Modul Ajar

FISIKA KUANTUM

KATA PENGANTAR

Puji syukur kepada Allah SWT, karena berkat dan rahmat-Nya penulis mampu menyelesaikan sebuah modul ajar untuk mata kuliah Fisika Kuantum. Pengembangan modul ajar ini merupakan sebagai salah satu output yang dihasilkan persemester sebagai kelangkapan bahan ajar.

Secara keseluruhan Modul Termodinamika ini terdiri dari 6 Modul yaitu: Modul 1 – Gejala Kuantum, Modul 2 – Dasar-Dasar Fisika Kuantum, Modul 3 – Persamaan Schrodinger, Modul 4 – Potensial Sederhana, Modul 5 – Atom Hidrogen, dan Modul 6 – Osilator Harmonik.

Modul ini diperuntukkan bagi para mahasiswa sarjana yang mempelajari bidang Fisika Kuantum. Harapan penulis bahwa para mahasiswa sarjana dapat sungguh menguasai materi modul ini sehingga nantinya dapat menjadi bekal untuk mengasai ilmu fisika berikutnya yang berkaitan. Dengan bantuan yang tepat itu diharapkan nantinya akan banyak siswa yang tertarik dan senang untuk menekuni bidang fisika lebih lanjut ketika mahasiswa bertugas sebagai guru Fisika di sekolah.

Semoga modul ini dapat membantu kemajuan guru fisika di Indonesia dan akhirnya juga ikut membantu perkembangan pendidikan di Indonesia terutama dalam bidang fisika.

Penulis menyadari bahwa modul yang dikembangkan ini masih belum sempurna. Oleh karena itu, penulis sangat mengharapkan masukan dan saran demi kesempurnaan modul ini.

Penulis

Fatimah, S.Pd., M.Si
NIDN. 1301078801

DAFTAR ISI

MODUL 1
GEJALA KUANTUM

PENDAHULUAN

Modul ini merupakan modul pertama dari mata kuliah Fisika Kuantum yang menjelaskan tentang gejala kuantum termasuk konsep radiasi benda hitam, efek fotolistrik, efek Compton, hipotesis de Broglie, difraksi elektron, teori atom Bohr. Dengan mempelajari modul ini Anda tidak hanya memperluas pemahaman kita tentang alam semesta, tetapi juga membuka pintu untuk inovasi teknologi yang dapat mengubah berbagai aspek kehidupan kita. Meskipun konsepnya mungkin terasa abstrak dan kompleks, dampaknya pada dunia nyata sangat signifikan dan terus berkembang. Gejala kuantum merujuk pada fenomena yang terjadi pada skala atom dan subatom yang tidak dapat dijelaskan oleh fisika klasik. Fenomena-fenomena ini menjadi dasar dari mekanika kuantum, sebuah teori fundamental dalam fisika modern.

Radiasi benda hitam adalah radiasi elektromagnetik yang dipancarkan oleh benda hitam sempurna - sebuah objek teoritis yang menyerap semua radiasi elektromagnetik yang jatuh padanya, tanpa memantulkan apa pun. Meskipun benda hitam sempurna tidak ada dalam kenyataan, konsep ini sangat penting dalam fisika dan memiliki banyak aplikasi praktis.

Pada kegiatan belajar ini akan kita pelajari bagaimana konsep gejala kuantum seperti radiasi benda hitam, efek foto listrik, efek Compton, hipotesis de Broglie, difraksi elektron, teori atom Bohr. Dalam modul ini, akan disajikan dua kegiatan belajar, yaitu:

1. Kegiatan Belajar 1 : Radiasi Benda Hitam, Efek Fotolistrik, efek Compton
2. Kegiatan Belajar 2 : Hipotesis de Broglie, Difraksi Elektron, Teori Atom Bohr

Setelah mempelajari modul ini Anda diharapkan memiliki kompetensi Mampu menelaah dan mengaplikasikan konsep gejala kuantum termasuk radiasi benda hitam, efek fotolistrik, menganalisis efek Compton, hipotesis de Broglie, difraksi elektron serta teori atom Bohr secara mandiri. Secara lebih khusus lagi, Anda diharapkan dapat:

1. Menelaah dan mengaplikasikan konsep gejala kuantum tentang radiasi benda hitam
2. Menelaah dan mengaplikasikan konsep gejala kuantum tentang efek fotolistrik
3. Menganalisis konsep efek coumpton.

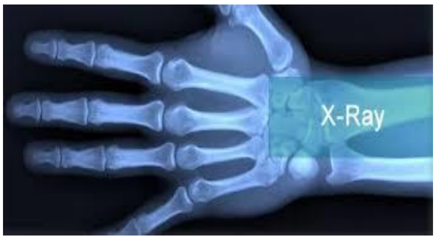
4. Menganalisis hipotesis de Broglie
5. Menganalisis konsep difraksi elektron
6. Menganalisis teori atom Bohr

Agar Anda memperoleh hasil yang maksimal dalam mempelajari modul ini, ikuti petunjuk pembelajaran berikut ini.

1. Sebelum membaca materi in yang mau dipelajari, bacalah bagian Pendahuluan modul ini, sampai Anda memahami betul apa, untuk apa, dan bagaimana mempelajari modul ini.
2. Bacalah bagian demi bagian, temukan kata-kata kunci dan kata-kata yang Anda anggap baru.
3. Carilah dan baca pengertian kata-kata tersebut dalam daftar kata-kata sulit dalam modul ini atau dalam kamus yang ada.
4. Tangkaplah pengertian demi pengertian dari isi modul ini melalui pemahaman sendiri, tukar pikiran dengan sesama mahasiswa, dan dosen Anda.
5. Mantapkan pemahanan Anda melalui diskusi dengan sesama teman mahasiswa.

Kegiatan Belajar 1

Gejala Kuantum



Gb. 1.1 Pemanfaatan efek fotolsirik

Pernahkan anda mendengar Pemeriksaan Sinar-X atau yang lebih umum dikenal dengan Rontgen dan airport scanner/mesin x-ray? Rontgen dan airport scanner merupakan Salah satu peralatan yang berkaitan dengan kuantisasi radiasi elektromagnetik, seperti halnya efek fotolistrik.

Pemeriksaan Sinar-X atau Rontgen banyak digunakan di Rumah sakit untuk mengambil Pencitraan X-ray gambar bagian dalam tubuh. Gambar yang dihasilkan berupa gambar nuansa hitam dan putih. Gambar hitam putih ini dihasilkan karena jaringan-jaringan tubuh menyerap jumlah radiasi yang berbeda. Misalnya, kalsium dalam tubuh menyerap sinar-X paling banyak, sehingga tulang tampak putih. Sementara lemak dan jaringan lunak lainnya menyerap lebih sedikit, sehingga terlihat abu-abu.

Adapun airport scanner/mesin x-ray merupakan alat yang fungsinya mendeteksi secara visual semua barang bawaan penumpang pesawat udara yang dapat membahayakan keselamatan penumpang lainnya. Security system atau x- ray security scanner dapat mendeteksi barang bawaan tanpa harus mengeluarkan isinya

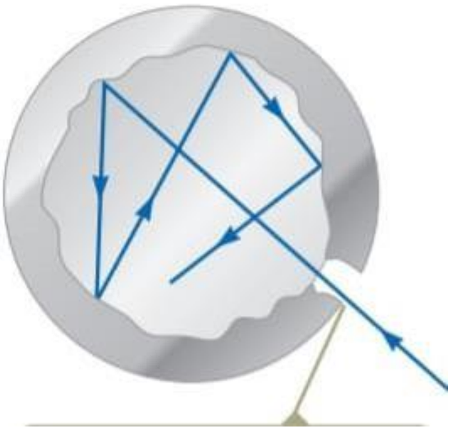
Penerapan lainnya dari fisika kuantum antara lain yaitu pengisian suara (dubbing film), fotosel, mikroskop elektron dan lain-lain. Pengisian suara (dubbing) film direkam dalam bentuk sinyal optik disepanjang pinggiran keping film. Pada saat film diputar, sinyal ini dibaca kembali melalui proses efek fotolistrik (cahaya menyinari jalur suara dan kemudian ke fotosel), fotosel membangkitkan arus listrik yang sebanding dengan intensitas cahaya yang datang padanya. Sinyal listrik ini diperkuat sehingga dihasilkan film bersuara.

A. Radiasi Benda Hitam

Panas (kalor) dari matahari sampai ke bumi melalui gelombang elektromagnetik. Perpindahan ini disebut radiasi, yang dapat berlangsung dalam ruang hampa. Radiasi yang dipancarkan oleh sebuah benda sebagai akibat suhunya disebut radiasi panas (thermal radiation).

Setiap benda secara kontinu memancarkan radiasi panas dalam bentuk gelombang elektromagnetik. Bahkan sebuah kubus es pun memancarkan radiasi panas, sebagian kecil dari radiasi panas ini ada dalam daerah cahaya tampak. Walaupun demikian kubus es ini tak dapat dilihat dalam ruang gelap. Serupa dengan kubus es, badan manusia pun memancarkan radiasi panas dalam daerah cahaya tampak, tetapi intensitasnya tidak cukup kuat untuk dapat dilihat dalam ruang gelap.

Setiap benda memancarkan radiasi panas, tetapi umumnya benda terlihat oleh kita karena benda itu memantulkan cahaya yang dating padanya, bukan karena ia memacarkan radiasi panas. Benda baru terlihat karena meradiasikan panas jika suhunya melebihi 1000 K. Pada suhu ini benda mulai berpijar merah sepeti kumparan pemanas sebuah kompor listrik. Pada suhu di atas 2000 K benda berpijar kuning atau keputih-putihan, seperti besi berpijar putihatau pijar putih dari filamen lampu pijar. Begitu suhu benda terus ditingkatkan, intensitas relatif dari spectrum cahaya yang dipancarkannya berubah. Ini menyebabkan pergeseran dalam warna- warna spektrum yang diamati, yang dapat digunakan untuk menaksir suhu suatu benda.



Gb. 1.2 Model penyerapan radiasi pada benda hitam

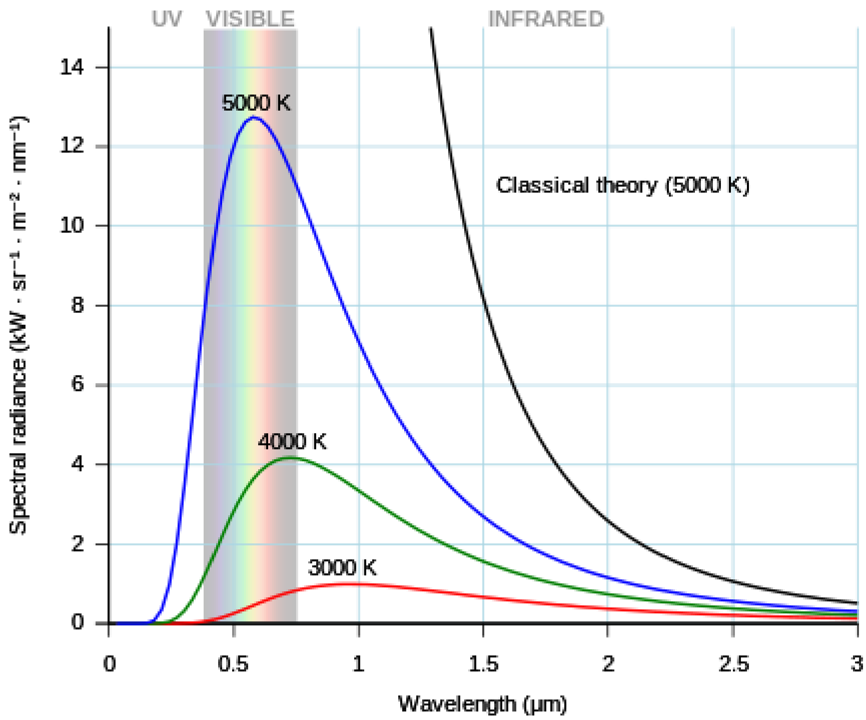
Secara umum bentuk terinci dari spectrum radiasi panas yang dipancarkan oleh suatu benda panas bergantung pada komposisi benda itu. Meskipun demikian hasil eksperimen menunjukkan bahwa ada satu kelas benda panas yang memancarkan spectra panas dengan kalor yang universal. Radiasi benda hitam adalah fenomena fisika di mana suatu benda ideal yang menyerap semua radiasi elektromagnetik yang jatuh ke permukaannya (tanpa memantulkan atau menembus) memancarkan radiasi dalam spektrum tertentu yang hanya bergantung pada suhu benda tersebut. Benda seperti itu disebut "benda hitam" (black body). Benda hitam adalah suatu benda yang permukannnya sedemikian sehingga menyerap semua radiasi yang dactang padanya (tidak ada radiasi yang dipantulkan keluar dari benda hitam). Dari pengamatan diperoleh bahwa semua benda hitam pada suhu yang sama memancarkan radiasi dengan spektrum yang sama.

Tidak ada benda yang hitam sempurna. Kita hanya dapat membuat benda yang mendekati benda hitam. Ketika radiasi dari cahaya matahari memasuki lubang kotak, radiasi dipantulkan berulang–ulang (beberapa kali) oleh dinding kotak dan setelah pemantulan ini hamoir dapat dikatakan tidak ada lagi radiasi yang tersisa (semua radiasi telah diserap di dalam kotak) dengan kata lain, lubang telah berfungsi menyerap semua radiasi yang dating padanya. Akibatnya benda tampak hitam.

Terkait dengan radiasi benda hitam, terdapat beberapa teori dan hukum seperti teori Plack, Hukum Stefan-Boltzmann dan Hukum Pergeseran Wien.

1. Teori Planck

Hukum Planck menjelaskan rapat spektrum radiasi elektromagnetik yang dilepas benda hitam dalam kesetimbangan termal pada temperatur T. Hukum ini mengambil namanya dari Max Planck yang mengusulkannya tahun 1900. Hukum ini adalah pionit bagi fisika modern dan mekanika kuantum.



Gb. 1.3 Hukum Planck (kurva berwarna) secara akurat menjelaskan radiasi benda hitam dan menyelesaikan teori klasik (kurva hitam)

Radiansi spektrum suatu benda, B_ν, menjelaskan seberapa banyak energi yang dilepas sebagai radiasi pada beberapa frekuensi. Radiansi diukur dalam daya yang dilepas per satuan luas benda, per satuan solid angle dimana radiasi diukur, per satuan frekuensi. Planck menunjukkan bahwa radiansi spektral benda pada temperatur absolut T dirumuskan dengan k_B adalah konstanta Boltzmann, h adalah konstanta Planck, dan c adalah laju cahaya pada medium, apakah material atau hampa udara. Radiasi spektral juga dapat diukur per satuan panjang gelombang. Pada kasus ini, dirumuskan dengan:

$$B_\nu(\nu, T) = \frac{2h\nu^3}{c^2}\frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_\mathrm{B}T}} - 1}$$

Dimana:
h adalah konstanta Planck;
c adalah kecepatan cahaya dalam ruang hampa;
k adalah konstanta Boltzmann;
ν adalah frekuensi radiasi elektromagnetik;
T adalah temperatur absolut benda.

Hukum ini juga dapat dinyatakan dalam istilah lainnya, seperti jumlah foton yang dilepas pada panjang gelombang tertentu, atau rapat energi dalam volume radiasi. Satuan SI dari Bν adalah $W \cdot sr^{-1} \cdot m^{-2} \cdot Hz-1$, sedangkan satuan Bλ adalah $W \cdot sr^{-1} \cdot m^{-3}$. Pada batasan frekuensi rendah (panjang gelombang tinggi), Hukum Planck cenderung ke Hukum Rayleigh–Jeans, sedangkan pada batasan frekuensi tinggi (panjang gelombang pendek), lebih cenderung ke perkiraan Wien.

Max Planck mengembangkan hukum ini tahun 1900 dengan konstanta yang ditentukan empiris, nantinya menunjukkan bahwa, dinyatakan sebagai distribusi energi stabil untuk radiasi dalam kesetimbangan termodinamika. Sebagai distribusi energi, hukum ini merupakan salah satu kelompok distribusi kesetimbangan termal yang diantaranya termasuk distribusi Bose–Einstein, distribusi Fermi–Dirac dan distribusi Maxwell–Boltzmann.

2. Hukum Stefan-Boltzmann

Hukum Stefan–Boltzmann menyatakan bahwa daya yang dilepas per satuan luas dari permukaan benda hitam adalah berbanding lurus dengan pangkat empat suhu absolutnya:

$$j^{\star} = \sigma T^4$$

dengan j* adalah total daya yang diradiasikan per satuan luas, T adalah temperatur absolut dan σ = 5,67×10−8 W m−2 K−4 adalah konstanta Stefan–Boltzmann. Hal ini didapat dengan mengintegralkan *I(ν, T)* terhadap frekuensi dan solid angle:

$$j^{\star} = \int_0^\infty d\nu \int d\Omega \, \cos\theta \cdot I(\nu, T)$$

Faktor cos θ muncul karena kita menganggap radiasi pada arah normal ke permukaan.:

$$\int d\Omega \, \cos\theta = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi/2} d\theta \, \sin\theta \cos\theta = \pi.$$

I(ν, T) independen terhadap sudut dan melewati integral solid angle. Masukkan rumus *I(ν, T)* menghasilkan

$$j^{\star} = \frac{2\pi(kT)^4}{c^2 h^3} \int_0^\infty dx \, \frac{x^3}{e^x - 1},$$

dengan $x \equiv h\nu/kT$ tanpa satuan. Integral terhadap *x* memiliki nilai $\pi^4/15$, sehingga menghasilkan

$$j^{\star} = \sigma T^4, \quad \sigma \equiv \frac{2\pi^5}{15} \frac{k^4}{c^2 h^3}$$

3. Hukum Pergeseran Wien

Hukum perpindahan Wien menjelaskan bagaimana spektrum radiasi benda-hitam pada suhu berapapun berkorelasi dengan spektrum pada suhu lainnya. Jika diketahui bentuk spektrum pada suatu suhu, maka bentuk spektrum pada suhu lainnya dapat dihitung. Intensitas spektrum dapat dinyatakan sebagai fungsi panjang gelombang atau fungsi frekuensi.

Akibat dari hukum perpindahan Wien adalah panjang gelombang saat intensitas per satuan panjang gelombang dari radiasi yang dihasilkan benda hitam ketika maksimum, λ_{max}, hanya sebagai fungsi temperatur:

$$\lambda_{\max} = \frac{b}{T}$$

dengan konstanta b, dikenal dengan konstanta perpindahan Wien, sama dengan 2,8977729(17)×10^{-3} K m.

Hukum Planck diatas juga dinyatakan sebagai fungsi frekuensi. Intensitas maksimum adalah

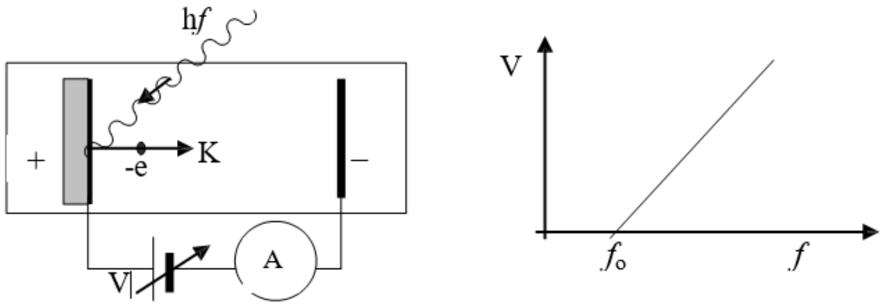
$$\nu_{\max} = T \times 58.8 \text{ GHz/K}$$

B. Efek Fotolistrik

Fenomena pertama yang dijelaskan dengan teori kuantum model yaitu Radiasi Benda Hitam. Pada akhir abad ke-19 diambil data pada radiasi termal, percobaan menunjukkan bahwa cahaya menumbuk pada permukaan suatu logam tertentu menyebabkan elektron dipancarkan dari permukaan tersebut. Fenomena ini dikenal dengan Efek Fotolistrik dan elektron yang dipancarkan disebut fotoelektron. Pada 1887 Hertz mengamati peningkatan discharge dari elektroda logam ketika disinari dengan cahaya ultraviolet. Pengamatan itu diteruskan oleh Hallwachs; dia mengamati emisi elektron ketika dia menyinari permukaan-permukaan logam seperti seng, rubidium, potassium dan sodium. Proses lepasnya elektron-elektron dari permukaan logam yang disinari disebut emisi fotoelektron atau effek foto-listrik. Dalam pengamatan itu ternyata: (i) untuk suatu jenis logam ada frekuensi cahaya minimal yang dapat melepaskan elektron, dan (ii) semakin tingi intensitas cahaya yang mengenai permukaan logam, semakin banyak elektron yang dilepaskan. Fakta eksperimen dari efek foto-listrik ini tak dapat dijelaskan dengan teori-teori klasik seperti teori listrik-magnetnya Maxwell. Pada 1905, Einstein mengemukakan bahwa proses tersebut dapat diungkapkan sebagai masalah tumbukan partikel. Menurut beliau, suatu berkas cahaya monokromatik dapat dipandang sebagai kumpulan partikel-partikel yang disebut foton yang masing-masing memiliki energi hf di mana f adalah frekuensi cahaya. Jika suatu foton menumbuk permuka-an logam, energi foton itu dialihkan ke elektron dan ketika elektron diemisikan dari permukaan logam energi kinetiknya ($K=\frac{1}{2}mv^2$):

$$K = hf - W$$

dengan W adalah kerja yang diperlukan untuk melepaskan elektron; W ini bergantung pada jenis logamMillikan pada 1916 melakukan eksperimen seperti dalam Gb.1.3. Energi kinetik K diukur dengan memberikan potensial stop V (sehingga K=eV) ditunjukkan oleh penunjukan ampermeter sama dengan 0. Jika V=0, maka W=hvo. sedangkan konstanta Planck h adalah kemiringan kurva V-f.



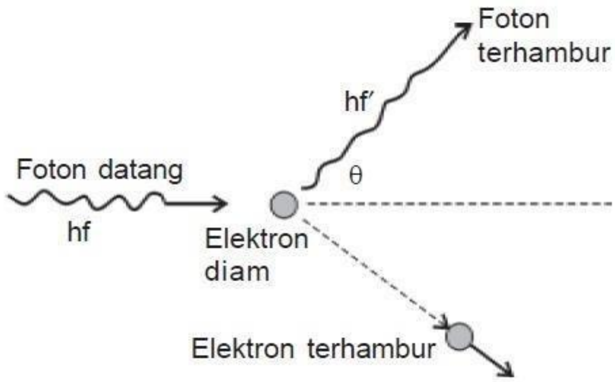
Gb. 1.3 Eksperimen efek fotolistrik (a), dan potensial stop sebagai fungsi frekuensi cahaya

C. Efek Compton

Pada tahun 1905 para ilmuwan menemukan pemikiran bahwa cahaya terdiri dari foton-foton dengan besar energi tertentu, namun pemikiran tersebut belum dapat membuktikan bahwa foton- foton tersebut juga membawa momentum. Dalam teori klasik, gambaran tentang gelombang adalah jika seberkas gelombang dengan frekuensi f1 bertumbukan dengan suatu bahan, maka elektron dalam bahan tersebut akan mengalami osilasi dengan frekuensi yang sama dengan frekuensi gelombang yang menumbuknya. Akibat dari osilasi elektron tersebut, maka akan timbul radiasi yang memiliki frekuensi yang sama dengan frekuensi osilasi elektron yang tentunya juga sama dengan frekuensi gelombang datang yang menumbuk bahan.

Namun dari eksperimen yang dilakukan oleh Compton diperoleh hasil yang tidak sesuai dengan teori klasik. Arthur Holly Compton menemuka bahwa hamburan compton merupakan hamburan foton oleh partikel bermuatan , biasanya elektron . Ini menghasilkan penurunan energi (peningkatan panjang gelombang) dari foton (yang mungkin merupakan sinar- X atau foton sinar gamma), yang disebut efek Compton . Bagian dari energi foton ditransfer ke elektron recoiling. Hamburan Compton Invers terjadi ketika partikel bermuatan mentransfer sebagian energinya ke foton.

Pada tahun 1923, Compton menjelaskan hasil eksperimennya dengan berasumsi bahwa berkas sinar (dalam hal ini sinar-x) yang digunakan untuk menembak bahan merupakan arus foton. Energi foton tersebut sebesar $E = h\nu$. Foton ini bertumbukan lenting dengan elektron yang ada pada target. Jika elektron mengambil sebagian energi yang dimiliki oleh foton, maka foton yang terhambur akan memiliki energi yang lebih kecil dibandingkan dengan energi foton yang datang. Hal ini menyebabkan foton yang terhambur akan memiliki frekuensi yang lebih kecil atau panjang gelombang yang lebih besar daripada foton yang datang. Hamburan Compton merupakan contoh hamburan inelastis cahaya oleh partikel bermuatan gratis, di mana panjang gelombang cahaya yang dihamburkan berbeda dari radiasi insiden. Hamburan inelastis merupakan proses hamburan mendasar di mana energi kinetik dari partikel kejadian tidak dikonservasi (berbeda dengan hamburan elastis). Dalam proses hamburan inelastik, sebagian energi dari partikel peristiwa hilang atau meningkat. Meskipun istilah ini secara historis terkait dengan konsep tabrakan inelastik dalam dinamika , kedua konsep ini cukup berbeda; tabrakan inelastik dalam dinamika mengacu pada proses di mana energi kinetik makroskopis total tidak dilestarikan. Secara umum, hamburan karena tumbukan tidak elastis akan menjadi tidak elastis, tetapi, karena tumbukan elastis sering mentransfer energi kinetik antar partikel, hamburan karena tumbukan elastis juga bisa dalam bentuk elastis.



Gb. 1.4 Skema percobaan tumbukan foton dengan elektron oleh Compton. Foton yang terhambur memiliki panjang gelombang lebih panjang λ ‘ dan momentum p’. Electron terpental dengan momentum pe. Arah foton yang terhambur membentuk sudut **P** dengan arah foton datang

Gambar tersebut memperlihatkan sebuah tumbukan foton dan sebuah elektron, di mana elektron tersebut mula-mula dianggap diam dan dapat dianggap bebas, yakni tidak terikat kepada atom-atom penghambur. Ternyata, sinar X tersebut dihamburkan dengan sudut θ terhadap arah datangnya. Panjang gelombang sinar X yang terhambur menjadi lebih besar daripada panjang gelombang semula. Analisis teori gelombang mengharuskan panjang gelombang sinar X tidak berubah, sementara pada kenyataannnya memberikan hasil yang berbeda.

Foton-foton dalam sinar X bertumbukan dengan elektron bebas dan foton tersebut terhambur. Ketika tumbukan terjadi, foton kehilangan sebagian energinya karena diserap oleh elektron. Oleh karena itu, panjang gelombang foton yang terhambur menjadi besar karena energinya menjadi kecil. Karena terjadi tumbukan antara foton dan elektron mengharuskan foton memiliki momentum sehingga berlaku Hukum Kekekalan

Momentum, besarnya momentum tersebut dapat dihitung dengan cara menurunkan momentum foton dari teori relativitas khusus Einstein yaitu :

Eistein menyatakan kesetaraan energi-massa dengan E = m . c^2 . Dalam efek fotolistrik kita melihat bahwa cahaya yang dijatuhkan pada keping logam diperlukan sebagai paket – paket energiyang disebut foton dengan energi tiap foton sebesar E = hf.

$E = m \, . \, c^2$

$E = mc \, . \, c = p \, . \, c$

Mengingat energi foton Planck E = hf maka momentum relativistic foton dapat ditentukan:

$P = mc = hfc$

Nilai $\lambda = c f$ atau $1\lambda = fc$ sehingga persamaan diatas dapat ditulis sebagai berikut : $P = h\lambda$ atau $\lambda = hp$.

P = momentum sebuah foton (Ns)

c = laju cahaya (m/s)

h = tetapan Planck (6,63 X 10-34 Js)

λ = panjang gelombang foton (m)

f = frekuensi cahaya (Hz)

Dengan menggunakan persamaan tersebut untuk momentum foton, Compton menerapkan Hukum Kekekalan Momentum dan Energi pada tumbukan antara foton dan elektron. Hasilnya adalah pergeseran panjang gelombang fotonsinar X yang memenuhi persamaan:

Δλ = λ' – λ = h/m0 c (1- cos θ)

Dengan :

Δλ = pergeseran panjang gelombang foton (m)

λ = panjang gelombang foton datang (m)

λ' = panjang gelombang foton hambur (m) m0= massa diam elektron

h = konstanta Plank (6,63 x 10-34 Js)

θ= sudut hamburan(o)

D. Aplikasi Hamburan Compton

Salah satu aplikasi dari hamburan compton adalah "Aplikasi Metode Hamburan Compton Energi Ganda Untuk Pengukuran Densitas Fluida Dan Uji Tak Merusak Pipa". Pengujian tak merusak (Non Destructive Testing, NDT) adalah suatu bentuk pengujian yang tidak merusak benda uji, komponen, produk atau konstruksi. Tujuan NDT adalah untuk mengetahui keadaan komponen mengandung cacat atau tidak. Selama 50 tahun terakhir ini, telah dikembangkan berbagai cara NDT untuk mendukung kegiatan inspeksi visual. penelitian simulasi aplikasi teknik hamburan Compton energi ganda pada uji tak merusak pipa untuk pengukuran densitas elektron fluida di dalam pipa dan menentukan letak serta ukuran kerusakan internal pada dinding pipa. Teknik yang dikembangkan ini menggunakan sebuah sumber radioaktif foton terkolimasi, yaitu Iridium-192 yang memancarkan sinar gamma dengan energi 317 keV dan 468 keV serta sebuah detektor titik. Untuk meminimalkan ukuran volume hambur, dipilih sudut hambur 90o. Kajian ini merupakan penelitian simulasi dengan menggunakan perangkat lunak MCNP versi 4B. Penentuan densitas elektron dilakukan untuk dua sampel fluida, yaitu air ringan (H2O) dan air berat (D2O). Data masukan disusun dan kemudian digunakan oleh perangkat lunak MCNP untuk menghasilkan respon detektor secara simulasi. Hasil ini kemudian diolah secara manual untuk menghitung densitas elektron pada setiap bahan, hasil kajian menunjukkan bahwa metode ini memberikan kesalahan maksimum 2,2 % untuk pengukuran densitas elektron fluida dalam pipa. Hasil simulasi juga memperlihatkan bahwa metode ini dapat dipakai untuk evaluasi secara visual suatu obyek dengan cara menghitung tebal dinding pipa. Pada kasus tertentu, lokasi dan ukuran kerusakan pipa kemungkinan tidak dapat ditentukan dengan tepat. Berdasarkan uraian di atas dapat diambil beberapa kesimpulan, metode hamburan Compton energi ganda dapat digunakan untuk menentukan densitas elektron fluida di dalam pipa. Pada dua kasus penelitian ini diperoleh persentase kesalahan di bawah 2% (2,1876%), kerusakan akibat korosi yang terjadi di permukaan dalam pipa menyebabkan nilai densitas elektron di setiap titik uji pada obyek terdeteksi sangat bervariasi, metode hamburan Compton energi ganda dapat digunakan untuk menentukan lokasi dan ukuran kerusakan internal yang terdapat di dalam suatu obyek dengan tepat, dengan cara menghitung perubahan tebal bahan pada masing-masing posisi obyek, pada kasus, yaitu obyek yang memiliki beberapa cacat yang terletak pada lokasi dengan perbedaan sudut 90o, maka lokasi dan ukuran cacat yang terdapat di dalam obyek tersebut ada kemungkinan tidak dapat ditentukan dengan tepat.

Aplikasi lainnya adalah “Perkembangan Penggunaan Teknik Hamburan Compton Sinar Gamma pada Aplikasi Sistem Uji Tak Merusak”. Sinar gamma merupakan sinar radioaktif yang memiliki energi tinggi dengan panjang gelombang yang pendek dalam spektrum elektromagnetik. Sinar gamma diproduksi oleh transisi energi karena percepatan elektron. Dalam beberapa tahun terakhir sinar gamma banyak dimanfaatkan pada aplikasi uji tak-merusak untuk melakukan pengujian terhadap suatu bahan di bawah permukaan yang sulit untuk dideteksi secara visual tanpa menyebabkan kerusakan pada bahan yang diuji. Energi sinar gamma yang tinggi mengakibatkan foton yang dihasilkan mampu melakukan penetrasi hingga kelapisan bahan yang diteliti. Berbagai penelitian menggunakan sinar gamma telah banyak dilakukan seperti pengamatan perbedaan intensitas hamburan balik foton gamma berenergi 1,12 MeV dari target elemen yang berbeda seperti Zn, Al, Sn, Fe dan C serta campurannya, menentukan ketebalan bahan menggunakan hamburan sinar gamma 137Cs, penggunaan sinar gamma dengan energi 662 keV dan 511 keV pada pengukuran koefisien atenuasi massa beton, pengukuran massa jenis fluida dalam pipa polietilen menggunakan 137Cs, pemeriksaan ketahanan kawat baja pada jembatan menggunakan 192Ir, dan penerapan teknik hamburan gamma dengan sumber gamma 137Cs 5 mCi (185 MBq) untuk uji material. Salah satu gejala fisis yang terjadi ketika foton sinar gamma berinteraksi dengan suatu material ialah hamburan Compton. Pada fenomena hamburan Compton, foton mengalami defleksi dari arah pergerakannya semula dengan sudut hamburan tertentu setelah berinteraksi dengan elektron di dalam material. Teknik hamburan Compton merupakan salah satu teknik yang digunakan pada aplikasi uji tak-merusak. Beberapa sistem uji tak-merusak menggunakan teknik hamburan Compton sinar gamma diterapkan pada uji ketahanan bahan, pendeteksian rongga, retakan, dan kebocoran pipa minyak maupun gas. Teknik hamburan Compton dapat juga diaplikasikan untuk mengukur densitas bahan. Paper ini mendeskripsikan perkembangan penggunaan metode hamburan Compton pada berbagai aplikasi khususnya uji tak-merusak selama lima tahun terakhir untuk menemukan kelebihan dan prospek penelitian menggunakan teknik hamburan Compton di masa depan. Pada umumnya penggunaan teknik hamburan Compton dipilih sebagai alternatif keterbatasan penggunaan metode transmisi pada pengukuran dimana akses dari dua sisi tidak mungkin dilakukan. Pengukuran atau pengujian terhadap suatu bahan menggunakan teknik hamburan Compton memiliki berbagai keuntungan yaitu bahan yang diukur dapat diakses dari sisi yang sama sehingga hal ini dapat menjadi alternatif proses pengukuran dengan kondisi dimana akses dari kedua sisi tidak dapat dilakukan. Penggunaan sinar gamma efektif dalam pengukuran bahan yang tebal karena mampu melakukan penetrasi yang dalam terhadap objek yang diteliti. Penelitian lanjutan dapat dilakukan pada berbagai aplikasi. Salah satu diantaranya adalah penerapan teknik hamburan Compton pada pengukuran ketahanan jalan raya aspal menggunakan sumber sinar gamma.

RANGKUMAN

Gejala kuantum adalah fenomena-fenomena yang terjadi pada skala atom dan subatom, di mana hukum-hukum fisika klasik tidak lagi berlaku dan digantikan oleh prinsip-prinsip mekanika kuantum. Pemahaman tentang gejala kuantum sangat penting dalam fisika modern karena memberikan wawasan mendalam tentang struktur alam semesta pada tingkat yang paling dasar.

Radiasi benda hitam adalah radiasi elektromagnetik yang dipancarkan oleh benda hitam sempurna (benda yang menyerap semua radiasi yang jatuh padanya) dalam kesetimbangan termal. Fenomena ini tidak dapat dijelaskan oleh fisika klasik, yang dikenal sebagai "bencana ultraviolet". Max Planck memecahkan masalah ini pada tahun 1900 dengan mengusulkan bahwa energi dipancarkan dalam paket diskrit yang disebut kuanta, yang menjadi awal mula fisika kuantum.

Seperti yang telah kita bahas sebelumnya, efek fotolistrik adalah fenomena di mana elektron dilepaskan dari permukaan logam ketika cahaya dengan frekuensi yang cukup tinggi mengenai permukaan tersebut. Albert Einstein menjelaskan fenomena ini pada tahun 1905 dengan mengusulkan bahwa cahaya terdiri dari paket-paket energi diskrit yang disebut foton.

Efek Compton, yang ditemukan oleh Arthur Compton pada tahun 1923, adalah fenomena di mana foton sinar-X berinteraksi dengan elektron dalam suatu materi, menyebabkan peningkatan panjang gelombang foton (penurunan energi) dan perubahan arah gerak elektron. Efek ini memberikan bukti lebih lanjut tentang sifat partikel cahaya dan mendukung teori foton Einstein.

LATIHAN

Untuk memperdalam pemahaman Anda mengenai materi di atas, kerjakanlah latihan berikut!

1. Sebuah stasiun Radio beroperasi pada frekuensi 103,7 MHz dengan keluaran daya sebesar 200kW. Tentukan laju emisi kuanta dari stasium radio tersebut!
2. Hasil percobaan tentang efek fotolistrik menggunakan kalsium sebagai emitor, didapatkan data sebagai berikut:

λ (Å)	f (x 10^{15} Hz)	V_0 (volt)
2536	1,18	1,95
3132	0,958	0,98
3650	0,822	0,50
4047	0,741	0,14

V_0 =potensial henti

Tentukanlah konstanta Planck dari data-data tersebut.

3. Sinar X dengan panjang gelombangnya 2500 Å mengalami hamburan Compton dan berkas hamburannya teramati pada sudut 60^0 reatif terhadap arah berkas datang. Tentukan energi foton sinar hamburannya!
4. Suatu benda hitam pada suhu 27^0C memancarkan energi R J/s. Benda hitam tersebut dipanasi hingga suhu 327^0C. Berapakah enenrgi yang dipancarkan benda tersebut?

DAFTAR PUSTAKA

Griffiths, David J,. 1995. Introduction to Quantum Mechanics. USA : Prentice Hall

Purwanto, A. (2016). Fisika Kuantum Edisi 2 Revisi. Yogyakarta: Penerbit Gava Media.

Siregar, R. E. (2010). Teori dan Aplikasi Fisika Kuantum. Bandung: Widya Padjadjaran.

MODUL 2

DASAR-DASAR FISIKA KUANTUM

PENDAHULUAN

Dasar-dasar Fisika kuantum merupakan bab 2 dari modul ini yang menjelaskan tentang fungsi gelombang, arti fisis dari fungsi gelombang, sifat-sifat fungsi gelombang, operator Hermitian, komutator dan representasi matrik. Fisika kuantum membantu kita memahami aturan fundamental yang mengatur alam semesta, dari skala terkecil (partikel subatomik) hingga proses-proses dalam bintang dan lubang hitam. Ini memberikan wawasan mendalam tentang sifat realitas dan bagaimana partikel berinteraksi di alam semesta, membuka jalan untuk menjawab pertanyaan besar dalam kosmologi dan fisika fundamental. Fisika kuantum adalah kunci untuk memahami banyak fenomena alam yang tidak bisa dijelaskan oleh fisika klasik. Dengan memahami dasar-dasar fisika kuantum, mahasiswa dapat mengerti bagaimana dunia di skala atom dan subatom berfungsi.

Fisika kuantum bukan hanya teori abstrak, ia juga memiliki penerapan langsung dalam teknologi yang kita gunakan setiap hari. Beberapa contoh termasuk transistor, laser dan komputasi kuantum yang merupakan sebuah bidang yang berkembang pesat menggunakan sifat kuantum untuk meningkatkan kecepatan dan efisiensi pemrosesan data. Dengan memahami fisika kuantum, mahasiswa mendapatkan wawasan tentang teknologi masa depan dan berkontribusi dalam pengembangannya. Banyak inovasi dalam ilmu material, teknologi informasi, dan telekomunikasi berbasis pada prinsip-prinsip kuantum. Dengan memahami dasar-dasar fisika kuantum, mahasiswa dapat berkontribusi pada penelitian dan pengembangan di berbagai industri yang menggunakan teknologi kuantum.

Pada kegiatan ini kita akan mempelajari bagaimana fungsi gelombang, arti fisis dari fungsi gelombang, sifat-sifat fungsi gelombang, operator Hermitian, komutator dan representasi matrik, yaitu

1. Kegiatan Belajar 1: Fungsi Gelombang, Arti Fisis Dari Fungsi Gelombang, Sifat-Sifat Fungsi Gelombang.
2. Kegiatan Belajar 2: Operator (Sifat-sifat gelombang dan Operator Hermitian) dan Komutator.

3. Kegiatan Belajar 3: Representasi Matrik.

Setelah mempelajari modul ini Anda diharapkan memiliki kompetensi mampu menelaah dan mengaplikasikan dasar – dasar fisika kuantum meliputi fungsi gelombang, arti fisis dari fungsi gelombang, sifat-sifat fungsi gelombang, operator Hermitian, komutator dan representasi matrik. Secara lebih khusus, Anda diharapkan:

1. Menganalisis dan menggunakan fungsi gelombang untuk menghitung probabilitas posisi partikel.
2. Menunjukkan sifat-sifat fungsi gelombang, seperti normalisasi, kontinuitas, dan diferensiabilitas.
3. Menerapkan operator posisi, momentum, dan energi pada fungsi gelombang.
4. Menjelaskan hubungan antara komutator operator posisi dan momentum dengan prinsip ketidakpastian.
5. Merepresentasikan operator dalam bentuk matriks dan menerapkan konsep ini untuk sistem kuantum sederhana, seperti spin partikel.
6. Menyelesaikan soal-soal yang berkaitan dengan fungsi gelombang, operator, dan komutator dalam konteks sistem kuantum satu dimensi.

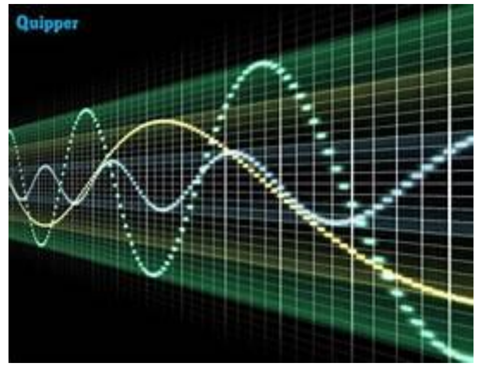
Agar memperoleh hasil yang maksimal dalam mempelajari modul ini, ikuti petunjuk pembelajaran berikut ini:

1. Sebelum membaca materi yang akan dipelajari, bacalah bagian Pendahuluan modul ini, sampai Anda memahami betul apa, untuk apa, dan bagaimana mempelajari modul ini.
2. Bacalah bagian demi bagian, temukan kata-kata kunci dan kata-kata yang Anda anggap baru.
3. Carilah dan baca pengertian kata-kata tersebut dalam daftar kata-kata sulit dalam modul ini atau dalam kamus yang ada.
4. Tangkaplah pengertian demi pengertian dari isi modul ini melalui pemahaman sendiri, tukar pikiran dengan sesama mahasiswa, dan dosen Anda.
5. Mantapkan pemahanan Anda melalui diskusi dengan sesama teman mahasiswa.

Kegiatan Belajar 1

Dasar-dasar Fisika Kuantum

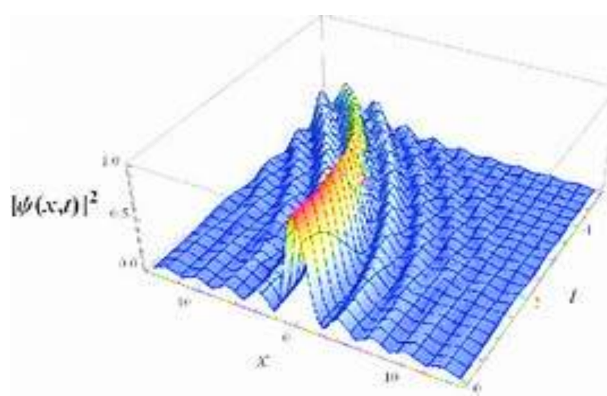
A. Fungsi Gelombang



Gb. 1.1 Karakteristik Gelombang

Kita sering mendengar tentang gelombang dan kebanyakan dari kita memahami gelombang dalam ilmu fisika adalah getaran yang merambat misalnya gelombang pada tali, gelombang pada air dan sebagainya. Namun dalam fisika kuantum, gelombang bukan lagi pembahasan tentang getaran melainkan partikel subatomik. Gelombang dan partikel merupakan sebuah landasan fisika kuantum yang berlaku untuk elektron dan juga cahaya. Partikel subatom sendiri merupakan kumpulan maupun gelombang informasi serta konsentrasi energi. Semua benda yang ada di dalam alam semesta merupakan sebuah kumpulan molekul yang terdiri dari kumpulan atom.

Fisika kuantum menggantikan pemahaman deterministik klasik dengan konsep probabilitas, di mana partikel tidak lagi digambarkan sebagai entitas dengan posisi dan momentum pasti, melainkan sebagai entitas dengan probabilitas tersebar dalam ruang. Salah satu konsep utama yang digunakan untuk menggambarkan partikel dalam fisika kuantum adalah fungsi gelombang. Fungsi gelombang (ψ) memainkan peran sentral dalam menggambarkan keadaan fisik sistem kuantum dan memuat semua informasi yang diperlukan untuk memahami dinamika partikel.



Gb. 2.2 Fungsi Gelombang

Fungsi gelombang, dilambangkan dengan ψ *(x,t)* adalah besaran matematis yang mendeskripsikan keadaan kuantum dari suatu sistem, seperti posisi, momentum, atau energi partikel dalam fisika kuantum untuk koordinat posisi x dan waktu t, adalah solusi dari Persamaan Schrödinger. Fungsi gelombang tidak hanya menyediakan informasi tentang posisi partikel, tetapi juga memberikan probabilitas untuk menemukan partikel tersebut pada posisi tertentu pada saat tertentu.

Fungsi gelombang pada umumnya bersifat kompleks, yaitu memiliki bagian real dan bagian imajiner. Namun, hanya kuadrat dari modulus fungsi gelombang, $|\psi\ (x,t)|^2$, yang memiliki arti fisik, yakni menunjukkan distribusi probabilitas keberadaan partikel. Konsekuensinya, $\psi\ (x,t)$ itu sendiri tidak memiliki makna fisik langsung tetapi berkaitan erat dengan besaran-besaran yang dapat diukur.

1. Persamaan Schrödinger dan Fungsi Gelombang

Fungsi gelombang ditentukan oleh Persamaan Schrödinger, yang merupakan persamaan diferensial parsial yang menjelaskan evolusi waktu dari fungsi gelombang untuk sistem kuantum. Bentuk waktu-independen dari Persamaan Schrödinger adalah:

$$\hat{H}\psi\ (x) = E\psi(x)$$

Di mana $\hat{H}$ adalah operator Hamiltonian yang menggambarkan energi total sistem, dan E adalah energi dari keadaan kuantum tersebut. Persamaan Schrödinger memungkinkan kita untuk menemukan fungsi gelombang yang sesuai dengan kondisi tertentu.

Fungsi gelombang yang memenuhi **Persamaan Schrödinger** merupakan persamaan diferensial parsial yang menjelaskan bagaimana fungsi gelombang berkembang seiring waktu. Dalam bentuk satu dimensi, **persamaan Schrödinger bebas waktu** dinyatakan sebagai:

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

Di mana:

$\hbar$ adalah konstanta Planck yang dibagi dengan 2π,
m adalah massa partikel,
$V(x)$ adalah potensial yang bekerja pada partikel,
E adalah energi total partikel.

2. Interpretasi Probabilistik

Fungsi gelombang tidak memberikan posisi partikel secara pasti, melainkan memberikan distribusi probabilitas. Kuadrat dari modulus fungsi gelombang, yaitu $|\psi\ (x,t)|^2$, dikenal sebagai probability density, atau kerapatan probabilitas untuk menemukan partikel di titik tertentu dalam ruang pada waktu tertentu. Oleh karena itu:

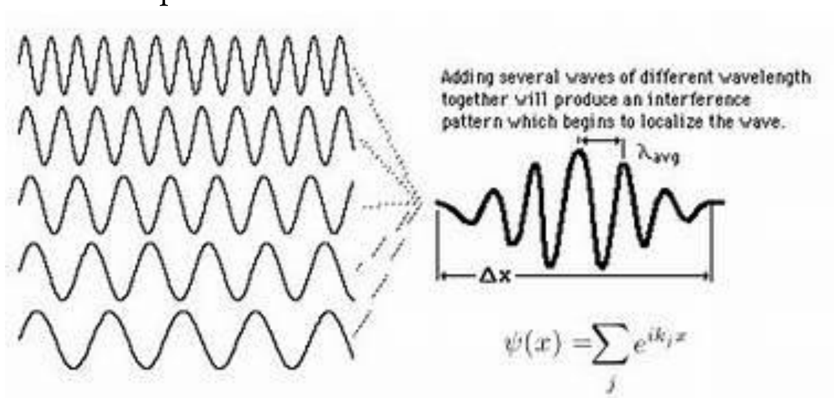
$P\ (x,t) = \ |\psi\ (x,t)|^2$

Dengan *P(x,t)* sebagai probabilitas untuk menemukan partikel di titik x pada waktu t.

3. Paket Gelombang

Dalam kebanyakan situasi fisika, partikel tidak digambarkan dengan satu gelombang datar, melainkan dengan superposisi dari banyak gelombang datar yang berbeda disebut paket gelombang. Paket gelombang memungkinkan kita menggambarkan partikel yang terlokalisasi di ruang, sementara gelombang datar menggambarkan partikel yang sepenuhnya delokalisasi.

Paket gelombang merupakan solusi linier dari fungsi gelombang dan berkaitan langsung dengan prinsip ketidakpastian Heisenberg. Dalam pendekatan ini, semakin sempit paket gelombang, semakin besar ketidakpastian dalam momentum.



Gb. 2.3 Paket Gelombang

4. Kondisi Batas dan Fungsi Gelombang Terkuantisasi

Dalam banyak kasus, sistem kuantum dibatasi oleh kondisi tertentu, seperti dinding potensial. Fungsi gelombang yang menjelaskan partikel dalam sistem ini harus memenuhi kondisi batas yang sesuai. Contoh yang umum digunakan adalah partikel dalam kotak, di mana partikel hanya dapat memiliki energi terkuantisasi dan fungsi gelombangnya berbentuk gelombang stasioner.

5. Fungsi Gelombang untuk Sistem Multi-Partikel

Untuk sistem yang terdiri dari banyak partikel, fungsi gelombang menjadi lebih rumit. Sebagai contoh, untuk dua elektron dalam sebuah atom, fungsi gelombang harus mencakup koordinat kedua elektron dan memenuhi prinsip Pauli exclusion bagi fermion, di mana dua fermion tidak dapat menempati keadaan kuantum yang sama.

6. Aplikasi Fungsi Gelombang

- Model Atom Hidrogen: Fungsi gelombang yang digunakan untuk mendeskripsikan elektron dalam atom hidrogen memberikan gambaran tentang probabilitas menemukan elektron pada jarak tertentu dari inti.
- Tunneling Kuantum: Salah satu aplikasi penting dari fungsi gelombang adalah dalam fenomena tunneling, di mana partikel dapat melewati penghalang potensial yang seharusnya tidak mungkin secara klasik.
- Komputasi Kuantum: Fungsi gelombang juga merupakan dasar dari komputasi kuantum, di mana keadaan kuantum superposisi dimanipulasi untuk melakukan perhitungan.

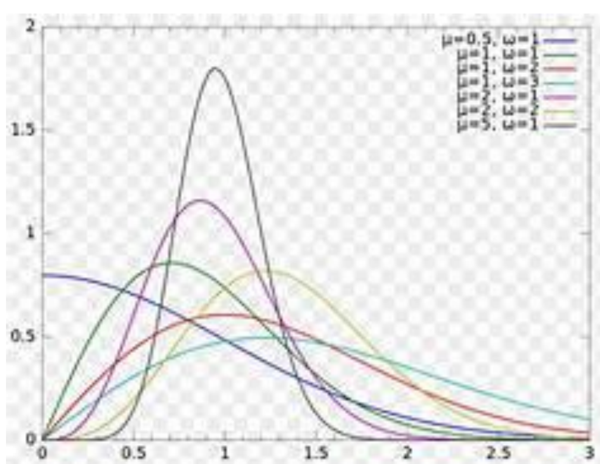
B. Arti Fisis Dari Fungsi Gelombang

Dalam fisika kuantum, fungsi gelombang (ψ) memiliki peran yang sangat penting karena ia menggambarkan keadaan kuantum suatu partikel atau sistem kuantum. Namun, fungsi gelombang itu sendiri tidak memiliki arti fisik langsung. Arti fisis dari fungsi gelombang dapat dijelaskan melalui beberapa konsep kunci:

1. Amplitudo Probabilitas

Fungsi gelombang menyatakan amplitudo probabilitas untuk menemukan partikel dalam keadaan tertentu (misalnya, pada posisi tertentu dalam ruang pada saat tertentu). Karena fungsi gelombang bisa bernilai kompleks, hanya kuadrat dari modulusnya yang memiliki arti fisik yang jelas.

Gb. 2.3 Distribusi Probabilitas



Gb. 2.4 Distribusi Probabilitas

2. Kerapatan Probabilitas

Arti fisik yang utama dari fungsi gelombang diberikan oleh kuadrat modulus dari fungsi gelombang, $|\psi\ (x,t)|^2$, yang disebut kerapatan probabilitas. Ini memberikan probabilitas relatif untuk menemukan partikel di posisi tertentu pada waktu tertentu dalam ruang.

$P\ (x,t) = \ |\psi\ (x,t)|^2$

Di mana *P(x,t)* adalah probabilitas untuk menemukan partikel di posisi *x* pada waktu t.

Kerapatan probabilitas harus memenuhi kondisi bahwa probabilitas total menemukan partikel di seluruh ruang adalah 1 (normalisasi):

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi\ (x,t)|^2 dx = 1$$

Dengan demikian, fungsi gelombang memberikan deskripsi probabilistik dari keberadaan partikel.

3. Superposisi Kuantum

Fungsi gelombang juga dapat berada dalam keadaan superposisi. Ini berarti partikel bisa berada di lebih dari satu keadaan kuantum sekaligus. Keadaan superposisi ini dijelaskan dengan fungsi gelombang sebagai kombinasi linear dari beberapa fungsi gelombang:

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$$

Di mana c_1 dan c_2 adalah koefisien amplitudo untuk setiap keadaan. Arti fisis dari ini adalah bahwa probabilitas total adalah gabungan dari dua kemungkinan keadaan partikel.

4. Evolusi Waktu

Fungsi gelombang berevolusi seiring waktu sesuai dengan Persamaan Schrödinger. Ini menggambarkan bagaimana keadaan kuantum (yang diwakili oleh fungsi gelombang) berubah dalam waktu dan bagaimana probabilitas untuk menemukan partikel di lokasi tertentu berubah seiring waktu.

5. Pengukuran dalam Mekanika Kuantum

Dalam mekanika kuantum, ketika dilakukan pengukuran, fungsi gelombang 'kolaps' ke salah satu keadaan eigen tertentu yang sesuai dengan nilai hasil pengukuran. Sebelum pengukuran, fungsi gelombang menyimpan informasi tentang semua kemungkinan keadaan yang bisa diambil oleh partikel. Setelah pengukuran, fungsi gelombang merepresentasikan keadaan partikel yang diukur.

6. Paket Gelombang

Fungsi gelombang dapat membentuk paket gelombang, yang menggambarkan partikel yang terlokalisasi dalam ruang. Ini relevan dalam konteks prinsip ketidakpastian Heisenberg, di mana terdapat ketidakpastian dalam posisi dan momentum partikel. Fungsi gelombang paket memungkinkan partikel untuk memiliki rentang kemungkinan posisi dan momentum, sehingga menyatukan dualitas gelombang-partikel dalam fisika kuantum.

7. Interferensi dan Difraksi

Arti fisis dari fungsi gelombang juga bisa dilihat dalam eksperimen interferensi dan difraksi, di mana partikel kuantum seperti elektron atau foton menunjukkan perilaku seperti gelombang. Fenomena interferensi muncul dari prinsip superposisi fungsi gelombang. Ketika dua fungsi gelombang bertemu, mereka dapat saling memperkuat (interferensi konstruktif) atau saling meniadakan (interferensi destruktif), sehingga menghasilkan pola interferensi.

C. Sifat – sifat Fungsi Gelombang

Fungsi gelombang (ψ) memiliki beberapa sifat penting yang berhubungan dengan deskripsi keadaan kuantum partikel atau sistem. Sifat-sifat ini memainkan peran sentral dalam memahami perilaku partikel di dunia kuantum dan mematuhi prinsip-prinsip dasar fisika kuantum. Berikut adalah sifat-sifat utama dari fungsi gelombang:

1. Kontinuitas

Fungsi gelombang harus kontinu (tidak memiliki diskontinuitas) dan diferensiabel (memiliki turunan yang kontinu). Ini berarti bahwa fungsi gelombang tidak boleh mengalami lompatan tiba-tiba pada suatu titik dalam ruang. Sifat kontinuitas ini diperlukan untuk memastikan bahwa probabilitas untuk menemukan partikel berubah secara halus dari satu titik ke titik lainnya.

2. Normalisasi

Agar fungsi gelombang memiliki makna probabilistik fungsi gelombang harus dapat dinormalisasi, yang berarti bahwa jumlah total probabilitas untuk menemukan partikel dalam seluruh ruang harus sama dengan 1. Dalam hal ini, integral kuadrat modulus dari fungsi gelombang di seluruh ruang harus sama dengan 1. Proses normalisasi ini memastikan bahwa fungsi gelombang menggambarkan distribusi probabilitas yang sah.,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi\ (x,t)|^2 dx = 1$$

3. Linearitas

Fungsi gelombang mematuhi prinsip superposisi atau linearitas. Jika ψ_1 dan ψ_2 adalah solusi dari persamaan Schrödinger, maka kombinasi linear keduanya juga merupakan solusi yang sah. Prinsip superposisi ini memungkinkan fungsi gelombang untuk menggambarkan keadaan kuantum yang merupakan campuran dari beberapa keadaan kuantum lain.

4. Kompleks

Fungsi gelombang dalam fisika kuantum umumnya berupa fungsi kompleks, yang berarti bahwa ia dapat dinyatakan dalam bentuk:

$$\psi\ (x,t) = a(x,t) + ib(x,t)$$

Di mana $a(x,t)$ dan $b(x,t)$ adalah bagian real dan imajiner dari fungsi gelombang, dan i adalah satuan imajiner. Meskipun fungsi gelombang itu sendiri bersifat kompleks, kuadrat modulusnya, yang menggambarkan kerapatan probabilitas, selalu berupa bilangan real:

$$|\psi\ (x,t)|^2 = \psi^*(x,t)\psi(x,t)$$

Di mana $\psi^*(x,t)$ adalah konjugat kompleks dari fungsi gelombang.

5. Solusi Persamaan Schrödinger

Fungsi gelombang harus merupakan solusi dari persamaan Schrödinger, baik persamaan Schrödinger bebas waktu (untuk keadaan stasioner) maupun persamaan Schrödinger bergantung waktu. Persamaan ini mengatur evolusi fungsi gelombang dan menggambarkan bagaimana keadaan kuantum berubah seiring waktu.

Untuk persamaan Schrödinger bebas waktu:

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

Persamaan ini menentukan bentuk fungsi gelombang berdasarkan energi total *E* dan potensial *V(x)* yang dialami partikel.

6. Kondisi Batas

Fungsi gelombang harus memenuhi kondisi batas yang sesuai dengan sistem fisik yang dipelajari. Sebagai contoh, untuk partikel dalam kotak (infinite potential well), fungsi gelombang harus bernilai nol pada dinding-dinding kotak:

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

Di mana L adalah panjang kotak. Kondisi batas ini menghasilkan energi terkuantisasi untuk partikel.

7. Keperiodikan

Untuk sistem-sistem yang memiliki sifat periodik, seperti dalam kristal atau partikel pada cincin (loop), fungsi gelombang sering kali periodik dalam ruang. Ini berarti bahwa nilai fungsi gelombang pada satu titik akan sama dengan nilai di titik yang berbeda, yang berjarak satu periode penuh:

$$\psi(x + L) = \psi(x)$$

Di mana L adalah periode ruang.

8. Kecepatan Grup dan Fase

Fungsi gelombang dalam banyak kasus dapat dianalisis sebagai gelombang sinusoidal dengan kecepatan grup dan kecepatan fase yang berbeda. Kecepatan grup terkait dengan propagasi paket gelombang dan memberikan gambaran tentang bagaimana partikel bergerak, sedangkan kecepatan fase terkait dengan perubahan fase gelombang.

9. Simetri

Fungsi gelombang bisa memiliki simetri tertentu tergantung pada sistem fisika yang dikaji. Fungsi gelombang dapat simetri terhadap transformasi tertentu, seperti simetri rotasi atau simetri translasi. Sebagai contoh, dalam atom hidrogen, fungsi gelombang elektron memiliki simetri rotasi sesuai dengan distribusi orbital atom.

10. Fase Fungsi Gelombang

Fungsi gelombang memiliki **fase** yang sering kali dapat berubah selama evolusi waktu atau dalam proses interferensi kuantum. Fase fungsi gelombang penting dalam fenomena seperti interferensi dan difraksi, di mana partikel kuantum dapat menunjukkan perilaku interferensi konstruktif atau destruktif tergantung pada perbedaan fase.

RANGKUMAN

Fisika kuantum merupakan salah satu cabang fundamental dalam fisika yang bertujuan untuk memahami perilaku sistem pada skala atomik dan subatomik, di mana hukum-hukum fisika klasik tidak lagi berlaku.

Fungsi gelombang, $\psi\,(x,t)$ adalah representasi matematika yang digunakan untuk menggambarkan keadaan kuantum suatu partikel. Nilai kuadrat modulus dari fungsi gelombang, $|\psi\,(x,t)|^2$, memberikan probabilitas menemukan partikel pada posisi tertentu di ruang. Konsep ini memperlihatkan bahwa dalam dunia kuantum, posisi dan momentum tidak dapat diketahui dengan pasti secara bersamaan (Prinsip Ketidakpastian Heisenberg), sehingga probabilitas menjadi elemen penting dalam prediksi hasil pengukuran.

Fungsi gelombang harus memenuhi beberapa sifat penting, seperti terormalisasi agar probabilitas total sama dengan satu, kontinyu, dan diferensiabel agar dapat dihitung operator momentum dan energi. Fungsi gelombang juga dapat mengalami interferensi, mencerminkan sifat gelombang partikel kuantum.

LATIHAN

Untuk memperdalam pemahaman Anda mengenai materi di atas, kerjakanlah latihan berikut!

1. Diberikan fungsi gelombang dari sebuah partikel dalam satu dimensi sebagai berikut:

$$\psi(x) = Ae^{-\alpha|x|}$$

   di mana A dan α adalah konstanta positif. Tentukan:

   a. Nilai konstanta normalisasi A agar fungsi gelombang terormalisasi.
   b. Apakah fungsi gelombang ini memenuhi sifat-sifat fungsi gelombang yang diharapkan?

2. Diberikan fungsi gelombang:

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

   di mana L adalah panjang kotak potensial dan nnn adalah bilangan kuantum.
   Tentukan:

a. Probabilitas menemukan partikel di antara $x = 0$ dan $x = L/2$.

b. Apakah probabilitas ini bergantung pada bilangan kuantum n?

3. Sebuah partikel digambarkan oleh fungsi gelombang:

$$\psi(x) = Be^{ikx}$$

dengan B adalah konstanta normalisasi dan kkk adalah bilangan gelombang. Tentukan:

a. Syarat agar fungsi gelombang ini terormalisasi.

b. Apakah fungsi gelombang ini memenuhi syarat normalisasi? Jelaskan alasanmu.

4. Diberikan fungsi gelombang partikel satu dimensi sebagai berikut:

$$\psi(x) = \begin{cases} A\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right), & 0 \leq x \leq L \\ 0, & selain\ itu \end{cases}$$

Tentukan:

a. Tentukan konstanta A sehingga fungsi gelombang terormalisasi.

b. Hitung probabilitas menemukan partikel pada interval $\left[0, \frac{L}{2}\right]$.

Kegiatan Belajar 2

D. Operator dalam fisika kuantum

Dalam fisika kuantum, operator adalah alat matematika yang bertindak pada fungsi gelombang untuk mengekstrak informasi fisik seperti posisi, momentum, energi, dan lain-lain. Operator-operator ini merupakan komponen kunci dari pendekatan formal mekanika kuantum, yang menggantikan konsep klasik seperti posisi dan momentum dengan besaran yang diwakili oleh operator dalam ruang fungsi gelombang. Berikut adalah beberapa poin penting tentang operator dalam fisika kuantum:

a. Operator Posisi (Position Operator)

Operator posisi $\hat{x}$ adalah operator yang mengembalikan posisi partikel. Dalam representasi ruang, operator ini bertindak sebagai pengali pada fungsi gelombang.

$$\hat{x}\,\psi(x) = x\psi\,(x)$$

Artinya, ketika operator posisi x diterapkan pada fungsi gelombang, hasilnya adalah posisi partikel x, dikalikan dengan fungsi gelombang.

b. Operator Momentum (Momentum Operator)

Operator momentum $\hat{p}$ dalam representasi posisi didefinisikan sebagai operator diferensial:

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

Ketika operator momentum ini diterapkan pada fungsi gelombang, ia mengukur momentum partikel tersebut. Di sini, $\hbar$\hbar$\hbar$ adalah konstanta Planck yang dibagi 2π, dan iii adalah bilangan imajiner.

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$$

Operator momentum memainkan peran penting dalam persamaan Schrödinger dan teori kuantum secara umum.

c. Operator Hamiltonian (Hamiltonian Operator)

Operator Hamiltonian Ĥ mewakili energi total sistem kuantum, yaitu gabungan dari energi kinetik dan energi potensial. Dalam satu dimensi, operator Hamiltonian didefinisikan sebagai:

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

Di mana:

$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ adalah operator energi kinetik,

V(x) adalah energi potensial.

Operator Hamiltonian digunakan dalam persamaan Schrödinger bebas waktu**:**

$$\widehat{H}\,\psi(x) = E\psi(x)$$

Di mana *E* adalah energi total sistem.

d. Operator Energi Kinetik

Energi kinetik dalam fisika kuantum dinyatakan melalui operator diferensial sebagai:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Operator ini bertindak pada fungsi gelombang untuk menghitung energi kinetik partikel berdasarkan distribusi spasial dari fungsi gelombang.

e. Operator Energi Potensial

Energi potensial biasanya tergantung pada posisi partikel, sehingga operator potensial bertindak sebagai fungsi posisi:

$$\hat{V}(x) = V(x)$$

Operator ini memberikan energi potensial sesuai dengan posisi partikel dalam medan potensial *V(x).*

f. Operator Momentum Sudut (Angular Momentum Operator)

Operator momentum sudut $\hat{L}$ adalah operator yang digunakan untuk menghitung momentum sudut dalam sistem kuantum, khususnya untuk sistem yang memiliki simetri rotasi seperti atom. Dalam bentuk vektor:

$$\hat{L} = r\ x\ \hat{p}$$

Dalam mekanika kuantum, momentum sudut juga terkuantisasi, dan operator momentum sudut memainkan peran penting dalam menggambarkan keadaan kuantum atom.

g. Operator Nilai Harapan (Expectation Value Operator)

Dalam fisika kuantum, nilai yang terukur dari besaran fisik tidak dapat diprediksi secara deterministik, tetapi hanya probabilitasnya yang dapat dihitung. Nilai harapan dari besaran yang diwakili oleh operator Â dihitung sebagai:

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{A} \psi(x)\, dx$$

Di mana ⟨A⟩ adalah nilai harapan operator Â, dan $\psi^*(x)$ adalah konjugat kompleks dari fungsi gelombang.

h. Operator Hermitian

Dalam mekanika kuantum, operator yang terkait dengan besaran fisik harus berupa operator Hermitian. Ini berarti bahwa operator memiliki sifat-sifat berikut:

Â Hermitian jika $\langle \psi_1 | \hat{A}\psi_2 \rangle = \langle \hat{A}\psi_1 | \psi_2 \rangle$

Semua eigenvalue dari operator Hermitian adalah real, yang penting karena besaran fisik seperti energi, momentum, dan posisi harus memiliki nilai real.

i. Operator Lifting (Raising) dan Lowering

Dalam konteks sistem osilator harmonik kuantum, terdapat dua operator penting yang disebut raising operator (pengangkat) dan lowering operator (penurun):

- Raising operator: $\hat{a}$
- Lowering operator**:** $\hat{a}$ Operator ini digunakan untuk mengubah keadaan kuantum dari osilator harmonik, menggerakkan sistem dari satu keadaan energi ke keadaan energi yang lebih tinggi atau lebih rendah.

j. Komutator Operator

Dalam mekanika kuantum, operator-operator tidak selalu komutatif, artinya urutan penerapan operator dapat mempengaruhi hasil. Komutator dari dua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ didefinisikan sebagai:

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\,\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Jika $\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$ =0, maka kedua operator dikatakan komutatif**,** dan besaran fisik yang mereka wakili dapat diukur secara simultan tanpa ketidakpastian.

Sebagai contoh, komutator posisi dan momentum memberikan hubungan penting:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Hubungan ini merupakan dasar dari prinsip ketidakpastian Heisenberg**.**

1. Sifat-Sifat Operator dalam Fisika Kuantum

Operator dalam fisika kuantum memiliki beberapa sifat penting yang menentukan bagaimana mereka beroperasi pada fungsi gelombang dan berhubungan dengan besaran fisik dalam suatu sistem kuantum. Sifat-sifat ini memastikan bahwa perhitungan yang dilakukan dengan operator tersebut memberikan hasil yang konsisten dengan teori kuantum. Berikut adalah beberapa sifat utama dari operator dalam fisika kuantum:

a. Linearitas

Operator kuantum bersifat linear, artinya jika Â adalah sebuah operator, maka berlaku sifat linear sebagai berikut:

$$\hat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\hat{A}\psi_1 + c_2\hat{A}\psi_2$$

Dengan c_1 dan c_2 adalah konstanta skalar, dan ψ_1 serta ψ_2 adalah fungsi gelombang. Sifat ini penting karena menjamin bahwa superposisi fungsi gelombang tetap mengikuti aturan kuantum ketika operator diterapkan.

b. Hermiticity (Operator Hermitian)

Dalam fisika kuantum, operator yang berhubungan dengan observabel fisik seperti energi, momentum, dan posisi harus Hermitian. Operator Hermitian memiliki sifat sebagai berikut:

$$\langle\psi|\hat{A}\phi\rangle = \langle\hat{A}\psi|\phi\rangle$$

Sifat ini memastikan bahwa nilai eigen dari operator tersebut (yang merupakan hasil pengukuran fisik) adalah bilangan real. Contoh operator Hermitian adalah operator Hamiltonian (Ĥ) yang mewakili energi total sistem.

c. Eigenvalue dan Eigenstate

Operator kuantum memiliki eigenvalue dan eigenstate **y**ang terkait. Jika Â adalah operator dan ψ adalah fungsi gelombang, maka:

$$\hat{A}\psi = \lambda\psi$$

Di mana λ adalah eigenvalue dari operator Â, dan ψ adalah eigenstate yang sesuai. Dalam konteks fisika kuantum, eigenvalue dari operator biasanya mewakili besaran fisik yang dapat diukur, seperti energi, momentum, atau posisi.

d. Komutatifitas (Komutator)

Dua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ komutatif jika urutan penerapan operator tidak mempengaruhi hasilnya, yaitu:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\,\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0$$

Jika komutator dua operator bernilai nol, besaran fisik yang terkait dengan kedua operator tersebut dapat diukur secara simultan tanpa ketidakpastian. Sebaliknya, jika komutator tidak bernilai nol, seperti komutator posisi dan momentum $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$ maka berlaku prinsip ketidakpastian Heisenberg, di mana besaran yang terkait tidak dapat diukur secara simultan dengan presisi tak terbatas.

2. Operator Hermitian

Dalam fisika kuantum, operator Hermitian adalah jenis operator yang berperan penting dalam menggambarkan besaran fisika yang dapat diukur (observabel), seperti energi, momentum, posisi, dan sebagainya. Operator Hermitian memiliki sifat khusus yang menjamin bahwa nilai-nilai yang dihasilkan dari pengukuran observabel tersebut adalah bilangan real**.** Berikut adalah uraian lengkap tentang operator Hermitian:

a. Definisi Operator Hermitian

Operator Hermitian $\hat{A}$ memenuhi kondisi berikut:

$$\hat{A}^{+} = \hat{A}$$

di mana $\hat{A}^{+}$ adalah operator adjoint (konjugat Hermitian) dari $\hat{A}$. Operator adjoint diperoleh dengan mentransposkan dan mengonjugasi kompleks matriks dari operator tersebut. Secara sederhana, untuk operator Hermitian, hasil operasi konjugat Hermitian sama dengan operator itu sendiri.

b. Sifat-Sifat Operator Hermitian

Operator Hermitian memiliki beberapa sifat penting yang menjadikannya berguna dalam fisika kuantum:

- Nilai Eigen yang Real

  Jika Â adalah operator Hermitian dan ψ adalah fungsi eigen dari operator tersebut dengan nilai eigen a, maka:

$$\hat{A}\psi = a\psi$$

  Sifat utama operator Hermitian adalah nilai eigen aaa selalu real. Ini penting karena observabel fisik dalam eksperimen nyata selalu berupa bilangan real (seperti energi, momentum, dll.).

- Orthogonalitas Fungsi Eigen

  Fungsi eigen yang terkait dengan nilai eigen yang berbeda dari operator Hermitian adalah ortogonal satu sama lain. Jika ψ_1 dan ψ_2 adalah dua fungsi eigen yang memenuhi:

$$\hat{A}\psi_1 = a_1\psi_1 \; dan \; \hat{A}\psi_2 = a_2\psi_2$$

  dengan $a_1 \neq a_2$, maka:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$$

  Sifat ortogonalitas ini merupakan dasar dari konstruksi basis ortonormal dalam ruang Hilbert.

- Ekspektasi Nilai Real

  Untuk setiap fungsi gelombang ψ\psiψ, ekspektasi nilai (nilai harapan) dari operator Hermitian Â selalu real:

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \in R$$

  Ekspektasi nilai ini menggambarkan rata-rata hasil pengukuran observabel yang diwakili oleh Â ketika sistem berada dalam keadaan ψ.

- Simetri dalam Fungsi Gelombang

  Operator Hermitian dapat dikaitkan dengan transformasi yang simetri dalam ruang Hilbert. Sebagai contoh, Hamiltonian (yang merupakan operator Hermitian) menggambarkan konservasi energi dan memunculkan evolusi waktu yang uniter.

3. Contoh Operator Hermitian dalam Fisika Kuantum

Beberapa operator observabel fisik yang umum dalam fisika kuantum adalah Hermitian:

- Operator Posisi $\hat{x}$ Dalam basis posisi, operator ini didefinisikan sebagai:

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$$

yang jelas menghasilkan bilangan real x, sehingga operator ini Hermitian.

- Operator Momentum $\hat{p}$: Dalam basis posisi, operator momentum diberikan oleh:

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar\frac{d}{dx}\psi(x)$$

Ini adalah operator Hermitian karena, jika diuji dalam integral inner product, konjugat Hermitian dari operator momentum sama dengan operator itu sendiri.

- **Operator Hamiltonian** Ĥ: Operator Hamiltonian, yang mewakili energi total sistem, juga merupakan operator Hermitian:

$$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$$

Hamiltonian penting karena menentukan evolusi waktu sistem kuantum melalui persamaan Schrödinger.

4. Pentingnya Operator Hermitian dalam Pengukuran

Dalam mekanika kuantum, setiap observabel fisik diwakili oleh operator Hermitian, karena pengukuran observabel selalu menghasilkan nilai real. Dalam proses pengukuran, fungsi gelombang ψ "dikolapskan" ke fungsi eigen dari operator observabel yang sesuai, dan nilai yang terukur adalah nilai eigen yang real dari operator tersebut.

E. Komutator dalam Fisika Kuantum

Dalam fisika kuantum, **komutator** adalah salah satu konsep penting yang menggambarkan hubungan antara dua operator. Komutator dua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ adalah ukuran seberapa jauh dua operator tersebut **gagal untuk komutatif**, atau dengan kata lain, seberapa besar urutan penerapan operator mempengaruhi hasil. Komutator ini memberikan informasi tentang apakah besaran fisik yang diwakili oleh operator tersebut dapat diukur secara simultan tanpa adanya ketidakpastian.Secara matematis, komutator dari dua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ didefinisikan sebagai:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\,\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

Jika $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, maka operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ **komutatif**, yang berarti mereka dapat diterapkan dalam urutan apa pun tanpa mempengaruhi hasil. Sebaliknya, jika $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, maka operator tersebut **tidak komutatif**, yang mengindikasikan adanya interaksi atau ketergantungan yang mendalam di antara kedua besaran fisik yang direpresentasikan oleh operator tersebut.

1. Sifat-Sifat Komutator

Komutator memiliki beberapa sifat penting yang sangat berguna dalam analisis kuantum:

a. Antikomutasi

Komutator adalah operator **antisimetri**, yang berarti:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$$

Ini menunjukkan bahwa menukar urutan dua operator menghasilkan tanda yang berlawanan.

b. Distributivitas

Komutator bersifat distributif terhadap penjumlahan operator, yaitu:

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$$

Sifat ini menunjukkan bahwa komutator dapat diperluas atau dikembangkan seperti operasi aljabar biasa.

c. Relasi dengan Bilangan Skalar

Jika c adalah konstanta skalar, maka:

$$[\hat{A}, c\hat{B}] = c[\hat{A}, \hat{B}]$$

Komutator tidak terpengaruh oleh perkalian operator dengan bilangan skalar.

d. Jacobi Identity

Komutator juga memenuhi identitas Jacobi, yaitu:

$$\left[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]\right] + \left[\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]\right] + \left[\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]\right] = 0$$

Identitas Jacobi penting dalam menjaga struktur matematis sistem kuantum, terutama dalam teori medan kuantum dan aljabar Lie.

2. Contoh Komutator dalam Fisika Kuantum

Komutator banyak digunakan untuk mendefinisikan hubungan fundamental antara observabel dalam fisika kuantum. Berikut adalah beberapa contoh penting:

a. Komutator Posisi dan Momentum

Komutator paling terkenal dalam fisika kuantum adalah antara operator posisi $\hat{x}$ dan momentum $\hat{p}$:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

Ini adalah dasar dari prinsip ketidakpastian Heisenberg, yang menyatakan bahwa kita tidak bisa mengukur posisi dan momentum secara bersamaan dengan ketidakpastian nol. Ketidakkomutatifan ini menyatakan bahwa ada batasan fundamental dalam pengukuran simultan kedua observabel ini.

b. Komutator Hamiltonian dan Operator Momentum

Jika $\widehat{H}$ adalah operator Hamiltonian (yang mewakili energi total sistem) dan $\hat{p}$adalah operator momentum, maka komutator $[\widehat{H}, \hat{p}]$ memberikan informasi penting tentang evolusi momentum dalam sistem tersebut. Misalnya, dalam sistem sederhana seperti partikel bebas, Hamiltonian dapat dinyatakan sebagai:

$$\widehat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

Komutator $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$, yang menunjukkan bahwa momentum adalah kuantitas yang konservatif dalam sistem ini.

c. Komutator Operator Sudut dan Momentum Angular

Dalam mekanika kuantum, komutator antara komponen-komponen dari operator momentum angular $\hat{L}_x, \hat{L}_y, dan\ \hat{L}_z$, sangat penting dalam mendeskripsikan rotasi sistem:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$$

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

Relasi komutasi ini mencerminkan hubungan antara komponen-komponen momentum angular dan prinsip rotasi dalam ruang tiga dimensi.

3. Prinsip Ketidakpastian Heisenberg

Komutator secara langsung terkait dengan **prinsip ketidakpastian Heisenberg**, yang menyatakan bahwa untuk dua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ jika komutator mereka tidak nol, maka terdapat batasan pada ketepatan pengukuran simultan observabel yang mereka wakili. Secara matematis, prinsip ketidakpastian Heisenberg untuk dua observabel A dan B adalah:

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right|$$

Jika komutator $[\hat{A}, \hat{B}]$ =0, kedua besaran tersebut dapat diukur secara simultan dengan presisi tak terbatas. Namun, jika $[\hat{A}, \hat{B}]$ ≠0, ada batas pada ketepatan yang dapat dicapai dalam pengukuran simultan.

4. Komutator dan Evolusi Waktu

Dalam mekanika kuantum, evolusi waktu dari operator $\hat{A}$ ditentukan oleh komutatornya dengan Hamiltonian $\hat{H}$ dari sistem. Jika $\hat{A}(t)$ adalah operator dalam representasi Heisenberg, maka evolusinya dalam waktu diatur oleh persamaan:

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}(t), \hat{H}]$$

Komutator dengan Hamiltonian menentukan bagaimana suatu observabel berubah seiring waktu, dan ini adalah bentuk umum dari persamaan gerak Heisenberg**.**

RANGKUMAN

Dalam mekanika kuantum, operator adalah alat matematis yang digunakan untuk menggambarkan pengukuran besaran fisis seperti momentum, energi, dan posisi. Operator bertindak pada fungsi gelombang *ψ(x)* dan mengubah fungsi tersebut menjadi bentuk lain yang terkait dengan besaran yang sedang diukur.

Operator dapat dituliskan dalam bentuk diferensial, misalnya:

- Operator posisi: $\hat{x} = x$
- Operator momentum: $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$
- Operator energi (Hamiltonian): $\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}V(x)$

Besaran fisis yang diukur dalam mekanika kuantum dikaitkan dengan nilai eigen dari operator tersebut. Misalnya, ketika kita menerapkan operator momentum pada fungsi gelombang, nilai eigen yang dihasilkan adalah momentum partikel yang diukur.

Operator Hermitian memiliki peran penting dalam fisika kuantum karena operator-operator yang merepresentasikan besaran yang dapat diukur (observables) selalu bersifat Hermitian. Sifat utama dari operator Hermitian adalah bahwa nilai eigen yang dihasilkannya selalu bilangan real, sehingga cocok untuk menggambarkan pengukuran fisik. Sebagai contoh, operator momentum dan energi (Hamiltonian) adalah operator Hermitian, dan mereka memiliki spektrum nilai eigen yang dapat diukur secara fisis.

Komutator dalam mekanika kuantum mengukur ketidaksalingbebasan (non-commutativity) antara dua operator. Jika dua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ memiliki komutator non-nol, maka pengukuran dua besaran yang diwakili oleh operator tersebut tidak dapat dilakukan secara bersamaan dengan akurasi yang sempurna. Komutator dari dua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ didefinisikan sebagai:$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\,\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.

Salah satu contoh komutator penting dalam fisika kuantum adalah komutator antara operator posisi $\hat{x}$ dan operator momentum $\hat{p}$: $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$

Komutator ini menjadi dasar dari Prinsip Ketidakpastian Heisenberg, yang menyatakan bahwa terdapat batasan dalam akurasi pengukuran posisi dan momentum secara bersamaan. Semakin tepat posisi partikel diukur, semakin tidak pasti pengukuran momentumnya, dan sebaliknya.

Prinsip ini dapat dinyatakan sebagai: $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$. Artinya, produk dari ketidakpastian dalam posisi Δx dan momentum Δp tidak bisa lebih kecil dari $\frac{\hbar}{2}$. Ini merupakan konsekuensi langsung dari komutator antara posisi dan momentum.

Operator dalam mekanika kuantum bertindak pada fungsi gelombang untuk memberikan informasi tentang besaran fisik yang diukur, seperti posisi, momentum, dan energi.

Operator Hermitian penting karena mereka memiliki nilai eigen real yang cocok untuk menggambarkan hasil pengukuran fisis.

Komutator mengukur ketidakmampuan untuk mengukur dua besaran secara bersamaan dengan akurasi sempurna, dengan komutator antara posisi dan momentum menjadi dasar dari prinsip ketidakpastian Heisenberg.

LATIHAN

1. Diberikan fungsi gelombang partikel dalam satu dimensi sebagai berikut:

$$\psi(x) = Ae^{ikx}$$

dengan A dan k adalah konstanta. Tentukan:

a. Hitung momentum partikel menggunakan operator momentum $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$

b. Apakah fungsi gelombang ini merupakan eigenfungsi dari operator momentum?

2. Diberikan operator $\hat{A} = -i \frac{d}{dx}$ Periksa apakah operator ini merupakan operator Hermitian.
   a. Gunakan definisi operator Hermitian: $\langle \phi | \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A} \phi | \psi \rangle$, dan periksa apakah operator $\hat{A}$ memenuhi syarat ini.
   b. Berikan kesimpulan apakah $\hat{A}$ adalah Hermitian atau bukan.

Kegiatan belajar 3

F. Representasi Matriks dalam Fisika Kuantum

Dalam fisika kuantum, representasi matriks adalah salah satu cara penting untuk menggambarkan operator dan fungsi gelombang. Matriks digunakan untuk merepresentasikan operator yang bekerja pada ruang vektor keadaan kuantum (ruang Hilbert). Pendekatan ini pertama kali dikembangkan oleh Werner Heisenberg dalam **mekanika matriks**, yang menjadi salah satu formulasi awal dari mekanika kuantum. Berikut adalah uraian tentang representasi matriks dalam konteks fisika kuantum.

1. Vektor Keadaan (State Vectors) dalam Basis Diskret

Dalam fisika kuantum, keadaan sistem kuantum dinyatakan oleh vektor keadaan $|\psi\rangle$ di ruang Hilbert. Dalam basis diskret (misalnya, basis eigen fungsi dari suatu operator observabel seperti operator posisi atau momentum), vektor keadaan ini dapat diwakili sebagai kolom vektor. Misalnya, jika $|\psi\rangle$ adalah keadaan sistem, maka dalam basis $|n\rangle$, kita memiliki:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

di mana c_n adalah komponen $|\psi\rangle$ dalam basis $|n\rangle$. Dalam representasi matriks, vektor keadaan $|\psi\rangle$ ditulis sebagai:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Setiap komponen c_n adalah amplitudo probabilitas untuk menemukan sistem dalam keadaan $|n\rangle$, dan informasi ini direpresentasikan sebagai entri dalam vektor kolom.

2. Operator sebagai Matriks

Operator kuantum, yang bertindak pada vektor keadaan, juga dapat direpresentasikan dalam bentuk matriks. Jika $\hat{A}$ adalah operator, maka elemen matriks dari $\hat{A}$ dalam basis $|n\rangle$ diberikan oleh:

$$A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$$

di mana $\langle m|$ adalah fungsi eigen dari operator observabel. Elemen matriks A_{mn} menunjukkan bagaimana operator $\hat{A}$ "menghubungkan" basis $|n\rangle$ dan $|m\rangle$.

Secara umum, operator kuantum $\hat{A}$ dalam basis diskret dapat dituliskan dalam bentuk matriks sebagai:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Elemen-elemen A_{mn} menentukan cara operator $\hat{A}$ bertindak pada vektor keadaan $|\psi\rangle$.

3. Representasi Matriks dari Operator Observabel

Dalam fisika kuantum, observabel fisik seperti posisi $\hat{x}$ momentum $\hat{p}$, energi $\hat{H}$, dan momentum angular $\hat{L}$ sering kali direpresentasikan sebagai operator dalam bentuk matriks.

a. Operator Posisi dan Momentum

Operator posisi $\hat{x}$ dan momentum $\hat{p}$ dalam basis momentum atau basis posisi dapat direpresentasikan sebagai matriks, yang bertindak pada fungsi gelombang. Sebagai contoh, dalam basis momentum, operator posisi $\hat{x}$ mungkin memiliki elemen matriks yang rumit tergantung pada transformasi Fourier antara basis posisi dan momentum.

b. Operator Spin

Representasi matriks operator spin sering digunakan dalam sistem dua tingkat (seperti spin-1/2). Operator spin $\hat{S}_x, \hat{S}_y\ dan\ \hat{S}_z$ memiliki representasi matriks dalam basis eigen dari $\hat{S}_z$. Sebagai contoh, matriks Pauli σ_x, σ_y dan σ_z $|+\rangle$ dan $|-\rangle$ adalah:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

Operator-operator ini digunakan untuk menggambarkan observasi spin dan interaksi spin dengan medan magnet dalam sistem dua tingkat.

4. Transformasi Matriks (Representasi Basis yang Berbeda)

Keadaan kuantum dan operator bisa dinyatakan dalam basis yang berbeda, seperti basis posisi atau momentum. Untuk berpindah dari satu basis ke basis lain, kita menggunakan transformasi matriks**.** Jika $\hat{A}$ adalah operator dalam suatu basis, maka transformasi ke basis lain diberikan oleh matriks transformasi T, dan operator baru dalam basis tersebut adalah:

$$\hat{A}' = T\hat{A}T^{-1}$$

Transformasi ini sering digunakan dalam representasi spin, momentum angular, dan simetri dalam fisika kuantum.

5. Operator Hermitian dalam Representasi Matriks

Operator Hermitian, yang memiliki nilai eigen real, sering kali direpresentasikan dalam bentuk matriks simetri. Jika $\hat{A}$ adalah operator Hermitian, maka elemen-elemen matriksnya memenuhi:

$$A_{mn} = A^{*}_{mn}$$

Dengan kata lain, matriks dari operator Hermitian adalah matriks yang transpos konjugatnya sama dengan dirinya sendiri. Contoh paling umum dari operator Hermitian adalah Hamiltonian dalam sistem fisika kuantum.

6. Contoh Representasi Matriks untuk Operator

Berikut adalah contoh representasi matriks dari beberapa operator kuantum dalam basis diskret.

a. Hamiltonian untuk Osilator Harmonik Kuantum

Hamiltonian osilator harmonik kuantum dalam basis keadaan |n⟩ diberikan oleh:

$$\widehat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^{+}\widehat{a} + \frac{1}{2}\right)$$

Elemen-elemen matriks Hamiltonian dalam basis |n⟩ berbentuk diagonal:

$$H_{nm} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Ini menunjukkan bahwa energi sistem kuantum pada tingkat nnn adalah diskret, dengan nilai $E_{nm} = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$

b. Operator Momentum Angular

Operator momentum angular dalam basis momentum angular $|l,\text{m}\rangle$ dapat direpresentasikan dalam bentuk matriks. Misalnya, elemen matriks dari operator $\hat{L}_z$ dalam basis $|l,\text{m}\rangle$ adalah diagonal:

$$\hat{L}_z \mid l, \text{m}\rangle = \hbar\text{m} \mid l, \text{m}\rangle$$

Dalam representasi matriks, operator $\hat{L}_z$, menjadi matriks diagonal dengan nilai eigen $\hbar m$ di sepanjang diagonal.

7. Keuntungan Representasi Matriks

a. **Keterhubungan dengan Aljabar Linear**: Representasi matriks membuat banyak perhitungan kuantum menjadi lebih sederhana, karena kita dapat menggunakan teknik-teknik aljabar linear seperti diagonaliasi, inversi matriks, dan perkalian matriks untuk menyelesaikan masalah.

b. **Keterkaitan dengan Basis**: Representasi matriks memungkinkan kita memproyeksikan operator dan keadaan kuantum ke dalam basis yang berbeda untuk memperoleh hasil pengukuran yang diinginkan.

c. **Numerik dan Komputasional**: Representasi matriks sangat berguna dalam pendekatan numerik dan komputasional, seperti dalam metode matriks densitas atau simulasi Monte Carlo untuk sistem kuantum kompleks.

RANGKUMAN

Dalam fisika kuantum, representasi matriks adalah salah satu cara untuk menggambarkan operator dan fungsi gelombang dalam bentuk matriks dan vektor. Pendekatan ini penting karena banyak sistem kuantum dapat dianalisis lebih mudah menggunakan aljabar matriks, terutama ketika mempelajari ruang keadaan yang diskrit, seperti dalam sistem dengan beberapa tingkat energi.

Operator yang bertindak pada fungsi gelombang dapat direpresentasikan sebagai matriks, dan fungsi gelombang itu sendiri sebagai vektor dalam ruang Hilbert. Penggunaan representasi matriks sangat umum dalam teori matriks di fisika kuantum, seperti pada teori spin, osilator harmonik kuantum, dan sistem dengan tingkat energi terkuantisasi.

Fungsi gelombang dalam ruang Hilbert direpresentasikan sebagai vektor kolom (vektor keadaan), sedangkan operator yang bertindak pada fungsi gelombang direpresentasikan sebagai matriks. Ruang Hilbert adalah ruang vektor berdimensi tak hingga atau berhingga, di mana setiap keadaan kuantum dapat dinyatakan sebagai kombinasi linear dari fungsi basis yang ortogonal. Dalam representasi matriks, fungsi basis ini dinyatakan sebagai vektor standar. Misalnya, fungsi gelombang suatu partikel dapat dinyatakan sebagai:

$$| \psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

Operator yang bertindak pada fungsi gelombang, seperti operator momentum atau energi, direpresentasikan sebagai matriks.

Operator dalam mekanika kuantum seperti posisi $\hat{x}$, momentum $\hat{p}$, dan Hamiltonian $\hat{H}$, dapat direpresentasikan sebagai matriks. Misalnya, dalam basis tertentu, operator momentum dapat memiliki bentuk matriks yang berbeda tergantung pada basis yang dipilih. Operator Hermitian dalam fisika kuantum, yang digunakan untuk mewakili besaran fisik yang terukur, direpresentasikan oleh matriks Hermitian. Matriks Hermitian memiliki elemen-elemen yang simetris terhadap diagonalnya dan memiliki nilai eigen yang real, sesuai dengan fakta bahwa besaran fisik harus menghasilkan hasil pengukuran yang real.

Representasi matriks adalah metode penting dalam fisika kuantum yang memungkinkan penyederhanaan analisis sistem kuantum, terutama ketika bekerja dengan ruang keadaan diskrit atau sistem yang terkuantisasi. Dengan mengubah fungsi gelombang menjadi vektor dan operator menjadi matriks, kita dapat menerapkan teknik aljabar matriks untuk menyelesaikan berbagai masalah kuantum. Representasi ini sangat berguna dalam perhitungan nilai eigen, analisis komutator, dan studi operator Hermitian.

LATIHAN

1. Diberikan basis $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$ di mana operator posisi $\hat{x}$, dalam basis ini direpresentasikan oleh matriks berikut:

$$\hat{x} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Tentukan:

a. Tentukan nilai eigen dari operator posisi $\hat{x}$.
b. Apakah matriks $\hat{x}$ ini merupakan operator Hermitian?

2. Diberikan dua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ dalam basis tertentu dengan matriks berikut:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

a. Hitung komutator $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\,\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$

b. Apakah kedua operator ini saling komutatif? Jelaskan apa implikasi dari hasil ini dalam fisika kuantum.

DAFTAR PUSTAKA

Griffiths, D. J. (2018). *Introduction to Quantum Mechanics* (3rd ed.). Pearson.

Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., & Laloë, F. (2019). *Quantum Mechanics* (Vol. 1 & 2). Wiley.

Shankar, R. (2020). *Principles of Quantum Mechanics* (2nd ed.). Springer.

Sakurai, J. J., & Napolitano, J. (2017). *Modern Quantum Mechanics* (2nd ed.). Addison-Wesley.

Merzbacher, E. (2020). *Quantum Mechanics* (3rd ed.). Wiley.

Nielsen, M. A., & Chuang, I. L. (2010). *Quantum Computation and Quantum Information* (10th Anniversary ed.). Cambridge University Press.

Feynman, R. P., & Hibbs, A. R. (2010). *Quantum Mechanics and Path Integrals*. Dover Publications.

Ballentine, L. E. (2014). *Quantum Mechanics: A Modern Development*. World Scientific.

MODUL 3

PERSAMAAN SCHRODINGER

Schrodinger merumuskan teori gelombangnya (1925) dalam upaya untuk mendapat suatu teori komprehensip (menyatu) tentang mekanika tingkat atom. Sampai waktu itu teori mengenai fisika tingkat atom masih tersebar dalam berbagai hipotesa. Persamaan gelombang Schrodinger merupakan seperangkat postulat tentang gerak partikel pada tingkat atom. Persamaan tersebut dikemukakan sebagai postulat,sehingga kebenarannya sebagai persamaan dasar mekanika tingkat atom masih harus ditunjukkan melalui pengamatan. Postulat Schrodinger sangat abstrak, dan karena itu memerlukan waktu untuk dapat diterapkan dalam kerangka berpikir seseorang yang mulai mempelajarinya. Tinjaulah sebuah partikel yang memiliki massa m, bergerak dengan momentum p di dalam suatu medan konservatif. Menurut mekanika klasik, energi total partikel adalah

jumlah energi kinetik dan potensial :

$$\mathrm{E} = \frac{p^2}{2m}^{+} V \ \rightarrow p = \sqrt{2m(E-V)}$$

Sebagai gelombang, kecepatan fase gelombang partikel itu

$$v = \frac{E}{p} = \frac{E}{\sqrt{2m(E-V)}}$$

Misalkan ψ (x,t) adalah fungsi gelombang partikel, maka persamaan gelombang:

$$\frac{\partial^2 \psi\,(x,t)}{\partial x^2} = \frac{2m(E-V)}{E^2}\,\frac{\partial^2 \psi\,(x,t)}{\partial t^2}$$

Suatu fungsi gelombang partikel dengan energi tetap berkaitan dengan frekuensi tetap. Untuk itu ψ (x,t) memenuhi

$$\psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\omega t}$$

Mengingat E = $\hbar\omega$ dan $\hbar = \frac{h}{2\pi}$

$$\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = -\ \frac{2m(E-\ V)}{\hbar^2}\ \psi(x,t)$$

Akhirnya diperoleh persamaan:

$$\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi(x) = 0$$

Persamaan di atas merupakan persamaan Schrodinger 1 dimensi Untuk tiga dimensi persamaan Schrödinger ini adalah:

$$\nabla^2 \psi(x,y,z) + \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)\psi(x,y,z) = 0$$

Bagian waktu exp(-iωt) telah dihilangkan sementara karena tak mempunyai pengaruh, dan selanjutnya persamaan itu disebut persamaan Schrödinger yang tak bergantung waktu bagi sebuah partikel dalam satu dimensi. V adalah energi potensial yang bentuknya harus diketahui sebelumnya, sedangkan fungsi gelombang ψ (x) dan energi E dari partikel bersangkutan merupakan solusi yang harus dicari dari persamaan tersebut. Persamaan Schrödinger di atas dapat dituliskan sebagai berikut :

$$\check{\mathrm{H}}\psi(x) = E\psi(x) \qquad (*)$$

Dengan

$$\check{\mathrm{H}} = \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

disebut hamiltonian partikel, yakni operator energi total dari partikel. Dalam bahasa matematik, E adalah harga eigen dari operator H dengan fungsi eigen ψ(x). Persamaan (*) disebut persamaan harga eigen.

Turunan pertama terhadap waktu untuk fungsi gelombang ψ(x,t) adalah:

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = i\omega\partial\psi(x,t)$$

Karena E = ħω maka diperoleh

$$i\hbar\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} E\psi(x,t) \rightarrow \check{\mathrm{H}}\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}$$

Ini disebut persamaan Schrödinger yang bergantung waktu bagi sebuah partikel.

Andaikan bahwa suatu partikel bergerak memenuhi , $\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$

maka momentum dan energi partikel itu dapat ditentukan:

$$P\,\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(Ae^{i(kx-\omega t)}\right)$$
$$= \hbar k\, Ae^{i(kx-\omega t)}$$
$$= \hbar k\,\psi(x,t)$$

$$E\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left(Ae^{i(kx-\omega t)}\right)$$
$$= \hbar k\,\psi(x,t)$$

Supaya kita memahami lebih jelas, mari kita tinjau terlebih dahulu prosedur untuk mendapatkan persamaan Schrodinger untuk partikel ¨ bebas pada ruang satu dimensi. Fungsi gelombang partikel bebas. Energi partikel bebas dalam mekanika klasik berkaitan dengan momentum sesuai dengan relasi,

$$E = \frac{p_x^2}{2m}$$

Jika kita kerjakan turunan parsial dua kali terhadap x pada fungsi gelombang kita memperoleh,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) = \left[-\frac{p_x^2}{\hbar^2}\right]\psi(x,t)$$

dan seperti sebelumnya turunan parsial terhadap t, kita mendapatkan

$$\frac{\partial}{\partial}\psi(x,t) = \left[\frac{iE}{\hbar}\right]\psi(x,t)$$

Menggunakan relasi E = $p_x^2/2m$, kita dapat menyatukan persamaan dan dengan cara sebagai berikut:

$$\frac{\partial}{\partial}\psi(x,t) = \left[-\frac{ip_x^2}{2m\hbar}\right]\psi(x,t)$$

$$\frac{\partial}{\partial}\psi(x,t) = \left[\frac{i\hbar}{2m}\right]\left[-\frac{p_x^2}{\hbar^2}\psi(x,t)\right]$$

Substitusi dengan persamaan, kemudian dihasilkan persamaan akhir yaitu:

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left[\frac{i\hbar}{2m}\right]\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)$$

Untuk menyederhanakan persamaan ini, kita kalikan kedua sisinya dengan $i\hbar$ sehingga kita peroleh,

$$i\hbar \;\; \frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)$$

Pada tahun 1926, Erwin Schrödinger menggunakan sifat gelombang de Broglie suatu partikel dalam persamaan gelombang. Jika momentum partikel adalah P, maka panjang gelombangnya adalah $\lambda = h/p$. Karena kecepatan $v = f\lambda$ maka,

$$v = \frac{\hbar\omega}{P}$$

di mana $\hbar = h/\,2\pi$ .dan $\omega = 2\pi f$. Dengan demikian maka persamaan gelombang menjadi

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{P^2}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$$

Tetapi, karena energi kinetik partikel adalah

$$K = \frac{P^2}{2m}$$

maka persamaan gelombang menjadi

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m\,K}{\hbar^2}\varphi(x) = 0$$

Jika energi potensial yang dimiliki partikel adalah V, maka energi partikel itu adalah

$$E = K + V$$

Dengan demikian maka persamaan gelombang menjadi

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi(x) = 0$$

Inilah yang disebut persamaan Schrödinger yang tidak bergantung waktu.

a. Persamaan Schrodinger Bergantung Waktu

Dalam mekanika kuantum fungsi gelombang ψ bersesuaian dengan variabel gelombang y dalam gerak gelombang umumnya. Namun ψ tidak seperti y, bukanlah suatu kuantitas yang dapat diukur, sehingga dapat berupa kuantitas kompleks. Karena itulah kita akan menganggap ψ dalam arah x dinyatakan oleh:

$$\psi = Ae^{-i\omega(t - x/V)}$$

Jika ganti ω dengan $2\pi v$ dan V dengan$v\lambda$, kita peroleh:

$$\psi = Ae^{-2\pi(vt - x/\lambda)}$$

Yang bentuknya menguntungkan, karena kita telah mengetahui hubungan v dengan ƛ dinyatakan dalam energi total E dan momentum P dari partikel yang diberikan oleh ψ selanjutnya karena E=hv=2π dan $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{P}$, maka kita peroleh :

$$\psi = Ae^{-i/\hbar(Et - px)}$$

Persamaan di atas merupakan pemberian matematis gelombang ekivalen dari partikel bebas yang berenergi total E dan momentum p yang bergerak dalam arah +x. Pernyataan fungsi gelombang ψ yang diberikan oleh persamaan diatas hanya benar untuk partikel yang bergerak bebas, sedangkan kita lebih tertarik pada situasi dengan partikel dipengaruhi berbagai pembatasan. Apa yang harus kita lakukan sekarang ialah mendapatkan persamaan diferensial pokok ψ , kemudian kita memecahkan ψ untuk situasi yang khusus. Persamaan ini disebut persamaan Schrodinger dapat diperoleh dengan berbagai cara, tetapi semuanya mengandung kelemahan yang sama. Persamaan itu tidak dapat diturunkan secara ketat dari prinsip fisis yang ada karena persamaan itu menyatakan sesuatu yang baru.

Selanjutnya dengan mendiferensialkan persamaan di atas dua kali terhadap x menghasilkan persamaan sebagai berikut:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi$$

Dan sekali terhadap t, diperoleh:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\psi$$

Untuk kelajuan yang kecil daripada kelajuan cahaya, energi total partikel ialah jumlah dari energi kinetik p2 /2m dan energi potensial V, dengan pada umumnya merupakan fungsi terhadap kedudukan x dan waktu:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

Kalikan persamaan di atas dengan fungsi gelombang ψ menghasilkan: *

$$E\psi = \frac{p^2\psi}{2m} + V\psi$$

Sehingga : **

$$E = \frac{\hbar \partial \psi}{i\, \partial t}$$

Dan ***

$$p\psi - \hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

Subtitusi persamaan ** dan *** ke parsamaan * didapat:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V$$

Persamaan di atas merupakan persamaan Schrodinger bergantung waktu dalam satu dimensi. Dalam tiga dimensi dapat dinyatakan sebagai:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+V\psi$$

Dengan energi potensial V merupakan fungsi terhadap x, y, z, dan t. Setiap pembatasan yang dapat membatasi gerak partikel dapat mempengaruhi fungsi energi potensial V. Sekali bentuk V diketahui, maka persamaan Schrodinger dapat dipecahkan untuk mendapatkan fungsi gelombang partikel ψ, sehingga kerapatan peluang ψ^2 ditentukan untuk x, y, z, dan t tertentu. Persamaan di atas hanya bias dipakai untuk persoalan non-relativsitik dan rumusan yang lebih memakan pikiran diperlukan jika kelajuan partikel yang mendekati kecepatan cahaya.

Jika operator $\widehat{H}$ dioperasikan pada fungsi lengkap itu maka

$$\widehat{H}\psi(x,t)=\widehat{H}\psi(x)e^{-iEt/\hbar}=E\varphi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

$$=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)$$

Persamaan ini

$$=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t)=\widehat{H}\psi(x,t)$$

disebut persamaan Schrödinger yang bergantung waktu.

b. Persamaan Schrodinger Bebas Waktu

Pada umumnya potensial dalam fisika tidak bergantung dari waktu.

$$-\frac{\hbar^2}{2m_o}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x,t)\psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

Pada suku pertama hanya merupakan fungsi terhadap r, dan pada suku kanan hanya merupakan fungsi terhadap t. Persamaan di atas dapat dinyatakan sebagai:

a) $i\hbar\frac{1}{\phi(t)}\frac{d\phi(t)}{dt}=G$

b) $-\frac{\hbar^2}{2m_o}\frac{d^2\psi(\vec{r})}{dx^2}+V(\vec{r})\psi(\vec{r})=G\psi[\vec{r}]$

Solusi persamaan (a) di atas adalah: *

$$\phi(t)=e^{\left(-\frac{iGt}{\hbar}\right)}$$

Selanjutnya persamaan (b) dapat dinyatakan sebagai:

$$\left[-\frac{\hbar}{2m_o}\nabla^2+V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r})=G\psi(\vec{r})$$

Dalam hal ini:

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Sehingga persamaan di atas dapat dinyatakan sebagai:

$$H_{op}\psi(\vec{r})=G\psi(\vec{r}) \qquad **$$

Dalam hal ini berlaku bahwa:

$$H_{op=\left[-\frac{\hbar^2}{2m_o}\nabla^2+V(\vec{r})\right]}$$

Sehingga persamaan * dapat dinyatakan dengan persamaan:

$$\phi(t)=e^{\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)}$$

Dengan demikian persamaan ** dapat dinyatakan sebagai:

$$H_{op\psi(\vec{r})}=E\psi(\vec{r})$$

Dalam hal ini: E = nilai eigen dengan operator H_{op}

ψ($\vec{r}$) = fungsi eigen dari operator H_{op}

Jika energi potensial yang dimiliki partikel adalah V, maka energi partikel itu adalah

$$E = K + V$$

Dengan demikian maka persamaan gelombang menjadi

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi(x) = 0$$

Inilah yang disebut persamaan Schrödinger yang tidak bergantung waktu. Jelaslah bahwa persamaan Schrödinger adalah persamaan gelombang untuk satu partikel. Untuk 3-dimensi persamaan Schrödinger adalah:

$$\nabla^2\varphi(x, y, z) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\varphi(x, y, z) = 0$$

di mana,

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Dari persamaan dan jelas bahwa persamaan Schrödinger adalah persamaan gelombang bagi partikel. Solusi persamaan itu adalah energi E dan fungsi gelombang *φ(x)*Untuk menyelesaikan persamaan itu diperlukan syarat batas bagi fungsi gelombang *φ(x*). Syarat batas itu bisa ditentukan jika bentuk energi potensial V diketahui sebelumnya. Persamaan Schrödinger untuk 1-dimensi dapat dituliskan sebagai berikut:

$$\left[-\frac{d^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}V(x)\right]\varphi(x) = E\varphi(x)$$

Untuk itu nyatakanlah

$$\widehat{H} = -\frac{d^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

sehingga persamaan menjadi

$$\widehat{H}\varphi(x) = E\varphi(x)$$

$\hat{H}$ disebut Hamiltonian partikel yang merupakan operator energi dari partikel. Untuk kasus 3-dimensi Hamiltonian itu adalah

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x, y, z)$$

Hamiltonian di atas hanya bergantung pada ruang, tidak bergantung waktu. Jadi ia bersifat stasioner. Dalam persamaan terlihat bahwa operasi operator $\hat{H}$ pada fungsi $\varphi(x)$ menghasilkan energi E tanpa mengubah fungsi $\varphi(x)$. Persamaan seperti itu disebut persamaan nilai eigen, di mana E adalah nilai eigen energi dari operator $\hat{H}$ dengan fungsi eigen $\varphi(x)$. Analogi dengan fisika klassik, $E=K+V$, maka $-(\hbar^2/2m)\partial^2 / \partial x^2$ adalah operator energi kinetik dan V adalah operator energi potensial dari partikel. Berdasarkan persamaan, mengingat $\omega = E/\hbar$ fungsi gelombang partikel bisa dituliskan seperti

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

c. Partikel Bebas

Sebuah partikel yang tidak memiliki potensial disebut partikel bebas. Persamaan Schrödinger untuk partikel ini adalah

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi = 0$$

Atau

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0; \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Solusi persamaan tersebut adalah

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Karena tidak mengalami potensial, maka fungsi gelombang tersebut tidak mempunyai syarat batas. Jadi, partikel bisa memiliki sembarang energi positif. Fungsi gelombang lengkap adalah $\Psi(x, t)\varphi(x)e^{-iEt\,/\,\hbar}$ atau

$$\Psi(x, t) = Ae^{ik\left(x\frac{k\hbar}{2m}t\right)} + Be^{-ik\left(x+\frac{k\hbar}{2m}t\right)}$$

Suku pertama merupakan gelombang yang menjalar ke kanan dan suku kedua gelombang yang menjalar ke kiri, dengan energi yang sama. Karena keduanya hanya dibedakan oleh tanda di depan k, maka berlaku

$$\Psi_k(x,t) = Ae^{i\left(kx + \frac{k^2\hbar}{2m}t\right)}$$

dengan

$$k = \pm\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \begin{cases} k > 0 \rightarrow \text{menjalar ke kanan} \\ k < 0 \rightarrow \text{menjalar ke kiri} \end{cases}$$

Laju penjalaran gelombang adalah

$$v_{kuantum} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$$

Di lain pihak, laju klasik suatu partikel bebas dengan energi $E=½mv^2$ adalah

$$v_{klasik} = \sqrt{\frac{2E}{m} = 2v_{kuantum}}$$

Jadi, laju partikel bebas secara kuantum sama dengan setengah laju klasiknya. Fungsi gelombang dalam persamaan tak dapat dinormalisasi,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^* \Psi_k dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = \infty$$

Ini tidak mempunyai arti fisis, kita hanya bisa katakan bahwa partikel bebas tidak bisa dalam suatu keadaan stasioner. Fungsi gelombang partikel bebas,$\Psi(x,t)$ dapat diungkapkan sebagai kombinasi linier dalam bentuk integral dalam k,

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

Fungsi ini dapat dinormalisasi, tetapi dalam daerah k atau daerah energi dan laju. Inilah yang disebut paket gelombang. Untuk itu ambillah t=0, sehingga

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

Transformasi Fourier dari fungsi f(x)⟷F(k) seperti

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

memiliki persyaratan untuk fungsi-fungsi yaitu, integral-integral di atas harus ada, misalnya $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 \, dk$ terbatas (finite). Hal ini menjamin persyaratan fisis yang diperlukan, yaitu Ψ(x,0) itu ternormalisasi. Jadi,

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

Dengan demikian maka, jika Ψ(x,0) diketahui maka *ϕ (k)* dapat ditentukan dan selanjutnya substitusi ke persamaan akan menghasilkan Ψ(x,t). Bentuk yang paling sederhana dari persamaan Schrödinger adalah persamaan untuk partikel bebas atau partikel di dalam potensial yang konstan, *V (x) = C =* konstanta. Pada potensial ini tidak ada gaya yang bekerja pada partikel karena *F =* $-dV/dx$ *= 0.* Nilai konstanta potensial *C* dapat dipilih berapa saja dan ini tidak akan mengubah solusi persamaan Schrödinger. Di samping itu pula kita dapat menaikkan atau menurunkan nilai potensial *C* dengan mengubah nilai potensial referensinya V_o. Agar analisis bisa lebih mudah, kita akan menggunakan potensial *V (x) = 0* tanpa ada pengaruh pada solusinya.

Operator Hamiltonian untuk partikel bebas dalam ruang satu dimensi adalah

$$\hat{H} = \hat{T} \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$$

Persamaan Schrodinger yang tidak bergantung waktu atau independen terhadap waktu yaitu

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$
$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

Ingat bahwa fungsi gelombang Ψ(x, t) yaitu

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

untuk sistem berada pada tingkatan energi E yang stasioner.) ini dapat disederhanakan menjadi persamaan diferensial biasa orde dua,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

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

di mana $k = \sqrt{2mE/\hbar}$

Solusi persamaan berbentuk,

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

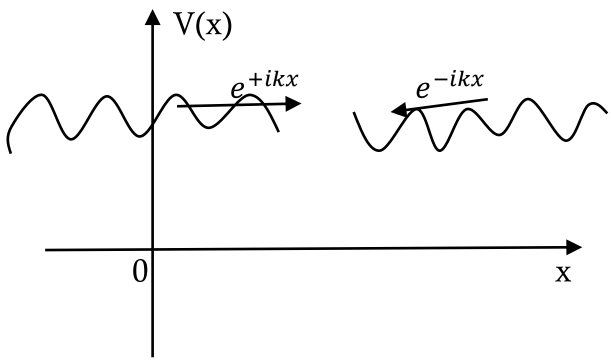
atau

$$\psi(x,t) = Ae^{+i(kx - Et/\hbar)} + Be^{-i(kx + Et/\hbar)}$$

Sehingga fungsi gelombang yang tergantung pada waktu menjadi

$$\psi(x,t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

di mana $\omega = E/\hbar$ adalah frekuensi angular. Sebuah ilustrasi gelombang yang bergerak ke arah positif dan negatif x ditunjukkan pada gambar berikut:



Gambar. Ilustrasi penjalaran fungsi gelombang ke arah positif dan negatif sumbu x

Supaya kita memahami lebih jelas, mari kita tinjau terlebih dahulu prosedur untuk mendapatkan persamaan Schrödinger untuk partikel bebas pada ruang satu dimensi. Fungsi gelombang partikel bebas diberikan oleh persamaan. Energi partikel bebas dalam mekanika klasik berkaitan dengan momentum sesuai dengan relasi,

$$E = \frac{p_x^2}{2m}$$

Jika kita kerjakan turunan parsial dua kali terhadap x pada fungsi gelombang persamaan, kita memperoleh,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = \left[-\frac{p_x^2}{\hbar^2}\right]\Psi(x,t)$$

dan seperti sebelumnya turunan parsial terhadap t, kita mendapatkan,

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left[-\frac{iE}{\hbar}\right]\Psi(x,t)$$

Menggunakan relasi $E = p_x^2/2m$, kita dapat menyatukan persamaan dengan cara sebagai berikut

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left[-\frac{ip_x^2}{2m\hbar}\right]\Psi(x,t)$$

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

Substitusi dengan persamaan, kemudian dihasilkan persamaan akhir yaitu

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

Untuk menyederhanakan persamaan ini, kita kalikan kedua sisinya dengan $i\hbar$ sehingga kita peroleh

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\ \Psi(x,t)$$

Mari kita kaji persamaan ini dengan memperhatikan definisi operator momentum $\hat{p}_x$ dan operator energi $\hat{E}$. Persamaan ini dapat ditulis kembali dengan menggunakan operator momentum dan energi menjadi

$$\hat{E}\ \Psi(x,t) = \frac{1}{2m}[\hat{p}_x]^2\Psi(x,t)$$

Generalisasi untuk ruang tiga dimensi dapat dilakukan dengan cara yang sama dan menggunakan hubungan energi dan momentum (mekanika klasik),

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

dapat diperoleh persamaan gerak untuk partikel bebas yaitu

$$\hat{E}\ \Psi(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2\Psi(\boldsymbol{r},t)$$

Atau

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\ \Psi(\boldsymbol{r},t)$$

di mana Laplacian ∇^2 ,

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Generalisasi untuk sebuah partikel yang berada pada sebuah potensial *V (**r**, t)* didapat dari hubungan energi,

$$E = \frac{p^2}{2m}V +\ (\boldsymbol{r},t)$$

dan melakukan penggantian variabel klasik dengan operator, kita dapat tuliskan persamaan geraknya,

$$\hat{E}\ \Psi(\boldsymbol{r},t) = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}V\ (\boldsymbol{r},t)\ \right]\Psi(\boldsymbol{r},t)$$

Atau

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\ \Psi(\boldsymbol{r},t) + V\ (\boldsymbol{r},t)\ \Psi(\boldsymbol{r},t)$$

Persamaan inilah yang dinamakan persamaan Schrödinger yang bergantung waktu. Persamaan ini menentukan evolusi fungsi gelombang.Untuk formulasi yang lebih umum, kita perhatikan bahwa operator operator pada sisi kanan persamaan adalah operator Hamiltonian,

$$\hat{H} = -\ \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\ (\boldsymbol{r},t) = \hat{T} + \hat{V}$$

Jadi persamaan Schödinger yang berlaku untuk semua keadaaan adalah

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t) = \hat{H}\ \Psi(\boldsymbol{r},t)$$

Pada mekanika klasik, energi total dari suatu sistem yang diekspresikan dalam bentuk variabel koordinat dan momentum disebut dengan fungsi Hamiltonian dari sistemnya.

$$E = H(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}, t) = \frac{p^2}{2m} + V\,(\boldsymbol{r}, t)$$

Dari fungsi Hamiltonian ini, operator Hamiltonian kuantum mekanik diperoleh dengan melakukan penggantian variabel momentum dengan operator momentum, $p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar\nabla$, atau

$$H = H(\boldsymbol{r}, -i\hbar\nabla, t)$$

Kita bisa ringkas bahwa persamaan Schrödinger yan bergantung waktu dapat diperoleh dengan penggantian variabel-variabel klasik dengan operator-operator kuantum.

$$E \rightarrow \hat{E} = i\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\boldsymbol{p} \rightarrow \hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$$

dan

$$\boldsymbol{r} \rightarrow \hat{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{r}$$

Persamaan Schödinger di atas bersifat linier dan homogen. Persamaan Schrödinger hanya terdapat turunan order satu terhadap variabel waktu. Sehingga evolusi dari fungsi gelombang dapat diketahui jika fungsi gelombang pada waktu tertentu t_o sudah diketahui. Fungsi gelombang untuk waktu yang lain diperoleh dengan menyelesaikan persamaan Schödinger.

d. Soal-Soal Latihan
Jawablah pertanyaan dibawah ini dengan tepat!

1. Diketahui bahwa:

$$E\psi = \frac{p^2\psi}{2m} + V\psi$$

Buktikan bahwa:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi$$

2. Gunakanlah teknik pemisahan variabel untuk memperlihatkan bahwa ada persamaan Schrodinger tiga dimensi untuk potensial bebas waktu yang dapat ditulis:

$$\psi(x,y,z,t)=\psi(x,y,z,t)e^{\frac{-Et}{\hbar}}$$

Dengan ψ *(x, y, z, t)* adalah solusi persamaan Shcrodinger bebas waktu.

3. Suatu partikel bergerak yang memenuhi persamaan: $\psi(x,t)=5{,}0e^{i(30x-50t)}$ Hitunglah energi dan momentum partikel tersebut.

BAB IV: Potensial Sederhana

Persoalan kuantum mekanis yang paling sederhana adalah persoalan sebuah partikel bebas yang bergerak tanpa dipengaruhi gaya apapun dalam suatu bagian ruang, yaitu F = 0, sehingga V(x) = konstanta, untuk semua x. Dalam hal ini, kita bebas memilih tetapan potensial sama dengan nol, karena potensial selalu ditentukan dengan tambahan satu tetapan integrasi sembarang (F = - dV/dx dalam satu dimensi).

Berikut kita terapkan persamaan Schrodinger bergantung waktu kecuali dengan potensial yang sesuai (V = 0) :

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$$

Atau

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=E\,\Psi$$

Perluasan bentuk energi partikel bebas ke dalam ruang tiga dimensi diberikan oleh

$$E=\frac{p^2}{2m}=\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_{y+}^2\,p_x^2\right)$$

Dan Persamaan di atas dapat diperluas menjadi

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\Psi$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi$$

Dan dari hubungan $E = \hbar\,\omega$ dan $p = \hbar k$, diperoleh

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = -k^2$$

di mana

$$k^2 = \frac{2m\,E}{\hbar^2}$$

Persamaan di atas adalah bentuk persamaan yang telah lazim dikenal ; dengan k^2 selalu positif, maka pemecahannya adalah

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

Nilai energi yang diperkenankan adalah:

$$E = \frac{\hbar^2\,k^2}{2m}$$

Karena pemecahan kita tidak memberi batasan pada k, maka energi partikel diperkenankan memiliki semua nilai (dalam istilah fisika kuantum, kita katakan bahwa energinya *tidak* terkuantisasi). Perhatikan bahwa Persamaan di atas tidak lain adalah energi kinetik sebuah partikel dengan momentum p = η *k* , atau, setara dengan ini, $p = h/\lambda$; ini tidak lain daripada apa yang kita perkirakan, karena kita telah membentuk persamaan Schrodinger yang menghasilkan pemecahan bagi partikel bebas yang berkaitan dengan satu gelombang de Broglie.

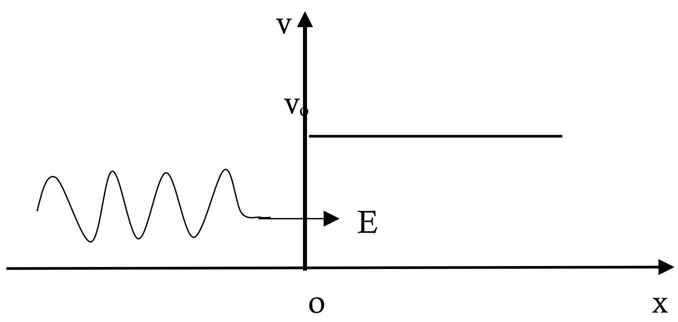
a. Potensial tangga

Sebuah elektron datang dari x-negatif menuju x-positif. Di x = 0 elektron itu menghadapi potensial tangga sebesar V_o.

Jika energi total elektron, $E < V_o$, secara klasik elektron akan terpantul sepenuhnya. Bagaimana menurut kuantum?

Di daerah x < 0, V = 0; misalkan fungsi gelombangnya adalah ψ1(x)

$$\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + E\Psi_1 = 0 \longrightarrow \Psi_1(x) = \underbrace{Ae^{-ikx}}_{\text{Gelombang datang}} + \underbrace{Be^{-ikx}}_{\text{Gelombang pantul}};\ k^2 = \frac{2m_e E}{\hbar^2}$$



Gambar. Potensial Tangga untuk $E < V_o$

Di daerah x > 0, $V = V_o$; misalkan fungsi gelombang elektron adalah $\psi_2(x)$

$$\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + (E - V_0)\psi_2 = 0$$

Karena $E < V_o$, maka solusi bagi fungsi $\psi_2(x)$ merupakan fungsi eksponensial menurun seperti:

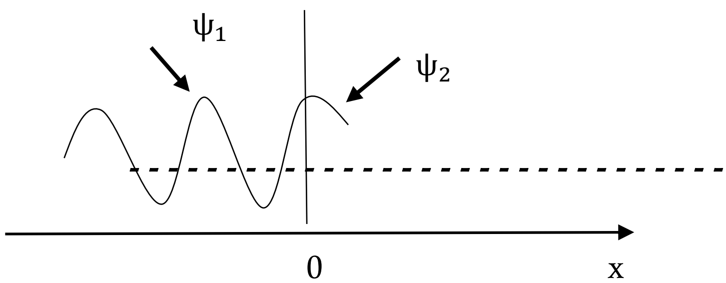
$$\psi_2(x) = Ce^{-Kx}; \quad K^2 = \frac{2m_e(V_0 - E)}{\hbar^2} - k^2$$

Di x = 0, ψ1 dan ψ2 harus bersambung agar fungsi gelombang itu kontinu;
Syarat kontinu:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0); \text{ dan } \left.\frac{d\psi_1(x)}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_1(x)}{dx}\right|_{x=0}$$

A+B=C $\qquad$ ik(A-B) = -KC

$$B = \frac{k-iK}{k+iK}A; \; C = \frac{2K}{k+iK}A \rightarrow \begin{cases} \psi_1(x)Ae^{ikx}\frac{k-iK}{k+iK}Ae^{-ikx}; & x < 0 \\ \psi_2(x) = \frac{2k}{k+iK}Ae^{-Kx}; & x0 \end{cases}$$



Gambar. Fungsi Gelombang

Kerapatan peluang elektron di x > 0 dapat dihitung dengan menggunakan $\psi_2(x)$:

$$|\psi_2(x)|^2 = \frac{4k^2}{k^2 + K^2}|A|^{2e^{-2Kx}} = \frac{4E}{V_0}|A|^2e^{-2Kx}$$

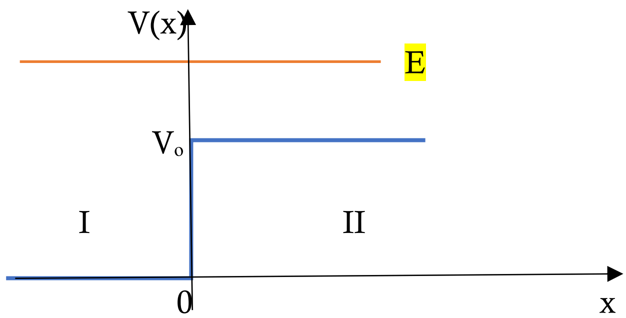
Jadi, meskipun mengalami potensial penghalang yang lebih besar dari energinya, elektron masih mempunyai peluang berada di x > 0.
Peluang itu menuju nol jika $V_o >> E$, atau di $x = \infty$.

$$|C/A|^2 = \frac{4k}{k+K} = \frac{4E}{V_0}$$

adalah koefisien transmisi yang secara klasik tak dapat diramalkan.

Fungsi gelombang dalam penjalarannya mengalami perubahan potensial pada posisi $x = 0$. Hal ini mirip dengan penjalaran cahaya yang melalui medium yang berbeda. Karena adanya perubahan medium akan terjadi pembiasan dan pemantulan cahaya. Hal yang sama juga terjadi untuk fungsi gelombang yang melalui perubahan perubahan potensial.

$$V(x) = \begin{cases} 0 \ \text{ jika } x < 0, \\ V_0 \ \text{ jika } x > 0 \end{cases}$$



Gambar. Pembagian daerah solusi untuk potensial tangga menjadi dua: daerah $x < 0$ dan $x > 0$.

Agar tidak membingungkan, kita akan menggunakan nilai potensial $V0 > 0$ yang positif. Ada tiga kasus yang perlu kita pahami: (a) energi partikel lebih kecil dari $V0$ atau $E < V0$, (b) energi partikel lebih besar dari V_o atau $E > V_o$ dan energi lebih kecil dari nol atau $E < 0$. Penyelesaian persamaan Schördinger dengan potensial tangga dilakukan dengan cara: (a) membagi solusinya menjadi dua bagian yaitu solusi untuk daerah I (*x* < *0*) dan II (*x* > *0*), (b) dua solusi ini nantinya kemudian disesuaikan sehingga memenuhi sifat kontinyuitas fungsi gelombang dan turunan fungsi gelombang. Persamaan Schrödinger pada dua daerah I dan II sebagai berikut:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} = E\Psi(x) \qquad \text{untuk} \qquad x < 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + V_0\Psi(x) = E\Psi(x) \qquad \text{untuk} \qquad x < 0$$

Persamaan-persamaan ini kemudian kita sederhanakan menjadi,

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} = E\Psi(x) = 0 \qquad \text{untuk} \qquad x < 0$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} = (E - V_0)\Psi(x) = 0 \qquad \text{untuk} \qquad x > 0$$

Menggunakan $k_I = \sqrt{2mE}/\hbar$ dan $k_{II} = \sqrt{2m(E - V_0)}/\hbar$, kita memperoleh,

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k_I^2\Psi(x) = 0 \qquad \text{untuk} \qquad x < 0$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + k_{II}^2\Psi(x) = 0 \qquad \text{untuk} \qquad x > 0$$

Solusi dua persamaan ini berbentuk,

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_Ix} + Be^{-ik_Ix} \qquad x < 0$$

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II}x} + De^{-ik_{II}x} \qquad x > 0$$

Koefisien *A, B, C* dan *D* akan disesuaikan sehingga fungsi gelombang memenuhi sifat kontinyuitas. Mari kita perhatikan solusi pada daerah I, fungsi *ψI* terdiri dari dua fungsi gelombang yang menjalar ke arah +*x* (fungsi e ikIx dan ke arah −*x* (fungsi e^{ik_Ix}). Begitu pula untuk solusi untuk daerah II. Kita asumsikan pada masalah ini situasi di mana partikel awalnya bergerak ke arah +*x* dan kemudian mengalami refleksi dan transmisi yang diakibatkan oleh perubahan potensial. Dengan asumsi ini, pada daerah II hanya ada fungsi gelombang transmisi, sehingga koefisien *D* = *0* menjadi

$$\psi_I(x) = Ae^{ik_Ix} + Be^{-ik_Ix} \qquad x < 0$$

$$\psi_{II}(x) = Ce^{ik_{II}x} \quad x > 0$$

Kondisi kontinyuitas pada posisi (*x = 0*) untuk solusi pada daerah I dan II adalah

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$\left.\frac{d\psi_I}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi_{II}}{dx}\right|_{x=0}$$

$$A + B = C$$

$$ik_IA - ik_IB = ik_{II}C$$

Dengan cara substitusi atau eliminasi, kita memperoleh

$$B = \frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}}A$$

$$C = \frac{2k_I}{k_I + k_{II}}A$$

Untuk menyederhanakan solusi kita menggunakan koefisien fungsi gelombang yang menjalar ke arah +*x* pada daerah I adalah *A = 1*. Solusi akhirnya adalah

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{ik_Ix} + \left(\frac{k_I - k_{II}}{k_I + k_{II}}\right) e^{-ik_Ix} & x < 0 \\ \left(\frac{2k_I}{k_I + k_{II}}\right) e^{-ik_{II}x} & x > 0 \end{cases}$$

Dengan $k_I = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}E}$ dan $k_{II} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar}(E - V_0)}$.

Mari kita perhatikan tiga kasus yang disebutkan sebelumnya yang tergantung pada nilai energi partikel *E.*

1. Kasus energi lebih besar dari V_o atau $E > V_o$
   k_I dan k_{II} bernilai riil. Solusi kasus ini diberikan oleh persamaan. Rapat arus probabilitasnya adalah

$$j = \frac{\hbar}{m} Im \left\{\psi^* \frac{d\psi}{dx}\right\}$$

$$= \frac{\hbar k_I}{m}(1 - |R|^2) \qquad x < 0$$

$$= \frac{\hbar}{m}|T|^2 Re\{k_{II}\}e^{-2xIm\{k_{II}\}} \qquad x > 0$$

2. Kasus $0 < E < V_o$
   Pada kasus ini $k_{II} = i\alpha$ bernilai imaginer karena $E - V_o$ bernilai negatif. Sehingga solusinya menjadi

$$\Psi(x) = \begin{cases} e^{ik_I x} + \left(\frac{k_I - i\alpha}{k_I + i\alpha}\right) e^{-ik_I x} & x < 0 \\ \left(\frac{2k_I}{k_I + i\alpha}\right) e^{-\alpha x} & x > 0 \end{cases}$$

Kita dapat lihat bahwa tidak ada fungsi gelombang yang ditransmisikan

3. Kasus $E < 0$
   Untuk kasus ini $k_I = i\beta$ dan $k_{II} = i\alpha$ adalah bernilai imaginer sehingga pada fungsi gelombangnya terdapat bagian $e^{-\beta x}$untuk daerah $x < 0$. Ini menyebabkan $\psi \to \infty$ jika $x \to -\infty$. Solusi ini tidak sesuai dengan sifat fungsi square integrable. Jika umpama solusinya berbentuk

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\beta x} & x < 0 \\ Be^{-\alpha x} & x > 0 \end{cases}$$

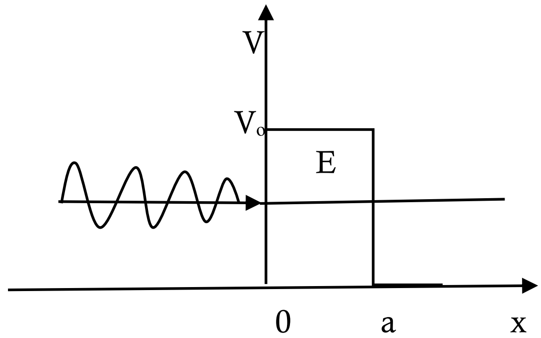
   Tetapi solusi ini tidak memenuhi sifat kontinyuitas. Jadi tidak ada solusi yang sesuai. Hal ini sesuai ekspetasi secara klasik bahwa $E < 0$ tidak bisa diakses.

b. Potensial penghalang persegi terhingga

Sebagai perluasan dari uraian di atas, pandanglah potensial penghalang seperti

$$V(x) = \begin{cases} V_o; & 0 \le x \le a \\ 0; & x < 0, x > a \end{cases}$$

yang dilukiskan dalam Gambar di bawah ini.



Gambar. Potensial penghalang terhingga persegi; partikel datang dari kiri dengan energi E<0

Fungsi gelombang elektron dalam daerah x<0

$$\varphi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx};\ k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Dalam daerah 0<x<a:

$$\varphi_2(x) = Ce^{Kx} + De^{-Kx}$$

Dengan

$$k^2 = \frac{2m(V_o - E)}{\hbar^2} = \frac{2mV_o}{\hbar^2} - k^2$$

Di daerah x>0, tidak ada potensial; maka fungsi gelombang di sana adalah

$$\varphi_3(x) = Fe^{ikx}$$

Syarat kontinuitas di x=0 dengan menggunakan fungsi-fungsi φ1(x) dan φ2(x), akan memberikan hubungan:

$$A + B = C + D$$
$$ik(A - B) = K(C - D)$$

dan syarat kontinuitas di x=a dengan menggunakan φ2(x) dan φ3(x), memberikan

$$Ce^{Ka} + De^{-Ka} = Fe^{ika}$$

$$K(Ce^{Ka} + De^{-Ka}) = ikFe^{ika}$$

Selanjutnya, dengan mengeliminasi C dan D, akan diperoleh koefisien refleksi:

$$\frac{B}{A} = \frac{(K^2 + k^2)sinh(Ka)}{(K^2 - k^2)sinh(Ka) + 4ikKcosh(Ka)}$$

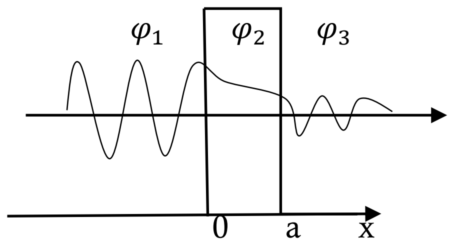
Jadi, reflektansi adalah

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{V_o^2 sinh^2(Ka)}{V_o^2 sinh^2(Ka) + 4E(V_o - E)}$$

Jika tidak ada kebocoran daya, maka R+T=1, sehingga diperoleh

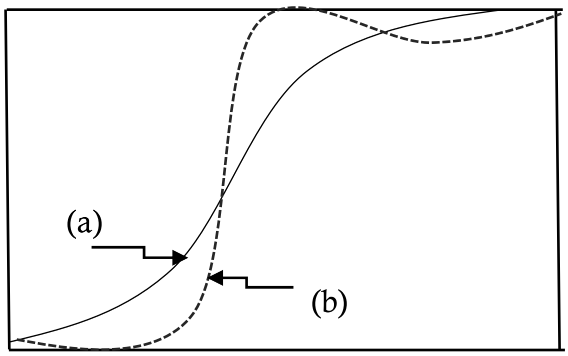
$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{4E(V_o - E)}{V_o^2 sinh^2(Ka) + 4E(V_o - E)}$$

R = $|B|^2 / |A|^2$ merupakan koefisien pantulan di x=0 dan T = $|F|^2 / |A|^2$ adalah koefisien transmisi di x=a



Gambar. Fungsi gelombang elektron yang mengalami potensial penghalang terhingga persegi; elektron dapat menerobos penghalang.

Dalam gambar tersebut diperlihatkan transmissi sebagai fungsi E/V_o untuk (a) $2mV_oa^2/\hbar^2=5$ dan (b) $2mV_o a^2/\hbar^2=20$. Sebagai gambaran, untuk a=10 nm maka (a) $V_o=7{,}6$ eV dan (b) 30,2 eV. Terlihat bahwa untuk $E/V_o<1$ transmittans $T>0$. Jadi, secara kuantum elektron dapat menerobos potensial penghalang meskipun energinya lebih kecil daripada potensial penghalang. Fenomena inilah yang disebut sebagai efek terobosan (*tunnel effect*).



Gambar. Transmittans sebagai fungsi E/V0 dari suatu potensial penghalang dengan: (a) $2mV_oa^2/\hbar^2=5$ dan (b) $2mV_o a^2/\hbar^2=20$.

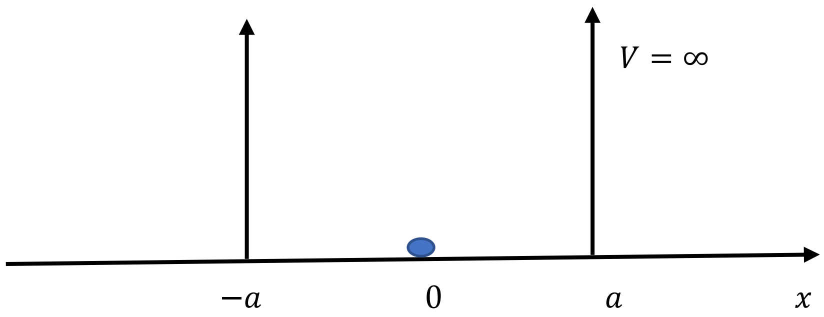
Terobosan partikel berlangsung dalam peluruhan radioaktif. Dalam kasus uranium suatu partikel-α (identik dengan inti atom He) mengalami gaya dorong elektrostatik inti hingga jarak 10^{-} μm dari inti. Kurang dari jarak itu gaya tersebut bersifat tarikan dan berbentuk sumur potensial. Partikel-partikel-α di dalam sumur potensial itu melawan gaya tarik dan dapat menerobos penghalang dan selanjutnya terdorong keluar, meskipun secara eksperimen ditunjukkan bahwa energi partikel-α itu lebih kecil daripada potensial penghalang. Teori tentang ini dikemukakan dalam Aplikasi penting dari efek terobosanditemukan dalam divais modern seperti *tunnel diode*, *quantum computing* dan *scanning tunneling microscope*.

c. Potensial persegi tak terhingga

Andaikanlah suatu elektron dalam pengaruh potensial berbentuk sumur tak terhingga berdimensi-1 seperti berikut:

$$V(x) = 0;\ -a < x\ < a$$

$$= \infty;\ \ x \geq a;\ x \leq -a$$



Gambar. Sumur Potensial Persegi Tak Terhingga

Elektron terperangkap dalam daerah –a < x < a, dan sama sekali tak dapat ke luar daerah itu. Dengan perkata lain peluang elektron berada di x>a dan di x <-a sama dengan nol. Oleh sebab itu, jika ψ(x) adalah fungsi gelombangnya, maka

$$\psi(a) = \psi(-a) = 0$$

Karena V = 0 dalam daerah –a < x < a, maka persamaan Schrödinger bagi elektron tersebut adalah:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2\psi}{dx^2} + E\psi = 0 \text{ atau } \frac{d\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0;\ \mathrm{k}^2 = \frac{2m_{eE}}{\hbar^2}$$

Solusinya adalah $\psi(x = C\ cos\ kx)$ dan $\psi(x) = D \sin kx$. Dengan syarat batas di x = a diperoleh

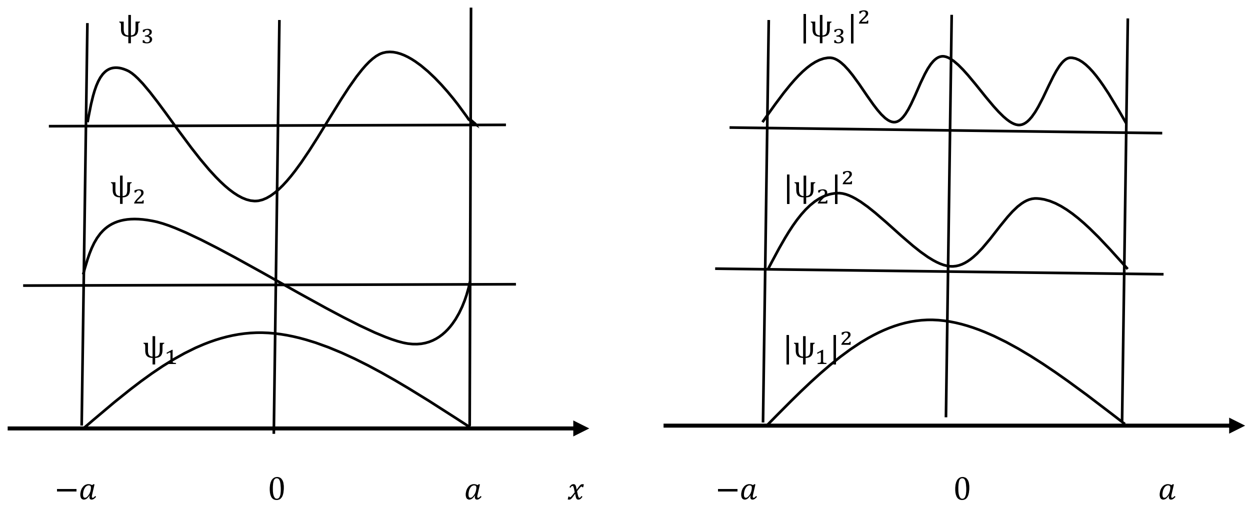
$$\psi_n(x) = C\ cos(n\pi x/2a) \text{ untuk } n = 1,3,5, \dots \dots ..$$

$\psi_n(x) = D\ sin(n\pi x/2a)$ untuk $n = 2,4,6, \dots \dots$

Harga C dan D dihitung melalui normalisasi fungsi, yakni: $\int_{-a}^{a} \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = 1$
Hasilnya adalah C=D=1/√ a , sehingga fungsi-fungsi eigen adalah:

$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right)$ untuk $n = 1,3,5, \dots \dots$

$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right)$ untuk $n = 1,3,5, \dots \dots$



Gambar. Fungsi-Fungsi Eigen

Fungsi-fungsi ini membentuk set ortonormal; artinya: $\int \psi_n^*(x)\psi_{n'}(x)dx = \delta_{nn'}$

Selanjutnya, diperoleh harga eigen energi:

ψ_4

$E_4 = 16\ E_1$

ψ_3

$E_3 = 9\ E_1$

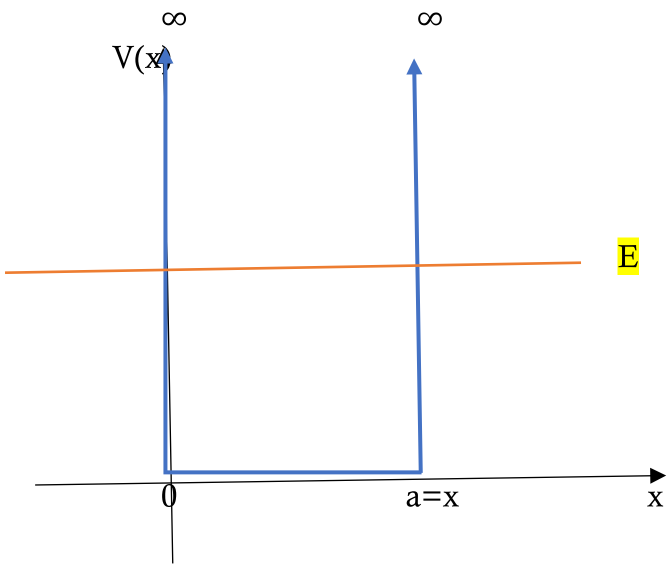
$E_n = n^2\left(\frac{\pi^2\hbar^2}{8m_e a^2}\right);\ \ n = 1,2,3 \dots \dots$ ψ_2

$E_2 = 4\ E_1$

ψ_1

E_1

Energi ini berharga diskrit (tidak kontinu, tapi bertingkat-tingkat) ditandai oleh bilangan kuantum n. Fungsi gelombang yang banyak digunakan dihasilkan dari persamaan Schrodinger untuk sebuah partikel berada pada sebuah sumur pote nsial persegi yang tak berhingga. Fungsi potensial untuk sistem ini adalah Bentuk fungsi potensial persegi tak berhingga ditunjukkan pada Gambar dibawah ini



Pada daerah yang memiliki potensial tinggi ∞, fungsi gelombangnya haruslah sama dengan nol atau $\psi(x) = 0$ untuk $x < 0$ dan $x > a$. Ini berarti partikel tidak berada di daerah ini. Hal ini dapat dimengerti dari persamaan Schrödinger yang memiliki bagian $V(x)\psi(x)$. Agar bagian persamaan ini mempunyai nilai (bukan tak terhingga) untuk nilai $V(x) = \infty$ maka satu-satunya cara adalah dengan membuat $\psi(x) = 0$. Hal ini juga dapat dimengerti dengan mempertimbangkan solusi persamaan Schrödinger untuk potensial tangga (persamaan yang memiliki sebuah faktor $e^{-\alpha x}$ di mana $\alpha = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$. Jika nilai $V_0 \to \infty$ maka nilai $\alpha \to \infty$ yang menunjukkan nilai fungsi gelombang $\psi(x) \propto e^{-\infty} = 0$ di daerah tersebut. Di samping itu pula, pada perbatasan dua daerah, karena sifat kontinyuitas fungsi gelombang, kita juga harus mempunyai fungsi gelombang yang bernilai nol pada posisi batasnya. Jadi solusi persamaan Schrödinger harus memenuhi syarat batas yaitu $\psi(0) = 0$ dan $\psi(a) = 0$.

Pada daerah $0 \leq x \leq a$, partikel dapat bebas bergerak. Persamaan Schrödinger yang akan diselesaikan untuk mendapatkan nilai eigen atau tingkat energi adalah

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

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

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

di mana $k^2 = \frac{2mE}{hbar^2}$ atau $k = \pm\sqrt{2mE/\hbar^2}$
Solusi persamaan diferensial ini berbentuk,

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

Atau

$$\psi(x) = C\exp(+ikx) + D\exp(-ikx)$$

Kita akan menggunakan solusi yang dibentuk dengan fungsi sinus dan cosinus. Koefisien A dan B ditentukan menggunakan syarat batas pada posisi $x = 0$ dan $x = a, \psi(x = 0) = 0$ dan $\psi(x = a) = 0$. Dengan menggunakan dua syarat batas, kita memperoleh,

$$\psi(0) = A\,sin(0) + B\,cos(0) = 0 \rightarrow B = 0$$
$$\psi(a) = A\,sin(ka) + B\,cos(ka) = 0 \rightarrow A\,sin(ka) = 0$$

Kita perhatikan bahwa untuk syarat batas yang kedua, persamaan menyatakan bahwa supaya solusinya tidak trivial ($A = 0$)maka $sin(ka) = 0$. Ini menyatakan bahwa tidak semua nilai k bisa menjadi solusi $sin(ka) = 0$. Atau dengan kata lain solusi persamaan Schrodinger mempunyai tingkatan energi yang diskrit. Nilai k yang memenuhi $sin(ka) = 0$ jika ka adalah kelipatan π. Jadi $ka = n\pi$. Nilai energi E yang menjadi solusinya adalah

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 = n^2\pi^2/a^2$$

Atau

$$E_n = \frac{n^2\pi^2}{a^2}\frac{\hbar^2}{2m} = \frac{n^2\hbar^2}{8ma^2}$$

Nilai koefisien A diperoleh dengan ketentuan bahwa total probabilitas seluruh ruang adalah 1 atau ternormalisasi, kita memperoleh

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = A^2 \frac{a}{\pi}\int_0^{\pi} sin^2(n\pi x/a)dx$$

Agar lebih mudah, kita mengganti variabel dengan $\theta = \pi x/a \, dan \, d\theta = (\pi/a)dx,$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = A^2 \frac{a}{\pi}\int_0^{\pi} sin^2\,(2n\theta)d\theta$$

$$= A^2 \frac{a}{\pi}\int_0^{\pi} 1 - cos(2n\theta)d\theta$$

$$= A^2 \frac{a}{\pi}\left[x - \frac{1}{2n} sin(2n\theta)\right]_0^{\pi}$$

$$= A^2 \frac{a}{\pi} 1$$

Sehingga koefisien normalisasi adalah

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

Persamaan gelombang yang dihasikan setelah dinormalisasi adalah

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

Kumpulan fungsi-fungsi solusi persamaan Schrodinger $\{\psi n\}$ merupakan kumpulan fungsi gelombang yang ortogonal, ternormalisasi, dan komplit. Sifat orthogonal berarti bahwa

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n(x)dx = \delta_{mn}$$

Orthogonalitas dari $\psi n(x)$ dibuktikan sebagai berikut.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n(x)dx = \frac{2}{a}\int_0^{\pi} sin(m\pi x/a)\sin(n\pi x/a)\,dx$$

Menggunakan substitusi variabel $\theta = \pi x/a \, dan \, d\theta = (\pi/a)dx,$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n(x)dx = \frac{2}{a}\frac{a}{\pi}\int_0^{\pi} sin(m\theta)\sin(n\theta)\,d\theta$$

$$= \frac{2}{\pi}\frac{1}{2}\int_0^{\pi} cos[(n-m)\theta] - \cos[(n+m)\theta]\,d\theta$$

$$= \frac{1}{\pi}\left[\frac{sin[(n-m)\theta]}{(n-m)} - \frac{\sin[(n+m)\theta]}{(n+m)}\right]_0^{\pi}$$

$$= 0 \text{ jika } m \neq n$$

Karena kumpulan fungsi $\{\psi n(x)\}$ adalah komplit maka fungsi apa saja $f(x)$ dapat direpresentasikan dengan fungsi-fungsi tersebut.

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

dan koefisien ekspansi diperoleh dengan

$$c_n = \int_0^a f(x) \sqrt{\frac{2}{a} sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx}$$

Ini sesuai dengan ekspansi Fourier atau deret Fourier untuk interval interval [0,a].

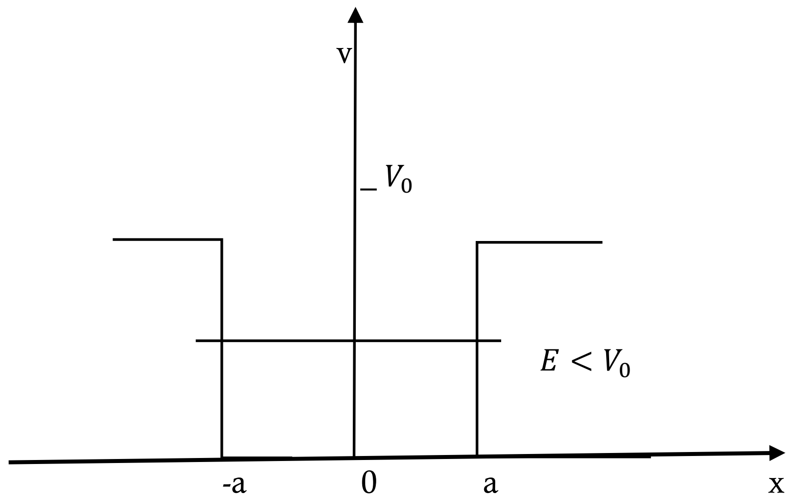
d. Potensial persegi terhingga

Sebuah elektron datang dari x-negatif menuju x-positif. Eleketron menghadapi potensial tangga seperti:

$$V(x) = 0; a < x < a$$

$$= V_0; \quad x \geq a; \;\; x < -a$$

Jika energi E < $V_o$secara klasik elektron tak dapat ke luar daerah itu. Tetapi secara kuantum, karena potensial itu terhingga elektron masih berpeluang berada diluar daerah –a < x < a. Syarat batas hanyalah: $\psi(\pm\infty) = 0$



Gambar. Sumur Potensial Persegi Terhingga

Persamaan Schrödinger untuk daerah –a < x < a adalah:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2}{dx^2} + E\psi = 0 \text{ atau } \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0;\ k^2 = \frac{2m_eE}{\hbar^2}$$

dengan mana diperoleh solusi berikut:

$$\psi(x) = \cos kx \text{ dan } \quad \psi(x) = \sin kx \text{ dimana:}$$

Untuk daerah $|x| \geq a$, persamaan Schrödinger adalah:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2\psi}{dx^2} + (V_0 - E)\psi = 0$$

Jika energi elektron E < V_o maka ψ(x) merupakan fungsi exponensial yang menurun dan menuju nol di $|x| = \infty$ Jadi, untuk $|x| \geq a$:

$$\psi(x) = Ce^{-K|a|} \text{ dengan } \quad K^2 = \frac{2m_e(V_0-E)}{\hbar^2}$$

Syarat kontinu di x = ±a:

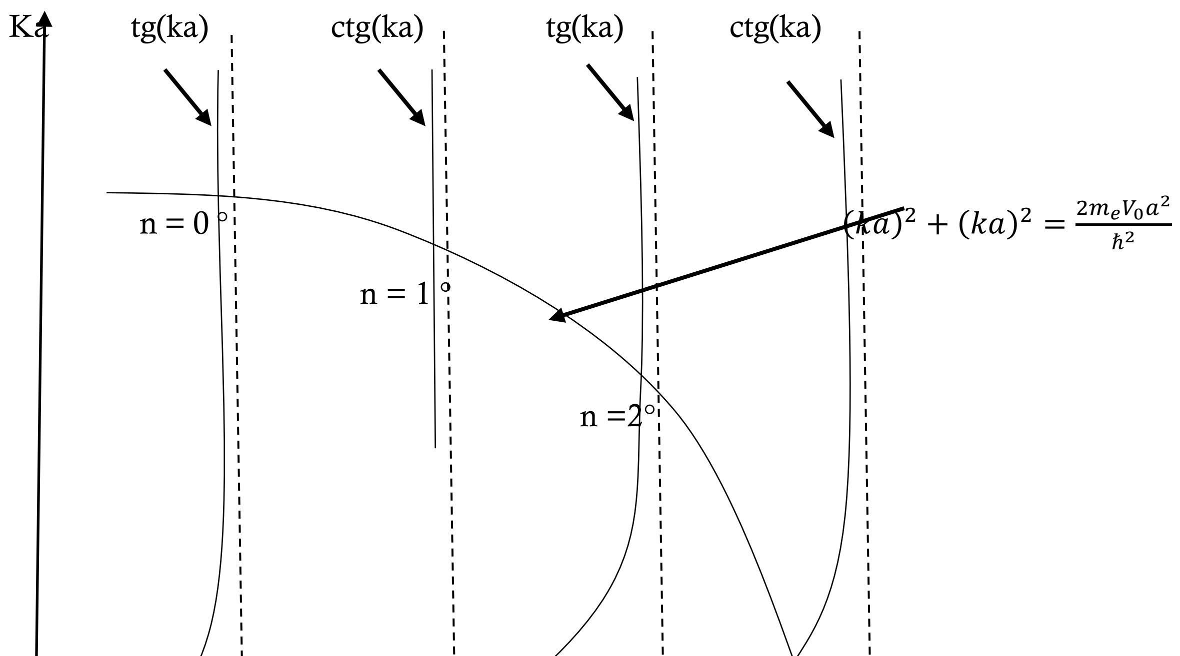
$$\cos ka = Ce^{-Ka} \longrightarrow ka\ tg\ ka = Ka$$

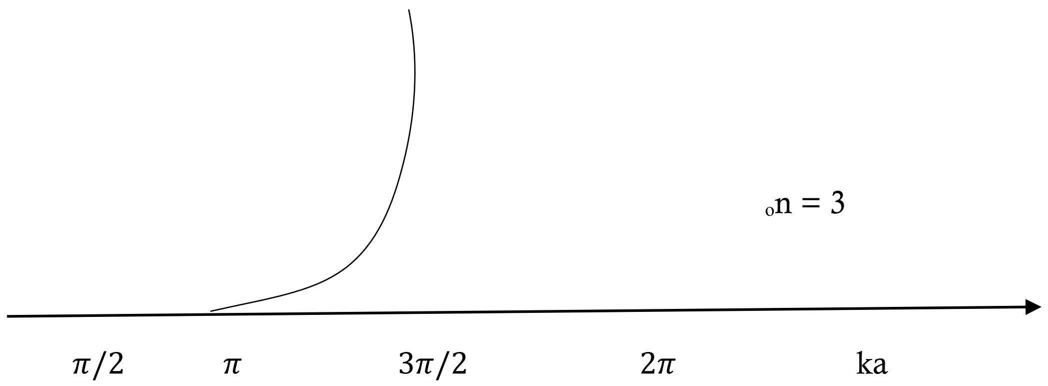
$$-k \sin ka = KCe^{-Ka}$$

$$\sin ka = Ce^{-Ka} \longrightarrow ka\ ctg\ ka = -Ka$$

$$k \cos ka = -KCe^{-Ka}$$

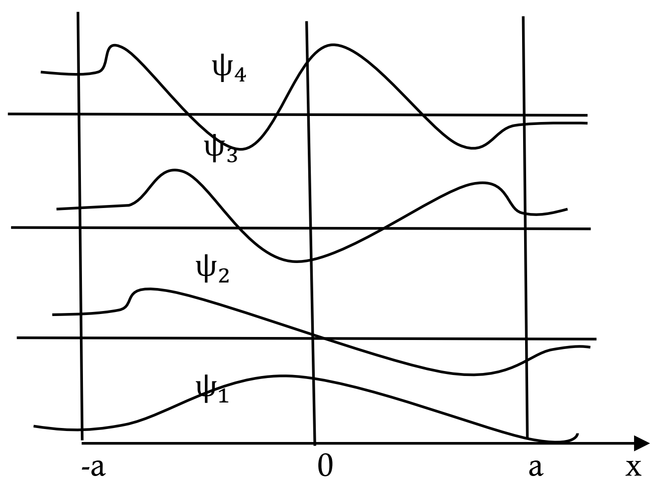
$$\left.\begin{aligned} k^2 &= \frac{2m_eE}{\hbar^2} \\ k^2 &= \frac{2m_e(V_0-E)}{\hbar^2} \end{aligned}\right\} \longrightarrow (ka)^2 + (ka)^2 = \frac{2m_eV_0a^2}{\hbar^2}$$





Gambar. Syarat Kontinu

Terlihat, jumlah tingkat energi sangat bergantung pada harga $V_o a^2$; misalnya untuk $V_o a^2 \leq (\pi\hbar^2 / 4\ m_e)$ hanya ada satu, dan $V_o a^2 \leq (\pi\hbar^2 / 4\ m_e)$ ada dua tingkat energi.

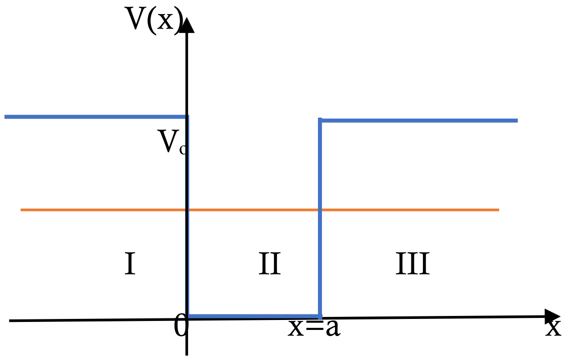


Gambar. Keadaan Energi

Jelas bahwa meskipun potensial yang dialami elektron itu terhingga, namun karena $E < V_o$, energinya tetap diskrit. Keadaan energi yang diskrit itu merupakan ciri dari partikel yang terikat dalam sumur potensial. Karena potensial itu berhingga, fungsi-fungsi eigen mempunyai ekor berbentuk eksponensial menurun di luar sumur. Artinya, elektron masih mempunyai peluang berada di luar sumur. Hal ini tidak mungkin secara klasik.

Pertimbangkan sebuah partikel dalam sumur potensial yang terhingga, dengan potensial yaitu

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{jika } 0 < x < a \\ V_0 & \text{jika } x < 0 \qquad x < -a \end{cases}$$



Gambar. Sumur Potensial Energi Terhingga

Untuk ruang satu dimensi, persamaan Schrödinger yang tidak bergantung waktu diberikan oleh,

$$\left[-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

Untuk potensial Pers, persamaan Schördinger menjadi bentuk yang berbeda untuk tiga daerah (I, II dan III).

Untuk daerah I dan III:

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + (V_0 - E)\psi(x) = 0 \qquad \text{untuk} \qquad x < 0 \quad \text{dan} \quad x > a$$

Untuk daerah II:

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + E\psi(x) = 0 \qquad \text{untuk} \qquad 0 < x < a$$

Persamaan-persamaan ini kemudian kita sederhanakan menjadi,

Untuk daerah I dan III:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar}(V_0 - E)\psi(x) = 0 \qquad \text{untuk} \qquad x < 0 \quad \text{dan} \quad x > a$$

Untuk daerah II:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar}\psi(x) = 0 \quad \text{untuk} \quad 0 < x < a$$

Untuk daerah I dan III:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - k_I^2\psi(x) = 0 \quad \text{untuk} \quad x < 0 \quad \text{dan} \quad x > a$$

$$k_I = k_{III} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

Untuk daerah II:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - k_{II}^2\psi(x) = 0 \quad \text{untuk} \quad 0 < x < a$$

$$k_{II} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}E}$$

Solusi persamaan diferensial pada tiga daerah ini adalah

$$\psi_I(x) = Ae^{-k_I x} + Be^{k_I x}$$

$$\psi_{II}(x) = C\,sin(k_{II}x) + D\,cos(k_{II}x)$$

$$\psi_{III}(x) = A'e^{-k_{III}x} + B'e^{k_{III}x} = A'e^{-k_I x} + B'e^{k_I x}$$

Karena $k_I = k_{III}$.

Pertimbangkan solusi pada daerah $x < 0$, syarat umum untuk fungsi gelombang adalah mempunyai sifat "*square integrable*". artinya fungsi gelombang harus menuju nilai nol pada x yang besar. atau $\psi(x) \rightarrow 0$ untuk $x \rightarrow \pm\infty$. Dengan kondisi ini, fungsi gelombang $\psi_I(x)$ harus menuju nol jika $x \rightarrow -\infty$, ini bisa diperoleh jika nilai $A = 0$. Jadi $\psi I = Be^{k_I x}$. Kondisi ini juga harus dipenuhi oleh fungsi gelombang ψ_{III} untuk daerah $x > a$. Fungsi gelombang yang sesuai adalah jika $B' = 0$, sehingga $\psi_{III} = A'e^{-k_I x}$.

Kondisi batas antara daerah (I dan II) dan (II dan III) adalah

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$$

$$\left.\frac{d\psi I}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi I}{dx}\right|_{x=0}$$

$$\psi_{III}(a) = \psi_{II}(a)$$

$$\left.\frac{d\psi II}{dx}\right|_{x=0} = \left.\frac{d\psi II}{dx}\right|_{x=0}$$

$$B = D$$

$$k_I B = k_{II} C$$

$$A' e^{-k_I a} = B' e^{k_{III} x} = C\ sin(k_{II} a) + D\ cos(k_{II} a)$$

$$k_i A' = k_{II}\ C\ cos(k_{II} a) - k_{II} D\ sin(k_{II} a)$$

$$B = D$$

$$C = \frac{k_I}{k_{II}} B$$

$$A' e^{-k_I a} = \frac{k_I}{k_{II}} B\ sin(k_{II} a) + B cos(k_{II} a)$$

$$-A' k_I e^{-k_I a} = k_{II} \frac{k_I}{k_{II}} B\ cos(k_{II} a) - k_{II} B\ sin(k_{II} a)$$

$$A' k_I e^{-k_I a} = k_I \frac{k_I}{k_{II}} B\ sin(k_{II} a) + k_I B\ cos(k_{II} a)$$

$$-A' k_I e^{-k_I a} = k_{II} \frac{k_I}{k_{II}} B\ cos(k_{II} a) - k_{II} B\ sin(k_{II} a)$$

Eliminasi A′ ,

$$\left[k_I \frac{k_I}{k_{II}}\ sin(k_{II} a) + k_I\ cos(k_{II} a) + \ k_I \frac{k_I}{k_{II}}\ cos(k_{II} a) - k_{II}\ sin(k_{II} a)\right] B = 0$$

Supaya mempunyai solusi non-trivial, maka,

$$\left[k_I \frac{k_I}{k_{II}}\ sin(k_{II} a) + k_I\ cos(k_{II} a) + \ k_I \frac{k_I}{k_{II}}\ cos(k_{II} a) - k_{II}\ sin(k_{II} a)\right] = 0$$

$$\left(k_I \frac{k_I}{k_{II}} - k_{II}\right)\ sin(k_{II} a) = -\left(k_I + k_{II} \frac{k_I}{k_{II}}\right)\ cos(k_{II} a)$$

$$\frac{sin(k_{II} a)}{cos(k_{II} a)} = \frac{-\left(k_I + k_{II} \frac{k_I}{k_{II}}\right)}{\left(k_I \frac{k_I}{k_{II}} + k_{II}\right)}$$

$$tan(k_{II}a) = \frac{-\left(k_I + k_{II}\frac{k_I}{k_{II}}\right)}{\left(k_I\frac{k_I}{k_{II}} + k_{II}\right)}$$

e. Potensial persegi dengan dinding

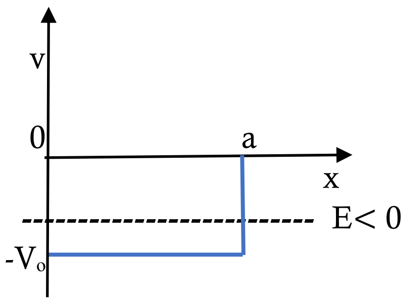
Misalkan pertikel berada dalam sumur potensial terhingga seperti:

$$V(x) = \infty;\ x \leq 0$$

$$= -V_0;\ 0 < x < a$$

$$= 0;\ \ x \geq a$$

Di x = 0, potensial itu ∞sehingga elektron tidak mungkin berada di daerah x < 0. Bagaimanakah energi dan fungsi gelombang elektron jika E < 0?



Gambar. Sumur Potensial Persegi dengan Dinding

Di dalam daerah 0 < x < a , persamaan Schrödinger adalah:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + (-E + V_0)\psi_1 = 0$$

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2}k^2\psi_1 = 0;\ \ k^2 = \frac{2m_e}{\hbar^2}(V_0 - E)$$

Solusinya : $\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

Karena $\psi_1(0) = 0$, maka A+B = 0 atau B = -A

$$\psi_1(x) = A\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) = C\sin kx$$

Persamaan Schrödinger di daerah x > a adalah:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2\psi_2}{dx^2} - E\psi_2 = 0$$

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + K^2\psi_1 = 0; \;\; K^2 = \frac{2m_e E}{\hbar^2}$$

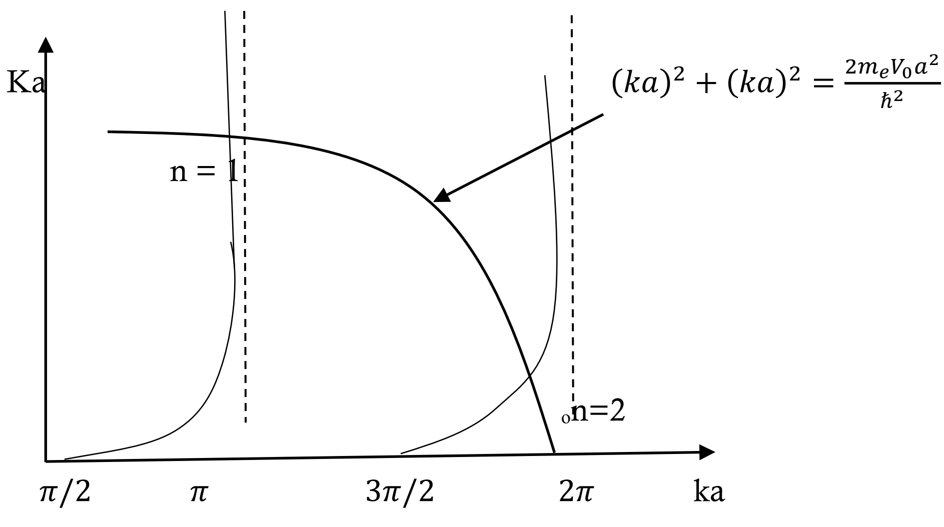
$$\psi_2(x) = De^{-Kx}$$

$$\left.\begin{matrix} C\sin ka = De^{-Ka} \\ \\ kC\cos ka = KDe^{-Ka} \end{matrix}\right\} \quad D = C\sqrt{\frac{k^2\ exp(2Ka)}{k^2 = +K^2}}$$

Dan $ka\ ctg\ (ka) = -Ka$

$$k^2a^2 + k^2a^2 = \frac{2m_eV_0a^2}{\hbar^2}$$

Dari kedua persamaan ini diperoleh grafik berikut:



Gambar. Grafik Persamaan Schrödinger di daerah x > a

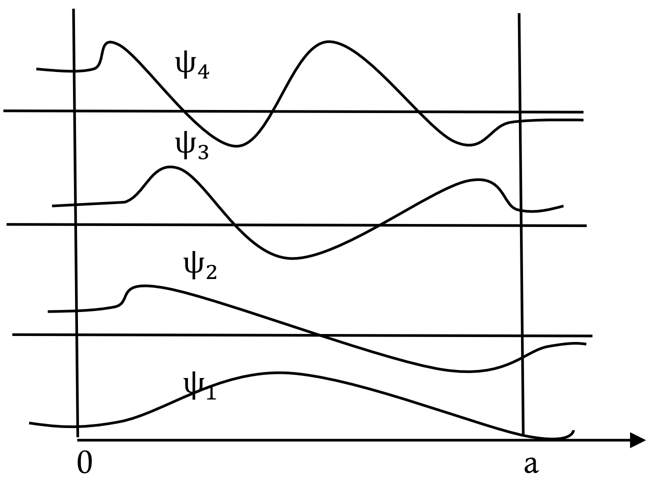
Dari rumusan k dan K, tingkat-tingkat energi elektron adalah:

$$E_n = \frac{k_n^2\hbar^2}{2m_e} - V_0 \text{ atau } E_n = \frac{k_n^2\hbar^2}{2m_e}$$

Di mana K_n dan K_n diperoleh berdasarkan titik-titik potong dalam gambar. Jadi, energi elektron diskrit, karena elektron terperangkap dalam sumur potensial.

Untuk $V_o a^2 < \pi\hbar^2/4\, m_e$ tidak ada titik potong untuk $\pi\hbar^2/4\, m_e < V_o a^2 < \pi\hbar^2/2\, m_e$ hanya ada satu titik potong, n=1, dan seterusnya.

Bentuk fungsi-fungsi keadaan dapat digambarkan dengan menggunakan hasil-hasil di atas:



Gambar. Bentuk Fungsi-Fungsi Keadaan

f. Partikel bebas

Sebuah partikel yang tidak memiliki potensial disebut partikel bebas. Persamaan Schrödinger untuk partikel ini adalah

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\varphi = 0$$

Atau

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + k^2\varphi = 0; \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Solusi persamaan tersebut adalah

$$\phi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

Karena tidak mengalami potensial, maka fungsi gelombang tersebut tidak mempunyai syarat batas. Jadi, partikel bisa memiliki sembarang energi positif. Fungsi gelombang lengkap adalah $\Psi(x,t)\varphi(x)e^{-iEt\,/\,\hbar}$ atau

$$\Psi(x,t) = Ae^{ik\left(x\frac{k\hbar}{2m}t\right)} + Be^{-ik\left(x+\frac{k\hbar}{2m}t\right)}$$

Suku pertama merupakan gelombang yang menjalar ke kanan dan suku kedua gelombang yang menjalar ke kiri, dengan energi yang sama. Karena keduanya hanya dibedakan oleh tanda di depan k, maka berlaku

$$\Psi_k(x,t) = Ae^{i\left(kx+\frac{k^2\hbar}{2m}t\right)}$$

dengan

$$k = \pm\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \begin{cases} k > 0 \rightarrow \text{menjalar ke kanan} \\ k < 0 \rightarrow \text{menjalar ke kiri} \end{cases}$$

Laju penjalaran gelombang adalah

$$v_{kuantum} = \frac{\hbar|k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$$

Di lain fihak, laju klasik suatu partikel bebas dengan energi E=½mv² adalah

$$v_{klasik} = \sqrt{\frac{2E}{m} = 2v_{kuantum}}$$

Jadi, laju partikel bebas secara kuantum sama dengan setengah laju klasiknya. Fungsi gelombang dalam persamaan tak dapat dinormalisasi,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_k^* \Psi_k dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx = \infty$$

Ini tidak mempunyai arti fisis, kita hanya bisa katakan bahwa partikel bebas tidak bisa dalam suatu keadaan stasioner. Fungsi gelombang partikel bebas,Ψ(x,t) dapat diungkapkan sebagai kombinasi linier dalam bentuk integral dalam k,

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

Fungsi ini dapat dinormalisasi, tetapi dalam daerah k atau daerah energi dan laju. Inilah yang disebut paket gelombang. Untuk itu ambillah t=0, sehingga

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

Transformasi Fourier dari fungsi f(x)⟷F(k) seperti

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

memiliki persyaratan untuk fungsi-fungsi yaitu, integral-integral di atas harus ada, misalnya $\int_{-\infty}^{\infty}|f(x)|^2\, dk$ terbatas (finite). Hal ini menjamin persyaratan fisis yang diperlukan, yaitu Ψ(x,0) itu ternormalisasi. Jadi,

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

Dengan demikian maka, jika Ψ(x,0) diketahui maka *ϕ (k)* dapat ditentukan dan selanjutnya substitusi ke persamaan akan menghasilkan Ψ(x,t).

Bentuk yang paling sederhana dari persamaan Schrodinger adalah ¨ persamaan untuk partikel bebas atau partikel di dalam potensial yang konstan, V (x) = C = konstanta. Pada potensial ini tidak ada gaya yang bekerja pada partikel karena F = −dV/dx = 0. Nilai konstanta potensial C dapat dipilih berapa saja dan ini tidak akan mengubah solusi persamaan Schrodinger. Di samping itu pula kita dapat menaikkan atau menurunkan nilai potensial C dengan mengubah nilai potensial referensinya V_o. Agar analisis bisa lebih mudah, kita akan menggunakan potensial V (x) = 0 tanpa ada pengaruh pada solusinya.

Operator Hamiltonian untuk partikel bebas dalam ruang satu dimensi adalah

$$\widehat{H}=\widehat{T}\,\frac{\hat{p}_x^2}{2m}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

Persamaan Schrodinger yang tidak bergantung waktu atau independen terhadap waktu yaitu

$$\widehat{H}\psi(x)=E\psi(x)$$

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

Ingat bahwa fungsi gelombang Ψ(x, t) yaitu

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

untuk sistem berada pada tingkatan energi E yang stasioner.) ini dapat disederhanakan menjadi persamaan diferensial biasa orde dua,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)=0$$

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

di mana $k = \sqrt{2mE/\hbar}$

Solusi persamaan berbentuk,

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

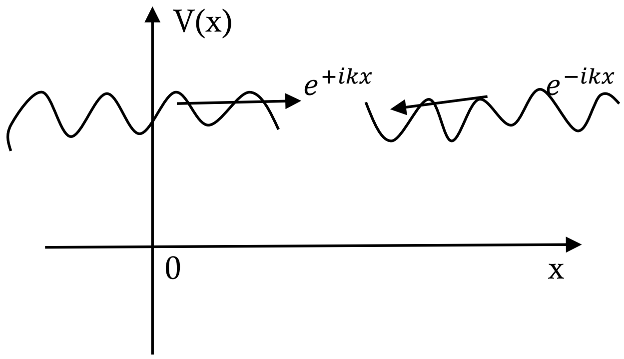
atau

$$\psi(x,t) = Ae^{+i(kx-Et/\hbar)} + Be^{-i(kx+Et/\hbar)}$$

Sehingga fungsi gelombang yang tergantung pada waktu menjadi

$$\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$$

di mana $\omega = E/\hbar$ adalah frekuensi angular. Sebuah ilustrasi gelombang yang bergerak ke arah positif dan negatif x ditunjukkan pada gambar berikut:



Gambar. Ilustrasi penjalaran fungsi gelombang ke arah positif dan negatif sumbu

Supaya kita memahami lebih jelas, mari kita tinjau terlebih dahulu prosedur untuk mendapatkan persamaan Schrödinger untuk partikel bebas pada ruang satu dimensi. Fungsi gelombang partikel bebas diberikan oleh persamaan. Energi partikel bebas dalam mekanika klasik berkaitan dengan momentum sesuai dengan relasi,

$$E = \frac{p_x^2}{2m}$$

Jika kita kerjakan turunan parsial dua kali terhadap x pada fungsi gelombang persamaan, kita memperoleh,

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) = \left[-\frac{p_x^2}{\hbar^2}\right]\Psi(x,t)$$

dan seperti sebelumnya turunan parsial terhadap t, kita mendapatkan,

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left[-\frac{iE}{\hbar}\right]\Psi(x,t)$$

Menggunakan relasi $E = p_x^2/2m$, kita dapat menyatukan persamaan dengan cara sebagai berikut

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left[-\frac{ip_x^2}{2m\hbar}\right]\Psi(x,t)$$

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

Substitusi dengan persamaan, kemudian dihasilkan persamaan akhir yaitu

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

Untuk menyederhanakan persamaan ini, kita kalikan kedua sisinya dengan $i\hbar$ sehingga kita peroleh

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\ \Psi(x,t)$$

Mari kita kaji persamaan ini dengan memperhatikan definisi operator momentum $\hat{p}_x$ dan operator energi $\hat{E}$. Persamaan ini dapat ditulis kembali dengan menggunakan operator momentum dan energi menjadi

$$\hat{E}\ \Psi(x,t) = \frac{1}{2m}[\hat{p}_x]^2\Psi(x,t)$$

Generalisasi untuk ruang tiga dimensi dapat dilakukan dengan cara yang sama dan menggunakan hubungan energi dan momentum (mekanika klasik),

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

dapat diperoleh persamaan gerak untuk partikel bebas yaitu

$$\hat{E}\ \Psi(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{2m}\hat{p}^2\Psi(\boldsymbol{r},t)$$

Atau

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\ \Psi(\boldsymbol{r},t)$$

di mana Laplacian ∇^2 ,

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Generalisasi untuk sebuah partikel yang berada pada sebuah potensial *V (**r**, t)* didapat dari hubungan energi,

$$E = \frac{p^2}{2m}V +\ (\boldsymbol{r},t)$$

dan melakukan penggantian variabel klasik dengan operator, kita dapat tuliskan persamaan geraknya,

$$\hat{E}\ \Psi(\boldsymbol{r},t) = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m}V\ (\boldsymbol{r},t)\ \right]\Psi(\boldsymbol{r},t)$$

Atau

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\ \Psi(\boldsymbol{r},t) + V\ (\boldsymbol{r},t)\ \Psi(\boldsymbol{r},t)$$

Persamaan inilah yang dinamakan persamaan Schrödinger yang bergantung waktu. Persamaan ini menentukan evolusi fungsi gelombang.Untuk formulasi yang lebih umum, kita perhatikan bahwa operator operator pada sisi kanan persamaan adalah operator Hamiltonian,

$$\hat{H} = -\ \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\ (\boldsymbol{r},t) = \hat{T} + \hat{V}$$

Jadi persamaan Schödinger yang berlaku untuk semua keadaaan adalah

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t) = \hat{H}\ \Psi(\boldsymbol{r},t)$$

Pada mekanika klasik, energi total dari suatu sistem yang diekspresikan dalam bentuk variabel koordinat dan momentum disebut dengan fungsi Hamiltonian dari sistemnya.

$$E = H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t) = \frac{p^2}{2m} + V\ (\boldsymbol{r},t)$$

Dari fungsi Hamiltonian ini, operator Hamiltonian kuantum mekanik diperoleh dengan melakukan penggantian variabel momentum dengan operator momentum, $p \to \hat{p} = -i\hbar\nabla$, atau

$$H = H(\boldsymbol{r}, -i\hbar\nabla, t)$$

Kita bisa ringkas bahwa persamaan Schrödinger yan bergantung waktu dapat diperoleh dengan penggantian variabel-variabel klasik dengan operator-operator kuantum.

$$E \to \hat{E} = i\frac{\partial}{\partial t}$$

$$\boldsymbol{p} \to \hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$$

dan

$$\boldsymbol{r} \to \hat{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{r}$$

Persamaan Schödinger di atas bersifat linier dan homogen. Persamaan Schrödinger hanya terdapat turunan order satu terhadap variabel waktu. Sehingga evolusi dari fungsi gelombang dapat diketahui jika fungsi gelombang pada waktu tertentu t_o sudah diketahui. Fungsi gelombang untuk waktu yang lain diperoleh dengan menyelesaikan persamaan Schödinger.

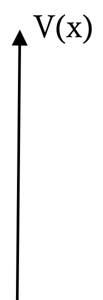
g. Potensial fungsi-delta

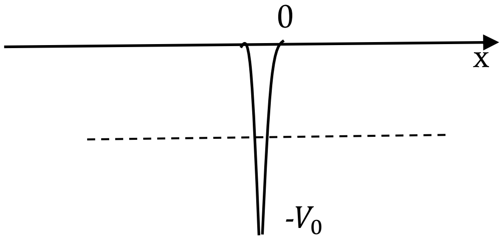
Tinjaulah potensial berbentuk fungsi-delta

$$V(x) = -V_0\delta(x)$$

di mana V_o adalah konstanta.Potensial seperti di atas menyebabkan keadaan partikel terikat jika energi E<0. Andakanlah E>0. Persamaan Schrödinger untk partikel yang mengalami potensial ini adalah

$$\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\varphi = 0$$





Gambar. Potensial fungsi-delta di x=0.

Di daerah x<0, V(x)=0, sehingga

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = k^2\varphi = 0;\ \ k = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

E<0 maka k adalah positif ril. Solusi persamaannya adalah

$$\varphi(x) = Be^{kx}; x < 0$$

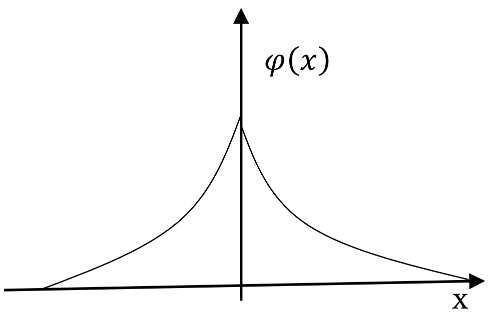
Di daerah x>0, V(x)=0, solusi adalah

$$\varphi(x) = Fe^{-kx}; x < 0$$

Di x=0, kedua fungsi dalam persamaan harus kontinu, maka F=B sehingga keduanya dapat dituliskan

$$\varphi(x) = \begin{cases} Be^{kx}; x < 0 \\ Be^{kx}; x < 0 \end{cases}$$

dan digambarkan seperti Gambar dibawah



Gambar. fungsi keadaan terikat dari partikel dengan potensial fungsi-δ.

Untuk memperlihatkan pengaruh dari potensial fungsi-delta, dilakukan integral terhadap persamaan Schrödinger dengan batas –ε sampai ε dengan limit ε→0.

$$\int_{-E}^{E} \frac{d^2\varphi}{dx^2} dx - \frac{2m}{\hbar^2} = -E \int_{-E}^{E} \varphi(x) dx$$

Integral pertama adalah dψ/dx, sedangkan yang terakhir adalah nol. Jadi, dengan menerapkan limit ε→0, diperoleh

$$\Delta\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)=\frac{2m}{\hbar^2}\lim_{E\to 0}\int_{-E}^{E}V(x)\varphi(x)dx$$

Dengan V(x)= -V0δ(x) dalam persamaan dan menggunakan sifat integral dalam persamaan

$$-V_0\int_{-E}^{E}\delta(x)\varphi(x)dx=-V_0\varphi(0)$$

Sehingga

$$\Delta\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)=-\frac{2mV_0}{\hbar^2}\varphi(0)$$

Dari persamaan turunan fungsi di x=0 adalah

$$\frac{d\varphi}{dx}=-Bke^{-k\,x}\,untuk\;x>0\to\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{+}\quad\text{=-Bk}$$

$$\frac{d\varphi}{dx}=-Bke^{-k\,x}\,untuk\;x>0\to\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{-}\quad\text{=Bk}$$

Jadi, dari persamaan di mana ψ(0)=B diperoleh 2Bk= ($2mV_0/\hbar^2$) sehingga

$$k=\frac{mV_0}{\hbar^2}$$

Dari persamaan energi adalah

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=-\frac{mV_0}{2\hbar^2}$$

Fungsi gelombang dapat dinormalisasi sebagai berikut

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi(x)|^2dx=|2B|^2\int_0^{\infty}e^{-2kx}dx=\frac{|B|^2}{k}=1$$

Sehingga $B=\sqrt{K}=\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}$. Dengan demikian maka fungsi gelombang berikut energinya adalah

$$\varphi(x)=\frac{\sqrt{mV_0}}{\hbar}e^{-mV_0|x|/\hbar^2}\;;\quad E=-\frac{mV_0}{2\hbar^2}$$

h. Soal-Soal Latihan

Jawablah pertanyaan dibawah ini dengan benar dan tepat!

1. Andaikan energi partikel, E, lebih besar daripada potensial Vo dalam kasus potensial penghalang terhingga. Tunjukkan bahwa bertentangan dengan pandangan klasik, dalam hal ini terjadi pantulan.
2. Fungsi-fungsi gelombang partikel dalam sumur potensial tak hingga dimensi-1 adalah:

$$\varphi_n(x) = C\, cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right); n = 1,3,5 \ldots\ldots. \text{ dan}$$

$$\varphi_n(x) = D \sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right); n = 2,4,6 \ldots\ldots\ldots \text{ dan}$$

   Hitunglah faktor normalisasi C dan D dengan batasan –a≤ x ≤ a. Selanjutnya buktikanlah bahwa fungsi-fungsi tersebut membentuk set ortonormal.

3. Dalam sumur potensial tak hingga, buktikan bahwa momen transisi

$$M_{mn}^{(x)} = e \int \varphi_m^* x \varphi_n \, dx$$

   tidak sama dengan nol jika |m±n| sama dengan suatu bilangan ganjil.

4. Dalam sistem dengan sumur potensial tak hingga, dalam hal transisi dari keadaan ψ_i yang lebih tinggi ke keadaan ψ_f yang lebih rendah, tunjukkan bahwa semakin besar lebar potensial (a) semakin besar pula panjang gelombang foton (λ_{if})yang teremisi. Sebaliknya, semakin besar beda bilangan kuantum (i-f) semakin kecil panjang gelombang tersebut.

5. Dalam sumur potensial tak hingga, buktikan bahwa momen transisi

$$M_{mn}^{(x)} = e \int \varphi_m^* x \varphi_n dx$$

   tidak sama dengan nol jika |m±n| sama dengan suatu bilangan ganjil.

BAB V

ATOM HIDROGEN

A. Postulat Bohr Tentang Atom Hidrogen

Pemecahan Persamaan Radial

Persamaan radial yang brekaitan dengan persamaan gelombang Schrodinger untuk atom hidrogen:

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\left(\frac{2m_0}{ħ^2}\{E-V(r)\}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right)R(r)=0 \qquad (1)$$

Dengan fungsi potensial:

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\text{; harga } \ell=0,\pm1,\pm2,\pm3,\dots\dots\dots \qquad (2)$$

Analisis tentang pemecahan persamaan radial diatas memberikan hasil sebagai dibawah ini:

1) Ada solusi dapat dipergunakan ditetapkan suatu tetapan baru n yang bernilai:

   $$n=(\ell+1),(\ell+2),(\ell+3),\dots\dots \qquad (3)$$

2) Bentuk solusi persamaan radial termaksud diatas:

   $$R_{n,\ell}(e\frac{Zr}{na_0}(\frac{Zr}{a})^{\ell}G_{n,\ell}(\frac{Zr}{a_0}) \qquad (4)$$

   Dengan $a_0=\frac{4\pi\varepsilon_0ħ^2}{m_0e^2}$, sedangkan:

   $G_{n,\ell}(\frac{Z_e}{a_0})$ adalah suatu polinon dalam $\left(\frac{Zr^-}{n_0}\right)$ dengan harga $n\,dan\,\ell$ yang berbeda.

3) Harga energi:

   $$E_n=-\frac{m_0Z^2e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 2ħ^2n^2}, \qquad n=1,2,3,4,\dots\dots \qquad (5)$$

Rumus energi:

E_n, untuk sistem sistem atom hidrogen yang diperoleh dengan menerapkan metode Shcrodinger ternyata tetap sama. Dengan hasil diperoleh dengan mempergunakan Postulat Bohr.

Rumus energi termaksud, sebagaimana juga rumus tingkat energi menurut Bohr, dapat menerapkan dengan jelas harga-harga panjang gelombang yang dipancarkan oleh atom-atom hidrogen. Oleh karena itu untuk kesesuaian antara pengamatan dan perhitungan berdasarkan teori sangat memperkuat keyakinan orang tentang keampuhan metode schrodinger dalam penelaahan sistem-sistem fisika tingkat atom dan sub atom.

Tabel 1. Persamaan Radial untuk Sistem Atom Hidrogen

N	ℓ	$R_{n\ell};\quad \rho \equiv \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)$
1	0	$R_{10}(r) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}}$
2	0	$R_{20}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (2-\rho)e^{-\frac{\rho}{2}}$
	1	$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \rho e^{-\frac{\rho}{2}}$
3	0	$R_{30}(r) = \frac{1}{4\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (6-6\rho+\rho^2)e^{-\frac{\rho}{2}}$
	1	$R_{31}(r) = \frac{1}{4\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \rho(4-\rho)\, e^{-\frac{\rho}{2}}$
	2	$R_{32}(r) = \frac{1}{4\sqrt{30}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \rho^2 e^{-\frac{\rho}{2}}$
4	0	$R_{40}(r) = \frac{1}{96}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (24-36\rho+12\rho^2+\rho^3)e^{-\frac{\rho}{2}}$
	1	$R_{41}(r) = \frac{1}{32\sqrt{15}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (20-10\rho+\rho^2)e^{-\frac{\rho}{2}}$
	2	$R_{42}(r) = \frac{1}{96\sqrt{5}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} (6-\rho)\rho^2 e^{-\frac{\rho}{2}}$
	3	$R_{43}(r) = \frac{1}{96\sqrt{15}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \rho^3 e^{-\frac{\rho}{2}}$

Perlu diperhatikan beberapa hal dibawah ini dalam menggunakan tabel, antara lain:

1. ρ dibataskan sebagai $\rho \equiv \frac{2Zr}{na_0}$; dalam tabel tersebut perlu diingat bahwa ρ dalam basis yang berbeda mungkin tidak sama karena harga n yang berlainan.
2. $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0 e^2} = 0{,}529^0 A$ adalah jejari baru Bohr
3. Fungsi-fungsi normaliasasi, artinya:

$$\int_0^\infty [R_{n\ell}(r)]^2 r^2 dr = 1 \qquad (6)$$

Normalisasi Persamaan Gelombangan Schrodinger

Solusi persamaan gelombang Schrodinger untuk sistem atom hidrogen ditandai oleh 3 bilangan bulat $n, \ell, dan\, m$. Oleh karena itu ketiga bilangan tersebut dicantumkan dalam notasi solusi persamaan Schrodinger sebagai:

$$\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi) = R_{n\ell}(r)\psi_{n\ell m}(\theta\varphi) \qquad (7)$$

Fungsi gelombang tersebut dinormalisasikan sebagai:

$$\int_0^\infty r^2 dr [R_{n\ell}(r)]^2 \int_\pi^{2\pi} d\varphi \int_\pi^{2\pi} d\theta\, sin\theta\, \psi_{\ell m}^* \psi_{\ell m} = 1 \qquad (8)$$

Karena elemen volumennya adalah:

$$d\tau = (dr)(r\, d\theta)(r\, sin\theta\, d\varphi) \qquad (9)$$

Dengan menormalisasikan $R_{n\ell}(r)$, dengan $\int_0^\infty [R_{n\ell}(r)]^2 r^2 dr = 1$, maka dapat dibataskan rapat kebolehjadian radial sebagai berikut:

$$P_{n\ell} = R_{\ell m}^* R_{\ell m} r^2 \qquad (10)$$

Persamaan di atas adalah kebolehjadian untuk menemukan suatu elektron atom hidrogen yang keadaannya dinyatakan dengan perangkat bilangan kuantum (n, ℓ), diantara $r\ dan\ (r + dr)$ tanpa memperhatikan harga θ dan harga φ.

Tinjauan Ulang

1. Pada akhirnya ada 3 buah bilangan yang memberi ciri pada solusi persamaan Shrodinger untuk sistem atom hidrogen, yaitu: n, ℓ, m

Keterkaitan bilangan tersebut satu dengan lainnya:

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

$$|m| \leq \ell$$

$$\ell = 0,1,2,3, \dots \dots$$

$$n = (\ell + 1), (\ell + 2), \dots \dots$$

Ketiga bilangan bulat itu dinamakan bilangan kuantum, yang secara khusus diberikan nama sebagai berikut:

n = bilangan kuantum utama

$$n = 0,1,2,3,4, \dots \dots$$

ℓ = bilangan kuantum lintas edar, atau bilangan kuantum orbital, atau bilangan kuantum azimuth.

$$\ell = 0,1,2,3, \dots \dots \quad (n - 1)$$

m = bilangan kuantum magnetic

$$m = -\ell, -(\ell - 1), \dots \dots, -1,0, +1,2, \dots \dots, \ell$$

2. Setiap perangkat bilangan kuantum (n, ℓ, m), menggambarkan suatu keadaan khusus sistem atom (keadaan kuantum). Setiap keadaan kuantum ditandai oleh perangkat (n, ℓ, m):

Tabel 2. Bilangan Kuantum Sistem Atom Hidrogen

Bilangan kuantum yang menandai Quantum State			**Jumlah perangkat bilangan kuantum yang berbeda**	
$\boldsymbol{n}$	$\boldsymbol{\ell}$	$\boldsymbol{m}$	$\boldsymbol{n\ dan\ell}$ **tertentu**	$\boldsymbol{n}$ **tertentu**
1	0	0	1	1
2	0	0	1	4
2	1	-1	3	
2	1	0		
2	1	+1		
			$(2\ell + 1)$	n^2

Seperti telah dinyatakan maka setiap keadaan kuantum sistem atom hidrogen ditandai oleh perangkat bilangan kuantum (n, ℓ, m). Ternyata bahwa untuk atom hidrogen energi total hanya bergantung dari bilangan kuantum utama n.

$$E_n = -\frac{13{,}6}{n^2}(eV) \tag{11}$$

Ini berarti bahwa keadaan kuantum yang berbeda, tetapi yang memiliki bilangan kuantum utama yang sama, memiliki energi total yang sama. Umpamanya, 4 keadaan kuantum yang dinyatakan dengan: (2, 0, 0), (2, 1, 1), (2, 1, 0), (2, 1, -1). Semuanya memiliki energi yang sama besar, yaitu:

$$E_2 = -\frac{13{,}6}{4}eV = -3{,}4\ eV \tag{12}$$

Ini dinamakan degenerasi energi, ialah satu harga energi yang memiliki beberapa eigen function yang berbeda, contoh di atas $E_2 = -3{,}4\,eV$ apat dipresentasikan dengan salah satu dari 4 eigen function;

$$\psi_{2,0,0}(r, \theta, \varphi); \psi_{2,1,0}(r, \theta, \varphi);\ \psi_{2,1,1}(r, \theta, \varphi);\ \psi_{2,1,-1}(r, \theta, \varphi); \tag{13}$$

Fungsi gelombang di atas dinamakan degenerasi eigen function, dengan degenerasi lipat empat.

3. Energi degenerasi ternyata karena kesetangkupan yang tinggi dalam fisika. Dalam kasus atom hidrogen, kesetangkupan bola. Kesetangkupan ini dapat dibuat lebih rendah, umpanya dengan menempatkan atom hidrogen tersebut dalam medan magnet luar.

Kehadiran medan magnet ini meniadakan kesetangkupan bola. Ternyata dalam hal seperti ini degenerasi terangkat, dan energi total ditentukan tidak hanya oleh n, tetapi juga m.

B. Persamaan Schrodinger Atom Hidrogen

1. Sistem Fisik Atom dan Representasinya Secara Matematika

Model dasar atom hidrogen adalah sebagai berikut:

a. Suatu elektron dengan muatan listrik *e* dan massa *m*, mengelilingi suatu inti yang bermuatan positif + Ze, karena pengaruh gaya Coulomb, maka potensial:

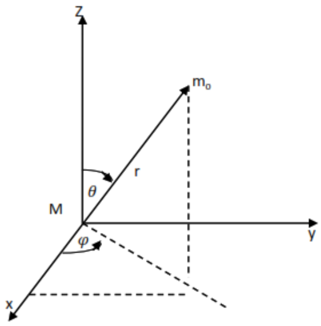
$$V(r) = \frac{-Ze^2}{4\pi\varepsilon r} \tag{14}$$

b. Massa inti atom hidrogen *M*, dianggap sangat benar terdapat massa elektron *m*, sehingga titik pusat massa berimpit dengan posisi inti.

Fungsi potensi

$$V(r) = \frac{-Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \tag{15}$$

Koordinat bola dipanaskan sebagai sistem koordinat acuannya. Sketsa koordinat (x, y, z) dan koordinat (σ, θ, μ) kemudian pula transformasinya adalah:



Gambar 1. Sketsa Koordinat (x, y, z) dan koordinat (σ, θ, μ)

Fungsi Hamilton (fungsi energi total) yang menggambarkan sistem atom hidrogen tersebut adalah:

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V(r) \tag{16}$$

Operator Hamiltonnya:

$$Hop = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V(r) \tag{17}$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{18}$$

Dalam koordinat bola operator Laplace tersebut berbentuk:

$$\nabla^2 = \left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sin\,\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right] \quad (19)$$

Sehingga dalam koordinat bola, operator Hamilton:

$$\widehat{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0}\left[r^2\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right] - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \quad (20)$$

Dengan demikian pesamaan gelombang Schroedinger untuk model atom H yang sederhana, yaitu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sin\,\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right]\psi(r,\theta,\varphi) \quad (21)$$

$$\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi) \quad (22)$$

Jadi, untuk notasi singkatan akan digunakan $\psi(\vec{r}\,)$ dalam mempresentasikan adalah $\psi(r,\theta,\varphi)$.

2. Struktur Persamaan gelombang schrodinger untuk sistem atom hidrogen

Andaikan bahwa dapat dilakukan pemisahan variabel sehingga solusi persamaan gelombang untuk atom H dapat ditulis sebagai berikut:

$$\psi(r,\theta,\mu) = R(r)Y(\theta,\varphi) \quad (23)$$

Bagian fungsi R(r) dinamakan bagian radialnya dan $\psi(r,\theta,\mu)$ dinamakan bagian angulernya.

Subtitusi bentuk diatas akan menghasilkan:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\left[\frac{Y^2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{R}{r^2 sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(sin\theta\frac{\partial Y}{\partial \theta}\right) + \frac{R}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2}\right]V(r)R(r)Y \quad (24)$$

$$= ER(r)Y(\theta,\varphi) \quad (25)$$

Apabila seluruh diperkalikan dengan

$$-\frac{2m_0 r^2}{\hbar^2}\frac{1}{R(r)\psi(\theta,\varphi)} \quad (26)$$

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right)+\frac{2m_0r^2}{\hbar^2}[E-V(r)]R \tag{27}$$

$$=-\frac{1}{\psi}\left[\frac{1}{sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{d\psi}{d\theta}\right)+\frac{1}{sin^2\theta}\frac{d^2\psi}{d\varphi^2}\right] \tag{28}$$

Karena ruas kiri terdiri dari variabel r, sedangkan ruas kanan hanya bergantung dari variabel φ, dan apabila keduannya selalu harus sama, masing-masing ruas itu sama dengan suatu tetapan, yang kita namakan saja (λ).

Dari uraian diatas diperoleh dua perangkat persamaan:

1) Persamaan radial

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\frac{2m_0r^2}{\hbar^2}[E-V(r)]R-\lambda R=0 \tag{29}$$

atau

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)+\left[\frac{2m_0r^2}{\hbar^2}\{E-V(r)\}-\frac{\lambda}{r^2}\right]R=0 \tag{30}$$

2) Persamaan anguler

$$\frac{1}{sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{d\psi}{d\theta}\right)+\frac{1}{sin^2\varphi}\frac{d^2\psi}{d\varphi^2}=-\lambda\psi \tag{31}$$

Dengan $\psi(\theta,\varphi)=H(\theta)\phi(\varphi)$

Subtitusi dalam persamaan anguler akan memberikan

$$\frac{\Phi}{sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{d\theta}{d\theta}\right)+\frac{H}{sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}=-\lambda H\Phi \tag{32}$$

Perkalian seluruhnya dengan $sin^2\theta\frac{1}{H\Phi}$ akan menghasilkan

$$\frac{1}{H}sin\theta\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{dH}{d\theta}\right)+\lambda sin^2\theta=-\frac{1}{\phi}\frac{d^2\phi}{d\varphi^2} \tag{33}$$

Masing-masing ruas itu harus sama dengan suatu tetapan yang sementara ini dinamakan v permisahan variabel θ dan φ akan menghasilkan dua perangkat persamaan.

1) Persamaan untuk $\phi(\varphi)$

$$\frac{d^2\phi}{d\varphi^2}=-v\Phi(\phi) \tag{34}$$

2) Persamaan untuk $\Theta(\theta)$

$$\frac{1}{sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right)+\left(\lambda-\frac{v}{sin\theta}\right)\Theta=0 \tag{35}$$

Tinjauan Ulang

Persamaan gelombang schoedinger untuk sistem atom hidrogen

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \qquad (36)$$

Merupakan eigen value problem, yang diselesaikan sebagai masalah persamaan differensial parsial

$$\psi(r, 0, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \qquad (37)$$

Akan diperoleh 3 perangkat persamaan berikut:

(1) Persamaan radial R (r):

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \left(\frac{2m_0}{\hbar^2}\{E - V(r)\} - \frac{\lambda}{r_2}\right)R = 0 \qquad (38)$$

(2) Persamaan anguler $\phi(\varphi)$:

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -v\Phi \qquad (39)$$

(3) Persamaan angguler $\Theta(\theta)$

$$\frac{1}{sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \left(\lambda - \frac{v}{sin\theta}\right)\Theta = 0 \qquad (40)$$

Ketiga perangkat persamaan itu tidak independen, tetapi terkait satu dengan lain melalui tetapan λ dan v.

3. Pemecahan Persamaan Anguler $(\boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\varphi})$

Persamaan anguler $\Phi(\varphi)$

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -v\Phi \qquad (41)$$

Diketahui mempunyai solusi $\Phi(\varphi)$ dengan keberkalaan 2π, artinya,

$$\Phi(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi) \qquad (42)$$

Solusi yang mungkin

$v \equiv 0$, berarti $\Phi = A + B\varphi$; bukan suatu solusi yang umum

$v \neq 0$, berarti $\Phi = Ae^{iv\frac{1}{2}\varphi} + Be^{iv\frac{1}{2}\varphi}$

Ambil solusi umum, sehingga

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{1m\varphi}; \qquad m = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \ldots\ldots\ldots \qquad (43)$$

Faktor (2π) karena normalisasi dalam selang (02π)

Persamaan anguler $\Theta(\theta)$; dengan $v = m^2$ menjadi

$$\frac{1}{sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{d\Theta}{d\theta}\right) + \left(\lambda - \frac{m^2}{sin^2\theta}\right)\Theta = 0 \tag{44}$$

Bentuk ini dikenal dari fisika mtematika, dengan solusi yang berbentuk: polinon Legendre.

Lakukanlah transformasi $\theta = arc\cos W$, atau $cos\theta = W$, maka solusinya:

$$\Theta(\theta) = p(\omega) \tag{45}$$

Dimana selang $\theta(0, \pi)$ menjadi selang $W, (1, -1)$

Persamaan differensial diatas berubah menjadi:

$$\frac{d}{dW}\left[(1 - W^2)\frac{dp}{dW}\right] + \left[\lambda - \frac{m^2}{1-W^2}\right]p = 0 \tag{46}$$

Sifat solusi persamaan diatas adalah sebagai berikut:

a. Secara umum solusi persamaan diatas mempunyai harga talk berhingga di $\omega = +1$, dan $\omega = -1$, kecuali apabila $\lambda = \ell(\ell + 1)$ dengan $\ell = 0,1,2$
b. Secara khusus, apabila $\lambda = \ell(\ell + 1)$ dengan $\ell = 0,1,2$ ... ada solusi dengan harga berhingga di $\omega = +1$ dan $\omega = -1$, solusi berhingga itu berbentuk:

   $$(1 - \omega^2)^{1/2|m|} \tag{47}$$

   Dikalikan suatu polinon berderajat $(\ell - |m|)$; dengan paritas $(\ell - |m|)$.
c. Lebih khusus lagi bilamana $m = 0$, solusinya adalah polinon Legendre $P_\ell(\omega)$, yang dapat diperoleh dari fungsi pembangkit

   $$(1 - 2Ws + s)\frac{1}{2} = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(W)s^\ell \tag{48}$$

   Polinon Legendre itu memenuhi hubungan s<1

   $$(1 - W^2)P_\ell^1 = -\ell W I_\ell + \ell P_{\ell-1} \tag{49}$$

   $$(\ell + 1)P_{\ell+1} = (2\ell + vWP_\ell) - \ell P_{\ell-1} \tag{50}$$
d. Apabila $m \neq 0$, hanya ada satu solusi yang berhingga apabila $|m| \leq \ell$ solusi dinamakan *Associated Legendre Functions*.

   $$P_\ell^m(W) = (1 - W)^{\frac{1}{2}|m|}\frac{d^{|m|}}{dW^{|m|}}P_\ell(\omega) \tag{51}$$

   Fungsi pembangkit:

$$\frac{(2|m|)!(1-W^2)^{\frac{1}{2}m} s^{|m|}}{2^{|m|}(|m|)!(1-2W+s^2)^{|m|+\frac{1}{2}}} = \sum_{\ell=|m|}^{\ell=\infty} P_\ell^m(W) s^\ell \qquad (52)$$

Tinjauan ulang pemecahan anguler total:

1. $\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}; \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \ldots \ldots \ldots$
2. $H(\theta)$ mempunyai solusi berhingga, apabila $\lambda = \ell(\ell + 1)$ dengan $\ell = 0,1,2,3, \ldots \ldots \ldots$
3. Apabila $m = 0$, maka $\Theta(\theta)$ adalah polinon Legendre dengan mengambil $\theta \; arc \cos W$, maka:

   $\Theta_\ell(\theta) = P_\ell(W)$, memenuhi:

   $\frac{d}{dw}\left[(1 - W^2)\frac{dP}{dW}\right] + l(l + 1)P_l = 0$
4. Apabila $m \neq 0$, maka solusi berhingga hanya$|m| \leq l$.

   $\Theta_l^m = P_l(W)$ diperoleh melalui transformasi $\theta = arc \cos \omega$

   $P_l^m(\omega)$ memenuhi persamaan:

   $$\frac{d}{dW}\left[(1 - W^2 \frac{dP_l^m}{dW}\right] + \left[l(l - 1) - \frac{m^2}{1-W^2}\right] P_l^m = 0 \qquad (53)$$

Contoh Soal:

1. Buktikan harga rata-rata $1/_r$ untuk electron 1s dalam atom hidrogen adalah $1/_{a_0}$.

Jawab:

Fungsi gelombang electron 1s dari tabel adalah:

$$\psi = \frac{e^{-\frac{r}{a_0}}}{\sqrt{\pi a_0}^{\frac{3}{2}}}$$

Karena $dV = r^2 sin\theta \; dr \; d\theta \; d\phi$ kita dapatkan harga ekspektasi $1/_r$, yaitu:

$$\left(\frac{1}{r}\right) = \int_0^\infty \left(\frac{1}{r}\right) |\psi|^2 dV = \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^\infty r e^{-\frac{2r}{a_0}} dr \int_0^\pi sin\theta \; d\theta \int_0^{2\pi} d\phi$$

$$\int_0^\infty r e^{-\frac{2r}{a_0}} dr = \frac{a_0^2}{4}, \; \int_0^\pi sin\theta \; d\theta = 2 \quad \text{dan} \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi$$

$$\left(\frac{1}{r}\right) = \frac{1}{\pi a_0^3} x \frac{a_0^3}{4} x2x2\pi = \frac{1}{a_0}$$

2. Jawablah soal dibawah ini!
   a. Apakah nilai-nilai ℓ yang mungkin bagi $n = 6$.
   b. Apakah nilai-nilai m_ℓ yang mungkin bagi $\ell = 6$.
   c. Apakah nilai ℓ terkecil paling mungkin untuk mana ℓ dapat sama dengan 4.
   d. Apakah nilai ℓ terkecil paling mungkin yang dapat memiliki suatu komponen z sama dengan 4ħ.

Jawab:

a. Nilai-nilai ℓ yang mungkin bagi $n = 6$
   Nilai ℓ terbatas oleh $(n - 1)$, jadi nilai ℓ yang mungkin bagi $\ell = 6$ adalah: 0, 1, 2, 3, 4, 5, atau ℓ yang mungkin {0, 1, 2, 3, 4, 5}.
b. Nilai bilangan kuantu magnetic m_ℓ dibatasi oleh $\pm 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \pm \ell$. Jadi nilai m_ℓ yang mungkin untuk $\ell = 6$, yaitu $\pm 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4, \pm 5, \pm 6$ atau $\{\pm 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4, \pm 5, \pm 6\}$.
c. Nilai ℓ terkecil paling mungkin untuk mana $\ell = 4$ adalah -4.
d. Karena $\ell_z = m_\ell \hbar$, maka $4\hbar = m_\ell \hbar$, jadi $m_\ell = 4$.

3. Hitunglah kedudukan r untuk mana rapat kebolehjadian $P(r) = r^2 R_{n\ell}(r)$ berharga maksimum untuk keadaan sistem atom atom hydrogen $n = 2$ dan $\ell = 1$.

Jawab:

$$\psi_{n\ell m_\ell}(r,\theta,\varphi) = RR_{n\ell}(r)\Theta_{\ell m_\ell}(\theta)\phi_{m\ell}(\varphi)$$

P_{21} maksimum pada r yang memenuhi $\frac{dP_{21}}{dr} = 0$ atau

$\frac{1}{24a_0^5}\frac{d}{dr}\left(r^4 e^{-\frac{r}{a_0}}\right) = 0$ atau karena $e^{-\frac{r}{a_0}} \neq 0$, maka $r = 4a_0$.

Latihan

1. Jawablah:
   a. Hitunglah kedudukan r untuk rapat kebolehjadian $P(r) = r^2 R_{n\ell}(r)$ berharga maksimum untuk keadaan sistem atom hidrogen $n = 3$ dan $\ell = 2$.
   b. Hitunglah harga ekspektasi (r) untuk keadaan tersebut.
2. Jawablah:
   a. Apakah nilai-nilai ℓ yang mungkin bagi $n = 7$.
   b. Apakah nilai-nilai m_ℓ yang mungkin bagi $\ell = 7$.
   c. Apakah nilai ℓ terkecil paling mungkin yang dapat dimiliki suatu komponen z dengan 5ħ.
3. Jawablah:
   a. Tentukan (r) untuk atom hidrogen $n = 1$ dan $\ell = 0$.
   b. Tentukan (r^2) untuk atom hidrogen $n = 1$ dan $\ell = 0$.

C. Momentum Sudut

1. Operator $\hat{L}_z$

Nilai eigen dan fungsi eigen operator $\hat{L}_z$ dapat ditetapkan seperti berikut. Misalkan $\Phi(\phi)$ adalah fungsi eigen bersangkutan dengan nilai eigen $\hat{L}_z$, sehingga:

$$\hat{L}_z\Phi = L_z\Phi; \tag{54}$$

atau

$$-i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi} = L_z\Phi$$

sehingga

$$\Phi = \Phi_0 e^{iL_z\phi/\hbar}$$

Karena sifat $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$, maka:

$$\exp\left(\frac{iL_z\phi}{\hbar}\right) = \exp\left[\frac{iL_z(\phi + 2\pi)}{\hbar}\right]$$

$$= exp\left(\frac{iL_z\phi}{\hbar}\right) exp\left(\frac{i2L_z\pi}{\hbar}\right)$$

Jadi, $\exp\left(\frac{i2\pi L_z}{\hbar}\right) = cos\left(\frac{2\pi L_z}{\hbar}\right) + i\, sin\left(\frac{2\pi L_z}{\hbar}\right) = 1$, artinya:

$$\frac{2\pi}{\hbar}L_z = 0, \pm 2\pi, \pm 4\pi, \dots$$

sehingga harga eigen operator $\hat{L}_z$ adalah:

$$L_z = m_\ell\hbar \quad m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots\dots \tag{55}$$

Dengan fungsi eigen bersangkutan:

$$\Phi_{m_\ell}(\phi) = Ce^{im_\ell\phi} \tag{56}$$

Contoh Soal:

Tentukanlah faktor normalisasi C agar fungsi $\Phi_{m_\ell} = C\exp(im_\ell\phi)$ dalam persamaan (56) ternormalisasi.

$$\int_0^{2\pi}\Phi_m^*\,\Phi_m d\phi = 1;$$

$$C^2\int_0^{2\pi}d\phi = 1 \quad \rightarrow \quad C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

Jaid,

$$\Phi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im_\ell\phi} \tag{57}$$

Persamaan (56) dan (57) merupakan nilai eigen dan fungsi eigen dari operator $\hat{L}_z$. Nilai eigen di atas nama dengan yang dikemukakan oleh Bohr tentang momentum sudut suatu elektron di dalam atom hidrogen. L_z sebagai komponen momentum sudut pada sumbu-z ternyata merupakan besaran yang diskrit atau terkuantisasi. Dengan perkataan lain komponen-z itu terkuantisasi. Dalam eksperimen, sumbu-z dinyatakan sebagai sumbu di mana arah medan magnet statik ditetapkan. Oleh sebab itu m_ℓ disebut bilangan kuantum magnetik orbital.

2. Operator $\hat{L}^2$

Nilai eigen dan fungsi eigen operator $\hat{L}^2$ ditentukan sebagai berikut. Andaikan $Y(\theta, \phi)$ adalah fungsi eigen dengan nilai eigen L^2:

$$\hat{L}^2 Y(\phi, \theta) = L^2 Y(\phi, \theta) \qquad (58)$$

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]$$

$$sin^2\theta\frac{\partial^2 Y}{\partial\theta^2} + sin\theta\ cos\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta} + \frac{L^2 sin^2\theta}{\hbar^2}Y = -\frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} \qquad (59)$$

Agar dapat diselesaikan, terlebih dahulu harus dilakukan pemisahan variabel; untuk itu misalkan:

$$Y(\theta, \varphi) = P(\theta)\Phi(\phi) \qquad (60)$$

Substitusi ke persamaan (59) menghasilkan:

$$\frac{1}{P}\left(sin^2\theta\frac{\partial^2 P}{\partial\theta^2} + sin\theta\ cos\theta\frac{\partial P}{\partial\theta} + \frac{L^2 sin^2\theta}{\hbar^2}\right) = -\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2}$$

Jelas kini, pihak kiri hanya bergantung pada θ dan pihak kanan hanya bergantung pada ϕ; oleh sebab itu masing-masing pihak dapat dinyatakan sama dengan suatu konstanta. Karena kita sudah mengenal fungsi Φ dalam persamaan (56), konstanta itu adalah ${m_\ell}^2$, sehingga diperoleh persamaa diferensial;

$$\frac{\partial^2 P}{\partial\theta^2} + ctg\theta\frac{\partial P}{\partial\theta} + \left(\frac{L^2}{\hbar^2} - \frac{{m_\ell}^2}{sin^2\theta}\right)P = 0 \qquad (61)$$

Persamaan ini identic dengan persamaan Legendre terasosiasi dengan:

$$L^2 = \hbar^2\ell(\ell+1) \qquad \ell \geq |m_\ell| \qquad (62)$$

dan fungsi P adalah:

$${P_\ell}^{|m_\ell|}(w) = \frac{(-1)^{|m_\ell|}}{2^\ell \ell!}(1-w^2)^{\frac{1}{2}|m_\ell|}\left(\frac{d}{dw}\right)^{\ell+|m_\ell|}(w^2-1)^\ell \quad w = cos\theta \qquad (63)$$

Fungsi ${P_\ell}^{|m_\ell|}(w)$ olinom Legendre-terasosiasi, dengan sifat ortogonalitas sebagai berikut:

$$\int_0^{\pi} P_\ell^{|m_\ell|}(cos\theta)P_\ell^{|m_\ell|}\,(cos\theta)sin\theta\; d\theta = \sqrt{\frac{2(\ell+|m_\ell|!}{(2\ell+1(\ell-|m_\ell|}}\delta_{\ell\ell} \tag{64}$$

Sehubungan dengan persamaan (63), dibawah ini diberikan contoh $P_\ell^{|m_\ell|}(\theta)$:

$$P_0{}^0(\theta) = 1$$

$$P_1{}^0(\theta) = cos\theta$$

$$P_1{}^{\pm 1}(\theta) = -sin\theta$$

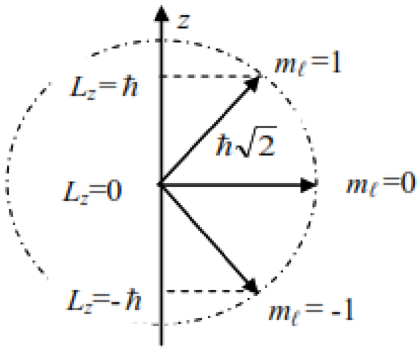
(65)

$$P_2{}^0(\theta) = \frac{1}{2}(3cos^2\theta - 1)$$

$$P_2{}^{\pm 1}(\theta) = -3cos\theta\; sin\theta$$

$$P_2{}^{\pm 2}(\theta) = 3sin^2\theta$$

Dalam persamaan (62), ℓ adalah bilangan positif: 0, 1, 2, …; bilangan ini disebut bilangan kuantum orbital. Dari persamaan itu jelas bahwa untuk suatu nilai ℓ ada $(2\ell + 1)$ buah nilai m_ℓ, yakni $m_\ell = -\ell, -(\ell-1), \dots, -1, 0, 1, \dots\dots, (\ell-1), \ell$. Untuk $\ell = 1$, besarnya momentum sudut adalah $L = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)} = \hbar\sqrt{2}$. Momentum sudut mempunyai tiga orientasi yang diperlihatkan dalam Gambar 2, $L_z = m_\ell\hbar$ adalah hasil proyeksi $\vec{L}$ pada sumbu-z; m_ℓ disebut



Gambar 3. Orientasi momentum sudut terhadap sumbu-z untuk $\ell = 1$

Bilangan kuantum magnetik orbital Ini menggambarkan kuantisasi komponen-z dari momentum sudut. Akhirnya, dari persamaan (60), diperoleh fungsi eigen yang ternormalisasi bagi operator $\hat{L}^2$:

$$Y(\theta,\phi) \equiv Y_{\ell m_\ell}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m_\ell|!)}{4\pi(\ell+|m_\ell|!}}P_\ell^{m_\ell}(cos\theta)e^{im_\ell\phi} \tag{66}$$

yang biasa disebut harmonik-harmonik bola (spherical harmonics). Fungsi-fungsi tersebut membentuk set ortonormal melalui persamaan ortogonalitas berikut:

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}(Y_{\ell m_\ell})^*\,(Y_{\ell' m'_\ell} sin\theta\; d\theta\; d\phi = \delta_{\ell\ell'}\delta_{m_\ell m'_\ell} \tag{67}$$

dan dua sifat penting dari fungsi ini adalah:

$$cos\theta Y_{\ell m_\ell} = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}\left[\sqrt{\frac{\ell^2-m_\ell{}^2}{2\ell-1}}Y_{\ell-1,m_\ell} + \sqrt{\frac{(\ell+1)^2-m_\ell{}^2}{2\ell+3}}Y_{\ell+1,m_\ell}\right] \quad (68)$$

$$sin\theta\ e^{\pm i\varphi}Y_{\ell m_\ell} = \mp\frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}\left[\sqrt{\frac{(\ell\mp m_\ell)(\ell\mp m_\ell{}^2)}{2\ell-1}}Y_{\ell-1,m_\ell\pm1} - \sqrt{\frac{(\ell\pm m_\ell+2)(\ell\pm m_\ell+1)}{2\ell+3}}Y_{\ell+1,m_\ell\pm1}\right]$$

(69)

Selanjutnya, beberapa contoh fungsi $Y_{\ell m_\ell}$ adalah sebagai berikut:

$$Y_{00}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{4x}}; \qquad Y_{20}(\theta) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3cos^2\theta - 1);$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}cos\theta; \qquad Y_{2\pm1}(\theta) = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}}sin2\theta e^{\pm i\varphi}; \quad (70)$$

$$Y_{1\pm1}(\theta) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}sin\theta e^{\pm i\varphi}; \qquad Y_{2\pm2}(\theta) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}sin^2\theta e^{\pm2i\varphi}$$

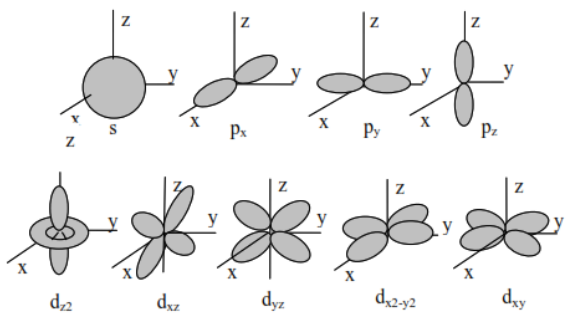
Dengan nilai eigen seperti dalam persamaan (62), persamaan nilai eigen adalah:

$$\hat{L}^2Y_{\ell m_\ell} = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m_\ell}\ ; \qquad \ell = 0,1,2\ \dots\dots$$

$$\hat{L}_2Y_{\ell m_\ell} = m_\ell\hbar Y_{\ell m_\ell}\ ; \qquad m_\ell = \pm\ell, \pm(\ell-1) \quad (71)$$

Persamaan-persamaan (62) dan (55) diatas menunjukkan kuantisasi momentum sudut. Dibandingkan dengan postulat Bohr, kuantisasi dalam postulat itu sangat premature dan tidak lengkap; inilah salah satu alasan mengapa teori Bohr tak dapat mengungkapkan struktur atom yang lebih besar.

Orbital-orbital elektron dibentuk dari fungsi-fungsi $Y_{\ell m_\ell}$ dalam bentuk ril. Karena di antara fungsi-fungsi $Y_{\ell m_\ell}$ itu ada yang kompleks, maka pembentukan orbital harus dilakukan melalui kombinasi linier dari fungsi-fungsi tersebut. Orbital-orbital itu diberi simbol s untuk $\ell = 0$, p untuk $\ell = 1$, dan d untuk $\ell = 2$ dan seterusnya. Dalam Gambar 4, dibawah ini di perlihatkan orbital-orbital tersebut.



Gambar 4. Orbital-orbital atom s, p, dan d.

$\ell = 0; \qquad s = Y_0^0$ (72)

$$\ell = 1; \qquad \begin{cases} p_z \equiv Y_1^0 \\ p_x \equiv \frac{-1}{\sqrt{2}}(Y_{11+}Y_{1-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} sin\theta\ cos\phi \\ p_y \equiv \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{11+}Y_{1-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} sin\theta\ cos\phi \end{cases} \tag{73}$$

$$\ell = 2; \qquad \begin{cases} d_{z^2} \equiv Y_{20} \\ d_{xz} \equiv -\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{21} + Y_{2-1}) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} sin\theta\ cos\theta\ cos\phi \\ d_{yz} \equiv \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{21} - Y_{2-1}) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} sin\theta\ cos\theta\ sin\phi \\ d_{x^2-y^2} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{22} + Y_{2-2}) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} sin^2\theta\ cos^2\phi \\ d_{xy} \equiv \frac{-i}{\sqrt{2}}(Y_{22} - Y_{2-2}) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} sin^2\theta\ sin^2\phi \end{cases} \tag{74}$$

Dalam pembentukan molekul dari beberapa atom, ikatan antar atom berlangsung melalui orbital-orbital tersebut. Permasalahan ikatan molekul dibahas dalam mekanika kuantum molekul, sebagai kelanjutan dari buku ini.

Contoh Soal:

1. Tentukanlah matriks $\hat{L}_z$ dengan basis fungsi-fungsi $Y_{\ell m_\ell}$ untuk $\ell = 0,1,2$. Berdasarkan persamaan $\hat{L}_z Y_{\ell m_\ell} = m_\ell \hbar Y_{\ell m_\ell}$; maka

Jawab:

$$(\hat{L}_z)_{\ell m_{\ell,} \ell' m'_\ell} = \int Y^*_{\ell', m'_\ell} \hat{L}_z Y_{\ell, m_\ell} sin\theta\ d\theta\ d\phi$$

$$= m_\ell \hbar \int Y^*_{\ell', m'_\ell} Y_{\ell, m_\ell} \sin\theta\ d\theta\ d\phi = m_\ell \hbar \delta_{\ell\ell'} \delta_{m\ell m'\ell}$$

$(\hat{L}_z)_{\ell m_{\ell,} \ell' m'_\ell}$ memiliki harga hanya jika $\ell' = \ell$ dan $m_\ell = m'_\ell$. Jadi dengan $\ell = 0,1,2$ ..., matriks $\hat{L}_z$ adalah

$\ell = 0; \qquad \ell = 1; \qquad \ell = 2$

$$\hat{L}_z = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

2. Tentukanlah matriks $\hat{L}_z$ dengan basis fungsi-fungsi $Y_{\ell m_\ell}$ untuk $\ell = 0,1,2$. Berdasarkan persamaan $\hat{L}^2 Y_{\ell m_\ell} = \hbar^2 \ell(\ell+1) Y_{\ell m_{\ell m}}$; maka:

Jawab:

$$(L^2)_{\ell m_\ell \ell' m'_\ell} = \int Y^*_{\ell', m'_\ell} \hat{L}^2 Y_{\ell, m_\ell} sin\theta \, d\theta \, d\phi$$

$$= \hbar^2 \ell(\ell+1) \int Y^*_{\ell', m'_\ell} Y_{\ell, m_\ell} \sin\theta \, d\theta \, d\phi = \hbar^2 \ell(\ell+1) \delta_{\ell\ell'} \delta_{m\ell m'\ell}$$

$(\hat{L}_z)_{\ell m_{\ell,} \ell' m'_\ell}$ memiliki harga hanya jika $\ell' = \ell$ dan $m_\ell = m'_\ell$. Jadi, dengan $\ell = 0,1,2$ ..., matriks $\hat{L}^2$ adalah

$\ell = 0$; $\ell = 1$; $\ell = 2$

$$\hat{L}^2 = \hbar^2 \begin{pmatrix} 0 & & & & & & & & \\ & 2 & 0 & 0 & & & & & \\ & 0 & 2 & 0 & & & & & \\ & & & & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 \end{pmatrix}$$

3. Operator $\hat{L}_+$ dan Operator $\hat{L}_-$

Sehubungan dengan operator $\hat{L}_\pm$ yang telah didefinisikan dalam persamaan $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$ akan kemukakan karakteristik operasinya terhadap fungsi harmonik bola Y_{ℓ,m_ℓ}. Karena $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm]$ maka:

$$\hat{L}_z\hat{L}_+Y_{\ell m_\ell} = (\hat{L}_+\hat{L}_z + \hbar\hat{L}_+)Y_{\ell m_\ell} = (m_\ell + 1)\hbar\hat{L}_+Y_{\ell m_\ell}$$

$$\hat{L}_z\hat{L}_-Y_{\ell m_\ell+1} = (\hat{L}_-\hat{L}_z - \hbar\hat{L}_-)Y_{\ell m_\ell+1} = m_\ell\hbar\hat{L}_-Y_{\ell m_\ell+1}$$

Jelas bahwa $\hat{L}_-Y_{\ell m_\ell}$ adalah fungsi eigen dari $\hat{L}_z$ dengan nilai eigen $(m_\ell + 1)\hbar$. Nilai eigen ini merupakan hasil operasi $\hat{L}_z$ terhadap $Y_{\ell m_\ell+1}$, oleh sebab itu:

$$\hat{L}_+Y_{\ell m_\ell} = CY_{\ell m_\ell+1}$$

Demikian pula $(\hat{L}_-Y_{\ell m_\ell+1})$ adalah fungsi eigen dari $\hat{L}_z$ dengan nilai eigen $m_\ell = \hbar$. Padahal nilai eigen ini merupakan hasil operasi $\hat{L}_z$ terhadap $Y_{\ell m_\ell}$. Jadi,

$$\hat{L}_-Y_{\ell m_\ell+1} = CY_{\ell m_\ell}$$

Dengan kedua persamaan diatas, maka:

$$\hat{L}_-\hat{L}_+Y_{\ell m_\ell} = C^2Y_{\ell m_\ell}$$

Di pihak lain,

$$\hat{L}_-\hat{L}_+Y_{\ell m_\ell} = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_2Y_{\ell m_\ell} = [\hbar^2\ell(\ell + 1) - m_\ell(m_\ell + 1)\hbar]Y_{\ell m_\ell}$$

Sehingga diperoleh,

$$C^2 = \hbar^2\ell(\ell + 1) - m_\ell(m_\ell + 1)\hbar$$

Dengan demikian maka sifat operasi operator $\hat{L}_\pm$ adalah:

$$\hat{L}_+Y_{\ell m_\ell} = \hbar\sqrt{\ell(\ell + 1) - m_\ell(m_\ell + 1)}Y_{\ell m_\ell+1}$$

$$\hat{L}_-Y_{\ell m_\ell} = \hbar\sqrt{\ell(\ell + 1) - m_\ell(m_\ell - 1)}Y_{\ell m_\ell-1} \quad (75)$$

Kedua persamaan di atas bukan persamaan nilaieigen, karena operator-operator itu menggeser bilangan kuantum m_ℓ. Operator $\hat{L}_+$ menambahkan bilangan kuantum m_ℓ menjadi $m_\ell + 1$, sedangkan $\hat{L}_-$ menguranginya dari m menjadi $m_\ell - 1$. Oleh sebab itu, kedua operator itu disebut sebagai operator tangga (step operator).

Contoh Soal:

Tentukan matriks $\hat{L}_+$ dengan basis fungsi-fungsi $Y_{\ell m_\ell}$ untuk $\ell = 0,1,2$. Berdasarkan persamaan $\hat{L}_+Y_{\ell m_\ell} = \hbar\sqrt{\ell(\ell + 1) - m_\ell(m_\ell + 1)}Y_{\ell m_\ell+1}$ maka

$$(\hat{L}_+)_{\ell\prime,m\prime_\ell;\ell,m_\ell} \quad = \int Y_{\ell\prime,m\prime_\ell} \hat{L}_+ Y_{\ell m_\ell}\, sin\theta \;\, d\varphi$$

$$= \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m_\ell(m_\ell+1)} \int Y_{\ell',m'_\ell}\, Y_{\ell m_\ell+1}\, sin\theta\, d\varphi$$

$$= \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m_\ell(m_\ell+1)}\,\delta_{\ell\prime\ell}\delta_{m\prime\ell,m_\ell+1}$$

$\widehat{(L_+)}_{\ell\prime,m\prime_\ell;\ell,m_\ell}$ memiliki harga hanya jika $\ell' = \ell$ dan $m'_\ell = m_\ell + 1$. Jadi dengan $\ell =$ 0,1,2 ..., matriks $\hat{L}_+$:

$\ell = 0$ $\quad\quad$ $\ell = 1$ $\quad\quad$ $\ell = 2$

$$\hat{L}_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & & & & & & & & \\ & 0 & \sqrt{2} & 0 & & & & & \\ & 0 & 0 & \sqrt{2} & & & & & \\ & 0 & 0 & 0 & & & & & \\ & & & & 0 & \sqrt{4} & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} & 0 \\ & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} \\ & & & & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Soal Latihan:

1. Buktikan $[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$, $[\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$.
2. Buktikan $[\hat{L}^2, \hat{L}_j] = 0, j = x, y, z$.
3. Dengan $\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$, buktikan: $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar\hat{L}_\pm$, $\hat{L}_+, \hat{L}_- = 2\hbar\hat{L}_z$, dan $[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] =$ 0. Butikan: $\hat{L}_-, \hat{L}_+ = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z$.
4. Nyatakanlah operator $\hat{L}_+$ dalam bentuk matriks dengan basis harmonik bola $Y_{\ell m_\ell}$ dengan $\ell = 3$. Hal yang sama untuk operator $\hat{L}_-$.
5. Nyatakanlah operator $\hat{L}_x$ dalam bentuk matriks dengan basis harmonik bola $Y_{\ell m_\ell}$ dengan $\ell = 0,1,2$. Hal yang sama untuk operator $\hat{L}_y$.

DAFTAR PUSTAKA

Nurlina. 2017. *Fisika Kuantum*. Makassar: LPP Unismuh Makassar.

Siregar, R.E. 2018. *Fisika Kuantum*. Jatinangor: Fakultas MIPA Universitas Padjadjaran.

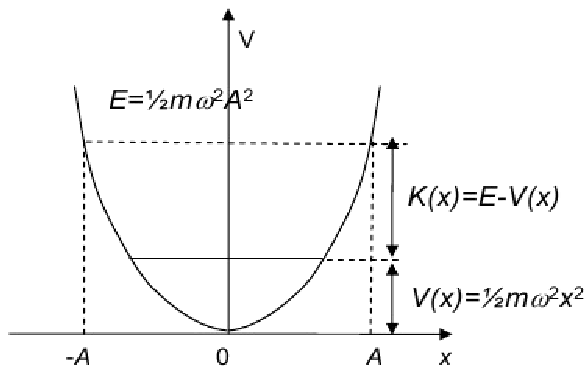
BAB VI

OSILATOR HARMONIK

1. Gambaran Schrödinger

Energi potensial $V(x)$ pada osilator harmonik diberikan oleh

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



Gambar 1: Osilator Harmonik Klasik

Sehingga persamaan Shcrödinger

$\frac{-h^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\Psi = E\Psi$ (2)

$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{h^2}\left(E - \frac{1}{2}\,\mathrm{k}x^2\right)\Psi = 0$ (3)

Definisikan

$x \equiv \sqrt{\frac{-h^2}{m\omega}}\; x'$ (4)

$\frac{d}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{h}}\frac{d}{dx'}$ (5)

$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{m\omega}{h}\frac{d^2}{dx'^2}$ (6)

$E = \frac{1}{2}\lambda\hbar\omega$ (7)

Persamaan diferensial :

$\left[\frac{m\omega}{h}\left(\frac{d^2\Psi}{dx^2} + (\lambda - x'^2)\right)\right] = 0$ (8)

$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + (\lambda - x'^2)\,\Psi = 0$ (9)

Jika $|x| \gg \lambda$ merupakan solusi asimptotik.

$$\frac{d^2\Psi as}{dx^2} \sim x^2\Psi_{as} \tag{10}$$

$$\Psi_{as} = Ae^{-x^2/2}\, Be^{x^2/2} \tag{11}$$

Sesuai syarat fungsi gelombang maka untuk$x \rightarrow \infty$ maka $\Psi \rightarrow 0$, sehingga $Be^{x^2/2}$ tidak digunakan. Solusi berdasarkan coba-coba (ansatz) adalah

$$\Psi = x^2 e^{\frac{x^2}{2}} \tag{12}$$

$$\frac{d\Psi}{dx} = nx^{n-1}e^{-x^2/2} + x^n(-x)\, e^{-x^2/2} \tag{13}$$

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = n\,(n-1)\, x^{n-1}e^{-x^2/2} + nx^{n-1}(-x)e^{-x^2/2} -$$

$$(n+1)\, x^{n-1}e^{-x^2/2} - x^{n+2}(-x)e^{-x^2/2}$$

$$= [n(n-1)x^{n-2} - \{n + (n+1)\}x^n + x^{n+2}]e^{-x^2/2} \tag{14}$$

Bagian

$$(\lambda - x^2)\Psi = [\lambda x^n - x^{n+2}]e^{-x^2/2} \tag{15}$$

Jumlahkan persamaan (14) dengan persamaan (15) maka:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + (\lambda - x^2)\Psi = \{-(2n+1) + \lambda + n(n-1)x^{-2}\}x^n e^{-x^2/2} = 0 \tag{16}$$

Analisis lebih umum

$$\Psi(x) = \Phi e^{-x^2/2} \tag{17}$$

$$\frac{d}{dx}\Phi(x) = \Phi' e^{-x^2/2} + \Phi(-x)e^{-x^2/2} \tag{18}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}\Phi(x) = \Phi'' e^{-x^2/2} + \Phi'(-x)e^{-x^2/2} + \Phi'(-x)e^{-x^2/2} - \Phi e^{-x^2/2} + \Phi \mathrm{x}^2 e^{-x^2/2}$$

$$= (\Phi'' - 2x\Phi' - \Phi + \Phi\mathrm{x}^2)e^{-x^2/2} \tag{19}$$

$$(\lambda - x^2)\Psi = \lambda\Phi e^{-x^2/2} - x^2\Phi e^{-x^2/2} \tag{20}$$

Sehingga

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + (\lambda - x^2)\Psi = 0 \tag{21}$$

Menjadi

$$\Phi'' - 2x\Phi' + (\lambda - 1)\Phi = 0 \tag{22}$$

merupakan persamaan differensial Hermite. Dengan Φ adalah polinomial Hermite,

$\Phi \ = \sum_k a_k x^{k+\alpha} \qquad \rightarrow \alpha?$ (23)

$\Phi' = \sum_k a_k (x+\alpha)^{k+\alpha-1}$ (24)

$\Phi'' = \sum_{k=0} a_k\,(x+\alpha)(x+\alpha-1)x^{k+\alpha-2}$ (25)

$\sum_{k=0}\{(k+\alpha)(k+\alpha+1)a_k x^{k+\alpha-2} - [2(k+\alpha)-(\lambda-1)]a_k x^{k+\alpha}\} = 0$ (26)

Untuk $k \ = \ 0$ yang diperoleh $x^{\alpha-2}x^{\alpha-2}$ sehingga untuk

$\alpha(\alpha-1) = 0$ (27)

diperoleh $\alpha = 0$ dan$\alpha = 1$. Untuk $\alpha = 0$

$\sum_{k=0}\{k(k-1)a_k x^{k+\alpha-2} - [2k-(\lambda-1)]a_k x^k\} = 0$ (28)

Untuk $k = 0$ diperoleh x^{-2}

$$\Rightarrow 0(0-1)\alpha_0 = 0$$

Untuk $k = 1$ diperoleh x^{-1}

$$\Rightarrow 1(0)a_1 = 0$$

Untuk x^k maka

$\Rightarrow (k+2)(k+1)a_{k+2} - [2k-(\lambda-1)]a_k = 0$

$a_{k+2} = \frac{[2k-(\lambda-1)]}{(k+2)(k+1)} a_k$ (29)

Jika diambil a_0, maka akan diperoleh a_2, a_4, a_6, a_8 ..., jika diambil a_1, maka akan diperoleh a_1, a_3, a_5, a_7 ... . Sehingga solusinya adalah

$\Phi(\mathrm{x}) \begin{cases} a_0 + a_2 x + a_4 x^4 + a_6 x^6 \ldots & \Rightarrow \text{genap} \\ a_1 x + a_3 x^3 + a_5 x^5 + a_7 x^7 \ldots & \Rightarrow \text{ganjil} \end{cases}$ (30)

Agar memenuhi syarat fungsi gelombang maka deret harus konvergen, untuk itu perlu dilakukan cek konvergensi salah satunya dengan Rasio Test.

$\lim_{k\to\infty} \frac{a_k + 2^{x^{k+2}}}{a_k x^k} = \lim_{k\to\infty} \frac{2k-(\lambda-1)}{(k+2)(k+1)} x^2 \approx 0$ (31)

sehingga $\Phi(x)$ adalah konvergensi untuk semua x. Untuk $k \gg \lambda$

$\lim_{k\to\infty} \frac{a_k + 2^{x^{k+2}}}{a_k x^k} = \frac{2x^2}{k} \approx 0$ (32)

Bandingkan (32) dengan sifat konvergensi maka

$$e^{x^2} = \sum_{k=0} \frac{x^k}{\left(\frac{k}{2}\right)!} \tag{33}$$

Dengan ratio test untuk deret tersebut

$$\frac{x^{k+2}}{\left(\frac{k+2}{2}\right)!} = \frac{\left(\frac{k}{2}\right)!}{x^k}$$

$$= \frac{2x^2}{2} \tag{34}$$

Sehingga solusinya adalah

$$\Psi(x) = \Phi e^{-x^2/2}$$

$$= e^{x^2} e^{-x^2/2} \tag{35}$$

Untuk $x \rightarrow \infty$ maka

$$\lim_{k\rightarrow\infty} e^{x^2/2} = \rightarrow \infty \tag{36}$$

ternyata DIVERGEN !!!. Supaya konvergen solusi a_k dipotong sehingga untuk

$$a_{k+1} = a_{k+2} = a_{k+3} = \cdots \tag{37}$$

Sehingga

$$\frac{2k-(\lambda-1)}{(k+2)(k+1)} a_k = 0$$

$$\lambda = 2k + 1 \tag{38}$$

dan

$$E_k = \frac{1}{2} \lambda \hbar\omega$$

$$= \frac{1}{2}(2k+1)\hbar\omega$$

$$= \left(k + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{39}$$

Fungsi gelombang menjadi

$$\Psi_n(x) = A_n e^{x^2/2} H_n(x) \tag{40}$$

dengan $n = 1,2,3,\cdots$ dimana dan

$$H_0(x) = 1 \tag{41}$$

$$H_1(x) = 2x \tag{42}$$

$$H_2(x) = 4x^2 - 2 \tag{43}$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x \tag{44}$$

adalah polinomial Hermit. Polinomial ini memenuhi persamaan differensial Hermit

$$\frac{d^2H_n}{dx^2} - 2x\frac{dH_n}{dx} + 2nH_n = 0 \tag{45}$$

Kemudian bandingkan persamaan ini dengan

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} - 2x\frac{d\Phi}{dx} + 2(n-1)\Phi = 0 \tag{46}$$

Differensialkan masing - masing persamaan (45) dan persamaan (46)

$$(H'_n)'' - 2x(H'_n)' - 2H'_n + 2n(H'_n) = 0$$

$$(H'_n)'' - 2x(H'_n)' - 2(n-1)H'_n = 0 \tag{47}$$

$$(H'_n)'' - 2x(H'_n)' - 2(n-1)H'_n = 0 \tag{48}$$

yang keduanya sama. Solusi umum osilator Harmonik 1 dimensi adalah

$$\Psi_n(x,t) \ = \ \Psi_n\,(x)e^{-iEt/\hbar} \tag{49}$$

dengan $\Psi_n(x)$ seperti persamaan (40).

Untuk menentukan konstanta normalisasi *A* pada persamaan (40) gunakan *Generating Function* untuk polinomial Hermit dan definisi fungsi gelombang ternormalisasi, yang masing - masing diberikan oleh

$$g(x,h) \equiv e^{2xh-h^2} = \sum_{n=0} H_n(x)\frac{h^n}{n!} \tag{50}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \Psi_m \, dx = \delta_{mn} \begin{Bmatrix} 0 \to m \neq n \\ 1 \to m = n \end{Bmatrix} \tag{51}$$

Untuk $m = n$ maka

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^* \Psi_m \, dx = 1$$

$$|A_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n^* H_n dx = 1 \tag{52}$$

Kalikan bagian integral suku sebelah kiri persamaan (52) dengan *Generating Function* maka

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{x}^2}\, g^2(x,h)dx = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{nm} e^{-\mathrm{x}^2}\, H_n H_m \frac{h^{n+m}}{n!m!}dx \tag{53}$$

Suku kiri persamaan (53) memberikan

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{x}^2} g^2(x,h)dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} e^{4xh-2h^2} dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(x^2-4xh-2h^2\right)} dx$$

$$= e^{2h^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\left(x^2-2h^2\right)} dx$$

$$= \sqrt{\pi e^{2h^2}} \tag{54}$$

Suku kanan persamaan (53) memberikan

$$\int_{-\infty}^{\infty} \sum_{nm} e^{-\mathrm{x}^2} H_n H_m \frac{h^{n+m}}{n!m!} dx = \sum_n \frac{h^{2n}}{(n!)^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n^2 dx \tag{55}$$

Sehingga persamaan (53) menjadi

$$\sum_n \frac{h^{2n}}{(n!)^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n^2 dx = \sqrt{\pi e^{2h^2}}$$

$$\sqrt{\pi} \sum_n \frac{2^n h^{2n}}{n!} \tag{56}$$

dan untuk sembarang n maka

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n^2 dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \tag{57}$$

dan persamaan (52) menjadi

$$|An|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n^2 dx = 1$$

$$|An|^2 2^n n! \sqrt{\pi} = 1 \tag{58}$$

atau

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}. \tag{59}$$

Sehingga solusi lengkap osilator harmonik 1 dimensi menjadi

$$\Psi_n(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n\,(x) exp\left[-\left(\frac{x^2}{2} + \frac{iEt}{\hbar}\right)\right] \tag{60}$$

4.2 Gambaran Heisenberg

Definisikan Operator energi dalam bentuk Hamiltonian untuk osilator harmonik 1 dimensi

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \tag{61}$$

Operator ini memenuhi persamaan eigen

$$H|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle \tag{62}$$

s hubungan komutatif $posisi\ x$ dan $momentum\ p$ adalah

$$[x, p] = i\hbar I \tag{63}$$

dengan I adalah matrik identitas. Definisikan operator penaik dan operator penurun masing - masing

$$a = \frac{i}{\sqrt{2}}(p - ix) \tag{64}$$

$$a^+ = \frac{-i}{\sqrt{2}}(p - ix) \tag{65}$$

Operasi

$$\begin{aligned} aa^+ &= \frac{1}{2}\{p^2 - i(px - xp) + x^2\} \\ &= H - i[x, p] \\ &= H + \frac{1}{2}I \end{aligned} \tag{66}$$

$$\begin{aligned} a^+a &= \frac{1}{2}\{p^2 - i(px - xp) + x^2\} \\ &= H + i[x, p] \\ &= H - \frac{1}{2}I \end{aligned} \tag{67}$$

Jumlahkan persamaan (66) dan persamaan (67) maka (dalam satuan ($\hbar\omega$)

$$H = \frac{1}{2}(aa^+ + a^+a) \tag{68}$$

Operasi lain memberikan

$$[a, H] = a \tag{69}$$

dan

$$[a^+, H] = -a^+ \tag{70}$$

Sehingga

$$\langle\Psi_E|a^+a|\Psi_E\rangle = \int \Psi_n^* a + a\Psi_n dx$$

$$\left\langle\Psi_E\middle|H - \frac{1}{2}I\middle|\Psi_E\right\rangle = \int (a\Psi_n^*)(a\Psi_n)dx$$

$$\left(E - \frac{1}{2}I\right)\langle\Psi_E|\Psi_E\rangle = a^2 \int (\Psi_n^* \Psi_n) dx \geq 0$$
$$E - \frac{1}{2}I \geq 0 \tag{71}$$

dan energi minimum adalah

$$E_{min} = \frac{1}{2}\hbar\omega \tag{72}$$

Operasi:

$$aH|\Psi_E\rangle(Ha^+a)|\Psi_E\rangle \tag{73}$$
$$aE|\Psi_E\rangle = (H+1)(a|\Psi_E\rangle) \tag{74}$$
$$H(a|\Psi_E\rangle) = (E-1)(a|\Psi_E\rangle) \tag{75}$$

sehingga a adalah operator anihilasi yang berperan menurunkan energi. Dengan cara yang sama maka akan diperoleh

$$H\left(a^+|\Psi_E\rangle\rangle\right) = (E+1)(a^+|\Psi_E\rangle) \tag{76}$$

sehingga $a+$ adalah operator kreasi yang berperan menaikkan energi. Tingkat energi tiap keadaan

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{77}$$

Definisikan$|\Psi'_n\rangle \equiv |n'\rangle$ dan $\Psi_n \equiv |n\rangle$ kemudian sifat ortonormal memberikan

$$\langle n'|n\rangle = \delta_{n\prime n}\begin{cases} 0 \rightarrow & n \neq n' \\ 1 \rightarrow & n' = n \end{cases} \tag{78}$$

Operasi dua operator anihilasi dan kreasi pada masing - masing fungsi gelombang adalah

$$a|n\rangle = \alpha_n|n-1\rangle \tag{79}$$
$$a^+|n\rangle = \beta_n|n+1\rangle \tag{80}$$

sehingga

$$\langle n'|a|n\rangle = \alpha_n\langle n'|n-1\rangle$$
$$= \alpha_n\delta_{n\prime(n-1)} \tag{81}$$

$$\langle n'|a^+|n\rangle = \beta_n\langle n'|n+1\rangle$$
$$= \beta_n^*\delta_{(n'+1)n} \tag{82}$$

dan operasi konjugatnya

$$\langle n'|a|n\rangle = (a^+|n'\rangle)^+|n\rangle$$
$$= \beta_n^*(n'+1|n\rangle$$
$$= \beta_n^*\delta_{(n'-1)n} \tag{83}$$

$\langle n'|a^+|n\rangle = (a|n'\rangle)^+|n\rangle$
$= \alpha_n^*(n' - 1|n\rangle$
$= \alpha_n^*\delta_{(n'-1)n}$ (84)

Selanjutnya perlu dihitung nilai α_n dan β_n. Tinjau operasi

$$\langle n-1|n-1\rangle = \langle n|a^+a|n\rangle \frac{1}{|a_n|^2}$$

$$1 = \left\langle n\middle|H - \frac{1}{2}I\middle|n\right\rangle \frac{1}{|a_n|^2}$$

$$1 = \left\langle n\middle|\left(n - \frac{1}{2}\right) + \frac{1}{2}\middle|n\right\rangle \frac{1}{|a_n|^2}$$

$$1 = \langle n|n|n\rangle \frac{1}{|a_n|^2}$$

$$|a_n|^2 = n$$

$$a_n = \sqrt{n} \tag{85}$$

dan dengan cara serupa

$$\langle n+1|n+1\rangle = \langle n|aa+1|n\rangle \frac{1}{|\beta_n|^2}$$

$$1 = \langle n\left|H + \frac{1}{2}I\right|n\rangle \frac{1}{|\beta_n|^2}$$

$$|\beta_n|^2 = n+1$$

$$\beta_n = \sqrt{n+1} \tag{86}$$

sehingga

$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ (87)
$a^+\big|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ (88)
$\langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\langle n'|n-1\rangle$
$= \sqrt{n}\,\delta_{n'(n-1)}$ (89)

$\langle n'|a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle n'|n+1\rangle$
$= \sqrt{n+1}\,\delta_{n'(n+1)}$ (90)

Operator anihilasi dan kreasi dapat ditentukan masing - masing melalui persamaan (89) dan persamaan (90) yang memberikan

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \vdots & 0 \end{pmatrix} \qquad (91)$$

dan

$$a^{+} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \vdots & 0 \end{pmatrix} \qquad (92)$$

Operator Hamiltonian dapat ditentukan dari

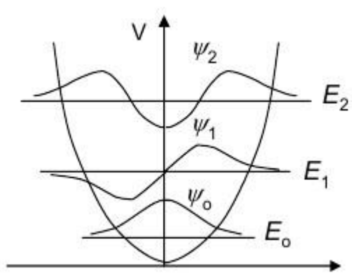
$$\langle n'|H|n\rangle = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\delta_{n'n} \qquad (93)$$

$$H = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \qquad (94)$$

Fungsi gelombang dapat di reprensentasikan dalam matrik yang merupakan vektor basis, seperti

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix};\ |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix};\ |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

dan seterusnya. Plot energi osilator harmonik secara klasik dan kuantum diberikan oleh **Gambar 2**



Gambar 2: Osilator Harmonik Klasik dan Kuantum

DAFTAR PUSTAKA

Zen, F.P. 2014. *Mekanika Kuantum*. Bandung: Fakultas MIPA Institut Teknologi Bandung.