہ ہوں گے۔

۸.۱ کلاسیکی خطہ

مساوات شرڈنجر

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

کو درج ذیل روپ میں لکھا جاسکتا ہے

$$(۸.۱) \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi$$

جہاں

$$(۸.۲) \quad p(x) \equiv \sqrt{2m[E - V(x)]}$$

ذرے کے معیار حرکت کا کلاسیکی کلیہ ہے، جس کی کل توانائی E اور محلی توانائی $V(x)$ ہے۔ فی الحال میں منرض کرتا ہوں کہ $E > V(x)$ ہے، لہذا $p(x)$ حقیقی ہوگا؛ اس خطہ کو ہم کلاسیکی خطہ کہتے ہیں چونکہ کلاسیکی طور پر یہ ذرہ سعت x پر رہنے کا پابند ہوگا (شکل ۸.۱)۔ عمومی طور پر، ψ ایک مخلوط تفاعل ہوگا؛ اس کو جیٹ، $A(x)$ ، اور ہیٹ، $\phi(x)$ ، جہاں دونوں حقیقی ہیں، کی صورت میں لکھا جاسکتا ہے۔

$$(۸.۳) \quad \psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)}$$

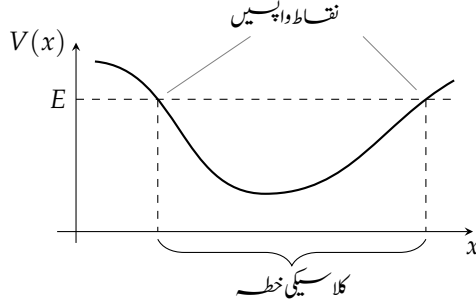
ہم x کے لحاظ سے تفرق کو قوت نہائی میں چھوٹی لکیر ('') سے ظاہر کرتے ہوئے

$$\frac{d\psi}{dx} = (A' + iA\phi')e^{i\phi}$$

اور

$$(۸.۴) \quad \frac{d^2 \psi}{dx^2} = [A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A(\phi')^2]e^{i\phi}$$

turning point^۳



شکل ۸.۱: کلاسیکی طور پر یہ ذرہ اس خط میں مقید ہوگا جہاں $E \geq V(x)$ ہو۔

لکھ سکتے ہیں۔ اس کو مساوات ۸.۱ میں پُر کرتے ہیں۔

$$(۸.۵) \quad A'' + 2iA'\phi' + iA\phi'' - A(\phi')^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2} A$$

دونوں ہاتھ کے حقیقی اجزاء کو ایک دوسرے کے برابر رکھ کر ایک حقیقی مساوات:

$$(۸.۶) \quad A'' - A(\phi')^2 = -\frac{p^2}{\hbar^2} A \Rightarrow A'' = A \left[(\phi')^2 - \frac{p^2}{\hbar^2} \right]$$

جبکہ خیالی اجزاء کو ایک دوسرے کے برابر رکھ کر دوسری حقیقی مساوات:

$$(۸.۷) \quad 2A'\phi' + A\phi'' = 0 \Rightarrow (A^2\phi')' = 0$$

حاصل ہوگی۔

مساوات ۸.۶ اور مساوات ۸.۷ ہر لحاظ سے اصل مساوات شرودنگر کے معادل ہیں۔ ان میں سے دوسری یا آسانی حل ہوتی ہے:

$$(۸.۸) \quad A^2\phi' = C^2 \Rightarrow A = \frac{C}{\sqrt{\phi'}}$$

جہاں C (حقیقی) مستقل ہوگا۔ ان میں سے پہلی (مساوات ۸.۶) عموماً حل نہیں کی جاسکتی ہے، لہذا ہمیں تخمین کی ضرورت پیش آتی ہے: ہم فرض کرتے ہیں کہ جب A بہت آہستہ آہستہ تبدیل ہوتا ہے، لہذا اجزاء A'' متابل نظر انداز ہوگا (بلکہ یہ کہنا زیادہ درست ہوگا کہ، ہم فرض کرتے ہیں کہ $(\phi')^2$ اور p^2/\hbar^2 سے A''/A بہت کم ہے)۔ ایسی صورت میں ہم مساوات ۸.۶ کے بائیں ہاتھ کو نظر انداز کر کے:

$$(\phi')^2 = \frac{p^2}{\hbar^2} \Rightarrow \frac{d\phi}{dx} = \pm \frac{p}{\hbar}$$

حاصل کرتے ہیں، لہذا

$$(۸.۹) \quad \phi(x) = \pm \frac{1}{\hbar} \int p(x) dx$$

ہوگا۔ (میں فی الحال اس کو ایک غیر قطعی عمل لکھتا ہوں؛ کسی بھی مستقل کو C میں ضم کیا جاسکتا ہے، جس کے تحت C مخلوط ہو سکتا ہے۔) اس طرح

$$(۸.۱۰) \quad \psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} \quad (\text{ونڈل وکرامرس و برلوان کلیہ})$$

ہوگا، اور (تخمینی) عمومی حل اس طرح کے دو اجزاء کا خطی جوڑ ہوگا، جہاں ایک جزو میں مثبت اور دوسرے میں منفی علامت استعمال ہوگی۔

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ درج ذیل ہوگا

$$(۸.۱۱) \quad |\psi(x)|^2 \cong \frac{|C|^2}{p(x)}$$

جس کے تحت، نقطہ x پر ذرہ پایا جانے کا احتمال، اس نقطہ پر ذرے کے (کلاسیکی) معیار حرکت (لہذا سمتی رفتار) کا بالکل عکس متناسب ہوگا۔ ہم یہی توقع رکھتے ہیں، چونکہ جس معتم پر ذرے کی رفتار تیز ہو، وہاں اس کے پائے جانے کا احتمال کم ہوگا۔ درحقیقت، بعض اوقات تفسیقی مساوات میں جزو A'' نظر انداز کرنے کی بجائے، اس نیم کلاسیکی مشاہدے سے آغاز کرتے ہوئے ونڈل وکرامرس و برلوان تخمین اخذ کیا جاتا ہے۔ موحصر الذکر طریقہ ریاضیاتی طور پر زیادہ صاف ہے، لیکن اول الذکر بہتر طبعی و جب پیش کرتا ہے۔

مثال ۸.۱: دو امتصالی دیواروں والا مخفیہ کنواں۔ مندرجہ کریں ہمارے پاس ایک لامتناہی چوکور کنواں ہو جس کی تہہ موڑے دار ہو (شکل ۸.۲)۔

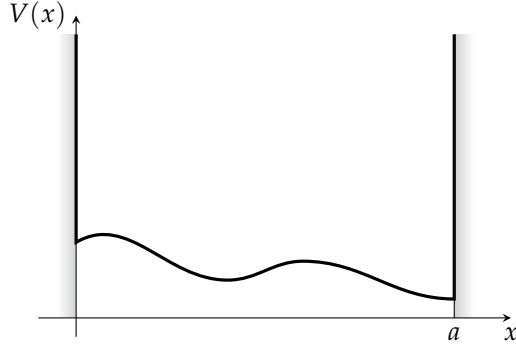
$$(۸.۱۲) \quad V(x) = \begin{cases} \text{کوئی منتخب تناسب} & 0 < x < a \\ \infty, & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

کنویں کے اندر (ہر جگہ $E > V(x)$ مندرجہ کرتے ہوئے)

$$\psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{p(x)}} [C_+ e^{i\phi(x)} + C_- e^{-i\phi(x)}]$$

ہوگا، جس کو بہتر انداز میں

$$(۸.۱۳) \quad \psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{p(x)}} [C_1 \sin \phi(x) + C_2 \cos \phi(x)]$$



شکل ۸.۲: ایسا لامستثنائی چوکور کنواں جس کی تہہ موڑے دار ہے۔

لکھا جاسکتا ہے، جہاں (یہ جانتے ہوئے کہ ہم عمل کی زیریں حد اپنی مرضی سے منتخب کر سکتے ہیں) درج ذیل ہوگا۔

$$(۸.۱۴) \quad \phi(x) = \frac{1}{\hbar} \int_0^x p(x') dx'$$

اب $x = 0$ پر $\psi(x)$ لازماً صفر کو پہنچے گا، لہذا (چونکہ $\psi(0) = 0$ ہے) $C_2 = 0$ ہوگا۔ ساتھ ہی $x = a$ پر بھی $\psi(x)$ صفر کو پہنچے گا، لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۸.۱۵) \quad \phi(a) = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

ماخوذ:

$$(۸.۱۶) \quad \int_0^a p(x) dx = n\pi\hbar$$

یہ کوانٹائی شرط (تخمینی) احبازی توانائیوں کا تعین کرتی ہے۔

مثلاً، اگر کنویں کی تہہ ہموار ہو ($V(x) = 0$)، تب $p(x) = \sqrt{2mE}$ (ایک مستقل) ہوگا، اور مساوات ۸.۱۶ کے تحت $p(x) = n\pi\hbar$ یا

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

ہوگا، جو لامستثنائی چوکور کنویں کی توانائیوں کا پرائما کلیہ ہے (مساوات ۲.۲۷)۔ یہاں ڈنزل وکرامرسس ویرلوان تخمین ہمیں بالکل ٹھیک جواب فراہم کرتا ہے (اصل تفعل موج کا محیط مستقل ہے، لہذا A'' کو نظر انداز کرنے سے کوئی اثر نہیں پڑا)۔ □

سوال ۸.۱: ونزل وکرامرسس وبرلوان تخمین استعمال کرتے ہوئے ایسے لامتناہی چوکور کنویں کی احبازتی توانائیاں (E_n) تلاش کریں جس کی نصف تہ میں V_0 بلند سیز بھی پائی جاتی ہو (شکل ۶.۳)۔

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & 0 < x < a/2 \\ 0, & a/2 < x < a \\ \infty, & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

اپنے جواب کو V_0 اور $E_n^0 \equiv (n\pi\hbar)^2/2ma^2$ (بغیر سیز بھی لامتناہی چوکور کنویں کی n ویں احبازتی توانائی) کی صورت میں لکھیں۔ فرض کریں $E_1^0 > V_0$ ہے، تاہم یہ فرض نہ کریں کہ $E_n \gg V_0$ ہوگا۔ اپنے جواب کا موازنہ مثال ۶.۱ میں رتبہ اول نظریہ اضطراب سے حاصل جواب کے ساتھ کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ بہت چھوٹے V_0 (جہاں نظریہ اضطراب کارآمد ہوگا) یا بہت بڑے n (جہاں ونزل وکرامرسس وبرلوان تخمین کارآمد ہوگی) کی صورت میں جوابات ایک جیسے ہوں گے۔

سوال ۸.۲: ونزل وکرامرسس وبرلوان کلیہ (مساوات ۸.۱۰) کو \hbar طاقتی توسیع سے اخذ کیا جاسکتا ہے۔ آزاد ذرے کے تفاعل موج $\psi = A \exp(\pm ipx/\hbar)$ سے حوصلہ افزا ہو کر کے ہم درج ذیل لکھتے ہیں

$$\psi(x) = e^{if(x)/\hbar}$$

جہاں $f(x)$ کوئی مخلوط تفاعل ہے۔ (دھیان رہے کہ ہم یہاں عمومیّت نہیں کھوتے؛ کسی بھی غیر صفر تفاعل کو اس طرح لکھا جاسکتا ہے۔)

۱. اس کو (مساوات ۸.۱ روپ کی) مساوات شرودنگر میں پُر کر کے درج ذیل دکھائیں۔

$$i\hbar f'' - (f')^2 + p^2 = 0$$

ب. تفاعل $f(x)$ کو \hbar کے طاقتی تسلسل کی صورت:

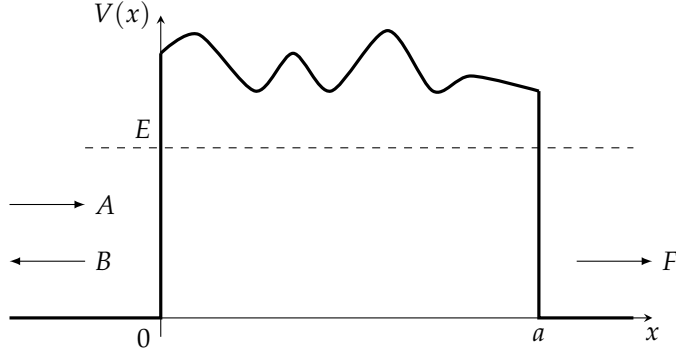
$$f(x) = f_0(x) + \hbar f_1(x) + \hbar^2 f_2(x) + \dots$$

میں لکھ کر \hbar کی ایک جیسی طاقتوں کو اکٹھا کر کے درج ذیل دکھائیں۔

$$(f_0')^2 = p^2, \quad if_0'' = 2f_0'f_1', \quad if_1'' = 2f_0'f_2' + (f_1')^2, \quad \text{وغیرہ}$$

ج. انہیں $f_0(x)$ اور $f_1(x)$ کے لئے حل کر کے دکھائیں کہ \hbar کی اول رتبہ تک آپ مساوات ۸.۱۰ دوبارہ حاصل کرتے ہیں۔

تبصرہ: منفی عدد کے لوگار تھم کی تعریف $\ln(-z) = \ln(z) + in\pi$ ہے، جہاں n طاق عدد صحیح ہوگا۔ اگر آپ اس کلیہ سے ناواقف ہوں، تب دونوں اطراف کو قوت نامیں منتقل کر کے دیکھیں۔



شکل ۸.۳: موڑے دار بالائی سطح کی مستطیلی رکاوٹ سے بکھراؤ۔

۸.۲ سرنگ زنی

اب تک $E > V$ فرض کیا گیا، لہذا $p(x)$ حقیقی تھا۔ ہم غیر کلاسیکی خط ($E < V$) کا مطالعہ کرتے ہیں۔ نتیجہ باآسانی لکھ سکتے ہیں:

$$(۸.۱۷) \quad \psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int |p(x)| dx}$$

یہ پہلے کی طرح ہے (مساوات ۸.۱۰)، تاہم اب $p(x)$ تخیلی ہے۔^۳

ایک مثال کے طور پر، مستطیلی رکاوٹ جس کی بالائی سطح غیر ہموار ہو (شکل ۸.۳) سے بکھراؤ کے مسئلے پر غور کریں۔ رکاوٹ کی بائیں جانب ($x < 0$)

$$(۸.۱۸) \quad \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

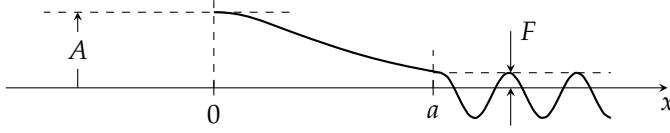
ہوگا، جہاں A آمدی جیٹہ اور B منعکس جیٹہ ہے، اور $k \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ ہے (حصہ ۲.۵ دیکھیں)۔ رکاوٹ کے دائیں جانب ($x > a$)

$$(۸.۱۹) \quad \psi(x) = Fe^{ikx}$$

ہوگا؛ F ترسیلی جیٹہ ہے، اور ترسیلی احتمال درج ذیل ہوگا۔

$$(۸.۲۰) \quad T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

^۳ اس صورت میں تصاعلی موج حقیقی ہوگا، اور مساوات ۸.۶ اور مساوات ۸.۷ کے ممابث ضروری نہیں کہ مساوات ۸.۵ سے حاصل ہوں، اگرچہ یہ اب بھی کافی ہیں۔ اگر آپ اس سے مطمئن نہیں، سوال ۸.۲ میں پیش متبادل حصول کے طریقے پر غور کریں۔



شکل ۸.۴: اونچی اور چوڑی رکاوٹ سے بھراؤ کے تعامل موج کی کیفی ساخت۔

سرنگ زنی خطہ $(0 \leq x \leq a)$ میں ونٹرل وکرامرس ویرلوان تخمین درج ذیل دیگی۔

$$(۸.۲۱) \quad \psi(x) \cong \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'} + \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'}$$

اگر رکاوٹ بہت بلند، یا بہت چوڑا یا دونوں ہو (یعنی جب سرنگ زنی کا احتمال بہت کم ہو)، تب قوت نمائی بڑھتے حبز و کا عددی سر (C) لازماً چھوٹا ہوگا (درحقیقت، لامتناہی چوڑے رکاوٹ کی صورت میں یہ صفر ہوگا)، اور تعامل موج کا نقش شکل ۸.۴ کی طرز سے ہوگا۔ غیر کلاسیکی خطہ پر قوت نمائی میں کل کی، آمدی اور ترسیلی امواج کے حیثوں کے تناسب کو تعین کرتا ہے

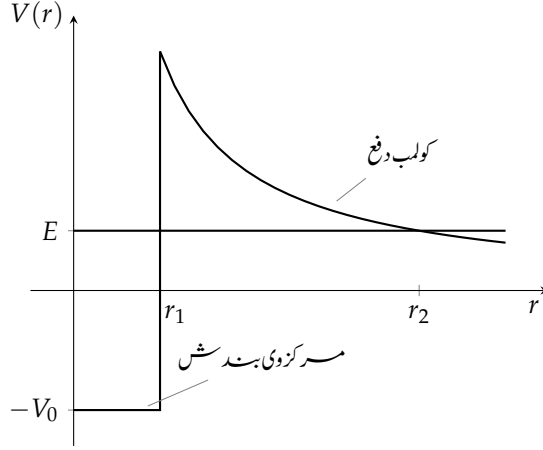
$$\frac{|F|}{|A|} \sim e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x')| dx'}$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۸.۲۲) \quad T \cong e^{-2\gamma}, \quad \gamma \equiv \frac{1}{\hbar} \int_0^a |p(x)| dx$$

مشال ۸.۲: الفا تحلیل کا نظریہ گامو۔ ۱۹۲۸ء میں جارج گامو نے مساوات ۸.۲۲ استعمال کرتے ہوئے الفا تحلیل (چند مخصوص تابکار مرکزہ سے، دو پروٹان اور دو نیوٹران پر مشتمل، الفا ذرہ کے احسراج) کی وجہ پیش کی۔ چونکہ الفا ذرہ مثبت بار (2e) کا حامل ہے، لہذا ایسے ہی یہ مرکزہ بندشی قوت کی پہنچ سے باہر نکلتا ہے، باقی مرکزہ (کے بار Ze) کی برقی قوت دافع اس کو دور جانے پر مجبور کرتی ہے۔ لیکن، اس کو پہلے اس مخفی رکاوٹ سے گزرنا ہوگا (جو یورینیم کی صورت میں) حارجی الفا ذرہ کی توانائی سے دو گن سے بھی زیادہ ہے۔ گامو نے اس مخفی توانائی کو تخمینی طور پر (پروٹان کے رداس r_1 وسعت کے چور کنواں (جو مرکزہ کی قوت کشش کو ظاہر کرتا ہے) کو کولمب قوت دافع کی دم سے جوڑ کر ظاہر کیا (شکل ۸.۵)، اور کوانٹائی سرنگ زنی کو الفا ذرہ کی مفرار کی وجہ مفرار دیا (مرکزہ کی طبیعیات پر کوانٹائی میکانیات کے اطلاق کا یہ پہلا واقعہ ہے)۔

^۳ اس تجسّی دلیل کو زیادہ پختہ بنایا جاسکتا ہے (سوال ۸.۱۰ دیکھیں)۔
Gamow's theory of alpha decay^۵



شکل ۸.۵: تابکار مسرکزہ میں الفا ذرے کی مخفی توانائی کا گامونہ۔

اگر خارج الفا ذرے کی توانائی E ہو، بیرونی واپس نقطے (r_2) کا تعین درج ذیل کرے گا۔

(۸.۲۳)

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r_2} = E$$

ظاہر ہے قوت نہ γ (مساوات ۸.۲۲) درج ذیل ہوگا۔^۱

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r} - E \right)} dr = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\frac{r_2}{r} - 1} dr$$

اس نکل میں $r \equiv r_2 \sin^2 u$ پر کر کے نتیجہ حاصل کرتے ہیں۔

(۸.۲۴)

$$\gamma = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left[r_2 \left(\frac{\pi}{2} - \sin^{-1} \sqrt{\frac{r_1}{r_2}} \right) - \sqrt{r_1(r_2 - r_1)} \right]$$

عام طور پر $r_1 \ll r_2$ ہوگا، لہذا ہم چھوٹے زاویوں کا تخمینہ ($\sin \epsilon \cong \epsilon$) استعمال کر کے اس نتیجے کا سادہ روپ حاصل کرتے ہیں:

(۸.۲۵)

$$\gamma \cong \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \left[\frac{\pi}{2} r_2 - 2\sqrt{r_1 r_2} \right] = K_1 \frac{Z}{\sqrt{E}} - K_2 \sqrt{Z r_1}$$

^۱ یہاں رکاوٹ کی بائیں جانب مخفی عنصر نہیں ہے (مزید، حقیقتاً یہ تین بعدی مسئلہ ہے)، تاہم مساوات ۸.۲۲ میں پیش بنیادی تصور سے ہمیں دلچسپی ہے۔

جہاں

$$(۸.۲۶) \quad K_1 \equiv \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{\pi\sqrt{2m}}{\hbar} = 1.980 \text{ MeV}^{1/2},$$

اور درج ذیل ہوگا۔

$$(۸.۲۷) \quad K_2 \equiv \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^{1/2} \frac{4\sqrt{m}}{\hbar} = 1.485 \text{ fm}^{-1/2}.$$

(عمومی مرکزہ کی جامت تقریباً 10^{-15} m یعنی 1 fm ہوتی ہے۔)

اگر ہم مرکزہ کے اندر الفا ذرے کو محصور تصور کریں اور کہیں کہ اسکی اوسط سمتی رفتار v ہے، تب دیواروں کے ساتھ تصادم کے بیچ اوسط وقفہ تقریباً $2r_1/v$ ہوگا، لہذا تصادم کا تعدد $v/2r_1$ ہوگا۔ ہر تصادم پر منسار ہونے کا احتمال $e^{-2\gamma}$ ہے، لہذا اکائی وقت میں احسار کا احتمال $(v/2r_1)e^{-2\gamma}$ ہوگا، اور یوں مائی مرکزہ کا عرصہ حیات تقریباً درج ذیل ہوگا۔

$$(۸.۲۸) \quad \tau = \frac{2r_1}{v} e^{2\gamma}.$$

بد قسمتی سے ہم v نہیں جانتے، لیکن اس سے زیادہ منسرق نہیں پڑتا، چونکہ ایک تابکار مرکزہ سے اور دوسرے تابکار مرکزہ کے بیچ قوت نمائی جزو ضرئی بچیں رتی تک تبدیل ہوتا ہے؛ اس کے سامنے v کی تبدیلی متابل نظر انداز ہے۔ بالخصوص، عرصہ حیات کی تجرباتی پیمائشی قیمتوں کو $1/\sqrt{E}$ کے ساتھ تسم کرنے سے ایک خوبصورت سیدھا خط (شکل 6.8) حاصل ہوتا ہے جو عین مساوات ۸.۲۵ اور مساوات ۸.۲۸ کے تحت ہوگا۔ □

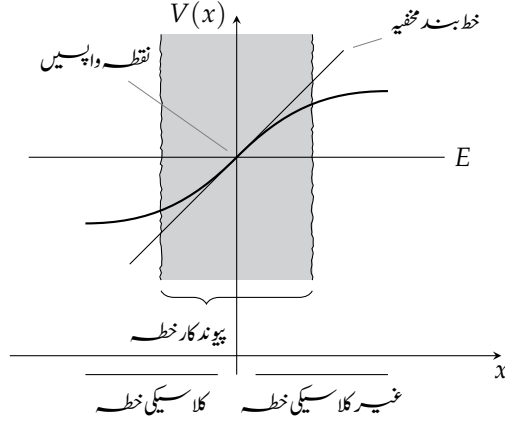
سوال ۸.۳: ایک مستثانی چوکور کاوٹ، جس کی اونچائی $V_0 > E$ اور چوڑائی $2a$ ہے، سے ایسے ذرے، جس کی توانائی E ہے، کی تخمینی ترسمی احتمال مساوات ۸.۲۸ استعمال کرتے ہوئے حاصل کریں۔ اپنے جواب کا موازنہ اصل نتیجے (سوال ۲.۳۳) کے ساتھ کریں، جس تک ونٹرل وکرامرس ویرلوان طریق $T \ll 1$ میں اس کی تخفیف ہوگی۔

سوال ۸.۴: مساوات ۸.۲۵ اور مساوات ۸.۲۸ استعمال کرتے ہوئے ^{238}U اور ^{212}Po کے عرصہ حیات تلاش کریں۔ اشارہ: تمام مرکزہ میں مرکزوی مادہ کی کثافت تقریباً ایک جیسی ہوتی ہے، لہذا $(r_1)^3$ (پروٹان اور نیوٹران کی تعداد کے مجموعہ) A کا راست متناسب ہوگا۔ تجرباتی طور پر درج ذیل حاصل کیا گیا ہے۔

$$(۸.۲۹) \quad r_1 \cong (1.07 \text{ fm}) A^{1/3}$$

حسار شدہ الفا ذرے کی توانائی، کلیہ آئنشتائن ($E = mc^2$) سے اخذ کی جاسکتی ہے

$$(۸.۳۰) \quad E = m_p c^2 - m_d c^2 - m_\alpha c^2$$



شکل ۸.۶: دائیں ہاتھ نقطہ واپس کو وضاحت سے دکھایا گیا ہے۔

جہاں m_p مائی مسرکزہ کی کیت، m_d بیٹی مسرکزہ کی کیت، اور m_α الفا ذرے (یعنی He^4 مسرکزہ) کی کیت ہے۔ یہ دیکھنے کی خاطر کہ بیٹی مسرکزہ کیا ہوگا، یاد رہے کہ الفا ذرہ دو پروٹان اور دو نیوٹران لے کر منسار ہوتا ہے، لہذا Z سے دو اور A سے چار منفی کریں۔ حاصل جو ابات استعمال کرتے ہوئے دوری جدول سے کیمیائی عنصر کا تعین کریں۔ سستی رفتار v کی اندازہ قیمت $E = (1/2)m_\alpha v^2$ سے حاصل کریں؛ یہ مسرکزہ کے اندر منفی مخفی توانائی کو نظر انداز کرتی ہے، لہذا v کی قیمت اصل سے زیادہ دیگی، تاہم اب تک ہم صرف اتنا ہی کر سکتے ہیں۔ اتفاقاً طور پر ان کیمیائی عناصر کی تجربہ سے حاصل کردہ عرصہ حیات بالستریب 6×10^9 سال اور $0.5 \mu\text{s}$ ہے۔

۸.۳ کلیات پیوند

اب تک کے بحث و منکر میں میں منرض کرتا رہا کہ مخفی کنویں (یار کاوٹ) کی ”دیواریں“ انتہائی تھیں، جس کی بت پر بیرونی حل آسان اور سرحدی شرائط سادہ تھے۔ درحقیقت، ہمارے مسرکزی نتائج (مساوات ۸.۱۶ اور ۸.۲۲) اس صورت میں بھی کافی حد تک درست ثابت ہوتے ہیں جب کسٹروں کی ڈھلان زیادہ سن ہو (یقیناً نظریہ گامو میں ایسی صورت پر ہی ان کا اطلاق کیا گیا)۔ بہر حال، نقطہ واپس ($E = V$)، جہاں ”کلاسیکی“ اور ”غیر کلاسیکی“ خطے جڑتے ہیں اور ونزل و کرامرس و برلوان تخمین ناتابل استعمال ہوگی، پر ہم تفسا عمل موج کا تشریحی مطالعہ کرنا چاہیں گے۔ اس حصہ میں میں مقید حال مسئلہ (شکل ۸.۱) پر غور کروں گا؛ آپ مسئلہ بکھراؤ (سوال ۸.۱۰) حل کریں گے۔^۸

اپنی آسانی کی خاطر، ہم محدود یوں منتخب کرتے ہیں کہ دائیں ہاتھ کا نقطہ واپس $x = 0$ پر واقع ہو (شکل ۸.۶)۔ ونزل و

^۸ انتباہ: درج ذیل دلائل زیادہ تکنیکی ہیں جنہیں پسیل مرتبہ پڑھ کر سمجھنا ضروری نہیں۔

کراسرس و برلوان تخمین میں درج ذیل ہوگا۔

$$(۸.۳۱) \quad \psi(x) \cong \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[Be^{\frac{i}{\hbar} \int_x^0 p(x') dx'} + Ce^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^0 p(x') dx'} \right], & x < 0 \\ \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} De^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^x |p(x')| dx'}, & x > 0 \end{cases}$$

(یہ فرض کرتے ہوئے کہ تمام $x > 0$ کے لئے E سے $V(x)$ بڑا ہوگا، ہم اس خطے میں مثبت قوت نما کو خارج کر سکتے ہیں، چونکہ $x \rightarrow \infty$ پر یہ بے فتابو بڑھتا ہے۔) ہمارا کام ان دو حل کو سرحد پر ایک دوسرے کے ساتھ جوڑنا ہے۔ لیکن یہاں ہمیں شدید مشکلات کا سامنا درپیش ہے: ونڈل وکراسرس و برلوان تخمین میں نقطہ واپسیں (جہاں $p(x) \rightarrow 0$) ہوگا) پر ψ کی قیمت لامتناہی تک پہنچتی ہے۔ حقیقی تقاضا عمل یقیناً ایسا رویہ نہیں رکھتا؛ جیسا ہمارا گمان بھتا، ونڈل وکراسرس و برلوان تخمین نقطہ واپسیں کی پڑوس میں نا قابل استعمال ہے۔ لیکن اجبازتی توانائیوں کا تعین نقاط واپسیں پر سرحدی شرائط کرتی ہیں۔ ہم ایک ایسا ”پیوندکار“ تقاضا عمل لیتے ہیں جو نقطہ واپسیں کو ڈھانپ کر دونوں اطراف کے ونڈل وکراسرس و برلوان تخمین حل کو ایک دوسرے کے ساتھ پیوند کرتا ہو۔

چونکہ ہمیں پیوندکار تقاضا عمل موج (ψ_p) صرف مبداء کے پڑوس میں چاہیے، لہذا ہم اس مخفیہ کو سیدھی لکیر:

$$(۸.۳۲) \quad V(x) \cong E + V'(0)x,$$

سے تخمین دے کر، اس خط بند V کے لئے مساوات شرودنگر:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_p}{dx^2} + [E + V'(0)x] \psi_p = E \psi_p$$

یا

$$(۸.۳۳) \quad \frac{d^2 \psi_p}{dx^2} = \alpha^3 x \psi_p$$

حل کرتے ہیں، جہاں درج ذیل ہے۔

$$(۸.۳۴) \quad \alpha \equiv \left[\frac{2m}{\hbar^2} V'(0) \right]^{1/3}$$

درج ذیل متعارف کر کے ہم ان α کو غیر تابع متغیر میں ضم کر سکتے ہیں

$$(۸.۳۵) \quad z \equiv \alpha x$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۸.۳۶) \quad \frac{d^2 \psi_p}{dz^2} = z \psi_p$$

یہ مساواتے ایئرے^۹ ہے جس کے حلوں کو تفاعلاتے ایئرے^{۱۰} کہتے ہیں۔ "چونکہ مساوات ایئرے دور تہی تفسرئی مساوات ہے، لہذا دو خطی غیر تابع ایئرے تفاعلاتے Ai(z) اور Bi(z) پائے جاتے ہیں۔

جدول ۸.۱: ایئرے تفاعلاتے کے چند خواص۔

$$\frac{d^2 y}{dz^2} = zy$$

تفسرئی مساوات:

ایئرے تفاعلاتے Ai(z) اور Bi(z) کے خطی مجموعے۔

حل:

$$Ai(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos\left(\frac{s^3}{3} + sz\right) ds$$

کملی روپ:

$$Bi(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \left[e^{-\frac{s^3}{3} + sz} + \sin\left(\frac{s^3}{3} + sz\right) \right] ds$$

متعاربی روپ:

$$\left. \begin{aligned} Ai(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \\ Bi(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}(-z)^{1/4}} \cos\left[\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] \end{aligned} \right\} z \ll 0 \quad \left. \begin{aligned} Ai(z) &\sim \frac{1}{2\sqrt{\pi}z^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}z^{3/2}} \\ Bi(z) &\sim \frac{1}{\sqrt{\pi}z^{1/4}} e^{\frac{2}{3}z^{3/2}} \end{aligned} \right\} z \gg 0$$

ان کا تعلق رتبہ 1/3 کے بیل تفاعلاتے کے ساتھ ہے؛ ان کے چند خواص جدول ۸.۱ میں پیش کیے گئے ہیں جبکہ شکل 8.8 میں انہیں ترسیم کیا گیا ہے۔ ظاہر ہے کہ پیوند کا تفاعل موج Ai(z) اور Bi(z) کا خطی جوڑ:

(۸.۳.۷)

$$\psi_p(x) = a Ai(ax) + b Bi(ax)$$

ہوگا، جہاں a اور b مناسب مستقلات ہیں۔

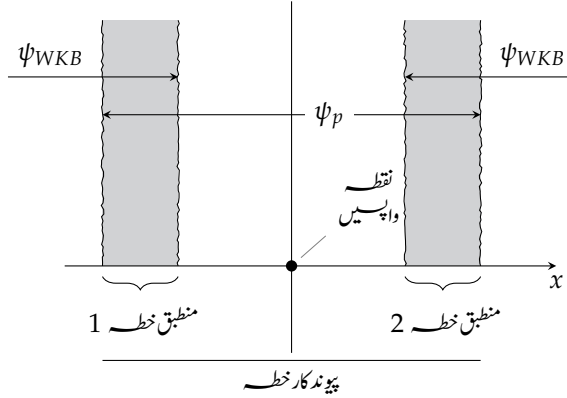
اب ψ_p مبداء کے پڑوس میں (تخمینی) تفاعل موج ہے؛ ہم نے مبداء کے دونوں اطراف منطق خطوں میں ψ_p کو ونزل و کرامرس و برلوان حلوں کے ساتھ ہم پلہ بنانا ہوگا (شکل ۸.۷ دیکھیں)۔ یہ منطق خطے نقطہ واپس کے اتنے متعریب ہیں کہ خط بند مخفیہ کافی درست ہوگا (لہذا ψ_p اصل تفاعل موج کا بہترین تخمین ہوگا)، اور ساتھ ہی نقطہ واپس سے اتنے دور ضرور ہیں کہ ونزل و کرامرس و برلوان تخمین پر بھروسہ کیا جاسکتا ہے۔^{۱۲} منطق خطوں میں

Airy's equation^۹

Airy functions^{۱۰}

اٹکلا سکی طور پر، خطی مخفیہ سے مراد مستقل قوت، لہذا مستقل اسراع ہے؛ یہ سادہ ترین حرکت ہے، جہاں سے بنیادی میکانیات کا آغاز ہوتا ہے۔ ستم ظریفی کی بات ہے کہ یہی سادہ مخفیہ، کوانٹائی میکانیات میں مادرائی تفاعلاتے کو جسم دیتا ہے، اور اس نظریہ میں کلیدی کردار ادا نہیں کرتا۔

^{۱۲} یہ نازک دوہری مسلط شرط ہے، اور ایسے گھمبیر مخفیہ تیار کرنا ممکن ہے کہ جن میں اس طرح کا کوئی منطق خطہ نہ پایا جاتا ہو۔ البتہ، عملی استعمال میں ایسا شاذ و نادر ہی ہوتا ہے۔ سوال ۸.۸ دیکھیں۔



شکل ۸.۷: پیوندی خط اور دو منطق خط۔

ساوات ۸.۳۲ کا رآمد ہے، لہذا (ساوات ۸.۳۴ کی عسایت میں) درج ذیل ہوگا۔

$$(۸.۳۸) \quad p(x) \cong \sqrt{2m(E - E - V'(0)x)} = \hbar\alpha^{3/2}\sqrt{-x}$$

بالخصوص منطق خط 2 میں

$$\int_0^x |p(x')| dx' \cong \hbar\alpha^{3/2} \int_0^x \sqrt{x'} dx' = \frac{2}{3} \hbar(\alpha x)^{3/2}$$

ہوگا، لہذا ونٹرل وکرامرس ویرلوان تفاعل موج (ساوات ۸.۳۱) درج ذیل لکھی جاسکتی ہے۔

$$(۸.۳۹) \quad \psi(x) \cong \frac{D}{\sqrt{\hbar\alpha^{3/4}x^{1/4}}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}}$$

ایسری تفاعل کی بڑی z متقارب روی ۳ (جدول ۸.۱) استعمال کرتے ہوئے، منطق خط 2 میں پیوند کار تفاعل موج (ساوات ۸.۳۷) درج ذیل روی اختیار کرتی ہے۔

$$(۸.۴۰) \quad \psi_p(x) \cong \frac{a}{2\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + \frac{b}{\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}}$$

دونوں حلوں کے موازنہ سے درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$(۸.۴۱) \quad a = \sqrt{\frac{4\pi}{\alpha\hbar}} D \quad \text{اور} \quad b = 0$$

۳ اپیلی نظر میں، اس خط میں، جسے $z = 0$ پر نقطہ واپس کا تریب تصویر کیا گیا ہے (لہذا انھیں کا خط بند تھمین کا رآمد ہوگا)، بڑی z تھمین کا استعمال نامعقول نظر آتا ہے۔ لیکن یہاں تفاعل کا دلیل z نہیں αx ہے، اور اگر آپ غور کریں (سوال ۸.۸ دیکھیں) تو آپ دیکھیں گے کہ (عموماً) ایسا خط ہوگا جہاں αx بڑا ہوگا، اور ساتھ ہی $V(x)$ کو خطی لکیرے تھمین دینا معقول ہوگا۔

ہم یہی کچھ منطبق خط 1 کے لئے بھی کرتے ہیں۔ اب بھی مساوات ۸.۳۸ ہمیں $p(x)$ دیگی، تاہم اس مرتبہ x منفی ہوگا، لہذا

$$(۸.۴۲) \quad \int_x^0 p(x') dx' \cong \frac{2}{3} \hbar (-\alpha x)^{3/2}$$

ہوگا، اور ونڈل وکرامرسس ویرلوان تفاعسل موج (مساوات ۸.۳۱) درج ذیل ہوگا۔

$$(۸.۴۳) \quad \psi(x) \cong \frac{1}{\sqrt{\hbar \alpha^{3/4} (-x)^{1/4}}} \left[B e^{i \frac{2}{3} (-\alpha x)^{3/2}} + C e^{-i \frac{2}{3} (-\alpha x)^{3/2}} \right]$$

ساتھ ہی بہت بڑی منفی z کے لئے ایسری تفاعسل کا متقارب روپ (جداول ۸.۱) استعمال کرتے ہوئے پیوندی تفاعسل (مساوات ۸.۳۷ جس میں $b = 0$ لیا گیا ہو) درج ذیل ہوگا۔

$$(۸.۴۴) \quad \begin{aligned} \psi_p(x) &\cong \frac{a}{\sqrt{\pi} (-\alpha x)^{1/4}} \sin \left[\frac{2}{3} (-\alpha x)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] \\ &= \frac{a}{\sqrt{\pi} (-\alpha x)^{1/4}} \frac{1}{2i} \left[e^{i\pi/4} e^{i \frac{2}{3} (-\alpha x)^{3/2}} - e^{-i\pi/4} e^{-i \frac{2}{3} (-\alpha x)^{3/2}} \right] \end{aligned}$$

منطبق خط 1 میں ونڈل وکرامرسس ویرلوان اور پیوندی تفاعسلات موج کے موازنے سے

$$\frac{a}{2i\sqrt{\pi}} e^{i\pi/4} = \frac{B}{\sqrt{\hbar \alpha}} \quad \text{اور} \quad \frac{-a}{2i\sqrt{\pi}} e^{-i\pi/4} = \frac{C}{\sqrt{\hbar \alpha}}.$$

حاصل ہوگا، جس میں a کی قیمت مساوات ۸.۴۱ سے پر کر کے درج ذیل حاصل ہوگا۔

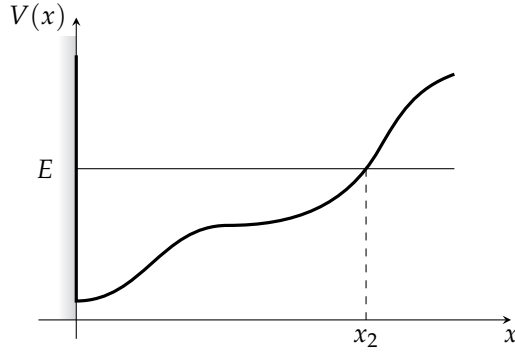
$$(۸.۴۵) \quad B = -ie^{i\pi/4} D \quad \text{اور} \quad C = ie^{-i\pi/4} D$$

انہیں کلیاتے جوڑ^{۱۴} کہتے ہیں، جو نقطہ واپس کے دونوں اطراف ونڈل وکرامرسس ویرلوان حلوں کو آپس میں پیوند کرتے ہیں۔ پیوندی تفاعسل موج کا کام، نقطہ واپس پر پیدا درز کو ڈھانپنا تھا؛ اس کی ضرورت آگے نہیں آئے گی۔ تمام چیزوں کو معمول زنی مستقل D کی صورت میں بیان کر کے نقطہ واپس کو واپس مبداءے اختیاری نقطہ x_2 منتقل کرتے ہوئے، ونڈل وکرامرسس ویرلوان تفاعسل موج (مساوات ۸.۳۱) درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے۔

$$(۸.۴۶) \quad \psi(x) \cong \begin{cases} \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], & x < x_2 \\ \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx' \right], & x > x_2 \end{cases}$$

مثال ۸.۳: ایک انتصابی دیوار والا مخفیہ کنواں۔ مندرجہ کریں ایک مخفیہ کنویں کی $x = 0$ پر انتصابی دیوار جبکہ دوسری دیوار ڈھلان ہے (شکل ۸.۸)۔ ایسی صورت میں $\psi(0) = 0$ ہوگا لہذا مساوات ۸.۴۶ کے تحت

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^{x_2} p(x) dx + \frac{\pi}{4} = n\pi, \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$



شکل ۸.۸: ایک انتہائی دیوار والا محفظہ کنواں۔

یادرج ذیل ہوگا۔

$$(۸.۴۷) \quad \int_0^{x_2} p(x) dx = \left(n - \frac{1}{4}\right) \pi \hbar$$

مثلاً، ”نصف ہارمونی سرقتش“:

$$(۸.۴۸) \quad V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, & x > 0, \\ 0, & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

پر غور کریں۔ اس صورت میں

$$p(x) = \sqrt{2m[E - (1/2)m\omega^2 x^2]} = m\omega \sqrt{x_2^2 - x^2}$$

ہوگا، جہاں

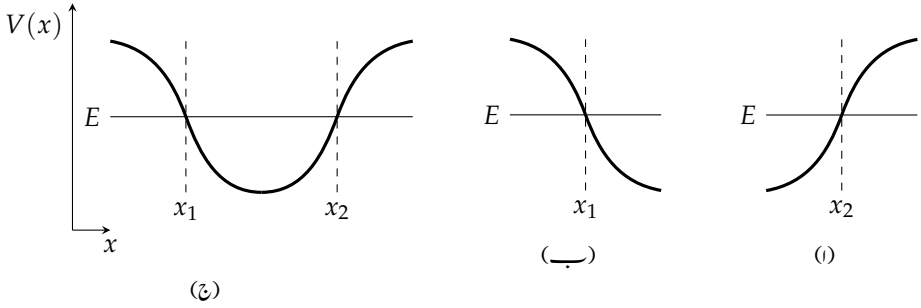
$$x_2 = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

نقطہ واپس ہے۔ لہذا

$$\int_0^{x_2} p(x) dx = m\omega \int_0^{x_2} \sqrt{x_2^2 - x^2} dx = \frac{\pi}{4} m\omega x_2^2 = \frac{\pi E}{2\omega}$$

ہوگا، اور کوانٹائزیشن شرط (مساوات ۸.۴۷) درج ذیل دیگا۔

$$(۸.۴۹) \quad E_n = \left(2n - \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(\frac{3}{2}, \frac{7}{2}, \frac{11}{2}, \dots\right) \hbar \omega$$



شکل ۸.۹: بالائی رخ ڈھلوان اور نیچے رخ ڈھلوان نقاط واپسیں۔

اس مخصوص صورت میں ونزل و کرامرس و برلوان تخمین اصل اجزائی توانائیاں دیتی ہے (جو مکمل ہارمونی سر تقش کی طاق توانائیاں ہیں؛ سوال ۲.۳۲ دیکھیں)۔

مثال ۸.۳: بغیر انتضالی دیواروں کا مخفیہ کنوائے۔ اس نقطہ واپسیں پر جہاں مخفیہ کی ڈھلوان اوپر رخ (شکل ۸.۹-۱) ہو، مساوات ۸.۳۶ ونزل و کرامرس و برلوان تفاعلات موج کو آپس میں پیوند کرتی ہے۔ نیچے ڈھلوان نقطہ واپسیں (شکل ۸.۹-ب) پر یہی دلائل درج ذیل دیئے (سوال ۸.۹)۔

$$(۸.۵۰) \quad \psi(x) \cong \begin{cases} \frac{D'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_1} |p(x')| dx'}, & x < x_1 \\ \frac{2D'}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right], & x > x_1 \end{cases}$$

بالخصوص، مخفیہ کنویں (شکل ۸.۹-ج) کی بات کرتے ہوئے، ”اندرونی خطہ“ ($x_1 < x < x_2$) میں تفاعل موج کو

$$\psi(x) \cong \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \theta_2(x), \quad \theta_2(x) \equiv \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4}$$

(مساوات ۸.۳۶)، یا درج ذیل لکھا جاسکتا ہے

$$\psi(x) \cong \frac{-2D'}{\sqrt{p(x)}} \sin \theta_1(x), \quad \theta_1(x) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x p(x') dx' - \frac{\pi}{4}$$

(مساوات ۸.۵۰)۔ ظاہر ہے، ماسوائے مضرب π کے،^{۱۵} سائن تفاعلات کے دلیل لازماً برابر ہوں گے: $\theta_2 = \theta_1 + n\pi$ ، لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۸.۵۱) \quad \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \left(n - \frac{1}{2}\right) \pi \hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

^{۱۵} سائن تفاعلات کے دلیل میں مشرق مضرب π کے مضرب 2π ہو گا، چونکہ مجموعی منفی علامت کو معمول ذنی مستطالات D اور D' میں ضم کیا جاسکتا ہے۔

یہ کوانٹائی شرط، دو ڈھلوان اطراف کے ”عمومی“ مخفیہ کنویں کی احبازتی توانائیوں کو تعین کرتا ہے۔ دھیان رہے کہ دو انتضائی دیواروں کے کلیہ (مساوات ۸.۱۶) یا ایک انتضائی دیوار کے کلیہ (مساوات ۸.۴) اور موجودہ کلیہ (مساوات ۸.۵) میں صرف اس عدد (0، 1/4 یا 1/2) کا منسرق ہے جو n سے منفی ہوتا ہے۔ چونکہ ونڈل وکرامرس و برلوان تخمین (بڑی n کی) نیم کلاسیکی طریق میں بہترین کام کرتی ہے، لہذا یہ منسرق صرف دکھانے کی حد تک ہے۔ بہر حال یہ نتیجہ انتہائی طاقتور ہے، جس کو استعمال کر کے، مساوات شرودنگر حل کیے بغیر، ایک سادہ عمل کی قیمت حاصل کر کے تخمینی احبازتی توانائیاں معلوم کی جاسکتی ہیں۔

تفاعل موج خود کہیں نہیں نظر آتا۔ □

سوال ۸.۵: زمین پر لپکدار ٹپکیاں لیتے ہوئے (کیست m کی) گیند کے کلاسیکی مسئلے کے ماش کوانٹائی میکانی مسئلے پر غور کریں۔^{۱۶}

ا. مخفی توانائی کیا ہوگی اس کو زمین سے بلندی x کا تفاعل لکھیں؟ (منفی x کی صورت میں مخفیہ لامستمانی ہوگا؛ گیند کبھی وہاں نہیں جاسکتا۔)

ب. اس مخفیہ کے لئے مساوات شرودنگر حل کر کے جواب کو مناسب ایسری تفاعل کے روپ میں لکھیں (یاد رہے، بڑی z پر $Bi(z)$ بے فتابو بڑھتا ہے، لہذا اس کو لازماً رد کرنا ہوگا۔) تفاعل $\psi(x)$ کی معمولی زنی کرنے کی ضرورت نہیں۔

ج. پہلی چار احبازتی توانائیوں کو تین مخفی خیزہندوں تک $g = 9.80 \text{ m/s}^2$ اور $m = 0.1 \text{ kg}$ لے کر حاصل کریں۔

د. اس ثقلی میدان میں ایک الیکٹران کی زمینی حال توانائی، eV میں، کتنی ہوگی؟ اوسطاً الیکٹران زمین سے کتنی بلندی پر ہوگا؟ اشارہ: مسئلہ دریل سے $\langle x \rangle$ کا تعین کریں۔

سوال ۸.۶: ونڈل وکرامرس و برلوان تخمین استعمال کرتے ہوئے (سوال ۸.۵ کی) ٹپکیاں کھاتے ہوئے گیند کا تخبزب کریں۔

ا. احبازتی توانائیوں E_n کو m ، g اور \hbar کی صورت میں لکھیں۔

ب. سوال ۸.۵ ج میں دی گئی مخصوص قیتوں کو پُر کر کے ونڈل وکرامرس و برلوان تخمین کی ابتدائی چار توانائیوں کا ”بالکل ٹھیک“ نتائج کے ساتھ موازنہ کریں۔

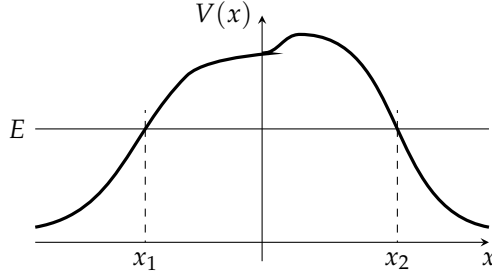
ج. کوانٹائی عدد n کو کتنا بڑا ہونا ہوگا کہ گیند اوسطاً زمین سے، مثلاً، ایک میٹر کی بلندی پر ہو۔

سوال ۸.۷: ہارمونی مرتعش کی احبازتی توانائیوں کو ونڈل وکرامرس و برلوان تخمین سے حاصل کریں۔

سوال ۸.۸: ہارمونی مرتعش (جس کی زاویائی تعدد ω ہو) کی n ویں ساکن حال میں کیست m کے ایک ذرے پر غور کریں۔

ا. نقطہ واپسیں، x_2 ، تلاش کریں۔

^{۱۶} ایک معنوی مسئلہ نظر آتا ہے؛ درحقیقت، نیوٹران کے لئے یہ تخبزب سرانجام دیا گیا ہے۔



شکل ۸.۱۰: ڈھلوانی دیواروں والا رکاوٹ۔

ب۔ نقطہ واپس سے کتنی بلندی (d) پر خط بند مخفیہ (مساوات ۸.۳۲ لیکن نقطہ واپس x_2 پر ہو) میں سہو 1% ہوگا؟ یعنی، اگر

$$\frac{V(x_2 + d) - V_{\text{نقطہ}}(x_2 + d)}{V(x_2)} = 0.01$$

ہو، تب d کیا ہوگا؟

ج۔ جب تک $z \geq 5$ ہو $Ai(z)$ کا مقدرابی روپ 1% تک درست ہوگا۔ جبز-ب میں حاصل کردہ d کے لئے n کی ایسی سب سے کم قیمت تلاش کریں کہ $\alpha d \geq 5$ ہو۔ (اس سے بڑی n کے لئے ایسا منطبق خطہ موجود ہوگا جس میں خط بند مخفیہ 1% تک درست اور بڑی z روپ کا ایسری تقابل 1% درست ہوگا۔)

سوال ۸.۹: نیچے ڈھلوان نقطہ واپس کا پیوندی کلیہ اخذ کر کے مساوات ۸.۵۰ کی تصدیق کریں۔

سوال ۸.۱۰: مناسب پیوندی کلیات استعمال کر کے ڈھلوان دیواروں کی رکاوٹ (شکل ۸.۱۰) سے بکھراؤ کے مسئلہ پر غور کریں۔ اشارہ: درج ذیل روپ کے ونڈل وکراس سرس و ہرلوان تقابل عمل موج سے آغز کریں۔

$$(۸.۵۲) \quad \psi(x) \cong \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[A e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^{x_1} p(x') dx'} + B e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^{x_1} p(x') dx'} \right], & (x < x_1) \\ \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \left[C e^{\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx'} + D e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^x |p(x')| dx'} \right], & (x_1 < x < x_2) \\ \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[F e^{\frac{i}{\hbar} \int_{x_2}^x p(x') dx'} \right], & (x > x_2) \end{cases}$$

کسی صورت $C = 0$ مت لیں۔ سرگت زنی احتمال $T = |F|^2 / |A|^2$ کا حاب کریں، اور دکھائیں کہ بلند اور چوڑی رکاوٹ کی صورت میں آپ کا نتیجہ مساوات ۸.۲۲ دے گا۔

اضافی سوالات برائے باب ۸
سوال ۸.۱۱: عمومی قوت نسائی مخفیہ:

$$V(x) = \alpha |x|^v$$

جہاں v ایک مثبت عدد ہے، کی احبازتی توانائیوں کو ونڈل وکرامرسس ویرلوان تخمین سے تلاش کریں۔ اپنے نتیجہ کو $v = 2$ جابجھیں۔ جواب: ۱۷

$$(۸.۵۳) \quad E_n = \alpha \left[(n - 1/2) \hbar \sqrt{\frac{\pi}{2m\alpha}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{v} + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{v} + 1\right)} \right]^{\left(\frac{2v}{v+2}\right)}$$

سوال ۸.۱۲: ونڈل وکرامرسس ویرلوان تخمین استعمال کر کے سوال ۲.۵۱ کے مخفیہ کے لئے مقبہ حال توانائی تلاش کریں۔
نتیجہ کا ٹھیک ٹھیک جواب کے ساتھ موازنہ کریں۔ جواب: $[(9/8) - (1/\sqrt{2})] \hbar^2 a^2 / m$

سوال ۸.۱۳: کروی تشکلی مخفیہ کے لئے ہم رداسی حصے (مساوات ۴.۳۷) پر ونڈل وکرامرسس ویرلوان تخمین کا اطلاق کر سکتے ہیں۔ مساوات ۸.۴ کی درج ذیل روپ کو $l = 0$ کی صورت میں استعمال کرنا معقول ہوگا ۱۸

$$(۸.۵۴) \quad \int_0^{r_0} p(r) dr = (n - 1/4) \pi \hbar$$

جہاں r_0 نقطہ واپس ہے، (یعنی ہم $r = 0$ کو لامتناہی دیوار تصور کرتے ہیں)۔ اس کلیہ کو زیر استعمال لاتے ہوئے لوکار تھی مخفیہ:

$$V(r) = V_0 \ln(r/a)$$

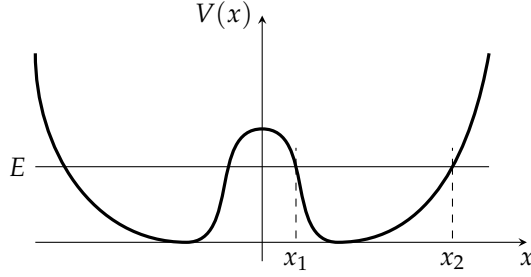
کی احبازتی توانائیوں کی انداز ا قیمت تلاش کریں (جہاں V_0 اور a مستقلات ہیں)۔ صرف $l = 0$ کی صورت پر غور کریں۔ دکھائیں کہ سطحوں کے بیچ فاصلوں کا انحصار کیفیت پر نہیں۔ جزوی جواب:

$$E_{n+1} - E_n = V_0 \ln \left(\frac{n + 3/4}{n - 1/4} \right)$$

سوال ۸.۱۴: ونڈل وکرامرسس ویرلوان تخمین کا درج ذیل روپ

$$(۸.۵۵) \quad \int_{r_1}^{r_2} p(r) dr = (n - 1/2) \pi \hbar$$

۱۸ ہمیشہ کی طرح، ونڈل وکرامرسس ویرلوان تخمین نیم کلاسیکی (بڑی n) طریق میں سب سے زیادہ درست ثابت ہوتی ہے۔ بالخصوص، مساوات ۸.۵۳ زمینی حال ($n=1$) کے لئے اتنی اچھی نہیں ہے۔
۱۸ رداسی مساوات پر ونڈل وکرامرسس ویرلوان تخمین کا اطلاق چند نازک اور پیچیدہ مسائل پیدا کرتا ہے، جس پر یہاں کوئی بات نہیں کی جائے گی۔



شکل ۸.۱۱: تشاکلی دوہر اکنویں؛ سوال ۸.۱۵۔

استعمال کر کے ہائیڈروجن کی مقبید حال توانائیوں کی اندازاً قیمت تلاش کریں۔ موثر محفہ (مساوات ۴.۳۸) میں مرکز گریز جبزوشا مسل کر نامت بھولیں۔ درج ذیل مکمل مددگار ثابت ہو سکتا ہے۔

$$(۸.۵۶) \quad \int_a^b \frac{1}{x} \sqrt{(x-a)(b-x)} dx = \frac{\pi}{2} (\sqrt{b} - \sqrt{a})^2$$

آپ دیکھیں گے کہ $n \gg l$ اور $n \gg 1/2$ کی صورت میں پوہر سطحیں حاصل ہوں گی۔ جواب:

$$(۸.۵۷) \quad E_{nl} \cong \frac{-13.6 \text{ eV}}{[n - (1/2) + \sqrt{l(l+1)}]^2}$$

سوال ۸.۱۵: تشاکلی دوہر اکنویں (شکل ۸.۱۱) پر غور کریں۔ ہم $E < V(0)$ والی مقبید حالات میں دلچسپی رکھتے ہیں۔

۱. خط (i) $x > x_2$ ، (ii) $x_1 < x < x_2$ ، اور (iii) $0 < x < x_1$ کے لئے ونڈل وکرامرسس وپروان تناعلات مون لکھیں۔ نقطہ x_1 اور x_2 پر مناسب پیوندی کلیات کا اطلاق کر کے (مساوات ۸.۴۶) میں x_2 کے لئے ایسا کیا گیا ہے؛ آپ کو x_1 کے لئے کرنا ہوگا (درج ذیل دکھائیں)

$$\psi(x) \cong \begin{cases} \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx'} & (i) \\ \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] & (ii) \\ \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \left[2 \cos \theta e^{\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x')| dx'} + \sin \theta e^{-\frac{1}{\hbar} \int_x^{x_1} |p(x')| dx'} \right] & (iii) \end{cases}$$

جہاں درج ذیل ہوگا۔

$$(۸.۵۸) \quad \theta \equiv \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx$$

ب. چونکہ $V(x)$ تشکیلی ہے، لہذا ہمیں صرف جفت (+) اور طاق (-) تفرعات موج پر غور کرنا ہوگا۔ اول الذکر صورت میں $\psi'(0) = 0$ ہوگا، جبکہ موخر الذکر صورت میں $\psi(0) = 0$ ہوگا۔ دکھائیں کہ اس سے درج ذیل کوانٹائی شرط حاصل ہوتی ہے

$$\tan \theta = \pm 2e^{\phi} \quad (۸.۵۹)$$

جہاں درج ذیل ہوگا۔

$$\phi \equiv \frac{1}{\hbar} \int_{-x_1}^{x_1} |p(x')| dx' \quad (۸.۶۰)$$

مساوات ۸.۵۹ (تخمینی) احبازی توانائیوں کا تخمین کرتی ہے (دھیان رہے کہ x_1 اور x_2 میں E کی قیمت داخل ہوتی ہے، لہذا θ اور ϕ دونوں E کے تفرعات ہوں گے)۔

ج. ہم بالخصوص ایسی درمیانے رکاوٹ میں دلچسپی رکھتے ہیں جو بلند یا چوڑی یا دونوں؛ ایسی صورت میں ϕ بڑا ہوگا، لہذا e^{ϕ} انتہائی بڑا ہوگا۔ مساوات ۸.۵۹ کے تحت θ کی قیمتیں π کی نصف عدد صحیح مضرب کے بہت قریب ہوں گی۔ اس کو ذہن میں رکھتے ہوئے $\theta = (n + 1/2)\pi + \epsilon$ ، جہاں $|\epsilon| \ll 1$ ہے، لکھ کر دکھائیں کہ کوانٹائی شرط درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$\theta \cong \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \mp \frac{1}{2} e^{-\phi} \quad (۸.۶۱)$$

د. فرض کریں دونوں کنوؤں میں مخفیہ قطع مکانی ہیں۔^{۱۹}

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} m \omega^2 (x + a)^2, & x < 0 \\ \frac{1}{2} m \omega^2 (x - a)^2, & x > 0 \end{cases} \quad (۸.۶۲)$$

اس مخفیہ کوترسیم کر کے θ (مساوات ۸.۵۸) تلاش کریں، اور درج ذیل دکھائیں۔

$$E_n^{\pm} \cong \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \mp \frac{\hbar \omega}{2\pi} e^{-\phi} \quad (۸.۶۳)$$

تبصرہ: اگر درمیانی رکاوٹ نا قابل گزر ($\phi \rightarrow \infty$) ہو، تب ہمارے پاس دو الگ الگ ہارمونی مرتعشات ہوتے، اور توانائیاں $E_n = (n + 1/2) \hbar \omega$ دوہری انخطاطی ہوتیں، چونکہ ذرہ بائیں کنوئیں یا دائیں کنوئیں میں ہو سکتا ہے۔ متناہی رکاوٹ کی صورت میں (دونوں کنوئیں کے بیچ ”رابطہ“ ممکن ہوگا، لہذا) انخطاط ختم ہوگا۔ جفت حالات (ψ_n^+) کی توانائی معمولی کم اور طاق تفرعات (ψ_n^-) کی توانائی معمولی زیادہ ہوگی۔

^{۱۹} حصہ ۲.۳ کے شروع کے تذکرہ میں $\omega \cong \sqrt{V''(x_0)}/m$ لیتے ہوئے جہاں x_0 کم سے کم نقطے کا مقام ہے، ہم دیکھتے ہیں کہ اگر دونوں کنوؤں میں مخفیہ ٹیکہ قطع مکانی نہ ہوں تب بھی یہاں کا حساب، لہذا نتیجہ (مساوات ۸.۶۳) تخمیناً درست ہوگا۔

۷. فرض کریں ذرہ دائیں کنویں سے آغاز کرتا ہے؛ یابیہ کہن زیادہ درست ہوگا کہ، ذرہ ابستہائی طور پر درج ذیل روپ میں پایا جاتا ہے

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n^+ + \psi_n^-)$$

جہاں ہم فرض کرتے ہیں کہ ہیٹ کی وہ قیمتیں منتخب کی جاتی ہیں کہ ذرے کا بیشتر حصہ دائیں کنویں میں پایا جاتا ہو۔ دکھائیں کہ یہ ذرہ دونوں کنویں کے بیچ دوری عرصہ:

$$\tau = \frac{2\pi^2}{\omega} e^{\phi} \quad (۸.۶۴)$$

کے ساتھ ارتعاش کرتا ہے۔

۸. متغیر ϕ کی قیمت، جسزودکے مخصوص مخفیہ کے لئے تلاش کریں، اور دکھائیں کہ $E \gg V(0)$ کے لئے $\phi \sim m\omega a^2 / \hbar$ ہوگا۔

سوال ۸.۱۶: شمارکے اثر میں سرنگے زنی۔ بیرونی برقی میدان چالو کرنے سے اصولاً ایک الیکٹران جوہر سے سرنگ زنی کے ذریعے باہر نکل کر جوہر کو باردار یہ بنا سکتا ہے۔ سوال: کیا عمومی شمارک اثر تجربے میں ایسا ہوگا؟ ہم ایک سادہ یک بُعدی نمونہ استعمال کر کے اس احتمال کی اندازاً قیمت دریافت کر سکتے ہیں: فرض کریں ایک ذرہ بہت گہرے مستثنای چوکور کنواں (حصہ ۲.۶) میں پایا جاتا ہے۔

۱. کنویں کی تہ سے ناپے ہوئے، زمینی حال توانائی کتنی ہوگی؟ یہاں $V_0 \gg \hbar^2 / ma^2$ فرض کریں۔ اشارہ: یہ $2a$ چوڑائی کے) لامستثنای چوکور کنویں کی زمینی حال توانائی ہے۔

ب. اب اضطراب $H' = -\alpha x$ متعارف کریں (برقی میدان E بیرونی $E = -E$ میں الیکٹران کے لئے بیرونی $E = eE$ ہوگا)۔ فرض کریں یہ نسبتاً کمزور اضطراب $(\alpha a \ll \hbar^2 / ma^2)$ ہے۔ کل مخفیہ کا خنک ترسیم کر کے دیکھیں کہ ذرہ اب مثبت x رخ سرنگ زنی کے ذریعے خارج ہو سکتا ہے۔

ج. سرنگ زنی جسزو ضربی γ (مساوات ۸.۲۲) کا حساب کریں، اور ذرے کو منسار ہونے کے لئے درکار وقت (مساوات ۸.۲۸) کی اندازاً معلوم کریں۔ جواب: $\gamma = \sqrt{8mV_0^3 / 3\alpha\hbar}$, $\tau = (8ma^2 / \pi\hbar)e^{2\gamma}$

د. معقول اعداد: $V_0 = 20 \text{ eV}$ (بیرونی الیکٹران کی بندشی توانائی کی عمومی قیمت)، $a = 10^{-10} \text{ m}$ (عمومی جوہری رداس)، $E = 7 \times 10^6 \text{ V/m}$ (تجربہ گاہ میں مضبوط میدان)، الیکٹران بار e اور الیکٹران کیت m لیں۔ عرصہ τ کا حساب کر کے اس کا موازنہ کائنات کی عرصے کریں۔

سوال ۸.۱۷: میزپر کھڑی بوتل، رہائشی درجہ حرارت پر کوانٹائی سرنگ زنی کی وجہ سے کتنی دیر میں خود با خود گر سکتی ہے؟ اشارہ: بوتل کو کیت m ، رداس R ، اور قد h کی یکساں تکی تصور کریں۔ گرتی ہوئی بوتل کے وسطی نقطے کی توازن قیمت $(h/2)$ سے، بلندی کو x سے ظاہر کریں۔ مخفی توانائی mgx ہوگی، اور بوتل اس صورت گرے گی جب x کی قیمت فاصل قیمت $\sqrt{R^2 + (h/2)^2} - h/2$ x_0 کو پہنچے۔ سرنگ زنی احتمال (مساوات ۸.۲۲)

$E = 0$ کے لئے حاصل کریں۔ حراری توانائی $(1/2)k_B T = (1/2)mv^2$ لیتے ہوئے رفتار کی اندازاً قیمت مساوات ۸.۲۸ سے معلوم کریں۔ مناسب قیمتیں چر کر کے اپنا جواب سالوں میں دیں۔

باب ۹

تابع وقت نظریہ اضطراب

اب تک ہم جو کچھ کر چکے ہیں اس کو کوانٹائی سکونیاتے کہا جاسکتا ہے، جس میں مخفی توانائی تفاعل غیر تابع وقت: $V(r, t) = V(r)$ ہے۔ ایسی صورت میں (تابع وقت) مساوات شرودنگر:

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

کو علیحدگی متغیرات:

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

سے حل کیا جاسکتا ہے، جہاں $\psi(r)$ غیر تابع مساوات شرودنگر

$$H\psi = E\psi$$

کو مطمئن کرتا ہے۔ چونکہ علیحدگی حلوں میں تابعیت وقت کو قوت نمائی حبز و ضربی $(e^{iEt/\hbar})$ ظاہر کرتا ہے، جو کسی بھی طبیعی مقدار $|\Psi|^2$ کے حصول میں منسوخ ہوتا ہے، لہذا تمام احتمالات اور توقعاتی قیمتیں وقت کے لحاظ سے مستقل ہوں گے۔ ان ساکن حالات کے خطی جوڑے ہم زیادہ دلچسپ تابعیت وقت والے تفاعلات موج تیار کر سکتے ہیں، لیکن اب بھی توانائی اور ان کے متعلقہ احتمالات مستقل ہوں گے۔

توانائی کی ایک سطح سے دوسری سطح میں الیکٹران کی **تحویلات** (جنہیں بعض اوقات **کوانٹائی پھلانگ**^۲ کہتے ہیں) ممکن بنانے کی خاطر، ضروری ہے کہ ہم تابع وقت مخفیہ (کوانٹائی حرکت) **حرکیات**^۳ متعارف کریں۔ کوانٹائی حرکیات میں

quantum statics^۱
quantum jumps^۲
quantum dynamics^۳

ایسے بہت کم مسائل پائے جاتے ہیں جن کا بالکل ٹھیک ٹھیک حل معلوم کیا جاسکتا ہے۔ ہاں، اگر ہیملٹنی کے غیر تابع وقت حصہ کے لحاظ سے تابع وقت حصہ بہت چھوٹا ہو، تب اسے اضطراب تصور کیا جاسکتا ہے۔ اس باب میں، میں تابع وقت نظریہ اضطراب تیار کرتا ہوں، اور اس کی دو اہم ترین استعمال: جوہر سے اشعاعی احراج اور انجذاب، پر غور کرتا ہوں۔

۹.۱ دو سطحی نظام

شروعات کرنے کی غرض سے فرض کریں (غیر مضطرب) نظام کے صرف دو حالات ψ_a اور ψ_b پائے جاتے ہیں۔ یہ غیر مضطرب ہیملٹنی، H^0 ، کے امتیازی حالات:

$$(9.1) \quad H^0 \psi_b = E_b \psi_b, \quad \text{اور} \quad H^0 \psi_a = E_a \psi_a$$

ہوں گے جو معیاری عمودی ہیں۔

$$(9.2) \quad \langle \psi_a | \psi_b \rangle = \delta_{ab}$$

کسی بھی حال کو ان کا خطی جوڑ لکھا جاسکتا ہے؛ بالخصوص، درج ذیل ہوگا۔

$$(9.3) \quad \Psi(0) = c_a \psi_a + c_b \psi_b$$

اس سے مندرجہ نہیں پڑتا کہ تفاعلات ψ_a اور ψ_b مقام و فضا کی تفاعلات، یا چپکار، یا کوئی اور عجیب تفاعل ہوں؛ ہمیں یہاں صرف تابعیت وقت سے غرض ہے، لہذا جب میں $\Psi(t)$ لکھتا ہوں، میرا مراد وقت t پر نظام کا حال ہے۔ عدم اضطراب کی صورت میں، ہر حبز واپنی خصوصی قوت نمائی حبز و ضربی کے ساتھ ارتقا:

$$(9.4) \quad \Psi(t) = c_a \psi_a e^{-iE_a t/\hbar} + c_b \psi_b e^{-iE_b t/\hbar}$$

پائے گا۔ ہم کہتے ہیں کہ ”حال ψ_a میں ذرہ پائے جانے کا احتمال“ $|c_a|^2$ ہے؛ جس سے ہمارا مطلب دراصل یہ ہے کہ پیمائش سے توانائی کی قیمت E_a حاصل ہونے کا احتمال $|c_a|^2$ ہے۔ یقیناً، تفاعل Ψ کی معمول زنی کے تحت درج ذیل ہوگا۔

$$(9.5) \quad |c_a|^2 + |c_b|^2 = 1$$

۹.۱.۱ مضطرب نظام

فرض کریں، اب ہم تابع وقت اضطراب، $H'(t)$ ، چالو کرتے ہیں۔ چونکہ ψ_a اور ψ_b ایک مکمل سلسلہ نام کرتے ہیں، لہذا تفاعل موج $\Psi(t)$ کو بھی ان کا خطی جوڑ لکھا جاسکتا ہے۔ مندرجہ صرف اتنا ہوگا کہ اب c_a اور c_b وقت t کے تفاعلات ہوں گے۔

$$(9.6) \quad \Psi(t) = c_a(t) \psi_a e^{-iE_a t/\hbar} + c_b(t) \psi_b e^{-iE_b t/\hbar}$$

(میں قوت نسائی حبز و ضربیوں کو $c_a(t)$ یا $c_b(t)$ میں ضم کر سکتا ہوں، جیسا بعض لوگ کرنا پسند کرتے ہیں، لیکن میں چاہتا ہوں کہ تابعیت وقت کا وہ حصہ جو عدم اضطراب کی صورت میں بھی پایا جاتا ہو نظر آتا رہے۔) ہمارا پورا کام صرف اتنا ہے کہ ہم وقت کے تفاعلات c_a اور c_b کا تعین کریں۔ مثال کے طور پر، اگر ایک ذرہ آغاز میں حال ψ_a ($c_a(0) = 1, c_b(0) = 0$) میں پایا جاتا ہو اور بعد میں کسی وقت t_1 پر $c_a(t_1) = 0, c_b(t_1) = 1$ ہو، تب ہم کہیں گے کہ نظام ψ_a سے ψ_b میں تحویل ہوا ہے۔

ہم $c_a(t)$ اور $c_b(t)$ معلوم کرنے کی غرض سے مطالب کرتے ہیں کہ $\Psi(t)$ تابع وقت مساوات شرودنگر کو مطمئن کرے۔

$$(9.7) \quad H\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}, \quad H = H^0 + H'(t)$$

مساوات ۹.۶ اور مساوات ۹.۷ سے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$\begin{aligned} c_a[H^0\psi_a]e^{-iE_at/\hbar} + c_b[H^0\psi_b]e^{-iE_bt/\hbar} + c_a[H'\psi_a]e^{-iE_at/\hbar} + c_b[H'\psi_b]e^{-iE_bt/\hbar} \\ = i\hbar \left[\dot{c}_a\psi_a e^{-iE_at/\hbar} + \dot{c}_b\psi_b e^{-iE_bt/\hbar} \right. \\ \left. + c_a\psi_a \left(-\frac{iE_a}{\hbar}\right) e^{-iE_at/\hbar} + c_b\psi_b \left(-\frac{iE_b}{\hbar}\right) e^{-iE_bt/\hbar} \right] \end{aligned}$$

مساوات ۹.۱ کی بدولت بائیں ہاتھ کے پہلے دو اجزاء دائیں ہاتھ کے آخری دو اجزاء کے ساتھ کٹتے ہیں، لہذا درج ذیل رہ جائے گا۔

$$(9.8) \quad c_a[H'\psi_a]e^{-iE_at/\hbar} + c_b[H'\psi_b]e^{-iE_bt/\hbar} = i\hbar \left[\dot{c}_a\psi_a e^{-iE_at/\hbar} + \dot{c}_b\psi_b e^{-iE_bt/\hbar} \right]$$

تفعل ψ_a کے ساتھ اندرونی ضرب لے کر ψ_a اور ψ_b کی عمودیت (مساوات ۹.۲) بروئے کار لاتے ہوئے ہم \dot{c}_a کو الگ کرتے ہیں۔

$$c_a\langle\psi_a|H'|\psi_a\rangle e^{-iE_at/\hbar} + c_b\langle\psi_a|H'|\psi_b\rangle e^{-iE_bt/\hbar} = i\hbar\dot{c}_a e^{-iE_at/\hbar}$$

مختصر لکھائی کے غرض سے ہم درج ذیل متعارف کرتے ہیں:

$$(9.9) \quad H'_{ij} \equiv \langle\psi_i|H'|\psi_j\rangle$$

دھیان رہے کہ H' ہر مشی ہے، لہذا $H'_{ji} = (H'_{ij})^*$ ہوگا۔ دونوں اطراف کو $-(i/\hbar)e^{iE_at/\hbar}$ سے ضرب دے کر درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$(9.10) \quad \dot{c}_a = -\frac{i}{\hbar} \left[c_a H'_{aa} + c_b H'_{ab} e^{-i(E_b - E_a)t/\hbar} \right]$$

اسی طرح ψ_b کے ساتھ اندرونی ضرب سے \dot{c}_b الگ کیا جاسکتا ہے:

$$c_a \langle \psi_b | H' | \psi_a \rangle e^{-iE_a t / \hbar} + c_b \langle \psi_b | H' | \psi_b \rangle e^{-iE_b t / \hbar} = i \hbar \dot{c}_b e^{-iE_b t / \hbar}$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(9.11) \quad \dot{c}_b = -\frac{i}{\hbar} \left[c_b H'_{bb} + c_a H'_{ba} e^{i(E_b - E_a)t / \hbar} \right]$$

مساوات ۹.۱۰ اور مساوات ۹.۱۱ سے $c_a(t)$ اور $c_b(t)$ کا تعین کرتے ہیں: یہ دونوں مساواتیں نظام کی (تابع وقت) مساوات شرودنگر کے مکمل معادل ہیں۔ عمومی طور پر H' کے وتری متعلقہ ارکان صفر ہوں گے:

$$(9.12) \quad H'_{aa} = H'_{bb} = 0$$

(عمومی صورت کے لیے سوال ۹.۴ دیکھیں)۔ اگر ایسا ہو تب مساوات سادہ رہے:

$$(9.13) \quad \dot{c}_a = -\frac{i}{\hbar} H'_{ab} e^{-i\omega_0 t} c_b, \quad \dot{c}_b = -\frac{i}{\hbar} H'_{ba} e^{i\omega_0 t} c_a$$

اختیار کرتی ہے، جہاں درج ذیل ہوگا۔

$$(9.14) \quad \omega_0 \equiv \frac{E_b - E_a}{\hbar}$$

(میں $E_b \geq E_a$ فرض کرتا ہوں، لہذا $\omega_0 \geq 0$ ہوگا۔)

سوال ۹.۱: ایک ہائیڈروجن جوہر کو (تابع وقت) برقی میدان $\mathbf{E} = E(t)\mathbf{k}$ میں رکھا جاتا ہے۔ زمینی حال ($n = 1$) اور (چارگٹ انحطاطی) پہلے ہیجان حالات ($n = 2$) کے بیچ اضطراب $H' = eEz$ کے چاروں متعلقہ ارکان H'_{ij} تلاش کریں۔ دکھائیں کہ پانچوں حالات کے لیے $H'_{ii} = 0$ ہوگا۔ تبصرہ: محور z کے لحاظ سے طاق پڑھو اور دے کار لاتے ہوئے، صرف ایک مکمل حل کرنے کی ضرورت ہوگی؛ اس روپ کا اضطراب زمینی حال سے $n = 2$ حالات میں سے صرف ایک تک رسائی دیتا ہے، لہذا یہ نظام دو حالات تشکیل کے طور پر کام کرے گا؛ یہاں فرض کیا گیا ہے کہ بلند ہیجان حالات تک تحویل نظریہ انداز کی جاسکتی ہے۔

سوال ۹.۲: غیر تابع وقت اضطراب کی صورت میں $c_a(0) = 1$ اور $c_b(0) = 0$ لیتے ہوئے مساوات ۹.۱۳ حل کریں۔ تصدیق کریں کہ $|c_a(t)|^2 + |c_b(t)|^2 = 1$ ہے۔ تبصرہ: بظاہر یہ نظام ”خالص ψ_a “ اور ”کسی ψ_b “ کے بیچ ارتعاش کرتا ہے۔ کیا یہ میرے اس عمومی دعوے کی نفی نہیں کرتا کہ غیر تابع وقت اضطراب کی صورت میں تحویل نہیں ہوگی؟ جی نہیں، لیکن اس کی وجہ کچھ لطیف ہے: یہاں ψ_a اور ψ_b نہ کبھی ہیملٹنی کے امتیازی تفاعلات تھے اور نہ ہیں؛ توانائی کی پیمائش کبھی بھی E_a یا E_b نہیں دیگی۔ نظام پر نظر ڈالنے کی خاطر، تابع وقت نظریہ اضطراب میں ہم عموماً اضطراب چالو کر کے کچھ دورانیہ کے بعد بند

کرتے ہیں۔ آغاز اور اختتام میں ψ_a اور ψ_b بالکل ٹھیک ہیملٹنی کے امتیازی حالات ہوں گے، اور صرف اس سیاق و سباق میں ہم کہہ سکتے ہیں کہ نظام ایک سے دوسرے میں تحویل ہوا۔ یوں، موجودہ مسئلے میں، فرض کریں کہ وقت $t = 0$ پر اضطراب چالو کیا جاتا ہے جسے وقت t پر بند کیا جاتا ہے؛ اس سے حساب پر کوئی مشرق نہیں پڑے گا، تاہم یہ نتائج کی معقول تشریح ممکن بناتی ہے۔

سوال ۹.۳: فرض کریں اضطراب کاروپ (وقت کا δ تفاعل ہے۔

$$H' = U\delta(t)$$

فرض کریں $U_{aa} = U_{bb} = 0$ اور $U_{ab} = U_{ba}^* \equiv \alpha$ ہے۔ اگر $c_a(-\infty) = 1$ اور $c_b(-\infty) = 0$ ہوں، $c_a(t)$ اور $c_b(t)$ تلاش کریں، اور تصدیق کریں کہ $|c_a(t)|^2 + |c_b(t)|^2 = 1$ ہے۔ تحویل ہونے کا حتمی احتمال $t \rightarrow \infty$ کے لیے $P_{a \rightarrow b}$ کیا ہوگا؟ اشارہ: آپ ڈیلٹا تفاعل کو مستطیلوں کے تسلسل کی تحدیدی حد لے سکتے ہیں۔

$$P_{a \rightarrow b} = \sin^2(|\alpha|/\hbar)$$

۹.۱.۲ تاجع وقت نظریہ اضطراب

اب تک سب کچھ بالکل ٹھیک رہا ہے: ہم نے اضطراب کی جامت کے بارے میں کچھ فرض نہیں کیا۔ لیکن، ”چھوٹے“ H' کی صورت میں ہم مساوات ۹.۱۳ کو (درج ذیل) یک بعد دیگر تخمینے سے حل کر سکتے ہیں۔ فرض کریں ذرہ زیریں حال:

$$(9.15) \quad c_a(0) = 1, \quad c_b(0) = 0$$

سے آغاز کرتا ہے۔ عدم اضطراب کی صورت میں ذرہ ہمیشہ کے لیے یہیں (صفر رتبہ میں) رہے گا۔ صفر رتبہ:

$$(9.16) \quad c_a^{(0)}(t) = 1, \quad c_b^{(0)}(t) = 0$$

(میں تخمینے کے رتبہ کو زیر بالا میں قوسین میں لکھتا ہوں۔ یوں $c_a^{(0)}(t)$ میں ”0“ رتبہ صفر کو ظاہر کرتا ہے۔)

ہم مساوات ۹.۱۳ کے دائیں ہاتھ میں رتبہ صفر قیمتیں پڑ کر کے اول رتبہ تخمینے حاصل کرتے ہیں۔ اول رتبہ:

$$(9.17) \quad \frac{dc_a^{(1)}}{dt} = 0 \rightarrow c_a^{(1)}(t) = 1$$

$$\frac{dc_b^{(1)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H'_{ba} e^{i\omega_0 t} \rightarrow c_b^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{ba}(t') e^{i\omega_0 t'} dt'$$

اب ہم انہیں دائیں ہاتھ میں پڑ کر کے رتبہ دوم تخمین حاصل کرتے ہیں۔

دوم رتبہ:

$$(9.18) \quad \frac{dc_a^{(2)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H'_{ab} e^{-i\omega_0 t} \left(-\frac{i}{\hbar} \right) \int_0^t H'_{ba}(t') e^{i\omega_0 t'} dt' \rightarrow$$

$$c_a^{(2)}(t) = 1 - \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t H'_{ab}(t') e^{-i\omega_0 t'} \left[\int_0^{t'} H'_{ba}(t'') e^{i\omega_0 t''} dt'' \right] dt'$$

جہاں c_b تبدیل نہیں ہوا $c_b^{(1)}(t) = c_b^{(2)}(t)$ ۔ (دھیان رہے کہ $c_a^{(2)}(t)$ میں صفر رتبہ جزو بھی شامل ہے؛ دوم رتبہ تصحیح صرف عملی حصہ ہوگا۔)

اصولاً، ہم اسی طرح چلتے ہوئے n رتبہ تخمین کو مساوات ۹.۱۳ کے دائیں ہاتھ میں پڑ کر کے $(n + 1)$ رتبہ تخمین کے لیے حل کر سکتے ہیں۔ صفر رتبہ میں H' کا کوئی جزو ضربی نہیں پایا جاتا، اول رتبہ تصحیح میں H' کا ایک جزو ضربی پایا جاتا ہے، دوم رتبہ تصحیح میں H' کے دو جزو ضربی پائے جاتے ہیں، وغیرہ۔^۵ اول رتبہ تخمین میں سہو ہوگا۔ ہاں H' میں اول رتبہ تک $|c_a^{(1)}(t)|^2 + |c_b^{(1)}(t)|^2 \neq 1$ سے صاف ظاہر ہے (ٹھیک عددی سروں کو یقیناً مساوات ۹.۵ پر پورا اترنا چاہیے)۔ یہی کچھ زیادہ بلند رتبہ تخمین کے لیے بھی ہوگا۔

سوال ۹.۴: فرض کریں آپ $H'_{aa} = H'_{bb} = 0$ نہیں لیتے۔

۱. صورت $c_a(0) = 1$ اور $c_b(0) = 0$ کے لئے اول رتبہ نظریہ اضطراب سے $c_a(t)$ اور $c_b(t)$ حاصل کریں۔ دکھائیں کہ H' میں اول رتبہ تک $|c_a^{(1)}(t)|^2 + |c_b^{(1)}(t)|^2 = 1$ ہوگا۔

ب. اس مسئلے کو بہتر انداز میں نمٹا جاسکتا ہے۔ درج ذیل لیکر

$$(9.19) \quad d_a \equiv e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{aa}(t') dt'} c_a, \quad d_b \equiv e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{bb}(t') dt'} c_b$$

دکھائیں کہ

$$(9.20) \quad \dot{d}_a = -\frac{i}{\hbar} e^{i\phi} H'_{ab} e^{-i\omega_0 t} d_b; \quad \dot{d}_b = -\frac{i}{\hbar} e^{-i\phi} H'_{ba} e^{i\omega_0 t} d_a$$

ہوگا، جہاں درج ذیل ہے۔

$$(9.21) \quad \phi(t) \equiv \frac{1}{\hbar} \int_0^t [H'_{aa}(t') - H'_{bb}(t')] dt'$$

^۵ دھیان رہے کہ ہر جفت رتبہ میں c_a ، اور ہر طاق رتبہ میں c_b تبدیل ہوتا ہے؛ اگر نظام ان دو حالات کے خطی جوڑے آفسز کرے، یا اضطراب میں وتری ارکان پائے جاتے ہیں، تب ایسا نہیں ہوگا۔

یوں (H' کے ساتھ چسپاں اضافی جزو ضرب $e^{i\phi}$ کے علاوہ) d_a اور d_b کی مساواتیں، ساخت کے لحاظ سے مساوات ۹.۱۳ کی متماثل ہیں۔

ج. اول رتبی نظریہ اضطراب سے، جزو-ب کی ترکیب استعمال کرتے ہوئے، $c_a(t)$ اور $c_b(t)$ حاصل کریں، اور اپنے جواب کا جزو-الف کے ساتھ موازنہ کریں۔ دونوں میں مندرجہ پر تبصرہ کریں۔

سوال ۹.۵: عمومی صورت $c_b(0) = b$ ، $c_a(0) = a$ کے لیے نظریہ اضطراب میں مساوات ۹.۱۳ کو دوم رتبہ تک حل کریں۔

سوال ۹.۶: غیر تابع وقت اضطراب (سوال ۹.۲) کے لیے $c_a(t)$ اور $c_b(t)$ کو دوم رتبہ تک حاصل کریں۔ اپنے جواب کا ٹھیک ٹھیک نتیجہ کے ساتھ موازنہ کریں۔

۹.۱.۳ سائنس اضطراب

معرض کریں اضطراب میں تابعیت وقت سائنس:

$$(9.22) \quad H'(r, t) = V(r) \cos(\omega t)$$

تب

$$(9.23) \quad H'_{ab} = V_{ab} \cos(\omega t)$$

ہوگا، جہاں V_{ab} درج ذیل ہے۔

$$(9.24) \quad V_{ab} \equiv \langle \psi_a | V | \psi_b \rangle$$

(عملاً، تقریباً ہر صورت میں وتری متالابی ارکان صفر ہوتے ہیں، لہذا پہلے کی طرح یہاں بھی میں معرض کرتا ہوں کہ وتری متالابی ارکان صفر ہیں۔) اول رتبہ تک (یہاں سے آگے، ہم صرف اول رتبہ تک کام کریں گے، لہذا زیر بالا میں رتبہ کی نشاندہی نہیں کی جائے گی) درج ذیل ہوگا (مساوات ۹.۱۷)۔

$$(9.25) \quad c_b(t) \cong -\frac{i}{\hbar} V_{ba} \int_0^t \cos(\omega t') e^{i\omega_0 t'} dt' = -\frac{i V_{ba}}{2\hbar} \int_0^t \left[e^{i(\omega_0 + \omega)t'} + e^{i(\omega_0 - \omega)t'} \right] dt'$$

$$= -\frac{V_{ba}}{2\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega_0 + \omega)t} - 1}{\omega_0 + \omega} + \frac{e^{i(\omega_0 - \omega)t} - 1}{\omega_0 - \omega} \right]$$

یہی جواب ہے، لیکن اس کے ساتھ کام کرنا ذرا دشوار ہوگا۔ جبری تعدد (ω) کو تحلیلی تعدد (ω_0) کے بہت قریب رہنے کا پابند بنانے سے، چونکہ قوسین میں دوسرا جزو غالب ہوگا، جس سے چیزیں نہایت آسان ہو جاتی ہیں؛ بالخصوص ہم درج ذیل معرض کرتے ہیں۔

$$(9.26) \quad \omega_0 + \omega \gg |\omega_0 - \omega|$$

یہ بہت بڑی پابندی نہیں ہے، چونکہ کسی دوسرے تعدد پر تحویل کا احتمال نہ ہونے کے برابر ہے۔^۶ پہلے جزو کو نظر انداز کرتے ہوئے درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$c_b(t) \cong -\frac{V_{ba}}{2\hbar} \frac{e^{i(\omega_0 - \omega)t/2}}{\omega_0 - \omega} \left[e^{i(\omega_0 - \omega)t/2} - e^{-i(\omega_0 - \omega)t/2} \right]$$

$$(9.24) \quad = -i \frac{V_{ba}}{\hbar} \frac{\sin[(\omega_0 - \omega)t/2]}{\omega_0 - \omega} e^{i(\omega_0 - \omega)t/2}$$

ایک ذرہ جو حال ψ_a سے آغاز کر کے لمحہ t پر حال ψ_b میں پایا جاتا ہو، کے تحویل کا احتمال، جس کو **تحویل احتمال**^۷ کہتے ہیں، درج ذیل ہوگا۔

$$(9.28) \quad P_{a \rightarrow b}(t) = |c_b(t)|^2 \cong \frac{|V_{ab}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2}$$

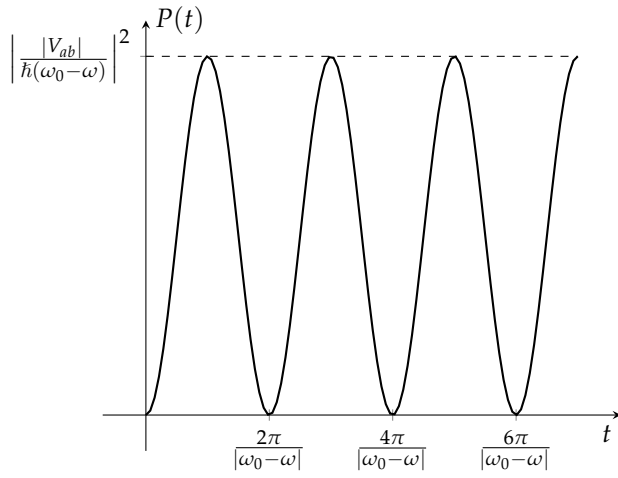
اس نتیجے کا دلچسپ پہلو یہ ہے کہ، وقت کے لحاظ سے تحویلی احتمال سائن نار تعاضل کرتا ہے (شکل ۹.۱)۔ یہ $|V_{ab}|^2 / \hbar^2 (\omega_0 - \omega)^2$ کی زیادہ سے زیادہ قیمت تک پہنچ کر، جو لازماً 1 سے بہت کم ہے (درج ذیل ہم اضطراب کو چھوٹا فرض نہیں کر پائیں گے) یہ واپس گر کر صفر ہوتا ہے! لمحات $t_n = 2n\pi / |\omega_0 - \omega|$ پر، جہاں $n = 1, 2, 3, \dots$ ہے، ذرہ لازماً پچھلے حال میں ہوگا۔ اگر آپ تحویل کا احتمال بڑھا نا چاہتے ہیں، اضطراب کو لمبے عرصے کے لیے چالو نہ رکھیں؛ بہتر ہوگا کہ آپ وقت $\pi / |\omega_0 - \omega|$ پر اضطراب کو بند کر کے نظام کو بالائی حال میں ”پانے“ کی امید کریں۔ سوال ۹.۷ میں آپ دیکھیں گے کہ دو حالات کے بیچ تحویل، نظریہ اضطراب کی پیدا کردہ مصنوعی خاصیت نہیں، بلکہ ٹھیک حال میں بھی ایسا ہی ہوگا، اگرچہ تحویل تعدد کچھ مختلف ہوگا۔

جیسا میں ذکر کر چکا ہوں، تحویل کا احتمال اس صورت سب سے زیادہ ہوگا جب جب جبری تعدد قدرتی تعدد ω_0 کے قریب ہو۔ شکل ۹.۲ میں ω کے لحاظ سے $P_{a \rightarrow b}$ ترسیم کر کے اس حقیقت کو اجاگر کیا گیا ہے۔ چوٹی کی بلندی $(|V_{ab}| t / 2\hbar)^2$ جبکہ چوڑائی $4\pi / t$ ہے؛ ظاہر ہے کہ وقت گزرنے کے ساتھ ساتھ اس کی بلندی بڑھتی اور چوڑائی گھٹتی ہے۔ (ظاہر، زیادہ سے زیادہ قیمت بغیر کسی حد کی بتدریج بڑھتی ہے۔ تاہم 1 تک پہنچنے سے بہت پہلے چھوٹے اضطراب کا مفروضہ ناکارہ ہو جاتا ہے، لہذا ہم نسبتاً کم t کے لیے اس نتیجے پر یقین کر سکتے ہیں۔ سوال ۹.۷ میں آپ دیکھیں گے کہ ٹھیک نتیجہ 1 سے تجاویز نہیں کرتا۔)

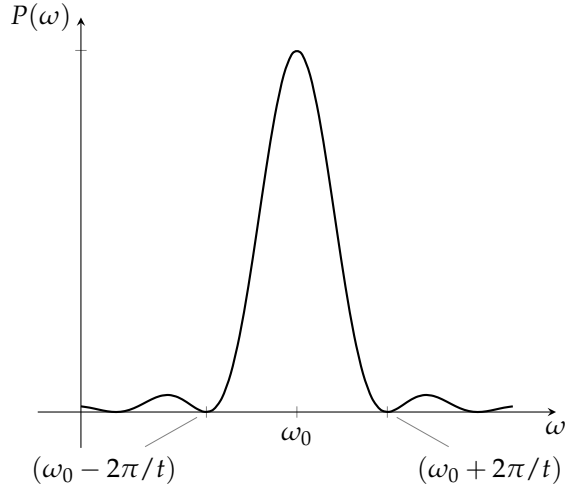
سوال ۹.۷: مساوات ۹.۲۵ میں پہلا جزو $\cos(\omega t)$ کے $e^{i\omega t} / 2$ حصے، اور دوسرا $e^{-i\omega t} / 2$ سے آتا ہے۔ یوں پہلے جزو کو نظر انداز کرنا باضابطہ طور پر $H' = (V/2)e^{-i\omega t}$ لکھنے کا معادل ہے، یعنی ہم درج ذیل کہہ سکتے ہیں۔

$$(9.29) \quad H'_{ba} = \frac{V_{ba}}{2} e^{-i\omega t}, \quad H'_{ab} = \frac{V_{ab}}{2} e^{i\omega t}$$

^۶ آنے والے حصوں میں ہم اس نظریے کا اطلاق روشنی پر کریں گے، جس کا $\omega \sim 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ہے، لہذا دونوں اجزاء میں نسب نما انتہائی بڑا ہوگا، ماسوائے ω_0 کے قریب (دوسرے جزو میں)۔
^۷ transition probability



شکل ۹.۱: سائنس مضطرب کے لئے وقت کے لحاظ سے تحویلی احتمال (مساوات ۹.۲۸)۔



شکل ۹.۲: تحویلی احتمال بالقابل متحرک تعدد (مساوات ۹.۲۸)۔

(ہیملٹنی متالاب کو ہر مشی بنانے کی خاطر مومنہ ذکر کی ضرورت پیش آتی ہے؛ آپ کہہ سکتے ہیں کہ ہم $c_a(t)$ کے لیے مساوات ۹.۲۵ کی طرح کلیہ میں غلاب جزو منتخب کرتے ہیں۔) اس کو گھومتی موج تخیل^۸ کہتے ہیں۔ جناب رابی نے دیکھا کہ حساب کے آغاز میں گھومتی موج تخمین کرتے ہوئے مساوات ۹.۱۳ کو، نظریہ اضطراب استعمال کیے بغیر اور میدان کے زور کے بارے میں کچھ فرض کیے بغیر، بالکل ٹھیک ٹھیک حل کیا جاسکتا ہے۔

۱. عمومی ابتدائی معلومات $c_b(0) = 0$ ، $c_a(0) = 1$ کے لیے گھومتی موج تخمین (مساوات ۹.۲۹) لیتے ہوئے مساوات ۹.۱۳ حل کریں۔ اپنے جوابات $c_a(t)$ اور $c_b(t)$ کو رابی پلٹنے^۹ عدد:

$$\omega_r \equiv \frac{1}{2} \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + (|V_{ab}| / \hbar)^2} \quad (۹.۳۰)$$

کی صورت میں لکھیں۔

ب. تحویلی احتمال $P_{a \rightarrow b}(t)$ کا تخمین کریں، اور دکھائیں کہ یہ کبھی بھی 1 سے تجاوز نہیں کرتا۔ تصدیق کریں کہ $|c_a(t)|^2 + |c_b(t)|^2 = 1$ ہے۔

ج. تصدیق کریں کہ ”کم“ اضطراب کی صورت میں $P_{a \rightarrow b}(t)$ نظریہ اضطراب کا نتیجہ (مساوات ۹.۲۸) دے گا۔ سیاق و سباق کے لحاظ سے یہاں ”کم“ سے مراد V پر عائد کیا پابندی ہے۔

د. نظام پہلی مرتبہ اپنے ابتدائی حال میں کس وقت واپس آئے گا؟

۹.۲ اشعاعی اخراج اور انجذاب

۹.۲.۱ برقناطیسی امواج

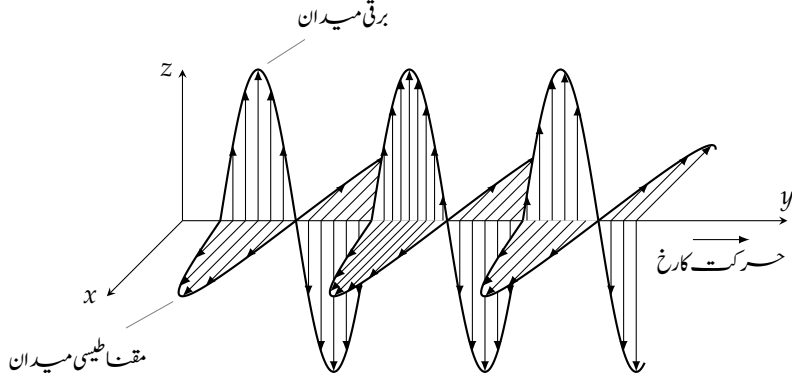
ایک برقناطیسی موج (جس کو میں روشنی کہوں گا، اگرچہ یہ زیریں سرخ، بالائے بصری شعاع، خنرد امواج، ایکس رے، وغیرہ ہو سکتی ہے؛ جن میں صرف تعداد کا فرق ہے) عرضی (اور باہم متعام) ارتعاشی برقی اور مقناطیسی میدانوں پر مشتمل ہوگا (شکل ۹.۳)۔ ایک جوہر، گزرتی ہوئی بصری موج کی برقی حبزو کو، بنیادی طور پر رد عمل کرتا ہے۔ اگر طول موج (جوہر کی جامت کے لحاظ سے) لمبا ہو، ہم میدان کے فاصلاتی تغیر کو نظر انداز کر سکتے ہیں۔^{۱۰} تب جوہر سائنس ارتعاشی برقی میدان:

$$E = E_0 \cos(\omega t) \mathbf{k} \quad (۹.۳۱)$$

^۸ rotating wave approximation

^۹ Rabi flopping frequency

^{۱۰} بصری روشنی کے لئے $500 \text{ nm} \sim \lambda$ جبکہ جوہر کا قطر 0.1 nm کے لگ بھگ ہے، لہذا یہ تخمین معقول ہے؛ تاہم ایکس رے کے لئے ایسا نہیں ہوگا۔ سوال ۹.۲۱ میدان کے فاصلاتی تغیر پر غور کرتا ہے۔



شکل ۹.۳: برقی و مغناطیسی موج۔

کے زیر اثر ہوگا (فی الحال میں روشنی کو ایک رنگی اور z رخ تقطیب شدہ فرض کرتا ہوں)۔ اضطرابی ہیملٹنی "درج ذیل ہوگی، جہاں q الیکٹران کا بار ہے۔"^۳

(۹.۳۲)

$$H' = -qE_0 z \cos(\omega t)$$

بظاہر درج ذیل ہوگا۔^۳

(۹.۳۳)

$$H'_{ba} = -\wp E_0 \cos(\omega t),$$

$$\wp \equiv q \langle \phi_b | z | \phi_a \rangle$$

عمومی طور پر، ψ متغیر z کا جفت یا طاق تفاعل ہوگا؛ دونوں صورتوں میں $z|\psi|^2$ طاق ہوگا، جس کا نکل صفر ہوگا (چند مثالوں کے لئے سوال ۹.۱ دیکھیں)۔ اسی کی بنا پر ہم فرض کرتے ہیں کہ H' کے وتری متالابی ارکان صفر ہوں گے۔ یوں

(۹.۳۴)

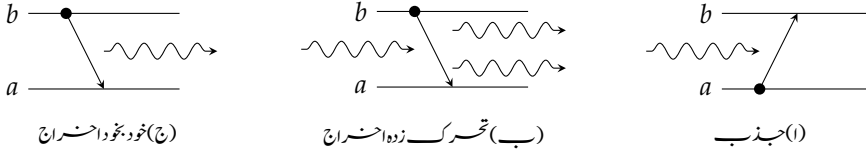
$$V_{ba} = -\wp E_0$$

لیتے ہوئے، روشنی اور مادے کا باہم عمل ٹھیک اسی قسم کے ارتعاشی اضطراب کے تحت ہوگا جس پر ہم نے حصہ ۹.۱ میں غور کیا۔

"اکن میدان E میں بار q کی توانی $-q \int E \cdot dr$ ہوگی۔ آپ تابع وقت (یعنی غیر ساکن) میدان کے لئے برقی سکونیات کے کلب کے استعمال پر ناراض ہو سکتے ہیں۔ میں بغیر کہے، فرض کرتا ہوں کہ (جوہر کے اندر) الیکٹران کو حرکت کرنے کے لئے درکار وقت سے ارتعاش کا دوری عرصہ زیادہ ہے۔

^۲ ہمیشہ کی طرح ہم فرض کرتے ہیں کہ مرکزہ بھاری اور ساکن ہے؛ ہمیں یہاں الیکٹران کے تفاعل موج سے عرض ہے۔

^۳ حرف \wp کے استعمال سے آپ کو برقی جفت قطب کا معیار اثر یاد دلایا جاتا ہے (جس کے لئے برقی حرکیات میں حرف p مستعمل ہے؛ یہاں اسے میٹر \wp کہا گیا ہے تاکہ معیار حرکت کے ساتھ عطا نہی پیدا نہ ہو)۔ درحقیقت، جفت قطب معیار حرکت عاقل، qr ، کے z جزو کا، \wp غیر وتری متالابی رکن ہے۔ برقی جفت قطب معیار حرکات کے ساتھ وابستگی کی بنا پر، ایسا اخراج جو مواد ۹.۳۳ کے تحت ہو برقی جفت قطب اخراج کہلاتا ہے۔ یہ کم از کم بصوری خطہ میں غالب قسم ہے۔ عمومیت اور اصطلاحات کے لئے سوال ۹.۲۱ دیکھیں۔



شکل ۹.۴: روشنی کا جوہر کے ساتھ تین قسم کے باہم عمل پائے جاتے ہیں۔

۹.۲.۲ انجذاب، تحریک شدہ اضطراب اور خود بخود اضطراب

ایک جوہر جو ابتدائی طور پر زیریں حال ϕ_a میں پایا جاتا ہو پر تقطیب شدہ یک رنگی روشنی کی شعاع ڈالی جاتی ہے۔ بالاحال ψ_b میں تحویل کا احتمال مساوات ۹.۲۸ دیتی ہے جو (مساوات ۹.۳۴ کو مد نظر رکھتے ہوئے) درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے۔

$$P_{a \rightarrow b}(t) = \left(\frac{|\phi| E_0}{\hbar} \right)^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} \quad (9.35)$$

اس عمل میں برقناطیسی میدان سے جوہر $E_b - E_a = \hbar\omega_0$ توانائی جذب کرتا ہے۔ ہم کہتے ہیں اس نے ”ایک نوریہ جذب کیا“ (شکل ۹.۴-۱)۔ (جیسا میں ذکر کر چکا ہوں، لفظ ”نوریہ“ درحقیقت کوائلٹی برقی حرکیات^{۱۴} [برقناطیسی میدان کی کوائلٹی نظریہ] سے تعلق رکھتا ہے، جبکہ ہم میدان کو کلاسیکی نقطہ نظر سے دیکھ رہے ہیں۔ یہ زبان اس وقت تک استعمال کرنا مناسب ہے جب تک آپ اس سے زیادہ گہرے مطلب نہ لیں۔) یقیناً، میں بالاحال $(c_a(0) = 0)$ اور $(c_b(0) = 1)$ سے آغاز کرتے ہوئے پورا عمل دوبارہ کر سکتا ہوں۔ آپ چاہیں تو ایسا کر سکتے ہیں؛ نتیجہ بالکل وہی ہوگا؛ البتہ اس مرتبہ $P_{b \rightarrow a} = |c_a(t)|^2$ حاصل ہوگا، جو نیچے زیریں سطح میں تحویل کا احتمال ہوگا۔

$$P_{b \rightarrow a}(t) = \left(\frac{|\phi| E_0}{\hbar} \right)^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} \quad (9.36)$$

(چونکہ ہم a اور b کو آپس میں بدل $(a \leftrightarrow b)$ رہے ہیں جو ω_0 کی جگہ $-\omega_0$ ڈالتا ہے، لہذا لازماً یہی نتیجہ حاصل ہوگا۔ مساوات ۹.۲۵ پر پہنچ کر اب ہم پہلا جزو چنتے ہیں جس کے نسب نامے $-\omega_0 + \omega$ ہوگا، باقی باب پہلے کی طرح ہے۔) لیکن اگر آپ رک کر سوچیں تو یہ ایک حیرت انگیز نتیجہ ہے: بالاحال میں پائے جانے والے ذرے پر روشنی کی شعاع ڈالنے سے ذرہ زیریں حال میں تحویل ہوتا ہے اور اس کا احتمال بالکل ٹھیک وہی ہوگا جو زیریں حال سے بالاحال تحویل کا ہے۔ اس عمل کو تحریک زدہ اخراج^{۱۵} کہتے ہیں، جس کی پیشگوئی آئنسٹائن نے کی تھی۔

تحرک زدہ انحرانج کی صورت میں برقن طیسی میدان جوہر سے $\hbar\omega$ توانائی کرتا ہے؛ ہم کہتے ہیں ایک نوریہ داخل ہوا اور دو نوریہ (ایک اصل جس نے تحویل پیدا کی اور دوسرا جو تحویل کی بدولت پیدا ہوا) باہر نکلے (شکل ۹.۲-ب)۔ اس طرح افزائش^{۱۶} کا امکان پیدا ہوتا ہے، چونکہ ایک بوتل میں بہت سارے جوہر، جو بالا حال میں ہوں، کو ایک آمدی نوریہ متحرک کے مسلسل تعامل^{۱۸} پیدا کرے گا؛ یوں پہلا نوریہ 2 نوریہ پیدا کرے گا، یہ نوریہ 4 پیدا کریں گے، وغیرہ۔ لیہر^{۱۹} اصول یہی ہے۔ دھیان رہے کہ (سیزر عمل کے لیے) ضروری ہے کہ جوہر کی اکثریت بالا حال میں پمپائی جائے (جسے آبادی^{۲۰} الثنائی کہتے ہیں)؛ چونکہ انخذاب (جو ایک نوریہ کم کرتا ہے) اور تحرک زدہ انحرانج (جو ایک پیدا کرتا ہے) بالمقابل ہوں گے، لہذا دونوں حالات کی برابر تعداد سے آغاز کر کے افزائش پیدا نہیں کی جاسکتی۔

(انخذاب اور تحرک شدہ انحرانج کے علاوہ) روشنی اور مادے کے باہم عمل کا تیسرا طریقہ بھی پایا جاتا ہے؛ اس کو خود بخود اخراج^{۲۱} کہتے ہیں۔ اس میں بیرونی برقن طیسی میدان، جو انحرانج پیدا کر سکتا ہے، کی عدم موجودگی میں ہیجان جوہر زیریں حال میں تحویل ہو کر ایک نوریہ خارج کرتا ہے (شکل ۹.۲-ج)۔ ہیجان حال سے جوہر کا زمینی حال میں تنزل عموماً آبی ذریعہ سے ہوتا ہے۔ پہلی نظر میں واضح نہیں کہ خود بخود انحرانج کیوں کر ہو گا۔ ساکن حال (اگرچہ ہیجان) جوہر کو کیا ضرورت پیش آتی ہے کہ وہ بیرونی اضطراب کی عدم موجودگی میں زمینی حال میں تحویل ہو، اسے وہیں عسر بھروسہ نہ چاہیے۔ درحقیقت، جوہر وہیں رہتا اگر اس پر کسی قسم کا بیرونی اضطراب اثر انداز نہ ہوتا۔ البتہ، کوانٹائی برقی حرکیات میں زمینی حال میں بھی میدان غیر صفر نہیں ہوتے؛ جیسا (مثال کے طور پر) ہارمونی مرتعش زمینی حال میں بھی غیر صفر توانائی ($\hbar\omega/2$) کا حاصل ہے۔ آپ تمام روشنی کو روک لیں، کمرے کو مطلق صفر حرارت پر لے جائیں، تب بھی کچھ برقن طیسی شعاع پائی جائے گی، اور یہی ”صفر نقطی“ انحرانج خود بخود انحرانج کا سبب بنتا ہے۔ اگر حبڑے دیکھا جائے تو تمام انحرانج تحرک شدہ انحرانج ہو گا۔ آپ کو یہ امتیاز کرنا ہو گا کہ آیا آپ میدان مبراہم کر رہے ہیں یا قدرتی میدان پایا جاتا ہے۔ اس نقطہ نظر سے یہ کلاسیکی انحرانجی عمل کے بالکل الٹ ہے، جہاں تمام انحرانج خود بخود ہوتا ہے اور تحرک شدہ انحرانج کا تصور نہیں پایا جاتا۔

کوانٹائی برقی حرکیات اس کتاب کی دسترس سے باہر ہے،^{۲۲} تاہم آئنشٹائن کی ایک خوبصورت دلیل ان تینوں (انخذاب، تحرک شدہ انحرانج اور خود بخود انحرانج) کا تعلق پیش کرتی ہے۔ آئنشٹائن نے خود بخود انحرانج کی وجہ (زمینی حال برقن طیسی میدان کا اضطراب) پیش نہیں کی، تاہم انکے نتائج ہمیں خود بخود انحرانج کا حساب کرنے کا مجاز بتاتی ہے، جس سے ہیجان جوہری حال کا قدرتی عرصہ حیات تلاش کیا جاسکتا ہے۔^{۲۳} البتہ ایسا کرنے سے پہلے، ہر طرف سے غیر یک رنگی، غیر تقطیب شدہ، غیر اتاتی برقن طیسی امواج کی آمد (جیسا

amplification^{۱۶}trigger^{۱۷}chain reaction^{۱۸}laser^{۱۹}population inversion^{۲۰}spontaneous emission^{۲۱}

^{۲۲} آئنشٹائن کا متالہ مساوات شرودنگر کی آمد سے قبل 1917 میں شائع ہوا۔ اس دلیل میں پلانک سیاہ جسمی کلیہ (مساوات ۵.۱۱۳) میں منظر عام پر آیا، کے ذریعہ کوانٹائی حرکیات داخل ہوتی ہے۔

^{۲۳} متبادل اشتقاق کے لئے سوال ۹.۸ دیکھیں۔

حقیقت میں ہوگا) سے جو ہر کے رد عمل پر بات کرتے ہیں؛ حراری شعاع میں جو ہر رکھنے سے ایسی صورتحال پیدا ہوگی۔

۹.۲.۳ غیر اتالی اضطراب

برقن طوسی موج کی کثافت توانائی درج ذیل ہے، جہاں E_0 ہمیشہ کی طرح برقی میدان کا محیط ہے۔^{۲۴}

$$(۹.۳۷) \quad u = \frac{\epsilon_0}{2} E_0^2$$

یوں حیرانی کی بات نہیں کہ تحویلی احتمال (مساوات ۹.۳۶) میدان کی کثافت توانائی کا راست متناسب ہے۔

$$(۹.۳۸) \quad P_{b \rightarrow a}(t) = \frac{2u}{\epsilon_0 \hbar^2} |\wp|^2 \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2}$$

تاہم یہ نتیجہ واحد ایک تعدد ω پر یکے رنگ^{۲۵} موج کے لیے درست ہوگا۔ عملی استعمال کے کئی نظاموں پر وسیع تعددی سرعت کی برقن طوسی امواج کی روشنی ڈالی جاتی ہے۔ ایسی صورت میں $\rho(\omega) d\omega \rightarrow u$ ہوگا، جہاں $\rho(\omega) d\omega$ تعددی سرعت $d\omega$ میں کثافت توانائی ہے، اور حالص تحویلی احتمال درج ذیل تکمل کا روپ اختیار کرے گا۔^{۲۶}

$$(۹.۳۹) \quad P_{b \rightarrow a}(t) = \frac{2}{\epsilon_0 \hbar^2} |\wp|^2 \int_0^\infty \rho(\omega) \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} d\omega$$

لہذا تو سین میں حبزوں کی ω_0 پر نوکدار چوٹی پائی جاتی ہے (شکل ۹.۲)، جبکہ عام طور پر $\rho(\omega)$ کافی چوڑا ہوگا، لہذا ہم $\rho(\omega)$ کی جگہ $\rho(\omega_0)$ لکھ کر اسے تکمل کے باہر منتقل کر سکتے ہیں۔

$$(۹.۴۰) \quad P_{b \rightarrow a}(t) \cong \frac{2|\wp|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_0) \int_0^\infty \frac{\sin^2[(\omega_0 - \omega)t/2]}{(\omega_0 - \omega)^2} d\omega$$

^{۲۴} برقن طوسی میدان میں فی اکائی حجم توانائی درج ذیل ہے۔

$$u = (\epsilon_2/2)E^2 + (1/2\mu_0)B^2$$

برقن طوسی موج کے لئے برقی اور مقناطیسی حصے برابر ہوں گے، لہذا

$$u = \epsilon_0 E^2 = \epsilon_0 E_0^2 \cos^2(\omega t)$$

ہوگا، اور چونکہ \cos^2 (یا \sin^2) کا اوسط $1/2$ ہے لہذا ایک مکمل پھیروے پر اوسط $(\epsilon_0/2)E_0^2$ ہوگا۔
monochromatic^{۲۵}

^{۲۶} مساوات ۹.۳۹ مندرج کرتی ہے کہ مختلف تعدد پر تحویل ایک دوسرے کے غیر تابع ہیں، لہذا کل تحویلی احتمال ان انفرادی احتمالات کا مجموعہ ہوگا۔ اگر مختلف حصے الٹاتے ہوں، تب ہمیں حیطوں $(c_b(t))$ سنہ کہ احتمالات $(|c_b(t)|^2)$ کا مجموعہ لینا ہوگا، اور اس میں حیطوں کے سرہموں کے علاوہ حاصل ضرب بھی پائے جاتے ہیں گے۔ ہم عملی استعمال میں ہر مرتبہ مندرج کرتے ہیں کہ اضطراب غیر اتالی ہے۔

متغیرات کو تبدیل کر کے $x \equiv (\omega_0 - \omega)t/2$ لکھ کر (اور چونکہ بنیادی طور پر مشکل باہر صفر ہی ہے) مکمل کی حدود کو $x = \pm\infty$ تک وسعت دے کر، اور قطعی مکمل کو جدول سے دیکھ کر:

$$(۹.۴۱) \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi$$

درج ذیل حاصل ہوتا ہے۔

$$(۹.۴۲) \quad P_{b \rightarrow a}(t) \cong \frac{\pi |\wp|^2}{\epsilon_0 \hbar^2} \rho(\omega_0) t$$

اس مرتبہ تحویلی احتمال t کا راستہ متناسب ہے۔ آپ نے دیکھا کہ یک رنگی اضطراب کے برعکس، غیر اتفاقی وسیع تعدد کی شعاع پلسٹیں کھاتا ہوا احتمال نہیں دیتی۔ بالخصوص، **تحویلی شرح** $R \equiv dP/dt$ اب ایک مستقل ہوگا۔

$$(۹.۴۳) \quad R_{b \rightarrow a} = \frac{\pi}{\epsilon_0 \hbar^2} |\wp|^2 \rho(\omega_0) \quad (\text{مستقل تحویلی شرح})$$

اب تک ہم فرض کرتے رہے ہیں کہ اضطرابی موج y رخ سے آمدی (شکل ۹.۳) اور z رخ تنظیم شدہ ہے۔ لیکن ہم اس صورت میں دلچسپی رکھتے ہیں جب جوہر پر شعاع ہر رخ سے آمدی ہو، اور اس میں ہر ممکن تنظیم پائی جاتی ہو؛ میدان کی توانائی $(\rho(\omega))$ ان مختلف انداز میں برابر تقسیم ہوگی۔ ہمیں $|\wp|^2$ کے بجائے $|\wp \cdot a_n|^2$ کی اوسط قیمت درکار ہوگی، جہاں (مادات ۹.۳۳ کو عمومیّت دیتے ہوئے) درج ذیل ہوگا،

$$(۹.۴۴) \quad \wp \equiv q \langle \psi_b | r | \psi_a \rangle$$

اور اوسط تمام تنظیم اور تمام آمدی رخ پر لیا جائے گا۔

اوسط درج ذیل طریقے سے حاصل کیا جاسکتا ہے: کروی محدودیوں منتخب کریں کہ شعاع کی حرکت کا رخ z محور پر ہو (تاکہ تنظیم xy سطح میں ہو) اور (اصل) سمتیہ p سطح yz میں پایا جاتا ہو (شکل ۹.۵)۔^{۲۸}

$$(۹.۴۵) \quad a_n = \cos \phi i + \sin \phi j, \quad \wp = \wp \sin \theta j + \wp \cos \theta k$$

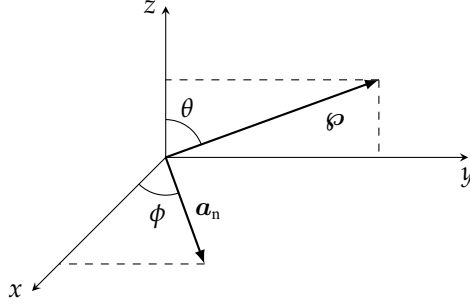
^{۲۸} میں \wp کو حقیقی کی طرح تصور کرتا ہوں، اگرچہ یہ عموماً مختلط ہوگا۔ درج ذیل کی بنا پر transition rate^{۲۷}

$$|\wp \cdot a_n|^2 = |(\wp \cos \theta) \cdot a_n + i(\wp \sin \theta) \cdot a_n|^2 = |(\wp \cos \theta) \cdot a_n|^2 + |(\wp \sin \theta) \cdot a_n|^2$$

ہم حقیقی اور خیالی حصوں کا حساب علیحدہ علیحدہ کر کے نتائج جمع کر سکتے ہیں۔ مادات ۹.۴۷ میں مطلق قیمت علامت دو کام کر رہی ہے، یہ سمتیہ کی مقدار اور مختلط حیثیت:

$$|\wp|^2 = |\wp_x|^2 + |\wp_y|^2 + |\wp_z|^2$$

ظاہر کرتی ہے۔



شکل ۹.۵: محدد برائے $|\phi \cdot a_n|^2$ کی اوسط زنی۔

تب

$$\phi \cdot a_n = \phi \sin \theta \sin \phi$$

اور درج ذیل ہوگا۔

$$\begin{aligned} |\phi \cdot a_n|_{\text{اوسط}}^2 &= \frac{1}{4\pi} \int |\phi|^2 \sin^2 \theta \sin^2 \phi \, d\theta \, d\phi \\ (9.46) \quad &= \frac{|\phi|^2}{4\pi} \int_0^\pi \sin^3 \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} \sin^2 \phi \, d\phi = \frac{1}{3} |\phi|^2 \end{aligned}$$

ماخوذ: ہر جانب سے آمدی، غیر قطبی، غیر اتالی شعاع کے زیر اثر حال b سے حال a میں تحرک شدہ احراج کی تحویلی شرح درج ذیل ہوگی،

$$(9.47) \quad R_{b \rightarrow a} = \frac{\pi}{3\epsilon_0 \hbar^2} |\phi|^2 \rho(\omega_0)$$

جہاں دو حالات کے بیچ برقی جفت قطب معیار اثر کا تالی رکن ϕ ہوگا (ساوات ۹.۴۴) اور $(E_b - E_a) / \hbar$ پرنی اکائی تعدد میدان میں کثافت توانائی $\rho(\omega_0)$ ہوگی۔^{۲۹}

۹.۳ خود باخود احراج

۹.۳.۱ آئنشٹائن عدی سر A اور B

فرض کریں ایک برتن میں زیریں حال ψ_a میں N_a اور بالا حال ψ_b میں N_b جوہر پائے جاتے ہوں۔ خود باخود احراجی شرح کو A لیتے ہوئے،^{۳۰} اکائی وقت میں بالا حال سے $N_b A$ ذرات خود باخود عمل کے ذریعہ

^{۲۹} تابع وقت نظریہ اضطراب کے فرم کے سنہ قانون کی ایک مخصوص صورت ہے، جو کہتا ہے کہ تحویلی شرح، اضطرابی تحفہ کے متالی ارکان کے مربع اور تحویلی تعدد پر اضطراب کے زور کاراست۔ متناسب ہوگا۔

^{۳۰} میں عام طور پر تحویلی شرح کے لئے علامت R استعمال کرتا ہوں، لیکن اس سیاق و سباق میں، باقی لوگوں کی طرح، میں بھی آئنشٹائن کی علامت استعمال کروں گا۔

ٹکلیں گے۔^{۳۱} جیسا ہم (مساوات ۹.۴۷) دیکھ چکے ہیں تحرک شدہ احسراج کی تحویلی شرح برقیاتی میدان کی کثافت توانائی، $B_{ab}\rho(\omega_0)$ کے راست متناسب ہوگی؛ یوں بالاحال سے تحرک شدہ احسراج کی بنا پر اکائی وقت میں $N_b B_{ba}\rho(\omega_0)$ ذرات ٹکلیں گے۔ اسی طرح انجذابی شرح $\rho(\omega_0)$ کی راست متناسب ہے، جسے ہم $B_{ab}\rho(\omega_0)$ کہتے ہیں؛ لہذا اکائی وقت میں $N_a B_{ab}\rho(\omega_0)$ ذرات بالاحال میں شامل ہوں گے۔ ان تمام کو یکجا کر کے درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$(۹.۴۸) \quad \frac{dN_b}{dt} = -N_b A - N_b B_{ba}\rho(\omega_0) + N_a B_{ab}\rho(\omega_0)$$

فرض کریں یہ جوہر محیط میدان کے ساتھ حراری توازن میں ہیں، لہذا ہر سطح میں ذرات کی تعداد مستقل ہوگی۔ یوں $dN_b/dt = 0$ لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۹.۴۹) \quad \rho(\omega_0) = \frac{A}{(N_a/N_b)B_{ab} - B_{ba}}$$

ہم بنیادی شماریاتی میکانیات سے جانتے ہیں کہ، درج حرارت T پر حراری توازن میں، توانائی E کے حاصل ذرات، کی تعداد بولٹزمن^{۳۲} $e^{(-E/k_B T)}$ کے راست متناسب ہوگی؛ یوں

$$(۹.۵۰) \quad \frac{N_a}{N_b} = \frac{e^{-E_a/k_B T}}{e^{-E_b/k_B T}} = e^{\hbar\omega_0/k_B T}$$

لہذا درج ذیل ہوگا۔

$$(۹.۵۱) \quad \rho(\omega_0) = \frac{A}{e^{\hbar\omega_0/k_B T} B_{ab} - B_{ba}}$$

لیکن پلانک کا سیاہ جسی کلیہ (مساوات ۵.۱۱۳) ہمیں حراری شعاع کی کثافت توانائی دیتی ہے۔

$$(۹.۵۲) \quad \rho(\omega) = \frac{\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

ان دونوں ریاضی فستروں کا موازنہ کرنے سے

$$(۹.۵۳) \quad B_{ab} = B_{ba}$$

اور درج ذیل حاصل ہوگا۔

$$(۹.۵۴) \quad A = \frac{\omega_0^3 \hbar}{\pi^2 c^3} B_{ba}$$

^{۳۱} ذرات کی تعداد N_a اور N_b بہت بڑی تصور کریں، لہذا ہم انہیں وقت کے استمراری تقاضات تصور کر کے شماریاتی اتار چڑھاؤ نظر انداز کرتے ہیں۔

^{۳۲} Boltzmann factor

مساوات ۹.۵۳ اس بات کی تصدیق کرتی ہے جو ہم پہلے سے جانتے تھے: تحرک شدہ اخراج کی تحویلی شرح وہی ہے جو اخذ اب کی ہے۔ 1907ء میں یہ ایک حیرت کن نتیجہ تھا جس میں آئنسٹائن کو اس بات پر مجبور کیا کہ وہ کلیہ پلانک حاصل کرنے کی خاطر تحرک شدہ اخراج کا تصور پیدا کرے۔ تاہم ہم پہلے سے مساوات ۹.۵۴ میں دلچسپی رکھتے ہیں، جو ہمیں تحرک شدہ اخراجی شرح $(B_{ba}\rho(\omega_0))$ ، جسے ہم پہلے سے جانتے ہیں، کی صورت میں خود بخود اخراجی شرح (A) دیتی ہے۔ جسے ہم جانتا چاہتے ہیں مساوات ۹.۴ سے

$$(9.55) \quad B_{ba} = \frac{\pi}{3\epsilon_0\hbar^2} |\phi|^2$$

لیتے ہیں، لہذا خود بخود اخراجی شرح درج ذیل ہوگی۔

$$(9.56) \quad A = \frac{\omega_0^3 |\phi|^2}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3}$$

سوال ۹.۸: نیچے کی طرف تحویل میں خود بخود اخراج اور حراری تحرک شدہ اخراج (وہ تحرک شدہ اخراج جو سیاہ جسم شعاع کی بنا پر ہو) میں متبادل ہوتا ہے۔ دکھائیں کہ رہائشی درجہ حرارت $(T = 300 \text{ K})$ پر $5 \times 10^{12} \text{ Hz}$ سے بہت کم تعدادوں پر حراری تحرک شدہ اخراج غالب ہوگا، جبکہ $5 \times 10^{12} \text{ Hz}$ سے بہت زیادہ تعدادوں پر خود بخود اخراج غالب ہوگا۔ بصری روشنی کے لیے کونسا غالب ہوگا؟

سوال ۹.۹: برقیاتی میدان کی زمینی حال کثافت توانائی $\rho_0(\omega)$ جانتے ہوئے خود بخود اخراجی شرح در حقیقت تحرک شدہ اخراجی شرح (مساوات ۹.۴۷) ہوگی، لہذا آئنسٹائن عددی سر A اور B جانتے بغیر آپ خود بخود اخراجی شرح (مساوات ۹.۵۶) اخذ کر سکتے ہیں۔ اگر چہ ایسا کرنے کے لیے کوانٹائی برقی حرکیات بروئے کار لانی ہوگی، تاہم اگر آپ یہ قبول کریں کہ زمینی حال میں ایک نوری فی انداز پایا جاتا ہے، تب اس کو اخذ کرنا بہت آسان ہوگا:

۱. مساوات ۵.۱۱۱ کی جگہ $N_\omega = d_k$ پر کر کے $\rho_0(\omega)$ اخذ کریں (زیادہ تعداد پر اس کلیہ کو ناکارہ ہونا ہوگا اور نہ کل "حالاتی توانائی" لامتناہی ہوگی؛ تاہم یہ کہانی کسی دوسرے دن کے لیے چھوڑتے ہیں)۔

ب. اپنے نتیجہ کے ساتھ مساوات ۹.۴۷ استعمال کر کے خود بخود اخراجی شرح حاصل کریں۔ مساوات ۹.۵۶ کے ساتھ موازنہ کریں۔

۹.۳.۲ ہیجان حال کا عرصہ حیات

مساوات ۹.۵۶ ہمارا بنیادی نتیجہ ہے: یہ تحرک شدہ اخراج کی تحویلی شرح دیتا ہے۔ اب فرض کریں کسی طرح آپ بہت بڑی تعداد میں جوہر کو ہیجان حال منتقل کرتے ہیں۔ خود بخود اخراج کے نتیجے میں، وقت کے ساتھ یہ تعداد گھٹے گی؛ بالخصوص، دورانہ dt میں جوہروں کی تعداد میں $A dt$ کمی ہوگی:

$$(9.57) \quad dN_b = -AN_b dt$$

(جہاں ہم فرض کرتے ہیں کہ مسزید جوہر ہیبان انگیز نہیں کیے حبار ہے ہیں)۔^{۳۳} اس کو $N_b(t)$ کے لیے حل کرتے ہیں:

$$(۹.۵۸) \quad N_b(t) = N_b(0)e^{-At}$$

بظاہر، ہیبان حال میں تعداد، قوت نمائی طور پر وقتی مستقل:

$$(۹.۵۹) \quad \tau = \frac{1}{A} \quad (\text{عمر حیات})$$

کے ساتھ کم ہوگی، جسے اس حال کا عرصہ حیات^{۳۴} کہتے ہیں۔ ایک عرصہ حیات میں $N_b(t)$ کی قیمت ابتدائی قیمت کی $1/e \approx 0.368$ گنتا ہوگی۔

میں اب تک فرض کرتا آ رہا ہوں کہ نظام میں صرف دو حالات پائے جاتے ہیں، تاہم علامتیت سادہ رکھنے کی خاطر ایسا کیا گیا؛ تحریک شدہ انحراج کا کلیہ (مساوات ۹.۵۶)، دیگر متاثرہ رسائی حالات سے قطع نظر، $\psi_a \rightarrow \psi_b$ کی تحویلی شرح دیتا ہے (سوال ۹.۱۵ دیکھیں)۔ عمومی طور پر ایک ہیبان جوہر کے کئی مختلف انداز تزلزل^{۳۵} ہوں گے (یعنی: ψ_b کا تنزل بہت سارے زیریں توانائی حالات ψ_{a1} ، ψ_{a2} ، ψ_{a3} ، وغیرہ میں ہو سکتا ہے)۔ ایسی صورت میں تمام تحویلی شرحیں جمع ہو کر درج ذیل خالص عرصہ حیات دیں گی۔

$$(۹.۶۰) \quad \tau = \frac{1}{A_1 + A_2 + A_3 + \dots}$$

مثال ۹.۱: فرض کریں ایک اسپرنگ کے ساتھ باندھا ہوا بار q محور x پر ارتعاش کا پابند ہے۔ فرض کریں یہ حال $|n\rangle$ (مساوات ۲.۶۷) سے آغاز کر کے خود بخود انحراج کے ذریعے حال $|n'\rangle$ کو پہنچتا ہے۔ مساوات ۹.۴۴ کے تحت درج ذیل ہوگا۔

$$\wp = q \langle n|x|n'\rangle i$$

آپ نے سوال ۳.۳۳ میں x کے متاثری ارکان:

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

تلاش کئے، جہاں مرتعش کا قدرتی تعدد ω ہے۔ (مجھے تحریک شدہ انحراج کے تعدد کے لیے اس حرف کی ضرورت اب پیش نہیں آئے گی)۔ ہم انحراج کی بات کر رہے ہیں لہذا n' لازماً n سے نیچے ہوگا؛ یوں ہمارے اس مقصد کے لئے درج ذیل ہوگا۔

$$(۹.۶۱) \quad \wp = q \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega}} \delta_{n',n-1} i$$

^{۳۳} یہ حراری توازن نہیں ہے جس پر گزشتہ حصے میں بات کی گئی۔ یہاں ہم فرض کر رہے ہیں کہ جوہروں کو ہیبان حال میں اٹھایا گیا ہے اور یہ اب واپس توازن سطحوں کو لوٹ رہے ہیں۔
lifetime^{۳۴}
decay modes^{۳۵}

بظاہر ”سیڑھی“ پر صرف ایک پایہ نیچے تحویل ممکن ہے $(n - n' = 1)$ ؛ اور اخراجی نوریہ کا تعدد درج ذیل ہے۔

$$(۹.۶۲) \quad \omega_0 = \frac{E_n - E'_n}{\hbar} = \frac{(n + 1/2)\hbar\omega - (n' + 1/2)\hbar\omega}{\hbar} = (n - n')\omega = \omega$$

کوئی حیرانی کی بات نہیں، نظام کلاسیکی ارتعاشی تعدد پر شعاع ریز ہے۔ تحویلی شرح (مساوات ۹.۵۶) درج ذیل

$$(۹.۶۳) \quad A = \frac{nq^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3}$$

اور n ویں ساکن حال کا عمر صحت درج ذیل ہوگا۔

$$(۹.۶۴) \quad \tau_n = \frac{6\pi\epsilon_0 mc^3}{nq^2\omega^2}$$

چونکہ ہر ایک اخراجی نوریہ $\hbar\omega$ توانائی ساتھ لے جاتا ہے، لہذا اشعاعی طاقت $A\hbar\omega$ ہوگی

$$P = \frac{q^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3} (n\hbar\omega)$$

یا، n ویں حال میں مرتعش کی توانائی $E = (n + 1/2)\hbar\omega$ لیتے ہوئے درج ذیل ہوگی۔

$$(۹.۶۵) \quad P = \frac{q^2\omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3} \left(E - \frac{1}{2}\hbar\omega \right)$$

(ابتدائی) توانائی E کے کوانٹائی مرتعش کی اوسط اشعاعی طاقت اتنی ہوگی۔

موازنہ کی حنا طر اسی طاقت کے کلاسیکی مرتعش کی اوسط اشعاعی طاقت کا تعین کرتے ہیں۔ کلاسیکی برقی حرکیات کے تحت مسرع بار q کی اشعاعی طاقت کلیہ لارمر^{۳۶}

$$(۹.۶۶) \quad P = \frac{q^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3}$$

دیتا ہے۔ ہارمونی مرتعش $x(t) = x_0 \cos(\omega t)$ کا حیظ x_0 ، اور اسراع $a = -x_0\omega^2 \cos(\omega t)$ ہوگا۔ ایک مکمل پھیرے پر اوسط درج ذیل ہوگا۔

$$P = \frac{q^2 x_0^2 \omega^4}{12\pi\epsilon_0 c^3}$$

لیکن اس مرتعش کی توانائی $x_0^2 = 2E/m\omega^2$ ہے، لہذا $x_0^2 = 2E/m\omega^2$ ہوگا، جس سے درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$P = \frac{q^2 \omega^2}{6\pi\epsilon_0 mc^3} E \quad (9.16)$$

توانائی E کا کلاسیکی مرتعش اوسطاً اتنی اشعاعی طاقت دے گا۔ کلاسیکی حد ($\hbar \rightarrow 0$) میں کلاسیکی اور کوانٹائی کلیات آپس میں متفق ہیں؛^{۳۷} البتہ زمینی حال کو کوانٹائی کلیہ (مساوات ۹.۶۵) تحفظ دیتا ہے: اگر $E = (1/2)\hbar\omega$ ہو تب مرتعش شعاع ریز نہیں ہوگا۔ □

سوال ۹.۱۰: ہیجان حال کی نصف حیات $(t_{1/2})^*$ سے مراد وہ دورانیہ ہے جس میں بڑی تعداد کے جوہروں میں سے نصف تحویل کرتے ہوں۔ نصف حیات $t_{1/2}$ اور (حال کے) ”عمر حیات“ τ کے بیچ رشتہ تلاش کریں۔

سوال ۹.۱۱: ہائیڈروجن کے چاروں $n = 2$ حالات کے لیے عمر حیات (سیکنڈوں میں) تلاش کریں۔ اشارہ: آپ کو $\langle \psi_{100}|x|\psi_{200} \rangle$ ، $\langle \psi_{100}|y|\psi_{211} \rangle$ ، وغیرہ طرز کے متوالی ارکان کی قیمتیں تلاش کرنی ہوں گی۔ یاد رہے کہ $x = r \sin \theta \cos \phi$ ، $y = r \sin \theta \sin \phi$ اور $z = r \cos \theta$ ہیں۔ ان میں سے زیادہ تر کمالات صفر کے برابر ہیں، لہذا احاب شروع کرنے سے پہلے ان پر ایک گہری نظر ضرور ڈالیں۔ جواب: سوائے ψ_{200} جو لامتناہی ہے، باقی تمام کے لیے 1.60×10^{-9} سیکنڈ ہوگا۔

۹.۳.۳ قواعد انتخاب

خود با خود احسراجی شرح درج ذیل روپ کے متوالی ارکان معلوم کر کے حاصل کی جاسکتی ہے۔

$$\langle \psi_b | \mathbf{r} | \psi_a \rangle$$

اگر آپ نے سوال ۹.۱۱ حل کیا ہو (اگر حل نہیں کیا، اسی وقت پہلے اس کو حل کریں!) تو آپ نے دیکھا ہوگا کہ یہ مقداریں عموماً صفر ہوتی ہیں، اور کیا بہتر ہوگا اگر ہم پہلے سے جان سکیں کہ کون سے کمالات صفر دیں گے، تاکہ ہم اپنا وقت غیر ضروری کمالات حل کرنے میں ضائع نہ کریں۔ فرض کریں ہم ہائیڈروجن کی طرح کے نظام میں دلچسپی رکھتے ہیں، جس کی ہیملٹنی کروی متشاکلی ہے۔ ایسی صورت میں ہم حالات کو عمومی کوانٹائی اعداد n ، ℓ ، اور m سے ظاہر کر سکتے ہیں اور متوالی ارکان درج ذیل ہوں گے۔

$$\langle n' \ell' m' | \mathbf{r} | n \ell m \rangle$$

زاویائی معیاری حرکت مقابلیت رشتے اور زاویائی معیاری حرکت عاملین کی ہر مشی پن مل کر اس مقدار پر طاقستور پابندیاں عائد کرتے ہیں۔

^{۳۷} درحقیقت، P کو زمینی حال سے زائد توانائی کی صورت میں لکھیں تو دونوں کلیات متشاکل ہوں گے۔
half-life^{۳۸}

انتخابی قواعد برائے m اور m' :

ہم پہلے x ، y ، اور z کے ساتھ L_z کے مقابلہ پر غور کرتے ہیں جنہیں باب ۴ میں حاصل کیا گیا (مساوات ۴.۱۲۲ دیکھیں)۔

$$(9.۶۸) \quad [L_z, x] = i\hbar y, \quad [L_z, y] = -i\hbar x, \quad [L_z, z] = 0$$

ان میں تیسرے درجہ ذیل حاصل ہوتا ہے۔

$$\begin{aligned} 0 &= \langle n' \ell' m' | [L_z, z] | n \ell m \rangle = \langle n' \ell' m' | L_z z - z L_z | n \ell m \rangle \\ &= \langle n' \ell' m' | [(m' \hbar) z - z (m \hbar)] | n \ell m \rangle = (m' - m) \hbar \langle n' \ell' m' | z | n \ell m \rangle \end{aligned}$$

ماخوذ:

$$(9.۶۹) \quad \langle n' \ell' m' | z | n \ell m \rangle = 0 \quad \text{یا} \quad m' = m$$

لہذا، مساوائے $m' = m$ کی صورت میں، z کے متعلقہ ارکان ہر صورت صفر ہوں گے۔

ساتھ ہی، x کے ساتھ L_z کا مقابلہ درج ذیل دے گا۔

$$\begin{aligned} \langle n' \ell' m' | [L_z, x] | n \ell m \rangle &= \langle n' \ell' m' | (L_z x - x L_z) | n \ell m \rangle \\ &= (m' - m) \hbar \langle n' \ell' m' | x | n \ell m \rangle = i\hbar \langle n' \ell' m' | y | n \ell m \rangle \end{aligned}$$

ماخوذ:

$$(9.۷۰) \quad (m' - m) \langle n' \ell' m' | x | n \ell m \rangle = i \langle n' \ell' m' | y | n \ell m \rangle$$

یوں، آپ y کے متعلقہ ارکان کو x کے مطابق متعلقہ ارکان سے حاصل کر سکتے ہیں، اور آپ کو کبھی بھی y کے متعلقہ ارکان کے حساب کی ضرورت پیش نہیں آئے گی۔

اور آخر میں، y کے ساتھ L_z کا مقابلہ درج ذیل دیتا ہے۔

$$\begin{aligned} \langle n' \ell' m' | [L_z, y] | n \ell m \rangle &= \langle n' \ell' m' | (L_z y - y L_z) | n \ell m \rangle \\ &= (m' - m) \hbar \langle n' \ell' m' | y | n \ell m \rangle = -i\hbar \langle n' \ell' m' | x | n \ell m \rangle \end{aligned}$$

ماخوذ:

$$(9.۷۱) \quad (m' - m) \langle n' \ell' m' | y | n \ell m \rangle = -i \langle n' \ell' m' | x | n \ell m \rangle$$

بالخصوص، مساوات ۹.۷۰ اور مساوات ۹.۷۱ کو ملا کر:

$$(m' - m)^2 \langle n' \ell' m' | x | n \ell m \rangle = i(m' - m) \langle n' \ell' m' | y | n \ell m \rangle = \langle n' \ell' m' | x | n \ell m \rangle$$

اہلذا،

$$(۹.۷۲) \quad \langle n' \ell' m' | x | n \ell m \rangle = \langle n' \ell' m' | y | n \ell m \rangle = 0 \quad \text{یا} \quad (m' - m)^2 = 1$$

ہوگا۔ مساوات ۹.۶۹ اور مساوات ۹.۷۲ سے ہمیں m کے انتخاب قواعد:^{۳۹}

$$(۹.۷۳) \quad \Delta m = 1, 0, -1 \quad \text{تحویل صرف اس صورت ہوگی جب یہ ہو:}$$

حاصل ہوتے ہیں۔ اس نتیجہ (کو اخذ کرنا آسان نہیں ہوتا، تاہم اس) کو سمجھنا آسان ہے۔ آپ کو یاد ہوگا، نوریہ چکر 1 کا حاصل ہے، لہذا اس کی m قیمت 1، 0، یا -1 ہو سکتی ہے: "زاویائی معیار حرکت کے z جزو کی بقا کے تحت نوریہ جو کچھ لے کر جاتا ہے، جو ہر اتن کچھ کھوئے گا۔

انتخابی قواعد برائے ℓ اور ℓ' :

آپ سے سوال ۹.۱۲ میں درج ذیل مقلبت رشتہ اخذ کرنے کا کہا گیا۔

$$(۹.۷۴) \quad [L^2, [L^2, r]] = 2\hbar^2(rL^2 + L^2r)$$

ہمیشہ کی طرح، ہم اس مقلب کو $\langle n' \ell' m' | n \ell m \rangle$ کے پیچ لپیٹ کر انتخابی قواعد اخذ کرتے ہیں۔

$$\begin{aligned} \langle n' \ell' m' | [L^2, [L^2, r]] | n \ell m \rangle &= 2\hbar^2 \langle n' \ell' m' | (rL^2 + L^2r) | n \ell m \rangle \\ &= 2\hbar^4 [\ell(\ell+1) + \ell'(\ell'+1)] \langle n' \ell' m' | r | n \ell m \rangle \\ &= \langle n' \ell' m' | (L^2[L^2, r] - [L^2, r]L^2) | n \ell m \rangle \\ &= \hbar^2 [\ell'(\ell'+1) - \ell(\ell+1)] \langle n' \ell' m' | [L^2, r] | n \ell m \rangle \\ &= \hbar^2 [\ell'(\ell'+1) - \ell(\ell+1)] \langle n' \ell' m' | (L^2r - rL^2) | n \ell m \rangle \\ (۹.۷۵) \quad &= \hbar^4 [\ell'(\ell'+1) - \ell(\ell+1)]^2 \langle n' \ell' m' | r | n \ell m \rangle \end{aligned}$$

ماخوذ:

$$(۹.۷۶) \quad 2[\ell(\ell+1) + \ell'(\ell'+1)] = [\ell'(\ell'+1) - \ell(\ell+1)]^2 \quad \text{یا} \quad \langle n' \ell' m' | r | n \ell m \rangle = 0 \quad \text{یا پھر}$$

ہوگا، لیکن

$$[\ell'(\ell'+1) - \ell(\ell+1)] = (\ell' + \ell + 1)(\ell' - \ell)$$

selection rules^{۴۰}

"جب قطبی محور حرکت کے رخ کے ساتھ ساتھ ہو، درمیانی قیمت نہیں پائی جاتی، اور اگر آپ غیر متابع نوری حالات کی تعداد میں دلچسپی رکھتے ہوں، تو جواب 2 سے 3 ہے۔ البتہ، اگر یہاں ضروری نہیں کہ نوریہ z محور کے رخ حرکت کرتا ہو، لہذا تینوں قیمتیں ممکن ہیں۔

اور

$$2[\ell(\ell+1) + \ell'(\ell'+1)] = (\ell' + \ell + 1)^2 + (\ell' - \ell)^2 - 1$$

لکھے جاسکتے ہیں، لہذا مساوات ۹.۷۶ میں پہلی شرط کو درج ذیل روپ میں لکھا جاسکتا ہے۔

$$[(\ell' + \ell + 1)^2 - 1][(\ell' - \ell)^2 - 1] = 0 \quad (9.77)$$

ان میں پہلا (بیاں) جزو ضربی صفر نہیں ہو سکتا ہے (ماسوائے اس صورت جب $\ell' = \ell = 0$ ہو؛ اس کمزوری سے سوال ۹.۱۳ میں چھکارا حاصل کیا گیا ہے)، لہذا یہ شرط $\ell' = \ell \pm 1$ کی سادہ روپ اختیار کرتی ہے۔ یوں ℓ کے انتخابی قواعد:

$$\Delta\ell = \pm 1 \quad \text{تحویل صرف اس صورت ہوگا جب یہ ہو:} \quad (9.78)$$

حاصل ہوتا ہے۔ اگرچہ اس نتیجہ کو اخذ کرنا آسان کام نہیں ہے، لیکن اس کی تشریح آسان ہے۔ نوریہ چکر 1 کا حاصل ہے، لہذا ازاد پائی معیار حرکت جمع کرنے کے قواعد $\ell' = \ell + 1$ ، یا $\ell' = \ell - 1$ کی اجازت دیں گے (برقی جفت قطبی اشعاع کے لیے درمیانی صورت نہیں پائی جاتی، اگرچہ زاویائی معیار حرکت کی بقا اس کی اجازت دیتی ہے)۔

یوں ظاہر ہے کہ خود بخود احسراج کے ذریعہ تمام زیریں توانائی حالات تک تحویل ممکن نہیں ہوگی ان میں سے کئی انتخابی قواعد کے تحت ممنوع ہیں۔ شکل ۹.۶ میں ہائیڈروجن کے ابتدائی چار بوہر سطحوں کے لیے اجزائی تحویلات دکھائے گئے ہیں۔ دھیان رہے کہ $2S$ حال (ψ_{200}) اسی جگہ ”پھنسا“ ہے؛ چونکہ $\ell = 1$ کا کوئی بھی زیریں توانائی حال نہیں پایا جاتا، لہذا یہ تسنزل پذیر نہیں ہوگا۔ اس کو نازکے مستحکم^{۲۱} احوال کہتے ہیں، اور یقیناً اس کا عرصہ حیات، مثلاً، $2P$ حالات (ψ_{210} ، ψ_{211} اور ψ_{21-1}) سے، کافی لمبا ہے۔ نازک مستحکم حالات بھی آخر کار تصادم کی بنا پر، یا (جنہیں گسراہ کن نام دیا گیا ہے) ممنوعہ تحویلات^{۲۲} کی بنا پر (سوال ۹.۲۱)، یا متعدد نوری احسراج کی بنا پر، تسنزل پذیر ہوں گے۔

سوال ۹.۱۲: مساوات ۹.۷۴ میں دی گئی مقلوبی رشتہ ثابت کریں۔ اشارہ: پہلے درج ذیل دکھائیں۔

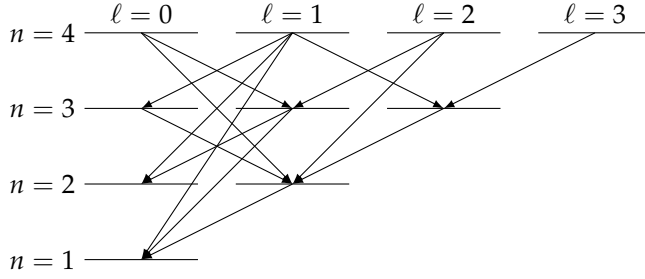
$$[L^2, z] = 2i\hbar(xL_y - yL_x - i\hbar z)$$

اس کے ساتھ $\mathbf{r} \cdot \mathbf{L} = \mathbf{r} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = 0$ استعمال کر کے درج ذیل دکھائیں۔

$$[L^2, [L^2, z]] = 2\hbar^2(zL^2 + L^2z)$$

z سے \mathbf{r} تک عمومیت دینا ایک آسان کام ہے۔

سوال ۹.۱۳: دکھائیں کہ $\ell' = \ell = 0$ کی صورت میں $\langle n'\ell'm' | \mathbf{r} | n\ell m \rangle = 0$ ہوگا۔ یوں مساوات ۹.۷۸ میں درپیش ”کمزوری“ ختم ہوتی ہے۔



شکل ۹.۶: ہائیڈروجن کی اولین چار سطحوں کا اجازتی تنزل۔

سوال ۹.۱۴: ہائیڈروجن کے $n = 3, \ell = 0, m = 0$ حال میں ایک الیکٹران زمینی حال تک (برقی جفت قطبی) تحویلی تسلسل کے ذریعہ پہنچتا ہے۔

۱. اس تنزل کے لیے کونسی راہیں کھلی ہیں؟ انہیں درج ذیل صورت میں پیش کریں۔

$$|300\rangle \rightarrow |n\ell m\rangle \rightarrow |n'\ell'm'\rangle \rightarrow \dots \rightarrow |100\rangle$$

ب. اگر آپ کے پاس، اس حال میں جو ہروں سے بھرا ہوا ایک بوتل ہو، تب ہر راہ سے کتنا حصہ گزرے گا؟

ج. اس حال کا عرصہ حیات کیا ہوگا؟ اشارہ: پہلی تحویل کے بعد یہ حال $|300\rangle$ میں نہیں ہوگا، لہذا ہر تسلسل کا صرف پہلا قدم، عرصہ حیات کے حصول میں کام آئے گا۔ متعدد تحویلی راستوں کی صورت میں تمام تحویلی شرحوں کا مجموعہ لینا ہوگا۔

مزید سوالات برائے باب ۹

سوال ۹.۱۵: متعدد سطحی نظام کے لیے مساوات ۹.۱ اور مساوات ۹.۲

$$(9.49) \quad H_0 \psi_n = E_n \psi_n, \quad \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}$$

کو عموماً دیتے ہوئے تابع وقت نظریہ اضطراب مرتب کریں۔ لمحہ $t = 0$ پر ہم اضطراب $H'(t)$ چالو کرتے ہیں؛ یوں کل ہیملٹنی درج ذیل ہوگی۔

$$(9.80) \quad H = H_0 + H'(t)$$

۱. مساوات ۹.۶ کو درج ذیل تقییمی روپ دیں

$$(9.81) \quad \Psi(t) = \sum c_n(t) \psi_n e^{-iE_n t / \hbar}$$

اور دکھائیں کہ

$$(۹.۸۲) \quad \dot{c}_m = -\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n H'_{mn} e^{i(E_m - E_n)t/\hbar}$$

ہوگا، جہاں H'_{mn} درج ذیل ہے۔

$$(۹.۸۳) \quad H'_{mn} \equiv \langle \psi_m | H' | \psi_n \rangle$$

ب. اگر نظام حال ψ_N سے آغاز کرے، تو دکھائیں کہ (اول رتبی نظریہ اضطراب میں)

$$(۹.۸۴) \quad c_N(t) \cong 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{NN}(t') dt'$$

اور درج ذیل ہوگا۔

$$(۹.۸۵) \quad c_m(t) \cong -\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{mN}(t') e^{i(E_m - E_N)t'/\hbar} dt' \quad (m \neq N)$$

ج. فرض کریں، (لمحہ $t = 0$ پر چالو اور بعد میں لمحہ t پر منقطع کرنے کے علاوہ) H' مستقل ہے۔ حال N سے حال M جہاں $M \neq N$ ہے، میں تحویل کے احتمال کو t کا تفاعل لکھیں۔ جواب:

$$(۹.۸۶) \quad 4 \left| H'_{MN} \right|^2 \frac{\sin^2[(E_N - E_M)t/2\hbar]}{(E_N - E_M)^2}$$

د. فرض کریں H' وقت کا سائن تفاعل: $H' = V \cos(\omega t)$ ہے۔ عمومی مفروضے فرض کرتے ہوئے دکھائیں کہ صرف توانائی $E_M = E_N \pm \hbar\omega$ کے حالات میں تحویل ہو سکتی ہے اور ان کا احتمال درج ذیل ہے۔

$$(۹.۸۷) \quad P_{N \rightarrow M} = |V_{MN}|^2 \frac{\sin^2[(E_N - E_M \pm \hbar\omega)t/2\hbar]}{(E_N - E_M \pm \hbar\omega)^2}$$

ه. فرض کریں کہ متعدد سطحی نظام پر غیر اتافی برقی طیسی روشنی ڈالی جاتی ہے۔ حصہ ۹.۲.۳ کو دیکھتے ہوئے دکھائیں کہ تھرمک شدہ اخراج کی تحویلی شرح وہی دو سطحی نظام کا کلیہ (مساوات ۹.۴۷) دیگا۔

سوال ۹.۱۶: عددی سر $c_m(t)$ کو رتبہ اول تک سوال ۹.۱۵ کے جزو-ج اور جزو-د کے لیے تلاش کریں۔ معمولی شرط:

$$(۹.۸۸) \quad \sum_m |c_m(t)|^2 = 1$$

کی تصدیق کر کے، تفساد اگر موجود ہو، پر تبصرہ کریں۔ فرض کریں آپ ابتدائی حال ψ_N میں رہنے کا احتمال جاننا چاہتے ہیں؛ کیا $|c_N(t)|^2$ یا $1 - \sum_{m \neq N} |c_m(t)|^2$ کا استعمال، بہتر ثابت ہوگا؟

سوال ۹.۱۷: لامستثنائی چوکور کنویں کے N ویں حال میں (وقت $t = 0$ پر) ایک ذرہ آغاز کرتا ہے۔ وقتی طور پر کنویں کی تہ بلند ہو کر واپس اپنی جگہ پہنچتی ہے، جس کے تحت کنویں کے اندر مخفیہ یکساں ضرور لیکن تابع وقت ہوگا: $V_0(t)$ ، جہاں $V_0(0) = V_0(T) = 0$ ہوگا۔

۱. مساوات ۱۹.۸۲ استعمال کر کے $c_m(t)$ کی ٹھیک ٹھیک قیمت دریافت کریں، اور دکھائیں کہ تفاعل موج کی ہیئت تبدیل ہوگی لیکن کوئی تحویل نہیں ہوگی۔ تفاعل $V_0(t)$ کی صورت میں تبدیلی ہیئت، $\psi(T)$ ، تلاش کریں۔

ب. اسی مسئلے کو رتبہ اول نظریہ اضطراب سے حل کر کے دونوں نتائج کا موازنہ کریں۔

تبصرہ: جب بھی مخفیے کے ساتھ اضطراب ایک مستقل x میں مستقل t کے (میں) جمع کرتا ہو، یہی نتیجہ حاصل ہوگا؛ یہ صرف لامستثنائی چوکور کنویں کی خاصیت نہیں ہے۔ سوال ۸.۸ کے ساتھ موازنہ کریں۔

سوال ۹.۱۸: ابتدا میں (یک بُعدی لامستثنائی) چوکور کنویں کے زمینی حال میں کیت m کا ایک ذرہ پایا جاتا ہے۔ لمحہ $t = 0$ پر ایک ”اینٹ“ اس کنویں میں گرانی جاتی ہے، جس سے مخفیہ درج ذیل ہو جاتا ہے، جہاں $V_0 \ll E_1$ ہے۔

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 \leq x \leq a/2 \\ 0 & a/2 < x \leq a \\ \infty & \text{دیگر صورت} \end{cases}$$

کچھ وقت T کے بعد، اینٹ ہوائی جاتی ہے، اور ذرے کی توانائی ناپی جاتی ہے۔ (رتبہ اول نظریہ اضطراب میں) نتیجہ E_2 ہونے کا احتمال کیا ہوگا؟

سوال ۹.۱۹: ہم تحرک شدہ احسراج، (تحرک شدہ) انجذاب، اور خود با خود احسراج دیکھ چکے ہیں۔ خود با خود انجذاب کیوں نہیں پایا جاتا ہے؟

سوال ۹.۲۰: مقناطیسی گمکے۔ ساکن مقناطیسی میدان $B_0 \mathbf{k}$ میں، $1/2$ سپر کا ایک ذرہ جس کی مکن مقناطیسی نسبت γ ہو، لارمر تعدد $\omega_0 = \gamma B_0$ (مثال ۴.۳) سے استقبالی حرکت کرتا ہے۔ اب ہم ایک کمزور عرضی ریڈیائی تعدد میدان، $B_r [\cos(\omega t) \mathbf{i} - \sin(\omega t) \mathbf{j}]$ ، چالو کرتے ہیں جس سے کل میدان درج ذیل ہو جاتا ہے۔

$$(9.89) \quad \mathbf{B} = B_r \cos(\omega t) \mathbf{i} - B_r \sin(\omega t) \mathbf{j} + B_0 \mathbf{k}$$

۱. اس نظام کے لیے 2×2 ہیملٹنی متالب (مساوات ۴.۱۵۸) تیار کریں۔

ب. وقت t پر چپکری حال $\chi(t) = \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}$ ہونے کی صورت میں درج ذیل دکھائیں

$$(9.90) \quad \dot{a} = \frac{i}{2} (\Omega e^{i\omega t} b + \omega_0 a); \quad \dot{b} = \frac{i}{2} (\Omega e^{-i\omega t} a - \omega_0 b)$$

جہاں $\Omega \equiv \gamma B_r$ کا تعلق ریڈیائی تعدد میدان کے زور سے ہے۔

ج. ابتدائی قیمتوں a_0 اور b_0 کی صورت میں $a(t)$ اور $b(t)$ کا عمومی حل تلاش کریں۔ جواب:

$$a(t) = \left\{ a_0 \cos(\omega' t/2) + \frac{i}{\omega'} [a_0(\omega_0 - \omega) + b_0 \Omega] \sin(\omega' t/2) \right\} e^{i\omega t/2}$$

$$b(t) = \left\{ b_0 \cos(\omega' t/2) + \frac{i}{\omega'} [b_0(\omega - \omega_0) + a_0 \Omega] \sin(\omega' t/2) \right\} e^{-i\omega t/2}$$

جہاں درج ذیل ہوگا۔

$$(۹.۹۱) \quad \omega' \equiv \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \Omega^2}$$

د. ایک ذرہ ہم میدان چپکری حال ($a_0 = 1$, $b_0 = 0$) سے آغاز کرتا ہے۔ مخالف میدان چپکری حالتوں کے احتمال کو بطور وقت کا تناسب عمل تلاش کریں۔

$$P(t) = \{ \Omega^2 / [(\omega - \omega_0)^2 + \Omega^2] \} \sin^2(\omega' t/2) \quad \text{جواب:}$$

۴۴. منحنی گمکے،

$$(۹.۹۲) \quad P(\omega) = \frac{\Omega^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \Omega^2}$$

کو (مقررہ ω_0 اور Ω کے لئے) جبری تعدد ω کے تفاعل کے طور پر ترسیم کریں۔ آپ دیکھیں گے کہ $\omega = \omega_0$ پر اس کی زیادہ سے زیادہ قیمت پائی جاتی ہے۔ ”زیادہ سے زیادہ قیمت کی نصف پر پوری چوڑائی“ $\Delta\omega$ تلاش کریں۔

و. چونکہ $\omega_0 = \gamma B_0$ ہے، لہذا ہم گمکے کا تجرباتی مشاہدہ کر کے ذرے کے مقناطیسی جفت قطبی معیار اثر کا تعین کر سکتے ہیں۔ مرکوزی مقناطیسی گمکے ۴۵ تجربہ میں نورپے کا g جزو ضربی، ایک ٹسلا (1 T) کے ساکن میدان اور ایک مائیکرو ٹسلا (1 μ T) حیطے کے ریڈیائی تعدد میدان کی مدد سے، ناپا جاتا ہے۔ تعدد گمکے کیا ہوگا؟ (پروٹان کے مقناطیسی معیار اثر کے لیے حصہ ۶.۵ دیکھیں۔) منحنی گمکے کی چوڑائی تلاش کریں۔ (اپنا جواب Hz میں دیں۔)

سوال ۹.۲۱: میں نے مساوات ۹.۳۱ میں جوہر کو (روشنی کے طول موج سے) اتنا چھوٹا تصور کیا کہ میدان کے فضائی تغیر کو نظر انداز کیا جاسکتا تھا۔ حقیقی برقی میدان درج ذیل ہوگا۔

$$(۹.۹۳) \quad E(\mathbf{r}, t) = E_0 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)$$

اگر جوہر کا مرکز مبداء ہو، تب متعلقہ حجم پر $k \cdot r \ll 1$ (لہذا $|k| = 2\pi/\lambda$) $k \cdot r \sim r/\lambda \ll 1$ ہوگا، جس کی بنا پر ہم اس جزو کو نظر انداز کر سکتے تھے۔ مندرجہ کریں ہم اول رتبہ درستگی:

$$(9.93) \quad E(r, t) = E_0[\cos(\omega t) + (k \cdot r) \sin(\omega t)]$$

کو نظر انداز نہیں کرتے۔ اس کا پہلا جزو (برقی جفت قطبی) ۴۶ تحویلات دے گا جن پر مستن میں بات کی چسکی ہے؛ دوسرا جزو ممنوعہ (مقناطیسی جفت قطبی) ۴۷ اور برقی چو قطبی ۴۸ تحویلات دے گا ($k \cdot r$ کی مزید بڑی طاقتیں، مزید ممنوعہ تحویلات دیں گی، جو زیادہ بلند متعدد قطبی معیار اثر سے وابستہ ہوں گی)۔
۱. ممنوعہ تحویلات کی خود باخود احسراجی شرح حاصل کریں (تقلیب اور حرکت کے رخوں پر اوسط تلاش کرنے کی ضرورت نہیں، اگرچہ مکمل جواب کے لیے ایسا کرنا ضروری ہے)۔ جواب:

$$(9.95) \quad R_{b \rightarrow a} = \frac{q^2 \omega^5}{\pi \epsilon_0 \hbar c^5} |\langle a | (a_n \cdot r) (k \cdot r) | b \rangle|^2$$

ب۔ دکھائیں کہ یک بعدی مرتعش کے لیے ممنوعہ تحویلات سطح n سے سطح $n - 2$ میں ہوں گی، اور تحویلی شرح (جس کا اوسط a_n اور k پر حاصل کیا گیا ہو) درج ذیل ہوگی۔

$$(9.96) \quad R = \frac{\hbar q^2 \omega^3 n(n-1)}{15 \pi \epsilon_0 m^2 c^5}$$

(تبصرہ: یہاں ω سے مراد نوریہ کا تعدد ہے نہ کہ مرتعش کا تعدد)۔ ”احسراجی شرح کے لحاظ سے ”ممنوعہ“ شرح کی نسبت تلاش کریں اور اس اصطلاح پر تبصرہ کریں۔

ج۔ دکھائیں کہ ہائیڈروجن میں ممنوعہ تحویل بھی $1S \rightarrow 2S$ تحویل کی احسراجی شرح نہیں دیتی۔ (یہ تمام بلند متعدد قطب کے لیے بھی درست ہوگا؛ غالب تنزل، درحقیقت، دو نوریہ احسراجی کی بنا پر ہوگا، جس کا عرصہ حیات تقریباً ایک سیکنڈ کا دسواں حصہ ہوگا۔)

سوال ۹.۲۲: دکھائیں کہ n, ℓ سے n', ℓ' میں تحویل کے لیے ہائیڈروجن کی خود باخود احسراجی شرح (مادرات ۹.۵۶) درج ذیل ہوگی

$$(9.97) \quad \frac{e^2 \omega^3 I^2}{3 \pi \epsilon_0 \hbar c^3} \times \begin{cases} \frac{\ell+1}{2\ell+1}, & \ell' = \ell + 1 \\ \frac{\ell}{2\ell-1}, & \ell' = \ell - 1 \end{cases}$$

جہاں I درج ذیل ہے۔

$$(9.98) \quad I \equiv \int_0^\infty r^3 R_{n\ell}(r) R_{n'\ell'}(r) dr$$

^{۴۶} allowed electric dipole transitions

^{۴۷} forbidden magnetic dipole transitions

^{۴۸} forbidden electric quadrupole transitions

(جو ہر m کی کسی مخصوص قیمت سے آغاز کر کے کسی ایک m' حال میں، انتخابی قواعد:

$$m' = m - 1, \quad m' = m, \quad m' = m + 1$$

کے تحت، پہنچتا ہے۔ دھیان رہے کہ جواب m کا تابع نہیں۔) اشارہ: پہلے $\ell' = \ell + 1$ صورت کے لیے $|n\ell m\rangle$ اور $|n'\ell'm'\rangle$ کے بیچ x ، y ، اور z کے تمام غیر صفر تالیفی ارکان معلوم کریں۔ ان سے درج ذیل مقدار کا تعین کریں۔

$$|\langle n', \ell + 1, m + 1 | r | n\ell m \rangle|^2 + |\langle n', \ell + 1, m | r | n\ell m \rangle|^2 + |\langle n', \ell + 1, m - 1 | r | n\ell m \rangle|^2$$

یہی کچھ $\ell' = \ell - 1$ کے لیے بھی کریں۔

باب ۱۰

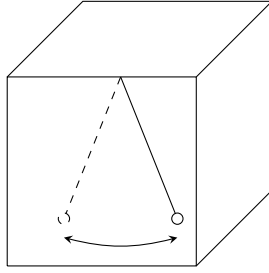
حرارت ناگزرتخمین

۱۰.۱ مسئلہ حرارت ناگزرت

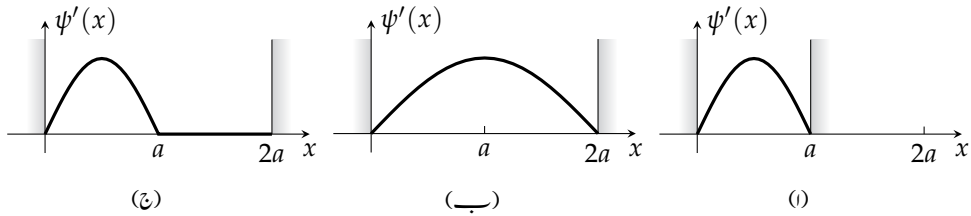
۱۰.۱.۱ حرارت ناگزرت عمل

فرض کریں ایک کامل روتص انتقصابی سطح میں بغیر کسی رگڑیا ہوائی مزاحمت کے آگے پیچھے ارتعاش کرتا ہے اگر آپ اس روتص کو جھٹکے سے ہلائیں تو یہ امضراتفسری کے ساتھ دائروی صورت میں حرکت کرنے لگے گا لیکن اگر آپ بغیر جھٹکے کے روتص کو آہستہ آہستہ ایک مقام سے دوسری مقام منتقل کریں (شکل ۱۰.۱) تب روتص اسی سطح یا اس کے متوازی سطح میں شائستگی اور روانی سے اسی جیلہ کے ساتھ جھلوتارہے گا بیرونی حالات کی بہت آہستہ آہستہ تبدیلی ہی حرارت نہ گزرت عمل کی پہچان ہے دھیان رہے کہ یہاں دو مختلف امتیازی وقتوں کی بات کی جبارہی ہے نظام کی حرکت جو یہاں روتص کی ارتعاش کا دوری عرصہ ہوگا کوظاہر کرنے والا اندرونی وقت T_i اور نظام میں نمایاں تبدیلی مثلاً لرزتے ہوئے چبوترے پر نصب روتص کی صورت میں چبوترے کی لرزش کا دوری عرصہ کوظاہر کرنے والا بیرونی وقت T_e حرارت ناگزرت عمل میں $T_e \gg T_i$ ہوگا۔

حرارت نہ گزرت عمل کے تجزیہ کا بنیادی حکمت عملی یہ ہوگا کہ پہلے بیرونی عوامل مقدار معلوم کو غیر متغیر رکھتے ہوئے مسئلہ حل کیا جاتا ہے اور حاب کے بالکل آخر میں انہیں بہت آہستہ آہستہ وقت کے ساتھ تبدیل ہونے کی احبازت دی جاتی ہے مثال کے طور پر مقررہ لمبائی L کی روتص کا کلاسیکی دوری عرصہ $2\pi\sqrt{L/g}$ ہوگا اب اگر لمبائی آہستہ آہستہ تبدیل ہو تب دوری عرصہ بظاہر $2\pi\sqrt{L(t)/g}$ ہوگا حصہ 3.7 میں ہائیڈروجن سالہ پر تبصرہ کے دوران ایک زیادہ باریک بین مثال پیش کی گئی ہم نے آغاز میں مرکزہ کو ساکن تصور کرتے ہوئے ان کے بیچ فاصلہ R کی صورت میں الیکٹران کی حرکت کے لئے حل کیا نظام کی زمینی حال توانائی کو R کے تقاعسل کی صورت میں دریافت کرنے کے بعد ہم نے توازن فاصلہ معلوم کر کے ترسیم کی ان حناے مرکزہ کی لرزش کا تعدد حاصل کیا سوال 10.7 طبعیت سالہ میں اس ترکیب کو جس میں ساکن مرکزہ سے آغاز کرتے ہوئے الیکٹران تقاعسلات موج کا حاب کر کے ان سے نسبتا



شکل ۱۰.۱: حرارت ناگزیر حرکت: اگر ڈبل کو نہایت آہستہ ایک جگہ سے دوسری جگہ منتقل کیا جائے تب رمتاس اسی حیث کے ساتھ ابتدائی سطح کے متوازی سطح میں جھولتا ہے۔



شکل ۱۰.۲: (۱) لامتناہی چوکور کنویں کے زمینی حال سے ایک ذرہ ابتدا کرتا ہے، (ب) اگر دیوار نہایت آہستہ حرکت کرے تب ذرہ اسی حال میں رہتا ہے، (ج) اگر دیوار تیزی سے حرکت کرے تب ذرہ لمحاتی طور پر ابتدائی حال میں رہتا ہے۔

رفتار مرکزہ کی معلومات اور حرکت کے بارے میں معلومات حاصل کرنے کو بارن واپن ہائیر تخمین کہتے ہیں حرارت نہ گزر تخمین کے بنیادی تصور کو ایک مسئلہ کے روپ میں پیش کیا جاسکتا ہے فرض کریں ہیملٹنی ابتدائی روپ H^i سے بہت آہستہ آہستہ تبدیل ہو کر کسی اختتامی روپ H^f تک پہنچتا ہے مسئلہ حرارت نہ گزر کہتا ہے کہ اگر ذرا ابتدائی طور پر H^i کے n وی امتیازی حال میں پایا جاتا ہوں تب یہ زیر مساوات شروڈنگر H^f کی n وی امتیازی حال میں منتقل ہوگا میں یہاں فرض کرتا ہوں کہ H^i سے H^f تک تحویل کے دوران طیف غیر مسلسل اور غیر انخطاطی ہے یوں حالات کی ترتیب کوئی شبہ نہیں پایا جائے گا امتیازی تقاضات پر نظر رکھنے کی کوئی ترکیب وضع کرنے سے ان شرائط کو نرم بنایا جاسکتا ہے لیکن میں یہاں ایسا نہیں کروں گا۔

مشال کے طور پر ہم لامتناہی چوکور کنویں میں ایک ذرا کو زمینی حال میں تیار کرتے ہیں (شکل ۱۰.۲-۱)۔

$$(۱۰.۱) \quad \psi^i(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

اب دائیں دیوار کو بہت آہستہ آہستہ تمام $2a$ پر منتقل کیا جاتا ہے مسئلہ حرارت نہ گزر کے تحت ماسوائے

حبز و ضربی ہیئت کے یہ ذرہ تو سب سے زیادہ کثیف کے زمینی حال میں منتقل ہوگا (شکل ۱۰.۲-ب)۔

$$\psi^f(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{2a}x\right) \quad (10.2)$$

دھیان رہے کہ نظریہ اضطراب کی طرح ہم ہیملٹنی میں ایک چھوٹی تبدیلی کی بات نہیں کر رہے ہیں یہاں تبدیلی بہت بڑی ہے فقط اتنا ضروری ہے کہ تبدیلی بہت آہستہ آہستہ رونما ہو یہاں توانائی کی بقا نہیں ہوگی جو بھی دیوار کو حرکت دے رہا ہے نظام سے توانائی حاصل کرے گا جیسا کہ گاڑی کی انجن کے شلنڈر میں آہستہ آہستہ پھیلتا ہوا گیس بوکا کو توانائی فراہم کرتا ہے اس کے برعکس کنویں کی اچانک وسط کی صورت میں حال $\psi^i(x)$ ہی رہتا ہے (شکل ۱۰.۲-ج) جو نئے ہیملٹنی کے امتیازی حالات کا ایک پیچیدہ خطی جوڑ ہوگا سوال 38.2 یہاں توانائی کی بقا ہوگی کم از کم اس کی توقعاتی قیمت کی ضرور ہوگی جیسا اچانک رکاوٹ ہٹانے سے حلاء میں گیس کی آزادانہ پھیلائے سے کوئی کام نہیں ہوتا۔

سوال ۱۰.۱: ایک لامتناہی چوکور کنواں جس کی دائیں دیوار ایک مستقل سمتی رفتار v سے حرکت کرتے ہوئے کنویں کو وسیع بناتا ہے کو بالکل ٹھیک ٹھیک حل کرنا ممکن ہے اس کے حلوں کا مکمل سلسلہ درج ذیل ہوگا

$$\Phi_n(x, t) \cong \sqrt{\frac{2}{\omega}} \sin\left(\frac{n\pi}{\omega}x\right) e^{i(mvx^2 - 2E_n^i at) / \hbar \omega} \quad (10.3)$$

جہاں $w(t) \equiv a + vt$ کنویں کی لمبائی چوڑائی اور چوڑائی a کے اصل کنواں کی n ویں اجزائی توانائی $E_n^i \equiv n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$ ہے عمومی حل ان Φ کا ایک خطی جوڑ:

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Phi_n(x, t) \quad (10.4)$$

ہوگا جہاں عددی سر c_n وقت t کے تابع نہیں ہوں گے

ا. دیکھیں آیا تابع وقت مساوات شرودنگر بمع مناسب سرحدی شرائط کو مساوات 3.10 مطمئن کرتی ہے

ب. فرض کریں اصل کنویں کی زمینی حال میں ایک ذرہ آغاز ($t = 0$) کرتا ہے

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)$$

دکھائیں کہ توسیعی عددی سروں کو درج ذیل روپ میں لکھا جاسکتا ہے

$$c_n = \frac{2}{\pi} \sum_0^{\pi} e^{-iaz^2} \sin(nz) \sin(z) dz \quad (10.5)$$

جہاں $\alpha \equiv mva / 2\pi^2 \hbar$ کنویں کی پھیلنے کی رفتار کی ایک بے بعدی پیمائش ہے بد قسمتی سے اس تکمل کی قیمت کو بنیادی تقاضات کی صورت میں حاصل نہیں کیا جاسکتا ہے

ج. فرض کریں ہم کنویں کو ابتدائی چوڑائی کے دگنا چوڑائی تک پھیلنے دیتے ہیں یوں بیرونی وقت $w(T_e) = 2a$ ہوگا ابتدائی زمینی حال کے تابع وقت قوت نمائی حبز و ضربی کا دورانیہ اندرونی وقت ہوگا وقت T_e اور T_i نعین کر کے دکھائے کہ حرکت نہ گزر صورتحال سے مراد $1 \ll \alpha$ ہوگا جس کے تحت مکمل کے دائرہ کار پر $1 \cong e^{-i\alpha z^2}$ ہوگا اس کو استعمال کرتے ہوئے توسیعی عددی سر c_n نعین کریں حال $\Psi(x, t)$ تیار کر کے تصدیق کریں کہ یہ مسئلہ حرارت نہ گزر کے مطابق ہے

د. دکھائیں گے $\Psi(x, t)$ میں حبز و بیئت کو درج ذیل روپ میں لکھا جاسکتا ہے

$$(10.6) \quad \theta(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^1 E_1(t') dt'$$

جہاں لمحہ t پر لحاتی امتیازی قدر $E_n(t) \equiv n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2m\omega^2$ ہوگا اس نتیجہ پر تبصرہ کریں

۱۰.۱.۲ مسئلہ حرارت نہ گزر کا ثبوت

مسئلہ حرارت نہ گزر بظاہر معقول نظر آتا ہے اور اسے باآسانی بیان کیا جاسکتا ہے تاہم اس کو ثابت کرنا اتنا آسان نہیں ہے غیر تابع وقت ہیمیلٹی کی صورت میں ایک ذرہ جو n وی امتیازی حال ψ_n میں آغاز کریں

$$(10.7) \quad H\psi_n = E_n\psi_n$$

وہ ڈوری حبز و ضربی اپنانے کے علاوہ n وی امتیازی حال میں رہتا ہے

$$(10.8) \quad \Psi_n(t) = \psi_n e^{-iE_n t / \hbar}$$

اگر ہیمیلٹی وقت کے ساتھ تبدیل ہوتا ہوں تب امتیازی تفاعلات اور امتیازی اتداری بھی تابع وقت ہوں گے

$$(10.9) \quad H(t)\psi_n(t) = E_n(t)\psi_n(t)$$

لیکن اب بھی کسی ایک مخصوص لمحہ پر یہ معیار عمودی سلسلہ

$$(10.10) \quad \langle \psi_n(t) | \psi_m(t) \rangle \delta_{nm}$$

تین گے جو مکمل ہے لہذا تابع وقت مساوات شروڈنگر

$$(10.11) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t) = H(t)\Psi(t)$$

کے عمومی حل کو ان کا خطی مجموعہ

$$(10.12) \quad \Psi(t) = \sum_n c_n(t) \psi_n(t) e^{i\theta_n(t)}$$

لکھا جاسکتا ہے جہاں

$$(۱۰.۱۳) \quad \theta_n(t) \approx -\frac{1}{\hbar} \int_0^1 E_n(t') dt'$$

وقت کے ساتھ تبدیل ہوتے ہوئے E_n کی صورت میں معیاری دوری جزو ضربی کو عمومیت دیتا ہے میں اس کو ہمیشہ کی طرح عددی سر $c_n(t)$ میں عزم کر سکتا تھا لیکن غیر تابع وقت ہیمیلٹنی کی صورت میں بھی یہ پایا جاتا ہے بلکہ اطمینان وقت کے اس حصہ کو صریحاً لکھنا موزوں ہوگا مساوات 12.10 کو مساوات 11.10 میں پر کرنے سے درج ذیل حاصل ہوگا

$$(۱۰.۱۴) \quad i\hbar \sum_n [\dot{c}_n \psi_n + c_n \dot{\psi}_n + i c_n \psi_n \theta_n] e^{i\theta_n} = \sum_n c_n (H \psi_n) e^{i\theta_n}$$

جہاں وقت کے لحاظ سے تفریق کو نکتہ سے ظاہر کیا گیا ہے مساوات 9.10 اور 13.10 کی بنا پر آخری دو اجزاء کٹ جاتے ہیں لہذا درج ذیل باقی رہتا ہے

$$(۱۰.۱۵) \quad \sum_n \dot{c}_n \psi_n e^{i\theta_n} = - \sum_n c_n \dot{\psi}_n e^{i\theta_n}$$

اس کا ψ_m کے ساتھ اندرونی ضرب لے کر لحقی امتیازی تعاملات کی معیار عمودیت مساوات 10.10 بروئے کار لاتے ہوئے

$$\sum_n \dot{c}_n \delta_{mn} e^{i\theta_n} = - \sum_n c_n \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle e^{i\theta_n}$$

یا درج ذیل ہوگا

$$(۱۰.۱۶) \quad \dot{c}_m(t) = - \sum_n c_n \langle \dot{\psi}_m | \psi_n \rangle e^{\theta_n - \theta_m}$$

اب مساوات 9.10 کا وقت کے ساتھ تفریق لیتے ہیں

$$\dot{H} \psi_n + H \dot{\psi}_n = \dot{E}_n \psi_n + E_n \dot{\psi}_n$$

اور یہاں بھی ψ_m کے ساتھ اندرونی ضرب لے کر درج ذیل ہوگا

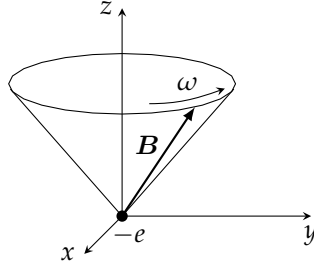
$$(۱۰.۱۷) \quad \langle \psi_m | \dot{H} | \psi_n \rangle + \langle \psi_m | H | \dot{\psi}_n \rangle = \dot{E}_n \delta_{mn} + E_n \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle$$

ہم H کے ہر مشی ہونے سے فائدہ اٹھاتے ہوئے $\langle \psi_m | H | \dot{\psi}_n \rangle = E_m \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle$ لکھتے ہیں $n \neq m$ کی صورت میں درج ذیل ہوگا

$$(۱۰.۱۸) \quad \langle \psi_m | \dot{H} | \psi_n \rangle = (E_n - E_m) \langle \psi_m | \dot{\psi}_n \rangle$$

یہ جانتے ہوئے کہ توانائیاں غیر انخطاطی ہے مساوات 18.10 کو مساوات 16.10 میں پُر کر کے درج ذیل اخذ ہوگا

$$(۱۰.۱۹) \quad \dot{c}_m(t) = -c_m \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle - \sum_{n \neq m} c_n \frac{\langle \psi_m | \dot{H} | \psi_n \rangle}{E_n - E_m} e^{(-i/\hbar) \int_0^1 [E_n(t') - E_m(t')] dt'}$$



شکل ۱۰.۳: مقناطیسی میدان زاویہی سمتی رفتار ω سے مخروطی راہ چڑاتا ہے (مساوات 24.10)۔

یہ بالکل ٹھیک نتیجہ ہے اب حرارت ناگزرتخمین کی باری آتی ہے فرض کریں \dot{H} نہایت چھوٹا ہے تب دو سراجبزنظر انداز کرتے ہوئے

$$(10.20) \quad \dot{c}_m(t) = -c_m \langle \psi_m | \dot{\psi}_m \rangle$$

ہوگا جس کا حل

$$(10.21) \quad c_m(t) = c_m(0) e^{i\gamma_m(t)}$$

ہے جہاں درج ذیل ہوگا

$$(10.22) \quad \gamma_m(t) \equiv i \int_0^t \langle \psi_m(t') | \frac{\partial}{\partial t'} \psi_m(t') \rangle dt'$$

بالخصوص اگر ذرا n وی امتیازی حال یعنی $m \neq n$ کیلئے $c_n(0) = 1$ اور $c_m(0) = 0$ ہوئے آغاز کرتے تب مساوات 12.10

$$(10.23) \quad \Psi_n(t) = e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)} \psi_n(t)$$

ہوگا لہذا کئی قیمتی جزو ضربیاں حاصل کرنے کے علاوہ یہ ذرا عجیبائی ہیملٹنی کی n وی امتیازی حال میں ہی رہے گا

مثال ۱۰.۱: فرض کریں ایک مقناطیسی میدان میں نکتہ پر کیت m اور بار $-e$ کا ایک الیکٹران ساکن پایا جاتا ہے اس مقناطیسی میدان کی مقدار B_0 ایک متقل ہے جبکہ اس کا رخ z محور کے گرد ایک متقل زاویہی سمتی رفتار ω سے ایک مخروطی سطح پر رہتے ہوئے گھومتا ہے محور z کے ساتھ مخروط کا اندرونی زاویہ α ہے (شکل ۱۰.۳)۔

$$(10.24) \quad B(t) = B_0 [\sin(\alpha) \cos(\omega t) \hat{i} + \sin(\alpha) \sin(\omega t) \hat{j} + \cos \alpha \hat{k}]$$

اس کا ہیملٹنی مساوات 158.4 درج ذیل ہوگا

$$\begin{aligned} H(t) &= \frac{e}{m} \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} = \frac{e\hbar\beta_0}{2m} [\sin \alpha \cos(\omega t) \sigma_x + \sin \alpha \sin(\omega t) \sigma_y + \cos \alpha \sigma_z] \\ (10.25) \quad &= \frac{\hbar\omega_1}{2} \begin{pmatrix} \cos \alpha & e^{-i\omega t} \sin \alpha \\ e^{i\omega t} \sin \alpha & -\cos \alpha \end{pmatrix} \end{aligned}$$

جہاں ω_0 درج ذیل ہیں

$$(10.26) \quad \omega_1 \equiv \frac{e\beta_0}{m}$$

ہیملٹنی $H(t)$ کے معمول شدہ امتیازی چپکر χ_+ اور χ_- درج ذیل ہیں۔

$$(10.27) \quad \chi_+(t) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) \\ e^{i\omega t} \sin(\alpha/2) \end{pmatrix}$$

$$(10.28) \quad \chi_-(t) = \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \sin(\alpha/2) \\ -\cos(\alpha/2) \end{pmatrix}$$

جو $B(t)$ کے لمحاتی رخ کے ساتھ ہم چپکر اور خلاف چپکر کو ظاہر کرتے ہیں سوال 30.4 دیکھیں ان کے مطابقتی امتیازی اعداد درج ذیل ہوں گے

$$(10.29) \quad E_{\pm} = \pm \frac{\hbar\omega_1}{2}$$

فرض کریں $B(0)$ کے ہمراہ الیکٹران حیدان صورت سے آغاز کرتا ہے

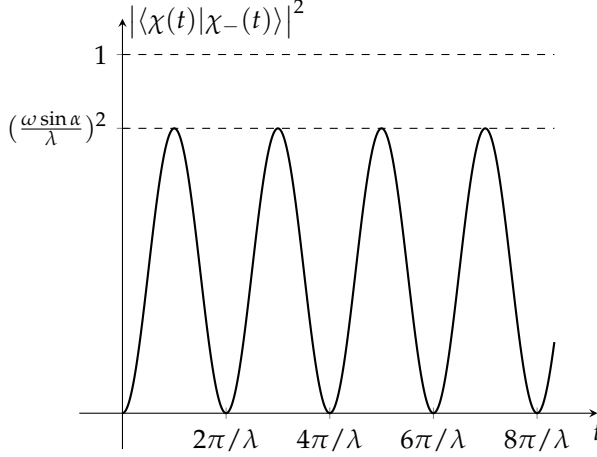
$$(10.30) \quad \chi(0) = \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) \\ \sin(\alpha/2) \end{pmatrix}$$

تابع وقت مساوات شرودنگر کا بالکل ٹھیک حل درج ذیل ہوگا سوال 2.10

$$(10.31) \quad \chi(t) = \begin{pmatrix} [\cos(\lambda t/2) - i \frac{(\omega_1 - \omega)}{\lambda} \sin(\lambda t/2)] \cos(\alpha/2) e^{-i\omega t/2} \\ [\cos(\lambda t/2) - i \frac{(\omega_1 + \omega)}{\lambda} \sin(\lambda t/2)] \cos(\alpha/2) e^{+i\omega t/2} \end{pmatrix}$$

جہاں λ درج ذیل

$$(10.32) \quad \lambda \equiv \sqrt{\omega^2 + \omega_1^2 - 2\omega\omega_1 \cos \alpha}$$



شکل ۱۰.۴: غیر حرارت ناگزرتنمین صورت ($\omega \gg \omega_1$) میں تحویلی احتمال (مساوات ۱۰.۱۰)۔

جسے χ_+ اور χ_- کا خطی مجموعہ لکھا جاسکتا ہے

$$(۱۰.۳۳) \quad \chi(t) = \left[\cos\left(\frac{\lambda t}{2}\right) - i \frac{(\omega_1 - \omega \cos \alpha)}{\lambda} \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) \right] e^{-i\omega t/2} \chi_+(t) \\ + i \left[\frac{\omega}{\lambda} \sin \alpha \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) \right] e^{+i\omega t/2} \chi_-(t)$$

ظاہر ہے کہ B کے موجودہ رخ کے لحاظ سے خلاف میدان کو تحویل کا ٹھیک ٹھیک احتمال درج ذیل ہوگا

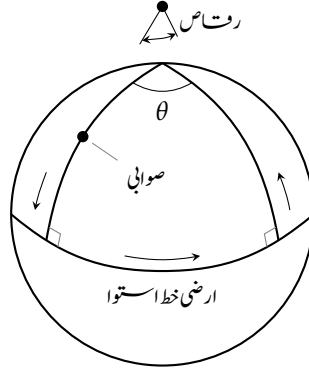
$$(۱۰.۳۴) \quad |\langle \chi(t) | \chi_-(t) \rangle|^2 = \left[\frac{\omega}{\lambda} \sin \alpha \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) \right]^2$$

مسئلہ حرارت ناگزرتنمین کہ $T_e \gg T_i$ کی تحدیدی صورت میں تحویلی احتمال عنصر کو پہنچے گا جہاں ہیملٹنی میں تبدیلی کو درکار امتیازی وقت T_e ہے جو موجودہ صورت میں $1/\omega$ ہوگا اور تفعل موج میں تبدیلی کے لیے درکار امتیازی وقت T_i ہوگا جو موجودہ صورت میں $1/(\omega_1) = \hbar/(E_+ - E_-)$ ہوگا جو حرارت ناگزرتنمین سے مراد $\omega \ll \omega_1$ ہوگا غیر مضطرب تفعلات موج کے دور کے لحاظ سے میدان آہستہ گھومتا ہے حرارت ناگزرتنمین صورت $\lambda \cong \omega_1$ میں درج ذیل ہوگا۔

$$(۱۰.۳۵) \quad |\langle \chi(t) | \chi_-(t) \rangle|^2 \cong \left[\frac{\omega}{\omega_1} \sin \alpha \sin\left(\frac{\lambda t}{2}\right) \right]^2 \rightarrow 0$$

جیسا ہم پہلے ذکر کر چکے ہیں، طبعی میدان الیکٹران کو ہاتھ سے پکڑ کر یوگھاتا ہے کے الیکٹران کا چکر ہر لمحہ پر B کہ رخ ہو اس کے برعکس $\omega \gg \omega_1$ کی صورت میں $\lambda \cong \omega$ ہوگا اور نظام ہم میدان اور خلاف میدان صورتوں کے بیچ پکیاں کھائے گا (شکل ۱۰.۴)۔

□



شکل ۱۰.۵: سطح زمین پر روتاس کی حرارت ناگزیر منتقلی۔

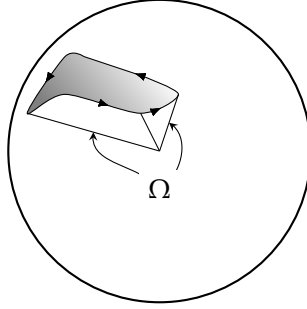
سوال ۱۰.۲: تصدیق کریں کہ مساوات 25.10 کی ہیملٹنی کیلئے مساوات 31.10 تابع وقت مساوات شرڈنگر کو مطمئن کرتی ہے ساتھ ہی مساوات 33.10 کی تصدیق کریں اور دکھائیں کہ عددی سروں کے سرٹوں کا مجموعہ ایک ہوگا جو معمول زنی کی شرط ہے

۱۰.۲ ہیئت بیری

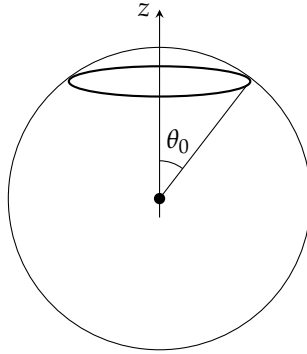
۱۰.۲.۱ گرگگی عمل

آئے حصہ 1.1.10 میں متعل کامل ہے رگڑھ لیکن جس کے چپوٹر اکو ایک مقام سے دوسری مقام منتقل کیا جاتا ہوں پر دوبارہ نظر ڈالتے ہیں جسے استعمال کرتے ہوئے حرارت نہ گزر عمل کا تصور اخذ کیا گیا میں نے دعویٰ کیا تھا کہ جب تک چپوٹر کی حرکت اتنی روتاس کے دوری عرصہ کے لحاظ سے اتنی آہستہ ہو کے روتاس کی نمایاں حرکت کے دوران روتاس بہت ساری ارتعاش کرتا ہوں یہ اسی مستوی میں یا اس کے متوازی مستوی میں اسی جیٹ اور اسی تعدد کے ساتھ جھومتا رہے گا۔

لیکن اگر میں اس کامل روتاس کو شمالی قطب پر لے جا کر مثلاً صوبائی شہر کے رخ جھولا دوں (شکل ۱۰.۵) فی الحال تصور کریں کہ دنیا گھوم نہیں رہی ہے میں اس کو بہت آہستہ آہستہ یعنی حرارت نہ گزر طریقہ سے صوبائی سے گزرتے خط طول بلند پر چلتے ہوئے عرضی خط استوا تک پہنچتا ہوں یہاں پہنچ کر یہ شمال و جنوب جھولے گا میں اس کو عرضی خط استوا پر کچھ فاصلہ دور تک لے جاتا ہوں روتاس ابھی بھی شمال و جنوب جھولتا ہے آخر میں میں اس نئی خط طول بلند پر چلتے ہوئے چپوٹر اکو شمالی قطب منتقل کرتا ہوں آپ دیکھ سکتے ہیں کہ روتاس اسی مستوی میں اب نہیں جھولے گا جہاں سے اس نے آغاز کیا یقیناً نئی مستوی اور پرانے مستوی کے بیچ زاویہ Θ پایا جاتا ہے جہاں جنوب کی طرف چلتے ہوئے اور شمال کی طرف چلتے ہوئے دو خط طول بلند کے بیچ زاویہ Θ ہے ہم دیکھتے ہیں کہ جس راہ پر میں چپوٹر اٹھا کر چلتا رہا وہ راہ زمین کے مرکز پر ٹھوس زاویہ Ω بناتی ہے یہ راہ شمالی نصف کرہ کا $2\pi/\Theta$ حصہ گھیرتی ہے لہذا اس کا رقبہ $A = (1/2)(\Theta/2\pi)4\pi R^2 = \Theta R^2$



شکل ۱۰.۶: کرہ پر اختیاری راہ، ٹھوس زاویہ Ω بناتا ہے۔



شکل ۱۰.۷: ایک دن کے دوران، فوقورتص کی راہ۔

ہوگا جہاں R زمین کا رداس ہے یوں درج ذیل ہوگا۔

$$\Theta = A/R^2 \equiv \Omega \quad (10.36)$$

جو اس نتیجہ کو نہایت عمدگی کے ساتھ پیش کرتا ہے اور جو راہ کی شکل و صورت پر منحصر نہیں ہے (شکل ۱۰.۶)۔
کرہ کی سطح پر ایک بند راہ پر چلتے ہوئے حرارت نہ گزرتمین کی ایک مثال فوکلٹ رفتص ہے جہاں چپو ترا کو
اٹھ کر چلنے کی بجائے زمین کے گھومنے کو یہ کام سونپا جاتا ہے خط عرض بلد θ_0 درج ذیل ٹھوس زاویہ بناتا ہے
(شکل ۱۰.۷)۔

$$\Omega = \int \sin \theta \, d\theta \, d\phi = 2\pi(-\cos \theta)_0^{\theta_0} = 2\pi(1 - \cos \theta_0) \quad (10.37)$$

زمین کے لحاظ سے جو اس دوران 2π زاویہ گھوم چکا ہوگا فوکلٹ رفتص کی روزانہ استقبالی حرکت $2\pi \cos \theta_0$
ہوگی اس نتیجہ کو عموماً گھومتی حوالہ چوکھٹ پر کو یولس کو تو کی اثر سے حاصل کیا جاتا ہے لیکن یہاں یہ

حالت ہندسی مفہوم پیش کرتا ہے ایسا نظام جو بند راہ پر چل کے واپس ابتدائی نکتہ پہنچ کر اپنی ابتدائی حال میں نہیں لوٹتا غیر ہماقواند نظام کہلاتا ہے یہاں ضروری نہیں کہ راہ پر چلنے سے مراد حرکت دینا ہو اس سے مراد صرف اتنا ہے کہ نظام کی مقدار معلوم قیمتوں کو یوں تبدیل کیا جاتا ہے کہ آخر کار ان کی قیمتیں وہی ہوں جو ابتدا میں تھی غیر ہماقواند نظام ہر جگہ پائے جاتے ہیں ایک لحاظ سے ہر چکر دار انجن غیر ہماقواند اعلیٰ ہے ہر ایک پھیرا کے اختتام تک گاڑی آگے حرکت کر چکی ہوگی یا کوئی وزن اٹھایا گیا ہوگا وغیرہ وغیرہ اگلے حصہ میں ہمیں غیر ہماقواند اعمالوں کی کوانٹائی میکانیات پر غور کروں گا ہم نے دیکھا ہوگا کہ ہیملٹنی کے مقدار معلوم مقداروں کو کسی بند راہ پر حرارت نہ گزر پھیرا دینے سے اختتامی حال کس طرح ابتدائی حال سے مختلف ہوگا

۱۰.۲.۲ ہندسی ہیٹ

میں نے حصہ 2.1.10 میں دکھایا کہ ایک ذرا جو $H(0)$ کے n وی امتیازی حال سے آغاز کرتا ہو حرارت نہ گزر حالات میں تابع وقت ہیٹ جزو ضربی کے علاوہ $H(t)$ کی n وی امتیازی حال میں ہوگا بالخصوص اس کا تعلق موج مساوات 23.10 درج ذیل ہوگا

$$\Psi_n(t) = e^{i[\theta_n(t) + \gamma_n(t)]} \psi_n(t) \quad (10.38)$$

جہاں

$$\theta_n(t) \equiv -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt' \quad (10.39)$$

حرکتی ہیٹ ہے جو تابع وقت تفاعل E_n کی صورت کے لیے جزو ضربی $e^{-iE_n t / \hbar}$ کو عمومیّت دیتا ہے اور درج ذیل ہندسی ہیٹ کہلاتا ہے

$$\gamma_n(t) \equiv \int_0^t \langle \psi_n(t') | \frac{\partial}{\partial t'} \psi_n(t') \rangle dt' \quad (10.40)$$

چونکہ اب ہیملٹنی میں کوئی ایسا مقدار معلوم $R(t)$ پایا جاتا ہے جو وقت کے ساتھ تبدیل ہوتا ہے لہذا $\psi_n(t)$ وقت t کا تابع ہوگا سوال 1.10 میں پھیلے ہوئے چوکور کنویں کی چوڑائی $R(t)$ ہوگی یوں درج ذیل ہوگا

$$\frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \frac{\partial \psi_n}{\partial R} \frac{dR}{dt} \quad (10.41)$$

لہذا درج ذیل ہوگا

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle \psi_n | \frac{\partial \psi_n}{\partial R} \rangle \frac{dR}{dt'} dt' = i \int_{R_i}^{R_f} \langle \psi_n | \frac{\partial \psi_n}{\partial R} dR \quad (10.42)$$

جہاں R_i اور R_f مقدار معلوم R_t کے بالترتیب ابتدائی اور اختتامی قیمتیں ہوں گی بالخصوص اگر کچھ دیر T بعد ہیملٹنی واپس اپنی ابتدائی روپ اختیار کرے تب $R_f = R_i$ لہذا $\gamma_n(T) = 0$ ہوگا جو زیادہ دلچسپ صورت حال نہیں ہے

میں نے مساوات 41.10 میں مندرجہ کیا کہ ہیمیلٹنی میں صرف ایک مقدار معلوم ایسا ہے جو تبدیل ہوتا ہو مندرجہ کریں N عدد مقدار معلوم $R_1(t), R_2(t), \dots, R_N(t)$ تبدیل ہوتے ہوں تب درج ذیل ہوگا

$$(۱۰.۴۳) \quad \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = \frac{\partial \psi_n}{\partial R_1} \frac{dR_1}{dt} + \frac{\partial \psi_n}{\partial R_2} \frac{dR_2}{dt} + \dots + \frac{\partial \psi_n}{\partial R_N} \frac{dR_N}{dt} = (\nabla_R \psi_n) \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt}$$

جہاں $\mathbf{R} \equiv (R_1, R_2, \dots, R_N)$ ہے اور ∇_R ان مقدار معلوم کے لحاظ سے ڈھلوان ہے اس مرتبہ درج ذیل ہوگا

$$(۱۰.۴۴) \quad \gamma_n(t) = i \int_{\mathbf{R}_i}^{\mathbf{R}_f} \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \cdot d\mathbf{R}$$

اور اگر وقت T کے بعد ہیمیلٹنی واپس اپنی اصل روپ اختیار کرتا ہوں تب کل ہندسی تبدیلی درج ذیل ہوگی

$$(۱۰.۴۵) \quad \gamma_n(T) = i \oint \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \cdot d\mathbf{R}$$

یہ مقدار معلوم فضا میں ایک بند راہ پر لکیری مکمل ہے جو عموماً غیر صفر ہوگا مساوات 45.10 کو پہلی مرتبہ 1984 میں میکائل بیری نے حاصل کیا اور یوں $\gamma_n(T)$ ہیٹ بیری کہلاتا ہے دھیان رہے ہیں کہ جب تک تبدیلی اتنی آہستہ ہو کہ قیاس حرارت ناگزیر کے شرائط مطمئن ہوتے ہوں $\gamma_n(T)$ کی قیمت صرف اس راہ پر منحصر ہوگی جس پر چلا جائے تاکہ راہ پر چلنے کی رفتار پر اس کے برعکس مجموعی حرکت ہیٹ

$$\theta_n(T) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T E_n(t') dt'$$

گزرے ہوئے وقت کا تابع ہوگا

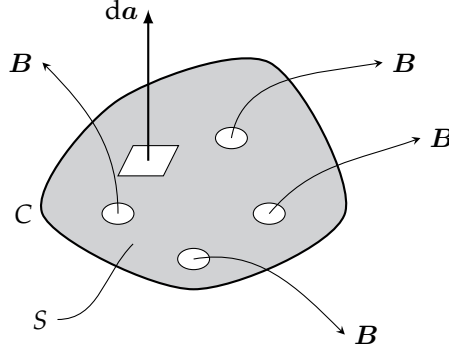
ہم اس سوچ کے عادی ہیں کہ تفاعل موج کا ہیٹ کچھ بھی ہو سکتا ہے اور طبعی مقداروں میں جہاں $|\Psi|^2$ پایا جاتا ہے ہیٹ حبز و ضرب کٹ جاتا ہے اسی لیے عموماً لوگوں کا خیال تھا کہ ہندسی ہیٹ کی کوئی طبعی اہمیت نہیں پائی جاتی ہے آئسٹر $\psi_n(t)$ کا ہیٹ بھی اختیاری ہے یہ جناب بیری کی دور اندیشی ہے کہ انہوں نے اس حقیقت کو پہچاننا کہ ہیمیلٹنی کو کسی بند دائرے پر لے جاتے ہوئے واپس اپنی اصل روپ میں لانے سے ابتدائی اور اختتامی ہیٹ کے بیچ فاصلہ غیر اختیاری ہوگا جسے حقیقت آنا کا حساب سکتا ہے مثال کے طور پر ذرات جو تمام حال Ψ میں ہوں کی ایک شعاع کو دو حصوں میں تقسیم کر کے صرف ایک حصے کو حرارت نہ گزرتے ہوئے مخفی سے گزارا جاتا ہے دونوں حصوں کو دوبارہ اکٹھا کرنے سے مجموعی تفاعل موج درج ذیل روپ کا حاصل ہوگا

$$(۱۰.۴۶) \quad \Psi = \frac{1}{2} \Psi_0 + \frac{1}{2} \Psi_0 e^{i\Gamma}$$

جہاں سیدھی پہنچتی شعاع کا تفاعل موج Ψ_0 ہے اور متغیر H کی بنا پر شعاع کا اضافی ہیٹ Γ ہے جس کا کچھ حصہ حرکتی اور کچھ حصہ ہندسی ہوگا اس صورت میں درج ذیل ہوگا

$$(۱۰.۴۷) \quad |\Psi|^2 = \frac{1}{4} |\Psi_0|^2 (1 + e^{i\Gamma}) (1 + e^{-i\Gamma})$$

$$(۱۰.۴۸) \quad = \frac{1}{2} |\Psi_0|^2 (1 + \cos \Gamma) = |\Psi_0|^2 \cos^2(\Gamma/2)$$



شکل ۱۰.۸: بند مخفی C کے بیچ سطح S سے گزرتا مقناطیسی بہاؤ۔

یوں تعمیلی مداخلت اور تباہ کن مداخلت نکات جہاں Γ کی قیمت π کی بالترتیب جفت اور طاق مضرب ہوگی کو دیکھ کر ہم Γ کی پیمائش کر سکتے ہیں بیری اور دیگر مصنفین کو شبہ تھا کہ زیادہ بڑی حیرت کی ہیئت کی موجودگی میں ہندسی ہیئت نظر نہیں آئے گی لیکن انہیں علیحدہ کرنا ممکن ثابت ہوا ہے تین آبادی مقدار معلوم فضا $R = (R_1, R_2, R_3)$ کی صورت میں کلیاں بیری مساوات 45.10 سمتی مخفیہ A کی صورت میں مقناطیسی بہاؤ کہ کلیہ کا یاد دلانی ہے سطح S جس کی سرحد مخفی C ہو سے درج ذیل بہاؤ گزرتا ہے (شکل ۱۰.۸)۔

$$\Phi \equiv \int_S B \cdot da \quad (10.49)$$

مقناطیسی میدان کو سمتی مخفیہ کی روپ میں $(B = \nabla \times A)$ لکھ کر مسئلہ سٹوکس کی اطلاق سے درج ذیل حاصل ہوگا

$$\Phi = \int_S (\nabla \times A) \cdot da = \oint_C A \cdot dr \quad (10.50)$$

یوں مقدار معلوم فضا میں بند راہ کے اندر سے مقناطیسی میدان کے بہاؤ

$$“B” = i \nabla_R \times \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle \quad (10.51)$$

کو ہیئت بیری تصور کیا جاسکتا ہے دوسرے لفظوں میں تین آبادی صورت میں ہیئت بیری کو ایک سطحی نکل کی صورت میں لکھا جاسکتا ہے

$$\gamma_n(T) = i \int [\nabla_R \times \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle] \cdot da \quad (10.52)$$

مقناطیسی مشابہت کو کافی دور تک لے جایا جاسکتا ہے تاہم ہماری استعمال کے نقطہ نظر سے مساوات 51.10 محض $\gamma_n(T)$ کو لکھنے کا دوسرا انداز ہے

سوال ۱۰.۳:

۱. لامتناہی چوکور کنویں کی چوڑائی w_1 سے بھڑکر w_2 ہونے کی صورت میں مساوات 42.10 استعمال کرتے ہوئے ہندسی تبدیلی ہیئت تلاش کریں

ب. اگر وسعت مستقل شرح $(dw/dt = v)$ سے بڑھے تب حرکی تبدیلی ہیئت کیا ہوگی

ج. اب اگر چوڑائی کم ہو واپس w_1 ہو جاتی ہے تب اس ایک تیسرے کاپیٹ سیری کیا ہوگا

سوال ۱۰.۴: ڈیٹا تفاعل کنواں مساوات 114.2 واحد ایک مقید حال مساوات 129.2 کا حاصل ہے α آہستہ آہستہ α_1 سے بڑھ کر α_2 ہوتا ہے ہندسی تبدیلی ہیئت کا حساب لگائیں اگر تبدیلی ایک مستقل شرح $da/dt = c$ سے رونما ہو تب حرکی تبدیلی ہیئت کیا ہوگا

سوال ۱۰.۵: دکھائی کے حقیقی $\psi_n(t)$ کی صورت میں ہندسی ہیئت صفر ہوگا سوال 3.10 اور 4.10 اس کی مثالیں ہیں امتیازی تفاعل کے ساتھ ایک غیر ضروری لیکن قانونی طور پر بالکل جائز جزو ضروری ہیئت منسلک کریں $\psi'_n(t) \equiv e^{i\Phi_n} \psi_n(t)$ جہاں $\Phi_n(\mathbf{R})$ ایک اختیاری حقیقی تفاعل ہے یقیناً آپ غیر صفر ہندسی ہیئت حاصل کریں گے لیکن دیکھنا یہ ہے کہ اسے مساوات 23.10 میں پر کرنے سے کیا ہوگا اور بند راہ پر صفر حاصل ہوگا سبق غیر صفر ہیئت سیری کی خاطر آپ کو ایک ہیملٹنی میں ایک سے زیادہ تابع وقت مقدار معلوم کی ضرورت ہوگی اور دو ایسا ہیملٹنی درکار ہوگا جو غیر حقیر مخلوط امتیازی تفاعل دیتا ہوں

مثال ۱۰.۲: ہیئت سیری کی کلاسیکی مثال ایک مستقل مقدار کی مقناطیسی میدان جس کی سمت تبدیل ہوتی ہو میں مبداء پر پڑا ہوا ایک الیکٹران ہے پہلے اس خصوصی صورت کو دیکھتے ہیں جس کا تجزیہ مثال 1.10 میں کیا گیا اور جس میں محور z کے ساتھ ایک اٹل زاویہ α بناتے ہوئے $B(t)$ ایک مستقل زاویہ یعنی مستقر رفتار ω سے استقبالی حرکت کرتا ہو میدان بھی کے ساتھ ساتھ ہم میدان الیکٹران کی صورت میں مساوات 33.10 ٹھیک ٹھیک حل دیتی ہے حرارت نہ گزر صورت $\omega_1 \ll \omega$ میں

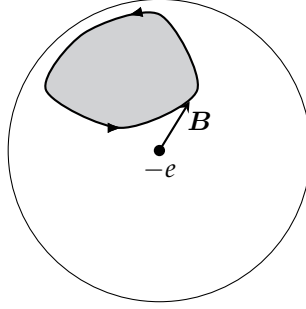
$$(10.53) \quad \lambda = \omega_1 \sqrt{1 - 2 \frac{\omega}{\omega_1} \cos \alpha + \left(\frac{\omega}{\omega_1}\right)^2} \cong \omega_1 \left(1 - \frac{\omega}{\omega_1} \cos \alpha\right) = \omega_1 - \omega \cos \alpha$$

ہوگا لہذا مساوات 33.10 درج ذیل روپ اختیار کرے گی

$$(10.54) \quad \chi(t) \cong e^{-i\omega_1 t/2} e^{i(\omega \cos \alpha)t/2} e^{-i\omega t/2} \chi_+(t) \\ i \left[\frac{\omega}{\omega_1} \sin \alpha \sin \left(\frac{\omega_1 t}{2} \right) \right] e^{+i\omega t/2} \chi_-(t)$$

دوسرے جزو کو $0 \rightarrow \omega/\omega_1$ کی صورت میں رد کرتے ہوئے مساوات 23.10 کے مطابق نتیجہ حاصل ہوگا حرکی ہیئت درج ذیل ہے

$$(10.55) \quad \theta + (t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E + (t') dt' = -\frac{\omega_1 t}{2}$$



شکل ۱۰.۹: مستقل مقدار لیکن بدلتے رخ کا مقناطیسی میدان بند راہ پر چلتا ہے۔

جہاں مساوات 29.10 سے $E_+ = \hbar\omega_1/2$ ہوگا لہذا ہیٹ سیری درج ذیل ہوگی

$$(۱۰.۵۶) \quad \gamma + (t) = (\cos \alpha - 1) \frac{\omega t}{2}$$

ایک مکمل پھیرا کے لیے $T = 2\pi/\omega$ ہوگا لہذا ہیٹ سیری درج ذیل ہوگی

$$(۱۰.۵۷) \quad \gamma + (T) = \pi(\cos \alpha - 1)$$

اب ایک زیادہ عمومی صورت پر غور کرتے ہیں جس میں مقناطیسی میدان سمتیہ کی نوک رداس B_0 کی کراں کہ سطح ہر ایک اختیاری بند راہ پر چلتا ہے (شکل ۱۰.۹)۔ میدان $B(t)$ کے ساتھ ساتھ ہم میدان کو ظاہر کرنے والا امتیازی حال درج ذیل روپ کا ہوگا سوال 30.4 دیکھیں

$$(۱۰.۵۸) \quad \chi_+ = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}$$

جہاں B کے دونوں کردی مہدد θ اور π وقت کے تغیرات ہیں کردی مہدد میں ڈھلواں درج ذیل ہوگا جیسے آپ جدول سے دیکھ سکتے ہیں

$$(۱۰.۵۹) \quad \nabla \chi_+ = \frac{\partial \chi_+}{\partial r} \hat{r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \chi_+}{\partial \theta} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \chi_+}{\partial \phi} \hat{\phi}$$

$$(۱۰.۶۰) \quad = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} -(1/2) \sin(\theta/2) \\ (1/2) e^{i\phi} \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \hat{\theta} + \frac{1}{r \sin \theta} \begin{pmatrix} 0 \\ i e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \hat{\phi}$$

یوں درج ذیل ہوگا

(۱۰.۶۱)

$$\langle \chi_+ | \nabla \chi_+ \rangle = \frac{1}{2r} \left[-\sin(\theta/2) \cos(\theta/2) \hat{\theta} + \sin(\theta/2) \cos(\theta/2) \hat{\theta} + 2i \frac{\sin^2(\theta/2)}{\sin \theta} \hat{\phi} \right]$$

$$(۱۰.۶۲) \quad = i \frac{\sin^2(\theta/2)}{r \sin \theta} p \hbar i$$

مسوات 51.10 کے لیے ہمیں اس مقدار کی گردش درکار ہوگی

$$(۱۰.۶۳) \quad \nabla \times \langle \chi_+ | \nabla \chi_+ \rangle = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \left(\frac{i \sin^2(\theta/2)}{r \sin \theta} \right) \right] \hat{r} = \frac{i}{2r^2} \hat{r}$$

یوں مسوات 51.10 کے تحت درج ذیل ہوگا

$$(۱۰.۶۴) \quad \gamma_+(T) = -\frac{1}{2} \int \frac{1}{r^2} \hat{r} \cdot d\mathbf{a}$$

مکمل متبرہ کی سطح پر اس رقبے پر لپا جائے گا جس کو B کی چھوٹی ایک پھیرا میں گرتا ہو لہذا $d\mathbf{a} = r^2 d\Omega \hat{r}$ ہوگا جس کے تحت درج ذیل ہوگا

$$(۱۰.۶۵) \quad \gamma_+(T) = -\frac{1}{2} \int d\Omega = -\frac{1}{2} \Omega$$

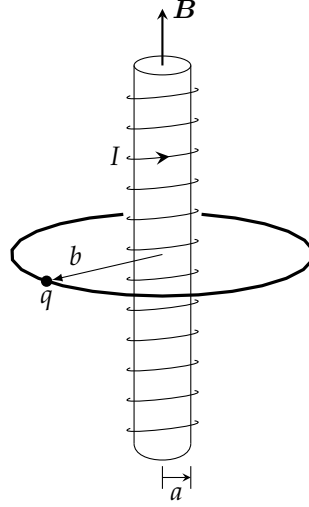
جہاں Ω زاویہ ہے یہ ایک انتہائی سادہ نتیجہ ہے جو ہمیں اس کلاسیکی مسئلہ کی یاد دلاتا ہے جس سے ہم نے یہ تبصرہ شروع کیا یعنی زمین کی سطح پر ایک بند راہ پر ایک بلا رگڑ روتاص کی منتقلی اس نتیجہ کے تحت کسی اختیاری بند راہ پر ایک مقناطیس کی مدد سے الیکٹران کے چکر کو حرارت نہ گزر طریقے سے لے جانے سے کل ہندی تبدیلی بیت مقناطیسی میدان سمتیہ کی چھوٹی سے حاصل ٹھوس زاویہ کی منفی منفی بڑا ہوگا مسوات 37.10 کو مد نظر رکھتے ہوئے یہ عمومی نتیجہ مسوات 56.10 کہ خصوصی نتیجہ کے مطابق ہے جیسا یقیناً ہونا بھی چاہیے □

سوال ۱۰.۶: ایک ذرہ جس کا چکر ایک ہو کے لئے مسوات 62.10 کا مائش حاصل کریں جواب $-\Omega$ ایک ذرہ جس کا چکر s ہو کے لیے نتیجہ $-s\Omega$

۱۰.۲.۳ اہارونو و لوہم اثر

کلاسیکی برقی حرکیات میں طبیعی متداریں برقی اور مقناطیسی میدان ہیں؛ مخفیہ φ اور A بلا واسطہ نامتابل پیمائش ہیں

$$(۱۰.۶۶) \quad E = -\nabla \varphi - \frac{\partial A}{\partial t}, \quad B = \nabla \times A$$



شکل ۱۰۱: ایک دائرہ، جس کے اندر سے ایک لمب بیچچاں برقی مقناطیس گزرتا ہو، پر ایک باردار ذرہ حرکت کرتا ہے۔

میکسول مساوات اور قواعدہ لورنس قوت جیسے بنیادی قوانین مخفیہ کا کوئی ذکر نہیں کرتے ہیں جو منطقی نقطہ نظر سے ایک نظریہ مرتب کرنے کے لیے کارآمد لیکن دیے غصیر ضروری ہیں بقصدنا ہم بغیر خوف و خطر ان مخفیہ کو تبدیل کر سکتے ہیں

$$(۱۰.۶۷) \quad \varphi \rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}, \quad \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla \Lambda$$

جہاں Λ معتام اور وقت کا کوئی بھی تقاضا ہو سکتا ہے اسے ماپ تبادلہ کہا جاتا ہے اور جیسا آپ مساوات 63.10 استعمال کرتے ہوئے دیکھ سکتے ہیں کہ اس کا میدانوں پر کوئی اثر نہیں ہوگا کوانٹائی میکانیات میں مخفیہ زیادہ اہم کردار ادا کرتی ہے چونکہ ہیملٹنی کو φ اور \mathbf{A} کی صورت میں تاکہ E اور B کی صورت میں بیان کیا جاتا ہے

$$(۱۰.۶۸) \quad H = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right)^2 + q\varphi$$

بہر حال زیر ماپ تبادلہ یہ نظریہ غیر متغیر ہے سوال 61.4 دیکھیں اور بہت لمبے عرصے کے لیے مانا گیا کہ جن خطوں میں E اور B صفر ہوں وہاں کسی قسم کا برقی مقناطیسی اثر نہیں پایا جائے گا بالکل اسی طرح جس طرح کلاسیکی نظریہ میں ہوتا ہے لیکن 1959 میں اہارونو اور بوہم نے دکھایا کہ اس خطہ میں بھی جہاں میدان صفر ہو سستی مخفیہ حرکت پذیر باردار ذرے کے کوانٹائی رویہ پر اثر انداز ہوگا میں ایک سادہ مثال پیش کرنے کے بعد اہارونو بوہم اثر پر تبصرہ کے بعد اس کا تعلق ہیٹ سیری کے ساتھ پیش کروں گا۔

فرض کریں ایک ذرا کو رداس b کے دائرہ پر رہنے کا پابند بنایا جائے اس دائرے کے محور پر رداس $a < b$ کا ایک لمب لچھا پایا جاتا ہے جس میں یک سستی برقی رو I ہے (شکل ۱۰۱) بہت لمب لچھا کی صورت میں لچھے کے

اندر مقناطیسی میدان یکساں ہوگا جبکہ بیرونی میدان صفر ہوگا تاہم لچھے کا بیرونی سمتی مخفیہ غیر صفر ہوگا لہذا مقناطیسی موزوں ماپ شرط $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ لیتے ہوئے درج ذیل ہوگا

$$(۱۰.۶۹) \quad \mathbf{A} = \frac{\Phi}{2\pi r} \hat{\phi}, \quad (r > a)$$

جہاں $\Phi = \pi a^2 B$ لچھے سے گزرتا ہو مقناطیسی ہوا ہوگا ساتھ ہی لچھا خود غیر باردار ہے لہذا غیر سمتی مخفیہ φ صفر ہے ایسی صورت میں ہیملٹنی مساوات 65.10 درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے

$$(۱۰.۷۰) \quad H = \frac{1}{2m} [-\hbar^2 \nabla^2 + q^2 A^2 + 2i\hbar q \mathbf{A} \cdot \nabla]$$

اب تفعل موج صرف زاویہ ائمت $(\theta = \pi/2, r = b)$ پر منحصر ہے لہذا $\nabla \rightarrow (p\hbar/b)(d/d\phi)$ ہوگا اور مساوات شروع درج ذیل لکھی جائے گی

$$(۱۰.۷۱) \quad \frac{1}{2m} \left[-\frac{\hbar^2}{b^2} \frac{d^2}{d\phi^2} + \left(\frac{q\Phi}{2\pi b} \right)^2 + i \frac{\hbar q \Phi}{\pi b^2} \frac{d}{d\phi} \right] \psi(\phi) = E \psi(\phi)$$

یہ مستقل عددی سروں والی خطی تفعلی مساوات ہے

$$(۱۰.۷۲) \quad \frac{d^2 \psi}{d\phi^2} - 2i\beta \frac{d\psi}{d\phi} + \epsilon \psi = 0$$

جہاں درج ذیل ہیں

$$(۱۰.۷۳) \quad \beta \equiv \frac{q\Phi}{2\pi\hbar}, \quad \epsilon \equiv \frac{2mb^2E}{\hbar^2} - \beta^2$$

اس کے حل درج ذیل روپ کے ہونگے

$$(۱۰.۷۴) \quad \psi = A e^{i\lambda\phi}$$

جہاں درج ذیل ہوگا

$$(۱۰.۷۵) \quad \lambda = \beta \pm \sqrt{\beta^2 + \epsilon} = \beta \pm \frac{b}{\hbar} \sqrt{2mE}$$

نقطہ $\phi = 2\pi$ پر $\psi(\phi)$ کی استرار کی بنا پر λ عدد صحیح

$$(۱۰.۷۶) \quad \beta \pm \frac{b}{\hbar} \sqrt{2mE} = n$$

ہوگا جس سے درج ذیل حاصل ہوگا

$$(۱۰.۷۷) \quad E_n = \frac{\hbar^2}{2mb^2} \left(n - \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} \right)^2, \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

لچھا دائرے پر ذرا کی دوری انحطاط ختم کرتا ہے سوال 46.2 مثبت n جو لچھا میں رو کے رخ حرکت کرتے ہوئے ذرا کو ظاہر کرتا ہے q مثبت لیتے ہوئے منفی n کے لحاظ سے جو مخالف رخ ذرا کو ظاہر کرتا ہے کے لحاظ سے نسبتاً کم توانائی دیتا ہے زیادہ اہم بات یہ ہے کہ احبازی توانائیوں کا دارومدار لچھے کے اندر میدان پر ہوگا اگرچہ اس مقام پر جہاں ذرا پایا جاتا ہے میدان صفر ہے زیادہ عمومی صورت پر غور کرنے کی خاطر فرض کریں ایک ذرہ ایسے خطہ میں حرکت کرتا ہے جہاں B ہے لہذا $\nabla \times \mathbf{A} = 0$ ہوگا تاہم \mathbf{A} خود غیر صفر ہے اگرچہ میں فرض کرتا ہوں کہ \mathbf{A} ساکن ہے اس ترکیب کو تابع وقت مخفیہ کے لئے عمومیت دی جاسکتی ہے مخفی توانائی V جس میں برقی حصہ شامل یا غیر شامل ہو سکتا ہے کی مساوات شروع کریں

$$(10.48) \quad \left[\frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right)^2 + V \right] \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

کی سادہ روپ درج ذیل لکھ کر حاصل کی جاسکتی ہے

$$(10.49) \quad \Psi = e^{ig} \Psi'$$

جہاں $g(\mathbf{r})$ درج ذیل ہے

$$(10.50) \quad g(\mathbf{r}) \equiv \frac{q}{\hbar} \int_I^{\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}') \cdot d\mathbf{r}'$$

اور I کوئی بھی اختیاری نقطہ حوالہ ہے دھیان رہے کہ یہ تعریف صرف اس صورت با معنی ہوگی جب پورا خطہ میں $\nabla \times \mathbf{A} = 0$ ہو ورنہ لکیری تکمل I سے \mathbf{r} تک راہ پر منحصر ہوگا اور یوں \mathbf{r} کا تعلق عمل نہیں ہوگا Ψ' کی صورت میں Ψ کا ڈھلوان درج ذیل ہوگا

$$\nabla \Psi = e^{ig} (i\nabla g) \Psi' + e^{\nabla \Psi'}$$

لیکن $\nabla g = (q/\hbar) \mathbf{A}$ کے برابر ہے لہذا

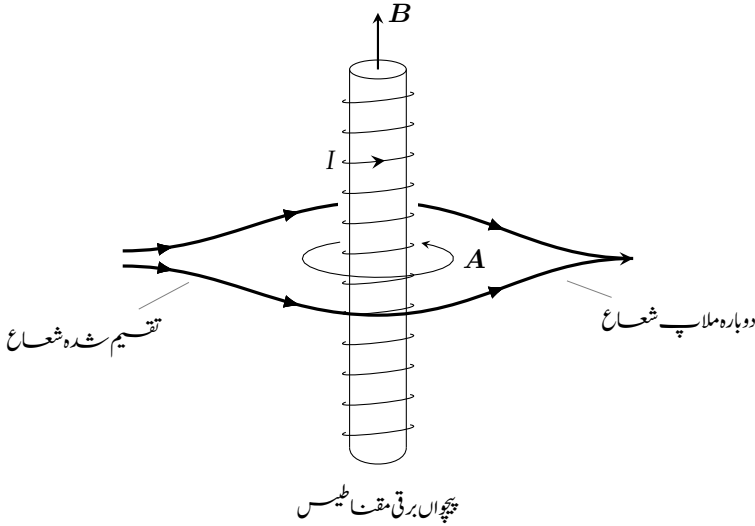
$$(10.51) \quad \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right) \Psi = \frac{\hbar}{i} e^{ig} \nabla \Psi'$$

اور یوں درج ذیل ہوگا

$$(10.52) \quad \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right)^2 \Psi = -\hbar^2 e^{ig} \nabla^2 \Psi'$$

اس کو مساوات 75.10 میں پر کر کے مشترکہ جزو ضربی e^{ig} کو کاٹ کر درج ذیل ملت ہے

$$(10.53) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi' + V \Psi' = i\hbar \frac{\partial \Psi'}{\partial t}$$



شکل ۱۰.۱۱: اہارنو و بوہم اثر: الیکٹران شعاع تقسیم ہو کر آدھا حصہ لمبے پتچواں برقی مقناطیس کے ایک طرف اور دوسرا حصہ دوسرے طرف سے گزرتا ہے۔

بظاہر Ψ' بغیر A مساوات شرودنگر کو مطمئن کرتا ہے مساوات 80.10 کا حل تلاش کرنے کے بعد بغیر گردش سمتی مخفیہ سے پیدا تصحیح کو شامل کرنا حقیر سا کام ہوگا: ہمیں صرف پیتی جبز و ضربی e^{ig} ساتھ منسلک کرنا ہوگا۔

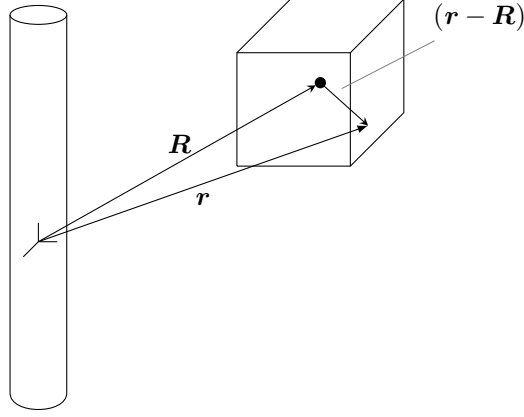
عہد انو اور بوہم نے ایک تجربہ تجویز کیا جس میں الیکٹران کی شعاع کو دو حصوں میں تقسیم کر کے لمبے لمبے کے دونوں اطراف سے گزار کر دوبارہ اکٹھا کیا جاتا ہے (شکل ۱۰.۱۱) ان شعاعوں کو لمبے لمبے سے اتنا دور رکھا جاتا ہے جہاں $B = 0$ ہوتا ہے A جس سے مساوات 66.10 پیش کرتی ہے غیر صفر ہوگا اور دونوں اطراف V کی قیمت ایک جیسی تصور کرتے ہوئے اختتامی نقطہ پر دونوں شعاعوں میں پیتی منفرق پایا جائے گا

$$(۱۰.۸۴) \quad g = \frac{q}{\hbar} \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \frac{q\Phi}{2\pi\hbar} \int \left(\frac{1}{r} \hat{\phi} \right) \cdot (r \hat{\phi} d\phi) = \pm \frac{q\Phi}{2\hbar}$$

یہاں مثبت علامت ان الیکٹران کے لیے ہوگی جو لمبے لمبے میں A کے رخ حرکت کرتے ہیں دونوں شعاعوں کے بیچ پیتی منفرق اس مقناطیسی بہاؤ کے راست متناسب ہوگا جس سے ان کی راہ گسرتے ہیں

$$(۱۰.۸۵) \quad \text{پیتی منفرق} = \frac{q\Phi}{\hbar}$$

اس پیتی منتقل سے متاثر پیمائش مداخلت مساوات 48.10 پیدا ہوتی ہے جس کی تجرباتی تصدیق چیمبرز اور ساتھی کرچے ہیں اہارنو و بوہم اثر کو ہندسی پیتی کی ایک مثال تصور کی جاسکتی ہے منفرض کریں مخفیہ $V(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ ایک



شکل ۱۰.۱۲: مخفیہ $V(r - R)$ ایک ذرہ کو ڈبہ میں مقید کیے ہوئے ہے۔

باردار ذرا کو ایک ڈبہ میں رہنے کا پابند بناتا ہو جہاں ڈبے کا مرکز لمبے لمبے سے باہر نقطہ R پر ہے؛ شکل ۱۰.۱۲ دیکھیں۔ ہم کچھ ہی دیر میں اس ڈبہ کو لمبے لمبے کے گرد ایک پھیلا دیں گے لہذا R وقت کا تقاضا ہو گا تاہم ابھی اسے ایک غیر متغیر سمتیہ تصور کریں اس ہیملٹنی کے امتیازی تقاضا درج ذیل تعین کرتی ہے

$$(10.84) \quad \left\{ \frac{1}{2m} \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - qA(r) \right]^2 + V(r - R) \right\} \psi_n = E_n \psi_n$$

ہم اس طرز کی مساوات کو حل کرنا چاہتے ہیں ہم

$$(10.85) \quad \psi_n = e^{ig} \psi'_n$$

لیتے ہیں جہاں درج ذیل ہوگا

$$(10.88) \quad g \equiv \frac{q}{\hbar} \int_R^r A(r') \cdot dr'$$

اور ψ'_n اسی امتیازی قدر مساوات کو صرف اس صورت میں مطمئن کرے گا جب $A \rightarrow 0$ ہو

$$(10.89) \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r - R) \right] \psi'_n = E_n \psi'_n$$

آپ نے دیکھا کہ ψ'_n ہٹاؤ $r - R$ کا تقاضا ہے نہ کہ ψ_n کی طرح علیحدہ علیحدہ r اور R کا تقاضا آئیے اب اس ڈبہ کو لمبے لمبے کے گرد ایک پھیلا دیے ہیں یہاں اس عمل کا حرارت نہ گزر ہونے کے بھی ضرورت نہیں ہے ہیٹیری تعین کرنے کی خاطر ہمیں مقدار $\langle \psi_n | \nabla \psi_n \rangle$ کی قیمت درکار ہوگی درج ذیل کی بنا پر

$$\nabla_R \psi_n = \nabla_R [e^{ig} \psi'_n(r - R)] = -\frac{q}{\hbar} A(R) e^{ig} \psi'_n(r - R) + e^{ig} \nabla_R \psi'_n(r - R)$$

ہم درج ذیل حاصل کرتے ہیں

$$\begin{aligned}
 (10.90) \quad \langle \psi_n | \nabla \psi_n \rangle &= \int e^{-ig} [\psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})]^* e^{ig} \left[-i \frac{q}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + \nabla_R \psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \right] d^3 r \\
 &= -i \frac{q}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{R}) - \int [\psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R})]^* \nabla \psi'_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}) d^3 r
 \end{aligned}$$

بغیر زبر نوشت $\nabla \mathbf{r}$ کے لحاظ سے ڈھلوان ظاہر کرتا ہے اور میں نے $(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ کے تفاسل پر عمل کے دوران $\nabla_R = -\nabla$ لیا یہاں آخری مکمل ہیملٹنی $-(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V$ کے امتیازی حال میں معیار حرکت کی توقعاتی قیمت ضرب i/\hbar ہے جو ہم حصہ 1.2 سے جانتے ہیں کہ صفر ہوگا یوں درج ذیل ہوگا

$$(10.91) \quad \langle \psi_n | \nabla_R \psi_n \rangle = -i \frac{q}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{R})$$

اس کو کلیہ بیری مساوات 45.10 میں پر کرتے ہوئے درج ذیل اخذ ہوگا

$$(10.92) \quad \gamma_n(T) = \frac{q}{\hbar} \oint \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = \frac{q}{\hbar} \int (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{a} = \frac{q\Phi}{\hbar}$$

جو اہارونو و بوہم نتیجہ مساوات 82.10 کی تصدیق کرتا ہے اور دکھاتا ہے کہ اہارونو و بوہم اثر فنی ہیئت کی ایک خصوصی صورت ہے اہارونو و بوہم اثر سے ہم کیا مطلب لیں ظاہر ہے ہماری کلاسیکی شعور درست نہیں ہے ایسے خطوں میں جہاں میدان صفر ہوں برقناطیسی اثرات پائے جاسکتے ہیں دھیان رہے کہ اس سے \mathbf{A} خود قابل پیمائش نہیں ہو جاتا آخری نتیجہ میں صرف گھیرا ہوا ہوا پایا جاتا ہے اور نظریہ اب بھی گیج غیر متغیر رہتا ہے

سوال ۱۰.۷:

ا. مساوات 65.10 سے مساوات 67.10 اخذ کریں

ب. مساوات 78.10 سے آغاز کرتے ہوئے مساوات 79.10 اخذ کریں

سوال ۱۰.۸: ایک ذرہ لامتناہی چوکور کنویں وقفہ $0 \leq x \leq a$ کی زمینی حال سے آغاز کرتا ہے اب کنویں کے وسط کے متعرب آہستہ آہستہ ایک دیوار کھڑی کی جاتی ہے

$$V(x) = f(t)\delta(x - \frac{a}{2} - \epsilon)$$

جہاں $f(t)$ آہستہ آہستہ صفر سے ∞ تک بڑھتا ہے مسئلہ حرارت ناگزیر کے تحت یہ ذرا ارتقائی ہیمیلین کے زمینی حال میں ہی رہے گا

ا. وقت $t \rightarrow \infty$ پر زمینی حال کا حنا کہ بنائیں اشارہ: یہ اس لامتناہی چوکور کنویں کا زمینی حال ہوگا جس میں $a/2 + \epsilon$ پر ناقابل گزر رکاوٹ ہو آپ دیکھیں گے کہ ذرا بائیں ہاتھ کے نسبتاً بڑے حصہ میں رہنے کا پابند ہوگا

$$(1 \cdot 9 \Delta) \quad \Psi(x, t) = \psi_n(x - x_c) e^{\frac{i}{\hbar} \left[-(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega t + m \dot{x}_c (x - \frac{x_c}{2}) + \frac{m \omega^2}{2} \int_0^t f(t') x_c(t') x_c(t') dt' \right]}$$

ج. دکھائے کہ $H(t)$ کے امتیازی تفاعلات اور امتیازی افتدار درج ذیل ہوں گے

$$(۱۰.۹۶) \quad \psi_n(x, t) = \psi_n(x - f); \quad E_n(t) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega - \frac{1}{2} m \omega^2 f^2$$

د. دکھائیں کہ حرارت نہ گزر تخمین کی صورت میں کلاسیکی مقام مساوات 91.10 درج ذیل روپ اختیار کرتی ہے $x_c(t) \cong f(t)$ سیاق و سباق کے لحاظ سے یہاں حرارت نہ گزر تفاعل f کہ وقتی تفرق پر کیا بندی عائد کرتی ہے اشارہ $\sin[\omega(t - t')] \cos[\omega(t - t')] (1/\omega) (d/dt')$ لکھ کر مکمل بالخص استعمال کریں

ه. اس مثال کے لیے مسئلہ حرارت نہ گزر کی تصدیق جزو (ج) اور (د) کے نتائج سے درج ذیل دکھا کر کریں

$$(۱۰.۹۷) \quad \Psi(x, t) \cong \psi_n(x, t) e^{i\theta_n(t)} e^{i\gamma_n(t)}$$

تصدیق کریں کہ حرارت نہ گزر کا روپ درست ہے مساوات 39.10 کیا ہندی ہیئت آپ کے توقعات کے مطابق ہے

سوال ۱۰.۱۰: حرارت نہ گزر تخمین کو مساوات 12.10 میں عددی سر $c_m(t)$ کے حرارت نہ گزر تسلسل کا پہلا جزو تصور کیا جاسکتا ہے فرض کریں نظام n وی حال سے آغاز کرتا ہے حرارت نہ گزر تخمین میں یہ ایک اضافی تابع وقت ہندی ہیئت جزو ضربی مساوات 21.10 کے علاوہ n وی حال میں ہی رہے گا

$$c_m(t) = \delta_{mn} e^{i\gamma_n(t)}$$

ا. اس کو مساوات 16.10 کے دائیں ہاتھ میں پر کر کے حرارت نہ گزر کی پہلی تصحیح حاصل کریں

$$(۱۰.۹۸) \quad c_m(t) = c_m(0) - \int_0^t \langle \psi_m(t') | \frac{\partial}{\partial t'} \psi_n(t') \rangle e^{i\gamma_n(t')} e^{i(\theta_n(t') - \theta_m(t'))} dt'$$

اس سے ہم متعریب حرارت نہ گزر خطوں میں تحویلی احتمالات کا حساب کر سکتے ہیں دوسری تصحیح کی حسب طرہ ہم مساوات 95.10 کو مساوات 16.10 کے دائیں ہاتھ میں پر کریں گے وغیرہ وغیرہ

ب. ایک مثال کے طور پر مساوات 95.10 کا اطلاق جبری مرتعش سوال 9.10 پر کریں دکھائیں کہ متعریب حرارت نہ گزر تخمین کی صورت میں صرف برابر والے سطحوں جن کے لیے درج ذیل ہوگا میں تحویل ممکن ہوگی

$$c_{n+1}(t) = i \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \sqrt{n+1} \int_0^t \dot{f}(t') e^{i\omega t'} dt'$$

$$c_{n-1}(t) = i \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \sqrt{n+1} \int_0^t \dot{f}(t') e^{-i\omega t'} dt'$$

یقیناً حویلی احتمالات ان کے مطلق مربع کے برابر ہوں گے

باب ۱۱

بکھراؤ

۱۱.۱ تعارف

۱۱.۱.۱ کلاسیکی نظریہ بکھراؤ

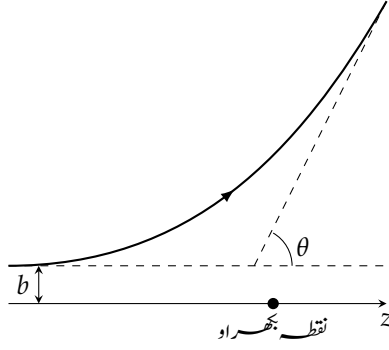
فرض کریں کسی مرکز بکھراؤ پر ایک ذرہ کا آمد ہوتا ہے مثلاً ایک پروٹان کو ایک بھاری مرکزہ پر داعضا جاتا ہے یہ توانائی E اور ٹکراؤ مقدار معلوم b کے ساتھ آکر کسی زاویہ بکھراؤ θ پر اُبھرتا ہے؛ شکل ۱۱.۱ دیکھیں۔ میں اپنی آسانی کے لئے فرض کرتا ہوں کہ ہدف استہتی تشکلی ہے یوں خط حرکت ایک مستوی میں پایا جائے گا اور کہ نشانہ بھاری ہے لہذا اتصادم کی بنا پر اس کی اچھال کو نظر انداز کیا جاسکتا ہے۔ کلاسیکی نظریہ بکھراؤ کا بنیادی مسئلہ یہ ہوگا: ٹکراؤ مقدار معلوم کو جانتے ہوئے زاویہ بکھراؤ کا حساب کریں۔ یقیناً عام طور پر ٹکراؤ مقدار معلوم جتنا چھوٹا ہو زاویہ بکھراؤ اتنا بڑا ہوگا۔

مثال ۱۱.۱: سختے کرہ کا بکھراؤ۔ فرض کریں ہدف رداس R کا ایک ٹھوس بھاری گیند ہے جبکہ آمدی ذرہ ہوائی صندوق کا ایک چھرا ہے جو لچھیلی ٹپکی کھ کر مڑتا ہے (شکل ۱۱.۲)۔ زاویہ α کی صورت میں ٹکراؤ مقدار معلوم $b = R \sin \alpha$ اور زاویہ بکھراؤ $\theta = \pi - 2\alpha$ ہوں گے۔ یوں درج ذیل ہوگا۔

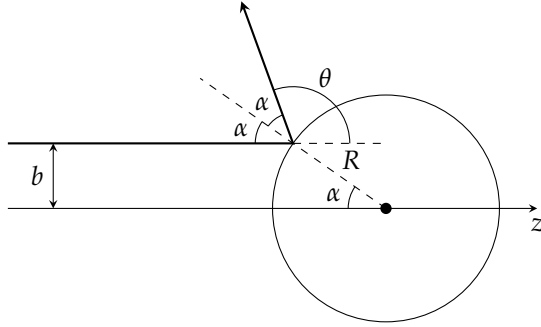
$$(11.1) \quad b = R \sin \left(\frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2} \right) = R \cos \left(\frac{\theta}{2} \right)$$

ظاہری طور پر درج ذیل ہوگا

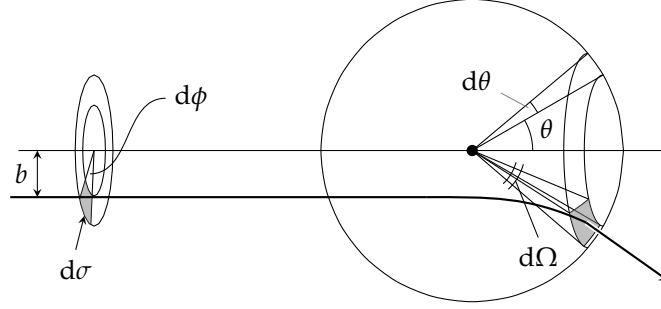
$$(11.2) \quad \theta = \begin{cases} 2 \cos^{-1}(b/R), & b \leq R \\ 0, & b \geq R \end{cases}$$



شکل ۱۱.۱: کلاسیکی مسئلہ بکھراؤ، جس میں نکتہ اور مقدار معلوم b اور زاویہ بکھراؤ θ کی وضاحت کی گئی ہے۔



شکل ۱۱.۲: سخت کرہ سے پسندیدہ بکھراؤ۔



شکل ۱۱.۳: رقبہ $d\sigma$ میں آمدی ذرات ٹھوس زاویہ $d\Omega$ میں بکھرتے ہیں۔

□

عمومی طور پر لامتناہی چھوٹے رقبہ عمودی تراش $d\sigma$ میں آمدی ذرات مطابقتی لامتناہی چھوٹے ٹھوس زاویہ $d\Omega$ میں بکھریں گے (شکل ۱۱.۳)۔ بڑی $d\sigma$ کی صورت میں $d\Omega$ بھی بڑا ہوگا تناسبی حبز و ضربی $D(\theta) \equiv d\sigma / d\Omega$ کو تفسیری بکھراؤ عمودی تراش کہتے ہیں

$$(11.3) \quad d\sigma = D(\theta) d\Omega$$

تکرار و مقدار معلوم اور راستی زاویہ ϕ کی صورت میں $d\sigma = b db d\phi$ اور $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ ہوں گے لہذا درج ذیل ہوگا

$$(11.4) \quad D(\theta) = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right|$$

چونکہ عمومی طور پر θ مقدار معلوم b کا گھٹتا ہوا تناسب ہوگا لہذا یہ تفرق در حقیقت منفی ہوگا اسی لئے مطلق قیمت لی گئی ہے۔

مثال ۱۱.۲: سخت کرہ کے بکھراؤ کے مثال جاری رکھتے ہیں۔ سخت کرہ بکھراؤ مثال ۱۱.۱ کی صورت میں

$$(11.5) \quad \frac{db}{d\theta} = -\frac{1}{2} R \sin \left(\frac{\theta}{2} \right)$$

لہذا درج ذیل ہوگا

$$(11.6) \quad D(\theta) = \frac{R \cos(\theta/2)}{\sin \theta} \left(\frac{R \sin(\theta/2)}{2} \right) = \frac{R^2}{4}$$

□

اس مثال میں تفسیری عمودی تراش θ کا تابع نہیں ہے جو ایک غیر معمولی بات ہے۔

کل عمودی تراش تمام ٹھوس زاویوں پر $D(\theta)$ کا مکمل ہوگا

$$\sigma \equiv \int D(\theta) d\Omega \quad (11.7)$$

اندازاً بات کرتے ہوئے یہ آمدی شعاع کا وہ رقبہ ہوگا جسے ہدف بکھیرتا ہے۔ مثال کے طور پر سخت کرہ بکھراؤ کی صورت میں درج ذیل ہوگا

$$\sigma = (R^2/4) \int d\Omega = \pi R^2 \quad (11.8)$$

جو ہمارے توقعات کے عین مطابق ہے۔ یہ کرہ کا رقبہ عمودی تراش ہے۔ اس رقبہ میں آمدی چھبرے ہدف کو نشانہ بنائیں گے جبکہ اس سے باہر چھبرے ہدف کو خطا کریں گے۔ یہی تصورات نرم اہداف مثلاً سرکڑہ کا کولمب میدان کے لئے بھی کارآمد ہے جن میں صرف نشانے پر لگنا یا نہ لگنا نہیں ہوگا۔

آخر میں فرض کریں ہمارے پاس آمدی ذرات کی یکساں شدت تابندگی کی ایک شعاع ہو

$$\mathcal{L} \equiv \text{اکائی رقبہ پر فی اکائی وقت آمدی ذرات کی تعداد} \quad (11.9)$$

فی اکائی وقت رقبہ $d\sigma$ میں داخل ہونے والے ذرات اور یوں ٹھوس زاویہ $d\Omega$ میں بکھراؤ والے ذرات کی تعداد $dN = \mathcal{L} d\sigma = \mathcal{L} D(\theta) d\Omega$ ہوگی لہذا درج ذیل ہوگا

$$D(\theta) = \frac{1}{\mathcal{L}} \frac{dN}{d\Omega} \quad (11.10)$$

چونکہ یہ صرف ان مفید اروں کی بات کرتا ہے جنہیں تجربہ گاہ میں باآسانی ناپا جاسکتا ہو لہذا اس کو عموماً تفسیری عمودی تراش کی تعریف لیا جاتا ہے۔ اگر ٹھوس زاویہ $d\Omega$ میں بکھرے ذرات کو محسوس کار دیکھتا ہو تب ہم اکائی وقت میں معلوم شدہ ذرات کی تعداد کو $d\Omega$ سے تقسیم کر کے آمدی شعاع کی تابندگی کے لحاظ سے معمول شدہ کرتے ہیں۔

سوال ۱۱.۱: رد فورڈ بکھراؤ۔ بار q_1 اور حسر کی توانائی E کا ایک آمدی ذرہ ایک بھاری ساکن ذرہ جس کا بار q_2 ہو سے بکھرتا ہے۔

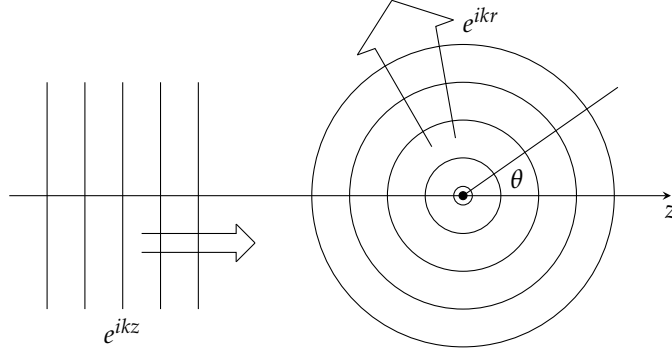
(الف) ٹکراؤ مفید اور زاویہ بکھراؤ کے بیچ رشتہ اغیز کریں۔

$$b = (q_1 q_2 / 8\pi\epsilon_0 E) \cot(\theta/2) \quad \text{جواب:}$$

(ب) تفسیری عمودی تراش تعین کریں۔

جواب:

$$D(\theta) = \left[\frac{q_1 q_2}{16\pi\epsilon_0 E \sin^2(\theta/2)} \right]^2 \quad (11.11)$$



شکل ۱۱.۳: امواج کا بکھراؤ؛ آمدی مستوی موج رخصتی کروئی موج پیدا کرتی ہے۔

(ج) دکھائیں کہ ردورڈ بکھراؤ کا کل عمودی تراش لامتناہی ہوگا۔ ہم کہتے ہیں $1/r$ مخفیہ لامتناہی ساتھ رکھتا ہے آپ کو لمب قوت سے بچ نہیں سکتے ہیں۔

۱۱.۱.۲ کوانٹائی نظریہ بکھراؤ

بکھراؤ کے کوانٹائی نظریہ میں فرض کرتے ہیں کہ ایک آمدی مستوی موج $Ae^{ikz} = \psi(z)$ جو محور z رخ حرکت کرتی ہو گا سنا ایک بکھراؤ مخفیہ سے ہوتا ہے جس کے نتیجہ میں ایک کروئی رخصتی موج پیدا ہوتی ہے (شکل ۱۱.۳)۔ یعنی ہم مساوات شرودنگر کے وہ حل تلاش کرنا چاہتے ہیں جن کی عمومی روپ درج ذیل ہو

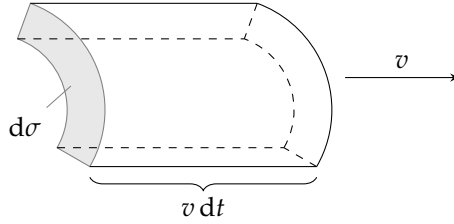
$$(11.12) \quad \psi(r, \theta) \approx A \left\{ e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right\}, \quad \text{بڑے } r \text{ کے لئے}$$

کروئی موج میں جب ضروری $1/r$ پایا جاتا ہے چونکہ احتمال کی بقا کے خاطر $|\psi|^2$ کا یہ حصہ $1/r^2$ کے لحاظ سے تبدیل ہوگا۔ عدد موج k کا آمدی ذرات کی توانائی کے ساتھ ہمیشہ کی طرح درج ذیل رشتہ ہوگا

$$(11.13) \quad k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

یہاں بھی میں فرض کرتا ہوں کہ ہدف استی تشاکلی ہے زیادہ عمومی صورت میں رخصتی کروئی موج کا حیظ f متغیرات ϕ اور θ کا تابع ہوگا۔

ہمیں حیظ بکھراؤ $f(\theta)$ تعین کرنا ہوگا۔ یہ ہمیں کسی مخصوص رخ θ میں بکھراؤ کا احتمال دیتا ہے اور یوں اس کا تعلق تفسیری عمودی تراش سے ہوگا۔ یقیناً سمتی رفتار v پر چلتے ہوئے ایک آمدی ذرہ کا وقت dt میں لامتناہی چھوٹی



شکل ۱۱.۵: وقت dt کے دوران رقبہ $d\sigma$ سے گزرتی ہوئی آمدی شعاع کا حجم dV ہے۔

رقبہ $d\sigma$ میں سے گزرنے کا احتمال (شکل ۱۱.۵ دیکھیں) درج ذیل ہوگا

$$dP = |\psi_{آمدی}|^2 dV = |A|^2 (v dt) d\sigma$$

لیکن مطابقتی ٹھوس زاویہ $d\Omega$ میں اس ذرہ کے بکھراؤ کا احتمال

$$dP = |\psi_{بکھراؤ}|^2 dV = \frac{|A|^2 |f|^2}{r^2} (v dt) r^2 d\Omega$$

بھی یہی ہوگا لہذا $d\sigma = |f|^2 d\Omega$ اور درج ذیل ہوں گے

$$(11.14) \quad D(\theta) = \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

ظاہر ہے کہ تفرقی عمودی تراش جس میں تجربہ کرنے والا دلچسپی رکھتا ہے حیطہ بکھراؤ جو مساوات شرودنگر کے حل سے حاصل ہوگا کی مطلق مربع کے برابر ہوگا آنے والے حصوں میں ہم حیطہ بکھراؤ کی حساب کے دو تراکیب جزوی موج تجزیہ اور بارن تخمینہ پر غور کریں گے۔

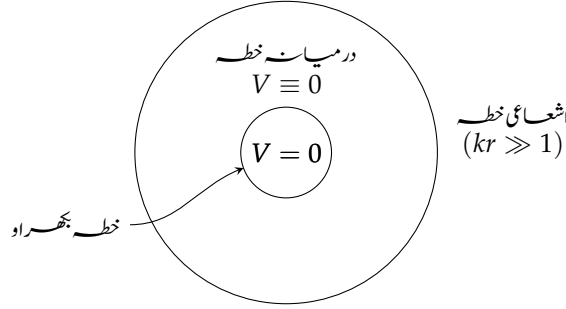
سوال ۱۱.۲: ایک بُعدی اور دو ابعادی بکھراؤ کے لئے مساوات 11.12 کے مثال تیار کریں۔

۱۱.۲ جزوی موج تجزیہ

۱۱.۲.۱ اصول و ضوابط

ہم نے باب 4 میں دیکھا کہ کروئی تشاکلی مٹھیہ $V(r)$ کے لئے مساوات شرودنگر متابل علیحدگی حلوں

$$(11.15) \quad \psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_\ell^m(\theta, \phi)$$



شکل ۱۱.۶: مقامی مخفیہ سے بکھراؤ؛ خط بکھراؤ، درمیانہ خط، اور اشعاعی خط۔

کا حاصل ہوگا جہاں Y_ℓ^m کروئی ہارمونی مساوات 4.32 ہے اور $u(r) = rR(r)$ مساوات مساوات

$$(11.12) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u = Eu$$

کو مطمئن کرتا ہے بہت بڑی r کی صورت میں مخفیہ صفر کو پہنچتا ہے اور مرکز گریز حصہ قابل نظر انداز ہوگا۔ لہذا درج ذیل لکھا جاسکتا ہے۔

$$\frac{d^2 u}{dr^2} \approx -k^2 u$$

اس کا عمومی حل درج ذیل ہے

$$u(r) = Ce^{ikr} + De^{-ikr}$$

پہلا جزو رخصتی کروئی موج کو اور دوسرا جزو آمدی موج کو ظاہر کرتا ہے پھر ہے کہ موج بکھراؤ کے لئے ہم $D = 0$ چاہتے ہیں۔ یوں بہت بڑی r کی صورت میں درج ذیل ہوگا

$$R(r) \sim \frac{e^{ikr}}{r}$$

جہاں ہم گزشتہ حصہ میں طبعی وجوہات سے آغاز کر چکے ہیں مساوات 11.12۔

یہ بہت بڑی r کے لئے ہتھیلیا ہے کہنا زیادہ درست ہوگا کہ $kr \gg 1$ کے لئے ہتھیلیا بصریات میں خط اشعاعی کہیں گے۔ یک بُعدی نظریہ بکھراؤ کی طرح ہم یہاں فرض کرتے ہیں کہ مخفیہ معتمی ہے جس سے ہمارا مراد یہ ہوگا کہ کسی مستثنائی بکھراؤ خط کے باہر یہ تقریباً صفر ہوگا (شکل ۱۱.۶)۔ درمیانی خط میں جہاں V کو رد کیا جاسکتا ہے لیکن مرکز گریز جزو کو نظر انداز نہیں کیا جاسکتا راسی مساوات درج ذیل روپ اختیار

کرتی ہے۔

$$(11.17) \quad \frac{d^2 u}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} u = -k^2 u$$

جس کا عمومی حل مساوات 4.45 کروئی۔ بیل تفاعلات کا خطی جوڑ ہوگا

$$(11.18) \quad u(r) = A r j_\ell(kr) + B r n_\ell(kr)$$

لیکن نہ ہی j_ℓ جو سائن تفاعل کی طرح ہے اور نہ ہی n_ℓ جو متعین کو سائن کی طرح ہے کسی رخصتی یا آمدی موج کو ظاہر نہیں کرتے ہیں۔ ہمیں یہاں e^{ikr} اور e^{-ikr} طرز کے خطی جوڑ درکار ہوں گے جنہیں کروئی مینکل تفاعلات کہتے ہیں

$$(11.19) \quad h_\ell^{(1)}(x) \equiv j_\ell(x) + i n_\ell(x); \quad h_\ell^{(2)}(x) \equiv j_\ell(x) - i n_\ell(x)$$

جدول 11.1 میں چند ابتدائی کروئی مینکل تفاعلات پیش کیے گئے ہیں۔ بڑی r کی صورت میں $h_\ell^{(1)}(kr)$ جسے

جدول ۱۱.۱: کروئی مینکل تفاعلات $h_\ell^{(1)}(x)$ اور $h_\ell^{(2)}(x)$

$h_0^{(2)} = i \frac{e^{-ix}}{x}$ $h_1^{(2)} = \left(\frac{i}{x^2} - \frac{1}{x} \right) e^{-ix}$ $h_2^{(2)} = \left(\frac{3i}{x^3} - \frac{3}{x^2} + \frac{i}{x} \right) e^{-ix}$	$h_0^{(1)} = -i \frac{e^{ix}}{x}$ $h_1^{(1)} = \left(-\frac{i}{x^2} - \frac{1}{x} \right) e^{ix}$ $h_2^{(1)} = \left(-\frac{3i}{x^3} - \frac{3}{x^2} + \frac{i}{x} \right) e^{ix}$
$\left. \begin{aligned} h_\ell^{(1)} &\rightarrow \frac{1}{x} (-i)^{\ell+1} e^{ix} \\ h_\ell^{(2)} &\rightarrow \frac{1}{x} (i)^{\ell+1} e^{-ix} \end{aligned} \right\} x \gg 1 \text{ کے لئے}$	

مینکل تفاعل کا پہلا قسم کہتے ہیں r / e^{ikr} کے لحاظ سے تبدیل ہوتا ہے جبکہ $h_\ell^{(2)}(kr)$ مینکل تفاعل کی دوسری قسم r / e^{-ikr} کے لحاظ سے تبدیل ہوگا۔ یوں رخصتی امواج کے لئے ہمیں کروئی مینکل تفاعلات کی پہلی قسم درکار ہوگی:

$$(11.20) \quad R(r) \sim h_\ell^{(1)}(kr)$$

اس طرح خطہ بکھراؤ کے باہر جہاں $V(r) = 0$ ہوگا بالکل ٹھیک تفاعل موج درج ذیل ہوگا

$$(11.21) \quad \psi(r, \theta, \phi) = A \left\{ e^{ikz} + \sum_{l,m} C_{l,m} h_\ell^{(1)}(kr) Y_\ell^m(\theta, \phi) \right\}$$

اس کا پہلا جزو آمدی مستوی موج ہے جبکہ مجموعہ جس کے عددی سر $C_{l,m}$ ہے موج بکھراؤ کو ظاہر کرتا ہے۔ چونکہ ہم مندرجہ کر چکے ہیں کہ مخفیہ کروئی تشاکلی ہے لہذا تفاعل موج ϕ کا تابع نہیں ہو سکتا ہے۔ یوں صرف وہ اجزاء باقی رہیں گے جن میں $m = 0$ ہو یا درجہ $Y_\ell^m \sim e^{im\phi}$ اب مساوات 4.27 اور 4.32 کے درج ذیل ہوگا

$$(11.22) \quad Y_\ell^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos \theta)$$

جہاں ℓ ویں لیٹائنڈرکشیہرکئی کو P_ℓ کو ظاہر کرتا ہے۔ روایتی طور پر a_ℓ $i^{\ell+1}k\sqrt{4\pi(2\ell+1)}$ $C_{\ell,0}$ لکھ کر عددی سروں کی تعریف یوں کی جاتی ہے:

$$(11.22) \quad \psi(r, \theta) = A \left\{ e^{ikz} + k \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell+1} (2\ell+1) a_\ell h_\ell^{(1)}(kr) P_\ell(\cos \theta) \right\}$$

آپ کچھ ہی دیر میں دیکھیں گے کہ یہ مخصوص علاقیت کیوں بہتر ہے a_ℓ کو ℓ واں حیطہ جزوی موج کہتے ہیں۔

اب بہت بڑی r کی صورت میں اینکل تف عمل e^{ikr}/kr $(-i)^{\ell+1}$ جدول 11.1 کے لحاظ سے تبدیل ہوگا لہذا درج ذیل ہوگا

$$(11.23) \quad \psi(r, \theta) \approx A \left\{ e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{(ikr)}}{r} \right\}$$

جہاں $f(\theta)$ درج ذیل ہے

$$(11.24) \quad f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) a_\ell P_\ell(\cos \theta)$$

یہ مساوات 11.12 میں میں پیش کی گئی عمومی ساخت کے اصول موضوعہ کی تصدیق کرتا ہے اور ہمیں دکھاتا ہے کہ جزوی موج حیطوں a_ℓ کی صورت میں حیطہ بکھراؤ $f(\theta)$ کس طرح حاصل ہوگا تقریبی عمودی تراش درج ذیل ہوگا

$$(11.25) \quad D(\theta) = |f(\theta)|^2 = \sum_{\ell} \sum_{\ell'} (2\ell+1)(2\ell'+1) a_\ell^* a_{\ell'} P_\ell(\cos \theta) P_{\ell'}(\cos \theta)$$

اور کل عمودی تراش درج ذیل ہوگا

$$(11.26) \quad \sigma = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) |a_\ell|^2$$

زاویائی کھل کو حل کرنے کے لئے میں نے لیٹائنڈرکشیہرکئیوں کی عمودیت مساوات 4.34 استعمال کی۔

۱۱.۲.۲ لایا عمل

زیر غور مخفیہ کے لئے جزوی موج حیطوں a_ℓ کا تعین کرنا باقی ہے۔ اندرونی خط جہاں $V(r)$ غیر صفر ہے میں مساوات شعروڈنگر کو حل کر کے اسے بیرونی حل مساوات 11.23 کے ساتھ مناسب سرحدی شرائط استعمال کرتے ہوئے ملانے سے ایسا کیا جاسکتا ہے۔ مثلاً صرف اتنا ہے کہ میں نے بکھراؤ موج کے لئے کروئی محدود جبکہ آمدی موج کے لئے کارتیسی محدود استعمال کیے ہیں۔ ہمیں تف عمل موج کو ایک جیسی علامتوں میں لکھنا ہوگا۔

یقیناً $V = 0$ کے لئے مساوات شرودنگر کو e^{ikz} مطمئن کرتا ہے۔ ساتھ ہی میں دلائل پیش کر چکا ہوں کہ $V = 0$ کے لئے مساوات شرودنگر کا عمومی حل درج ذیل روپ کا ہوگا

$$\sum_{\ell, m} [A_{\ell, m} j_{\ell}(kr) + B_{\ell, m} n_{\ell}(kr)] Y_{\ell}^m(\theta, \phi)$$

یوں بالخصوص e^{ikz} کو اس طرح بیان کرنا ممکن ہونا چاہیے اب مبداء پر e^{ikz} متناہی ہے لہذا نیو من تفاعلات کی اجازت نہیں ہوگی $r = 0$ پر $n_{\ell}(kr)$ بے متناہی ہوتے ہیں اور چونکہ $z = r \cos \theta$ میں کوئی ϕ نہیں پایا جاتا ہے لہذا صرف $m = 0$ اجزاء ہوں گے۔ مستوی موج کی کروی امواج کی صورت میں صریحاً پھیلاؤ کلیہ ریلے دیتی ہے۔

$$(11.28) \quad e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} (2\ell + 1) j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta)$$

اس کو استعمال کرتے ہوئے بیرونی خطے میں تفاعل موج کو صرف r اور θ کی صورت میں پیش کیا جاسکتا ہے

$$(11.29) \quad \psi(r, \theta) = A \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} (2\ell + 1) [j_{\ell}(kr) + ika_{\ell} h_{\ell}^{(1)}(kr)] P_{\ell}(\cos \theta)$$

مثال ۱۱.۳: کوانٹائی سخت کرہ بکھراؤ۔ درج ذیل فرض کریں

$$(11.30) \quad V(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq a \\ 0, & r > a \end{cases}$$

سرحدی شرط تب درج ذیل ہوگا

$$(11.31) \quad \psi(a, \theta) = 0$$

یوں تمام θ کے لئے

$$(11.32) \quad \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} (2\ell + 1) [j_{\ell}(ka) + ika_{\ell} h_{\ell}^{(1)}(ka)] P_{\ell}(\cos \theta) = 0$$

ہوگا۔ جس سے درج ذیل حاصل ہوتا ہے سوال 11.3

$$(11.33) \quad a_{\ell} = i \frac{j_{\ell}(ka)}{kh_{\ell}^{(1)}(ka)}$$

بالخصوص کل عمودی تراش درج ذیل ہوگا

$$(11.34) \quad \sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \left| \frac{j_{\ell}(ka)}{h_{\ell}^{(1)}(ka)} \right|^2$$

یہ بالکل درست جواب ہے۔ لیکن اس کو دیکھ کر کچھ زیادہ نہیں کہا جاسکتا ہے آئیں کم توانائی بکھراؤ $ka \ll 1$ کی تحدیدی صورت پر غور کریں $k = 2\pi/\lambda$ کی بنا پر یہ کہتا ہے کہ دوری عرصہ کرہ کے رداس سے بہت بڑا ہے۔ جدول 4.4 سے مدد لیتے ہوئے ہم دیکھتے ہیں کہ چھوٹی z کے لئے $n_\ell(z)$ کی مقدار $j_\ell(z)$ سے بہت زیادہ ہوگی لہذا

$$\frac{j_\ell(z)}{h_\ell^{(1)}(z)} = \frac{j_\ell(z)}{j_\ell(z) + in_\ell(z)} \approx -i \frac{j_\ell(z)}{n_\ell(z)}$$

$$(11.35) \quad \approx -i \frac{2^\ell l! z^\ell / (2\ell + 1)!}{-(2\ell)! z^{-\ell-1} / 2^\ell \ell!} = \frac{i}{2\ell + 1} \left[\frac{2^\ell \ell!}{(2\ell)!} \right]^2 z^{2\ell+1}$$

اور درج ذیل ہوگا

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{1}{2\ell + 1} \left[\frac{2^\ell \ell!}{(2\ell)!} \right]^4 (ka)^{4\ell+2}$$

چونکہ ہم $ka \ll 1$ فرض کر رہے ہیں لہذا بلند طاقتمیں متابل نظر انداز ہوں گی۔ کم توانائی تخمین میں $\ell = 0$ حبزوی بکھراؤ میں غالب ہوگا۔ یوں کلاسیکی صورت کے لئے تقریبی عمودی تراش θ کا تابع نہیں ہوگا۔ ظاہر ہے کہ کم توانائی سخت کرہ بکھراؤ کے لئے درج ذیل ہوگا

$$(11.36) \quad \sigma \approx 4\pi a^2$$

حیرانی کی بات ہے کہ بکھراؤ عمودی تراش کی قیمت ہندی عمودی تراش کے چار گنا ہے۔ درحقیقت σ کی قیمت کرہ کی کل سطحی رقبہ کے برابر ہے۔ لمبی طول موج بکھراؤ کی ایک خاصیت بڑی معاصر جامت ہے جو بصریات میں بھی ہوگا۔ ایک لحاظ سے یہ امواج کرہ کو چھوتے ہوئے اس کے اوپر سے گزرتے ہیں تاکہ کلاسیکی ذرات کی طرح جنہیں صرف سیدھا دیکھتے ہوئے عمودی تراش نظر آتا ہے۔ □

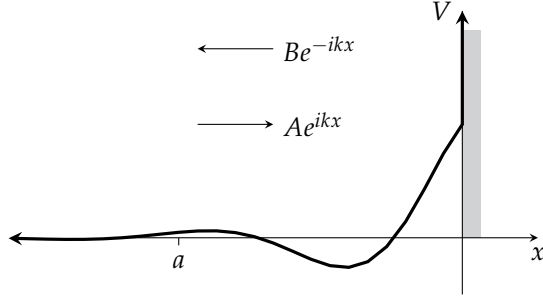
سوال ۱۱.۳: مساوات 11.32 سے آغاز کرتے ہوئے مساوات 11.33 ثابت کریں۔ اشارہ: لیٹنڈر کثیر رکتی کی عمودیت بروئے کار لاتے ہوئے دکھائیں کہ ℓ کی مختلف قیمتوں والے عددی سرلازما صفر ہوں گے۔

سوال ۱۱.۴: کروی ڈیلٹا تفاعل:

$$V(r) = \alpha \delta(r - a)$$

سے کم توانائی بکھراؤ کی صورت پر غور کریں جہاں α اور a مستقلات ہیں۔ جیٹ بکھراؤ $f(\theta)$ تقریبی عمودی تراش $D(\theta)$ اور کل عمودی تراش σ کا حساب کریں۔ ان میں $ka \ll 1$ فرض کریں لہذا صفر $\ell = 0$ حبزو حناطر خواہ حصہ ڈالیں گے۔ چیزوں کو آسان بنانے کی حناطر آغاز سے ہی $\ell \neq 0$ والے تمام اجزاء کو نظر انداز کریں۔ یہاں a_0 تعین کرنا اصل مسئلہ ہے۔ اپنے جواب کو بے بعدی مقدار $\beta \equiv 2ma\alpha/\hbar^2$ کی صورت میں پیش کریں۔

$$\sigma = 4\pi a^2 \beta^2 / (1 + \beta)^2$$



شکل ۱۱.۷: معتمای مخفیہ، جس کے دائیں جانب ایک لامستثنائی دیوار پائی جاتی ہے، سے ایک بُجری بکھراؤ۔

۱۱.۳۳ متقلات حیط

پہلے نصف لکیر $x < 0$ پر معتمای مخفیہ $V(x)$ سے ایک بُجری بکھراؤ کے مسئلے پر غور کرتے ہیں۔ شکل ۱۱.۷ میں $x = 0$ پر ایسنٹوں کی ایک دیوار کھڑی کرتا ہوں تاکہ بائیں سے آمدی موج

$$(11.37) \quad \psi_i(x) = Ae^{ikx} \quad (x < -a)$$

مکمل طور پر منعکس ہوگا

$$(11.38) \quad \psi_r(x) = Be^{-ikx} \quad (x < -a)$$

باہم عمل خطہ $(-a < x < 0)$ میں جو کچھ بھی ہوا احتمال کی بقا کی بنا پر منعقد موج کا حیطہ لازماً آمدی موج کے حیطہ کے برابر ہوگا۔ تاہم ضروری نہیں کہ اس کا حیطہ وہی ہو اگر ماسوائے $x = 0$ پر دیوار کے کوئی مخفیہ نہیں پایا جاتا تو تب چونکہ مبداء پر آمدی جمع منعکس کل تف عمل موج صفر ہوگا

$$(11.39) \quad \psi_0(x) = A(e^{ikx} - e^{-ikx}) \quad (V(x) = 0)$$

لہذا $B = -A$ ہوگا۔ غیر صفر مخفیہ کی صورت میں $x < -a$ کے لئے تف عمل موج درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے

$$(11.40) \quad \psi(x) = A(e^{ikx} - e^{i(2\delta - kx)}) \quad (V(x) \neq 0)$$

نظریہ بکھراؤ کی پوری کہانی کسی مخصوص مخفیہ کے لئے k لہذا توانائی $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ کی صورت میں مستقل حیطہ کے حساب کا دوسرا نام ہے۔ ہم خطہ بکھراؤ $(-a < x < 0)$ میں مبادات شرودنگر کو حل کر کے مناسب سرحدی شرائط مسلط کر کے ایسا کرتے ہیں سوال 11.5 دیکھیں۔ مخلوط حیطہ B کی بجائے مستقل حیطہ

کے ساتھ کرنے کا فائدہ یہ ہے کہ یہ طبیعیات پر روشنی ڈالتا ہے۔ احتمال کی بقا کی بدولت مخفیہ منعکس موج کی صرف حیث تبدیل کر سکتا ہے اور ایک مخلوط مقدار جو دو حقیقی اعداد پر مشتمل ہوتا ہے کی بجائے ایک حقیقی مقدار کے ساتھ کام کرتے ہوئے ریاضی آسان ہوتی ہے۔

آئیں اب تین بُعدی صورت پر دوبارہ ڈالیں۔ آمدی مستوی موج (Ae^{ikz}) کا z رخ میں کوئی زاویائی معیار حرکت نہیں پایا جتنا کلیہ میں $m \neq 0$ والا کوئی جزو نہیں پایا جاتا۔ تاہم اس میں کل زاویائی معیار حرکت $(\ell = 0, 1, 2, \dots)$ کی تمام قیمتیں شامل ہیں۔ چونکہ کروی تشاکلی مخفیہ زاویائی معیار حرکت کی بقا کرتا ہے لہذا ہر ایک جزوی موج جسے کسی ایک خصوصی ℓ سے نام دیا جاتا ہے انفرادی طور پر بکھرے گی اور اس کے حیث میں کوئی تبدیلی رونمائی نہیں ہوگی تاہم اس کا حیث تبدیل ہو سکتا ہے۔ مخفیہ بالکل نہ ہونے کی صورت میں $\psi_0 = Ae^{ikz}$ ہوگا لہذا ℓ ویں جزوی موج درج ذیل ہوگی مساوات 11.28

$$(11.۴۱) \quad \psi_0^{(\ell)} = Ai^{\ell}(2\ell+1)j_{\ell}(kr)P_{\ell}(\cos\theta) \quad (V(r)=0)$$

لیکن مساوات 11.19 اور جدول 11.1 کے تحت درج ذیل ہوگا

$$(11.۴۲) \quad j_{\ell}(x) = \frac{1}{2} \left[h^{(1)}(x) + h_{\ell}^{(2)}(x) \right] \approx \frac{1}{2x} \left[(-i)^{\ell+1} e^{ix} + i^{\ell+1} e^{-ix} \right] \quad (x \gg 1)$$

لہذا بڑی r کی صورت میں درج ذیل ہوگا

$$(11.۴۳) \quad \psi_0^{(\ell)} \approx A \frac{(2\ell+1)}{2ikr} \left[e^{ikr} - (-1)^{\ell} e^{-ikr} \right] P_{\ell}(\cos\theta) \quad (V(r)=0)$$

چونکہ قوسین میں دوسرا جزو آمدی کروی موج کو ظاہر کرتا ہے مخفیہ بکھراؤ متعارف کرانے سے یہ تبدیل نہیں ہوگا۔ پہلا جزو نھتھی موج ہے جو بمقتل حیث δ_{ℓ} لیتا ہے

$$(11.۴۴) \quad \psi^{(1)} \approx A \frac{(2\ell+1)}{2ikr} \left[e^{i(kr+2\delta_1)} - (-1)^{\ell} e^{-ikr} \right] P_{\ell}(\cos\theta) \quad (V(r) \neq 0)$$

آپ e^{ikz} میں $h_{\ell}^{(2)}$ جزو کی بنا پر اس کو کروی مسرتک موج تصور کر سکتے ہیں جس میں $2\delta_{\ell}$ بمقتل حیث پایا جاتا ہے اور جو e^{ikz} میں $h_{\ell}^{(1)}$ حصہ کے ساتھ بکھرے موج کی بدولت رختی کرویہ موج کے طور پر ابھرتا ہے۔

حصہ 1.2.11 میں پورے نظریہ کو جزوی تفاصل حیثوں a_{ℓ} کی صورت میں پیش کیا گیا یہاں اس کو بمقتل حیث δ_{ℓ} کی صورت میں پیش کیا گیا۔ ان دونوں کے بیچ ضرور کوئی تعلق پایا جاتا ہوگا۔ یقیناً مساوات 11.23 کی بڑی r کی صورت میں متعارفابی روپ

$$(11.۴۵) \quad \psi^{(1)} \approx A \left\{ \frac{(2\ell+1)}{2ikr} \left[e^{ikr} - (-1)^{\ell} e^{-ikr} \right] + \frac{(2\ell+1)}{r} a_{\ell} e^{ikr} \right\} P_{\ell}(\cos\theta)$$

کا δ_{ℓ} کی صورت میں عمومی کی صورت مساوات 1.44 کے ساتھ موازنہ کرنے سے درج ذیل حاصل ہوگا

$$(11.۴۶) \quad a_{\ell} = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_{\ell}} - 1) = \frac{1}{k} e^{i\delta_{\ell}} \sin(\delta_{\ell})$$

اس طرح بالخصوص مساوات 11.25

$$(11.۴۷) \quad f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) e^{i\delta_{\ell}} \sin(\delta_{\ell}) P_{\ell}(\cos \theta)$$

اور درج ذیل ہوگا مساوات 11.27

$$(11.۴۸) \quad \sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2(\delta_{\ell})$$

اب بھی جزوی موج جیٹوں کی بجائے منتقلات جیٹ کے ساتھ کام کرنا بہتر ثابت ہوتا ہے چونکہ ان سے طبعی معلومات باآسانی حاصل ہوتی ہے اور ریاضی کی نقطہ نظر سے ان کے ساتھ کام کرنا آسان ہوتا ہے۔ منتقلی جیٹ زاویائی معیار حرکت کی بقا کو استعمال کرتے ہوئے مخلوط متدار a_{ℓ} جو دو حقیقی اعداد پر مشتمل ہوتا ہے کی بجائے ایک حقیقی عدد δ_{ℓ} استعمال کرتا ہے۔

سوال ۱۱.۵: ایک ذرہ جس کی کمیت m اور توانائی E ہو درج ذیل مخفیہ پر بانیں سے آمدی ہے

$$V(x) = \begin{cases} 0, & (x < -a). \\ -V_0, & (-a \leq x \leq 0). \\ \infty, & (x > 0). \end{cases}$$

(الف) آمدی موج Ae^{ikx} جہاں $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ کی صورت میں منعکس موج تلاش کریں۔

جواب:

$$Ae^{-2ika} \left[\frac{k - ik' \cot(k'a)}{k + ik' \cot(k'a)} \right] e^{-ikx}, \quad \text{جہاں } k' = \sqrt{2m(E + V_0)}/\hbar$$

(ب) تصدیق کریں کہ منعکس موج کا جیٹ وہی ہے جو آمدی موج کا ہے۔

(ج) بہت گہرا کنواں $E \ll V_0$ کے لئے منتقلات جیٹ δ مساوات 11.40 تلاش کریں۔

جواب: $\delta = -ka$

سوال ۱۱.۶: سخت کرہ بکھراؤ کے لئے جزوی موج جیٹ انتتال δ_{ℓ} کی ہوں گے مشال 11.3؟

سوال ۱۱.۷: ایک ڈیلٹا تفاعل خول سوال 11.4 سے S موج $\ell = 0$ جزوی موج انتتال جیٹ $\delta_0(k)$ تلاش کریں۔ ایک کرتے ہوئے فرض کریں کہ $r \rightarrow \infty$ پر ردای تفاعل موج $u(r)$ صفر کو پہنچے گا۔

جواب:

$$-\cot^{-1} \left[\cot(ka) + \frac{ka}{\beta \sin^2(ka)} \right], \quad \text{جہاں } \beta \equiv \frac{2m\alpha a}{\hbar^2}$$

۱۱.۴ بارن تخمین

۱۱.۴.۱ مساوات شرودنگر کی تکلی روپ

غیر تاج وقت مساوات شرودنگر

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi \quad (11.49)$$

کو مختصراً

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = Q \quad (11.50)$$

لکھا جاسکتا ہے جہاں درج ذیل ہوں گے

$$k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \text{ اور } Q \equiv \frac{2m}{\hbar^2} V\psi \quad (11.51)$$

اس کارو پ سرسری طور پر مساوات ہلم ہولٹز کی طرح ہے۔ البتہ غیر متجانس جزو Q خود ψ کا تابع ہے۔

فرض کریں ہم ایک تفاعل $G(r)$ دریافت کر پائیں جو ڈیلتا تفاعل منع کے لئے مساوات ہلم ہولٹز کو مطمئن کرتا ہو

$$(\nabla^2 + k^2)G(r) = \delta^3(r) \quad (11.52)$$

ایسی صورت میں ہم ψ کو بطور ایک مکمل لکھ سکتے ہیں

$$\psi(r) = \int G(r-r_0)Q(r_0) d^3 r_0 \quad (11.53)$$

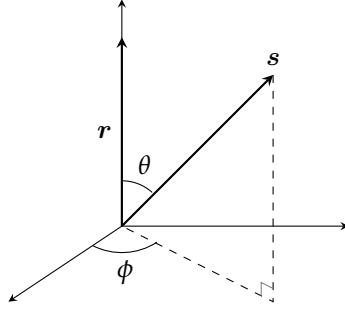
ہم با آسانی دیکھ سکتے ہیں کہ یہ مساوات 11.50 روپ کی مساوات شرودنگر کو مطمئن کرتا ہے

$$\begin{aligned} (\nabla^2 + k^2)\psi(r) &= \int [(\nabla^2 + k^2)G(r-r_0)] Q(r_0) d^3 r_0 \\ &= \int \delta^3(r-r_0)Q(r_0) d^3 r_0 = Q(r) \end{aligned}$$

تفاعل $G(r)$ کو مساوات ہلم ہولٹز کا تفاعل گرین کہتے ہیں۔ عمومی طور پر ایک خطی تفرقی مساوات کا تفاعل گرین ایک ڈیلتا تفاعل منع کو رد عمل ظاہر کرتا ہے۔

ہمارا پہلا کام $G(r)$ کے لئے مساوات 11.52 کا حل تلاش کرنا ہے۔ ایسا کرنے کا آسان ترین طریقہ یہ ہے کہ ہم فوریر تبدیل لیں جو تفرقی مساوات کو ایک الجبرائی مساوات میں تبدیل کرتا ہے۔ درج ذیل لیں

$$G(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{is \cdot r} g(s) d^3 s \quad (11.54)$$



شکل ۱۱.۸: موزوں محدود برائے مساوات ۱۱.۵۸ کا مکمل۔

تب۔

$$(\nabla^2 + k^2)G(r) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int [(\nabla^2 + k^2)e^{is \cdot r}] g(s) d^3 s$$

ہوگا تاہم

$$(11.55) \quad \nabla^2 e^{is \cdot r} = -s^2 e^{is \cdot r}$$

اور مساوات 2.144 دیکھیں

$$(11.56) \quad \delta^3(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{is \cdot r} d^3 s$$

لہذا مساوات 11.52 درج ذیل کہے گی

$$\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int (-s^2 + k^2) e^{is \cdot r} g(s) d^3 s = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{is \cdot r} d^3 s$$

یوں درج ذیل ہوگا

$$(11.57) \quad g(s) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}(k^2 - s^2)}$$

اس کو واپس مساوات 11.54 میں پڑ کے درج ذیل ملتا ہے

$$(11.58) \quad G(r) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{is \cdot r} \frac{1}{(k^2 - s^2)} d^3 s$$

اب s مکمل کے نقطہ نظر سے r غیر متغیر ہے ہم r کو (s, θ, ϕ) کو یوں چنتے ہیں کہ r قطبی محور پر پایا جاتا ہو (شکل ۱۱.۸)۔ یوں $s \cdot r = sr \cos \theta$ ہوگا متغیر ϕ کا مکمل 2π ہوگا جبکہ θ مکمل درج ذیل ہوگا

$$(11.59) \quad \int_0^\pi e^{isr \cos \theta} \sin \theta \, d\theta = -\frac{e^{isr \cos \theta}}{isr} \Big|_0^\pi = \frac{2 \sin(sr)}{sr}$$

یوں درج ذیل ہوگا

$$(11.60) \quad G(r) = \frac{1}{(2\pi^2)} \frac{2}{r} \int_0^\infty \frac{s \sin(sr)}{k^2 - s^2} \, ds = \frac{1}{4\pi^2 r} \int_{-\infty}^\infty \frac{s \sin(sr)}{k^2 - s^2} \, ds$$

باقی مکمل اتنا آسان نہیں ہے۔ قوت نمائی عملیت استعمال کر کے نصب نام کو اجزائے ضربی کی روپ میں لکھنا مددگار ثابت ہوتا ہے

$$(11.61) \quad G(r) = \frac{i}{8\pi^2 r} \left\{ \int_{-\infty}^\infty \frac{se^{isr}}{(s-k)(s+k)} \, ds - \int_{-\infty}^\infty \frac{se^{-isr}}{(s-k)(s+k)} \, ds \right\} \\ = \frac{i}{8\pi^2 r} (I_1 - I_2)$$

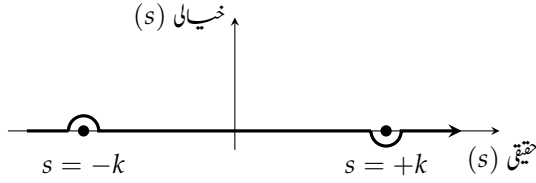
اگر z_0 خط ارتقاء کے اندر پایا جاتا ہو تب کوشی کلیہ مکمل

$$(11.62) \quad \oint \frac{f(z)}{(z-z_0)} \, dz = 2\pi i f(z_0)$$

استعمال کرتے ہوئے ان نکلات کی قیمت تلاش کی جاسکتی ہے دیگر صورت مکمل صفر ہوگا۔ یہاں حقیقی محور جو $\pm k$ پر قطبی نادر نکات کے بالکل اوپر سے گزرتا ہے کے ساتھ ساتھ مکمل لیا جاتا ہے۔ ہمیں قطبین کے اطراف سے گزرنا ہوگا میں $-k$ پر بالائی جانب سے $+k$ پر زیریں جانب سے گزروں گا (شکل ۱۱.۹)۔ آپ کوئی نیا راستہ منتخب کر سکتے ہیں مثلاً آپ ہر قطب کے گرد سات مرتبہ چکر کاٹ کر راہ منتخب کر سکتے ہیں جس سے آپ کو ایک مختلف تقاضا عمل گرین حاصل ہوگا لیکن میں کچھ ہی دیر میں دکھاؤں گا کہ یہ تمام قابل قبول ہوں گے۔

مسوات 11.61 میں ہر ایک مکمل کے لئے ہمیں خط استواء کو اس طرح بند کرنا ہوگا کہ لامتناہی پر نصف دائرہ مکمل کی قیمت میں کوئی حصہ نہ ڈالے۔ مکمل I_1 کی صورت میں اگر s کا خیالی جزو بہت بڑا اور مثبت ہو تب جزو ضربی e^{isr} صفر کو پہنچے گا اس مکمل کے لئے ہم بالانصف دائرہ لیتے ہیں (شکل ۱۱.۱۰)۔ اب خط ارتقاء صرف $s = +k$ پر پائے جانے والا نادر نقطہ کو گھیرتا ہے لہذا درج ذیل ہوگا

$$(11.63) \quad I_1 = \oint \left[\frac{se^{isr}}{s+k} \right] \frac{1}{s-k} \, ds = 2\pi i \left[\frac{se^{isr}}{s+k} \right] \Big|_{s=k} = i\pi e^{ikr}$$



شکل ۱۱.۹: ارتقائی مکمل (مساوات ۱۱.۶۱) میں ہمیں قطبین کے اطراف سے گزرنا ہوگا۔



شکل ۱۱.۱۰: مساوات ۱۱.۶۳ اور مساوات ۱۱.۶۴ کے خط ارتقاع کو بند کرنا دکھایا گیا ہے۔

I_2 کی صورت میں جب s کا خیالی جزو بہت بڑی منفی مقدار ہو تب جزو ضربی e^{-isr} صفر کو پہنچتا ہے لہذا ہم زیریں نصف دائرہ لیتے ہیں (شکل ۱۱.۱۰-ب)۔ اس مرتبہ خط ارتقاع $s = -k$ پر پائے جانے والے نادر نقطہ جو کو گھیرتا ہے اور یہ گھسڑی وار ہے لہذا اس کے ساتھ اضافی منفی علامت ہوگا

$$(11.64) \quad I_2 = - \oint \left[\frac{se^{-isr}}{s-k} \right] \frac{1}{s+k} ds = -2\pi i \left[\frac{se^{-isr}}{s-k} \right] \Big|_{s=-k} = -i\pi e^{ikr}$$

ماخوذ:

$$(11.65) \quad G(r) = \frac{i}{8\pi^2 r} \left[\left(i\pi e^{ikr} \right) - \left(-i\pi e^{ikr} \right) \right] = -\frac{e^{ikr}}{4\pi r}$$

یہ مساوات 11.52 کا حل اور مساوات ہولٹنز کا تفاعل گرین ہے اگر آپ کہیں ریاضیاتی تجزیہ میں گم ہو گئے ہوں تب بلا واسطہ تفریق کی مدد سے نتیجہ کی تصدیق کریں سوال 11.8 دیکھیں۔ بلکہ یہ مساوات ہولٹنز کا ایک تفاعل گرین ہے چونکہ ہم $G(r)$ کے ساتھ ایسا کوئی بھی تفاعل $G_0(r)$ جمع کر سکتے ہیں جو متبذل ہولٹنز مساوات کو مطمئن کرتا ہو

$$(11.66) \quad (\nabla^2 + k^2)G_0(r) = 0$$

صاف ظاہر ہے کہ مساوات 11.52 کو $(G + G_0)$ بھی مطمئن کرتا ہے۔ اس ایسا م کی وجہ قطبین کے متغیر سے گزرتے ہوئے راہ کی بنا پر ہے راہ کی ایک مختلف انتخاب ایک مختلف تفاعل $G_0(r)$ کے مترادف ہے۔

11.53 مساوات شرودنگر کا عمومی حل درج ذیل روپ کا ہوگا

$$(11.۶۷) \quad \psi(r) = \psi_0(r) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r_0|}}{|r-r_0|} V(r_0) \psi(r_0) d^3 r_0$$

جہاں ψ_0 آزاد ذرہ مساوات شرودنگر کو مطمئن کرتا ہے

$$(11.۶۸) \quad (\nabla^2 + k^2) \psi_0 = 0$$

11.67 مساوات شرودنگر کی تکمیلی روپ ہے جو زیادہ معروف تفرقی روپ کی مکمل طور پر معادل ہے۔ پہلی نظر میں ایسا معلوم ہوتا ہے کہ یہ کسی بھی مخفیہ کے لئے مساوات شرودنگر کا سری حل ہے جو ماننے والی بات نہیں ہے۔ دھوکہ مت کھائیں۔ دائیں ہاتھ تکمیل کی علامت کے اندر ψ پایا جاتا ہے جسے جاننے بغیر آپ تکمیل حاصل کر کے حل نہیں جان سکتے ہیں تاہم تکمیلی روپ انتہائی طاقتور ثابت ہوتا ہے اور جیسا ہم اگلے حصہ میں دیکھیں گے یہ بالخصوص بکھراؤ مسائل کے لئے نہایت موضوع ہے۔

سوال ۱۱.۸: مساوات 11.65 کو مساوات 11.52 میں پُر کر کے دیکھیں کہ یہ اسے مطمئن کرتا ہے۔ اشارہ: $-\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta^3(r)$

سوال ۱۱.۹: دکھائیں کہ V اور E کی مناسب قیمتوں کے لئے مساوات شرودنگر کی تکمیلی روپ کو ہائیڈروجن کا زمینی حال مساوات 4.80 مطمئن کرتا ہے۔ دھیان رہے کہ E منفی ہے لہذا $k = ik$ ہوگا جہاں $\kappa \equiv \sqrt{-2mE/\hbar}$ ہوگا۔

۱۱.۴.۲ بارن تخمین اول

فرض کریں $r_0 = 0$ پر $V(r_0)$ مقامی مخفیہ ہے یعنی کسی مستطی خطے کے باہر مخفیہ کی قیمت صفر ہے جو عموماً مسئلہ بکھراؤ میں ہوگا اور ہم مرکز بکھراؤ سے دور نکات پر $\psi(r)$ جاننا چاہتے ہیں۔ ایسی صورت میں مساوات 11.67 کی تکمیل میں حصہ ڈالنے والے تمام نکات کے لئے $|r| \gg |r_0|$ ہوگا لہذا

$$(11.۶۹) \quad |r - r_0|^2 = r^2 + r_0^2 - 2r \cdot r_0 \cong r^2 \left(1 - 2\frac{r \cdot r_0}{r^2}\right)$$

اور یوں درج ذیل ہوگا

$$(11.۷۰) \quad |r - r_0|^2 \cong r - \hat{r} \cdot r_0$$

ہم

$$(11.۷۱) \quad k \equiv k\hat{r}$$

لیتے ہیں۔ یوں

$$(11.42) \quad e^{ik|r-r_0|} \cong e^{ikr} e^{-ik \cdot r_0}$$

ہوگا۔ لہذا درج ذیل ہوگا

$$(11.43) \quad \frac{e^{ik|r-r_0|}}{|r-r_0|} \cong \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ik \cdot r_0}$$

نصب نام میں ہم زیادہ بڑی تخمین $r \cong |r-r_0|$ دے سکتے ہیں قوت نام میں ہمیں دوسرا جزو بھی رکھنا ہوگا۔ اگر آپ یقین نہیں کر سکتے ہیں تو نصب نام میں دوسرے جزو کو پہلا کر دیکھیں ہم یہاں ایک چھوٹی مقدار (r_0/r) کی قوتوں میں پھیلا کر کم سے کم رتی جزو کے علاوہ باقی تمام کو رد کرتے ہیں۔
بکھراؤ کی صورت میں ہم درج ذیل چاہتے ہیں۔ جو آمدی مستوی موج کو ظاہر کرتا ہے

$$(11.44) \quad \psi_0(r) = A e^{ikz}$$

یوں بڑی r کے لئے درج ذیل ہوگا

$$(11.45) \quad \psi(r) \cong A e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{ik \cdot r_0} V(r_0) \psi(r_0) d^3 r_0$$

یہ معیاری روپ مساوات 11.12 ہے جس سے ہم حیطہ بکھراؤ پڑھ سکتے ہیں

$$(11.46) \quad f(\theta, \phi) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2 A} \int e^{-ik \cdot r_0} V(r_0) \psi(r_0) d^3 r_0$$

یہاں تک یہ بالکل ایک درست جواب ہے ہم اب بارن تخمین بروئے کار لاتے ہیں۔ فرض کریں آمدی مستوی موج کو تخفیف و تابیل ذکر تبدیل نہیں کرتا ہو ایسی صورت میں درج ذیل استعمال کرنا معقول ہوگا

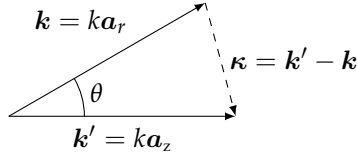
$$(11.47) \quad \psi(r_0) \approx \psi_0(r_0) = A e^{ikz_0} = A e^{ik' \cdot r_0}$$

جہاں عمل کے اندر k' درج ذیل ہے

$$(11.48) \quad k' \equiv k \hat{z}$$

تخفیف V صفر ہونے کی صورت میں یہ بالکل ٹھیک تفعل موج ہو تا یہ بنیادی طور پر کمزور تخفیف تخمین ہے۔ بارن تخمین میں یوں درج ذیل ہوگا

$$(11.49) \quad f(\theta, \phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(k'-k) \cdot r_0} V(r_0) d^3 r_0$$



شکل ۱۱.۱۱: بارن تخمین میں دو تفاعل موج: k' آمدی رخ جبکہ k بکھراور رخ ہے۔

ہو سکتا ہے کہ آپ k' اور k کی تعریفات بھول چکے ہوں دونوں کی مقدار k ہے تاہم اول الذکر کا رخ آمدی شعاع کے رخ ہے جبکہ موخر الذکر کا رخ کاشف کے رخ ہے (شکل ۱۱.۱۱ دیکھیں)۔ اس عمل میں $\hbar(k - k')$ منتقلی معیار حرکت کو ظاہر کرے گا بالخصوص خط بکھراور پر کم توانائی لمبی طول موج بکھراور کے لئے قوت نمائی حبز و ضربی بنیادی طور پر متقل ہو گا اور یوں تخمین بارن درج ذیل سادہ روپ اختیار کرے گا

$$(11.80) \quad f(\theta, \phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar} \int V(r) d^3 r, \quad \text{کم توانائی}$$

میں نے یہاں r کے زیر نوشت میں کچھ نہیں لکھا امید کی جاتی اس سے کوئی پریشانی پیدا نہیں ہوگی۔

مثال ۱۱.۴: کم توانائی نرم کرہ بکھراور درج ذیل مخفیہ لیں

$$(11.81) \quad V(r) = \begin{cases} V_0, & r \leq a \\ 0, & r > a \end{cases}$$

کم توانائی کی صورت میں θ اور ϕ کا غیر تابع جملہ بکھراور درج ذیل ہوگا۔

$$(11.82) \quad f(\theta, \phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2} V_0 \left(\frac{4}{3} \pi a^3 \right)$$

تفریقی عمودی تراش

$$(11.83) \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2 \cong \left(\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2} \right)^2$$

اور کل عمودی تراش درج ذیل ہوگا۔

$$(11.84) \quad \sigma \cong 4\pi \left(\frac{2mV_0a^3}{3\hbar^2} \right)^2$$

□

ایک کروئی تشکلی مخفیہ $V(r) = V(r)$ کے لئے جو ضروری نہیں کہ کم توانائی پر ہو تنہمین بارن دوبارہ سادہ روپ اختیار کرتا ہے۔ درج ذیل متعارف کرتے ہوئے

$$(11.85) \quad \kappa \equiv k' - k$$

r_0 نکل کے قطبی محور کو κ پر رکھتے ہوئے درج ذیل ہوگا

$$(11.86) \quad (k' - k) \cdot r_0 = \kappa r_0 \cos \theta_0$$

یوں درج ذیل حاصل ہوگا

$$(11.87) \quad f(\theta) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\kappa r_0 \cos \theta_0} V(r_0) r_0^2 \sin \theta_0 dr_0 d\theta_0 d\phi_0$$

متغیر ϕ_0 کے لحاظ سے نکل 2π دیگا اور θ_0 نکل کو ہم پہلے دیکھ چکے ہیں مساوات 11.59 دیکھیں۔ یوں r کے زیر نوشتہ کو نہ لکھتے ہوئے درج ذیل رہ جائے گا

$$(11.88) \quad f(\theta) \cong -\frac{2m}{\hbar^2 \kappa} \int_0^\infty r V(r) \sin(\kappa r) dr \quad \text{کروئی تشکل}$$

f کی زاویائی تابعیت κ میں سمونی گئی ہے شکل 11.11 کو دیکھ کر درج ذیل لکھا جاسکتا ہے

$$(11.89) \quad \kappa = 2k \sin(\theta/2)$$

مثال 11.5: یوکاوا بکھراؤ۔ یوکاوا مخفیہ جو جوہری مرکزہ کے بیچ بندشی قوت کا ایک سادہ نمونہ پیش کرتا ہے کارو پ درج ذیل ہے جہاں β اور μ مستقلات ہیں

$$(11.90) \quad V(r) = \beta \frac{e^{-\mu r}}{r}$$

تنہمین بارن درج ذیل دیگا

$$(11.91) \quad f(\theta) \cong -\frac{2m\beta}{\hbar^2 \kappa} \int_0^\infty e^{-\mu r} \sin(\kappa r) dr = -\frac{2m\beta}{\hbar(\mu^2 + \kappa^2)}$$

□

آپ کو سوال 11.11 میں یہ نکل حل کرنے کو کہا گیا ہے۔

مثال 11.6: ردورڈ بکھراؤ۔ مخفیہ یوکاوا میں $\beta = q_1 q_2 / 4\pi\epsilon_0$ اور $\mu = 0$ پر کرنے سے مخفیہ کو لب حاصل ہوگا جو دو نقطی باروں کے بیچ برقی باہم عمل کو بیان کرتا ہے۔ ظاہر ہے کہ جیٹ بکھراؤ درج ذیل ہوگا

$$(11.92) \quad f(\theta) \cong -\frac{2mq_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 \kappa^2}$$

یساوات 11.89 اور 11.51 استعمال کرتے ہوئے درج ذیل ہوگا

$$f(\theta) \cong -\frac{q_1 q_2}{16\pi\epsilon_0 E \sin^2(\theta/2)} \quad (11.93)$$

اس کا مربع ہمیں تفسیریاتی عمودی تراش دیگا

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{q_1 q_2}{16\pi\epsilon_0 E \sin^2(\theta/2)} \right]^2 \quad (11.94)$$

جو ٹھیک کلیہ ردورڈ مساوات 11.11 ہے۔ آپ دیکھ سکتے ہیں کہ کولمب مخفیہ کے لئے کالسی میکانیات تخمین بارن اور کوانٹائی نظریہ میدان تمام ایک جیسا نتیجہ دیتے ہیں۔ ہم کہہ سکتے ہیں کہ کلیہ ردورڈ ایک مضبوط کلیہ ہے۔ □

سوال ۱۱.۱۰: اختیاری توانائی کے لئے نرم کرہ بکھراؤ کا حیطہ بکھراؤ بارن تخمین سے حاصل کریں دکھائیں کہ کم توانائی حد میں اس سے مساوات 11.82 حاصل ہوگا۔

سوال ۱۱.۱۱: مساوات 11.91 میں مکمل کی قیمت تلاش کر کے دائیں ہاتھ ریاضی فنترہ کی تصدیق کریں۔

سوال ۱۱.۱۲: بارن تخمین میں یو کاوا مخفیہ سے بکھراؤ کا کل عمودی تراش تلاش کریں۔ اپنے جواب کو E کا تناسب لکھیں۔

سوال ۱۱.۱۳: درج ذیل اقدام سوال 11.4 کے مخفیہ کے لئے کریں۔

(الف) کم توانائی تخمین بارن میں $f(\theta, D(\theta))$ اور σ کا حساب لگائیں۔

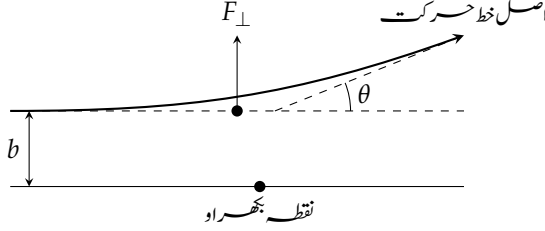
(ب) تخمین بارن میں اختیاری توانائیوں کے لئے $f(\theta)$ کا حساب لگائیں۔

(ج) دکھائیں کہ آپ کے نتائج مناسب خطوں میں سوال 4.11 کے جواب کے مطابق ہیں۔

۱۱.۴.۳ تسلسل بارن

تخمین بارن روح کے لحاظ سے کلاسیکی نظریہ بکھراؤ میں تخمین ضرب کی طرح ہے۔ ایک ذرہ کو متقتل عرضی ضرب کا حساب کرنے کے لئے ہم تخمین ضرب میں فرض کرتے ہیں کہ ذرہ ایک سیدھی لیکر پر ہی چلے جاتا ہے (شکل ۱۱.۱۲)۔ ایسی صورت میں درج ذیل ہوگا

$$I = \int F_{\perp} dt \quad (11.95)$$



شکل ۱۱.۱۲: ذرہ کو منتقل معیار حرکت کا حساب کرتے ہوئے، تخمین ضرب کی ترکیب میں فرض کیا جاتا ہے کہ ذرہ بغیر مڑے سیدھی لکیر پر حرکت کیے جاتا ہے۔

اگر ذرہ زیادہ نہیں مڑے تب ذرہ کو منتقل معیار حرکت کی ایک اچھی تخمین ہوگی اور یوں زاویہ بکھراؤ درج ذیل ہوگا جہاں p آمدی معیار حرکت ہے

$$(11.96) \quad \theta \cong \tan^{-1}(I/p)$$

اے ہم رتبہ اول تخمین ضرب کہہ سکتے ہیں نہ مڑنے کی صورت کو صفر رتبہ اول کہا جائے گا اسی طرح صفر رتبہ تخمین بارن میں آمدی مستوی موج بغیر کسی تبدیلی کے گزرے گی اور ہم نے جو کچھ گزشتہ حصہ میں دیکھا وہ درحقیقت اس کی رتبہ اول تصحیح ہے۔ ہم توقع کر سکتے ہیں کہ اسی تصور کو بار بار استعمال کرتے ہوئے ہم زیادہ بلند رتبہ تصحیح کا ایک تسلسل پیدا کر کے بالکل ٹھیک جواب پر مسر کوڑ ہو سکتے ہیں۔

مساوات شرودنگر کی عملی روپ درج ذیل ہے

$$(11.97) \quad \psi(r) = \psi_0(r) + \int g(r-r_0)V(r_0)\psi(r_0) d^3 r_0$$

جہاں ψ_0 آمدی موج ہے

$$(11.98) \quad g(r) \equiv -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r}$$

تفاعل گرین ہے۔ جس میں میں نے اپنی آسانی کے لئے حبز ضربی $2m/\hbar^2$ شامل کیا ہے اور V مخفیہ بکھراؤ ہے۔ اس کو درج ذیل دیکھا جاسکتا ہے

$$(11.99) \quad \psi = \psi_0 + \int gV\psi$$

فرض کریں ہم ψ کی اس ریاضی جملہ کو لیکر اسے عمل کی علامت کے اندر لکھیں

$$(11.100) \quad \psi = \psi_0 + \int gV\psi_0 + \iint gVgV\psi$$

شکل ۱۱.۱۳: بارن تسلسل (مساوات ۱۱.۱۰۱) کا نظیری مفہوم۔

اس عمل کہ بار بار دہرانے سے ہمیں ψ کا ایک تسلسل حاصل ہوگا

$$(11.101) \quad \psi = \psi_0 + \int gV\psi_0 + \iint gVgV\psi_0 + \iiint gVgVgV\psi_0 + \dots$$

ہر متکمل میں آمدی تفاع عمل موج ψ_0 کے علاوہ gV کے مزید زیادہ طقتیں پائی جاتی ہیں۔ بارن کی تقنین اول اس تسلسل کو دوسرے جزو کے بعد ختم کرتا ہے تاہم آپ دیکھ سکتے ہیں کہ بلند رتبہ تصحیح کس طرح پیدا کی جاتی ہیں گی۔

بارن تسلسل کا خاکہ شکل ۱۱.۱۳ میں پیش کیا گیا ہے۔ صفر رتبہ ψ پر مخفیہ کا کوئی اثر نہیں ہوگا رتبہ اول میں اسے ایک چوٹ پڑتی ہے جس کے بعد یہ کسی نئے رخ چلے جائے گا۔ دوم رتبہ میں اسے ایک چوٹ پڑتی ہے جس کے بعد یہ ایک نئے مقام پر پہنچتا ہے جہاں اسے دوبارہ ایک چوٹ پڑتی ہے جس کے بعد یہ ایک نئے راہ پر چل نکلتا ہے وغیرہ وغیرہ۔ اسی کے بنا پر بعض اوقات تفاع عمل گرین کو اشاعت کار کہا جاتا ہے جو ایک باہم عمل اور سورے کے سچ تسلسل کی اشاعت کس طرح ہوتی ہے۔ تسلسل بارن اضافیتی کو انسانی میکانیات کی فینمن تشریح کا سبب بنا جس میں اشکال فینمن میں جزو ضربی راس V اور اشاعت کار g کو ایک ساتھ جوڑ کر سب کچھ بیان کیا جاتا ہے۔

سوال ۱۱.۱۳: تقنین ضرب میں رد فورڈ بکھراؤ کے لئے θ کو ٹکراؤ متدار معلوم کا تفاع عمل تلاش کریں۔ دکھائیں کہ مناسب حدود کے اندر آپ کا نتیجہ بالکل ٹھیک ریاضی فقرہ سوال 11.1 (الف) کے مطابق ہے۔

سوال ۱۱.۱۵: بارن کی دوسری تقنین میں کم توانائی نرم کرہ بکھراؤ کے لئے جیٹ بکھراؤ تلاش کریں۔

$$\text{جواب: } -(2mV_0a^3/3\hbar^2)[1 - (4mV_0a^2/5\hbar^2)]$$

سوال ۱۱.۱۶: ایک بُعدی مساوات شرودنگر کے لئے تفاع عمل گرین تلاش کر کے مساوات 11.67 کا مشغل مکملی روپ تیار کریں۔

جواب:

$$(11.102) \quad \psi(x) = \psi_0(x) - \frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik|x-x_0|} V(x_0) \psi(x_0) dx_0$$

سوال ۱۱.۱۷: مبداء پر بغیر اینٹوں کی دیوار کی صورت میں وقفہ $-\infty < x < \infty$ پر ایک بُعدی بکھراؤ کے لئے

سوال 11.16 کا نتیجہ استعمال کرتے ہوئے تقنین بارن تیار کریں۔ یعنی $\psi(x_0) \cong \psi_0(x_0)$ تصور کرتے ہوئے $\psi_0(x)$

Ae^{ikx} منتخب کر کے مکمل کی قیمت تلاش کریں۔ دکھائیں کہ انعکاسی عمودی سر درج ذیل روپ اختیار کرتا ہے

$$(11.103) \quad R \cong \left(\frac{m}{\hbar^2 k} \right)^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ikx} V(x) dx \right|^2$$

سوال ۱۱.۱۸: ایک ڈیپٹنٹف عمل مساوات 2.114 اور ایک مستثنائی چوکور کنواں مساوات 2.145 سے بکھراؤ کے لئے تفصیلی عمودی سر ($T = 1 - R$) کو یک بُعدی تخمینہ بارن سوال 11.17 کی مدد سے حاصل کریں۔ اپنے جوابات کا بالکل ٹھیک جوابات مساوات 2.141 اور 2.169 کے ساتھ موازنہ کریں۔

سوال ۱۱.۱۹: آگے رخ جیٹ بکھراؤ کے خیالی حبز و اور کل عمودی تراش کے پچر رشتہ دینے والا مسئلہ بصریات ثابت کریں

$$(11.104) \quad \sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im}(f(0))$$

اشارہ: مساوات 11.47 اور 11.48 استعمال کریں۔

سوال ۱۱.۲۰: QuestionMissing

$$(11.105) \quad V(r) = Ae^{-\mu r^2}$$

باب ۱۲

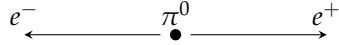
پس نوشت

اب چونکہ میں توقع کرتا ہوں آپ کوانٹائی میکانیات کو سمجھتے ہیں ہم حصہ 1.2 میں کیا گیا سوال دوبارہ اٹھاتے ہیں کوانٹائی میکانیات کے نتائج سے کیا مطلب اخذ کرنا چاہیے مسئلہ کا جبر تفاعل موج کے ساتھ وابستہ شمار یاتی مفہوم کی عدم تعینیت ہے۔ تفاعل Ψ یا کوانٹائی حال کہنا بہتر ہوگا جو مثال کے طور پر چکر کار ہو سکتا ہے صرف ممکنہ نتائج کی شمار یاتی تقسیم مہیا کرتا ہے اور کسی بھی پیمائش کا نتیجہ یکتا طور پر تعین نہیں کرتا اس سے ایک اہم سوال کھڑا ہوتا ہے کیا پیمائش سے قبل نظام یہ مخصوص خاصیت حقیقتاً رکھتا تھا جسے حقیقت پسند نقطہ نظر کہتے ہیں یا پیمائش کے عامل نے اس خاصیت کو جسم دیا جو تفاعل موج کی شمار یاتی پابندی کو مطمئن کرتا ہے۔ تقلید پسند نقطہ نظر یا ہم اس سوال کو ان بنیادوں پر رد کرتے ہیں کہ یہ سوال ایک فرضی سوال ہے انکاری نقطہ نظر۔

حقیقت پسند کے نقطہ نظر سے کوانٹائی میکانیات ایک نامکمل نظریہ ہے چونکہ کوانٹائی میکانیات کی تمام فراہم کردہ معلومات یعنی اس کا تفاعل موج جاننے ہوئے آپ خواص تعین نہیں کر سکتے ہیں۔ ظاہر ہے ایسی صورت میں کوانٹائی میکانیات سے باہر کوئی اور معلومات ہوگی جس کو Ψ کے ساتھ ملا کر طبعی حقائق کو مکمل طور پر بیان کرنا ممکن ہوگا۔

تقلید پسند نقطہ نظر اس سے بھی زیادہ سنگین سوالات کھڑے کرتا ہے چونکہ اگر پیمائشی عمل نظام کو ایک خاصیت اختیار کرنے پر مجبور کرتا ہو تب پیمائش ایک عجیب عمل ہوگا ساتھ ہی یہ جانتے ہوئے کہ ایک پیمائش کے فوراً بعد دوسری پیمائش وہی نتیجہ دیتی ہے ہمیں ماننا ہوگا کہ پیمائشی عمل تفاعل موج کو یوں منہدم کرتا ہے جو مساوات شرودنگر کی تجویز کردہ ارتقاء کے برعکس ہے۔

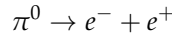
ان سب کی روشنی میں ہم دیکھ سکتے ہیں کہ نسل در نسل ماہر طبیعیات انکاری سوچ کے پیچھے پناہ لینے پر مجبور کیوں ہوئے اور اپنے شاگردوں کو نصیحت کرتے رہے کہ نظریہ کے تصوراتی بنیادوں پر غور و فکر کر کے اپنا وقت ضائع نہ کریں۔



شکل ۱۲.۱: آئنشٹائن، پوڈلسکی و روزن تضاد کا بوجہ، انداز۔ ساکن π^0 کا تنزل الیکٹران و ضد الیکٹران جوڑی میں ہوتا ہے۔

۱۲.۱ آئنشٹائن پوڈلسکی و روزن تضاد

۱۹۳۵ء میں آئنشٹائن پوڈلسکی اور روزن نے مل کر آئنشٹائن پوڈلسکی اور روزن تضاد پیش کیا جس کا مقصد حتمی نظریاتی بنیادوں پر یہ ثابت کرنا تھا کہ صرف حقیقت پسندانہ نقطہ نظر درست ہو سکتا ہے۔ میں اس تضاد کی ایک سادہ روپ جو داؤد بام نے پیش کی پر تبصرہ کرتا ہوں۔ تادیلی پائے میزان کی ایک الیکٹران اور ایک پروٹان میں تحلیل پر غور کریں



ساکن پایون کی صورت میں الیکٹران اور پروٹان ایک دوسرے کے مخالف رخ جائیں گے (شکل ۱۲.۱)۔ اب چونکہ پایون کا چکر صفر ہے لہذا زاویائی معیار حرکت کی بقا کے تحت یہ الیکٹران اور ضد الیکٹران یکساں تفکیک میں ہوں گے

$$(12.1) \quad \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow + \downarrow\uparrow)$$

اگر دکھا جائے کہ الیکٹران ہم میدان ہے تب ضد الیکٹران لازماً مخالف میدان ہوگا اور اسی طرح اگر الیکٹران مخالف میدان پایا جائے تب ضد الیکٹران ہم میدان ہوگا۔ کوانٹائی میکانیات آپ کو یہ بتانے سے قاصر ہے کہ کس پایون تحلیل میں آپ کو کونسی صورت حال ملے گی تاہم کوانٹائی میکانیات یہ ضرور بتا سکتی ہے کہ ان پیمائش کا ایک دوسرے کے ساتھ تعلق ہوگا اور اوسطاً نصف وقت ایک قسم اور نصف وقت دوسری قسم کی جوڑیاں پیدا ہوں گے۔ اب فرض کریں ہم ان الیکٹران اور ضد الیکٹران کو ایک عملی تجربہ کے لیے دس میٹر تک جانے دیں یا اصولاً دس نوری سال تک جانے دیں اور اس کے بعد الیکٹران کے چکر کی پیمائش کریں۔ فرض کریں آپ کو ہم میدان ملتا ہے۔ آپ فوراً جان پائیں گے کہ بیس میٹر یا بیس نوری سال دور کوئی دوسرا شخص ضد الیکٹران کو مخالف میدان پائے گا۔

حقیقت پسند کے نقطہ نظر سے اس میں کوئی حیرانی کی بات نہیں ہے چونکہ انکی پیدائش کے وقت سے ہی الیکٹران حقیقتاً ہم میدان اور ضد الیکٹران مخالف میدان تھے ہاں کوانٹائی میکانیات ان کے بارے میں جاننے سے قاصر تھا۔ تاہم تقلید پسند نقطہ نظر کے تحت پیمائش سے قبل دونوں ذرات نہ ہم میدان اور نہ ہی مخالف میدان تھے الیکٹران پر پیمائش تضاد عمل موج کو منہدم کرتی ہے جو فوراً بیس میٹر یا بیس نوری سال دور ضد الیکٹران کو مخالف میدان بناتا ہے۔ آئنشٹائن پوڈلسکی اور روزن اس قسم کے دور عمل کرنے والے عوامل میں یقین نہیں رکھتے تھے۔ یوں انہوں نے تقلید پسند نقطہ نظر کو ناقابل قبول مقرر دیا جس پر کوانٹائی میکانیات حتمی یا نہ حتمی ہو الیکٹران اور ضد الیکٹران لازماً کسی مخصوص چکر کے حامل تھے۔

ان کی دلیل اس بنیادی مفروضہ پر کھڑی ہے کہ کوئی بھی اثر روشنی کی رفتار سے تیز سفر نہیں کر سکتا ہے۔ ہم اسے اصول مقناطیت کہتے ہیں۔ آپ کو شبہ ہو سکتا ہے کہ تقا عمل موج کی انہدام کی خبر کسی مستناہی سستی رفتار سے سفر کرتی ہے۔ تاہم ایسی صورت میں زاویائی معیار حرکت کی بقا مطمئن نہیں ہوگی چونکہ ضد الیکٹران تک انہدام کی خبر پہنچنے سے پہلے اگر ہم اس کے چکر کی پیمائش تو ہمیں دونوں اقسام کے چکر چپا چپا سنی صد احتمال سے حاصل ہوں گے۔ آپ کا نظریہ جو بھی کہے تجربہ بات کے تحت دونوں کے چکر ہر صورت ایک دوسرے کے مخالف ہوتے ہیں۔ ظاہر ہے تقا عمل موج کا انہدام ایک دم ہوتا ہے۔

سوال ۱۲.۱: پولیدہ حالات کی ایک کلاسیکی مثال یکتا چکر تشکیل مساوات 12.1 ہے۔ اس دوزرہ حال کو دو یک ذروی حالات کا مجموعہ نہیں لکھا جاسکتا ہے لہذا جس کے بارے میں بات کرتے ہوئے کسی ایک ذرے کے علیحدہ حال کی بات نہیں کی جاسکتی ہے۔ آپ گمان کر سکتے ہیں کہ شاید ہماری علامتیت کی بنا پر ہے اور عین ممکن ہے کہ یک ذرہ حالات کا کوئی خطی جوڑ اس نظام کو کھول سکے درج ذیل مسئلے کا ثبوت پیش کریں۔

دو سطحی ایک نظام $|\psi_a\rangle$ اور $|\psi_b\rangle$ پر غور کریں جہاں $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$ ہو۔ مثلاً $|\psi_a\rangle$ ہم میدان اور $|\psi_b\rangle$ حنائف میدان کو ظاہر کر سکتا ہے۔ دوزوی حال

$$\alpha |\phi_a(1)\rangle |\phi_b(2)\rangle + \beta |\phi_b(1)\rangle |\phi_a(2)\rangle$$

جہاں $\alpha \neq 0$ اور $\beta \neq 0$ ہیں کو کسی بھی یک ذروی حالات $|\psi_r\rangle$ اور $|\psi_s\rangle$ کا حاصل ضرب

$$|\psi_r(1)\rangle |\psi_s(2)\rangle$$

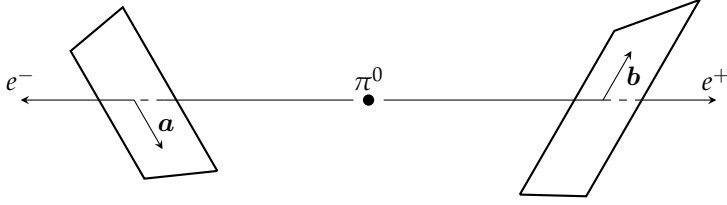
نہیں لکھا جاسکتا ہے۔

اشارہ: $|\psi_s\rangle$ اور $|\psi_r\rangle$ کو $|\psi_a\rangle$ اور $|\psi_b\rangle$ کے خطی جوڑ لکھیں۔

۱۲.۲ مسئلہ بل

آئنسٹائن، پوڈولسکی اور روزن کا کوانٹائی میکانیات کی درستی پر کوئی شق نہیں تھا البتہ ان کا دعویٰ کے طبعی حقیقت کو بیان کرنے کے لیے یہ ایک مکمل نظریہ ہے کسی بھی نظام کا حال پوری طرح جاننے کی خاطر ψ کے ساتھ ساتھ ایک اور مقدار λ درکار ہوگی۔ چونکہ فی الحال ہم نہیں جانتے کہ λ کو کس طرح ناپا یا حساب کے ذریعہ معلوم کیا جائے۔ لہذا ہم اسے درپردہ متغیر کہتے ہیں۔ تاریخی طور پر کئی درپردہ متغیر نظریات پیش کئے گئے جو پیچیدہ ہونے کے ساتھ ساتھ نامعقول ثابت ہوئے بہر حال سن 1964 تک اس پر کام کرنے کی وجہ نظر آتی تھی تاہم اس سال جناب بل نے ثابت کیا کہ درپردہ متغیر نظریہ اور کوانٹائی میکانیات ساتھ ساتھ نہیں چل سکتے ہیں۔

بل نے آئنسٹائن، پوڈولسکی اور روزن جو ہم تجربہ کو عمومی بنانے کی بات کی الیکٹران اور ضد الیکٹران کا شیف کو ایک ہی رخ رکھنے کی بجائے بل نے انہیں علیحدہ علیحدہ زاویوں پر رکھنے کی اجازت دی۔ پہلا کاشف اکائی سمتیہ a کے رخ الیکٹران



شکل ۱۲.۲: آئنشٹائن، پوڈولسکی وروزن تصادف کا بل انداز۔ کاشف آزادانہ طور پر a اور b رخ سمت بند ہیں۔

چپک کا حبزناپتا ہے جبکہ دوسرا b کے رخ ضد الیکٹران کے چپک کا حصہ ناپتا ہے (شکل ۱۲.۲)۔ ہم اپنی آسانی کے لیے چپک کو $\hbar/2$ کی اکائیوں میں ناپتے ہیں یوں کاشف کے رخ ہم میدان کی قیمت $+1$ اور خلاف میدان کی قیمت -1 پائی جائے گی۔ کئی π^0 تسنزل کے نتائج درج ذیل جدول میں پیش کئے گئے نتائج کی طرح ہو سکتے ہیں۔ کاشف

الیکٹران	ضد الیکٹران	حاصل ضرب
$+1$	-1	-1
$+1$	$+1$	$+1$
-1	$+1$	-1
$+1$	-1	-1
-1	-1	$+1$
-1	$+1$	-1
\vdots	\vdots	\vdots

کے رخوں کی کسی ایک جوڑی کے لیے بل نے چپک کے حاصل ضرب کی اوسط قیمت تلاش کی جسے ہم $P(a, b)$ لکھتے ہیں۔ متوازی کاشفوں کی صورت میں $b = a$ ہوگا جو ہمیں اصل آئنشٹائن و پوڈولسکی وروزن و بوم تفکیک دیکھا ایسی صورت میں ایک ہم میدان اور دوسرا خلاف میدان ہوگا لہذا ان کا حاصل ضرب ہر صورت -1 ہوگا اور یوں اوسط کی قیمت بھی یہی ہوگی

$$(12.2) \quad P(a, a) = -1$$

اسی طرح اگر کاشف زد متوازی ہوں تب $b = -a$ اور ہر حاصل ضرب $+1$ لہذا درج ذیل ہوگا

$$(12.3) \quad P(a, -a) = +1$$

اختیاری سمت بندی کے لیے کوانٹائی میکانیات درج ذیل پیشگوئی کرتی ہے

$$(12.4) \quad P(a, b) = -a \cdot b$$

سوال 4.50 دیکھیں۔ بل نے دریافت کیا کہ یہ نتیجہ کسی بھی درپردہ متغیر نظریہ کا ہم آہنگ نہیں ہو سکتا ہے۔

اس کا دلیل حیرت کن حد تک سادہ ہے فرض کریں الیکٹران ضد الیکٹران نظام کے مکمل حال کو کوئی درپردہ متغیر یا متغیرات λ ظاہر کرتا ہے۔ ایک پائیون تسنزل سے دوسرے پائیون تسنزل تک λ کی تبدیلی کو

ہم سمجھتے اور نہ ہی متاثر کرتے ہیں۔ ساتھ ہی فرض کرتے ہیں کہ الیکٹران کی پیمائش پر ضد الیکٹران کاشف کی سمت بندی b کا کوئی اثر نہیں پایا جاتا ہے یا درجہ کہ تجربہ کرنے والا الیکٹران کی پیمائش کے بعد ضد الیکٹران کاشف کا رخ منتخب کر سکتا ہے۔ ایسی صورت میں چونکہ ضد الیکٹران کاشف کا رخ منتخب کرنے سے پہلے ہی الیکٹران کی پیمائش کی جا چکی ہوگی لہذا اس پر بھی کی سمت کا کوئی اثر نہیں ہو سکتا ہے۔ یہ اصول مقیاسیت کا مفروضہ ہے یوں الیکٹران کی پیمائش کوئی تقاضا عمل $A(a, \lambda)$ اور ضد الیکٹران کی پیمائش کوئی دوسرا تقاضا عمل $B(b, \lambda)$ دیگا۔ ان تقاضات کی قیمتیں صرف ± 1 ہو سکتی ہیں

$$(12.5) \quad A(a, \lambda) = \pm 1; \quad B(b, \lambda) = \pm 1$$

جب کاشف متوازی ہوں تب تمام λ کے لیے درج ذیل ہوگا

$$(12.6) \quad A(a, \lambda) = -B(a, \lambda)$$

اب پیمائشوں کی حاصل ضرب کی اوسط قیمت درج ذیل ہوگی جہاں $\rho(\lambda)$ درپردہ متغیر کی کثافت احتمال ہے

$$(12.7) \quad P(a, b) = \int \rho(\lambda) A(a, \lambda) B(b, \lambda) d\lambda$$

کسی بھی کثافت کا احتمال کے لیے یہ غیر منفی ہوگا اور معمولی شرط $\int \rho(\lambda) d\lambda = 1$ کو مطمئن کرے گا تاہم اس کے علاوہ ہم $\rho(\lambda)$ کے بارے میں کچھ بھی فرض نہیں کرتے ہیں درپردہ متغیر کے مختلف نظریات ρ کے لیے کافی مختلف تقاضات پیش کر سکتے ہیں۔ مساوات 12.6 کو استعمال کرتے ہوئے ہم B کو خارج کر سکتے ہیں۔

$$(12.8) \quad P(a, b) = - \int \rho(\lambda) A(a, \lambda) A(b, \lambda) d\lambda$$

اگر c کوئی تیسرا اکائی سمتیہ ہو تب درج ذیل ہوگا

$$(12.9) \quad P(a, b) - P(a, c) = - \int \rho(\lambda) [A(a, \lambda) A(b, \lambda) - A(a, \lambda) A(c, \lambda)] d\lambda$$

اور چونکہ $[A(b, \lambda)]^2 = 1$ ہے لہذا آپ درج ذیل ہوگا

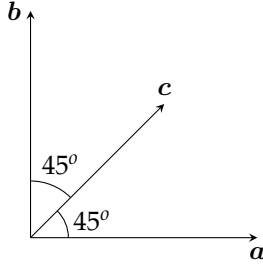
$$(12.10) \quad P(a, b) - P(a, c) = - \int \rho(\lambda) [1 - A(b, \lambda) A(c, \lambda)] A(a, \lambda) d\lambda$$

تاہم مساوات 12.5 کے تحت $+1 \leq [A(a, \lambda) A(b, \lambda)] \leq -1$ مزید $\rho(\lambda) [1 - A(b, \lambda) A(c, \lambda)] \geq 0$ لہذا

$$(12.11) \quad |P(a, b) - P(a, c)| \leq \int \rho(\lambda) [1 - A(b, \lambda) A(c, \lambda)] d\lambda$$

یا مختصر اور درج ذیل ہوگا

$$(12.12) \quad |P(a, b) - P(a, c)| \leq 1 + P(b, c)$$



شکل ۱۲.۳: کاشف کو یوں سمت بند کیا گیا ہے کہ بل عدم مساوات کی کوانٹائی خلاف ورزی ظاہر ہو۔

یہ مشہور بل عدم مساوات ہے۔ مساوات 12.5 اور 12.6 کے علاوہ کوئی شرط عائد نہیں کی گئی ہے ہم نے درپردہ متغیرات کی تعداد یا خاصیت یا تقسیم ρ کے بارے میں کچھ بھی فرض نہیں کیا لہذا یہ عدم مساوات ہر معنای درپردہ متغیر نظریہ کے لیے کارآمد ہوگا۔

لیکن ہم بہت آسانی سے دکھا سکتے ہیں کہ کوانٹائی میکانیات کی پیش گوئی مساوات 12.4 اور بل عدم مساوات ہم آہنگ نہیں ہیں۔ فرض کریں تینوں اکائی سمتیات ایک مستوی میں پائے جاتے ہوں اور a اور b کے ساتھ c کا زاویہ 45° ہو (شکل ۱۲.۳)۔ ایسی صورت میں کوانٹائی میکانیات کہتی ہے کہ

$$P(a, b) = 0,$$

$$P(a, c) = P(b, c) = -0.707$$

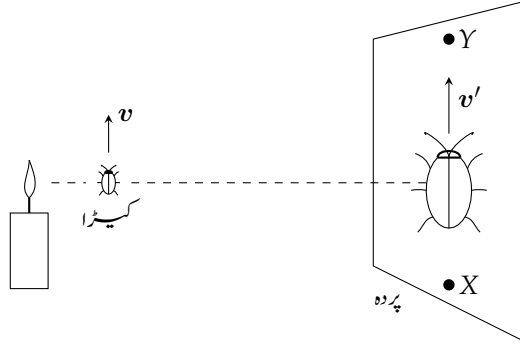
جبکہ بل عدم مساوات کہتی ہے کہ

$$0.707 \nless 1 - 0.707 = 0.293$$

جو ایک دوسرے کے غیر ہم آہنگ نتائج ہیں یوں بل کی ترمیم سے آہٹناؤں، پوڈسکی اور روزن تضاد ایک ایسی بات ثابت کرتا ہے جو اس کے مصنفین تصور بھی نہیں کر سکتے تھے۔ اگر وہ درست ہوں تب نہ صرف کوانٹائی میکانیات مکمل ہے بلکہ یہ مکمل طور پر غلط ہے اس کے برعکس اگر کوانٹائی میکانیات درست ہے تب کوئی درپردہ متغیر نظریہ ہمیں اس غیر معتمدیت سے نجات نہیں دے سکتی جسے آہٹناؤں مضحکہ خیز سمجھتا تھا۔ مزید اب ہم بہت سادہ تجربے سے اس مسئلے کو دفن کر سکتے ہیں۔

بل عدم مساوات کو پرکھنے کے لیے ساٹھ اور ستر کی دہائیوں میں کئی تجربات سرانجام دئے گئے جن میں ایسکٹ، گرنیکیز اور روجبر کا کام متابل فخر ہے ہمیں یہاں انکے تجربے کی تفصیل سے دلچسپی نہیں ہے۔ انہوں نے پایون تفرز کی بجائے دو نوریہ جوہری انتقال استعمال کیا یہ خدشہ دور کرنے کے لیے کہ ایسکٹران کاشف کی سمت بندی کو کسی طرح ضد ایسکٹران کاشف جان پائے گا نوریہ کی روانگی کے بعد دونوں کی سمت بندی کی گئی۔ نتائج کوانٹائی میکانیات کی پیش گوئی کی عین مطابق تھے اور بل عدم مساوات کے غیر ہم آہنگ تھے۔

ستم ظریفی کی بات ہے کہ کوانٹائی میکانیات کی تجرباتی تصدیق نے سائنسی برادری کو ہلا کر رکھ دیا۔ لیکن اس کی وجہ حقیقت پسند سوچ کا غلط ثابت ہونا نہیں تھا عموماً سائنسدان کب کے اس حقیقت کو مان چکے تھے اور جو



شکل ۱۲.۲: پردہ پر کیڑے کا سایہ، روشنی کی رفتار c سے زیادہ رفتار v' سے حرکت کرتا ہے بشرطیکہ پردہ کافی دور ہو۔

ابھی بھی مانتے تھے انکے لیے غیر معتامی در پردہ متغیر نظریات کا راستہ ابھی کھلا ہے چونکہ مثلاً بل اطلاق ان پر نہیں ہوتا ہے۔ اصل صدمہ اس بات کا تھا کہ فطرت خود بنیادی طور پر غیر معتامی ہے۔ تعادل موج کی فوراً انہدام کی صورت میں غیر معتامیت یا متماثل ذرات کے لیے ضرورت تشاکلیت ہمیشہ تقلید پسند نظریہ کی حناصیت رہی ہے۔ تاہم الیسیکٹ کے تجربے سے قبل اُمید کی جاسکتی تھی کہ کوانٹائی غیر معتامیت کسی طرح متاثر و ضوابط کی غیر طبعی پیداوار تھی جس کے متاثر کشف اثرات نہیں ہو سکتے ہیں اس اُمید کو بھول جائیں ہمیں فاصلہ پر یکدم عمل کے تصور کو دوبارہ دیکھنا ہوگا۔

ماہر طبیعیات روشنی سے زیادہ تیز رفتار اثر و سوچ کو کیوں برداشت نہیں کر سکتے ہیں؟ آخر کئی چیزیں روشنی سے زیادہ تیز رفتار سے حرکت کرتی ہے۔ ایک موم بتی کے سامنے چلتے ہوئے کیڑے کا سامنے دیوار پر سائے کی رفتار دیوار تک فاصلے کے راست متناسب ہوگی اصولاً آپ اس فاصلہ کو اتنا بڑھا سکتے ہیں کہ سایہ کی رفتار روشنی سے زیادہ ہو (شکل ۱۲.۲)۔ تاہم دیوار پر کسی ایک نقطہ سے دوسرے نقطہ تک سایہ نہ کوئی توانائی منتقل کر سکتا ہے اور نہ ہی کوئی خبر پہنچا سکتا ہے۔ نقطہ X پر ایک شخص ایسا کوئی عمل نہیں کر سکتا جو یہاں سے گزرتے ہوئے سائے کے ذریعہ نقطہ Y پر اثر انداز ہو۔

اس کے برعکس روشنی سے زیادہ تیز حرکت کرنے والے سببی اثر و سوچ کے نا متاثر قبول مضمرات ہو سکتے ہیں۔ خصوصی نظریہ اضافت میں ایسے جمودی چوکھٹ پائے جاتے ہیں جن میں اس طرح کا اشارہ وقت میں پیچھے جاسکے گا یعنی سبب سے پہلے اثر رونما ہوگا جس سے نا متاثر قبول متنتی مسائل کھڑے ہوتے ہیں۔ مثلاً آپ اپنے نوزائیدہ دادا کو قتل کر سکتے ہیں۔ جو ظاہر ہے ایک بری بات ہے۔ اب سوال یہ کھڑا ہوتا ہے کہ آیا روشنی سے تیز اثرات جن کی پیشگوئی کوانٹائی میکانیات کرتی ہے اور جو الیسیکٹ کے تجربے میں کشف ہتے ہیں ان معنوں میں سببی ہے یا یہ سائے کی حرکت کی طرح غیر حقیقی ہے جن پر فلسفیانہ اعتراضات نہیں لگائے جاسکتے ہیں۔

آئیں تجربے بل پر غور کریں کریں۔ کیا الیسیکٹران کی پیمائش کا ضد الیسیکٹران کی پیمائش پر اثر ہوگا یقیناً ایسا ہوتا ہے ورنہ ہم مواد کے بیچ باہم رشتہ کی وضاحت پیش کرنے سائے متاثر ہوں گے۔ لیکن کیا الیسیکٹران کی پیمائش ضد

الیکٹران کی کسی مخصوص نتیجہ کا سبب ہے؟ الیکٹران کاشف پر بیٹھا شخص اپنی پیمائش کے ذریعہ ضد الیکٹران کاشف پر بیٹھے شخص کو اشارہ نہیں بھیج سکتا ہے چونکہ یہ اپنی پیمائش کے نتیجہ کو متاثر نہیں کرتا یہ الیکٹران کو ہم میدان ہونے پر مجبور نہیں کر سکتا ہے جیسا نقطہ X پر کیڑا کے سائے پر وہ شخص اثر انداز نہیں ہو سکتا، ہاں الیکٹران کاشف پر بیٹھا شخص فیصلہ کر سکتا ہے کہ وہ پیمائش کرے یا نہ کرے تاہم ضد الیکٹران کاشف پر بیٹھا شخص اپنی پیمائش نتائج کو دیکھ کر یہ نہیں بتا سکتا کہ الیکٹران پر پیمائش کی گئی یا نہیں دونوں کاشف کے نتائج پر علیحدہ علیحدہ غور کرنے سے مکمل بلا واسطہ مواد دیکھنے کو ملتا ہے۔ صرف دونوں مواد کا ایک دوسرے کے ساتھ موازنہ کرنے سے ہمیں ان کے بیچ باہم رشتہ نظر آتا ہے کسی دوسرے جمودی چوکھٹ میں الیکٹران کی پیمائش سے قبل ضد الیکٹران کی پیمائش کی جائے گی لیکن اس کے باوجود اس سے کوئی منتفی تفسیر پیدا نہیں ہوتا۔ دکھا گیا باہم رشتہ اس پر منحصر نہیں کہ ہم کہیں الیکٹران کی پیمائش ضد الیکٹران کی پیمائش پر اثر انداز ہوتی ہے یا ضد الیکٹران کی پیمائش الیکٹران کی پیمائش پر اثر انداز ہوتی ہے۔ یہ ایک نہایت نازک اور خوبصورت اثر ہے جو بلا واسطہ مواد کے بیچ باہم رشتہ کی صورت میں نظر آتا ہے۔

یوں ہمیں مختلف قسم کے اثرات کی بات کرنی ہوگی سبھی قسم جو وصول کنندہ کی کسی طبعی خاصیت میں حقیقی تبدیلیاں پیدا کرتا ہو جنہیں صرف ذیلی نظام پر تجرباتی پیمائش سے کشف کیا جاسکتا ہو اور آسمانی قسم جو توانائی یا معلومات کی ترسیل نہیں کرتا اور جس کے لیے واحد ثبوت دو علیحدہ ذیلی نظاموں کے مواد کے بیچ باہم رشتہ ہے۔ اس باہم رشتہ کو کسی بھی طرح کسی ایک ذیلی نظام میں تجربہ بات کے نتائج کو دیکھ کر کشف نہیں کیا جاسکتا ہے۔ سببی اثرات روشنی کی رفتار سے تیز حرکت نہیں کر سکتے ہیں جبکہ آسمانی اثرات پر ایسی کوئی پابندی عائد نہیں۔ تفسیر موج کی انہدام سے وابستہ اثرات موخر الذکر قسم کی ہے جس کا روشنی سے تیز سفر کرنا حیران کن ضرور ہو سکتا ہے لیکن تبہ کن نہیں ہے۔

۱۲.۳ مسئلہ کلیہ

کوانٹائی پیمائش عموماً متباہ کن ہوتے ہیں یعنی یہ پیمائش کردہ نظام کے حال کو تبدیل کرتا ہے۔ یہی تجربہ گاہ میں اصول عدم یقینیت کو یقینی بناتا ہے ہم کیوں اصل حال کی کئی متضاد فکتل کلیہ بن کر اصل نظام کو چھوئے بغیر ان کی پیمائش نہیں کرتے ایسا کرنا ممکن نہیں ہے۔ اگر آپ کلیہ بنانے والا ایسا آلا بنائیں تو کوانٹائی میکانیات کو خداحافظ کہنا ہوگا۔

مثال کے طور پر آئنشٹائن، پوڈلنسکی، روزن اور بوہم تجربہ کے ذریعہ روشنی سے تیز رفتار پر خبر بھیجنا ممکن ہوگا فرض کریں ضد الیکٹران کاشف چلانے والا شخص ہاں یا نہیں کی خبر ترسیل کرتا ہے۔ خبر ہاں ہونے کی صورت میں بھیجے والا ضد الیکٹران کا S_z ناپتا ہے یہ جاننے کی ضرورت نہیں کہ پیمائش نتیجہ کیا ہے صرف اتنا جاننا ضروری ہے کہ پیمائش کی گئی ہے یوں الیکٹران کسی غیر مبہم حال \uparrow یا \downarrow میں ہوگا جس کا جاننا غیر اہم ہے۔ خبر وصول کرنے والا جلدی سے الیکٹران کی دس لاکھ کلیہ تیار کر کے ہر ایک کی S_z ناپتا ہے اگر تمام کا ایک ہی جواب ہو کون جواب یہ جاننا ضروری نہیں ہم یقین سے کہہ سکیں گے کہ الیکٹران کی پیمائش کی گئی لہذا خبر ہاں ہوگی۔ اس کے برعکس اگر نصف الیکٹران ہم میدان اور نصف خلاف میدان ہوں تب یقیناً الیکٹران کی

پیمائش نہیں کی گئی اور خبر نہیں ہوگا۔

لیکن سن 1982 ووترز، زورک اور ڈانکس نے ثابت کیا کہ ایسا مشین تیار نہیں کیا جاسکتا ہے جو کوانٹائی متماثل ذرات پیدا کرتا ہو ہم چاہیں گے کہ یہ مشین حال $\langle \psi \rangle$ میں ایک ذرہ جس کا نقل بنانا مقصود ہو اور حال $\langle X \rangle$ میں ایک اضافی ذرہ لی کر حال $\langle \psi \rangle$ میں دو ذرات اصل اور نقل دیتا ہو

$$(12.13) \quad |\psi\rangle |X\rangle \rightarrow |\psi\rangle |\psi\rangle$$

فرض کریں ہم ایسا مشین بنانے میں کامیاب ہوتے ہیں جو حال $\langle \psi_1 \rangle$ کا کلمہ تیار کرتا ہو

$$(12.14) \quad |\psi_1\rangle |X\rangle \rightarrow |\psi_1\rangle |\psi_1\rangle$$

اور $\langle \psi_2 \rangle$ پر بھی کام کرنے کے متماثل ہو

$$(12.15) \quad |\psi_2\rangle |X\rangle \rightarrow |\psi_2\rangle |\psi_2\rangle$$

مثال کے طور پر اگر ذرہ ایک الیکٹران ہو تب $\langle \psi_1 \rangle$ اور $\langle \psi_2 \rangle$ ہم میدان اور خلاف میدان ہو سکتے ہیں۔ یہاں تک کوئی مسئلہ پیدا نہیں ہوتا تب دکھانا ہوگا کہ ان کا خطی جوڑ $\langle \psi \rangle = \alpha \langle \psi_1 \rangle + \beta \langle \psi_2 \rangle$ کی صورت میں کیا ہوگا؟ ظاہر ہے ایسی صورت میں درج ذیل ہوگا

$$(12.16) \quad |\psi\rangle |X\rangle \rightarrow \alpha |\psi_1\rangle |\psi_1\rangle + \beta |\psi_2\rangle |\psi_2\rangle$$

جو ہم نہیں چاہتے ہیں۔ ہم درج ذیل چاہتے ہیں

$$(12.17) \quad |\psi\rangle |X\rangle \rightarrow |\psi\rangle |\psi\rangle = [\alpha |\psi_1\rangle + \beta |\psi_2\rangle][\alpha |\psi_1\rangle + \beta |\psi_2\rangle] \\ = \alpha^2 |\psi_1\rangle |\psi_1\rangle + \beta^2 |\psi_2\rangle |\psi_2\rangle + \alpha\beta [|\psi_1\rangle |\psi_2\rangle + |\psi_2\rangle |\psi_1\rangle]$$

آپ ہم میدان الیکٹران اور خلاف میدان الیکٹران کے کلمہ بنانے کی مشین بنا سکتے ہیں لیکن وہ کسی بھی با وقعت (غیر صفر) خطی جوڑ کی صورت میں ناکامی کا شکار ہوگا یہ بالکل ایسا ہوگا جیسا نقل بنانے کی مشین افقی لکیریوں اور انتضابی لکیریوں کی نقل خوش اسلوبی سے کرتا ہو لیکن وتری لکیریوں کو مکمل طور پر بگاڑتا ہو۔

۱۲.۴ شرودنگر کی بلی

کوانٹائی میکینکات میں پیمائش کا عمل ایک شرارتی کردار ادا کرتا ہے جس میں عدم تعینیت غیر متماثلیت تفاعلی موج کا انہدام اور باقی تمام تصوراتی مشکلات رونما ہوتی ہیں۔ پیمائش کی غیر موجودگی میں مساوات شرودنگر کے تحت تفاعلی موج متماثل تعین طریقہ سے ارتقا کرتا ہے اور کوانٹائی میکینکات کسی بھی سادہ نظریہ میدان کی طرح نظر آتا ہے جو کلاسیکی برقی حرکیات سے بہت سادہ ہوگا چونکہ دو میدان E اور B کی بجائے اس میں واحد ایک غیر مستقیم ψ پایا جاتا ہے۔ یہ پیمائش کا عمل ہی ہے جو کوانٹائی میکینکات میں عجیب و غریب کردار ادا کرتے ہوئے اس کو سمجھنے کے باہر خواص سے نوازتا ہے۔ یہ پیمائش

حقیقت میں ہے کیا؟ اسے دیگر طبعی عوامل سے کیا منفرد بناتا ہے اور ہم کس طرح جان سکتے ہیں کہ پیمائش کی گئی ہے؟

شروڈنگر نے اپنے مشہور تصادف بلی کے مفروضہ نے اس بنیادی سوال کو پیش کیا۔

ایک بلی کو فولاد کے ایک بند ڈبے میں بند کیا جاتا ہے اس ڈبے میں ایک گانگر گنت کار اور کسی تابکار مادہ کی اتنی چھوٹی مقدار رکھی جاتی ہے جس کا ایک گھنٹہ میں صرف ایک جوہر کے تحلیل ہونے کا امکان ہوتا ہے یہ بھی ممکن ہے کہ کوئی جوہر تحلیل نہ ہو تحلیل کی صورت میں گنت کار اس ڈبے میں ایک زہریلی گیس چھوڑتا ہے۔ ایک گھنٹہ گزرنے کے بعد ہم کہہ سکتے ہیں کہ تحلیل نہ ہونے کی صورت میں یہ بلی زندہ ہوگی۔ پہلی تحلیل اس کو زہر سے مار دیتی۔ اس مکمل نظام کا تقاضا عمل موج اس حقیقت کو ظاہر کرنے کے لیے زندہ اور مردہ بلی کے برابر حصوں پر مشتمل ہوگا۔

ایک گھنٹہ کے بعد بلی کا تقاضا عمل موج درج ذیل روپ کا ہوگا

$$(۱۲.۱۸) \quad \psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{\text{زندہ}} + \psi_{\text{مردہ}})$$

یہ بلی نہ تو زندہ اور نہ ہی مردہ ہے بلکہ پیمائش سے پہلے ہی ان دونوں کا ایک خطی جوڑ ہوگا یہاں کھڑکی سے اندر دیکھ کر بلی کا حال جاننے کو پیمائش تصور کیا جائے گا۔ آپ کا دیکھنے کا عمل بلی کو زندہ یا مردہ ہونے پر مجبور کرتا ہے ایسی صورت میں اگر بلی مردہ پائی جائے تو یقیناً اس کے ذمہ دار آپ ہی ہیں چونکہ آپ نے کھڑکی سے دیکھ کر اسے قتل کیا۔

شروڈنگر اس تمام کو ایک کوا اس سے زیادہ نہیں سمجھتا تھا اور میرے خیال سے زیادہ تر ماہر طبیعیات ان کے ساتھ متفق ہیں۔ کلاں این اجام کا دو مختلف حالات کی ایک خطی جوڑ کی صورت میں ہونے کا تصور بے معنی ہے۔ ایک الیکٹران تو ہم میدان اور خلاف میدان کے ایک خطی جوڑ کی صورت میں ہو سکتا ہے لیکن ایک بلی زندہ اور مردہ حالات کے ایک خطی جوڑ کی صورت میں نہیں ہو سکتی ہے۔ اس کو کوانٹائی میکانیات کی تقلید پسند تشریح کے ساتھ کس طرح ہم آہنگ بنایا جاسکتا ہے۔

شماریاتی مفہوم کے لحاظ سے مقبول ترین جواب یہ ہے کہ گنت کار کی گنتی پیمائش ہوگی تاکہ کھڑکی میں سے انسانی مشاہدہ پیمائش سے مراد وہ عمل ہے جو کلاں این نظام پر اثر انداز ہو جو یہاں گنت کار ہے۔ پیمائش کا عمل اس لحاظ پر رونما ہوگا جب خوردبین نظام جسے کوانٹائی میکانیات کے قوانین بیان کرتا ہے کلاں این نظام جسے کلاسیکی میکانیات کے قواعد بیان کرتے ہیں کے ساتھ اس طرح باہم عمل کرے جس سے دائمی تبدیلی رونما ہو۔ کلاں این نظام خود منفرد حالات کی ایک خطی جوڑ کا مکین ہو سکتا ہے۔

۱۲.۵ کوانٹائی زینو تضاد

اس عجیب قصہ کی اہم ترین خاصیت تقاضا عمل موج کا انہدام ہے۔ ایک پیمائش کے فوراً بعد دوسری پیمائش سے اسی نتیجہ کے حصول کی خاطر حتمی نظریاتی بنیادوں پر اسے متعارف کیا گیا تھا یقیناً اس دو

رس اصول موضوعہ کے متبادل مشاہدہ اثرات بھی ہوں گے۔ مسر اور سدرشان نے سن 1977 میں تفاعلی موج کی انہدام کا ایک ڈرامائی تجزیہ کیا جسے انہوں نے کوانٹائی زیٹو اثر کا نام دیا۔ ان کا تصور یہ تھا کہ ایک غیر مستحکم نظام مثلاً ہیجان حال میں ایک جوہر کو بار بار پیمائشی عمل سے گزارا جائے۔ ہر ایک مشاہدہ تفاعلی موج کو منہدم کر کے گھڑی کو دوبارہ صفر سے چالو کرے گا اور یوں زیریں حال میں متوقع انتقال کو غیر معائنہ مدد تک روکا جاسکتا ہے۔

فرض کریں ایک نظام ہیجان حال ψ_2 سے آغاز کرتا ہے اور زمینی حال ψ_1 میں منتقلی کے لیے اس کا وقت درتی عرصہ حیات τ ہے۔ عام طور پر τ سے کافی کم وقتوں کے لیے انتقالی احتمال وقت t کا راست متناسب ہوگا مساوات 9.42 دیکھیں چونکہ انتقالی شرح $1/\tau$ ہے لہذا درج ذیل ہوگا

$$P_{2 \rightarrow 1} = \frac{t}{\tau} \quad (12.19)$$

وقت t پر پیمائش کرنے کی صورت میں بالائی حال میں نظام ہونے کا احتمال درج ذیل ہوگا

$$P_2(t) = 1 - \frac{t}{\tau} \quad (12.20)$$

فرض کریں ہم دیکھتے ہیں کہ نظام بالائی حال میں ہی ہے ایسی صورت میں تفاعلی موج واپس ψ_2 پر منہدم ہوگا اور پورا عمل ایک بار نئے سرے سے دوبارہ شروع ہوگا۔ اگر ہم وقت $2t$ پر دوسری پیمائش کریں تب بالائی حال میں نظام ہونے کا احتمال درج ذیل ہوگا

$$\left(1 - \frac{t}{\tau}\right)^2 \approx 1 - \frac{2t}{\tau} \quad (12.21)$$

جو وہی ہے جو اس صورت ہوتا اگر ہم پہلی پیمائش کرتے ہی نہیں سادہ موج کے تحت ایسا ہی ہونا چاہیے تھا۔ اگر ایسا ہی ہوتا تب نظام کا بار بار مشاہدہ کرنے سے کوئی فخرق نہیں پڑتا اور نہ یہ کوانٹائی زیٹو اثر پیدا ہوتا تاہم بہت کم وقت کی صورت میں انتقالی احتمال وقت t کے بجائے t^2 کا راست متناسب ہوگا 9.39 دیکھیں

$$P_{2 \rightarrow 1} = \alpha t^2 \quad (12.22)$$

ایسی صورت میں دو پیمائشوں کے بعد بھی نظام کا بالائی حال میں ہونے کا احتمال درج ذیل ہوگا

$$\left(1 - \alpha t^2\right)^2 \approx 1 - 2\alpha t^2 \quad (12.23)$$

جبکہ پہلی پیمائش نہ کرنے کی صورت میں اب احتمال درج ذیل ہوتا

$$1 - \alpha(2t)^2 \approx 1 - 4\alpha t^2 \quad (12.24)$$

آپ دیکھ سکتے ہیں کہ وقت t گزرنے کے بعد نظام کے مشاہدہ کی بنا پر زیریں حال میں منتقلی کا احتمال کم ہوا ہے۔

یقیناً $t = 0$ سے لیکر $t = T$ تک n برابر وقفہ $T/n, 2T/n, 3T/n, \dots, T$ پر نظام کا مشاہدہ کرنے کی وجہ سے اس دورانیہ کے آخر میں بھی نظام بالائی حال میں پائے جانے کا احتمال درج ذیل ہوگا

$$(۱۲.۲۵) \quad \left(1 - \alpha(T/n)^2\right)^n \approx 1 - \frac{\alpha}{n} T^2$$

جو $n \rightarrow \infty$ کی حد میں 1 تک پہنچتا ہے ایک غیر مستحکم نظام جس کا مسلسل مشاہدہ کیا جائے کبھی بھی تحلیل نہیں ہوگا بعض مصنفین اس مآخوذ سے اتفاق نہیں کرتے اور ان کے نزدیک یہ تفاعل موج کے انہدام غیر درست ہونے کا ثبوت ہے۔ تاہم ان کے دلائل مشاہدہ کے مفہوم کی عطا تشریح پر مبنی ہے اگر بلا حنا میں ایک ذرہ کی راہ کو مسلسل مشاہدہ متدار دے دیا جائے تب یہ بالکل درست ہوں گے چونکہ ایسی ذرات یقیناً تحلیل ہوتے ہیں اور ان کا عرصہ حیات پر کشف کا مقابل پیمائش اثر نہیں پایا جاتا ہے تاہم ایسا ذرہ حنا کے اندر جوہروں کے ساتھ خدو حنا باہم عمل کرتا ہے جبکہ کوانٹائی زینو اثر کے لیے ضروری ہے کہ یک بعد دیگر پیمائشوں کے بیچ وقفہ اتنا کم ہو کہ نظام کو t^2 خطہ میں پکڑا جائے۔

ہم دیکھتے ہیں کہ خود بخود انتقل کی صورت میں یہ تجربہ عملاً ممکن نہیں ہے۔ تاہم پیدا کردہ انتقال کی صورت میں نتائج کا نظریاتی پیشگوئی کے ساتھ مکمل اتفاق پایا جاتا ہے۔ بد قسمتی سے یہ تجربہ تفاعل موج کی انہدام کا حتمی ثبوت پیش نہیں کر سکتا ہے اس مشاہدہ کے دیگر وجوہات بھی دئے جاسکتے ہیں۔

میں نے اس کتاب میں ایک ہم آہنگ اور بلا تضاد کہانی پیش کرنے کی کوشش کی ہے تفاعل موج ψ کی ذرہ یا نظام کے حال کو ظاہر کرتا ہے۔ عمومی طور پر ای کذرہ کسی مخصوص حرکی خاصیت مثلاً مقام معیار حرکت۔ توانائی زوایائی معیار حرکت وغیرہ کا حامل نہیں ہوتا اس وقت تک جب پیمائشی عمل مداخلت نہ کرے کسی ایک تجربہ میں حاصل ایک مخصوص قیمت کا احتمال ψ کی شاریاتی مفہوم تعین کرتا ہے۔ پیمائشی عمل سے تفاعل موج منہدم ہوتا ہے جس کی بنا پر فوراً دوسری پیمائش لازماً وہی نتیجہ دیگی۔ اگرچہ دیگر تشریحات مثلاً غیر مدتمای در پردہ متغیر نظریات متعدد کائنات کا تصور بلا تضاد تاریخیں سگرہ نمونے وغیرہ بھی پائے جاتے ہیں لیکن میں یقین کرتا ہوں کہ یہ سب سے سادہ ہے جس سے عموماً ماہر طبیعیات اتفاق کرتے ہیں۔ یہ ہر تجربہ سے کامیابی سے ابھرا ہے تاہم یہ کہانی کا اختتام نہیں ہے ہمیں پیمائشی عمل کے بارے میں اور انہدام کے طریقے کار کے بارے میں بہت کچھ جاننا ہے عین ممکن ہے کہ آنے والے نسلیں زیادہ پیچیدہ نظریہ جانتے ہوئے سوچتے ہوں کہ ہم اتنا سادہ کیسے ہو سکتے تھے۔

جوابات

ضمیمہ ۱

خطی الجبر ۱

۱.۱ سمتیات

۲.۱ اندرونی ضرب

$$(۱) \quad |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \leq \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle$$

(۱) اس اہم نتیجہ کو شوارز عدم مساوات^۱ کہتے ہیں؛ اس کا ثبوت سوال ۲.۱ میں پیش کیا گیا ہے۔ یوں اگر آپ چاہیں تو α اور β کے بیچ زاویہ کی تعریف درج ذیل کلیہ کے تحت کر سکتے ہیں۔

$$(۲) \quad \cos \theta = \sqrt{\frac{\langle \alpha | \beta \rangle \langle \beta | \alpha \rangle}{\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle}}$$

سوال ۱.۱: فرض کریں آپ غیر معیاری عمودی اساس $(|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots, |e_n\rangle)$ سے آغاز کرتے ہیں۔ اس اساس سے معیاری عمودی اساس $(|e'_1\rangle, |e'_2\rangle, \dots, |e'_n\rangle)$ کو گرام و شمد حکمت عملی^۲ سے حاصل کیا جاسکتا ہے۔ یہ طریقہ کار کچھ یوں ہے:

۱. اساس کے پہلے سمتیہ کی معمول زنی کریں (اس کو اپنے معیار سے تقسیم کریں)۔

$$|e'_1\rangle = \frac{|e_1\rangle}{\|e_1\|}$$

^۱Schwarz inequality
^۲Gram-Schmidt procedure

ب. دوسرے سمتیہ کا پہلے معمول شدہ سمتیہ پر تقطیل لے کر اس کو دوسرے سمتیہ سے منفی کریں۔

$$|e_2\rangle - \langle e'_1|e_2\rangle|e'_1\rangle$$

یہ سمتیہ $|e'_1\rangle$ کو فائز ہوگا؛ اس کی معمول زنی کر کے $|e'_2\rangle$ حاصل کریں۔

ج. سمتیہ $|e_3\rangle$ سے اس کا $|e'_1\rangle$ اور $|e'_2\rangle$ پر تقطیل منفی کریں۔

$$|e_3\rangle - \langle e'_1|e_3\rangle|e'_1\rangle - \langle e'_2|e_3\rangle|e'_2\rangle$$

یہ $|e'_1\rangle$ اور $|e'_2\rangle$ کو فائز ہوگا؛ اس کی معمول زنی کر کے $|e'_3\rangle$ حاصل کریں۔ اسی طرح باقی بھی حاصل کریں۔

گرام و شمد حکمت عملی استعمال کر کے 3 فضا اس:

$$|e_1\rangle = (1+i)\mathbf{i} + (1)\mathbf{j} + (i)\mathbf{k}, |e_2\rangle = (i)\mathbf{i} + (3)\mathbf{j} + (1)\mathbf{k}, |e_3\rangle = (0)\mathbf{i} + (28)\mathbf{j} + (0)\mathbf{k}$$

کو معیاری عمودی بنائیں۔

سوال ۲۱: شواہد عدم مساوات (مساوات ۱) ثابت کریں۔ اشارہ: آپ $\langle \gamma|\gamma \rangle \geq 0$ استعمال کرتے ہوئے $|\gamma\rangle = |\beta\rangle - (\langle \alpha|\beta \rangle / \langle \alpha|\alpha \rangle)|\alpha\rangle$ سے شروع کریں۔

۳.۱. طالب

۴.۱. تبدیلی اساس

۵.۱. امتیازی تفاعلات اور امتیازی افتدار

۶.۱. ہر مشی تبادله

فهرست

- centrifugal term, 146
- Chandrasekhar limit, 253
- chemical potential, 247
- Clebsch-Gordon coefficients, 190
- coherent states, 133
- collapses, 4, 111
- commutation
 - canonical relation, 45
 - canonical relations, 138
 - fundamental relations, 165
- commutator, 44
- commute, 44
- complete, 35, 100
- conductor, 235
- configuration, 237
- continuity equation, 194
- continuous, 105
- continuum, 138
- coordinates
 - spherical, 139
- Copenhagen interpretation, 4
- covalent bond, 214
- cubic symmetry, 298

- Darwin term, 280
- decomposition
 - spectral, 130
- degeneracy pressure, 228
- degenerate, 90, 104
- degrees of freedom, 254
- delta
 - Kronecker, 35

- 21-centimeter line, 291

- adjoint, 103
- allowed
 - values, 33
- aluminium, 220
- angular momentum
 - conservation, 170
 - extrinsic, 174
 - intrinsic, 174
- argument, 61

- bands, 234
- baryon, 191
- Bessel
 - spherical function, 148
- binding energy, 156
- binomial coefficient, 239
- blackbody spectrum, 250
- Bloch's theorem, 229
- Bohr
 - radius, 156
- Bohr formula, 155
- Bohr magneton, 284
- Bose condensation, 249
- Bose-Einstein distribution, 247
- bosons, 208
- boundary conditions, 32
- bra, 128
- bra-ket
 - notation, 128
- bulk modulus, 229

- fermions, 208
- Feynmann-Hellmann theorem, 294
- fine structure, 272
- fine structure constant, 272
- formula
 - De Broglie, 19
 - Euler, 30
- Fourier
 - inverse transform, 63
 - transform, 63
- Frobenius
 - method, 54
- function
 - Dirac delta, 72
 - even, 31
- g-factor, 278
- gamma function, 249
- gaps, 234
- gauge
 - invariant, 202
 - transformation, 202
- generalized
 - distribution, 72
 - function, 72
- generalized statistical interpretation, 111
- generating
 - function, 60
- generator
 - translation in space, 136
 - translation in time, 136
- geometric series, 253
- good
 - linear combinations, 263
- good quantum numbers, 275
- Gram-Schmidt
 - orthogonalization process, 107
- Gram-Schmidt procedure, 437
- graviton, 163
- group theory, 191
- gyromagnetic ratio, 182
- density
 - free electron, 227
- determinant
 - Slater, 214
- determinate state, 103
- deuterium, 297
- deuteron, 297
- dipole moment
 - magnetic, 181
- Dirac
 - comb, 229
 - notation, 128
 - orthonormality, 108
- direct integral, 313
- discrete, 105
- dispersion
 - relation, 67
- dope, 235
- eigenfunction, 103
- eigenvalue, 103
- eigenvalue equation, 103
- electrodynamics
 - quantum, 278
- electron
 - classic radius, 175
- energy
 - allowed, 29
 - conservation, 39
- energy gap, 290
- ensemble, 15
- entangled states, 207
- exchange force, 213
- exchange integral, 313
- expectation
 - value, 7
- Fermi
 - energy, 227
 - temperature, 228
- Fermi surface, 227
- Fermi-Dirac distribution, 247

- polynomial, 158
- Lamb shift, 272
- Landau Levels, 202
- Lande g -factor, 284
- Laplacian, 138
- Larmor frequency, 184
- law
 - Hooke, 42
- LCAO, 311
- Legendre
 - associated, 142
- leptons, 175
- Levi-Civita symbol, 180
- linear
 - combination, 28
- linear algebra, 97
- Lithium, 162
- Lorentz force
 - law, 201
- magnetic moment
 - anomalous, 278
- mass
 - reduced, 206
- matrices, 98
- matrix
 - S , 94
 - transfer, 95
- matrix elements, 125
- Maxwell-Boltzmann distribution, 247
- mean, 7
- median, 7
- meson, 191
- momentum, 17
- momentum space
 - wave function, 195
- momentum space wave function, 113
- motion
 - cyclotron, 202
- muon catalysis, 319
- muonic hydrogen, 291
- Hamiltonian, 28
- harmonic
 - oscillator, 32
- harmonic oscillator
 - three-dimensional, 193
- Helium, 162
- Hermitian
 - conjugate, 49
- hermitian, 101
 - anti, 130
 - conjugate, 103
 - skew, 130
- hidden variables, 3
- Hilbert space, 99
- hole, 235
- Hund's
 - first rule, 221
 - second rule, 221
 - third rule, 221
- Hund's Rules, 220
- hydrogen
 - muonic, 207
- hydrogenic atom, 162
- hyperfine structure, 272
- ideal gas, 245
- idempotent, 129
- indeterminacy, 3
- infinite spherical well, 146
- inner product, 98
- insulator, 235
- inverse beta decay, 253
- ket, 128
- kion, 191
- Kronig-Penny model, 232
- ladder
 - operators, 46
- Lagrange multiplier, 242
- Laguerre
 - associated polynomial, 158

- degenerate, 260
- pion, 191
- Planck's
 - formula, 162
- polynomial
 - Hermite, 58
- position
 - agnostic, 4
 - orthodox, 3
 - realist, 3
- positronium, 207, 291
- potential, 15
 - effective, 146
 - reflectionless, 93
- probability
 - conservation, 194
 - density, 10
- probability current, 21, 194
- probable
 - most, 7
- quantum
 - principle number, 155
- quantum dots, 319
- quantum number
 - azimuthal, 145
 - magnetic, 145
- quantum numbers, 147
- quark, 191
- radial equation, 146
- recursion
 - formula, 55
- reflection
 - coefficient, 78
- relation
 - Kramers, 295
 - Pasternack, 295
- relativistic correction, 272
- revival time, 89
- Riemann zeta function, 249
- rigid rotor, 173
- muonium, 291
- Neumann
 - spherical function, 148
- neutrino
 - electron, 127
 - muon, 127
- neutron star, 253
- node, 34
- non-normalizable, 13
- normalizable, 14
- normalization, 13
- normalization constant, 22
- normalized, 100
- observables
 - incompatible, 116
- occupation number, 237
- operator, 17
 - exchange, 209
 - lowering, 46, 166
 - projection, 129
 - raising, 46, 166
- orbital, 173
- orbitals, 219
- orthogonal, 34, 100
- orthohelium, 217
- orthonormal, 35, 100
- orthorhombic symmetry, 298
- oscillation
 - neutrino, 127
- overlap integral, 312
- pair annihilation, 292
- parahelium, 217
- particle
 - unstable, 21
- Paschen-Back effect, 285
- Pauli exclusion principle, 208
- Pauli spin matrices, 177
- periodic table, 219
- perturbation theory

- spinor, 175
- square-integrable, 13
- square-integrable functions, 98
- standard deviation, 9
- Stark effect, 296
- state
 - bound, 70
 - excited, 34
 - ground, 34, 156
 - scattering, 70
- stationary states, 27
- statistical
 - interpretation, 2
- Stefan-Boltzmann formula, 251
- step function, 80
- Stern-Gerlach experiment, 184
- Stirling's approximation, 243
- symmetrization
 - requirement, 209
- temperature, 236
- tetragonal symmetry, 298
- theorem
 - Dirichlet's, 35
 - Ehrenfest, 18
 - equipartition, 254
 - Plancherel, 63
- thermal equilibrium, 236
- Thomas precession, 279
- transformations
 - linear, 97
- transition, 161
- transmission
 - coefficient, 78
- triplet, 188
- tunneling, 72, 79
- turning points, 70
- uncertainty principle, 19, 116
 - energy-time, 119
- valence, 223
- Rodrigues
 - formula, 60
- Rodrigues formula, 142
- rotation
 - generator, 200
- Rydberg
 - constant, 162
 - formula, 162
- scattering
 - matrix, 93, 94
- Schrodinger
 - time-independent, 27
- Schrodinger align, 2
- Schwarz inequality, 99, 437
- screened, 219
- semiconductors, 235
- separation constant, 26
- sequential measurements, 131
- series
 - Balmer, 162
 - Fourier, 35
 - Lyman, 162
 - Paschen, 162
 - power, 43
 - Taylor, 42
- shell, 219
- sodium, 23
- space
 - dual, 128
 - outer, 23
- spectrum, 104
- spherical
 - harmonics, 144
- spin, 173, 174
- spin down, 175
- spin up, 175
- spin-orbit
 - interaction, 279
- spin-orbit coupling, 272
- spin-spin coupling, 290

- اتساق
حالات، 133
اجزائی
قیمتیں، 33
ارتعاش
نیوٹرینو، 127
استمراری، 105
استمراری مساوات، 194
استمراریہ، 138
اصول
عدم یقینیت، 19
اصول تغیریت، 299
اصول عدم یقینیت، 116
اضافیتی تصحیح، 272
اکیس سٹی میٹر لکیر، 291
الیکٹران
کلاسیکی رداس، 175
الیکٹران نیوٹرینو، 127
امتیازی تقابلی عمل، 103
امتیازی فطرت، 103
امتیازی فطرت مساوات، 103
انتشاری
رشتہ، 67
انخطاطی، 90، 104
انخطاطی دباؤ، 228
اندرونی ضرب، 98
انوکاس
شرح، 78
اوسط، 7
- باضابطہ معیار حرکت، 203
برقی حرکیات
کوانٹائی، 278
بقا
توانائی، 39
بقا احتمال، 194
بلا واسطہ مکمل، 313
بندشی توانائی، 156
بوس آئنسٹائن تقسیم، 247
بوس انجماد، 249
- Van der Waals interaction, 294
variables
separation of, 25
variance, 9
variational principle, 299
vectors, 97
velocity
group, 66
phase, 66
virial theorem, 132
three-dimensional, 194
wag the tail, 56
wave
incident, 77
packet, 62
reflected, 77
transmitted, 77
wave function, 2
wave vector, 224
wavelength, 18
white dwarf, 252
Wien displacement law, 250
WKB, 321
Yukawa potential, 316
Zeeman effect, 283
zero-crossing, 34

- بو سن، 208
بوہر
رداس، 156
کلیہ، 155
بوہر مقناطیس، 284
بیریان، 191
میل
کروی تقا عمل، 148
بے لچک پھسکی، 173
پازیشٹرانیم، 207، 291
پاشن ویک اثر، 285
پالی اصول مناعت، 208
پالی متالب چکر، 177
پایان، 191
پنیاں، 234
پس پردہ، 219
پلانک
کلیہ، 162
پیدا کار
فت میں انتقال کا، 136
وقت میں انتقال، 136
پیدا کار
تقا عمل، 60
گھومت، 200
تجدیدی عرصہ، 89
تجربہ
شرن و گرلاخ، 184
ترتیبی پیمائشیں، 131
ترسیل
شرح، 78
تسل
بالمر، 162
پاشن، 162
ٹیلر، 42
طامتی، 43
فوریئر، 35
لیمان، 162
تشاکیت
ضرورت، 209
تفکیک، 237
تعداد مکین، 237
تغیرین حال، 103
تغیریت، 9
تقا عمل
ڈیٹا، 72
تقا عمل موج، 2
تقا علیہ، 128
تکمل
ڈھنپائی، 312
توالی
کلیہ، 55
توانائی
اجبازتی، 29
توقعاتی
قیمت، 7
شنائی عددی سر، 239
حبرو ڈارون، 280
جسیم مقیاس، 229
جفت، 34
تقا عمل، 31
جفت قطب معیار اثر
مقناطیسی، 181
جوہری مدار چوں
خطی جوڑ ترکیب، 311
جی حبرو ضربی، 278
چکر، 173، 174
مخالف میدان، 175
ہم میدان، 175
چکر چکر رابطہ، 290
چکر کار، 175
چکر و مدار باہم عمل، 279
چکر و مدار رابطہ، 272
چندر شیکھر حد، 253
چوزاویہ تشکل، 298
حال
بھراؤ، 70

- 66، سستی
 66، گروہی سستی
 86، رمز اور وٹاؤسڈ اثر،
 194، رواحتال،
 روڈریگیس
 142، کلیہ
 249، ریمان زیٹا تفسا عمل،
 زاویائی معیار حرکت
 170، بقب
 174، خنقی
 174، غیر خنقی
 283، زیسان اثر،
 ساکن
 27، حالیت،
 243، سٹرلنگ تخمین،
 251، شیفتن و بولسٹمن کلیہ،
 32، سرحدی شراط،
 72، 79، سرنک زنی،
 252، سفید بونا،
 15، سگرا،
 220، سلور،
 128، سمتاویہ،
 97، سمتیات،
 224، سمتیہ موج،
 سوچ
 4، انکاری،
 3، تقلید پسند،
 3، حقیقت پسند،
 23، سوڈیم،
 188، سہ تا،
 250، سیاہ جسمی طیف،
 سیزھی
 46، عاملین،
 80، سیزھی تفسا عمل،
 296، شمارک اثر،
 27، غیر تابع وقت،
 136، شروڈنگر نقطہ نظر،
 156، 34، زمینی،
 70، مقید،
 34، ہچکان،
 236، حراری توازن،
 حرکت
 202، سائیکلوثران،
 97، خطی الجبرا،
 97، خطی تبدلہ،
 28، خطی جوڑ،
 3، خفیہ متغیرات،
 219، 235، خول،
 254، درجبات آزادی،
 236، درجہ حرارت،
 234، درز،
 290، درز توانائی،
 61، دلیل،
 96، 56، دم ہلانا،
 219، دوری جدول،
 ڈیراک
 128، علامتیت،
 229، کنگھی،
 108، معیاری عمودیت،
 ڈیلٹا
 35، کروئیکر،
 297، ڈیوٹریم،
 297، ڈیوٹیران،
 ذرہ
 21، غیر مستحکم،
 رو
 21، احتمال،
 146، ردای مساوات،
 162، رڈبرگ،
 162، کلیہ،
 رشتہ
 295، پترنک،
 295، کرامرس،
 رفتار

- فـنـر و نـو س
ترکیب، 54
فـنـن
بیرونی، 23
دوہری، 128
فورینسر
الٹ بدل، 63
بدل، 63
- فـنـن
غیر ہم آہنگ، 116
فـنـن
بچھراؤ، 93، 94
ترسیل، 95
فـنـن اراکان، 125
فـنـن
کب، 42
فـنـن مین، 298
قواعد بن، 220
قوالب، 98
قوت مبادلہ، 213
- کامل گیس، 245
کایان، 191
کشافت
آزاد الیکٹران، 227
احتمال، 10
کشیر رکشی
ہرمانڈ، 58
کرائنگ و پینی نمونہ، 232
کروی
ہارمونیات، 144
کبھی تشاکل، 298
کلیہ
ڈی بروگلی، 19
روڈریگیس، 60
پولر، 30
کلیش و گورڈن عددی سر، 190
کیٹ
تختیف شدہ، 206
کوارک، 191
- شریک عامل، 103
شریک گرفتگی بندہ، 214
شارپائی مفہوم، 2
شوارز
عدم مساوات، 437
شوارز عدم مساوات، 99
فـنـر مـتـم انقطاع، 34
- طاق، 34
طامس استقبالی حرکت، 279
طول موج، 18، 162
طیف، 104
طیفی تحلیل، 130
- عامل، 17
تخلیل، 129
تقلیل، 166، 46
رفع، 166، 46
مبادلہ، 209
عبور، 161
عدم تعین، 3
عدم یقینیت
توانائی و وقت، 119
عدم یقینیت اصول، 19
عقدہ، 34
علائیت
تفعلی و سمتاویہ، 128
علیحدگی متغیرات، 25
علیحدگی مستقل، 26
عمودی، 100، 34
- غیر مسل، 105
غیر موصل، 235
- فـنـری
توانائی، 227
درجہ حرارت، 228
سطح، 227
فـنـر مـیان، 208
فـنـری و ڈیراک تقسیم، 247

- کوانٹائی
 صدر عدد، 155
 کوانٹائی اعداد، 147
 کوانٹائی عدد
 اسمتی، 145
 مقنطیسی، 145
 کوانٹائی نقطے، 319
 کوپن ہیگن مفہوم، 4
 کیسادی مخفیہ، 247
- گرام شمد
 ترکیب عمودیت، 107
 گرام و شمد حکمت عملی، 437
 گرافتی، 223
 گروہی نظریہ، 191
 گروپویشن، 163
 گیما تفسار عمل، 249
- لاپلائی، 138
 لارمر تردد، 184
 لاگت
 شریک کشیر رکتی، 158
 کشیر رکتی، 158
 لامتناہی کروئی کنواں، 146
 لپٹان، 175
 لتصمیم، 162
 لگراج مضرب، 242
 لسنڈو سطحیں، 202
 لسنڈو جی جزو ضربی، 284
 لوریننز قوت
 وٹانون، 201
 لوی وچو بیت، 180
 لیڈ انڈر
 شریک، 142
 لیب انتقال، 272
- ماپ
 تبادلہ، 202
 غیر متغیر، 202
 مبادلہ مکمل، 313
- متعمم
 تفسار عمل، 72
 تقسیم، 72
 متعمم شمار یاتی مفہوم، 111
 مختل
 سب سے زیادہ، 7
 محدود
 کر دی، 139
 مخالف بیضا تحلیل، 253
 مخفیہ، 15
 بلا العکاس، 93
 موثر، 146
 مدار چھ، 219
 مداری، 173
 مربع متکا مسل، 13
 مربع متکا مسل تفسارات، 98
 مرتعش
 ہارمونی، 32
 مرکز گریز جزو، 146
 مساوات شروع و ڈنگر، 2
 ممکن مقنطیسی نسبت، 182
 مسئلہ
 اہر نفٹ، 18
 پلانشرال، 63
 ڈرشلے، 35
 مساوی حسانہ بندی، 254
 مسئلہ بلوخ، 229
 مسئلہ وٹنمن وٹلمن، 294
 مسئلہ ورل، 132
 تین البعادی، 194
 معمول زنی، 13
 وٹائل، 14
 متقل، 22
 ناسٹائل، 13
 معمول شدہ، 100
 معیار حرکت، 17
 معیار حرکتی فضا تفسار عمل موج، 113، 195
 معیاری انحراف، 9
 معیاری عمودی، 100، 35
 منقطع

- واٹن فٹانون ہٹاؤ، 250
وسطانیہ، 7
ونڈیل وکرام سرس وبرلوان، 321
ون در ولس باہم عمل، 292
ہن
کاپیلا فٹا عدد، 221
کاشیہ فٹا عدد، 221
کادو سرافٹا عدد، 221
ہار مونی
سر نقش، 32
ہار مونی سر نقش
تین البعدی، 193
ہائیڈروجن
میونی، 207
ہائیڈروجنی جوہر، 162
ہر مشی، 101
جوڑی دار، 49، 103
حسلاف، 130
منحرف، 130
لمبرٹ فضا، 99
ہمبستہ حال، 207
ہندی تسل، 253
ہیزنبرگ نقطہ نظر، 136
ہیلیم، 162
ہیلیم پرست، 217
ہیملٹنی، 28
یک طامتی، 129
یو کا دا مخفیہ، 316
- سلیٹر، 214
مقابلہ، 44
مقلبت
باضابطہ رشتہ، 45
باضابطہ رشتہ، 138
بنیادی رشتہ، 165
مقلوب، 44
مقتطبی معیار اثر
بے ضابطہ، 278
مکمل، 35، 100
ملاوٹ، 235
منہدم، 4، 111
موج
آمدی، 77
ترسیلی، 77
متعکس، 77
موجی اکٹھ، 62
موزوں
خطی جوڑ، 263
موزوں کوانٹائی اعداد، 275
موصول، 235
مہین ساخت، 272
مہین ساخت متقل، 272
میزان، 191
میکسویل وولٹس من تقسیم، 247
میدن عمل انگیزی، 319
میدن نیوٹرینو، 127
میدنی ہائیڈروجن، 291
میدنیسم، 291
نالودگی جوڑا، 292
نزد ہیلیم، 217
نظریہ اضطراب
انخطاطی، 260
نہایت مہین ساخت، 272
نیم موصول، 235
نیوٹران ستارہ، 253
نیومن
کروی تق عمل، 148
واپسی نقطہ، 70