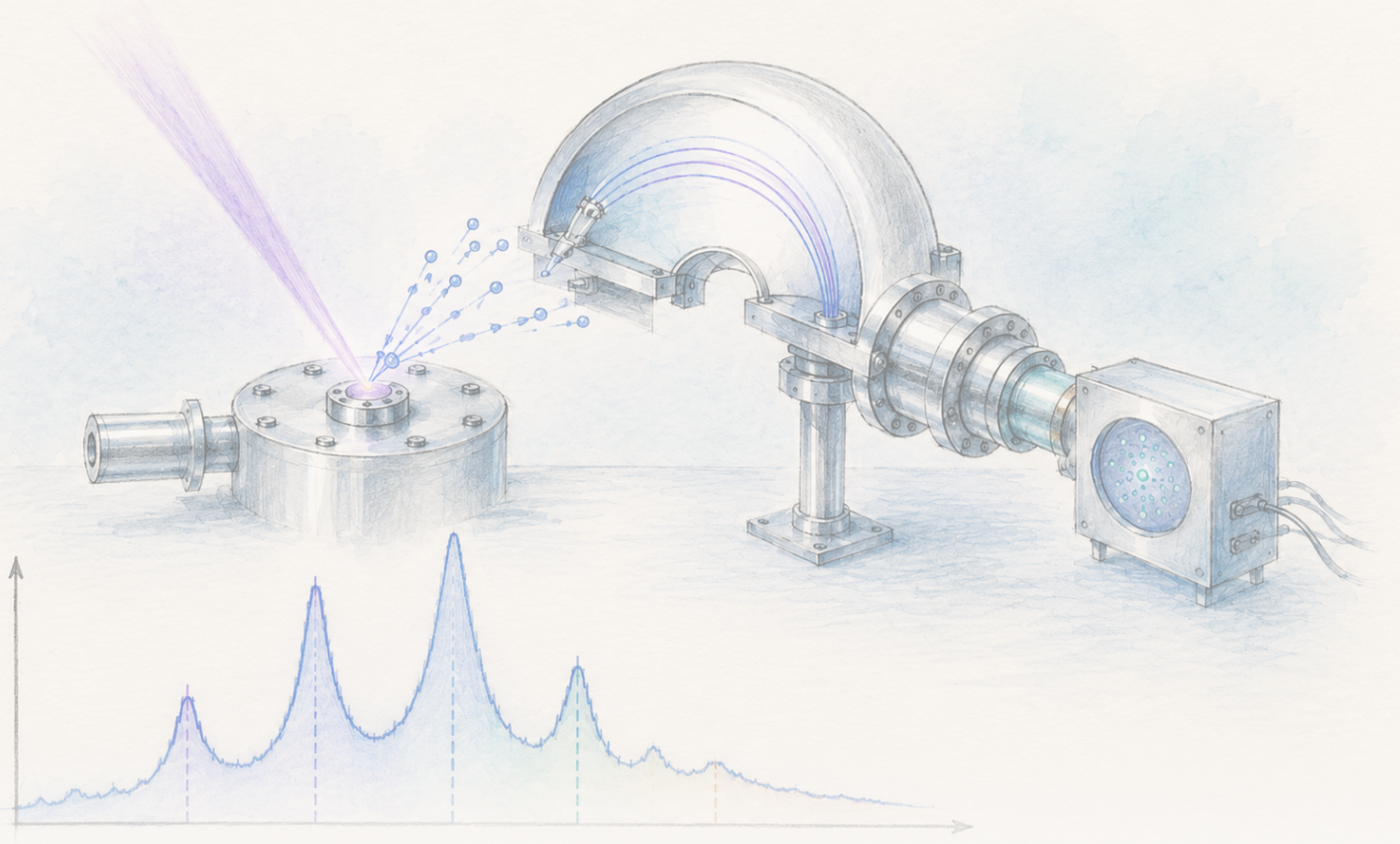




The CLEAN PAPER

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۔

cryogenic ion کو بلند-ریزولوشن Wang نے Peterson Choi, Ellis, Zhang, Hui, Kahraman, photoelectron طیف نگاری/امیجنگ سے پیمائش کیا اور طیف کو fully نسبتی coupled-cluster Dirac-Coulomb calculations سے موازنہ کرنا کیا۔ غیر جانب دار CBI کے تین حالتیں کی energies detachment adiabatic 3429.2، 5812.2، 5246.3 eV ملیں۔ طیف/ angular distributions سادہ nonrelativistic سگما-plus-two-pi بندش-triple تصویر سے مطابقت نہیں۔ مضبوط bonding coupling spin-orbit کو نسبتی Kramers جوڑے میں reorganize کرتی ہے: ایک 3/2 = |omega| pi-like اور 1/2 = |omega| two جوڑے with سگما-pi mixing- یہ براہ راست شواہد ہے کہ very بہاری-element بندش-triple نظام میں labels orbital textbook بہترین conserved زبان رہنا چھوڑتے ہیں۔ معمول کا کیمیائی reject bonding نہیں ہوتی؛ یہ درست نقشہ ہے کہ ایک جگہ bookkeeping relativity 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 سگا بندش اور دو π bonds ہے۔ سگا بندش بندش کا head-on حصہ ہے، جس میں الیکٹران کثافت دونوں اینٹز کے درمیان لائن کے ساتھ ہوتی ہے۔ π بندش جانب-on حصہ ہے، جہاں الیکٹران کثافت اس لائن کے اوپر/نیچے یا گرد ہوتی ہے۔ درسی تہرا بندش میں ایک سگا + π two ایک tidy package بناتے ہیں۔

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

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

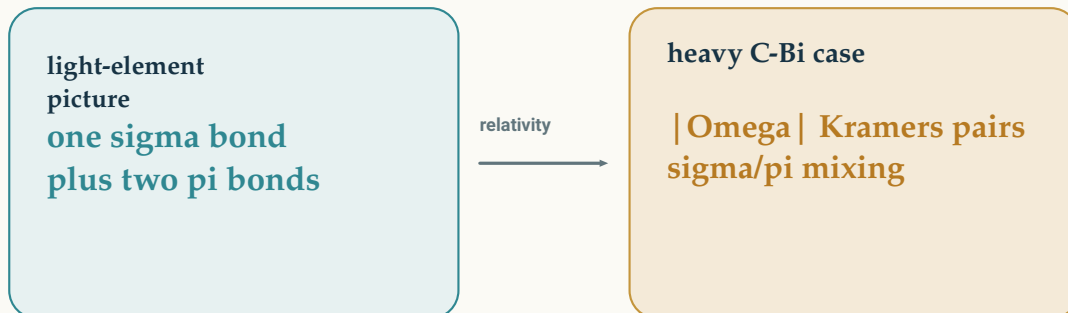
Bismuth کے 83 protons ہیں۔ اتنے بھاری nucleus کے قریب نسبیت decorative تصحیح نہیں رہتی، کیمیا کا حصہ بن جاتی ہے۔ الیکٹرانز ایسے مضبوط شعبہ میں حرکت کرتے ہیں کہ اسپن-مدار جوڑ-الیکٹران کے spin اور مداری motion کا جوڑ-اہم organizing حقائق میں سے ایک بن سکا ہے۔ تب پرانا لیبلز اس لیے disappear نہیں ہوتے کہ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

Lai-Sheng اور Peterson A. Kirk Choi، Wook Hyun Ellis، A. Neil Zhang، Xin-Yu Hui، Jie Kahraman، Deniz 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 سگا 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 سگا- π -two plus وضاحت collapse ہو کر نسبیتی وضاحت بنتی ہے، Kramers جوڑے کے ذریعے جنہیں کل زاویائی-projection momentum سے لیبل کیا جاتا ہے۔ بندش موجود ہے۔ پرانا حسابی زبان ناکام ہونا ہوتا ہے۔

The textbook triple bond meets heavy-atom relativity

Spin-orbit coupling mixes the clean sigma/pi picture in C-Bi.



Boundary: the textbook model still works where relativity is small.

روشنی-element تہا بندش میں ایک سگما + pi two مدارچے؛ بھاری C-Bi میں اسپن-مدار جوڑ اسے $|\Omega|$ Kramers جوڑے میں دوبارہ درجہ بند کرتی ہے جن میں سگما/pi اختلاط ہے۔ بندش موجود رہتا ہے—درسی لیبز 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 C-Bi بنایا، پھر anion کو بلند-ریزولوشن انتہائی سرد فوٹو الیکٹران طیف نگاری اور فوٹو الیکٹران امیجنگ سے پروب کیا۔ charged negatively anion آئن ہے؛ یہاں C-Bi 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 off knock 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 arrangement allowed 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 incoming animation: روشنی مادہ 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، C-Bi تجربہ نہیں۔ compatibility browser 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، B A، نظر آئیں۔ سالماتی طیف نگاری میں X عموماً ground الیکٹرانک حالت—غیر

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

بلند-ریزولوشن پیمائشیں کے اڈیابیٹک detachment توانائیاں:

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

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

نپا گیا ارتعاشی frequencies:

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

اعداد باہمی بندش کے بارے میں معلومات دیتے ہیں۔ مختصر/زیادہ مضبوط بندش عموماً زیادہ stretching تعدد دیتا ہے؛ کمزور/زیادہ طویل بندش کم۔ کیمیا ہمیشہ 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 ہم 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 ہونی چاہئیں۔

پیمائشیں اتنی tidy نہیں۔

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

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

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

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

نسبیتی وضاحت

بھاری ایٹمز میں spin اور مداری separable cleanly motion 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 + pi دو مدارچے، پھر add spin کرنے کے بجائے، متعلقہ حالتیں نسبیتی Kramers جوڑے ہیں۔ Kramers جوڑا spinors degenerate کا جوڑا ہے جو الیکٹران-odd نظام میں وقت-symmetry reversal 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 $3/2 = |\omega|$ Kramers جوڑا اور دو $1/2 = |\omega|$ جوڑے دیتی ہے جن میں substantial سگما/pi اختلاط ہے۔ plain اصطلاحات میں ایک جوڑا اب بھی pi mostly ہے، باقی دو صاف سگما یا pi نہیں رہتے۔ مقالہ title کا "collapse" یہی ہے: باہمی بندش disappear نہیں، کلاسیکی سگما/pi علیحدگی اس سالہ کے لیے دائیں زبان نہیں رہتی۔

afterthought decorative computations نہیں۔ مصنفین جزو-coupled-cluster Dirac-Coulomb four ground/کم حالتیں کے لیے، B DC-CCSD(T) حالت کے لیے۔ CBI- EOM-IP-CCSD کا C-Bi calculated بندش لمبائی 022.2 انگسٹروم اور stretching anion تعداد 1 695 cm⁻¹ ہے، experimental پیمانہ کے قریب۔ detachment calculated توانائیاں X/A پیمائشیں سے agree closely اور نسبیتی تعیین تائید کرتی ہیں۔

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

یہ کیا ثابت نہیں کرتا

- معمول کا سگما/pi باہمی بندش useless نہیں۔
- کاربن-nitrogen تہرا، alkynes bonds 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 flourish optional نہیں؛ درست تعیین کے لیے required ہے۔
- اس سے خود کوئی نیا مادہ یا کیمیائی ٹیکنالوجی نہیں بنتی۔

حد ہی نقطہ ہے۔ کلاسیکی باہمی بندش زبان وہاں 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۔

شواہد کتنے مضبوط ہیں؟

مصنفین کی تعیین کے لیے شواہد مضبوط ہیں۔

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، tractable-theoretically۔

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۔ سگ/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؛ نسبت ان کی معمول کا 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

Wang اور Peterson Choi، Ellis، Zhang، Hui، Kahraman، CBI- سالماتی آئن کو بلند ریزولوشن، انتہائی سرد فوٹو الیکٹران طیف نگاری اور امیجنگ سے ناپا اور طیف کا مکمل نسبیتی coupled-cluster Dirac-Coulomb حسابات سے موازنہ کیا۔ غیر جانب دار CBI کی تین حالتوں کی detachment adiabatic توانائیاں بالترتیب 3429.2، 5812.2 اور 5246.3 eV ملیں۔ طیف اور زاویائی تقسیم سادہ غیر نسبیتی $\pi^2 + \sigma$ تہری بندش کی تصویر سے مطابقت نہیں رکھتیں۔ مضبوط coupling spin-orbit 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 براہ 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 نسبت کو حساب کا زیادہ بڑا حصہ سنبھالنا پڑتا ہے۔

ماخذ

CBi- the in bond triple classical the of collapse Relativistic Wang, and Peterson Choi, Ellis, Zhang, Hui, Kahraman,
(2026) 187-184 ,393 Science ion, molecular
<https://doi.org/10.1126/science.aei1285>
(2026) Zenodo Analysis, Spectroscopic CBi the for Details Computational and Data Tabular al., et Kahraman
<https://doi.org/10.5281/zenodo.20249312>