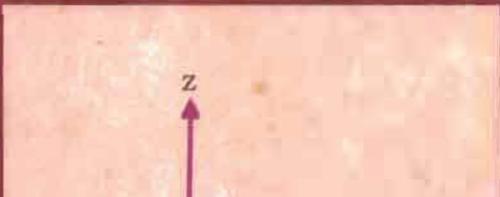
প্রাথমিক
কোয়ান্টাম রসায়ন

ডঃ সুভাষ চন্দ্র পাল



নূর পাবলিকেশন্স

প্রাথমিক কোয়ান্টাম রসায়ন

ELEMENTARY QUANTUM CHEMISTRY

ডঃ সুভাষ চন্দ্র পাল
প্রফেসর
রসায়ন বিভাগ
রাজশাহী বিশ্ববিদ্যালয়

নূর পাবলিকেশন্স
৩৮/৪ বাংলা বাজার
ঢাকা-১১০০

দ্বিতীয় সংস্করণের ভূমিকা

প্রাথমিক কোয়ান্টাম রসায়নের প্রথম সংস্করণের সবগুলো কপি আশাতীত কম সময়েই শেষ হয়ে যায়। পাঠক মহলে বইটির ব্যাপক গ্রহযোগ্যতাই এর প্রধান কারণ। দ্বিতীয় সংস্করণ বের করতে অনিচ্ছাকৃত বিলম্ব হওয়ায় পাঠককুলের বেশ অসুবিধা হয়েছে- এ জন্য দুঃখিত।

বইটির এ সংস্করণে সব ত্রুটি বিচ্যুতি দূর করার চেস্টা করা হয়েছে। এতে বেশ কিছু উদাহরণ ও তার সমাধান সংযোজন করা হয়েছে। ফলে বইটির গ্রহণযোগ্যতা আরও বৃদ্ধি পাবে বলে আমি আশা করি। আমার সব শুভাজ্ক্ষী ছাত্র-ছাত্রী ও সহকর্মী, যারা আমাকে বইটির এ সংস্করণ বের করতে সব সময় উৎসাহিত করেছেন, তাদেরকে আন্তরিক ধন্যবাদ জানাই। সবশেষে প্রকাশক মহোদয় ও মুদ্রণ সংশ্লিষ্ট সকলকে আন্তরিক শুভেচ্ছা ও কৃতজ্ঞতা জ্ঞাপন করি।

বইটির মান উন্নয়নে যে কোন গঠনমূলক প্রস্তাব সাদরে গ্রহণ করা হবে।

রসায়ন বিভাগ
রাজশাহী বিশ্ববিদ্যালয়
জানুয়ারি ২০০১।

বিনীত
ডঃ সুভাষ চন্দ্র পাল

প্রথম সংস্করণের ভূমিকা

মাতৃভাষায় বিজ্ঞানের পঠন-পাঠন ও চর্চার কোনো বিকল্প নেই-দীর্ঘদিন ধরে এ সত্যটি সর্বস্তরের শিক্ষিতজন উপলব্ধি করলেও এ লক্ষ্যে আমাদের দেশের উদ্যোগ ও অগ্রগতির ধারা ধীরে ধীরে এগুচ্ছে। বিশেষ করে সহায়ক গ্রন্থের বিষয় লক্ষ্য করলে বাস্তব চিত্রটি পরিস্কার হয়ে উঠে। শিক্ষার ব্যবহারিক মঙ্গলের কথা ভাবলে উদ্যোগের ধারাটি আরও বেগবান হওয়া আবশ্যক। বাংলা একাডেমী এ ধারায় অগ্রণী ভূমিকা পালন করে চলেছে।

কোয়ান্টাম রসায়ন গণিতে সমৃদ্ধ একটি জটিল বিষয়। বিদেশী ভাষায় এ জটিল বিষয় অনুধাবন করা ছাত্র-ছাত্রীদের পক্ষে কষ্টকর। এ কথা স্মরণে রেখে সহজ সরলভাবে বিষয়ের বর্ণনামূলক দিকটিকে গুরুত্ব দিয়ে 'প্রাথমিক কোয়ান্টাম রসায়ন' বইটি রচনা করা হয়েছে। বইটি পাঠে রসায়নের স্নাতক সম্মান শ্রেণির ছাত্র-ছাত্রীরা সহজেই বিষয়টির প্রাথমিক ধারণা যথাযথভাবে পাবে বলে আমার বিশ্বাস। কোয়ান্টাম রসায়ন সম্পর্কে উন্নত ধারণার পথে বইটি একটি সিঁড়ি হিসেবে কাজ করবে।

বাংলাদেশের সকল বিশ্ববিদ্যালয়ের রসায়ন বিষয়ের স্নাতক (সম্মান) শ্রেণির সিলেবাস অনুযায়ী বইটি লেখা হয়েছে। বইটি সাতটি অধ্যায়ে বিভক্ত। প্রথম অধ্যায়ে কোয়ান্টাম তত্ত্বের বুনিয়াদ সম্পর্কে পুঙ্খানুপুঙ্খরূপে আলোচনা করা হয়েছে এবং তৎসহ প্রচুর গাণিতিক উদাহরণ দিয়ে বিষয়টির তাৎপর্য তুলে ধরা হয়েছে। দ্বিতীয় অধ্যায়ে বস্তুর তরঙ্গ ধর্ম, তৃতীয় অধ্যায়ে তরঙ্গ বলবিদ্যা, চতুর্থ পঞ্চম, ষষ্ঠ ও সপ্তম অধ্যায়ে তরঙ্গ বলবিদ্যার কতিপয় প্রয়োগ যথাসম্ভব প্রাঞ্জল ভাষায় আলোচনা করার চেষ্ট করা হয়েছে। সর্বত্র গাণিতিক ধাপ ও ভাষায় বর্ণনার মধ্যে একটি ভারসাম্য রক্ষা করা হয়েছে যাতে সাধারণ ডিফারেন্সিয়েশন, ইন্টিগ্রেশন ও ম্যাট্রিক্সের ধারণা দিয়ে বিষয়টি সহজেই অনুধাবন করা যায়। বইটির শেষে সহায়ক গ্রন্থপঞ্জি ও পরিভাষা দেয়া হয়েছে।

বইটি রচনায় কিছু সহকর্মী ও ছাত্র-ছাত্রী উৎসাহ যুগিয়েছেন। তাঁদের সকলের কাছে আমি কৃতজ্ঞতা প্রকাশ করছি। যে-সব বিদেশী বইয়ের সাহায্য নিয়েছি সে সব বইয়ের প্রণেতা ও প্রকাশকদের নিকট আমি ঋণী।

গ্রন্থকার

সূচিপত্র

প্রথম অধ্যায়

কোয়ান্টাম তত্ত্বের বুনিয়াদ
(FOUNDATION OF QUANTUM THEORY)

১.১ সূচনা
Introduction

সনাতন পদার্থবিদ্যার (classical physics) সকল ঘটনা তাপগতিবিজ্ঞানের সূত্র এবং তড়িৎ ও চুম্বকের সনাতন সূত্রের ভিত্তিতে ব্যাখ্যা করা সম্ভব। উনবিংশ শতাব্দীর শেষভাগ পর্যন্ত পদার্থবিদদের এমন ধারণা করার যথেষ্ট কারণ ছিল। এটি সত্য যে, নিউ-টনের গতি সূত্রের ভিত্তিতে সনাতন বলবিদ্যা দ্বারা স্থূল বস্তুর গতি সাফল্যজনকভাবে ব্যাখ্যা করা সম্ভব। বর্তমান শতাব্দী পর্যন্ত মনে করা হতো, সনাতন ধারণা এবং সূত্র পরমাণুর মতো ক্ষুদ্র বস্তুর ক্ষেত্রেও প্রয়োগ করা যায়। কিন্তু এ পর্যন্ত প্রাপ্ত পরীক্ষামূলক তথ্য এটিই প্রমাণ করে যে, নিউক্লিয়াস ও মৌলিক কণিকার (fundamental parti-cles) মতো অতি ক্ষুদ্র কণার ক্ষেত্রে সনাতন বলবিদ্যার (classical mechanics) প্রয়োগ ব্যর্থ হয়।

পরমাণু, নিউক্লিয়াস ও মৌলিক কণিকার আওতাধীন ঘটনাকে সাধারণত কোয়াণ্টাম ঘটনা (quantum phenomenon) বলে। এসব ঘটনার সাথে সম্পৃক্ত বিষয় কোয়ান্টাম পদার্থবিদ্যার (quantum physics) অন্তর্গত। আজকাল কোয়াণ্টাম পদার্থবিদ্যার মৌলিক গাণিতিক তত্ত্ব কোয়ান্টাম বলবিদ্যা (quantum mechanics) নামে পরিচিত।

প্রকৃতপক্ষে প্রচলিত সনাতন বলবিদ্যার সাহায্যে রেডিয়েশন ও উপ-পারমাণবিক জগতের (sub-atomic world) আচরণ ব্যাখ্যার ক্ষেত্রে যে ব্যর্থতা সৃষ্টি হয়, সে ব্যর্থতার ধারণা থেকেই কোয়াণ্টাম বলবিদ্যার উৎপত্তি ঘটে। ১৯০০ সাল থেকেই এ ধারণা একটি রূপ নিতে শুরু করে। উপ-আণুবীক্ষণিক (sub-microscopic) অঞ্চলের বিভিন্ন ঘটনা, যেমন কৃষ্ণবস্তুর বিকিরণ (black body radiation), আলোক-তড়িৎ ফলাফল (photoelectric effect) এবং কম্পটন ফলাফল কোয়াণ্টাম বলবিদ্যার ভিত্তি রচনায় সহায়ক ভূমিকা পালন করেছে।

সত্য কথা বলতে কি, বলবিদ্যার জগতে কোয়াণ্টাম বলবিদ্যা একটি বিপ্লব বলা যায়। কোয়ান্টাম বলবিদ্যা বিভিন্ন বুনিয়াদি পরীক্ষার ভূমিকা অনুধাবনের জন্য সনাতন বলবিদ্যা সম্পর্কে সংক্ষিপ্তভাবে আলোচনা করা হলো।

১.২ সনাতন বলবিদ্যার কেন্দ্রীয় ধারণা বা স্থুল জগতের বলবিদ্যা **Central Concept of Classical Mechanics or Mechanics of Microscopic World**

বস্তুর গতি বর্ণনায় দুটি মৌলিক সমীকরণ ব্যবহৃত হয়। এরা সনাতন বলবিদ্যার মূল সমীকরণ। এদের একটি হলো ঃ

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V \qquad (১.১)$$

মোট শক্তি = গতিশক্তি + স্থৈতিক শক্তি

যেখানে m = কণার ভর এবং v = কণার বেগ, কিন্তু রৈখিক ভরবেগের প্রেক্ষিতে সমীকরণ (১.১)-কে নিম্নরূপে লেখা যায় ঃ

রৈখিক ভরবেগ, $p = mv$

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{2}mv^2 + V \\ &= \frac{(mv)^2}{2m} + V \\ &= \frac{p^2}{2m} + V \qquad (১.২) \end{aligned}$$

সনাতন বলবিদ্যার দ্বিতীয় মূল সমীকরণ নিউটনের গতির দ্বিতীয় সূত্রের সমীকরণ থেকে পাওয়া যায়। যথা,

$$\frac{dp}{dt} = f \qquad (১.৩)$$

যেখানে $\frac{dp}{dt}$ = কণার ভরবেগ পরিবর্তনের হার এবং f = কণার উপর ক্রিয়াশীল বল।

সমীকরণ (১.২) নানাভাবে ব্যবহার করা যায়। উদাহরণস্বরূপ, যেহেতু $p = m\left(\frac{dx}{dt}\right)$ সুতরাং এটি t এর অপেক্ষক হিসেবে x-এর একটি ডিফারেন্সিয়াল সমীকরণ এবং এর সমাধান করে t-এর অপেক্ষকরূপে কণাটির অবস্থান ও ভরবেগ জানা যায়। $x(t)$ এবং $p(t)$- এর বর্ণনাকে কণাটির আবক্রপথ (trajectory) বলা হয়। এটি সঙ্গত যে, কণাটির ভবিষ্যৎ আবক্রপথও বর্তমানের জ্ঞাত অবস্থান ও ভরবেগের মতোই সঠিকভাবে অনুমান করা যায়।

এটি সম্ভব হতে পারে, যদি স্থৈতিক শক্তিকে সুষম (uniform) ও স্থির ধরা হয়। অর্থাৎ V কখনও x বা t- এর উপর নির্ভর করবে না। সরলীকরণের জন্য V= o ধরে সমীকরণ (১.২) দাঁড়ায়,

$$E = p^2/2\,m$$

বা, $p^2 = 2\,E\,m$

বা, $m^2v^2 = 2\,E\,m$

বা, $v^2 = \dfrac{2E}{m}$

বা, $v = \dfrac{dx}{dt} = \left(\dfrac{2E}{m}\right)^{1/2}$

এ সমীকরণের সমাধান হলো,

$$x\,(t) = x\,(o) + \left(\frac{2E}{m}\right)^{1/2} t$$

সমাধানঃ $\int dx = \int \left(\dfrac{2E}{m}\right)^{1/2} dt$

বা, $x = \left(\dfrac{2E}{m}\right)^{1/2} t +$ ধ্রুবক

যখন $t = o,\ x\,(t) = x\,(o)$

সুতরাং ধ্রুবক $= x\,(o)$

প্রাথমিক ভরবেগ p (o) এর প্রেক্ষিতে স্থির শক্তি, E-কে প্রকাশ করা যায়। ফলে আবক্রপথ হবে

$$x\,(t) = x\,(o) + p\,(o)\,\frac{t}{m} \qquad (১.৪)$$

এখানে $p\,(t) = p\,(o)$

সুতরাং প্রাথমিক অবস্থান ও ভরবেগ জেনে পরবর্তী সকল অবস্থান ও ভরবেগ অনুমান করা যায়।

সমীকরণ (১.৩) ব্যবহারের ক্ষেত্রে ধরা যাক, একটি কণার উপর τ সময় যাবৎ একটি স্থির বল F প্রযুক্ত হলো। অর্থাৎ একে বল প্রয়োগে ভ্রমণে বাধ্য করা হচ্ছে। ফলে যে সমীকরণ পাওয়া যায় তা হলো,

$$\frac{dp}{dt} = F$$

যেখানে F হলো $t = o$ এবং $t = \tau$ সময়ের মধ্যে স্থির বল।

আবার $t = \tau$-এর পরবর্তী সময়ে $\frac{dp}{dt} = 0$ হবে।

$\frac{dp}{dt} = F$ সমীকরণটির সমাধান নিম্নরূপ ঃ

$$p(t) = p(0) + Ft$$
$$(0 \leq t \leq \tau)$$

$$\int dp = \int F dt$$

বা, $p = Ft +$ ধ্রুবক

যখন $t = 0,\ p = p(0)$ এবং ধ্রুবক $= p(0)$

অর্থাৎ $p(t) = Ft + p(0)$

সরলীকরণের জন্য ধরা যাক, কণাটি প্রাথমিকভাবে স্থির অবস্থায় (at rest) আছে। সেক্ষেত্রে $p(0) = 0$ এর গতিশক্তি $= p^2/2m$।

সুতরাং এখানে বলের ক্রিয়া থেমে যাবার পর সকল সময় গতিশক্তি হবে,

$$F^2\tau^2/2m \text{ (যেহেতু } p(t) = F\tau)$$

যেহেতু F এবং τ এর যে কোনো মান হতে পারে সেহেতু কণাটির শক্তির যে কোনো মান হওয়া সম্ভব অর্থাৎ শক্তি অবিচ্ছিন্ন হবে। আবর্তনমান বা কম্পমান যে কোনো বস্তুর ক্ষেত্রেই এ হিসাব প্রয়োগ করা যায়। সুতরাং নির্দ্বিধায় সিদ্ধান্ত করা যেতে পারে যে, সনাতন বলবিদ্যা দ্বারা দুটি বিশেষ ফল পাওয়া সম্ভব।

(১) এটি দ্বারা সঠিকভাবে একটি আবক্রপথ অনুমান করা যায় এবং (২) নিয়ন্ত্রিত বল দ্বারা স্থানান্তর, আবর্তন ও কম্পনীয় শক্তিকে যে কোনো মানে উত্তেজিত করা যায়।

এখন একটি গুরুত্বপূর্ণ প্রশ্ন হলো যে, এরূপ দৈনন্দিন অভিজ্ঞতার সিদ্ধান্ত কি ইলেক্ট্রন, প্রোটন, নিউক্লিয়াস, নিউট্রন ও অন্যান্য মৌলিক কণার ক্ষেত্রে আদৌ প্রয়োগ করা যায়? এর উত্তর একটিই এবং তা হলো 'না'। এ জবাব অনুসন্ধানের মধ্যে নিহিত রয়েছে অনেকগুলো মৌলিক পরীক্ষা। পরীক্ষাগুলো (যা পরে আলোচনা করা হবে) এটিই প্রমাণ করে যে, সনাতন বলবিদ্যা কোনোক্রমেই পারমাণবিক জগতের ক্ষেত্রে প্রযোজ্য নয়।

১.৩ সনাতন বলবিদ্যার ত্রুটি
Defects of Classical Mechanics

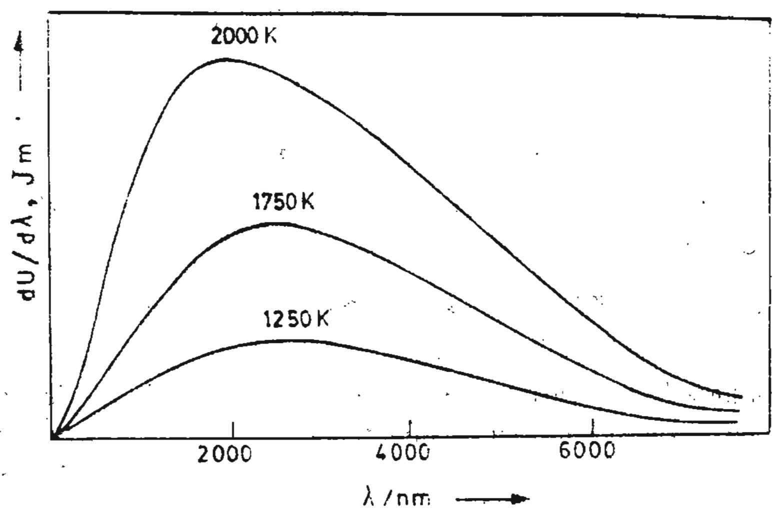
(ক) পরমাণুর স্থায়িত্ব ব্যাখ্যার ব্যর্থতা (Failure to explain the stability of atoms) ঃ সনাতন বলবিদ্যা অনুসারে নিউক্লিয়াসের চারদিকে ভ্রমণরত একটি ইলেক্ট্রন অবিচ্ছিন্নভাবে তার শক্তি হারাতে থাকবে এবং হঠাৎ এক সময়

নিউক্লিয়াসের সঙ্গে একীভূত (collapse) হয়ে যাবে। কারণ কোনো ত্বরণকৃত চার্জযুক্ত কণা তড়িৎ চৌম্বক তরঙ্গাকারে শক্তি বিকিরণ করে। পরমাণুর ক্ষেত্রে এটি ঘটলে পরমাণু তার স্থায়িত্ব হারাতো। কিন্তু এর পরিবর্তে আমরা পরমাণুকে অত্যন্ত সুস্থিত অবস্থায় পাই। সুতরাং দেখা যাচ্ছে যে, সনাতন বলবিদ্যা পরমাণুর স্থায়িত্ব ব্যাখ্যায় ব্যর্থ হয়েছে।

(খ) হাইড্রোজেন বর্ণালী ব্যাখ্যার ব্যর্থতা (Failure to explain the hydrogen spectrum) ঃ পুনরায় সনাতন বলবিদ্যা অনুসারে উত্তেজিত হাইড্রোজেন পরমাণুর অবিচ্ছিন্নভাবে সব তরঙ্গদৈর্ঘ্যের তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণ নিক্ষেপ করা উচিত। অথচ দেখা যায়, এসব উত্তেজিত পরমাণু নির্দিষ্ট তরঙ্গদৈর্ঘ্যের বিকিরণ নিক্ষেপ করে।

১.৪ কৃষ্ণবস্তুর বিকিরণ
Black Body Radiation

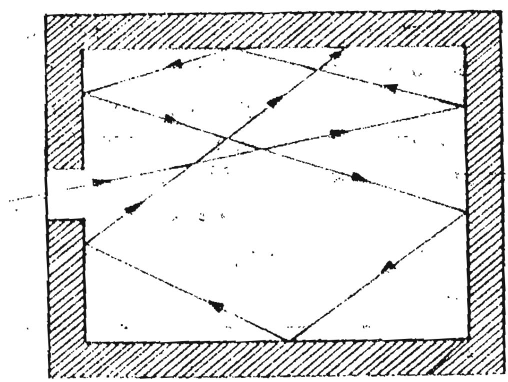
স্মরণাতীতকাল থেকে লক্ষ্য করা যাচ্ছে যে, উত্তপ্ত বস্তু বিকিরণ নিক্ষেপ করে এবং নিক্ষিপ্ত বিকিরণ তাপমাত্রার উপর সম্পূর্ণরূপে নির্ভরশীল। কোনো বস্তুকে তাপ দিলে প্রথমে তা হালকা লাল আলো নিক্ষেপ করে (glows a dull red) এবং তাপমাত্রা বাড়াতে থাকলে ঐ বর্ণ উজ্জ্বল লালে পরিবর্তিত হয় এবং শেষে তা উজ্জ্বল সাদায় পরিণত হয়। যথেষ্ট উচ্চ তাপমাত্রায় অতিবেগুনি বিকিরণ নিক্ষিপ্ত হয়। এ বিকিরণের দিকে খালি চোখে তাকালে চোখ জ্বালা করে। তাপমাত্রা যতোই বাড়ানো যায় হ্রস্ব তরঙ্গদৈর্ঘ্যের বিকিরণের পরিমাণ ততো বাড়ে। ১.১ চিত্রে বিভিন্ন তাপমাত্রায় তরঙ্গদৈর্ঘ্যের উপর শক্তি উৎপাদনের (energy output) নির্ভরশীলতা প্রকাশ করা হয়েছে।



চিত্র ১.১ ঃ কৃষ্ণবস্তুর গর্তে বিভিন্ন তাপমাত্রায় প্রতি একক আয়তনে প্রতি একক তরঙ্গদৈর্ঘ্যে শক্তি।

চিত্রে কার্ভগুলো কৃষ্ণবস্তুর যা একটি আদর্শ নিক্ষেপক। যে বস্তুর কোনো প্রতিফলন ক্ষমতা নেই অর্থাৎ যা সকল আপতিত বিকিরণ (incident radiation) শোষণ করে তাকে **কৃষ্ণবস্তু** বলে। এ জাতীয় বস্তু বিকিরণের সকল ফ্রিকুয়েন্সি সুষমভাবে নিক্ষেপ ও শোষণ করতে পারে এবং এ বস্তু থেকে নিক্ষিপ্ত বিকিরণকে **কৃষ্ণবস্তুর বিকিরণ** বলে। প্রকৃতপক্ষে একটি আদর্শ কৃষ্ণবস্তু পাওয়া সম্ভব নয়। কিন্তু ক্ষুদ্র ছিদ্রবিশিষ্ট একটি পরিবেষ্টনী আদর্শ কৃষ্ণবস্তুর হিসেবে কাজ করতে পারে। ঐ ছিদ্র দিয়ে পরিবেষ্টনীর মধ্যে বিকিরণ প্রবেশ করে অসংখ্য বার প্রতিফলিত হয়ে অবশেষে সবটাই শোষিত হয়। ১.২ চিত্রে এটি দেখানো হয়েছে।

১৮৫৯ সালে **কির্শফ** (Kirchoff) কৃষ্ণবস্তু সম্পর্কে দুটি সূত্র আবিষ্কার করেন এবং সূত্র দুটি কৃষ্ণবস্তু বিকিরণের বৈশিষ্ট্য উদ্‌ঘাটনের ক্ষেত্রে খুবই গুরুত্বপূর্ণ। সূত্রগুলো হলোঃ



চিত্র ১.২ ঃ একটি আদর্শ কৃষ্ণবস্তু।

(ক) একটি কৃষ্ণবস্তুকে তাপ দিলে শুধু যে তার উপর আপতিত সকল বিকিরণ সম্পূর্ণভাবে শোষণ করে তা নয়, কৃষ্ণবস্তুটি একটি আদর্শ বিকিরক হিসেবেও কাজ করে।

(খ) কোনো কৃষ্ণবস্তু থেকে নিক্ষিপ্ত বিকিরণ কৃষ্ণবস্তুটিকে যে তাপমাত্রায় উন্নীত করা হয় তার উপর নির্ভর করে, বস্তুটি প্রকৃতির উপর নির্ভরতা করে না।

কৃষ্ণবস্তুর বিকিরণ অধ্যয়নের যে দিকটি বিশেষ গুরুত্বপূর্ণ তা হলো শক্তির বর্ণালীগত বণ্টন (spectral distribution of energy)। এর অর্থ এই যে, কিভাবে বিভিন্ন তরঙ্গদৈর্ঘ্যের মধ্যে শক্তি বণ্টিত হয় এবং কোন বিশেষ তরঙ্গদৈর্ঘ্যে শক্তির অধিকাংশই নিক্ষিপ্ত হয় এ বণ্টন তা নির্দেশ করে।

১৮৮৪ সালে **জোসেফ স্টিফেন** (Josef Stefan) এবং **বোলৎজম্যান** (Boltzmann) পরীক্ষার মাধ্যমে প্রমাণ করেন যে, বর্ণালীর সকল তরঙ্গদৈর্ঘ্যের ক্ষেত্রে একক আয়তনে বিকিরণের শক্তি কৃষ্ণবস্তুর কেলভিন তাপমাত্রায় (T) চতুর্থ ঘাতের সমানুপাতিক। একে স্টিফেনের **চতুর্থ ঘাত সূত্র** বলে। দুর্ভাগ্যবশত এ সূত্র বিভিন্ন তরঙ্গদৈর্ঘ্যের মধ্যে শক্তি বণ্টনের উপর কোনো আলোকপাত করে না।

স্টিফেন সূত্র ঃ

$$U = aT^4 \qquad (১.৫)$$

যেখানে a = স্টিফেন-বোলৎজম্যান ধ্রুবক।

১৮৯৩ সালে **ভিয়েন** (Wien) সমস্যাটিকে বিশ্লেষণধর্মী দৃষ্টিকোণ থেকে দেখেন এবং তাপীয় বর্ণালীর শক্তি বণ্টনকে তাপগতীয়ভাবে নিম্নরূপ সমীকরণের মাধ্যমে প্রকাশ করেন ঃ

(১) $T\lambda$ (সর্বোচ্চ) = ধ্রুবক (১.৬)

(২) $U\lambda\, T^{-5}$ = ধ্রুবক (১.৭)

যেখানে $\lambda = T$ তাপমাত্রার অনুরূপ (corresponding) তরঙ্গদৈর্ঘ্য এবং $U\lambda$ = নিক্ষেপন ক্ষমতা (emissive power) অর্থাৎ কোনো নির্দিষ্ট তাপমাত্রায় প্রতি বর্গ সে.মি. ও প্রতি সেকেন্ডে নিক্ষিপ্ত বিকিরণের পরিমাণ।

সমীকরণ (১.৬) ও (১.৭)-কে ভিয়েনের **প্রথম ও দ্বিতীয় প্রতিস্থাপন সূত্র** (displa-cement law) বলে। সমীকরণ দুটি সমন্বয় করলে নিচের সমীকরণ পাওয়া যায় ঃ

$$U_\lambda \lambda^5 = \text{ধ্রুবক}$$

ভিয়েন মনে করেন যে, $U_\lambda \lambda^5$, λT এর অপেক্ষক হওয়া উচিত। অর্থাৎ

$$U_\lambda \lambda^5 = A\ f(\lambda T) \qquad (১.৮)$$

যেখানে A = অন্য ধ্রুবক। সমীকরণ (১.৮)-কে সামান্য পুনর্বিন্যাস করলে দাঁড়ায়,

$$U_\lambda = A\lambda^{-5} f(\lambda T) \qquad (১.৯)$$

এ সমীকরণ পর্যাপ্তভাবে কৃষ্ণবস্তু বিকিরণের বর্ণালীতে শক্তির বণ্টন নিশ্চিত করে না। কারণ এর মধ্যে অজ্ঞাত অপেক্ষক λT রয়েছে। যাহোক ভিয়েন এ সমস্যা থেকে মুক্ত হওয়ার জন্য আরও চেষ্টা করেন এবং যথেচ্ছভাবে নিম্নরূপ যৌক্তিক অনুমান করেন ঃ

(ক) বিকিরককে (radiator) একটি গ্যাস মিশ্রণ ভর্তি ফাঁকা পাত্র হিসেবে মনে করা হয়, যে গ্যাস মিশ্রণ সকল তরঙ্গদৈর্ঘ্যের বিকিরণকে শোষণ ও নিক্ষেপ করতে সক্ষম।

(খ) প্রতিটি গ্যাস অণু শুধু একটি তরঙ্গদৈর্ঘ্যের বিকিরণ নিক্ষেপ করে, যা গ্যাস অণুটির বেগের উপর নির্ভরশীল।

(গ) λ ও $\lambda + d\lambda$ সীমার মধ্যে λ বিশিষ্ট বিকিরণের শক্তি উক্ত তরঙ্গদৈর্ঘ্য সীমার অনুরূপ সময়ের মধ্যে কম্পমান অণু-সংখ্যার সমানুপাতিক।

সুতরাং ভিয়েনের শক্তি বণ্টনের সূত্র নিম্নরূপ অবস্থায় পরিণত হয় ঃ

$$U_\lambda = A\lambda^{-5} \exp(-a/\lambda T) \qquad (১.১০)$$

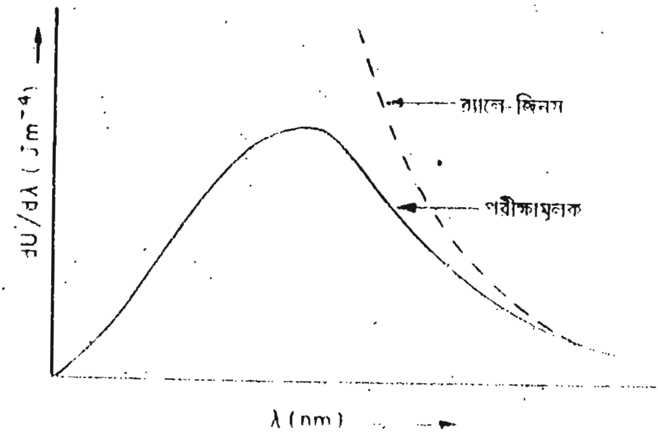
যদিও এ ফর্মুলা (খুব বেশি দীর্ঘ তরঙ্গদৈর্ঘ্যের ক্ষেত্রে ব্যবহার না করলে) যথেষ্ট সঠিকভাবে শক্তি বণ্টন প্রকাশ করতে সক্ষম, তথাপি তা ত্রুটি মুক্ত নয়। সমীকরণ (১.১০) পরীক্ষা করলে দেখা যায় যে, যখন $\lambda = \propto$ (অসীম), $U_\lambda = 0$ এবং যখন $\lambda = 0$, $U_\lambda = 0$। অর্থাৎ অসীম বা শূন্য তরঙ্গদৈর্ঘ্যে কোনো কৃষ্ণবস্তু শক্তি নিক্ষেপ বা শোষণ করে না। পুনরায় যখন $T = \propto$ (অসীম) তখন $U_\lambda = A\lambda^{-5}$, যা একটি সসীম পরিমাণ। এটি সরাসরিভাবে আমাদের অভিজ্ঞতা বিরোধী (contradiction)। এর ফলে ভিয়েনের ফর্মুলার ত্রুটি ধরা পড়ে।

১৯০০ সালে **লর্ড র‍্যালে** (Lord Raleigh) এবং **জেমস জীনস** (James Jeans) কৃষ্ণ-বস্তুর শক্তি বণ্টনের একটি সন্তোষজনক ফর্মুলা বের করার চেষ্টা করেন। এরূপ প্রচেষ্টায় তাঁরা মনে করেন যে, তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণ একবর্ণী তরঙ্গ-ট্রেন (wave-train) বা একতালীয় দোলক দ্বারা গঠিত। তাঁরা υ ও $\upsilon + d\upsilon$ ফ্রিকুয়েন্সি পরিসরে (range) এরূপ তরঙ্গ-ট্রেনের সংখ্যা বা সমতুল (equivalent) স্বাতন্ত্র্য-মাত্রা (degree of freedom) নির্ণয় করেন। সাধারণ পরিসংখ্যান তত্ত্বের সাহায্যে প্রতিটি স্বাতন্ত্র্য-মাত্রার শক্তি হিসাব করা হয়েছিল এবং যার ফলে বিকিরণের শক্তি-ঘনত্ব নির্ণয় করা সম্ভব হয়। বিজ্ঞানী **র‍্যালে** ও **জীনস** নিচের সমীকরণের সাহায্যে শক্তি-ঘনত্ব (energy density) প্রকাশ করেনঃ

$$U_\lambda = 8\pi kT/\lambda^4 \qquad (১.১১)$$

(১.১১) সমীকরণকে এখন পরীক্ষা করা যাক। দেখা যাক, কতোটা সন্তোষজনকভাবে তা কৃষ্ণবস্তুর বিকিরণের শক্তি বণ্টন প্রকাশ করতে পারে। সমীকরণটি থেকে দেখা যায় যে, নির্দিষ্ট তাপমাত্রা T-তে λ হ্রাসের সাথে সাথে U_λ এর মান দ্রুত বৃদ্ধি পাওয়া উচিত (বিশেষত অতি হ্রস্ব তরঙ্গদৈর্ঘ্যের ক্ষেত্রে)। যদি শূন্য থেকে অসীম পর্যন্ত সমগ্র তরঙ্গদৈর্ঘ্যের পরিসরে সমীকরণটি সমাকলন করে মোট শক্তি হিসাব করা হয় তবে দেখা যায়, সর্বোচ্চ মান ছাড়াই মানটি অসীম হয়। এটি একটি অযৌক্তিক (absurd) ফল। কারণ সসীম তাপমাত্রায় কোনো কৃষ্ণবস্তু দ্বারা নিক্ষিপ্ত শক্তিও সসীম (finite)। ১.৩ চিত্রে এটি দেখানো হয়েছে।

এর অর্থ দাঁড়ায়, অতি ক্ষুদ্র তরঙ্গদৈর্ঘ্যের একতালীয় দোলকগুলো (তড়িৎ-চৌম্বক ক্ষেত্রে বা তরঙ্গ-ট্রেন) কক্ষ তাপমাত্রায়ও উচ্চভাবে উত্তেজিত হয়। সনাতন বলবিদ্যা অনুসারে অন্ধকারেও বস্তু দীপ্ত হতে পারে (should glow)। প্রকৃতপক্ষে কোথাও কোনো অন্ধকার নেই বা থাকে না। এরূপ গ্রহণযোগ্যতাহীন ফলাফলকে **'হ্রস্ব তরঙ্গ বিপর্যয়'** (short wave hazard) বা **'অতিবেগুনি বিপর্যয়'** (uv catastrope) বলে।



চিত্র ১.৩ ঃ কৃষ্ণবস্তুর পরীক্ষামূলক ও র‍্যালে জীনস্ ফর্মুলা দ্বারা প্রাপ্ত শক্তি বন্টনের তুলনামূলক চিত্র।

বিজ্ঞানী **ম্যাক্স প্ল্যাঙ্ক** (Max Planck) তাপগতিবিজ্ঞানের দৃষ্টিকোণ থেকে এ সমস্যাটিকে গভীরভাবে পর্যালোচনা করেন। তিনি দেখেন যে, শক্তি কোয়ান্টায়িত (energy is quantized) অর্থাৎ নির্দিষ্ট ফ্রিকুয়েন্সির বিকিরণ-দোলকের শক্তি কতক গুলো নির্দিষ্ট মানে সীমাবদ্ধ এবং তাদেরকে ইচ্ছানুযায়ী পরিবর্তন করা যায় না। এরূপ অনুমান করে পরীক্ষামূলক তথ্য ব্যাখ্যা করা যায়। এ জাতীয় অনুমানকালে তিনি ধরে নেন যে, পরিবেষ্টনীর (enclosure) অভ্যন্তরীণ দেয়ালে আণবিক আকৃতির (molecular dimension) একতালীয় দোলক সারিবদ্ধভাবে থাকে। এরা বিকিরণ ক্ষেত্র থেকে শক্তি শোষণ করে এবং ক্ষেত্রে তা ফিরিয়ে দেয়। এ প্রক্রিয়া প্ল্যাঙ্কের নিয়মানুযায়ী চলে। একটি দোলক কেবল তখনই বিকিরণ করতে পারে যখন তার শক্তি এমন একটি নির্দিষ্ট মানে পৌঁছায় যা শক্তির কোয়ান্টাম (quantum of energy) নামক একটি

নির্দিষ্ট ন্যূনতম মানের অখণ্ড গুণিতক (ল্যাটিনঃ কোয়ান্টাম = পরিমাণ)। এটি দোলকের ফ্রিকুয়েন্সির সমানুপাতিক। প্ল্যাঙ্কের বিকিরণ সূত্র নিম্নরূপে বর্ণনা করা যায়ঃ

(ক) একটি দোলক 0, $h\upsilon$, $2h\upsilon$ ইত্যাদি শক্তির কোয়ান্টাম অনুযায়ী বিকিরণ ক্ষেত্র থেকে শক্তি শোষণ বা বিকিরণ ক্ষেত্রে শক্তি ফিরিয়ে দেয়। এখানে υ = দোলকের ফ্রিকুয়েন্সি এবং h = প্ল্যাঙ্কের ধ্রুবক। গাণিতিকভাবে এক কোয়ান্টামের শক্তি হলো,

$$\varepsilon = h\upsilon \qquad (১.১২)$$

(খ) কোনো বিশেষ শক্তি নিক্ষেপণকারী দোলকের সংখ্যা বোলৎজম্যান বণ্টন সূত্র দ্বারা প্রকাশ করা যায়।

যেহেতু কোনো নির্দিষ্ট ফ্রিকুয়েন্সির দোলক নির্দিষ্ট ও ধারাবাহিকতাহীন (discrete) মানের শক্তি ধারণ করতে পারে, সুতরাং সেই ফ্রিকুয়েন্সির আলোকরশ্মিকে $h\upsilon$ শক্তি-সম্পন্ন কণার স্রোত হিসেবে গণ্য করা যায়। এদেরকে ফোটন (photon) বলা হয়। E শক্তির একটি আলোকরশ্মি $E/h\upsilon$ সংখ্যক ফোটন বহন করে।

উদাহরণ ঃ বাংলাদেশ গভর্ণমেন্ট বহু সংখ্যক 200 w হলুদ বাতি আমদানি করেছে। প্রতি সেকেন্ডে এ জাতীয় বাতি কতো সংখ্যক ফোটন বিকিরণ করে এবং তার শক্তি কতো তা হিসাব কর। দেয়া আছে, হলুদ আলোর λ = 560 nm বা $\upsilon = 5.4 \times 10^{14}$ Hz এবং $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s।

সমাধান ঃ শক্তি, $E = 200$ W (ওয়াট) 200 J s^{-1}

ফোটনের সংখ্যা, $$n = \frac{E}{h\upsilon} = \frac{200 \text{ J s}^{-1}}{6.627 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 5.4 \times 10^{14} \text{ Hz}}$$

$$= 5.59 \times 10^{20} \text{ Photons s}^{-1}$$

প্ল্যাঙ্ক বণ্টনের বিস্তারিত হিসাব এখানে পরিহার করা হয়েছে। হিসাবের ফলাফল λ ও $\lambda + d\lambda$ পরিসরে শক্তি-ঘনত্ব নিচের সমীকরণের মাধ্যমে প্রকাশ করা যায় ঃ

$$dU = \rho(\lambda)\, d\lambda \qquad (১.১৩)$$

এবং $$\rho(\lambda) = 8\pi hc/\lambda^5 \left\{\frac{\exp(-hc/\lambda kT)}{1-\exp(-hc/\lambda kT)}\right\} \qquad (১.১৪)$$

প্ল্যাঙ্কের শক্তি বণ্টনের সমীকরণ র‍্যালে-জীনসের সমীকরণের মতোই। তবে পার্থক্য হলো এক্সপোনেন্সিয়াল ফ্যাক্টরের।

প্ল্যাঙ্ক সমীকরণের পর্যালোচনা (Examination of the Planck formula) ঃ যখন λ খুবই ক্ষুদ্র, তখন $hc/\lambda kT$ বড় হয় এবং $\exp(-hc/\lambda kT) = 0$। এক্ষেত্রে শক্তি-ঘনত্ব $\rho(\lambda)$ শূন্য হয় এবং পর্যবেক্ষণের সাথে মিলে যায়। অপরপক্ষে

যখন λ খুবই বড়, তখন $hc/\lambda kT$ ক্ষুদ্র হয় এবং এক্সপোনেন্সিয়ালের অন্তর্গত মান সন্নিহিতভাবে (approximately) $(1- hc/\lambda kT)$ হয়। এক্ষেত্রে প্ল্যাঙ্ক সমীকরণ **র‍্যালে-জীনস সমীকরণে** পরিণত হয়।

প্ল্যাঙ্ক বণ্টন দ্বারা স্টিফেন ও ভিয়েনের সূত্র (Stefan and Wien's law)-এর যৌক্তিকতা যাচাই করা যায়। নিম্ন তাপমাত্রায় λT এর মান ক্ষুদ্র হওয়ায় $\exp(-hc/\lambda kT) << 1$ এবং একে হর (denominator) থেকে বাদ দেয়া যায়। অতএব প্ল্যাঙ্ক সমীকরণ নিম্নরূপ ধারণ করে ঃ

$$dU = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \exp(-hc/\lambda kT)\, d\lambda \qquad (১.১৫)$$

এটিই **ভিয়েনের সূত্র** (Wien's Law)।

শক্তি-ঘনত্বকে $\lambda = 0$ থেকে $\lambda = \alpha$ (অসীম) পর্যন্ত সকল তরঙ্গদৈর্ঘ্য সমাকলিত করে স্টিফেন সূত্র পাওয়া যায়। অর্থাৎ

$$U = aT^4$$

যেখানে $$a = \frac{\lambda^2 k^4}{15\, c^3 h^3}$$

উপরের বর্ণনা থেকে এটিই প্রতীয়মান হয় যে, প্ল্যাঙ্কের বণ্টন সমীকরণ একটি আদর্শ সমীকরণ এবং অন্যান্য সূত্র কৃষ্ণ বস্তুর বর্ণালীর একটি সীমিত অংশের জন্য প্রযোজ্য।

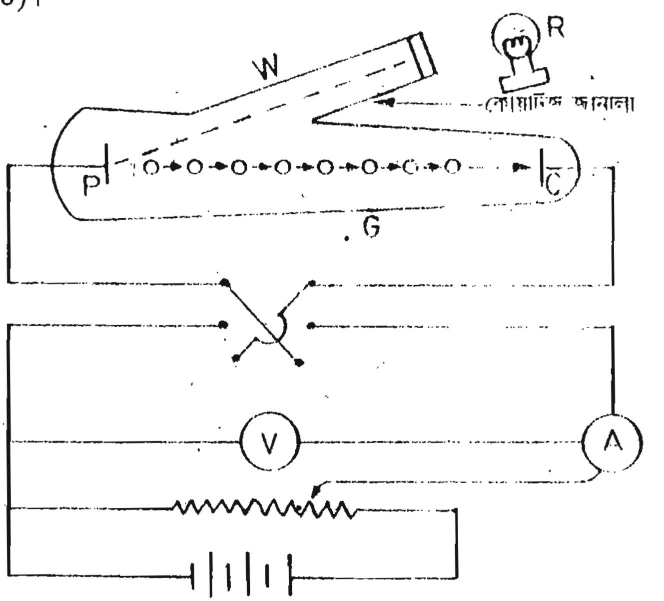
বিকিরণের কোয়ান্টাম তত্ত্বের প্রয়োগ (Application of quantum theory of radiation) ঃ বিজ্ঞানী প্ল্যাঙ্কের বিকিরণের বৈপ্লবিক তত্ত্ব অতি দ্রুত সমসাময়িক বিজ্ঞানীদের দৃষ্টি আকর্ষণ করে। ১৯০৫ সালে **আইনস্টাইন** (Einstein) আলোক-তড়িৎ ফলাফল (photoelectric effect) ব্যাখ্যায় বিকিরণের কোয়ান্টাম তত্ত্ব প্রয়োগ করেন। ইতোপূর্বে সনাতন তত্ত্ব দিয়ে এ ফলাফল ব্যাখ্যা করা সম্ভব হয় নি। ১৯০৭ সালে তিনি কঠিন পদার্থের আপেক্ষিক তাপ সাফল্যজনকভাবে ব্যাখ্যা করেন। ১৯১৩ সালে **নীলস বোর** (Neils Bohr) বর্ণালীরেখার উৎস ও পারমাণবিক গঠনের রহস্য উন্মোচনের ক্ষেত্রে এ ধারণাকে প্রয়োগ করেন। বিজ্ঞানী **কম্পটন** (Compton) ১৯২২ সালে এক্সরের বিচ্ছুরণ (scattering) ঘটনা ব্যাখ্যায় বিকিরণের কোয়ান্টাম তত্ত্ব সার্থকভাবে প্রয়োগ করেন।

১.৫ আলোক-তড়িৎ ফলাফল
Photoelectric Effect

কোনো ধাতুকে উচ্চ ফ্রিকুয়েন্সির তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণ, বিশেষত অতিবেগুনি এবং এক্স-রে দ্বারা আলোকিত (irradiate) করার ফলে ঐ ধাতু থেকে ইলেক্ট্রন নির্গত

হওয়ার (ejection) ঘটনাকে **আলোক-তড়িৎ ফলাফল** বলা হয়। ১৮৮৭ সালে বিজ্ঞানী **হলওয়াশ** (Hallwachs) এ ঘটনা আবিষ্কার করেন। তিনি লক্ষ্য করেন যে, জিঙ্ক অতিবেগুনি রশ্মি দ্বারা আলোকিত করলে তা ঋণাত্মক চার্জ হারায়। তিনি এ ফলাফলের কোনো আঙ্গিক (qualitative) বা মাত্রিক (quantitative) ব্যাখ্যা দিতে সক্ষম হন নি।

আলোক-তড়িৎ ফলাফল অনুধাবনের জন্য একটি পরীক্ষার বর্ণনা দেয়া হলো। একটি কাঁচ নল, G এর কোয়ার্টজ জানালা, w আছে এবং তা উচ্চভাবে নির্বাত (highly evacuated) করা। অতিবেগুনি উৎস, R বিকিরণ সরবরাহ করে, বা কোয়ার্টজ জানালার মধ্য দিয়ে প্রবাহিত হয়ে আলোক সুগ্রাহী (photosensitive) প্লেট P-এর উপর পড়ে (চিত্র ১.৪)।



চিত্র ১.৪ ঃ আলোক-তড়িৎ ফলাফল।

প্লেট P থেকে ইলেক্ট্রন নির্গত হয় এবং তা C-তে সংগৃহীত হয় (C-কে ধণাত্মক চার্জযুক্ত করা থাকে)। সংগ্রাহকে পরিবর্তনযোগ্য পটেনশিয়াল প্রয়োগের ব্যবস্থাও থাকে (চিত্রে প্রদর্শিত)। বাহ্যিক বর্তনীতে ইলেক্ট্রন প্রবাহজনিত তড়িৎ প্রবাহকে একটি সুগ্রাহী অ্যামিটার A দ্বারা মাপা হয়।

পরীক্ষাটি থেকে আলোক-তড়িৎ ফলাফলের বৈশিষ্ট্য সম্পর্কে নিম্নরূপ সিদ্ধান্ত পাওয়া যায় ঃ

(ক) ধাতুর বৈশিষ্ট্যসূচক সূত্রপাতকারী (threshold) ফ্রিকুয়েন্সি অতিক্রম না করা পর্যন্ত আলোর তীব্রতা যতোই হোক ধাতু থেকে ইলেক্ট্রন নির্গত হবে না।

(খ) নির্গত ইলেক্ট্রনের গতি-শক্তি (kinetic energy) আপতিত বিকিরণের ফ্রিকুয়েন্সির সমানুপাতিক।

(গ) তীব্রতা নিম্ন হলেও ফ্রিকুয়েন্সি সূত্রপাতকারী মানের উপরে গেলেই তৎক্ষণাৎ ইলেক্ট্রন নির্গত হবে।

এখন দেখা যাক, আলোকের তড়িৎ-চৌম্বক তত্ত্ব দিয়ে উপরিউক্ত সিদ্ধান্ত ব্যাখ্যা করা যায় কিনা। এ তত্ত্ব অনুসারে বলা যায় যে, তীব্রতাসম্পন্ন বিকিরণের শক্তিশালী তড়িৎ-ক্ষেত্র (electric field) থাকবে এবং এ শক্তিশালী ক্ষেত্র আরও অধিকতর শক্তিসম্পন্ন ইলেক্ট্রন উৎপাদন করবে। কিন্তু সূত্রপাতকারী ফ্রিকুয়েন্সির অস্তিত্ব এ তত্ত্ব দ্বারা ব্যাখ্যা করা কঠিন।

এলস্টার (Elster) ও **গেটাল** (Geital) সনাক্ত করেন যে, ধাতু থেকে ইলেক্ট্রন নির্গত হওয়ার জন্য বোধগম্য (appreciable) সময় ক্ষেপণ (time lag) (3×10^{-৪} সেকেণ্ডের কম) হয় না। আলোকের তরঙ্গ তত্ত্ব অনুসারে সমগ্র তরঙ্গ-ফ্রণ্টের উপর সমভাবে তরঙ্গের শক্তি বণ্টিত হয়। অথচ ইলেক্ট্রন কেবল লক্ষ্য অঞ্চলের সামান্য অংশ জুড়ে থাকে। সুতরাং তড়িৎ-চৌম্বক তরঙ্গ তত্ত্ব আলোক-তড়িৎ ফলাফল ব্যাখ্যা করতে ব্যর্থ হয়েছে।

আইনস্টাইন তত্ত্ব দ্বারা আলোক-তড়িৎ ফলাফল ব্যাখ্যা (Explanation of photoelectric effect by Einstein theory) ঃ আইনস্টাইনের বিকিরণের ফোটন তত্ত্ব দ্বারা আলোক-তড়িৎ ফলাফল ব্যাখ্যা করা যায়। এটি বিকিরণের কোয়ান্টাম তত্ত্বের বর্ধিত রূপ। ১৯০৫ সালে **আইনস্টাইন** দৃঢ়তার সাথে প্রস্তাব করেন যে, বিকিরণ যে কেবল কোয়ান্টামে শোষিত বা নিক্ষিপ্ত হয় তা নয়, এটি কোয়ান্টামরূপে প্রবাহিতও হয়। তিনি আরও প্রস্তাব করেন যে, বিকিরণ ফোটন কণার ঝাঁক ঝাঁক প্রবাহ। প্রতিটি ফোটনের শক্তি হলো ঃ

$$E = h\upsilon$$

এবং তা শূন্যস্থানে আলোর বেগে প্রবাহিত হয়। আলোক-তড়িৎ ফলাফলের সিদ্ধান্ত বা পর্যবেক্ষণাদি এটিই দ্ব্যর্থহীনভাবে প্রমাণ করে যে, ফলাফলটি ইলেক্ট্রন এবং ধাতু থেকে তাকে নির্গত করার মতো যথেষ্ট শক্তিসম্পন্ন ফোটনের মধ্যে সংঘর্ষের উপর নির্ভর করে। যখন ফোটনটি আলোক সুগ্রাহী ধাতুর কোনো পরমাণুর সংগে সংঘর্ষিত হয় তখন পরমাণুটি ফোটনের শক্তি শোষণ করে বা নাও করতে পারে। যদি তা ফোটনের

শক্তি শোষণ করে, তাহলে তৎক্ষণাৎ সে শক্তি ধাতব বন্ধনের জন্য দায়ী ইলেক্ট্রনে স্থানান্তরিত হয়। এভাবে ইলেক্ট্রনটি $h\upsilon$ পরিমাণ শক্তি ফোটন থেকে অর্জন করে।

যেহেতু ইলেক্ট্রনটি নিউক্লিয়াসের সংগে আকর্ষণের মাধ্যমে ধাতুতে যুক্ত থাকে সেহেতু ইলেক্ট্রন নির্গত করার জন্য কিছু শক্তি ব্যয় বা কিছু কাজ করতে হয়। এ শক্তিকে কাজ অপেক্ষক (work function) বলে এবং তা ϕ দ্বারা সূচিত করা হয়। যদি ফোটনের শক্তি $h\upsilon$ কাজ অপেক্ষক, ϕ অপেক্ষা বৃহত্তর হয় তবে যে গতিশক্তি নিয়ে ধাতু থেকে ইলেক্টনটি নির্গত হয় তা নিচের সমীকরণ দিয়ে প্রকাশ করা যায়ঃ

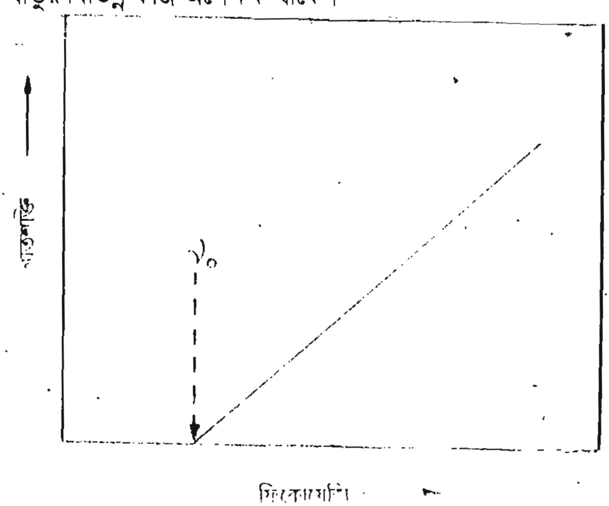
$$\frac{1}{2}\, mv^2 = h\upsilon - \phi \qquad (১.১৬)$$

যেখানে h = ইলেক্ট্রনের ভর এবং v = ইলেক্ট্রনের বেগ।
পুনরায়,

$$\phi = h\upsilon_o$$

যেখানে m = প্ল্যাঙ্ক ধ্রুবক এবং υ_o বিকিরণের সূত্রপাতকারী ফ্রিকুয়েন্সি। ১.৫ চিত্রের ইলেক্ট্রনের গতিশক্তি বনাম বিকিরণের ফ্রিকুয়েন্সির কার্ভ দেখানো হলো।

চিত্রে দেখা যাচ্ছে যে, ফ্রিকুয়েন্সি, υ_O-এর নিচে কোনো ফটোইলেক্ট্রন তড়িৎ (photoelectron current) বা গতিশক্তি পাওয়া যায় না এবং ফ্রিকুয়েন্সি বৃদ্ধির সাথে সাথে ইলেক্ট্রনের গতিশক্তি সমরৈখিকভাবে বৃদ্ধি পায়। কাজ অপেক্ষক ধাতুর বৈশিষ্ট্য-গত ধর্ম। বিভিন্ন ধাতুর বিভিন্ন কাজ অপেক্ষক থাকে।



চিত্র ১.৫ ঃ ইলেক্ট্রনের গতিশক্তি বনাম বিকিরণের ফ্রিকুয়েন্সি কার্ভ।

সমীকরণ (১.১৬) বিজ্ঞানী আইনস্টাইনের আলোক-তড়িৎ ফলাফলের সমীকরণ নামে পরিচিত। এ সমীকরণ দ্বারা অত্যন্ত সার্থকভাবে ফলাফলটি ব্যাখ্যা করা যায়।

ফোটন তত্ত্ব অনুযায়ী বিকিরণের তীব্রতা বৃদ্ধির অর্থ হলো ফোটনের সংখ্যা বৃদ্ধি। সুতরাং বিকিরণের তীব্রতা বাড়লে ফটোইলেক্ট্রনের বেগের উপর তার কোনো প্রভাব পড়ে না। অথচ বিকিরণের ফ্রিকুয়েন্সি বাড়লে বিকিরণের শক্তি বাড়ে এবং তার ফলে ফটোইলেক্ট্রনের গতিশক্তিও বাড়ে। যখন বিকিরণের ফ্রিকুয়েন্সি সূত্রপাতকারী মান, υ_0-এ পৌঁছায়, তখন ফটোইলেক্ট্রনের গতিশক্তি শূন্য হয়। এক্ষেত্রে ফোটনগুলো শূন্য বেগসম্পন্ন ইলেক্ট্রন নির্গত করতে সক্ষম হয়। এ অবস্থায় আইনস্টাইন সমীকরণ নিম্নরূপ হবেঃ

$$\frac{1}{2}mv^2 = 0 = h\upsilon_0 - \phi$$

বা, $$\phi = h\upsilon_0 \qquad (১.১৭)$$

বা, $$h = \phi/\upsilon_0$$

সমীকরণ (১.১৭) থেকে ϕ এবং υ_0 জেনে h নির্ণয় করা যায়। এ উপায়ে নির্ণীত h-এর মান বহুকাল যাবৎ শুদ্ধ হিসেবে জ্ঞাত ছিল।

উদাহরণ ১ ঃ কোনো ক্ষার ধাতুর সূত্রপাতকারী ফ্রিকুয়েন্সি 550 টেরাহার্টজ (THz)। আলোক-তড়িৎ কাজ অপেক্ষক নির্ণয় কর। দেয়া আছে, $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s।

সমাধান ঃ কাজ অপেক্ষক, $\phi = h\upsilon_0$

$$= (6.627 \times 10^{-34} \text{ J s})(550 \times 10^{12} \text{ Hz})$$
$$= 3.645 \times 10^{-19} \text{ J}$$
$$= \frac{3.645 \times 10^{-19}}{1.6 \times 10^{-19}} \text{ eV}$$
$$= 2.278 \text{ eV}$$
$$(1 \text{ eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J})$$

উদাহরণ ২ ঃ কোনো পরমাণু থেকে ইলেক্ট্রন বিদূরিত করার জন্য প্রয়োজনীয় শক্তি 3.6×10^{-18} J। অজ্ঞাত তরঙ্গদৈর্ঘ্যের একটি ফোটনকে শোষণ করে পরমাণুটি আয়নিত হয় এবং 1.05×10^{-6} m s^{-1} বেগসম্পন্ন একটি ইলেক্ট্রন নির্গত করে। পরমাণুটি যে ফোটন শোষণ করেছে তার তরঙ্গদৈর্ঘ্য হিসাব কর। দেয়া আছে, ইলেক্ট্রনের ভর 9.1×10^{-31} kg, আলোর বেগ 3.0×10^{8} ms^{-1} এবং $h = 6.627 \times 10^{-34}$ Js।

সমাধান ঃ আমরা জানি, $\frac{1}{2}mv^2 = h\upsilon - \phi$

$$= \frac{hc}{\lambda} - \phi$$

বা, $\frac{1}{2}\left[9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times (1.05 \times 10^{-6} \text{ m s}^{-1})^2\right]$

$$= \left(\frac{6.627 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 3.0 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}}{\lambda}\right) - (3.6 \times 10^{-18} \text{ J})$$

বা, $5.02 \times 10^{-19} \text{ kg m}^2 \text{s}^{-2} \text{ (J)}$

$$= \frac{19.88 \times 10^{-26} \text{ J m}}{\lambda} - (3.6 \times 10^{-18} \text{ J})$$

বা, $\frac{19.88 \times 10^{-26} \text{ J m}}{\lambda} = 41.02 \times 10^{-19} \text{ J}$

বা, $\lambda = \frac{19.88 \times 10^{-26} \text{ Jm}}{41.02 \times 10^{-19} \text{ J}} = 4.85 \times 10^{-8} \text{ m}$

উদাহরণ ৩ ঃ সিজিয়ামের কাজ অপেক্ষক 2.14 eV। যখন ধাতুটিকে 650 mm আলোক দিয়ে আলোকিত (irradiate) করা হয় তখন ধাতুটি থেকে নির্গত ইলেক্ট্রনের গতিশক্তি ও বেগ কত হবে ? দেয়া আছে, আলোর বেগ $3.0 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$, $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s এবং ইলেক্ট্রনের ভর 9.1×10^{-31} kg

সমাধান ঃ গতিশক্তি $= \frac{1}{2} mv^2 = h\upsilon - \phi$

$$= \frac{hc}{\lambda} - \phi$$

$$= \frac{6.627 \times 10^{-34} \text{ J s} \times 3.0 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}}{650 \times 10^{-9} \text{ m}} - (2.14 \times 1.6 \times 10^{-19} \text{J})$$

$$[\text{ 1eV} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ J }]$$

$$= 3.06 \times 10^{-19} \text{ J} - 3.424 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$= -0.364 \times 10^{-19} \text{ J}$$

গতিশক্তি ঋণাত্মক হওয়ার অর্থ ধাতু থেকে কোনো ইলেক্ট্রন নির্গত হবে না। সুতরাং ইলেক্ট্রনের বেগ হিসাব করার প্রশ্ন আসে না।

উদাহরণ ৪ ঃ আমরা জানি আলোক-তড়িৎ ফলাফল হলো ফটোইলেক্ট্রন বর্ণালী বিশ্লেষণের (photoelectron spectroscopy) ভিত্তিস্বরূপ। একটি এক্স-রে ফোটন (তরঙ্গদৈর্ঘ্য = 140 pm, পিকোমিটার) কোনো পরমাণুর অভ্যন্তরীণ শেল থেকে

ইলেক্ট্রন নির্গত করে। ইলেক্ট্রনের বেগ পাওয়া গেল $2.5 \times 10^{7}\ m\ s^{-1}$। ইলেক্ট্রনের বন্ধনশক্তি হিসাব কর। দেয়া আছে, ইলেক্ট্রনের ভর = 9.1×10^{-31} kg এবং $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s।

সমাধান ঃ গতিশক্তি = $\frac{1}{2}mv^2 = h\upsilon - \phi$

সুতরাং ϕ = কাজ অপেক্ষক = বন্ধন শক্তি (ইলেক্ট্রনের)

$$= h\upsilon - \frac{1}{2}mv^2$$

$$= \frac{hc}{\lambda} - \frac{1}{2}mv^2$$

$$= \left(\frac{6.627 \times 10^{-34}\ J\ s \times 3.0 \times 10^{8}\ m\ s^{-1}}{140 \times 10^{-12}\ m}\right)$$

$$- \left(\frac{1}{2} \times 9.1 \times 10^{-31}\ kg \times 2.5 \times 10^{7}\ m\ s^{-1}\right)$$

$$= 1.42 \times 10^{-15} J - 0.284 \times 10^{-15}\ J\ (kg\ m^2\ s^{-2})$$

$$= 1.36 \times 10^{-15}\ J$$

$$= \frac{1.136 \times 10^{-15}}{1.6 \times 10^{-19}}\ eV$$

$$= 7.1 \times 10^{3}\ eV$$

$$= 7.1\ keV$$

উদাহরণ ৫ ঃ কোনো বিশেষ ক্ষার ধাতুর সূত্রপাতকারী ফ্রিকুয়েন্সি 8.57×10^{14} Hz। যদি ধাতুটিকে 200 nm তরঙ্গদৈর্ঘ্যে বিশিষ্ট অতিবেগুনি বিকিরণ দিয়ে আলোকিত করা হয়, তবে নির্গত ইলেক্ট্রনটির গতিশক্তি হিসাব কর। দেয়া আছে, $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s, আলোর বেগ, $c = 3.0 \times 10^{8}\ m\ s^{-1}$।

সমাধান ঃ ধাতুর কাজ অপেক্ষক, ϕ

$$= h\upsilon_0 = (6.627 \times 10^{-34}\ J\ s) \times (8.57 \times 10^{14}\ Hz)$$

$$= 5.68 \times 10^{-19} J$$

আলোক-তড়িৎ সমীকরণ অনুসারে,

গতিশক্তি $= h\upsilon - \phi$

$$= \frac{hc}{\lambda} - \phi$$

$$= \frac{(6.627 \times 10^{-34}\ J\ s) \times (3.0 \times 10^{8}\ m\ s^{-1})}{200 \times 10^{-9}\ m} - (5.68 \times 10^{-19}\ J)$$

$$= 9.94 \times 10^{-19}\ J - 5.68 \times 10^{-19}\ J$$

$$= 4.26 \times 10^{-19}\ J$$

$$= \frac{4.26 \times 10^{-19}}{1.6 \times 10^{-19}}\ eV$$

$$= 2.89\ eV$$

উদাহরণ ৬ ঃ কোনো ধাতুর কাজ অপেক্ষক 3.55 eV। 4.5×10^{-19} J গতিশক্তি সম্পন্ন ইলেক্ট্রন উৎপাদনের জন্য কতো তরঙ্গদৈর্ঘ্যের বিকিরণ ব্যবহার করতে হবে? দেয়া আছে, $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s, আলোকের বেগ, $c = 3.0 \times 10^{8}\ m\ s^{-1}$ এবং 1 eV = 1.6×10^{-19} J।

সমাধান ঃ আমরা জানি, গতিশক্তি $= h\upsilon - \phi$

বা, $h\upsilon = \phi +$ গতিশক্তি

বা, $\frac{hc}{\lambda} = \phi +$ গতিশক্তি

বা, $$\frac{6.627 \times 10^{-34}\ J\ s \times 3.0 \times 10^{8}\ m\ s^{-1}}{\lambda}$$

$$= (3.55 \times 1.6 \times 10^{-19}\ J) + (4.5 \times 10^{-19}\ J)$$

$$= 10.18 \times 10^{-19}\ J$$

বা, $$\lambda = \frac{19.88 \times 10^{-26}\ J\ m}{10.18 \times 10^{-19}\ J}$$

$$= 1.953 \times 10^{-7}\ m$$

$$= 195.3 \times 10^{-9}\ m$$

$$= 195.3\ nm$$

১.৬ কঠিন পদার্থের তাপ ধারণ ক্ষমতা
Heat Capacity of Solids

কৃষ্ণবস্তুর বিকিরণ বর্ণালী থেকে আমরা তড়িৎ-চৌম্বক ক্ষেত্রের শক্তির কোয়াণ্টাম-করণ সম্পর্কে ধারণা পাই। বিকিরণের কোয়াণ্টামকরণ সম্পর্কে বলতে গেলে সর্ব প্রথমেই ম্যাক্স প্ল্যাঙ্কের কথা বলতে হয়। কারণ তিনি ছিলেন এ বিষয়ের পুরোধা বিজ্ঞানী। বিজ্ঞানী **আলবার্ট আইনস্টাইন** নিম্ন তাপমাত্রায় কঠিন পদার্থের তাপধারণ ক্ষমতার **দুঁলো এবং পেতীর সূত্র** (Dulong and Petit's law) যাচাই করার সময় কঠিন পদার্থের কম্পনীয় শক্তির (vibrational energy) ক্ষেত্রে এ ধারণা প্রয়োগ করেন।

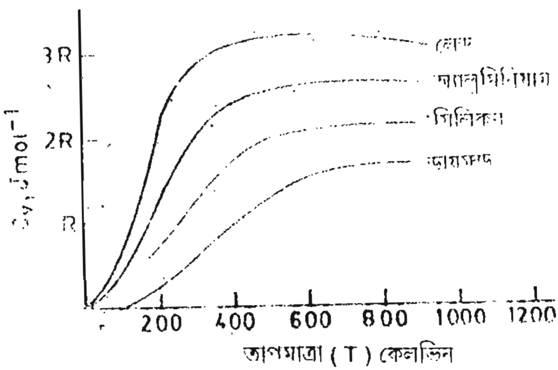
ধরা যাক, কোনো কঠিন পদার্থের সিস্টেম N সংখ্যক পরমাণু ধারণ করে। শক্তির সমবিভাগের নীতি অনুসারে সিস্টেমটির 3N সংখ্যক স্বাতন্ত্র্য মাত্রা (degree of freedom) থাকবে। অধিকাংশ কঠিন পদার্থে ল্যাটিসের দৃঢ় গঠনের কারণে তাদের আবর্তন ও স্থানান্তর গতি (rotational and translational motions) থাকে না। কঠিন পদার্থের পরমাণুগুলো কেবল তাদের সাম্যাবস্থানের চতুর্দিকে কম্পিত হতে পারে। সুতরাং এ ক্ষেত্রে আমাদের একমাত্র কম্পনীয় স্বাতন্ত্র্য-মাত্রার কথা ভাবলে চলবে এবং তার মান হবে 3N–6 (3টি স্থানান্তর এবং 3টি আবর্তনীয় স্বাতন্ত্র্য-মাত্রা অর্থাৎ মোট 6টি স্বাতন্ত্র্য-মাত্রা 3N থেকে বাদ যাবে)। যেহেতু N একটি বৃহৎ সংখ্যা সেহেতু 3N–6-এর মান থেকে খুব বেশি পৃথক নয়। ফলে কঠিন পদার্থের কম্পনীয় স্বাতন্ত্র্য-মাত্রা হিসেবে 3N কে নির্দ্বিধায় ব্যবহার করা যায়। এ কম্পনকে সরল একতালীয় (simple harmonic) প্রকৃতির মনে করে গড় গতিশক্তিকে গড় স্থৈতিক শক্তির সমান ধরা যায় (কারণ প্রতিটি কম্পনীয় স্বাতন্ত্র্য-মাত্রা আংশিকভাবে গতীয় এবং আংশিকভাবে স্থৈতিক প্রকৃতির)। প্রতিটি কম্পনীয় স্বাতন্ত্র্য-মাত্রার জন্য মোট গড় শক্তি = $\frac{1}{2}$ kT + $\frac{1}{2}$ kT = kT। সুতরাং 3N পরিমাণ কম্পনীয় স্বাতন্ত্র্য-মাত্রার জন্য মোট তাপীয় শক্তি 3NkT। ফলে স্থির আয়তনে (constant volume) তাপ ধারণ ক্ষমতা হবে,

$$\left(\frac{dU}{dT}\right)_V = C_V = 3Nk = 3R \text{ J mol}^{-1} \qquad (১.১৮)$$

যেখানে N = অ্যাভোগাড্রো সংখ্যা, k = বোলৎজম্যান ধ্রুবক এবং Nk = R = মোলার গ্যাস ধ্রুবক। সমীকরণ (১.১৮)-ই বিখ্যাত **দুলোঁ ও পেতী সূত্র** (১৮১৯) নামে পরিচিত। সূত্রটির বর্ণনা হলো ঃ

সকল কঠিন পদার্থের মোলার তাপ ধারণ ক্ষমতা 3R এর সমান এবং তা তাপমাত্রার উপর নির্ভর করে না।

প্রযুক্তিগত পশ্চাদপদতার (technological deficiencies) কারণে ডুলং ও পেটিটের সূত্র প্রথম দিকে নিম্ন তাপমাত্রায় যাচাই করা সম্ভব হয় নি। ফলে সূত্রটি কয়েক দশক যাবৎ নির্ভুল হিসেবে প্রচলিত ছিল। পরে দেখা গেল, নিম্ন তাপমাত্রায় ধাতুর মোলার তাপ ধারণ ক্ষমতা 3R এর চেয়ে কম। নিচে ১.৬ চিত্রে তা দেখানো হলো।



চিত্র ১.৬ ঃ তাপমাত্রার সাথে C_V এর পরিবর্তন।

চিত্র থেকে দেখা যায়, তাপমাত্রা শূন্য কেলভিনের দিকে অগ্রসর হলে ধাতুর C_V মানও শূন্যের দিকে অগ্রসর হয়। তাপমাত্রা পরিবর্তনের সাথে C_V মানের পরিবর্তন সর্ব-প্রথম আইনস্টাইন এবং পরে আরও ভালভাবে **পি. ডিবাই** (P. Debye) কোয়াণ্টাম ধারণা প্রয়োগ করে ব্যাখ্যা করেন।

কঠিন পদার্থের তাপধারণ ক্ষমতার আইনস্টাইন তত্ত্ব (Einstein theory of heat capacity of solids) ঃ বিজ্ঞানীকুলের মধ্যে সর্বপ্রথম বিজ্ঞানী **আইনস্টাইন** উপলব্ধি করেন যে, তাপমাত্রার সাথে C_V এর পরিবর্তন কোয়াণ্টাম বলবিদ্যা দ্বারা ব্যাখ্যা করা সম্ভব। তিনি মনে করে যে, কঠিন পদার্থের একটি পরমাণু তার সাম্যাবস্থানের চারদিকে একটি একক ফ্রিকুয়েন্সিতে কম্পিত হয় এবং কম্পমান পরমাণুটি সমরৈখিক একতালীয় দোলকরূপে আচরণ করে। অতঃপর বিজ্ঞানী **প্লাঙ্ক** যেভাবে

কৃষ্ণবস্তুর বিকিরণের ক্ষেত্রে শক্তির বণ্টন নির্ণয় করেছিলেন ঠিক সেভাবেই তিনি পারমাণবিক দোলকের গড় শক্তি লাভ করেন।

$$\bar{\varepsilon} = \frac{h\upsilon}{\exp(h\upsilon/kT)-1} \qquad (১.১৯)$$

এখন এক গ্রাম পরমাণু কঠিন পদার্থের মোট শক্তি নির্ণয় করতে হলে সমীকরণ (১.১৯) থেকে প্রাপ্ত গড় শক্তিকে 3N দ্বারা গুণ করতে হবে। প্রতিটি দোলনের সাথে তিনটি কম্পন-উপায় (mode of vibration) জড়িত আছে। এখানে N অ্যাভোগাড্রোর সংখ্যা। সুতরাং এক গ্রাম পরমাণু কঠিন পদার্থের মোট গড় শক্তি হলো

$$U = 3N\bar{\varepsilon} = \frac{3Nh\upsilon}{\exp(h\upsilon/kT)-1} \qquad (১.২০)$$

অতএব

$$C_v = \left(\frac{dU}{dT}\right)_v = 3R\left\{\frac{\exp(h\upsilon/kT)}{[\exp(h\upsilon/kT)-1]^2}\left(\frac{h\upsilon}{kT}\right)^2\right\} \qquad (১.২১)$$

উচ্চ তাপমাত্রায় $kT >> h\upsilon$। ফলে সমীকরণ (১.২০) দাঁড়ায়

$$U = \frac{3Nh\upsilon}{(1+h\upsilon/kT)-1} = 3NkT = 3RT \qquad (১.২১ ক)$$

যেহেতু $h\upsilon/kT << 1$ সেহেতু $\exp(h\upsilon/kT)$ এর সিরিজের প্রথম দুটি পদ বিবেচনা করা হয়েছে। সুতরাং

$$C_V = \left(\frac{dU}{dT}\right)_v = \frac{d}{dT}(3RT) = 3R \qquad (১.২২)$$

এটিই দুলোঁ ও পেতীর সূত্রকে নিশ্চিত করে। অতি নিম্ন তাপমাত্রায়

$$kT << h\upsilon \text{ এবং } h\upsilon/kT >> 1$$

এক্ষেত্রে

$$U = \frac{3Nh\upsilon}{\exp(h\upsilon/kT)} \qquad (১.২৩)$$

এবং $$C_V = \left(\frac{dU}{dT}\right)_v = 3R\left(\frac{h\upsilon}{kT}\right)^2 \exp(-h\upsilon/kT). \qquad (১.২৪)$$

যখন $T \rightarrow 0$ তখন C_V এর মান অতি দ্রুত শূন্যের দিকে অগ্রসর হয়। কারণ সমীকরণ(১.২৪)-এর হরে (denominator) T^2 রয়েছে। এ ছাড়াও হরে রয়েছে $\exp(h\upsilon/kT)$। এ থেকে পরিষ্কারভাবে প্রমাণিত হয় যে, শূন্য কেলভিন তাপমাত্রার

শূন্য মান থেকে উচ্চ তাপমাত্রায় স্থির মান 3R (ডুলং ও পেটিট) পর্যন্ত মোলার তাপ ধারণ ক্ষমতার পরিবর্তনকে আইনস্টাইন সমীকরণের মাধ্যমে অনুমান করা যায়। সত্যি কথা বলতে কি, আদর্শ দুলোঁ ও পেতী মান থেকে মোলার তাপধারণ ক্ষমতার প্রধান বিচ্যুতি আইনস্টাইন তত্ত্ব দিয়ে মোটামুটিভাবে ব্যাখ্যা করা যায়। কিন্তু অতি নিম্ন তাপমাত্রার অঞ্চলে হিসাবকৃত মানের সাথে পরীক্ষিত মানের খুব বেশি সন্তোষজনক মিল হয় না। এর একমাত্র কারণ হলো, প্ল্যাঙ্কের হিসাবে (যা আইনস্টাইন অনুসরণ করেছিলেন) নিম্ন তাপমাত্রায় কেবল কতিপয় দোলকের দোলন শুরু করার মতো পর্যাপ্ত শক্তি থাকে। উচ্চ তাপমাত্রায় দোলনে অংশ গ্রহণের জন্য সব দোলকেরই পর্যাপ্ত শক্তি অর্জিত হয়। ফলে 3N দোলকের সকলেই তাপধারণ ক্ষমতার মানকে আদর্শ মানের উন্নীত করতে অবদান রাখে।

এক্ষেত্রে যে সামান্য সাংখ্যিক মিল পাওয়া যায় তার ব্যাখ্যা হলো, আইনস্টাইন ফর্মুলায় এটি অনুমান করা হয়েছিল যে, সব পারমাণবিক দোলক একই বৈশিষ্ট্যসূচক (characteristic) ফ্রিকুয়েন্সিতে কম্পিত হয় (oscillate বা vibrate)। পরবর্তীতে সিস্টেমে প্রাপ্য সব বৈশিষ্ট্যসূচক ফ্রিকুয়েন্সিকে গড় করে সমস্যাটি সমাধানের চেষ্টা করা হয়। পি. ডিবাই প্রকৃতপক্ষে এ ধারণা প্রবর্তন করে কঠিন পদার্থের তাপধারণ ক্ষমতা সম্পর্কে তাঁরই বিখ্যাত ডিবাই সমীকরণ উদ্ভাবন করেন।

কঠিন পদার্থের তাপধারণ ক্ষমতার ডিবাই তত্ত্ব (Debye theory of heat capacity of solids) ঃ বিজ্ঞানী পি. ডিবাই স্থির (stationary) তরঙ্গের ধারণা ব্যবহার করেন। এ অনুসারে প্রতিটি ফ্রিকুয়েন্সিতে সিস্টেম অনেকগুলি কম্পন-উপায় লাভ করে। যুগলায়িত দোলনের তত্ত্ব (theory of coupled oscillations) থেকে স্থির তরঙ্গের প্রেক্ষিতে যথাসম্ভব কম্পন-উপায় পাওয়া যায়।

যদি υ_l ও υ_t যথাক্রমে কঠিন পদার্থের লম্বিক (longitudinal) ও আড় (transverse) তরঙ্গের বেগ হয়, তবে ফ্রিকুয়েন্সি পরিসর, $d\upsilon$ এবং আয়তন, V-তে লম্বিক তরঙ্গ, υ_l অনুরূপ কম্পন-উপায় হবে নিম্নরূপ ঃ

$$\frac{4\pi V}{\upsilon_l}\,\upsilon^2\,d\upsilon \qquad (১.২৫)$$

এবং আড় তরঙ্গের ক্ষেত্রে কম্পন-উপায় (modes of vibration) হবে,

$$\frac{8\pi V}{\upsilon_t^3}\,\upsilon^2\,d\upsilon \qquad (১.২৬)$$

সুতরাং মোট কম্পন-উপায় হবে,

$$dN = \frac{8\pi V}{\upsilon_t^3}\,\upsilon^2 d\upsilon + \frac{8\pi V}{\upsilon_l^3}\,\upsilon^2 d\upsilon \qquad (১.২৭)$$

প্রতিটি কম্পন-উপায়ের শক্তি হলো

$$\bar{\varepsilon} = \frac{h\upsilon}{\exp(h\upsilon/kT)-1}$$

সুতরাং $d\upsilon$ পরিমাণ ফ্রিকুয়েন্সি পরিসরে V আয়তনের কঠিন শক্তি দাঁড়ায়,

$$dU = \left(\frac{8\pi V}{\upsilon_t^3}\upsilon^2 d\upsilon + \frac{4\pi V}{\upsilon_l^3}\right) \times \frac{h\upsilon}{\exp(h\upsilon/kT)-1} \qquad (১.২৮)$$

দোলন যুগলায়নের কারণে কোনো কঠিন পদার্থের তরঙ্গের ফ্রিকুয়েন্সি একটি চূড়ান্ত মান, υ_m-এ পৌঁছায়। ফলে সব মিলিয়ে মোট কম্পন-উপায়ের সংখ্যা দাঁড়ায় 3N। সুতরাং

$$3N = 4\pi V\left(\frac{2}{\upsilon_t^3} + \frac{1}{\upsilon_l^3}\right)\int_o^{\upsilon_m} \upsilon^2 d\upsilon$$

$$= 4\pi V\left(\frac{2}{\upsilon_t^3} + \frac{1}{\upsilon_l^3}\right)\frac{\upsilon_m^3}{3} \qquad (১.২৯)$$

অতএব কঠিন পদার্থের মোট শক্তি হবে,

$$U = \int dU = 4\pi V\left(\frac{2}{\upsilon_t^3} + \frac{1}{\upsilon_l^3}\right)\int_o^{\upsilon_m} \frac{h\upsilon}{\exp(h\upsilon/kT)-1}\,\upsilon^2 d\upsilon \qquad (১.৩০)$$

সমীকরণ (১.২৯) এবং (১.৩০) থেকে,

$$U = \frac{9N}{\upsilon_m^3}\int_o^{\upsilon_m} \frac{h\upsilon}{\exp(h\upsilon/kT)-1}\,\upsilon^2 d\upsilon$$

$$= \frac{9Nh}{\upsilon_m^3}\int_o^{\upsilon_m} \frac{\upsilon^3}{\exp(h\upsilon/kT)-1}\,d\upsilon \qquad (১.৩১)$$

ধরা যাক, $x = h\upsilon/kT$ একটি মাত্রাহীন (dimensionless) অপেক্ষক (variable) সুতরাং

$$\frac{dx}{d\upsilon} = h/kT \text{ বা } dx = h/kT.d\upsilon$$

পুনরায় মনে করা যাক $\theta = \frac{h\upsilon_m}{k}$ = বৈশিষ্ট্যসূচক তাপমাত্রা। সমীকরণ (১.৩১) এর রূপ এখন হবে

$$U = \frac{9Nh}{\theta^3k^3/h^3}\int_o^{\theta/T}\frac{(kT/h)^3\,x^3\,(kT/h)\,dx}{e^x-1}$$

$$= \frac{9Nh^4}{\theta^3k^3}\,(kT/h)^4\int_o^{\theta/T}\frac{x^3dx}{e^x-1} \qquad (১.৩২)$$

সুতরাং মোলার তাপ হবে,

$$C_V = \left(\frac{du}{dT}\right)_V = \frac{9R}{\theta^3}\frac{d}{dt}\left[T^4\int_o^{\theta/T}\frac{x^3}{e^x-1}\,dx\right]$$

$$= 3R\left[\frac{12T^3}{\theta^3}\int_o^{\theta/T}\frac{x^3dx}{e^x-1} - \frac{3\theta/T}{\exp(\theta/T)-1}\right] \qquad (১.৩৩)$$

সমীকরণ (১.৩৩)-ই হলো কঠিন পদার্থের তাপধারণ ক্ষমতার বিখ্যাত **ডিবাই সমীকরণ।**

T^3 সূত্র ঃ নিম্ন তাপমাত্রায় θ/T এর মান খুবই বড়। সুতরাং θ/T কে অসীম মানের ধরা যায়। পুনরায় এক্ষেত্রে υ_m-এর মান যথেষ্ট ক্ষুদ্র হয়। সুতরাং $h\upsilon/kT \to o$ । ফলে

$$C_V = \frac{12}{5}\pi^2R\,(T/\theta)^3 = 464.4\,((T/\theta)^3$$

$\left[\int_o^{\theta/T}\frac{x^3dx}{e^x-1} = \frac{\pi^2}{15}\right.$ সমাকলনটি একটি প্রমাণ (standard) সমাকলন $\left.\right]$

বা

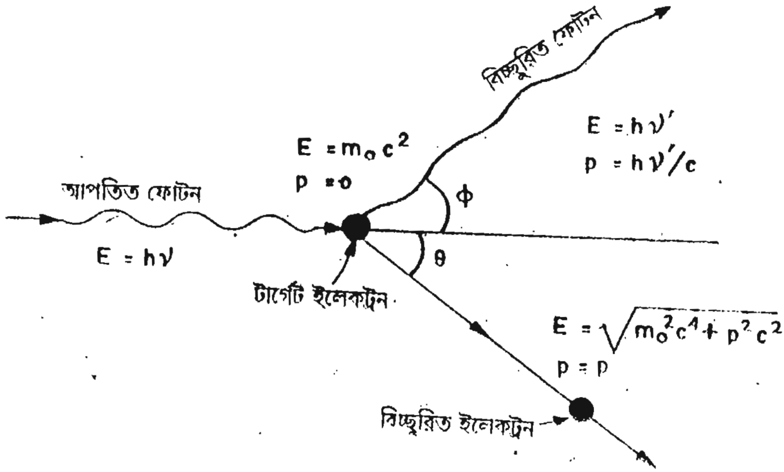
সুতরাং দেখা যাচ্ছে, নিম্ন তাপমাত্রায় কঠিন পদার্থের তাপধারণ ক্ষমতা কেলভিন তাপমাত্রার ঘন ঘাতের (cube) সমানুপাতিক। সমীকরণ (১.৩৪)কে ডিবাই-এর T^3 সূত্র বলা হয়। বিভিন্ন পদার্থের ক্ষেত্রে সূত্রটি যাচাই করা হয়েছে।

এরূপ ধারণা করা হয় যে, ধাতুর স্ফটিক ল্যাটিসের এসব পারমাণবিক দোলকের কম্পনীয় ফ্রিকুয়েন্সি সমগ্র স্ফটিক জুড়ে স্থিতিস্থাপক তরঙ্গ পাঠায়। স্ফটিকে মধ্য দিয়ে যেসব স্থিতিস্থাপক লম্বিক ও আড় তরঙ্গ প্রবাহিত হয় তার মাধ্যমেই প্রতিটি পরমাণু প্রতিবেশী পরমাণুর সাথে শক্তি বিনিময় করে। এসব তরঙ্গকে ফোন্ন (phonon) নামে এক ধরনের কণা হিসেবে বিবেচনা করা যেতে পারে। অপরপক্ষে তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণের তরঙ্গকে ফোটন বলা হয়। ফোননের শক্তিও $h\upsilon$ এককে কোয়াণ্টায়িত (quantized), যেখানে υ = স্ফটিকে যান্ত্রিক কম্পনের ফ্রিকুয়েন্সি (mechanical frequency of vibration)। প্রকৃতপক্ষে ফোনন হলো যান্ত্রিক কম্পনীর গতির কোয়াণ্টায়িত তরঙ্গ।

১.৭ কম্পটন ফলাফল
Compton Effect

কম্পটন ফলাফলের মাধ্যমে আলোকের কোয়াণ্টাম তত্ত্বের প্রত্যক্ষ রূপ স্পষ্টভাবে তুলে ধরা যায়। দেখা গেছে, কোনো ইলেক্ট্রন থেকে এক্স-রে বিচ্ছুরিত (scattered) হলে এ বিকিরণের তরঙ্গদৈর্ঘ্য পরিবর্তিত হয়। এটিই **কম্পটন ফলাফল** নামে পরিচিত। ১৯২২ সালে এ.এইচ. কম্পটন এ ফলাফল আবিষ্কার করেন।

আইনস্টাইনের ফোটন তত্ত্বের ভিত্তিতে বিজ্ঞানী কম্পটন তাঁর কম্পটন ফলাফলের তাত্ত্বিক ব্যাখ্যা দেন। এ তত্ত্ব অনুসারে ফোটন স্থির ভর (rest mass) ছাড়াই কণা হিসাবে আচরণ করে। যদি প্রকৃতই তা ঘটে তবে ফোটন ও ইলেক্ট্রনের মধ্যে সংঘর্ষকে সনাতন বলবিদ্যায় বিলিয়ার্ড বলের মধ্যে সংঘর্ষরূপে গণ্য করা যায়। নিচের ১.৭. চিত্রে কম্পটন ফলাফলের বৈশিষ্ট্য দেখানো হয়েছে।



চিত্র ১.৭ ঃ কম্পটন ফলাফল।

চিত্রে থেকে দেখা যাচ্ছে, কিভাবে স্থির অবস্থার একটি ইলেক্ট্রনকে আঘাত করে এক্স-রে ফোটন নিজের মূল গতির দিক থেকে বিচ্যুত হয়ে বিচ্ছুরিত হয় এবং ইলেক্ট্রনটি ধাক্কা খেয়ে চলতে থাকে। সংঘর্ষের পর ফোটন খানিকটা শক্তি হারায়, যা ইলেক্ট্রন কর্তৃক অর্জিত গতিশক্তি T-এর সমান (যদিও তখন পরবর্তী ফোটন এ প্রক্রিয়ায় অংশ গ্রহণ করে)। যদি প্রাথমিক ফোটনের ফ্রিকুয়েন্সি υ হয়, তবে বিচ্ছুরিত ফোটনের ফ্রিকুয়েন্সি হবে υ' যা υ অপেক্ষা ক্ষুদ্রতর। অতএব আমরা লিখতে পারি,

ফোটনের শক্তি-ক্ষয় = ইলেক্ট্রনের অর্জিত শক্তি

$$h\upsilon - h\upsilon' = T \qquad (১.৩৫)$$

আপেক্ষিকতাবাদের ধারণা (relativistic concept) থেকে ফোটনের শক্তি লেখা যায়,

$$E = (m_o^2c^4 + p^2c^2)^{1/2} \qquad (১.৩৬)$$

যেখানে m_o = ফোটনের স্থির ভর

p = ফোটনের ভরবেগ

c = ফোটনের বেগ

যেহেতু ফোটনের কোনো স্থির ভর নেই, সুতরাং মোট শক্তি হলো,

$$E = pc \quad (১.৩৭)$$

আমরা জানি, E (বিকিরণ) = $h\upsilon$ (১.৩৮)

সমীকরণ (১.৩৭) ও (১.৩৮) থেকে,

$$p = h\upsilon / c \quad (১.৩৯)$$

ভরবেগ একটি ভেক্টর রাশি। সুতরাং সংঘর্ষের পর ভরবেগ পরস্পর লম্ব দুটি দিকের প্রতিটিতে সর্বদা সংরক্ষিত থাকবে। এর একটি হলো মূল ফোটনের এবং অপরটি এর লম্ব দিকে ইলেক্ট্রন ও বিচ্ছুরিত ফোটন ধারণকারী তলে অবস্থিত। ফোটনের প্রাথমিক ভরবেগ $h\upsilon/c$ এবং বিচ্ছুরিত ফোটনের ভরবেগ $h\upsilon'/c$। অপরদিকে ইলেক্ট্রনের প্রাথমিক ও সমাপনী ভরবেগ যথাক্রমে o এবং p। ফোটনের মূল দিক,

ফোটন ও ইলেক্ট্রনের প্রাথমিক ভরবেগ = ফোটন ও ইলেক্ট্রনের সমাপনী ভরবেগ

$$\therefore\ h\upsilon/c + o = h\upsilon'/c \cos\theta + p\cos\theta \quad (১.৪০)$$

এবং এর লম্ব দিকে,

ফোটন ও ইলেক্ট্রনের প্রাথমিক ভরবেগ = ফোটন ও ইলেক্ট্রনের সমাপনী ভরবেগ

$$\therefore\ o = h\upsilon'/c \sin\theta - p\sin\theta \quad (১.৪১)$$

প্রাথমিক ফোটন ও বিচ্ছুরিত ফোটনের মধ্যকার কোণ, ϕ এবং প্রাথমিক ফোটন ও রিকয়েল (recoil) ইলেক্ট্রনের মধ্যকার কোণ, θ। সমীকরণ (১.৩৫), (১,৪০) এবং (১.৪১) থেকে এমন একটি সমীকরণ পাওয়া যাবে, যা প্রাথমিক ও বিচ্ছুরিত ফোটনের তরঙ্গদৈর্ঘ্যের পার্থক্যের সাথে ফোটনের দিক দুটির মধ্যকার কোণের সম্পর্ক প্রকাশ করবে।

সমীকরণ (১.৪০) (১.৪১) কে c দ্বারা গুণ করে পুনর্বিন্যাস করলে,

$$pc\cos\theta = h\upsilon - h\upsilon' \cos\phi \quad (১.৪২)$$

এবং $$pc\sin\theta = h\upsilon' \sin\phi \quad (১.৪৩)$$

প্রতিটি সমীকরণকে বর্গ করে,

$$p^2c^2\cos^2\theta = (h\upsilon)^2 + (h\upsilon')^2 - \cos^2\phi - 2(h\upsilon)(h\upsilon')\cos\phi \quad (১.৪৪)$$

এবং $$p^2c^2\sin^2\theta = (h\upsilon')^2\sin^2\phi \quad (১.৪৫)$$

সমীকরণ (১.৪৪) ও (১.৪৫) যোগ করে,

$p^2c^2 (\sin^2\theta + \cos^2\theta) = (h\upsilon)^2 + (h\upsilon')^2 (\sin^2\phi + \cos^2\phi) - 2 (h\vartheta)$
$(h\upsilon') \cos\phi$

বা, $$p^2c^2 = (h\upsilon)^2 + (h\upsilon')^2 - 2 (h\upsilon)(h\upsilon') \cos\phi \qquad (১.৪৬)$$

এখন কণার মোট শক্তির ক্ষেত্রে নিচের দুটি আপেক্ষিকতাবাদের সমীকরণ ব্যবহার করে পাওয়া যায়

$$E = T + m_0c^2$$

এবং $$E = \sqrt{m_0^2c^4 + p^2c^2}$$

সুতরাং আমরা লিখতে পারি,

$$(T + m_0c^2)^2 = m_0^2c^4 + p^2c^2$$

বা, $$T^2 + m_0^2c^4 + 2T m_0c^2 = m_0^2c^4 + p^2c^2$$

বা, $$p^2c^2 = T^2 + 2Tm_0c^2 \qquad (১.৪৭)$$

পুনরায় $$T = h\upsilon - h\upsilon' \qquad (১.৪৮)$$

সুতরাং $$p^2c^2 = (h\upsilon - h\upsilon')^2 + 2Tm_0c^2$$

$$= (h\upsilon)^2 + (h\upsilon')^2 - 2 (h\upsilon)(h\upsilon') + 2Tm_0c^2$$

$$= (h\upsilon)^2 + (h\upsilon')^2 - 2 (h\upsilon)(h\upsilon') + 2m_0c^2 (h\upsilon - h\upsilon') \qquad (১.৪৯)$$

সমীকরণ (১.৪৬) ও (১.৪৯) থেকে,

$$2(h\upsilon)(h\upsilon') - 2m_0c^2 (h\upsilon - h\upsilon') = 2 (h\upsilon)(h\upsilon') \cos\phi$$

বা, $$2m_0c^2 (h\upsilon - h\upsilon') = 2 (h\upsilon)(h\upsilon')(1 - \cos\phi) \qquad (১.৫০)$$

সমীকরণ (১.৫০) কে $2h^2c^3$ দ্বারা ভাগ করে,

$$\frac{m_0c}{h}\left(\frac{\upsilon}{c} - \frac{\upsilon'}{c}\right) = \frac{\upsilon\upsilon'}{c^2 (1 - \cos\phi)} \qquad (১.৫১)$$

যেহেতু $\upsilon / c = 1/\lambda$ এবং $\upsilon' / c = \frac{1}{\lambda'}$ সুতরাং

$$\frac{m_0c}{h}\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) = \frac{1 - \cos\phi}{\lambda\lambda'}$$

বা, $$\frac{\lambda' - \lambda}{\lambda\lambda'} \frac{m_0c}{h} = \frac{1 - \cos\phi}{\lambda\lambda'}$$

বা, $$\lambda' - \lambda = \Delta\lambda = \frac{h}{m_0 c}(1-\cos\phi) \qquad (১.৫২)$$

সমীকরণ (১.৫২)-ই **কম্পটন ফলাফলের সমীকরণ**। এ সমীকরণ m_0 স্থির ভরের কণা দ্বারা ϕ কোণে বিচ্ছুরিত ফোটনের তরঙ্গদৈর্ঘ্যের পার্থক্য প্রকাশ করছে। এটি প্রাথমিক ফোটনের তরঙ্গদৈর্ঘ্য, λ-এর উপর নির্ভরশীল নয়। h/m_0c পদটিকে বিচ্ছুরিত কণার কম্পটন তরঙ্গদৈর্ঘ্য বলে। ইলেক্ট্রনের ক্ষেত্রে মানটি 0.024 অ্যাংস্ট্রম।

উদাহরণ ১ ঃ কোনো একটি এক্স-রে রশ্মি একটি মুক্ত ইলেক্ট্রনের দ্বারা মূল রশ্মির দিক থেকে ৬০° কোণে বিচ্ছুরিত হয়। যদি বিচ্ছুরিত এক্স-রে এর তরঙ্গ দৈর্ঘ্য 0.0025 nm হয় তাহলে এক্স-রে রশ্মির মূল তরঙ্গদৈর্ঘ্য নির্ণয় কর।

সমাধান ঃ বিচ্ছুরিত রশ্মির তরঙ্গদৈর্ঘ্য – মূল রশ্মির তরঙ্গদৈর্ঘ্য

$$= \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 c}(1-\cos\phi)$$

বা, $$\lambda = \lambda' - \frac{h}{m_0 c}(1-\cos\phi)$$

$$= (0.0025 \times 10^{-9}\ \text{m}) - \frac{6.627 \times 10^{-34}\ \text{J s}}{9.1 \times 10^{-31}\ \text{kg} \times 3 \times 10^{8}\ \text{m s}^{-1}}(1-\cos 60)$$

$$= (0.0025 \times 10^{-9}\ \text{m}) - (0.2427 \times 10^{-11})(1-0.5)\ \text{m}$$

$$= (0.0025 \times 19^{-9}\ \text{m}) - (0.12135 \times 10^{-11})\ \text{m}$$

$$= 0.00129 \times 10^{-9}\ \text{m}$$

$$= 0.00129\ \text{nm}$$

১.৮ হাইড্রোজেন পরমাণুর বর্ণালী
Spectrum of Hydrogen atom

হাইড্রোজেন পরমাণুর বর্ণালী ব্যাখ্যার প্রচেষ্টা থেকেই পারমাণবিক গঠনের বোর তত্ত্বের উৎপত্তি ঘটে। নির্দিষ্ট দূরত্ব পর পর অবস্থিত রেখাশ্রেণি দ্বারা হাইড্রোজেন বর্ণালী গঠিত। এ দূরত্ব তরঙ্গদৈর্ঘ্য হ্রাসের সাথে হ্রাস পায়। বর্ণালীর রেখাশ্রেণি দূর অবলোহিত অঞ্চল থেকে অতিবেগুনি অঞ্চল পর্যন্ত বিস্তৃত। এসব শ্রেণিকে আবিষ্কারকের নামানুসারে **লীম্যান** সিরিজ (Lyman series), **বামার সিরিজ** (Balmer series), প্যাসেন

সিরিজ (Paschen series), **ব্রাকেট সিরিজ** (Brackett series), **ফাণ্ড সিরিজ** (Pfund series) বলা হয়। শ্রেণিভুক্ত বর্ণালীরেখার শৃংখলা (regularity) থেকে এটিই প্রতীয়মান হয় যে, এদের মধ্যে হয়তো বা কোনো সম্পর্ক আছে। বিজ্ঞানী **বামার** সর্বপ্রথম উক্ত সম্পর্ক প্রকাশকারী একটি ইমপিরিক্যাল ফর্মুলা প্রদানে সফলকাম হন। তাঁর ফর্মুলা হলো,

$$\lambda \text{ (অ্যাংস্ট্রেম)} = \frac{3645.6\, n^2}{n^2 - 4} \qquad (১.৫৩)$$

যেখানে n= 3, 4, 5 ইত্যাদি। (n-এর মান 3- এর কম হলে λ এর অস্তিত্ব থাকে না। রিডবার্গও (Rydberg) একটি ফর্মুলা প্রস্তাব করেন ঃ

$$\bar{\upsilon} = \frac{1}{\lambda} = A - \frac{R}{(n+\alpha)^2} \qquad (১.৫৪)$$

যেখানে $\bar{\upsilon}$ = তরঙ্গ সংখ্যা (প্রতি সে.মি. এ তরঙ্গ সংখ্যা)। A এবং α সমন্বয় ধ্রুবক। বর্ণালীর একটি অংশের জন্য এদের সুবিধামতো গ্রহণ করা হয়। R-কে **রিডবার্গ** ধ্রুবক বলে।

১৯০৮ সালে **রিজ** (Ritz) তাঁর বিখ্যাত রিজ সংযোগ সূত্রের (Ritz combination principle) সাহায্যে বিভিন্ন বর্ণালী শ্রেণির (spectral series) মধ্যে সম্পর্ক স্থাপন করেন। তিনি রিডবার্গ ফর্মুলার দ্বিতীয় পদের ন্যায় আরও একটি পদ প্রবর্তন করে উক্ত ফর্মুলার A-এর স্থলে যোগ করেন। এভাবে রিডবার্গ ফর্মুলা সংযোগ সূত্র দ্বারা সংশোধিত হয়েছে।

$$\bar{\upsilon} = \frac{R}{(m+\beta)^2} - \frac{R}{(n+\alpha)^2}$$
$$= R\left[\frac{1}{(m+\beta)^2} - \frac{1}{(n+\alpha)^2}\right] \qquad (১.৫৫)$$

যেখানে α এবং β দুটি ভিন্ন ভিন্ন ধ্রুবক এবং এরা কেবল মৌলিক পদার্থের উপর নির্ভর করে। n-এর বিভিন্ন অখণ্ড মান এবং m-এর একটি নির্দিষ্ট অখণ্ড মান ধরে (m <n) বিভিন্ন বর্ণালী শ্রেণির সমীকরণ পাওয়া যায়। যেমন, ইচ্ছানুযায়ী (arbitrarily) α = β = o, m = 2 এবং n = 3, 4, 5 ইত্যাদি ধরে বামার সিরিজ বা ফর্মুলা পাওয়া যায়। প্রকৃতপক্ষে, α = β = o ধরে হাইড্রোজেন বর্ণালীর সব বর্ণালী শ্রেণি সমীকরণ (১.৫৫) দ্বারা প্রকাশ করা যায়। ফলে এ সমীকরণ দাঁড়ায়,

$$\bar{\upsilon} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) : m < n \qquad (১.৫৬)$$

$R = \frac{2\pi^2 me^4}{ch^3}$ সম্পর্কটি থেকে রিডবার্গ ধ্রুবক, R-এর মান 109677 cm^{-1} হিসাবে গণনা করা হয়েছে। যেখানে m= ইলেক্ট্রনের ভর, e= ইলেক্ট্রনের চার্জ, c= আলোর বেগ এবং h = প্লাঙ্ক ধ্রুবক।

সংযোগ সূত্র ব্যবহার করে হাইড্রোজেন বর্ণালীর বিভিন্ন বর্ণালীরেখার শ্রেণি তালিকাবদ্ধ করা হলো।

অতিবেগুনি অঞ্চল : $\bar{\upsilon} = R\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right)$, n= 2, 3, 4 লীম্যান সিরিজ

দৃশ্যমান অঞ্চল : $\bar{\upsilon} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$, n= 3, 4, 5, বামার সিরিজ

নিকট অবলোহিত অঞ্চল : $\bar{\upsilon} = R\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right)$, n= 4, 5, 6 প্যাসেন সিরিজ

অবলোহিত অঞ্চল : $\bar{\upsilon} = R\left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2}\right)$, n= 5, 6, 7 ব্রাকেট সিরিজ

দূর অবলোহিত অঞ্চল : $\bar{\upsilon} = R\left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2}\right)$, n= 6, 7, 8 ফান্ড সিরিজ

বিজ্ঞানী **নীলস বোর** (Neils Bohr) হাইড্রোজেন বর্ণালীর যে তত্ত্ব প্রস্তাব করেন তার মধ্যে 'বিকিরণের কোয়ান্টাম প্রকৃতি' এবং 'রাদারফোর্ডের নিউক্লীয় পরমাণু'-এ দুটি ধারণার নির্যাস (essence) ছিল। তত্ত্বটি নিম্নলিখিত অনুমানের সমন্বয়ে গঠিত।

(ক) কোনো পরমাণুর কতকগুলো নির্দিষ্ট শক্তিস্তর (state) আছে, যেসব স্তর থেকে বিকিরণ নিক্ষিপ্ত হয় না। এ স্তরগুলিকে স্থিরাবস্থা (stationary states) বা অর্বিট (orbit) বা কক্ষপথ বলে।

স্থিরাবস্থায় থাকাকালে ইলেক্ট্রন পরমাণুর কেন্দ্রে অবস্থিত নিউক্লিয়াসের চারদিকে শক্তি বিকিরণ ছাড়াই আবর্তিত হয়।

(খ) কেবল সেই অর্বিটগুলি গ্রহণযোগ্য, যাদের ক্ষেত্রে নিচের সমীকরণ প্রযোজ্য :

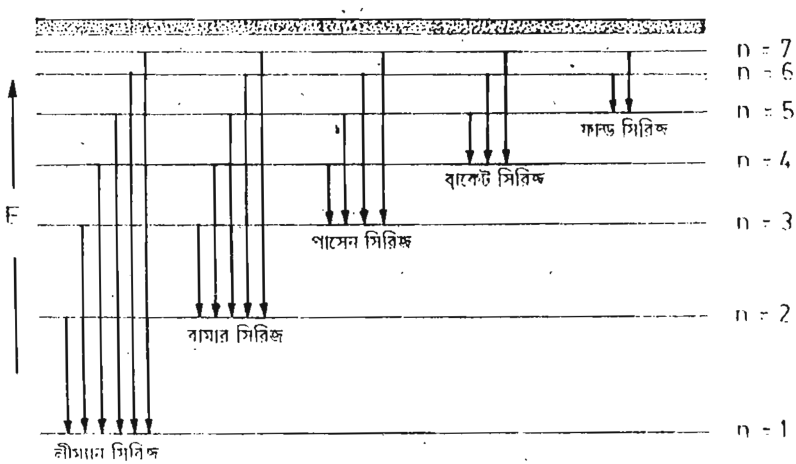
$$p = n\,(h/2\pi) \qquad (১.৫৭)$$

এখানে p = অর্বিটে ইলেক্ট্রনের ভরবেগ (momentum) এবং h = প্ল্যাঙ্কের ধ্রুবক। একে বোরের **কোয়ান্টাম শর্ত** (quantum condition) বলে।

(গ) কেবল তখনই বিকিরণের নিক্ষেপণ ঘটে যখন গ্রহণযোগ্য কোনো শক্তিস্তর E থেকে অন্য একটি নিম্নতর শক্তিসম্পন্ন স্তর E_2-তে ইলেক্ট্রন লাফ দেয়। নিক্ষিপ্ত বিকিরণের শক্তির সমীকরণ নিম্নরূপ ঃ

$$E_1 - E_2 = h\upsilon \qquad (১.৫৮)$$

যেখানে υ = বিকিরণের ফ্রিকুয়েন্সি। একে আইনস্টাইনের **ফ্রিকুয়েন্সি শর্ত** (frequency condition) বলে। নিম্নে বিভিন্ন বর্ণালী শ্রেণির লৈখিকরূপ দেখানো হলো।



চিত্র ঃ ১.৮ ঃ হাইড্রোজেন পরমাণুর শক্তিস্তর চিত্র।

এখানে y অক্ষ আনুভূমিক রেখা হিসেবে আঁকা বিভিন্ন স্তরের শক্তি নির্দেশ করছে। n-এর মান শক্তিস্তরের শক্তি নির্ধারণ করে। চিত্র থেকে বিভিন্ন বর্ণালী শ্রেণির গঠন এবং রিজ সংযোগ নীতির তাৎপর্য স্পষ্ট হয়ে উঠেছে। ফলে যখন m =1 এবং n = 2,3,4, 5 আমরা লীম্যান সিরিজ পাই। অর্থাৎ যখন ইলেক্ট্রন বিভিন্ন উত্তেজিত স্তর থেকে সর্বনিম্ন স্তরে লাফ দেয়, তখন **লীম্যান সিরিজ** উৎপন্ন হয়। এভাবে সব বর্ণালী শ্রেণি বর্ণনা করা যায়।

শীর্ষের ছায়া অংশ অসীম স্তরে ইলেক্ট্রনের উত্তেজনা বুঝায়, যেখানে শক্তির অবিচ্ছিন্ন বণ্টন পাওয়া যায়। এখানে অবিচ্ছিন্ন বর্ণালী উৎপন্ন হয়। সুতরাং হাইড্রোজেন বর্ণালীর বোর তত্ত্ব হলো বিকিরণের কোয়াণ্টাম মতবাদের একটি প্রয়োগ।

১.৯ বোর তত্ত্বের সীমাবদ্ধতা
Limitations of Bohr Theory

বোর তত্ত্ব অনুসারে কোনো ইলেক্ট্রন একটি উচ্চতর অর্বিট থেকে নিম্নতর কোনো অর্বিটে লাফ দিলে পারমাণবিক বর্ণালীতে কেবল একটি বর্ণালীরেখা উৎপন্ন হয়। কিন্তু উচ্চ বিশ্লেষণে এ একক রেখাকে প্রকৃতই অনেকগুলি সূক্ষ্ম রেখার গুচ্ছ হিসেবে দেখা যায়। সুক্ষ্ম রেখার গুচ্ছকে বর্ণালীরেখার সূক্ষ্ম গঠন বা বহুপদী গঠন (fine structure of multiple structure) বলা হয়। বোর তত্ত্ব সন্তোষজনকভাবে এরূপ সূক্ষ্ম গঠনের উৎস ব্যাখ্যা করতে পারেনি। বর্ণালীরেখার সূক্ষ্ম গঠন থেকে এটিই প্রতীয়মান হয় যে, প্রধান কোয়াণ্টাম সংখ্যার কোনো অণু নির্দিষ্ট মানের অনুরূপ শক্তিস্তর অনেকগুলি উপস্তরে বিভক্ত। এ সব উপস্তরের মধ্যে শক্তি-পার্থক্য খুব কম। এর ভিত্তিতে বর্ণালীরেখার সূক্ষ্ম গঠন ব্যাখ্যা করা যায় এভাবে যে, উচ্চতর স্তর থেকে নিম্নতর স্তরে কোনো ইলেক্ট্রন স্থানান্তরের সময় বিভিন্ন উপস্তরে তা প্রবেশ করে। ফলে বর্ণালীরেখার সূক্ষ্ম গঠন সৃষ্টি হয়। কিন্তু বহু-ইলেক্ট্রন ঘটিত জটিল পরমাণুর ক্ষেত্রে বোর তত্ত্ব ব্যর্থ হয়েছে।

১.১০ বোর সোমারফেল্ড তত্ত্ব
Bohir Sommerfeld Theory

ইলেক্ট্রন বিন্যাসের আধুনিক ধারণা বোর সোমারফেল্ড তত্ত্বের উপর প্রতিষ্ঠিত সোমারফেল্ড বোর তত্ত্বের দুর্বলতাগুলো পুঙ্খানুপুঙ্খভাবে লক্ষ্য করেন এবং তা সংশোধন করতে উৎসাহী হন। তিনি প্রস্তাব করেন, ইলেক্ট্রন কেবল নিউক্লিয়াসের চারদিকে গোলাকার অর্বিটেই ঘোরে না, এরা উপবৃত্তাকার অর্বিটেও ঘোরে। তিনি তাঁর নিজের বিখ্যাত প্রস্তাবের পক্ষে নিম্নরূপ যুক্ত তুলে ধরেন।

কোনো ইলেক্ট্রন ধনাত্মকভাবে চার্জিত নিউক্লিয়াসের চারদিকে ঘুরবার সময় নিউক্লিয়াসের প্রভাবে তা এতোই অস্থির (perturbed) হয় যে, ইলেক্ট্রনটি উপবৃত্তাকার অর্বিটে ঘুরতে বাধ্য হয়। উপবৃত্তের একটি ফোকাস বিন্দুতে নিউক্লিয়াস অবস্থিত। গোলাকার অর্বিট উপবৃত্তাকার অর্বিটের একটি বিশেষ রূপ।

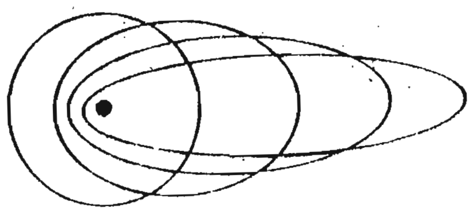
উপবৃত্তকার অর্বিটে ইলেক্ট্রনের কৌণিক ভরবেগ নিম্নরূপ কোয়ান্টায়িত হয়।

কৌণিক ভরবেগ, $mvr = k(h/2\pi)$ (১.৫৯)

যেখানে k একটি অখণ্ড সংখ্যা = 1, 2, 3 ইত্যাদি। একে সহকারী বা দিগংশিক কোয়ান্টাম সংখ্যা বলে। উদাহরণস্বরূপ, যখন $n = 4$, $k = 4, 3, 2, 1$, অর্থাৎ বোরের চতুর্থ অর্বিট চারটি উপস্তরে বিভক্ত (চিত্র ১.৯)।

পরবর্তীকালে সহকারী কোয়ান্টাম সংখ্যা k-কে l দ্বারা সূচিত করা হয়। k এবং l এর মধ্যে সম্পর্ক হলো ঃ

$$l = k - 1$$



চিত্র ঃ ১.৯ বোর সোমারফেল্ড অর্বিট।

কোয়ান্টাম শর্ত অনুসারে n এর প্রতিটি মানের জন্য সহকারী কোয়ান্টাম সংখ্যা l এর n সংখ্যক মান থাকবে। অর্থাৎ

যখন $n = n$

$$l = 0, 1, 2, 3, \ldots.. (n - l)$$

এটি উল্লেখ্য যে, $l = n - l$ অর্বিটটি গোলাকার হবে। উদাহরণস্বরূপ l যখন

$$n = 3$$

$$l = 0, 1, 2,$$

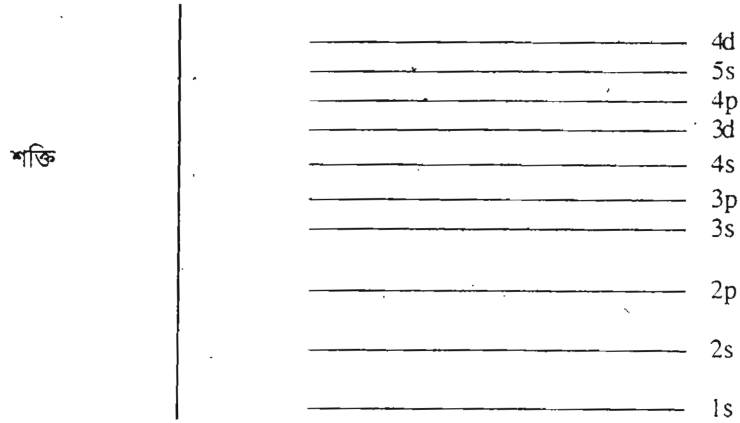
অর্থাৎ বোরের তৃতীয় শক্তিস্তর তিনটি উপস্তরে বিভক্ত। l এর মান থেকে ইলেক্ট্রন অর্বিটের আকৃতি সম্পর্কে জানা যায়। প্রধান ও সহকারী কোয়ান্টাম সংখ্যার প্রচলিত প্রতীক নিম্নে দেয়া হলো ঃ

প্রধান কোয়ান্টাম সংখ্যা, n	প্রতীক	সহকারী কোয়ান্টাম সংখ্যা, l	প্রতীক
1	k শেল	o	s অরবিটাল
2	L ,,	1	p ,,
3	M ,,	2	d ,,
4	N ,,	3	f ,,
5	o ,,	4	g ,,

এখানে s = sharp, p = principal, d = diffuse এবং f = fundamental। কিভাবে অরবিটালের প্রতীক ব্যবহার করা হয় নিচের তালিকায় তা দেখানো হলো ঃ

n	l	অরবিটালের প্রতীক
1	o	1s
2	o	2s
	1	2p
3	o	3s
	1	3p
	2	3d
4	o	4s
	1	4p
	2	4d
	3	4f

নিম্নে শক্তিস্তরগুলির তুলনামূলক শক্তি দেয়া হলো ঃ



চিত্র ১.১০ ঃ শক্তিস্তরগুলির শক্তি।

১.১১ করেসপণ্ডেন্স নীতি

The Correspondence Principle

কোয়াণ্টাম তত্ত্বের সাহায্যে অত্যন্ত দক্ষভাবে পরমাণুর অণুবীক্ষণিক জগৎ (microscopic world) (তা যতোই জটিল হোক না কেন) এর মাত্রিক ব্যাখ্যা দেয়া যায়। অপরপক্ষে নিউটনীয় বলবিদ্যা বা সনাতন বলবিদ্যা স্থুল জগতকে অত্যন্ত সন্তোষজনকভাবে ব্যাখ্যা করতে পারে। কিন্তু তা আনুবীক্ষণিক জগতের ক্ষেত্রে প্রযোজ্য নয়। তবে কোয়াণ্টাম বলবিদ্যা স্থুল জগতের ক্ষেত্রে প্রয়োগ করতে পারা উচিত- এ আশাবাদ ব্যক্ত করা যায়।

এ আশাবাদই বিজ্ঞানী **নীলস বোরের** মনে উদয় হয়। ১৯২৩ সালে তিনি প্রস্তাব করেন যে, সনাতন সীমায় যে কোনো প্রকৃত সন্তোষজনক কোয়াণ্টাম তত্ত্ব ধীরে ধীরে সনাতন বলবিদ্যার দিকে এগুতে পারে। যখন কোনো ভৌত সিস্টেম উচ্চভাবে উত্তেজিত হয়, অর্থাৎ যখন তারা নির্দিষ্ট বৈশিষ্ট্যগত শক্তিসম্পন্ন (যে শক্তি নিম্নতর স্তর অপেক্ষা অনেক বড় মানের) কোয়াণ্টাম সংখ্যার স্তরে অবস্থান করে, তখন এটি আশা করা সঙ্গত যে, এ অবস্থায় কোয়াণ্টাম হিসাবের ফলাফল একই সিস্টেমের সনাতন ফলাফলের অত্যন্ত কাছাকাছি হবে। অন্য কথায় বোর প্রস্তাব করেন যে, সনাতন জগতের একেবারে শেষ সীমায় (threshold) কোয়াণ্টাম তত্ত্ব ও সনাতন বলবিদ্যা এক হয়ে যায়।' এটিই **করেসপণ্ডেন্স নীতি** নামে পরিচিত।

এখন নীতিটির রহস্য গাণিতিকভাবে উন্মোচন করা যাক। তড়িৎ-চৌম্বক তত্ত্ব অনুসারে গোলাকার অর্বিটে ভ্রমণকালে একটি ইলেক্ট্রন আবর্তনের ফ্রিকুয়েন্সির সমান তড়িৎ-চৌম্বক তরঙ্গ বিকিরণ করে। হাইড্রোজেন পরমাণুতে ইলেক্ট্রনের বেগ নিচের সমীকরণ অনুযায়ী প্রকাশ করা যায় ঃ

$$v = \frac{e}{(4\pi\varepsilon_0 mr^{1/2})} \qquad (১.৬০)$$

যেখানে e = ইলেক্ট্রনের চার্জ

m = ইলেক্ট্রনের ভর

ε_0 = সর্বনিম্ন অর্বিটের শক্তি

r = অর্বিটের ব্যাসার্ধ

সুতরাং ইলেক্ট্রনের আবর্তনের ফ্রিকুয়েন্সি, f

$$= \frac{\text{ইলেক্ট্রনের বেগ}}{\text{অর্বিটের পরিধি}}$$

$$= \frac{v}{2\pi r}$$

$$= \frac{e}{2\pi\sqrt{4\pi\varepsilon_0 mr^3}} \qquad (১.৬১)$$

কোয়ান্টাম সংখ্যা, n-এর প্রেক্ষিতে কোনো অর্বিটের ব্যাসার্ধ হলো ঃ

$$r_n = \frac{n^2h^2\varepsilon_0}{\pi me^2}$$

সুতরাং আবর্তনের ফ্রিকুয়েন্সি

$$f = \frac{me^4}{8e_0^2 h^3}\left(\frac{2}{n^3}\right) \qquad (১.৬২)$$

এখন প্রশ্ন হলো, কোন অবস্থায় বোর পরমাণু মডেল সনাতন আচরণ করবে ? অর্বিট যদি এতো বেশি বড় হয় যে, সহজেই তা প্রত্যক্ষভাবে মাপা সম্ভব, কোয়ান্টাম ফলাফল সেক্ষেত্রে সম্পূর্ণভাবে লক্ষণীয় হয় না (inconspicuous)। উদাহরণস্বরূপ, অর্বিটের ব্যাস এক সে.মি. হলে কোয়ান্টাম সংখ্যা (quantum number) $n = 10^4$ হবে। এখন যদি হাইড্রোজেন পরমাণুকে এরূপ বৃহদাকারে কল্পনা করা হয়, তবে অর্বিটাল শক্তি আয়নীকরণ শক্তির খুব সামান্য নিচে থাকবে। তত্ত্বটিতে এসব শক্তি নিষিদ্ধ করা হয় নি।

তাহলে বোর তত্ত্ব কি এ ধারণাই দেবে যে, পরমাণু ঐ অবস্থায় বিকিরণ করবে ? এখন হাইড্রোজেন পরমাণু n_2 শক্তিস্তর থেকে n_1 শক্তিস্তরে পতিত হলে যে ফোটন বিকিরিত হয় তার ফ্রিকুয়েন্সি হলো

$$\upsilon = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \qquad (১.৬৩)$$

n_2 এর পরিবর্তে n এবং n_1 এর পরিবর্তে $n - p$ (যেখানে $p = 1, 2, 3$ ইত্যাদি)। (১.৬৩) সমীকরণে এদের প্রতিস্থাপিত করলে দাঁড়ায়,

$$\upsilon = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3}\left(\frac{1}{(n-p)^2}\right) - \frac{1}{n^2}$$

$$= \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3}\left[\frac{2np - p^2}{n^2(n-p)^2}\right] \qquad (১.৬৪)$$

n_1 এবং n_2 উভয়ই যখন খুব বড় মানের হয়, তখন $n >> p$।

এক্ষেত্রে $2np - p^2 \cong 2np$

এবং $(n-p)^2 \cong n^2$

ফলে $$\upsilon = \frac{me^4}{8\varepsilon_0^2 h^3}\frac{2p}{n^3} \qquad (১.৬৫)$$

যখন $p=1$, তখন বিকিরণের ফ্রিকুয়েন্সি অর্বিটাল ইলেক্ট্রনের আবর্তনীয় ফ্রিকুয়েন্সি f এর সমান হয় (সমীকরণ ১.৬২)। সুতরাং দেখা যাচ্ছে যে, অতি উচ্চ কোয়ান্টাম সংখ্যার সীমায় হাইড্রোজেন পরমাণুর ক্ষেত্রে কোয়ান্টাম ও সনাতন হিসাবাদি একই রূপ লাভ করে।

১.১২ পুরাতন কোয়ান্টাম তত্ত্ব

Old Quantum Theory

কৃষ্ণবস্তু বিকিরণের উপর প্ল্যাঙ্কের আলোক-তড়িৎ ফলাফলের উপর আইনস্টাইনের এবং হাইড্রোজেন বর্ণালীর উপর নীলস বোরের গবেষণাই পুরাতন কোয়ান্টাম তত্ত্বের ভিত্তি

রচনা করেছে। পুরাতন কোয়ান্টাম তত্ত্বের অগ্রগতির অব্যবহিত পরেই এটি বোঝা যায় যে, তত্ত্বটি পারমাণবিক সিস্টেমের নিখুঁত ও পূর্ণাঙ্গ বিশ্লেষণের জন্য পর্যাপ্ত নয়। তত্ত্বটি অখণ্ড কোয়াণ্টাম সংখ্যা সম্পর্কে ধারণা দেয়। এ কোয়াণ্টাম সংখ্যা ভৌত রাশি কোয়াণ্টামকরণের জন্য ব্যবহৃত হয়। প্রকৃতপক্ষে তা ইচ্ছানুযায়ী ধরা হয়েছে। পরবর্তীকালে দেখা গেছে যে, পরীক্ষামূলক ফলাফলের সংগে মিল দেখানোর উদ্দেশ্যে এবং বিশেষ কতকগুলো রাশিকে কোয়াণ্টায়িত করার জন্য অর্ধ অখণ্ড-কোয়াণ্টাম সংখ্যা ব্যবহার করা হয়েছে। পুরাতন কোয়াণ্টাম তত্ত্বের এ অপর্যাপ্ততা একটি পূর্ণাঙ্গ তত্ত্ব অনুসন্ধানের চেষ্টায় বিজ্ঞানীদের লিপ্ত করে।

পুরাতন কোয়াণ্টাম তত্ত্বের প্রধান ত্রুটি নিম্নরূপ ঃ

(ক) পুরাতন কোয়াণ্টাম তত্ত্ব দ্বারা অবস্থান্তর সম্ভাবনা (transition probabilities) এবং বর্ণালীরেখার তীব্রতা সম্পর্কে কোনো তথ্য পাওয়া যায় না।

(খ) এ তত্ত্ব এমন কি হাইড্রোজেন অণু, হিলিয়াম অণু He^+, Li^{2+} প্রভৃতি সরল ক্ষেত্রে বর্ণালীরেখা ব্যাখ্যা করতে পারে না।

(গ) বর্ণালীরেখার আপেক্ষিক তীব্রতা (relative intensities) এ তত্ত্ব দ্বারা ব্যাখ্যা করা যায় না।

(ঘ) ইলেক্ট্রন স্পিনের প্রক্রিয়াও এ তত্ত্ব দ্বারা ব্যাখ্যা করা সম্ভব নয়।

শ্রডিঙ্গারের তরঙ্গ সমীকরণ আবিষ্কার থেকে তরঙ্গ বলবিদ্যা (wave mechanics) নামে এক নতুন কোয়াণ্টাম তত্ত্বের উদ্ভব ঘটে। এ সমীকরণ (তার সমাধানসহ) বহু ক্ষেত্রে পারমাণবিক বা কোয়াণ্টাম মেকানিক্যাল সিস্টেমকে সম্পূর্ণভাবে ব্যাখ্যা করতে পারে। শ্রডিঙ্গার সমীকরণের সমাধান স্বতঃস্ফূর্তভাবে অখণ্ড এবং অর্ধ-অখণ্ড কোয়াণ্টাম সংখ্যা প্রদান করে।

যদিও কোয়াণ্টাম তত্ত্বের ঐতিহাসিক গুরুত্ব রয়েছে, তথাপি এটি বলার কোনো প্রয়োজন নেই যে, এ তত্ত্ব তরঙ্গ বলবিদ্যা সম্পর্কে বৈপ্লবিক চিন্তাভাবনা করতে সহায়তা করেছে। তরঙ্গ বলবিদ্যাকেই নুতন কোয়াণ্টাম তত্ত্ব বলা হয়। **হাইজেনবার্গ** (Heisenberg), **বর্ণ** (Born), **ডিরাক** (Dirac) প্রমুখ বিজ্ঞানীর গবেষণা নতুন কোয়াণ্টাম তত্ত্বকে আরও উন্নত করেছে।

প্রশ্নাবলি

১.১। সনাতন বলবিদ্যার মূল্য ধারণা দাও। এর ত্রুটিগুলি কি ?

১.২। কোয়ান্টাম বলবিদ্যা বলতে কি বুঝ ?

১.৩। কৃষ্ণবস্তু কাকে বলে? কিভাবে কৃষ্ণবস্তুর বিকিরণ বিকিরণের কোয়ান্টাম ধারণা প্রতিষ্ঠা করতে সহায়তা করেছে তা আলোচনা কর।

১.৪। বিভিন্ন তাপমাত্রায় কৃষ্ণবস্তুর শক্তি বণ্টন কিভাবে তরঙ্গদৈর্ঘ্যের উপর নির্ভর করে তা রৈখিক চিত্রের মাধ্যমে দেখাও।

১.৫। কৃষ্ণবস্তু বিকিরণের কির্শক সূত্র বর্ণনা কর।

১.৬। কৃষ্ণবস্তু বিকিরণের শক্তি বণ্টন ব্যাখ্যার জন্য প্রাথমিক পর্যায়ে কি কি তত্ত্ব ব্যবহার করা হয়েছিল ? আলোর কোয়ান্টাম তত্ত্বের অগ্রগতিতে তাদের ভূমিকা পুঙ্খানুপুঙ্খভাবে আলোচনা কর।

১.৭। প্ল্যাঙ্কের কৃষ্ণবস্তু বিকিরণের সূত্র লিখ। কৃষ্ণবস্তু বিকিরণের শক্তি বণ্টন প্রকাশ করতে এ তত্ত্ব কতোটা সফল হয়েছে ?

১.৮। 'অতিবেগুনী বিপর্যয়' বলতে কি বুঝ? আলোকের কোয়ান্টাম তত্ত্ব কি? কিভাবে তা প্রতিষ্ঠিত হয়েছে ?

১.৯। 300 Watt সোডিয়াম বাতি থেকে প্রতি সেকেন্ডে নিক্ষিপ্ত ফোটন-সংখ্যা হিসাব কর। দেয়া আছে, সোডিয়াম আলো 550 nm তরঙ্গদৈর্ঘ্যর হলুদ আলো নিক্ষেপ করে এবং $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s।

[উত্তর ঃ ফোটন সংখ্যা $n = \dfrac{E}{h\upsilon} = 8.3 \times 10^{20}\ s^{-1}$]

১.১০। 530–550 nm তরঙ্গদৈর্ঘ্য পরিসরের বিকিরণের জন্য 1600 K পর্যন্ত উত্তপ্ত করা একটি 1.5 cm^3 আয়তনবিশিষ্ট গোলাকার গর্তের মধ্যকার শক্তি হিসাব কর। দেয়া আছে, আলোর বেগ $c = 2.99 \times 10^8$ m s^{-1} এবং $h = 6.627 \times 10^{-34}$ Js।

[সংকেত ঃ প্ল্যাঙ্কের বিকিরণ সূত্র ব্যবহার কর। $dU = p(\lambda)\, d\lambda$, যেখানে $d\lambda = 540$ nm]

১.১১। আলোক-তড়িৎ ফলাফল কাকে বলে ? এ ফলাফল ব্যাখ্যা করার উপযোগী একটি যান্ত্রিক ব্যবস্থা বর্ণনা কর।

১.১২। আলোক-তড়িৎ ফলাফলের বৈশিষ্ট্য কি কি? আইনস্টাইন তত্ত্বের ভিত্তিতে এ ফলাফল কিভাবে ব্যাখ্যা করা যায় ?

১.১৩। ধর, কোনো বিকিরণ একটি আলোক সুগ্রাহী তলের উপর পড়েছে। যদি তলটি থেকে ইলেক্ট্রন নিক্ষিপ্ত হয়, তবে তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণের ফ্রিকুয়েন্সির উপর

ইলেক্ট্রনের বেগের নির্ভরশীলতা প্রদর্শনকারী একটি লেখচিত্র আঁক এবং এতে সূত্রপাতকারী ফ্রিকুয়েন্সি দেখাও।

১.১৪। জিঙ্কের কাজ অপেক্ষক 3.6 eV। ধাতুটির তলে 295 nm তরঙ্গদৈর্ঘ্য বিশিষ্ট অতিবেগুনি বিকিরণ পড়তে দিলে যে ফটোইলেক্ট্রন নিক্ষিপ্ত হয় তার সর্বোচ্চ শক্তি হিসাব কর। দেয়া আছে, বিকিরণের বেগ $c = 3 \times 10^8$ m s^{-1} এবং $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s।

[সংকেত ঃ গতিশক্তি $= h\upsilon - \phi = 0.98 \times 10^{-19}$ J]

১.১৫। কোনো পরমাণুর অভ্যন্তরীণ কক্ষপথ (shell) থেকে 145 pm (পিকোমিটার) তরঙ্গদৈর্ঘ্যের এক্স-রে ফোটন ইলেক্ট্রন নির্গত করে। ইলেক্ট্রনের বেগ পাওয়া গেল 2.1×10^7ms^{-1}। ইলেক্ট্রনের বন্ধনশক্তি হিসাব কর।

[সংকেতঃ ইলেক্ট্রনের বন্ধন শক্তি = কাজ অপেক্ষক $= \phi = h\upsilon -$ গতিশক্তি = 8.4 keV]

১.১৬। সাফল্য ও দুর্বলতা উল্লেখপূর্বক কঠিন পদার্থের তাপধারণ ক্ষমতার আইনস্টাইন তত্ত্ব আলোচনা কর।

১.১৭। কেন পি. ডিবাই কঠিন পদার্থের তাপধারণ ক্ষমতার তাঁর বিখ্যাত তত্ত্ব প্রতিষ্ঠা করতে এগিয়ে এলেন? তত্ত্বটি বিস্তারিতভাবে বর্ণনা কর।

১.১৮। আলোকের কোয়ান্টামকরণ বলতে কি বুঝ? আলোর কোয়ান্টামকরণ সমর্থন করে এমন ঘটনাগুলি উল্লেখ কর। তাঁদের সংক্ষিপ্ত বর্ণনা দাও।

১.১৯। ধর, একটি আলোক সুগ্রাহী ধাতুকে কাজ অপেক্ষক অপেক্ষা অধিকতর শক্তির বিকিরণ দ্বারা আলোকিত করা হলো। ধাতু দ্বারা ব্যবহৃত বিকিরণের শক্তি সম্পর্কে পুঙ্খানুপুঙ্খরূপে আলোচনা কর।

১.২০। কঠিন পদার্থের তাপধারণ ক্ষমতার আইনস্টাইন তত্ত্বের চেয়ে ডিবাই তত্ত্ব কোন কোন বিষয়ে অধিকতর উন্নত (superior) তা উল্লেখ কর।

১.২১। 750 nm তরঙ্গদৈর্ঘ্যের ফোটনের শক্তি হিসাব কর।

[উত্তর ঃ 2.65×10^{-19}J]

১.২২। উপযুক্ত অবস্থায় মানুষের চোখ 10^{-18}J শক্তিবিশিষ্ট তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণ সনাক্ত করতে পারে। ঐ শক্তিতে 500 nm তরঙ্গদৈর্ঘ্যের কতগুলি ফোটন থাকবে?

[সংকেত ঃ $n = \frac{E}{h\upsilon} = 2.52$ s^{-1}]

১.২৩। 150 MeV শক্তিসম্পন্ন ফোটনের তরঙ্গদৈর্ঘ্য কতো হবে?

[উত্তর ঃ 0.0083 pm]

১.২৪। কোনো ধাতুর আলোক-তড়িৎ নিক্ষেপণের জন্য সূত্রপাতকারী ফ্রিকুয়েন্সি 1.15×10^{15} Hz। ধাতুটির তলে 1.8×10^{15} Hz ফ্রিকুয়েন্সির আলোক ফেললে যে ইলেক্ট্রন নির্গত হবে তার সর্বোচ্চ শক্তি জুল বা ইলেক্ট্রন ভোল্ট-এ হিসাব কর।

[উত্তর ঃ 4.31×10^{-19} J বা, 2.69 eV]

১.২৫। সোডিয়ামের কাজ অপেক্ষক 2.3 eV। সোডিয়াম তল থেকে ফটোইলেক্ট্রন নির্গত করার জন্য সর্বোচ্চ কতো তরঙ্গদৈর্ঘ্যের আলো ব্যবহার করতে হবে? যদি 250 nm তরঙ্গদৈর্ঘ্যের আলো ধাতুটির তলে ফেলা হয়, তবে ফটোইলেক্ট্রনের সর্বোচ্চ শক্তি কতো হবে তা হিসাব কর।

[উত্তর ঃ 540 nm এবং গতিশক্তি = 4.22×10^{-19} J]

১.২৬। প্রমাণ কর, ফোটন তার সব শক্তি ও ভরবেগ একটি মুক্ত ইলেক্ট্রনকে দিতে পারে না।

১.২৭। কম্পটন ফলাফল কাকে বলে? গাণিতিকভাবে ফলাফলটি বিশ্লেষণ কর।

১.২৮। 3.5×10^{19} Hz প্রাথমিক ফ্রিকুয়েন্সি বিশিষ্ট একটি এক্স-রে ফোটন একটি ইলেক্ট্রনকে আঘাত করলে তা 45^0 কোণে বিচ্ছুরিত হয়। বিচ্ছুরিত ফোটনের ফ্রিকুয়েন্সি নির্ণয় কর।

১.২৯। বোর তত্ত্ব দ্বারা কিভাবে হাইড্রোজেন বর্ণালী ব্যাখ্যা করা যায়?

১.৩০। বোর তত্ত্ব দ্বারা হাইড্রোজেন বর্ণালীর সিরিজ ব্যাখ্যা কর।

১.৩১। বোর তত্ত্বের সীমাবদ্ধতা বা দুর্বলতা নির্দেশ কর। বোর সোমারফেল্ড তত্ত্বের আলোচনা কর।

২.৩২। সোমারফেল্ড কিভাবে বোর তত্ত্ব সংশোধন করেন? কেন তিনি এ কাজ করতে উৎসাহী হলেন?

১.৩৩। সহকারী কোয়ান্টাম সংখ্যার ধারণা কিভাবে জন্ম নিল? করেসপন্ডেন্স নীতি কি?

১.৩৪। করেসপন্ডেন্স নীতির গাণিতিক প্রমাণ দাও।

১.৩৫। পুরাতন কোয়ান্টাম তত্ত্ব কাকে বলে? এর প্রধান ত্রুটিগুলি নির্দেশ কর।

১.৩৬। (ক) আলোক-তড়িৎ ফলাফল বর্ণনা ও ব্যাখ্যা কর।

(খ) প্লাটিনাম তলে 200 nm তরঙ্গ দৈর্ঘ্যের বিকিরণ আপতিত হলে নির্গত ইলেক্ট্রনের বেগ নির্ণয় কর। প্লাটিনামের কাজ অপেক্ষক = 8.01×10^{-19} J ইলেক্ট্রন ভর = 9.11×10^{-31} kg ও $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s।

[রা. বি. এম.এস-সি. শেষবর্ষ, ১৯৯৮]

[উত্তরঃ ইলেক্ট্রনের বেগ = 0.5827×10^6 m s^{-1}]

দ্বিতীয় অধ্যায়

বস্তুর তরঙ্গ ধর্ম
(WAVE PROPERTIES OF MATTER)

২.১ বস্তু তরঙ্গ ঃ বিকিরণ ও ইলেক্ট্রনের দ্বৈত প্রকৃতি
Matter Waves : The Dual Nature of Radiation and Electrons

মৌলিক কণিকাগুলির দ্বৈত প্রকৃতি কোয়ান্টাম বলবিদ্যার অপরিহার্য উপাদান। এ কণিকা কখনও তরঙ্গরূপে আবার কখনও সাধারণ কণারূপে আচরণ করে। উদাহরণ-স্বরূপ, তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণের (electromagnetic radiation) কথাই ধরা যাক। আইনস্টাইন আলোক-তড়িৎ ফলাফল ব্যাখ্যার ক্ষেত্রে এ প্রস্তাব করতে বাধ্য হন যে, তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণ ফোটন কণা নামক সূক্ষ্ম কণিকার (corpuscles) মধ্যে কেন্দ্রীভূত থাকে (concentrated)। কিন্তু এ ধারণা কোনোভাবেই তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণের পুরাতন ও যথাযথভাবে পরীক্ষিত তরঙ্গ প্রকৃতিকে বাতিল করতে পারে নি। ব্যাপারটি যুগপৎভাবে (simultaneously) এরূপ চিন্তা করবার মতো যে, কণার একটি স্রোত হঠাৎ অপবর্তন ঘটনা (diffraction phenomenon) প্রদর্শন করে এবং তরঙ্গ গতি (wave motion) কোনো সুগ্রাহী তল (sensitive surface) থেকে ইলেক্ট্রন নির্গত করতে একটি বিন্দুতে তার শক্তি কেন্দ্রীভূত করে।

ব্যতিচার (interference) এবং অপবর্তন ঘটনা দুটি থেকে তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণের তরঙ্গ প্রকৃতির প্রমাণ পাওয়া যায়। অপবর্তন পরীক্ষায় অপবর্তন প্যাটার্ন এ সম্ভাবনার ইঙ্গিত দেয় (expression) যে, কোনো উৎস থেকে ফোটন নির্গত হয়ে তা প্লেটের কোনো নির্দিষ্ট অংশে আঘাত করছে। এটি ঠিক যে, আলোক সম্পর্কীয় পরীক্ষায় (optical experiment) বিকিরণের তরঙ্গ দেখা যায় না।

আমরা সর্বদাই ফোটন দেখতে পাই। কিন্তু কখনই তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণ দেখতে পাই না। সুতরাং আমরা যৌক্তিকভাবে সিদ্ধান্ত করতে পারি যে, তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণ হলো ফোটনের প্রবাহ (stream of photons)। ফোটনগুলো শূন্যে (space) যেভাবে ভ্রমণ করে তরঙ্গ হলো তার গাণিতিক প্রকাশ।

ডেভিসন (Davisson), **গার্নার** (Gerner) এবং **থমসনের** (Thomson) পরীক্ষা প্রমাণ করে যে, ইলেক্ট্রন রশ্মিমালার অপবর্তন তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণের

অপবর্তনের মতোই। বিকিরণের শোষণ বা নিক্ষেপণ ছাড়া ইলেক্ট্রনের অবস্থান্তরের (transition) সম্ভাবনা কেন নেই সে সম্পর্কে কারণ অনুসন্ধানের গবেষণা এবং উপরিউক্ত পরীক্ষা থেকে বিজ্ঞানী **দ্য ব্রগলী** (De Broglie) ১৯২৪ সালে প্রস্তাব করেন যে, বস্তু ও তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণের ন্যায় একইভাবে তরঙ্গ-বস্তু দ্বৈত প্রকৃতি প্রদর্শন করে। কোনো কণার দ্বৈত প্রকৃতি প্রদর্শনকারী বিখ্যাত সমীকরণ দ্য ব্রগলী কর্তৃক সর্বপ্রথম প্রতিষ্ঠিত হয়। এ সমীকরণকে বস্তু তরঙ্গের **দ্য ব্রগলী সমীকরণ** বলা হয়। সমীকরণটি নিম্নরূপে উপপাদন করা যায়।

দ্য ব্রগলী সমীকরণ ঃ কোয়ান্টাম ধারণা অনুসারে ফোটনের শক্তি,

$$E = h\upsilon \qquad (২.১)$$

যেখানে h = প্ল্যাঙ্ক ধ্রুবক (6.627×10^{-34} J s) এবং υ = তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণের ফ্রিকুয়েন্সি (ফোটন)। এ সমীকরণ ফোটনের কণা ও তরঙ্গ প্রকৃতির সংযোগকে (combination) সমন্বিত (accomodate) করেছে। কারণ ফ্রিকুয়েন্সি তরঙ্গ প্রকৃতির সাথে সম্পর্কিত এবং শক্তি কণা প্রকৃতির উপর নির্ভরশীল। আইনস্টাইনের বিখ্যাত আপেক্ষিকতাবাদের (theory of relativity) ভর-শক্তি সম্পর্ক হলো

$$E = mc^2 \qquad (২.২)$$

যেখানে m ও c যথাক্রমে ফোটনের ভর ও বেগ। সমীকরণ (২.১) ও (২.২) হতে,

$$h\upsilon = mc^2$$

বা,
$$\frac{h\upsilon}{h} = mc = p \qquad (২.৩)$$

যেখানে p ফোটনের ভরবেগ। পুনরায় $\upsilon = \frac{c}{\lambda}$। সুতরাং সমীকরণ (২.৩) কে লেখা যায়

$$\frac{h}{\lambda} = p$$

বা,
$$\lambda = \frac{h}{p} \qquad (২.৪)$$

সমীকরণ (২.৪) কে দ্য ব্রগলীর **বস্তু-তরঙ্গ সমীকরণ** বলা হয়। এ সমীকরণ থেকে দেখা যায় যে, কোনো বস্তুর ভর তার তরঙ্গদৈর্ঘ্যের ব্যস্তানুপাতিক। অর্থাৎ ভর যতো ক্ষুদ্র হবে, তরঙ্গদৈর্ঘ্য ততো বড় হবে। যেহেতু ইলেক্ট্রনের ভর অতি ক্ষুদ্র, সুতরাং এর তরঙ্গদৈর্ঘ্য খুবই বড় হবে। অতএব, ইলেক্ট্রন মূলত কণা হলেও তা তরঙ্গ ধর্ম প্রদর্শন করে।

স্থুল বস্তুর ক্ষেত্রে এ সমীকরণের প্রযোজ্যতা মেনে নেয়া কষ্টসাধ্য। কারণ ভারি ভরের তরঙ্গদৈর্ঘ্য এতো ক্ষুদ্র হয় যে, তা সনাক্ত করা দুরূহ। এ সীমাবদ্ধতা সত্ত্বেও দ্য ব্রগলী অত্যন্ত দৃঢ়ভাবে ঘোষণা করেন যে, সমীকরণটি সব ধরনের বস্তুর ক্ষেত্রে প্রযোজ্য। অতএব m ভর এবং v বেগ বিশিষ্ট কোনো কণার দ্য ব্রগলী সমীকরণ নিম্নরূপে লেখা যায়। যথা,

$$\lambda = \frac{h}{mv} \tag{২.৫}$$

এখন দেখা যাক, কিভাবে কোন ইলেক্ট্রনের বেগ তড়িৎ ক্ষেত্রের উপর নির্ভর করে। ধরা যাক, চার্জ e বিশিষ্ট একটি ইলেক্ট্রনকে পটেনশিয়াল পার্থক্য, V (ইলেক্ট্রন ভোল্ট) এর মধ্য দিয়ে ভ্রমণ করতে দেয়া হলো। এর ফলে ইলেক্ট্রনের গতিশক্তি হবে,

$$\text{গতিশক্তি} = \frac{1}{2}mv^2 = Ve$$

বা, $$v^2 = \frac{2eV}{m}$$

বা, $$v = \sqrt{\frac{2eV}{m}} \tag{২.৬}$$

সমীকরণ (২.৫)-এ v এর মান বসিয়ে

$$\lambda = \frac{h}{(2meV)^{1/2}} \tag{২.৭}$$

যদি 30–40 কিলোভোল্ট পটেনশিয়াল পার্থক্যের মধ্য দিয়ে ইলেক্ট্রন ত্বরান্বিত করা হয়, তবে তাদের তরঙ্গদৈর্ঘ্য 0.006 – 0.007 nm হয়। এটি অপবর্তন প্রদর্শনের পক্ষে অতি ক্ষুদ্র। গ্যাসীয় অণুর মাত্রা নির্ণয়ের ক্ষেত্রে ইলেক্ট্রন অপবর্তন খুবই উপযোগী।

উদাহরণ ১ ঃ কোনো ইলেক্ট্রন 60×10^7 m s^{-1} বেগে ভ্রমণ করলে তার দ্য ব্রগলী তরঙ্গদৈর্ঘ্য কত হবে ? দেয়া আছে, $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s এবং ইলেক্ট্রনের ভর, $m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg।

সমাধান ঃ দ্য ব্রগলী তরঙ্গদৈর্ঘ্য,

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6.627 \times 10^{-34}\ \text{J s}}{9.1 \times 10^{-31}\ \text{kg} \times 6 \times 10^{7}\ \text{m s}^{-1}}$$

$$= 1.21 \times 10^{-11}\ \text{m}$$

$= 12.1$ pm (picometer)

উদাহরণ ২ ঃ কোনো ইলেক্ট্রনের 150 cV গতিশক্তি থাকলে তার দ্য ব্রগলী তরঙ্গদৈর্ঘ্য কত হবে ? দেয়া আছে, ইলেক্ট্রনের ভর, $m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg। এবং $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s এবং 1 eV $= 1.6 \times 10^{-19}$ J।

সমাধান ঃ ধরা যাক, ইলেক্ট্রনের গতিশক্তি ও ভরবেগ যথাক্রমে T এবং p

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

$$P = \sqrt{2mT} = \sqrt{2 \times 9.1 \times 10^{-31} kg \times 150 \times 1.6 \times 10^{-19} J}$$

$$= 6.609 \times 10^{-24} \text{ kg m s}^{-1}$$

অতএব, দ্য ব্রগলীর তরঙ্গদৈর্ঘ্য,

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.627 \times 10^{-34} \text{ J s}}{6.609 \times 10^{-24} \text{ kg m. s}^{-1}}$$

$$= 1.002 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$= 100.2 \text{ pm}$$

উদাহরণ ৩ ঃ V ভোল্ট পটেনশিয়াল পার্থক্যের মধ্য দিয়ে কোনো ইলেক্ট্রন ত্বরান্বিত করলে তার দ্য ব্রগলী তরঙ্গদৈর্ঘ্য কতো হবে ? দেয়া আছে, $e = 4.8 \times 10^{-10}$ e.s.u. $m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg এবং $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s।

সমাধান ঃ পটেনশিয়াল পার্থক্য, V-এর মধ্য দিয়ে যাবার সময় ইলেক্ট্রনটি গতিশক্তি অর্জন করে। ঐ গতিশক্তি হলো ঃ

$$\frac{1}{2} mv^2 = eV \text{ ইলেক্ট্রন ভোল্ট}$$

$$= \frac{eV}{300} \text{ আর্গ}$$

বা, $$m^2 v^2 = \frac{2eVm}{300}$$

বা, $$mv = p = \left(\frac{2eVm}{300}\right)^{1/2}$$

এখন $\lambda = \frac{h}{p} = h.(150/eVm)^{1/2}$

$$= \left(\frac{150}{V}\right) \frac{6.627 \times 10^{-34}\, J\, s}{4.8 \times 10^{-10}\, e.s.u. \times 9.1 \times 10^{-31}\, kg}$$

$$= \left(\frac{150}{V}\right) \times 10^{-10}\, m$$

উদাহরণ ৪ ঃ 200 ভোল্টের পটেনশিয়াল পার্থক্যের মধ্য দিয়ে কোনো ইলেক্ট্রনকে ত্বরান্বিত করা হলে তার দ্য ব্রগলী তরঙ্গদৈর্ঘ্য নির্ণয় কর। দেয়া আছে, $e = 4.8 \times 10^{-10}$ e.s.u., $m = 9.1 \times 10^{-28}$ gm এবং $h = 6.627 \times 10^{-27}$, erg-sec.।

সমাধান ঃ $\lambda = h\left(\frac{150}{meV}\right)^{1/2} = 6.627 \times 10^{-27}$ erg-sec

$$\times \left(\frac{150}{9.1 \times 10^{-28}\, gm \times 4.8 \times 10^{-10}\, e.s.u \times 200}\right)^{1/2}$$

$$= 0.86 \times 10^{-8}\, cm.$$

উদাহরণ ৫ ঃ 5×10^{-8} দ্য ব্রগলী তরঙ্গদৈর্ঘ্য বিশিষ্ট কোনো নিউট্রনের শক্তি নির্ণয় কর। দেয়া আছে, নিউট্রনের ভর = 1.67×10^{-21} gm এবং $h = 6.627 \times 10^{-27}$erg-sec।

সমাধান ঃ আমরা জানি, $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mT}}$

বা, $\lambda^2 = \frac{h^2}{2mT}$

বা, T = গতিশক্তি = $\frac{h^2}{2m\lambda^2}$

$$= \frac{6.627 \times 10^{-27} erg\text{-}sec}{2 \times 1.67 \times 10^{-21}\, gm \times (5 \times 10^{-8}\, cm)}$$

$$= 2.213 \times 10^{-11}\, erg$$

$$= \frac{2.213 \times 10^{-11}}{1.6 \times 10^{-12}}\, eV$$ (ইলেকট্রন ভোল্ট)

$$= (1eV = 1.6 \times 10^{-12} erg = 1.6 \times 10^{-19} J)$$

উদাহরণ ৬ : কোনো পরীক্ষায় ইলেক্ট্রন রশ্মিমালা 0.55 nm তরঙ্গ দৈর্ঘ্যের অপবর্তন প্রদর্শন করে। ইলেক্ট্রনের বেগ কতো হবে ?

ইলেক্ট্রনের ভর, $m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg এবং $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s

সমাধান : $p = \dfrac{h}{\lambda}$

বা $mv = \dfrac{h}{\lambda}$

বা $$v = \frac{h}{\lambda m} = \frac{6.627 \times 10^{-34} J\ s\ (kg\ m^2 s^{-2} s)}{0.55 \times 10^{-9}\ m \times 9.1 \times 10^{-31}\ kg}$$

$$= 1.324 \times 10^6\ m\ s^{-1}$$

উদাহরণ ৭ : 800 nm (ন্যানোমিটার) তরঙ্গদৈর্ঘ্য বিশিষ্ট ফোটনের ভরবেগ হিসাব কর। দেয়া আছে, $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s।

সমাধান :

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{6.627 \times 10^{-34}\ J\ s\ (kg\ m^2 s^{-2} s)}{800 \times 10^{-9}\ m}$$

$$= 8.284 \times 10^{-28}\ kg\ m\ s^{-1}$$

উদাহরণ ৮ : আলোর বেগে ভ্রমণরত এবং এক কোয়াণ্টাম শক্তি নিক্ষেপকারী ইলেক্ট্রনের তরঙ্গদৈর্ঘ্য নির্ণয় কর। দেয়া আছে, ইলেক্ট্রনের ভর,

$m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg এবং $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s।

সমাধান : বিকিরণের এক কোয়াণ্টামের শক্তি,

$$E = h\upsilon = hc/\lambda$$

পুনরায় আলোর বেগে ভ্রমণরত একটি ইলেক্ট্রনের শক্তি,

$E = mc^2$ (ভর শক্তি সম্পর্ক অনুযায়ী)

অতএব, $\dfrac{hc}{\lambda} = mc^2$

বা $\lambda = \frac{h}{mc} = \frac{6.627 \times 10^{-34} J\ s}{9.1 \times 10^{-31}\ kg \times 3 \times 10^{8}\ m\ s^{-1}}$

$= 2.427 \times 10^{-12}\ m$

$= 2.427\ pm$

উদহারণ ৯ ঃ ডেভিসন এবং গার্নার 200 eV শক্তির ইলেক্ট্রন রশ্মির অপবর্তন লক্ষ্য করেছে। ইলেক্ট্রনের ভর, $m = 9.108 \times 10^{-31}\ kg$ দ্য ব্রগলীর তরঙ্গদৈর্ঘ্য নির্ণয় কর।

সমাধান ঃ ইলেক্ট্রন রশ্মিমালার গতিশক্তি,

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

অতএব $p = \sqrt{2mE}$

এখন তরঙ্গদৈর্ঘ্য, $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$

$$= \frac{6.627 \times 10^{-34} J\ s}{(2 \times 9.108 \times 10^{-31}\ kg) \times (200 \times 1.6021 \times 10^{-19} J)}$$

$= 8.67 \times 10^{-11}\ m$

$(1 eV = 1.6021 \times 10^{-19} J)$

২.২ বস্তু তরঙ্গের পরীক্ষামূলক প্রমাণ
Experimental Evidence of Matter Waves

বস্তু-তরঙ্গ ধারণার পক্ষে প্রমাণস্বরূপ দুটি পরীক্ষা আছে। যথা,

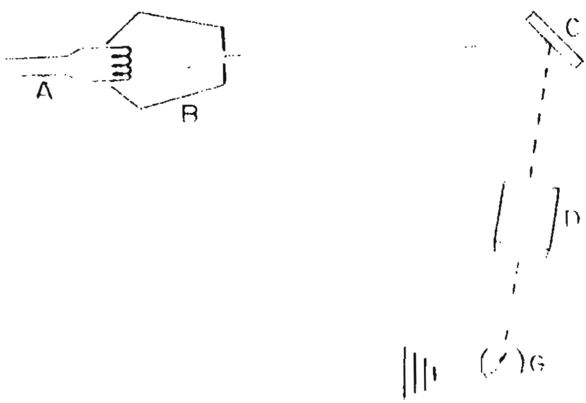
(ক) ডেভিসন ও গার্নার পরীক্ষা

(খ) জি.পি. থমসন পরীক্ষা

ডেভিসন ও গার্নার পরীক্ষা (Davisson and Gerner experiment) ঃ ইলেক্ট্রনের তরঙ্গ ধারণাকে পরীক্ষার মাধ্যমে প্রতিষ্ঠিত করবার অগ্রণী গবেষণা ছিল ডেভিসন ও গার্নার নামে দুই আমেরিকান পদার্থবিদের। ১৯২৭ সালে তাঁরা নিকেল লক্ষ্যবস্তু (target) থেকে ইলেক্ট্রনের প্রতিফলন অধ্যয়ন করেছিলেন। লক্ষ্যবস্তুটি তখন

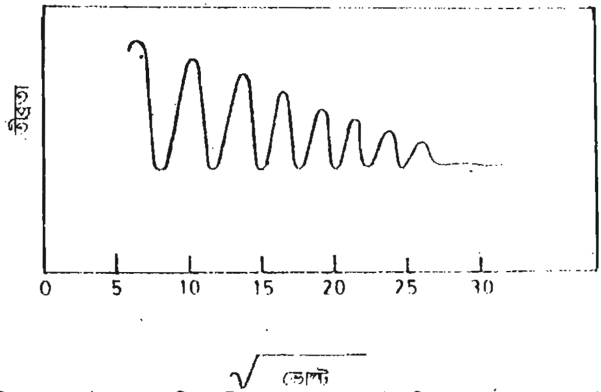
এমন তাপমাত্রায় উত্তপ্ত করা হয় যাতে তা একটি স্ফটিক গ্রুপে পরিণত হয়। বিজ্ঞানীদ্বয় বিস্ময়ের সাথে লক্ষ্য করেন, প্রতিফলনটি সত্যই ব্যতিক্রমী (anomalous) হয়েছে এবং প্রতিফলিত তীব্রতায় উল্লেখযোগ্য ম্যাক্সিমা (maxima) এবং মিনিমা (minima) রয়েছে। তাঁরা অনুমান করলেন যে, এক্সরে-এর ন্যায় ইলেক্ট্রন রশ্মিমালারও হয়তো বা অপবর্তন ঘটতে পারে।

২.১ চিত্রে পরীক্ষামূলক ব্যবস্থা দেখানো হলো। ইলেক্ট্রনগুলো লাল তপ্ত টাঙ্গস্টেন ফিলামেন্ট (A) থেকে নিক্ষিপ্ত হয়ে ইলেক্ট্রন বন্দুক (B) এর মধ্য দিয়ে নিকেল লক্ষ্যবস্তু (C)-এর উপর পড়ে। বিচ্ছুরিত ও যথেষ্ট শক্তিসম্পন্ন কতিপয় ইলেক্ট্রন সংগ্রাহক (collector) নামে পরিচিত ফ্যারাডে সিলিন্ডার D-তে প্রবেশ করে। একটি বর্ধিত (amplified) সংগ্রাহকে সুগ্রাহী গ্যালভানোমিটার (G) দ্বারা বিদ্যুৎপ্রবাহ মাপা হয়। সংগ্রাহকে প্রাপ্ত বিদ্যুৎপ্রবাহ সরাসরি ইলেক্ট্রন রশ্মিমালার তীব্রতা প্রদান করে। ইলেক্ট্রন বন্দুকের সাহায্যে ত্বরক পটেনশিয়াল (accelerating potential) পরিবর্তন করা যায়।



চিত্র ২.১ ঃ নিকেল লক্ষ্যবস্তু থেকে ইলেক্ট্রনের প্রতিফলন (ডেভিসন ও গার্নার পরীক্ষা)।

প্রকৃত পরীক্ষায় ডেভিসন ও গার্নার আপতন কোণ (angle of incidence) স্থির রেখে ত্বরক পটেনশিয়াল পরিবর্তন করেন এবং ইলেক্ট্রন রশ্মির তীব্রতা মাপেন। দেখা যায়, ইলেক্ট্রন রশ্মির তীব্রতা বনাম ত্বরক পটেনশিয়ালের বর্গমূলের লেখচিত্রে সমদূরবর্তী ম্যাক্সিমা উৎপন্ন হয়েছে (চিত্র ২.২)।



চিত্র ২.২ ঃ ইলেক্ট্রন রশ্মির তীব্রতা ও ত্বরক পটেনশিয়ালের মধ্যে সম্পর্ক।

ইলেক্ট্রন রশ্মির পরিবর্তে এক্স-রে ব্যবহার করলেও একই আচরণ লক্ষ্য করা যায়। অতএব এটি সিদ্ধান্ত করা যায় যে, ইলেক্ট্রন এক্সরে-এর ন্যায় আচরণ করে এবং ইলেক্ট্রনের তরঙ্গ প্রকৃতি রয়েছে। তাছাড়া অপবর্তন পরীক্ষা থেকে যেভাবে এক্সরের তরঙ্গদৈর্ঘ্য নির্ণয় করা যায়, ইলেক্ট্রনের তরঙ্গদৈর্ঘ্য সেভাবে নির্ণয় করা সম্ভব।

বিখ্যাত ব্রাগ সমীকরণ $n\lambda = 2d = \sin\theta$ (২.৮)

কে ইলেক্ট্রনের তরঙ্গদৈর্ঘ্য (λ) নির্ণয়ে ব্যবহার করা যায়। এখানে n = প্রতিফলনের ক্রম (order), d = আন্তঃপারমাণবিক দূরত্ব এবং θ = প্রতিফলন কোণ।

উদাহরণ ঃ ধরা যাক, 75 ভোল্ট দ্বারা ত্বরণকৃত কোনো ইলেক্ট্রন রশ্মি নিকেল স্ফটিক লক্ষ্যবস্তুর উপর পড়লে আপতিত রশ্মির সাথে 60^{0} কোণে সর্বোচ্চ তীব্রতা পাওয়া যায়। যদি স্ফটিকের আন্তঃপারমাণবিক দূরত্ব 0.12 nm হয় তবে ইলেক্ট্রনের তরঙ্গদৈর্ঘ্য নির্ণয় কর। দেয়া আছে, প্রতিফলনের ক্রম এক।

সমাধানঃ আমরা জানি, $n\lambda = 2d\sin\theta$

বা $$\lambda = \frac{2d\sin\theta}{n} = \frac{2\times 0.12\times\sin 60}{1}$$

$$= 2\times 0.12\times\sqrt{3/2} = 0.208 \text{ nm}$$

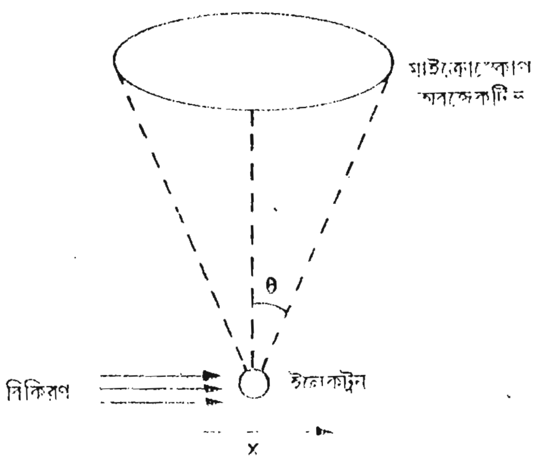
২.৩ হাইজেনবার্গ অনিশ্চয়তা নীতি
Heisenberg Uncertainty Principle

যদিও বস্তু রতঙ্গ ও কণার দ্বৈত প্রকৃতি প্রদর্শন করে, তথাপি সনাতন বলবিদ্যায় এটি একটি সমস্যা যে, কোনো বিশেষ সময়ে যুগপৎভাবে অবস্থান কোঅর্ডিনেট এবং

ভরবেগের উপাদানের মতো গতীয় অপেক্ষক খুব বেশি শুদ্ধভাবে মাপা যায় বলে মনে হয় না। এ সম্পর্কে খুবই যৌক্তিক প্রশ্ন হলো, কেন তা সম্ভব নয় ? এ প্রশ্নটির উত্তর সরলভাবে নিম্নরূপে দেয়া যায়। উদাহরণস্বরূপ, বস্তু (যেমন, ইলেক্ট্রন) একই সাথে দুটি বৈশিষ্ট্য (তরঙ্গ ও কণা) প্রদর্শন করতে পারে না। কোয়ান্টাম মেকানিক্যাল সিস্টেমের প্রকৃত আচরণের সূক্ষ্ম বিশ্লেষণ থেকে দেখা গেছে, একটি বিশেষ শুদ্ধতা সীমা পর্যন্ত গতীয় অপেক্ষক (অবস্থান ও ভরবেগ) মাপা যেতে পারে। ১৯২৭ সালে বিজ্ঞানী **হাইজেনবার্গ** এ সীমার মধ্যে একটি সম্পর্ক আবিষ্কার করেন। একে **হাইজেনবার্গ অনিশ্চয়তা নীতি** বলে। এ নীতি অনুসারে, যদি Δx এবং Δp যুগপৎভাবে মাপিত ইলেক্ট্রনের অবস্থান এবং ভরবেগের অনিশ্চয়তা হয় তবে অনিশ্চয়তাগুলির গুণফল প্ল্যাঙ্কের ধ্রুবক h-এর সমান হবে। অর্থাৎ

$$\Delta x \cdot \Delta p \approx h \qquad (২.৯)$$

সম্পর্কটিকে এখন গাণিতিকভাবে যাচাই করা যাক। ধরা যাক, কোনো ইলেক্ট্রনের গতি অনুসন্ধান করার জন্য আমরা তার অবস্থান ও ভরবেগ মাপতে চাই। এ কাজে একটি মাইক্রোস্কোপ ব্যবহার করলেই চলে (চিত্র ২.৩)।



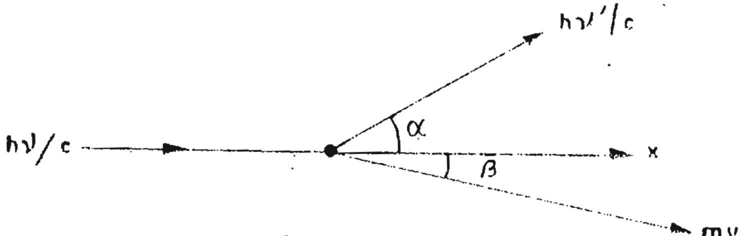
চিত্র ঃ ২.৩

মাইক্রোস্কোপ দ্বারা যে শুদ্ধতাসহ x-এর দিকে দূরত্ব মাপা সম্ভব তা বিকিরণের তরঙ্গ-দৈর্ঘ্য দ্বারা সীমিত হয়ে যায় এবং এ সীমা হলো ঃ $\dfrac{\lambda}{2\sin\theta}$

এটি ইলেক্ট্রনের অবস্থান নির্ণয়ের অনিশ্চয়তা। অর্থাৎ

$$\Delta x = \frac{\lambda}{\sin\theta} \qquad (২.১০)$$

কেউ হয়তো ভাবতে পারেন যে, ক্ষুদ্র তরঙ্গদৈর্ঘ্যের আলো ব্যবহার করে এ সীমাবদ্ধতা দূর করা সম্ভব। এটি করতে গেলে কম্পটন ফলাফল নামক একটি নতুন সমস্যা দেখা দেবে। উদাহরণস্বরূপ, যদি $h\upsilon$ শক্তি এবং $h\upsilon/c$ ভরবেগসম্পন্ন একটি ফোটন স্থির অবস্থায় থাকা একটি ইলেক্ট্রনকে আঘাত করে, তবে আঘাতের পর ফোটনের শক্তি হবে $h\upsilon'$ এবং ভরবেগ হবে $h\upsilon/c$। কিন্তু ইলেক্ট্রনের গতিশক্তি $\frac{1}{2}mv^2$ এবং ভরবেগ mv হবে। এখানে m = ইলেক্ট্রনের আপেক্ষিকতাবাদী (relativistic) ভর এবং v = ইলেক্ট্রনের বেগ। নিচের চিত্রে তা দেখানো হলো।



চিত্র ২.৪ ঃ কম্পটন ফলাফল।

শক্তি সংরক্ষণ সূত্র অনুসারে,

$$h\upsilon = h\upsilon' + \frac{1}{2}mv^2 \qquad (২.১১)$$

কিন্তু ভরবেগের সংরক্ষণ সূত্র অনুসারে (মূল ফোটনের দিকে)

$$\frac{h\upsilon}{c} = \frac{h\upsilon'}{c}\cos\alpha + mv\cos\beta \qquad (২.১২)$$

এবং ফোটনের দিকের সাথে লম্ব দিকে

$$0 = \frac{h\upsilon'}{c}\ \text{in}\ \alpha + mv\sin\beta \qquad (২.১৩)$$

অতএব ভরবেগের x উপাদান (component) হবে,

$$mv\cos\beta = p_x = \frac{h}{c}(\upsilon - \upsilon' \cos\alpha) \qquad (২.১৪)$$

আমাদের উদ্দেশ্য সাধনের জন্য যদি $\upsilon = \upsilon'$ ধরি, তবে যথেষ্ট শুদ্ধ ফলাফল লাভে কোনো বিঘ্ন ঘটবে না। ফলে

$$px = \frac{h\upsilon}{c}(1 - \cos\alpha)$$

$$= \frac{h}{\lambda}(1 - \cos\alpha) \qquad (২.১৫)$$

এখন যদি $90^o - \theta$ কোণটি এবং $90^o + \theta$ এর মধ্যে থাকে, তবে ইলেক্ট্রন দ্বারা বিচ্ছুরিত আলো মাইক্রোস্কোপে দেখা সম্ভব। অতএব ইলেক্ট্রনের ভরবেগের x উপাদান নিম্নের সীমায় পড়বে।

$$\frac{h}{\lambda}[1 - \cos(90^o - \theta)] \le p_x \le \frac{h}{\lambda}[1 - \cos(90^o + \theta)]$$

বা $$\frac{h}{\lambda}(1 - \sin\theta) \le p_x \le \frac{h}{\lambda}(1 + \sin\theta) \qquad (২.১৬)$$

সুতরাং ভরবেগের অনিশ্চয়তা দাঁড়ায়,

$$\Delta p_x = \frac{h}{\lambda}(1 + \sin\theta) - \frac{h}{\lambda}(1 - \sin\theta)$$

$$= \frac{2h}{\lambda}\sin\theta \qquad (২.১৭)$$

সমীকরণ (২.১০) ও (২.১৭) ব্যবহার করে অবস্থান ও ভরবেগের অনিশ্চয়তার গুণফল

$$\Delta p_x \cdot \Delta x = \frac{2h\sin\theta}{\lambda} \cdot \frac{\lambda}{2\sin\theta} \approx h \qquad (২.১৮)$$

এ গুণফল আলোর তরঙ্গদৈর্ঘ্যের উপর নির্ভর করে না।

লেন্সের রন্ধ্র (aperture) সরু করে ভরবেগের অশ্চিয়তা কমানো যায়। কিন্তু এতে অপবর্তন ফলাফল বৃদ্ধির কারণে বিশ্লেষণ ক্ষমতাও কমে যায়। ফলে অবস্থান মাপনে অনিশ্চয়তা বৃদ্ধি পায়। পুনরায় হ্রস্ব তরঙ্গদৈর্ঘ্য ব্যবহার করে অবস্থান মাপনে শুদ্ধতা বৃদ্ধির চেষ্টা করলে ভরবেগের মাপনে শুদ্ধতা হ্রাস পায়। এটি প্রকৃতির মৌলিক সূত্র।

সময়-শক্তি অনিশ্চয়তা (Time-energy uncertainties) ঃ ইলেক্ট্রন বা যে কোনো কণার ক্ষেত্রে অবস্থান-ভরবেগ অনিশ্চয়তার মতো সময়-শক্তি অনিশ্চয়তা রয়েছে। এসব অনিশ্চয়তা নিম্নরূপে উপপাদন করা যায়। যথা,

$$\Delta E = \Delta \frac{1}{2} mv^2 = \Delta \frac{p^2}{2m} \approx p \frac{\Delta p}{m} \quad (২.১৯)$$

এবং $$\Delta t = \frac{\Delta x}{v} = \frac{\Delta x}{p/m} = \frac{\Delta x . m}{p} \quad (২.২০)$$

সুতরাং সমীকরণ (২.১৯) ও (২.২০) থেকে,

$$\Delta E . \Delta t = p \frac{\Delta p}{m} \times \frac{\Delta x . m}{p} = \Delta p . \Delta x \approx h \quad (২.২১)$$

উদাহরণ ১ ঃ কোনো ইলেক্ট্রন যখন 3×10^5 m s^{-1} বেগের অনিশ্চয়তায় ভ্রমণ করে তখন তার অবস্থানের অনিশ্চয়তা কতো হবে ?

দেয়া আছে, ইলেক্ট্রনের ভর, $m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg এবং $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s।

সমাধান ঃ আমরা জানি, $\Delta p_x . \Delta x = h$

বা $$\Delta x = \frac{h}{\Delta p_x} = \frac{h}{\Delta (mv)} = \frac{h}{m \Delta v}$$

এখানে $\Delta v = 3 \times 10^5$ m s^{-1}

$m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg

এবং $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s

অতএব, $$\Delta x = \frac{6.627 \times 10^{-34} \text{ J s}}{9.1 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 3 \times 10^5 \text{ m s}^{-1}}$$

$$= 2.4 \times 10^{-9} \text{ m} = 2.4 \text{ nm}$$

উদাহরণ ২ ঃ কোনো কণার অবস্থানের অনিশ্চয়তা 0.002 nm হলে তার ভরবেগের অনিশ্চয়তা কতো হবে ? দেয়া আছে, $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s।

সমাধান ঃ অনিশ্চয়তা নীতি অনুসারে

$$\Delta p_x . \Delta x = h$$

বা $$\Delta p_x = \frac{h}{\Delta x} = \frac{6.627 \times 10^{-34} \text{ J s}}{0.002 \times 10^{-9} \text{ m}}$$

$$= 3.314 \times 10^{-22} \text{ kg m s}^{-1}$$

উদাহরণ ৩ ঃ কোনো পরমাণুর উত্তেজনা ও বিকিরিত শক্তির নিক্ষেপণের মধ্যকার গড় সময় 10^{-8} s। ফোটনের শক্তির অনিশ্চয়তা নির্ণয় কর।

দেয়া আছে, $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s

সমাধান ঃ সময়-শক্তি অনিশ্চয়তা নীতি থেকে,

$$\Delta E.\Delta t = h$$

$$\Delta E = \frac{h}{\Delta t} = \frac{6.627 \times 10^{-34} \text{ J s}}{10^{-8} \text{ s}}$$

$$= 6.627 \times 10^{-26} \text{ J}$$

$$= \frac{6.627 \times 10^{-26} \text{ eV}}{1.6 \times 10^{-19}}$$

$$= 4.142 \times 10^{-7} \text{ eV (ইলেক্ট্রন ভোল্ট)}$$

উদাহরণ ৪ ঃ 98% শুদ্ধতায় কোনো ইলেক্ট্রনের বেগ 3×10^4 m s^{-1}। ইলেক্ট্রনের অবস্থানের অনিশ্চয়তা নির্ণয় কর। দেয়া আছে, ইলেক্ট্রনের ভর = 9.1×10^{-31} kg এবং $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s।

সমাধান ঃ তাত্ত্বিকভাবে ইলেক্ট্রনের শুদ্ধ বেগ

$$= \frac{3 \times 10^4 \text{ m s}^{-1}}{98\%} = \frac{3 \times 10^4 \text{ m s}^{-1}}{98} \times 100$$

$$= 3.061 \times 10^4 \text{ m s}^{-1}$$

সুতরাং বেগের অনিশ্চয়তা, $\Delta v = (3.061 \times 10^4) - (3 \times 10^4)$ m s^{-1}

$$= 0.061 \times 10^4 \text{ m s}^{-1}$$

অনিশ্চয়তা সম্পর্ক হতে,

$$\Delta p \,.\, \Delta x \approx h$$

বা, $$\Delta x = \frac{h}{\Delta p} = \frac{h}{\Delta(mv)} = \frac{h}{m\Delta v}$$

$$= \frac{6.627 \times 10^{-34} \text{ J s}}{9 \times 10^{-31} \text{ kg} \times 0.0061 \times 10^4 \text{ m s}^{-1}}$$

$$= 11.94 \times 10^{-7} \text{ m}$$

প্রশ্নাবলি

২.১। কণার তরঙ্গ ধর্ম প্রদর্শনকারী দ্য ব্রগলী সম্পর্ক উপপাদন কর।

২.২। দেখাও যে, ভর m এবং গতিশক্তি T বিশিষ্ট কোনো ইলেক্ট্রনের সাথে জড়িত তরঙ্গদৈর্ঘ্যের সম্পর্ক নিম্নের সমীকরণ দ্বারা প্রকাশ করা যায় ঃ

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mT}}$$

২.৩। 20 eV শক্তিসম্পন্ন কোনো ইলেক্ট্রনের দ্য ব্রগলী তরঙ্গদৈর্ঘ্য নির্ণয় কর।

উত্তর ঃ $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mT}} = 0.275$ nm

২.৪। 5×10^7 m s^{-1} (মিটার প্রতি সেকেন্ড) বেগে ভ্রমণরত একটি ইলেক্ট্রনের তরঙ্গদৈর্ঘ্য হিসাব কর। দেয়া আছে, ইলেক্ট্রনের ভর 9.1×10^{-31} kg।

(উত্তর ঃ 0.01456 nm)

২.৫। পটেনশিয়াল পার্থক্য, V-এর মধ্য দিয়ে ত্বরণকৃত কোনো ইলেক্ট্রনের দ্য ব্রগলী তরঙ্গদৈর্ঘ্যের সম্পর্ক উপপাদন কর।

২.৬। বস্তু তরঙ্গের পরীক্ষামূলক প্রমাণ দাও।

২.৭। বস্তু তরঙ্গের পরীক্ষামূলক প্রমাণ দেয়ার জন্য ডেভিসন ও গার্মারের পরীক্ষা বর্ণনা কর।

২.৮। হাইজেনবার্গের অশ্চিয়তা নীতি কি ? গাণিতিক সমর্থনসহ তা ব্যাখ্যা কর।

২.৯। হাইজেনবার্গের অশ্চিয়তা নীতির সম্পর্ক, $\Delta p_x . \Delta x = h$ উপপাদন কর।

২.১০। 1.1nm বাক্সে আবদ্ধ একটি ইলেক্ট্রন ও একটি প্রোটনের বেগের অনিশ্চয়তা কতো হবে ?

(উত্তর ঃ 6.62×10^5 m s^{-1} এবং 3.6×10^2 m s^{-1}

২.১১। একটি 4 গ্রামের বুলেট যা লক্ষ্যবস্তুকে 10^{-4} m এর জন্য লক্ষ্যভেদ করতে পারেনি, তার বেগের অনিশ্চয়তা কতো হবে ? দেয়া আছে, $h = 6.627 \times 10^{-34}$ J s।

(উত্তর ঃ 1.657×10^{-27} m^{-1})

২.১২। একজন বিশেষজ্ঞ ব্যাটসম্যান তার ক্রিকেট ব্যাটের মধ্যস্থান দ্বারা ১৫০ গ্রাম ওজনের ক্রিকেট বলকে আঘাত করতে চেয়েছিল। কিন্তু বলটি ব্যাটের মধ্যস্থলে না লাগায় বরের গতি প্রত্যাশার চেয়ে 10^{-7}km s^{-1} (কিলোমিটার প্রতি সেকেন্ড) কম হলো। ব্যাটসম্যানের প্রত্যাশার অনিশ্চয়তা কতো হবে ?

(উত্তর ঃ $\Delta x = 4.42 \times -10^{-30}$ m)

২.১৩। মৌলিক কণিকার দ্বৈত আচরণ বলতে কি বোঝায় ? দ্য ব্রগলীর তরঙ্গ-কণার দ্বৈত আচরণের সম্পর্ক উপপাদন কর।

[রা. বি., এম. এস- সি. (শেষবর্ষ), ১৯৯৭]

তৃতীয় অধ্যায়

তরঙ্গ বলবিদ্যা
(WAVE MECHANICS)

৩.১ তরঙ্গ বলবিদ্যার মূল স্বীকার্য
Basic Postulates of Wave Mechanics

স্বীকার্য বর্ণনার পূর্বে অবস্থা (state) অবস্থা অপেক্ষক (state function) এবং অপারেটর সম্পর্কে আলোচনা করা আবশ্যক।

(ক) অবস্থা ও অবস্থা অপেক্ষক (State and state function) : ১৯১৩ সালে বিজ্ঞানী বোর (Bohr) তাঁর হাইড্রোজেন পরমাণু সংক্রান্ত বিখ্যাত তত্ত্বে প্রস্তাব করেন যে, কোনো বিশেষ কক্ষপথে (orbit) ইলেক্ট্রন তড়িৎ-চৌম্বক বিকিরণ নিক্ষেপণ ছাড়াই নিউক্লিয়াসের চারদিকে ঘুরতে পারে। এসব সুস্থিত (stable) বা স্থির কক্ষপথ (stationary orbit) ফেজ ইন্টিগ্রালরূপে বোর-সোমারফেল্ড কোয়ান্টাম শর্ত দ্বারা নির্ণীত হয়েছে ঃ

$$\oint pdq = nh \qquad (৩.১)$$

যেখানে p = ভরবেগ। এসব স্থির কক্ষপথে ইলেক্ট্রনের কৌণিক ভরবেগ সমীকরণ (৩.১) থেকে পাওয়া যায়।

$$\int_0^{2\pi r} mvdr = mv \times 2\pi r = 2\pi\ (mvr)$$

$$= 2\pi \times \text{কৌণিক ভরবেগ}$$

$$= nh$$

অতএব, কৌণিক ভরবেগ $= \dfrac{nh}{2\pi}$ (৩.২)

এসব স্থিরাবস্থার সুনির্দিষ্ট (definite) ধারাবাহিকতাহীন (discrete) শক্তি আছে। হাইড্রোজেন পরমাণুর বর্ণালী সম্পর্কে পূর্বানুমান (predict) করাই ছিল কোয়ান্টাম সীমাবদ্ধকরণের (restriction) একমাত্র কারণ।

চারটি মূল স্বীকার্য ব্যবহার করে তরঙ্গ বলবিদ্যা থেকে স্থিরাবস্থার ধারণা পাওয়া যেতে পারে। তরঙ্গ বলবিদ্যায় এ অবস্থাকে একটি পরিবর্তনীয় (variable) অপেক্ষক (function) ψ দ্বারা বর্ণনা করা হয়। এ অবস্থা অপেক্ষক (একে আইগেন ফাংশন বা অপেক্ষক বা তরঙ্গ অপেক্ষক বলে) থেকে গড় শক্তি, গড় ভরবেগ, গড় অবস্থান, ঘনত্ব প্রভৃতি গুরুত্বপূর্ণ তথ্য পাওয়া যায় (তরঙ্গ বলবিদ্যার সূত্র ব্যবহার করে)।

প্রকৃতপক্ষে অবস্থা অপেক্ষক ψ হলো অক্ষ (co-ordinate) (কার্টেশীয় বা পোলার) এবং সময়ের অপেক্ষক। অর্থাৎ

$$\psi = \psi \ (x, y, z, \ldots\ldots. t) \qquad (৩.৩)$$

যদি অপেক্ষকটি সময়ের সাথে পরিবর্তিত না হয়, তবে দেখা যায়,

$$\psi = \psi \ (x, y, z, \ldots\ldots.) \qquad (৩.৪)$$

যা কেবল স্পেস অক্ষের (space co-ordinate) অপেক্ষক।

অপেক্ষক ψ কেবল তখনই গ্রহণযোগ্য হবে, যখন তা নিম্নের শর্ত অনুসরণ করবে ঃ

(ক) ψ অবিচ্ছিন্ন (continuous) হওয়া উচিত,
(খ) ψ-এর একটি অবিচ্ছিন্ন ঢাল (slope) থাকা উচিত,
(গ) ψ–কে একক মানসম্পন্ন (single valued) হবে,
(ঘ) ψ–কে অবশ্যই সসীম (finite) হতে হবে।

তরঙ্গ অপেক্ষকের সসীম প্রকৃতি তখন বুঝা যায়, যখন অপেক্ষকটি বর্গ সমাকলন-যোগ্য হয়। অর্থাৎ

$$\int \psi^*\psi \, d\tau < \infty \qquad (৩.৫)$$

যেখানে সমাকলনটি সমগ্র স্পেসের উপর করা হয়েছে এবং $d\tau$ ক্ষুদ্র আয়তনে সংক্ষিপ্তরূপ (abbreviation)।

$$d\tau = dx.\, dy.\, dz \qquad (৩.৬)$$

তারকা চিহ্নের অর্থ হলো যদি ψ একটি জটিল (complex) হয়, তবে তার জটিল কনজুগেট ψ^* কে অবশ্যই ব্যবহার করতে হবে। সমীকরণ (৩.৫) থেকে এটি বুঝা যায়

যে, অবস্থা অপেক্ষক, ψ সঙ্গতকরণযোগ্য (normalizable)। তার অর্থ হলো, যদি $\int\psi^*\psi\, d\tau = N$ হয় তবে অন্য অপেক্ষক $\phi = \frac{1}{\sqrt{N}}\psi$ এবং

$$\int \phi^*\phi\, d\tau = 1 \qquad (৩.৭)$$

যেখানে $\frac{1}{\sqrt{N}}$ কে সঙ্গতকরণ ধ্রুবক (normalization constant) বলে। এখন থেকে আমরা ϕ-এর পরিবর্তে ψ ব্যবহার করব, যার মধ্যে একটি নতুন ফ্যাকটর $\frac{1}{\sqrt{N}}$ অন্তর্ভুক্ত। ফলে আমরা পাই,

$$\int \psi^*\psi\, d\tau = 1 \qquad (৩.৮)$$

একমাত্র ψ অপেক্ষকের মাধ্যমেই স্থুল জগতের (miacroscopic world) সাথে সূক্ষ্ম জগতের (microscopic world) যোগাযোগ ঘটে। এটি বলার অপেক্ষা রাখে না যে $\psi^*\psi$ হলো পারমাণবিক জগতে প্রবেশের জানালা।

(খ) অপারেটর (Operator) ঃ অপারেটরের ধারণা কোয়ান্টাম বলবিদ্যায় একটি গুরুত্বপূর্ণ ভূমিকা পালন করে। কোনো অপারেটর হলো একটি সংকেত (symbol) যা কোনো বিশেষ গাণিতিক অপারেশনের (operation) বহিঃপ্রকাশ। নিম্নে কতিপয় অতি পরিচিত অপারেটর দেয়া হলো ঃ

সংগে যোগ করা	[+ x]
সমাকলন করা	[$\int$ .... d x]
x এর প্রেক্ষিতে আংশিকভাবে ব্যবকলন করা	[d/dx]

এখানে অপারেটরের সংকেত বর্গ বন্ধনীর মধ্যে দেখানো হয়েছে। স্পষ্টভাবে প্রতীয়মান যে, এসব অপারেটর অপেক্ষকের কাজ করে। অপারেটরগুলো ধারাবাহিকভাবে প্রয়োগ করা যেতে পারে। কিন্তু তাদের প্রয়োগটাই গুরুত্বপূর্ণ। অপারেটর যে অপেক্ষক বা ধ্রুবকের উপর ক্রিয়া করে তাকে **অপারান্ড** (operand) বলে।

তরঙ্গ বলবিদ্যার সমীকরণ উপপাদনের জন্য স্বীকার্য (Postulates) আবশ্যক। এসব স্বীকার্যের কোনো পরম প্রমাণ নেই। কিন্তু তারা যে সিদ্ধান্ত দেয় তা পরীক্ষার সঙ্গে সম্পূর্ণ মিলে যায় এবং তা থেকে তাদের যথার্থতা প্রমাণিত হয়।

(১) **স্বীকার্য-এক** ঃ এক স্বাতন্ত্র্য-মাত্রা (degree of freedom) বিশিষ্ট প্রত্যেক সিস্টেমের সঙ্গে একটি তরঙ্গ অপেক্ষক, ψ (x, t) জড়িত থাকে।

(২) **স্বীকার্য-দুই** ঃ সনাতন বলবিদ্যার প্রতিটি অবজার্ভ্যাবল্ (observeable)-কে কোয়ান্টাম বলবিদ্যায় উপযুক্ত অপারেটর দ্বারা প্রতিস্থাপিত করা হয়।

উদাহরণস্বরূপ, নিচে একটি ছক দেয়া হলো ঃ

	সনাতন অবজার্ভ্যাবল	অপারেটর
(গতীয় চলক)		
অবস্থান ঃ সমরৈখিক	x_j	x_j
ভরবেগ ঃ	p_x (J)	$\frac{h}{2\pi i} \cdot \frac{d}{dx_j}$
কৌণিক ভরবেগের x উপাদান ঃ	X_j	$\frac{h}{2\pi i} \left(y_j \frac{\partial}{\partial x_j}\right) - \left(Z_j \frac{\partial}{\partial y_j}\right)$

সিস্টেমের মোট শক্তি W-এর জন্য সনাতন সমীকরণ হলো

$$W = T + V(x) = \frac{1}{2m} p^2.x + V(x)$$

যেখানে $p_x = m\ v_x$ (ভরবেগের x উপাদান) এবং V(x) স্থৈতিক শক্তি (potential energy)। n কণা ঘটিত কোনো সিস্টেমের **হ্যামিলটনীয় অপারেটর** (Hamiltonian operator) ব্যবহার করে উক্ত মোট শক্তি লেখা যায় নিম্নরূপে ঃ

$$H = T + V$$

$$= \backslash F(1,2) \sum_{j=i}^{n} \backslash F\ (1,mj)\ \backslash B \sum_{j=i}^{n} (p^2xj + p^2yj + p^2zj)$$

$$+ V(x \ldots\ldots 7) \qquad (৩.৯)$$

একক কণার ক্ষেত্রে এ সমীকরণ হবে

$$H = \frac{1}{2m} (p^2x + p^2y + p^2z) + V\ (x, y, z) \qquad (৩.১০)$$

(৩) **স্বীকার্য-তিন** ঃ তরঙ্গ অপেক্ষক ψ (x, y, z, t) এবং তার প্রথম ডেরিভেটিভকে অবিচ্ছিন্ন, সসীম একক মানসম্পন্ন হতে হবে এবং সমগ্র কনফিগারেশন স্পেস (configuration space) ব্যাপীই তা হওয়া উচিত।

(৪) **স্বীকার্য-চার** ঃ ψ অবস্থা অপেক্ষা বিশিষ্ট কণাটিকে যে সম্ভাব্যতায় কনফিগারেশন স্পেসের ক্ষুদ্র আয়তনে (volume element) দেখতে পাওয়া যায়, গুণফল, $\psi^*\psi$ সেই সম্ভাব্যতার পরিমাপক। যেহেতু প্রতিটি ভেরিয়েবলের একটি নির্দিষ্ট মান আছে, সুতরাং মোট সম্বাব্যতা হবে একক (unity)। সুতরাং

$$\int \psi^*\psi \, d\tau = 1 \qquad (৩.১১)$$

যেখানে সমাকলকটি (integral) অক্ষের সকল সম্ভাব্য মানের উপর ধরা হয়েছে। এখানে $\psi^*\psi$ সঙ্গতকৃত (normalized) বলে ধরা হয়। সমীকরণ (৩.১১)-কে 'সমাকলনযোগ্য বর্গ' (integrable square) বলা হয়ে থাকে।

(৫) **স্বীকার্য-পাঁচ** ঃ অপারেটরগুলি নির্দিষ্ট অবস্থা অপেক্ষক, ψ এর উপর ক্রিয়া করে (যার উপর উপরিউক্ত সীমাবদ্ধকরণ শর্ত আরোপ করা হয়েছে) অর্থাৎ $[Q\psi]$, যেখানে ψ কোনো সিস্টেমের স্থিরাবস্থার (stationary state) অবস্থা অপেক্ষক। এখন যদি কোনো অবজার্ভ্যাবল (Q যার অপারেটর) মাপা হয়, তবে যে সম্ভাব্য মান পাওয়া যায় তা হলো আইগেন মান q। নিচের সমীকরণ দ্বারা এটি দেখানো হলো ঃ

$$[Q\,\psi] = q\psi \qquad (৩.১২)$$

(৬) **স্বীকার্য-ছয়** ঃ অবজার্ভ্যাবল q (Q যার অপরেটর)-এর বহুসংখ্যক মাপনের গড় হলো ঃ

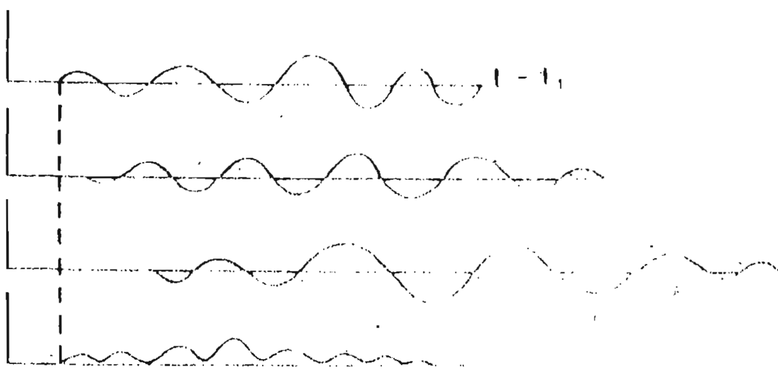
$$\bar{q} = \frac{\int \psi^* Q\psi \, d\tau}{\int \psi^*\psi \, d\tau} \qquad (৩.১৩)$$

যেখানে q-এর উপর বার চিহ্ন (–) q এর গড় মান বুঝানোর জন্য ব্যবহার করা হয়েছে। যখন সঙ্গতকৃত কোনো অপেক্ষক ব্যবহার করা হয়, তখন সমীকরণ (৩.১৩)-এর হরের মান একক হয়। ফলে সমীকরণ (৩.১৩) দাঁড়ায়,

$$\bar{q} = \int \psi^* Q\psi \, d\tau \; \ldots \qquad (৩.১৪)$$

স্বীকার্য সম্পর্কে সাধারণ আলোচনা (General discussion of the postulates) ঃ উপরিউক্ত স্বীকার্যগুলির মধ্যে কোয়ান্টাম বলবিদ্যার নির্যাস (essence) রয়েছে। এগুলিকে সহজেই সরল সিস্টেমের ক্ষেত্রে প্রয়োগ করা যায় এবং

তা থেকে সহজেই মাত্রিক ফল পাওয়া সম্ভব। বিশেষত তড়িৎ-চৌম্বক ক্ষেত্রে সংশ্লিষ্ট অন্য ধরনের অপারেটর আছে, যদিও অধিকতর জটিল সিস্টেমের জন্য উপরের স্বীকার্যের সম্প্রসারণ দরকার তবুও উপরিউক্ত সরল স্বীকার্যগুলি অত্যন্ত তাৎপর্যপূর্ণ। কোয়ান্টাম বলবিদ্যা কি এবং কিভাবে তা ব্যবহার করা যায় সে সম্পর্কে ধারণা প্রদানে স্বীকার্যগুলির অবদান ব্যাপক।



চিত্র ৩.১ ঃ x দিকে ভ্রমণরত তরঙ্গ প্যাকেট। উল্লেখ যে, তরঙ্গ প্যাকেটের সামনে ও পিছনে শূন্য বিস্তার রয়েছে।

স্বীকার্য-এক এ তরঙ্গ অপেক্ষকের সংক্ষিপ্ত ধারণা দেয়া হয়েছে। তরঙ্গ সমীকরণ গঠন এবং বিশেষত অপারেটর প্রতিস্থাপনের নির্বাচন দ্বিতীয় স্বীকার্যে ইচ্ছানুযায়ী (arbitrarily) করা হয়েছে। অপারেটর প্রতিস্থাপনের ক্ষেত্রে আমাদের লক্ষ্য রাখা উচিত যে, শ্রডিঙ্গার তত্ত্ব প্রবর্তনকালে কণার তরঙ্গ ধর্ম সবেমাত্র স্বীকৃতি (appreciation) পেতে শুরু করেছিল এবং তার তরঙ্গ সমীকরণ সনাতন বলবিদ্যার তরঙ্গ সমীকরণের মতোই। স্বীকার্য-তিন থেকে তরঙ্গ অপেক্ষকের যে সব শর্ত পালন করা উচিত সে সম্পর্কে ধারণা পাওয়া যায়। সকল ভৌত তরঙ্গ (যেমনঃ পানির তরঙ্গ, শব্দ তরঙ্গ, ইলেক্ট্রনিক তরঙ্গ)-এর শর্তগুলি পালন করা উচিত। স্বীকার্য-চার এ সঙ্গতকরণের শর্তটি সবচেয়ে প্রত্যক্ষভাবে দর্শনযোগ্য তরঙ্গও পালন করে। যেমন, একটি দড়িতে উৎপন্ন তরঙ্গকে নির্দিষ্ট শক্তিসম্পন্ন

সসীম বিস্তারের (amplitude) একটি চক্র উৎপাদনের জন্য একটি নির্দিষ্ট পরিমাণ শক্তি অর্জন করতে হয়। যদি $y(x, t)$ কোনো দড়ির উপর সৃষ্ট তরঙ্গ হয়,তবে বিশৃংখলাটি সর্বদা আবদ্ধ থাকবে (যদিও তা সম্মুখ দিকে অগ্রসর হয়)। প্রতিবার y^2 (x,t) কার্ভের অধীনস্থ ক্ষেত্রফল সসীম হবে। y কে কোনো উপযুক্ত ধ্রুবক (appropriate constant) দ্বারা গুণ করে ক্ষেত্রফলকে একক করা যায় অর্থাৎ তাকে সঙ্গত করা সম্ভব।

স্বীকার্য- ছয় খুবই গুরুত্ব বহন করে। কারণ যে কেউ যে ফর্মুলা দ্বারা দৃষ্টিগোচর রাশি (observable quantity) গণনা করতে পারে যা পরবর্তীতে পরীক্ষামূলক মানের সাথে মিলিয়ে দেখা যায়।

তরঙ্গ সমীকরণ এবং তার গাণিতিক অর্থ
Wave Equation and its Mathematical Implication

৩.২ মাইক্রোস্কোপীয় সিস্টেম বা কণার ক্ষেত্রে শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণ Schrodinger Wave Equation for Microscopic System or Particle

১৯২৬ সালে বিজ্ঞানী **আরউইন শ্রডিঙ্গার** (Erwin Schrodinger) দ্য ব্রগলীর কণা-তরঙ্গ সম্পর্কের ($p= h/\lambda$) দ্বারা উৎসাহিত হন এবং সীমাবদ্ধ কণার সনাতন ধারণা প্রত্যাখ্যান বা বাতিল ঘোষণা করেন। তিনি তরঙ্গ বিস্তার-এর ন্যায় বণ্টিত ধরে কণার অবস্থানকে বর্ণনা করেন। আবক্রপথের সনাতন ধারণাকে প্রতিস্থাপিত করতে তিনি তরঙ্গ অপেক্ষকের ধারণা প্রবর্তন করেন। শ্রডিঙ্গার পরে দ্য ব্রগলীর বস্তু তরঙ্গের উন্নতি সাধন করে তরঙ্গ বলবিদ্যা নামে একটি ব্যাপক (rigorous) গাণিতিক তত্ত্ব প্রস্তাব করেন। এ বলবিদ্যায় ইলেক্ট্রন, ফোটন, পরমাণু প্রভৃতি সূক্ষ্ম কণা যেন তরঙ্গের ন্যায় আচরণ করে– এরূপ মনে করা হয়। তিনি ইলেক্ট্রন এবং অন্যান্য কণার ক্ষেত্রে ত্রি-মাত্রিক তরঙ্গ সমীকরণ উপপাদন করেন। এ সমীকরণকে **শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণ** বলা হয়। তরঙ্গ বলবিদ্যার একটি গুরুত্বপূর্ণ দিক হলো, মাইক্রোস্কোপীয় পারমাণবিক সিস্টেমের আচরণ বর্ণনায় এর অসাধারণ সাফল্য প্রদর্শন।

(ক) উপপাদন (Derivation) ঃ শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণের উপপাদনে ধরা যাক, একটি একক মাইক্রোস্কোপীয় কণার সাথে যে তরঙ্গ গতি জড়িত আছে তা একটি প্রসারিত দড়ির সাধারণ কম্পনের গতির মতোই। নিউক্লিয়াসের চারদিকে আবর্তনমান একটি ইলেক্ট্রনের গতির সংগে তরঙ্গ অপেক্ষক (wave function) উৎপাদনকারী

তরঙ্গ বৈশিষ্ট্য জড়িত থাকে। যদি t সময়ে কোনো বিন্দুতে x অক্ষবিশিষ্ট কোনো কম্পনের বিস্তার w হয় তবে তার তরঙ্গ গতি আংশিক ব্যবকলন সমীকরণ দ্বারা নিম্নরূপে প্রকাশ করা যায় ঃ

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} \qquad (৩.১৫)$$

যেখানে u= তরঙ্গ প্রবাহের বেগ। একে মাঝে মাঝে ফেজ বেগ (phase velocity) বলা হয়। পুনরায় w-কে নিম্নরূপে প্রকাশ করা যায়।

$$w = f(x) f'(t) \qquad (৩.১৬)$$

যেখানে $f(x)$ কেবল x কোঅর্ডিনেটের অপেক্ষক এবং $f'(t)$ কেবল t (সময়) এর অপেক্ষক। স্থির তরঙ্গের ক্ষেত্রে

$$f'(t) = A \sin 2\pi\upsilon t \qquad (৩.১৭)$$

যেখানে υ = কম্পনীয় ফ্রিকুয়েন্সি এবং A= ধ্রুবক = সর্বোচ্চ বিস্তার (maximum amplitude)।

অতএব $$w = f(x). A \sin 2\pi\upsilon t \qquad (৩.১৮)$$

সুতরাং $$\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = -f(x). 4\pi^2\upsilon^2 A \sin 2\pi\upsilon t$$

$$= -4\pi^2\upsilon^2 f(x) f'(t) \qquad (৩.১৯)$$

সমীকরণ (৩.১৬)-কে x-এর প্রেক্ষিতে দুবার ব্যবকলন করে পাওয়া যায়,

$$\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} f'(t) \qquad (৩.২০)$$

সমীকরণ (৩.১৫), (৩.১৯) এবং (৩.২০)-কে সমন্বিত করে পাওয়া যায়,

$$\frac{1}{u^2} \cdot \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} f'(t)$$

বা, $$\frac{1}{u^2}(-4\pi^2\upsilon^2)\, f(x).\, f'(t) = \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2}\; f'(t)$$

বা, $$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2\upsilon^2}{u^2} f(x) \qquad (৩.২১)$$

$$= -4\pi^2\left(\frac{\upsilon}{u}\right)^2 f(x)$$

$$= -\frac{4\pi^2}{\lambda^2} f(x) \qquad (৩.২২)$$

সমীকরণ (৩.২২) এক দিকের তরঙ্গ গতি প্রকাশ করছে। একে x, y ও z দ্বারা প্রকাশিত ত্রি-মাত্রিক গতির সমীকরণে রূপান্তরিত করা যায়।

এক-মাত্রিক অপেক্ষক, $f(x)$-কে যথাযথ ত্রি-মাত্রিক তরঙ্গ অপেক্ষক, $\psi(x, y, z)$ (যা তিনটি অক্ষের বিস্তার অপেক্ষক দ্বারা প্রতিস্থাপিত করলে দাঁড়ায়,

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi \qquad (৩.২৩)$$

বা, $$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi \qquad (৩.২৪)$$

যেখানে $\psi = \psi\,(x; y, z)$ ল্যাপলাসীয় অপারেটর (Laplacian operator),

$$\nabla \left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z}\right)$$ ব্যবহার করে,

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi = \nabla^2\psi = -\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi \qquad (৩.২৫)$$

সমীকরণ (৩.২৫) ইলেক্ট্রন, ফোটন এবং পরমাণুসহ সকল কণার ক্ষেত্রে প্রযোজ্য। দ্য ব্রগলীর সম্পর্ক ব্যবহার করে সমীকরণ (৩.২৫) এর রূপ হবে,

$$\nabla^2\psi = -\frac{4\pi^2 p^2}{h^2}\psi \qquad (৩.২৬)$$

এখানে $p =$ ভরবেগ এবং $h =$ প্ল্যাঙ্কের ধ্রুবক। পুনরায়

$$\underset{\text{মোট শক্তি}}{E} = \underset{\text{গতিশক্তি}}{T} + \underset{\text{স্থৈতিক শক্তি}}{V}$$

সুতরাং $T = E - V = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$ (৩.২৭)

সমীকরণ (৩.২৬) ও (৩.২৭) থেকে পাওয়া যায়

$$\nabla^2\psi = -\frac{4\pi^2}{h^2} 2mT\psi$$

$$= -\frac{4\pi^2}{h^2} 2m (E - V)\psi$$

বা, $$\nabla^2\psi + -\frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V)\psi = 0 \qquad (৩.২৮)$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V)\psi = 0 \qquad (৩.২৯)$$

সমীকরণ (৩.২৮) ও (৩.২৯)-কে **ত্রি-মাত্রিক শ্রডিঙ্গার সমীকরণ** বলে। বিজ্ঞানী শ্রডিঙ্গার এ সমীকরণ সর্বপ্রথম উপপাদন করেন।

(খ) তরঙ্গ সমীকরণের অপারেটর উপপাদন (Operator derivation of wave equation) ঃ অপারেটর উপপাদনে যে স্বীকার্য ব্যবহৃত হয় তার সাথে তরঙ্গ গতির কোনো সম্পর্ক আছে বলে আপাত দৃষ্টিতে মনে হয় না। সনাতন বলবিদ্যার অবস্থান ভরবেগ, শক্তি প্রভৃতি অবজার্ভ্যাবল রাশির প্রতিটির বিপরীতে একটি করে নির্দিষ্ট গাণিতিক অপারেটর আছে যার প্রকৃতি বা বৈশিষ্ট্য নতুন কোয়ান্টাম বলবিদ্যা দ্বারা স্বীকৃত। উপপাদনটি এ ধারণার উপর প্রতিষ্ঠিত। এ ক্ষেত্রে যে সব স্বীকার্য ব্যবহার করা হয় তারা হলোঃ

(১) অবস্থানের (q) কোঅর্ডিনেটের অনুরূপ অপারেশন ঐ কোঅর্ডিনেটের মান দ্বারা গুণন বুঝায়।

(২) ভরবেগ (p) প্রকাশকারী অপারেশন হলো ব্যবকলক অপারেটর (differential operator)। অর্থাৎ

$$p = \frac{h}{2\pi i} \frac{\delta}{\delta q} \qquad (৩.৩০)$$

যেখানে h = প্লাঙ্ক ধ্রুবক এবং $i = \sqrt{-1}$। এ উপপাদনে তরঙ্গ অপেক্ষক, ψ (সব কোঅর্ডিনেটের) ব্যবহার করা হয়, যা সমগ্র কনফিগারেশন স্পেসে একক মানসম্পন্ন, অবিচ্ছিন্ন এবং সসীম (continuous and finite) এবং $\psi^*\psi$ সম্ভাবনা অপেক্ষক (probability function) প্রকাশ করে। যদি Q কোনো অবজার্ভ্যাবল রাশির (বা ধর্ম) (যেমন, মোট শক্তি) সমতূল অপারেটর এবং α সেই অবজার্ভ্যাবলের সঠিক মান হয় তবে,

$$Q\psi = \alpha\psi \qquad (৩.৩১)$$

যার অর্থ হলো ψ এর উপর Q-এর অপারেশন α দ্বারা ψ-কে গুণ করার সমতুল (equivalent)। এখানে অপারেটর Q এর জন্য ψ হলো আইগেন অপেক্ষক (eigen function) এবং α হলো অনুরূপ আইগেন মান (eigen value)।

ধরা যাক, m ভরবিশিষ্ট একটি একক কণা (ধর, ইলেক্ট্রন) স্থৈতিক শক্তি, V [V(x, y, z)-এর সংক্ষিপ্ত রূপ] এর অনুরূপ একটি ক্ষেত্রে ভ্রমণ করছে। সমীকরণ (৩.৩০) থেকে পরস্পর লম্বদিকে অবস্থিত তিনটি অক্ষের দিকে ভরবেগ p_x, p_y এবং p_z এর অপারেটর হবে,

$$\left.\begin{aligned} p_x &= \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x} \\ p_x &= \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial y} \\ p_z &= \frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial z} \end{aligned}\right\} \qquad (৩.৩২)$$

অতএব, উপাদান ভরবেগগুলোর সাথে মোট ভরবেগের সম্পর্ক হবে

$$p^2 = p^2{}_x + p^2{}_y + p^2{}_z \qquad (৩.৩৩)$$

সমীকরণ (৩.৩২) ব্যবহার করে,

$$p^2 = -\frac{h^2}{4\pi^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \qquad (৩.৩৪)$$

ল্যাপলাসীয় অপারেটর প্রয়োগ করলে দাঁড়ায়,

$$p^2 = -\frac{h^2}{4\pi^2}\nabla^2 \qquad (৩.৩৫)$$

পুনরায় গতিশক্তি, T= মোট শক্তি, E – স্থৈতিক শক্তি, V

অর্থাৎ $$T = E - V \tag{৩.৩৬}$$

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

অতএব $$p^2/2m = E - V$$

বা $$p^2 = 2m (E - V) \tag{৩.৩৭}$$

সমীকরণ (৩.৩৫) এবং (৩.৩৭) থেকে পাওয়া যায়

$$2m (E - V) = - \frac{h^2}{4\pi^2} \nabla^2$$

বা $$\nabla^2 = - \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V)$$

বা $$\nabla^2 \psi = - \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi$$

বা $$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0 \tag{৩.৩৮}$$

পুনরায় মোট শক্তির জন্য **হ্যামিলটনীয় অপারেটর** (Hamiltonian operator), H নামে একটি নতুন অপারেটর ব্যবহার করে,

$$\begin{aligned} H &= E = T + V \\ &= \frac{p^2}{2m} + V \\ &= - \frac{h^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 + V \end{aligned} \tag{৩.৩৯}$$

এখন যদি E সিস্টেমটির কোনো নির্দিষ্ট আইগেন অবস্থার মোট শক্তির সঠিক মান (আইগেন মান) হয়, তবে সমীকরণ (৩.৩১) থেকে,

$$H\psi = E\psi$$

বা $$\left(- \frac{h^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 + V\right) \psi = E \psi$$

বা $$- \frac{h^2}{8\pi^2 m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi$$

বা $$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \cdot \psi = 0 \qquad (৩.৪০)$$

সমীকরণ (৩.৩৮) বা (৩.৪০)-এর যে কোনোটি ইতোপূর্বে অপারেটর ব্যবহার ছাড়াই যে সমীকরণ উপপাদন করা হয়েছে তা মতোই।

৩.৩ তরঙ্গ অপেক্ষক ψ এর ব্যাখ্যা ও তাৎপর্য

Interpretation and Significance of Wave Function ψ

ইতোপূর্বে ψ কে এক সেট ভেরিয়েবলের এমন একটি অপেক্ষকের অভিন্নরূপে গণ্য করা হয়েছে যা দক্ষভাবে কোনো সিস্টেমের অবস্থা বর্ণনা করতে পারে। ψ–কে অবস্থা অপেক্ষক (state function) বা তরঙ্গ অপেক্ষক (wave function) বা **আইগেন অপেক্ষক** বলা হয়। কোনো অপারেটর উক্ত অপেক্ষকের উপর ক্রিয়া করলে আমরা তখন তার সটিক মান াই। এসব মানকে **আইগেন মান** বলে।

কোনো নির্দিষ্ট সিস্টেমের তরঙ্গ অপেক্ষকের ভৌত তাৎপর্য নিম্নরূপে উপলব্ধি করা যায়।

এ সম্পর্কে অপরিহার্য ধারণা হলো, তরঙ্গ অপেক্ষকের বর্গ (অর্থাৎ ψ^2)-কে স্পেসে কোনো বিশেষ বিন্দুতে সিস্টেমটি (কণা)-কে দেখার সম্ভাবনার পরিমাপক হিসেবে গণ্য করা হয়।

কখনও কখনও তরঙ্গ অপেক্ষকে একটি পদ, i (কাল্পনিক রাশি $\sqrt{-1}$) অন্তর্ভুক্ত থাকে। এক্ষেত্রে ψ^2 বাস্তব বা কাল্পনিক হতে পারে, কিন্তু তা নির্ভর করবে ψ-এর প্রকাশ-প্রকৃতির উপর। স্পেসে কোনো বিশেষ বিন্দুতে একটি কণা পাবার সম্ভাবনা সর্বদাই বাস্তব হবে। $\psi^*\psi$ দ্বারা এ জাতীয় সম্ভাবনাকে আরও ভালভাবে সংজ্ঞায়িত করা যায়। যেখানে ψ^* হলো ψ-এর জটিল কনজুগেট (complex conjugate)।

$$\text{সম্ভাবনা} = \psi^*\psi \text{ বা } |\psi|^2 \qquad (৩.৪১)$$

ψ বাস্তব বা কাল্পনিক যেটাই হোক না কেন গুণফলটি সর্বদাই বাস্তব হবে। $\psi^*\psi$-কে নির্দিষ্ট কোনো সিস্টেমের কনফিগারেশন স্পেসের জন্য **সম্ভাবনা বণ্টন অপেক্ষক** বলে।

যখন কোনো বিশেষ আইগেন অপেক্ষক বাস্তব হয় এবং তা কোনো কাল্পনিক রাশি ধারণ করে না, তখন উক্ত অপেক্ষকটি এবং তার জটিল কনজুগেট একই (identical) হবে। এক্ষেত্রে

$$\text{সম্ভাবনা} = \psi^*\psi = \psi^2 \qquad (৩.৪২)$$

এখানে পরস্পর লম্বভাবে অবস্থিত তিনটি অক্ষের তরঙ্গ অপেক্ষককে [ψ(x, y, z)] ψ রূপে লেখা হয়েছে। ত্রি-মাত্রিক কনফিগারেশন স্পেস যথা, উপাদানিক আয়তন (volume element), $d\tau$ এর সম্ভাবনাকে স্মরণ করে আমরা লিখতে পারি।

$$\psi^*\psi \, d\tau = \psi^*(x, y, z) \, \psi \, (x, y, z) \, dx, dy, dz \qquad (৩.৪৩)$$

যেখানে $d\tau = dx, dy, dz$

এটি উল্লেখ করা প্রয়োজন যে, এ সম্ভাবনা-সমীকরণ একটি একক কণার (যথা, ইলেক্ট্রন) ক্ষেত্রে প্রযোজ্য। দুটি স্বাধীন কণার (যেমন, দুটি ইলেক্ট্রন) ক্ষেত্রে কনফিগারেশন স্পেসে সিস্টেমটির অবস্থান সংজ্ঞায়িত করার জন্য ছয়টি অক্ষের প্রয়োজন।

৩.৪ ψ–এর উপর আরোপিত শর্ত বা সীমাবদ্ধতা সম্পর্কে আলোচনা
Discussion on The Conditions or Limitations of ψ

যদিও এ অধ্যায়ের প্রথম দিকে শর্তগুলি উল্লেখ করা হয়েছে (যে শর্তগুলি তরঙ্গ অপেক্ষক বা আইগেন অপেক্ষক, ψ–কে মেনে চলতে হয়), তথাপি তাদের সম্পর্কে ভিন্নভাবে আলোচনার প্রয়োজনীয়তা রয়েছে।

খুবই যৌক্তিক প্রশ্ন হলো কেন আমরা ψ–এর উপর ঐসব শর্ত বা সীমাবদ্ধতা আরোপ করেছি ? নিচের আলোচনা থেকে এ প্রশ্নের উত্তর পাওয়া যাবে। পুনরায় শর্তগুলি লেখা যাক ঃ

(ক) অক্ষের সকল মানের ক্ষেত্রে ψ অবশ্যই সসীম হবে,

(খ) ψ-কে একক মানসম্পন্ন হতে হবে; অর্থাৎ প্রতিটি বিশেষ অক্ষের জন্য ψ–এর কেবল একটি মান থাকবে।

(গ) ψ–কে অবশ্যই অবিচ্ছিন্ন হতে হবে।

এসব সীমাবদ্ধতা যুক্তিসঙ্গত। কারণ, প্রথমত যদি ψ যে কোনো স্থলে অসীম হয়, তবে সেই বিন্দুতে কণাটি পাবার সম্ভাবনাও অসীমভাবে বেড়ে যাবে। ψ এর অসীম প্রকৃতি (infinite nature) অবশ্যই তরঙ্গ বলবিদ্যার মূল সাংখ্যিক বৈশিষ্ট্য (statistical nature) নষ্ট করে ফেলবে। দ্বিতীয়ত যদি কোনো কনফিগারেশন স্পেসে কণাটি পাবার সম্ভাবনার সাথে ψ^2 কে অভিন্নরূপে গণ্য করতে হয়, তবে কোনো বিশেষ কোঅর্ডিনেটের বিশেষ মানের জন্য ψ এর একটি মাত্র মান থাকবে। অতএব ψ এর একক মান থাকার যৌক্তিকতা স্পষ্টরূপে বোঝা যায়। তৃতীয়ত যদি ψ বিচ্ছিন্ন (discontinuous) হতো, তবে সম্ভাবনাও বিচ্ছিন্ন প্রকৃতির হতো।

মোট কথা শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণের কথা ভাবলে তরঙ্গ অপেক্ষকের এ শর্তগুলি অবশ্যই মেনে চলা উচিত বলে মনে হয়। যখন ψ কে উপরিউক্ত শর্তে বেঁধে ফেলা হয়, তখনই আমরা E-এর কতকগুলি নির্দিষ্ট মান পাই। এ থেকেই কোয়াণ্টামকরণের যৌক্তিকতা খুঁজে পাওয়া যায়, যা কোয়াণ্টাম বলবিদ্যার ভিত্তি।

৩.৫ তরঙ্গ অপেক্ষকের নর্মালাইজেশন বা সঙ্গতকরণ
Normalization of Wave Functions

যেহেতু $\psi^*\psi d\tau$ হলো কনফিগারেশন স্পেসে ক্ষুদ্র আয়তনে($d\tau$) কোনো কণা পাবার সম্ভাবনা, সুতরাং এ রাশির সমাকলক উপরিউক্ত সম্ভাবনার সমানুপাতিক হবে। এর কারণ হলো, শ্রডিঙ্গার সমীকরণ অনুসরণকারী আইগেন অপেক্ষক, ψ উত্তম আচরণপূর্ণ (well behaved) অর্থাৎ ψ হলো সসীম, একক মানসম্পন্ন এবং অবিচ্ছিন্ন প্রকৃতির। কিন্তু যখন সমাকলনটি সমগ্র কনফিগারেশন স্পেস ব্যাপী করা হয় অর্থাৎ অক্ষগুলোর ঋণাত্মক অসীম ($-\infty$) মান থেকে ধনাত্মক অসীম ($+\infty$) মান পর্যন্ত সমাকলন করা হয় তখন তার মান একক হয়। সুতরাং

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*\psi \, d\tau = 1 \qquad (৩.৪৪)$$

যে কোনো তরঙ্গ অপেক্ষক (আইগেন অপেক্ষক) উপরের শর্ত পালন করলেই তা এককে (unity) সঙ্গতকৃত বা 'সঙ্গতকৃত' হয়েছে বলে ধরা হয়। সমগ্র কনফিগারেশন স্পেসের উপর সমাকলনটিকে এককের সমান করা হয়েছে। কারণ কণাটি সব সময় নির্দিষ্ট স্পেসের (specified space) কোথাও না কোথাও উপস্থিত থাকবে।

আইগেন অপেক্ষকের (তরঙ্গ অপেক্ষক) যে কোনো সমাধানকে কোনো ধ্রুবক দ্বারা গুণ বা ভাগ করে তাকে সঙ্গতকৃত করা হয়। এ প্রক্রিয়ায় প্রাপ্ত ফলও তরঙ্গ সমীকরণের একটি সমাধান।

উদাহরণ ঃ তরঙ্গ অপেক্ষক $\psi_n(x) = A \sin n\pi \frac{x}{L}$ কে $0 \le x \le L$ সীমার মধ্যে সঙ্গতকরণ করে A-এর মান নির্ণয় কর।

সমাধান ঃ অপেক্ষকটির সঙ্গতকরণ করার পর দাঁড়ায়,

$$\int_0^L \psi_n^2(x)\, dx = \int_0^L A^2 \sin^2 n\pi \frac{x}{L}\, dx = 1$$

কিন্তু $$\sin^2 n\pi \frac{x}{L} = \frac{1}{2}\left\{1 - \cos n\pi \frac{x}{L}\right\}$$

অতএব, $\int_o^L \psi_0^2 (x)\, dx$

$$= A^2 \left\{\int_o^L \frac{dx}{2} - \int_o^L \frac{1}{2} \cos n\pi \frac{x}{L}\, dx\right\} = 1$$

বা $A^2 \left(\frac{L}{2} - o\right) = 1$

বা $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$

দ্রষ্টব্য ঃ আইগেন অপেক্ষক, ψ_n (x) এর সঠিক মান নির্ণয়ের জন্য অপেক্ষকটির সঙ্গতকরণের মাধ্যমে A এর মান নির্ণয় করা আবশ্যক।

৩.৬ তরঙ্গ অপেক্ষকের অর্থোগোনালিটি
Orthogonality of Wave Function

যখন তরঙ্গ অপেক্ষক ψ এবং তার জটিল কনজুগেট, ψ^* এর গুণফলের উপর সমগ্র কনফিগারেশন স্পেসব্যাপী $-\infty$ থেকে $+\infty$ পর্যন্ত সমাকলকের মান শূন্য হয়, তখন অপেক্ষকগুলিকে পরস্পর অর্থোগোনাল বলে গণ্য করা হয়।

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi\, d\tau = o \qquad (৩.৪৫)$$

কোনো নির্দিষ্ট সিস্টেমের ক্ষেত্রে প্রযোজ্য তরঙ্গ সমীকরণের সন্তোষজনক সমাধান এমন দুটি তরঙ্গ অপেক্ষক যদি ψ_n এবং ψ_m হয় $(n \neq m)$; তবে তাদের অর্থোগোনাল সম্পর্ক লেখা যায় নিম্নরূপ ঃ

$$\int \psi_n \psi_m\, d\tau = o \qquad (৩.৪৬)$$

যেখানে n বা m = 1, 2, 3, 4 ... ...

উদাহরণ ১ ঃ ধর, দুটি তরঙ্গ অপেক্ষক $\psi_1 = 1$ এবং $\psi_2 = \sin x$ যারা উভয়ই কোনো তরঙ্গ সমীকরণের সন্তোষজনক সমাধান। প্রমাণ কর তারা $-\pi \leq x \leq +\pi$ সীমার মধ্যে পরস্পর অর্থোগোনাল।

সমাধান ঃ অর্থোগোনালিটির শর্ত অনুযায়ী,

$$\int_{-\pi}^{+\pi} \psi_1 \psi_2\, dx = o$$

এখানে $\int_{-\pi}^{+\pi} \psi_1 \psi_2 \, dx = \int_{-\pi}^{+\pi} 1 . \sin x \, dx$

$$= \int_{-\pi}^{+\pi} \sin x \, dx = [-\cos x]_{-\pi}^{+\pi}$$

$$= -[\cos \pi - \cos(-\pi)]$$

$$= -[\cos \pi - \cos \pi]$$

$$= 0$$

অতএব, অপেক্ষক দুটি পরস্পর অর্থোগোনাল।

উদাহরণ ২ঃ প্রমাণ কর $-\pi \leq x \leq +\pi$ সীমার মধ্যে $\sin x$ এবং $\cos x$ তরঙ্গ অপেক্ষক দুটি পরস্পর অর্থোগোনাল। মনে করি তারা কোনো তরঙ্গ সমীকরণের সমাধান।

সমাধান ঃ অপেক্ষক দুটি অর্থোগোনালিটির শর্ত পালন করবে, যদি

$$= \int_{-\pi}^{+\pi} \sin x \cos x \, dx = 0$$

এখন বামপক্ষ =

$$\sin x \int_{-\pi}^{+\pi} \cos x \, dx - \int_{-\pi}^{+\pi} \left[\frac{d}{dx} \sin x \int_{-\pi}^{+\pi} \cos x \, dx \right] dx$$

$$= \left[\sin x \sin x \right]_{-\pi}^{+\pi} - \int_{-\pi}^{+\pi} \cos x \sin x \, dx$$

$$= \left[\sin^2 x \right]_{-\pi}^{+\pi} - \text{বামপক্ষ}$$

বা 2 (বামপক্ষ) $= \left[\sin^2 x \right]_{-\pi}^{+\pi}$

বা বামপক্ষ $= \frac{1}{2} \left[\sin^2 x \right]_{-\pi}^{+\pi}$

$$= \frac{1}{2}\left[\{\sin^2\pi - \sin^2(-\pi)\}\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[\{\sin\pi + \sin(-\pi)\}\{\sin\pi - \sin(-\pi)\}\right]$$

$$= \frac{1}{2}\left[(\sin\pi + \sin\pi)\right]\left[\sin\pi + \sin\pi\right]$$

$$= 0$$

প্রশ্নাবলি

৩.১। তরঙ্গ বলবিদ্যার মূল স্বীকার্যগুলো লিখ।

৩.২। অবস্থা ও অবস্থা অপেক্ষক কাকে বলে ? স্পষ্টরূপে ব্যাখ্যা কর।

৩.৩। আইগেন অপেক্ষক, ψ এর ভৌত তাৎপর্য কি ? একে গ্রহণযোগ্য করতে হলে কি কি শর্ত পূরণ হওয়া দরকার ?

৩.৪। অপারেটর কাকে বলে? ল্যাপলাসীয় ও হ্যামিলটনীয় অপারেটর লিখ।

৩.৫। তরঙ্গ বলবিদ্যার স্বীকার্যগুলির পুঙ্খানুপুঙ্খ আলোচনা কর।

৩.৬। একটি একক মুক্ত কণার ক্ষেত্রে ত্রি-মাত্রিকরূপে শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণ উপপাদন কর।

৩.৭। একটি একক কণার ক্ষেত্রে শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণের অপারেটর উপপাদন কর। ψ–এর সীমাবদ্ধতা উল্লেখ কর।

৩.৮। তরঙ্গ অপেক্ষকের নর্মালাইজেশন ও অর্থোগোনালিটি বলতে কি বুঝ ?

[রা.বি. এম.এস-সি. শেষবর্ষ, ১৯৯৮]

৩.৯। **টীকা লিখ ঃ**

(ক) তরঙ্গ অপেক্ষক, ψ

(খ) তরঙ্গ বলবিদ্যার স্বীকার্য

(গ) শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণ

(ঘ) তরঙ্গ অপেক্ষকের ভৌত তাৎপর্য

(ঙ) নর্মালাইজেন ও অর্থোগোনালিটি।

৩.১০। হাইড্রোজেন পরমাণুর দু'টি অসঙ্গতকৃত বা উত্তেজিত অবস্থার তরঙ্গ অপেক্ষক হল-

(ক) $\psi = (2 - r/a_o)\,e^{-r/a_o}$

(খ) $\psi = r\sin\theta\cos\theta\, e^{-r/2a_o}$

উভয় অপেক্ষককে সঙ্গতকরণ (এক-এ) কর।

চতুর্থ অধ্যায়

তরঙ্গ সমীকরণের প্রয়োগ
(APPLICATION OF WAVE EQUATION)

৪.১ অসীম দেয়ালবিশিষ্ট একমাত্রিক বাক্সে আবদ্ধ কণা
Particle in a One-dimensional Box with Infinite Walls

আমরা এখন এমন অবস্থায় পৌঁছেছি যখন একটি বাক্সের দেয়ালের মধ্যে ভ্রমণরত একটি কণার ক্ষেত্রে শ্রডিঙ্গার সমীকরণ প্রয়োগ করতে পারি। পরমাণুতে নিউক্লিয়াসের চারদিকে ইলেক্ট্রনের ভ্রমণকে এ গতির সাথে তুলনা করা যেতে পারে। এখন প্রশ্ন হলো, কেন আমরা এক্ষেত্রে শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণ প্রয়োগ করব ? কারণ প্রয়োগের ক্ষেত্র হিসেবে এক-মাত্রিক বাক্স খুবই সরল। এ বাক্সে কণাটি সামনে ও পেছনে ধাক্কা খেয়ে ফিরে আসে (bounches back and forth)। নিচে তিনটি দিক থেকে বিচার করলে তরঙ্গ সমীকরণের প্রয়োগের সার্থকতা বোঝা যাবে।

(ক) আমরা দেখতে চাই একটি কণার গতিকে সীমাবদ্ধকরণের (restrictions) মধ্যে ফেলে কিভাবে তরঙ্গ সমীকরণকে সমাধান করা যায়,

(খ) আমরা তরঙ্গ সমীকরণের সমাধানের ধর্ম জানতে চাই যেমন, নির্দিষ্ট ও ধারাবাহিকতাহীন মানে (discrete values) কণার শক্তির সীমাবদ্ধতা এবং

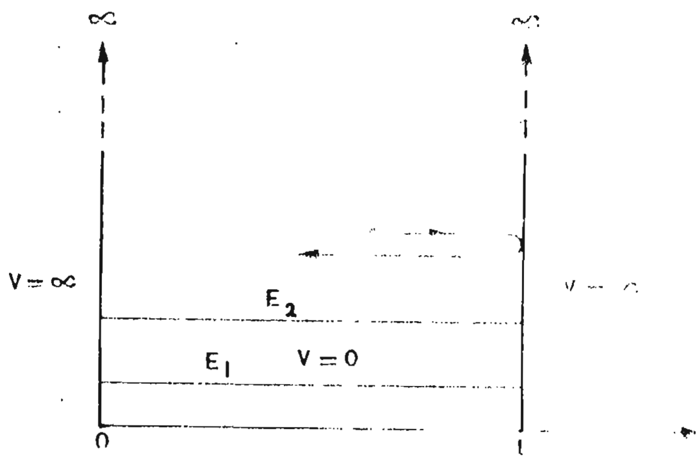
(গ) কোয়াণ্টাম বলবিদ্যার সার্থক পূর্বানুমানগুলোর (predictions) সাথে সনাতন বলবিদ্যার পূর্বানুমানগুলোর তুলনা করতে চাই।

এখন এরূপ একটি শর্তে কণাটির গতি সীমাবদ্ধ করা যাক যে, তা অসীমভাবে উচ্চ শক্ত দেয়াল (infinitely high hard wall) দ্বারা ঘেরা এক-মাত্রিক বাক্সে কেবল x- অক্ষ বরাবর $x = 0$ থেকে $x = L$ এর মধ্যে ভ্রমণ করছে। এক্ষেত্রে আবদ্ধ কণাটির শক্তি যেটিই হোক না কেন তা পালাতে পারে না। এরূপ দেয়ালের সাথে সংঘর্ষের ফলে কণাটি শক্তি হারায় না। ফলে মোট শক্তি স্থির থাকে। দেয়ালের উপরে কণাটির স্থৈতিক শক্তি, V অসীম এবং দেয়ালের বাইরে তার মান ধ্রুবক। সুবিধার জন্য বাক্সের মধ্যে স্থৈতিক শক্তি V-কে শূন্য ধরা হয়। কোনো ক্রমেই আবদ্ধ কণাটি অসীম শক্তি লাভ

করতে পারে না। অতএব এটি বাক্সের বাইরে অবস্থান করতে পারে না এবং এর তরঙ্গ অপেক্ষক, ψ-এর মান নিম্ন ক্ষেত্রে শূন্য হবে ঃ

$$x \le o \text{ এবং } x \ge L$$

৪.১ চিত্রে বিষয়টি দেখানো হলো।



চিত্র ৪.১ ঃ অসীম পটেনশিয়াল বাধাবিশিষ্ট একমাত্রিক বাক্সে একটি কণার ভ্রমণ।

বাক্সের অভ্যন্তরে শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণ দাঁড়ায়,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - o)\psi = o$$

বা,
$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 mE}{h^2}\psi = o \qquad (৪.১)$$

কারণ এখানে $V = o$। আংশিক ব্যবকলন $\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$ -এর পরিবর্তে মোট ব্যবকলন $\frac{d^2\psi}{dx^2}$ = ব্যবহার করা হয়েছে কারণ হলো, এখানে ψ একমাত্র x- এর অপেক্ষক। সমীকরণ (৪.১)-এর সাধারণ সমাধান হলো (যখন E একটি ধনাত্মক ধ্রুবক)

$$\psi = A \sin \alpha x + B \cos \alpha x \qquad (৪.২)$$

যেখানে
$$\alpha^2 = \frac{8\pi^2 mE}{h^2} \qquad (৪.৩)$$

কারণ সমীকরণ (৪.২)-কে দুবার ব্যবকলন করলে আমরা মূল তরঙ্গ সমীকরণ পাই

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\alpha^2 A \sin \alpha x - \alpha^2 B \cos \alpha x$$

$$= -\alpha^2 [A \sin \alpha x - B \cos \alpha x]$$

$$= -\alpha^2\psi$$

$$= -\frac{8\pi^2}{h^2}\psi \qquad (৪.৪)$$

পুনরায় দেয়ালের উপর এবং বাক্সের বাইরে $V = \infty$ এবং এক্ষেত্রে কণাটির তরঙ্গ সমীকরণ হবে,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - \infty)\psi = 0 \qquad (৪.৫)$$

সমীকরণ (৪.৫) এর একমাত্র সমাধান হলো ঃ

$$\psi = 0 \qquad (৪.৬)$$

ψ-এর যে কোনো সসীম মানের (finite value) জন্য সমীকরণ (৪.৫)-এর বামপক্ষ সসীম হবে, কিন্তু শূন্য হবে না। $\psi = 0$ হলে সমীকরণটির বাম পক্ষ শূন্যে পরিণত হবে। সুতরাং আমরা সিদ্ধান্ত করতে পারি,

যখন $x = 0$ বা $x = L$

$$\psi = 0$$

অতএব, এক-মাত্রিক বাক্সে আবদ্ধ যে কোনো কণার তরঙ্গ সমীকরণের সমাধান এমন হবে যা পূর্বোক্ত সমীকরণ (৪.২)কে তুষ্ট (satisfy) করবে এবং $x = 0$ বা $x = L$ এ তরঙ্গ অপেক্ষক, ψ শূন্য হবে।

যখন $x = 0$ এবং $\psi = 0$, তখন সমীকরণ (৪.২) দাঁড়ায়

$$0 = A \sin \alpha\, 0 + B \cos \alpha x$$

বা, $B \cos \alpha x = 0$

এক্ষেত্রে, $\psi = A \sin \alpha x$ (৪.৭)

পুনরায় যখন $x = L$ এবং $\psi = 0$ সমীকরণ (৪.৭) দাঁড়ায়,

$$A \sin \alpha L = 0$$

সুতরাং এক্ষেত্রে $A = 0$ বা $\sin \alpha L = 0$ হবে।

যখন $\sin \alpha L = 0$ তখন

$$\alpha L = n\pi \qquad (8.৮)$$

যেখানে $n = 1, 2, 3 \ldots$। সমীকরণ (৪.৭) ও (৪.৮) থেকে

$$\psi_1 = A \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \qquad (8.৯)$$

যখন $n = 1$ (সর্বনিম্ন আইগেন অবস্থা) আইগেন অপেক্ষক,

$$\psi = A_1 \sin \frac{n\pi}{L}$$

যখন $n = 2$, আইগেন অপেক্ষক $\psi_2 = A_2 \sin \dfrac{2x\pi}{L}$

সাধারণভাবে যখন $n = n$,

আইগেন অপেক্ষক, $\psi_n = A_n \sin \dfrac{n\pi x}{L}$

পুনরায় সমীকরণ (৪.৩) এবং (৪.৮) থেকে

$$\frac{n^2\pi^2}{L^2} = \frac{8\pi^2 m E_n}{h^2}$$

বা, $$E_n = \frac{n^2h^2}{8mL^2} \text{ জুল (J)} \qquad (8.১০)$$

সমীকরণ (৪.১০) এটিই নির্দেশ করে যে, শক্তি স্তরের অসীম ক্রম আছে যা এক-মাত্রিক বাক্সে ভ্রমণরত কোনো কণার ক্ষেত্রে n-এর সকল ধনাত্মক অখন্ড মানের অনুরূপ। এর অর্থ এই যে, বাক্সের অভ্যন্তরে কণার শক্তি কোয়ান্টায়িত (quantized) থাকবে।

উপরে প্রবর্তিত n রাশিটিকে **কোয়ান্টাম সংখ্যা** বলা হয়। n-এর বিভিন্ন মানের জন্য প্রাপ্ত বিভিন্ন শক্তি বিভিন্ন শক্তি-স্তর বা কোয়ান্টাম অবস্থার অনুরূপ (corresponding)।

যখন $n = 1,\ E_1 = \dfrac{h^2}{8mL^2}$

$$n = 2,\ E_2 = \frac{2^2h^2}{8mL^2} = \frac{4h^2}{8mL^2}$$

$$n = 3,\ E_3 = \frac{3^2h^2}{8mL^2} = \frac{9h^2}{8mL^2}$$ এবং এভাবে চলবে।

যখন $n = 1$ হয় তখন আমরা একটি সর্বনিম্ন কোয়ান্টাম স্তর পাই। এ স্তরের শক্তিকে **শূন্য বিন্দু শক্তি** (zero point energy) বলে। এখন প্রশ্ন হলো n-এর মান কি শূন্য হতে পারে ? এর একমাত্র উত্তর 'না'। কারণ এক্ষেত্রে সর্বনিম্ন স্তরের (ভিত্তি স্তর) শক্তি বিলুপ্ত হয় যা বাক্সে ভ্রমণরত কোনো কণার ক্ষেত্রে প্রযোজ্য নয়।

সমীকরণ (৪.১০) থেকে দেখা যায় যে, বাক্সে আবদ্ধ কোনো কণার সম্ভাব্য শক্তি বাক্সের প্রশস্ততার (width) উপর নির্ভর করে। বাক্সের প্রশস্ততা যতো বেশি হবে, শক্তির মান ততো কমে যাবে।

উদাহরণ ১ ঃ 1.0 nm দৈর্ঘ্য বিশিষ্ট অণুতে একটি ইলেক্ট্রন আবদ্ধ আছে (confined)। এর (ক) সর্বনিম্ন শক্তি ও (খ) এ স্তর থেকে ন্যূনতম উত্তেজনা শক্তি (excitation energy) হিসাব কর।

সমাধান ঃ m_e ভর বিশিষ্ট ইলেক্ট্রনের $n = 1$ অবস্থার শক্তি বা এর শূন্য বিন্দু শক্তি হল সর্বনিম্ন শক্তি এবং সর্বনিম্ন উত্তেজনা শক্তি হল $n = 1$ এবং $n = 2$ শক্তি স্তর দু'টির শক্তি পার্থক্য।

$$\text{শক্তি, } E_1 \text{ (সর্বনিম্ন স্তরে)} = \frac{h^2}{8m_eL^2}$$

$$= \frac{(6.627 \times 10^{-34})^2}{8 \times (9.0196 \times 10^{-31}) \times (1.0 \times 10^{-9})^2}$$

$$= 6.09 \times 10^{-20} \text{ J (জুল)}$$

$$\text{অনুরূপে, } E_2 \text{ (n = 2 তে)} = \frac{4h^2}{8m_eL^2} = 24.36 \times 10^{-20} \text{ J}$$

$$\text{এখন } E_2 - E_1 = 18.27 \times 10^{-20} \text{ J}$$

= সর্বনিম্ন উত্তেজনা শক্তি।

উদাহরণ ২ ঃ একটি 10 গ্রাম ওজনের স্টীল বল 3.3 সে.মি. সেকেন্ডে গতিবেগে 10 সে.মি. প্রশস্ত বাক্সের মসৃন মেঝেতে গড়িয়ে দেয়া হল। বলটির স্থানান্তির শক্তির অনুরূপ কোয়ান্টাম সংখ্যা হিসাব কর। মানটি কি কোয়ান্টাম সংখ্যার ধারণার সাথে সামঞ্জস্যপূর্ণ ? ব্যাখ্যা কর।

সমাধান ঃ স্টীল বলের স্থানান্তরিত শক্তি

$$= \frac{1}{2} m\upsilon^2$$

$$= \frac{1}{2} (10 \times 10^{-3})\ \text{kg} \ \times (3.3 \times 10^{-2})^2\ \text{m}^2$$

$$= \frac{1}{2} \times 10 \times (3.3)^2 \times 10^{-7}\ \text{kg m}^2$$

এ শক্তির সাথে E_n অর্থাৎ $\frac{n^2h^2}{8mL^2}$ কে সমান দেখিয়ে n এর মান নির্ণয় করতে হবে। সুতরাং

$$\frac{n^2 \times (6.627 \times 10^{-34})^2}{8 \times (10 \times 10^{-3}) \times (10 \times 10^{-2})^2}$$

$$= \frac{1}{2} \times 10 \times (3.3)^2 \times 10^{-7}$$

বা, $$n^2 = \frac{10 \times (3.3)^2 \times 10^{-7} \times 8 \times 10^{-4}}{(6.627 \times 10^{-34})^2}$$

$$= 19.8337 \times 10^{57}$$

$$\approx 2 \times 10^{58}$$

বা, $$n \approx 10^{29}$$

n এর মান অত্যধিক বড়, যা কোয়ান্টাম সংখ্যা ধারণার সাথে আদৌ সমাঞ্জস্যপূর্ণ নয়।

আইগেন অপেক্ষক ψ_n-এর সঠিক মান নির্ণয় (Determination of precise value of eigen function, ψ_n) ঃ আইগেন অপেক্ষকের সঠিক মান নির্ণয়ের জন্য আইগেন অপেক্ষকের সঙ্গতকরণের মাধ্যমে A-এর মান নির্ণয় করা আবশ্যক। $o \leq x \leq L$ সীমার মধ্যে সঙ্গতকরণের শর্ত হলো,

$$\int_0^1 \psi_n^2\, dx = \int_0^1 A_n^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1$$

কিন্তু, $$\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \frac{1}{2}\left\{1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right\}$$

অতএব, $\int_0^1 \psi_n^2 \, dx = A_n^2 \; \frac{L}{2} - \; o = 1$

বা, $A_n = \sqrt{2/L}$

সুতরাং $\psi_n = \sqrt{2/L} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ (৪.১১)

আইগেন অপেক্ষকের মানের ভিত্তিতে সম্ভাব্যতা কার্ভ প্রস্তুতকরণ (Construction of probability curve depending on the values of eigen function) ঃ

যখন $n = 1 \; ; \psi_1 = \sqrt{2/L} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) = o$

$x = o$ এবং $x = L$ এর ক্ষেত্রে

$n = 2 \; ; \psi_2 = \sqrt{2/L} \; \sin\left(\frac{2\pi x}{L}\right) = o$

$x = o, \; x = L/2$ এবং $x = L$ এর ক্ষেত্রে

$n = 3 \; ; \psi_3 = \sqrt{2/L} \; \sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right) = o$

$x = o, \; x = L/3, \;\; x = 2L/3$ এবং $x = L$ এর ক্ষেত্রে।

উপরের বিশ্লেষণ থেকে দেখা যাচ্ছে যে, বিভিন্ন কোয়ান্টাম স্তরের বিভিন্ন সংখ্যক অঞ্চল (locations) আছে যেখানে $\psi = o$। যেসব অঞ্চলের $\psi = o$ তাদেরকে **নোডাল বিন্দু** (nodal point) বলে। এসব অঞ্চলে কণা পাবার সম্ভাবনা শূন্য। কণাটিকে ইলেক্ট্রন হিসেবে বিবেচনা করলে এসব বিন্দুতে ইলেক্ট্রন থাকার সম্ভাবনা নেই বলে চলে। কারণ ψ_2-এর মানও শূন্য হবে। $n = 1$ হলে দুটি নোডাল বিন্দু, $n = 2$ হলে তিনটি, $n = 3$ হলে চারটি নোডাল বিন্দু পাওয়া যায়। সাধারণভাবে n-তম কোয়ান্টাম স্তরের ক্ষেত্রে $(n+1)$ নোডাল বিন্দু উৎপন্ন হয়। এখন আমরা বাক্সের মধ্যে বিভিন্ন কোয়ান্টাম স্তরে সর্বোচ্চ সম্ভাব্যতাবিশিষ্ট অঞ্চল নির্ধারণ করতে চাই। আমাদের উদ্দেশ্য সফল হবে, যখন

$$\psi_n = \sqrt{2/L} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = \text{সর্বোচ্চ}$$

এটি সত্য হতে পারে, যদি

$$\psi_n = \sqrt{2/L} = \text{কম্পনের সর্বোচ্চ বিস্তার}$$

পুনরায় এটি সম্ভব হবে, যখন

$$\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = 1 = \sin(\pi/2)$$

অর্থাৎ $\frac{n\pi x}{L} = \pi/2$

সুতরাং যখন $n = 1$ এবং $x = L/2$; $\psi_1 = \sqrt{2/L}$

$n = 2$ এবং $x = L/4$; $\psi_2 = \sqrt{2/L}$

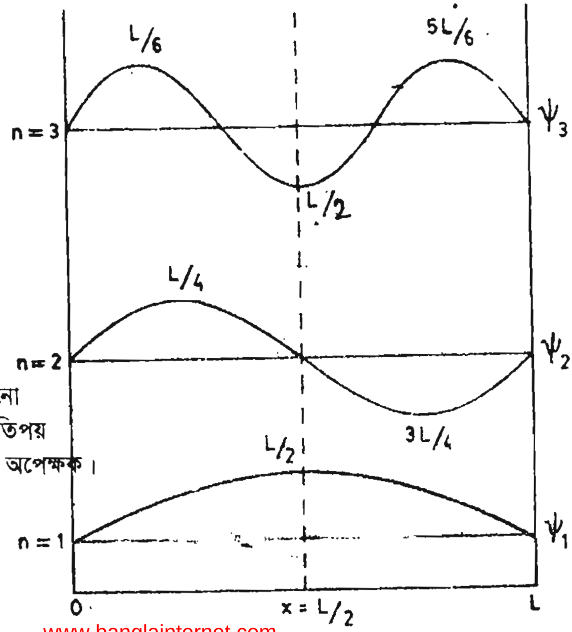
$x = 3L/4$; $\psi_2 = -\sqrt{2/L}$

$n = 3$ এবং $x = L/6$; $\psi_3 = -\sqrt{2/L}$

$x = L/2$; $\psi_3 = \sqrt{2/L}$

$x = 5L/6$; $\psi_3 = \sqrt{2/L}$

উপরিউক্ত গাণিতিক বিশ্লেষণের ভিত্তিতে এখন একমাত্রিক বাক্সে কণাটির ক্ষেত্রে প্রথম তিনটি কোয়ান্টাম স্তরের আইগেন অপেক্ষক বা সম্ভাব্যতা বণ্টন কার্ভ 4.2 চিত্রে দেখানো হলো।



চিত্র ৪.২ ঃ বাক্সে আবদ্ধ কোনো কণার প্রাথমিক কতিপয় শক্তিস্তর ও তরঙ্গ অপেক্ষক।

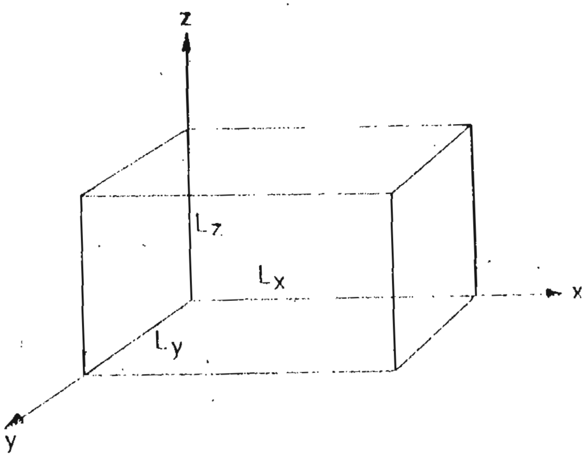
৪.২ ত্রি-মাত্রিক আয়তাকার বাক্সে আবদ্ধ কণা

Particle in a Rectangular Three Dimensional Box

পারমাণবিক গঠনের মৌলিক সমস্যার রহস্য ত্রি-মাত্রিক শ্রডিঙ্গার সমীকরণ দ্বারা উম্মোচন করা যায়। ত্রি-মাত্রিক বাক্সে আবদ্ধ কোনো কণা পরীক্ষা করে আমরা এমন একটি প্রক্রিয়ায় প্রবেশ করব যেখানে ত্রি-মাত্রিক শ্রডিঙ্গার সমীকরণ সমাধান করা হবে এবং আমরা সে সমাধানের সাধারণ বৈশিষ্ট্যের সঙ্গে পরিচিত হবো।

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\psi = 0 \qquad (৪.১২)$$

এখন ধরা যাক, অসীমভাবে শক্ত দেয়ালবিশিষ্ট একটি আয়তাকার বাক্সে একটি ইলেক্ট্রন বা একটি গ্যাস অণু আবদ্ধ আছে। দেয়ালগুলো পরস্পর লম্বভাবে অবস্থিত অক্ষত্রয় z, y, z-এর সাথে সমান্তরাল (চিত্র ৪.৩)। এটি এমন একটি পরিবেশ যেখানে কণাটি দুটি খাড়া পটেনশিয়াল বাধার মধ্যে আবদ্ধ, যে বাধা-গুলি তিনটি অক্ষের প্রতিটি দিকেই বিস্তৃত। তিনটি দিকের বাধার যুগলের প্রতিটির মধ্য-কার দূরত্ব হলো L_x, L_y, এবং L_z। এ বাক্সের অনুরূপ স্থৈতিক শক্তি V (x, y, z)। বাক্সের অভ্যন্তরে V = o এবং বাক্সের বাইরে V = ∞ (অসীম, infinite)। এরূপ আয়তাকার বাক্সে ভ্রমণরত কণাটির শ্রডিঙ্গার, সমীকরণ,



চিত্র ৪.৩ ত্রি-মাত্রিক বাক্সে আবদ্ধ কণা।

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}+\frac{8\pi^2 m}{h^2}E\psi = 0 \qquad (৪.১৩)$$

আইগেন অপেক্ষক, ψ হলো অক্ষত্রয় x, y, z-এর অপেক্ষক। এখন অপেক্ষক, ψ (x, y, z)-কে তিনটি ভেরিয়েবলের গুণফল ধরে সমীকরণ (৪.১৩)-এর সমাধান করা যায় ঃ

$$\psi\,(x, y, z) = X\,(x).\,Y(y).\,Z(z) \qquad (৪১.৪)$$

যেখানে X (x). Y (y) এবং Z (z) যথাক্রমে x, y এবং z-এর অপেক্ষক। সমীকরণ

(৪১.৩) (৪.১৪) থেকে $\frac{\partial^2 X}{\partial x^2}.Y(y).\,Z\,(z) + \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}.X\,(x).\,Z(z) + \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2}\,X\,(x).Y\,(y)$

$$+\frac{8\pi^2 m}{h^2}\,E\,X.\,(x)\,Y\,.(y)\,Z.\,(z) = o \qquad (৪.১৫)$$

বা $$\frac{1}{X(x)}\cdot\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}\cdot\frac{1}{Y(y)} + \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2}\cdot\frac{1}{Z(z)} + \frac{8\pi^2 mE}{h^2} = o$$

বা $$\frac{h^2}{8\pi^2 m}\cdot\frac{1}{X(x)}\cdot\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{h^2}{8\pi^2 m}\cdot\frac{1}{Y(y)}\cdot\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2}$$

$$+\frac{h^2}{8\pi^2 m}\cdot\frac{1}{Z(z)}\cdot\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = -E \qquad (৪.১৬)$$

এখানে X(x) কেবল x-এর অপেক্ষক এবং তা y বা z-এর উপর নির্ভর করে না। অনুরূপ Y(y) এবং Z(z) অপেক্ষক দুটিও যথাক্রমে x ও z এবং x ও y এর উপর নির্ভর করে না। ফলে তারা যথাক্রমে x, y এবং z-এর অপেক্ষক। এ তিনটি কোঅর্ডিনেটের দিকের সংগে সমান্তরাল শক্তির উপাদান (components of energy) যথাক্রমে E_x $-E_y$ এবং $-E_z$ কে উপরিউক্ত অপেক্ষক তিনটির সাথে শনাক্ত করে,

$$+\frac{h^2}{8\pi^2 m}\cdot\frac{1}{X(x)}\cdot\frac{\partial^2 X}{\partial x^2} = -E_x$$

$$+\frac{h^2}{8\pi^2 m}\cdot\frac{1}{Y(y)}\cdot\frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} = -E_x \text{ এবং}$$

$$+\frac{h^2}{8\pi^2 m}\cdot\frac{1}{Z(z)}\cdot\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = -E_z \qquad (৪.১৭)$$

অতএব $-E = -E_x - E_y - E_z$

বা $\qquad E = E_x + E_y + E_z$

সমীকরণ (৪.১৭)-এর যে কোনো অংশ এক-মাত্রিক বাক্সে তরঙ্গ সমীকরণের অনুরূপ। অতএব, এদের সাধারণ সমাধান হলো ঃ

$$X(x) = \sqrt{2/L_x}\ \sin\left(\frac{n\pi x}{L_x}\right) \quad n_x$$

$$Y(y) = \sqrt{2/Ly}\ \sin\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right) \quad n_y$$

এবং
$$Z(z) = \sqrt{2/L_z}\ \sin\left(\frac{n\pi z}{L_z}\right) \quad n_z \tag{8.১৮}$$

অনুরূপ শক্তিগুলো হবে,

$$E_x = \frac{n_x{}^2h^2}{8mL_x{}^2}\ ;\ E_y = \frac{n_y{}^2h^2}{8mL_y{}^2} \text{ এবং } E_z = \frac{n_z{}^2h^2}{8mL_z{}^2} \tag{8.১৯}$$

অতএব ত্রি-মাত্রিক বাক্সে ভ্রমণরত কণাটির মোট স্থানান্তর শক্তি

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{n_x{}^2h^2}{8mL_x{}^2} + \frac{n_y{}^2h^2}{8mL_y{}^2} + \frac{n_z{}^2h^2}{8mL_z{}^2} \tag{8.২০}$$

এবং সামগ্রিক তরঙ্গ অপেক্ষক,

$$\psi(x,y,z) = \sqrt{2/L_x}\ \sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right) . \sqrt{2/Ly}\ \sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right) . \sqrt{2/L_z}\ \sin\left(\frac{n_z\pi z}{L_z}\right)$$

$$= \sqrt{\frac{8}{L_xL_yL_z}}\ \sin\left(\frac{n_x\pi x}{L_x}\right) . \sin\left(\frac{n_y\pi y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{n_z\pi z}{L_z}\right) \tag{8.২১}$$

এখানে $n_x = 1, 2, 3, ...$

$n_y = 1, 2, 3, ...$

এবং $n_z = 1, 2, 3, ...$

সমীকরণ (8.২০) থেকে এটি প্রতীয়মান হয় যে কণাটির মোট শক্তি অক্ষ তিনটি x, y এবং z-এর অনুরূপ কোয়ান্টাম সংখ্যা যথাক্রমে n_x, n_y এবং n_z-এর উপর নির্ভরশীল। অক্ষ-সংখ্যা বৃদ্ধি পেলে (বা কণা আবদ্ধকারী বাক্সের মাত্রা বৃদ্ধি পেলে) কণাটির শক্তি বর্ধিত অক্ষ-সংখ্যার অনুরূপ কোয়ান্টাম সংখ্যায় বণ্টিত হয়ে যাবে।

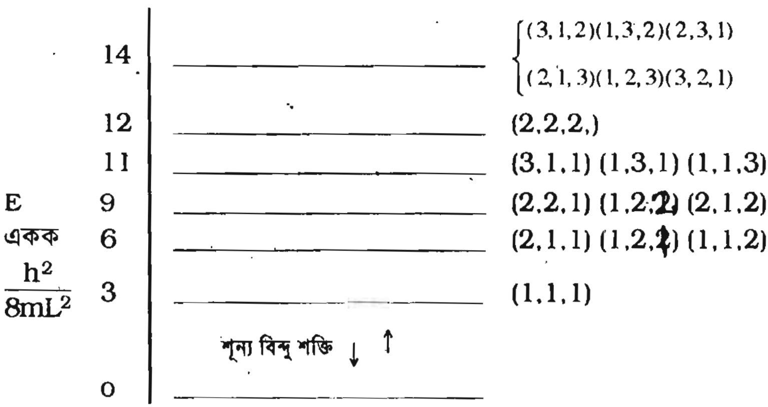
8.৩ ঘনকাকার বাক্সে আবদ্ধ কণা
Particle in a Cubic Box

ধরা যাক কণাটি আয়তাকার বাক্সের পরিবর্তে ঘনকাকার বাক্সে আবদ্ধ আছে। ঘনকের ক্ষেত্রে $L_x = L_y = L_z$। অতএব ঘনকের প্রত্যেক পার্শ্বকে L ধরে সমীকরণ (8.২০) দাঁড়ায়,

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{h^2}{8mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \qquad (৪.২২)$$

সমীকরণ (৪.২২) অনুসারে, শূন্যবিন্দু এক-মাত্রিক বাক্সের তিনগুণ, যার প্রতিটি অংশ অক্ষ তিনটি প্রতিটির সাথে জড়িত। যেহেতু মোট শক্তি n_x, n_y ও n_z এর উপর নির্ভর করে, সুতরাং মোট শক্তি স্থির রেখে এরা প্রত্যেকে ভিন্ন ভিন্ন মানের হতে পারে।

ধরা যাক, একটি স্তরের শক্তি $\frac{6h^2}{8mL^2}$। এ শক্তি তিনটি অনির্ভরশীল স্তরের অনুরূপ হতে পারে,যাদের কোয়াণ্টাম সংখ্যা (n_x, n_y, x_z) এর জন্য মান (2, 1, 1) (1, 2, 1) বা (1, 1, 2) হওয়া সম্ভব। এ স্তরটিকে **তিন স্তর সমশক্তিসম্পন্ন** বলা হয় (three fold degenerate or triply degenerate)। অনুরূপে, $\frac{14h^2}{8mL^2}$। শক্তিসম্পন্ন স্তরটি **ছয় স্তর সমশক্তিসম্পন্ন** (six fold degenerate)। এ শক্তি যেসব স্তরের হতে পারে তাদের কোয়ান্টাম সংখ্যা হবে, (3, 2, 1), (3, 1, 2), (2, 3, 1), (2, 1, 3) (1, 2, 3) এবং (1, 3, 2)। অপরপক্ষে ভিত্তি স্তর (ground state) এবং অন্যান্য আরও অনেক স্তর সমশক্তিসম্পন্ন নয়। **ইচ্ছানুযায়ী ব্যক্তিগত কোয়াণ্টাম সংখ্যার মান পরিবর্তন সত্ত্বেও কোনো শক্তিস্তরের মোট শক্তির ধ্রুবকতাকে (constancy) সমশক্তিসম্পন্নতা বলে**। বিষয়টির ৪.৪ চিত্রে দেখানো হলো।



চিত্র ৪.৪ ঃ L পার্শ্ববিশিষ্ট কোনো ঘনকের মধ্যে আবদ্ধ কোনো কণার শক্তিস্তর।

এখন ঘনকের সামান্য আকৃতিগত বিচ্যুতি (slight distortion) ঘটলে যে সমস্যা সৃষ্টি হবে সে সম্পর্কে আলোচনা করা যাক। ধরা যাক, ঘনকে X-এর মাত্রা

সামান্য ∂L পরিমাণ বৃদ্ধি পেল। এখন প্রশ্ন হলো, $E = \frac{6h^2}{8mL^2}$ শক্তিসম্পন্ন কোনো তিন স্তর সমশক্তিসম্পন্নতাবিশিষ্ট যে কোনো একটি স্তরের ভাগ্যে কি ঘটবে ?

(n_x, n_y, n_z)-এর জন্য কোয়ান্টাম সংখ্যা (2, 1, 1)। এখানে

$$E_{n(x)} = \frac{4h^2}{8mL^2}$$

$$E_{n(y)} = \frac{h^2}{8mL^2}$$

$$E_{n(z)} = \frac{h^2}{8mL^2}$$

এখন x-এর দিকে ∂L পরিবর্তনের ফলে বিভিন্ন কোয়ান্টাম সংখ্যার সাথে জড়িত শক্তির কিছুটা পরিবর্তন অবশ্যই হবে। কিন্তু সারকথা হলো যে, X-এর দিকে শক্তির যে পরিবর্তন হবে তা অন্য দুটি দিকে শক্তি-পরিবর্তনের সমান হবে না। কারণ, x-এর দিকে শক্তি-হ্রাস হবে,

$$\frac{4\partial L}{L} \cdot \frac{h^2}{8mL^2}$$

অপরপক্ষে অন্য দুটি দিকের ক্ষেত্রে সে মান হবে,

$$\frac{2\partial L}{L} \cdot \frac{h^2}{8mL^2}$$

প্রকৃতপক্ষে সমশক্তিসম্পন্নতার এ ধরনের ধ্বংস প্রাপ্তি সচরাচর দেখা যায় (যখনই সিস্টেমটির সামান্য সংশোধন করা হয়)। উদাহরণস্বরূপ, অনেক পারমাণবিক স্তর সমশক্তিসম্পন্ন। কিন্তু যখন কোনো চুম্বক বা বৈদ্যুতিক ক্ষেত্র প্রয়োগ করা হয়, তখন সমশক্তিসম্পন্ন স্তর ভেঙ্গে গিয়ে অনেকগুলি পৃথক উপস্তরে বিভক্ত হয়। এটি স্পষ্টভাবে পারমাণবিক বর্ণালীতে বহুপদী গঠনের উপস্থিতি ব্যাখ্যার ক্ষেত্রে ব্যাপকভাবে সহায়ক।

উদাহরণ ১ ঃ নিম্নের তরঙ্গ অপেক্ষককে সঙ্গতকরণ কর।

$$\psi(x,y,z) = A \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{b} \sin \frac{n_z \pi z}{c}$$

সমাধান ঃ সঙ্গতকরণের শর্ত হলো

$$\int_0^a \int_0^b \int_0^c \psi \psi^* dx \,.\, dy \,.\, dz = 1$$

অতএব $A^2 \int_0^a \int_0^b \int_0^c \sin^2 \frac{n_x \pi x}{a} \sin^2 \frac{n_y \pi y}{b} \sin^2 \frac{n_z \pi z}{c} = 1$

কিন্তু $\int_0^a \sin^2 \frac{n_x \pi x}{a} = \int_0^a \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos \frac{2 n_x \pi x}{a}\right] dx = \frac{a}{2}$

অনুরূপে $\int_0^b \sin^2 \frac{n_y \pi y}{b} = \frac{b}{2}$

এবং $\int_0^c \sin^2 \frac{n_z \pi z}{c} = \frac{c}{2}$

অতএব $A^2 \frac{a}{2} \cdot \frac{b}{2} \cdot \frac{c}{2} = 1$

বা $A^2 = \frac{8}{abc}$

বা $A = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{abc}}$

সুতরাং $\psi (x, y, z) = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{abc}} \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{b} \sin \frac{n_z \pi z}{c}$

উদাহরণ ২ ঃ 1.0 nm দৈর্ঘ্য বিশিষ্ট একটি বাক্সে আবদ্ধ ইলেক্ট্রনের সর্বনিম্ন শক্তি স্তরে x = 0 ও x = 0.2 nm এর মধ্যে থাকার সম্ভাব্যতা P কত হবে ? দেয়া আছে, ইলেক্ট্রনের তরঙ্গ অপেক্ষক $\psi = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi r}{L}\right)$।

সমাধান ঃ সাধারণভাবে x দৈর্ঘ্যের মধ্যে dx ক্ষুদ্র অঞ্চলে কোন কণা পাবার বা থাকার সম্ভাব্যতা হল $\psi^2 dx$। সুতরাং কণা (ইলেক্ট্রন) থাকার মোট সম্ভাব্যতা হবে নির্ধারিত সমগ্র অঞ্চলের উপর $\psi^2 dx$ এর সমাকলন।

এখন x = 0 ও x = L এর মধ্যে ইলেক্ট্রন থাকার সম্ভাব্যতা,

$$P = \int_0^L \psi^2 dx = \frac{2}{L} \sin^2 \left(\frac{n\pi r}{L}\right) dx$$

$$= \frac{2}{L} \int_0^L \frac{1}{2} \left\{1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right\} dx$$

$$= \int_0^L \frac{1}{L} \left\{1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{L}\right)\right\} dx$$

$$= \left[\frac{x}{L} - \frac{1}{L} \cdot \frac{1}{2n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi x}{L}\right) \right]_0^{\iota}$$

$$= \frac{\iota}{L} - \frac{1}{L} \cdot \frac{1}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi r\iota}{L}$$

এখন $\iota = 0.2$ nm, $n = 1$ ও $L = 1.0$ nm বসিয়ে,

$$P = 0.2 - \frac{1}{2\pi} \sin 72^0 = 0.2 - 0.151 = 0.049$$

উদাহরণ ৩ ঃ L দৈর্ঘ্য বিশিষ্ট একমাত্রিক বাক্সে আবদ্ধ কণার ভিত্তিস্তরে তরঙ্গ অপেক্ষক হল

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi x}{L}$$

ধরা যাক, বাক্সটি 10 nm দীর্ঘ। এখন (ক) $x = 4.95$ nm ও $x = 5.05$ nm ও (খ) বাক্সের ডান অর্ধেকাংশে কণার সম্ভাব্যতা কত হবে ?

সমাধান ঃ (ক) সম্ভাব্যতা $= \int_{4.95}^{5.05} \psi 2 \, dx$

$$= \int_{4.95}^{5.05} \frac{2}{L} \sin^2 \frac{\pi x}{L} dx$$

$$= \int_{4.95}^{5.05} \frac{2}{L} \left(\frac{1}{2} \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{L}\right)\right) dx$$

$$= \int_{4.95}^{5.05} \frac{1}{L} \left(1 - \cos \frac{2\pi x}{L}\right) dx$$

$$= \left[\frac{x}{L} - \frac{1}{L} \cdot \frac{1}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{L} \right]_{4.95}^{5.05}$$

$$= \left(\frac{5.05}{10} - \frac{1}{10} \cdot \frac{1}{2\pi} \sin \frac{2\pi \times 5.05}{10}\right) - \left(\frac{4.95}{10} - \frac{1}{10} \cdot \frac{1}{2\pi} \sin \frac{2\pi \times 4.95}{10}\right)$$

$$= \frac{0.1}{10} - \frac{1}{20\pi}$$

$$\left(\sin \frac{2\pi \times 5.05}{10} - \sin \frac{2\pi \times 4.95}{10} \right)$$

$$= 0.01 - \frac{1}{20\pi} (0.0314107 - 0.0314107)$$

$$= 0.01$$ / 0'02

(খ) সম্ভাব্যতা $= \int_5^{10} \frac{2}{L} \sin^2 \frac{\pi x}{L} dx$

$$= 0.5$$

প্রশ্নাবলি

৪.১। কোনো একক কণা একটি এক-মাত্রিক বাক্সে আবদ্ধ থাকলে তার ক্ষেত্রে শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণের রূপ কেমন হবে ? এরূপ বাক্সে কণিকাটি আবদ্ধ করার উপকারিতা কি ?

৪.২। অসীম দেয়ালবিশিষ্ট কোনো একমাত্রিক বাক্সে আবদ্ধ কোনো কণার ক্ষেত্রে শ্রডিঙ্গার সমীকরণ সমাধান কর এবং বিভিন্ন স্তরের শক্তি হিসাব কর।

[১ম অংশ রা.বি., এম.এস-সি (শেষবর্ষ), ১৯৯৭]

৪.৩। আইগেন অপেক্ষক, ψ-এর সঠিক মান কিভাবে পাওয়া যায় ?

৪.৪। আইগেন অপেক্ষকের মানের ভিত্তিতে সম্ভাব্যতা কার্ভ আঁক।

৪.৫। কোনো মুক্ত কণার ক্ষেত্রে শ্রডিঙ্গার সমীকরণ থেকে শুরু করে আয়তাকার বাক্সে আবদ্ধ কণার জন্য প্রযোজ্য তরঙ্গ সমীকরণ উপপাদন কর। এসমীকরণ সমাধান করে শক্তি হিসাব কর।

৪.৬। একটি ত্রি-মাত্রিক বাক্সে আবদ্ধ শক্তির সমীকরণ তার সঠিক আইগেন অপেক্ষকসহ লিখ।

৪.৭। একটি ঘনকাকার বাক্সে আবদ্ধ কণার শ্রডিঙ্গার সমীকরণ লিখ। ঐ কণার শক্তিস্তরগুলো চিত্রাকারে দেখাও।

৪.৮। নিম্নে আলাদাভাবে কতিপয় স্তরের শক্তি দেয়া হলো। এদের সমশক্তিসম্পন্নতা সম্পর্কে পূর্বানুমান কর।

(ক) $\frac{9h^2}{8mL^2}$ (খ) $\frac{11h^2}{8mL^2}$ (গ) $\frac{14h^2}{8mL^2}$

শক্তিস্তরের সমশক্তিসম্পন্নতা কাকে বলে ? উদাহরণসহ ব্যাখ্যা কর।

পঞ্চম অধ্যায়

কেন্দ্রীয় ক্ষেত্রে কণা
(PARTICLE IN A CENTRAL FIELD)

৫.১ হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর ক্ষেত্রে শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণ
Schrodinger Wave Equation for Hydrogen-like Atoms

সাধারণ আলোচনা ঃ একটি আয়তাকার বাক্সে আবদ্ধ কোনো কণার তরঙ্গ অপেক্ষক সরল প্রকৃতির। বেষ্টনী শর্তের মাধ্যমে যে আইগেন অবস্থা উৎপন্ন হয় সে সম্পর্কে মনে মনে কল্পনা করাও (visualize) বেশ সহজ। কিন্তু এ জাতীয় সিস্টেমের বাস্তব রূপ প্রকৃতিতে দেখা যায় না। সরল বাস্তব সিস্টেম হলো হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণু, যেখানে বৈদ্যুতিকভাবে চার্জিত একটি ইলেক্ট্রন বিপরীতভাবে চার্জিত প্রবাণ্ড একটি কণা প্রোটন (যার ভর ইলেক্ট্রনের চেয়ে ১৮৩৬ গুণ ভারি) দ্বারা আকর্ষিত হয়। তরঙ্গ বলবিদ্যার উপর প্রথম গবেষণা পত্রে বিজ্ঞানী **শ্রডিঙ্গার** আইগেন অবস্থা এবং তাদের শক্তি অত্যন্ত শুদ্ধভাবে গণনা করেন, যা পরীক্ষামূলক মানের সাথে সুন্দরভাবে মিলে যায়।

হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর সমস্যা কেন্দ্রীয় আকর্ষক ক্ষেত্রের মধ্যে আবদ্ধ কণার মতোই। বস্তুতপক্ষে একটি আয়তাকার বাক্সে আবদ্ধ কণার সমস্যার অনুরূপ। বাক্সটি এখন আকৃতিগতভাবে গোলাকার এবং তার তীক্ষ্ণ (sharp) বেষ্টনী নেই। কিন্তু বস্তু তরঙ্গ (matter wave) এরই মধ্যে অনুনাদী (resonant), স্থির তরঙ্গ সৃষ্টি করবে। তবে বাক্সটি জ্যামিতিকভাবে গোলাকার হওয়ায় এক্ষেত্রে গাণিতিক জটিলতা খানিকটা বাড়বে।

হাইড্রোজেন পরমাণুতে নিউক্লীয় ভর ইলেক্ট্রনটির চেয়ে ১৮৩৬ গুণ ভারি একথা পূর্বে বলা হয়েছে। সনাতনভাবে সিস্টেমটি ভরকেন্দ্রের (centre of mass) চারদিকে ঘোরে, যে কেন্দ্রটি নিউক্লিয়াসের সন্নিকটে, কিন্তু নিউক্লিয়াসে নয়। নিউক্লিয়াস এবং ইলেক্ট্রনের যুক্তভাবে যে তরঙ্গ সমীকরণ পাওয়া যাবে তাকে দুভাগে ভাগ করা যেতে পারে। একটি অংশ সিস্টেমের ভরকেন্দ্রের স্থানান্তর গতির (translational motion) উপর নির্ভর

করে এবং অন্য অংশটি ভরকেন্দ্রের প্রেক্ষিতে সিস্টেমটির দুটি অংশের আপেক্ষিক গতির (relative motion) উপর নির্ভর করে। আয়তাকার বাক্সে আবদ্ধ একক কণার ক্ষেত্রে যে তরঙ্গ সমীকরণ পাওয়া গেছে স্থানান্তর গতির সমীকরণ ঠিক তার মতোই। অপরপক্ষে কেন্দ্রেই স্থির এমন কেন্দ্রীয় ক্ষেত্রের (central field) মধ্যে ভ্রমণরত একক কণার তরঙ্গ সমীকরণের মতোই হলো আপেক্ষিক গতির সমীকরণ।

হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর অবস্থার প্রকৃতি (nature of state) অনুধাবনের উদ্দেশ্যে সহজেই আমরা ধরে নিতে পারি যে, ভারি প্রকাণ্ড (massive) নিউক্লিয়াসটি কেন্দ্রে অবস্থিত ক্ষেত্রে অবস্থান করে এবং হালকা ইলেক্ট্রনটির স্থির কেন্দ্রীয় ক্ষেত্রের চারদিকে ঘোরে।

এ জাতীয় সিস্টেমের ক্ষেত্রে মূল যে সমস্যাটি জড়িয়ে আছে তা হলো, যখন V (x, y, z) স্পেসের সুষমভাবে গোলাকার অপেক্ষক তখন V (r) যে অপেক্ষকটি খোঁজে তা হচ্ছে ψ (x, y, z) বা আরও পরিষ্কারভাবে ψ (r, θ, ϕ)। অপেক্ষকটি উত্তম আচরণপূর্ণ এবং তার সমাকলনযোগ্য (integrable) বর্গ রয়েছে।

উপপাদন ঃ কোনো হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণু একটি প্রোটনীয় নিউক্লিয়াস, যার বৈদ্যুতিক চার্জ + Ze (Z = প্রোটন সংখ্যা) এবং একটি ইলেক্ট্রন যে কণার চার্জ – e, দ্বারা গঠিত। ইলেক্ট্রনটি প্রোটনের চেয়ে ১৮৩৬ গুণ হালকা। সুবিধার জন্য ধরা যাক, প্রোটনীয় নিউক্লিয়াস স্থির এবং ইলেক্ট্রনটি সন্নিকটে থেকে এর চারদিকে ঘোরে। ইলেক্ট্রনের জন্য ব্যবহৃত ত্রি-মাত্রিক শ্রডিঙ্গার সমীকরণকে হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর ক্ষেত্রে ব্যবহার করা যেতে পারে। যেমন,

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2\mu}{h^2} (E - V) \psi = 0 \qquad (৫.১)$$

কার্টেশীয় অক্ষে (Cartesian axis) সমীকরণটি হচ্ছে,

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2\mu}{h^2} (E - V) \psi = 0 \qquad (৫.২)$$

যেখানে μ = হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর লঘুভর (reduced mass)

$$= \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$ (এখানে m_1 এবং m_2 যথাক্রমে ইলেক্ট্রন ও নিউক্লিয়াসের ভর)

নিম্নের যুক্তির ভিত্তিতে μ-কে ইলেক্ট্রনের ভর m_1 দ্বারা প্রতিস্থাপিত করা যেতে পারে। যেহেতু $m_1 << m_2$, অতএব $m_1 + m_2 \approx m_2$

সুতরাং $$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_2} \approx m_1$$

স্থৈতিক শক্তি V হলো,

$$V = \frac{(\text{ইলেক্ট্রনের চার্জ}) \times (\text{প্রোটনের চার্জ}) \times (\text{প্রোটনের সংখ্যা})}{r}$$

$$= -\frac{Ze^2}{r} \qquad (৫.৩)$$

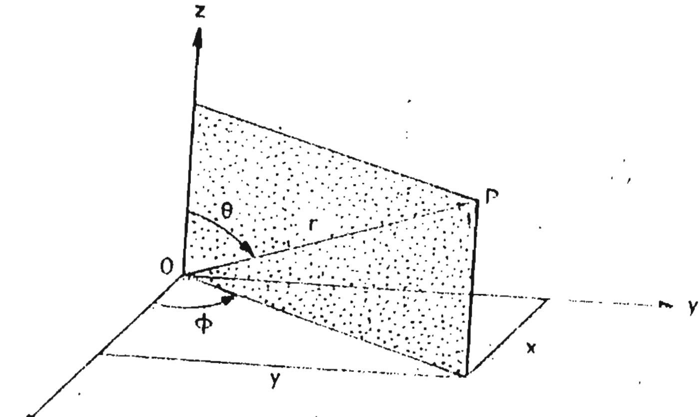
যেখানে দুধরনের চার্জের মধ্যে দূরত্ব r এবং Z হলো প্রোটনের সংখ্যা।

সমীকরণ (৫.২)-এর V এখানে V(r), যা r এর অপেক্ষক এবং তা x, y, z এর অপেক্ষক নয়। আমরা সমীকরণ (৫.৩) কে সমীকরণ (৫.২)-এ প্রতিস্থাপিত করতে পারি না। এ ক্ষেত্রে দুটি বিকল্প আছে। যথাঃ

(ক) r কে $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ দ্বারা প্রতিস্থাপিত করে V- কে কার্টেশীয় অক্ষ, x, y, z এর প্রেক্ষিতে প্রকাশ করা যায়। অথবা,

(খ) গোলকাকার পোলার অক্ষ r, θ, ϕ এর প্রেক্ষিতে শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণ প্রকাশ করা যায়।

p বিন্দুর গোলকাকার পোলার অক্ষ r, θ, ϕ নিম্নের ৫.১ চিত্রে দেখানো হলো।



চিত্র ৫.১ ঃ গোলকাকার পোলার অক্ষ।

চিত্র ৫.১ ঃ গোলকাকার পোলার অক্ষ।

চিত্রটির বিশ্লেষণ নিম্নরূপ ঃ

r = মূল বিন্দু (origin) O থেকে P বিন্দু পর্যন্ত ব্যাসার্ধ ভেক্টরের দৈর্ঘ্য।

$= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$

θ = ব্যাসার্ধ্য ভেক্টর ও z অক্ষের মধ্যকার কোণ

= খমধ্য কোণ (zenith angle)

ϕ = xy তলে ব্যাসার্ধ্য ভেক্টরের অভিক্ষেপ (projection) ও x অক্ষের মধ্যকার কোণ (প্রদর্শিত দিকে মাপিত)

= দিগবলয় কোণ (azimuth angle)

O কেন্দ্রবিশিষ্ট কোনো গোলকের তলে (surface) স্থির খমধ্য কোণের রেখাগুলো ভূমন্ডলের (globe) অক্ষাংশের সমান্তরাল রেখার অনুরূপ। কিন্তু কোনো বিন্দুর θ এর মান তার অক্ষাংশের সমান নয়। উদাহরণস্বরূপ, বিষুবরেখা বরাবর $\theta = 90^\circ$। কিন্তু এ

অবস্থানে অক্ষাংশ হলো $0°$। পুনরায় স্থির দিগবলয় কোণের (ϕ) রেখাগুলি দ্রাঘিমাংশের মধ্যরেখার (meridians of longitude) মতোই। আমরা যদি গোলকটিকে পরিচিত পৃথিবী বা ভূমণ্ডল মনে করি তাহলে মেরুর মধ্য দিয়ে গমনকারী রেখাটিকে z অক্ষ এবং বিষুব রেখাটিকে xy তলে শায়িত ধরা যায়।

সমীকরণ (৫.২) কে আরও সঠিকভাবে লিখলে দাঁড়ায়,

$$\frac{\partial^2\psi\,(x,y,z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi\,(x,y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi\,(x,y,z)}{\partial z^2}$$

$$+ \frac{8\pi^2\mu}{h^2}\,[E - V(r)]\;\psi\,(x, y, z) = 0 \qquad (৫.৪)$$

যেখানে $V(r) = -\dfrac{Ze^2}{r}$ এবং $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ পটেনশিয়াল অপেক্ষক, V ছাড়া বাকি সবদিক থেকেই সমীকরণটি আয়তাকার বাক্সে আবদ্ধ কোনো কণার তরঙ্গ সমীকরণের মতো।

দুর্ভাগ্যবশত সমীকরণের (৫.৪)কে x, y এবং z অক্ষে পৃথক করা সম্ভব নয়। অর্থাৎ কোনোক্রমেই একে তিনটি সাধারণ ডিফারেন্সিয়াল সমীকরণে ভাঙ্গা যায় না, যার প্রতিটি যথাক্রমে x, y, z এর উপর নির্ভর করে।

যাহোক যদি আমরা এ ক্ষেত্রে কণার অঞ্চল ও তরঙ্গ অপেক্ষক $\psi(r, \theta, \phi)$ বর্ণনা করার জন্য গোলকাকার পোলার অক্ষ সিস্টেম প্রয়োগ করি, তাহলে সমীকরণ (৫.৪) এর রূপান্তরিত রূপকে তিনটি সাধারণ ডিফারেন্সিয়াল সমীকরণে পৃথক করা যায়।

এখন একই সমীকরণে দুধরনের অক্ষ সিস্টেম (যেমনঃ কার্টেশীয় ও পোলার) নিহিত রয়েছে। ৫.১ চিত্র থেকে উক্ত দুধরনের অক্ষ সিস্টেমের মধ্যে নিম্নরূপ সম্পর্ক পাওয়া যায়ঃ

$$\left.\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\phi \\ y &= r\sin\theta\sin\phi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned}\right\} \qquad (৫.৫)$$

তরঙ্গ সমীকরণকে সম্পূর্ণরূপে গোলকাকার পোলার অক্ষে রূপান্তরিত করতে হলে x, y ও z ঘটিত সকল পদকে r, θ ও ϕ ঘটিত পদে রূপান্তরিত করতে হবে। এ প্রক্রিয়ায় অক্ষ রূপান্তর সম্পর্ক (৫.৫) ব্যবহার করে,

$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \psi$ (x, y, z) পদটি দাঁড়ায়,

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}$$

যেখানে $\psi = \psi\,(r, \theta, \phi)$

এবং গোলকাকার পোলার অক্ষে পূর্ণাঙ্গ তরঙ্গ সমীকরণ নিম্নরূপ হবে ঃ

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}$$

$$+ (8\pi^2\mu\,(E - V)\,\psi = 0 \qquad (৫.৬)$$

V এর স্থলে– $\frac{Ze^2}{r}$ বসিয়ে এবং সমগ্র সমীকরণ (৫.৬) কে $r^2\sin^2\theta$ দ্বারা গুণ করে,

$$\sin^2\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta^2}\right)$$

$$+ \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{8\pi^2\mu r^2\sin^2\theta}{h^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right)\psi = 0 \qquad (৫.৭)$$

সমীকরণ (৫.৭) হলো হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুতে ইলেক্ট্রনের তরঙ্গ অপেক্ষকের আংশিক ডিফারেন্সিয়াল সমীকরণ। ψ-কে বিভিন্ন শর্ত পালন করতে হয় (উদাহরণস্বরূপ প্রতিটি বিন্দু r, θ, ϕ-তে ψ এর কেবল একটি মান থাকবে)। এ সমীকরণ ইলেক্ট্রনের আচরণ সম্পূর্ণভাবে বর্ণনা করতে পারে। এ আচরণ কি তা জানার জন্য সমীকরণ (৫.৭)কে ψ এর প্রেক্ষিতে সমাধান করা আবশ্যক।

৫.২ ভেরিয়েবল পৃথকীকরণ ঃ তরঙ্গ সমীকরণ সমাধানের একটি উপায় Separation of Variables: A Way for The Solution of The Wave Equation

হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর ক্ষেত্রে শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণকে গোলকাকার পোলার অক্ষে প্রকাশ করার সুবিধা এই যে, এ অবস্থায় সমীকরণটিকে তিনটি অনির্ভরশীল

সমীকরণে পৃথক করা যায়, যার প্রতিটিতে একটি মাত্র অক্ষ জড়িত থাকে। এ উদ্দেশ্যে সাধনের জন্য ধরা যাক, ψ (r,θ,ϕ) তিনটি ভিন্ন ভিন্ন অপেক্ষকের গুণফল। যেমন, $R(r)$ যা একমাত্র r এর উপর; Θ (θ) যা একমাত্র θ এর উপর এবং $\Phi(\phi)$ যা একমাত্র ϕ এর উপর নির্ভর করে। ফলে আমরা লিখতে পারি,

$$\psi\ (r,\theta,\phi) = R(r)\ .\ \Theta(\theta)\ .\ \Phi(\phi) \tag{৫.৮}$$

θ এবং ϕ স্থির রেখে নিউক্লিয়াস থেকে ব্যাসার্ধ ভেক্টর বরাবর কিভাবে তরঙ্গ অপেক্ষক ψ পরিবর্তিত হয়, অপেক্ষক $R(r)$ তা বর্ণনা করে। r এবং ϕ স্থির রেখে কেন্দ্রে যার নিউক্লিয়াস এমন গোলকের পৃষ্ঠতলে মধ্যরেখা (meridian) বরাবর খমধ্য কোণ পরিবর্তনের সাথে সাথে তরঙ্গ অপেক্ষক, ψ কিভাবে পরিবর্তিত হয় অপেক্ষক Θ (θ) তা নির্দেশ করে। আবার r এবং θ স্থির রেখে কেন্দ্রে যার নিউক্লিয়াস এমন গোলকের পৃষ্ঠতলে একটি সমান্তরাল রেখা বরাবর দিগবলয় কোণ ϕ এর পরিবর্তনের সাথে সাথে কিভাবে তরঙ্গ অপেক্ষক ψ পরিবর্তিত হয় অপেক্ষক Φ (ϕ) দ্বারা তা বর্ণনা করা যায়।

সমীকরণ (৫.৮) কে নিম্নরূপে সরলভাবে লেখা যায়ঃ

$$\psi = R\Theta\Phi$$

সুতরাং

$$\frac{\partial\psi}{\partial r} = \Theta\Phi\frac{\partial R}{\partial r}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial\theta} = R\Phi\frac{\partial\Theta}{\delta\theta}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial\phi} = R\Theta\frac{\partial\Phi}{\partial\phi}$$

অতএব হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর জন্য প্রযোজ্য শ্রডিঙ্গার সমীকরণে ψ এর স্থলে $R\Theta\Phi$ প্রতিস্থাপন করে এবং সমীকরণটিকে $R\Theta\Phi$ দ্বারা ভাগ করে,

$$\frac{\sin^2\theta}{R}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{\sin^2\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)$$

$$+\frac{1}{\phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} + \frac{8\pi^2\mu r^2\sin^2\theta}{h^2}\left(E+\frac{Ze^2}{r}\right) = 0 \tag{৫.৯}$$

সমীকরণ (৫.৯) এর তৃতীয় পদটি কেবল দিগবলয় কোণ ϕ এর অপেক্ষক। অন্য পদগুলি কেবল R ও θ এর অপেক্ষক।

সমীকরণ (৫.৯) এর পুনর্বিন্যাস করে

$$\frac{\sin^2\theta}{R}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{\sin^2\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\Theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\frac{8\pi^2\mu r^2\sin^2\theta}{h^2}\left(E+\frac{Ze^2}{r}\right)$$

$$=-\frac{1}{\Theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} \qquad (৫.১০)$$

এ সমীকরণটি তখনই শুদ্ধ হতে পারে যখন এর উভয় পক্ষ একই ধ্রুবকের সমান হয়। কারণ তারা বিভিন্ন ভেরিয়েবলের অপেক্ষক। ধরা যাক, এ ধ্রুবকটি m^2। অতএব,

$$-\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}=m^2। \qquad (৫.১১)$$

সমীকরণ (৫.১০) এর ডান পক্ষের স্থলে m^2 বসিয়ে এবং সমগ্র সমীকরণকে $\sin^2\theta$ দ্বারা ভাগ করে এবং পুনর্বিন্যাস করে আমরা পাই,

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{8\pi^2\mu r^2}{h^2}\left(E+\frac{Ze^2}{r}\right)$$

$$=\frac{m^2}{\sin^2\theta}-\frac{1}{\Theta\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) \qquad (৫.১২)$$

পুনরায় দেখা যাচ্ছে, আমরা যে সমীকরণ পেলাম তার প্রতিটির পার্শ্বে ভিন্ন ভেরিয়েবল রয়েছে। এটি সম্ভব হতে হলে উভয় পক্ষকে একটি ধ্রুবকের সমান হতে হবে। এ ধ্রুবককে β ধরে,

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)\frac{8\pi^2\mu r^2}{h^2}\left(E+\frac{Ze^2}{r}\right)=\beta \qquad (৫.১৩)$$

এবং $$\frac{m^2}{\sin^2\theta}-\frac{1}{\Theta\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)=\beta \qquad (৫.১৪)$$

সমীকরণ (৫.১১), (৫.১৩) এবং (৫.১৪)-কে যথাক্রমে লেখা যায়,

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} + m^2\Phi = 0 \qquad (৫.১৫)$$

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[\frac{8\pi^2\mu}{h^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right) - \frac{B}{r^2}\right] R = 0 \qquad (৫.১৬)$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \left[\beta - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]\Theta = 0 \qquad (৫.১৭)$$

সমীকরণ (৫.১৫), (৫.১৬) এবং (৫.১৭) এর প্রতিটি একটি একক ভেরিয়েবল ঘটিত একক অপেক্ষকের সাধারণ ডিফারেন্সিয়াল সমীকরণ। এভাবে আমরা হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর শ্রডিঙ্গার সমীকরণ সরলীকরণ করতে সক্ষম হয়েছি, যে সমীকরণ প্রাথমিকভাবে r, θ, ϕ অক্ষ ঘটিত $\psi(r, \theta, \phi)$ অপেক্ষকের আংশিক ডিফারেন্সিয়াল সমীকরণ ছিল।

তিনটি পৃথকীকৃত সমীকরণের সমাধান ঃ কোয়ান্টাম সংখ্যার বিকাশ
Solutions of Three Separated Equations : Development of Quantum Numbers

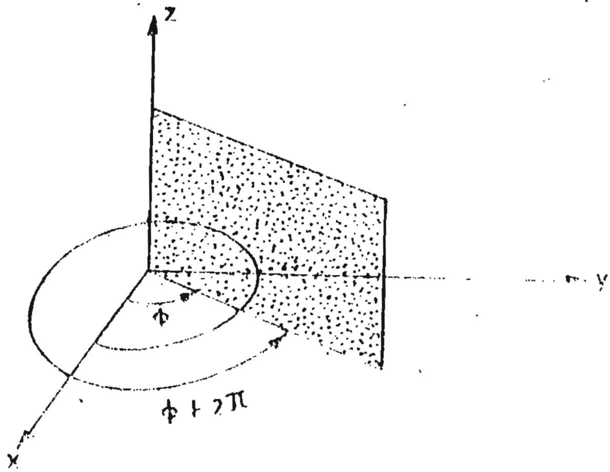
৫.৩ Φ নির্ভরশীল সমীকরণের সমাধান ঃ চুম্বকীয় কোয়ান্টাম সংখ্যা
Solution of Φ Dependent Equation : Magnetic Quantum Number

প্রথমেই m এর নির্বাচন সম্পর্কে কথা বলা যাক। Φ-নির্ভরশীল সমীকরণের সমাধান হলো ঃ

$$\Phi(\phi) = Ae^{im\phi} \qquad (৫.১৮)$$

যেখানে A = সমাকলন ধ্রুবক। যেহেতু কোনো তরঙ্গ অপেক্ষক উত্তম আচরণপূর্ণ অর্থাৎ তা সসীম একক মান সম্পন্ন এবং অবিচ্ছিন্ন, সুতরাং স্পেসে একটি নির্দিষ্ট বিন্দুতে পূর্ণাঙ্গ তরঙ্গ অপেক্ষক, ψ-এর উপাদান (component) Φ এরও একক মান থাকবে। (৫.২) চিত্র থেকে এটি পরিস্কার যে, ϕ এর মান বৃদ্ধির সাথে সাথে (মনে কর, এখন r এবং θ ধ্রুবক) r, θ ও ϕ দ্বারা সূচিত বিন্দুটি z-অক্ষের চারদিকে বৃত্তাকারে ঘুরতে থাকে এবং শেষে যখন $\phi = \phi + 2\pi$ হয়, তখন তা মূল অবস্থানে ফিরে আসে। অতএব এটি অবশ্যই সত্য হবে যে,

$$\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi + 4\pi) = \Phi(\phi + 6\pi)$$ ইত্যাদি।



চিত্র ৫.২ ঃ ϕ এবং $\phi + 2\pi$ এর অবস্থান একই।

উপরের যুক্তিও নিচের সমীকরণের ক্ষেত্রে প্রযোজ্য ঃ

$$Ae^{im\phi} = Ae^{im(\phi + 2\pi)}$$

এটি ঘটতে পারে একমাত্র তখনই যখন $m = 0$ বা ধনাত্মক বা ঋণাত্মক অখন্ড সংখ্যা। অর্থাৎ

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \qquad (৫.১৯)$$

ধ্রুবক m কে **চুম্বকীয় কোয়ান্টাম সংখ্যা** (magnetic quantum number) (হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর) বলা হয়।

Φ সমীকরণের সমাধানের ধ্রুবক A-এর মান Φ কে সঙ্গতকরণ (normalize) করে পাওয়া যায়। অর্থাৎ

$$\int_0^{2\pi} \Phi \times \Phi \, d\phi = 1$$

বা, $$\int_0^{2\pi} A^2 \, d\phi = L \qquad (৫.২০)$$

বা, $$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tag{৫.২১}$$

অতএব সমাধান দাঁড়ায়,

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \tag{৫.২২}$$

৫.৪ Θ নির্ভরশীল সমীকরণের সমাধান ঃ কাক্ষিক (অরবিটাল) কোয়ান্টাম সংখ্যা
Solution of Θ-Dependent Equation : Orbital Quantum Number

Θ-নির্ভরশীল সমীকরণ সমাধান করে অরবিটাল কোয়ান্টাম সংখ্যা পাওয়া যায়। কিন্তু ডিফারেন্সিয়াল সমীকরণটির সমাধান করা অত্যন্ত জটিল। এর সমাধান করতে হলে সহযোগী লেজেন্ডার অপেক্ষক (associated legendre function) ব্যবহার করতে হবে।

Θ- নির্ভরশীল সমীকরণটি পুনরায় লেখা যাক ঃ

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \left(\beta - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta = 0$$

ধর, $x = \cos\theta$ (৫.২৩)

যেখানে x একটি নতুন ভেরিয়েবল।

ফলে $$\sin\theta = \sqrt{1-x^2} \tag{৫.২৪}$$

আবার $$\frac{d\Theta}{d\theta} = \frac{dx}{d\theta}\cdot\frac{d\Theta}{dx} = -\sin\theta\frac{d\Theta}{dx} \tag{৫.২৫}$$

অতএব সাধারণভাবে,

$$\frac{d}{d\theta} = -\sin\theta\frac{d}{dx} \tag{৫.২৬}$$

সমীকরণ (৫.২৫) কে $\sin\theta$ দ্বারা গুণ করে,

$$\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta} = -\sin\theta\frac{d\Theta}{dx}$$

$$= -(1-x^2)\frac{d\Theta}{dx} \qquad (৫.২৭)$$

সমীকরণ (৫.২৫) এবং (৫.২৬) কে Θ–নির্ভরশীল ডিফারেন্সিয়াল সমীকরণে ব্যবহার করে,

$$\frac{d}{dx}\left\{(1-x^2)\frac{d\Theta}{dx}\right\}+\left(\beta-\frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta = 0 \qquad (৫.২৮)$$

সমীকরণটি **লেজেন্ডার সমীকরণ** বলা হয়। এটি উল্লেখ্য যে, x এর মান -1 এবং $+1$ এর মধ্যে থাকলেই $\cos\theta$ অর্থপূর্ণ হবে।

উপরিউক্ত লেজেন্ডার সমীকরণের সমাধান পলিনমিয়াল পদ্ধতিতে সুবিধাজনকভাবে করা যেতে পারে। এটি করতে হলে Θ কে x এর অন্য অপেক্ষক দ্বারা প্রতিস্থাপিত করা দরকার। এ অপেক্ষকটি হলো $G(x)$। একে নিম্নরূপে সংজ্ঞায়িত করা যায়ঃ

$$\Theta = (1-x^2)^{m/2}\, G \qquad (৫.২৯)$$

x- এর প্রেক্ষিতে ব্যবকলন করে,

$$\frac{d\Theta}{dx} = -mx(1-x^2)^{m/2-1}G + (1-x^2)^{m/2}\frac{dG}{dx}$$

$$বা,\ (1-x^2)\frac{d\Theta}{d\theta} = -mx(1-x^2)^{m/2}G + (1-x^2)^{m/2+1}\frac{dG}{dx} \qquad (৫.৩০)$$

অতএব

$$\frac{d}{dx}\left\{(1-x^2)\frac{d\Theta}{dx}\right\} = \left\{-m(1-x^2)^{m/2} + m^2x^2(1-x^2)^{m/2-1}\right\}G$$

$$-\left\{2x(m+1)(1-x^2)^{m/2}\right\}G'$$

$$+(1-x^2)^{m/2+1}G'' \qquad (৫.৩১)$$

যেখানে $G' = \frac{dG}{dx}$ এবং $G'' = \frac{d^2G}{dx^2}$ (৫.৩২)

সমীকরণ (৫.২৮) এর বামপক্ষে সমীকরণকে ব্যবহার করে এবং সমগ্র সমীকরণকে $\left(1-x^2\right)^{1/2m}$ দ্বারা ভাগ করলে দাঁড়ায়,

$$(1-x^2)\, G'' - 2\,(m+1)\, xG' + \left\{ \beta - m\,(m+1) \right\} G = 0$$

বা, $$(1-x^2)\, G'' - 2axG' + bG = 0 \qquad (৫.৩৩)$$

যেখানে $a = m+1$ এবং $b = \beta - m\,(m+1)$ (৫.৩৪)

এখন G(x) কে একটি ঘাত শ্রেণিতে (power series) প্রকাশ করা যাক।

$$G = k_o + k_1x + k_2\, x^2 + k_3\, x^3 + \ldots \qquad (৫.৩৫)$$

অতএব $G' = k_1 + 2k_2x + 3k_3\, x^2 + 4k_4\, x^3 + \ldots.$ (৫.৩৬)

এবং $G'' = 2k_2 + 6k_3\, x + 12k_4\, x^2 + \ldots$ (৫.৩৭)

সমীকরণ (৫.৩৩)-এ সমীকরণ (৫.৩৬) ও (৫.৩৭) ব্যবহার করে,

$$(1-x^2)\,(2k_2 + 6k_3x + 12k_4x^2 + 20k_5x^3 + \ldots)$$

$$- 2ax\,(k_1 + 2k_2x + 3k_3x^2 + 4k_4x^3 + \ldots.)$$

$$+ b\,(k_o + k_1x + k_2x^2 + k_3\, x^3 + \ldots.) = 0 \qquad (৫.৩৮)$$

x- এর ঘাত পুনর্বিন্যাস করে পাওয়া যায়,

$$2k_2 + 6k_3\, x + 12k_4\, x^2 + 20k_5\, x^3 + \ldots$$

$$- 2k_2\, x^2 - 6k_3\, x^3 + \ldots.$$

$$- 2ak_1x - 4ak_2\, x^2 - 6ak_3\, x^3 - \ldots$$

$$+ bk_o + bk_1x - bk_2x^2 + bk_3x^3 + \ldots. = 0 \qquad (৫.৩৯)$$

যদি x এর সকল সম্ভাব্য মানের জন্য শ্রেণিটিকে শূন্য হতে হয়, তবে পৃথক পৃথকভাবে x এর ভিন্ন ভিন্ন ঘাতের সহগগুলিকে অবশ্যই বিলুপ্ত হতে হবে (must also vanish)।

অতএব

$$2k_2 + bk_o = o$$

$$6k_3 + (b - 2a)\, k_1 = o$$

$$12k_4 + (b - 4a - 2)\, k_2 = o$$

$$20k_5 + (b - 6a - 6)k_3 = o$$

সুতরাং সাধারণভাবে,

$$(n+1)\,(n+2)\, k_{n+2} - \left\{ b - 2na - n(n-1) \right\} k_n = o \qquad (৫.৪০)$$

যেখানে n একটি অখণ্ড সংখ্যা (integer)। সমীকরণ (৫.৩৪) থেকে a এবং b এর মান নিয়ে (৫.৪০) সমীকরণে ব্যবহার করলে আমরা **রিকার্শন ফর্মুলা** (recursion formula) পাইঃ

$$\frac{k_{n+2}}{k_n} = \frac{(n+m)\,(n+m+1) - \beta}{(n+1)\,(n+2)} \qquad (৫.৪১)$$

যেহেতু G(x) গ্রহণযোগ্য তরঙ্গ সমীকরণ ψ এর একটি অংশ, সুতরাং এটি একটি পলিনমিয়াল হওয়া উচিত যা একটি সসীম সংখ্যক পদের পর ভেঙ্গে যাবে। এ শর্তপূরণ করতে হলে রিকার্শন ফর্মুলার লবের মান শূন্য হতে হবে।

ফলে

$$(n+ m)\,(n+ m+1) - \beta = o$$

বা, $$\beta = (n+ m)\,(n+ m+1) \qquad (৫.৪২)$$

Φ সমীকরণের সমাধান থেকে আমরা জানি যে, m এর মান শূন্য বা যে কোনো অখণ্ড সংখ্যা হতে পারে। যেহেতু n একই শর্ত অনুসরণ করে সেহেতু (n+m) শূন্য বা যে কোনো অখণ্ড সংখ্যা হতে পারে। (৫.৪২) সমীকরণে (n+m)-এর পরিবর্তে l ব্যবহার করে,

$$\beta = l\,(l+1) \qquad (৫.৪৩)$$

যেখানে l = o, 1, 2, 3, ... ইত্যাদি এবং l কে কাক্ষিক কোয়াণ্টাম সংখ্যা (orbital quantum number) বলা হয় (হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর ক্ষেত্রে)।

কাক্ষিক কোয়ান্টাম সংখ্যা এবং চুম্বকীয় কোয়ান্টাম সংখ্যার মধ্যে সম্পর্ক নিম্নরূপঃ

$$l = 0, 1, 2, 3, \ldots\ldots (n - l)$$

$$m = 0 \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots \pm l \qquad (৫.৪৪)$$

সহযোগী লেজেন্ডার পলিনমিয়াল ব্যবহার করে Θ- নির্ভরশীল সমীকরণের সমাধান নিম্নরূপ পাওয়া যায় ঃ

$$\Theta(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \times P_l^{|m|}(\cos\theta)$$

যেখানে বর্গমূলের অধীনস্থ রাশি সঙ্গতকরণ ফ্যাক্টর এবং $P_l^m(x)$ কে সহযোগী পলিনমিয়াল অপেক্ষক বলা হয়।

৫.৫ R- নির্ভরশীল সমীকরণের সমাধান ঃ প্রধান কোয়ান্টাম সংখ্যা Solution of R-Dependent Equation : Principal Quantum Number

প্রধান কোয়ান্টাম সংখ্যাকে মোট শক্তির কোয়ান্টাম সংখ্যা (quantum number of total energy) বলা হয়। হাইড্রোজেন বা হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর ক্ষেত্রে প্রযোজ্য শ্রডিঙ্গার সমীকরণের মধ্যেই এ কোয়ান্টাম সংখ্যা নিহিত। R-নির্ভরশীল (রেডিয়াল সমীকরণ (radial equation) সমীকরণকে সমাধান করে এ কোয়ান্টাম সংখ্যা লাভ করা যায়। প্রাপ্ত কোয়ান্টাম সংখ্যার সাথে অরবিটাল কোয়ান্টাম সংখ্যার যোগসূত্র আছে।

রেডিয়াল (৫.১৬) সমীকরণে β এর মান $l(l+1)$ স্থাপন করে,

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left[\frac{8\pi^2\mu}{h^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0 \qquad ১$$

বা প্রথম পদকে সম্প্রসারণ করে,

$$\frac{1}{r^2}\left[r^2\frac{d^2R}{dr^2} + 2r.\frac{dR}{dr}\right]\left[\frac{8\pi^2\mu}{h^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0$$

$$\text{বা, } \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2dR}{rdr} + \left[\frac{8\pi^2\mu}{h^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r}\right) - \frac{l\,(l+1)}{r^2} \right] R = o$$

$$\text{বা, } \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2dR}{rdr} + \left[\frac{8\pi^2\mu E}{h^2} + \frac{8\pi^2\mu Ze^2}{r} - \frac{l\,(l+1)}{r^2} \right] R = o \qquad (৫.৪৫)$$

বদ্ধ ইলেক্ট্রনিক শেল (electronic shell) বিশিষ্ট অ-আয়নিত পরমাণুর শক্তির E এর ঋণাত্মক মান থাকতে পারে– সনাতন পারমাণবিক তত্ত্ব এটিই পূর্বানুমান করে। এ শর্তটি কোয়ান্টাম বলবিদ্যার সমস্যা আলোচনায় আমাদেরকে সাহায্য করবে। এখন আমরা সুবিধানুযায়ী ঋণাত্মক শক্তি মান E বিশিষ্ট একটি নতুন পরিমাত্রা (parameter) n প্রয়োগ করতে পারি, যা নিম্নরূপে সংজ্ঞায়িত করা যায় ঃ

$$n^2 = -\frac{2\pi^2\mu^2Z^2e^4}{h^2E} \qquad (৫.৪৬)$$

এবং r এর স্থলে একটি নতুন ভেরিয়েবল x-কে সংজ্ঞায়িত করা যায় নিম্নরূপেঃ

$$x = \frac{2Z}{na_o}\, r \qquad (৫.৪৭)$$

$$\text{যেখানে } a_o = \frac{h^2}{4\pi^2\mu e^2} \qquad (৫.৪৮)$$

এটি হাইড্রোজেন পরমাণুর তথাকথিত বোর কক্ষপথের (Bohr orbit) মতো (সবচেয়ে ছোট)। (৫.৪৫) সমীকরণে n ও x এর মান স্থাপন করে এবং R(r)-কে একটি নতুন অপেক্ষক, X(x) দ্বারা প্রতিস্থাপন করে,

$$\frac{d^2X}{dx} + \frac{2}{x} \cdot \frac{dX}{dx} + \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{n}{x} - \frac{l\,(l+1)}{x^2} \right\} X = o \qquad (৫.৪৯)$$

যেখানে (x) এর মান শূন্য (o) থেকে অসীম পর্যন্ত পরিবর্তিত হয়। যদি (x)-কে খুব বড় একটি রাশি ধরা হয়, তবে সমীকরণ (৫.৪৯) নিচের অ্যাসিমটোটিক সমীকরণে পরিণত হয় ঃ

$$\frac{d^2X}{dx} - \frac{1}{4}X = o \qquad (৫.৫০)$$

এ সমীকরণের সমাধানগুলি হলো

$$X(x) = e^{x/2} \text{ এবং } X(x) = e^{-x/2} \qquad (৫.৫১)$$

এ দুটি সমাধানে দ্বিতীয়টি সন্তোষজনক হবে। কারণ x তথা নিউক্লিয়াস থেকে ইলেক্ট্রনের দূরত্ব r যতোই অসীমের দিকে বাড়বে সমাধানটির মান ততোই শূন্যের দিকে কমবে।

অতএব সমীকরণ (৫.৪৯) এর সম্ভাব্য সমাধান হলো

$$X(x) = e^{-x/2} F(x) \qquad (৫.৫২)$$

যেখানে F(x) অন্য একটি ভেরিয়েবল x এর অপেক্ষক। F (x)-কে দুটি ফ্যাক্টরে বিভক্ত করে,

$$F(x) = x^{l} G(x) \qquad (৫.৫৩)$$

যেখানে পূর্বের ন্যায় l-এর একটি তাৎপর্য রয়েছে এবং G (x) হলো x-এর অন্য একটি অপেক্ষক। এভাবে আমরা লিখতে পারি,

$$R(r) = X(x) = e^{-x/2} . x^{l} G(x) \qquad (৫.৫৪)$$

সমীকরণ (৫.৫৪) থেকে G (x) এর প্রেক্ষিতে $\frac{d^2X}{dx^2}$ এবং $\frac{dX}{dx}$ কে মূল্যায়ন করা যায়। এদের মান (৫.৪৯) সমীকরণে স্থাপন করলে ফলাফল দাঁড়ায়,

$$x\frac{d^2G}{dx^2} + \left\{(2l+1)+1-x\right\}\frac{dG}{dx} + (n-l-1)G = o \qquad (৫.৫৫)$$

G(x)-কে **সহযোগী ল্যাগুয়েরী পলিনমিয়াল** (associated Laguerre polynomial)-এর সাথে অভিন্ন মনে করে আমরা লিখতে পারি,

$$p = 2l + 1 \qquad (৫.৫৬)$$

এবং $$k = n + l \qquad (৫.৫৭)$$

যেখানে p হলো সহযোগী ল্যাগুয়েরী পলিনমিয়ালের ডেরিভেশনের (derivation) ক্রম এবং k হলো প্রাথমিক পলিনমিয়ালের ব্যবকলনের সংখ্যা।

অর্থাৎ

$$y = x^{k}e^{-x} \qquad (৫.৫৮)$$

সহযোগী ল্যাগুয়েরী পলিনমিয়াল $L_{k}^{p}(x)$-এ p এবং k এর উভয়কেই শূন্য বা অখণ্ড সংখ্যা হতে হবে। অতএব $2l+1$ এবং $n+l$ কে অবশ্যই শূন্য (o) বা অখণ্ড হওয়া আবশ্যক। যেহেতু পূর্বেই এটি প্রতিষ্ঠিত হয়েছে যে, l শূন্য বা অখণ্ড হবে এবং $k \leq p$. সেহেতু আমরা পাই,

$p = 2l + 1 = o$ বা অখণ্ড

$k = n + l = o$ বা অখণ্ড

$k \leq p$

অতএব $2l + 1 \geq n + l$

বা, $n \geq l + 1$ (৫.৫৯)

যেহেতু $(l = o, 1, 2, 3, \ldots. (n - l)$

সুতরাং $n = 1, 2, 3, 4 \ldots\ldots$ ইত্যাদি (৫.৬০)

এখানে n কে **প্রধান কোয়ান্টাম সংখ্যা** বলা হয়।

ল্যাগুয়েরী পলিনমিয়ালকে কোনো ফ্যাক্টর C দ্বারা গুণ করলে সমীকরণ (৫.৫৫) এর একটি সমাধান পাওয়া যায়। অতএব আমরা লিখতে পারি

$$R(x) = CL_{n+l}^{2l+1}(x) \quad (৫.৬১)$$

যেখানে C সঙ্গতকরণ ফ্যাক্টরের সমান হতে পারে। এভাবে আমরা সমীকরণ (৫.৫৪) থেকে রেডিয়াল অপেক্ষক R(r) এর একটি পূর্ণাঙ্গ প্রকাশ লাভ করি। যথা,

$$R(r) = C^{-x/2} x^{l} L_{n+l}^{2l+1}(x) \quad (৫.৬২)$$

এবং
$$C = \left(\frac{x}{r}\right)^2 \frac{(n-l-1)!}{2n\{n+l!\}^2} \quad (৫.৬৩)$$

এরূপে আমরা দেখতে পাই যে, হাইড্রোজেন বা হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর শ্রডিঙ্গার সমীকরণের পূর্ণাঙ্গ সমাধান থেকে তিনটি কোয়ান্টাম সংখ্যা পাওয়া যায়। নিচে তা দেখানো হলো।

প্রধান কোয়ান্টাম সংখ্যা, $n = 1, 2, 3, \ldots\ldots$

অরবিটাল কোয়ান্টাম সংখ্যা, $l = 0, 1, 2, 3 \ldots\ldots (n-1)$

চৌম্বক কোয়ান্টাম সংখ্যা, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots\ldots \pm l$

এক্ষেত্রে ইলেক্ট্রন স্পিন কোয়ান্টাম সংখ্যা (যা ইলেক্ট্রনের স্পিন সমস্যার সাথে জড়িত) নির্ণয় করা সম্ভব হলো না। স্পিন ব্যতীত আইগেন অপেক্ষকের পূর্ণাঙ্গ প্রকাশ নিম্নরূপে লেখা যায় ঃ

$$\Psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)\,\Theta_{lm}(\theta)\,\Phi_m(\phi) \qquad (৫.৬৪)$$

এ অপেক্ষকগুলি আপাতদৃষ্টিতে জটিল মনে হতে পারে। কিন্তু কোয়ান্টাম সংখ্যা n, l এবং m এর নিম্ন মানগুলোতে অপেক্ষকগুলো সরল রূপ ধারণ করে।

নিম্নের তালিকায় $n = 1$ ও 2, $l = 0$ এবং 1 এবং $m = 0$ এবং ± 1 এর ক্ষেত্রে $R(r)$, $\Theta(\theta)$ এবং $\Phi(\phi)$ এর সমীকরণ দেয়া হলো।

তালিকা ৫.১ ঃ হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর সঙ্গতকৃত রেডিয়াল অপেক্ষক (radial functions)।

n	l	$R_{nl}(r)$
1	0	$2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$
2	0	$\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$
2	1	$\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} \frac{Zr}{a_0} e^{-Zr/2a_0}$

তালিকা ৫.২ ঃ হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর সঙ্গতকৃত গোলকাকার অপেক্ষক।

l	m	$\Theta_{lm}(\theta)$	$\Phi_m(\phi)$
0	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

1	0	$\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
1	±1	$\sqrt{\frac{3}{2}}\sin\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm i\Phi}$ বা, $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos\phi$ এবং $\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\phi$

সমীকরণ (৫.৬৪) দ্বারা প্রকাশিত আইগেন অপেক্ষককে স্পেস তরঙ্গ অপেক্ষক (space wave function) বলা হয়। R (r), $\Theta(\theta)$ এবং $\Phi(\phi)$ অপেক্ষকগুলোর গুণফল থেকে তা নির্ণয় করা হয়। নিম্নের তালিকায় প্রধান কোয়ান্টাম সংখ্যার নিম্ন মানের দিকে কতিপয় স্পেস তরঙ্গ অপেক্ষক দেখানো হলো।

তালিকা ৫.৩ ঃ স্পেস তরঙ্গ অপেক্ষক।

n	l	m	অরবিটাল	আইগেন অপেক্ষক
1	o	o	ls	$\Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_o}$
2	o	o	2s	$\Psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a_o}\right) e^{-Zr/2a_o}$
2	1	o	2p	$\Psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-Zr/2a_o}.r\cos\theta$
2	1	±1	2p	$\Psi_{211} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-Zr/2a_o}.r\sin\theta\cos\phi$
				$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-Zr/2a_o}.r\sin\theta\cos\phi$

যখন ইলেক্ট্রনটি n= 1 (k শেল)-এ অবস্থান করে, যার l = o এবং m = o, তখন ইলেক্ট্রনটিকে ls ইলেক্ট্রন বলা হয়। আবার যখন n = 2 (L শেল), তখন সম্ভাব্য চারটি ইলেক্ট্রনীয় অবস্থা থাকে। যথা, l = o এবং m = o নির্দেশিত 2s অরবিটাল।

$$\left.\begin{array}{l} n = 2 \\ l = o \\ m = o \end{array}\right| \; 2s$$

এবং $l = 1$ ও $m = 0 \pm 1$ নির্দেশিত তিনটি p অবস্থা,

$n = 2$ $l = 0$ $m = 0, \pm 1$	2p (বা $2p_x, 2p_y, 2p_z$)

যখন $n = 3$ (M শেল), তখন নয়টি সম্ভাব্য ইলেকট্রনীয় অবস্থা পাওয়া যায় ঃ

$n = 3$ $l = 0$ $m = 0$	3s
$n = 3$ $l = 1$ $m = 0, \pm 1$	3p
$n = 3$ $l = 2$ $m, = 0, \pm 1, \pm 2$	3d

এটি উল্লেখ্য যে, শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণ থেকে নির্ণীত স্পেস তরঙ্গ অপেক্ষক থেকে অরবিটালের (ইলেক্ট্রনিক অবস্থা s, p, d, f ইত্যাদি) আকৃতি সম্পর্কে পরিষ্কার ধারণা পওয়া যায়। বস্তুত অরবিটাল হলো স্পেস আয়তনে ইলেক্ট্রন দেখার সম্ভাব্যতার প্রকৃতি (nature of probability of finding electron)।

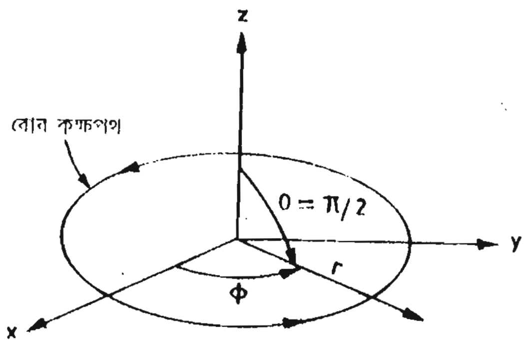
৫.৬ ইলেক্ট্রন সম্ভাব্যতার ঘনত্ব বা বণ্টন ঃ তাৎপর্যসহ বিভিন্ন অরবিটালের আকৃতি

Electron Probability Density or Electron Probability Distributoin : Shapes of Various Orbitals with Significance

গোলকাকার পোলার অক্ষ সিস্টেমে বোর পরমাণু মডেল চিত্রায়িত করে ইলেক্ট্রন সম্ভাব্যতার ঘনত্ব বণ্টন অনুধাবন করা যায়। ৫.৩ চিত্রে তা দেখানো হলো।

চিত্রটি থেকে দেখা যাচ্ছে যে, ইলেক্ট্রনটি z অক্ষের (নিউক্লিয়াস) চারদিকে স্থির খমধ্য কোণ, (zenith angle), $\pi/2$ তে ঘুরছে। ঘূর্ণনকালে যদিও সময়ের সাথে

দিগবলয় কোণ (azimuth angle) ϕ পরিবর্তিত হচ্ছে, তথাপি নিউক্লিয়াস থেকে ইলেক্ট্রনের দূরত্ব স্থির থাকছে।



চিত্র ৫.৩ ঃ গোলকাকার পোলার অক্ষে বোর পরমাণু মডেল।

তরঙ্গ বলবিদ্যা বোর মডেলকে দুভাবে সংশোধিত করেছে। যথা, (ক) r, θ ও ϕ এর কোনো নির্দিষ্ট মান নেই। কিন্তু কেবল বিভিন্ন অঞ্চল ক্ষুদ্র আয়তনে (volume element) ইলেক্ট্রন লাভের আপেক্ষিক সম্ভাব্যতা নির্ণয় সম্ভব এবং (খ) ইলেক্ট্রন কোনো প্রচলিত রীতিতে নিউক্লিয়াসের চারদিকে ঘুরছে– এমন ভাবা যায় না। কেবল যে বিষয়টিকে গুরুত্বসহ বিবেচনা করতে হবে তা হলো সম্ভাব্যতা ঘনত্ব $|\psi|^2$ সময়ের উপর নির্ভরশীল নয় এবং তা স্থান বা অঞ্চল ভেদে পৃথক হয়।

হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুতে ইলেক্ট্রনের আইগেন অপেক্ষক হলো

$$\psi_{nlm} = R\,\Theta\,\Phi \qquad (৫.৬৫)$$

যেখানে $R = R_{nl}(r)$ (৫.৬৬)

সমীকরণ (৫.৬৬) এটিই প্রকাশ করে যে, প্রধান ও অরবিটাল কোয়ান্টাম সংখ্যা, n ও l এর বিভিন্ন মানের জন্য কিভাবে ψ, r এর সাথে পরিবর্তিত হয়। পুনরায়

$$\Theta = \Theta_{lm}(\theta) \qquad (৫.৬৭)$$

অরবিটাল ও চুম্বকীয় কোয়ান্টাম সংখ্যা l এবং m এর বিভিন্ন মানের জন্য কিভাবে ψ খমধ্য কোণ θ পরিবর্তনের সাথে পরিবর্তিত হয়, সমীকরণ (৫.৬৭) থেকে সেটি বুঝা যায়। আবার

$$\Phi = \Phi_m (\theta) \qquad (৫.৬৮)$$

চুম্বকীয় কোয়ান্টাম সংখ্যা m এর বিভিন্ন মানের জন্য কিভাবে ψ দিগবলয় কোণ ϕ পরিবর্তনের সাথে পরিবর্তিত হয়, সমীকরণ (৫.৬৮) তা নির্দেশ করে। সুতরাং সম্ভাব্যতা বন্টন হবে

$$|\psi|^2 = |R|^2 \, |\Theta|^2 \, |\Phi|^2 \qquad (৫.৬৯)$$

এটি সত্য যে, দিগংশিক সম্ভাব্যতা ঘনত্ব (azimuthal probability density) $|\Phi|^2$ কোনো বিশেষ দিগবলয় কোণ ϕ তে ইলেক্ট্রন লাভের সম্ভাব্যতার পরিমাপক এবং তা একটি ধ্রুবক এবং এটি ϕ এর উপর নির্ভর করে না। নিম্নরূপে তা প্রমাণ করা যায় ঃ

$$\Phi = A\, e^{im\phi} \qquad (৫.৭০)$$

যেখানে A= ধ্রুবক। Φ এর জটিল কনজুগেট (complex conjugate) হলো

$$\Phi^* = A\, e^{-im\phi} \qquad (৫.৭১)$$

অতএব,

$$|\Phi|^2 = \Phi\,\Phi^*$$

$$= Ae^{im\phi} \,.\, Ae^{-im\phi}$$

$$= A^2 \qquad (৫.৭১ ক)$$

সমীকরণ (৫.৭১ক) নির্দেশ করে যে, z অক্ষের চারদিকে ইলেক্ট্রনটির সম্বাব্যতা ঘনত্ব বা বন্টন সুষম (symmetrical) হবে এবং ইলেক্ট্রন যে কোয়ান্টাম অবস্থায় থাকে তার উপর এটি নির্ভর করে না। এর অর্থ ইলেক্ট্রনটিকে যে কোনো কোণে দেখার সম্ভাবনা একই।

শূন্য থেকে 2π এর মধ্যে $|\Phi|^2$ এর সমাকলন থেকে A এর মান নির্ণয় করা সম্ভব (কারণ ইলেক্ট্রনটি কোণের সীমার মধ্যেই অবস্থান করতে বাধ্য)। অতএব,

$$\int_o^{2\pi} |\Phi|^2 \, d\phi = A^2 \int_o^{2\pi} d\phi$$

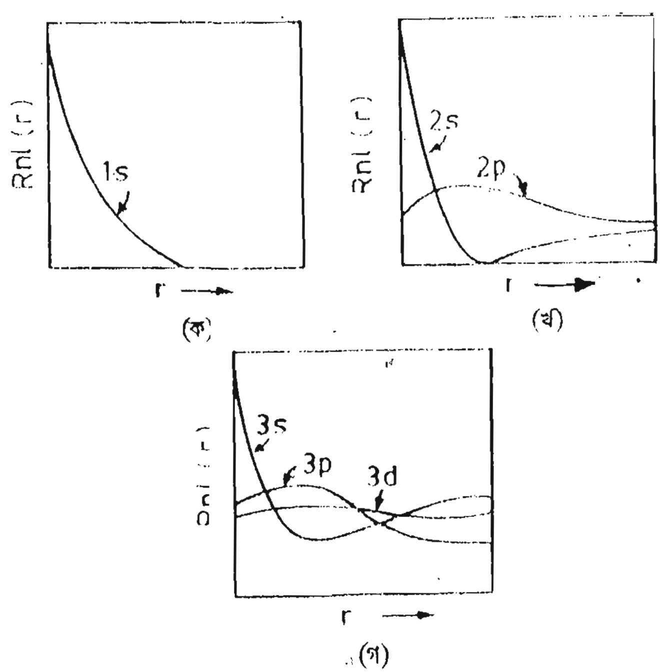
$$= 2\pi A^2 = 1$$

বা,
$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \qquad (৫.৭২)$$

এ রূপে সঙ্গতকৃত দিগশিক অপেক্ষক (normalized azimuthal function) পাওয়া যায়ঃ

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i m \phi} \qquad (৫.৭৩)$$

অপরপক্ষে আইগেন অপেক্ষকের রেডিয়াল অংশ R এর মান r এর সাথে পরিবর্তিত হয়। প্রতিটি n ও l এর সংযোগের কারণে এটি ভিন্নভাবে পরিবর্তিত হয়। ৫.৪ চিত্রে $n = 1, l = 0$ এবং $m = 0$ (1.) ; $n = 2, l = 0$ এবং $m = 0$ (2s) ; $n = 2, l = 1$ এবং $m = 0, \pm$ (2p) ; $n = 3, l = 0$ এবং $m = 0$, (3s) ; $n = 3, l = 1$ এবং $m = 0, \pm$(3p) ; $n = 3, l = 2, m = 0, \pm 1, \pm 2$ (3d) অবস্থায় হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর ক্ষেত্রে R বনাম r লেখচিত্র দেখানো হলো।



চিত্র ৫.৪ ঃ R বনাম r লেখচিত্র।

চিত্র থেকে দেখা যাচ্ছে, যে সব s অবস্থার ক্ষেত্রে r = o (নিউক্লিয়াসে) হলে R সর্বোচ্চ (maximum) হয়। অথচ যে সব অবস্থার কৌণিক ভরবেগ রয়েছে তাদের ক্ষেত্রে r = o হলে R এর মানও শূন্য হয়।

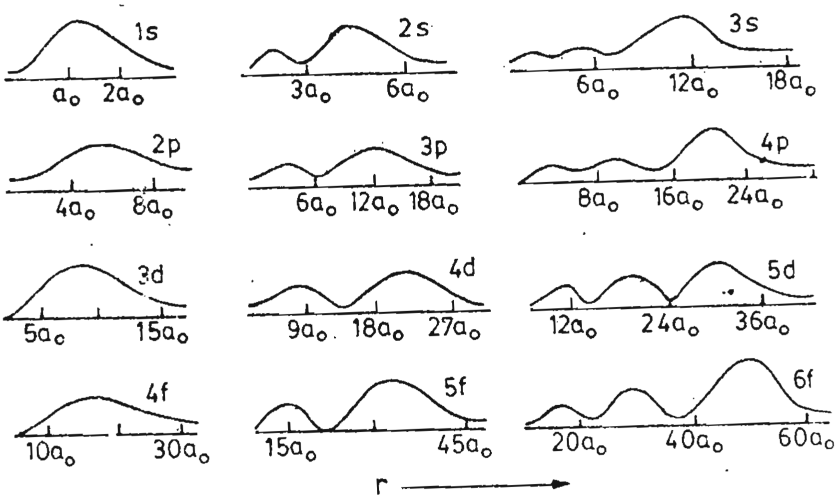
কোনো দূরত্ব r-এ ইলেক্ট্রন পাবার সম্ভাবনার (সম্ভাবনা ঘনত্ব $|R|^2$) পরিবর্তে একে বণ্টন অপেক্ষক (distribution function) বা ইলেক্ট্রন লাভের প্রকৃত সম্ভাবনা p বলাই ভাল। সম্ভাব্যতা P হলো $|R|^2$ dv এর সমানুপাতিক। যেখানে dv= ক্ষুদ্রাতিক্ষুদ্র আয়তন (r এবং r + dr এর মধ্যে)। অভ্যন্তরীণ ও বাইরের ব্যাসার্ধ r এবং r + dr এর জন্য আয়তন dv হলো।

$$dv = 4\pi r^2\, dr \qquad (৫.৭৪)$$

R-কে সঙ্গতকৃত অপেক্ষক মনে করে নিউক্লিয়াস থেকে r এবং r + dr দূরত্বের মধ্যে হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুতে ইলেক্ট্রনটি পাওয়ার প্রকৃত সাংখ্যিক সম্ভাবনা হবে

$$p = 4\pi r^2\, |R|^2\, dr \qquad (৫.৭৫)$$

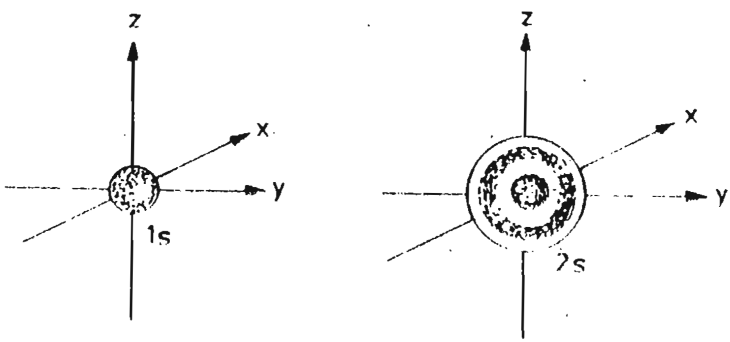
উক্ত রেডিয়াল বণ্টন অপেক্ষক (radial distribution function) আকৃতির কতিপয় উদাহরণ ৫.৫ চিত্রে দেয়া হলো।



চিত্র ৫.৫ ঃ বিভিন্ন কোয়ান্টাম অবস্থার জন্য ইলেক্ট্রন লাভের সম্ভাব্যতা;
a_o = সবচেয়ে ছোট বোর কক্ষপথের ব্যাসার্ধ।

চিত্র হতে এটি স্পষ্ট যে, 1s এর সম্ভাব্যতা চিত্রে একটি মাত্র সর্বোচ্চ বিন্দু অথচ 2s এবং 3s এর ক্ষেত্রে যথাক্রমে দুটি এবং তিনটি সর্বোচ্চ বিন্দু রয়েছে। এ ছাড়াও 2s ও 3s চিত্রে যথাক্রমে একটি এবং দুটি নোডাল তল আছে। সর্বোচ্চ বিন্দুতে ইলেক্ট্রন লাভের সম্ভাবনা সর্বাধিক অথচ নোডাল তলে তা সর্বনিম্ন। সুতরাং সাধারণভাবে প্রধান কোয়ান্টাম সংখ্যা n এর ক্ষেত্রে রেডিয়াল বণ্টন কার্ভে n সংখ্যক সর্বোচ্চ বিন্দু এবং (n−1) সংখ্যক নোডাল তল থাকবে।

এটি উল্লেখ্য যে, প্রধান কোয়ান্টাম সংখ্যার মান বৃদ্ধির সাথে সাথে s অরবিটালের আয়তন বৃদ্ধি পায়। বিভিন্ন s অরবিটালের প্রস্থচ্ছেদ-আকৃতি (cross-sectional shape) ৫.৬ চিত্রে দেখানো হলো।



চিত্র ৫.৬ ঃ 1s এবং 2s অরবিটালের প্রস্থচ্ছেদ-আকৃতি।

হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর শ্রডিঙ্গার সমীকরণ সমাধান করে n = 1, 2, 3 এবং l= 0, m = 0 অবস্থার ক্ষেত্রে s অরবিটালগুলোর (যথা, 1s, 2s, 3s ইত্যাদি) যে আইগেন অপেক্ষক পাওয়া যায় সেগুলো পরীক্ষা করে বিভিন্ন s অরবিটালের তাৎপর্য অনুধাবন করা সম্ভব। 1s, 2s এবং 3s অরবিটালের আইগেন অপেক্ষকগুলো (বা তরঙ্গ অপেক্ষক) হলো

$$1s ঃ \ \Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-Zr/2a_o}$$

$$2s ঃ \ \Psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \cdot \left(2 - \frac{Zr}{a_o}\right) e^{-Zr/2a_o}$$

$$3s : \psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(27 - 18\frac{Zr}{a_o} + 2\frac{Z^2 r^2}{a_o^2}\right)e^{-Zr/3a_o}$$

এখানে $a_o = \frac{h^2}{4\pi^2\mu r^2}$ ক্ষুদ্রতম বোর অরবিটের ব্যাসার্ধ।

দেখা যাচ্ছে যে, s অরবিটালের তরঙ্গ অপেক্ষকগুলো সর্বতোভাবেই r এর অপেক্ষক এবং খমধ্য বা দিগবলয় কোণ (θ বা ϕ) ধারণ করে না। এর অর্থ হলো তারা কোনক্রমেই θ বা ϕ এর উপর নির্ভর করে না। সুতরাং θ এবং ϕ এর যে কোনো মানের ক্ষেত্রেই নিউক্লিয়াস থেকে একটি নির্দিষ্ট দূরত্বে s অরবিটালে ইলেক্ট্রন পাবার সম্ভাবনা $|\psi|^2$ সুষম (uniform) হবে। এ যুক্তির ভিত্তিতে বলা যায় যে, s অরবিটাল ত্রিমাত্রিক গোলাকার গোলক (three dimensional circular sphere) যা সবদিকেই সুষম।

সাধারণভাবে n এর একই মানের জন্য s এবং p আইগেন অপেক্ষকগুলো (l = o এবং l =1) যথা, ψ_{200}, ψ_{210} এবং ψ_{211} r-এর উপর একই নির্ভরশীলতা প্রদর্শন করে। কিন্তু এসব আইগেন অপেক্ষকগুলোর মধ্যে মূল পার্থক্য হলো খমধ্য কোণ ও দিগবলয় কোণের উপর নির্ভরশীলতা। এর অর্থ এই যে, তরঙ্গ অপেক্ষকগুলোর রেডিয়াল অংশ প্রায় একই। তবে পার্থক্য হলো কেবল গোলকাকার অংশে।

সুতরাং আমরা সিদ্ধান্ত নিতে পারি যে, p আইগেন অপেক্ষক, যা আদৌ s আইগেন অপেক্ষকের মতো নয় (s আইগেন অপেক্ষক কেবল r এর উপর নির্ভর করে) এবং θ ও ϕ এর উপর নির্ভরশীল, তা কখনই গোলকাকার সুষম অরবিটাল উৎপন্ন করবে না।

তালিকা ৫.১ এবং ৫.২ থেকে $\Theta_{lm}(\theta)$ এবং $\Phi_m(\phi)$ এর মান যুক্ত করে হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর p ইলেক্ট্রনের পূর্ণাঙ্গ গোলকাকার তরঙ্গ অপেক্ষক নির্ণয় করা যায়। নিচে এটি দেয়া হলো ঃ

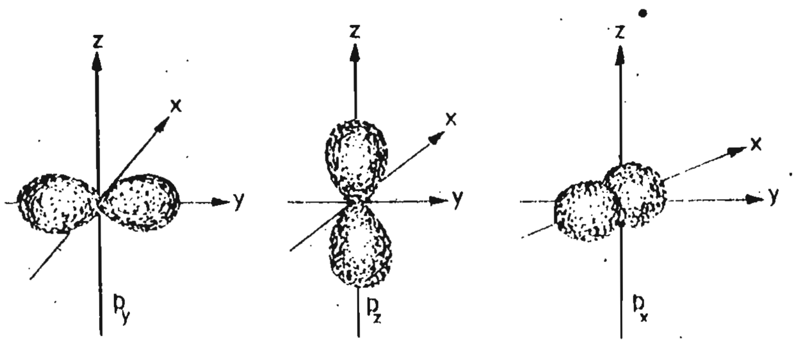
$$l = 1 \quad m = o : \psi(2p_z) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\ \cos\theta$$

$$l = 1 \quad m = -1 : \psi(2p_y) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\ \sin\theta \sin\phi$$

$$l = 1 \quad m = +1 : \psi(2p_x) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\ \sin\theta \cos\phi$$

p অপেক্ষকগুলো আমাদের সামনে কতকগুলি চমৎকার তথ্য তুলে ধরে। তারা বিভিন্ন কৌণিক বন্টন প্রদর্শন করে। এটি প্রমাণ করা যায় যে, p_x, p_y এবং p_z

আকৃতিগতভাবে একই। p অরবিটালের আকৃতি ডামবেলের ন্যায়; দুটি গোলক (একটি ধনাত্মক এবং অপরটি ঋণাত্মক) যেন একে অপরের সংস্পর্শে আছে। বিভিন্ন কৌণিক বন্টনে p ইলেক্ট্রন পাবার সম্ভাবনা (ψ^2) ছাড়া এরা অন্য কিছু নয়। বিভিন্ন p আইগেন অপেক্ষক (যথা, p_x, p_y এবং p_z) এর ক্ষেত্রে $|R(r)|^2$ $|\Theta(\theta)|^2$ $|\Phi(\phi)|^2$ বনাম r লেখচিত্র থেকে এদের প্রস্তুত করা যায়। এসব লেখচিত্র চতুর্মাত্রিক হওয়ায় এদের আঁকা খুব শক্ত। কিন্তু যুগপৎভাবে θ এবং ϕ পরিবর্তন করে $|\Theta(\theta)|^2$ $|\Phi(\phi)|^2$ এর লেখচিত্র আঁকলে যে সম্ভাব্যতা বন্টন পাওয়া যাবে তা p অরবিটালের আকৃতি প্রদান করবে। ৫.৭ চিত্রে p অরবিটালের আকৃতি দেখানো হলো।



চিত্র ৫.৭ঃ p_x, p_y এবং p_z অরবিটালের আকৃতি।

চিত্র হতে দেখা যাচ্ছে যে, p_x এর ক্ষেত্রে লোবের (Lobe) একটি সেট x অক্ষ বরাবর, p_y এর ক্ষেত্রে y অক্ষ বরাবর এবং p_z এর ক্ষেত্রে z অক্ষ বরাবর রয়েছে। ফলে p_z, p_y এবং p_z অরবিটালগুলোর যথাক্রমে y_z, x_z এবং xy তলে নোডাল তল থাকবে।

প্রধান কোয়ান্টাম সংখ্যা n এর মান 2 এর অধিক হলে অর্থাৎ যখন n = 3, 4, 5 ইত্যাদি, তখন আমরা d অরবিটাল পাই। সুতরাং n= 3, $l = 2$ এবং m = o, ±1, ±2 এর ক্ষেত্রে আমরা প্রথম পাঁচটি d অরবিটালের সেট পাই। এদের সংকেত হলোঃ d_{xy}, d_{yz}, d_{xz}, $d_{x^2-y^2}$ এবং d_{z^2}। যে কোনো প্রধান কোয়ান্টাম সংখ্যায় d আইগেন অপেক্ষকের সাধারণ রূপ নিচে দেয়া হলোঃ

$$\psi\ (d_{xy}) = R(r)\sqrt{15}/(2\sqrt{\pi})\ \sin^2\theta \sin\phi \cos\phi$$

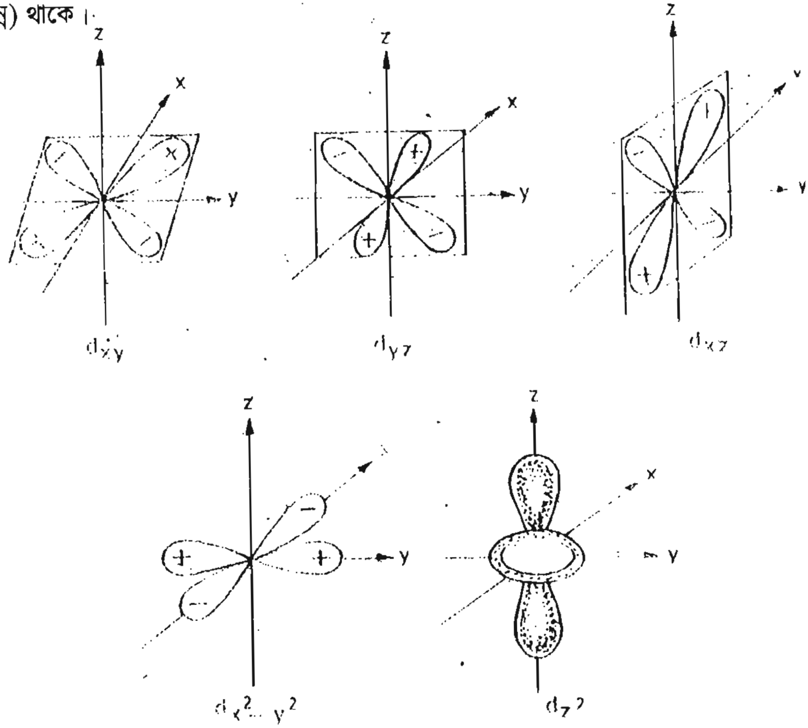
$$\psi\,(d_{yz}) = R(r)\,\sqrt{15}/(2\sqrt{\pi})\,\cos\theta\,\sin\theta\,\sin\phi$$

$$\psi\,(d_{xz}) = R(r)\,\sqrt{15}/(2\sqrt{\pi})\,\cos\theta\,\sin\theta\,\cos\phi$$

$$\psi\,(d_{x^2-y^2}) = R(r)\,\sqrt{15}/(4\sqrt{\pi})\,\sin^2\theta\,(2\cos^2\phi-1)$$

$$\psi\,(d_{z^2}) = R(r)\,\sqrt{5}/4\sqrt{\pi})\,(\cos^2\theta-1)$$

d- অরবিটালের উপরিউক্ত আইগেন অপেক্ষক থেকে দেখা যায় যে, সব d অরবিটালের একই রেডিয়াল অপেক্ষক (বিভিন্ন n মানের ক্ষেত্রে R(r) এর সব মান ভিন্ন ভিন্ন) থাকে।



চিত্র ৫.৮ ঃ d অরবিটালের আকৃতি।

কিন্তু তাদের কৌণিক অপেক্ষক ভিন্ন ভিন্ন (differ in their angular functions)। এরা $\Theta(\theta)$ এবং $\Phi(\phi)$ এর উপর নির্ভরশীল। বস্তুত এদের মান খমধ্য ও দিগবলয় কোণ যথাক্রমে θ এবং ϕ এর উপর নির্ভর করে। θ এবং ϕ এর মান যুগপৎ

পরিবর্তন করে বিভিন্ন $|\Theta|^2$ $|\Phi|^2$ এর লেখচিত্র থেকে আঁকা ইলেক্ট্রন সম্ভাব্যতা ঘনত্ব বন্টন হতে বিভিন্ন d= অরবিটালের আকৃতির ধারণা পাওয়া যায়। d অরবিটালের আকৃতি ৫.৮ চিত্রে দেখানো হলো।

চিত্রটি হতে দেখা যায় যে, d_{xy}, d_{yz} এবং d_{xz} অরবিটালগুলোর লোব যথাক্রমে xy, yz এবং xz তলে তলস্থিত অক্ষগুলোর সাথে 45^0 কোণে অবস্থিত। $d_{x^2-y^2}$ অরবিটালটি xy তলে অবস্থিত। কিন্তু তা তলধারণকারী অক্ষ বরাবর বিস্তৃত (directed)। d_{z^2} অরবিটালটি ব্যতিক্রমধর্মী। এটি অন্য চারটির সাথে একেবারেই মেলে না। এর লোবগুলি z অক্ষ বরাবর বিস্তৃত এবং লোবগুলোর কেন্দ্র (centre of the lobes) ঘিরে একটি ঘনীভূত টায়ার (condensed tyre) xy তলে অবস্থিত। d অরবিটালগুলোর অবশ্য প্রতিটির দুটি করে নোডাল তল আছে।

উদাহরণ ১ ঃ হাইড্রোজেন পরমাণুর জন্য ব্যবহৃত তরঙ্গ অপেক্ষক $\psi = N\, e^{-r/ao}$ কে সঙ্গতকরণ করে N এর মান নির্ণয় কর।

সমাধান ঃ যেহেতু তরঙ্গ অপেক্ষকটি গোলকাকারভাবে প্রতিসম (sherically symmetrical) সেহেতু পোলার কোঅর্ডিনেট ব্যবহার করা দরকার।

এখন সঙ্গতকরণের জন্য কাংখিত সমাকলন হল,

$$\int \psi^*\psi\, d\tau = N^2 \left(\int_0^{\infty} r^2 e^{-2r/ao} . dr\right) \left(\int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\right) \left(\int_0^{2\pi} d\phi\right)$$

(কারণ $d\tau = dx . dy . dz$

$$= r^2\, dr \sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

সমগ্র স্পেস আওতায় আনার জন্য r কে o থেকে ∞ পর্যন্ত, θ কে o থেকে π পর্যন্ত এবং ϕ কে o থেকে 2π পর্যন্ত সীমাবদ্ধ করা হয়েছে।)

ডানপক্ষ $= N^2 \times \dfrac{a_o^3}{4} \times 2 \times 2\pi$

$= \pi a_o^3\, N^2$

অতএব, সঙ্গতকরণের জন্য সমাকলনটির মান 1 (এক) হলে N এর মান হবে,

$$N = \left(\frac{1}{\pi a_o^3}\right)^{1/2}$$

এবং সঙ্গতকৃত তরঙ্গ অপেক্ষক $\left(\frac{1}{\pi a_o^3}\right)^{1/2} e^{-r/a_o}$

দ্রষ্টব্য ঃ $\int_o^\infty r^2 e^{-2r/a_o} dr$

$$= r^2 \int_o^\infty e^{-2r/a_o} dr - \int_o^\infty \frac{d}{dr}(r^2) \int e^{-2r/a_o} dr$$

$$= r^2 \frac{e^{-2r/a_o}}{-2/a_o} - \int_o^\infty 2r \, . \frac{e^{-2r/a_o}}{-2/a_o} dr$$

$$= \frac{-a_o r^2}{2} e^{-2r/a_o} + \int_o^\infty a_o r \, e^{-2r/a_o} dr$$

$$= \frac{-a_o r^2}{2} e^{-2r/a_o} + a_o r \int_o^\infty e^{-2r/a_o} - \int_o^\infty \frac{d}{dr}(a_o r) \int e^{-2r/a_o} dr$$

$$= \frac{a_o r^2}{2} e^{-2r/a_o} + a_o r \frac{e^{-2r/a_o}}{-2/a_o} - \int_o^\infty a_o \frac{e^{-2r/a_o}}{-2/a_o} dr$$

$$= \frac{-a_o r^2}{2} e^{-2r/a_o} - \frac{a_o^2 r}{2} e^{-2r/a_o} + \frac{a_o^2}{2} \int_o^\infty e^{-2r/a_o} dr$$

$$= \left[\frac{-a_o r^2}{2} e^{-2r/a_o} - \frac{a_o^2 . r}{2} e^{-2r/a_o} + \frac{a_o^2}{2} . \frac{e^{-2r/a_o}}{-2/a_o}\right]_o^\infty$$

$$= -0 - 0 - 0 + 0 + 0 + \frac{a_o^3}{4}$$

$$= \frac{a_o^3}{4}$$

উদাহরণ ২ ঃ হাইড্রোজেন পরমাণুর সর্বনিম্ন শক্তি স্তরে ইলেক্ট্রনের তরঙ্গ অপেক্ষক, $\psi = Ne^{-r/a_o}$ যেখানে N = একটি ধ্রুবক, $a_o = 52.9$ pm ও r = নিউক্লিয়াস থেকে

ইলেক্ট্রনের দূরত্ব। (ক) নিউক্লিয়াসে 1.0 pm^3 ক্ষুদ্র আয়তনের মধ্যে ও (খ) নিউক্লিয়াস থেকে a_0 দূরত্বে ঐ একই আয়তনের মধ্যে ইলেক্ট্রন প্রাপ্তির বা দেখার আপেক্ষিক সম্ভাব্যতা (relative probabilities) হিসাব কর।

সমাধান ঃ সম্ভাব্যতা $\int\psi^2 d\tau$ এর সমান। 1.0 pm^3 আয়তনটি এতই ক্ষুদ্র যে, (পারমাণবিক স্কেলেও) এর মধ্যে ψ-এর তারতম্য উপেক্ষা করা যায় এবং সম্ভাব্যতাকে সম্ভাব্যতা ঘনত্ব (ψ^2) ও কাংখিত আয়তনের (V) গুণফল হিসেবে দেখানো যায়। অর্থাৎ

$$\text{সম্ভাব্যতা} = \int_{\text{আয়তন}}\psi^2 d\tau = \psi^2 \int_{\text{আয়তন}} d\tau = \psi^2 V$$

এখানে $V = 1.0\ pm^3$।

(ক) নিউক্লিয়াসে $r = 0$, সুতরাং

$$\psi^2 = N^2 e^{-2r/a_0}$$

$$= N^2 \times 1.0 = N^2$$

$$\text{সম্ভাব্যতা} = \psi^2 V = N^2 \times 1.0\ pm^2$$

(খ) দূরত্ব $r = a_0$ তে (যে কোন দিকে) এবং

$$\psi^2 = N^2 e^{-2r/a_0} = N^2 e^{-2} = N^2 \times 0.14$$

$$\text{সুতরাং সম্ভাব্যতা} = (0.14 \times N^2) \times 1.0\ pm^3$$

অতএব, সম্ভাব্যতার অনুপাত = $1.0/0.14 = 7.4$

উদাহরণ ৩ ঃ ভিত্তি অবস্থায় H- পরমাণুর তরঙ্গ অপেক্ষক হল

$$\psi_{100} = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} e^{-r/a_0}$$

দেখাও যে, পরমাণুটির ভিত্তি অবস্থায় ইলেক্ট্রন পাবার সর্বোচ্চ সম্ভাব্যতা হল বোর অর্বিট।

[রা. বি. এম.এস-সি. (শেষবর্ষ), ১৯৯৭]

বা,

1s অবস্থায় হাইড্রোজেন পরমাণুর সঙ্গতকৃত তরঙ্গ অপেক্ষক হল

$$\psi_{1s} = (\pi a_o^3)^{-1/2} e^{-r/a_o}$$

দেখাও যে, এ অবস্থায় প্রোটন থেকে ইলেক্ট্রনের সবচেয়ে সম্ভাব্য দূরত্ব a_o।

সমাধান ঃ সবচেয়ে সম্ভাব্য দূরত্ব, $<r>$

$$= \psi^*\psi \, r d\tau$$

$$= \frac{1}{\pi a_o^3}\left(\int_o^\infty r^3 e^{-2r/a_o} dr\right)\left(\int_o^\pi \sin\theta \, d\theta\right)\left(\int_o^{2\pi} d\phi\right)$$

$$= \frac{1}{\pi a_o^3}\left[r^3 \frac{e^{-2r/a_o}}{-2/a_o} - \int_o^\infty \frac{d}{dr}(r^3)\int e^{-2r/a_o} dr\right]$$

$$\times \left[-\cos\theta\right]_o^\pi \times \left[\phi\right]_o^{2\pi}$$

$$= \frac{1}{\pi a_o^3}\left[-\frac{a_0 r^3}{2} . e^{-2r/a_0} - \int_o^\infty 2r^2 . \frac{e^{-2r/a_0}}{-2/a_0} dr\right] \times 2 \times 2\pi$$

$$= \frac{1}{\pi a_o^3}\left[-\frac{a_0 r^3}{2} e^{-2r/a_0} + \int_o^\infty a_o r^2 . e^{-2r/a_0}\right] \times 4\pi$$

$$= \frac{1}{\pi a_o^3}\left[-\frac{a_0 r^3}{2} e^{-2r/a_0} + a_0 r^2 . \frac{a^{-2r/a_0}}{-2/a_0} - \int_o^\infty \frac{d}{dr}(a_0 r^2)\right.$$

$$\left.\int e^{-2r/a_0} dr\right] \times 4\pi$$

$$= \frac{1}{\pi a_o^3}\left[-\frac{a_0 r^3}{2} e^{-2r/a_0} - \frac{a_0^2 r^2}{2} . e^{-2r/a_0} - \int_o^\infty 2ra_0 . \frac{e^{-2r/a_0}}{-2/a_0} dr\right] \times 4\pi$$

$$= \frac{1}{\pi a_o^3}\left[-\frac{a_0 r^3}{2} e^{-2r/a_0} - \frac{a_0^2 r^2}{2} . e^{-2r/a_0} + \int_o^\infty r a_0^2 \, e^{-2r/a_0} dr\right] \times 4\pi$$

$$= \frac{1}{\pi a_o^3}\left[- \frac{a_0 r^3}{2}\, e^{-2r/a_0} - \frac{a_0^2 r^2}{2} + e^{-2r/a_0} + r a_0^2\right.$$

$$\left.\int_o^{\propto} e^{-2r/a_0}\, dr - \int_o^{\propto} \frac{d}{dr}(r a_0^2) \int_o^{\propto} e^{-2r/a_0}\, dr\right] \times 4\pi$$

$$= \frac{1}{\pi a_o^3}\left[- \frac{a_0 r^3}{2} - e^{-2r/a_0} - \frac{a_0 r^2}{2} + r a_0^2 \cdot \frac{e^{-2r/a_0}}{-2r/a_0} -\right.$$

$$\left.\int_o^{\propto} a_0^2 \cdot \frac{e^{-2r/a_0}}{-2r/a_0}\, dr\right] \times 4\pi$$

$$= \frac{1}{\pi a_o^3}\left[- \frac{a_0 r^3}{2} \cdot e^{-2r/a_0} - \frac{a_0^2 r^2}{2} e^{-2r/a_0} - \frac{r}{2} a_o^3 \cdot e^{-2r/a_0} +\right.$$

$$\left.\frac{a^3}{2} \int_o^{\propto} e^{-2r/a_0} dr\right] \times 4\pi$$

$$= \frac{1}{\pi a_o^3}\left[- \frac{a_0 r^3}{2} e^{-2r/a_0} - \frac{a_0^2 r^2}{2} e^{-2r/a_0} - \frac{a_o^3 r}{2} \cdot e^{-2r/a_0}\right.$$

$$\left. + \frac{a^3}{2} \frac{e^{-2r/a_0}}{-2/a_0}\, dr\right]_o^{\propto} \times 4\pi$$

$$= \frac{1}{\pi a_o^3}\left[- \frac{a_0 r^3}{2} e^{-2r/a_0} - \frac{a_0^2 r^2}{2} e^{-2r/a_0} - \frac{a_o^3 r}{2} \cdot e^{-2r/a_0} - \frac{a_0^4}{4}\right.$$

$$\left. e^{-2r/a_0}\right]_0^{\infty} \times 4\pi$$

$$= \frac{1}{\pi a_o^3}\left[+ \frac{a_0^4}{4} \cdot 1\right] \times 4\pi$$

$= a_o$ প্রমাণিত।

দ্রষ্টব্য : $dr = r^2 dr \sin\theta\, d\theta\, d\theta$

উদাহরণ ৪ ঃ দেখাও যে, H-পরমাণুর 1s ও 2s অরবিটাল অর্থোগোনাল। দেয়া আছে, $\psi_{1s} = \left(\frac{1}{\pi a_o^3}\right)^{1/2} e^{-r/a_o}$ এবং $\psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2}} \cdot \left(\frac{1}{\pi a_o^3}\right)^{1/2}$

$$\left(2 - \frac{r}{a_o}\right) e^{-r/a_o}$$

সমাধান ঃ প্রশ্নানুসারে, $\int_o^\infty \psi_{1s}\ \psi_{2s}\ dr = o$ প্রমাণ করতে হবে।

$$\text{বামপক্ষ} = \int_o^\infty \frac{1}{4\sqrt{2}} \left(\frac{1}{\pi a_o^3}\right) \left(2 - \frac{r}{a_o}\right) e^{-2r/a_o} dr$$

$$= \frac{1}{4\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\pi a_o^3} \int_o^\infty \left(2 - \frac{r}{a_o}\right) e^{-2r/a_o} dr$$

$$= \frac{1}{4\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\pi a_o^3} \left[\left(2 - \frac{r}{a_o}\right) \int_o^\infty e^{-2r/a_o} dr - \int_o^\infty \frac{d}{dr}\left(2 - \frac{r}{a_o}\right) \int e^{-2r/a_o} dr \right]$$

$$= \frac{1}{4\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\pi a_o^3} \left[\left(2 - \frac{r}{a_o}\right) \frac{e^{-2r/a_o}}{-2/a_o} + \frac{1}{a_o} \int_o^\infty \frac{e^{-2r/a_o}}{-2/a_o} dr \right]$$

$$= \frac{1}{4\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\pi a_o^3} \left[\left(2 - \frac{r}{a_o}\right) \frac{-a_o}{2} e^{-2r/a_o} - \frac{1}{2} \int_o^\infty e^{-2r/a_o} dr \right]$$

$$= \frac{1}{4\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\pi a_o^3} \left[\left(\frac{r}{2} - a_o\right) e^{-2r/a_o} - 1/2 \cdot \frac{e^{-2r/a_o}}{-2r/a_o} \right]_o^\infty$$

$$= \frac{1}{4\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\pi a_o^3} \left[\left(\frac{r}{2} - a_o\right) e^{-2r/a_o} + a_o\ e^{-r/a_o} \right]_o^\infty$$

$$= \frac{1}{4\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\pi a_o^3} \left[o + o - a_o + a_o\right]$$

$= o$ প্রমাণিত।

উদাহরণ ৫ ঃ He^+ আয়নের সর্বনিম্ন শক্তি স্তরের অর্বিটালে ইলেক্ট্রনের তরঙ্গ অপেক্ষক $\psi = Ne^{-2r/a_o}$। N এর মান নির্ণয় কর।

সমাধান ঃ ψ কে সঙ্গতকরণ করে N এর মান নির্ণয় করা যায়। এখন সঙ্গতকরণের কাংখিত সমাকলনটি হল,

$$\int \psi^* \psi \, d\tau = N^2 \left(\int_o^\infty r^2 e^{-4r/a_o} dr\right) \left(\int_o^\pi \sin\theta \, d\theta\right) \left(\int_o^{2\pi} d\Phi\right)$$

$$= N^2 I_1 I_2 I_3 \text{ (ধরা যাক)}$$

$$I_1 = \int_o^\infty r^2 e^{-4r/a_o} dr$$

$$= r^2 \int_o^\infty e^{-4r/a_o} dr - \int_o^\infty \frac{d}{dr}(r^2) \int e^{-4r/a_o} dr$$

$$= r^2 \cdot \frac{e^{-4r/a_o}}{-4/a_o} - \int_o^\infty 2r \cdot \frac{e^{-4r/a_o}}{-4/a_o} dr$$

$$= \frac{-a_o r^2}{4} e^{-4r/a_o} + \int_o^\infty \frac{a_o r}{2} e^{-4r/a_o} dr$$

$$= -\frac{a_o r^2}{4} e^{-4r/a_o} + \frac{a_o r}{2} \int_o^\infty e^{-4r/a_o} dr - \int_o^\infty \frac{d}{dr}\left(\frac{a_o r}{2}\right) \int e^{-4r/a_o} dr$$

$$= -\frac{a_o r^2}{4} e^{-4r/a_o} + \frac{a_o r}{2} \cdot \frac{e^{-4r/a_o}}{-4/a_o} - \int_o^\infty \frac{a_o}{2} \cdot \frac{e^{-4r/a_o}}{-4/a_o}$$

$$= -\frac{a_o r^2}{4} e^{-4r/a_o} - \frac{a_o^2 r}{8} e^{-4r/a_o} + \int_o^\infty \frac{a_o^2}{8} e^{-4r/a_o} dr$$

$$= \left[-\frac{a_o r^2}{4} e^{-4r/a_o} - \frac{a_o r}{8} e^{-4r/a_o} + \frac{a_o^2}{8} \cdot \frac{e^{-4r/a_o}}{-4/a_o} \right]_o^\infty$$

$$= \left[-\frac{a_o r^2}{4} e^{-4r/a_o} - \frac{a_o r}{8} e^{-4r/a_o} - \frac{a_o^3}{32} e^{-4r/a_o} \right]_o^\infty$$

$$= -0-0-\ 0+0+0+\frac{a_o^3}{32}$$

$$= \frac{a_o^3}{32}$$

$$I_2 = \int_o^\pi \sin\ \theta\, d\theta = [-\cos\theta]_o^\pi = -(-1-1) = 2$$

$$I_3 = \int_o^{2\pi} d\phi = 2\pi$$

সুতরাং $\int \psi^* \psi\, d\tau = N^2 . \frac{a_o^3}{32} \times 2 \times 2\pi = N^2 \left(\frac{a_o^3 \pi}{8} \right) = 1$ হলে N এর মান হবে $(8/a_o^3\pi)^{1/2}$ ।

প্রশ্নাবলি

৫.১। হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর ক্ষেত্রে কার্টেশীয় অক্ষে শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণ লিখ এবং সমীকরণটিকে পোলার অক্ষে রূপান্তরিত কর।

৫.২। গোলকাকার পোলার অক্ষের চিত্র দাও। পোলার ও কার্টেশীয় অক্ষের মধ্যে সম্পর্ক স্থাপন কর।

৫.৩। হাইড্রোজেন পরমাণুর ক্ষেত্রে পোলার অক্ষে শ্রডিঙ্গার সমীকরণ লিখ এবং ভেরিয়েবল পৃথক কর। কেন ভেরিয়েবল পৃথক করা হয়?

৫.৪। প্রধান কোয়ান্টাম সংখ্যা সম্পর্কে ধারণা পাবার জন্য R- নির্ভরশীল সমীকরণ সমাধান কর।

৫.৫। গোলকাকার পোলার অক্ষে শ্রডিঙ্গার সমীকরণের রেডিয়াল অংশ সমাধান করে প্রধান কোয়ান্টাম সংখ্যার ধারণা পাওয়া যায়। এ বর্ণনার যৌক্তিকতা প্রমাণ কর।

৫.৬। ল্যাগুয়েরী পলিনমিয়াল ব্যবহার করে R নির্ভরশীল সমীকরণ সমাধান কর।

৫.৭। যে সমীকরণের সমাধান করে অরিবিটাল কোয়ান্টাম সংখ্যার ধারণা পাওয়া যায় তা লিখ। লেজেন্ডার পলিনমিয়াল ব্যবহার করে এর সমাধানের বিস্তারিত ধাপ দেখাও।

৫.৮। লেজেন্ডার পলিনমিয়াল ব্যবহার করে Θ নির্ভরশীল সমীকরণ সমাধান কর।

৫.৯। Φ নির্ভরশীল সমীকরণ সমাধান করে চুম্বকীয় কোয়ান্টাম সংখ্যার ধারণা পাওয়া যায়। এ বক্তব্যের যৌক্তিকতা দেখাও।

৫.১০। Φ নির্ভরশীল সমীকরণের সন্তোষজনক সমাধান কর।

৫.১১। স্পিন ব্যতীত হাইড্রোজেন পরমাণুর ক্ষেত্রে পূর্ণাঙ্গ আইগেন অপেক্ষক লিখ এবং সংকেতগুলোর তাৎপর্য নির্দেশ কর।

৫.১২। নিচের আইগেন অপেক্ষকগুলোর অনুরূপ অরবিটাল লিখ ঃ

ψ_{100}, ψ_{200}, ψ_{210}, ψ_{211}, ψ_{300}, ψ_{310}

৫.১৩। ইলেক্ট্রন সম্ভাব্যতা ঘনত্ব এবং স্পেস এর বন্টন বলতে কি বুঝ ? এটি কিভাবে নির্মাণ করা যায় ? উদাহরণসহ ব্যাখ্যা কর।

৫.১৪। চিত্রাকারে 1s, 2s, 3s, 2p, 3p, 3d এবং 4d অরবিটালে ইলেক্ট্রন পাবার সম্ভাব্যতা দেখাও।

৫.১৫। s, p এবং d অরবিটালের কোয়াণ্টাম বলবিদ্যা সম্পর্কীয় তাৎপর্য দাও।

৫.১৬। সংক্ষিপ্ত টীকা লিখ ঃ

(ক) গোলকাকার পোলার অক্ষ,

(খ) Φ নির্ভরশীল সমীকরণের সমাধান,

(গ) Θ নির্ভরশীল সমীকরণের সমাধান,

(ঘ) R নির্ভরশীল সমীকরণের সমাধান,

(ঙ) ইলেক্ট্রন সম্ভাব্যতা ঘনত্ব,

(চ) ভেরিয়েবল পৃথককরণ,

(ছ) s, p এবং d অরবিটালের তাৎপর্য।

ষষ্ঠ অধ্যায়

দৃঢ় আবর্তক ও সরল একতালীয় দোলকের কোয়ান্টাম বলবিদ্যা

QUANTUM MECHANICS OF RIGID ROTATOR AND SIMPLE HARMONIC OSCILLATOR

এ অধ্যায়ে আমরা দৃঢ়ভাবে আবর্তনমান (rigidly rotating) এবং সরল একতালীয় কম্পমান (simple harmonically vibrating) মাইক্রোস্কোপীয় সিস্টেমের ক্ষেত্রে কোয়ান্টাম বলবিদ্যা প্রয়োগ করব এবং তাদের আবর্তনীয় শক্তি (rotational energy) ও কম্পনীয় শক্তি (vibrational energy) উপপাদন করব। কারণ অণুর আবর্তনীয় বর্ণালী (rotational spectra) ও কম্পনীয় বর্ণালী (vibrational spectra) সম্পর্কে স্পষ্ট ধারণার জন্য এসব শক্তি গুরুত্বপূর্ণ।

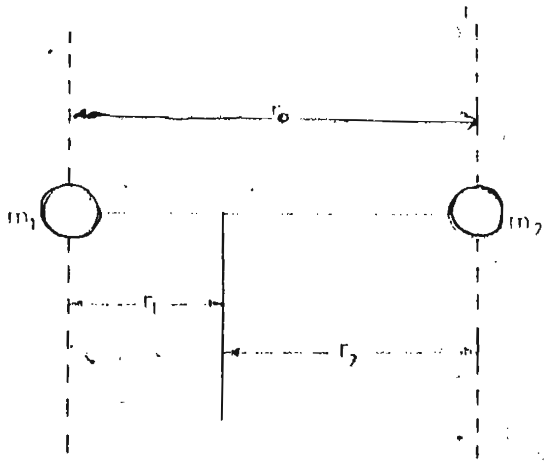
দৃঢ় আবর্তক (Rigid Rotator)

৬.১ মুক্ত অক্ষ দৃঢ় আবর্তক

Free Axis Rigid Rotator

মুক্ত অক্ষবিশিষ্ট দুটি ভরের দৃঢ় আবর্তককে সাধারণত কোনো দ্বি-পারমাণবিক অণুর সমগোত্র হিসেবে বর্ণনা করা হয়। কিন্তু দ্বি-পারমাণবিক অণুর ক্ষেত্রে পরমাণুগুলো একে অন্যের প্রেক্ষিতে কাঁপে (vibrate)।

দৃঢ় আবর্তক মনে করে ধরা যাক, m_1 ও m_2 ভরের দুটি গোলকাকার (spherical) কণা (ভর) আবর্তন-অক্ষ থেকে যথাক্রমে r_1 এবং r_2 দূরত্বে অবস্থিত (চিত্র ৬.১)। ভর দুটির কেন্দ্র থেকে পরস্পরের দূরত্ব r_0 একটি ধ্রুব রাশি। এটি r_1 এবং r_2-এর যোগফলের সমান। এ ধরনের একটি সিস্টেম ভরকেন্দ্রের (centre of gravity) মধ্য দিয়ে গমনকারী অক্ষের চারদিকে ঘোরে



চিত্র ৬.১ ঃ দৃঢ় আবর্তক।

অক্ষটি ভর ধারণকারী তলের উপর লম্বভাবে অবস্থিত। যদি এ রকম হয় যে, কণাটি আবর্তনকালে একই তলে অবস্থান করছে, তবে সেক্ষেত্রে আবর্তন-অক্ষের দিক অপরিবর্তিত থাকে। এ শর্তে সিস্টেমটি স্থির অক্ষবিশিষ্ট দৃঢ় আবর্তক হিসেবে গণ্য হবে।

কিন্তু আমাদের আগ্রহ এমন একটি সিস্টেমে, যার কণাগুলোর তল পরিবর্তিত হয় এবং এর ফলে আবর্তন-অক্ষ যে কোনো অবস্থান গ্রহণ করতে পারে। আণবিক বর্ণালী অধ্যয়নে এ বিষয়টি অত্যন্ত গুরুত্বপূর্ণ (বিশেষত অণুর আবর্তনীয় ও কম্পনীয় বর্ণালীর ক্ষেত্রে)।

ধরা যাক, আবর্তন-অক্ষ মূল বিন্দু, O-এর মধ্য দিয়ে গমন করেছে এবং ভর দুটির আক্ষিক মান যথাক্রমে (x_1, y_1, z_1) এবং (x_2, y_2, z_2)। ভরগুলোর অনুরূপ পোলার অক্ষ হবে,

$$(r_1, \theta, \phi) \text{ এবং } [r_2, (\pi + \theta), (\pi + \phi)]$$

কার্টেশীয় অক্ষ ও পোলার অক্ষের মধ্যে সম্পর্ক হলো,

$$x_1 = r_1 \sin\theta \cos\phi$$

$$y_1 = r_1 \sin\theta \sin\phi \text{ এবং}$$

$$z_1 = r_1 \cos\theta$$
$$x_2 = r_2 \sin(\pi + \theta)\cos(\pi + \phi)$$
$$= r_2 \sin\theta \cos\phi$$
$$y_2 = r_2 \sin(\pi + \theta)\sin(\pi + \phi)$$
$$= r_2 \sin\theta \sin\phi$$
$$z_2 = r_2 \cos(\pi + \theta)$$
$$= r_2 \cos\theta$$

m_1 ভরবিশিষ্ট কণাটির গতিশক্তি

$$T_1 = \frac{1}{2} m_1 \left[\left(\frac{dx_1}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dy_1}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dz_1}{dt}\right)^2\right] \qquad (৬.১)$$

এখন $\frac{dx_1}{dt} = r_1\left[\cos\theta\cos\phi\left(\frac{d\theta}{dt}\right) - \sin\theta\sin\phi\left(\frac{d\phi}{dt}\right)\right]$

$$\frac{dy_1}{dt} = r_1\left[\cos\theta\sin\phi\left(\frac{d\theta}{dt}\right) + \sin\theta\cos\phi\left(\frac{d\phi}{dt}\right)\right]$$

এবং $\frac{dz_1}{dt} = -r_1\sin\theta\left(\frac{d\theta}{dt}\right)$

অতএব $\left(\frac{dx_1}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dy_1}{dt}\right)^2 + \left(\frac{dz_1}{dt}\right)^2$

$$= r_1^2\left[\cos^2\theta\left(\frac{d\phi}{dt}\right)^2 + \sin^2\theta\left(\frac{d\phi}{dt}\right)^2 + \sin^2\theta\left(\frac{d\phi}{dt}\right)^2\right]$$

$$= r_1^2\left[\left(\frac{d\phi}{dt}\right)^2 + \sin^2\theta\left(\frac{d\phi}{dt}\right)^2\right]$$

সুতরাং $= T_1 = \frac{1}{2} m_1 r_1^2 \left[\left(\frac{d\phi}{dt}\right)^2 + \sin^2\theta\left(\frac{d\phi}{dt}\right)^2\right] \qquad (৬.২)$

অনুরূপে m_2 ভরবিশিষ্ট কণার গতিশক্তি,

$$T_2 = \frac{1}{2} m_2 r_2^2 \left[\left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 + \sin^2\theta \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right] \qquad (৬.৩)$$

ফলে দুটি ভরের মোট গতিশক্তি দাঁড়ায়,

$$T = T_1 + T_2 = \left[\left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 + \sin^2\theta \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right]$$

$$\left[\frac{1}{2} m_1 r_1^2 + \frac{1}{2} m_2 r_2^2 \right] \qquad (৬.৪)$$

কিন্তু $m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2$ = মুক্ত অক্ষের চারদিকে জড়তা মোমেন্ট (moment of inertia)

$$= I \text{ (ধরা যাক)} \qquad (৬.৫)$$

সমীকরণ (৬.৪) ও (৬.৫) থেকে,

$$T = \frac{1}{2} I \left\{ \left(\frac{d\theta}{dt} \right)^2 + \sin^2\theta \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 \right\} \qquad (৬.৬)$$

যে একক কণার ভর, I এবং যা একক ব্যাসার্ধ বিশিষ্ট গোলকের পৃষ্ঠতলে (surface) ভ্রমণ করছে তার গতিশক্তি উক্ত সমীকরণ (৬.৬) দ্বারা প্রকাশ করা হয়েছে।

ত্রি-মাত্রিক শ্রডিঙ্গার সমীকরণ হলো ঃ

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0 \qquad (৬.৭)$$

সমীকরণ (৬.৭) গোলকাকার পোলার অক্ষ ব্যবহার করে,

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial\psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial\psi}{\partial\theta} \right)$$

$$+ \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V) \psi = 0 \qquad (৬.৮)$$

যেহেতু r একটি ধ্রুবক এবং তা এককের সমান, সুতরাং প্রথম রাশি $\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial\psi}{\partial r} \right)$ = 0। পুনরায় যেহেতু কোনো বল আবর্তকের উপর নির্ভর করে না, পটেনশিয়াল অপেক্ষক, V = 0। অতএব স্পেসে (বা শূন্যে) জড়তা মোমেন্ট I বিশিষ্ট দৃঢ় আবর্তকের শ্রডিঙ্গার সমীকরণ দাঁড়ায় ঃ

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}+\frac{8\pi^2 I}{h^2}E\psi=0 \qquad (৬.৯)$$

সমীকরণ (৬.৯) θ এবং ϕ এ দুটি অনির্ভরশীল ভেরিয়েবলের ডিফারেন্সিয়াল সমীকরণ। এ ভেরিয়েবল দুটি সিস্টেমের যথাক্রমে আবর্তনীয় শক্তি এবং আবর্তনের মুক্ত অক্ষের অগ্রগমন গতি বা ভ্রমণ (precessional motion বা movement) প্রকাশ করে।

ভেরিয়েবল পৃথকীকরণ পদ্ধতিকরণ (৬.৯) এর সমাধান করার চেষ্টা করা যেতে পারে। ধরা যাক, $\psi(\theta, \phi)$ অপেক্ষকটি $\Theta(\theta)$ এবং $\Phi(\phi)$ অপেক্ষক দুটির গুণফল। সুতরাং

$$\psi(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\,\Phi(\phi) = \Theta\Phi \qquad (৬.১০)$$

যেখানে Θ হলো কেবল θ-এর অপেক্ষক এবং Φ হলো কেবল ϕ–এর অপেক্ষক। সমীকরণ (৬.১০) এর ধারাবাহিক ব্যবকলন করে,

$$\frac{\partial\psi}{\partial\theta}=\Phi\frac{\partial\Theta}{\partial\theta} \quad \text{এবং} \quad \frac{\partial\psi}{\partial\phi}=\Theta\frac{\partial\Phi}{\partial\phi} \qquad (৬.১১)$$

এবং
$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\theta}=\Phi\frac{\partial^2\Theta}{\partial\theta} \quad \text{এবং} \quad \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi}=\Theta\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi} \qquad (৬.১২)$$

সমীকরণ (৬.৯) এর ফলাফলগুলো স্থাপন করে এবং উভয় পক্ষকে $\Theta\Phi/\sin^2\theta$ দ্বারা ভাগ করে,

$$\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\frac{8\pi^2 IE}{h^2}\sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} \qquad (৬.১৩)$$

এখন ধরা যাক, $\frac{8\pi^2 IE}{h^2}=\beta$ এবং $-\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2}=m^2$

β এবং m^2 দ্বারা সমীকরণ (৬.১৩)-কে সমন্বয় করলে,

$$\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\beta\sin^2\theta=m^2 \qquad (৬.১৪)$$

বা $$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\beta\Theta=\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta$$ ($\Theta/\sin^2\theta$ দ্বারা গুণ করে)

বা $$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left(\beta-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta=0 \qquad (৬.১৫)$$

সমীকরণ- $\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} = m^2$ কে স্মরণ করে,

বা $$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m^2\Phi = 0 \qquad (৬.১৬)$$

সমীকরণ- (৬.১৬) এর সমাধান হলো :

$$\Phi = Ae^{\pm i m \phi} \qquad (৬.১৭)$$

যেখানে A = ধ্রুবক এবং m = একটি অখণ্ড সংখ্যা। সঙ্গতকরণ শর্ত প্রয়োগ করে ধ্রুবক A-এর মান নির্ণয় করা যায়।

$$\int_0^{2\pi} \Phi\Phi^* \, d\phi = 1$$

বা $$A^2\int_0^{2\pi} e^{i m \phi} . e^{-i m \phi} \, d\phi = 1$$

বা $$A^2\int_0^{2\pi} d\phi = 1$$

বা $$A^2 . 2\pi = 1$$

বা $$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \qquad (৬.১৮)$$

অতএব সমীকরণ (৬.১৭)-এর সমাধান হলো :

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i m \phi} \qquad (৬.১৯)$$

যেখানে $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$ ইত্যাদি।

সমীকরণ (৬.১৭) এর সন্তোষজনক সমাধান পাবার পর এখন আমরা সমীকরণ (৬.১৩) সম্পর্কে সংক্ষিপ্ত আলোচনা এবং সমীকরণ (৬.১৫) এর সমাধানে মনোনিবেশ করতে পারি।

সমীকরণ (৬.১৩) এর বাম পক্ষে কেবল θ ভেরিয়েবল রয়েছে অথচ ডান পক্ষ কেবল ϕ ভেরিয়েবলের উপর নির্ভরশীল। কিন্তু এ ভেরিয়েবল দুটি একে অন্যের উপর নির্ভর করে না। সমীকরণটি θ এবং ϕ এর যে কোনো মানের জন্য প্রযোজ্য। ফলে সমীকরণ (৬.১৩) এর প্রতিটি পক্ষ একটি ধ্রুবক।

লেজেণ্ডার পলিনমিয়াল পদ্ধতিতে সমীকরণ (৬.১৫)-কে সমাধান করা যায়। ধরা যাক,

$$x = \cos\theta \text{ বা } \sin\theta = \sqrt{1-x^2} \qquad (৬.২০)$$

অতএব, $$\frac{d\Theta}{d\theta} = \frac{dx}{d\theta}\frac{d\Theta}{d\theta} = -\sin\theta\frac{d\Theta}{dx} \qquad (৬.২১)$$

সুতরাং সাধারণভাবে,

$$\frac{d}{d\theta} = -\sin\theta\frac{d}{dx} \qquad (৬.২২)$$

পুনরায় $$\sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta} = -\sin^2\theta\frac{d\Theta}{dx} \qquad (৬.২৩)$$

$$= -(1-x^2)\frac{d\Theta}{dx} \qquad (৬.২৪)$$

সমীকরণ(৬.১৫)-এ উপরিউক্ত সম্পর্কগুলো প্রয়োগ করে,

$$\frac{d}{dx}\left\{(1-x^2)\frac{d\Theta}{d\theta}\right\} + \left(\beta - \frac{m^2}{1-x^2}\right)\Theta = 0 \qquad (৬.২৫)$$

এ সমীকরণ বিখ্যাত লেজেণ্ডার সমীকরণের একটি রূপ) সমীকরণটির সমাধান নিম্নরূপ ঃ

$$p_l^m(x)$$

যেখানে $p_l^m(x)$ হলো l ঘাত ও m ক্রমের সহযোগী লেজেণ্ডার অপেক্ষক। একে নিম্নরূপে সংজ্ঞায়িত করা হয় ঃ

$$p_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2}\frac{dp_l^m(x)}{dx^m} \qquad (৬.২৬)$$

সুতরাং সমীকরণ (৬.১৫) এর সাধারণ সমাধান হলো ঃ

$$\Theta_l^m(\theta) = A\, p_l^m(\cos\theta) \qquad (৬.২৭)$$

সঙ্গতকরণ ধ্রুবক, A-কে নিম্নরূপভাবে লেখা যায় ঃ

$$A = \sqrt{\frac{2l+1}{2}\cdot\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \qquad (৬.২৮)$$

A-এর মান সমীকরণ (৬.২৭)-এ সমন্বয় করে,

$$\Theta_l^m(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\; p_l^m\;(\cos\theta) \qquad (৬.২৯)$$

অতএব দৃঢ় আবর্তকের জন্য প্রয়োজনীয় সঙ্গতকৃত আইগেন অপেক্ষক $[\Theta(\theta)\,\Phi(\phi)]$-কে নিম্নরূপে প্রকাশ করা যায় ঃ

$$\psi_{l,m}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\; p_l^m\;(\cos\theta)\,.\,e^{i\,m\,\phi} \qquad (৬.৩০)$$

পুনরায় সন্তোষজনক তরঙ্গ অপেক্ষকের জন্য শর্ত নিম্নরূপ ঃ

$$\beta = l\,(l+1) \qquad (৬.৩১)$$

যেখানে $l = 0, 1, 2, 3, 4 \ldots$ = আবর্তনীয় কোয়ান্টাম সংখ্যা।

সমীকরণটিতে β এর মান বসিয়ে,

$$\frac{8\pi^2 I}{h^2}\,E = l\,(l+1)$$

বা

$$E = \frac{h^2}{8\pi^2 I}\,l\,(l+1) \qquad (৬.৩২)$$

সমীকরণ (৬.৩২) অনুসারে

যখন $l = 0 \quad E_0 = 0$

$$l = 1 \quad E_1 = \frac{h^2}{8\pi^2 I}\,(2)$$

$$l = 2 \quad E_2 = \frac{h^2}{8\pi^2 I}\,(6)$$

$$l = 3 \quad E_3 = \frac{h^2}{8\pi^2 I}\,(12)$$

৬.২ চিত্রে কোনো দৃঢ় আবর্তকের শক্তি স্তরগুলো দেখানো হলো। দেখা যাচ্ছে, কোনো দৃঢ় আবর্তকের আইগেন অবস্থা l দ্বারা নির্ধারিত হয়। কিন্তু মুক্ত অক্ষবিশিষ্ট এরূপ দৃঢ় আবর্তকের প্রতিটি শক্তি স্তর $(2l+1)$ মাত্রায় (fold) সমশক্তিসম্পন্ন (degenerate) অর্থাৎ l এর প্রতিটি মানের $2l+1$ সংখ্যা একই বা প্রায় একই শক্তিসম্পন্ন শক্তি স্তর থাকে (দৃঢ় আবর্তকের)। চিত্র হতে এটি স্পষ্ট প্রতীয়মান হয় যে শক্তি স্তর ও শক্তির মধ্যে বৈশিষ্ট্যসূচক অনুপাত রয়েছে।

3 ——————————— $\frac{h^2}{8\pi^2 I}$ (12)

2 ——————————— $\frac{h^2}{8\pi^2 I}$ (6)

1 ——————————— $\frac{h^2}{8\pi^2 I}$ (2)

$I = 0$ ——————————— 0

চিত্র ৬.২ ঃ দৃঢ় আবর্তকের শক্তিস্তর চিত্র।

৬.২ সমরৈখিক একতালীয় দোলক
Linear Harmonic Oscillator

কোয়ান্টাম বলবিদ্যায় সমরৈখিক একতালীয় দোলক অত্যন্ত গুরুত্বপূর্ণ। অণু ও স্ফটিকের উপাদান পরমাণুতে যে কম্পন থাকে এখানেই একতালীয় দোলকের প্রয়োগ। সিস্টেমটিকে যখন আণবিক দৃষ্টকোণে কল্পনা করা হয় তখন তার নির্দিষ্ট কতকগুলো ধারাবাহিকতাহীন (discrete) শক্তি স্তর থাকবে। আমাদের চূড়ান্ত উদ্দেশ্য হলো-এ জাতীয় সিস্টেমের কম্পনীয় সমীকরণ প্রতিষ্ঠা করা। কারণ অণুর কম্পনীয় বর্ণালী অনুধাবনের জন্য এ শক্তি গুরুত্বপূর্ণ।

এক মাত্রায় (one dimension) সরল একতালীয় দোলন প্রদানকারী কোনো কণার রেস্টোরিং বল (restoring force) সাম্য অবস্থান থেকে সরণের (x) সমানুপাতিক। গাণিতিকভাবে,

$$m = \frac{d^2x}{dt^2} = -kx \qquad (৬.৩৩)$$

যেখানে m = কম্পমান কণার ভর এবং k = বল ধ্রুবক (force constant)।

সমীকরণ (৬.১)-কে পুনর্বিন্যাস করে,

$$-\frac{m}{x}\frac{d^2x}{dt^2} = k \qquad (৬.৩৪)$$

এ সমীকরণের সমাধান নিম্নরূপ ঃ

$$x = A \sin (Bt + C) \qquad (৬.৩৫)$$

যেখানে A, B এবং C ধ্রুবক। গতির একতালীয় প্রকৃতির কারণে লেখা যায়,

$$B = 2\pi\upsilon \qquad (৬.৩৬)$$

যেখানে υ = কণার কম্পনীয় ফ্রিকুয়েন্সি। সমীকরণ (৬.৩৫) ও (৬.৩৬) থেকে,

$$x = A\sin(2\pi\upsilon t + C) \qquad (৬.৩৭)$$

বা $$\frac{dx}{dt} A\cos(2\pi\upsilon t + C) \,.\, 2\pi\upsilon$$

বা $$\frac{d^2x}{dt^2} = -A\sin(2\pi\upsilon t + C)\,.\,4\pi^2\upsilon^2 \qquad (৬.৩৮)$$

অতএব, সমীকরণ (৬.৩৪) এবং (৬.৩৮) থেকে,

$$k = 4\pi^2\upsilon^2 m \qquad (৬.৩৯)$$

কোনো দোলকের স্থৈতিক শক্তি নিচের সমীকরণ দ্বারা প্রকাশ করা যায় ঃ

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2}\,kx^2 \\ &= \frac{1}{2}\,4\pi^2\upsilon^2\,m.x^2 \\ &= 2\pi^2\upsilon^2\,m.x^2 \qquad (৬.৪০) \end{aligned}$$

এটি তরঙ্গ সমীকরণের পটেনশিয়াল অপেক্ষক। যে কণাটি একমাত্র x অক্ষের সমান্তরাল হয়ে কম্পিত হয় তার y এবং z অক্ষ ধ্রুবক থাকে। এক্ষেত্রে শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণ এক-মাত্রিক রূপ লাভ করে। যথা,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V)\,\psi = 0 \qquad (৬.৪১)$$

যেখানে ψ যথাযথ আইগেন অপেক্ষক এবং E মোট শক্তির অনুরূপ আইগেন মান। সমীকরণ (৬.৪০) ও (৬.৪১) থেকে পাওয়া যায়,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - 2\pi^2\upsilon^2\,m.x^2)\,\psi = 0 \qquad (৬.৪২)$$

বা $$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{8\pi^2 mE}{h^2} - \frac{16\pi^4\upsilon^2 m^2 x^2}{h^2}\right)\psi = 0 \qquad (৬.৪৩)$$

ডিফারেন্সিয়াল সমীকরণ (৬.৪৩)-কে সরলীকরণ করবার জন্য ধরা যাক,

$$A = \frac{8\pi^2 mE}{h^2} \quad \text{এবং} \quad B = \frac{4\pi^2\upsilon m}{h} \qquad (৬.৪৪)$$

সমীকরণ (৬.৪৩) এবং (৬.৪৪) থেকে পাওয়া যায়,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (A - B^2x^2)\,\psi = 0 \qquad (৬.৪৫)$$

এখন একটি নতুন অপেক্ষক Q প্রবর্তন (introduce) করা যাক ঃ

$$Q = \sqrt{B}x \qquad (৬.৪৬)$$

তখন
$$\frac{d}{dx} = \sqrt{B}\,\frac{d}{dQ} \qquad (৬.৪৭)$$

এবং
$$\frac{d^2}{dx^2} = B\,\frac{d^2}{dQ^2} \qquad (৬.৪৮)$$

এরূপে সমীকরণ (৬.৪৫) দাঁড়ায়,

$$B\,\frac{d^2\psi}{dQ^2} + (A - BQ^2)\,\psi = 0$$

বা
$$\frac{d^2\psi}{dQ^2} + \left(\frac{A}{B} - Q^2\right)\psi = 0 \qquad (৬.৪৯)$$

এটি উল্লেখের কোনো প্রয়োজন নেই যে, এ সমীকরণের সমাধান $\psi(x)$ উত্তম আচরণপূর্ণ হবে ($-\infty$ থেকে $+\infty$ পর্যন্ত x এর সকল মানের জন্য অর্থাৎ $-\infty < x < +\infty$)।

সমীকরণ (৬.৪৯) এর অ্যাসিমটোটিক সমাধান [Asymptotic solution of equation (৬.৪৯)] ঃ যে ক্ষেত্রে Qএর মান খুব বড়, অর্থাৎ

$$Q >> \sqrt{\frac{A}{B}}$$

প্রথমেই সেক্ষেত্রে সমাধানের চেষ্টা করা যেতে পারে। এ অবস্থায় সমীকরণ (৬.৪৯) দাঁড়ায়,

$$\frac{d^2\psi}{dQ^2} - Q^2\psi = 0 \qquad (৬.৫০)$$

এ সমীকরণের সমাধান হলো ঃ

$$\psi = e^{\pm Q^2/2} \qquad (৬.৫১)$$

Q-এর পরিপ্রেক্ষিতে ব্যবকলন করে এবং Q>>1 বিবেচনা করে এটি প্রমাণ করে এটি প্রমাণ করা যায়। সমীকরণ (৬.৫১)-কে নিম্নরূপভাবে লেখা সম্ভব ঃ

$$\psi = e^{+Q^2/2} \text{ এবং } \psi = e^{-Q^2/2} \qquad (৬.৫২)$$

এ দুটি সমাধানের মধ্যে $\psi = e^{+Q^2/2}$ প্রয়োজনীয় শর্ত পূরণ করে এবং তাকে তরঙ্গ সমীকরণের সন্তোষজনক সমাধান হিসেবে গ্রহণ করা যায়।

রিকার্শন ফর্মুলা (Recursion formula) ঃ মূল সমীকরণ (৬.৪৯)এর সম্ভাব্য সমাধান হলো

$$\psi = e^{-Q^2/2}\, f(Q) \tag{৬.৫৩}$$

যেখানে $f(Q)$ Q এর একটি অপেক্ষক এবং $e^{-Q^2/2}$ একটি ফ্যাক্টর হিসেবে কাজ করে। সমীকরণ (৬.৫৩)কে দুবার ব্যবকলন করলে দাঁড়ায়,

$$\frac{d^2\psi}{dQ^2} = e^{-Q^2/2}\left\{\frac{d^2f}{dQ^2} - 2Q\frac{df}{dQ} + (Q^2-1)\,f\right\} \tag{৬.৫৪}$$

যেখানে f কে $f(Q)$ এর স্থলে ব্যবহার করা হয়েছে। এখন সমীকরণ (৬.৪৯), (৬.৫৩) এবং (৬.৫৪) হতে,

$$e^{-Q^2/2}\left\{\frac{d^2f}{dQ^2} - 2Q\frac{df}{dQ} + (Q^2-1)\,f\right\} + e^{-Q^2/2}\left(\frac{A}{B} - Q^2\right) f = 0$$

বা $$e^{-Q^2/2}\left(\frac{d^2f}{dQ^2} - 2Q\frac{df}{dQ}\right) + e^{-Q^2/2}\,.\,Q^2 f - e^{-Q^2/2} f + e^{-Q^2/2}\,.\,\frac{A}{B} f - e^{-Q^2/2}\,.\,Q^2 f = 0$$

বা $$e^{-Q^2/2}\left(\frac{d^2f}{dQ^2} - 2Q\frac{df}{dQ}\right) + e^{-Q^2/2}\left(\frac{A}{B} - 1\right) f = 0$$

বা $$e^{-Q^2/2}\left\{\frac{d^2f}{dQ^2} - 2Q\frac{df}{dQ} + \left(\frac{A}{B} - 1\right) f\right\} = 0 \tag{৬.৫৫}$$

যেহেতু $e^{-Q^2/2}$ এর একটি সসীম মান আছে, সুতরাং বন্ধনীর মধ্যকার রাশিটি অবশ্যই শূন্য হবে। ফলে আমরা পাই,

$$\frac{d^2f}{dQ^2} - 2Q\frac{df}{dQ} + \left(\frac{A}{B} - 1\right) f = 0 \tag{৬.৫৬}$$

এখন $f(Q)$ কে একটি ঘাত শ্রেণিতে প্রকাশ করা যাক।

$$f(Q) = \alpha_0 + \alpha_1 Q + \alpha_2 Q^2 + \alpha_3 Q^3 + \alpha_4 Q^4 + \ldots \tag{৬.৫৭}$$

$$\frac{dt}{dQ} = \alpha_1 + 2\alpha_2 Q + 3\alpha_3 Q^2 + 4\alpha_4 Q^3 + 5\alpha_5 Q^4 + \ldots \tag{৬.৫৮}$$

এবং $$\frac{d^2f}{dQ^2} = 2\alpha_2 + 6\alpha_3 Q + 12\alpha_4 Q^2 + 20\alpha_5 Q^3 + \ldots \qquad (৬.৫৯)$$

(৬.৫৬) সমীকরণে এসব ফল বসিয়ে,

$$2\alpha_2 + 6\alpha_3 Q + 12\alpha_4 Q^2 + 20\alpha_5 Q^3 + \ldots$$

$$- 2\alpha_1 Q - 4\alpha_2 Q^2 - 6\alpha_3 Q^3 + \ldots$$

$$+ \left(\frac{A}{B} - 1\right) \alpha_0 + \left(\frac{A}{B} - 1\right) \alpha_1 Q + \left(\frac{A}{B} - 1\right) \alpha_2 Q^2 + \ldots = 0 \qquad (৬.৬০)$$

যখন $f(Q)$ সমীকরণ (৬.৬০) এর সমাধান হয়, তখন Q-এর সকল মানের জন্য (৬.৬০) দ্বারা নির্দেশিত শ্রেণিটি বিলুপ্ত হবে। এ অবস্থায় Q-এর ভিন্ন ভিন্ন ঘাতের সহগ অবশ্যই পৃথক পৃথকভাবে বিলুপ্ত হবে।

সুতরাং আমরা লিখতে পারি,

Q^0-এর জন্য ঃ $$2\alpha_2 + \left(\frac{A}{B} - 1\right) \alpha_0 = 0 \qquad (৬.৬১)$$

Q এর জন্য ঃ $$6\alpha_3 - 2\alpha_1 + \left(\frac{A}{B} - 1\right) \alpha_1 = 0 \qquad (৬.৬২)$$

Q^2-এর জন্য ঃ $$12\alpha_4 - 4\alpha_2 + \left(\frac{A}{B} - 1\right) \alpha_2 = 0 \qquad (৬.৬৩)$$

সাধারণভাবে,

Q^n- এর জন্য $$(n+1)(n+2)\, \alpha_{n+2} - 2n\alpha_n + \left(\frac{A}{B} - 1\right) \alpha_n = 0 \qquad (৬.৬৪)$$

বা $$(n+1)(n+2)\, \alpha_{n+2} = \alpha_n + \left(2n - \frac{A}{B} + 1\right)$$

বা $$\frac{\alpha_{n+2}}{\alpha_n} = \frac{2n - \frac{A}{B} + 1}{(n+1)(n+2)} \qquad (৬.৬৫)$$

যেখানে $n = 0$ বা যে কোনো অখন্ড সংখ্যা। সমীকরণ (৬.৬৫)কে রিকার্শন ফর্মুলা বলে।

এখন সমীকরণ (৬.৫৩) দ্বারা নির্দেশিত অপেক্ষক পেতে হলে A/B-এর উপর কতিপয় সীমাবদ্ধতা (restrictions) আরোপ করতে হবে (A/B. E-এর সাথে সম্পর্কযুক্ত)। $e^{Q^2/2}$ শ্রেণিটি বিবেচনা করা যাক।

$$e^{Q^2/2} = 1 + Q^2 + \frac{Q4}{2!} + \ldots + \frac{Q^n}{\left(\frac{1}{2n}\right)!} + \ldots \qquad (৬.৬৬)$$

শ্রেণিটি থেকে দেখা যাচ্ছে যে, Q^n এর সহগ $\frac{1}{\left(\frac{1}{2}n\right)!}$

এবং Q^{n+2} এর সহগ $\frac{1}{\left(\frac{1}{2}n+1\right)!}$

Q^n এবং Q^{n+2} এর সহগ দুটিকে যথাক্রমে β_n এবং β_{n+2} রূপে প্রকাশ করে,

$$\frac{\beta_{n+2}}{\beta_n} = \frac{\left(\frac{1}{2}n\right)!}{\left(\frac{1}{2}n+1\right)!} = \frac{1}{\frac{1}{2}n+1} = \frac{2}{n+2} \qquad (৬.৬৭)$$

যখন n-এর মান 2 অপেক্ষা অনেক বড়, তখন সমীকরণ দাঁড়ায়

$$\mathrm{Lim}_{n \to \infty} \frac{\beta_{n+2}}{\beta_n} = \frac{2}{n} \qquad (৬.৬৮)$$

এ অবস্থায় (যখন n খুব বড়) f(Q) ঘাত শ্রেণির জন্য রিকার্শন ফর্মুলা নিম্নরূপ ধারণ করবে ঃ

$$\mathrm{Lim}_{r \to \infty} \frac{\alpha_{n+2}}{\alpha_n} = \frac{2}{n} \qquad (৬.৬৯)$$

অতএব আমরা বলতে পারি যে, n এর খুব বড় মানের জন্য f(Q) এর শ্রেণি $e^{Q^2/2}$ শ্রেণির ন্যায় আচরণ করে। সুতরাং n-এর বৃহৎ মানের ক্ষেত্রে ψ-কে নিম্নরূপে প্রকাশ করা যায়। যথা,

$$\psi = e^{-Q^2/2} \,.\, e^{Q^2} = e^{Q^2/2} \qquad (৬.৭০)$$

সমীকরণ (৬.৭০) দ্বারা নির্দেশিত তরঙ্গ অপেক্ষক গ্রহণযোগ্য নয়। কারণ এ ক্ষেত্রে Q-এর মান বৃদ্ধির সাথে ψ বৃদ্ধি পায়। সুতরাং কতিপয় সীমাবদ্ধতা আরোপ করা দরকার,

যাতে সসীম সংখ্যক পদের পর শ্রেণিটি ভেঙ্গে যায়। এটি তখনই সম্ভব, যখন f(Q)-কে একটি পলিনমিয়াল তৈরি করা হয় (ঘাত শ্রেণির পরিবর্তে)। এ পলিনমিয়াল এবং $e^{-Q^2/2}$ এর গুণফল তখন গ্রহণযোগ্য তরঙ্গ অপেক্ষক হবে।

রিকার্শন ফর্মুলার (সমীকরণ ৬.৬৫ দ্বারা প্রকাশিত) লবের মান শূন্য হলেই f(Q)-এর শ্রেণি সসীম সংখ্যক পদের পর ভেঙ্গে যাবে। সুতরাং আমরা লিখতে পারি,

$$\frac{A}{B} - 1 - 2n = 0$$

বা $$\frac{A}{B} = 2n+1 \qquad (৬.৭১)$$

সমীকরণ (৬.৪৪) থেকে A এবং B এর মান নিয়ে (৬.৭১) সমীকরণে বসিয়ে,

$$\frac{8\pi^2 mE_n}{h^2} \Big/ \frac{4\pi^2 \upsilon m}{h} = 2n+1$$

বা $$\frac{2E_n}{h\upsilon} = 2n+1$$

বা $$E_n = h\upsilon\left(n + \frac{1}{2}\right) \qquad (৬.৭২)$$

যেখানে $n = 0$ বা যে কোনো অখন্ড সংখ্যা

$= 0, 1, 2, 3, 4$ .... ইত্যাদি।

সমীকরণ (৬.৭২) থেকে এটি স্পষ্ট প্রতীয়মান হয় যে, n দ্বারা নিয়ন্ত্রিত কতিপয় নির্দিষ্ট ধারাবাহিকতাহীন (definite and discrete) শক্তি-মানের ক্ষেত্রে সমরৈখিক একতালীয় দোলকের শ্রডিঙ্গার সমীকরণের গ্রহণযোগ্য সমাধান থাকতে পারে। গ্রহণযোগ্য আইগেন অপেক্ষককে নিম্নরূপে প্রকাশ করা যায়ঃ

$$\psi_n = Ne^{-Q^2/2} \cdot H_n(Q) \qquad (৬.৭৩)$$

যেখানে N = সঙ্গতকৃত ফ্যাক্টর এবং H_n হলো n ডিগ্রী হারমাইট পলিনমিয়াল। এখানে

$$H_n = (-1)^n \, e^{Q^2} \frac{d^n e^{-Q^2/2}}{dQ^n} \qquad (৬.৭৪)$$

সমীকরণ (৬.৭২) অনুসারে আমরা লিখতে পারি,

যখন $n = 0 \qquad E_0 = \frac{1}{2}h\upsilon$

$n = 1 \qquad E_1 = \frac{3}{2}h\upsilon$

$$n = 2 \qquad E_2 = \frac{5}{2} h\upsilon$$

$$n = 3 \qquad E_3 = \frac{7}{2} h\upsilon$$

শক্তি স্তরের শক্তির মান ব্যবহার করে সরল একতালীয় দোলকের শক্তি চিত্র আঁকা যায়। ৬.৩ চিত্রে তা দেখানো হলো। n= o স্তরের শক্তিকে শূন্য বিন্দু শক্তি (zero point energy) বলে।

3	$7/2\ h\upsilon$	
2	$5/2\ h\upsilon$	↑
1	$3/2\ h\upsilon$	E
n = o	$1/2\ h\upsilon$	

চিত্র ৬.৩ ঃ সরল একতালীয় দোলকের শক্তি চিত্র।

প্রশ্নাবলি

৬.১। মুক্ত অক্ষ-দৃঢ় আবর্তক কাকে বলে? এ জাতীয় আবর্তকের শ্রডিঙ্গার সমীকরণ লিখ।

৬.২। দৃঢ় আবর্তকের ক্ষেত্রে কোয়াণ্টাম বলবিদ্যা প্রয়োগ করে তার আবর্তনীয় শক্তির সমীকরণ উপপাদান কর।

৬.৩। লেজেণ্ডার পলিনমিয়াল পদ্ধতিতে দৃঢ় আবর্তকের শ্রডিঙ্গার সমীকরণ সমাধান করে আবর্তনীয় শক্তির সমীকরণ উপপাদন কর।

৬.৪। একতালীয় দোলক কাকে বলে ? এরূপ দোলকের ক্ষেত্রে সরল এক-মাত্রিক শ্রডিঙ্গার সমীকরণ লিখ।

৬.৫। সরল একতালীয় দোলকের শ্রডিঙ্গার সমীকরণের উপপাদন কর।

৬.৬। অ্যাসিমটোটিক সমাধানের মাধ্যমে একতালীয় দোলকের রিকার্শন ফর্মুলা উপপাদন কর।

৬.৭। সরল একতালীয় দোলকের রিকার্শন ফর্মুলা লিখ। কিভাবে এ ফর্মুলা থেকে কম্পনীয় শক্তির সমীকরণ পাওয়া যায় ?

৬.৮। টীকা লিখ ঃ

(ক) দৃঢ় আবর্তকের কোয়াণ্টাম বলবিদ্যা,

(খ) সরল একতালীয় দোলকের কোয়াণ্টাম বলবিদ্যা

৬.৯। একতালীয় দোলকের শক্তির সমীকরণের জন্য দোলকটির শ্রডিঙ্গার সমীরকরণ সমাধান কর। [রা.বি. এম.এস-সি, ১৯৯৮]

সপ্তম অধ্যায়

জটিল সিস্টেমের জন্য সন্নিহিত পদ্ধতি

APPROXIMATE METHODS FOR COMPLICATED SYSTEMS

৭.১ সূচনা
Introduction

তরঙ্গ সমীকরণের প্রকৃত সমাধানের দৃষ্টিকোণে হাইড্রোজেন-সদৃশ পরমাণুর সিস্টেমের সমস্যাগুলো তুলনামূলকভাবে সরল। এর একমাত্র কারণ হলো সিস্টেমটিতে একটি ইলেক্ট্রন উপস্থিত থাকে। যখন সিস্টেমে অনেকগুলো ইলেক্ট্রন থাকে (অধিকাংশ রাসায়নিক সিস্টেমই এ ধরনের) তখন ব্যাপারটি অত্যন্ত জটিল হয় এবং এ জাতীয় সিস্টেমের তরঙ্গ সমীকরণের পূর্ণাঙ্গ সমাধান নিতান্তই কঠিন এবং প্রকৃতপক্ষে তা সম্ভব নয়। এক্ষেত্রে কতকগুলো সন্নিহিত (approximate) পদ্ধতির প্রস্তাব করা হয়েছে। জটিল সিস্টেমের ক্ষেত্রে এ পদ্ধতি প্রয়োগ করে সার্থক ফল পাওয়া গেছে। পদ্ধতিগুলোর মধ্যে দুটি ব্যাপকভাবে ব্যবহৃত হয়। যেমন,

(ক) অস্থিরতা তত্ত্ব (Perturbation theory)

(খ) পরিবর্তনশীলতা তত্ত্ব (Variation theory)

৭.২ অস্থিরতা তত্ত্ব
Perturbation Theory

অস্থিরতা তত্ত্ব অনুসারে আমাদের আলোচ্য সিস্টেমটিকে একটি আদর্শ সিস্টেমের সামান্য সংশোধিত রূপ (slight perturbation) হিসেবে দেখতে পারি যে আদর্শ সিস্টেমের প্রকৃত সমাধান আমাদের জানা আছে। ধরা যাক, আমরা যে জটিল সিস্টেমটি গ্রহণ করেছি তার হ্যামিলটনীয় অপারেটর হলো H এবং আদর্শ সিস্টেমটির (যার সমাধান আমরা আগেই করেছি) হ্যামিলটনীয় অপারেটর H_o। H এর মান H_o হতে সামান্য ভিন্ন।

এটি মনে করা হয় যে, নিম্নলিখিত অস্থির না করা (unperturbed) তরঙ্গ সমীকরণের পূর্ণাঙ্গ সমাধান আছে। যথা,

$$H_o \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0 \qquad (৭.১)$$

যেখানে H_0 এর সংগে E_1^0, E_2^0, E_3^0, ... E_n^0 আইগেন মান জড়িত এবং তাদের অনুরূপ আইগেন অপেক্ষক হলো যথাক্রমে ψ_1^0 ψ_2^0 ψ_3^0, ... ψ_n^0 ।

এখন আমাদের বহু-ইলেক্ট্রন ঘটিত জটিল সিস্টেমের জন্য নিম্নের প্রকৃত শ্রডিঙ্গার সমীকরণ সমাধান করতে হবে ঃ

$$H \psi_n = E_n \psi_n \qquad (৭.২)$$

যেখানে H = অস্থির সিস্টেমের হ্যামিলটনীয় অপারেটর। অনুমানের ভিত্তিতে ধরা হয় H এর মান H_0 থেকে সামান্য বেশি। সুতরাং তাদের মধ্যে সম্পর্ক হবে

$$H = H_0 + \lambda H^{(1)} \qquad (৭.৩)$$

যেখানে λ- একটি যথেচ্ছ (arbitrary) রাশি (parameter) এবং $\lambda H^{(1)}$ কে **'অস্থিরতা'** বলে। এর মান H_0 এর তুলনায় অত্যন্ত কম। সুতরাং আমরা যে সমীকরণটি সমাধান করতে চাই তা হলো ঃ

$$\left(H_0 + \lambda H^{(1)} \right) \psi_n = E_n \psi_n \qquad (৭.৪)$$

যখন λ-কে শূন্য ধরা হয় তখন সমীকরণ (৭.৪) (৭.১) সমীকরণে পরিণত হয়। সুতরাং λ এর ক্ষুদ্র মানের জন্য (৭.৪) সমীকরণে এর সমাধান (৭.১) সমীকরণের সমাধানের অত্যন্ত কাছাকাছি হবে। এরূপে আমরা বলতে পারি যে, অস্থিরতার ফল $\lambda H^{(1)}$ সামান্যভাবেই অস্থির না করা (unperturbed) আইগেন মান E_n^0 এবং আইগেন অপেক্ষক ψ_n^0 -কে পরিবর্তন করে।

এখন ধরা যাক, $\lambda \to 0$ হলে ψ_n এবং E_n যথাক্রমে ψ_n^0 এবং E_n^0 এর দিকে অগ্রসর হয় এবং যে কোনো দুটি আইগেন মান, E_n^0 সমান হবে না। পুনরায় যেহেতু ψ_n এবং E_n হলো λ-এর অপেক্ষক সেহেতু তাদেরকে ঘাত শ্রেণিতে প্রকাশ করা যায় ঃ

$$\psi_n = \psi_n^0 + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + ... \qquad (৭.৫)$$

$$E_n = E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + ... \qquad (৭.৬)$$

যেখানে $\psi_n^{(1)}$, $\psi_n^{(2)}$, ..., $E_n^{(1)}$, $E_n^{(2)}$ .... λ এর উপর নির্ভর করে না। এখন সমীকরণ (৭.৪), (৭.৫) এবং (৭.৬) থেকে,

$$H_0 (\psi_n^0 + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + ...) + \lambda H^{(1)} (\psi_n^0 + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + ...)$$

$$= (\psi_n^0 + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2 \psi_n^{(2)} + \ldots) (E_n^0 + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \ldots)$$

বা, $H_0 (\psi_n^0 + \lambda (H_0 \psi_n^{(1)} + H^{(1)} \psi) + \lambda^2 (H_0 \psi_n^{(2)} + H^{(1)} \psi_n^{(1)} + \ldots$

$$= E\psi_n^0 \psi_n^0 + \lambda (E_n^{(1)} \psi_n^0 + E_n^0 \psi_n^{(1)})$$

$$+ \lambda^2 (E_n^{(2)} \psi_n^0 + E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} + E_n^0 \psi_n^{(2)}) + \ldots \qquad (৭.৭)$$

যদি এ সমীকরণটিকে λ-এর সকল মানের জন্য তুষ্ট হতে হয়, তবে সমীকরণটির উভয় পক্ষের λ-এর বিভিন্ন ঘাতের সহগগুলোকে সমান হতে হবে। λ-এর বিভিন্ন ঘাতের সহগের মধ্যে সমতা বিধান করে,

$$H_0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0 \qquad (৭.৮)$$

$$(H_0 - E_n^0) \psi_n^{(1)} = (E_n^{(1)} - H_n^{(1)}) \psi_n^0 \qquad (৭.৯)$$

$$(H_0 - E) \psi_n^{(2)} = (E_n^{(2)} \psi_n^0 + (E_n^{(1)} - H^{(1)}) \psi_n^{(1)} \qquad (৭.১০)$$

সমীকরণ (৭.৮) কে ইতঃপূর্বে সমাধান করা হয়েছে। যদি সমীকরণ (৭.৯)-এর সমাধান করা সম্ভব হয়, তবে $\psi_n^{(1)}$ এবং $E_n^{(1)}$ পাওয়া সম্ভব। আবার সমীকরণ (৭.১০) এর সমাধান সম্ভব হলে $\psi_n^{(2)}$ এবং $E_n^{(2)}$ পাওয়া যেতে পারে। এভাবে পরবর্তী মানগুলো নির্ণয় করা যায়।

সমীকরণ (৭.৯) এর সমাধানকল্পে $\psi_n^{(1)}$ কে নর্মালাইজড এবং অর্থোগোনালাইজড অপেক্ষকের সেট $\psi_1^0 \psi_2^0 \ldots\ldots\ldots \psi_n^0$ -এর প্রেক্ষিতে নিম্নরূপে সম্প্রসারণ করা যেতে পারে ঃ

$$\psi_n^{(1)} = A_1 \psi_1^0 + A_2 \psi_2^0 + A_3 \psi_3^0 + \ldots\ldots A_m \psi_m^0 + \ldots\ldots\ldots \qquad (৭.১১)$$

যেখানে A_m গুলো নির্ণয় করতে হবে। $\psi^{(1)} \psi_n^0$-কে নিম্নের ঘাত শ্রেণিতে সম্প্রসারণ করা যায় ঃ

$$H^{(1)} \psi_n^0 = H_{1n}^{(1)} \psi_1^0 + H_{2n}^{(1)} \psi_2^0 + \ldots\ldots \ldots\ldots + H_{2m} \psi_m^0 + \ldots\ldots (৭.১২)$$

যেখানে $H_{mn}^{(1)} = \int \psi_m^0 {}^* H^{(1)} \psi_n^0 \, d\tau$

সমীকরণ (৭.৯), (৭.১০) এবং (৭.১১) থেকে,

$$(H_0 - E_n^0)(A_1 \psi_1^0 + A_2 \psi_2^0 + \dots)$$

$$= E_n^{(1)} \psi_n^0 - H_{1n}^{(1)} \psi_1^0 - H_{2n}^{(1)} \psi_2^0 \qquad (৭.১৩)$$

সমীকরণ (৭.১৩) কে এখন সমীকরণ (৭.৮) এর সাহায্যে নিম্নরূপে পুনর্বিন্যাস করা যায় ঃ

$$(E_0 - E) A_1 \psi_1^0 + (E_2^0 - E_n^0) A_2 \psi_2^0 + \dots\dots$$

$$= E_n^{(1)} \psi_1^0 - H_{1n}^{(1)} \psi_1^0 - H_{2n}^{(1)} \psi_2^0 \qquad (৭.১৪)$$

সমীকরণটির উভয় পার্শ্বের প্রতিটি ψ_n^0 এর সহগ সমান হওয়া উচিত। কিন্তু বাম পার্শ্বস্থ ψ_n^0 এর সহগ শূন্য এবং ডানপার্শ্বস্থ সহগ $(H_n^{(1)} - H_{nn}^{(1)})$। অতএব,

$$E_n^{(1)} - H_{nn}^{(1)} = 0 \qquad (৭.১৫)$$

ফলে প্রথম ক্রমের অস্থিরতা শক্তি (first order perturbation energy) নিম্নরূপে নির্ণীত হয় ঃ

$$E_n^{(1)} = H_{nn}^{(1)} = \int \psi_n^{0} {}^* H^{(1)} \psi_n^0 \, d\tau$$

এখন ψ_m^0 ($m \neq n$) এর সহগের সমতা বিধান করলে দাঁড়ায়,

$$A_m (E_m^0 - E_n^0) = - H_{mn}^{(1)}$$

বা, $$A_m = \frac{H_{mn}^{(1)}}{E_n^0 - E_m^0} \qquad (৭.১৬)$$

আমরা Ψ_n কে নিম্নরূপে প্রকাশ করতে পারি ঃ

$$\Psi_n = \Psi_n^0 + \lambda \sum_m{}' A_m \Psi_m^0 + \lambda A_n \Psi_n^0 + \lambda^2 (\dots)$$

যেখানে $\sum_m{}'$ এর অর্থ হলো -n ব্যতীত m এর সকল মানের যোগ করতে হবে।

ফলে আমরা পাই,

$$\int \Psi_n^* \Psi_n \, d\tau = \int \Psi_n^{0}{}^* \Psi_n^0 \, d\tau + \lambda \sum_m{}' A_m \int \Psi_m^{0}{}^* \Psi_n^0 \, d\tau$$

$$+ \lambda \sum_{m}{}' A_m \int \psi_n^{0*} \psi_m^0 \, d\tau + 2\lambda A_m$$

$$\int \psi_n^{0*} \psi_n^0 \, d\tau + \lambda^2 (....) \qquad (৭.১৭)$$

এখানে ψ_m^0 অপেক্ষকটি সঙ্গতকৃত এবং অর্থোগোনাল হলে সমীকরণ (৭.১৭) দাঁড়ায়,

$$\int \psi^* \psi_n \, d\tau = 1 + 2\lambda A_n + \lambda^2 (...) \qquad (৭.১৮)$$

যদি ψ_n অপেক্ষকগুলো সঙ্গতকৃত করতে হয়, তবে সমীকরণ (৭.১৮) এর ডানপক্ষ অবশ্যই এককের সমান হবে (λ এর সকল মানের জন্য)। এক্ষেত্রে A_n কে শূন্য ধরতে হবে। λ এর প্রথম ক্রমে ফলাফল দাঁড়ায়,

$$E_n = E_n^0 + \lambda H_{nn}^{(1)} + \lambda^2 \ (...) \qquad (৭.১৯)$$

$$\psi_n = \psi_n^0 + \lambda \sum_{m}{}' \frac{H_{mn}^{(1)}}{E_n^0 - E_m^0} + \lambda^2 (...) \qquad (৭.২০)$$

৭.৩ পরিবর্তনশীলতা তত্ত্ব
Variation Theory

একাধিক ইলেক্ট্রন ঘটিত সিস্টেমের তরঙ্গ সমীকরণ সমাধানের পরিবর্তনশীলতা তত্ত্বটি অস্থিরতা তত্ত্ব থেকে সম্পূর্ণ আলাদা। এ তত্ত্ব নিচের উপপাদ্যের উপর প্রতিষ্ঠিত ঃ

যদি m শ্রেণির যে কোনো অপেক্ষক ψ হয়, যাতে

$$\int \psi^* \psi \, d\tau = 1$$

এবং যদি H অপারেটরের ভিত্তি (সর্বনিম্ন) আইগেন মান E_0 হয়, তবে

$$\int \psi^* H \psi \, d\tau \geq E_0 \qquad (৭.২১)$$

এখন এ উপপাদ্যটিকে প্রমাণ করা যাক। নিচে সমাকলকটি বিবেচনা করে,

$$\int \psi^* (H - E_0) \psi d\tau = \int \psi^* H \psi \, d\tau - E_0 \int \psi^* \psi d\tau$$

$$= \int \psi^* H \psi \, d\tau - E_0 \qquad (৭.২২)$$

যদি অপেক্ষক ψ-কে H-এর বিভিন্ন আইগেন অপেক্ষক, যথা, ψ_1, ψ_2, ψ_3 ... এর শ্রেণি সম্প্রসারণ করা হয়, তবে

$$\int \psi^*(H-E_0)\,\psi d\tau = \int \Big(\sum_i C_i^* \psi_i^*\Big)(H-E_0)\Big(\sum_i C_i \psi_i\Big) d\tau \quad (৭.২৩)$$

যেহেতু ψ_i গুলো H এর আইগেন অপেক্ষক, সেহেতু

$$H\psi_i = E_i \psi_i$$

অতএব সমীকরণ (৭.২৩) দাঁড়ায়,

$$\int \psi^*(H-E_o)\,\psi d\tau = \int \Big(\sum_i C_i^* \psi_i^*\Big) \sum_i (E_i - E_o) C_i \psi_i d\tau$$

$$= \sum_i C_i^* C_i (E_i - E_o) \qquad (৭.২৪)$$

(কারণ $\int \psi_i^* \psi_i \, d\tau = 1$)

$C_i^* C_i$ একটি ধনাত্মক সংখ্যা এবং

$$E_i \geq E_o$$

ফলে আমরা পাই,

$$\int \psi^*(H-E_o)\,\psi\, d\tau \geq 0 \qquad (৭.২৫)$$

এবং $$\int \psi^* H\psi\, d\tau \geq E_o \qquad (৭.২৬)$$

যখন $\psi = \psi_o$ (যেখানে ψ_o আইগেন অপেক্ষকটির আইগেন মান E_o) তখন সমীকরণটির ক্ষেত্রে সমান চিহ্ন প্রযোজ্য হবে।

এ উপপাদ্যের প্রয়োগ নীতিগতভাবে সরল। এ উদ্দেশ্যে একটি ট্রায়াল আইগেন অপেক্ষক ψ (λ_1, λ_2 ....)-কে নির্বাচন করা হয়। এ আইগেন অপেক্ষকটি কতিপয় পরিমাত্রা, যথা λ_1, λ_2 ... ইত্যাদির অপেক্ষক। সমাকলক $I = \int \psi^* H\psi\, d\tau$ নির্ণয় করা যায়। এরূপে চূড়ান্ত ফলটি λ_1, λ_2 ... ইত্যাদি পরিমাত্রার অপেক্ষক হবে। সমাকলকের মান সর্বনিম্ন আইগেন মানের কাছাকাছি হয় এবং অনুরূপ ψ টি নির্ণীতব্য আইগেন অপেক্ষকের সমান হয়।

উদাহরণস্বরূপ, একতালীয় দোলকটির কথা বিবেচনা করা যাক, যার হ্যামিলটনীয় অপারেটর,

$$\hat{H} = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{k}{2}x^2 \qquad (৭.২৭)$$

সঙ্গতকৃত ψ দ্বারা তুষ্ট তবে এ শর্তে $\psi = C\,e^{-\lambda x2}$ সমীকরণটি ব্যবহার করা যেতে পারে। সেক্ষেত্রে C-এর মান হবে নিম্নরূপ ঃ

$$C = \left(\frac{2\lambda}{\pi}\right)^{1/4}$$

ফলে আমরা পাই,

$$H\psi = -\frac{Ch^2}{8\pi^2 m}(4\lambda^2x^2 - 2\lambda)\,e^{-\lambda x^2} + \frac{Ck}{2}x^2\,e^{-\lambda x^2}$$

এবং $$I = \int_{-\infty}^{+\infty}\left[-\frac{C^2h^2}{8\pi^2 m}(4\lambda^2x^2 - 2\lambda)\,e^{-\lambda x^2} + \frac{Ck}{2}x^2\,e^{-\lambda x^2}\right]dx \qquad (৭.২৮)$$

$$= \frac{h^2\lambda}{8\pi^2 m} + \frac{k}{8\lambda} \qquad (৭.২৯)$$

I এর মান সর্বনিম্ন হতে পারে, যখন

$$\frac{dI}{d\lambda} = \frac{h^2}{8\pi^2 m} - \frac{k}{8\lambda^2} = 0$$

বা, $$\lambda = \frac{\pi}{h}\sqrt{mk} \qquad (৭.৩০)$$

অতএব সর্বনিম্ন আইগেন মান হলো ঃ

$$E_0 \leq \frac{h}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{1}{2}h\upsilon \qquad (৭.৩১)$$

এবং অনুরূপ আইগেন অপেক্ষক হবে,

$$\psi = \left(\frac{2}{h}\sqrt{km}\right)^{1/4} e^{-\pi/h\,\sqrt{mkx2}} \qquad (৭.৩২)$$

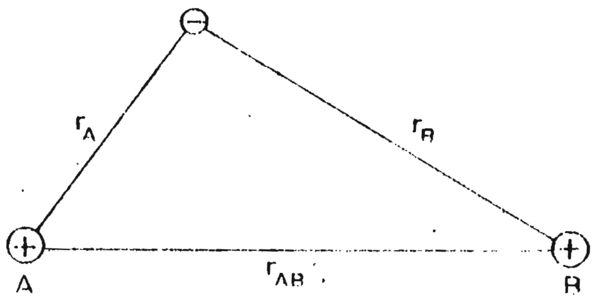
পরিবর্তনশীল তত্ত্ব ভিত্তি-স্তর ও উত্তেজিত স্তরের আইগেন অপেক্ষক হিসাব করার জন্য প্রয়োগ করা যায়।

৭.৪ হাইড্রোজেন অণু আয়ন, H_2^+

The Hydrogen Molecule Ion, H_2^+

দুটি প্রোটন এবং একটি ইলেক্ট্রন নিয়ে গঠিত হয় হাইড্রোজেন অণু আয়ন H_2^+। এ অণু এক বিশেষ অবস্থায় সুস্থিত। হাইড্রোজেন গ্যাসকে বৈদ্যুতিক ডিসচার্জ করলে এরা

উচ্চ মাত্রায় উৎপন্ন হয়ে থাকে। তবে এ চার্জযুক্ত অণুর কোনো সুস্থিত লবণ প্রস্তুত করা যায় না। এদেরকে ভর বর্ণালী মাপক (mass spectrometer) দ্বারা পরীক্ষা করা যায়। এর বন্ধন দৈর্ঘ্য 106pm (পিকোমিটার) এবং বিয়োজন শক্তি ($H_2^+ \rightarrow H^+ + H$) 2.78 eV (268 k J mol^{-1})। হাইড্রোজেন অণু আয়নের পরিকাল্পনিক চিত্র (schematic diagram) নিচে দেখানো হলো।



চিত্র ৭.১ ঃ হাইড্রোজেন অণু আয়নের (H_2^+) পরিকাল্পনিক চিত্র।
r_{AB} = আন্তঃনিউক্লীয় দূরত্ব।

এই সিস্টেম, যা দুটি প্রোটন ও একটি ইলেক্ট্রন দ্বারা গঠিত, তার কণাগুলোর চার্জের জন্য ইলেক্ট্রোস্ট্যাটিক স্থৈতিক শক্তি U কে কুলম্ব সূত্র দ্বারা লেখা যায় ঃ

r_{AB} দূরত্বে দুটি প্রোটনের জন্য $$U_1 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{AB}}$$

প্রোটন-ইলেক্ট্রন আন্তঃক্রিয়ার জন্য $$U_2 = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_A}$$

এবং $$U_3 = \frac{-e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_B}$$

সুতরাং সিস্টেমটির মোট স্থৈতিক শক্তি হবে,

$$U = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r_{AB}} - \frac{1}{r_A} - \frac{1}{r_B}\right) \qquad (৭.৩৩)$$

৩৫

স্থৈতিক শক্তির এ মান যথাযথ শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণের বসালে আমরা H_2^+ এর তরঙ্গ সমীকরণ পাব। এ সমীকরণ সমাধান করে সিস্টেমটির মোট শক্তি পাওয়া যায়।

৭.৫ বর্ণ-ওপেনহাইমার অ্যাপ্রক্সিমেশন
Born-Oppenheimer Approximation

দুটি প্রোটন ও একটি ইলেক্ট্রনের দ্বারা গঠিত H_2^+ এর সমস্যাটি বস্তুত একটি ত্রি-অবয়ব (three body) সমস্যা। সনাতন বা কোয়াণ্টাম বলবিদ্যা এর সঠিক সমাধান সম্ভব নয়। তবে একটি গুরুত্বপূর্ণ অ্যাপ্রক্সিমেশন সিস্টেমটির ক্ষেত্রে প্রয়োগ করে এর তরঙ্গ সমীকরণ সমাধান করা যায়। অ্যাপ্রক্সিমেশনটি অন্যান্য সিস্টেম, যাদের নিউক্লিয়াস ও ইলেক্ট্রন রয়েছে তাদের ক্ষেত্রেও প্রয়োগ করা সম্ভব। ইলেক্ট্রনের তুলনায় নিউক্লিয়াসের ভর এ ক্ষেত্রে কয়েক হাজার গুণ ভারি হওয়ায় নিউক্লিয়াসের গতি ইলেক্ট্রনের তুলনায় অনেক ধীর। **“ইলেক্ট্রনের তুলনায় নিউক্লিয়াসের গতি এতোই ধীর যে, ইলেক্ট্রনের ভ্রমণকালে নিউক্লিয়াস প্রকৃতপক্ষে একটি বিশেষ অবস্থায় অনড় (fixed) থাকে।” এটিই বর্ণ-ওপেনহাইমার অ্যাপ্রক্সিমেশন**। এর সাহায্যে ইলেক্ট্রনীয় অবস্থা হিসাব করা যায়। ১৯২৭ সালে **ম্যাক্স বর্ন** (Max Born) ও **জে. রবার্ট ওপেন-হাইমার** (J. Robert Oppenheimer) এ অ্যাপ্রক্সিমেশন ব্যবহার করেন। অণুর ধর্ম সম্পর্কীয় কোয়াণ্টাম মেকানিক্যাল হিসাবের ভিত্তি হলো এ অ্যাপ্রক্সিমেশন।

বর্ণ-ওপেনহাইমার অ্যাপ্রক্সিমেশনের ফলশ্রুতি হিসেবে নিউক্লিয়াসের অবস্থান অনড় করে দেয়া যায় এবং এরূপ অনড় নিউক্লিয়াসযুক্ত সিস্টেমের ইলেক্ট্রনীয় স্থিরাবস্থার (stationary state) তরঙ্গ অপেক্ষক নির্ণয় করা যায়।

৭.৬ H_2^+ এর তরঙ্গ সমীকরণ
Wave Equation of H_2^+

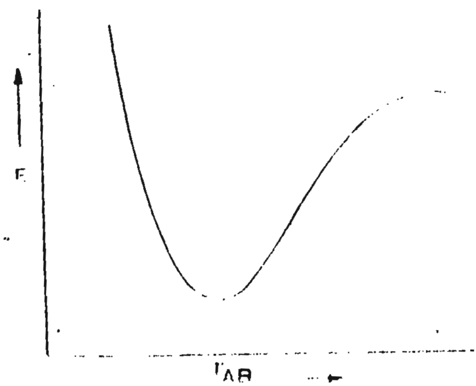
স্থৈতিক শক্তির জন্য সমীকরণ (৭.৩৩) ব্যবহার করে H_2^+ এর যথাযথ শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণ হবে নিম্নরূপ ঃ

$$\left[\frac{-h^2}{8\pi^2 me}\nabla^2 + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r_{AB}} - \frac{1}{r_A} - \frac{1}{r_B}\right)\right]\psi = E\psi$$

$$\text{বা } -\frac{h^2}{8\pi^2 me}\nabla^2\psi = \left[E - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r_{AB}} - \frac{1}{r_A} - \frac{1}{r_B}\right)\right]\psi$$

$$\text{বা } \nabla^2\psi + \frac{8\pi^2 me}{h^2}\left[E - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r_{AB}} - \frac{1}{r_A} - \frac{1}{r_B}\right)\right]\psi = 0 \quad (৭.৩৪)$$

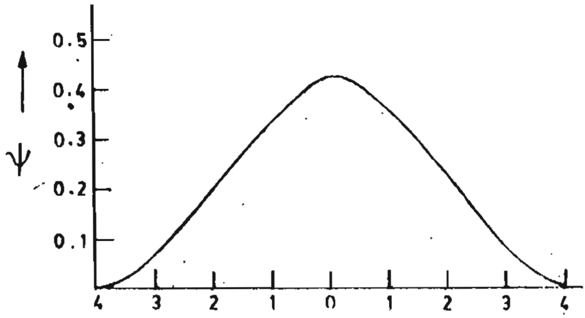
যথাযথ অক্ষ সিস্টেম (coordinate system) ব্যবহার করে সমীকরণ (৭.৩৪) এর সমাধান করা যায় এবং এ থেকে ইলেক্ট্রনের তরঙ্গ অপেক্ষক ψ এবং গ্রহণযোগ্য শক্তি স্তর পাওয়া যায়। ৭.২ চিত্র E বনাম r_{AB} লেখচিত্র প্রকাশ করছে।



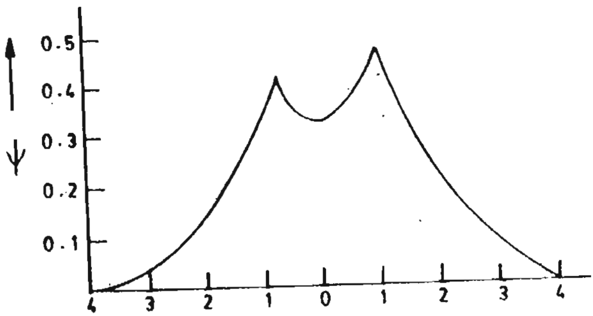
চিত্র ৭.২ ঃ E বনাম r_{AB} লেখচিত্র।

চিত্রে প্রদর্শিত সর্বনিম্ন বিন্দু এটিই নির্দেশ করে যে, H_2^+ একটি সুস্থিত অণু। সুতরাং দেখা যাচ্ছে, একক ইলেক্ট্রনটি দুটি প্রোটনকে একত্রে বেঁধে রাখতে আশ্চর্যজনকভাবে সক্ষম।

আমরা জানি, $\psi^2 d\tau$ হলো, কোনো ক্ষুদ্র আয়তন (volume element) $d\tau$ এ ইলেক্ট্রন লাভের সম্ভাবনা। হাইড্রোজেন অণু আয়ন H_2^+ এ ইলেক্ট্রনীয় চার্জ কিভাবে বণ্টিত তা নিচের ৭.৩ চিত্র থেকে বুঝা যাবে।



(ক)



(খ)

বন্ধনের মধ্য বিন্দু থেকে দূরত্ব (পারমাণবিক একক)

চিত্র ৭.৩ ঃ H_2^+ এর ভিত্তি অবস্থায় ইলেক্ট্রনের সঠিক তরঙ্গ অপেক্ষক (ক) H–H বন্ধনের মধ্য বিন্দুতে লম্ব বরাবর। (খ) H–H বন্ধন বরাবর।

৭.৩ (ক) চিত্রে H – H বন্ধনের মধ্যবিন্দুতে অঙ্কিত লম্ব বরাবর তরঙ্গ অপেক্ষক এবং ৭.৩(খ) চিত্রে H – H বন্ধন বরাবর তরঙ্গ অপেক্ষক প্রকাশ করছে। দেখা যাচ্ছে ψ এর সর্বোচ্চ বিন্দু প্রোটন পর্যন্ত বিস্তৃত এবং ψ এর যথেষ্ট পরিমাণ বিস্তার উভয়

প্রোটনের মাঝামাঝি অঞ্চলেই পাওয়া যায়। আমরা জানি ψ^2 হলো ইলেক্ট্রনের ঘনত্বের পরিমাপক। সুতরাং প্রোটন দুটির মধ্যবর্তী অঞ্চলেই ঋণাত্মক চার্জের ঘনত্ব বেশি থাকবে। অর্থাৎ ধনাত্মক নিউক্লিয়াসগুলোর আশেপাশেই ইলেক্ট্রন মেঘের ঘনত্ব অপেক্ষাকৃত বেশি। এ কারণেই ইলেক্ট্রোস্ট্যাটিক স্থৈতিক শক্তি কমতে থাকে। এর ফলেই H_2^+ সুস্থিত হয়।

৭.৭ H_2^+ এর ক্ষেত্রে পরিবর্তনশীল তত্ত্ব

Variation Theory in The Case of H_2^+

৭.৩ অনুচ্ছেদে বর্ণিত পরিবর্তনশীল তত্ত্ব আণবিক ধর্মের অধিকাংশ কোয়ান্টাম মেকানিক্যাল হিসাবের ভিত্তি। আমরা এখন H_2^+ এর ক্ষেত্রে পরিবর্তনশীলতা তত্ত্ব প্রয়োগ করতে চাই।

দুটি 1s অরবিটাল u_A এবং u_B এর জন্য তরঙ্গ অপেক্ষক যথাক্রমে ψ_A এবং ψ_B ধরে পরিবর্তনশীল অপেক্ষক পাওয়া যায়,

$$\psi = C_1\psi_A + C_2\psi_B \qquad (৭.৩৫)$$

এখানে $C = \int \phi^* \psi \, d\tau$ এবং ϕ হলো সঙ্গতকৃত ও অর্থোগোনাল অপেক্ষক। সমীকরণ (৭.৩৫) সঠিক তরঙ্গ অপেক্ষকের MO – LACO অ্যাপ্রক্সিমেশন। পরিবর্তনশীল তত্ত্ব থেকে

$$E = \int \psi^* H \psi \, d\tau \Big/ \int \psi^* \psi \, d\tau \qquad (৭.৩৬)$$

যেখানে

$$H = \frac{h^2}{8\pi^2 me}\nabla^2 + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r_{AB}} - \frac{1}{r_A} - \frac{1}{r_B}\right) \qquad (৭.৩৭)$$

এখন নিচের সমীকরণগুলো প্রবর্তন করা যাক ঃ

$$H_{AA} = H_{BB} = \int \psi_A^* \, H\psi_A \, d\tau = \int \psi_B^* \, H\psi_B \, d\tau \qquad (৭.৩৮)$$

$$H_{AB} = H_{BA} = \int \psi_A^* \; H\psi_B \, d\tau = \int \psi_B^* \; H\psi_A \, d\tau$$

এবং $$S = \int \psi_A^* \; \psi_B^* \, d\tau$$

S-কে **অধিক্রম সমাকলক** (overlap integral) বলে।

সমীকরণ (৭.৩৫) ও (৭.৩৬) থেকে

$$E = \frac{C_1^2 H_{AA} + 2C_1C_2H_{AB} + C_2^2 H_{BB}}{C_1^2 + 2C_1C_2S + C_2^2} \qquad (৭.৩৯)$$

C_1 এবং C_2 এর সাপেক্ষে শক্তি কমানোর জন্য এসব সহগের প্রেক্ষিতে E এর আংশিক ব্যবকলন শূন্য ধরে

$$\frac{\partial E}{\partial C_1} = 0 = C_1 (H_{AA} - E) + C_2 (H_{AB} - SE) \qquad (৭.৪০)$$

এবং $$\frac{\partial E}{\partial C_2} = 0 = C_1 (H_{BB} - E) + C_2 (H_{AB} - SE)$$

এরা যুগপৎভাবে সমরৈখিক সমসত্ত্ব সমীকরণ (linear homogeneous equation)। Nontrivial সমাধানের জন্য উক্ত সমীকরণগুলোর সহগের নির্ণায়ক (determinant) বিলুপ্ত করতে হবে। অর্থাৎ

$$\begin{vmatrix} H_{AA} - E & H_{AB} - SE \\ H_{AB} - SE & H_{AA} - E \end{vmatrix} = 0 \qquad (৭.৪১)$$

সাধারণভাবে N যুগপৎ সমীকরণ হলো E এর n-তম ডিগ্রি সমীকরণ। এ জাতীয় সমীকরণকে **সেকুলার সমীকরণ** (secular equation) বলে। সমীকরণ (৭.৪১) এর সমাধান হবে।

$$E_S = \frac{H_{AA} + H_{AB}}{1 + S} \quad \text{এবং} \quad E_A = \frac{H_{AA} - H_{AB}}{1 - S} \qquad (৭.৪২)$$

সুতরাং অনুরূপ আইগেন অপেক্ষকগুলো হবে

$$\left.\begin{aligned}\psi_S &= \frac{1}{\sqrt{2+2S}}(\psi_A+\psi_B)\\ \psi_A &= \frac{1}{\sqrt{2-2S}}(\psi_A-\psi_B)\end{aligned}\right| \qquad (৭.৪৩)$$

সমীকরণ (৭.৪২) থেকে শক্তি হিসাব করতে আইগেন অপেক্ষক

$\psi = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a}$ ব্যবহার করা হয়।

প্রশ্নাবলি

৭.১। একাধিক ইলেক্ট্রন বিশিষ্ট সিস্টেমের শ্রডিঙ্গার সমীকরণ সমাধান করার জন্য যে সন্নিহিত পদ্ধতিগুলো ব্যবহার করা হয় তা উল্লেখ কর এবং তাদের যে কোনো একটি বিস্তারিতভাবে আলোচনা কর।

৭.২। অস্থিরতা তত্ত্ব কি ? বহু-ইলেক্ট্রনঘটিত সিস্টেমের শ্রডিঙ্গার সমীকরণ সমাধান করবার জন্য কিভাবে তা ব্যবহার করা হয় ?

৭.৩। পরিবর্তনশীলতা তত্ত্ব কাকে বলে ? জটিল সিস্টেমের শ্রডিঙ্গার সমীকরণ সমাধান করবার ক্ষেত্রে এ তত্ত্ব কিভাবে ব্যবহৃত হয় ?

৭.৪। হাইড্রোজেন অণু আয়নের স্থৈতিক শক্তির সমীকরণ লিখ। এর শ্রডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণের রূপ কেমন হবে ?

৭.৫। বর্ণ-ওপেনহাইমার অ্যাপ্রক্সিমেশন কি ?

৭.৬। হাইড্রোজেন অণু আয়নের ক্ষেত্রে পরিবর্তনশীল তত্ত্ব প্রয়োগ করে তার মোট শক্তি এবং আইগেন অপেক্ষক নির্ণয় কর।

৭.৭। টীকা লিখ :

(ক) অস্থিরতা তত্ত্ব

(খ) পরিবর্তনশীলতা তত্ত্ব

(গ) হাইড্রোজেন অণু আয়ন

(ঘ) বর্ণ-ওপেনহাইমার অ্যাপ্রক্সিমেশন।

পরিশিষ্ট

১। আন্তর্জাতিক পদ্ধতির (SI) এককে কতিপয় ধ্রুবক।

রাশি	প্রতীক	SI এককে ধ্রুবকের মান
আলোর গতি	c	$2.997925 \times 10^8 ms^{-1}$
ইলেক্ট্রনের চার্জ	e	$1.60219 \times 10^{-19} C$
প্ল্যাঙ্ক ধ্রুবক	h	$6.627 \times 10^{-34} Js$
অ্যাভোগাড্রো সংখ্যা	N	6.023×10^{23} mol^{-1}
গ্যাস ধ্রুবক	R	8.314 JK^{-1} mol^{-1}
বোলৎজম্যান ধ্রুবক	k	$1.38066 \times 10^{-23} JK^{-1}$
রিডবার্গ ধ্রুবক	$R\alpha$	$1.09737 \times 10^7 m^{-1}$
নিউক্লিয়ার ম্যাগনেটন	μN	$5.05082 \times 10^{-27} J\,T^{-1}$
বোর ম্যাগনেটন	μ_B	$9.27408 \times 10^{-24} J\,T^{-1}$
ইলেক্ট্রনের ভর	m_e	$9.10953 \times 10^{-31} kg$
প্রোটনের ভর	m_p	$1.67265 \times 10^{-27} kg$
নিউট্রনের ভর	m_n	$1.67495 \times 10^{-27} kg$

২। আন্তর্জাতিক এককের উৎপাদক।

উৎপাদক	নাম	সংকেত
10^{-12}	পিকো (pico)	p
10^{-9}	ন্যানো (nano)	n
10^{-6}	মাইক্রো (micro)	μ
10^{-3}	মিলি (mili))	m
10^{-2}	সেন্টি (centi)	c
10^3	কিলো (kilo)	k
10^6	মেগা (mega)	M
10^9	গিগা (giga)	G
10^{12}	টেরা (tera)	T

সহায়ক গ্রন্থপঞ্জি

1. *Introduction to quantum mechanics* : Chalmers W. Sherwin
2. *Quantum Chemistry* : Henry Eyring, John Walter and G.E. Kimball
3. *Theoretical Chemistry* : Samuel Glasstone
4. *The Wave Mechanics of atoms, molecules, and ions* : C.J.H. Schutte
5. *Basic Quantum Mechanics* : Klaus ziock
6. *Perspective of Modern Physics* : Arthur Beiser
7. *Quantum Mechanics* : Gupta. Kumar and Sharma
8. *Wave Mechanics and Valency* : J.W. Linnette
9. *Physical Chemistry* : P.W. Atkins

পরিভাষা

অখণ্ড সংখ্যা integer
অক্ষ axix
অঞ্চল region, location
অতিবেগুনি ultraviolet
অনিশ্চয়তা নীতি uncertainty principle
অনির্ভরশীল independent
অপেক্ষক function
অবস্থা state
অবস্থান position
অবিচ্ছিন্ন continuous
অভিক্ষেপ projection
অসীম infinite
অস্থিরতা perturbation

আকার size
আকৃতি shape
আড় transverse
আদর্শ ideal
আপতিত incident
আপেক্ষিকতাবাদ theory of relativity
আবর্তক rotator
আবর্তন rotation
আবর্তনীয় trajectory
আবক্রপথ trajectory
আলোক-তড়িৎ photoelectric
আলোক সুগ্রাহী photosensitive
আংশিক partial

উত্তেজিত excited
উপ-অণুবীক্ষণিক sub-microscopic
উপ-পারমাণবিক sub-atomic
উপাদান component
উপবৃত্ত ellipse

একক unity, unit
একতালীয় harmonic
একবর্ণী monochromatic
একমাত্রিক one-dimensional

কক্ষপথ orbit
কণা, কণিকা particile
কম্পন vibration
কম্পনীয় vibrational
কাক্ষিক orbital
কাজ অপেক্ষক work function
কোয়াণ্টায়িত quantized
কোয়াণ্টায়ন quantization
কৌণিক angular

খমধ্য কোণ zenith angle

গঠন structure
গতি motion
গতিশক্তি kinetic energy
গতীয় kinetic
গোলকাকার spherical

ঘটনা phenomenon
ঘনক cube
ঘনকাকার cubic
ঘাত power

তত্ত্ব theory
তরঙ্গ wave
ত্বরণ acceleration
তরঙ্গদৈর্ঘ্য wavelength
তড়িৎ ক্ষেত্র electric field
তড়িৎ চুম্বকীয় electromagnetic
তীক্ষ্ম sharp
তীব্রতা intensity
ত্রিমাত্রিক three dimensional
স্থানান্তর translational
স্থায়িত্ব stability

স্থির	stationary
স্থূল	macroscopic
স্থৈতিক শক্তি	potential energy
দিগবলয় কোণ	azimuthal angle
দোলক	oscillatory
দোলন	ocillation
দৃঢ়	rigid
ধারাবাহিকতাহীন	discrete
পদ	term
পরিবর্তনশীল	variation
পরিবেষ্টনী	enclosure
পরিমাত্রা	parameter
পরীক্ষামূলক	experimental
পূর্বানুমান	predict
প্রস্থচ্ছেদ	cross section
বণ্টন	distribution
বল	force
বল ধ্রুবক	force constant
বলবিদ্যা	mechanics
বর্ণালী	spectra
বহুপদী	multiplet
বর্তনী	circuit
বাস্তব	real
বাধা	barrier
বিকিরক	radiatory
বিকিরণ	radiation
বিচ্ছুরণ	scattering
বেষ্টনী	sboundary
ভরবেগ	momentum
মতবাদ	theory
মাত্রা	dimension
মৌলিক	fundamental
যুগ্মালায়ন	coupling
লম্বিক, অনুদৈর্ঘ্য	longitudinal
শক্তি	energy
শর্ত	condition
শোষণ	absorption
শ্রেণী	series
সনাতন	classic
সনাতনী	classical
সমগোত্র	analogous
সমাকলনযোগ্য	integrable
সমবিভাগ	equipartition
সমশক্তি সম্পন্নতা	degeneracy
সমীকরণ	euqation
সসীম	finite
সঙ্গতকরণ	normalize
সংগ্রাহক	collector
সংঘর্ষ	collision
সংযোগ	combination
সংরক্ষণ	conservation
সম্ভাব্যতা	probability
সুগ্রাহী	sensitive
সুষম	uniform, symmetrical
সূত্রপাতকারী	threshold
স্বাতন্ত্র্য-মাত্রা	degree of freedom
স্বীকার্য	postulate