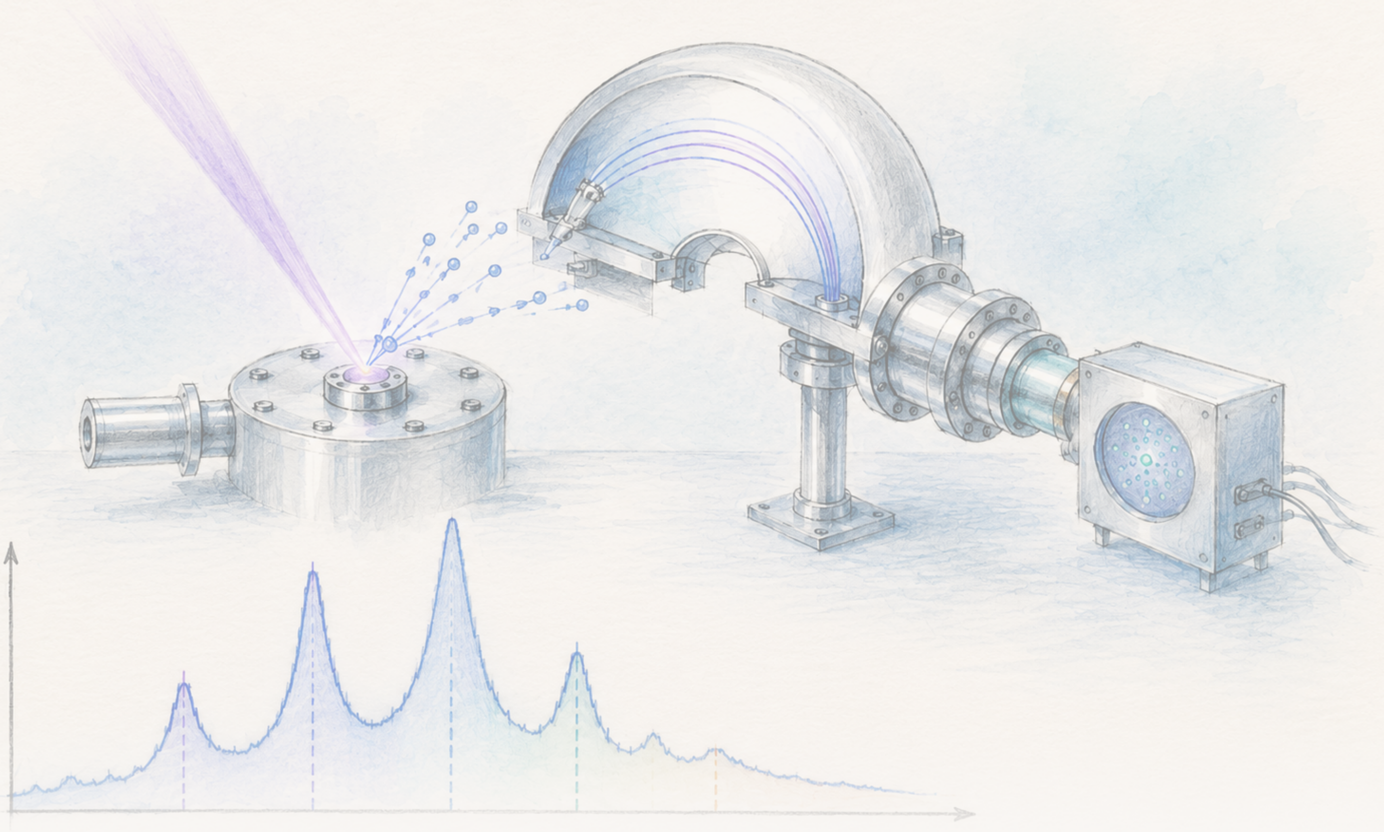


The Clean Paper

WHAT THE PAPER SAYS · WHAT IT DOESN'T · WHY IT MATTERS

triple بندش عموماً صاف ستھری چیز ہے۔ Bismuth اسے کم صاف بنا دیتا ہے۔

Kahraman، *Hui*، *Zhang*، *Ellis*، *Choi*، *Peterson* اور *Wang* نے *CBi-* سالماتی *ion* کو بلند-ریزولوشن *cryogenic* *photoelectron* طیف نگاری/امیجنگ سے پیمائش کیا اور طیف کو *fully* نسبیتی *Dirac-Coulomb coupled-cluster calculations* سے موازنہ کرنا کیا۔ غیر جانب دار *CBi* کے تین حالتیں کی *adiabatic detachment energies* 3429.2، 5812.2، 5246.3 *eV* ملیں۔ طیف/*angular distributions* سادہ *nonrelativistic* سگما-*plus-two-pi* بندش-*triple* تصویر سے مطابقت نہیں۔ مضبوط *spin-orbit coupling bonding* کو نسبیتی *Kramers* جوڑے میں *reorganize* کرتی ہے: ایک *pi-like* |*omega*| = 3/2 جوڑا اور *two* |*omega*| = 1/2 جوڑے *with* سگما/*pi mixing*۔ یہ براہِ راست شواھد ہے کہ *very* بھاری-*element* بندش-*triple* نظام میں *textbook orbital labels* بہترین *conserved* زبان رھنا چھوڑتے ھیں۔ معمول کا کیمیائی *bonding reject* نہیں ہوتی، یہ درست نقشہ ہے کہ ایک جگہ *relativity bookkeeping* سنبھال لیتی ہے۔

Written by Matteo · Cross-checked by Vera Rubin · Edited by Michele Renda · Figures by Nova Vela · AI-assisted, human-reviewed

Paper: *Relativistic collapse of the classical triple bond in the CBi- molecular ion*, Deniz Kahraman, Jie Hui, Xin-Yu Zhang, Neil A. Ellis, Hyun Wook Choi, Kirk A. Peterson and Lai-Sheng Wang, Science ,393 187-184 (2026) · DOI: science.aei1285/1126.10

تہرا بندش عموماً صاف ستھری چیز ہے۔ Bismuth اسے کم صاف بنا دیتا ہے۔

تہرا بندش کی معیاری تصویر ایک سگما بندش اور دو pi bonds ہے۔ سگما بندش بندش کا head-on حصہ ہے، جس میں الیکٹران کثافت دونوں ایٹمز کے درمیان لائن کے ساتھ ہوتی ہے۔ pi بندش جانب-on حصہ ہے، جہاں الیکٹران کثافت اس لائن کے اوپر/نیچے یا گرد ہوتی ہے۔ درسی تہرا بندش میں ایک سگما + two pi ایک tidy package بناتے ہیں۔

یہ صاف ڈرائنگ ہے، اور روشنی ایٹمز کے لیے اکثر اچھی وجہ سے صاف ہے: الیکٹرانز ایسے مدارچے میں describe ہو سکتے ہیں جن کی ساختیں اور spins conceptually الگ رکھی جا سکتی ہیں۔

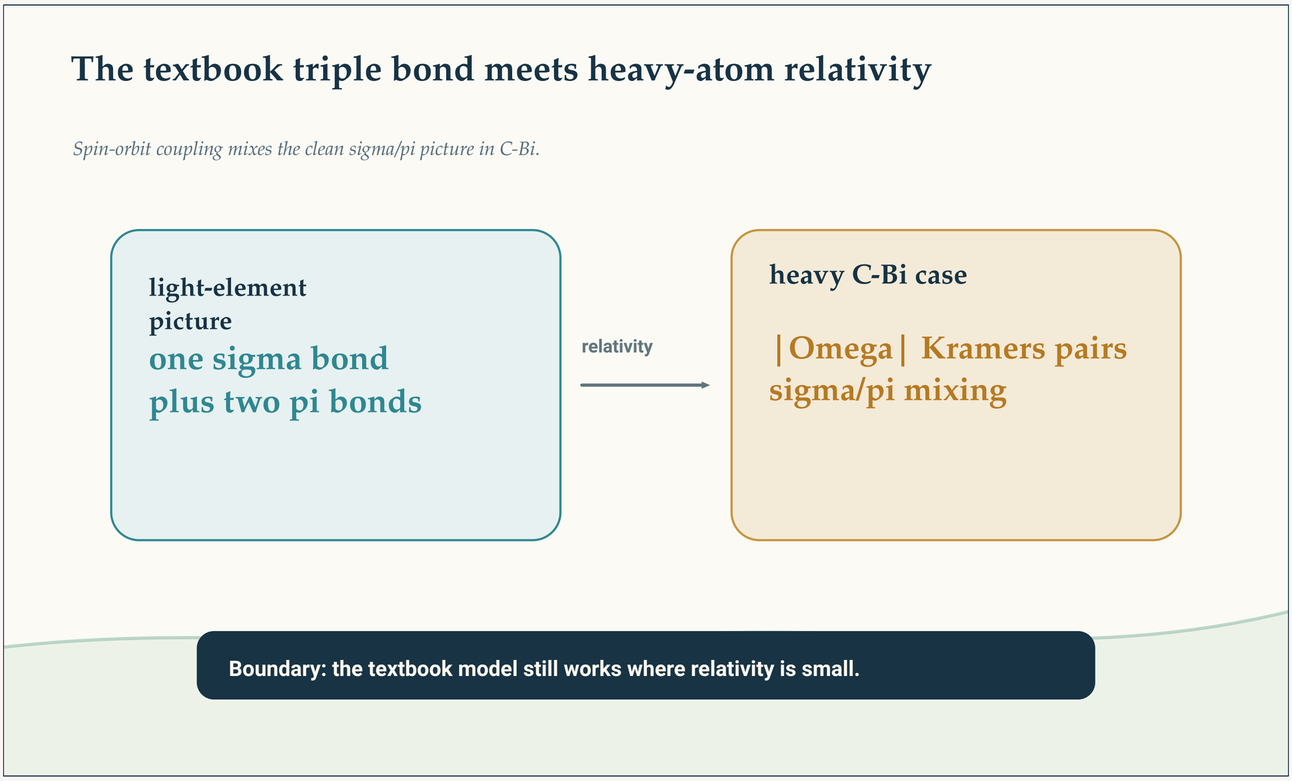
یہ تصویر جھوٹ نہیں۔ periodic table کے اس حصے میں بہت اچھی approximation ہے جہاں زیادہ تر درسی مثالیں رہتے ہیں۔

Bismuth اس حصے میں نہیں۔

Bismuth کے 83 protons ہیں۔ اتنے بھاری nucleus کے قریب نسبیت decorative تصحیح نہیں رہتی، کیمیا کا حصہ بن جاتی ہے۔ الیکٹرانز ایسے مضبوط شعبہ میں حرکت کرتے ہیں کہ اسپن-مدار جوڑ—الیکٹران کے spin اور مداری motion کا جوڑ—اہم organizing حقائق میں سے ایک بن سکتا ہے۔ تب پرانا لیبلز اس لیے disappear نہیں ہوتے کہ کوئی بھول گیا؛ وہ بہترین لیبلز رہنا چھوڑ دیتے ہیں۔

Deniz Kahraman، Jie Hui، Xin-Yu Zhang، Neil A. Ellis، Wook Hyun Choi، Kirk A. Peterson اور Lai-Sheng Wang کا نیا Science مقالہ جان بوجھ کر ایک انتہائی واضح مثال کا مطالعہ کرتا ہے: کاربن-بسمتھ سالماتی آئن CBi^-۔ الیکٹرانوں کی تعداد کے لحاظ سے یہ CN^- کے مساوی ہے، جو ہلکے عناصر کے درمیان سہ گا بندش کی ایک معروف مثال ہے۔ لیکن نائٹروجن کی جگہ بسمتھ رکھنے سے یہی الیکٹران-گنتی کا مسئلہ ایک کہیں بھاری اور زیادہ نسبیتی ماحول میں منتقل ہو جاتا ہے۔

صاف نتیجہ "تہرا bonds غلط ہیں" نہیں۔ زیادہ محدود اور زیادہ دلچسپ بات یہ ہے: CBi^- میں کلاسیکی سگما-plus-two-pi وضاحت collapse ہو کر نسبیتی وضاحت بنتی ہے، Kramers جوڑے کے ذریعے جنہیں کل زاویائی momentum-projection سے لیبل کیا جاتا ہے۔ بندش موجود ہے۔ پرانا حسابی زبان ناکام ہونا ہوتا ہے۔



روشنی-element تہرا بندش میں ایک سگما + pi two مدارچے؛ بھاری C–Bi میں اسپن-مدار جوڑ اسے |Ω| Kramers جوڑے میں دوبارہ درجہ بند کرتی ہے جن میں سگما/pi اختلاط ہے۔ بندش موجود رہتا ہے—درسی لیبلز کام کرنا چھوڑتے ہیں۔

Original diagram — The Clean Paper CC BY 0.4

مصنفین نے کیا پیمائش کیا

انہوں نے bismuth/graphite ہدف کی لیزر ablation سے سالماتی beam میں CBi- بنایا، پھر anion کو بلند-ریزولوشن انتہائی سرد فوٹو الیکٹران طیف نگاری اور فوٹو الیکٹران امیجنگ سے پروب کیا۔ anion negatively charged آئن ہے؛ یہاں CBi- کاربن-bismuth سالمہ ہے جس کے پاس ایک اضافی الیکٹران ہے۔

فوٹو الیکٹران طیف نگاری سادہ چیز technically demanding طریقے سے کرتی ہے۔ فوٹون anion سے الیکٹران knock off کرتا ہے۔ outgoing الیکٹران کی توانائی پیمائش کر کے معلوم ہوتا ہے الیکٹران نکالنے کے لیے کتنی توانائی درکار تھی، اور غیر جانب دار سالمہ کس الیکٹرانک حالت میں رہ گیا۔ غیر جانب دار الیکٹرانک حالت باقی الیکٹرانز کی allowed arrangement ہے۔ فوٹو الیکٹران امیجنگ زاویائی معلومات بھی دیتی ہے: emitted الیکٹرانز کی سمتیں کا پیٹرن، جو مداری character شناخت کرنے میں مدد دیتا ہے۔

[video pending]

photoemission اثر کی مختصر educational animation: incoming روشنی مادّہ سے الیکٹرانز eject کرتی ہے، اور الیکٹران توانائیاں left-behind حالتیں ظاہر کرتی ہیں—یہی اصول یہاں فوٹو الیکٹران طیف نگاری کے پیچھے ہے۔ یہ عمومی technique دکھاتی ہے، CBi- تجربہ نہیں۔ browser compatibility کے لیے The صاف مقالہ نے MP4 میں transcode کیا؛ content تقریباً غیر تبدیل۔

661.4 eV کے اہم طیف میں تین الیکٹرانک بینڈز X، A، B نظر آئیں۔ سالماتی طیف نگاری میں X عموماً ground الیکٹرانک حالت—غیر

جانب دار سالمہ کی توانائی-lowest حالت—کو لیبل کرتا ہے، A/B اگلا excited حالتیں۔ 424.6 eV کے زیادہ-توانائی طیف میں اضافی خصوصیات نہیں ملیں۔

بلند-ریزولوشن پیمائشیں کے اڈیابیٹک detachment توانائیاں:

- **3429.2 eV** X حالت کے لیے، یعنی غیر جانب دار CBi کی الیکٹران affinity؛
- **5812.2 eV** A حالت؛
- **5246.3 eV** B حالت۔

رپورٹ شدہ experimental غیر یقینی الیکٹرانک توانائیاں کے لیے تقریباً **0010.0 eV** اور ارتعاشی frequencies کے لیے **8 cm-1** ہے۔

ناپا گیا ارتعاشی frequencies:

- X: **681 cm-1**؛
- A: **606 cm-1**؛
- B: **633 cm-1**۔

اعداد باھمی بندش کے بارے میں معلومات دیتے ھیں۔ مختصر/زیادہ مضبوط بندش عموماً زیادہ stretching تعدد دیتا ہے؛ کمزور/زیادہ طویل بندش کم۔ کیمیا ھمیشہ آزاد-caveat نہیں، مگر مفید پہلا handle ہے۔

پرانا تصویر کہاں مشکل میں پڑتی ہے

غیر نسبتی تصویر میں -CBi کو -CN کا بھاری قریبی ھم شکل سمجھا جاتا: filled سگما مداری اور دو pi filled مدارچے۔ ایک الیکٹران remove کرنے سے غیر جانب دار حالتیں معمول کا سگما/pi زبان میں assign ھونی چاھئیں۔

پیمائشیں اتنی tidy نہیں۔

زاویائی distributions پہلی مسئلہ ھیں۔ آلہِ شناخت الیکٹران توانائی کے ساتھ سمتیں بھی پیمائش کرتا ہے۔ سمتی پیٹرن سمتی عدم یکسانیت پیرامیٹر beta سے summarize ھوتا ہے۔ X بینڈ beta **86.1** رکھتی ہے، مصنفین اسے سگما-قسم مداری سے p-wave dominant detachment سمجھتے ھیں۔ A/B beta -**73.0** اور -**67.0** ھیں، زیادہ pi-like detachment کے ھم آھنگ۔

یہاں تک manageable: X سگما-like، A/B pi-like۔

مگر ارتعاشی ساخت اسی سادہ تعیین کو resist کرتی ہے۔ الیکٹران remove ھونے پر سالمہ vibrate کر سکتی ہے؛ vibration peaks پیٹرن Franck-Condon progression کہلاتی ہے۔ X اور B similarly مختصر progressions دکھاتے ھیں، A زیادہ طویل۔ اگر A/B معمول کا pi-hole حالت کے صرف two اسپن-مدار اجزا ھوتے تو بندش-لمبائی تبدیلیاں میں زیادہ alike ھونے چاھئیں۔ مگر B ایک respect میں X، دوسرے میں A جیسا ہے۔

یہ diagram contradiction کے نیچے چھپ سکتی تھی۔ مصنفین اسے اشارہ بناتے ھیں کہ diagram ھی اب دائیں شے نہیں۔

نسبیتی وضاحت

بھاری ایٹمز میں spin اور مداری motion cleanly separable نہیں۔ بہتر محفوظ quantity کل الیکٹرانک زاویائی momentum کا سالماتی محور کے ساتھ projection ہے، مقالہ اسے omega سے لیبل کرتا ہے۔

وضاحت کی basis بدل جاتی ہے۔ تہرا بندش کو ایک سگما + two pi مدارچے، پھر add spin کرنے کے بجائے، متعلقہ حالتیں نسبیتی Kramers جوڑے ہیں۔ Kramers جوڑا degenerate spinors کا جوڑا ہے جو الیکٹران-odd نظام میں وقت-reversal symmetry سے required ہوتا ہے۔ تکنیکی لفظ کا سادہ نقطہ: نسبیتی کیس میں قدرتی ایک-الیکٹران اشیا **spinors** ہیں، معمول کا آزاد-spin مدارچے نہیں جن پر spin بعد میں چپکایا جائے۔

مکمل طور پر نسبیتی حساب ایک خالص pi-like |**omega**| = **3/2** Kramers جوڑا اور دو |**omega**| = **1/2** جوڑے دیتی ہے جن میں substantial سگما/pi اختلاط ہے۔ plain اصطلاحات میں ایک جوڑا اب بھی mostly pi ہے، باقی دو صاف سگما یا pi نہیں رہتے۔ مقالہ title کا "collapse" یہی ہے: باهمی بندش disappear نہیں، کلاسیکی سگما/pi علیحدگی اس سالمہ کے لیے دائیں زبان نہیں رہتی۔

computations decorative afterthought نہیں۔ مصنفین جزو-four Dirac-Coulomb coupled-cluster طریقے استعمال کرتے ہیں، ground/کم حالتیں کے لیے DC-CCSD(T)، B حالت کے لیے EOM-IP-CCSD۔ CBi- کا calculated C-Bi بندش لمبائی **2.022 انگسٹروم** اور anion stretching تعدد **695 cm-1** ہے، experimental پیمانہ کے قریب۔ calculated detachment توانائیاں X/A پیمائشیں سے closely agree اور نسبیتی تعیین تائید کرتی ہیں۔

B حالت حساب کا delicate حصہ ہے۔ calculated ارتعاشی تعدد تجربہ سے کم well agree کرتی ہے، مصنفین اسے X/B حالتیں اختلاط کی degree کے لیے تعدد کی sensitivity کی sign سمجھتے ہیں۔ وهی مضبوط |omega| = 1/2 اختلاط B کو A سے noticeably زیادہ تعدد دیتی ہے۔ صاف explainer کو ماخذ مقالہ سے "زیادہ صاف" نہیں بننا چاہیے۔

یہ کیا ثابت نہیں کرتا

- معمول کا سگما/pi باهمی بندش useless نہیں۔
- کاربن-nitrogen تہرا bonds، alkynes یا زیادہ تر روشنی-element درسی مثالیں redraw کرنے کی ضرورت نہیں۔
- ہر بھاری-element بندش CBi- جیسا behave نہیں کرتا۔
- یہ نہیں کہتا C-Bi بندش متعدد بندش نہیں۔
- نسبیتی کوانٹم کیمیا یہاں optional flourish نہیں، درست تعیین کے لیے required ہے۔
- اس سے خود کوئی نیا مادّہ یا کیمیائی ٹیکنالوجی نہیں بنتی۔

حد ھی نقطہ ہے۔ کلاسیکی باهمی بندش زبان وهاں بہترین کام کرتی ہے جہاں مفروضے approximately درست ہوں۔ CBi- مفید ہے کیونکہ مفروضے اتنی strain ہوتی ہیں کہ ناکامی قابلِ پیمائش ہو جاتی ہے۔

شواهد کتنے مضبوط هیں؟

مصنفین کی تعیین کے لیے شواهد مضبوط هیں۔

experimentally بلند-ریزولوشن انتہائی سرد طیف، ارتعاشی ساخت اور فوٹو الیکٹران زاویائی distributions ملانا کیے گئے—

complementary قیود۔ توانائی spacings اکیلا کمزور ہوتے، زاویائی اکیلا کمزور، انہی کے tension نے نسبیتی تشریح کی طرف نقطہ کیا۔

computationally مکمل طور پر نسبیتی جزو-four طریقے استعمال ہوئے، نہ کہ غیر نسبیتی حساب پر چھوٹا اسپن-مدار تصحیح add۔ دعویٰ یہی ہے کہ اسپن-مدار جوڑ چھوٹا نہیں۔

مطابقت کامل نہیں۔ حالت-B ارتعاشی تعدد loose notable اختتام ہے۔ مقالہ ایک سالماتی آئن مطالعہ کرتا ہے، پورا کیمیائی کائنات نہیں۔ مگر نسبیتی بھاری-element باہمی بندش بینچ مارک کے طور پر -CBi unusually صاف ہے: چھوٹا، experimentally واضح ہوئی، theoretically tractable۔

یہ کیوں اہم ہے

کیمیا باہمی بندش pictures سے سکھاتی ہے۔ یہ weakness نہیں؛ اچھا تصویر کوانٹم میکینکس کو انسانی-مفید شکل میں compress کرتی ہے۔

مگر ہر تصویر کی jurisdiction ہوتی ہے۔ سگما/pi تہرا-بندش تصویر ایسے حالت کی ہے جہاں اسپن-مدار جوڑ ثانوی ہو۔ بھاری elements اس حالت سے نکل سکتے ہیں۔ -CBi departure کو اتنے چھوٹا سالمہ میں دکھاتا ہے کہ ناکامی تفصیل میں پیمائش/calculate ہو سکتی ہے۔

بھاری-element کیمیا کے لیے اہم ہے کیونکہ bismuth اور neighbours کوانٹم-میکانی curiosities نہیں؛ نسبیت ان کی معمول accounting کا حصہ ہے۔ بھاری ایٹمز کے قریب باہمی بندش ڈیزائن/interpret/predict کرنے کے لیے chemists کو وہ زبان چاہیے جو دائیں محفوظ quantities رکھے۔

مقالہ پرانا تصویر کو foolish نہیں بناتا۔ زیادہ مفید کام کرتا ہے: exactly دکھاتا ہے کہ پرانا تصویر کہاں load لے جاتا ہے کرنا چھوڑ دیتی ہے۔

صاف خلاصہ

Kahraman، Hui، Zhang، Ellis، Choi، Peterson اور Wang نے CBi^- سالماتی آئن کو بلند ریزولوشن، انتہائی سرد فوٹو الیکٹران طیف نگاری اور امیجنگ سے ناپا اور طیف کا مکمل نسبیتی Dirac–Coulomb coupled-cluster حسابات سے موازنہ کیا۔ غیر جانب دار CBi کی تین حالتوں کی adiabatic detachment توانائیاں بالترتیب 3429.2، 5812.2 اور 5246.3 eV ملیں۔ طیف اور زاویائی تقسیم سادہ غیر نسبیتی $\sigma + 2\pi$ تہری بندش کی تصویر سے مطابقت نہیں رکھتیں۔ مضبوط spin–orbit coupling بندش کو نسبیتی Kramers جوڑوں میں دوبارہ منظم کرتی ہے: ایک π نما $|\Omega| = 3/2$ جوڑا اور دو $|\Omega| = 1/2$ جوڑے، جن میں π/σ اختلاط موجود ہے۔ یہ براہِ راست شواہد ہیں کہ بہت بھاری عناصر والے تہری بندش کے نظام میں درسی مداری لیبل بہترین محفوظ زبان نہیں رہتے۔ عام کیمیائی بندش رد نہیں ہوتی؛ بلکہ یہاں نسبیت کو حساب کا زیادہ بڑا حصہ سنبھالنا پڑتا ہے۔

ماخذ

Kahraman, Hui, Zhang, Ellis, Choi, Peterson and Wang, Relativistic collapse of the classical triple bond in the CBi- molecular ion, Science 393, 184-187 (2026)
https://doi.org/10.1126/science.aei1285

Kahraman et al., Tabular Data and Computational Details for the CBi Spectroscopic Analysis, Zenodo (2026)
https://doi.org/10.5281/zenodo.20249312