কোয়ান্টাম রসায়ন

হুমায়ূন আহমেদ

ভূমিকা

ঢাকা বিশ্ববিদ্যালয়ের স্নাতক এবং স্নাতকোত্তর শ্রেণীতে কোয়ান্টাম বলবিজ্ঞান পড়ানোর দায়িত্ব আমাকে মাঝে মাঝেই নিতে হয়। ভৌত বিজ্ঞানের অন্যান্য শাখার সঙ্গে এই শাখার খানিকটা প্রভেদ আছে। কোয়ান্টাম বলবিদ্যা ভৌত বিজ্ঞানের আর সব শাখার মত পুরোপুরি ব্যাখ্যা ও বর্ণনার আয়ত্তে নেই। বিষয়টি বহুলাংশে বিমূর্ত বা এবস্ট্রাক্ট ধরনের। কোঁন এ্যাবস্ট্র্যাক্ট বিষয় সম্পর্কে কাল্পনিক চিত্র তৈরি করা সম্ভব হয় না। আর সম্ভব হলেও খুব কাজের হয় না। সে কারণেই কোয়ান্টাম বলবিজ্ঞানের ছাত্র-শিক্ষক সবাই খানিকটা হতাশায় ভুগেন। আমার ব্যক্তিগত হতাশার কারণেই আমি কোয়ান্টাম রসায়নে একটি বই বাংলা ভাষায় লেখার কথা ভাবতে শুরু করি। সেও প্রায় দশ বছর আগের কথা। ভাবা এক কথা মূল গ্রন্থ রচনায় হাত দেয়া অন্য কথা। তার উপর আছে পরিভাষার সমস্যা। বাংলা একাডেমী পরিভাষা আকর গ্রন্থ তৈরি করেছে। কোয়ান্টাম রসায়ন গ্রন্থ রচনায় আমি মূলত বাংলা একাডেমী প্রকাশিত আকর গ্রন্থের সাহায্য নিয়েছি। কিছু কিছু পরিভাষা আমার কাছে মোটেই গ্রহণযোগ্য মনে হয়নি। যেমন, Singular, এর পরিভাষা হল 'কূটিল'। কূটিল বাংলাভাষার একটি অতি পরিচিত শব্দ এর অর্থের সঙ্গে Singular শব্দের অর্থের কোন মিল আছে বলে মনে হয় না। এই গ্রন্থ রচনায় আমি নিজের কিছু পরিভাষা ব্যবহার করেছি উদাহরণ দিচ্ছি variable — পরিবর্তনীয়। বাংলা একাডেমী পরিভাষায় variable হচ্ছে চলক। আমার কাছে মনে হয়েছে চলক variable শব্দটির মূল ভাব প্রকাশ করছে না। Oscillator এর বাংলা করেছি 'কম্পক', যা কাঁপছে। বাংলা একাডেমীর পরিভাষায় Oscillator হল দোলক। দোলক ব্যবহারে আমার আপত্তির কারণ হল দোলক বলা মাত্রই আমাদের মনে আঁসে পেণ্ডুলামের দোলন। এই গ্রন্থ পাঠে পরিভাষা তেমন সমস্যা সৃষ্টি করবে না, কারণ যেখানেই পরিভাষা ব্যবহার করেছি সেখানেই মূল ইংরেজী শব্দ দেয়া আছে।

বইটি লেখার সময় আমি বেশ কিছু গ্রন্থের সাহায্য নিয়েছি। মাঝে মাঝে এমনও হয়েছে ঐসব গ্রন্থের কিছু কিছু নির্বাচিত অংশের আক্ষরিক অনুবাদ করা হয়েছে। ঐসব গ্রন্থের লেখকদের কাছে ঋণ স্বীকার করছি। ব্যক্তিগত গবেষণা লব্ধ জ্ঞান ব্যবহার করেই কেবল বিজ্ঞানের কোন বিষয়ে পুরোপুরি মৌলিক গ্রন্থ রচনা করা সম্ভব। আমার সেই সুযোগ নেই। আমি যা করেছি তা হল কোয়ান্টাম রসায়ন বিষয়ে তথ্য সংগ্রহ করে সহজভাবে ছাত্র-ছাত্রীদের জন্যে সাজানোর চেষ্টা করেছি। কিছু কিছু ক্ষেত্রে অতি সরলীকরণ করা হয়েছে। কোয়ান্টাম বলবিদ্যা একটি জটিল বিষয়। অতি সরলীকরণ খুব ভাল জিনিস নয়। অতি সরলীকরণ বিষয়বস্তু সম্পর্কে ভ্রান্ত ধারণা দিতে পারে।

যাদের জন্যে এই বইটি লেখা হয়েছে তাদের কোন উপকারে এলে — আমার শ্রম সার্থক হয়েছে বলে মনে করব।

বিনীত

হুমায়ূন আহমেদ

সূচিপত্র

কোয়ান্টাম বলবিদ্যা

সূচনা পর্ব

পদার্থবিদ্যার ইতিহাসে ১৯০০ খ্রীষ্টাব্দের ১৪ই ডিসেম্বর, একটি রোমাঞ্চকর দিন। ঐ দিনে প্রফেসর ম্যাক্স প্লাঙ্ক জার্মান ফিজিক্যাল সোসাইটির সভায় সাদামাটা ভঙ্গিতে বলে ফেললেন — শক্তির বিকিরণ নিরবিচ্ছিন্ন নয়। শক্তির বিকিরণ প্রক্রিয়া বিচ্ছিন্ন, কোয়ান্টা বা 'শক্তি আঁটি'তে বিভক্ত। ম্যাক্স প্লাঙ্কের বক্তৃতা শ্রোতাদের ধাঁধায় ফেলে দিল। অস্পষ্টভাবে হলেও তাঁরা বুঝতে পারলেন — পদার্থ বিদ্যায় বড় ধরনের কিছু ঘটতে যাচ্ছে। সম্ভবত আঘাত আসছে চিরায়ত পদার্থবিদ্যার সুরক্ষিত দূর্গে।

এতদিন পর্যন্ত পদার্থবিদ্যা শক্তিকে নিরবিচ্ছিন্ন হিসেবেই দেখে আসছিল। শক্তি সম্পর্কিত এই ধারণা বদলাবার মত কোন কারণ ঘটেনি। পদার্থবিজ্ঞানের প্রধান দু'টি শাখা নিউটনীয় বলবিজ্ঞান (চিরায়ত বলবিজ্ঞান, Classical mechanics) এবং ম্যাক্সওয়েলীয় তড়িৎ চুম্বকীয় তত্ত্ব, আমাদের চারপাশের দৃশ্যমান জগৎকে সুন্দর ব্যাখ্যা করে যাচ্ছে। গ্রহ, উপগ্রহের গতি থেকে শুরু করে — দোলকের গতি, শব্দ তরঙ্গ, গ্যাসের গতিতত্ত্ব, আধানযুক্ত বস্তুর গতি সবই সুন্দরভাবে এবং নিখুঁতভাবে ব্যাখ্যা করছে চিরায়ত বলবিজ্ঞান। অন্যদিকে, তড়িৎ চুম্বকীয় ঘটনা, আলোর ধর্ম, তরঙ্গ তত্ত্ব চমৎকারভাবেই ব্যাখ্যা করে যাচ্ছে ম্যাক্সওয়েলীয় তড়িৎ চুম্বকীয় তরঙ্গ তত্ত্ব। এই যদি অবস্থা হয় তাহলে শক্তি সম্পর্কিত নতুন ধারণার হাত ধরে কোয়ান্টাম বলবিদ্যার আবির্ভাবের প্রয়োজন কি ছিল? কি এমন ঘটল যে আমাদের এতদিনকার সনাতন বলবিদ্যার সুরক্ষিত আশ্রয় ছেড়ে পা বাড়াতে হল — কোয়ান্টাম বলবিদ্যার দিকে? পদার্থবিদ্যার সেই রোমাঞ্চকর ইতিহাস দিয়েই কোয়ান্টাম রসায়ন গ্রন্থের শুরু করা যাক।

পদার্থের গঠন সম্পর্কে বিজ্ঞানীদের ধারণা খানিকটা স্পষ্ট হতে শুরু করল উনিশ শতকের শেষ দিকে। তাঁরা ইলেকট্রন সম্পর্কে জানলেন, ইলেকট্রনের ঋণাত্মক ধর্ম জানা গেল। প্রোটন আবিষ্কৃত হল। জানা গেল প্রোটনও বৈদ্যুতিক আধানযুক্ত। এই বৈদ্যুতিক আধানের মান ইলেকট্রনের আধানের মানের সমান তবে তা ধনাত্মক। প্রোটন যে ইলেকট্রনের চেয়ে ১৮৩৬ গুণ ভারী এই তথ্যও অজানা রইল না।।

১৯০৯ সনে রাদারফোর্ড (Rutherford), গাইগার (Geiger) এবং মার্সডেন (Marsden) পাতলা ধাতুর ভেতর দিয়ে আলফা কণা পাঠানোর বিখ্যাত পরীক্ষা শুরু করলেন। পরমাণুর গঠন সম্পর্কে মানুষের ধারণা আরো স্পষ্ট হতে থাকল। জানা গেল পরমাণুর কেন্দ্রীন বা নিউক্লিয়াসে অবস্থান করে আধানশূন্য বস্তুকণা নিউট্রন, এবং ধনাত্মক আধানের বাহন প্রোটন। পরমাণুর কেন্দ্রীন হল পরমাণুর অতি ক্ষুদ্র একটি অংশ যার ব্যাসার্ধ $১০^{-১৩}$ থেকে $১০^{-১২}$ সেন্টিমিটারের কাছাকাছি, যেখানে পরমাণুর ব্যাসার্ধ $১০^{-৮}$ সেন্টিমিটারের মত। রাদারফোর্ড পরমাণুর গঠন ব্যাখ্যা করার চেষ্টা করলেন। তিনি একটি মডেল দাঁড়া করলেন — রাদারফোর্ডের গ্রহগত নিদর্শ বা প্লেনেটারী মডেল। এই মডেলের সঙ্গে সৌর মণ্ডলের খুব মিল। সৌর মণ্ডলে গ্রহগুলি ঘুরছে সূর্যের চারদিকে। তাদের আছে নির্দিষ্ট যাত্রাপথ। পরমাণুতেও তাই, ইলেকট্রন নির্দিষ্ট পথে বা 'কাক্ষিকে' (orbit) ঘুরছে কেন্দ্রীনের চারদিকে।

আপাতদৃষ্টিতে রাদারফোর্ডের গ্রহগত নিদর্শ বেশ পরিচ্ছন্ন এবং মূল বিষয় ব্যাখ্যায় উপযোগী মনে হলেও এতে বড় ধরণের একটি ত্রুটি রয়ে গেল। সনাতন তড়িৎ চুম্বকীয় সূত্র (Classical electromagnetic theory) অনুযায়ী আধানযুক্ত ঘূর্ণায়মান বস্তু শক্তি বিকিরণ করতে থাকবে। ক্রমেই তার শক্তি কমতে থাকবে, তার গতিপথের ব্যাসার্ধ কমে আসবে, সে প্যাঁচানো পথে (Spiral way) যেতে যেতে কেন্দ্রীনের গায়ে পড়ে যাবে। রাদারফোর্ডের গ্রহগত নিদর্শ এই কারণেই ত্রুটিযুক্ত, কারণ বাস্তবের পরমাণু এমন নয়। বাস্তবের পরমাণু ইলেকট্রন গায়ে এসে পড়ে না।

এই সমস্যা সমাধানের উপায় বের করলেন বিজ্ঞানী নীলস বোর (Neils Bohr, 1913), তিনি শক্তি সম্পর্কিত এক নতুন ধারণা পরমাণুর ক্ষেত্রে প্রয়োগ করলেন। শক্তি সম্পর্কিত তাঁর এই ধারণা মৌলিক নয়, তিনি ধার করেছেন বিজ্ঞানী প্ল্যাংকের (Planck, 1900) কাছ থেকে। প্ল্যাংক বলছেন শক্তির বিকিরণ নিরবিচ্ছিন্ন নয়। শক্তির বিকিরণ হয় বিচ্ছিন্ন প্রক্রিয়ায়। শক্তির বিচ্ছিন্ন অংশগুলিকে তিনি বললেন 'কোয়ান্টা'। ধরা যাক একটি উত্তপ্ত বস্তু শক্তি বিকিরণ করছে। প্ল্যাংকের মতে এই বিকিরণ হবে কোয়ন্টায় বা কোয়ান্টার পূর্ণ গুণিতকে। কোয়ন্টার শক্তি (E)এর মান হবে,

$$E = h\nu \qquad (১.১)$$

এখানে ν হচ্ছে বিকিরণের কম্পনাংক এবং h হচ্ছে প্ল্যাংক ধ্রুবক, যার মান ৬.৬২৬১৭×১০^{-৩৪} জুল সেকেণ্ড। '$h\nu$' হল কোয়ান্টা বা শক্তি আঁটি।

প্ল্যাংকের ধারণা ব্যবহার করে নীলস বোর বললেন, হাইড্রোজেন পরমাণুর ঘূর্ণায়মান ইলেকট্রনের শক্তি কোয়ান্টাকৃত (quantized)। এর ফলে ইলেকট্রন শুধু কিছু নির্ধারিত চক্রাকার পথে শক্তির কোন পরিবর্তন না করেই ঘুরবে। ইলেকট্রন যখন এক নির্দিষ্ট পথ ছেড়ে পরবর্তী একটিতে যাবে তখন যে শক্তি সে গ্রহণ করবে বা ছেড়ে দেবে তার পরিমাণ হবে,

$$\Delta E = h\nu \qquad (১.২)$$

নীলস বোর নিউটনীয় বলবিদ্যা ব্যবহার করে হাইড্রোজেন পরমাণুর বিভিন্ন শক্তিতল সম্পর্কিত সমীকরণ দাঁড়া করালেন। সমীকরণ (১.২) ব্যবহার করে তিনি হাইড্রোজেন বর্ণালীর ব্যাখ্যাও করতে পারলেন। কিন্তু হিলিয়াম বর্ণালীর ব্যাখ্যা দেয়া তাঁর পক্ষে সম্ভব হল না। তাছাড়া তাঁর মতবাদ রসায়নিক বন্ধন কি করে হয় তাও বলতে পারল না। বোরের মূল সমস্যা হল — তিনি ইলেকট্রনের গতি ব্যাখ্যায় নিউটনীয় বলবিদ্যা প্রয়োগ করেছিলেন।

দ্য ব্রগলি (de Broglie, 1923) তখন সবাইকে অবাক করে দিয়ে বললেন, ইলেকট্রনের তরঙ্গ ধর্মের সম্ভাবনার কথা। তিনি বললেন, একটি ইলেকট্রন যার ভর m এবং গতিবেগ v, তার তরঙ্গ দৈর্ঘ্য 'λ' হবে,

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p} \qquad (১.৩)$$

যেখানে p হচ্ছে ভরবেগ। বিজ্ঞানী ডেভিসন (Devission, 1929) এবং গারমার (Germer, 1927) দ্য ব্রগলির মতের সমর্থন পেলেন ল্যাবোরেটরিতে। তাঁরা দেখালেন ধাতু থেকে বিচ্ছুরিত ইলেকট্রন কণা তরঙ্গের অপবর্তন ধর্ম (Diffraction) দেখায়। যদিও অপবর্তন কোন বস্তু কণার দেখানোর কথা না। একই সঙ্গে বস্তুর কণা এবং তরঙ্গ ধর্মের বিচিত্র সহবস্থানের কথা বলার জন্যেই প্রয়োজন হয়ে পড়েছিল কোয়ান্টাম বলবিদ্যার। ব্যাপারটা বেশ ধোঁয়াটে। কারণ কণা হল সীমাবদ্ধ, তরঙ্গ সীমাবদ্ধ নয়। বস্তুর একই সঙ্গে সীমাবদ্ধ ও সীমামুক্ত ধর্ম বেশ গোলমেলে। অবিশ্য আমাদের প্রাত্যহিক জীবনে চারপাশের দৃশ্যমান জগতের ব্যাখ্যায় এর তেমন প্রয়োগ নেই। বস্তুর তরঙ্গ ধর্ম গুরুত্বপূর্ণ হয়ে পড়ে পরমাণু জগতে, যে জগৎ দৃশ্যমান জগৎ নয়। আমাদের চারপাশের দৃশ্যমান জগৎ ব্যাখ্যার জন্যে সনাতন বলবিদ্যাই যথেষ্ট।

সনাতন বলবিদ্যা কোন রকম ভনিতা ছাড়াই শক্তির নিরবিচ্ছিন্নতার কথা বলে। শক্তিসম্পর্কিত এই ধারণা মূলত এসেছে গ্যাসের গতিতত্ত্ব (১৭৩৮) থেকে। গতিতত্ত্ব বলছে, এক মৌল গ্যাসের গতিশক্তি হল —

$$K.E = {}^{3}/_{2}\ PV = {}^{3}/_{2}\ RT \qquad (১.৪)$$

গ্যাস অণুর অপসরণ গতি বিষয়ক স্বাধীন ভেদক সংখ্যা (Translational degrees of freedom) হল তিন। শক্তির সমবন্টন সূত্র অনুযায়ী গতি শক্তি এই তিন স্বাধীন ভেদক সংখ্যায় সমভাবে বন্টিত হবে। প্রতি স্বাধীন ভেদক সংখ্যায় তার পরিমাণ হবে ;

$$\frac{1}{3}\ KE = \frac{{}^{3}/_{2}\ RT}{3} = \frac{1}{2}RT \qquad (১.৫)$$

যেহেতু গ্যাসের অণুগুলির যেকোন তাপমাত্রায় থাকা সম্ভব সেহেতু $\frac{1}{2}$ RT'র যেকোন মান হতে পারে অর্থাৎ শক্তি নিরবিচ্ছিন্ন।

স্বীকার করতেই হবে, গ্যাসের গতিতত্ত্ব থেকে পাওয়া শক্তির এই ধারণা একটি বলিষ্ট ধারণা, যা বস্তুজগতের অনেক কিছুই চমৎকার ব্যাখ্যা করে। উনিশ শতকের শেষ ভাগ পর্যন্ত শক্তি সম্পর্কিত সনাতন ধারণার কোন পরিবর্তনের প্রয়োজন হয় নি। বর্তমান শতাব্দীর শুরু থেকেই সমস্যা দেখা দিতে শুরু করল। চিরায়ত বলবিজ্ঞান বা ম্যাক্সওয়েলীয় তড়িৎ চম্বুকীয় তত্ত্ব দিয়ে কঠিন বস্তুর আপেক্ষিক তাপ, কৃষ্ণবস্তুর বিকিরণ, হাইড্রোজেন বর্ণালী, ফটো তড়িৎ ক্রিয়া, কম্পটন ক্রিয়া ব্যাখ্যা করা গেল না। সনাতন বলবিদ্যার সুরক্ষিত দূর্গ ভেঙ্গে পড়ে গেল। শক্তি নিরবচ্ছিন্ন এই সনাতন ধারণার পরিবর্তন জরুরী হয়ে পড়ল। কেন পড়ল, তা এক এক করে দেখা যাক।

১. কঠিন বস্তুর আপেক্ষিক তাপ

আমরা জানি কঠিন বস্তুর আপেক্ষিক তাপ Cv হল,

$$Cv = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_v \qquad (১.৬)$$

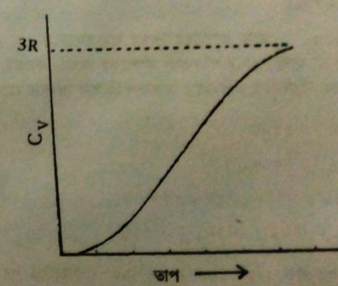
মনে করা যাক কঠিন বস্তুটিতে N সংখ্যক অণু বিভিন্ন ল্যাটিস বিন্দুতে আছে। এদের আছে কম্পন শক্তি (Vibrational energy)। এই সব অণু বা কম্পকের স্বাধীন ভেদক সংখ্যা হল দুই। অণুগুলি কাঁপছে বলেই এদের কম্পক বলা হচ্ছে। শক্তির সনাতন ধারণা বলছে প্রতিটি কম্পকের শক্তি হবে 3kT। এভাগেড্রো সংখ্যক (N) কম্পকের মোট শক্তি হবে ;

$$E = 3NkT = 3RT \qquad (১.৭)$$

কাজেই Cv'র মান হবে,

$$Cv = \left(\frac{\partial 3RT}{\partial T}\right) = 3R \qquad (১.৮)$$

সমীকরণ (১.৮) বলছে Cv তাপমাত্রার সঙ্গে সম্পর্কিত নয়। Cv হল ধ্রুবক যার মান যে কোন তাপমাত্রাতেই 3R এর সমান। পরীক্ষাগারে পাওয়া ফলাফল এই সিদ্ধান্ত সমর্থন করল না। বিভিন্ন তাপমাত্রায় পাওয়া 'হীরকে'র আপেক্ষিক তাপমাত্রার একটি লেখচিত্র নিচে দেয়া হল (চিত্র ১.১), লেখচিত্রে পরিষ্কার দেখা যাচ্ছে যে, 'Cv' তাপমাত্রার সঙ্গে সম্পর্কশূন্য নয়। এক হাজার ডিগ্রী সেন্টিগ্রেড তাপমাত্রার উপরে Cv'র মান '3R' হয় ঠিকই, কিন্তু ১০০০° ডিগ্রী সেলসিয়াসের নীচে তাপমাত্রা যতই কমতে থাকে Cv'র মানও কমতে থাকে।



চিত্র ১.১ : তাপমাত্রার সঙ্গে আপেক্ষিক তাপের পরিবর্তন।

শক্তি সম্পর্কিত সনাতন ধারণা এই সমস্যার সমাধান দিতে পারল না। ম্যাক্স প্ল্যাংক এই কারণেই শক্তি সম্পর্কিত নতুন ধারণা নিয়ে এলেন। তাঁর ধারণা কিছু স্বীকার্যের উপর প্রতিষ্ঠিত। স্বীকার্যগুলি হচ্ছে ;

(ক) কম্পকগুলির শক্তি নিরবিচ্ছিন্ন নয়। শক্তি বিচ্ছিন্ন, বিভিন্ন শক্তি তলে (energy levels) বিভক্ত, যেমন e_0 e_1, e_2, e_3 . . . . . .

(খ) কম্পকের কম্পণাংক (Frequency) ν হলে তার শক্তি $\in_1$ হবে,

$$\in_1 = h\nu_1$$

(গ) শক্তি কোয়ান্টা বা কোয়ান্টার পূর্ণ গুণিতকের বাইরে কখনো হবে না।

শক্তি সম্পর্কিত নতুন ধারণার উপর ভিত্তি করে প্ল্যাংক N সংখ্যক কম্পকের মোট শক্তি হিসেব করলেন। সব কম্পক যে একই শক্তিতলে থাকবে তা নয়। তারা বিভিন্ন শক্তিতলে থাকবে। তিনি বোল্টজম্যানে (Boltzmann) এর বন্টন সূত্র থেকে প্রতিটি শক্তিতলে কম্পকের সংখ্যা নির্ধারণ করলেন।

$$n_1 = n_o e^{-\in_1/kT}$$
$$n_2 = n_o e^{-\in_2/kT}$$
$$n_3 = n_o e^{-\in_3/kT}$$
$$\ldots\ldots\ldots\ldots$$
$$n_j = n_o e^{-\in_j/kT} \qquad (১.৯)$$

এখানে n_1, n_2, n_3. . . . হচ্ছে কম্পকের সংখ্যা যারা যথাক্রমে $\in_1$, $\in_2$, $\in_3$. . . শক্তিতলে অবস্থিত। n_o হচ্ছে সর্বনিম্ন শক্তিতলে কম্পকের সংখ্যা। কাজেই এভ্যাগেড্রো সংখ্যক (N) কম্পককে নিম্নলিখিত রাশিমালার যোগফল হিসেবে দেখানো যেতে পারে।

$$N = n_o + n_1 + n_2 + n_3 \ldots\ldots$$
$$= n_o + n_{o}e^{-\in_1/kT} + n_{o}e^{-\in_2/kT} \ldots\ldots$$
$$= n_o + (1 + e^{-\in_1/kT} + e^{-\in_2/kT} + e^{-\in_3/kT} \ldots\ldots\ldots)$$
$$= n_o (1 + e^{-h\nu/kT} + e^{-2h\nu/kT} + e^{-3h\nu/kT} + \ldots\ldots\ldots$$

যেহেতু $\in_1 = h\nu$ এবং $\in_2 = 2h\nu$, $\in_3 = 3h\nu$ (কোয়ান্টার পূর্ণ গুণিতক) কাজেই N হল,

$$N = n_o \sum_{x=0}^{\alpha} e^{-xh\nu/kT} \qquad (১.১০)$$

কম্পকের মোটশক্তি E হল,

$$E = \in_0 n_0 + \in_1 n_1 + \in_2 n_2 \ldots\ldots\ldots$$

$$= n_0 h\nu \sum_{x=0}^{\alpha} xe^{-xh\nu/kT} \qquad (১.১১)$$

কম্পকের গড় শক্তি $\bar{\in} = \frac{E}{N} = \frac{h\nu \sum_{x=0}^{\alpha} x(e^{-xh\nu/kT})}{\sum_{x=0}^{\alpha} (e^{-xh\nu/kT})}$

$$= \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \qquad (১.১২)$$

এই হল কোয়ান্টাম বলবিদ্যায় কম্পকের গড় শক্তির বিবরণ।

যখন $^{h\nu}/_{kT} << 1$

তখন $e^{h\nu/kT} - 1 = \frac{h\nu}{kT}$ (১.১৩)

সমীকরণ (১.১২) তে (১.১৩) র মান বসিয়ে আমরা পাই ;

$$E = \frac{h\nu}{h\nu/kT} = kT \qquad (১.১৪)$$

যা আর কিছুই না সনাতন বলবিদ্যায় গড় শক্তির বিবরণ। প্ল্যাংকের শক্তি সম্পর্কিত নতুন ব্যাখ্যা ল্যাবেরেটরীতে পাওয়া পর্যবেক্ষণের সঙ্গে সামঞ্জস্যপূর্ণ। হীরকের আপেক্ষিক তাপ পরীক্ষায় কি ঘটেছে দেখা যাক। উচ্চ তাপমাত্রায় ($T > 1000$ C) $^{h\nu}/_{kT}$ র মান একের অনেক নিচে নেমে গেছে। কাজেই গড় শক্তি হচ্ছে kT, যা শক্তি সম্পর্কিত সনাতন ব্যাখ্যা। আমরা দেখছি উচ্চ তাপমাত্রায় শক্তি সম্পর্কিত সনাতন ধারণা এবং প্ল্যাংকের নতুন ধারণা মিলেমিশে এক হয়ে যাচ্ছে।

২. হাইড্রোজেন বর্ণালী

হাইড্রোজেন বর্ণালীতে আলোর দৃশ্যমান অংশে যে সব রেখা (Line) দেখা যায় তার সঙ্গে বিজ্ঞানীরা দীর্ঘদিন থেকেই পরিচিত ছিলেন। ১৮৮৬ সনে বিজ্ঞানী জে. জে. বামার (J. J. Balmer) রেখাগুলির কম্পণাংক বের করার জন্য একটি সমীকরণ উদ্ভাবন করলেন। সমীকরণটি হল,

$$\frac{1}{\lambda} = \bar{\nu} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) cm^{-1} \qquad (১.১৫)$$

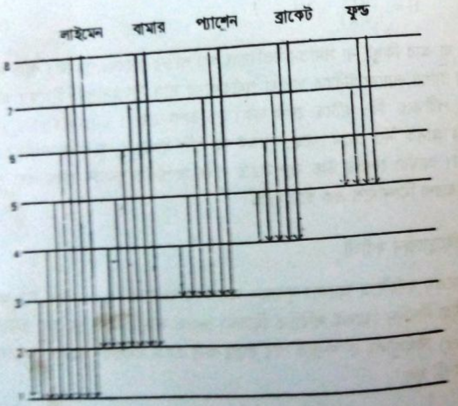
n^2 হচ্ছে যথাক্রমে ৩, ৪, ৫, ...

R হল রাইডবার্গ (Ryderg) ধ্রুবক যার মান 109,677.58 cm^{-1}

পরবর্তী সময়ে হাইড্রোজেন বর্ণালীতে দৃশ্যমান আলোকে আরো কিছু নতুন রেখা দেখা গেল। বিজ্ঞানী রিটজ (Ritz, 1908) একটি সাধারণ সমীকরণ বের করলেন যা সব রেখার কম্পনাকে বের করায় সক্ষম।

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)\ cm^{-1} \qquad (১.১৬)$$

নীচের সারণীতে সারণী, n_1 এবং n_2র মান এবং হাইড্রোজেন বর্ণালীর রেখাগুলির পরিচয় দেয়া হল। রেখাগুলির উৎপত্তির ব্যাখ্যা এখন বেশ সরল হয়ে গেল। লাইমেন রেখাসারি উৎপত্তির কারণ হল ইলেকট্রন গুলির দ্বিতীয়, তৃতীয়, চতুর্থ . . . . . কাক্ষিক থেকে প্রথম কাক্ষিক ($n_1 = 1$) এ আগমন। একইভাবে বামার রেখাসারি ($n_1 = 2$)র উৎপত্তি হচ্ছে ইলেকট্রনের তৃতীয়, চতুর্থ, পঞ্চম . . . . কাক্ষিক থেকে দ্বিতীয় কাক্ষিকে আগমন। পুরো ব্যাপারটি একটি ছবির সাহায্যে দেখানো গেল (চিত্র ১.২)



চিত্র ১.২ : হাইড্রোজেন বর্ণালীতে বর্ণালী রেখার উৎপত্তি

সারণী ১

লাইনের সারি	n_1	n_1	বর্ণালীতে অবস্থান
লাইমেন (Lyman)	১	২, ৩, ৪, ৫	ইউভি (UV)
বামার (Balmer)	২	৩, ৪, ৫, ৬	দৃশ্যমান
প্যাশেন (Paschen)	৩	৪, ৫, ৬, ৭	আইআর (IR)
ব্র্যাকেট (Bracket)	৪	৫, ৬, ৭, ৮	আইআর (IR)
ফুন্ড (Pfund)	৫	৬, ৭, ৮, ৯	আইআর (IR)

সনাতন বলবিদ্যা হাইড্রোজেন বর্ণালী ব্যাখ্যা করতে পারল না। কারণ সনাতন বলবিদ্যা বলে, বর্ণালী হবে নিরবিচ্ছিন্ন, এখানে রেখা থাকবে না।

নীলস বোর তখন কোয়ন্টাম ধারণা ব্যবহার করে হাইড্রোজেন বর্ণালীতে পাওয়া রেখাগুলির ব্যাখ্যা দিলেন। বোর বলেন,

১. ইলেকট্রন কেন্দ্রীনের চারদিকে কিছু বিশেষ বিশেষ শক্তিতলেই ঘুরতে পারে। এই শক্তিতলগুলিতে তাদের প্রবেশাধিকার কাছে।

২ শক্তির বিকিরণ ও শোষণ হয় বিচ্ছিন্নভাবে বা কোয়ান্টায়। ইলেকট্রন যখন উপরের শক্তিতল থেকে (E_2) নীচের শক্তিতলে (E_1) আসে তখনি বাড়তি শক্তি বিকিরণের মাধ্যমে বের হয়ে আসে। সেই শক্তির পরিমাণ,

$$\Delta E = E_2 - E_1 = h\nu$$

একইভাবে নীচের শক্তিতল থেকে উপরের শক্তিতলে যাবার সময় শক্তি শোষিত হয় যার পরিমাণ হল,

$$\Delta E = E_1 - E_2 = h\nu$$

৩. ইলেকট্রনের ঘূর্ণায়মান গতি এমন যে তার কৌণিক ভরবেগ mvr হবে $\frac{h}{2\pi}$ এর পূর্ণ গুনিতক।

$$mvr = n\frac{h}{2\pi} \qquad (১.১৭)$$

এইসব শর্তের কারণে ইলেকট্রনের গতিপথে এক ধরনের নিয়ন্ত্রণ সৃষ্টি হল। এই নিয়ন্ত্রিত ঘূর্ণন হাইড্রোজেন বর্ণালী ব্যাখ্যায় খুব কাজে এল।

ইলেকট্রন প্রোটনের মধ্যের কুলম্বক তড়িৎ আকর্ষণ বল (electrotatic force) এবং কেন্দ্রাভীমুখী বলের (centrifugal force) সমতা থেকে ইলেকট্রন কক্ষপথের ব্যাসার্ধ (r_n) এবং তার শক্তি (E_n) বের করা হল।

$$r_n = \frac{n^2h^2}{4\pi^2me^2} \quad (১.১৮)$$

$$E_n = \frac{2\pi^2me^4}{n^2h^2} \quad (১.১৯)$$

সমীকরণ ১.১৭ এবং ১.১৮ এ n হচ্ছে কোয়ান্টাম সংখ্যা। n যখন 1 তখন

r হয় a_0 যাকে বলা হয় বোর ব্যাসর্ধ।

n_2 থেকে n_1 এ আসার ফলে ইলেকট্রন যে শক্তি বিকিরণ করবে তার পরিমাণ হল

$$\Delta E = h\nu = -\left(\frac{2\pi^2me^2}{n_2^2h^2}\right) - \left(-\frac{2\pi^2me^4}{n_1^2h^2}\right)$$

$$\text{বা } h\nu = \frac{2\pi^2me^4}{h^2}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

$$\nu = \frac{2\pi^2me^4}{h^3}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right)$$

$$\text{যেহেতু } \nu = \frac{c}{\lambda} = c\bar{\nu}$$

$$\bar{\nu} = \frac{2\pi^2me^4}{ch^3}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \quad (১.২০)$$

রিটজ এর সমীকরণ (১.১৫) এবং এই সমীকরণে (১.২০) কোন তফাৎ নেই। দুটি সমীকরণ তুলনা করে রাইডবার্গ ধ্রুবকএর মান পাওয়া যায়।

$$R = \frac{2\pi^2me^4}{ch^3} \quad (১.২১)$$

m, e এবং c-র মান বসিয়ে R ধ্রুবকের মান হয় ১.০৯৬৭৯ × ১০⁵ cm যা ল্যাবরেটরীতে পাওয়া মানের সমান। তাত্ত্বিকভাবে পাওয়া এবং পরীক্ষাগারে পাওয়া R–এর মানের এই আশ্চর্য সমতা কোয়ান্টাম ধারণাকে খুব সুন্দরভাবে সমর্থন করে।

৩. কৃষ্ণ বস্তুর বিকিরণ

উত্তপ্ত বস্তু তাপ বিকিরণ করে। কোন ধাতব বস্তু যেমন লৌহ-খণ্ড গরম করতে শুরু করলে এক সময় তা লাল বর্ণ ধারণ করে, এবং তাপ বিকিরণ শুরু করে। উত্তপ্ত লোহা যে তাপশক্তি বিকিরণ করে তা তড়িৎ চৌম্বকীয় বিকিরণের চেয়ে আলাদা কিছু নয়।

বস্তু যেমন তাপ বিকিরণ করে তেমনি সে 'বিকিরণ' গ্রহণও করতে পারে। যখন কোন বস্তুর উপর বিকিরণ পড়ে তখন সেই বিকিরণের কিছুটা প্রতিফলিত হয়, কিছু বস্তু ভেদ করে চলে যায়, এবং কিছু অংশ বস্তুতে শোষিত হয়। বস্তুতে পতিত বিকিরণের পুরোটা কখনো শোষিত হয় না। যে জন্যে সব বস্তুই ত্রুটিপূর্ণ-শোষক বা 'অনাদর্শ তাপ গ্রাহক'। কিন্তু কৃষ্ণ বস্তু হচ্ছে আদর্শ তাপ গ্রাহক। একটি কৃষ্ণবস্তু তার উপর পতিত তাপ শক্তির সবটাই শোষণ করে নেবে। বলাই বাহুল্য আদর্শ তাপগ্রাহক কৃষ্ণ বস্তু একটি কাল্পনিক ব্যাপার। বাস্তবে এর অস্তিত্ব নেই।

একটি বস্তুর তাপ শোষণ করার ক্ষমতা, তাপ বিকিরণ করার ক্ষমতার সঙ্গে সম্পর্কিত। সেই বস্তুই সবচে বেশি তাপ বিকিরণ করবে যার তাপ শক্তি শোষণ করার ক্ষমতা সবচে বেশি। কাজে কাজেই আদর্শ তাপ গ্রাহক কৃষ্ণ বস্তু একই সঙ্গে আদর্শ তাপ বিকিরক, তার তাপ বিকিরণ ক্ষমতাও সবচে বেশি। একটি কৃষ্ণবস্তু একক সময়ে এবং একক আয়তনে যতটুকু তাপ শোষণ করবে ঠিক ততটুকু তাপ বিকিরণও করবে।

আগেই বলা হয়েছে সত্যিকার কৃষ্ণবস্তু প্রকৃতিতে নেই, তবে কাজ চালাবার মত একটি কৃষ্ণ বস্তু তৈরী করা যেতে পারে যা আদর্শ কৃষ্ণ বস্তুর কাছাকাছি। একটা ফাঁপা ধাতব গোলককে আমরা কৃষ্ণবস্তু বলতে পারি যার ভেতরটা ভূষোকালি (carbon black) দিয়ে রঙ করা এবং যার মধ্যে সূচ ঢোকার মত একটি ছিদ্র আছে। কো তাপ বিকিরণ যখন এই ফুটো দিয়ে ঢুকে তখন তা বার বার ফাঁপা গোলকের গা প্রতিফলিত হতে হতে এক সময় পুরোটাই শোষিত হয়। কাজেই সূচ ছিদ্রবিশিষ্ট ফাঁ গোলক, যার ভেতরটা কালো রঙ করা তাকে আমরা কাজ চালাবার মত কৃষ্ণ বস্তু বল পারি।

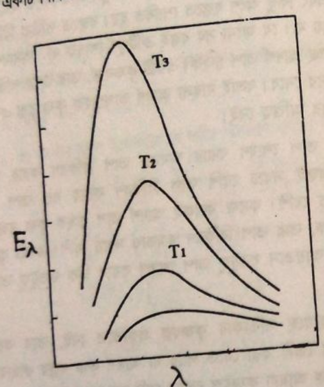
কৃষ্ণবস্তুর বিকিরণ একক সময়ে এবং একক আয়তন থেকে নির্গত শক্তি E, কৃষ্ণ তাপমাত্রার সঙ্গে সম্পর্কিত। যে সূত্র এই সম্পর্ক দেখায় তা স্টিফান বোল্টজম্যান চতু সূত্র (Stefan – Boltzmann fourth power law) হিসেবে পরিচিত

$$E = \alpha T^4 \qquad (১.২২)$$

α হচ্ছে ধ্রুবক যার মান 5.6697×10^{-8} J S^{-1} m^{-2} K^{-4}

T হল পরম তাপমাত্রা।

কৃষ্ণ বস্তু থেকে নির্গত শক্তি একটি কম্পাংকে আসে না। বর্ণালীর সব কম্পনাংকে সমানভাবে বন্টিত অবস্থায়ও আসে না। বিকিরণ ঘটে নীচে দেয়া লেখচিত্র (১.৩) অনুযায়ী। কোন একটি নির্দিষ্ট তাপ একটি নির্দিষ্ট তরঙ্গ দৈর্ঘে সবচে বেশী বিকিরণ হয়।



$T_1 < T_2 < T_3$

লেখচিত্র (১.৩) বিভিন্ন তাপে কৃষ্ণবস্তুর শক্তি বিকিরণ বর্ণালী

তাপ বৃদ্ধির সঙ্গে সর্বধিক বিকিরণ ক্ষুদ্রতর তরঙ্গ দৈর্ঘ্যের দিকে সরে যায়। ব্যাপারটি সূত্রের আকারেও বলা যায়, সর্বাধিক বিকিরণের তরঙ্গ দৈর্ঘ্য এবং কেলভিন তাপমাত্রার গুণনের মান ধ্রুবক। অর্থাৎ,

$$\lambda_{max} T = 0.287 \text{ cm}^{\circ}\text{c} \qquad (১.২৩)$$

তাপগতিবিদ্যার (Thermodynamics) সাহায্য নিয়ে ভিয়েন (Wien, 1896) এবং সনাতন বলবিদ্যার সাহায্যে র‍্যালি (Rayleigh, 1900) কৃষ্ণবস্তুর বিকিরণ ব্যাখ্যা করার চেষ্টা করলেন।

ভিয়েন বললেন, কোন নির্দিষ্ট তরঙ্গ দৈর্ঘ্যে বিকিরিত তাপশক্তি E_λ হল,

$$E_\lambda = \frac{C_1}{\lambda^5} e^{-C_2/\lambda T} \qquad (১.২৪)$$

লেখচিত্র ১.৩ এ ম্যাক্সিমা তখনই হবে যখন $\frac{dE}{d\lambda} = 0$

সমীকরণ (১.২৪) কে λ এর সাপেক্ষে ব্যবকলন (Differentiation) করে আমরা পাই,

$$\frac{dE}{d\lambda} = \frac{C_1}{\lambda^6} \left(\frac{C_2}{\lambda T} - 5 \right) e^{-C_2/\lambda T}$$

যখন $\lambda = \lambda_{max}$, $\frac{dE}{d\lambda} = 0$

কাজেই $$\frac{C_1}{\lambda^6_{max}} \left(\frac{C_2}{\lambda_{max} T} - 5 \right) e^{-C_2/\lambda_{max} T} = 0 \qquad (১.২৫)$$

বা $$\frac{C_2}{\lambda_{max} T} = 5$$

বা $$\lambda_{max} T = C_2/5 = \text{ধ্রুবক} \qquad (১.২৬)$$

দেখা গেল ভিয়েন সমীকরণ লেখচিত্রের সর্বোচ্চ মান বা ম্যাক্সিমা ব্যাখ্যা করতে পারলেও দীর্ঘ তরঙ্গ দৈর্ঘে লেখচিত্রে দেখানো সম্পর্ক ব্যাখ্যা করতে পারছে না।

র‍্যালি সনাতন বলবিদ্যার সাহায্যে দেখালেন বিকরিত তাপশক্তি E_λ হল ;

$$E_\lambda = \frac{8\pi e}{\lambda^4} \qquad (১.২৭)$$

e হল গড় শক্তি। শক্তির সমবন্টন সূত্র অনুযায়ী $e = kT$, কাজেই ;

$$E_\lambda = \frac{8\pi kT}{\lambda^4} \qquad (১.২৮)$$

ভিয়েন সমীকরণের মত র‍্যালি সমীকরণেও সমস্যা ধরা পড়ল। দেখা গেল র‍্যালি সমীকরণ শুধুমাত্র দীর্ঘ তরঙ্গ দৈর্ঘ্যের জন্যেই কার্যকর। ক্ষুদ্র তরঙ্গ দৈর্ঘ্যে তাপশক্তির বিকিরণ ঐ সমীকরণ ব্যাখ্যা করতে অক্ষম।

ম্যাক্স প্ল্যাংক তখন তাঁর কোয়ন্টাম মতবাদ ব্যবহার করে সমস্যা সমাধানের চেষ্টা করলেন। তিনি র‍্যালি সমীকরণ নীতিগতভাবে গ্রহণ করলেও তবে গড় শক্তি e এর জায়গায় কোয়ান্টাম মতবাদ থেকে পাওয়া গড় শক্তি ব্যবহার করলেন (১.১২) ;

$$e = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT}-1}$$

র‍্যালি সমীকরণে e এর মান বসিয়ে পাওয়া গেল,

$$E_\lambda = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 (e^{h\nu/kT}-1)} \qquad (১.২৯)$$

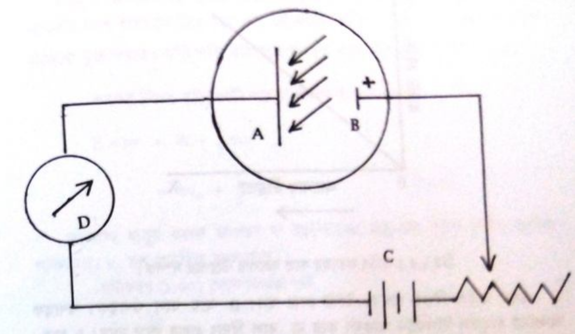
এই সমীকরণ কৃষ্ণবস্তুর বিকিরণ পুরোপুরি ব্যাখ্যা করতে সক্ষম হল। কোয়ান্টাম মতবাদের পক্ষে আরেকটি শক্ত যুক্তি পাওয়া গেল।

৪. ফটো তড়িৎ প্রক্রিয়া

উচু কম্পনাংকের বিকিরণ যেমন আলট্রাভায়োলেট কিংবা X রশ্মী যখন কোন পরিষ্কার ধাতু-তলে এসে পড়ে তখন সেই ধাতু-তল থেকে ইলেকট্রন বের হয়ে আসে। এই বিশেষ ঘটনার নাম ফটো তড়িৎ প্রক্রিয়া বা ফটো ইলেকট্রিক এফেক্ট। যে ইলেকট্রনগুলি বের হয়ে আসে তাদের বলে ফটো ইলেকট্রন। ১৮৮৭ সনে জার্মান পদার্থবিদ হেনরিখ হার্টজ (Heinrich Hertz) এই প্রক্রিয়া প্রথম লক্ষ্য করেন। তিনি এর কোন ব্যাখ্যা দিতে পারেন নি। ফটো তড়িৎ প্রক্রিয়ার বিস্তারিত ব্যাখ্যা দেন মহাবিজ্ঞানী আইনষ্টাইন (১৯০৫)।

প্রসঙ্গক্রমে বলা প্রয়োজন, শুধু যে উচু কম্পনাংকের বিকিরণই ফটো ইলেকট্রন বের করে তাই না, দৃশ্যমান আলো যখন লিথিয়াম, সোডিয়াম, পটাশিয়াম জাতীয় ক্ষারীয় ধাতুর উপর পড়ে তখনো ফটো ইলেকট্রন বের হয়।

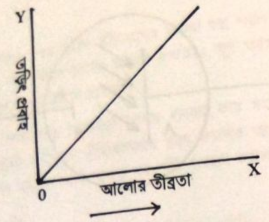
ফটো তড়িৎ প্রক্রিয়া পরীক্ষার জন্যে সহজ কিছু যন্ত্রপাতি ব্যবহার করা যায়। নিচের ছবিতে (চিত্র ১.৪) এমন কিছু ব্যবস্থা দেখানো হল।



চিত্র ১.৪ ঃ ফটো তড়িৎ প্রক্রিয়ার পরীক্ষা।

বায়ুশূন্য গোলকে রাখা A এবং B হল দুটি ধাতব তল। বিদ্যুৎ কোষ C দিয়ে A এবং Bর মধ্যে বিভব প্রভেদ তৈরী করা হয়। এমনভাবে বিভব প্রভেদ তৈরী হয় যেন A হয় ঋণাত্মক এবং B ধনাত্মক। বিভব প্রভেদকে প্রয়োজনমত বাড়ানো কমানো বা বিপরীত ধর্মী করারও ব্যবস্থা আছে। D হল একটি মাইক্রো এ্যামিটার যার সাহায্যে ক্ষীণ বিদ্যুৎ প্রবাহও মাপা সম্ভব।

এখন ফটো তড়িৎ প্রক্রিয়ার পরীক্ষা শুরু করা যাক। পরীক্ষার জন্যে A এবং B' মধ্যে বিভব পার্থক্য তৈরী করা হল। বিকিরণ উৎস 'S' চালু করা হল। বিকিরণ উৎ থেকে আলট্রাভায়োলেট রশ্মী এসে পড়ল A ধাতব তলে। ফটো ইলেকট্রন বের হল। যেহেতু ধনাত্মক, ফটো ইলেকট্রন আকৃষ্ট হল B তে। বিদ্যুৎ প্রবাহের সৃষ্টি হল। এই প্র মাপা হল মাইক্রএ্যামিটার D'র সাহায্যে। A এবং B'র বিভব পার্থক্য বাড়াতে থাক বিদ্যুৎ প্রবাহও বাড়তে থাকবে। এক সময় এমন অবস্থার সৃষ্টি হবে যে বিভব পা বাড়ালেও বিদ্যুৎ প্রবাহ বাড়বে না, স্থির থাকেব। এই অবস্থায় A পাত থেকে যত ইলেকট্রন বের হবে তার সব কটি Bতে আকৃষ্ট হবে। এই স্থির প্রবাহকে বলে স প্রবাহ।



চিত্র ১.৫ ঃ তড়িৎ প্রবাহের সঙ্গে আলোর তীব্রতার সম্পর্ক।

এখন তড়িৎ বিভব পার্থক্য উল্টে দেয়া হল। B হয়ে বলে ঋণাত্মক। ঋণাত্মক আধানের ধাতুতল ইলেকট্রন আকর্ষণ করে না বলে বিদ্যুৎ প্রবাহ কমে যাবে। B ধাতু-তলের একটি নিকৃষ্ট ঋণাত্মক বিভব আছে — যে বিভবে A ধাতু-তল থেকে কোন ইলেকট্রনই Bতে আসতে পারে না। এবং যার ফলে বিদ্যুৎ প্রবাহ পুরোপুরি থেমে যায়। এই বিভব কে গতিরোধী বিভব (Stopping potential) বলে।

ফটো তড়িৎ পরীক্ষায় পাওয়া ফলাফলগুলি এখন বিবেচনা করা যাক।

ক. সকল কম্পনাংকের বিকিরণ ফটো তড়িৎ প্রবাহ সৃষ্টি করে না। কোন ধাতুতল থেকে নির্গত ইলেকট্রনের প্রবাহ তৈরী করতে হলে সেই ধাতুতলে পতিত বিকরণের এক নির্দিষ্ট কম্পনাংক থাকতে হবে। সেই কম্পনাংককে বলা হয় প্রারম্ভিক কম্পনাংক λ_0 (Threshold frequency). কম্পনাংক λ_0 এর নিচে হলে বিদ্যুৎ প্রবাহ পাওয়া যাবে না।

খ. ফটো তড়িৎ প্রবাহ পতিত বিকিরণের তীব্রতার উপর নির্ভরশীল। বিকিরণের তীব্রতা এবং তড়িৎ প্রবাহ সমানুপাতিকভাবে সম্পর্কিত। লেখচিত্র (১.৫) ও সম্পর্ক দেখানো হল।

বিজ্ঞানী আইনষ্টাইন প্লাংকের কোয়ান্টাম মতবাদের সাহায্যে ফটো তড়িৎ প্রক্রিয়া ব্যাখ্যা করেন। কোয়ান্টাম মতবাদে বিকিরণ শক্তি নিরবিচ্ছিন্ন নয়। বিকিরণ শক্তি বিচ্ছিন্ন ধারায় বিকিরণ কণিকা আকারে প্রবাহিত। আইনষ্টাইন আলোর এই কণিকাগুলির নাম দেন ফোটন। কোয়ান্টাম মতবাদ অনুসারে ফোটনের শক্তি E হল,

$$E = h\nu$$

যখন ν কম্পনাংকের একটি ফোটন ধাতু-তলে আঘাত করে তখন তার শক্তির খানিকটা অংশ ইলেকট্রন নিয়ে নেয় এবং এই বাড়তি শক্তি ব্যবহার করে ধাতু-তল থেকে নিজেকে মুক্ত করতে। বাকি শক্তি ইলেকট্রন ব্যবহার করে গতি শক্তি হিসেবে ($\frac{1}{2}mv^2$)

কাজেই নিচের সমীকরণটি আমরা এভাবে সাজাতে পারি।

$$E = h\nu = W + \frac{1}{2}mv^2$$

$$= h\nu_0 + \frac{1}{2}mv^2 \qquad (১.৩০)$$

W হচ্ছে ধাতুর ওয়ার্ক ফাংশান যা ইলেকট্রনের ধাতু-তল থেকে নির্গত হওয়ার শক্তিতুল্য। ν_0 হল প্রারম্ভিক কম্পনাংক।

সমীকরণ (১.৩০) থেকে আমরা পাই

$$v^2 = \frac{2h}{m}(\nu - \nu_0) \qquad (১.৩১)$$

সমীকরণ ১.৩১ হল আইনষ্টাইনের বিখ্যাত ফটো তড়িৎ সমীকরণ। এই সমীকরণ থেকে এটা স্পষ্ট যে যখন $\nu = \nu_0$ তখন $\lambda^2 = 0$ অর্থাৎ ইলেকট্রনের প্রবাহ হবে না। প্রারম্ভিক কম্পনাংকের ব্যাখ্যা আমরা পেয়ে গেলাম। ইলেকট্রন প্রবাহ তখনি হবে যখন,

$$\nu > \nu_0$$

বিজ্ঞানী মিলিকান (Millikan) আইনষ্টাইনের এই সমীকরণ পরীক্ষাগারে প্রমাণ করেন। তিনি আইনষ্টাইন সমীকরণ ব্যবহার করে h এর যে মান নির্ধারণ করেন তা অন্য পদ্ধতি থেকে পাওয়া h এর মানের সমান। এতে কোয়ান্টাম মতবাদের পক্ষে আরো একটি জুড়ালো সমর্থন চলে আসে।

সমস্যা ও সমাধান

রূপার তৈরী ধাতু-পৃষ্ঠে ২০০০A° তরঙ্গ দৈর্ঘ্যের আলট্রাভায়োলেট রশ্মি ফেলা হল। (ক) ধাতু খণ্ড থেকে বের হয়ে আসা ফটো ইলেকট্রনের সর্বোচ্চ গতিশক্তি এবং (খ) ফটো ইলেকট্রনের গতিরোধী বিভব কত হবে? রূপার ফটো তড়িৎ প্রারম্ভিক তরঙ্গ দৈর্ঘ্য ২৭৬২ A°

দেয়া আছে $\lambda = ২০০০ \times ১০^{-১০}\,m = ২ \times ১০^{-৭}\,m$

$$\lambda_0 = ১৭৬২ \times ১০^{১০}\,m = ২.৭৬২ \times ১০^{-৭}\,m$$

(গ) $E_{max} = h(\nu - \nu_0) = hc\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_0}\right)$

$$= 6.63 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^{8}\left(\frac{১০^{৭}}{২} - \frac{১০^{৭}}{২৭৬২}\right)$$

$$= ২.৭৪৫ \times ১০^{-১৯}\ J.$$

(ঘ) $e\nu_0 = E_{max}$

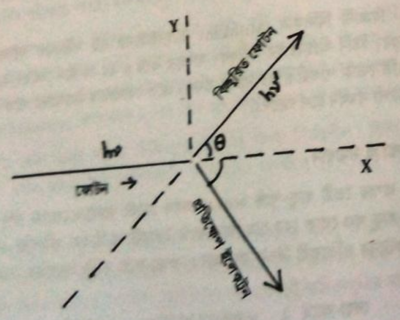
$$\nu_0 = \frac{E_{max}}{e} = \frac{২.৭৪৫ \times ১০^{-১৯}}{১.৬ \times ১০^{-১৯}}$$

$$= ১.৭১৫ \text{ ভোল্টস।}$$

৪. কম্পটন প্রক্রিয়া

কোন স্ফটিকের উপর যখন X রশ্মি পড়ে, সেই রশ্মি চারদিকে বিচ্ছুরিত হয়। দেখা গেছে বিচ্ছুরিত রশ্মির কম্পনাংক (ν^1) পতিত রশ্মির কম্পনাংকের চেয়ে (ν) কম। কম্পনাংকের ব্যবধান ($\nu - \nu^1$) বিচ্ছুরণ কোণ α'র সঙ্গে সঙ্গে বাড়তে থাকে। এই প্রক্রিয়াই কম্পটন প্রক্রিয়া (Compton effect, 1923) নামে পরিচিত।

নিচের চিত্রে (১.৬) স্ফটিকের ইলেকট্রনের x রশ্মি বিচ্ছুরণ দেখানো হল।



চিত্র ১.৬ : ইলেকট্রন কর্তৃক X রশ্মি বিচ্ছুরণ।

কম্পটন প্রক্রিয়া শক্তি ও ভরবেগের সংরক্ষণশীলতা (Conservation of momentum) সূত্রের সাহায্যে ব্যাখ্যা করা যায়। X রশ্মির বিকিরণ অর্থাৎ ফোটন, স্ফটিকের ইলেকট্রনের গায়ে এসে পড়ে। তাদের ভেতর সংঘর্ষ হয়। সংঘর্ষের পরেও তাদের শক্তি ও ভরবেগের সংরক্ষণশীলতা বজায় থাকে (সারণী ২)।

সারণী ২

ফোটন এবং ইলেকট্রনের প্রাক সংঘর্ষ এবং সংঘর্ষ পরবর্তী শক্তি ও ভরবেগের অবস্থা

		ফোটন	ইলেকট্রন
প্রাক সংঘর্ষ	শক্তি	$h\nu$	0
	x অক্ষ বরাবর ভরবেগ	$h\nu/c$	0
	y অক্ষ বরাবর ভরবেগ	0	0
সংঘর্ষের পর	শক্তি	$h\nu^1$	$\frac{1}{2}mv^2$
	x অক্ষ বরাবর ভরবেগ	$\frac{h\nu^1}{c}\cos\theta$	$mv\cos\phi$
	y অক্ষ বরাবর ভরবেগ	$\frac{h\nu^1}{c}\sin\theta$	$mv\sin\phi$

আইনষ্টাইনের সমীকরণ থেকে আমরা পাই $E = mc^2$

প্ল্যাংকের মতবাদ থেকে $E = h\nu$

এদের একত্র করে পাওয়া যায়

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

শক্তির সংরক্ষণশীলতার কারণে আমরা লিখতে পারি,

$$h\nu = h\nu^1 + \frac{1}{2}mv^2$$

যেহেতু ভরবেগেও সংরক্ষণশীলতা সূত্র মেনে চলবে কাজেই x অক্ষ বরাবর ভরবেগের উপাংশ (component) হবে, (১.৩২)

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu^1}{c}\cos\theta + mv\cos\phi$$

y অক্ষের উপাংশে হবে,

$$\frac{hv^1}{c}\sin\theta = mv\sin\phi \qquad (১.৩৩)$$

$\sin^2\phi + \cos^2\phi = 1$ সম্পর্ক ব্যবহার করে এবং

সমীকরণ ১.৩২ এবং ১.৩৩ থেকে ϕ কে সরিয়ে দিয়ে আমরা পাই

$$mv = \frac{2hv}{c} \cdot \frac{\sin\theta}{2}$$

$$\Delta v = v - v^1 = \frac{hv^2}{mc^2}$$

বিভিন্ন বিচ্ছুরণ কোনে (θ) বিচ্ছুরিত রশ্মির কম্পনাংক বের করে প্ল্যাংক ধ্রুবক h এর মান পাওয়া যায়। এই মান অন্যসব পদ্ধতি থেকে পাওয়া মানের সমান। যা প্রমাণ করে শক্তি সম্পর্কিত সনাতন ধারণা বদলে কোয়ান্টাম মতবাদের শক্তি সম্পর্কিত নতুন ধারণা ব্যবহার করলে বস্তুজগতের বিশেষ করে পরমাণু জগতের ব্যাখ্যা সহজ হবে।

প্রশ্নমালা

১. কোয়ান্টাম বলবিদ্যা কি? চিরায়ত বলবিদ্যার সঙ্গে তার পার্থক্য কোথায়? দৃশ্যমান জগতের ব্যাখ্যায় কোয়ান্টাম বলদিব্যার আদৌও কোন প্রয়োজন আছে কি?

২. আদর্শ কৃষ্ণ বস্তু কি? বিজ্ঞানী প্লাংকে কৃষ্ণ বস্তুর বিকিরণের কি ব্যাখ্যা দেন?

৩. বিকিরণের কোয়ান্টাম তত্ত্বের ক্রমবিকাশ আলোচনা কর। 7000 A° ফোটনের শক্তি কত হবে?

৪. ফটো তড়িৎ প্রক্রিয়া ব্যাখ্যা কর। আইনস্টাইনের ফটো তড়িৎ সমীকরণটি কি এবং তা কিভাবে পাওয়া যায়? "তরঙ্গ তত্ত্ব ফটো তড়িৎ প্রক্রিয়া ব্যাখ্যায় অসমর্থ" কেন?

৫. ১২ ev এর একটি ফোটন মলিবডিনাম ধাতুর গায়ে এসে পড়ল, যার ওয়ার্ক ফাংশান ৪.১৫ ev এই পরিস্থিতিতে ইলেকট্রনের গতিরোধী বিভব কত হবে?

৬. পটাশিয়াম ধাতুর ওয়ার্ক ফাংশান হল ২ ev, পটাশিয়ামের গায়ে যদি তরঙ্গ দৈর্ঘ্য ৩৮০০ A° আলো ফেলা হয় তাহলে

ক. নির্গত ইলেকট্রনের গতি শক্তি কত হবে?

খ. ইলেকট্রনের গতিরোধী বিভব কত হবে?

৭. কম্পটন প্রক্রিয়া কাকে বলে? কোয়ান্টাম বলবিদ্যার সাহায্যে কম্পটন প্রক্রিয়ার ব্যাখ্যা দাও। এবং কম্পটন বিচ্যুতি বিষয়ক সমীকরণটি প্রতিষ্ঠিত কর।

৮. হাইড্রোজেন বর্ণালীর জন্যে বোর এর তত্ত্ব ব্যাখ্যা কর। এই তত্ত্ব যে রাইডবার্গের সূত্রের সঙ্গে সামঞ্জস্যপূর্ণ তা দেখাও। হাইড্রোজেনের সবচে নিকটতম কক্ষটির ব্যাসার্ধ বের কর।

৯. চিরায়ত বলবিদ্যা কেন কঠিন বস্তুর আপেক্ষিক তাপ ব্যাখ্যা করতে পারে না। কঠিন বস্তুর আপেক্ষিক তাপ ব্যাখ্যার শক্তি সম্পর্কিত নতুন ধারণার কেন প্রয়োজন পড়ল?

১০. আলোক তড়িৎ পাবার জন্যে কোন ধাতুর প্রারাম্ভিক তরঙ্গ দৈর্ঘ্য (Threshold wavelength) হল 28000A° সর্বোচ্চ 2.5 ev শক্তিসম্পন্ন ইলেকট্রন বের করার জন্যে কোন তরঙ্গ দৈর্ঘ্যের আলো ব্যবহার করতে হবে?

১১. 'অতিক্ষুদ্র বস্তুর ধর্ম ব্যাখ্যায় চিরায়ত বলবিদ্যা অপারগ' ব্যাখ্যা কর।

কিছু গাণিতিক প্রক্রিয়া

সংঘটক (Operator)

সংঘটক হল এক ধরনের সংকেত যা দিয়ে বিশেষ বিশেষ গাণিতিক ক্রিয়া বুঝানো হয়ে থাকে। গাণিতিক ক্রিয়া একটি ফাংশানকে অন্য একটি ফাংশানে রূপান্তরিত করে। উদাহরণহিসেবে $\frac{d}{dx}$ সংঘটকের কথা বলা যায়। এই সংঘটক যে গাণিতিক প্রক্রিয়ার কথা বুঝায় তা হল একটি ফাংশানকে x এর সাপেক্ষে ব্যবকলন (Differentiate) করার কথা বলে।

$$\frac{d}{dx}x^n = nx^{n-1}$$

এখানে $\frac{d}{dx}$ যে গাণিতিক ক্রিয়া বুঝাচ্ছে তা হল x^n এর জাতক (Derivative) নির্ণয় প্রক্রিয়া। যে ফাংশানটির উপর সংঘটক কাজ করে তাকে বলা হয় অপারেন্ড (Operand)। নানা ধরনের সংঘটক আছে। নীচের ছকে (সারণী ৩.১) কিছু উদাহরণ দেয়া গেল।

সারণী ৩.১

সংঘটক	অপারেন্ড	গাণিতিক প্রক্রিয়া	গাণিতিক প্রক্রিয়ার ফল
$\frac{d}{dx}$	x^4	x সাপেক্ষে ব্যবকলন	$4x^3$
$\int(\quad)dx$	x^4	x এর সাপেক্ষে সংকলন	$\frac{x^5}{5}+c$
k	x^4	ধ্রুবক k দিয়ে গুণন	kx^4
$\sqrt{\ }$	x^4	বর্গমূল নির্ণয়	x^2
$(\quad)^2$	x^4	বর্গ করণ	x^8

সংঘটক এলজেব্রা

ধরা যাক $\hat{A}$ এবং $\hat{E}$ দুটি সংঘটক ($\hat{A}$ এবং $\hat{E}$'র মাথায় ^ চিহ্ন সংঘটক নির্দেশ করতে ব্যবহার করা হচ্ছে)। এ দুটি সংঘটকের যোগফল নিচের সহজ সমীকরণের সাহায্যে দেখানো হয়ে থাকে

$$(\hat{A}+\hat{E})f = \hat{A}f + \hat{E}f \qquad (২১)$$

উদাহরণ $\frac{d}{dx}$ এবং 3 এই দুটি সংঘটকের যোগফল যখন (x^2+3e^x) এই ফাংশানটির উপায় কাজ করে তখন যা পাওয়া যায় তা হল,

$$\left(\frac{d}{dx}+3\right)\left(x^2+3e^x\right) = \frac{d}{dx}(x^2+3e^x)+3(x^2+3e^x)$$
$$= 2x+3e^x+3x^2+9e^x$$
$$= 2x+3x^2+12e^x \qquad (২২)$$

একইভাবে দুটি সংঘটকের বিয়োগফল —

$$(\hat{A}-\hat{E})f = \hat{A}f - \hat{E}f \qquad (২৩)$$

সংঘটকের গুণের ব্যাপারটা কেমন হয় দেখা যাক। $\hat{A}$ এবং $\hat{E}$ যদি দুটি সংঘটক হয় তবে $\hat{A}\hat{E}f$ এর মানে হচ্ছে প্রথমে $\hat{E}$ সংঘটক f এর উপর ক্রিয়া করে একটি ফাংশান দেবে। মনে করা যাক সেই ফাংশানটি হল f', তারপর $\hat{A}$ সংঘটক f' ফাংশানের উপর ক্রিয়া করবে,

$$\hat{E}f = f'$$
$$\hat{A}f' = f''$$
$$\hat{A}\hat{E}f = f'' \qquad (২৪)$$

এর থেকে বোঝা যায় যে

$$\hat{A}\hat{A}f = \hat{A}^2 f \qquad (২৫)$$
$$\hat{A}\hat{A}\hat{A}f = \hat{A}^3 f \qquad (২৬)$$

কমুটেটর

সাধারণ এলজেব্রায় আমরা দেখি, $A \times E = E \times A$

কিন্ত সংঘটক এলজেব্রায় সবক্ষেত্রে এটি সত্যি নয়। সংঘটক এলজেব্রায় কোন কাজটি (operation) আগে করা হচ্ছে কোনটি পরে করা হচ্ছে তার উপর সব নির্ভর করছে। যদি দেখা যায় দুটি সংঘটক এমন যে সংঘটক এর ক্রমের উপর ফলাফল নির্ভর করছে না তখন এই সংঘটক দুটিকে বলা হয় কমুটেটর (commutator). $\hat{A}$ এবং $\hat{E}$ যদি কমুটেটর হয় তাহলে এদের $[\hat{A}, \hat{E}]$ এর সংকেত দিয়ে প্রকাশ করা হয়।

$$[\hat{A}, \hat{E}] = \hat{A}\hat{E} - \hat{E}\hat{A} = 0 \qquad (২.৭)$$

$\hat{A} - \hat{E}$

এই ক্ষেত্রে বলা হয় $\hat{A}$ এবং $\hat{E}$ কমিউট করছে।

$\hat{A}\hat{E} = \hat{E}\hat{A}$

রৈখিক সংঘটক

মনে করা যাক f এবং g হচ্ছে দুটি ভিন্ন ফাংশান। সংঘটক Λ এদের উপর ক্রিয়া করছে। যদি এমন হয় যে

$$\hat{\Lambda}(f+g) = \hat{\Lambda}f + \hat{\Lambda}g \qquad (২.৮)$$

তখন আমরা Λ সংঘটককে বলব রৈখিক সংগঠক বা রৈখিক অপারেটর। লিনিয়ার সংঘটকের উদাহরণ হল $\frac{d}{dx}, \frac{d}{dx^2}$ স্পষ্টতই বোঝা যাচ্ছে বর্গমূল সংঘটক হল অরৈখিক বা নন লিনিয়ার।

$\sqrt{9+3} \neq \sqrt{9} + \sqrt{3}$

ভেক্টর সংঘটক এবং ল্যাপলাসিয়ন সংঘটক

সংঘটক শুধু যে একক পরিবর্তক (variable) এর ফাংশানেই কাজ করে তা নয়, একের বেশি পরিবর্তক আছে এমন ফাংশানেও কাজ করতে পারে যেমন $\frac{d}{dx}$ সংঘটক $f(x, y, z)$ এর উপরও ক্রিয়া করতে পারে। ভেক্টর সংঘটক তেমনি এক জাতীয় সংঘটক। কার্টেসিয়ান স্থানাঙ্কে ভেক্টর সংঘটক 'ডেল' হচ্ছে,

$$\Delta = i\frac{\partial}{\partial x} + j\frac{\partial}{\partial y} + k\frac{\partial}{\partial z} \qquad (২.৯)$$

যেখানে i, j, k হচ্ছে যথাক্রমে x, y এবং z অক্ষের দিকে একক ভেক্টর। ল্যাপলাসিয়ন সংঘটক ও এই প্রসঙ্গে চলে আসে। কোয়ান্টাম বলবিদ্যার

হার্মিশিয়ান অপারেটর,

ল্যাপলাসিয়ান সংঘটক ব্যাপকভাবে ব্যবহৃত হয়। ল্যাপলাসিয়ান সংঘটক হচ্ছে Δ^2

$$\Delta^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad (২.১০)$$

আইগেন ফাংশান ও আইগেন মান (Eigen functions and Eigen values)

মনে করা যাক একটি সংঘটক $\hat{\Lambda}$ এমন যে সে যখন একটি ফাংশান $f(x)$ এর উপর ক্রিয়া করে — সেই ক্রিয়ার ফলে আমরা ফাংশানটিই পাই, তবে ফাংশানটির সঙ্গে একটি ধ্রুবক গুণিতক চলে আসে। অর্থাৎ

$$\hat{\Lambda} f(a) = k f(a) \qquad (২.১১)$$

এই ক্ষেত্রে $f(a)$ কে বলা হবে আইগেন ফাংশান এবং k হবে আইগেন মান। উদাহরণ দেয়া যাক,

$$\frac{d}{dx} e^{2x} = 2e^{2x}$$

উপরের উদাহরণে 2 হচ্ছে আইগেন মান। e^{2x}, আইগেন ফাংশান।

হারমিসিয়ান সংঘটক

মনে করা যাক ψ_1 এবং ψ_2 হচ্ছে সংঘটক $\hat{\Lambda}$র আইগেন ফাংশান। এখন যদি সংঘটক $\hat{\Lambda}$ নিচের সমীকরণ (২.১২) মেনে চলে তখনই আমরা $\hat{\Lambda}$ কে বলব হারমিসিয়ান সংঘটক। তারকা চিহ্ন কমপ্লেক্স কনজুগেট বুঝাতে ব্যবহার করা হচ্ছে।

$$\int \psi_1^* (\hat{\Lambda}\psi_2)\, d\tau = \int (\hat{\Lambda}\psi_1)^* \psi_2\, d\tau \qquad (২.১২)$$

হারমিসিয়ান সংঘটক যখন আইগেন মান সমীকরণ মেনে চলে তখন

$$\hat{\Lambda}\psi = a\psi \qquad (২.১৩)$$

এখন যদি উভয় পক্ষকেই ψ^* দিয়ে গুণ করা হয় এবং সমগ্র স্পেস ইন্টিগ্রেল করে আমরা পাই,

$$\int \psi^* \hat{\Lambda}\psi\, d\tau = a\int \psi^* \psi\, d\tau \qquad (২.১৪)$$

সমীকরণ (২.১৩) এর উভয় পক্ষেরই যদি কমপ্লেক্স কনজুগেট নেয়া হয় তাহলে পাই

$$\hat{\Lambda}^* \psi^* = a^* \psi^*$$

এদের ψ দিয়ে গুণন করার পর সমগ্র দেশ সংকলন (Space integral) করলে যা দাঁড়ায় তা হচ্ছে,

$$\int \psi \hat{\Lambda}^{*} \psi^{*} \partial\tau = a^{*} \int \psi^{*} \psi \partial\tau \qquad (২.১৫)$$

হারমিসিয়ান সংঘটকের সংজ্ঞা অনুযায়ী সমীকরণ (২.১৪) এবং (২.১৫) এর মান সমান।

কাজেই $$a \int \psi^{*} \psi \partial\tau = a^{*} \int \psi^{*} \psi \partial\tau \qquad (২.১৬)$$

অর্থাৎ $a = a^{*}$

এই স্বীকার্য অত্যন্ত গুরুত্বপূর্ণ। এটি বলে দিচ্ছে যে হারমিসিয়ান সংঘটক যে ভৌত পরিমানের (physical quantity) সদৃশ (representitive) তা পরিমাপ করা সম্ভব।

সাম্ভাব্যতা

সাম্ভাব্যতা (Probability) কোয়ান্টাম বলবিদ্যায় এক গুরুত্বপূর্ণ স্থান দখল করে আছে। কোয়ান্টাম বলবিদ্যার মূল বিষয় শুরু করার আগে সাম্ভাব্যতা সম্পর্কে কিছু ধারণা থাকা অত্যন্ত জরুরী। সাম্ভাব্যতার খুব সহজ ব্যাখ্যা এইভাবে করা যায় — ধরা যাক আমরা একটি বিশেষ পরীক্ষা চালিয়ে যাচ্ছি। পরীক্ষাটি N সংখ্যক বার করা হল। N সংখ্যক পরীক্ষায় কোন একটি বিশেষ ফল 'Λ' পাওয়া গেল M বার। তাহলে বলা হবে এই পরীক্ষায় Λ পাওয়ার সাম্ভাব্যতা হল,

$$\lim_{N \to \alpha} \frac{M}{N} \qquad (২.১৭)$$

উদাহরণ দেয়া যাক। মনে করা যাক আমাদের কাছে এক প্যাকেট তাস আছে। আমরা এই প্যাকেট থেকে যে কোন একটি তাস টেনে নেব। যে তাসটি টানব তা হবে হরতন, সেই সাম্ভাব্যতা কতটুকু? আমরা জানি তাসের প্যাকেটে ৫২টি তাস তাস আছে। তার ভেতর হরতন আছে ১৩টি। কাজেই আমরা একটি হরতন টেনে নেব তার সাম্ভাব্যতা হল,

$$\frac{m}{n} = \frac{১৩}{৫২} = \frac{১}{৪}$$

কোয়ান্টাম বলবিদ্যায় বস্তুর কোন নির্দিষ্ট জায়গায় অবস্থানের সাম্ভাব্যতা ব্যাপারটি প্রায়ই চলে আসে।

উদাহরণস্বরূপ বলা যাক আমরা একটি ইলেকট্রনের x অক্ষ বরাবর অবস্থানের সম্ভাবনা হিসেবে করছি। x এবং x + dx এইটুকু জায়গায় অর্থাৎ অতি ক্ষুদ্র dx´ এ ইলেকট্রনটি থাকবে এই সাম্ভাব্যতা কি? সাম্ভাব্যতা হল, $f(x)\,dx$. এখানে $f(x)$ হচ্ছে একটি ফাংশান যা বলছে সাম্ভাব্যতা কিভাবে x অক্ষের সঙ্গে সঙ্গে পরিবর্তিত হয়। ফাংশান $f(x)$ কে বলা হয় সাম্ভাব্যতা ঘনত্ব যেহেতু এটি একক দৈর্ঘের সাম্ভাব্যতা। সাম্ভাব্যতা কখনো ঋণাত্বক হতে পারে না, এবং জটিল রাশিও হতে পারে না বলে $f(x)$ সব সময় সবক্ষেত্রে ধ্বণাত্বক এবং বাস্তব ফাংশান হতে হবে (real function) প্রসঙ্গক্রমে বলে রাখা প্রয়োজন তরঙ্গ ফাংশান ψ ঋণাত্বক এবং জটিল রাশি হতে পারে। কারণ তরঙ্গ ফাংশান সাম্ভাব্যতা ঘনত্ব নয়। কোয়ান্টাম বলবিদ্যায় সাম্ভাব্যতা ঘনত্ব হল, $|\psi|^2$, যা সব সময় ধ্বণাত্বক এবং বাস্তব।

একটি বস্তুর অবস্থানের সাম্ভাব্যতা কিভাবে বের করা যায়? ধরা যাক x অক্ষ বরাবর কোথাও বস্তুটি আছে। আমরা দেখছি a এবং b র ভেতরে বস্তুটির পাবার সম্ভাবনা। নিয়ম হল এইটুক জায়গায় প্রতিটি ক্ষুদ্রাতিক্ষুদ্র অংশে তার সাম্ভাব্যতা পরীক্ষা করে যোগ করতে হবে। অর্থাৎ সাম্ভাব্যতা হল

$$\int_a^b |\psi|^2 dx$$

সাম্ভাব্যতা ১ হওয়া মানে বস্তুটি অবস্থানের সম্ভাবনা নিশ্চিত। যেহেতু x অক্ষ বরাবর বস্তুটিকে পাওয়ার সম্ভাবনা একশত ভাগ সেহেতু

$$\int_{-\alpha}^{\alpha} |\psi|^2 dx = 1$$

ψ যখন এই শর্ত মেনে চলে তখন ψ কে বলা হয় নর্মায়িত (normalized)

জটিল সংখ্যা

কোয়ান্টাম বলবিদ্যায় জটিল সংখ্যা (complex number) বার বার আসে। তরঙ্গ ফাংশান প্রায়শই জটিল (complex) হয়ে থাকে। কাজেই জটিল সংখ্যা সম্পর্কে কিছু ধারণা থাকা দরকার।

যদি $\sqrt{-1}$ কে i দিয়ে বুঝানো হয় তাহলে জটিল সংখ্যা Z কে এই ভাবে প্রকাশ করা যেতে পারে

$$Z = x + iy$$

এখানে x এবং y হল বাস্তব সংখ্যা। x হল Z এর বাস্তব অংশ এবং y হল কাল্পনিক (imagining) অংশ।

Z এর জটিল যুগ্ম (complex conjugate) হবে Z^*, যেখানে Z^* হল,

$$Z^* = x - iy$$

$$ZZ^* = x^2 + y^2 = |Z|^2$$

যদি ψ কোন জটিল তরঙ্গ ফাংশান হয় তাহলে উপরে উল্লেখিত যুক্তি অনুযায়ী,

$$|\psi^2| = |\psi|^2 = \psi^* \psi$$

প্রশ্নমালা

১. সংঘটক কি? হারমিসিয়ান সংঘটক বলতে কি বোঝ? প্রমাণ কর যে হারমিসিয়ান সংঘটকের আইগেন মান বাস্তব।

২. কমুটেটর বলতে কি বোঝ? নীচের কমুটেটর গুলির মান বের কর

$$\left[\frac{\partial}{\partial_x}, x\right], \qquad [x, P_x]$$

৩. কোয়ান্টাম বলবিদ্যায় সম্ভাব্যতা (Probabilities) র ব্যাখ্যা কি?

৪. জটিল সংখ্যা কি? দেখাও যে $ZZ^* = |Z|^2$,

৫. নর্মায়িত তরঙ্গ ফাংশান কাকে বলে?

ইলেকট্রনের দ্বৈত চরিত্র

নীলস বোর পরমানুর যে সদৃশ দিলেন সেখানে ইলেকট্রনকে বস্তু কণা হিসেবেই ধরা হয়েছে, যে কণা একটি নির্দিষ্ট পথে (orbit) নির্দিষ্ট বেগে ঘুরছে। সমস্যা হল ঘূর্ণায়মান এই ইলেকট্রনের অবস্থান এবং গতিবেগ একই সময়ে নির্ণয় করা নিয়ে। দেখা গেল একই সঙ্গে অবস্থান এবং গতিবেগ পাওয়া যাচ্ছে না, কিছু অনিশ্চয়তা থেকেই যাচ্ছে। কাজেই সন্দেহ দেখা দিল নির্দিষ্ট পথে ইলেকট্রন ঘুরছে এই ধারণা সম্ভবত ঠিক নয়। এর বাইরেও কিছু আছে। দেখা গেল আসলেই তাই, কণা সত্তার বাইরেও ইলেকট্রনের আরেকটি সত্তা আছে — তরঙ্গ সত্তা। ইলেকট্রন একই সঙ্গে কণা এবং তরঙ্গ। ডঃ জেকেল এবং মিস্টার হাইডের মত দ্বৈত চরিত্র।

ডি ব্রগলি হাইপোথিসিস

প্ল্যাংক আইনষ্টাইনের সূত্র অনুযায়ী একটি ফোটনের শক্তি E হচ্ছে,

$$E = h\nu \qquad (৩.১)$$

আইনষ্টাইনের রিলেটিভিটি সূত্র অনুযায়ী রিলেটিভিষ্টিক শক্তি E হচ্ছে,

$$E^2 = P^2c^2 + m_0^2 c^4 \qquad (৩.২)$$

P হচ্ছে রিলেটিভিষ্টিক ভরবেগ, m_0 হচ্ছে স্থির ভর (Rest mass).

ফোটনের ক্ষেত্রে স্থির–ভর শূন্য। কাজেই,

$$E = Pc$$

বা $$P = \frac{E}{c} \qquad (৩.৩)$$

সমীকরণ (৩.১) এবং (৩.২) থেকে আমরা লিখতে পারি,

$$Pc = h\nu$$

$$Pc = h\frac{c}{\lambda} \qquad \text{যেহেতু } \nu = \frac{c}{\lambda}$$

$$\text{বা } \lambda = \frac{h}{p} \qquad (৩.৪)$$

ফোটনের তরঙ্গ এবং কণা ধর্মকে এই বিখ্যাত সমীকরণটি স্পষ্ট করে তুলছে। ১৯২৪ সনে লুইস ডি ব্রগলী এই সমীকরণটি ফোটনের বাইরেও প্রয়োগ করলেন। তিনি বললেন, যাবতীয় গতিশীল বস্তুর জন্যেই এই সমীকরণ সত্য, তা সে ইলেকট্রনই হোক বা প্রোটনই হোক কিংবা অণু পরমাণুই হোক। তিনি বললেন যাবতীয় গতিশীল বস্তুরই তরঙ্গ ধর্ম থাকবে। সেই গতিশীল বস্তুর তরঙ্গ দৈর্ঘ λ হবে,

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

এই ক্ষেত্রে m হবে বস্তুটির রিলেটিভিষ্টিক ভর যা পাওয়া যাবে নিচের সমীকরণ থেকে

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \qquad (৩.৫)$$

m_0 হচ্ছে স্থির ভর। v হচ্ছে বস্তুর গতিবেগ। c হচ্ছে আলোর গতিবেগ। v যদি cর তুলনায় অনেক কম হয় তাহলে m কে m_0 এর সমান ধরা যেতে পারে। সেই ক্ষেত্রে $\lambda = \frac{h}{mv}$ সমীকরণ ব্যবহার করে তরঙ্গ দৈর্ঘ্য বের করা যায়।

ডি ব্রগলী সমীকরণ ব্যবহার করে এখন ১০ গ্রাম ওজনের একটি বলের তরঙ্গ দৈর্ঘ্য নির্ণয় করা যাক। ধরা যাক বলটির গতিবেগ প্রতি সেকেণ্ডে ১০ মিটার।

$$\lambda = \frac{h}{mv} \qquad h = ৬.৬২৫ \times ১০^{-৩৪} \text{ জুল সেকেন্ড}$$

$$m = ১ \times ১০^{-২} \text{ কিলোগ্রাম}$$

$$v = ১০ \text{ মিটার/সেকেন্ড}$$

$$\lambda = \frac{৬.৬২ \times ১০^{-৩৪}}{০.০১} = ৬.৬২৫ \times ১০^{-২৮} \text{ মিটার}$$

এই মান অবিশ্বাস্য ধরনের ক্ষুদ্র যা মাপা মানুষের পক্ষে সম্ভব নয়।

ইলেকট্রনের গতিবেগ নির্ভর করে কি পরিমাণ তড়িৎ বিভবের (Potential difference) ভেতর দিয়ে ইলেকট্রনকে যেতে হয় তার উপর। ইলেকট্রনের গতিবেগ v এবং তড়িৎ বিভব পার্থক্য (potential drop) E–র ভেতর সম্পর্কটি হচ্ছে,

$$v = ৫.৯৩ \times ১০^{৭} \sqrt{E}$$

ইলেকট্রনের ভর m হচ্ছে ৯.১০৮×১০^{-৩১} কিলোগ্রাম কাজেই তার তরঙ্গ দৈর্ঘ্য হবে

$$\lambda = \frac{৬.৬২৫ \times ১০^{-৩৪}}{৯.১০৮ \times ১০^{-৩১} \times ৫.৯৩ \times ১০^{৭} \sqrt{E}} \text{ মিটার}$$

১০ থেকে ১০,০০০ ভোল্ট তরিৎ বিভবে ইলেকট্রনের λ হয় ৩.৮৯ থেকে ০.১২ A^0. এই মান $\times$ রশ্মির তরঙ্গ দৈর্ঘের সমান।

এটা বোঝাই যাচ্ছে বস্তুর ভর যত কমতে থাকবে তার তরঙ্গ দৈর্ঘ্য ততই বাড়বে। নিচের সারণী থেকে কিছুটা ধারণা পাওয়া যাবে।

সারণী ৩.১

বস্তু	ভর (কিলোগ্রাম)	গতিবেগ (মিটার/সেকেন্ড)	ডি ব্রগলী তরঙ্গ দৈর্ঘ্য (মিটার)
গলফ বল	৪.৫×১০^{-২}	৩×১০	৪.৯×১০^{-১০}
রাইফেলের বুলেট	১.৯×১০^{-৩}	৩.২×১০^{২}	১.১×১০^{-২৭}
ইলেকট্রন	৯.১×১০^{-৩১}	৫.৯×১০^{৫}	১.২×১০^{-৩}

আমেরিকার বেল ল্যাবোরেটরীর দুই বিজ্ঞানী ডেভিসন (Davisson) ও গারমার (Germer) ১৯২৫ সনে ডি বগ্রলী সমীকরণ কতটুক সত্যি তা জানার জন্যে একটা পরীক্ষা চালান। পদার্থ বিদ্যায় চমৎকার কিছু পরীক্ষার মধ্যে তাদের পরীক্ষা হচ্ছে একটি। এদের দুজনকেই অসম্ভব সুন্দর এই পরীক্ষার জন্যে পদার্থবিদ্যায় ১৯২৭ সনে নোবেল পুরস্কার দেয়া হয়। তাঁরা নিকেল ধাতুর মসৃণ তলে নির্দিষ্ট

গতিবেগের ইলেকট্রন ফেলেন। তল থেকে বিচ্ছুরিত ইলেকট্রনের অপবর্তন চিত্র (Diffrection pattern) বের করেন এবং বিস্মিত হয়ে লক্ষ্য করেন এই অপবর্তন চিত্র এবং X–রশ্মির অপবর্তন চিত্র একই রকম। অপবর্তন চিত্র থেকে ইলেকট্রনের তরঙ্গ দৈর্ঘ্য বের করা হয়। দেখা যায় ডি ব্রগলী সমীকরণ থেকে পাওয়া তরঙ্গ দৈর্ঘ্য এবং পরীক্ষাগারে পাওয়া তরঙ্গ দৈর্ঘ্য একই। কণার তরঙ্গ ধর্ম এইভাবে পরীক্ষাগারে মাধ্যমে স্বীকৃতি লাভ করে। হাইজেন বার্গের অনিশ্চয়তা সূত্র মূলত বস্তুর দ্বৈত ধর্মের কথাই বলে। বস্তু যদি শুধু বস্তুই হত তার তরঙ্গ ধর্ম না থাকতো তাহলে অনিশ্চয়তার ব্যাপারটি আসত না। আলোর ক্ষেত্রেও এই কথা সত্যি। আলোর শুধু তরঙ্গ ধর্ম থাকলে অনিশ্চয়তা সূত্রের প্রয়োজন পড়ত না। আলোর বস্তু ধর্ম আছে বলেই অনিশ্চয়তা সূত্রের প্রয়োজন হচ্ছে।

অনিশ্চয়তার সূত্র

১৯২৭ সনে ভারনার হাইজেনবার্গ (Werner Heisenberg) তাঁর বিখ্যাত অনিশ্চয়তা সূত্র (Uncertainity principle) প্রকাশ করলেন। এই সূত্র বলছে — একই সময়ে কোন বস্তুর ভরবেগ এবং অবস্থান নিখুঁতভাবে জানা অসম্ভব। অবস্থানের ক্ষেত্রে এই অনিশ্চয়তা যদি হয় Δx এবং ভরবেগের ক্ষেত্রে যদি হয় ΔP তবে,

$$(\Delta x)\ (\Delta p) \geq \frac{h}{2\pi} \qquad (৩.৬)$$

বা $\Delta x\ \Delta v \geq \dfrac{h}{2\pi m}$

বা $\Delta x.\ \Delta v \geq \dfrac{\hbar}{m}\ (\hbar = \dfrac{h}{2\pi})$

যখনই নিখুঁতভাবে বস্তুর অবস্থান জানার চেষ্টা করা হবে তখনি Δx এর মান কমে আসবে কিন্তু সঙ্গে সঙ্গে ΔP যাবে বেড়ে। উদাহরণ দিয়ে বুঝানো যায়, অপবর্তন বা ডিফ্রেকশান পরীক্ষায় জোর দেয়া হয় ইলেকট্রনের অবস্থানের উপর, কিন্তু ইলেকট্রন তখন দেখাচ্ছে তরঙ্গ ধর্ম কাজেই অনিশ্চয়তা দেখা দিচ্ছে ভরবেগে।

ভারী বস্তুর জন্যে $\frac{\hbar}{m}$ হবে খুবই ক্ষুদ্র কাজেই $\Delta x.\ \Delta v$ হবে ক্ষুদ্র। এইসব বস্তুর অবস্থান ও গতিবেগ একই সময়ে সঠিকভাবেই মাপা যাবে। খুব ভারী বস্তুর জন্যে

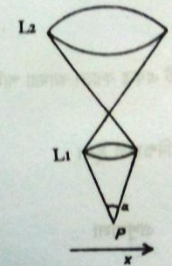
$\frac{\hbar}{m}$ হবে শূন্যের কাছাকাছি। কাজেই অনিশ্চয়তা বলে কিছুই থাকবে না। নিখুঁতভাবে বস্তুর অবস্থান এবং গতিবেগ মাপা সম্ভব হবে।

উদাহরণ দেয়া যাক ১০$^{-৩}$ গ্রাম ভরের একটি চলমান বস্তুর ক্ষেত্রে অনিশ্চয়তা

$\Delta x.\ \Delta v \sim$ ১০$^{-২৪}$ সেমি^{২}/সেকেন্ড

আবার ১০$^{-২৭}$ গ্রাম ভরের একটি চলমান বস্তুর অবস্থানের অনিশ্চয়তা $\pm$ ১ সেমি যা মোটেই অগ্রাহ্য করার বিষয় নয়।

এখান থেকে চিরায়ত কৌশলের সীমারেখা সম্পর্কেও আমরা খানিকটা ধারণা করতে পারি। চিরায়ত কৌশলে অনিশ্চয়তা সূত্র বলে কিছু নেই — অনিশ্চয়তা সূত্র কোন্টাম কৌশলের বিষয় যা অতি ক্ষুদ্র বস্তুর ক্ষেত্রে প্রযোজ্য। সেই বস্তুও আবার ঠিক বস্তু নয় — তরঙ্গ। চিরায়ত কৌশলের জগৎ এবং কোয়ান্টাম কৌশলের জগৎ আলাদা। কোয়ান্টাম কৌশলের জগৎ অনেক রহস্যময়।



চিত্র : ৩.১ : হাইজেনবার্গের চিন্তা পরীক্ষা।

অনিশ্চয়তা সূত্রের প্রমাণের জন্যে হাইজেনবার্গের বের করা একটি 'চিন্তা পরীক্ষা' করা যেতে পারে। চিন্তা পরীক্ষা হচ্ছে এমন পরীক্ষা যা ল্যাবটেরীতে করা সম্ভব নয়। যে পরীক্ষা করতে হয় মস্তিষ্কে। চিন্তা পরীক্ষাকে কল্পনা পরীক্ষাও বলা যেতে পারে। কল্পনা পরীক্ষা হলেও যুক্তিনির্ভর পরীক্ষা।

নিচের ছবিতে (চিত্র ৩.১) আমরা দেখছি একটি অতি ক্ষুদ্র বস্তু, ধরা যাক একটি ইলেকট্রন e. ইলেকট্রনটি x অক্ষের দিকে অগ্রসর হচ্ছে। আমরা একটি

কাল্পনিক মাইক্রোসকোপের সাহায্যে ইলেকট্রনটি দেখার চেষ্টা করছি। L_1 and L_2 হচ্ছে মাইক্রোস্কোপের দুটি লেন্স। কোন এক মুহূর্তে চলমান ইলেকট্রন e লেন্স L_1 এ α কোণ তৈরি করল। এখন ইলেকট্রনটির অবস্থানগত অনিশ্চয়তা যদি Δx হয় এবং λ যদি হয় যে আলো ইলেকট্রনটিকে আলোকিত করে রেখেছে তার তরঙ্গ দৈর্ঘ্য তাহলে আলোবিদ্যা (optics) এর সূত্র ব্যবহার করে লেখা যেতে পারে,

$$\Delta x = \frac{\lambda}{\sin\alpha} \qquad (৩.৭)$$

ইলেকট্রনকে দেখতে হলে কমপক্ষে একটি ফোটনকে ইলেকট্রন থেকে এসে মাইক্রোস্কোপে চোখ রেখে বসে থাকা পরীক্ষকের চোখে পড়তে হবে। যেই মুহূর্তে একটি ফোটন ইলেকট্রনের গায়ে পড়বে সেই মুহূর্তেই ইলেকট্রনের হবে কমপটন বিচ্যুতি (Compton Recoil) যার পরিমাণ হবে h/λ. ভরবেগের ক্ষেত্রে যে অনিশ্চয়তা দেখা দেবে তার নির্ভর করবে $^h/_\lambda$ র উপর। যদি x উপাংশে ভরবেগের অনিশ্চয়তা ΔPx হয় তাহলে,

$$\Delta Px \sim \frac{h}{\lambda}\sin\alpha \qquad (৩.৮)$$

৩.৭ এবং ৩.৮ সমীকরণ দুটি একত্র করলে আমরা পাই

$$\Delta x.\ \Delta Px \sim h \qquad (৩.৯)$$

যা হাইজেনবার্গের বিখ্যাত অনিশ্চয়তা সূত্র।

প্রশ্নমালা

১. বস্তু ও তরঙ্গের দ্বৈত প্রকৃতি আলোচনা কর।

২ বস্তুর তরঙ্গ ধর্ম বলতে কি বোঝ?

৩. কণিকার ডি ব্রগলী তরঙ্গ ব্যাখ্যা কর। দেখাও যে বস্তুর তরঙ্গ দৈর্ঘের ধারণা দৃশ্যমান বস্তুজগতের ব্যাখ্যা তেমন প্রয়োজনীয় নয়।

৪. "একটি দৃশ্যমান বস্তুর তরঙ্গ দৈর্ঘ একই ক্ষুদ্র যে মাপা সম্ভব নয়।" ব্যাখ্যা কর। এক কিলোগ্রাম ভরের একটি বল ৬.৬ মিটার/সেকেন্ড বেগে চলছে এর ডি ব্রগলী তরঙ্গ দৈর্ঘ কত?

৫. হাইজেনবার্গের অনিশ্চয়তা নীতি বর্ণনা কর। একটি ইলেকট্রন ৩×১০^৭ m/s বেগে ছুটছে এর অবস্থানের অনিশ্চয়তা নির্ণয় কর।

৬. অনিশ্চয়তা নীতি থেকে ব্যাখ্যা কর যেন কেন্দ্রীনের ভেতর মুক্ত ইলেকট্রন থাকতে পারে না।

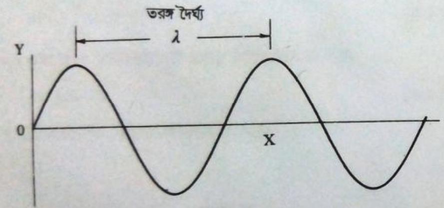
৭. 'হাইজেনবার্গের অনিশ্চয়তা সূত্রের মূল আছে বস্তুর তরঙ্গ ধর্ম' ব্যাখ্যা কর।

৮. ১ কিলোইলেকট্রনভোল্ট ইলেকট্রনের অবস্থান ও ভরবেগ একই সঙ্গে বের করা হল। যদি অবস্থান ১ A^o এর মধ্যে নির্ধারণ করা যায় তবে ভরবেগের অনিশ্চয়তা কতটুকু হবে?

৯. এক গ্রাম ওজনের একটি শামুক সেকেন্ডে ০.১ মি. মি. বেগে হাঁটছে তার অবস্থানের অনিশ্চয়তা নির্ণয় কর।

শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ

চিরায়ত বলবিদ্যা বা নিউটনীয় বলবিদ্যা শুধুমাত্র দৃশ্যমান বস্তু বা বস্তুকণার প্রতিই প্রযোজ্য। অতি ক্ষুদ্র কণা-জগতে চিরায়ত বলবিদ্যা কার্যকর নয়। একটি ক্রিকেট বলের অবস্থান ও গতি চিরায়ত বলবিদ্যা ব্যবহার করে বলে দেয়া যায়, তাতে কোন ভুল হয় না। কিন্তু একটি ইলেকট্রনের ক্ষেত্রে তা সম্ভব নয়। কাজেই অতিক্ষুদ্র কণা জগতের জন্যে নতুন ধরনের বলবিদ্যা প্রয়োজন। কোয়ান্টাম বলবিদ্যা হচ্ছে সেই বলবিদ্যা। অষ্ট্রিয়ান পদার্থবিদ ই. শ্রোডিঙ্গার (১৯২৬) কোয়ন্টাম বলবিদ্যার প্রধান প্রবক্তা। তরঙ্গ ফাংশানের এবং সময়ের সঙ্গে তরঙ্গ ফাংশানের পরিবর্তন বিষয়ক সমীকরণে তাঁর আবিষ্কার। তাঁর নামানুসারে এই সমীকরণ শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ হিসেবে পরিচিত।



চিত্র ৪.১ ঃ তরঙ্গ

শ্রোডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণটি কি তা এখন দেখা যাক। সাধারণ একটি তরঙ্গ ধরা যাক — যা x অক্ষের বরাবর প্রবাহিত হচ্ছে (চিত্র ৪.১)। এই তরঙ্গের সমীকরণ আমাদের জানা। কোন এক নির্দিষ্ট সময়ে তরঙ্গের বিস্তার (amplitude) কত হবে তা এই সমীকরণ থেকে জানা যায়

$$\psi = A \sin 2\pi \left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right) \qquad (৪.১)$$

এখানে ψ হচ্ছে তরঙ্গের বিস্তার (amplitude), λ তরঙ্গ দৈর্ঘ্য, ν কম্পনাংক এবং t হল সময়। সমীকরণটি আমরা সামান্য পরিবর্তন করে লিখতে পারি,

$$\psi = A \sin \frac{2\pi}{\lambda}(x - ct) \qquad \text{যেহেতু } C = \nu\lambda \qquad (৪.২)$$

সমীকরণ (৪.২)-কে x এর সাপেক্ষে পর পর দুবার ব্যবকলন করে আমরা পাই —

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi = 0 \qquad (৪.৩)$$

সমীকরণ (৪.৩) হচ্ছে সব ধরনের তরঙ্গের সাধারণ সমীকরণ। ইলেকট্রনকে তরঙ্গ হিসেবে কল্পনা করলে এই সমীকরণ সেই তরঙ্গের জন্যেও প্রযোজ্য। এখন এই সমীকরণে তরঙ্গের কণা ধর্ম আরোপ করা যাক। আমরা জানি গতিশীল ইলেকট্রনের মোট শক্তি E হচ্ছে গতিশক্তি এবং স্থিতিশক্তির যোগফল।

$$E = \frac{1}{2} mv^2 + v$$

v হচ্ছে স্থিতি শক্তি।

m, ভর।

v, ইলেকট্রনের গতিবেগ।

ডি ব্রগলি সমীকরণ থেকে আমরা জানি

$$mv = {}^{h}/_{\lambda}$$

$$mv^2 = \frac{h^2}{m\lambda^2}$$

$$(E - V) = \frac{1}{2} mv^2 = \frac{1}{2}\,\frac{h^2}{m\lambda^2}$$

বা $$\frac{1}{\lambda 2} = \frac{2m(E - V)}{h^2}$$

তরঙ্গ সমীকরণে (৪.৩) $\frac{1}{\lambda^2}$ এর মান বসিয়ে আমরা পাই

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V)\psi = 0 \qquad (৪.৪)$$

এইটিই হচ্ছে শ্রোডিঙ্গারের বিখ্যাত তরঙ্গ সমীকরণ। যে সমীকরণ x অক্ষ বরাবর প্রবাহিত একটি কণার তরঙ্গ ধর্ম এবং কণা ধর্ম প্রকাশ করছে।

ইলেকট্রন টি যদি তিন মাত্রায় ঘুরছে বলে কল্পনা করে নেই তাহলে সমীকরণটি হবে

∇ হলো ল্যাপলাসিয়ান অপারেটর। → জানকায়।

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V)\psi = 0 \qquad (৪.৫)$$

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

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

∇ হচ্ছে ল্যাপলাসিয়ান অপারেটর।

কার্টেসিয়ান স্থানাংক ব্যবহার না করে আমরা পোলার স্থানাংক ব্যবহার করতে পারি। পোলার স্থানাংকে ল্যাপলাসিয়ান অপারেটর ∇^2 হচ্ছে

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \qquad (৪.৬)$$

শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ আইগেন মান সমীকরণের মত করেও লেখা যায়, যেমন

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

$$\text{বা} \quad H\psi = E\psi \qquad (৪.৭)$$

এখানে H হচ্ছে কোয়ান্টাম বলবিদ্যায় হেমিলটনিয়ান অপারেটর যার মান হল

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

ψ হচ্ছে আইগেন ফাংশান এবং E হল আইগেন মান। সিস্টেমটির অবস্থা হচ্ছে আইগেন অবস্থা। V, স্থিতি শক্তি।

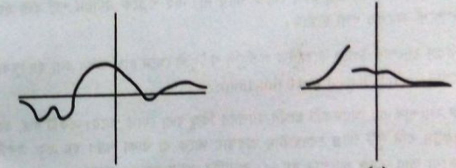
শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের সমাধান সম্পর্কেও কিছু বলা যাক। ψ যদি শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের সমাধান হয় তবে $C\psi$ ও হবে আরেকটি সমাধান। যেখানে C হল ধ্রুবক। কোন শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের যদি দুটি সমাধান থাকে ψ^1 এবং $\psi 2$ তবে $C_1\psi_1 \pm C_2\psi_2$ ও হবে উক্ত শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের সমাধান। → কেনও উদ্ভব কি?

শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের সমাধান করে আমরা কি পাব? সিস্টেম সম্পর্কে পরিপূর্ণ ধারণা পাব। সিস্টেমে আইজেন মান অর্থাৎ E জানতে পারব। বিভিন্ন অবস্থানে ψ (x, y, z) এর মান কত তা জানতে পারব। ψ এর মান জানতে পারলেই আমরা বের করতে পারব সেই অবস্থানে ইলেকট্রনটি পাওয়ার সম্ভাবনা কতটুকু।

শ্রোডিঙ্গার যে সমীকরণ (সমীকরণ ৪.৫) উল্লেখ করা হল, লক্ষণীয় যে সেখানে সময়ের ব্যাপারে কিছু বলা হয় নি। এই সমীকরণে সময় কোন পরিবর্তক (variable) নয়।

ψ^2 কে বলা হয় সম্ভাবনা বিস্তৃতি ফাংশান (probability distibution function). সাধারণভাবে ψ^2 হচ্ছে সম্ভাবনা ঘনত্ব (probability density) এবং $\psi^2 d\tau$ হচ্ছে $d\tau$ আয়তনে বস্তুটির প্রাপ্তির সম্ভাবনা। সম্ভাবনা ঘনত্ব লেখা হয় $\psi\psi^*$ দিয়ে যেখানে ψ^* হচ্ছে ψ এর কমপ্লেক্স কনজুগেট। যেহেতু ψ কে তার কমপ্লেক্স কনজুগেট দিয়ে গুণ করা হচ্ছে সেহেতু $\psi\psi^*$ বা সম্ভাবনা ঘনত্ব সব সময় হবে ধনাত্মক সরল সংখ্যা।

যদিও বলা হচ্ছে $\psi\psi^*$ হচ্ছে সম্ভাবনা ঘনত্ব তবু মনে রাখা দরকার $\psi\psi^*$ সম্ভাবনা ঘনত্ব তখনি হবে যখন ψ কিছু স্বীকার্য মেনে চলবে। স্বীকার্যগুলি হচ্ছে —



(a) (c)

চিত্র ৪.২ : প্রবহমান ও ভগ্ন ফাংশান

ফাংশান a. প্রবহমান ফাংশান c. প্রবহমান নয়।

(১) ψ কে হতে হবে একমান বিশিষ্ট (single valued).

'একমান বিশিষ্ট' বাক্যটি ব্যাখ্যা করা দরকার। ধরা যাক একটি নির্দিষ্ট অবস্থানে ψ র মান বের করা হচ্ছে। সেই অবস্থানে x, y, z মান দেয়া হচ্ছে। x, y, z এর এই নির্দেশিত মানে ψ এর মান হবে একটিই। দ্বিতীয় মান কখনো হবে না। একই অবস্থানে ψ এর দুটি মান হওয়া মানে — সেই অবস্থানে দু'রকম সম্ভাবনা পাওয়া, যা সম্ভব নয়।

(২) ψ হতে হবে প্রবহমান বা অভগ্ন (continuous) নিচের ছবিতে ফাংশান a হচ্ছে প্রবহান বা অভঙ্গুর। ফাংশান c প্রবহমান নয় ভঙ্গুর।

(৩) ψ কে শুধু প্রবহমান হলেই চলবে না। ψ এর প্রথম জাতককেও (স্থানাঙ্ক এবং সময় সাপেক্ষ জাতক) হতে হবে প্রবাহমান। (৪.২) চিত্রের ফাংশান a র প্রথম জাতকটিও প্রবহমান, কিন্তু ফাংশান c র প্রথম জাতক প্রবহমান নয়।

(৪) ψ এর মান সবজায়গায় এমন কি অসীমেও হবে সীমাবদ্ধ (Finite).

এছাড়াও ψ এমন হবে যেন যখন সমগ্র দৃশ্যমান জগত ধরে $\int \psi\psi^* \, d\tau$ এর সংকলন বা ইন্টিগ্রেসন করা সম্ভব। এই শর্তটিকে বলা হয় কোয়াড্রেটিকেলি ইন্টিগ্রেবলের শর্ত।

সমগ্র দৃশ্যমান জগত ধরা হলে

$$\int \psi\psi^* \, d\tau$$

এর মান অবশ্যই এক হবে। কারণ বস্তুটির প্রাপ্তির সম্ভাবনা ১০০ ভাগ হতেই হবে। বিশ্বব্রহ্মান্ডের বাইরে কোন বস্তু চলে যেতে পারে না। এই শর্তকে নর্মায়ন শর্ত বলা হয়। নর্মায়ন সম্পর্কে আগেও বলা হয়েছে।

যে তরঙ্গ ফাংশান উপরে উল্লেখিত শর্তগুলি শর্তগুলি মেনে চলে তখন বলা হয় সুবোধ তরঙ্গ ফাংশান (well behaved wave function).

তরঙ্গ ফাংশান এর আরেকটি ধর্মের ব্যাপারে কিছু বলা যেতে পারে। একটি বস্তু, ধরা যাক ইলেকট্রন যদি দুটি ভিন্ন কোয়ান্টাম অবস্থায় থাকে বা থাকা সম্ভব হয় এবং একটি অবস্থার জন্যে তার তরঙ্গ ফাংশান হয় ψ_a অন্যটির জন্যে হয় ψ_b তখন

$$\int \psi_a \psi_b d\tau = 0 \quad (1)$$

এই সূত্রের নাম অর্থগোনালিটি সূত্র।

প্রশ্নমালা

১. শ্রোডিঙ্গার সমীকরণটি প্রতিপাদ কর। তরঙ্গ ফাংশানের বৈশিষ্ট্য ও গুরুত্ব ব্যাখ্যা কর।

২. তরঙ্গ ফাংশান কি? তরঙ্গ ফাংশানের ভৌত ব্যাখ্যা দাও। নর্মায়িত তরঙ্গ ফাংশান বলতে কি বুঝ ব্যাখ্যা কর।

৩. সম্ভাবনা ঘনত্ব বলতে কি বুঝ? ব্যাখ্যা কর। দেখাও যে,

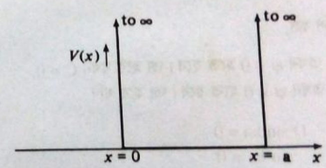
$$\int_{-\alpha}^{\alpha} \psi\psi^* d\tau = 1.$$

মুক্ত ইলেকট্রন এবং কোয়ান্টাম বলবিদ্যা

কোয়ান্টাম বলবিদ্যার সাহায্যে এবার খুব সহজ একটি সমস্যার সমাধান করা যাক। সমস্যার নাম 'বাক্সের ভেতর একটি কণা'। এই অধ্যায়ে বাক্সের ভেতরকার কণাটির জন্যে শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ সাজানো হবে এবং সমীকরণটি সমাধান করার চেষ্টা করা হবে।

১. বাক্সের ভেতর মুক্ত কণা

মনে করা যাক একটি আয়তকার বাক্সের ভেতর একটি 'বস্তু কণা' পড়ে আছে। বাক্সটি এমন যে এর বাইরে অসীম ($v = \alpha$), কিন্তু এর ভেতরে স্থৈতিক শক্তি বা পটেনশীয়াল এনার্জি শূন্য ($v = 0$)। ছবিতে যে বাক্সটি দেখানো হচ্ছে তার '0' কে আমরা অরিজিন ধরে নিচ্ছি। OA, OB, OC হচ্ছে তিনটি অক্ষ।



চিত্র (৫.১) ঃ বাক্সের ভেতর কণা।

কণাটি যখন x অক্ষের উপর দিয়ে যাবে তখন তার তরঙ্গ ফাংশান ধরা যাক $\psi(x)$. কণাটির জন্যে শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ হবে,

$$\frac{d^2}{dx^2} + \frac{8\pi^2}{h^2} \; (E - V)\psi = 0$$

যেহেতু বাক্সের ভেতর $V = 0$, কাজেই সমীকরণটির নতুন রূপ হবে,

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E\psi = 0 \quad (৫.১)$$

সমীকরণটি আরো সহজ করে লেখা যায়

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \quad (৫.২)$$

$$\left(k^2 = \frac{8\pi^2 m}{h^2} E\right) \quad (৫.৩)$$

সমীকরণ (৫.২) এর সমাধান হল,

$$\psi_{(x)} = C \cos kx + D \sin kx \quad (৫.৪)$$

কোয়ান্টাম বলবিদ্যার সূত্র অনুসারে ψ কে x এর অভগ্ন বা প্রবহমান ফাংশান হতে হবে। এর অর্থ হল যখন $x = 0$, এবং $x = a$ তখন ψ এর মান 0 হতে হবে। এই শর্তের নাম সীমা শর্ত বা বাউন্ডারী কন্ডিশান।

সীমা শর্তগুলি হল,

যখন $x = 0$ তখন $\psi = 0$ হতে হবে। তা হবে যখন $C = 0$.
যখন $x = a$ তখন $\psi = 0$ হতে হবে। তা হবে যদি

$$D \sin ka = 0$$

বা $$\sin ka = 0$$

অর্থাৎ $ka = n\pi$, $k = \frac{n\pi}{a}$

$$n = 0, 1, 2, 3, \ldots\ldots\ldots$$

n হল কোয়ান্টাম সংখ্যা

কাজেই (৫.১) সমীকরণটির সমাধান হল,

$$\psi = D \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (৫.৫)$$

বাক্সের ভেতরকার শক্তি সম্পর্কিত ধারণা আমরা পাচ্ছি সমীকরণ (৫.৩) থেকে

$$\frac{8\pi^2 m}{h^2} E = k^2$$

$$E = \frac{k^2 h^2}{8\pi^2 m} \qquad k = \frac{n\pi}{a}$$

$$= \frac{n^2 h^2}{8a^2 m} \quad (৫.৬)$$

কোয়ান্টাম সংখ্যা n এর মান 0, হতে পারে তাহলেও মনে রাখতে হবে যে $n = 0$, গ্রহণযোগ্য নয় কারণ $n = 0$ হলে (৫.৫) নং সমীকরণে ψ ও 0 হয়ে যায়। তা হতে পারে না কারণ কণাটিকে বাক্সের ভেতরই থাকতে। $\psi = 0$ হওয়ার অর্থ কণার অস্তিত্ব বিলোপ হওয়া। আমরা শুরুতেই ধরে নিয়েছি কণাটি বাক্সের ভেতর আছে।

কাজেই সর্বনিম্ন গতিশক্তি যা কণাটির হবে তা হচ্ছে $n = 1$. কোয়ান্টাম তলে কণাটির শক্তি এই শক্তিকে বলে শূন্য বিন্দু শক্তি বা জিরো পয়েন্ট এনার্জি। যার মানে,

$$E_{zero} = \frac{h^2}{8ma^2}$$

এটি পরিষ্কার বলে দিচ্ছে বাক্সের ভেতরের কণা কখনো স্থির থাকবে না এমন কি 0 কেলভিন তাপেও থাকবে না।

২. নরমালাইজেশন এবং অর্থগোনালিটি।

কণাটিকে বাক্সের ভেতর পাবার সম্ভাবনা কতটুকু?

আগেই বলা হয়েছে কণাটিকে পাবার সম্ভাবনা, সম্ভাবনা ঘনত্ব দিয়ে দেখানো হয়। সম্ভাবনা ঘনত্ব হচ্ছে $|\psi|^2$

যেহেতু কণাটি বাক্সের ভেতরই থাকবে। কাজেই বাক্সের ভেতর কণাটিকে পাবার সম্ভাবনা হল, '1'. বা ১০০ শত ভাগ। (কণাটির বাক্সের বাইরে যাবার উপায় নেই। বাক্সের বাইরে স্থিতি শক্তি অসীম।)

$$\int_0^a |\psi|^2 dx = 1$$

$$\int_0^a D^2 \sin^2 \frac{n\pi x}{a}\, dx = 1$$

আমরা জানি $2 \sin^2\theta = (1 - \cos 2\theta)$

$$\frac{D^2}{2} \int_0^a \left(1 - \cos \frac{2n\pi x}{a}\right) dx = 1$$

$$\frac{D^2}{2}(a) - \frac{D^2}{2} \int_0^a \frac{\cos 2n\pi x}{a} = 1$$

$$D^2 a/2 = 1$$

$$D^2 = \frac{2}{a}$$

$$D = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

কাজেই কণাটির জন্যে নর্মায়িত তরঙ্গ ফাংশান হবে,

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \qquad (৫.৭)$$

ধরা যাক দুটি নর্মায়িত তরঙ্গ ফাংশান ψ_n এবং $\psi_{n'}$ যা কণাটির দুটি ভিন্ন অবস্থার কথা বলছে অর্থাৎ $n \neq n'$

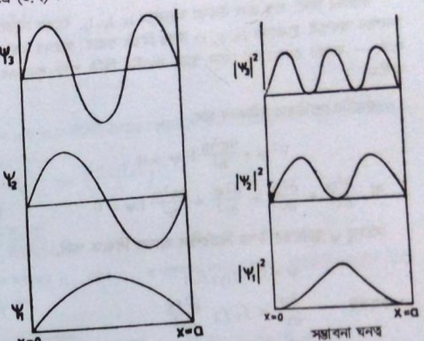
এই ক্ষেত্রে যা হবে তাহল,

$$\int_0^a \psi_n \psi_{n'}\, dx = 0 \qquad (৫.৮)$$

ভিন্ন অবস্থার দুটি ওয়েভ ফাংশানকে বলা হয় অর্থগোনাল। অর্থগোনাল তরঙ্গ ফাংশান (৫.৮) এ দেয়া শর্ত মেনে চলে।

৩. তরঙ্গ ফাংশানের ধর্ম।

নীচের চিত্রে (৫.২) বিভিন্ন কোয়ান্টাম তলে কণাটির তরঙ্গ ফাংশান এবং গতি শক্তি দেখানো হল।



চিত্র ৫.২ : তরঙ্গ ফাংশান ও সম্ভাবনার ঘনত্ব।

চিত্র ৫.২ থেকে বুঝা যাচ্ছে যে কিছু কিছু বিন্দুতে $\psi = 0$ হয়ে যাচ্ছে। এই বিন্দুগুলিকে বলা হয় নোডস। কোয়ান্টাম সংখ্যা যত বাড়ে নোডস এর সংখ্যাও তত বাড়ে। তরঙ্গ ফাংশান ψ_5 এর নোড হবে (৫-১) অর্থাৎ চারটি। তেমনি ψ_n এর নোডস হবে $(n-1)$ টি।

চিত্র ৫.২-এ কণাটিকে পাওয়ার সম্ভাবনা দেখানো হচ্ছে। যখন $n = 1$ তখন কণাটিকে বাক্সের ঠিক মাঝখানে পাওয়ার $(x = a/2)$ সম্ভাবনা সবচেয়ে বেশি, যখন $n = 2$ তখন কণাটি $x = \frac{a}{4}$ এবং $n = \frac{3}{4}a$ তে পাওয়ার সম্ভাবনা সর্বোচ্চ। মজার ব্যাপার হচ্ছে বাক্সের ঠিক মাঝামাঝিতে নোডস থাকার কারণে বাক্সের মাঝখানে কণাটি পাওয়ার সম্ভাবনা হচ্ছে শূন্য।

একটি মাত্র কণা অথচ তাকে বাক্সের দুভাগে পাওয়া যাবে মাঝখানে কেন পাওয়া যাবে না কোয়ন্টাম বলবিদ্যা তার ব্যাখ্যা দেয় না।

আয়তাকার বাক্সে কণা

একটি আয়তাকার বাক্সের ভেতর কণাটির অবস্থা কি হবে তা দেখা যাক।

বাক্সটির দৈর্ঘ্য, প্রস্থ এবং উচ্চতা যথাক্রমে l_x, l_y, l_z. বাক্সের ভেতরে কণাটির তরঙ্গ ফাংশান অবশ্যই স্থানাঙ্কের (x, y, z) উপর নির্ভর করবে। আগের মত এবারো ধরে নেয়া হচ্ছে — বাক্সের ভেতর যে কোন স্থানে কণাটির স্থিতি শক্তি শূন্য এবং বাক্সের বাইরে অসীম।

কণাটির শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ হবে,

$$\nabla^2 \psi + \frac{9\pi^2 m}{h^2} E\psi = 0 \qquad (৫.৯)$$

বা $$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} E\psi = 0 \qquad (৫.১০)$$

যেহেতু ψ স্থানাঙ্কের উপর নির্ভরশীল আমরা লিখতে পারি,

$$\psi = f_{(x)} f_{(y)} f_{(z)}$$

কাজেই $$\frac{\partial\psi}{\partial x^2} = f_y f_2 \cdot \frac{\partial^2 f_x}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = f_x f_z \frac{\partial^2 f_y}{\partial y^2}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = f_x \cdot f_y \frac{\partial^2 f_z}{\partial z^2}$$

কাজেই সমীকরণ (৫.১০) কে আমরা এইভাবে লিখতে পারি

$$f_{(y)} \cdot f_{(z)} \frac{\partial^2 f_{(x)}}{\partial x^2} + f_{(x)} \cdot f_{(z)} \frac{\partial^2 f_{(y)}}{\partial y^2} + f_{(x)} \cdot f_{(y)} \frac{\partial^2 f_{(z)}}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}$$

$$E \cdot f_{(x)} \cdot f_{(y)} \cdot f_{(z)} = 0 \qquad (৫.১১)$$

সমীকরণ (৫.১১) কে $\frac{8\pi^2 m}{h^2} f_{(x)} f_{(y)} f_{(z)}$ দিয়ে ভাগ করে আমরা পাই,

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m}\left[\frac{1}{f_{(x)}} \cdot \frac{\partial^2 f_{(x)}}{\partial x^2} + \frac{1}{f_{(y)}} \frac{\partial^2 f_{(y)}}{\partial y^2} + \frac{1}{f_{(z)}} \cdot \frac{\partial^2 f_{(z)}}{\partial z^2}\right] + E = 0$$

সমগ্র শক্তি E কে স্থানাঙ্কের তিনটি দিকে ভাগ করে দেখানো যায়। অর্থাৎ

$$E = E_x + E_y + E_z$$

এখন আমরা লিখতে পারি

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{1}{f_{(x)}} \frac{\partial^2 f_{(x)}}{\partial x^2} = -Ex \qquad (৫.১২)$$

এই সমীকরণ এক মাত্রা বিশিষ্ট বাক্সের ভেতরের কণার সমীকরণের অনুরূপ কাজেই,

$$f_{(x)} = \sqrt{\frac{2}{l_x}} \sin\left(\frac{n_x \pi . x}{l_x}\right)$$

$$E_x = \frac{n_x^2 h^2}{8m l_x^2} \qquad (৫.১৩)$$

একই রকম সমাধান $f_{(y)}$ এবং $f_{(z)}$ র জন্যেও পাওয়া যাবে। কাজেই কণাটির সমগ্র তরঙ্গ ফাংশান ψ হবে,

$$\psi_{(x,\,y,\,z)} = \sqrt{\frac{8}{l_x l_y l_z}} \sin\frac{n_x \pi x}{l_x} \cdot \sin\frac{n_y \pi y}{l_y} \sin\frac{n_z . \pi . z}{l_z}$$

এখানে n_x, n_y, n_z হচ্ছে তিনটি কোয়ান্টাম সংখ্যা। প্রতিটি অবস্থায় (state) তিনটি কোয়ান্টাম সংখ্যা হল ত্রিমাত্রিক শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ সমাধানের ফল। কোয়ান্টাম বলবিদ্যার এটি একটি বৈশিষ্ট্য। যেহেতু প্রতি অবস্থায় তিনটি করে কোয়ান্টাম সংখ্যা পাওয়া যাচ্ছে সেহেতু একই শক্তি বিশিষ্ট কয়েকটি ভিন্ন উত্তেজিত অবস্থার (Exited state) কল্পনা করা সম্ভব, যেখানে এদের শক্তি হবে অভিন্ন। ব্যাপারটি ব্যাখ্যা করার জন্যে এমন একটি বাক্সে কণাটির কথা ভাবা যাক যেখানে $l_x = l_y = l_z$ অর্থাৎ বাক্সটি হচ্ছে একটি ঘনক বা 'কিউব'। এখানে n_x, n_y, n_z এই তিনটি কোয়ান্টাম সংখ্যার কারণে তিনটি মুক্ত অবস্থা (independent state) পাওয়া যাবে যেমন, কোয়ান্টাম সংখ্যা (2, 1, 1), (1, 2, 1), (1, 1, 2). তিনটি সম্পূর্ণ পৃথক মুক্ত অবস্থা (independent state), যদিও এদের শক্তি সমান, $6h^2/8ml^2$. এই সমশক্তি বিশিষ্ট পৃথক মুক্ত অবস্থাকে বলে চ্যুতি বা ডিজেনারেসি (degeneracy). এই ক্ষেত্রে ডিজেনারেসী সংখ্যা হচ্ছে তিন।

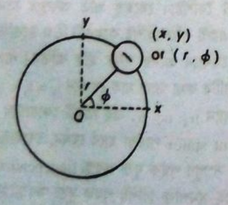
নিচের সারণীর কিছু শক্তিতল এবং ডিজেনারেসি দেখানো হল।

সারণী ৫.১

শক্তিতল (Energy level)	কোয়ান্টাম সংখ্যা (n_x, n_y, n_z)	ডিজেনারেসী
$\frac{3\pi^2h^2}{8ml^2}$	(1, 1, 1)	এক মাত্রিক অবস্থা
$\frac{6\pi^2h^2}{8ml^2}$	(2, 1, 1) (1, 2, 1) (1, 1, 2)	ত্রিমাত্রিক ডিজেনারেসী
$\frac{9\pi^2h^2}{8ml^2}$	(2, 2, 1) (2, 1, 2), (1, 2, 2)	ত্রিমাত্রিক ডিজেনারেসী
$\frac{11\pi^2h^2}{8ml^2}$	(3, 1, 1) (1, 3, 1) (1, 1, 3)	ত্রিমাত্রিক ডিজেনারেসী
$\frac{12\pi^2h^2}{8ml^2}$	(2, 2, 2)	এক মাত্রিক অবস্থা

২. বৃত্তের পরিধিতে ইলেকট্রন।

কল্পনা করা যাক যে একটি ইলেকট্রন ঘুরছে বৃত্তের পরিধিতে। যেখানে তার স্থিতি শক্তি শূন্য কিন্তু পরিধির বাইরে গেলেই স্থিতি শক্তি হয়ে যাচ্ছে অসীম। অর্থাৎ ইলেকট্রনটির পরিধির বাইরে যাবার ক্ষমতা নেই।



চিত্র ৫.৩ঃ বৃত্তের পরিধিতে ইলেকট্রন

ইলেকট্রন e বৃত্তের কেন্দ্র থেকে r দূরত্বে ঘুরছে। ইলেকট্রনটির যাত্রাপথে স্থানাংক x, y দিয়ে বর্ণনা করা যায়।

ইলেকট্রনটির জন্যে শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ হবে,

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E)\,\psi = 0 \qquad (৫.১৫)$$

সমীকরণটির সমাধান সহজ হবে যদি আমরা কার্টেসিয়ান স্থানাঙ্কের পরিবর্তে পোলার স্থানাঙ্ক ব্যবহার করি,

যেহেতু $x = r\cos\phi$

$y = r\sin\phi$

$r = (x^2 + y^2)^{1/2} \quad \tan\phi = \frac{y}{x}$.

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2}$$

পোলার স্থানাংকে শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ হবে

$$\frac{1}{r^2}\frac{d^2\psi}{d\phi^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}E\psi = 0 \qquad (৫.১৬)$$

এই দ্বিতীয় ক্রম অন্তরক বা সেকেন্ড অর্ডার ডিফারেনসিয়েল সমীকরণের দুটি সমাধান।

$\psi_1 = N_1 \sin M\phi$

$\psi_2 = N_2 \cos M\phi$

যেখানে $M^2 = \frac{8\pi^2 mr^2}{h^2}.E$

N_1 এবং N_2 হচ্ছে নর্মায়িত ধ্রুবক। বৃত্তের পরিধিতে ঘুরে বেড়ানো ইলেকট্রনের বিভিন্ন শক্তিতলে (energy level) শক্তির পরিমাণ নিচের সমীকরণ থেকে পাওয়া যাবে।

$$E = \frac{M^2h^2}{8\pi^2 mr^2} \qquad M = 0, 1, 2 \ldots\ldots\ldots \qquad (৫.১৭)$$

'বাক্সের ভেতর কণা' সমস্যার সঙ্গে এই সমস্যার মিল দর্শনীয়। অমিল একটি জায়গায় কোয়ান্টাম সংখ্যা M এর মান এই ক্ষেত্রে শূন্য হতে পারে।

রসায়নে মুক্ত কণা সমস্যার প্রয়োগ

বাক্সে কণা সমস্যার কোন বাস্তব প্রয়োগ আছে কি–না দেখা যাক। পলিইন অণু অনেক দিক দিয়েই একমাত্রা বিশিষ্ট বাক্সের কাছাকাছি। সেই বাক্সের দৈর্ঘ পলিইনের দৈর্ঘের সমান। পলিইনের π ইলেকট্রন হচ্ছে বাক্সের ভেতরকার মুক্ত কণা। এই কণা অণুর দৈর্ঘ বরাবর ছোটাছুটি করতে পারবে কিন্তু অণুর বাইরে যেতে পারবে না। উদাহরণ দিয়ে বিষয়টি স্পষ্ট করা যাক। বাক্সে মুক্ত কণা সমস্যা বিউটাডাইইনের ক্ষেত্রে প্রয়োগ করলে ফলাফল কি পাওয়া যায় — তাই আমরা দেখছি।

বিউটাডাইটনের অণুতে চারটি π ইলেকট্রন আছে। ইলেকট্রনগুলি সাজানো থাকবে এইভাবে,

$n = 1$ শক্তিতলে দুটি এবং $n = 2$ শক্তিতলে দুটি।

উত্তেজিত অবস্থায় বিউটাডাইইনের $n = 2$ শক্তিতল থেকে একটি ইলেকট্রন যাবে $n = 3$ শক্তি তলে, কাজেই

$$\Delta E = \frac{3^2h^2}{8ml^2} - \frac{2^2h^2}{8ml^2} = \frac{5h^2}{8ml^2}$$

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda}$$

কাজেই $\qquad \dfrac{hc}{\lambda} = \dfrac{5h^2}{8ml^2}$

$$l = \sqrt{5h\lambda/8mc} \qquad (৫.১৮)$$

দেখা গেছে বিউটাডাইটন 2150 Å তরঙ্গ দৈর্ঘ্যে আলো শোষণ করে (λ = 2.50 Å).

সমীকরণ (৫.১৮)–তে তরঙ্গ দৈর্ঘ্যের মান বসিয়ে আমরা বিউটাডাইনের অণুর দৈর্ঘ পাওয়া যায়। যেমন,

$$l = \sqrt{5h\, 2150/8mc} = 5.52 \text{ Å}.$$

এই মান ইলেকট্রন ডিফ্রেকশনের মাধ্যমে পাওয়া মানের (3.66) কাছাকাছি নয়। বাক্স কণা সমস্যা থেকে পাওয়া বিভিন্ন পলিইনের তরঙ্গ দৈর্ঘ এবং ইলেকট্রন ডিফ্রেকশান পরীক্ষায় পাওয়া তরঙ্গ দৈর্ঘের মান সারণী (৫.২) এ দেয়া হল। তুলনামূলক পর্যালোচনা করলে দেখা যাবে π ইলেকট্রনের সংখ্যা বৃদ্ধির সঙ্গে সঙ্গে দু পদ্ধতিতে পাওয়া মান কাছাকাছি চলে আসে।

সারণী ৫.২

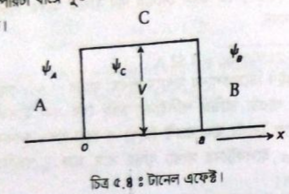
পলিইনের ক্ষেত্রে বাক্সে কণা সমস্যার প্রয়োগ

পলিইন	π ইলেকট্রনের সংখ্যা	সর্বোচ্চ শোষণ	বাক্সে কণা সমস্যা থেকে পাওয়া মান	X রশ্মি ডিফ্রেকশান থেকে পাওয়া মান
বিউটাডাইইন	৪	২১৫০	৫.৫২	৩.৫৫
হেক্সাট্রাইইন	৬	২৫০০	৭.৩০	৬.১০
ওক্টাট্রাইইন	৪	২৯০০	৮.৯০	৮.৬০

পলিইনের ক্ষেত্রে 'বাক্সে মুক্ত কণার' যে প্রয়োগ করা হয়েছে, ঠিক একই ধরনের প্রয়োগ করা যায় 'বৃত্তের পরিধিতে ইলেকট্রন' সমস্যার। বেনজিন অণুর π ইলেকট্রনকে বৃত্তের পরিধিতে ইলেকট্রন যার ব্যাসার্ধ ০.১৪ × ১০ $^{-৯}$ মিটার সমস্যা হিসেবে ধরা যেতে পারে।

বাক্সে মুক্ত কণার আরেকটি প্রয়োগ আছে রসায়নিক গতিবিদ্যায়। রসায়নিক বিক্রিয়ার গতি শক্তি বাধার (energy barrier) উপর নির্ভরশীল। এই শক্তি বাধাকে বাক্সে মুক্ত কণা সমস্যার কাছাকাছি নিয়ে আসা যায়। একটি বাক্স কল্পনা করা যাক, যার দৈর্ঘ a, বাক্সের ভেতর স্থিতিশক্তির নির্দিষ্ট মান আছে, কিন্তু বাক্সের বাইরে এই মান শূন্য (চিত্র ৫.৫)। ইলেকট্রন A থেকে B তে যেতে পারে, কিন্তু যেতে হলে তাকে শক্তি বাধা C অতিক্রম

করতে হয়। ব্যাপারটা বাক্সে মুক্ত কণার ঠিক উল্টো। রসায়নে এই সমস্যা টানেল এফেক্ট হিসেবে পরিচিত।



চিত্র ৫.৪ : টানেল এফেক্ট।

সমস্যা ও সমাধান

১. একটি ইলেকট্রন 10A° দৈর্ঘের একটি একমাত্রা বাক্সে আবদ্ধ। ইলেকট্রনটির সর্বনিম্ন শক্তি কত? দেয়া আছে $h = 6.6262 \times 16^{-34}$ J. sec.

$$m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg.}$$

উত্তর $$E = \frac{n^2h^2}{8ml^2} = \frac{1^2 . (6.6262 \times 10^{-34})^2}{8 \times (9.11 \times 10^{-31}) (10^{-10})^2}$$

$$1 \text{ A}^\circ = 10^{-10} \text{ meter.}$$

$$= 6. \times 10^{-18} \text{ J.}$$

২. একটি ঘনকের (cube) বাহুর দৈর্ঘ 1 A°. এই বাক্সে বন্দি ইলেকট্রনের সর্বনিম্ন শক্তি কত হবে?

উত্তর : $$E = \frac{h^2}{8ml^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

সর্বনিম্ন শক্তি তখনি হবে যখন

$$n_x = n_y = n_z = 1$$

কাজেই $$E = \frac{3h^2}{8ml^2} = \frac{3(6.6262 \times 10^{-34})^2}{8(9.11 \times 10^{-31}) (10^{-10})^2}$$

$$= 18.03 \times 10^{-18} \text{ J.}$$

প্রশ্নমালা

১. ক. বাক্সে আবদ্ধ কণার জন্যে শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ প্রতিপাদ কর এবং কণার শক্তি আইগেন মানের জন্যে সমীকরণের সমাধান কর।

খ. দেখাও যে কণাটির জন্যে $n = 0$ অবস্থা অনুমোদিত নয়।

২. m ভর বিশিষ্ট একটি কণা অভেদ্য দেয়াল $x = 0$ এবং $x = a$ র মধ্যে আবদ্ধ। দেখাও যে কণাটির শক্তিতল

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8ma^2}$$

কণাটির তরঙ্গ ফাংশান বের কর।

৩. m ভর বিশিষ্ট একটি কণা একটি a দৈর্ঘ্য বিশিষ্ট ঘনকের (cube) ভেতর আবদ্ধ। কোয়ান্টাম বলবিদ্যায় অনুযায়ী কণাটির শক্তি সম্পর্কিত সমীকরণ কি হবে? এই শক্তি কিভাবে বস্তুর ভরের উপর এবং বাক্সের আয়তনের উপর নির্ভরশীল?

৪. একটি 1 cm দৈর্ঘ্য বিশিষ্ট ঘনকের (cube) এর ভেতর একটি ইলেকট্রন ঘুরে বেড়াচ্ছে। ইলেকট্রনটিকে সর্বনিম্ন শক্তিতল থেকে $n_x = 2, n_y = 1, n_z = 1$ এবং (b) $n_x = 1, n_y = 2\ n_2 = 1$ শক্তিতলে আনতে কি পরিমাণ শক্তির প্রয়োজন?

সরল ছন্দিত স্পন্দন

সরল ছন্দিত গতি হল এক ধরনের পর্যাবৃত্ত (periodic) গতি। মধ্যক অবস্থান থেকে দোদুল্যমান গতিকে ছন্দিত গতি বলা যায়। কল্পনা করা যাক একটি বস্তুর উপর বল এমনভাবে কাজ করছে যে (১) বলের দিক বস্তুটির মধ্যক অবস্থানের দিকে এবং (২) বলের মান মধ্যক অবস্থান থেকে বস্তুটির দূরত্বের সমানুপাতিক। বস্তুটির এই গতি সরল স্পন্দিত গতি (Simple Harmonic motion).

সকল বস্তুর পরমাণুতেই সরল স্পন্দিত গতি ধর্ম আছে। পরম শূন্য তাপমাত্রায় পরমাণুগুলি হয়তবা স্থির কিন্তু তাপ তারচেয়ে বাড়লেই পরমাণু জাফরি (Lattice) অবস্থানের দু পাশে দুলতে থাকে। দোলনমান তাপমাত্রা বৃদ্ধির সঙ্গে সঙ্গে বাড়ে। সনাতন বলবিদ্যায় সরল স্পন্দিত গতি খুব ভালভাবেই ব্যাখ্যা করা যায়।

সনাতন বলবিদ্যা ও সরল ছন্দিত গতি

ধরা যাক বল F কাজ করছে একটি বস্তুর উপর যার ভর m. বল প্রয়োগের কারণে বস্তুটি তার মধ্যক অবস্থান থেকে সরে গেল। এই সরে যাওয়ার পরিমাণ হল x. তাহলে, হুক সূত্র অনুযায়ি ;

$$F = -kx \qquad (৬.১)$$

এখানে k হল বলাত্মক ধ্রুবক।

নিউটনের গতির দ্বিতীয় সূত্র অনুযায়ী ;

$$F = m\frac{d^2x}{dt^2} \qquad (৬.২)$$

কাজেই বস্তুটির গতির নিউটনীয় সমীকরণ হবে,

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

বা, $$\frac{d^2x}{dt^2} = -\left(\frac{k}{m}\right)x = -\omega^2 x \qquad (৬.৩)$$

যেখানে $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

সমীকরণ ৬.৩ এর সাধারণ সমীকরণ হল ;

$$x = A\sin(\omega t - \theta) \qquad (৬.৪)$$

এখানে A এবং θ হল ধ্রুবক। সমীকরণকে ৬.৪ এবং ৬.৩ থেকে কম্পনাংক ν এর মান পাওয়া যায়

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}$$

বস্তুটির স্থিতি শক্তি V (x) র মান হল,

$$V = \int_0^x dv = \int_0^x \frac{dv}{dx}.dx = \int_0^x kx\,dx = \frac{1}{2}kx^2$$

$$\text{যেহেতু } \frac{dv}{dx} = -F = -(-kx) = kx$$

$$\frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \qquad (৬.৫)$$

বস্তুটির গতিশক্তি K হল,

$$K = \frac{1}{2}m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 = \frac{1}{2}mA^2\omega^2\cos^2(\omega t + \theta)$$

$$= \frac{1}{2}m\omega^2A^2\left[1 - \sin^2(\omega t + \theta)\right]$$

$$= \frac{1}{2}m\omega^2(A^2 - x^2) \qquad (৬.৬)$$

বস্তুটির মোট শক্তি E হল ;

$$E = K + V$$

$$= \frac{1}{2}m\omega^2(A^2 - x^2) + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

$$= \frac{1}{2} m\omega^2 A^2 \qquad (৬.৭)$$

সমীকরণ ৬.৭ বলছে সরল ছন্দিত গতির গতি সম্পন্ন বস্তুর মোট শক্তি বিস্তারের বর্গের উপর নির্ভর করবে। সনাতন বলবিদ্যা বলছে যেহেতু বস্তু যে কোন বিস্তারে কাঁপতে পারে সেহেতু বস্তুর মোটশক্তি নিরবিচ্ছিন্নভাবে বিস্তারের সঙ্গে সঙ্গে বাড়তে বা কমতে পারে।

কোয়ান্টাম বলবিদ্যা ও সরল ছন্দিত গতি

সরল গতিসম্পন্ন কোন বস্তুর সময় শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ হল ;

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E-V)\,\psi = 0 \qquad (৬.৮)$$

সমীকরন ৬.৫ থেকে স্থিতিশক্তি Vর মান বসিয়ে পাওয়া যায়

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{8mE\pi^2}{h^2} - \frac{4\pi^2 m^2\omega^2}{h^2}x^2\right) = 0 \qquad (৬.৯)$$

সমীকরণ ৬.৯ হল কম্পকের শ্রোডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণ। এই সমীকরণের সমাধানের জন্যে একটি মাত্রানিরপেক্ষ পরিবর্তক 'y' ব্যবহার করা যায় যেখানে ;

$$y = \sqrt{\frac{2\pi m\omega}{h}}\,x \qquad (৬.১০)$$

নতুন পরিবর্তক y ব্যবহার করে যে শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ পাওয়া যায় তা হল,

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + \left(\frac{4\pi E}{h\omega} - y^2\right)\psi = 0 \qquad (৬.১১)$$

বা $\frac{d^2\psi}{dy^2} + (\lambda - y^2)\,\psi = 0$ (৬.১২)

যেখানে $\lambda = \frac{4\pi E}{h\omega}$

সমীকরণ ৬.১২ এর সমাধান হল ;

$$\psi = e^{-y^2/2}\, H(y) \qquad (৬.১৩)$$

H (y) হচ্ছে y এর সসীম পলিনমিয়েল যা হারমাইট (Hermite) পলিনমিয়েল নামে পরিচিত।

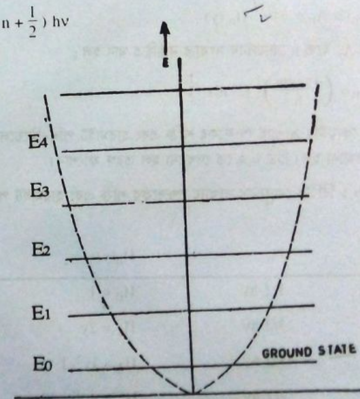
পলিনমিয়েল H (y) হল দুটি অসীম অনুক্রম বা সিরিজের যোগফল। যার অর্থ হল y যখন অসীম হবে ψ ও হবে অসীম। এটি গ্রহণযোগ্য নয়। সমাধান গ্রহণযোগ্য করার জন্যে এমন শর্ত আরোপ করতে হবে যেন কোন এক পর্যায়ে অর্থাৎ n এর কোন এক মানে H (y) সিরিজে ছেদ ঘটে। এই শর্ত পালনের জন্যে সমীকরণ ৬.১২ এ λ র মানকে হতে হবে 2n + 1 এর সমান।

$$\lambda = (2n + 1) \qquad (৬.১৪)$$

$$\frac{4\pi E}{h\omega} = (2n + 1) \qquad (৬.১৫)$$

$E_n = (n + \frac{1}{2})\frac{h}{2\pi}\omega$ $\qquad \omega = 2\pi\nu$ বসিয়ে

$$= (n + \frac{1}{2})\, h\nu \qquad (৬.১৬)$$



চিত্র ৬.১ ঃ সরল ছন্দিত গতি স্পন্দকের শক্তিতল।

যেখানে $n = 0, 1, 2 \ldots\ldots$

সমীকরণ ৬.১৬ থেকে আমরা নিম্নলিখিত সিদ্ধান্তে আসতে পারি।

(ক) একটি স্পন্দকের সর্বনিম্ন শক্তি হবে যখন $n = 0$, অর্থাৎ

$$E_0 = \frac{1}{2} h\nu \qquad (৬.১৭)$$

এই শক্তি হল স্পন্দকের ভূমি স্তর (Ground level) শক্তি বা শূন্য বিন্দু স্পন্দন শক্তি। অন্যান্য স্তরের শক্তি E_n হবে (চিত্র ৬.১)

$$E_n = (2n + 1) E_0 \qquad n = 0, 1, 2, 3 \qquad (৬.১৮)$$

(খ) যেহেতু আইগেন মান শুধুমাত্র কোয়ন্টাম সংখ্যা n এর উপর নির্ভরশীল শক্তিতল সেই কারণেই অনাপজাত (non degenerate).

ছন্দিত স্পন্দনের পূর্ণ তরঙ্গ ফাংশান হল

$$\psi_n = A_n e^{-y^2/2} H_n(y) \ldots\ldots$$

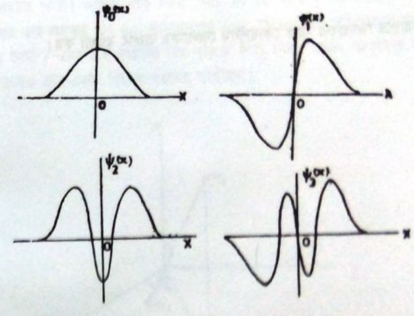
যেখানে A_n হচ্ছে n কোয়ান্টাম সংখ্যার নর্মায়িত মান হল ;

$$A_n = \left(\frac{4\pi^2 \nu m}{h}\right)^{\frac{1}{4}} (2^n n!)^{-\frac{1}{2}} \qquad (৬.১৯)$$

বিভিন্ন কোয়ন্টাম সংখ্যায় স্পন্দকের শক্তি এবং হারমাইট পলিনমিয়েলের মান সারণী ৬.১ এ এ দেখানো হল। চিত্র ৬.২ তে দেখানো হল তরঙ্গ ফাংশান।

সারণী ৬.১ বিভিন্ন কোয়ন্টাম সংখ্যায় স্পন্দকের শক্তি এবং হারমাইট পলিনমিয়েলের মান।

n	E_n	$H_n(y)$
0	1/2 hν	$H_0 = 1$
1	3/2 hν	$H_1 = 2y$
2	5/2 hν	$H_2 = 4y^2 - 1$
3	7/2 hν	$H_3 = 8y^3 - 12y$
4	9/2 hν	$H_4 = 16y^4 - 48y^2 + 12$



চিত্র ৬.২ ঃ বিভিন্ন কোয়ান্টাম সংখ্যায় স্পন্দনের তরঙ্গ ফাংশান।

প্রশ্নমালা

১. সরল ছন্দিত স্পন্দনের শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ প্রতিপাদকরণ এবং দোলকের শক্তির আইগেন মান বের কর।

২. একমাত্রিক ছন্দিত দোলকের n তম অবস্থার তরঙ্গ ফাংশানের রাশিমালা বের কর।

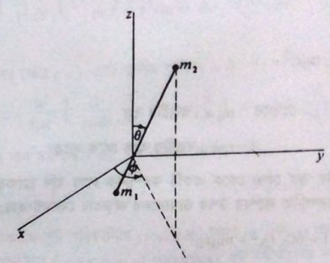
৩. কোয়ান্টাম বলবিজ্ঞান অনুসরণে একমাত্রিক ছন্দিত দোলকের আইগেন মান ও আইগেন ফাংশান বের কর।

৪. একটি দোলকের পর্যায়কাল 10^{5} সেকেন্ড। তার শূন্য বিন্দু শক্তি ইলেকট্রন ভোল্টে বের কর।

৫. চিরায়ত দোলকের সঙ্গে কোয়ান্টাম দোলকের তফাৎ ব্যাখ্যা কর।

সুদৃঢ় ঘূর্ণক

দুটি মাত্র পরমানু আছে এমন সব অণুকে আমরা জিমনিসিয়ামের ডামবেল হিসেবে হিসেবে ভাবতে পারি। আমরা ধরে নিতে পারি যে দ্বি পরমাণু বিশিষ্ট অণু এমন এক ডামবেল যার এক প্রান্তের ভর m_A অন্যপ্রান্তের m_B. যে দন্ড এই দুটি বলকে যোগ করে আছে তার দৈর্ঘ্য r এবং এই দন্ডটির ভর বলতে কিছু নেই। অর্থাৎ অণুটিকে ডামবেল কল্পনা করলেও এটা একটা বিশেষ ধরনের ডামবেল।



চিত্র ৭.১ ঃ ডামবেল সদৃশ দ্বিপরমাণু বিশিষ্ট অণু।

আমরা জানি অণুদের ঘূর্ণায়মান গতি আছে। একটি দ্বিপরমাণু বিশিষ্ট অণু নিজের অক্ষের উপর ঘুরতে পারে আবার অক্ষের উপর টানা লম্বের চারদিকেও ঘুরতে পারে। তড়িৎ এবং চৌম্বক ক্ষেত্রের প্রভাব যখন থাকে না তখন ঘূর্ণায়মান গতির কারণে স্থানীয় শক্তি বা পটেনশিয়াল এনার্জির কোন পরিবর্তন হয় না। কোয়ান্টাম বলবিদ্যার সাহায্যে দ্বিপরমাণু বিশিষ্ট অণুর ঘূর্ণন সমস্যার সমাধান কিছুটা জটিল।

স্ফেরিকেল পোলার স্থানাংকের সাহায্যে সমস্যার সমাধান কোয়ান্টাম বলবিদ্যায় দেয়ার চেষ্টা করা যাক। ছবিতে (চিত্র ৭.১) বিষয়টি দেখানো হয়েছে। ডামবেলের ভর কেন্দ্রকে রাখা হয়েছে স্থানাংকের শূন্য বিন্দু বা অক্ষকেন্দ্রে।

ভরকেন্দ্রের সংজ্ঞা থেকে আমরা জানি

$$m_B r_B = m_A r_A \qquad (৭.১)$$

ডামবেলের সংযোগকারী দন্ডটির দৈর্ঘ্য যদি r হয়। তাহলে

$$r = r_A + r_B$$

কাজেই $r_A = \frac{m_B}{m_A + m_B} r$ এবং $r_B = \frac{m_A}{m_A + m_B}$ (৭.২)

এখন এই ঘূর্ণায়মান ডামবেলের জড়তার মোমেন্ট (Moment of inertia) কী হবে? আমরা জানি একটি বস্তুর তিনটি প্রধান মোমেন্ট অব ইনারশিয়া থাকে, যা তিনটি অক্ষের (x, y, z) দিকে।

$$I = \sum_i m_i r_i^2 \qquad (৭.৩)$$

যেখানে m_i = i বস্তুটির ভর

r_i = i বস্তুটির অক্ষ থেকে দূরত্ব

ডামবেলটির ভর কেন্দ্র থেকে একটি কাল্পনিক লম্ব যদি অক্ষের উপর টানা হয় তাহলে সেই কাল্পনিক লম্বের উপর ডামবেলের জড়তার মোমেন্ট হবে,

$$I = m_A r_A^2 + m_B r_B^2$$

কাজেই $I = \left(\frac{m_A m_B}{m_A + m_B}\right) r^2 = \mu r^2$ (৭.৪)

μ হচ্ছে ডামবেলের সংক্ষেপিত ভর (Reduced mass)।

এখন কোয়ান্টাম কৌশলের সাহায্যে ঘূর্ণায়মান ডামবেল সমস্যাটির সমাধান বের করা যাক। আমরা তিনটি সহজ ধাপে তা করব

১. ঘূর্ণায়মান ডামবেলের জন্যে চিরায়ত হেমিলটনিয়ান (H) বের করব।

২. চিরায়ত হেমিলটনিয়ানকে কোয়ান্টাম মেকানিক্যাল অপারেটরে (H) রূপান্তরিত করা হবে।

৩. আইগেন মান সমীকরণ $H\psi_i = E\psi_i$ এর সমাধান বের করব।

আলোচ্য ব্যবস্থা (System) টির চিরায়ত হেমিলটনিয়ান হচ্ছে

$$H = \frac{1}{2\mu}(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) \qquad (৭.৫)$$

যেখানে P হচ্ছে ভরবেগ। এবং μ সংক্ষেপিত ভর।

এই হেমিলটনিয়ানের কোয়ন্টাম মেকানিক্যাল অপারেটর হল,

$$H = \frac{h^2}{8\mu} \nabla^2 \qquad (৭.৬)$$

স্পেরিকেল পোলার স্থানাংকে ∇^2 এর মান বসিয়ে দিলে আমরা পাই,

$$H = \frac{h^2}{8\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \qquad (৭.৭)$$

ডামবেলের ক্ষেত্র r = o এবং স্থানীয় শক্তি v = 0

$$H = -\frac{h^2}{8\mu r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \qquad (৭.৮)$$

আইগেন মান সমীকরণে এই মান বসিয়ে আমরা পাই,

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{8\pi^2 I}{h^2}E\psi = 0 \qquad (৭.৯)$$

এই সমীকরণে দুটি পরিবর্তনীয় (variable) কোণ (θ এবং ϕ) আছে। 'পরিবর্তনীয়' পৃথকীকরণ পদ্ধতিতে (seperation of variables) এই সমীকরণের সমাধান সম্ভব। ধরে নেই যে Ψ কে θ এবং Φ এই দুটি ফাংশানের পৃথক করা যায়। যার একটি শুধু θ এর উপর অন্যটি Φ এর উপর নির্ভরশীল।

$$\Psi(\theta, \phi) = \Theta(\theta)\,\Phi(\phi) \qquad (৭.১০)$$

সমীকরণ (৭.৯) এ Ψ এর মান বসিয়ে প্রয়োজনীয় সরলিকরণের পর যা পাওয়া যায় তা হল।

$$\frac{\sin\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \frac{8\pi^2 I}{h^2}\sin^2\theta = -\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} \qquad (৭.১১)$$

সমীকরণ ৭.১১ 'র দুটি অংশকে ধ্রুবক m^2 এর সমান দেখালে আমরা দুটি অন্তরক (Differential) সমীকরণ পাব। দুটি সমীকরণেই একটি মাত্র পরিবর্তক। সমীকরণ দুটি হল

$$\frac{d^2\Phi}{d\phi^2} + m^2\Phi = 0 \qquad (৭.১২)$$

এবং $$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial\theta}\right) + \left(\beta - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\theta = 0 \qquad (৭.১৩)$$

এখানে $\beta = \frac{8\pi^2 I}{h^2} E$

সমীকরণ ৭.১২ এর সমাধান হল,

$$\Phi = C\, e^{\pm im\phi} \qquad (৭.১৪)$$

এই সমাধান তখনি গ্রহণযোগ্য হবে যখন m হবে একটি পূর্ণ সংখ্যা। কারণ গ্রহণযোগ্য সমাধানের জন্যে ϕ কে হতে হবে এক মান বিশিষ্ট (single valued). একমান বিশিষ্ট হতে হলে,

$$\Phi(\phi) = \Phi(2\pi + \phi) \qquad (৭.১৫)$$

শর্ত মেনে চলতে হবে। অর্থাৎ

$$e^{im\phi} = e^{im(\phi + 2\pi)} \qquad (৭.১৬)$$

সমীকরণ ৭.১৬ র শর্ত মানতে হলে $2\pi mi$ এর মান হতে হবে এক। অর্থাৎ

$$\cos 2\pi m + i \sin 2\pi m = 1 \qquad (৭.১৭)$$

যা তখনি সত্যি হবে যখন $m = 0, \pm1, \pm2, \pm3$

নর্মায়ন শর্ত পালনের পর ধ্রুবক 'C'র মান পাওয়া যায় $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$, কাজেই সমীকরণ (৭.১২) র পূর্ণ সমাধান হল,

$$\Phi_{\pm m}(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm(im\phi)} \qquad (৭.১৮)$$

সমীকরণ ৭.১৪ এর সমাধান খানিকটা জটিল। হাইড্রজেন পরমাণু ব্যাখ্যায় এই জাতীয় সমস্যার পূর্ণ সমাধান করা হয়েছে বলে এখানে আর করা হল না। শুধু উত্তর দিয়ে দেয়া হল।

$$\theta_{(\theta)} = \sqrt{\frac{2l+1}{2}\cdot\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\, P_l^{|m|}\cos\theta$$

(৭.১৯)

$P_l^{|m|}\cos\theta$ হল সহযাগী লিজেনড্রি পলিনমিয়েল যেখানে l এর মান হয় শূন্য অথবা

$$l \geq |m|$$

l এর মানও হবে পূর্ণসংখ্যা যেমন $l = 0, 1, 2, \ldots\ldots$ ইত্যাদি। l এর যে কোন একটি মানের জন্যে m এর $(2l+1)$ সংখ্যক মান পাওয়া যাবে। যেমন $l, (l-1), (l-2) \ldots\ldots 0, \ldots\ldots - (l-1), -(l-2), -l.$

সমীকরণ ৭.১৯ এর সমাধান এবং l এর উপর আরোপিত শর্ত থেকে দৃঢ় ঘূর্ণকের ঘূর্ণায়মান গতি শক্তি পাওয়া যায়।

$$E = \frac{l(l+1)h^2}{8\pi^2 I} \qquad (৭.২০)$$

হাইড্রোজেন পরমাণু

হাইড্রোজেন হচ্ছে সবচে সরল ধরনের পরমাণু। প্রকৃতির শুধু এই পরমাণুতেই কোন নিউট্রন নেই। একটি প্রোটন, প্রোটনের চারপাশে ঘূর্ণায়মান ইলেকট্রন নিয়ে হাইড্রোজেন পরমাণু।

পরমাণুর স্থিতিশক্তির পুরোটাই আসে ইলেকট্রন এবং প্রোটনের কুলম্বিক আকর্ষণ থেকে। v একটি ইলেকট্রনকে অসীম দূরত্ব থেকে হাইড্রোজেন পরমাণুর কাছে (অর্থাৎ যে অবস্থানেইলেকট্রন থাকে সেই অবস্থানে) যে 'কাজ' করতে হয় তাই হচ্ছে পরমাণুর স্থিতি শক্তি। অর্থাৎ

$$v = \int_r^{\alpha} F.dr = \int_r^{\alpha} -\frac{e^2.z}{r^2}\,dr = -\frac{e^2.z}{r} \qquad (৮.১)$$

e হচ্ছে ইলেকট্রনের বৈদ্যুতিক আধান। (১.৬০২২ × ১০^{−১৯} কুলম্ব)
z পারমাণবিক সংখ্যা, এই ক্ষেত্রে ১
r নিউক্লিয়াস থেকে ইলেকট্রনের দূরত্ব।

হাইড্রোজেন পরমাণুর জন্যে শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ হবে,

$$\Delta^2\psi_{(x,y,z)} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{z.e^2}{r}\right)\psi_{(x,y,z)} = 0 \qquad (৮.২)$$

শ্রোডিঙ্গার সমীকরণকে এই ক্ষেত্রে কিছুটা সরলীকরণ করা হয়েছে। শুধুমাত্র ইলেকট্রনের ঘূর্ণন গতিকে হিসেবে ধরা হয়েছে। কেন্দ্রীনের গতিকে ধরা হয়নি। দুটি বস্তুর গতিকে ধরা হলে সমীকরণে ইলেকট্রনের ভরের (m) জায়গায় সংক্ষেপিত ভর (reduced mass) μ ব্যবহার করতে হত। সংক্ষেপিত ভর μ হচ্ছে,

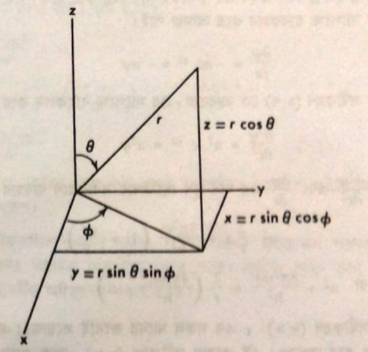
$$\mu = \frac{m_e\, m_n}{m_e + m_n}$$

যেখানে m_n হলে কেন্দ্রীনের ভর। যেহেতু ইলেকট্রনের ভর প্রোটনের ভরের তুলনায় নগণ্য সেহেতু,

$$\frac{m_e\, m_n}{m_e + m_n} = m_e$$

কাজেই শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের সামান্য সরলীকরণ তেমন সমস্যার সৃষ্টি করবে না। এই সমীকরণটি সমাধানের জন্যে কার্টেসিয়ান স্থানাংকের পরিবর্তে পোলার স্থানাংক ব্যবহার করা অনেক যুক্তিযুক্ত। পোলার স্থানাংক $(x.y.z)$ এর পরিবর্তে $(r.\theta.\phi)$ ব্যবহার করা হবে।

নিচের ছবিতে কার্টেসিয়ান স্থানাংক এবং পোলার স্থানাংকের সম্পর্ক দেখানো হলো।



চিত্র ৮.১ ঃ কার্টেসিয়ান স্থানাংক ও পোলার স্থানাংকের পারস্পরিক সম্পর্ক।

পোলার স্থানংকে রূপান্তরের পর শ্রোডিঙ্গার সমীকরণটি হবে,

$$\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2.\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta.\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)$$
$$+ \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi = 0 \qquad (৮.৪)$$

(z এর মান ১ ধরা হয়েছে)

তরঙ্গ ফাংশান ψ যদি শুধুমাত্র কেন্দ্রীন থেকে ইলেকট্রনের দূরত্বের উপর নির্ভর করে তাহলে সমীকরণটি অনেক সহজ হয়ে যায়। যেমন

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\cdot\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi = 0 \qquad (৮.৫)$$

এই সমীকরণের সবচে সহজ সমাধান হল

$$\psi = e^{ra} \qquad (৮.৬)$$

a হল ধ্রুবক। এখন এই ধ্রুবকের মান বের করা যাক। সমীকরণ (৮.৬) কে r এর সাপেক্ষে ব্যবকলন করে আমরা পাই।

$$\frac{\partial\psi}{\partial r} = -ae^{ra} = -a\psi \qquad (৮.৭)$$

সমীকরণ (৮.৭) কে আবারো r এর সাপেক্ষে ব্যবকলন করে পাই

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} = a^2 \cdot e^{ra} = a^2\psi$$

$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}$ এবং $\frac{\partial\psi}{\partial r}$ এর মান মূল শ্রোডিঙ্গার সমীকরণে ব্যবহার করে আমরা পাই

$$a^2 - \frac{2}{r}a + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{y}\right) = 0$$

$$বা \quad a^2 + \frac{8\pi^2 mE}{h^2} + \frac{2}{r}\left(\frac{4\pi^2 me^2}{h^2} - a\right) = 0 \qquad (৮.৮)$$

সমীকরণ (৮.৮) r এর সকল মানের জন্যেই প্রয়োজ্য। এমন কি r যখন অসীম হবে তখনও। এই কারণে সমীকরণ (৮.৮) r মুক্ত প্রথম দুটি রাশিমালার যোগফল হবে ০ এবং r সহগ সম্পন্ন তৃতীয় রাশিমালাও হবে 0.

$$a^2 + \frac{8\pi^2 mE}{h^2} = 0 \quad এবং$$

$$\frac{2}{r}\left(\frac{4\pi^2 me^2}{h^2} - a\right) = 0$$

$$a = \frac{4\pi^2 me^2}{h^2} \qquad (৮.৯)$$

$$বা \quad \frac{1}{a} = \frac{h^2}{4\pi^2 me^2}$$

আমরা পুরানো প্রসঙ্গে ফিরে যাই। এই গ্রন্থের প্রথম অধ্যায়ে দেখানো হয়েছিল যে বোর ব্যাসার্ধ a_0 হল

$$a_0 = \frac{n^2h^2}{4\pi^2 me^2} \qquad (৮.১০)$$

শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ থেকে এখন হাইড্রোজেন পরমাণুর মোট সক্তি সম্পর্কে কি ধারণা পাওয়া যায় তা দেখা যাক। বলা হয়েছে,

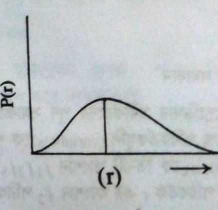
$$a^2 + \frac{8\pi^2 mE}{h^2} = 0$$

$$বা \quad \frac{8\pi^2 mE}{h^2} = a^2 = -\left(\frac{4\pi^2 me^2}{h^2}\right)^2 = -\frac{16\pi^4 e^4}{h^4}$$

$$বা \quad E = \frac{-2\pi^2 me^4}{h^2} \qquad (৮.১১)$$

প্রাপ্ত শক্তি E ও বোরের বের করা প্রথম কোয়ান্টাম নাম্বারে হাইড্রোজেন পরমাণুর শক্তির অনুরূপ।

শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের সমাধান কাজে লাগিয়ে এখন হাইড্রজেন পরমাণুর ইলেকট্রনের অবস্থানের সম্ভাবনা বের করা যেতে পারে। সর্বনিম্ন শক্তি তলে বা গ্রাউন্ড ষ্টেটে ইলেকট্রনটির অবস্থানের সম্ভাবনা কি?



চিত্র - ৮.২

আমরা দেখেছি $\psi = e^{-ar}$

এখন কেন্দ্রীন থেকে r এবং $r+dr$ এই শুধুমাত্র এই অংশটুকুতে ইলেকট্রন প্রাপ্তির সম্ভাবনা বের করা যাক। এই অংশটুকুর আয়তন হবে $4\pi r^2 dr$. সম্ভাবনা যদি P হয়, তাহলে,

$$P\,dr = 4\pi r^2 \psi^2 dr$$

$$\text{বা } P = 4\pi r^2 e^{-2ar} \qquad (৮.১২)$$

P যদি কেন্দ্রীন থেকে ইলেকট্রনের দূরত্বে লৈখিক চিত্রানুযায়ী দেখানো হয় তাহলে যে অবস্থানে Pর মান সবচে বেশী হবে সেখানে লেখচিত্রের সর্বোচ্চ মান (maxima). দেখা যাবে (চিত্র ৮.২)।

মনে করা যাক r_1 অবস্থানে P এর মান সবচে বেশি। তাহলে $\frac{dP}{dr}$ সেই অবস্থানে হবে শূন্য।

$$\frac{dP}{dr} = 0 \qquad (৮.১৩)$$

$$\text{বা } \frac{d\,4\pi r^2 e^{-2ra}}{dr} = 0$$

$$\text{বা } 2re^{-2ra} + r^2(-2a)e^{-2ra} = 0$$

$$\text{বা } r = \frac{1}{a} \qquad (৮.১৪)$$

অর্থাৎ ইলেকট্রন পাবার সবচে বেশি সম্ভাবনা হচ্ছে যখন $r = \frac{1}{a}$ বা বোর ব্যাসার্ধে।

শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের পূর্ন সমাধান

হাইড্রোজেন পরমাণুর শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের পূর্ণ সমাধানের জন্যে প্রথম যে কাজটি করা প্রয়োজন তা হচ্ছে পরিবর্তকগুলি (variables)কে পৃথকিকরণের ব্যবস্থা করা। তরঙ্গ ফাংশান $\Psi(\gamma, \theta, \phi)$ কে তিনটি ফাংশান $f_1 f_2 f_3$ হিসেবে এমনভাবে দেখানো যায় যে f_1 শুধুমাত্র পরিবর্তক r এর ফাংশান f_2 পরিবর্তক θ এর এবং f_3 ϕ এর ফাংশান। অর্থাৎ,

$$\Psi_{(r,\theta,\phi)} = f_1(\phi)\, f_2(\theta)\, f_3(\phi)$$

মূল শ্রোডিঙ্গার সমীকরণে Ψ এর পরিবর্তে $f_1 f_2 f_3$ বসিয়ে এবং প্রতিটি রাশিকে $f_1 f_2 f_3$ দিয়ে ভাগ করে আমরা পাই,

$$\mathrm{Sin}^2\theta\, \frac{r^2}{f_1} \left\{ \frac{\partial^2 f_1}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial r} + \frac{8\pi^2 m}{\partial r} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) f_1 \right\}$$

$$+ \frac{\mathrm{Sin}\theta}{f_2} \left\{ \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\mathrm{Sin}\theta \cdot \frac{\partial f_2}{\partial\theta} \right) = -\frac{1}{f_3} \cdot \frac{\partial^2 f_3}{\partial\phi^2}\right.$$

সমীকরণটির বাম পার্শ্বে আছে পরিবর্তক r এবং θ ডানদিকে শুধুমাত্র ϕ

সমীকরণটি r, θ এবং ϕর সকল মানের জন্যেই প্রযোজ্য। এটি তখনই সম্ভব যখন সমীকরনের বাম এবং ডান দুটি অংশই একটি ধ্রুবকের সমান হবে। ধরা যাক ধ্রুবকটি হল m^2,

কাজেই

$$-\frac{1}{f_3} \cdot \frac{\partial^2 f_3}{\partial\phi^2} = -m^2$$

$$\text{বা } \frac{1}{f_3} \cdot \frac{\partial^2 f_3}{\partial\phi^2} = m^2 \qquad (৮.১৬)$$

একটি একটি দ্বিতীয় ক্রম অন্তরক সমীকরণ। এর সমাধান,

$$f_3 = C\,e^{\pm im\phi} \qquad (৮.১৭)$$

এখানে C হল ইন্টিগ্রেসন ধ্রুবক। সমীকরণটি নর্মায়ন করবার জন্যে প্রয়োজনীয় শর্ত আরোপ করে আমরা পাই,

$$\int_0^{2\pi} f_3^2\, \partial\phi = 1$$

বা $\int_0^{2\pi} C^2 e^{\pm im\phi}\, d\phi = 1$

বা $C^2 \int_0^{2\pi} d\phi = 1$

বা $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

নর্মায়নের পর সমীকরণটির সমাধান হবে,

$$f_3 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm im\phi} \qquad (৮.১৮)$$

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$

অর্থাৎ সমীকরণ ৮.১৮ এর গ্রহণযোগ্য সমাধান তখনই হবে যখন m এর মান হবে $0, \pm 1, \pm 2 \,\ldots\ldots$

একইভাবে

$$\mathrm{Sin}^2\theta \frac{\partial^2}{f_1}\left\{\frac{\partial^2 f_2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\cdot\frac{\partial f_1}{\partial r} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right) f_1\right\}$$
$$+ \frac{\mathrm{Sin}\theta}{f_2}\left\{\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\mathrm{Sin}\theta \frac{\partial f_2}{\partial\theta}\right) = m^2$$

বা

$$\frac{r^2}{f_1}\left\{\frac{\partial^2 f_1}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\cdot\frac{\partial f_1}{\partial r} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right) f_1\right\} = -\frac{1}{f_2}$$
$$\left\{\frac{1}{\mathrm{Sin}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\mathrm{Sin}\theta \frac{\partial f_2}{\partial\theta}\right) - \frac{m^2}{\mathrm{Sin}^2\theta}\right\} \qquad (৮.১৯)$$

সমীকরণের ৮.১৯ এর ক্ষেত্রে দেখা যাবে বাম অংশ পরিবর্তক r এর উপর নির্ভরশীল আবার ডান অংশে শুধুমাত্র θর উপর নির্ভরশীল। দুটি অংশেই একটি ধ্রুবক α র সমান ধরে নিলে আমরা পাই,

$$-\frac{1}{f_2}\left\{\frac{1}{\mathrm{Sin}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\mathrm{Sin}\theta\frac{\partial f_2}{\partial\theta}\right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right\} = \alpha$$

বা $\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f_2}{\partial\theta}\right) + \left(\alpha - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right) f_2 = 0$

(৮.২০)

সমীকরণ (৮.২০) একটি 'স্ফেরিকেল হারমিনক্স' গঠিত অন্তরক সমীকরণ। এটি একটি আইগেন মান সমীকরণ যার সমাধান তখনই অর্থবহ যখন,

$\alpha = l(l+1)$

$l \geq m$

αর মান ব্যবহার করে সমীকরণ (৮.২০) এইভাবে লেখা যায়

$$\frac{1}{\sin\theta}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left\{\sin\theta\frac{\partial_1 P_l^m(\cos\theta)}{\partial\theta}\right\} + \left\{l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right\} P_l^m \cos\theta = 0$$

সমীকরণে আইজেন ফাংশানের ক্ষেত্রে ব্যবহার করা হল

$P_l^m(\cos\theta)$

এটি হচ্ছে এসোসিয়েটেড লিজেনড্রি ফাংশান যার ডিগ্রী হল l এবং অর্ডার m.

সমীকরণ (৮.২০) এর সমাধান হল

$$f_2(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}}\, P_l^{|m|} \cos\theta \qquad (৮.২১)$$

সমাধান থেকে জানা যাচ্ছে যে m এর যে কোন মানের জন্যে l এর মান হবে 0 থেকে l অর্থাৎ l এর একটি মানের জন্যে m এর $(2l+1)$ বিভিন্ন মান হবে। l যদি হয় 2,

m হবে , 1, 2, 0, -1, -2

এবার শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের r পরিবর্তক বিশিষ্ট অংশটুকুর সমাধান করা যাক। এই অংশটি হল অরীয় অংশ (redial part) এই অংশটুকু শুধুমাত্র r এর উপর নির্ভরশীল, θ বা ϕ এর উপর নয়। আমরা ধরে নিয়েছি,

$$\frac{r^2}{f_2}\left\{\frac{\partial^2 f_1}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\cdot\frac{\partial f_1}{\partial r} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right) f_1\right\} = \alpha = l(l+1)$$

বা $\frac{\partial^2 f_1}{\partial r^2} = \frac{2}{r}\cdot\frac{\partial f_1}{\partial r} + \left(\frac{8\pi^2 mE}{h^2} + \frac{8\pi^2 me^2}{h^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) f_1 = 0$

বা $\frac{\partial^2 f_1}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\cdot\frac{\partial f_1}{\partial r} + \left(A + \frac{2B}{r} + \frac{C}{r^2}\right) f_1 = 0 \qquad (৮.২২)$

যেখানে, $A = \frac{8\pi^2 mE}{h^2}$, $B = \frac{4\pi^2 me^2}{h^2}$, $C = -\ell(\ell+1)$

সমীকরণ সমাধান করতে হবে লেগুয়েরে সমীকরণ ব্যবহার করে (Laguerre) যার সমাধান হয়,

$$f_1(r) = -\sqrt{\left(\frac{2z}{na_0}\right)^3 \left[\frac{n-\ell-1}{2n\{(n+\ell)!\}^3}\right] e^{-P^2} P^\ell L_{n+\ell}^{2\ell+1}(P)}$$

(৮.২৩)

যেখানে $P = \left(\frac{2z}{na_0}\right) r$

$a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m^2}$

$L_{n+\ell}^{2\ell+1}(P)$ এসেসিয়েটেড লেগুয়েরে পলিনমিয়েল।

সমীকরণটির গ্রহণযোগ্য সমাধান তখনই হবে যখন $B^2 = -n^2 A$

n হচ্ছে একটি পূর্ণ গুণিতক, কাজেই —

$$E = -\frac{2\pi^2 me^4}{n^2 h^2} \quad (n = 1, 2, 3 \ldots\ldots\ldots) \qquad (৮.২৪)$$

এবং $n \geq \ell + 1$

যেখানে $\ell = 0, 1, 2, 3,$

অর্থাৎ কোয়ান্টাম সংখ্যা m, e এবং n কে প্রয়োজন হচ্ছে শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের গ্রহণযোগ্য সমাধানের জন্যে। তাহলে যা দাঁড়াচ্ছে তাহল

$m = 0, \pm 1, \pm 2, + \ldots\ldots\ldots\ldots \pm \ell$

$\ell \geq m$

$n \geq 1 + \ell$

অর্থাৎ $\ell = 0, 1, 2, 3 \ldots (n - \ell)$

কোয়ান্টাম নাম্বার n, অরবিটেলের শক্তি নির্ধারণ করে, ℓ নির্ধারণ করে কৌণিক ভরবেগ এবং m নির্ধারণ করে কৌণিক ভরবেগের z অক্ষ। $\ell = 0, 1, 2, 3$ কাক্ষিক (orbitals) হচ্ছে যথাক্রমে S, P, d এবং f. কাক্ষিক যখন n = 1 এবং তখন যে কাক্ষিক পাওয়া যাবে তা হল 1s কাক্ষিক। n = 3 এবং $\ell = 1$ হল 3p কাক্ষিক।

p অরবিটেলের সংখ্যা হল 3 যাদের m কোয়ন্টাম সংখ্যা মান m = 0, + 1, - 1.

হাইড্রোজেন বর্ণালীকে পুরোপুরি ব্যাখ্যা করার জন্যে আরো একটি কোয়ান্টাম সংখ্যার প্রয়োজন। সেটি হল স্পিন কোয়ন্টাম সংখ্যা যার মান $\pm\frac{1}{2}$, এটি এসেছে রিলেটিভিস্টিক কোয়ান্টাম বলবিদ্যা থেকে। বর্তমান গ্রন্থে রিলেটিভিস্টিক কোয়ান্টাম বলবিদ্যা আলোচনার সুযোগ নেই।

হাইড্রোজেন পরমাণুর পূর্ণ তরঙ্গ ফাংশান n = 1, এবং n = 2 অবস্থায় নিচের সরণীতে দেয়া হল।

সারণী ৮.১

হাইড্রোজেন পরমাণু পূর্ণ তরঙ্গ ফাংশান (n = 1 এবং n = 2) হল,

$\Psi = f_1(r)\, f_2(\theta).\, f_3(\phi)$

n	ℓ	m	$f_1(r)$	$f_2(\theta)\, f_3\phi$	প্রতীক
1	0	0	$2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-2r/a_0}$	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	1s
2	0	0	$\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	2s
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2}\cos\theta$	$2p_z$
2	1	+1	$\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-2r/2a_0}$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)\sin\theta\cos\phi$	$2p_x$
2	1	-1	$\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$	$\left(\frac{3}{4\pi}\right)\sin\theta\sin\phi$	$2p_y$

বিভিন্ন কাক্ষিকে ইলেকট্রনের সম্ভাবনা ঘনত্ব

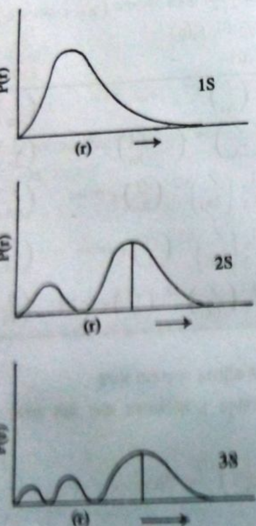
হাইড্রোজেন পরমাণুর 1s কাক্ষিকের কথা ভাব যাক। এই কাক্ষিকের তরঙ্গ ফাংশান,

$$\psi_{1s} = \left(\frac{1}{\pi a_0^3}\right)^{1/2} e^{-r/a_0}$$

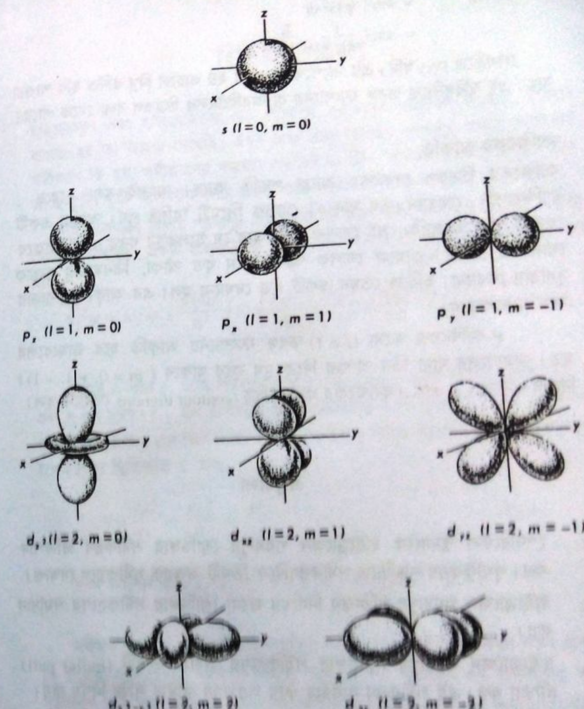
সম্ভাবনা ঘনত্ব $\psi_{1s}^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0}$

দেখা যাচ্ছে $\psi_{1s}{}^2$ কোনক্রমেই θ এবং ϕ র সঙ্গে সম্পর্কিত নয়। কাজেই নির্দ্বিধায় ধরে নেয়া যায় 1s কাক্ষিক হচ্ছে বর্তুল প্রতিসম (spherically symmetric)।

আমরা যদি কেন্দ্র থেকে r দূরত্বে dr, r এবং r + dr অংশ ইলেকট্রন পাওয়ার সম্ভাবনা হিসেব করি তাহলে সেই সম্ভাবনা P(r) হবে



চিত্র ৮.৩ : কাক্ষিকের চিত্ররূপ।



চিত্র ৮.৪ : কাক্ষিকের কন্টুর চিত্র

$$P(r)dr = 4\pi r^2 \psi_{1s}^2 dr$$
$$= 4\pi r^2 \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} dr$$

লেখচিত্রে $P(r)$ যদি r এর সাপেক্ষে দেখানো হয় তাহলে নিম্ন বর্ণিত ছবি পাওয়া যায়। এই ছবিগুলিকে তরঙ্গ ফাংশানের বা অরবিটেলের চিত্ররূপ বলা যেতে পারে।

কক্ষিকের আকৃতি

কক্ষিকের চিত্ররূপ দেখানোর আরো পদ্ধতি আছে। আগেই বলা হয়েছে s কক্ষিকগুলি (যেখানে l এর মান ০) গোলক সিমেট্রি বৈশিষ্ট পূর্ণ। আমরা একটি গোলক আঁকতে পারি। সেই গোলক এমন হবে যে ইলেকট্রন ঘনত্ব 99% থাকবে গোলকের ভেতর। কাগজে গোলক আঁকা মানে বৃত্ত আঁকা, তিনমাত্রার বস্তুকে দুমাত্রায় দেখানো। ছবিতে তেমন একটি বৃত্ত দেখানো হল। এর আকৃতি n বাড়ার সঙ্গে সঙ্গে বাড়বে।

p কক্ষিকের জন্যে ($l = 1$) তরঙ্গ ফাংশানের আকৃতি হবে ডামবেলের মত। ডামবেলের মাথা তিন অক্ষের দিকে মুখ করে থাকবে ($m = 0, +1, -1$)। নিচের ছবিতে s, p এবং d কক্ষিকের কনটুর চিত্র (contour digram) দেখানো হল।

প্রশ্নমালা

১. স্পেরিকেল স্থানাংকে হাইড্রোজেন পরমাণুর শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ প্রতিপাদ কর। পৃথকিকরণ পদ্ধতিতে সমীকরণটিকে তিনটি অন্তরক সমীকরণে দেখাও।

২. হাইড্রোজেন পরমাণুর শক্তিস্তর নির্ণয়ের জন্যে শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের সমাধান কর।

৩. হাইড্রোজেন পরমাণুর শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের অরীয় অংশটি (radial part) ব্যাখ্যা কর। এই সমীকরণ ব্যবহার করে পরমাণুর ভূমিস্ত শক্তি নির্ণয় কর।

৪. হাইড্রোজেন পরমাণুর বর্ণনার ক্ষেত্রে বিভিন্ন কোয়ান্টাম সংখ্যায় প্রয়োজনীয়তা ও বৈশিষ্ট্য বর্ণনা কর।

৫. হাইড্রোজেন বর্ণালীতে দৃশ্যমান রেখা দ্যুতির কারণ কোয়ান্টাম বলবিদ্যার সাহায্যে ব্যাখ্যা কর।

হিলিয়াম পরমাণু

হাইড্রোজেন এবং হাইড্রোজেনের মত পরমাণুর শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ কিভাবে সমাধান করতে হয় তা আমরা দেখেছি। এখন দেখা যাক হিলিয়ম পরমাণুর ক্ষেত্রে শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ কি হয়, সমীকরণের সমাধান পদ্ধতিই বা কি? হিলিয়াম পরমাণুতে ইলেকট্রন আছে দু'টি। দু'টি ইলেকট্রন কণার জন্যে সঙ্গত কারণেই সমস্যা খানিকটা জটিল হবে।

দুই ইলেকট্রন বিশিষ্ট পরমাণুর শ্রোডিঙ্গার সমীকরণ দাঁড়া করানোর কাজটি অবশ্যি তেমন জটিল নয়। একটি ইলেকট্রনকে ১ অন্যটিকে ২ ধরে সমীকরণটি এইভাবে সাজানো যায় —

$$\Delta_1^2\psi + \Delta_2^2\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{Ze^2}{r_1} + \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{Ze^2}{r_2} - \frac{e^2}{r_{12}}\right)\psi = 0 \quad (৯.১)$$

এখানে r_1 এবং r_2 হচ্ছে পরমাণু কেন্দ্রীন (Nucleus) থেকে যথাক্রমে ইলেকট্রন ১ এবং ২ এর দূরত্ব। r_{12} হল ইলেকট্রন দু'টির নিজেদের মধ্যে দূরত্ব। Δ_1 এবং Δ_2 হচ্ছে ইলেকট্রন ১ এবং ২ এর ডেল সংঘটক। Ze কেন্দ্রীনের তড়িৎ আধান। হিলিয়াম পরমাণুতে ইলেকট্রনের স্থিতিশক্তি V হবে,

$$V = \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r^2} + \frac{e^2}{r_{12}} \quad (৯.২)$$

তরঙ্গ ফাংশান $\psi = f_1(r_1, \theta_1, \phi_1) f_2(r_2, \theta_2, \phi_2)$ (৯.৩)

সমীকরণ ৯.১ এ r_{12} রাশির উপস্থিতির কারণে পরিবর্তনী পৃথকিকরণ সম্ভব হবে না। যে কাজটি হাইড্রোজেন পরমাণুর ক্ষেত্রে সহজেই করা যাচ্ছিল। এই জটিলতার জন্যেই সমীকরণ ৯.১ এর সমাধানে আমাদের প্রায়ীকরণ (approximate method) ব্যবহার করতে হবে। কোয়ান্টাম বলবিদ্যায় দু'ধনের প্রায়ীকরণ পদ্ধতি আছে।

ক) পরিবর্তন পদ্ধতি (variation method)

খ) বিচলিত পদ্ধতি (Perturbation method)

ক. পরিবর্তন পদ্ধতি ঃ

এই পদ্ধতিতে মূল ফাংশানের কাছাকাছি মোটামুটিভাবে গ্রহণযোগ্য একটি পরীক্ষামূলক ফাংশান (Trial function) নেয়া হয়। এই ফাংশান শ্রোডিঙ্গার সমীকরণে ব্যবহার করে মোট শক্তি E বের করা হয়। পরিবর্তন পদ্ধতি অনুযায়ী হিসেব করে পাওয়া E সব সময়ই সত্যিকার E'র মানের (E^0) চেয়ে বেশি হবে। সত্যিকার E'র মান তখনি পাওয়া যাবে যখন,

$$E_{calculated} \geq E^0 \qquad (৯.৪)$$

শ্রোডিঙ্গার সমীকরণের সরল রূপ হল,

$$H\psi = E\psi \qquad (৯.৫)$$

এখানে হেমিলটোনিয়ান অপারেটর H হল,

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

যেহেতু H ননকম্যুটিং অপারেটর (noncommuting operator)

$$H\psi \neq \psi E$$

কিন্তু E ধ্রুবক বলেই, যে কোন পরিস্থিতিতে

$$E\psi = \psi E$$

হেমিলটোনিয়ান অপারেটরে ব্যবহৃত ∇^2 হল ইলেকট্রন ১ এবং ২ এর ∇^2 এর যোগফল।

$$\nabla^2 = \nabla_1^2 + \nabla_2^2$$

সমীকরণ ৯.৪ এর সাধারণ সমাধান ব্যবহার করে E র মান নিম্নোক্ত সমীকরণ থেকে পাওয়া যাবে।

$$E = \frac{\int\psi H\psi d\tau}{\int\psi^2 d\tau} \qquad (৯.৬)$$

যে ফাংশান ব্যবহার করে E বের করা হয়েছে সেটি পরীক্ষামূলক ফাংশান। প্রাপ্ত E, মূল E–র কতটা কাছাকাছি তাই হচ্ছে পরিবর্তন পদ্ধতির হিসেব নিকেশের মূল বিষয়। চেষ্টা করা হবে পরীক্ষামূলক ফাংশানের ধ্রুবকে পরিবর্তন করে মূল ফাংশানের কাছাকাছি পৌছতে।

খ. বিচলন পদ্ধতি ঃ

হাইড্রোজেন পরমাণুর ক্ষেত্রে আমরা দেখেছি,

$$H^0\psi = E^0\psi \qquad (৯.৮)$$

যেখানে H^0 হল অবিচলিত হেমিলটোনিয়ান এবং E^0 হচ্ছে তার অবিচলিত আইগেন মান।

বিদ্যুৎ বা চৌম্বক ক্ষেত্রের প্রভাবে হেমিলটোনিয়ান বিচলিত (perturbed) হবে। সেক্ষেত্রে

$$H = H^0 + H' \qquad (৯.৮)$$

এখানে H' হল হেমিলটোনিয়ান সংগঠক এর বিচলন।

একইভাবে আইজেন মানের ক্ষেত্রেও E–র বিচলন হবে (E') এবং

$$E = E^0 + E' \qquad (৯.৯)$$

এবং $$E = \frac{\int\psi^{0*} H \psi^0 d\tau}{\int\psi^*\psi d\tau} \qquad (৯.১০)$$

ψ^0 হল অবিচলিত অবস্থার তরঙ্গ ফাংশান।

সমীকরণ (৯.৮) থেকে H এর মান সমীকরণ (৯.১০) এ বসিয়ে আমরা পাই,

$$E = \frac{\int\psi^* H^0\psi d\tau}{\int\psi^*\psi d\tau} + \frac{\int\psi^* H'\psi d\tau}{\int\psi^*\psi d\tau} \qquad (৯.১১)$$

$$\frac{\int\psi^* H^0\psi d\tau}{\int\psi^*\psi d\tau} = E^0$$

এবং

$$\frac{\int\psi^* H'\psi d\tau}{\int\psi^*\psi d\tau} = E'$$

বিচলন পদ্ধতিতে হিলিয়াম পরমাণুর মোট শক্তি বের করার জন্যে প্রথমে হিলিয়ামকে এক ইলেকট্রন বিশিষ্ট পরমাণু হিসেবে কল্পনা করা হয়। এবং পরে তার সঙ্গে যুক্ত করা হয় দ্বিতীয় ইলেকট্রনের কারণে যে বিচলন হয়েছে তার জন্যে প্রাপ্ত বিচলন শক্তি E'. স্টার্ক এবং জিমান প্রভাব ব্যাখ্যা করার জন্যে বিচলন পদ্ধতি খুবই উপযোগী।

কোয়ান্টাম বলবিদ্যা
এবং
রসায়নিক বন্ধন

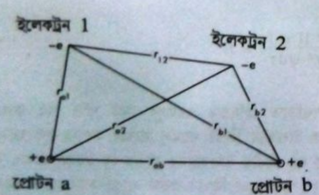
কোয়ান্টাম বলবিদ্যার প্রভূত উন্নতি সাধিত হলেও এখন পর্যন্ত শুধুমাত্র একটি অণুর ক্ষেত্রেই শ্রোডিঙ্গার তরঙ্গ সমীকরণের নিখুঁত এবং সম্পূর্ণ সমাধান পাওয়া গেছে। সেই অণুটি হল হাইড্রোজেন অণু আয়ন H_2^+. অন্যসব অণুর জন্যে যা পাওয়া গেছে তা হল প্রায়ীকরণ সমাধান (approximate solution). অবশ্যি প্রায়ীকরণ সমাধান অণুর রাসায়নিক বন্ধনের প্রকৃতি সম্পর্কে ধারণা করবার মত অনেক তথ্যই দেয়। জটিল অণুর রসায়নিক বন্ধন কোয়ান্টাম বলবিদ্যা এখনো তেমনভাবে কিছু বলতে পারে না, যদিও ছোট অণু থেকে প্রাপ্ত জ্ঞান বড় এবং জটিল অণু বুঝতে সাহায্য করে। আমরা এই অধ্যায়ে কয়েকটি ছোট অণুর রসায়নিক বন্ধন সম্পর্কে বলব।

১. হাইড্রোজেন অণু আয়ন, H_2^+

হাইড্রোজেন অণু আয়ন হল মূলত একটি হাইড্রোজেন অণু যার একটি ইলেকট্রন আয়নাইজেশনের মাধ্যমে সরিয়ে ফেলা হয়েছে —

$$H + H^+ \rightarrow H_2^+$$

এতে আছে একটি প্রোটন এবং দুটি ইলেকট্রন।



চিত্র ১০.১ ঃ হাইড্রোজেন অণু আয়নে ইলেকট্রন ও প্রোটনের অবস্থান।

হাইড্রোজেন অণু আয়নের তরঙ্গ সমীকরণের সমাধান পরীক্ষাগারে প্রাপ্ত ফলাফল ভালমত ব্যাখ্যা করলেও অণুটির রসায়নিক বন্ধন সম্পর্কে খুব বেশি তথ্য দিতে পারে না। প্রায়ীকরণ সমাধান থেকে হাইড্রোজেন অণু আয়নের জন্যে যে চিত্রটি দাঁড়া করা যায় তা হল — হাইড্রোজেন পরমাণু এবং হাইড্রোজেন পরমাণু আয়নের তরঙ্গ ফাংশানের সংযোগ।

যে সংযোগ দুভাবে হতে পারে,

$$\psi = \psi_a - \psi_b \qquad (১০.১)$$

$$\psi = \psi_a + \psi_b \qquad (১০.২)$$

হাইড্রোজেন পরমাণুর তরঙ্গ ফাংশান ψ_a কে কল্পনা করা হচ্ছে কেন্দ্রীন a র চারপাশে আবার ψ_b হচ্ছে b কেন্দ্রীনের চারপাশের তরঙ্গ ফাংশান।

সমীকরণ (১০.১) যা দেখাচ্ছে তা হল দু'টি তরঙ্গ ফাংশানের সংযোগের ফলে বিকর্ষণ আবার (১০.২) বলছে আকর্ষণের কথা।

তরঙ্গ ফাংশানের সাহায্যে যখন হাইড্রোজেন পরমাণু আয়নের ইলেকট্রন ঘনত্বের বিবরণমূলক রেখা (contour line) দাঁড়া করানো হয় তখন দেখা যায় রেখাগুলি শুধু যে দুটি কেন্দ্রীনকেই ঘিরে থাকে তাই না, দুটি কেন্দ্রীনের মাঝামাঝি জায়গায়ও ইলেকট্রনের ঘনত্ব পাওয়া যায়। ঋণাত্মক ইলেকট্রন ঘনত্বের এই উপস্থিতি দুটি ধ্বনাত্মক কেন্দ্রীনকে আটকে রাখে। কোয়ান্টাম বলবিদ্যায় এই হল হাইড্রোজেন পরমাণু আয়নের রসায়নিক বন্ধনের মূল কথা।

২. হাইড্রোজেন অণু, H_2

হাইড্রোজেন অণু সমস্যার কোয়ান্টাম বলবিদ্যার ব্যাখ্যা প্রথম দেন হিটলার ও লণ্ডন (Heitler, London, 1927) তাঁরা ব্যাখ্যায় যে পদ্ধতি ব্যবহার করেন তার নাম ভেলেন্সি বন্ড পদ্ধতি (valence bond method).

এই পদ্ধতিতে হাইড্রোজেন অণুকে দুটি আলাদা হাইড্রোজেন পরমাণু হিসেবে ভাবা হয় যারা নিদৃষ্ট দূরত্বে অবস্থান করছে (চিত্র ১০.২)

এই অবস্থায় কেন্দ্রীন a, ইলেকট্রন 1 এর সঙ্গে সম্পর্কিত। কেন্দ্রীন b ইলেকট্রন ২ এর সঙ্গে সম্পর্কিত। কেন্দ্রীন দু'টির দূরত্ব r_{ab}।

পরমাণু 'a' র জন্যে তরঙ্গ ফাংশান হল $\psi_a(1)$, পরমাণুর 'B'র জন্যে $\psi_b(2)$। দুটি পরমাণুর একক তরঙ্গ ফাংশান হল $\psi_a(1)\,\psi_b(2)$. আবার একই সঙ্গে এটিও সম্ভব যে

কেন্দ্রীন a, ইলেকট্রন ২ এর সঙ্গে সম্পর্কিত হবে এবং কেন্দ্রীন b সম্পর্কিত হবে ইলেকট্রন 1 এর সঙ্গে। সেই ক্ষেত্রে দুটি পরমাণুর তরঙ্গ ফাংশান হবে $\psi_a(2)\,\psi_b(1)$। হিটলার এবং লণ্ডন বললেন, দুটি পরমাণুর বন্ধনের জন্যে, তরঙ্গ ফাংশান দু'টিকে সংযুক্ত করতে হবে। নতুন তরঙ্গ ফাংশান ψ_{VB} যা পরমাণু দু'টির বন্ধনের কথা বলবে তা পাওয়া যাবে দুটি তরঙ্গ ফাংশানের রৈখিক সংযোগের (linear combination) মাধ্যমে। অর্থাৎ

$$\psi_{VB} = \psi_a(1)\,\psi_b(2) + \psi_a(2)\,\psi_b(1) \qquad (১০.৩)$$

অণু কাক্ষিক পদ্ধতি বা মলিকুলার অরবিটাল পদ্ধতি (molecular orbital method) নামে আরো একটি পদ্ধতি হাইড্রোজেন অণুর রসায়নিক বন্ধন ব্যাখ্যায় ব্যবহার করা হয়। এই পদ্ধতি বের করেন হোন্ড, মুলিকান এবং হাকল (Hund, Mulliken, Huckel) এই পদ্ধতিতে অণুর ইলেকট্রন কোন নির্দিষ্ট পরমাণু গোলকে আবদ্ধ রাখা হয় না। বরং ইলেকট্রনটিকে প্রতিটি পরমাণুর কেন্দ্রীনকে ঘিরে ঘূর্ণায়মান অবস্থায় কল্পনা করা হয়। কাজেই ইলেকট্রনের তরঙ্গ ফাংশান নির্ভর করবে প্রতিটি পরমাণুর কেন্দ্রীনের উপর।

প্রথমে হাইড্রোজেন অণুর একটি ইলেকট্রন '1' কল্পনা করা যাক। দু'টি প্রোটনের আওতাধীন এই ইলেকট্রনটির তরঙ্গ ফাংশান হবে —

$$\psi_2 = \psi_a(1) + \psi_b(1) \qquad (১০.৪)$$

কোন অণুতে একটি ইলেকট্রনের এ জাতীয় তরঙ্গ ফাংশানকে বলে অণু কাক্ষিক বা মলিকুলার অরবিটাল (Molecular orbital)।

অণু কাক্ষিক তৈরী করা হয় পরমাণু কাক্ষিকের রৈখিক সংযোগের মাধ্যমে। একইভাবে হাইড্রোজেন অণুর দ্বিতীয় ইলেকট্রনটির জন্যে অণু কাক্ষিক তৈরী করা যায়।

$$\psi_2 = \psi_a(2) + \psi_b(2) \qquad (১০.৫)$$

হাইড্রোজেন অণুর তরঙ্গ ফাংশান হবে,

$$\psi_{MO} = \psi_1\,\psi_2$$
$$= [\,\psi_a(1) + \psi_b(1)\,]\,[\,\psi_a(2) + \psi_b(1)\,] \qquad (১০.৬)$$

এই পদ্ধতি ব্যবহার করে হাইড্রোজেন অণুর সর্বনিম্ন শক্তিতলের শক্তি E হয় — 2.680ev এবং r_0 হয় 0.850A°। এই মান পরীক্ষাগারে প্রাপ্ত মানের কাছাকাছি নয়। যদিও পরবর্তী সময়ে দুটি পদ্ধতিতেই কিছু কিছু পরিবর্তন করা হয়েছে যা ব্যবহার

করে কোয়ান্টাম বলবিদ্যার বিজ্ঞানীরা পরীক্ষাগারে প্রাপ্ত ফলাফলের কাছাকাছি যেতে পারেন।

বন্ধক এবং প্রতি বন্ধক অণু কাক্ষিক (Bonding and antibonding molecular orbital).

মনে করা যাক AB হল একটি অণু যা পরমাণু A এবং B র সংযোগে তৈরী হয়েছে। ψ_A এবং ψ_B হচ্ছে যথাক্রমে পরমাণু A এবং পরমাণু B র পরমাণু কাক্ষিক (atomic orbital) পরমাণু দু'টিকে যখন কাছাকাছি আনা হবে তখন দুটি পরমাণু কাক্ষিক সংযোগের মাধ্যমে একটি অণু কাক্ষিক দেবে। অণুকাক্ষিক পাওয়া যাবে পরমাণু কাক্ষিক দুটির রৈখিক সংযোগের মাধ্যমে

$$\psi = \psi_A + \lambda\psi_B \qquad (১০.৭)$$

অণুকাক্ষিক তৈরীতে দুটি পরমাণু কাক্ষিকের আনুপাতিক পরিমাণ নির্ধারণের জন্যে λ ব্যবহৃত হয়। গাণিতিক যুক্তির মাধ্যমে দেখানো হয়েছে λর মান $\pm C$ হতে পারে। যেখানে C হচ্ছে একটি ধ্রুবক যার মান A এবং Bর প্রকৃতির উপর নির্ভরশীল। কাজেই আমরা রৈখিক সংযোগের মাধ্যমে দুটি অনুকাক্ষিক তৈরী করতে পারি।

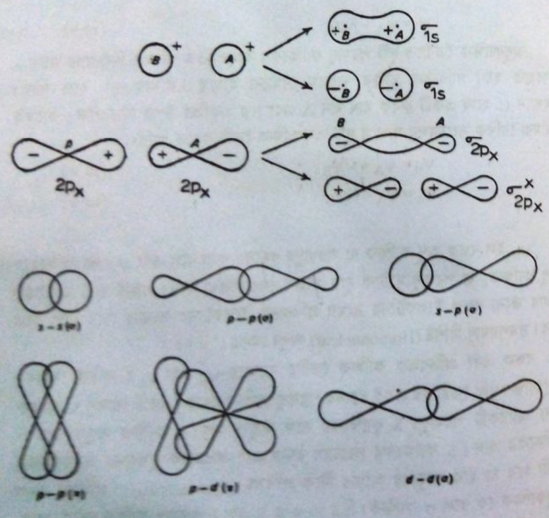
$$\psi_b = \psi_A + C\psi_B \qquad (১০.৮)$$
$$\psi_a = \psi_A - C\psi_B \qquad (১০.৯)$$

ψ_b হল বন্ধক অণু কাক্ষিক বা পরমাণুর বন্ধনের কথা বলে এবং ψ_a হল প্রতিবন্ধক অণু কাক্ষিক, যা পরমাণু দু'টিকে দূরে সরিয়ে দেবার কথা বলে। একটি স্থায়ী অণু তৈরী করার জন্যে বন্ধক ইলেকট্রনের সংখ্যা প্রতিবন্ধক ইলেকট্রনের সংখ্যার চেয়ে বেশী হতে হবে। সমপরমাণু বিশিষ্ট (Homonuclear) অণুর ক্ষেত্রে C = 1।

বন্ধক এবং প্রতিবন্ধক কাক্ষিক তৈরীর ব্যাপারে ψ_a এবং ψ_bর ভূমিকা সমান। অণুকাক্ষিকগুলি তৈরী হয় একই ধরনের পরমাণু কাক্ষিক থেকে। একটি পরমাণু S কাক্ষিক অন্য আরেকটি পরমাণুর S কাক্ষিকের সঙ্গে সংযুক্ত হবে। P কাক্ষিক সংযুক্ত হবে P কাক্ষিকের সঙ্গে। S কাক্ষিকের সংযোগে বন্ধক এবং প্রতিবন্ধক দু'ধরনের অনুকাক্ষিকই তৈরী হবে যা হবে সংযুগের অক্ষের দিকে প্রতিসম (Symmetrical)। প্রতিসম বন্ধক অনুকাক্ষিক কে বলে σ কাক্ষিক। চিত্র ১০.৩ এ S এবং P পরমাণু কাক্ষিক থেকে বন্ধক এবং প্রতিবন্ধক অণুকাক্ষিক তৈরীর বিষয়টি দেখানো হল।

প্রকৃতিকে জানার জন্যে তার রহস্যের কাছাকাছি যাবার জন্যে কোয়ান্টাম বলবিদ্যা একটি অত্যন্ত শক্তিশালী মাধ্যম। মূলত প্রধান যে কারণে বিজ্ঞানের এই শাখাটির ব্যবহার ব্যাহত হচ্ছে তা হল অতি জটিল এবং বিপুল হিসাব নিকাশ। বিজ্ঞানী ডাইরাক (Dirac) ১৯২৬ সনে অত্যন্ত সাহসের সঙ্গে বলেছিলেন — কোয়ান্টাম তত্ত্বের সাহায্যে পুরো রসায়ন শাস্ত্রের ব্যাখ্যার কৌশল আমাদের জানা আছে। আমরা তা পারছি না শুধুমাত্র জটিল সব সমীকরণের কারণে যার সমাধান এই সময়ে সম্ভব নয়।

এখন আমরা হাই স্পীড ডিজিটাল কম্পিউটারের যুগে পা দিয়েছি। কম্পিউটার এগিয়ে এসেছে আমাদের সাহায্যে। যদিও এই মুহূর্তে রসায়নের খুব অল্প কিছু সমস্যারই পূর্ণ সমাধান কোয়ান্টাম বলবিদ্যা দিচ্ছে তবুও বিজ্ঞানীরা একশ ভাগ নিশ্চিত যে সব সমস্যায় পূর্ণ সমাধান কোয়ান্টাম বলবিদ্যা একদিন অবশ্যই দেবে। আগামী দিনের রসায়ন চর্চা পরীক্ষাগারে হবে না — হবে সুপার স্পীড ডিজিটাল কম্পিউটারে।



চিত্র ১০.২ : S এবং P পরমাণু কাক্ষিক থেকে অনুকাক্ষিক।

প্রশ্নমালা

১. হিলিয়াম পরমাণুর জন্যে শ্রোডিঙ্গার সমীকরণটি কি? এই সমীকরণ সমাধানের পদ্ধতিগুলি আলোচনা কর।

২ বিচলন পদ্ধতি ব্যবহার করে হিলিয়াম পরমাণুর শক্তির আইগেন মান কিভাবে বের করা যায়।

৩. বিচলন পদ্ধতি ও পরিবর্তন পদ্ধতির তুলনামূলক আলোচনা কর।

৪. কোয়ান্টাম বলবিদ্যার সাহায্যে রসায়নিক বন্ধনের ব্যাখ্যা দাও।

৫. বন্ধক ও প্রতি বন্ধক অনুকাক্ষিক কি? উদাহরণসহ ব্যাখ্যা কর।

সহায়ক গ্রন্থ

১. **Quantum Chemistry :** Ira N. Levine 2nd edition, Allyn and Bacon, Inc. 1974.

২. **Introductory Quantum Chemistry :** A. K. Chandra 3rd edition Tata MacGraw Hill Publishing Company Limited, New Delhi.

৩. কোয়ান্টাম বলবিজ্ঞান : সুনীল কুমার গোলদার, বাংলা একাডেমী ১৯৮৯

৪. **Principles of physical Chemistry :** Samuel H. Maron & Carl F. Prutton 4th edition. The Macmillan company New York 1965.

৫. **An introduction to quantum mechanics of chemical systems :** R. P. Rastogi, V. K. Srivastova, First edition, Oxford and IBH publishing Co. New Delhi, 1986.

৬. **Physical Chemistry :** Robert A. Alberty, Farrington Daniels, 5th edition. Wiley caster limited 1980.

৭. **Quantum Mechanics :** S. P. Singh and M. K. Bagdhe. First edition. Schard and Company Limited New Delhi. 1990.

৮. **Principles of Modern Physico :** A. P. French. Wiley and sons International. 1970.

পরিভাষা

Amplitude — বিস্তার
Bound — আবদ্ধ
Coefficient — সহগ
Complex — জটিল
Component — উপাংশ
Conjugate — যুগ্ম
Continuous — অবিচ্ছিন্ন
Continuity — অবিচ্ছিন্নতা
Coordinate — স্থানাঙ্ক
Degrees of Freedom — স্বাধীন-সত্তা
Degeneracy — চ্যুতি
Derivative — জাতক
Differential equation — অন্তরক সমীকরণ
Diffraction — অপবর্তন
Dimension — মাত্রা
Eigen function — আইগেন ফাংশান
Eigen Valve — আইগেন মান
Expected value — প্রত্যাশিত মান
Frequency — কম্পণাংক
Graph — লেখচিত্র
Harmonic — ছন্দিত
Integration — সঙ্কলন
Interference — ব্যতিচার
Lattice — জাফরি
Level — স্তর
Linear — রৈখিক
Mechanics — বলবিজ্ঞান
Momentum — ভরবেগ
Nucleus — কেন্দ্রীন
Normalisation — নর্মায়ন
Operator — সংঘটক
Orbit — কক্ষপথ
Orbital — কাক্ষিক
Oscillation — দোলন
Oscillator — কম্পক
Perturbation — বিচলন
Potential energy — স্থানিক শক্তি
Probability — সম্ভাব্যতা
Radial — অরীয়
Reduced mass — সংক্ষেপিত ভর
Quantum — কোয়ান্টাম, শক্তি আঁটি
Scattering — বিক্ষেপণ
Series — ধারা
Single valued — একমান সম্পন্ন
Spectrum — বর্ণালী
State — অবস্থা
Stationary — স্থির
Symmetric — প্রতিসম
Variable — পরিবর্তনীয়
Vibration — কম্পন
Zero point — শূন্য বিন্দু।

পরিশিষ্ট

SI একক এবং ভৌত ধ্রুবক।

ভৌত পরিমাণ	পরিমানের সংকেত	এককের নাম	SI এককে সংকেত
দৈর্ঘ	l	meter	m
ভর	m	kilogram	kg
সময়	t	second	S
তাপমাত্রা	T	Kelvin	K
বস্তুর পরিমাণ	in	mole	mol.

পরিমাণ	একক	সংকেত	ব্যাখ্যা
	নিউটন	N	$kgms^{-2}$

অন্য একক থেকে SI এককে রূপান্তরের সারণী

ভৌত পরিমাণ	এককের নাম	সংকেত	SI সংকেত রূপান্তরের গুণাঙ্ক
দৈর্ঘ্য	এংগোষ্টার্ম	Å	10^{-10}m
শক্তি	ইলেকট্রনভোল্ট	eV	1.602×10^{-19}J
	ক্যালোরি		4.184J
	আর্গ		10^{-7}J
বল	ডাইন		10^{-5}N
ইলেকট্রিক চার্জ	ই. এস. ইউ (esu)		3.334×10^{-10}C

ভৌত ধ্রুবকের মান

ধ্রুবক	সংকেত	মান
আলোর গতি	C	2.997×10^{8} mS^{-1}
ইলেকট্রনের চার্জ	e	1.602×10^{-19}c
প্লাঙ্ক ধ্রুবক	h	6.626×10^{-34}JS