# FISIKA KUANTUM

4 SKS

# BAB 1
# PENDAHULUAN

Mekanika klasik (Newton, Lagrange, Hamilton dll) sukses menjelaskan gerak dinamis benda-benda makroskopis.

Cahaya sebagai gelombang (Fresnel, Maxwell, Hertz) sangat berhasil menjelaskan sifat-sifat cahaya.

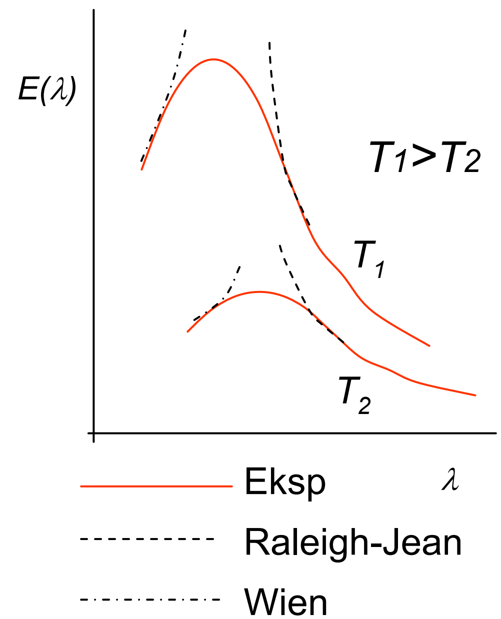
**Pada akhir abad 19, teori-teori klasik di atas tidak mampu memberikan penjelasan yang memuaskan bagi sejumlah fenomena "berskala-kecil" seperti sifat radiasi dan interaksi radiasi-materi.**

Akibatnya, dasar-dasar fisika yang ada secara radikal diteliti-ulang lagi, dan dalam perempat pertama abad 20 muncul berbagai pengembangan teori seperti relativitas dan mekanika kuantum.

## 1.1 Radiasi Benda-hitam

Benda-hitam: penyerap semua radiasi elektromagnet yang mengenainya, atau pengemisi semua radiasi elektromagnet yang dimiliknya.

Berdasarkan termodinamika, distribusi panjang gelombang spektrumnya hanya bergantung pada temperatur tidak pada jenis bahan benda-hitam.




Stefan (1879): total energi yang dipancarkan adalah:

$$E = (4\sigma / c)T^4$$

$\sigma$ adalah konstanta dan $c=3\times10^8$ m/s adalah kecepatan cahaya dalam ruang hampa.

Wien (1893): panjang gelombang di mana rapat energi radiasi maksimum berbanding lurus dengan *1/T*.

$\lambda_{max}T$=konstan; disebut hukum pergeseran Wien

Menurut teori medan listrik-magnet, gelombang elektromagnet diemisikan oleh osilator muatan-muatan listrik.

Bilamana osilator-osilator dalam kesetimbangan dengan radiasi dalam benda-hitam, maka rapat energi radiasi per satuan volum adalah:

$$E(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} u(\nu)$$

$u(\nu)$= energi rata-rata osilator dengan frekuensi $\nu$.

Hukum energi ekipartisi: energi rata-rata itu adalah $u(\nu)=k_B T$ di mana $k_B$=1,3806 x $10^{-23}$ J/K adalah konstanta Boltzmann. Dengan c=$\lambda\,\nu$,

$$E(\lambda) = \frac{8\pi}{\lambda^4} k_B T$$

Inilah rumusan Raleigh-Jeans, yang ternyata hanya berlaku pada panjang gelombang yang besar.

Max Planck (1900):
Suatu benda-hitam adalah kumpulan osilator dalam kesetimbangan dengan medan radiasi.

Suatu osilator dengan frekuensi ν hanya bisa memiliki energi:

$$\varepsilon_n = nh\nu;\ n = 0,1,2,.....$$

$h$=6,624 x $10^{-34}$ Js disebut konstanta Planck, dan $h\nu$ disebut kuantum energi.

Energi rata-rata per osilator dengan frekuensi ν adalah:

$$u(\nu) = \frac{\sum\limits_{n=0} \varepsilon_n \exp(-\varepsilon_n / k_B T)}{\sum\limits_{n=0} \exp(-\varepsilon_n / k_B T)} \longrightarrow u(\nu) = \frac{h\nu}{\exp(h\nu / k_B T) - 1}$$

Akhirnya diperoleh:

$$E(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\upsilon/k_B T} - 1}$$

Inilah rumusan Planck yang sesuai kurva radiasi benda hitam secara lengkap.

Untuk panjang gelombang yang besar berlaku pendekatan

$\exp(h\upsilon/k_B T)=\exp[hc/(\lambda\, k_B T)] \approx 1+ h\upsilon/k_B T$

$$E(\nu)=\frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\nu}{e^{h\upsilon/k_B T}-1}=\frac{8\pi\nu^2}{c^3}k_B T$$ persamaan dari Raleigh-Jeans.

Persamaan dapat diungkapkan dalam $\lambda$ sebagai berikut:

$$E(\lambda)=\frac{8\pi hc}{\lambda^5}\frac{1}{e^{hc/\lambda k_B T}-1}$$

Misalkan $x=hc/\lambda k_B T$, maka

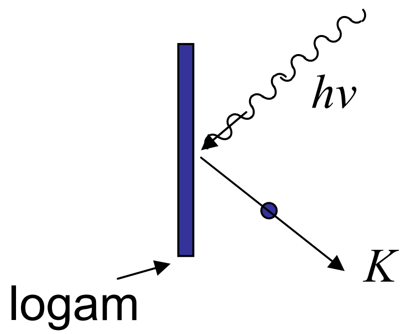
$$E(\lambda)=\frac{8\pi k_B^5 T^5}{c^4 h^4}\frac{x^5}{e^x-1}$$

Untuk memperoleh $E(\lambda)$ maksimum, harus dipenuhi $dE/dx=0$; jadi,

$e^{-x}+\frac{1}{5}x-1=0 \longrightarrow x=4{,}9651$

$\lambda T=hc/(4{,}9651\ k_B)=2{,}8978\times10^{-3}$ mK. hukum pergeseran Wien

## 1.2 Efek Foto Listrik




Dalam pengamatan 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.

## 1.3 Dualisme Gelombang-Partikel

Hasil-hasil eksperimen interferensi dan difraksi membuktikan bahwa teori tentang cahaya sebagai gelombang telah mantap pada penghujung abad 19, terlebih lagi karena keberhasilan teori elektromagnetik Maxwell.

Einstein (1905) menolak teori tersebut berdasarkan fenomena efek foto-listrik dimana permukaan logam melepaskan elektron jika disinari dengan cahaya berfrekuensi

$\nu \geq W / h$ W adalah fungsi kerja logam (=energi ikat elektron dipermukaan logam).

Menurut Einstein, dalam fenomena tersebut cahaya harus dipandang sebagai kuanta yang disebut foton, yakni partikel cahaya dengan energi kuantum $E=h\nu$. Dalam teori relativitas khususnya (1905), hubungan energi dan momentum suatu partikel diungkapkan sebagai berikut:

$$\left(\frac{E}{c}\right)^2 = p^2 + m_o^2 c^2$$

$p$ adalah momentum partikel, dan $m_o$ adalah massa diam partikel bersangkutan

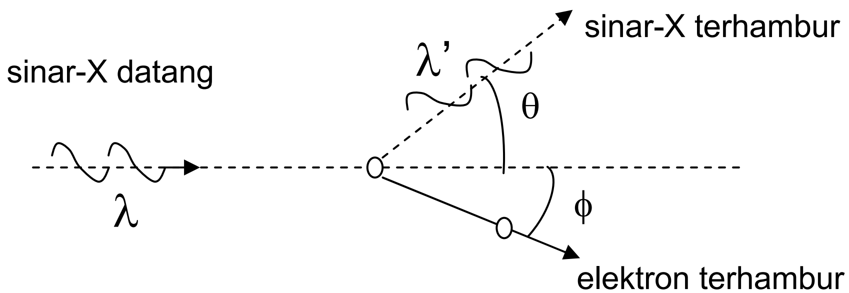
Untuk foton, karena <u>tidak mempunyai massa diam</u>, sedangkan energinya $E=h\upsilon$, maka momentum foton adalah

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h}{\lambda}.$$

Adanya momentum inilah yang mencirikan sifat partikel dari cahaya.

Arthur H. Compton (1924)

Mengamati perubahan panjang gelombang sinar-X setelah dihamburkan oleh elektron bebas.




Jika $\lambda$ dan $\lambda'$ adalah panjang gelombang sinar-X sebelum dan setelah terhambur, dan $m_e$ adalah massa diam elektron, maka diperoleh hubungan:

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c}(1 - \cos\theta)$$

Dapat dibuktikan dengan hukum kekekalan momentum dan energi

$h/m_e c$=0,00243 nm, disebut panjang gelombang Compton.

$\lambda' > \lambda \longrightarrow$ energi foton terhambur (E') lebih kecil daripada energi foton datang (E).

Louis de Broglie :

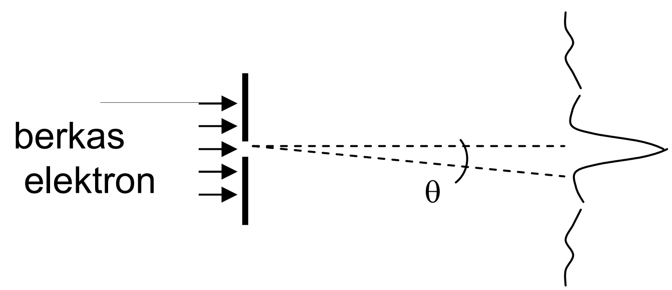
Mengemukakan bahwa tidak hanya cahaya yang memiliki sifat “mendua”, tetapi juga partikel.

Suatu partikel dapat juga memiliki sifat gelombang. Menurut de Broglie suatu partikel yang memiliki momentum p jika dipandang sebagai gelombang, mempunyai panjang gelombang:

$$\lambda = \frac{h}{p}.$$ Panjang gelombang ini disebut panjang gelombang de Broglie.

Clinton Davisson dan Lester Germer (1927):

Memperlihatkan efek difraksi dari berkas elektron ketika melalui celah sempit sebagaimana cahaya.




Andaikan a adalah lebar celah dan posisi sudut untuk ‘gelap’ pertama adalah $\theta$, maka berlaku

$$a \sin\theta = \lambda$$

Momentum $p=mv$ dan energi $E=p^2/2m=½mv^2$

Kecepatan fasa:

$v_f=\lambda\upsilon=(h/p)(E/h)=E/p=p/2m=½v$.

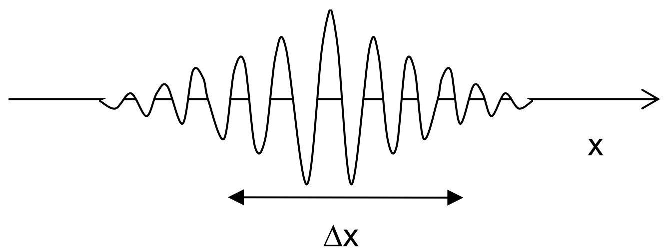
Aneh tapi tidak penting karena tak punya arti fisis.

Yang penting adalah <u>kecepatan grup</u>, yakni

$v_g=d\omega/dk$, di mana $\omega=2\pi\upsilon$ dan $k=2\pi/\lambda$.

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

$v_g=d\omega/dk=dE/dp=p/m=v$.




Kecepatan grup dari gelombang partikel sama dengan kecepatan partikel itu sendiri.

## 1.2 Spektroskopi Atom Hidrogen

Johann Balmer (1885):

Eksperimen menunjukkan bahwa panjang gelombang-panjang gelombang semua garis spektrum atom hidrogen bisa diungkapkan dengan rumus empiris:

$$\frac{1}{\lambda_n} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)$$

dengan $R$ =1.097x107 $m^{-1}$ disebut konstanta Rydberg.

Balmer dan Ritz: mengemukakan rumus yang lebih umum,

$$\frac{1}{\lambda_n} = R\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right); \quad n > m$$

Dengan rumusan empiris ini, Lyman menemukan deret ultraviolet untuk m=1, n=2, 3, 4, … dan Paschen menemukan deret inframerah untuk m=3, n=4, 5, 6, …

Bagaimana sebenarnya struktur atom?

Ernest Rutherford (1911):
Berdasarkan percobaan hamburan partikel-$\alpha$, menyarankan struktur atom terdiri dari inti bermuatan positif dan elektron-elektron yang mengitarinya.

Sayangnya, teori fisika pada masa itu tak mampu menjelaskan hasil penemuan Rutherford dalam kaitannya dengan rumusan Balmer-Ritz di atas.

# BAB 2
# DASAR-DASAR FISIKA KUANTUM

## 2.1 Persamaan Gelombang

Tinjaulah getaran sebuah kawat halus yang diregang sepanjang sumbu-x dengan kedua ujungnya dibuat tetap. Misalkan simpangan pada sembarang posisi dan waktu adalah $\psi(x,t)$.

Dalam teori gelombang simpangan itu memenuhi persamaan gelombang seperti:

$$\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial t^2}$$ v adalah kecepatan fasa

Misalkan $\psi(x,t) = \psi(x)\,\phi(t)$

$$\frac{v^2}{\psi(x)}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{1}{\phi(t)}\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} = -\omega^2$$

$$\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} + \omega^2\phi(t) = 0 \longrightarrow \phi(t) = A\sin(\omega t + \delta)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{\omega^2}{v^2}\psi(x) = 0 \longrightarrow \psi(x) = C\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right) + D\cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right)$$

$\omega=2\pi\upsilon$, $\upsilon$ adalah frekuensi dan $\delta$ adalah konstanta; karena *v* adalah kecepatan merambat maka panjang gelombang $\lambda=v/\upsilon$.

Untuk konstanta C dan D diperlukan syarat batas, misalnya untuk fungsi di atas, pada $x=0$, dan $x=L$ dengan *L* adalah panjang kawat. Andaikan, untuk $x=0$, $\psi(0)=0$ maka D=0,

$$\psi(x) = C\sin\left(\frac{2\pi}{\lambda}x\right)$$

Selanjutnya jika di $x=L$, $\psi(L)=C\sin(2\pi L/\lambda)=0$ maka $\sin(2\pi L/\lambda)=0$, sehingga:

$$\frac{2L}{\lambda} = n;\ n = 1, 2, .....$$ n disebut nomor modus normal.

maka: $$\psi_n(x) = C\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$$

Akhirnya: $$\psi_n(x,t) = B\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\sin(\omega t + \delta)$$

## 2.2 Persamaan Schrödinger

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:

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

Sebagai gelombang, kecepatan fasa gelombang partikel itu

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

Misalkan $\psi(x,t)$ 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 $\psi(x,t)$ memenuhi

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

Mengingat $E = \hbar\omega$ dan $\hbar = h/2\pi$

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

Akhirnya diperoleh persamaan:

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

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(-i$\omega$t)* 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 *$\psi$(x)* dan energi E dari partikel bersangkutan merupakan solusi yang harus dicari dari persamaan tersebut.

Persamaan Schrödinger di atas dapat dituliskan sebagai berikut

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

dengan $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$ disebut hamiltonian partikel, yakni operator energi total dari partikel.

Dalam bahasa matematik, *E* adalah harga eigen dari operator H dengan fungsi eigen $\psi(x)$. Persamaan (*) disebut persamaan harga eigen.

Turunan pertama terhadap waktu untuk fungsi gelombang $\psi(x,t)$ dalam hal. 14 adalah:

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

Karena $E=\hbar\omega$ maka diperoleh

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

Ini disebut persamaan Schrödinger yang bergantung waktu bagi sebuah partikel .

## 2.3 Sifat-sifat suatu Fungsi Gelombang

Untuk fungsi gelombang partikel yang tidak bergantung waktu, $\psi(x)$,
$|\psi(x)|^2 dx$ disebut peluang menemukan partikel di antara x dan x+dx.

$|\psi(x)|^2$ rapat peluang partikel berada di x

Total peluang untuk menemukan partikel itu disepanjang sumbu-x adalah:

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

$\psi^*$ adalah konjugasi dari $\psi$.

Fungsi $\psi(x)$ yang memenuhi persamaan di atas disebut fungsi yang dinormalisasi, sedangkan disebut rapat peluang.

Suatu fungsi gelombang partikel harus memiliki kelakuan yang baik, yakni:

- tidak sama dengan nol dan bernilai tunggal, artinya untuk suatu harga x, $\psi(x)$ memiliki hanya satu harga saja.
- fungsi dan turunannya kontinu di semua harga x, dan
- fungsi (harga mutlaknya) tetap terbatas (finite) untuk x menuju $\pm\infty$;

Contoh: $\psi(x) = C\sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = C^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1$$

$\sin^2\theta=(1-\cos 2\theta)/2$, maka hasil integral di atas adalah $C^2(L/2)=1$ sehingga $C=\sqrt{2/L}$

Jadi secara lengkap fungsi yang dinormalisasi adalah

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

Jika $\psi(x)$ adalah <u>kombinasi linier dari sekumpulan fungsi-fungsi</u> $\{\varphi_n(x)\}$, maka penulisannya secara umum adalah seperti:

$$\psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x)$$

$c_n$ adalah koefisien bagi fungsi $\varphi_n(x)$ yang bisa ril atau kompleks.

$$c_m = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^*(x)\psi(x)\,dx$$

Jika $\varphi_n(x)$ adalah fungsi-fungsi yang dinormalisasi dan ortogonal satu sama lain.

Jika fungsi-fungsi $\{\varphi_n(x)\}$ selain ternormalisasi juga ortogonal (disebut ortonormal) satu sama lain maka berlaku

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^*(x)\,\varphi_n(x)\,dx = \delta_{mn} \begin{cases} =1; & m=n \\ =0; & \text{lainnya} \end{cases}$$

$\delta$ disebut kronecker delta

Jika $\psi(x)$ fungsi yang dinormalisasi, maka

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1 \longrightarrow \sum_{m,n} c_m^* c_n \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m^*(x)\varphi_n(x)dx = 1 \longrightarrow \sum_{m,n} c_m^* c_n \delta_{mn} = 1$$

Jadi, $\sum_n c_n^* c_n = 1$

Untuk memudahkan penulisan, fungsi-fungsi dituliskan dalam ket seperti $\left|\varphi_n\right\rangle$ dan konjugasinya dalam bra seperti $\left\langle\varphi_n\right|$

Integral overlap dituliskan seperti:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_k^*(x)\,\varphi_l(x)\,dx = \left\langle \varphi_k \middle| \varphi_l \right\rangle$$

Ortogonalisasi Schmidt

Andaikan $\phi_1$ dan $\phi_2$ adalah fungsi-fungsi yang non-ortogonal satu terhadap lainnya.

Misalkan $\varphi_1=\phi_1$, lalu pilih $\varphi_2=\phi_2+\alpha\phi_1$. Besarnya $\alpha$ dihitung atas dasar $\varphi_1$ dan $\varphi_2$ yang ortogonal satu sama lain.

$$\int \varphi_1^* \varphi_2 \, dx = \int \phi_1^* \phi_2 \, dx + \alpha \int \phi_1^* \phi_1 \, dx = 0$$

$$\alpha = -\frac{\int \phi_1^* \phi_2 \, dx}{\int \phi_1^* \phi_1 \, dx}$$

## 2.4 Operator Fisis

Setiap besaran fisis suatu partikel dikaitkan dengan operatornya; misalnya operator bagi energi total adalah $\hat{H}$ seperti diperlihat dalam persamaan:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

Operator energi potensial

Operator energi kinetik

Bagi suatu operator besaran fisis berlaku istilah matematik berikut:

1. Harga suatu besaran fisis adalah *nilai eigen* dari *operatornya*;
2. Setiap *nilai eigen* dari suatu *operator* berkaitan dengan suatu *fungsi eigen*; nilai eigen adalah ril.

Persamaan harga eigen:

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

fungsi eigen partikel

nilai eigen; energi partikel

operator energi total; disebut hamiltonian partikel

3. Secara umum harga rata-rata suatu besaran fisis pada fungsi keadaannya memenuhi persamaan

operator besaran fisis

$$A_{av} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\hat{A}\,\psi(x)\,dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,\psi(x)\,dx}$$

fungsi keadaan partikel

harga rata-rata besaran fisis

Bagi fungsi keadaan yang dinormalisasi

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

Andaikan: $\hat{A}\varphi_n(x) = a_n\,\varphi_n(x)$

$$\psi(x) = \sum_n c_n \varphi_n(x)$$

Jika $\{\varphi_n\}$ adalah fungsi-fungsi yang ortonormal

$$A_{av} = \int \psi^*(x)\hat{A}\psi(x)\,dx = \sum_{mn} c_m^* c_n \int \varphi_m^*(x)\hat{A}\varphi_n(x)dx$$

$$= \sum_{mn} c_m^* c_n a_n \int \varphi_m^*(x)\varphi_n(x)dz = \sum_{mn} c_m^* c_n a_n \delta_{mn}$$

$$= \sum_n c_n^* c_n a_n$$

Karena harga rata-rata suatu besaran fisis adalah ril maka berlaku

$$\int \psi^*(x)\hat{A}\psi(x)dx = \int [\hat{A}\psi(x)]^* \psi(x)dx$$

Secara matematik, operator yang memenuhi persamaan di atas disebut <u>operator hermitian.</u>

Operator momentum:

Menurut de Broglie, sebuah partikel yang bergerak sepanjang sumbu-x mempunyai momentum linier $p_x = \hbar k$ dengan $k=2\pi/\lambda$. Fungsi gelombang partikel itu adalah .

$$\varphi(x) = ae^{ikx}$$

Bagaimanakah bentuk operator momentum yang memiliki harga eigen $p_x = \hbar k$ ?
Untuk itu berlaku persamaan nilai eigen:

$$\hat{p}_x \varphi(x) = \hbar k \, \varphi(x)$$

$$\varphi(x) = ae^{ikx} \longrightarrow \hbar k \varphi(x) = -i\hbar \frac{d\varphi(x)}{dx}$$

$$\hat{p}_x \varphi(x) = \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)\varphi(x)$$

Jadi operator momentum linier adalah:

$$\hat{p}_x \equiv -i\hbar \frac{d}{dx}$$

Ingat, energi kinetik:

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

Secara umum, operator momentum:

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

Komutator:

Tinjau dua buah operator: $\hat{A}$ dan $\hat{B}$

Jika keduanya merupakan operator besaran fisis maka didefinisikan komutatornya seperti

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

Jika $[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \longrightarrow$ Kedua operator disebut komut.

Contoh, tentukan komutator operator-operator *x* dan *d/dx* ! Gunakan fungsi $\varphi$(x) sebagai alat bantu:

$$\begin{aligned}[x, \frac{d}{dx}]\varphi(x) &= x[\frac{d\varphi(x)}{dx}] - \frac{d}{dx}[x\varphi(x)] \\ &= x\frac{d\varphi(x)}{dx} - \varphi(x) - x\frac{d\varphi(x)}{dx} \\ &= -\varphi(x)\end{aligned}$$

Jadi: $\left[x, \frac{d}{dx}\right] = -1$ Buktikan: $\left[\frac{d}{dx}, x\right] = 1$

Dua buah operator yang komut satu sama lain, mempunyai fungsieigen yang sama.

$$\hat{A}\psi = a\psi; \ \hat{B}\psi = b\psi$$

$$\hat{A}\overleftarrow{B}\psi - \hat{B}\hat{A}\psi = ba\psi - ab\psi = 0$$

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

## 2.5 Persamaan Gerak Heisenberg

Secara umum jika $A_{av}$ adalah harga rata-rata operator $\hat{A}$ besaran fisis dengan fungsi gelombang $\psi(x,t)$ maka:

$$A_{av} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t)\,\hat{A}\psi(x,t)\,dx$$

Variasi harga rata-rata itu terhadap waktu adalah

$$\frac{dA_{av}}{dt} = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\psi + \frac{\partial \psi^*}{\partial t}\hat{A}\psi + \psi^* \hat{A}\frac{\partial \psi}{\partial t} \right) dx$$

Mengingat: $\hat{H}\psi(x) = i\hbar \dfrac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}$ dan $\left[\hat{H}\psi(x)\right]^* = -i\hbar \dfrac{\partial \psi^*(x,t)}{\partial t}$

$$\frac{\partial \psi^*}{\partial t}\hat{A}\psi + \psi^* \hat{A}\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\psi^* \hat{H}\hat{A}\psi + \frac{1}{i\hbar}\psi^* \hat{A}\hat{H}\psi = \frac{1}{i\hbar}\psi^*\left[\hat{A}\hat{H} - \hat{H}\hat{A}\right]\psi = \frac{1}{i\hbar}\psi^*\left[\hat{A},\hat{H}\right]\psi$$

maka $$\frac{dA_{av}}{dt} = \int \psi^* \left( \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[\hat{A},\hat{H}] \right) \psi\, dx$$

Jadi, $\frac{dA_{av}}{dt} = \int \psi^* \frac{d\hat{A}}{dt} \psi \, dx$ dengan $\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}, \hat{H}\right]$

$\frac{d\hat{A}}{dt}$ Operator turunan dari $\hat{A}$

$\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}$ Turunan dari $\hat{A}$

Jika operator $\hat{A}$ komut dengan $\hat{H}$, maka $\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}$

Jika operator $\hat{A}$ selain komut dengan $\hat{H}$, juga tak bergantung waktu: $\frac{d\hat{A}}{dt} = 0$
Besaran fisis seperti itu disebut tetapan gerak dari partikel (kekal dalam pengertian klasik).

## 2.6 Representasi Matriks

Tinjau persamaan harga eigen: $\hat{A}\psi = a\psi$

Misalkan: $\psi = \sum_{i=1}^{N} c_i \phi_i$

maka $$\sum_j c_j \hat{A}\phi_j = a\sum_j c_j \phi_j$$

Kalikan dari dengan $\phi_i^*$

$$\sum_j c_j \int \phi_i^* \hat{A}\phi_j d\tau = a\sum_j c_j \int \phi_i^* \phi_j d\tau \longrightarrow \sum_j c_j A_{ij} = ac_i$$

$$\begin{aligned}
&A_{11}c_1 + A_{12}c_2 + \ldots\ldots\ldots + A_{1N}c_N = ac_1 \\
&A_{21}c_1 + A_{22}c_2 + \ldots\ldots\ldots + A_{2N}c_N = ac_2 \\
&A_{31}c_1 + A_{32}c_2 + \ldots\ldots\ldots + A_{3N}c_N = ac_3 \\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\
&A_{N1}c_1 + A_{N2}c_2 + \ldots\ldots\ldots + A_{NN}c_N = ac_N
\end{aligned}
\Longrightarrow
\begin{pmatrix}
(A_{11}-a) & A_{12} & A_{13} \ldots\ldots\ldots & A_{1N} \\
A_{21} & (A_{22}-a) & A_{23} \ldots\ldots\ldots & A_{2N} \\
A_{31} & A_{32} & (A_{33}-a) \ldots\ldots & A_{3N} \\
\ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots & \ldots\ldots \\
A_{N1} & A_{N2} & A_{N3} \ldots\ldots & (A_{NN}-a)
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \ldots \\ c_N \end{pmatrix} = 0$$

Jika elemen-elemen $A_{ij}$ diketahui maka harga a dapat ditentukan sebagai solusi dari polinom yang diperoleh dari determinan:

$$\begin{vmatrix} (A_{11}-a) & A_{12} & A_{13} & \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & A_{1N} \\ A_{21} & (A_{22}-a) & A_{23} & \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & A_{2N} \\ A_{31} & A_{32} & (A_{33}-a) & \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & A_{3N} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots & \\ A_{N1} & A_{N2} & A_{N3} & \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & (A_{NN}-a) \end{vmatrix} = 0$$

<u>Contoh</u>

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} -a & 1 \\ 1 & -a \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0$$

$$\begin{vmatrix} -a & 1 \\ 1 & -a \end{vmatrix} = 0 \longrightarrow a^2\text{-}1\text{=}0, \qquad a_1\text{=-}1 \text{ dan } a_2\text{=}1.$$

Dengan $a_1$ diperoleh $c_1 = -c_2 = 1/\sqrt{2}$ $\longrightarrow$ $\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2)$

dengan $a_2$ diperoleh $c_1 = c_2 = 1/\sqrt{2}$ $\longrightarrow$ $\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$

# BAB 3
# SISTEM DENGAN POTENSIAL SEDERHANA

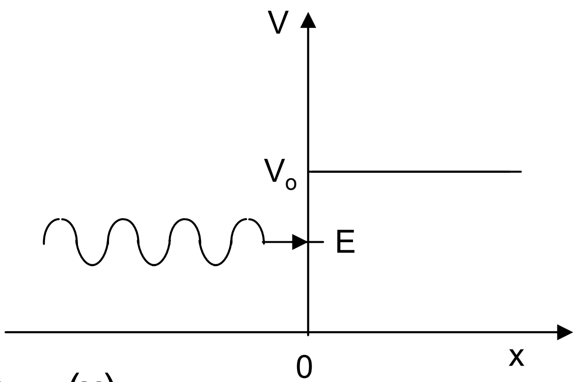
Persamaan Schrödinger untuk 1 partikel yang tidak bergantung waktu untuk suatu partikel

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - V)\psi = 0 \qquad \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V\right)\psi = E\psi$$

dapat diselesaikan jika bentuk potensial V diketahui sebelumnya.

## 3.1 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 $\psi_1(x)$.

$$\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + E\psi_1 = 0 \longrightarrow \psi_1(x) = \underset{\text{gelombang datang}}{\underset{\uparrow}{Ae^{ikx}}} + \underset{\text{gelombang pantul.}}{\underset{\uparrow}{Be^{-ikx}}};\; k^2 = \frac{2m_eE}{\hbar^2}$$

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

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

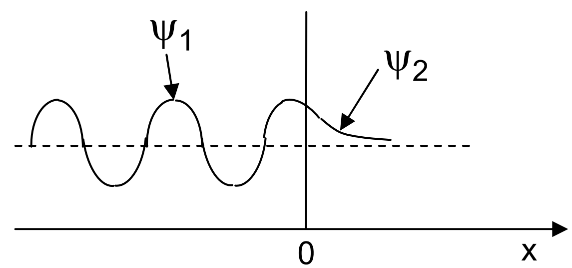
Karena E<$V_o$, maka solusi bagi fungsi $\psi_2$*(x)* merupakan fungsi eksponensial menurun seperti:

$$\psi_2(x)=Ce^{-Kx} \qquad K^2=\frac{2m_e(V_o-E)}{\hbar^2}=\frac{2m_eV_o}{\hbar^2}-k^2$$

Di x=0, $\psi_1$ dan $\psi_2$ harus bersambung agar fungsi gelombang itu kontinu;

Syarat kontinu:

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




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

$$B=\frac{k-iK}{k+iK}A; \quad C=\frac{2k}{k+iK}A \longrightarrow \begin{cases} \psi_1(x)=Ae^{ikx}+\dfrac{k-iK}{k+iK}Ae^{-ikx}; \; x<0 \\ \psi_2(x)=\dfrac{2k}{k+iK}Ae^{-Kx}; \; x>0 \end{cases}$$

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

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

Jadi, meskipun mengalami potensial penghalang yang lebih besar dari energinya, elektron masih mempunyai peluang berada di $x$>0.

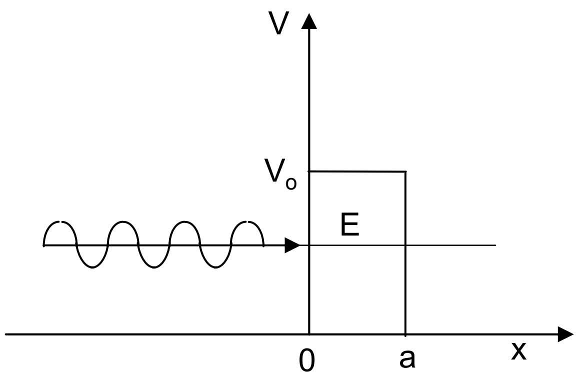
Peluang itu menuju nol jika $V_o \gg E$, atau di $x=\infty$.

$|C/A|^2 = 4k/(k^2+K^2) = 4E/V_o$ adalah koefisien transmisi yang secara klasik tak dapat diramalkan.

## 3.2 Potensial Tangga Persegi

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

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




Sepanjang perjalanannya energi total elektron, $E < V_o$.

Karena V=0, fungsi gelombang elektron sebagai solusi persamaan Schrodinger dalam daerah x<0 sama dengan:

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}; \quad k^2 = \frac{2m_e E}{\hbar^2}$$

Dalam daerah 0<x<a, karena E<$V_o$: fungsi gelombang sebagai solusi persamaan Schrodinger adalah

$$\psi_2(x) = Ce^{Kx} + De^{-Kx} \qquad K^2 = \frac{2m_e(V_o - E)}{\hbar^2} = \frac{2m_e V_o}{\hbar^2} - k^2$$

Di daerah *x*>a, V=0; maka fungsi gelombang di sana adalah:

$$\psi_3(x) = Fe^{ikx}$$ Hanya arah ke kanan saja.

Syarat kontinuitas di *x*=0 dengan menggunakan fungsi-fungsi $\psi_1(x)$ dan $\psi_2(x)$, akan memberikan hubungan:

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

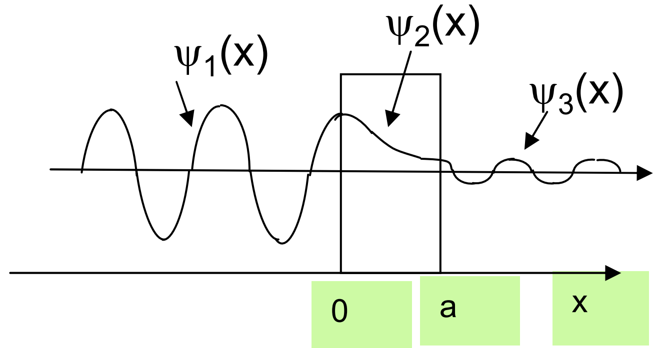
dan syarat kontinuitas di *x*=*a* dengan menggunakan $\psi_2(x)$ dan $\psi_3(x)$, memberikan

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

Dengan mengeliminasi *C* dan *D*, akan diperoleh:

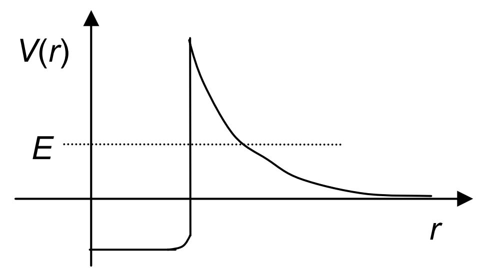
$$\frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{V_o^2 \sinh^2(Ka)}{V_o^2 \sinh^2(Ka) + 4E(V_o - E)} \qquad \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{4E(V_o - E)}{V_o^2 \sinh^2(Ka) + 4E(V_o - E)}$$

Ilustrasi fungsi gelombang-fungsi gelombang:



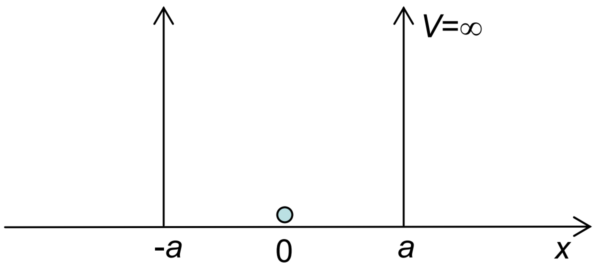

$|B|^2/|A|^2$ merupakan koefisien pantulan di $x$=0 dan $|F|^2/|A|^2$ adalah koefisien transmisi di $x$=$a$. Jadi, secara kuantum elektron dapat menerobos potensial penghalang meskipun energinya lebih kecil daripada potensial penghalang. Fenomena inilah yang disebut sebagai efek terobosan (*tunnel effect*).

Terobosan partikel berlangsung dalam peluruhan radioaktif. Suatu partikel-$\alpha$ (= inti atom He) mengalami gaya dorong elektrostatik inti hingga jarak $10^{-8}$ $\mu$m dari inti Uranium. Kurang dari jarak itu gaya bersifat tarikan dan berbentuk sumur potensial seperti diperlihat-kan dalam Gb. Partikel-$\alpha$ dalam sumur itu dapat menerobos penghalang (tarikan) dan selanjutnya terdorong keluar. Eksperimen menunjukkan bahwa energi partikel itu lebih kecil daripada penghalang.



## 3.3 Sumur Potensial Persegi Tak Terhingga

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




$$V(x) = 0; \quad -a < x < a$$
$$= \infty; \quad x \geq a, \; x \leq -a$$

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 $\psi(x)$ adalah fungsi gelombangnya, maka

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

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

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

Solusinya adalah $\psi(x) = C\cos kx$ dan $\psi(x) = D\sin kx$

Dengan syarat batas di *x*=*a* diperoleh

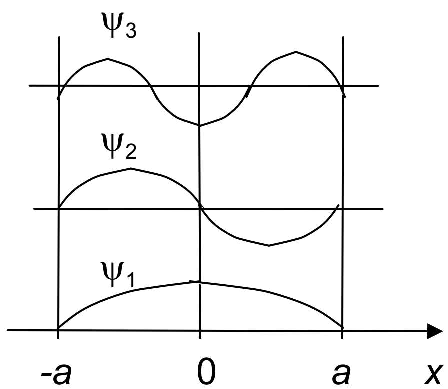
$$\psi_n(x) = C\cos(n\pi x/2a) \quad \text{untuk n=1,3,5,…}$$

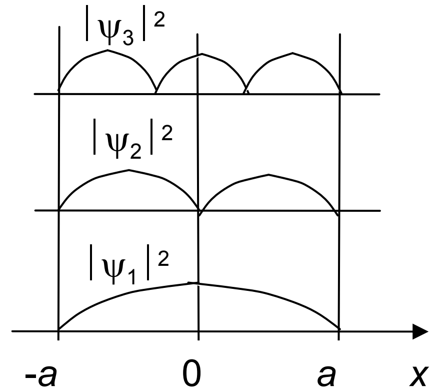
$$\psi_n(x) = D\sin(n\pi x/2a) \quad \text{untuk n=2,4,6 ...}$$

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:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right);\ n = 1,3,5\ldots\ldots \qquad .\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right);n = 2,4,6\ldots\ldots$$

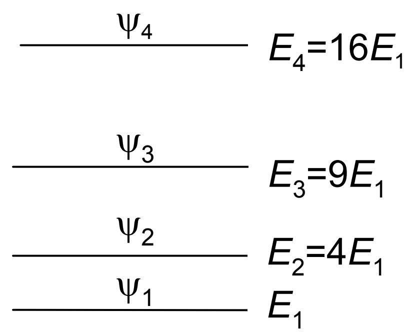



Fungsi-fungsi ini membentuk set ortonormal; artinya: $\int \psi_n^*(x)\psi_{n'}(x)\,dx = \delta_{nn'}$

Selanjutnya, diperoleh harga eigen energi:

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

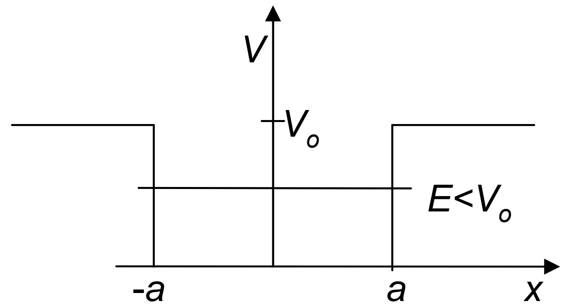



Energi ini berharga diskrit (tidak kontinu, tapi bertingkat-tingkat) ditandai oleh bilangan kuantum *n*.

## 3.4 Sumur Potensial Persegi Terhingga

Misalkan elektron terperangkap dalam sumur potensial terhingga seperti:

$$V(x) = 0; \quad -a < x < a$$
$$= V_o; \quad x \geq a,\ x < -a$$




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: $\psi(\pm\infty) = 0$

Persamaan Schrödinger untuk daerah $-a<x<a$ adalah:

$$\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2\psi}{dx^2} + E\psi = 0 \rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \qquad k^2 = \frac{2m_e E}{\hbar^2}$$

dengan mana diperoleh solusi berikut:

$\psi(x) = \cos kx$ dan $\psi(x) = \sin kx$ di mana

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

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

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

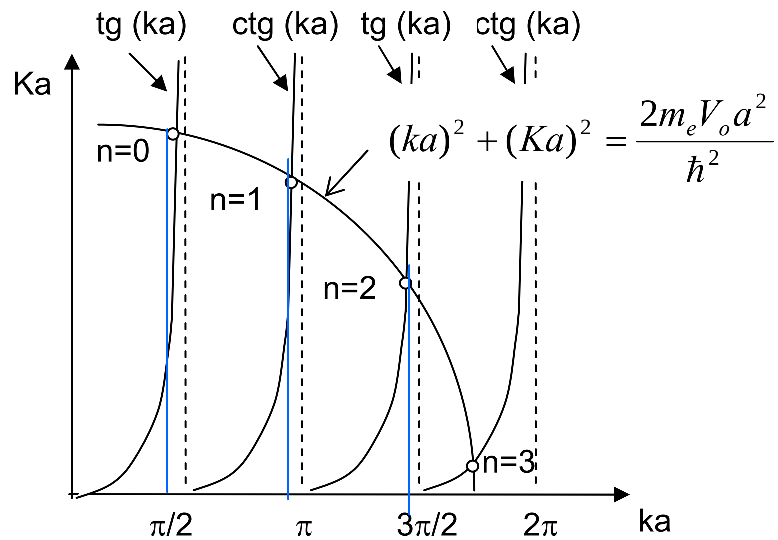
$$\psi(x) = Ce^{-K|x|} \quad \text{dengan} \quad K^2 = \frac{2m_e(V_o - E)}{\hbar^2}$$

Syarat kontinu di $x=\pm a$ :

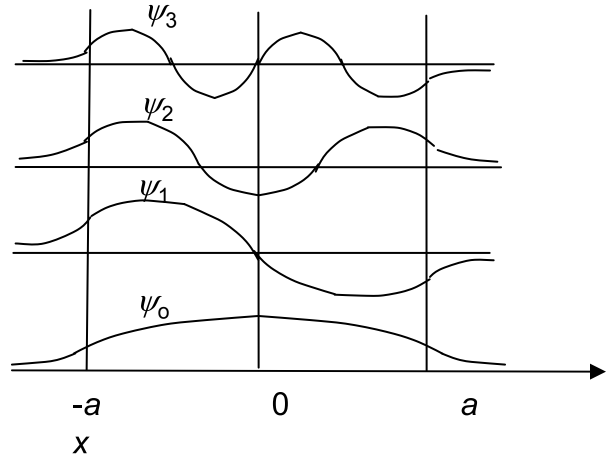
$$\left.\begin{aligned} \cos ka &= Ce^{-Ka} \\ -k \sin ka &= -KCe^{-Ka} \end{aligned}\right. \longrightarrow ka\ tg\ ka = Ka$$

$$\left.\begin{aligned} \sin ka &= Ce^{-Ka} \\ k \cos ka &= -KCe^{-Ka} \end{aligned}\right. \longrightarrow ka\ ctg\ ka = -Ka$$

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




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




Jelas bahwa meskipun potensial yang dialami elektron itu terhingga, namun karena $E<V_o$, energinya tetap diskrit.

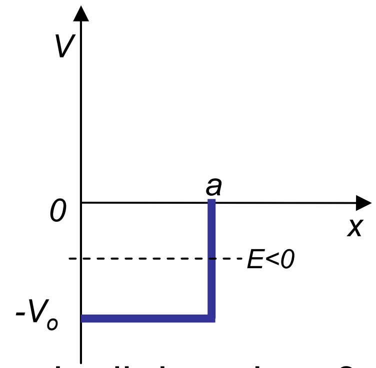
Keadaan energi yang diskrit itu merupakan ciri dari partikel yang terikat dalam sumur potensial.

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.

Quantum well, quantum dot, quantum wire adalah pengembangan dari kasus ini dalam riset-riset laser dan optik.

## 3.5 Sumur Potensial Persegi dengan Dinding

Misalkan pertikel berada dalam sumur potensial terhingga seperti:




$$\begin{aligned} V(x) &= \infty; \quad x \le 0 \\ &= -V_o; \quad 0 < x < a \\ &= 0; \quad x \ge a \end{aligned}$$

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

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

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

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

Solusinya:

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

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

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

Persamaan Schrödinger di daerah x>a adalah:

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

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

$$\psi_2(x) = D\,e^{-Kx}$$

Syarat kontinu di *x*=*a* harus memenuhi $\psi_1=\psi_2$ dan $d\psi_1/dx=d\psi_2/dx$. Jadi,

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

dan $$ka\,ctg\,(ka) = -Ka$$

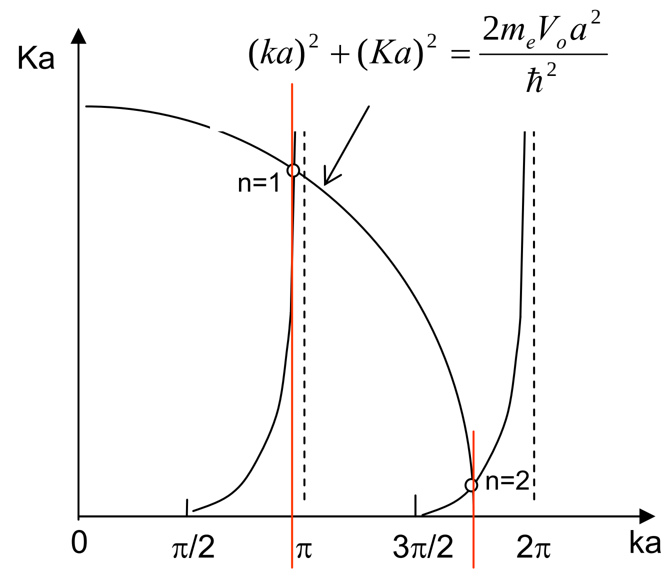
Di pihak lain: $$k^2a^2 + K^2a^2 = \frac{2m_eV_oa^2}{\hbar^2}$$

Dari kedua persamaan ini diperoleh grafik berikut:

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

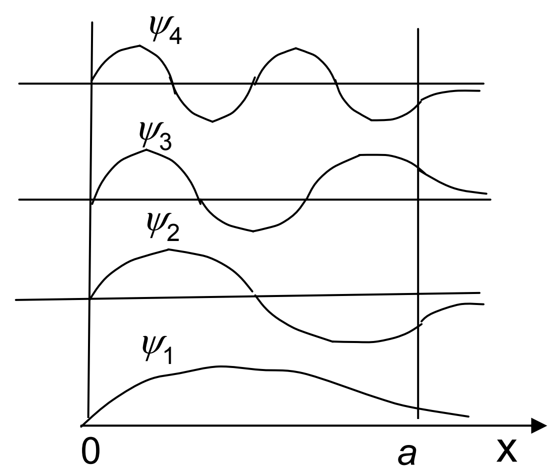
$$E_n = \frac{k_n^2 \hbar^2}{2m_e} - V_o \quad \text{atau} \quad E_n = -\frac{K_n^2 \hbar^2}{2m_e}$$

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

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



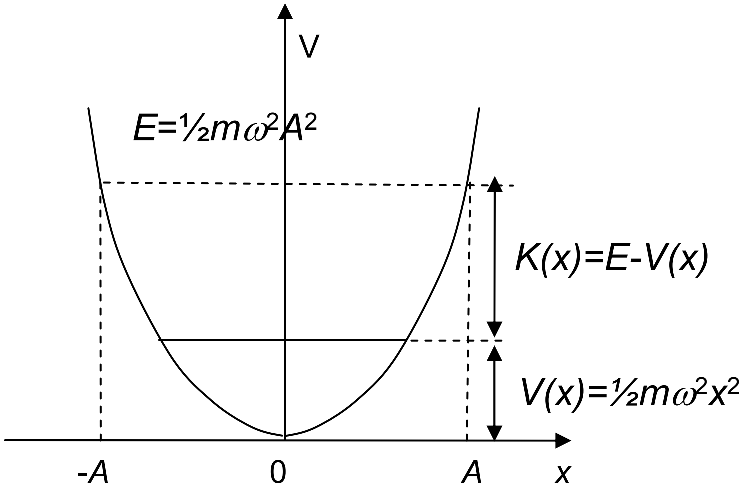
## 3.6 Osilator Harmonis Sederhana

Dalam mekanika klasik, osilator harmonis sederhana adalah benda yang bergerak osilasi dengan simpangan kecil dalam pengaruh gaya konservatif:

$$\vec{F} = -m\omega^2 \vec{x}$$

m adalah massa, dan $\omega$ adalah $2\pi$ x frekuensi; gerak osilasi berbentuk sinusoida dengan amplitudo A adalah:

$$x(t) = A \sin \omega t$$




Dengan gaya konservatif tersebut, energi potensial yang dimiliki benda adalah:

$$V(x) = -\int_0^x \vec{F}.d\vec{x} = \tfrac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

Energi total sebagai jumlah energi potensial (V) dan energi kinetik (K) diperlihatkan dalam:

$$E = \tfrac{1}{2} m\omega^2 A^2$$

Jadi, secara klasik osilator memiliki energi tunggal.

Bagaimana pandangan fisika kuantum?

Persamaan Schrödinger untuk suatu partikel berosilasi adalah:

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

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\tfrac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi(x)=0$$

Lakukan penyederhanaan: $a=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}};\ \ c=\frac{2E}{\hbar\omega};\ \ z=ax$

$$\frac{d^2\psi(z)}{dz^2}+(c-z^2)\psi(z)=0$$

Persamaan ini dapat diselesaikan dalam dua tahap.

Tahap pertama: untuk z yang besar *c* dapat diabaikan: (appr. Asimtotik)

$$\psi(z)\propto e^{-z^2/2}$$

Tahap berikutnya, nyatakan fungsi lengkap seperti:

$$\psi(z)=H(z)\,e^{-z^2/2}$$

Persamaan Schrodinger menjadi:

$$\frac{d^2 H(z)}{dz^2} - 2z\frac{dH}{dz} + (c-1)H = 0$$

merupakan persamaan <u>diferensial Hermite</u>. Solusinya adalah <u>polinom Hermite</u> sebagai berikut:

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n}\left(e^{-z^2}\right); \quad n = 0,1,2,\ldots\ldots\ldots\ldots \qquad n = \tfrac{1}{2}(c-1) = 0,\ 1,\ 2,\ \ldots\ldots$$

sehingga fungsi-fungsi eigen (keadaan) adalah:

$$\psi_n(z) = N_n H_n(z) e^{-\frac{1}{2}z^2}\ ;\ N_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n! \pi^{1/2}}}$$

$$\psi_n(x) = N_n H_n(ax) e^{-\frac{1}{2}a^2x^2}\ ;\ N_n = \sqrt{\frac{a}{2^n n! \pi^{1/2}}} \qquad \psi_n(x) = \sqrt{a}\,\psi_n(z)$$

di mana adalah faktor normalisasi dan *n* merupakan bilangan kuantum .

Contoh fungsi-fungsi keadaan:

$$\left.\begin{aligned} H_o(z) = 1 &\longrightarrow \psi_o(z) = \sqrt{\pi^{-\frac{1}{2}}}\, e^{-\frac{1}{2}z^2} \\ H_1(z) = 2z &\longrightarrow \psi_1(z) = \sqrt{2\pi^{-\frac{1}{2}}}\, z e^{-\frac{1}{2}z^2} \\ H_2(z) = 4z^2 - 2 &\longrightarrow \psi_2(z) = \sqrt{\tfrac{1}{2}\pi^{-\frac{1}{2}}}\,(2z^2 - 1) e^{-\frac{1}{2}z^2} \end{aligned}\right\}$$

Fungsi-fungsi eigen ini membentuk set yang ortonormal.

Dari $c = \dfrac{2E}{\hbar\omega}$ dan $n = \frac{1}{2}(c-1)$

diperoleh energi eigen (keadaan) bersangkutan:

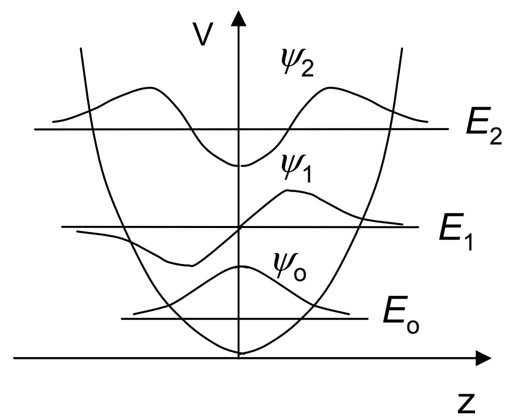
$$E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega;\ n = 0,1,2,......$$

Terlihat bahwa, karena partikel terperangkap dalam potensial *V,* maka energinya diskrit. Frekuensi osilator lebih kurang sama dengan frekuensi bunyi; oleh sebab itu, $\hbar\omega$ disebut fonon. Jadi, fungsi keadaan $\psi_n$ dikatakan mengandung n buah fonon.

Untuk lebih jelasnya, fungsi-fungsi keadaan diperlihatkan dalam gambar. Fungsi keadaan

$$\psi_o(z) = \sqrt{\pi^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}z^2}}$$

disebut keadaan dasar dengan energi $E_o = ½\hbar\omega$.



Sifat-sifat penting polinom Hermite:

(i). Hubungan rekursif:

$$H_{n+1}(z) = 2z\,H_n(z) - 2n\,H_{n-1}(z)$$

$$\frac{dH_n(z)}{dz} = 2n\,H_{n-1}(z)$$

(ii). Sifat ortogonalitas:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} H_m(z)\,H_n(z)\,dz = 2^n\,n!\pi^{1/2}\delta_{mn}$$

Dengan sifat-sifat di atas, diperoleh sifat-sifat fungsi keadaan:

(i) Hubungan rekursif:

$$\psi_{n+1}(z) = \sqrt{\frac{2}{n+1}}z\psi_n(z) - \sqrt{\frac{n}{n+1}}\psi_{n-1}(z)$$

$$\frac{d\psi_n(z)}{dz} = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(z) - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(z)$$

(ii) Sifat ortonormalitas:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(z)\psi_n(z)dz = \delta_{mn}$$

Contoh:

1. Hitunglah gaya pegas rata-rata.

$$F = -m\omega^2 x$$

$$F_{ave} = -m\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) x \psi_n(x) dx = -\omega\sqrt{m\hbar\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(z) z \psi_n(z) dz$$

2. Hitunglah harga rata-rata energi potensial.

$$V = \tfrac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$$V_{ave} = \tfrac{1}{2} m\omega^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) x^2 \psi_n(x) dx = \tfrac{1}{2}\hbar\omega \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(z) z^2 \psi_n(z) dz$$

3. Hitunglah harga rata-rata energi kinetik

$$K = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

$$K_{ave} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x) \left[\frac{d^2}{dx^2}\psi_n(x)\right] dx = -\tfrac{1}{2}\hbar\omega \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(z) \left[\frac{d^2}{dz^2}\psi_n(z)\right] dz$$

Ungkapan lain dari osilator harmonik

$$\left.\begin{array}{r}\dfrac{d^2\psi_n(z)}{dz^2}+(c-z^2)\psi_n(z)=0\\ c=\dfrac{2E_n}{\hbar\omega}\end{array}\right\}\left(-\frac{d^2}{dz^2}+z^2\right)\psi_n(z)=2(n+\tfrac{1}{2})\psi_n(z)$$

Misalkan:

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}(z+\frac{d}{dz});\hat{a}^{+}=\frac{1}{\sqrt{2}}(z-\frac{d}{dz});\longrightarrow 2\hat{a}^{+}\hat{a}+1\equiv 2\hat{a}\hat{a}^{+}-1=-\frac{d^2}{dz^2}+z^2$$

$$\left.\right\}\begin{array}{l}\hat{a}^{+}\hat{a}\psi_n=n\psi_n\\ \hat{a}\hat{a}^{+}\psi_n=(n+1)\psi_n\end{array}$$

Operator $\hat{a}^{+}\hat{a}$ mempunyai nilai eigen *n* dengan fungsi keadaan $\psi_n$; karena *n* menyatakan jumlah fonon dalam keadaan $\psi_n$ maka operator ini disebut operator okupasi.

Karena $\frac{1}{2}\hbar\omega(2\hat{a}\hat{a}^{+}-1)\psi_n(z)=\hbar\omega(n+\frac{1}{2})\psi_n(z)$

maka $\hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^{+}-\tfrac{1}{2})$ merupakan operator hamiltonian.

Selanjutnya,

$$\hat{a}^{+}\psi_n=\tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(z-\frac{d}{dz}\right)\psi_n=\sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}\quad \hat{a}\psi_n=\tfrac{1}{\sqrt{2}}(z+\frac{d}{dz})\psi_n=\sqrt{n}\,\psi_{n-1}$$

Terlihat, operator $\hat{a}^{+}$ mengubah $\psi_n$ menjadi $\psi_{n+1}$; artinya menambah jumlah fonon. Dengan alasan itu operator ini disebut operator kreasi, sedangkan $\hat{a}$ disebut operator anihilasi.

### 3.8 Transisi dan Aturan Seleksi

Suatu medan listrik yang berosilasi, jika berinteraksi dengan elektron, akan menggeser posisi elektron dari posisi stasionernya. Pergeseran itu akan menimbulkan suatu momen dipol . Selanjutnya, dipol itu berinteraksi dengan medan menimbulkan Hamiltonian

Misakan medan listrik: $E=E_o \cos \omega t$ dan dipol listrik elektron: $\mu=er$

Interaksi dipol dan medan menimbulkan Hamiltonian:

$$\hat{H}_D = \vec{\mu}.\vec{E} = e\vec{E}_o.\vec{r} \cos \omega t$$

Interaksi itu memungkinkan elektron bertransisi (berpindah keadaan) dari keadaan awal $\psi_i$ ke keadaan akhir $\psi_f$. Probabilitas transisi diungkapkan sebagai berikut:

$$P_{if} \propto \left| e\int \psi_i^*(r)[\vec{E}_o.\vec{r}]\psi_f(r)\,dv \right|^2$$

$$\propto \left| e\int \psi_i^*(r)[E_{ox}.x + E_{oy}y + E_{oz}z]\psi_f(r)\,dv \right|^2$$

$$\propto \sum_\alpha E_{o\alpha}^2 \left| M_{if}^{(\alpha)} \right|^2;\ \alpha = x, y, z$$

di mana $M_{if}^{(x)} = e\int \psi_i^*(r) x \psi_f(r)\,dv$ disebut komponen-x dari momen transisi.

Transisi dari suatu keadaan $\psi_i$ ke keadaan $\psi_f$ disebut terlarang (*forbidden*) jika $M_{if}=0$; sebaliknya transisi diperbolehkan (*allowed*) jika $M_{if} \neq 0$.

Contoh:

Dalam sistem dengan sumur potensial tak hingga, buktikan bahwa momen transisi elektron tidak sama dengan nol jika $|m \pm n|$ sama dengan suatu bilangan ganjil.

$$M_{mn}^{(x)} = e\int \psi_m^* \, x \, \psi_n \, dx$$

Periksa m,n=2,4,6…., $|m-n| = genap$

$$M_{mn} = e\frac{1}{a}\int_{-a}^{a} \sin\left(\frac{m\pi}{2a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right) \, x \, dx$$ Misalkan πx/2a=θ

$$M_{mn} = e\frac{4a}{\pi^2}\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\sin(m\theta)\sin(n\theta)\theta \, d\theta = e\frac{2a}{\pi^2}\left[\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos[(m-n)\theta] \, \theta \, d\theta - \int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos[(m+n)\theta] \, \theta \, d\theta\right]$$

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos[(m\pm n)\theta] \, \theta d\theta = \theta\frac{\sin[(m\pm n)\theta]}{m\pm n}\Bigg|_{-\pi/2}^{\pi/2} - \int_{-\pi/2}^{\pi/2}\frac{\sin[(m\pm n)\theta]}{m\pm n}d\theta$$

$$= 0 + \frac{\cos[(m\pm n)\theta]}{(m\pm n)^2}\Bigg|_{-\pi/2}^{\pi/2} = 0 \rightarrow M_{mn} = 0$$

Periksa m,n=1,3,5…., $|m-n| = genap$

$$M_{mn} = e\frac{1}{a}\int_{-a}^{a}\cos\left(\frac{m\pi}{2a}x\right)\cos\left(\frac{n\pi}{2a}x\right)xdx$$

$$M_{mn} = e\frac{4a}{\pi^2}\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos(m\theta)\cos(n\theta)\theta d\theta = e\frac{2a}{\pi^2}\left[\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos[(m-n)\theta]\ \theta d\theta + \int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos[(m+n)\theta]\ \theta d\theta\right]$$

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos[(m\pm n)\theta]\ \theta d\theta = \theta\frac{\sin[(m\pm n)\theta]}{m\pm n}\Bigg|_{-\pi/2}^{\pi/2} - \int_{-\pi/2}^{\pi/2}\frac{\sin[(m\pm n)\theta]}{m\pm n}d\theta$$

$$= 0 + \frac{\cos[(m\pm n)\theta]}{(m\pm n)^2}\Bigg|_{-\pi/2}^{\pi/2} = 0 \longrightarrow M_{mn} = 0$$

Periksa m=1,3,5…., n=2,4,6…. $|m-n| = ganjil$

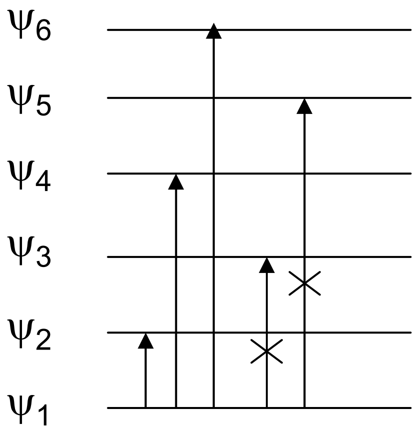
$$M_{mn} = e\frac{1}{a}\int_{-a}^{a}\cos\left(\frac{m\pi}{2a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{2a}x\right)xdx$$

$$M_{mn} = e\frac{4a}{\pi^2}\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\cos(m\theta)\sin(n\theta)\theta d\theta = e\frac{2a}{\pi^2}\left[\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\sin[(m+n)\theta]\ \theta d\theta - \int_{-\pi/2}^{\pi/2}\sin[(m-n)\theta]\ \theta d\theta\right]$$

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2}\sin[(m\pm n)\theta]\ \theta d\theta = -\theta\frac{\cos[(m\pm n)\theta]}{m\pm n}\Bigg|_{-\pi/2}^{\pi/2} + \int_{-\pi/2}^{\pi/2}\frac{\cos[(m\pm n)\theta]}{m\pm n}d\theta$$

$$= 0 + \frac{\sin[(m\pm n)\theta]}{(m\pm n)^2}\Bigg|_{-\pi/2}^{\pi/2} = \frac{2}{(m\pm n)^2}$$

$$M_{mn} = e\frac{4a}{\pi^2}\left[\frac{1}{(m+n)^2} - \frac{1}{(m-n)^2}\right] \neq 0; \; |m \pm n| = ganjil$$




Transisi dari keadaan dasar $\psi_1$ ke keadaan lebih tinggi

Contoh:

Periksalah momen transisi antara dua keadaan suatu osilator.

$$\psi_n(z) = N_n H_n(z) e^{-\frac{1}{2}z^2}; \; N_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n! \pi^{1/2}}}$$

$$M_{mn} = e\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(x) x \psi_n(x) dx \longrightarrow M_{mn} = e\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m(z) z \psi_n(z) dz$$

$$z\psi_n(z) = \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(z) + \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(z)$$

$$M_{mn} = e\sqrt{\frac{\hbar}{m_e\omega}}\left[\sqrt{\frac{n+1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m(z)\psi_{n+1}(z)dz + \sqrt{\frac{n}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m(z)\psi_{n-1}(z)dz\right]$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m(z)\psi_{n+1}(z)dz = 1 \quad jika \;\; m = n+1 \rightarrow M_{n+1,n} = e\sqrt{\frac{(n+1)\hbar}{2m_e\omega}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m(z)\psi_{n-1}(z)dz = 1 \quad jika \;\; m = n-1 \rightarrow M_{n-1,n} = e\sqrt{\frac{n\hbar}{2m_e\omega}}$$

Jelas, aturan seleksi adalah $|m\text{-}n| = 1$

Dari contoh di atas jelas bahwa $\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m(x)x\psi_n(x)dx$ punya harga jika $|m\text{-}n| = 1$.

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} 0 & x_{01} & 0 \\ x_{10} & 0 & x_{12} \\ 0 & x_{21} & 0 \end{pmatrix}$$

# BAB 4
# MOMENTUM SUDUT ELEKTRON TUNGGAL

## 4.1 Operator Momentum Sudut

Dalam mekanika klasik, momentum sudut suatu partikel merupakan perkalian vektor posisi dan vektor momentum, $\vec{L} = \vec{r} \mathrm{x} \vec{p}$

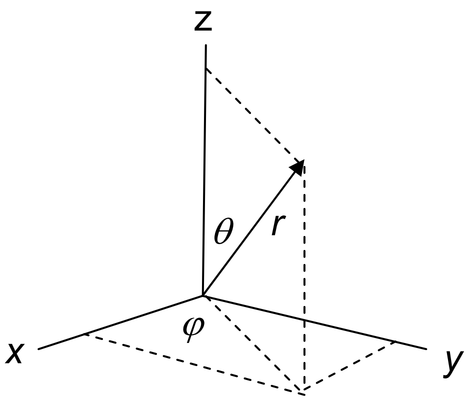
Komponen-komponennya merupakan operator-operator dari partikel tersebut:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y; \qquad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z; \qquad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right); \quad \hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right); \quad \hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Selain itu, momentum kuadrat adalah operator juga:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$




Dalam koordinat bola berlaku hubungan berikut:

$$x = r\sin\theta\cos\varphi, \; y = r\sin\theta\sin\varphi, \; z = r\cos\theta$$

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2; \; \cos\theta = \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}}; \; tg\varphi = \frac{y}{x}$$

$$\hat{L}_x = i\hbar(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + ctg\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi})$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - ctg\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi})$$

Buktikan sendiri !!

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

Komutator-komutator:

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

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_j] = 0, \ j = x, y, z.$$

Buktikan sendiri !!

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

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z$$

**4.2 Komponen-z**

Harga eigen dan fungsi eigen operator $\hat{L}_z$ dapat ditetapkan sebagai berikut. Misalkan $\Phi(\varphi)$ adalah fungsi eigen bersangkutan dengan harga eigen $L_z$ sehingga:

$$\underbrace{\hat{L}_z}_{\text{operator}}\Phi = \underbrace{L_z}_{\text{harga eigen}}\Phi$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \longrightarrow -i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial\varphi} = L_z\Phi \longrightarrow \Phi \propto \exp(iL_z\varphi/\hbar)$$

Karena $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$ maka

$$\exp(iL_z\varphi/\hbar) = \exp[iL_z(\varphi + 2\pi)/\hbar] = \exp(iL_z\varphi/\hbar)\exp(i2\pi L_z/\hbar)$$

$$\exp(i2\pi L_z/\hbar) = \cos(2\pi L_z/\hbar) + i\sin(2\pi L_z/\hbar) = 1$$

Jadi: $\frac{2\pi}{\hbar}L_z = 0, \pm 2\pi, \pm 4\pi, \ldots \longrightarrow L_z = m_\ell\hbar;\ m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$

$$\Phi_{m_\ell} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(im_\ell\varphi)$$ $1/\sqrt{2\pi}$ adalah faktor normalisasi

$L_z$ sebagai komponen momentum sudut pada sumbu-z ternyata merupakan besaran yang diskrit atau terkuantisasi. Dalam eksperimen, sumbu-z dinyatakan sebagai sumbu di mana arah medan magnet statik ditetapkan. Oleh sebab itu $m_l$ disebut bilangan kuantum magnetik.

**4.3 Momentum Sudut Total**

Harga eigen dan fungsi eigen operator $\hat{L}^2$ ditentukan sebagai berikut. Andaikan *Y(θ,φ)* adalah fungsi eigen dengan harga eigennya $L^2$:

$$\hat{L}^2 Y(\varphi,\theta) = L^2 Y(\varphi,\theta)$$

$$-\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y = L^2 Y$$

$$\sin^2\theta\frac{\partial^2 Y}{\partial\theta^2}+\sin\theta\cos\theta\frac{\partial Y}{\partial\theta}+\frac{L^2\sin^2\theta}{\hbar^2}Y = -\frac{\partial^2 Y}{\partial\varphi^2}$$

Untuk pemisahan variable misalkan $Y(\theta,\varphi) = P(\theta)\Phi(\varphi)$

$$\frac{1}{P}\left(\sin^2\theta\frac{\partial^2 P}{\partial\theta^2}+\sin\theta\cos\theta\frac{\partial P}{\partial\theta}+\frac{L^2\sin^2\theta}{\hbar^2}P\right) = -\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = m_\ell^2$$

$$\left(\sin^2\theta\frac{\partial^2 P}{\partial\theta^2}+\sin\theta\cos\theta\frac{\partial P}{\partial\theta}+\frac{L^2\sin^2\theta}{\hbar^2}P\right) = m_\ell^2 P$$

Persamaan ini identik dengan persamaan Legendre terasosiasi dengan:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial\theta^2}+ctg\,\theta\frac{\partial P}{\partial\theta}+\left(\frac{L^2}{\hbar^2}-\frac{m_\ell^2}{\sin^2\theta}\right)P = 0 \qquad L^2 = \hbar^2\,\ell(\ell+1);\ \ell \geq |m_\ell|$$

$$P_\ell^{|m_\ell|}(w) = \frac{(-1)^{|m_\ell|}}{2^\ell\,\ell!}(1-w^2)^{\frac{1}{2}|m_\ell|}\left(\frac{d}{dw}\right)^{\ell+|m_\ell|}\left(w^2-1\right)^\ell; \quad w = \cos\theta$$

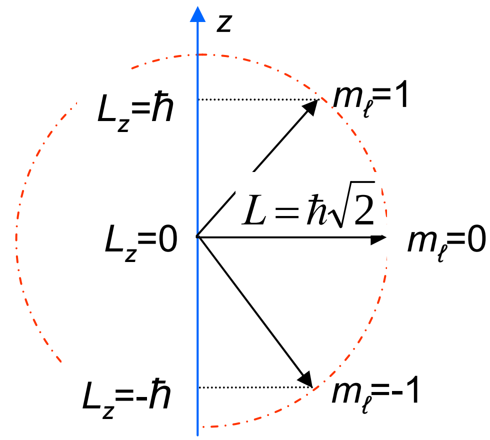
$$P_o^{\,o}(\theta) = 1;$$

$$P_1^{\,o}(\theta) = -\cos\theta$$

$$P_1^{\,1}(\theta) = -\sin\theta$$

$$P_2^{\,o}(\theta) = \tfrac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1);$$

$$P_2^1(\theta) = 3\cos\theta\sin\theta;\; P_2^2(\theta) = 3(1-\cos\theta)^2$$




$\ell$ adalah bilangan bulat positif 0, 1, 2, …..; bilangan ini disebut bilangan kuantum orbital. Untuk suatu harga $\ell$ ada (2 $\ell$ +1) buah harga $m_\ell$, yakni $m_\ell = -\ell, -(\ell-1), ..., -1, 0, 1, ..., (\ell-1), \ell$. $L_z = m_\ell\hbar$ adalah hasil proyeksi $L$ pada sumbu-z..

Akhirnya, diperoleh fungsi eigen bagi operator: $\hat{L}^2$

$$Y(\theta,\varphi) \equiv Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi) = \left[\frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-m_\ell)!}{(\ell+m_\ell)!}\right]^{1/2} P_\ell^{|m_\ell|}(\theta)\,\Phi_{m_\ell}(\varphi)$$

yang biasa disebut fungsi harmonik bola (spherical harmonics).

Sifat ortogonalitas: $$\int_0^\pi\int_0^{2\pi}(Y_{\ell m_\ell})^* Y_{\ell' m'_\ell}\sin\theta\,d\theta\,d\varphi = \delta_{\ell\ell'}\delta_{m_\ell m'_\ell}$$

Tiga sifat penting dari fungsi ini adalah

$$1. \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} (Y_{\ell m_\ell})^* Y_{\ell' m'_\ell} \sin\theta \, d\theta \, d\varphi \quad = \delta_{\ell\ell'}\delta_{m_\ell m'_\ell}$$

$$2. \cos\theta \, Y_{\ell m_\ell} = \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}\left[\sqrt{\frac{\ell^2 - m_\ell^2}{2\ell-1}} Y_{\ell-1,m_\ell} + \sqrt{\frac{(\ell+1)^2 - m_\ell^2}{2\ell+3}} Y_{\ell+1,m_\ell}\right]$$

$$3. \sin\theta e^{\pm i\varphi} \, Y_{\ell m_\ell} = \mp\frac{1}{\sqrt{2\ell+1}}\left[\sqrt{\frac{(\ell \mp m_\ell)(\ell \mp m_\ell - 1)}{2\ell-1}} Y_{\ell-1,m_\ell \pm 1} - \sqrt{\frac{(\ell \pm m_\ell + 2)(\ell \pm m_\ell + 1)}{2\ell+3}} Y_{\ell+1,m_\ell \pm 1}\right]$$

Beberapa contoh fungsi harmonik bola adalah

$$Y_{00}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}};$$

$$Y_{20}(\theta) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta - 1);$$

$$Y_{10}(\theta) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta;$$

$$Y_{2\pm1}(\theta) = -\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin 2\theta \, e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{1\pm1}(\theta) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta \, e^{\pm i\varphi}$$

$$Y_{2\pm2}(\theta) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta \, e^{\pm 2i\varphi}$$

Dengan fungsi dan harga eigen seperti di atas, persamaan harga eigen adalah:

$$\hat{L}^2 Y_{\ell m_\ell} = \hbar^2\, \ell(\ell+1) Y_{\ell m_\ell}\,;\ \ell = 0, 1, 2, ....$$

$$\hat{L}_z Y_{\ell m_\ell} = m_\ell \hbar\, Y_{\ell m_\ell}\,; \quad m_\ell = \pm\ell,\ \pm(\ell-1), ......$$

Persamaan-persamaan di atas menunjukkan kuantisasi momentum sudut.

Orbital-orbital elektron dibentuk dari fungsi-fungsi $Y_{\ell m\ell}$ dalam bentuk ril.

$\ell = 0; \quad s \equiv Y_{oo}$

$\ell = 1; \quad p_z \equiv Y_{1o}$

$$p_x \equiv \frac{-1}{\sqrt{2}}(Y_{11} + Y_{1-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\varphi$$

$$p_y \equiv \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{11} - Y_{1-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\sin\varphi$$

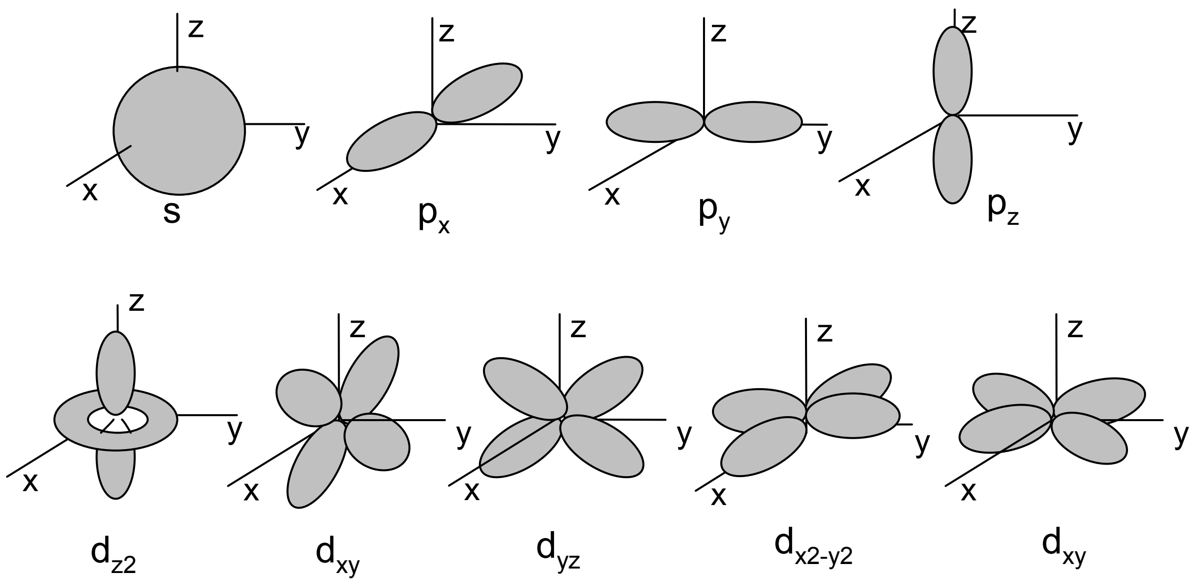
$\ell = 2 \quad d_{z^2} \equiv Y_{20}$

$$d_{xz} \equiv -\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{21} + Y_{2-1}) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\cos\varphi$$

$$d_{yz} \equiv \frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{21} - Y_{2-1}) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\sin\varphi$$

$$d_{x^2-y^2} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{22} + Y_{2-2}) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}}\sin^2\theta\cos^2\varphi$$

$$d_{xy} \equiv \frac{-i}{\sqrt{2}}(Y_{22} - Y_{2-2}) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}}\sin^2\theta\sin^2\varphi$$




*s* untuk $\ell$ =0,

*p* untuk $\ell$ =1

d untuk $\ell$ =2

Dalam pembentukan molekul dari beberapa atom, ikatan antar atom berlangsung melalui orbital-orbital tersebut di atas.

## 4.4 Operator Tangga

Sehubungan dengan operator $\hat{L}_{\pm}$ akan dikemukakan karakteristik operasinya terhadap fungsi harmonik bola $Y_{\ell,m_\ell}$.

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] = \pm\hbar\hat{L}_{\pm}$$

$$\hat{L}_z\hat{L}_+Y_{\ell m_\ell} = (\hat{L}_+\hat{L}_z + \hbar\hat{L}_+)Y_{\ell m_\ell} = (m_\ell + 1)\hbar\hat{L}_+Y_{\ell m_\ell}$$

$$\hat{L}_z\hat{L}_-Y_{\ell m_\ell +1} = (\hat{L}_-\hat{L}_z - \hbar\hat{L}_-)Y_{\ell m_\ell +1} = m_\ell\hbar\hat{L}_-Y_{\ell m_\ell +1}$$

$\hat{L}_+Y_{\ell m_\ell}$ adalah fungsi eigen dari $\hat{L}_z$ dengan harga eigen $(m_\ell+1)\hbar$. Demikian pula $\hat{L}_-Y_{\ell,m_\ell+1}$ adalah fungsi eigen dengan harga eigen $m_\ell\hbar$.

Andaikan $\hat{L}_+Y_{\ell m_\ell} = CY_{\ell m_\ell +1}$ dan $\hat{L}_-Y_{\ell m_\ell +1} = CY_{\ell m_\ell}$

$$\hat{L}_-\hat{L}_+Y_{\ell m_\ell} = C\hat{L}_-Y_{\ell m_\ell +1} = C^2Y_{\ell m_\ell}$$

Tapi $\hat{L}_-\hat{L}_+Y_{\ell m_\ell} = (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z)Y_{\ell m_\ell} = [\hbar^2\ell(\ell+1) - m_\ell(m_\ell+1)\hbar^2]Y_{\ell m_\ell}$

$$C = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m_\ell(m_\ell+1)} \qquad \hat{L}_+ Y_{\ell m_\ell} = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m_\ell(m_\ell+1)}\; Y_{\ell m_\ell+1}$$

Dengan cara yang sama diperoleh $\hat{L}_- Y_{\ell m_\ell} = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1) - m_\ell(m_\ell-1)}\; Y_{\ell m_\ell-1}$

Kedua persamaan di atas bukan persamaan harga eigen, karena operator-operator itu menggeser bilangan kuantum $m_\ell$.

Operator $\hat{L}_+$ menambah bilangan kuantum $m_\ell$ 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*).

Tentukanlah matriks $L_+$ untuk $\ell$=1

$$\left(\tilde{L}_+\right)_{m'_\ell,m_\ell} = \int Y^*_{\ell,m'_\ell}\hat{L}_+ Y_{\ell,m_\ell}\sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \hbar\sqrt{\ell(\ell+1)-m_\ell(m_\ell+1)}\,\delta_{m'_\ell,m_\ell+1}$$

$$\ell = 1 \rightarrow m_\ell, m'_\ell = -1,\ 0,\ 1$$

$$m'_\ell = -1 \rightarrow m_\ell = -2\text{(tidak ada)}$$

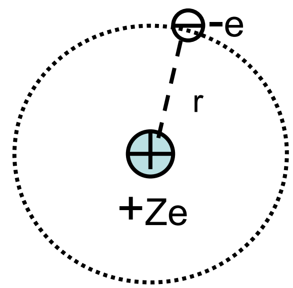
$$m'_\ell = 0 \rightarrow m_\ell = -1 \quad \rightarrow \left(L_+^{(1)}\right)_{0,-1} = \hbar\sqrt{2}$$

$$m'_\ell = 1 \rightarrow m_\ell = 0 \quad \rightarrow \left(L_+^{(1)}\right)_{1,0} = \hbar\sqrt{2}$$

$$\tilde{L}_+^{(1)} = \begin{array}{c} \\ -1 \\ 0 \\ 1 \end{array}\!\!\begin{array}{c} \begin{array}{ccc} -1 & 0 & 1 \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \hbar\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \hbar\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \end{array}$$

# BAB 5
# ATOM HIDROGEN DAN SEJENISNYA

## 5.1 Atom Hidrogen dan Sejenisnya




Hamiltonian (operator energi) elektron adalah

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_o r}$$

Misalkan $\psi(r,\theta,\varphi)$ adalah fungsi gelombangnya, maka persamaan Schrödinger untuk elektron adalah:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_o r}\right)\psi = 0$$

Karena potensial ini bersifat sentral maka perlu dilakukan transformasi ke koordinat bola, yakni

$$\nabla^2 \equiv \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{ctg\,\theta}{r^2}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}\right)$$

Tetapi, $\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + ctg\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)$

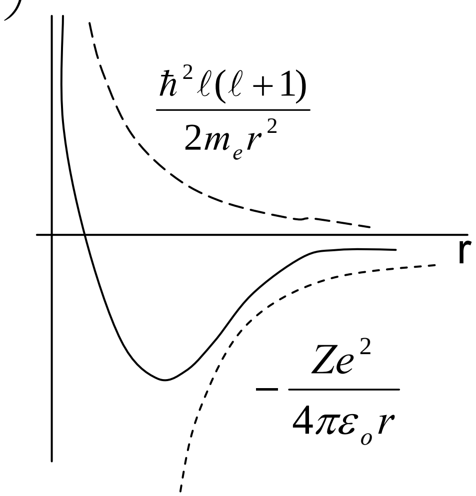
sehingga

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_o r} - \frac{\hat{L}^2}{2m_e r^2}\right)\psi = 0$$

Misalkan $\psi(r,\varphi,\theta) = R(r)Y(\varphi,\theta)$ dimana $Y(\varphi,\theta) = Y_{\ell m}$

$$\frac{\partial^2 R}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial R}{\partial r} + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_o r} - \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2m_e r^2}\right)R = 0$$

$$V_{eff} = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_o r} + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2m_e r^2}$$




Merupakan potensial efektif yang dimiliki elektron, yakni penjumlahan potensial Coulomb dan kinetik rotasi. Jelas terlihat, bahwa elektron mengalami sejenis sumur potensial dengan dinding. Jadi, elektron itu terikat dalam medan inti sehingga energinya diskrit.

Misalkan $\rho = \frac{2Z}{na_o} r;\ n^2 = \frac{Z^2 e^2}{8\pi\varepsilon_o a_o |E|};\ a_o = \frac{4\pi\varepsilon_o \hbar^2}{m_e e^2} = 0{,}53 A^\circ$

maka $$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left(\frac{n}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right) R = 0$$

Misalkan solusinya, $R(\rho) = \rho^s\ \mathscr{L}(\rho)\, e^{-\rho/2}$

$$\rho \frac{d^2 \mathscr{L}}{d\rho^2} + [2(s+1) - \rho]\frac{d\mathscr{L}}{d\rho} + [(n-s-1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)]\mathscr{L} = 0$$

Agar memberikan solusi yang baik dipilih $s(s+1)-\ell(\ell+1)=0$ atau $s=\ell$ , sehingga

$$\rho \frac{d^2 \boldsymbol{\mathcal{L}}}{d\rho^2} + [2(\ell+1) - \rho]\frac{d\boldsymbol{\mathcal{L}}}{d\rho} + (n-\ell-1)\boldsymbol{\mathcal{L}} = 0$$

Persamaan ini dikenal sebagai persamaan diferensial Laguerre terasosiasi, yang solusinya merupakan polinom-polinom:

$$\mathcal{L}_p^q(\rho) = (-1)^q \frac{d^q}{d\rho^q} \mathcal{L}_p(\rho); \; p = n + \ell, \; q = 2\ell + 1$$ Laguerre terasosiasi

$$\mathcal{L}_p(\rho) = e^{\rho} \frac{d^p}{d\rho^p} (\rho^p e^{-\rho});$$ Laguerre

dimana *n* dan adalah bilangan-bilangan bulat positif yang harus memenuhi syarat:

$$n \geq (\ell + 1); \; n = 1, 2, 3, .....$$

Syarat ini menunjukkan bahwa untuk suatu harga n ada n buah harga $\ell$ .

$$n = 1, \ell = 0; \quad \mathcal{L}_1^1(\rho) = 1,$$

$$n = 2, \ell = 0; \quad \mathcal{L}_2^1(\rho) = 2(2 - \rho),$$

$$n = 2, \ell = 1; \quad \mathcal{L}_3^3(\rho) = 18,$$

$$n = 3, \ell = 0; \quad \mathcal{L}_3^1(\rho) = 3(6 - 6\rho + \rho^2)$$

$$n = 3, \ell = 1; \quad \mathcal{L}_4^3(\rho) = 24(4 - \rho),$$

$$n = 3, \ell = 2; \quad \mathcal{L}_5^5(\rho) = 120 .$$

Syarat ortogonalitas:

$$\int_0^\infty \rho^{q+1} e^{-\rho}\, \mathfrak{L}_p^q(\rho)\, \mathfrak{L}_{p'}^q(\rho)\, d\rho = (2p + q + 1)\frac{(p+q)!}{p!}\delta_{p'p}$$

$$p = n + \ell, \; q = 2\ell + 1$$

$$\int_0^\infty \rho^{2\ell+2} e^{-\rho}\, \mathfrak{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)\, \mathfrak{L}_{n'+\ell}^{2\ell+1}(\rho)\, d\rho = \frac{2n[(n+\ell)!]^3}{(n-\ell-1)!}\delta_{nn'}$$

$$R_{n\ell}(\rho) = N_{n\ell}\rho^{\ell} e^{-\rho/2}\mathfrak{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)$$

Sifat ortonormal dari R:

$$\int_0^\infty R_{n\ell}(\rho) R_{n'\ell}(\rho)\rho^2 d\rho = \delta_{nn'}$$

$$N_{n\ell}N_{n'\ell}\int_0^\infty \rho^{2\ell} e^{-\rho}\mathfrak{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho)\mathfrak{L}_{n'+\ell}^{2\ell+1}(\rho)\rho^2 d\rho = \delta_{nn'}$$

$$N_{n\ell}^2 \frac{2n[(n+\ell)!]^3}{(n-\ell-1)!} = 1 \rightarrow N_{n\ell} = \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}}$$

Akhirnya diperoleh:

$$R_{n\ell}(\rho) = N_{n\ell}\,\rho^{\ell} e^{-\rho/2} \mathcal{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) \qquad N_{n\ell} = \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}}$$

atau dengan $\rho=(2Z/na_o)r$ .

$$R_{n\ell}(r) = N_{n\ell}\left(\frac{2Z}{na_o}\right)^{\ell} r^{\ell} e^{-\frac{Zr}{na_o}} \mathcal{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(\rho) \qquad N_{n\ell} = \left(\frac{2Z}{na_o}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{2n[(n+\ell)!]^3}}$$

;

$$R_{10}(r) = 2\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-Z/a_o},$$

$$R_{20}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}(2-\rho)e^{-\rho/2},$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\rho e^{-\rho/2},$$

$$R_{30}(r) = \frac{1}{9\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(6-6\rho+\rho^2\right)e^{-\rho/2},$$

$$R_{31}(r) = \frac{1}{9\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}(4-\rho)\rho e^{-\rho/2},$$

$$R_{32}(r) = \frac{1}{9\sqrt{30}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\rho^2 e^{-\rho/2}$$

Energi keadaan:

$$E_n = -\frac{Z^2 e^2}{8\pi\varepsilon_o a_o n^2} = -\frac{Z^2}{n^2}(13{,}6\,eV)$$

Untuk atom hidrogen di mana *Z*=1, rumusan ini sama dengan postulat Bohr.

Bilangan *n* disebut bilangan kuantum utama. Untuk suatu harga *n* ada *n* buah harga *ℓ*, yakni *ℓ*=*n*-1, *n*-2,….,0.

$L^2 = \hbar^2\,\ell(\ell+1) = \hbar^2(n-1)n$ $\longrightarrow$ Untuk n>>: $L = n\hbar$

Ini sesuai dengan Bohr; jadi postulat Bohr berlaku hanya untuk n>>

Fungsi gelombang lengkap dari elektron: $\psi_{n\ell m_\ell}(r,\theta,\varphi) = R_{n\ell}(r)\,Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi)$

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_o};$$

$$\psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a_o}\right)e^{-Zr/2a_o};$$

$$\psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_o}\right)e^{-Zr/2a_o}\cos\theta;$$

$$\psi_{21\pm1} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_o}\right)e^{-Zr/2a_o}\sin\theta\, e^{\pm i\varphi};$$

Untuk hidrogen Z=1.

$$\psi_{1s} \equiv \psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_o};$$

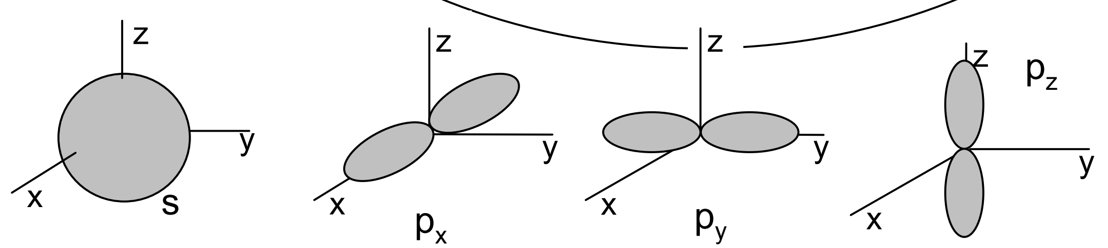
$$\psi_{2s} \equiv \psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a_o}\right)e^{-Zr/2a_o};$$

$$\psi_{2pz} = \psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_o}\right)e^{-Zr/2a_o}\cos\theta;$$

$$\psi_{2px} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_o}\right)e^{-Zr/2a_o}\sin\theta\cos\varphi;$$

$$\psi_{2py} \equiv \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a_o}\right)e^{-Zr/2a_o}\sin\theta\sin\varphi.$$

Disebut orbital atom



Jadi keadaan suatu elektron dapat dikarakterisasikan oleh tiga bilangan kuantum *n, ℓ* dan $m_\ell$.

Selanjutnya, dengan fungsi-fungsi tersebut di atas, harga rata-rata besaran fisis elektron dapat ditentukan melalui persamaan berikut:

$$A_{av} = \int \psi^*_{n\ell m_\ell} \hat{A} \psi_{n\ell m_\ell} dv$$

$$dv = r^2 dr \ \sin\theta \, d\theta \ d\varphi; \ 0 \le r \le \infty; 0 \le \theta \le \pi; \ 0 \le \varphi \le 2\pi$$

Contoh:

$$(1/r)_{av,1s} = \int \psi^*_{1s}(1/r)\psi_{1s} dv = \frac{1}{\pi}\left(\frac{1}{a_o}\right)^3 \int_0^\infty e^{-2r/a_o}(1/r)\, r^2 dr \int_0^\pi \sin\theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi = 1/a_o$$

$$r_{av,1s} = \int \psi^*_{1s}\, r \psi_{1s} dv = \frac{1}{\pi} 4\pi a_o^{-3} \int_0^\infty e^{-2r/a_o} \ r^3 dr = 4a_o^{-3} \frac{3! a_o^4}{2^4} = \frac{3a_o}{2}$$

Jelas bahwa $(1/r)_{av} \neq 1/r_{av}$.

## 5.2 Efek Relativitas

Dalam teori relativitas khusus energi suatu elektron yang bergerak dengan momentum *p* dan memiliki energi potensial *V* dituliskan seperti:

$$E = c\sqrt{m_e^2 c^2 + p^2} + V - m_e c^2$$

Jika momentum *p* << $m_e c$, ekspansi sebagai berikut dapat dilakukan:

$$E = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{p^4}{8m_e^3c^2} + \ldots\ldots\ldots\ldots + V = \left(\frac{p^2}{2m_e} + V\right) - \frac{p^4}{8m_e^3c^2} + \ldots\ldots\ldots\ldots$$

energi total dalam pendekatan non-relativistik

koreksi relativistik order-1

$$\Delta E_c = -\frac{p^4}{8m_e^3c^2} = -\frac{1}{2m_ec^2}\left(\frac{p^2}{2m_e}\right)\left(\frac{p^2}{2m_e}\right) = -\frac{1}{2m_ec^2}(-E)(\tfrac{1}{2}m_e v^2) = \tfrac{1}{4}\frac{v^2}{c^2}E$$

Untuk $(v/c)^2 = 10^{-5}$ maka $\Delta E_c = 10^{-5}E$

Dalam fisika kuantum, koreksi harus dihitung secara rata-rata. Harga rata-rata misalnya pada keadaan $\psi_{n\ell m_\ell}$ adalah:

$$\Delta E_c = -\frac{1}{8m_e^3c^2}(p^4)_{av} = -\frac{1}{8m_e^3c^2}\int \psi^*_{n\ell m_\ell} p^4 \psi^*_{n\ell m_\ell} dv$$

$$\Delta E_c = \frac{|E_n|\alpha^2}{n}\left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{\ell + \frac{1}{2}}\right)$$

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o \hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

Parameter $\alpha$ disebut konstanta struktur halus (*fine structure*), dan $|E_n|$ adalah harga absolut energi elektron.

Terlihat bahwa energi koreksi itu bergantung pada bilangan kuantum *n* dan *ℓ*. Jadi, jika efek relativitas diperhitungkan, maka koreksi energi akan memisahkan fungsi-fungsi yang terdegenerasi.

**5.3 Probabilitas Transisi**

Probabilitas transisi sebanding dengan kuadrat transisi momen dipol:

$$M_{if}^{(z)} = e\int \psi_i^* \, z\, \psi_f \, dv$$

Misalnya,

$$M_{if}^{(z)} = e\int \psi_{n\ell m_\ell}^* \, z\, \psi_{n'\ell' m'_\ell} \, dv$$

Mengingat *z=r cos θ,* maka

$$M_{if}^{(z)} = \int [R_{n\ell}(r)Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi)][R_{n'\ell'}(r)Y_{\ell' m_{\ell'}}(\theta,\varphi)]r^3 dr\cos\theta\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

$$M_{if}^{(z)} = N_{n\ell}N_{n'\ell'}\int_0^\infty \left(\frac{2Zr}{na_o}\right)^{\ell}\left(\frac{2Zr}{n'a_o}\right)^{\ell'} e^{-\frac{Zr}{a_o}\left(\frac{1}{n}+\frac{1}{n'}\right)} \mathcal{L}_{n+\ell}^{2\ell+1}(r)\mathcal{L}_{n'+\ell'}^{2\ell'+1}(r)r^3 dr$$

$$\times\int \cos\theta\, Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi)\, Y_{\ell' m_{\ell'}}\sin\theta\, d\theta\, d\varphi$$

Integral di atas mempunyai harga tidak sama dengan nol jika $\ell'=\ell\pm1$, $m_{\ell'}=m_\ell$.

$$\Delta n = 0, 1, 2, .......$$

$$\Delta\ell = \pm 1$$

$$\Delta m_\ell = 0, \pm 1$$

$$M_{if}^{(x)} = e\int \psi^*_{n\ell m_\ell}\, x\, \psi_{n'\ell' m'_\ell}\, dv$$

*x=r sin $\theta$ cos $\varphi$= ½ r sin $\theta$ ($e^{i\varphi}$+$e^{-i\varphi}$),*

$$\int \sin\theta \cos\varphi\, Y_{\ell m_\ell}(\theta,\varphi)\, Y_{\ell' m'_{\ell'}} \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \alpha_1 \delta_{\ell'\ell-1}\delta_{m'_\ell m_\ell+1} + \alpha_2 \delta_{\ell'\ell+1}\delta_{m'_\ell m_\ell-1} + \beta_1 \delta_{\ell'\ell-1}\delta_{m'_\ell m_\ell-1}$$

$$+\beta_2 \delta_{\ell'\ell+1}\delta_{m'_\ell m_\ell-1}$$

Integral mempunyai harga jika *ℓ'=ℓ*±1, *mℓ'=mℓ*±1.

Hal yang sama akan diperoleh untuk $M_{if}^{(y)}$

dengan y=*r sin $\theta$ sin $\varphi$*= (-½ i) *r sin $\theta$ (ei$\varphi$-e-i$\varphi$).*

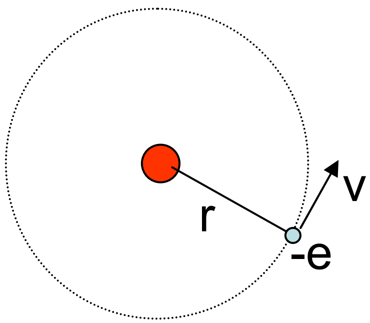
Secara keseluruhan dapat disimpulkan bahwa syarat transisi adalah:

$$\Delta n = 0, 1, 2, .......$$

$$\Delta \ell = \pm 1$$

$$\Delta m_\ell = 0, \pm 1$$

## 5.4 Efek Zeeman; Spin Elektron




Elektron yang bergerak mengitari inti dengan jari-jari r dan kecepatan v, menimbulkan arus listrik: $I = ev/2\pi r$

Arus listrik itu menginduksikan momen magnet:

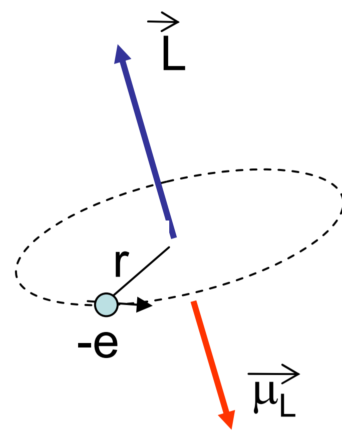
$$\mu = I\pi r^2 = \tfrac{1}{2} evr$$

Momentum sudut elektron: $L = r\, m_e v$

Jadi, hubunganantara momen magnet dan momentum sudut: $\mu = \dfrac{e}{2m_e} L$

Dalam bentuk vektor:

$$\vec{\mu}_L = -\left(\frac{e\hbar}{2m_e}\right)\frac{\vec{L}}{\hbar} = -\frac{\beta_e}{\hbar}\vec{L}$$




$\beta_e$=9,2732x10$^{-24}$ joule/tesla disebut magneton Bohr elektron.

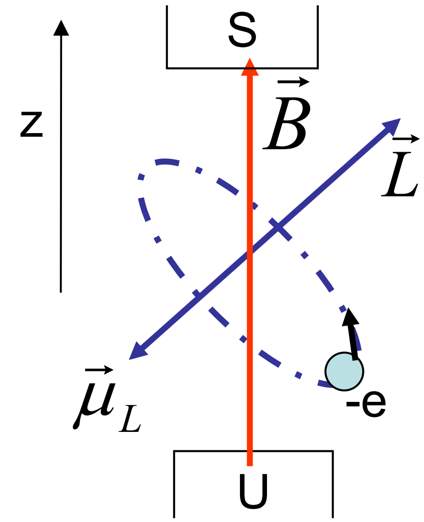
Total Hamiltonian elektron di dalam medan magnet B (pada sb-z):

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{H}_B$$

$$\hat{H}_B = -\vec{\mu}_L \cdot \vec{B} = \frac{\beta_e}{\hbar}\vec{L}.\vec{B} = \frac{\beta_e B}{\hbar}\hat{L}_z$$

= Hamiltonian elektron dalam medan magnet

$\hat{H}_o$ = Hamiltonian elektron tanpa medan magnet




Dengan fungsi keadaan elektron $\psi_{n\ell m_\ell}$

$$\hat{H}\psi_{n\ell m_\ell} = \hat{H}_o\psi_{n\ell m_\ell} + \hat{H}_B\psi_{n\ell m_\ell}$$

$$= E_n\psi_{n\ell m_\ell} + \frac{\beta_e B}{\hbar}\hat{L}_z\,\psi_{n\ell m_\ell} = (E_n + \beta_e B m_\ell)\psi_{n\ell m_\ell}$$

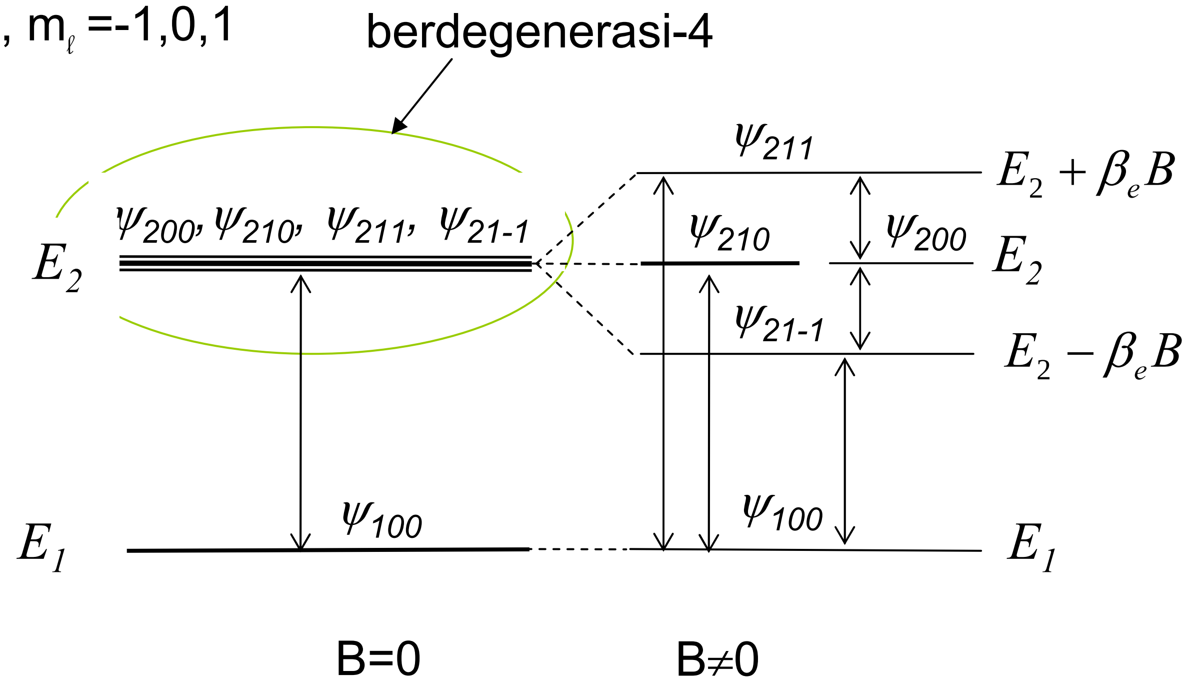
$\beta_e B m_\ell$ adalah pergeseran energi sebagai dampak kehadiran medan B.

Pergeseran ini disebut efek Zeeman.

Contoh,

untuk $\ell$=0, $m_\ell$ =0

Untuk $\ell$=1, $m_\ell$ =-1,0,1




Transisi:

$$\Delta n = 0, 1, 2, .......$$

$$\Delta \ell = \pm 1$$

$$\Delta m_\ell = 0, \pm 1$$

Pada B=0 teramati satu transisi saja;

Pada B≠0 termati empat transisi.

## Spin elektron

Pengamatan lebih teliti terhadap beberapa garis spektra menunjukkan garis-garis itu sebenarnya tidak tunggal tetapi doblet.

Karena kecilnya pecahan doblet itu, G.E.Uhlenbeck dan S.Goudsmit (1926) menyatakan bahwa elektron sendiri memiliki momentum sudut intrinsik yang disebut spin.

Spin memiliki bilangan kuantum s=½, sehingga bilangan kuantum magnetiknya $m_s$=½, -½.

Operator-operator spin adalah $\hat{S}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_+ \text{ dan } \hat{S}_-$

dengan fungsi spin $|\alpha\rangle$ dan $|\beta\rangle$ dengan operasi:

$$\hat{S}_z \begin{cases} |\alpha\rangle \\ |\beta\rangle \end{cases} = \begin{cases} \tfrac{1}{2}\hbar|\alpha\rangle \\ -\tfrac{1}{2}\hbar|\beta\rangle \end{cases}; \qquad \hat{S}_+ \begin{cases} |\alpha\rangle \\ |\beta\rangle \end{cases} = \begin{cases} 0 \\ \hbar|\alpha\rangle \end{cases}$$

$$\hat{S}^2 \begin{cases} |\alpha\rangle \\ |\beta\rangle \end{cases} = \tfrac{3}{4}\hbar^2 \begin{cases} |\alpha\rangle \\ |\beta\rangle \end{cases}; \qquad \hat{S}_- \begin{cases} |\alpha\rangle \\ |\beta\rangle \end{cases} = \begin{cases} \hbar|\beta\rangle \\ 0 \end{cases}$$

Karena spin adalah momentum sudut juga, maka terhadap momentum sudut spin harus ditambahkan terhadap momentum sudut $\vec{L}$ :

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \qquad \text{Momentum sudut total}$$

Bilangan kuantum bagi momentum sudut total adalah $j = \ell \pm s$

$$\ell = 0, \quad j = \tfrac{1}{2}$$

$$\ell = 1, \quad j = \tfrac{1}{2}, \tfrac{3}{2}$$

$$\ell = 2, \quad j = \tfrac{3}{2}, \tfrac{5}{2}$$

Bilangan kuantum magnetiknya: $m_j = \pm j, \pm (j-1), \ldots\ldots\ldots \ldots\ldots$

$$j = \tfrac{1}{2} \rightarrow m_j = \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}$$

$$j = \tfrac{3}{2} \rightarrow m_j = \tfrac{3}{2}, \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}, -\tfrac{3}{2}$$

$$j = \tfrac{5}{2} \rightarrow m_j = \tfrac{5}{2}, \tfrac{3}{2}, \tfrac{1}{2}, -\tfrac{1}{2}, -\tfrac{3}{2}, -\tfrac{5}{2}$$

Momen magnet spin tak dapat diturunkan sebagaimana momen magnet orbital; sebagai analogi

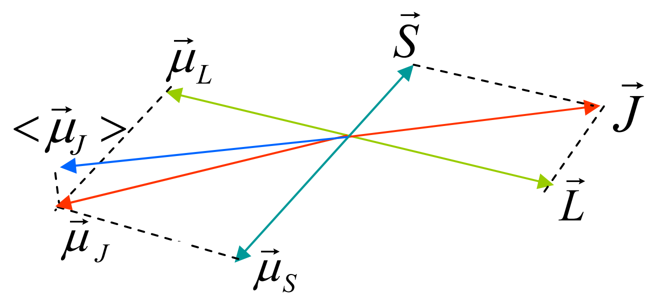
$$\vec{\mu}_S = -\frac{\beta_e}{\hbar} g_s \vec{S}$$

$g_s$ = 2,0024 untuk elektron bebas.

Momen magnet total adalah

$$\vec{\mu}_J = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = -\frac{\beta_e}{\hbar}(\vec{L} + g_s \vec{S})$$

$$\vec{\mu}_J \approx -\frac{\beta_e}{\hbar}(\vec{L} + 2\vec{S}) = -\frac{\beta_e}{\hbar}(\vec{J} + \vec{S})$$




$$<\vec{\mu}_J> = \left(\frac{\vec{\mu}_J . \vec{J}}{J}\right)\frac{\vec{J}}{J} = -\frac{\beta_e}{\hbar}\frac{(\vec{J} + \vec{S}).\vec{J}}{J^2}\vec{J}$$

$$= -\frac{\beta_e}{\hbar} g_J \vec{J}$$

$$g_J = \frac{(\vec{J} + \vec{S}).\vec{J}}{J^2} = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - \ell(\ell+1)}{2j(j+1)}$$

$$\hat{H}_B = -< \vec{\mu}_J > . \vec{B}$$

$$= \frac{\beta_e}{\hbar} g_J B \hat{J}_z$$

Karena $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$ maka fungsi-fungsi eigen dari operator $\hat{J}_z$ adalah

$$Y_{\ell m_\ell s m_s} \equiv Y_{\ell m_\ell} \chi_{s m_s} \qquad \chi_{s m_s} = \begin{cases} |\alpha\rangle \\ |\beta\rangle \end{cases}$$

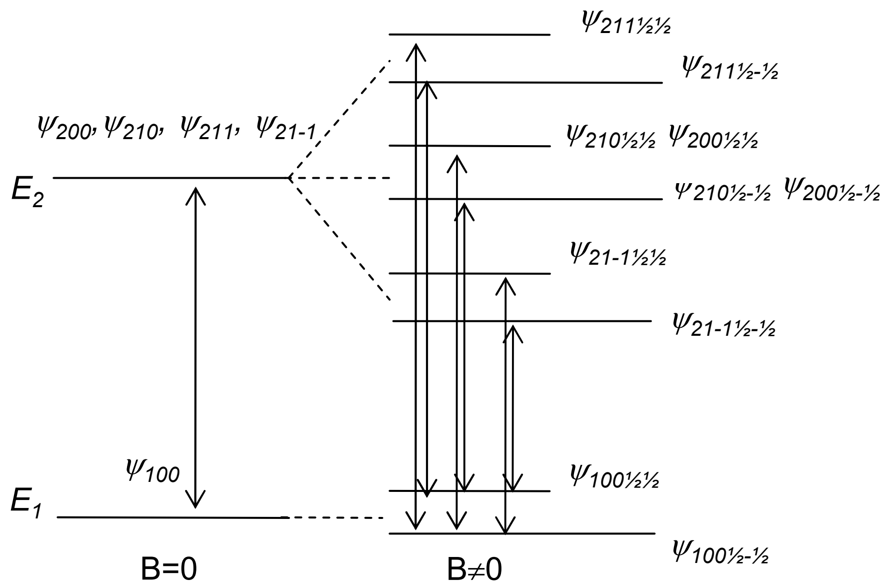
$$\hat{J}_z Y_{\ell m_\ell s m_s} \equiv m_j \hbar Y_{\ell m_\ell s m_s} \qquad m_j = m_\ell + m_s$$

Fungsi $\psi_{n\ell m_\ell}$ harus dilengkapi dengan bilangan kuantum spin menjadi $\psi_{n\ell m_\ell s m_s}$

$$\hat{H}\psi_{n\ell m_\ell s m_s} = \hat{H}_o \psi_{n\ell m_\ell s m_s} + \hat{H}_B \psi_{n\ell m_\ell s m_s}$$

$$= E_n \psi_{n\ell m_\ell s m_s} + \frac{\beta_e B}{\hbar} g_J \hat{J}_z \psi_{n\ell m_\ell s m_s}$$

$$= (E_n + \beta_e g_J B m_j)\psi_{n\ell m_\ell s m_s}$$



$\psi_{211½½}$
$\psi_{211½-½}$
$\psi_{200}, \psi_{210}, \psi_{211}, \psi_{21-1}$
$\psi_{210½½}$ $\psi_{200½½}$
$E_2$
$\psi_{210½-½}$ $\psi_{200½-½}$
$\psi_{21-1½½}$
$\psi_{21-1½-½}$
$\psi_{100}$
$\psi_{100½½}$
$E_1$
$\psi_{100½-½}$
B=0
B≠0

# BAB 6

# TEORI GANGGUAN TAK BERGANTUNG WAKTU

Dalam banyak masalah meskipun Hamiltonian sistem sudah diketahui, persamaan itu tidak bisa diselesaikan, misalnya karena adanya <u>interaksi elektron-elektron</u> atau karena <u>adanya medan luar</u>. Untuk masalah seperti itu harus digunakan <u>teori gangguan</u>.

## 6.1 Gangguan pada Sistem Tak Berdegenerasi

Andaikan pada awalnya sistem memiliki Hamiltonian $\hat{H}^{(0)}$ dengan fungsi-fungsi eigen ortonormal $\{\psi_n^{(0)}\}$ yang telah diketahui:

$$\hat{H}^{(0)}\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$$

$$\int \psi_n^{(0)*}\psi_m^{(0)}\, dv = \delta_{mn}; \quad E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$$ Sistem nondegenerate

Misalkan Hamiltonian sistem mendapat tambahan, misalnya $\hat{G} << \hat{H}^{(0)}$

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \gamma \hat{G} \qquad \gamma=1$$

Misalkanlah fungsi-fungsi eigen dari hamiltonian total H adalah $\{\psi_n\}$

$$\hat{H}\psi_n = (\hat{H}^{(0)} + \gamma \hat{G})\psi_n = E_n\psi_n$$

Karena gangguan cukup kecil, maka gangguan itu hanya akan menimbulkan sedikit perubahan dari $\psi_n^{(0)}$ menjadi $\psi_n$ dan $E_n^{(0)}$ menjadi $E_n$. Untuk memperoleh koreksi dapat dilakukan ekspansi sebagai berikut:

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_{m=1} \gamma^m \phi_n^{(m)}$$

superskript *(m)* menyatakan order koreksi atau tingkat ketelitian

$$E_n = E_n^{(0)} + \sum_{m=1} \gamma^m \varepsilon_n^{(m)}$$

Setiap $\phi^{(m)}$ dan setiap $\varepsilon^{(m)}$ tidak bergantung pada $\gamma$, dan setiap $\phi^{(m)}$ dipilih orthogonal terhadap $\psi_n^{(0)}$. Substitusi persamaan (6.4) ke persamaan (6.3) menghasilkan:

$$\hat{H}\psi_n = (\hat{H}^{(0)} + \gamma\,\hat{G})\psi_n = E_n\psi_n$$

$$H^{(0)}\left(\psi_n^{(0)} + \sum_{m=1}\gamma^m\phi_n^{(m)}\right) + \gamma\,\hat{G}\left(\psi_n^{(0)} + \sum_{m=1}\gamma^m\phi_n^{(m)}\right) = \left(E_n^{(0)} + \sum_{m=1}\gamma^m\varepsilon_n^{(m)}\right)\left(\psi_n^{(0)} + \sum_{m=1}\gamma^m\phi_n^{(m)}\right)$$

Samakan kiri dan kanan bagi yang berkoefisien $\gamma^n$ yang sama

1. $\left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)\psi_n^{(0)} = 0 \qquad \gamma^0$

2. $\left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)\phi_n^{(1)} = -\hat{G}\psi_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)}\psi_n^{(0)} \qquad \gamma^1$

3. $\left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)\phi_n^{(2)} = -\hat{G}\phi_n^{(1)} + \varepsilon_n^{(2)}\psi_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)}\phi_n^{(1)} \qquad \gamma^2$

4. $\left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)\phi_n^{(3)} = -\hat{G}\phi_n^{(2)} + \varepsilon_n^{(3)}\psi_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(2)}\phi_n^{(1)} + \varepsilon_n^{(1)}\phi_n^{(2)}. \qquad \gamma^3$

Koreksi order-1

2. $$\int \psi_n^{(0)*}[H^{(0)} - E_n^{(0)}]\phi_n^{(1)} dv = -\int \psi_n^{(0)} \hat{G} \psi_n^{(0)} dv + \varepsilon_n^{(1)} \int \psi_n^{(0)} \psi_n^{(0)} dv$$

$$\int \left\{ \left( H^{(0)} - E_n^{(0)} \right) \psi_n^{(0)*} \right\} \phi_n^{(1)} dv = -G_{nn} + \varepsilon_n^{(1)}$$

$$\underline{\underline{\varepsilon_n^{(1)} = \int \psi_n^{(0)} \hat{G} \psi_n^{(0)} dv = G_{nn}}}$$ Koreksi order-1 bagi $E_n^{(o)}$

Misalkan: $\phi_n^{(1)} = \sum_{m(\neq n)} c_{nm} \psi_m^{(0)} \rightarrow c_{nm}$ harus ditentukan

2. $$\sum_{m \neq n} c_{nm} \left( \hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)} \right) \psi_m^{(0)} = -\hat{G} \psi_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)} \psi_n^{(0)}$$

$$\sum_{m \neq n} c_{nm} \left( E_m^{(0)} - E_n^{(0)} \right) \psi_m^{(0)} = -\hat{G} \psi_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)} \psi_n^{(0)}$$

$$\sum_{m \neq n} c_{nm} \left( E_m^{(0)} - E_n^{(0)} \right) \int \psi_k^{(0)*} \psi_m^{(0)} dv = -\int \psi_k^{(0)*} \hat{G} \psi_n^{(0)} dv + \varepsilon_n^{(1)} \int \psi_k^{(0)*} \psi_n^{(0)} dv$$

$$\sum_{m(\neq n)} c_{nm}[E_m^{(0)} - E_n^{(0)}]\delta_{km} = -G_{kn} + \varepsilon_n^{(1)}\delta_{kn}$$

Fihak kiri mempunyai harga jika *m*=*k*, sedangkan suku kedua sebelah kanan sama dengan nol karena $k \neq n$.

$$c_{nk}\left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}\right) = -G_{kn} \rightarrow c_{nk} = \frac{G_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

$$\underline{\underline{\phi_n^{(1)} = \sum_{k(\neq n)} \frac{G_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)}}}$$

Koreksi order-1 bagi $\psi_n^{(o)}$

Terlihat, aproksimasi ini tidak berlaku jika $E_k^{(0)} = E_n^{(0)}$

(sistem berdegenarasi).

## Koreksi order-2

3. $$\int \psi_n^{(0)*}\left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)\phi_n^{(2)} dv = -\int \psi_n^{(0)*}\hat{G}\phi_n^{(1)} dv + \varepsilon_n^{(2)}\int \psi_n^{(0)*}\psi_n^{(0)} dv + \varepsilon_n^{(1)}\int \psi_n^{(0)*}\phi_n^{(1)} dv$$

$$\int \left\{[E_n^{(0)} - E_n^{(0)}]\psi_n^{(0)*}\right\}\phi_n^{(2)} dv = -\sum_{m(\neq n)} c_{nm}\int \psi_n^{(0)*}\hat{G}\psi_m^{(0)} dv + \varepsilon_n^{(2)}$$

$$+\varepsilon_n^{(1)}\sum_{m(\neq n)} c_{nm}\int \psi_n^{(0)*}\psi_m^{(0)} dv$$

$$0 = -\sum_{m(\neq n)} c_{nm}G_{nm} + \varepsilon_n^{(2)} \rightarrow \underline{\underline{\varepsilon_n^{(2)} = \sum_{m(\neq n)} \frac{G_{nm}G_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}}}$$

Koreksi order-2 bagi $\psi_n^{(o)}$

$$c_{nk} = \frac{G_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

Misalkan $\phi_n^{(2)} = \sum_{m(\neq n)} a_{nm}\psi_m^{(0)}$ $a_{\mathrm{nm}}$ harus ditentukan

3. $$\sum_{m(\neq n)} a_{nm}\left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)\psi_m^{(0)} = -\hat{G}\phi_n^{(1)} + \varepsilon_n^{(2)}\psi_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)}\phi_n^{(1)}$$

$$\sum_{m(\neq n)} a_{nm}\int \psi_l^{(0)*}\left(\hat{H}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)\psi_m^{(0)} d\tau = -\int \psi_l^{(0)*}\hat{G}\phi_n^{(1)} d\tau$$

$$+\varepsilon_n^{(2)}\int \psi_l^{(0)*}\psi_n^{(0)} d\tau + \varepsilon_n^{(1)}\int \psi_l^{(0)*}\phi_n^{(1)} d\tau$$

$$\sum_{m(\neq n)} a_{nm}(E_l^{(0)} - E_n^{(0)})\delta_{lm} = -\sum_{m(\neq n)} c_{nm}G_{lm} + \varepsilon_n^{(1)}\sum_{m(\neq n)} c_{nm}\delta_{lm}$$

$$a_{nl}(E_l^{(0)} - E_n^{(0)}) = -\sum_{m(\neq n)} c_{nm}G_{lm} + \varepsilon_n^{(1)} c_{nl}$$

$$= -\sum_{m(\neq n)} \frac{G_{mn}G_{lm}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \frac{G_{nn}G_{nl}}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}}$$

$$a_{nl} = \sum_{m \neq n} \frac{G_{mn} G_{lm}}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} - \frac{G_{nn} G_{nl}}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})^2}$$

$$\phi_n^{(2)} = \sum_{l(\neq n)} \left\{ \sum_{m \neq n} \frac{G_{mn} G_{lm}}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} - \frac{G_{nn} G_{nl}}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})^2} \right\} \psi_l^{(0)}$$

Fungsi gelombang dan energi sistem terganggu:

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \phi_n^{(1)} + \phi_n^{(2)}$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)} + \varepsilon_n^{(2)}$$

## 6.2 Efek Stark

Pengaruh medan listrik statik terhadap tingkat-tingkat energi suatu atom disebut efek Stark.

Atom hidrogen ditempatkan dalam medan listrik statis F yang diandaikan sejajar sumbu-z. Interaksi elektron dengan medan itu adalah:

$$G = e\vec{r}.\vec{F} = eFr\cos\theta$$

Koreksi order-1 bagi $E_1^{(0)}$

$$\psi_{1s} \equiv \psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_o^{-3/2} e^{-r/a_o};$$

$$\varepsilon_n^{(1)} = G_{nn} = \int \psi_n^{(0)} \hat{G} \psi_n^{(0)} dv$$

$$\varepsilon_1^{(1)} = eF \int \psi_{1s} r \cos\theta\, \psi_{1s}\, dv$$

$$= eF \frac{a_o^{-3}}{\pi} \int_0^\infty e^{-2r/a_o} r^3 dr \cancel{\int_0^\pi \cos\theta \sin\theta\, d\theta} \int_0^{2\pi} d\varphi = 0$$

Koreksi order-1 terhadap $\psi_{1s}^{(0)}$

$$E_2^{(0)} \quad \psi_{2s}^{(0)}, \psi_{2px}^{(0)}, \psi_{2py}^{(0)}, \psi_{2pz}^{(0)}$$

$$\phi_n^{(1)} = \sum_{k(\neq n)} \frac{G_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \psi_k^{(0)}$$

$$E_1^{(0)} \quad \psi_{1s}^{(0)} \qquad \psi_{1s}^{(0)} + \phi_{1s}^{(1)}$$

$$\phi_{1s}^{(1)} = \frac{eF}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \Big[ \cancel{\left(\int \psi_{2s}^{(0)}\, r\cos\theta\, \psi_{1s}^{(0)} dv\right)\psi_{2s}^{(0)}} + \cancel{\left(\int \psi_{2px}^{(0)}\, r\cos\theta\, \psi_{1s}^{(0)} dv\right)\psi_{2px}^{(0)}}$$

$$+ \cancel{\left(\int \psi_{2py}^{(0)}\, r\cos\theta\, \psi_{1s}^{(0)} dv\right)\psi_{2py}^{(0)}} + \left(\int \psi_{2pz}^{(0)}\, r\cos\theta\, \psi_{1s}^{(0)} dv\right)\psi_{2pz}^{(0)} \Big]$$

$$= \frac{0{,}745 a_o eF}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \psi_{2pz}$$

$$\psi_{2pz} = \psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_o}\right) e^{-Zr/2a_o} \cos\theta;$$

$$\psi_{1s} \equiv \psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} a_o^{-3/2} e^{-r/a_o};$$

$$\psi_{2px} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_o}\right) e^{-Zr/2a_o} \sin\theta\cos\varphi;$$

$$\psi_{2s} \equiv \psi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_o^{-3/2} \left(2 - \frac{r}{a_o}\right) e^{-r/2a_o};$$

$$\psi_{2py} \equiv \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_o}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_o}\right) e^{-Zr/2a_o} \sin\theta\sin\varphi.$$

Koreksi order-2 terhadap $E_1^{(0)}$

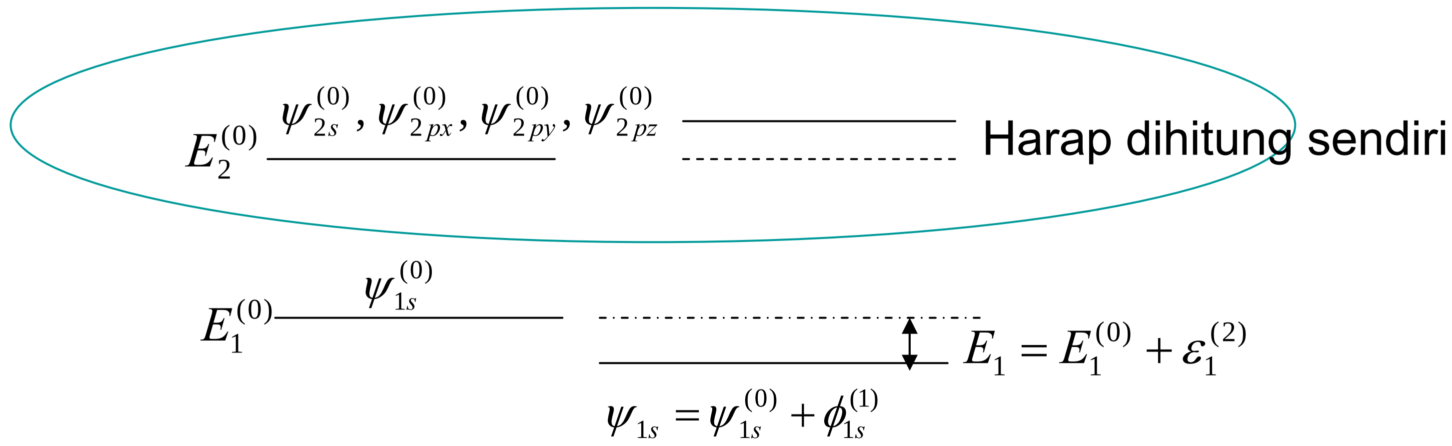
$$\varepsilon_n^{(2)} = \sum_{m(\neq n)} \frac{G_{nm}G_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m(\neq n)} \frac{G_{nm}^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$\varepsilon_1^{(2)} = \frac{e^2F^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(o)}} \left\{ \cancel{\left[\int \psi_{1s}^{(0)} r\cos\theta\, \psi_{2s}^{(0)}\, dv\right]^2} + \cancel{\left[\int \psi_{1s}^{(0)} r\cos\theta\, \psi_{2px}^{(0)}\, dv\right]^2} + \cancel{\left[\int \psi_{1s}^{(0)} r\cos\theta\, \psi_{2py}^{(0)}\, dv\right]^2} + \left[\int \psi_{1s}^{(0)} r\cos\theta\, \psi_{2pz}^{(0)}\, dv\right]^2 \right\}$$

$$\varepsilon_1^{(2)} = \frac{e^2F^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(o)}} (0{,}745 a_o)^2$$

Maka energi yang terkoreksi adalah: $E_1 = E_1^{(0)} - \dfrac{(0{,}745 a_o)^2 e^2}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} F^2$

Fungsi terkoreksi hingga order-1 adalah $\psi_{1s} = \psi_{1s}^{(0)} - \dfrac{0{,}745 a_o eF}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} \psi_{2pz}^{(0)}$


$E_2^{(0)}$
$\psi_{2s}^{(0)}, \psi_{2px}^{(0)}, \psi_{2py}^{(0)}, \psi_{2pz}^{(0)}$
Harap dihitung sendiri
$E_1^{(0)}$
$\psi_{1s}^{(0)}$
$E_1 = E_1^{(0)} + \varepsilon_1^{(2)}$
$\psi_{1s} = \psi_{1s}^{(0)} + \phi_{1s}^{(1)}$

G=0 G=erF cosθ

## 6.4 Gangguan pada Sistem Berdegenerasi

Untuk sistem yang mengandung fungsi-fungsi berdegenerasi, gangguan harus diselesaikan dengan metoda variasi sebagai berikut.

Misalkanlah $\hat{\mathrm{H}}$ adalah hamiltonian sistem yang terganggu.

Nyatakan suatu fungsi gelombang $\psi$ dari $\hat{\mathrm{H}}$ sebagai kombinasi linier dari fungsi-fungsi yang belum terganggu $\{\phi_n\}$.

$$\psi = \sum_{n=1}^{N} c_n \phi_n$$

di mana kita dapat menghitung:

$$\int \phi_n^* \hat{H} \phi_m \, d\tau = H_{nm}$$

$$\int \phi_n^* \phi_m \, d\tau = S_{nm}$$

Misalkan E energi sistem, sehingga:

$$E = \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi \, dv}{\int \psi^* \psi \, dv}$$

$$\sum_n c_n^2 H_{nn} + \sum_{n \neq m} c_n^* c_m H_{nm} = E\left( \sum_n c_n^2 S_{nn} + \sum_{n \neq m} c_n^* c_m S_{nm} \right)$$

Untuk memperoleh energi *E* minimum, variasi terhadap semua koefisien *c* harus nol; misalnya turunan terhadap $c_k$:

$$\frac{\partial E}{\partial c_k} = 0$$

Hasilnya:

$$c_k H_{kk} + \sum_{n \neq k} c_n H_{nk} = E\left( c_k S_{kk} + \sum_{n \neq k} c_n S_{nk} \right)$$

$$c_k\left(H_{kk}-ES_{kk}\right)+\sum_{n\neq k}c_n\left(H_{nk}-ES_{nk}\right)=0$$

Setelah digabubng, hasilnya

$$\sum_n c_n\left(H_{nk}-ES_{nk}\right)=0$$

Dalam bentuk matriks:

$$\begin{pmatrix} H_{11}-ES_{11} & H_{12}-ES_{12} & H_{13}-S_{13}\ldots\ldots\ldots\ldots H_{1N}-ES_{1N} \\ H_{21}-ES_{21} & H_{22}-ES_{22} & H_{23}-ES_{23}\ldots\ldots\ldots\ldots H_{2N}-ES_{2N} \\ H_{31}-ES_{31} & H_{32}-ES_{32} & H_{33}-ES_{33}\ldots\ldots\ldots\ldots H_{3N}-ES_{3N} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ H_{N1}-ES_{N1} & H_{N2}-ES_{N2} & H_{N3}-ES_{N3}\ldots\ldots H_{NN}-ES_{NN} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \ldots \\ \ldots \\ c_N \end{pmatrix}=0$$

disebut persamaan sekuler

$$\begin{vmatrix} (H_{11}-ES_{11}) & (H_{12}-ES_{12}) \;\ldots\ldots\ldots & (H_{1N}-ES_{1N}) \\ (H_{21}-ES_{21}) & (H_{22}-ES_{22})\ldots\ldots\ldots & (H_{2N}-ES_{2N}) \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots & \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots & \\ (H_{N1}-ES_{N1}) & (H_{N2}-ES_{N2})\ldots\ldots\ldots & (H_{NN}-ES_{NN}) \end{vmatrix} = 0$$ disebut determinan sekuler.

Karena mempunyai order-N maka dari persamaan tersebut akan diperoleh N buah harga energi: $E_1$, $E_2$,….,$E_N$.

Selanjutnya, substitusi setiap harga energi $E_k$ ke persamaan sekuler menghasilkan satu set harga-harga koefisien, yakni $c_{k1}$, $c_{k2}$, ….,$c_{kN}$ dengan mana

$$E_k \rightarrow \psi_k = \sum_{n=1}^{N} c_{kn}\phi_n$$

Normalisasi: $$\sum_{n,m} c_{kn}^{*} c_{km} S_{nm} = 1$$

Jika fungsi-fungsi $\{\phi_n\}$ bersifat ortonormal: $\int \phi_n^* \phi_m dv = \delta_{nm}$

$$\begin{pmatrix} H_{11}-E & H_{12} & H_{13}\ldots\ldots\ldots\ldots H_{1N} \\ H_{21} & H_{22}-E & H_{23}\ldots\ldots\ldots\ldots H_{2N} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33}-E\ldots\ldots\ldots H_{3N} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots \\ H_{N1} & H_{N2} & H_{N3}\ldots\ldots\ldots H_{NN}-E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \ldots \\ \ldots \\ c_N \end{pmatrix} = 0$$

disebut persamaan sekuler

$$\begin{vmatrix} H_{11}-E & H_{12} & H_{13}\ldots\ldots\ldots\ldots H_{1N} \\ H_{21} & H_{22}-E & H_{23}\ldots\ldots\ldots\ldots H_{2N} \\ H_{31} & H_{32} & H_{33}-E\ldots\ldots\ldots H_{3N} \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots \\ \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots & \ldots\ldots\ldots\ldots \\ H_{N1} & H_{N2} & H_{N3}\ldots\ldots\ldots H_{NN}-E \end{vmatrix} = 0$$

disebut determinan sekuler.

$$E_k \rightarrow \psi_k = \sum_{n=1}^{N} c_{kn}\phi_n \qquad \sum_{n,m} c_{kn}^* c_{km} \delta_{nm} = 1$$

Kelanjutan efek Stark

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + eFr\cos\theta$$

$$\phi_1 = \psi_{2s},\ \phi_2 = \psi_{2pz},\ \phi_3 = \psi_{2px},\ \phi_4 = \psi_{2py}$$

$$\int \phi_k \phi_l \, dv = \delta_{kl}$$

$$H_{kl} = \int \phi_k \hat{H} \phi_l \, dv = \int \phi_k \left(\hat{H}^{(0)} + eFr\cos\theta\right)\phi_l \, dv$$

$$H_{11} = H_{22} = H_{33} = H_{44} = E_2^{(0)}$$

$H_{12} = H_{21} = -3eFa_o$ Lain-lainnya =0.

Determinan sekuler

$$\begin{vmatrix} (E_2^{(0)} - E) & -3eFa_o & 0 & 0 \\ -3eFa_o & (E_2^{(0)} - E) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & (E_2^{(0)} - E) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (E_2^{(0)} - E) \end{vmatrix} = 0$$

$$(E_2^{(0)} - E)^4 - (3eFa_o)^2 (E_2^{(0)} - E)^2 = 0$$

$$(E_2^{(0)} - E)^2 \left[ (E_2^{(0)} - E)^2 - (3eFa_o)^2 \right] = 0$$

$$(E_2^{(0)} - E)^2 = (3eFa_o)^2 \rightarrow E_1 = E_2^{(0)} - 3eFa_o, \quad E_2 = E_2^{(0)} + 3eFa_o$$

$$(E_2^{(0)} - E)^2 = 0 \rightarrow E_3 = E_4 = E_2^{(0)}$$

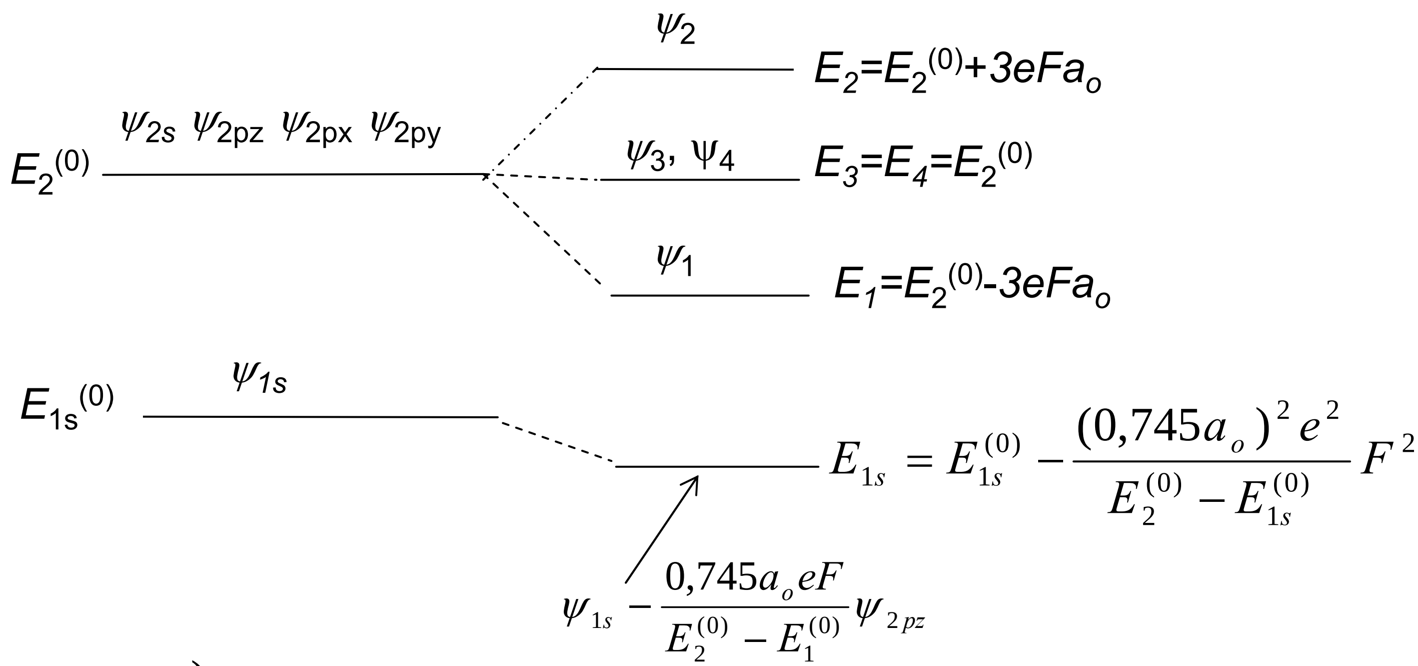
Substitusi $E_1$ menghasilkan $c_1$=$c_2$=1/√2 substitusi $E_2$ menghasilkan $c_1$=-$c_2$=1/√2. Karena $E_3$ dan $E_4$ sama dengan harga asalnya maka fungsinya juga sama dengan asalnya.

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2s} + \psi_{2pz}),$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 - \phi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2s} - \psi_{2pz}),$$

$$\psi_3 = \phi_3 = \psi_{2px},$$

$$\psi_4 = \phi_4 = \psi_{2py}$$




$$\psi_1=\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2s}+\psi_{2pz}),$$

$$\psi_2=-\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{2s}-\psi_{2pz}),$$

$$\psi_3=\psi_{2px},$$

$$\psi_4=\psi_{2py}$$

# BAB 7
# TEORI GANGGUAN BERGANTUNG WAKTU

## 7.1 Gangguan Bergantung Waktu

Hamiltonian total:

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)}(r) + \hat{G}(r,t)$$

Gangguan bergantung waktu

Keadaan yang tidak terganggu (keadaan stasioner):

$$\hat{H}^{(0)}\psi_j^{(0)}(r) = E_j^{(0)}\psi_j^{(0)}(r)$$

Persamaan Schrödinger bergantung waktu:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_j^{(0)}(r,t)}{\partial t} = H^{(0)}\psi_j^{(0)}(r,t) \rightarrow \psi_j^{(0)}(r,t) = \psi_j^{(0)}(r)e^{iE_j^{(0)}t}$$

Karena H bergantung waktu, maka energi menjadi tidak stasioner, sehinga untuk menentukan fungsi gelomang diperlukan cara yang berbeda dengan persamaan eigen biasa. Misalkan fungsi gelombang bagi H adalah $\{\psi_i(r,t)\}$

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

$$= [\hat{H}^{(0)}(r) + \hat{G}(r,t)]\psi_i(r,t)$$

Misalkan $\psi_i^{(0)}(r)$ adalah keadaan awal, dan karena kehadiran gangguan

Selanjutnya fungsi $\psi_i(r,t)$ dinyatakan sebagai kombinasi linier dari fungsi-fungsi lainnya:

$$\psi_i(r,t) = \sum_k a_{ik}(t)\psi_k^{(0)}(r,t)$$

$$i\hbar \sum_k \frac{\partial a_{ik}(t)}{\partial t}\psi_k^{(0)}(r,t) + \cancel{i\hbar \sum_k a_{ik}(t)\frac{\partial \psi_k^{(0)}(r,t)}{\partial t}} =$$

$$\cancel{\sum_k a_{ik}(t)\hat{H}^{(0)}\psi_k^{(0)}(r,t)} + \sum_k a_{ik}(t)G(r,t)\psi_k^{(0)}(r,t)$$

$$i\hbar\sum_k \frac{\partial a_{ik}(t)}{\partial t}\psi_k^{(0)}(r,t) = \sum_k a_{ik}(t)G(r,t)\psi_k^{(0)}(r,t)$$

Misalkan pada akhirnya, sistem berada pada $\psi_f^{(0)}(r,t)$ maka

$$i\hbar\sum_k \frac{\partial a_{ik}(t)}{\partial t}\int \psi_f^{(0)*}(r,t)\psi_k^{(0)}(r,t)dvdt = \sum_k a_{ik}(t)\int \psi_f^{(0)*}(r,t)G(r,t)\psi_k^{(0)}(r,t)dv$$

$$i\hbar\frac{\partial a_{if}(t)}{\partial t} = \sum_k a_{ik}(t)\int \psi_f^{(0)*}(r,t)G(r,t)\psi_k^{(0)}(r,t)dv$$

Pada permulaan diandaikan sistem berada sepenuhnya pada keadaan $\psi_i^{(0)}(r)$ sehingga $a_{ii}$=1 dan semua $a_{ik}$=*0.*

Asumsikan, beberapa saat sejak gangguan dimulai, $a_{ii}$ masih mendekati 1 sedangkan semua $a_{ik} << a_{ii}$. Jadi, suku paling penting dalam persamaan di atas adalah yang mempunyai indeks *k*=*i*, sehingga

$$\frac{\partial a_{if}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\int \psi_f^{(0)}(r,t)G(r,t)\psi_i^{(0)}(r,t)dv$$

Misalkan: $G(r,t) = G^{(0)}(r)\varphi(t)$

$$\frac{\partial a_{if}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\int \psi_f^{(0)}(r,t) G(r,t) \psi_i^{(0)}(r,t) dv$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\int \psi_f^{(0)*}(r) e^{iE_f^{(0)}t/\hbar} \hat{G}^{(0)}(r)\varphi(t)\psi_i^{(0)}(r) e^{-iE_i^{(0)}t/\hbar} dv$$

$$= \frac{1}{i\hbar}\underline{\int \psi_f^{(0)*}(r)\hat{G}^{(0)}(r)\psi_i^{(0)}(r) dv}\ \varphi(t) e^{i(E_f^{(0)}-E_i^{(0)})t/\hbar}$$

$$= \frac{1}{i\hbar} G_{fi}^{(0)}\varphi(t) e^{i(E_f^{(0)}-E_i^{(0)})t/\hbar}$$

$$a_{if}(T) - a_{if}(0) = \frac{G_{fi}^{o}}{i\hbar}\int_0^T dt\, \varphi(t)\, e^{i(E_f^{(0)}-E_i^{(0)})t/\hbar}$$

$$a_{if}(T) - a_{if}(0) = \frac{G_{fi}^{o}}{i\hbar}\int_0^T dt\,\varphi(t)\,e^{i(E_f^{(0)}-E_i^{(0)})t/\hbar}$$

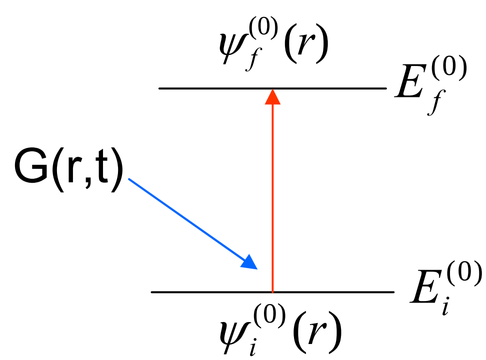
=0

$$\omega_{fi} = \frac{E_f^{(0)} - E_i^{(0)}}{\hbar}$$

$$a_{if}(T) = \frac{G_{fi}^{o}}{i\hbar}\int_0^T \varphi(t)\,e^{i\omega_{fi}t}\,dt$$

Peluang bertransisi dari keadaan stasioner awal $\psi_i^{(0)}(r)$ ke keadaan stasioner akhir $\psi_f^{(0)}(r)$

$$P_{if} = \tfrac{1}{T}\left|a_{if}(T)\right|^2$$



Gangguan oleh medan EM $\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_o \cos\omega t$

Interaksi medan dengan momen dipol:

$$\hat{G}(r,t) = \vec{\mu}.\vec{\mathcal{E}} = (e\mathcal{E}_o r\cos\theta)\cos\omega t$$

$$\hat{G}^{(0)}(r) = e\mathcal{E}_o r\cos\theta; \quad \varphi(t) = \cos\omega t$$

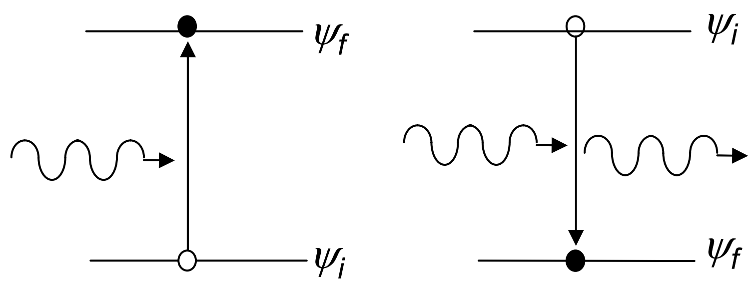
$$G^o_{fi} = e\mathcal{E}_o \int \psi_f^{(0)*}(r)\, r\cos\theta\, \psi_i^{(0)}(r)\,dv = e\mathcal{E}_o M_{fi}$$

$$a_{if}(T) = \frac{e\mathcal{E}_o M_{fi}}{i\hbar}\int_0^T dt\ \cos\omega t\, e^{i\omega_{fi}t}$$

$$= \frac{e\mathcal{E}_o M_{fi}}{i\,2\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_{fi}+\omega)T}-1}{\omega_{fi}+\omega} + \frac{e^{i(\omega_{fi}-\omega)T}-1}{\omega_{fi}-\omega}\right]$$

Dalam kasus absorpsi di sekitar $\omega = \omega_{fi}$, suku pertama dapat diabaikan.

$$P_{fi} = \frac{1}{T}\left|a_{if}(t)\right|^2 = \frac{e^2\mathcal{E}_o^2\left|M_{fi}\right|^2}{4\hbar^2 T}\frac{\sin^2[(\omega_{fi}-\omega)T/2]}{[(\omega_{fi}-\omega)/2]^2}$$



(a) (b)