KIMIA KUANTUM

KASMUI

KIMIA KUANTUM

Terjemahan Bahasa Indonesia

Sumber utama: Ira N. Levine, Quantum Chemistry, Edisi Ketujuh

KATA PENGANTAR PENERJEMAH

Puji syukur ke hadirat Allah Swt. atas limpahan rahmat, taufik, dan karunia-Nya sehingga penerjemahan bahasa Indonesia buku *Quantum Chemistry*, Edisi Ketujuh, karya Ira N. Levine ini dapat diselesaikan sampai dengan Bab 12. Penerjemahan dan penyuntingan naskah ini merupakan ikhtiar untuk menyediakan bahan pembelajaran kimia kuantum yang sistematis, mendalam, dan lebih mudah diakses oleh pembaca berbahasa Indonesia.

Buku ini terutama ditujukan bagi mahasiswa tingkat sarjana lanjut dan mahasiswa tahun pertama program pascasarjana. Meskipun demikian, materi yang disajikan juga diharapkan bermanfaat bagi dosen, peneliti, praktisi kimia komputasi, serta pembaca dari berbagai cabang ilmu kimia yang memerlukan landasan kuat mengenai mekanika kuantum, struktur atom, dan struktur elektronik molekul.

Salah satu tantangan dalam mempelajari kimia kuantum adalah adanya perbedaan latar belakang matematika dan fisika di antara para pembaca. Oleh karena itu, konsep-konsep matematika yang diperlukan—seperti bilangan kompleks, persamaan diferensial, operator, vektor, matriks, nilai eigen, dan determinan—diperkenalkan secara terpadu dengan penerapannya dalam persoalan mekanika kuantum. Penurunan persamaan disajikan secara bertahap agar pembaca tidak hanya memahami bentuk matematisnya, tetapi juga mampu menangkap makna fisis dan kimiawi yang terkandung di dalamnya.

Dalam proses penerjemahan, urutan pembahasan, struktur bab dan subbab, contoh, soal, tabel, gambar, persamaan, serta nomor persamaan dipertahankan sejauh mungkin sesuai dengan sumber utama. Notasi matematika dituliskan dalam format persamaan dokumen yang dapat dibaca dan disunting, bukan dalam bentuk kode LaTeX mentah. Istilah yang telah lazim digunakan dalam literatur kimia fisik, kimia kuantum, dan kimia komputasi berbahasa Indonesia tetap dipertahankan. Untuk istilah yang belum memiliki padanan tunggal atau berpotensi menimbulkan ambiguitas, istilah bahasa Inggris dicantumkan pada kemunculan pertama atau pada bagian yang memerlukan penegasan makna.

Naskah ini mencakup dua belas bab yang disusun secara berjenjang. Bab 1 menguraikan latar belakang lahirnya mekanika kuantum, Persamaan Schrödinger, prinsip ketidakpastian, probabilitas, bilangan kompleks, satuan, dan kalkulus. Bab 2 membahas partikel dalam kotak, partikel bebas, sumur potensial, dan penerowongan kuantum. Bab 3 memperkenalkan operator, fungsi eigen, nilai eigen, degenerasi, nilai rata-rata, serta persyaratan fungsi gelombang yang dapat diterima.

Bab 4 membahas osilator harmonik dan vibrasi molekul diatomik. Bab 5 menguraikan momentum sudut dan metode operator tangga, sedangkan Bab 6 membahas atom hidrogen, pemisahan variabel, rotor tegar, orbital mirip hidrogen, efek Zeeman, dan penyelesaian numerik Persamaan Schrödinger radial. Bab 7 menyajikan teorema-teorema dasar mekanika kuantum, operator Hermitian,

komutasi operator, paritas, superposisi keadaan, pengukuran, postulat mekanika kuantum, dan representasi matriks.

Bab 8 membahas metode variasi, determinan, persamaan linear simultan, fungsi variasi linear, nilai eigen, dan vektor eigen. Bab 9 menguraikan teori gangguan untuk keadaan nondegenerasi dan degenerasi, koreksi energi dan fungsi gelombang, penerapannya pada atom helium, teori gangguan bergantung waktu, serta interaksi antara radiasi dan materi. Bab 10 membahas spin elektron, teorema spin-statistik, prinsip eksklusi Pauli, determinan Slater, atom helium dan litium, momen magnetik spin, serta dasar-dasar spektroskopi resonansi magnetik inti.

Bab 11 membahas atom berelektron banyak melalui metode medan konsisten-diri Hartree dan Hartree–Fock, orbital atom, korelasi elektron, penjumlahan momentum sudut, term atom, kaidah Hund, interaksi spin–orbit, Hamiltonian atom, dan kaidah Condon–Slater. Bab 12 menutup bagian terjemahan ini dengan pembahasan simetri molekul, unsur dan operasi simetri, hasil kali operasi simetri, hubungan simetri dengan momen dipol dan aktivitas optik, representasi matriks operasi simetri, serta klasifikasi kelompok titik molekul.

Setiap bab dilengkapi dengan contoh, penurunan persamaan, rangkuman, serta soal-soal konseptual dan kuantitatif untuk memperkuat pemahaman pembaca. Pada bagian tertentu disertakan pula jawaban soal terpilih sebagaimana tersedia dalam sumber utama. Daftar isi disusun secara rinci dan dapat diperbarui apabila terjadi perubahan tata letak, penomoran halaman, atau penyempurnaan struktur dokumen.

Sebagai penguatan pedagogis, edisi terjemahan ini juga dilengkapi dengan bagian khusus yang memuat soal-soal setiap bab beserta petunjuk jawaban dan pembahasan. Soal-soal tersebut disusun secara sistematis mengikuti urutan materi dalam masing-masing bab agar dapat digunakan untuk latihan mandiri, tugas perkuliahan, kegiatan tutorial, dan evaluasi pembelajaran. Petunjuk jawaban tidak hanya memberikan hasil akhir, tetapi juga menjelaskan konsep, prinsip, persamaan, asumsi, tahapan penyelesaian, penggunaan satuan, serta penafsiran fisis dan kimiawi dari jawaban yang diperoleh. Dengan demikian, bagian ini diharapkan dapat membantu pembaca memahami cara berpikir dan prosedur penyelesaian persoalan kimia kuantum secara runtut, bukan sekadar menghafalkan rumus atau hasil perhitungan.

Petunjuk jawaban dan pembahasan tersebut merupakan tambahan editorial penerjemah/editor yang disusun untuk melengkapi fungsi buku sebagai bahan ajar. Bagian tambahan ini ditempatkan secara jelas sehingga dapat dibedakan dari teks asli, jawaban terpilih, dan materi yang secara langsung berasal dari buku sumber. Kehadirannya tidak dimaksudkan untuk menggantikan proses penalaran mandiri, melainkan untuk memberikan arahan, sarana pemeriksaan, dan umpan balik akademik setelah pembaca berusaha menyelesaikan soal secara mandiri.

Sebagai tambahan editorial lainnya, pada sejumlah bab disertakan catatan integrasi sains dan nilai-nilai Islam berupa ayat Al-Qur'an, hadis, atau refleksi keilmuan yang relevan. Bagian tersebut ditempatkan secara jelas dan terpisah dari teks sumber. Penambahannya tidak dimaksudkan untuk mengubah teori, penalaran, maupun argumentasi ilmiah penulis asli, melainkan untuk menempatkan kegiatan mempelajari alam dalam kerangka tauhid, amanah keilmuan, ketelitian, kerendahan hati intelektual, tanggung jawab etis, serta kemanfaatan ilmu bagi kehidupan.

Naskah ini juga dilengkapi dengan daftar pustaka dan glosarium untuk membantu pembaca menelusuri sumber rujukan serta memahami istilah-istilah penting dalam mekanika kuantum dan kimia kuantum. Kehadiran bagian-bagian tersebut diharapkan dapat memudahkan proses pembelajaran, terutama bagi pembaca yang baru mulai memasuki bidang kimia kuantum dan kimia komputasi.

Penerjemahan karya ilmiah yang sarat dengan notasi matematika, persamaan, terminologi khusus, dan konsep abstrak merupakan pekerjaan yang memerlukan ketelitian serta pemeriksaan berulang. Penyusunan petunjuk jawaban dan pembahasan soal juga menuntut konsistensi antara konsep, persamaan, notasi, satuan, hasil perhitungan, dan penafsiran ilmiahnya. Meskipun penyuntingan dan pemeriksaan telah dilakukan terhadap bahasa, istilah, simbol, penomoran persamaan, jawaban soal, gambar, dan tata letak, tidak tertutup kemungkinan masih terdapat kekurangan atau ketidakkonsistenan.

Oleh karena itu, kritik dan saran dari para pembaca sangat diharapkan, khususnya mengenai ketepatan terjemahan, konsistensi terminologi dan notasi, kelengkapan persamaan, kebenaran nomor persamaan, ketepatan petunjuk jawaban dan pembahasan soal, kualitas gambar, serta keterbacaan tata letak. Masukan tersebut akan sangat bermanfaat bagi penyempurnaan naskah pada edisi berikutnya.

Ucapan terima kasih disampaikan kepada semua pihak yang telah memberikan dukungan, masukan, dan dorongan selama proses penerjemahan, penyuntingan, pemeriksaan persamaan, penyusunan petunjuk jawaban dan pembahasan soal, serta penataan dokumen ini. Semoga buku ini dapat berkontribusi terhadap pengembangan pembelajaran kimia kuantum dan kimia komputasi di Indonesia, memperkuat pemahaman mahasiswa mengenai hubungan antara matematika, fisika, dan kimia, serta mendorong lahirnya kegiatan pendidikan dan penelitian yang teliti, bertanggung jawab, dan bermanfaat.

Semoga Allah Swt. menerima ikhtiar ini sebagai amal yang bermanfaat, memberikan kemudahan kepada para pembaca dalam mempelajari dan memahaminya, serta membimbing kita untuk menggunakan ilmu pengetahuan demi kemaslahatan umat manusia dan kelestarian alam.

Semarang, Agustus 2026

Penerjemah/Editor

KATA PENGANTAR EDISI KETUJUH

Buku ini ditujukan untuk mata kuliah kimia kuantum pada tahun pertama program pascasarjana dan tingkat sarjana lanjut. Buku ini memberikan pembahasan kimia kuantum secara mendalam dan memungkinkan mahasiswa memahami prinsip-prinsip dasarnya. Keterbatasan latar belakang matematika banyak mahasiswa kimia diperhitungkan; karena itu, ulasan mengenai matematika yang diperlukan, seperti bilangan kompleks, persamaan diferensial, operator, dan vektor, turut disertakan. Penurunan persamaan disajikan secara lengkap, langkah demi langkah, sehingga mahasiswa pada berbagai tingkat dapat mengikutinya dan memahaminya dengan mudah. Setiap bab dilengkapi beragam soal pekerjaan rumah, baik kuantitatif maupun konseptual.

Hal Baru pada Edisi Ini

Perbaikan berikut dilakukan pada edisi ketujuh:

- Pembaruan menyeluruh yang mencerminkan penelitian kimia kuantum dan metode kimia komputasi terkini, termasuk banyak rujukan literatur baru.
- Soal-soal baru ditambahkan pada sebagian besar bab, termasuk soal komputasi tambahan pada Bab 15 dan 16.
- Penjelasan direvisi pada bagian-bagian yang sebelumnya dirasakan sulit oleh mahasiswa.
- Warna ditambahkan pada gambar untuk meningkatkan daya tarik visual buku.
- Program komputer dalam Pedoman Penyelesaian dan teks diubah dari BASIC menjadi C++.
- Teks diperkaya dengan rujukan terhadap penelitian modern dalam mekanika kuantum, seperti perumusan ulang prinsip ketidakpastian oleh Ozawa dan pengamatan efek interferensi pada molekul yang sangat besar.
- Materi baru dan materi yang diperluas dalam edisi ketujuh mencakup:
- Karya teoretis dan eksperimental baru tentang prinsip ketidakpastian (Bagian 5.1).
- Metode CM5 dan Hirshfeld-I untuk muatan atom (Bagian 15.7).
- Korelasi statis dan dinamis (Bagian 16.1).
- Pembahasan yang diperluas mengenai ekstrapolasi menuju batas himpunan basis lengkap atau complete-basis-set (CBS) (Bagian 15.5, 16.1, dan 16.4).
- Penggunaan matriks densitas tereduksi dua-elektron (Bagian 16.2).
- Metode DFT-D3 (Bagian 16.5).
- Fungsional korelasi VV10 untuk dispersi (Bagian 16.5).
- Metode W1-F12 dan W2-F12 (Bagian 16.6).
- Interaksi dispersi (penumpukan/stacking) dalam DNA (Bagian 16.8).
- Metode MP2.5, MP2.X, SCS(MI)-CCSD, dan SCS(MI)-MP2 (Bagian 16.8).

- Pembahasan yang diperluas mengenai perhitungan konstanta perisai NMR dan konstanta kopling spin-spin, termasuk penskalaan linear (Bagian 16.9).
- Metode fragmentasi (Bagian 16.10).
- Metode PM6-D3H4 dan PM7 (Bagian 17.4).

Sumber daya: perangkat lunak pemodelan molekul Spartan Student Edition yang bersifat opsional menyediakan akses ke paket pemodelan molekul canggih yang memadukan antarmuka grafis yang mudah digunakan dengan seperangkat fungsi komputasi yang terarah. Pedoman penyelesaian soal-soal akhir bab tersedia melalui laman penerbit yang disebutkan pada edisi asli.

Perkembangan luar biasa perhitungan kimia kuantum ke seluruh bidang kimia menjadikan pemahaman metode modern perhitungan struktur elektronik sangat penting bagi semua mahasiswa kimia; buku ini ditulis dengan tujuan tersebut.

Saya berusaha membuat penjelasan jelas dan lengkap tanpa mengabaikan bagian yang sulit atau halus. Penurunan persamaan diberikan dengan rincian yang memadai agar mudah diikuti, dan sedapat mungkin saya menghindari penggunaan frasa yang sering membuat frustrasi, “dapat ditunjukkan bahwa”. Tujuannya ialah memberikan kepada mahasiswa pemahaman yang kokoh mengenai aspek fisis dan matematis mekanika kuantum dan struktur elektronik molekul. Buku ini dirancang agar bermanfaat bagi mahasiswa dari semua cabang kimia, bukan hanya bagi calon kimiawan kuantum. Namun, penyajiannya juga disusun sedemikian rupa sehingga mereka yang melanjutkan studi kimia kuantum memiliki landasan yang baik dan tidak terhambat oleh miskonsepsi.

Salah satu hambatan yang dihadapi banyak mahasiswa kimia ketika mempelajari mekanika kuantum ialah ketidakakraban mereka dengan sebagian besar matematika yang diperlukan. Dalam buku ini saya menyertakan pembahasan terperinci mengenai matematika tersebut. Alih-alih menempatkan seluruh matematika dalam sebuah bab pendahuluan atau serangkaian lampiran, saya mengintegrasikan matematika dengan fisika dan kimia. Penerapan langsung matematika untuk menyelesaikan masalah mekanika kuantum akan membuat matematika lebih bermakna bagi mahasiswa dibandingkan mempelajarinya secara terpisah. Saya juga memperhatikan keterbatasan latar belakang fisika banyak mahasiswa kimia dengan meninjau kembali topik-topik fisika yang diperlukan.

Edisi-edisi sebelumnya buku ini memperoleh manfaat dari tinjauan dan saran Leland Allen, N. Colin Baird, Steven Bernasek, James Bolton, W. David Chandler, Donald Chesnut, R. James Cross, Gary DeBoer, Douglas Doren, David Farrelly, Melvyn Feinberg, Gordon A. Gallup, Daniel Gerrity, David Goldberg, Robert Griffin, Tracy Hamilton, Sharon Hammes-Schiffer, James Harrison, John Head, Warren Hehre, Robert Hinde, Hans Jaffé, Miklos Kertesz, Neil Kestner, Harry King, Peter Kollman, Anna Krylov, Mel Levy, Errol Lewars, Joel Liebman, Tien-Sung Tom Lin, Ryan McLaughlin, Frank Meeks, Robert Metzger, Charles

Millner, John H. Moore, Pedro Muiño, William Palke, Sharon Palmer, Kirk Peterson, Gary Pfeiffer, Russell Pitzer, Oleg Prezhdo, Frank Rioux, Kenneth Sando, Harrison Shull, James J. P. Stewart, Richard Stratt, Fu-Ming Tao, Ronald Terry, Alexander Van Hook, Arieh Warshel, Peter Weber, John S. Winn, dan Michael Zerner.

Penelaah edisi ketujuh adalah:

John Asbury, Pennsylvania State University
Mu-Hyun Baik, Indiana University
Lynne Batchelder, Tufts University
Richard Dawes, Missouri University of Science and Technology
Kalju Kahn, University of California, Santa Barbara
Scott Kirkby, East Tennessee State University
Jorge Morales, Texas Technical University
Ruben Parra, DePaul University
Michael Wedlock, Gettysburg College

Saya mengucapkan terima kasih kepada semua pihak tersebut dan sejumlah penelaah anonim atas saran-saran mereka yang sangat membantu.

Saya akan sangat menghargai setiap saran pembaca untuk memperbaiki buku ini.

Ira N. Levine
INLevine@brooklyn.cuny.edu

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR PENERJEMAH 3
KATA PENGANTAR EDISI KETUJUH 6
BAB 1 PERSAMAAN SCHRÖDINGER 18
1.1 Kimia Kuantum 18
1.2 Latar Belakang Historis Mekanika Kuantum 19
1.3 Prinsip Ketidakpastian 25
1.4 Persamaan Schrödinger Bergantung Waktu 27
1.5 Persamaan Schrödinger Tak Bergantung Waktu 31
1.6 Probabilitas 34
1.7 Bilangan Kompleks 36
1.8 Satuan 38
1.9 Kalkulus 38
Rangkuman Bab 1 39
Catatan Integrasi Sains dan Islam 39
Soal Bab 1 40
BAB 2 PARTIKEL DALAM KOTAK 45
2.1 Persamaan Diferensial 45
2.2 Partikel dalam Kotak Satu Dimensi 46
2.3 Partikel Bebas dalam Satu Dimensi 53
2.4 Partikel dalam Sumur Persegi Panjang 54
2.5 Penerowongan 56
RANGKUMAN 58
CATATAN INTEGRASI SAINS DAN ISLAM 58
SOAL BAB 2 59
BAB 3 OPERATOR 64
3.1 Operator 64
3.2 Fungsi Eigen dan Nilai Eigen 68
3.3 Operator dan Mekanika Kuantum 70
3.4 Persamaan Schrödinger Tiga-Dimensi dan Banyak-Partikel 75
3.5 Partikel dalam Kotak Tiga-Dimensi 78

3.6 Degenerasi 83
3.7 Nilai Rata-Rata 84
3.8 Persyaratan bagi Fungsi Gelombang yang Dapat Diterima 87
Ringkasan 89
Soal 90
Integrasi Nilai Keislaman 94
Al-Qur'an 94
Hadis 94
BAB 4 95
OSILATOR HARMONIK 95
4.1 Penyelesaian Persamaan Diferensial dengan Deret Pangkat 95
4.2 Osilator Harmonik Satu Dimensi 98
Perlakuan Mekanika Klasik 98
Perlakuan Mekanika Kuantum 100
Fungsi Genap dan Fungsi Ganjil 105
Fungsi Gelombang Osilator Harmonik 106
4.3 Vibrasi Molekul Diatomik 110
Contoh 113
4.4 Penyelesaian Numerik Persamaan Schrödinger Satu Dimensi Tak Bergantung Waktu 114
Metode Numerov 114
Variabel Tak Berdimensi 116
Pemilihan x_r,o, x_r,maks, dan s_r 119
Program Komputer untuk Metode Numerov 120
Penggunaan Lembar Kerja untuk Menyelesaikan Persamaan Schrödinger Satu Dimensi 121
Penggunaan Mathcad untuk Menyelesaikan Persamaan Schrödinger Satu Dimensi 125
Ringkasan Langkah-Langkah Metode Numerov 125
Ringkasan 126
Soal 126
Integrasi Nilai Keislaman 134
Ukuran dan Keteraturan dalam Penciptaan 134

Ihsan dan Ketelitian Ilmiah 135
BAB 5 136
MOMENTUM SUDUT 136
5.1 Penetapan Serentak Beberapa Besaran 136
Contoh 139
5.2 Vektor 141
Vektor dalam Ruang n-Dimensi 144
5.3 Momentum Sudut Sistem Satu Partikel 146
Mekanika Klasik Momentum Sudut Satu Partikel 146
Operator Momentum Sudut Orbital Satu Partikel 148
Fungsi Eigen dan Nilai Eigen Momentum Sudut Orbital Satu Partikel 152
Contoh 157
5.4 Metode Operator Tangga untuk Momentum Sudut 160
Ringkasan 165
Integrasi Nilai Keislaman — Tambahan Editorial 166
Soal 167
BAB 6 171
ATOM HIDROGEN 171
6.1 Masalah Gaya Pusat Satu Partikel 171
6.2 Partikel Tidak Berinteraksi dan Pemisahan Variabel 174
6.3 Reduksi Masalah Dua Partikel menjadi Dua Masalah Satu Partikel 176
6.4 Rotor Tegar Dua Partikel 179
6.5 Atom Hidrogen 184
Penyelesaian Persamaan Radial 187
Tingkat Energi 191
Degenerasi 192
6.6 Fungsi Gelombang Keadaan Terikat Atom Hidrogen 193
Faktor Radial 193
Fungsi Gelombang dan Energi Keadaan Dasar 193
Contoh 195
Contoh 195
Fungsi Gelombang untuk n = 2 197

Fungsi Distribusi Radial 198
Contoh 200
Fungsi Mirip Hidrogen Real 201
6.7 Orbital Mirip Hidrogen 203
6.8 Efek Zeeman 208
6.9 Penyelesaian Numerik Persamaan Schrödinger Radial 210
Ringkasan 212
Soal 213
Integrasi Nilai Keislaman 219
BAB 7 221
TEOREMA-TEOREMA MEKANIKA KUANTUM 221
7.1 Notasi 221
7.2 Operator Hermitian 222
Definisi Operator Hermitian 222
Contoh Operator Hermitian 223
Teorema tentang Operator Hermitian 224
7.3 Penguraian dalam Fungsi-Fungsi Eigen 228
Penguraian Fungsi Menggunakan Fungsi Gelombang Kotak Partikel 228
Penguraian Fungsi dalam Fungsi-Fungsi Eigen 231
Contoh 233
7.4 Fungsi Eigen Operator-Operator yang Saling Komut 234
7.5 Paritas 237
7.6 Pengukuran dan Superposisi Keadaan 240
Contoh 244
Contoh 245
7.7 Fungsi Eigen Posisi 246
7.8 Postulat-Postulat Mekanika Kuantum 249
Contoh 253
7.9 Pengukuran dan Interpretasi Mekanika Kuantum 255
7.10 Matriks 260
Matriks dan Mekanika Kuantum 262
Rangkuman 263

Catatan Integratif: Ketelitian Ilmiah, Pengukuran, dan Batas Pengetahuan ... 264
Soal ... 265
BAB 8 ... 275
METODE VARIASI ... 275
8.1 Teorema Variasi ... 275
Contoh: partikel dalam kotak satu dimensi ... 277
Contoh: osilator harmonik satu dimensi ... 278
8.2 Perluasan Metode Variasi ... 280
8.3 Determinan ... 281
Contoh: evaluasi determinan dengan operasi baris ... 284
8.4 Persamaan Linear Simultan ... 285
Contoh: sistem homogen tiga peubah ... 287
Contoh: penyelesaian dengan eliminasi Gauss–Jordan ... 288
8.5 Fungsi Variasi Linear ... 289
Contoh: empat fungsi basis untuk partikel dalam kotak ... 292
8.6 Matriks, Nilai Eigen, dan Vektor Eigen ... 296
Contoh: nilai dan vektor eigen matriks Hermitian 2 × 2 ... 301
Ringkasan ... 303
Soal ... 305
BAB 9 ... 316
TEORI GANGGUAN ... 316
9.1 Teori Gangguan ... 316
9.2 Teori Gangguan Nondegenerasi ... 317
Teori Gangguan Nondegenerasi ... 317
Koreksi Energi Orde Pertama ... 319
Contoh ... 319
Latihan ... 320
Koreksi Fungsi Gelombang Orde Pertama ... 320
Koreksi Energi Orde Kedua ... 320
Pembahasan ... 322
Perbandingan Metode Variasi dan Metode Gangguan ... 322
Metode Variasi-Gangguan ... 323

9.3 Perlakuan Gangguan terhadap Keadaan Dasar Atom Helium 323
9.4 Perlakuan Variasi terhadap Keadaan Dasar Helium 327
9.5 Teori Gangguan untuk Tingkat Energi Terdegenerasi 330
9.6 Penyederhanaan Persamaan Sekuler 334
9.7 Perlakuan Gangguan terhadap Keadaan Tereksitasi Pertama Helium 336
9.8 Teori Gangguan Bergantung Waktu 342
9.9 Interaksi Radiasi dan Materi 345
Rangkuman 347
Soal 348
CATATAN INTEGRATIF: RELEVANSI AL-QUR'AN DAN HADIS 353
BAB 10 354
SPIN ELEKTRON DAN TEOREMA SPIN-STATISTIK 354
10.1 Spin Elektron 354
10.2 Spin dan Atom Hidrogen 357
10.3 Teorema Spin-Statistik 358
10.4 Atom Helium 361
10.5 Prinsip Eksklusi Pauli 362
10.6 Determinan Slater 366
10.7 Perlakuan Perturbasi Keadaan Dasar Litium 367
10.8 Perlakuan Variasi Keadaan Dasar Litium 368
10.9 Momen Magnetik Spin 369
Spektroskopi NMR 369
10.10 Operator Tangga untuk Spin Elektron 372
Ringkasan 374
Soal 374
BAB 11 378
ATOM BERELEKTRON BANYAK 378
11.1 Metode Medan Konsisten-Diri Hartree–Fock 378
Metode SCF Hartree 378
Metode SCF Hartree–Fock 381
11.2 Orbital dan Tabel Periodik 384
11.3 Korelasi Elektron 387

11.4 Penjumlahan Momentum Sudut 389
11.5 Momentum Sudut dalam Atom Berelektron Banyak 393
Momentum Sudut Orbital dan Spin Elektronik Total 393
Term Atom 395
Penurunan Term Atom 396
Kaidah Hund 398
Nilai Eigen Fungsi Spin Dua Elektron 399
Fungsi Gelombang Atom 400
Paritas Keadaan Atom 401
Momentum Sudut Elektronik Total dan Tingkat Atom 402
Term dan Tingkat Hidrogen serta Helium 403
Tabel Tingkat Energi Atom 403
11.6 Interaksi Spin–Orbit 404
11.7 Hamiltonian Atom 406
11.8 Kaidah Condon–Slater 408
Ringkasan 411
Soal 412
Catatan Integrasi Keislaman — Tambahan Penerjemah 414
Isyarat untuk Meneliti Keteraturan Alam 414
Keutamaan Menempuh Jalan Ilmu 415
BAB 12 416
SIMETRI MOLEKUL 416
12.1 Unsur dan Operasi Simetri 416
Unsur Simetri dan Operasi Simetri 416
Hasil Kali Operasi Simetri 420
Simetri dan Momen Dipol 422
Simetri dan Aktivitas Optik 422
Operasi Simetri dan Mekanika Kuantum 423
Matriks dan Operasi Simetri 426
12.2 Kelompok Titik Simetri 427
I. Kelompok tanpa sumbu C_n: C_1, C_s, C_i 428
II. Kelompok dengan satu sumbu C_n: C_n, C_{nh}, C_{nv}, S_{2n} 429

III. Kelompok dengan satu sumbu C_n dan n sumbu C_2: D_n, D_{nh}, D_nd 430
IV. Kelompok dengan lebih dari satu sumbu C_n, n > 2: T_d, T, T_h, O_h, O, I_h, I, K_h 431
Ringkasan 435
CATATAN INTEGRATIF: RELEVANSI AL-QUR'AN DAN HADIS 435
Soal 436
DAFTAR PUSTAKA 441
GLOSARIUM 442
KUMPULAN SOAL DAN PETUNJUK JAWABAN 445
BAB 1 — PERSAMAAN SCHRÖDINGER 446
Soal 446
PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 1 451
BAB 2 — PARTIKEL DALAM KOTAK 467
Soal 467
PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 2 472
BAB 3 — OPERATOR 489
Soal 489
PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 3 494
BAB 4 — OSILATOR HARMONIK 521
Soal 521
PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 4 530
BAB 5 — MOMENTUM SUDUT 559
Soal 559
PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 5 563
BAB 6 — ATOM HIDROGEN 583
Soal 583
PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 6 590
BAB 7 — TEOREMA-TEOREMA MEKANIKA KUANTUM 620
Soal 620
PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 7 630
BAB 8 — METODE VARIASI 666
Soal 666

PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 8 679
BAB 9 — TEORI GANGGUAN 717
Soal 717
PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 9 722
BAB 10 — SPIN ELEKTRON DAN TEOREMA SPIN-STATISTIK 740
Soal 740
PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 10 743
BAB 11 — ATOM BERELEKTRON BANYAK 758
Soal 758
PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 11 763
BAB 12 — SIMETRI MOLEKUL 784
Soal 784
PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 12 788

BAB 1
PERSAMAAN SCHRÖDINGER

1.1 Kimia Kuantum

Pada akhir abad ketujuh belas, Isaac Newton menemukan mekanika klasik, yaitu hukum-hukum gerak benda makroskopik. Pada awal abad kedua puluh, para fisikawan menemukan bahwa mekanika klasik tidak menggambarkan dengan benar perilaku partikel yang sangat kecil, seperti elektron dan inti atom serta molekul. Perilaku partikel-partikel tersebut digambarkan oleh seperangkat hukum yang disebut mekanika kuantum.

Kimia kuantum menerapkan mekanika kuantum pada persoalan kimia. Pengaruh kimia kuantum tampak pada semua cabang kimia. Kimiawan fisik menggunakan mekanika kuantum untuk menghitung—dengan bantuan mekanika statistik—sifat termodinamika gas, misalnya entropi dan kapasitas panas; menafsirkan spektrum molekul sehingga memungkinkan penentuan eksperimental sifat molekul, misalnya geometri molekul, momen dipol, penghalang rotasi internal, dan perbedaan energi antar-isomer konformasi; menghitung sifat molekul secara teoretis; menghitung sifat keadaan transisi dalam reaksi kimia sehingga memungkinkan perkiraan konstanta laju; memahami gaya antarmolekul; dan menangani ikatan dalam padatan.

Kimiawan organik menggunakan mekanika kuantum untuk memperkirakan kestabilan relatif molekul, menghitung sifat zat antara reaksi, menyelidiki mekanisme reaksi kimia, serta menganalisis dan meramalkan spektrum resonansi magnetik inti.

Kimiawan analitik menggunakan metode spektroskopi secara luas. Frekuensi dan intensitas garis-garis dalam spektrum hanya dapat dipahami dan ditafsirkan dengan benar melalui penggunaan mekanika kuantum.

Kimiawan anorganik menggunakan teori medan ligan, yaitu metode mekanika kuantum hampiran, untuk meramalkan dan menjelaskan sifat ion kompleks logam transisi.

Meskipun ukuran molekul yang penting secara biologis membuat perhitungan mekanika kuantum terhadap molekul tersebut sangat sulit, biokimiawan mulai memperoleh manfaat dari kajian mekanika kuantum mengenai konformasi molekul biologis, pengikatan enzim-substrat, dan solvasi molekul biologis.

Mekanika kuantum menentukan sifat nanomaterial, yaitu objek yang sekurang-kurangnya memiliki satu dimensi dalam rentang 1 sampai 100 nm, dan metode perhitungan untuk menanganinya terus dikembangkan. Ketika satu atau lebih dimensi suatu bahan berada di bawah 100 nm—terutama di bawah 20 nm—dapat

terjadi perubahan dramatis pada sifat optik, elektronik, kimia, dan sifat lainnya dibandingkan bahan ruah. Objek semikonduktor atau logam dengan satu dimensi pada rentang 1 sampai 100 nm disebut sumur kuantum (quantum well); dengan dua dimensi pada rentang tersebut disebut kawat kuantum (quantum wire); dan dengan ketiga dimensi pada rentang tersebut disebut titik kuantum (quantum dot). Kata kuantum pada istilah-istilah tersebut menunjukkan peran utama mekanika kuantum dalam menentukan sifat bahan itu. Banyak orang memperkirakan bahwa nanosains dan nanoteknologi akan membawa "revolusi industri berikutnya".

Peningkatan cepat kecepatan komputer dan pengembangan metode baru untuk melakukan perhitungan molekul, seperti teori fungsional kerapatan—dibahas pada Bab 16—telah menjadikan kimia kuantum sebagai alat praktis dalam seluruh bidang kimia. Saat ini, sejumlah perusahaan menjual perangkat lunak kimia kuantum untuk melakukan perhitungan kimia kuantum molekul. Program-program tersebut dirancang untuk digunakan oleh semua jenis kimiawan, bukan hanya kimiawan kuantum. Karena peran kimia kuantum serta metode teoretis dan komputasi terkait berkembang sangat cepat, American Chemical Society mulai menerbitkan Journal of Chemical Theory and Computation pada tahun 2005.

"Mekanika kuantum ... mendasari hampir seluruh sains dan teknologi modern. Mekanika kuantum mengatur perilaku transistor dan rangkaian terpadu ... serta merupakan ... dasar kimia dan biologi modern" (Stephen Hawking, A Brief History of Time, 1988, Bab 4).

1.2 Latar Belakang Historis Mekanika Kuantum

Perkembangan mekanika kuantum dimulai pada tahun 1900 melalui kajian Planck mengenai cahaya yang dipancarkan oleh padatan panas. Oleh karena itu, pembahasan diawali dengan sifat cahaya.

Pada tahun 1803, Thomas Young memberikan bukti yang meyakinkan mengenai sifat gelombang cahaya melalui pengamatan difraksi dan interferensi ketika cahaya melewati dua lubang kecil yang berdekatan. Difraksi adalah pembelokan gelombang di sekitar penghalang. Interferensi adalah penggabungan dua gelombang berfrekuensi sama sehingga gangguan pada setiap titik di ruang merupakan jumlah aljabar atau jumlah vektor gangguan pada titik tersebut yang dihasilkan oleh masing-masing gelombang yang berinterferensi.

Pada tahun 1864, James Clerk Maxwell menerbitkan empat persamaan yang dikenal sebagai persamaan Maxwell dan menyatukan hukum kelistrikan serta kemagnetan. Persamaan Maxwell meramalkan bahwa muatan listrik yang dipercepat memancarkan energi dalam bentuk gelombang elektromagnetik yang terdiri atas medan listrik dan medan magnet yang berosilasi. Kecepatan gelombang yang diramalkan oleh persamaan Maxwell ternyata sama dengan

kecepatan cahaya yang diukur secara eksperimen. Maxwell menyimpulkan bahwa cahaya merupakan gelombang elektromagnetik.

Pada tahun 1888, Heinrich Hertz mendeteksi gelombang radio yang dihasilkan oleh muatan listrik yang dipercepat dalam percikan, sebagaimana diramalkan persamaan Maxwell. Temuan tersebut meyakinkan para fisikawan bahwa cahaya memang merupakan gelombang elektromagnetik.

Semua gelombang elektromagnetik merambat dengan kecepatan $c = 2{,}998 \times 10^8$ m s^{-1} dalam vakum. Frekuensi ν dan panjang gelombang λ suatu gelombang elektromagnetik berhubungan melalui persamaan berikut.

$$\boxed{\lambda\nu = c} \qquad (1.1)$$

Persamaan yang diberi kotak dalam sumber merupakan persamaan yang perlu diingat. Berbagai label konvensional diberikan kepada gelombang elektromagnetik berdasarkan frekuensinya. Dalam urutan frekuensi yang meningkat terdapat gelombang radio, gelombang mikro, radiasi inframerah, cahaya tampak, radiasi ultraviolet, sinar-X, dan sinar gamma. Dalam buku ini, istilah cahaya digunakan untuk semua jenis radiasi elektromagnetik. Panjang gelombang radiasi tampak dan ultraviolet dahulu dinyatakan dalam angstrom (Å), tetapi sekarang lazim dinyatakan dalam nanometer (nm).

$$1\ \text{nm} = 10^{-9}\ \text{m}, \quad 1\ \text{Å} = 10^{-10}\ \text{m} = 0{,}1\ \text{nm} \qquad (1.2)$$

Pada dekade 1890-an, para fisikawan mengukur intensitas cahaya pada berbagai frekuensi yang dipancarkan benda hitam panas pada suhu tetap, kemudian mengulangi pengukuran pada beberapa suhu. Benda hitam adalah objek yang menyerap seluruh cahaya yang jatuh padanya. Pendekatan yang baik terhadap benda hitam ialah rongga yang memiliki lubang sangat kecil.

Pada tahun 1896, fisikawan Wien mengusulkan persamaan untuk ketergantungan radiasi benda hitam terhadap frekuensi cahaya dan suhu benda hitam: I = av³/e^(bν/T), dengan a dan b sebagai konstanta empiris. Besaran I dν adalah energi berfrekuensi antara ν dan ν + dν yang dipancarkan per satuan waktu dan per satuan luas permukaan oleh benda hitam, sedangkan dν merupakan rentang frekuensi infinitesimal. Rumus Wien sesuai dengan baik terhadap data radiasi benda hitam yang tersedia pada tahun 1896, tetapi argumen teoretisnya dianggap belum memuaskan.

Pada tahun 1899-1900, pengukuran radiasi benda hitam diperluas ke frekuensi yang lebih rendah. Data frekuensi rendah menunjukkan penyimpangan berarti dari rumus Wien. Penyimpangan tersebut mendorong Max Planck pada Oktober 1900 mengusulkan rumus I = av³/[e^(bν/T) - 1], yang ternyata sangat sesuai dengan data pada seluruh frekuensi.

Setelah mengusulkan rumus tersebut, Planck mencari pembenaran teoretis. Pada Desember 1900, ia menyajikan penurunan teoretis persamaannya kepada German Physical Society. Planck menganggap pemancar dan penyerap radiasi dalam benda hitam sebagai muatan listrik yang berosilasi harmonik—disebut resonator—dan berada dalam kesetimbangan dengan radiasi elektromagnetik di dalam rongga. Ia mengasumsikan bahwa energi total resonator berfrekuensi ν tersusun atas N "elemen energi" yang tidak dapat dibagi, masing-masing sebesar $h\nu$, dengan N bilangan bulat dan h sebagai konstanta baru dalam fisika, yaitu konstanta Planck. Planck mendistribusikan elemen-elemen energi tersebut di antara resonator. Pada hakikatnya, hal ini membatasi energi setiap resonator pada kelipatan bilangan bulat dari $h\nu$, walaupun Planck tidak mengatakannya secara eksplisit. Dengan demikian, energi resonator terkuantisasi: hanya nilai diskret tertentu yang diizinkan. Teori Planck menghasilkan $a = 2\pi h/c^2$ dan $b = h/k$, dengan k sebagai konstanta Boltzmann. Dari pencocokan kurva benda hitam eksperimen, Planck memperoleh $h \approx 6{,}6 \times 10^{-34}$ J s.

Karya Planck biasanya dianggap sebagai awal mekanika kuantum. Namun, sejarawan fisika memperdebatkan apakah pada tahun 1900 Planck memandang kuantisasi energi sebagai gambaran realitas fisis atau sekadar pendekatan matematis untuk memperoleh rumus radiasi benda hitam yang benar. Kragh mencatat bahwa apabila revolusi fisika terjadi pada Desember 1900, hampir tidak ada yang menyadarinya; arti penting karya Planck sebagian besar merupakan rekonstruksi historis.

Konsep kuantisasi energi bertentangan langsung dengan seluruh gagasan fisika sebelumnya. Menurut mekanika Newton, energi benda material dapat berubah secara kontinu. Akan tetapi, kurva radiasi benda hitam yang benar hanya diperoleh dengan hipotesis energi terkuantisasi.

Penerapan kedua kuantisasi energi adalah efek fotolistrik. Dalam efek fotolistrik, cahaya yang menyinari logam menyebabkan elektron terpancar. Energi gelombang sebanding dengan intensitasnya dan tidak berkaitan dengan frekuensinya; karena itu, gambaran cahaya sebagai gelombang elektromagnetik mengarahkan dugaan bahwa energi kinetik fotoelektron yang terpancar meningkat ketika intensitas cahaya meningkat, tetapi tidak berubah ketika frekuensi cahaya berubah. Pengamatan menunjukkan kebalikannya: energi kinetik elektron yang terpancar tidak bergantung pada intensitas cahaya, tetapi meningkat ketika frekuensi cahaya meningkat.

Pada tahun 1905, Einstein menunjukkan bahwa hasil pengamatan tersebut dapat dijelaskan dengan menganggap cahaya tersusun atas entitas menyerupai partikel yang disebut foton, dan setiap foton memiliki energi berikut.

$$E\_foton = h\nu \quad (1.3)$$

Ketika elektron dalam logam menyerap foton, sebagian energi foton digunakan untuk mengatasi gaya yang menahan elektron di dalam logam; sisanya menjadi energi kinetik elektron setelah meninggalkan logam. Kekekalan energi memberikan $h\nu = \Phi + T$, dengan Φ sebagai energi minimum yang diperlukan elektron untuk keluar dari logam—fungsi kerja logam—dan T sebagai energi kinetik maksimum elektron yang terpancar. Peningkatan frekuensi cahaya ν meningkatkan energi foton sehingga meningkatkan energi kinetik elektron yang terpancar. Peningkatan intensitas cahaya pada frekuensi tetap meningkatkan laju foton yang mengenai logam dan laju pemancaran elektron, tetapi tidak mengubah energi kinetik setiap elektron.

Efek fotolistrik menunjukkan bahwa cahaya dapat memperlihatkan perilaku menyerupai partikel selain perilaku gelombang yang tampak pada eksperimen difraksi.

Pada tahun 1907, Einstein menerapkan kuantisasi energi pada getaran atom dalam unsur padat. Ia mengasumsikan bahwa energi getaran setiap atom pada masing-masing arah x, y, dan z terbatas pada kelipatan bilangan bulat dari $h\nu\_vib$, dengan ν_vib sebagai frekuensi getaran khas unsur. Dengan mekanika statistik, Einstein menurunkan persamaan kapasitas panas volume tetap C_V padatan. Persamaan tersebut cukup sesuai dengan data C_V terhadap suhu untuk intan.

Selanjutnya kita mempertimbangkan struktur materi. Pada akhir abad kesembilan belas, penelitian tabung lucutan listrik dan radioaktivitas alami menunjukkan bahwa atom dan molekul tersusun atas partikel bermuatan. Elektron bermuatan negatif. Proton memiliki muatan positif yang sama besar tetapi berlawanan tanda dengan muatan elektron dan massanya 1836 kali massa elektron. Penyusun ketiga atom, neutron—ditemukan pada tahun 1932—tidak bermuatan dan sedikit lebih berat daripada proton.

Mulai tahun 1909, Rutherford, Geiger, dan Marsden berulang kali melewatkan berkas partikel alfa melalui lembaran logam tipis dan mengamati pembelokan partikel pada layar fluoresen. Partikel alfa adalah inti helium bermuatan positif yang diperoleh dari peluruhan radioaktif alami. Sebagian besar partikel alfa melewati lembaran hampir tanpa dibelokkan, tetapi secara mengejutkan sejumlah kecil mengalami pembelokan besar dan beberapa bahkan terpental balik. Pembelokan besar memerlukan pendekatan yang sangat dekat antara muatan sehingga gaya tolak Coulomb menjadi besar. Jika muatan positif tersebar di seluruh atom seperti model J. J. Thomson tahun 1904, gaya tolak terhadap partikel alfa berenergi tinggi akan berkurang setelah partikel memasuki atom dan menjadi nol di pusat atom menurut elektrostatika klasik. Rutherford menyimpulkan bahwa pembelokan besar hanya mungkin terjadi apabila muatan positif terkonsentrasi dalam inti yang sangat kecil dan berat.

Sebuah atom memiliki inti sangat kecil dengan jari-jari sekitar 10^{-13} sampai 10^{-12} cm dan bermassa besar, yang terdiri atas neutron serta Z proton; Z adalah nomor atom. Di luar inti terdapat Z elektron. Partikel bermuatan berinteraksi menurut hukum Coulomb. Nukleon diikat di dalam inti oleh gaya nuklir kuat berjangkauan pendek yang tidak dibahas di sini. Jari-jari atom kira-kira satu angstrom, sebagaimana ditunjukkan antara lain oleh teori kinetik gas. Molekul memiliki lebih dari satu inti.

Sifat kimia atom dan molekul ditentukan oleh struktur elektroniknya. Karena itu timbul pertanyaan mengenai sifat gerak dan energi elektron. Oleh karena massa inti jauh lebih besar daripada massa elektron, gerak inti diperkirakan kecil dibandingkan gerak elektron.

Pada tahun 1911, Rutherford mengusulkan model atom planet, dengan elektron mengelilingi inti pada berbagai orbit seperti planet mengelilingi Matahari. Model ini memiliki kesulitan mendasar. Menurut teori elektromagnetik klasik, partikel bermuatan yang dipercepat memancarkan energi sebagai gelombang elektromagnetik. Elektron yang mengitari inti dengan kelajuan tetap tetap mengalami percepatan karena arah vektor kecepatannya terus berubah. Elektron dalam model Rutherford seharusnya terus kehilangan energi melalui radiasi dan bergerak spiral menuju inti. Dengan demikian, menurut fisika klasik abad kesembilan belas, atom Rutherford tidak stabil dan akan runtuh.

Jalan keluar yang mungkin diusulkan Niels Bohr pada tahun 1913 ketika ia menerapkan konsep kuantisasi energi pada atom hidrogen. Bohr mengasumsikan bahwa energi elektron dalam atom hidrogen terkuantisasi dan elektron hanya dapat bergerak pada salah satu lingkaran yang diizinkan. Ketika elektron berpindah dari satu orbit Bohr ke orbit lain, foton cahaya dengan frekuensi ν diserap atau dipancarkan menurut persamaan berikut.

$$E\_atas - E\_bawah = h\nu \tag{1.4}$$

Dalam persamaan tersebut E_atas dan E_bawah adalah energi keadaan atas dan bawah, sesuai kekekalan energi. Dengan asumsi bahwa elektron yang bertransisi dari keadaan bebas atau terionisasi menuju salah satu orbit terikat memancarkan foton yang frekuensinya merupakan kelipatan bilangan bulat dari setengah frekuensi klasik revolusi elektron pada orbit terikat, Bohr menggunakan mekanika klasik untuk menurunkan rumus tingkat energi atom hidrogen. Dengan Persamaan (1.4), ia memperoleh kesesuaian dengan spektrum hidrogen yang teramati. Namun, upaya menyesuaikan spektrum helium dengan teori Bohr gagal. Teori tersebut juga tidak dapat menjelaskan ikatan kimia dalam molekul.

Kegagalan model Bohr berasal dari penggunaan mekanika klasik untuk menggambarkan gerak elektron dalam atom. Spektrum atom memperlihatkan frekuensi diskret, yang menunjukkan bahwa hanya energi gerak tertentu yang diizinkan; energi elektronik terkuantisasi. Mekanika klasik sebaliknya

mengizinkan rentang energi kontinu. Kuantisasi memang terjadi pada gerak gelombang, misalnya frekuensi dasar dan nada atas dawai biola. Karena itu, pada tahun 1923 Louis de Broglie mengusulkan bahwa gerak elektron mungkin memiliki aspek gelombang: elektron bermassa m dan berkelajuan v memiliki panjang gelombang berikut.

$$\lambda = h/(mv) = h/p \tag{1.5}$$

Di sini p adalah momentum linear. De Broglie memperoleh Persamaan (1.5) melalui analogi dengan foton. Menurut teori relativitas khusus Einstein, energi foton dapat ditulis E = pc, dengan c sebagai kecepatan cahaya dan p sebagai momentum foton. Dengan E_foton = hν, diperoleh pc = hν = hc/λ dan λ = h/p untuk foton yang merambat dengan kecepatan c. Persamaan (1.5) adalah persamaan yang bersesuaian untuk elektron.

Pada tahun 1927, Davisson dan Germer mengonfirmasi hipotesis de Broglie secara eksperimen dengan memantulkan elektron dari logam dan mengamati efek difraksi. Pada tahun 1932, Stern mengamati efek yang sama pada atom helium dan molekul hidrogen. Hal tersebut membuktikan bahwa efek gelombang bukan kekhususan elektron, melainkan akibat suatu hukum gerak umum bagi partikel mikroskopik. Difraksi dan interferensi bahkan telah diamati pada molekul sebesar $C_{48}H_{26}F_{24}N_8O_8$ yang melewati kisi difraksi.

Dengan demikian, elektron dalam beberapa hal berperilaku seperti partikel dan dalam hal lain seperti gelombang. Kita berhadapan dengan "dualitas gelombang-partikel" materi—dan juga cahaya—yang tampaknya bertentangan. Bagaimana elektron dapat sekaligus menjadi partikel yang terlokalisasi dan gelombang yang tidak terlokalisasi? Jawabannya ialah elektron bukan gelombang maupun partikel klasik, melainkan entitas lain. Gambaran visual yang sepenuhnya tepat mengenai perilaku elektron tidak mungkin dibuat dengan konsep gelombang atau partikel dari fisika klasik.

Konsep fisika klasik dikembangkan dari pengalaman di dunia makroskopik dan tidak menggambarkan dunia mikroskopik secara tepat. Evolusi membentuk otak manusia agar mampu memahami dan menangani gejala makroskopik secara efektif. Sistem saraf manusia tidak berkembang untuk menangani gejala pada tingkat atom dan molekul; karena itu, tidak mengherankan apabila kita tidak dapat memahami gejala tersebut sepenuhnya.

Walaupun foton dan elektron sama-sama menunjukkan dualitas semu, keduanya bukan jenis entitas yang sama. Foton bergerak dengan kecepatan c dalam vakum dan mempunyai massa diam nol; elektron selalu memiliki v < c dan massa diam tidak nol. Foton selalu harus diperlakukan secara relativistik, sedangkan elektron dengan kelajuan jauh lebih kecil daripada c dapat diperlakukan secara nonrelativistik.

1.3 Prinsip Ketidakpastian

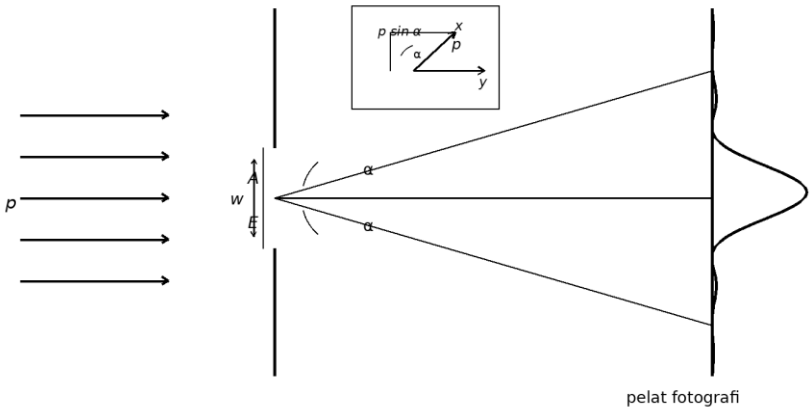
Kita mempertimbangkan pengaruh dualitas gelombang-partikel terhadap usaha mengukur secara bersamaan koordinat x dan komponen x momentum linear sebuah partikel mikroskopik. Mula-mula digunakan berkas partikel bermomentum p yang bergerak pada arah y dan diarahkan ke celah sempit. Di belakang celah ditempatkan pelat fotografi, seperti pada Gambar 1.1.

Partikel yang melewati celah selebar w memiliki ketidakpastian w pada koordinat x ketika melalui celah. Jika sebaran nilai x tersebut disebut Δx, maka $\Delta x = w$.

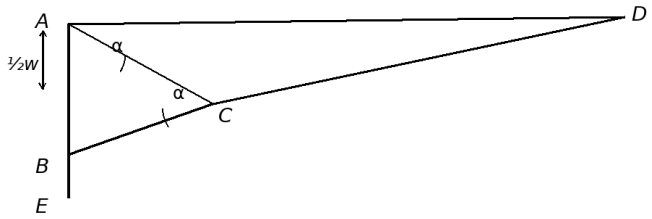
Karena partikel mikroskopik memiliki sifat gelombang, partikel didifraksikan oleh celah dan menghasilkan pola difraksi pada pelat, sebagaimana berkas cahaya. Tinggi kurva pada Gambar 1.1 menyatakan banyaknya partikel yang mencapai suatu titik. Pola difraksi menunjukkan bahwa ketika partikel didifraksikan oleh celah, arah geraknya berubah sehingga sebagian momentumnya berpindah ke arah x. Komponen momentum p_x adalah proyeksi vektor momentum p pada arah x. Partikel yang dibelokkan ke atas sebesar sudut α memiliki $p_x = p \sin \alpha$, sedangkan partikel yang dibelokkan ke bawah sebesar α memiliki $p_x = -p \sin \alpha$. Karena sebagian besar partikel mengalami pembelokan pada rentang $-\alpha$ sampai α, dengan α sebagai sudut menuju minimum pertama pola difraksi, setengah sebaran nilai momentum pada puncak difraksi pusat digunakan sebagai ukuran ketidakpastian Δp_x, yaitu $\Delta p_x = p \sin \alpha$.

Karena itu, pada celah tempat pengukuran dilakukan, diperoleh:

$$\Delta x \, \Delta p_x = p \, w \sin \alpha \tag{1.6}$$



Gambar 1.1. Difraksi elektron oleh sebuah celah.



Gambar 1.2. Penentuan minimum difraksi pertama.

Sudut α tempat minimum difraksi pertama terjadi dapat dihitung dengan mudah. Syarat minimum pertama ialah selisih jarak yang ditempuh partikel yang melewati tepi atas celah dan partikel yang melewati pusat celah sama dengan ½λ, dengan λ sebagai panjang gelombang gelombang yang terkait. Gelombang dari bagian atas celah tepat berlawanan fase dengan gelombang dari pusat celah sehingga saling meniadakan. Gelombang yang berasal dari titik berjarak d di bawah titik tengah celah meniadakan gelombang dari titik berjarak d di bawah bagian atas celah.

Dengan menggambar AC pada Gambar 1.2 sedemikian sehingga AD = CD, selisih lintasan adalah BC. Jarak celah ke layar sangat besar dibandingkan lebar celah; karena itu AD dan BD hampir sejajar. Sudut ACB pada dasarnya merupakan sudut siku-siku, sehingga sudut BAC = α. Selisih lintasan BC kemudian sama dengan ½w sin α. Dengan menetapkan BC = ½λ diperoleh w sin α = λ dan Persamaan (1.6) menjadi $\Delta x\ \Delta p_x = p\lambda$. Panjang gelombang λ diberikan oleh hubungan de Broglie λ = h/p, sehingga $\Delta x\ \Delta p_x = h$. Karena ketidakpastian belum didefinisikan secara presisi, tanda sama dengan tidak sepenuhnya dibenarkan. Oleh karena itu dituliskan:

$$\Delta x\ \Delta p_x \approx h \qquad (1.7)$$

Persamaan tersebut menunjukkan bahwa hasil kali ketidakpastian x dan p_x memiliki orde besaran konstanta Planck.

Walaupun Persamaan (1.7) ditunjukkan hanya untuk satu susunan eksperimen, validitasnya bersifat umum. Apa pun upaya yang dilakukan, dualitas gelombang-partikel entitas mikroskopik membatasi kemampuan kita mengukur posisi dan momentum secara bersamaan. Makin tepat posisi ditentukan, makin rendah ketepatan penentuan momentum. Pada Gambar 1.1, sin α = λ/w; karena itu, penyempitan celah memperlebar pola difraksi. Batasan ini disebut prinsip ketidakpastian yang ditemukan Werner Heisenberg pada tahun 1927.

Akibat dualitas gelombang-partikel, tindakan pengukuran menimbulkan gangguan yang tidak dapat dikendalikan pada sistem yang diukur. Pada awalnya partikel memiliki nilai p_x yang tepat, yaitu nol. Dengan memasang celah, koordinat x diukur dengan ketelitian w, tetapi pengukuran tersebut menimbulkan ketidakpastian pada nilai p_x partikel. Pengukuran mengubah keadaan sistem.

1.4 Persamaan Schrödinger Bergantung Waktu

Mekanika klasik hanya berlaku bagi partikel makroskopik. Untuk "partikel" mikroskopik diperlukan bentuk mekanika baru yang disebut mekanika kuantum. Berikut dibahas beberapa perbedaan antara mekanika klasik dan mekanika kuantum. Untuk penyederhanaan digunakan sistem satu partikel satu dimensi.

Dalam mekanika klasik, gerak partikel diatur oleh hukum kedua Newton:

$$F = ma = m\, d^2x/dt^2 \tag{1.8}$$

Di sini F adalah gaya yang bekerja pada partikel, m massanya, t waktu, dan a percepatan yang diberikan oleh $a = dv/dt = (d/dt)(dx/dt) = d^2x/dt^2$; v adalah kecepatan. Persamaan (1.8) memuat turunan kedua koordinat x terhadap waktu. Penyelesaiannya memerlukan dua integrasi, yang memperkenalkan dua konstanta sembarang c_1 dan c_2 ke dalam solusi:

$$x = g(t, c_1, c_2) \tag{1.9}$$

Fungsi g adalah suatu fungsi waktu. Pertanyaan berikutnya ialah informasi apa yang harus diketahui pada waktu t_0 agar gerak partikel pada masa mendatang dapat diramalkan. Apabila diketahui bahwa pada t_0 partikel berada di x_0, maka:

$$x_0 = g(t_0, c_1, c_2) \tag{1.10}$$

Karena terdapat dua konstanta yang harus ditentukan, diperlukan informasi tambahan. Dengan mendiferensialkan Persamaan (1.9), diperoleh $dx/dt = v = (d/dt)g(t,c_1,c_2)$. Apabila pada waktu t_0 partikel juga diketahui memiliki kecepatan v_0, berlaku hubungan tambahan berikut.

$$v_0 = [(d/dt)g(t, c_1, c_2)]_{t=t0} \tag{1.11}$$

Persamaan (1.10) dan (1.11) kemudian dapat digunakan untuk menentukan c_1 dan c_2 sebagai fungsi x_0 dan v_0. Setelah c_1 dan c_2 diketahui, Persamaan (1.9) memberikan gerak masa depan partikel secara tepat.

Sebagai contoh Persamaan (1.8)-(1.11), pertimbangkan gerak vertikal partikel dalam medan gravitasi Bumi. Sumbu x diarahkan ke atas. Gaya pada partikel berarah ke bawah, $F = -mg$, dengan g sebagai percepatan gravitasi. Hukum kedua Newton memberikan $-mg = m\, d^2x/dt^2$ sehingga $d^2x/dt^2 = -g$. Integrasi pertama menghasilkan $dx/dt = -gt + c_1$. Konstanta c_1 dapat ditentukan apabila diketahui bahwa pada waktu t_0 partikel memiliki kecepatan v_0. Karena $v = dx/dt$, maka $v_0 = -gt_0 + c_1$ dan $c_1 = v_0 + gt_0$. Dengan demikian, $dx/dt = -gt + gt_0 + v_0$. Integrasi kedua memperkenalkan konstanta c_2 yang dapat ditentukan apabila diketahui bahwa pada waktu t_0 posisi partikel adalah x_0. Diperoleh $x = x_0 - \frac{1}{2}g(t - t_0)^2 + v_0(t - t_0)$. Dengan mengetahui x_0 dan v_0 pada t_0, posisi partikel pada waktu berikutnya dapat diprediksi.

Energi potensial mekanika klasik V untuk partikel yang bergerak dalam satu dimensi didefinisikan memenuhi persamaan:

$$\partial V(x,t)/\partial x = -F(x,t) \tag{1.12}$$

Sebagai contoh, untuk partikel dalam medan gravitasi Bumi, $\partial V/\partial x = -F = mg$ dan integrasi memberikan $V = mgx + c$, dengan c sebagai konstanta sembarang. Tingkat nol energi potensial dapat dipilih secara bebas. Dengan memilih $c = 0$ diperoleh $V = mgx$.

Dalam mekanika klasik, keadaan (state) berarti spesifikasi posisi dan kecepatan setiap partikel sistem pada suatu saat, disertai spesifikasi gaya yang bekerja pada partikel. Berdasarkan hukum kedua Newton, apabila keadaan sistem pada suatu waktu diketahui, keadaan dan gerak masa depannya ditentukan secara tepat sebagaimana ditunjukkan Persamaan (1.9)-(1.11). Keberhasilan besar hukum Newton dalam menjelaskan gerak planet mendorong banyak filsuf menggunakannya sebagai argumen determinisme filosofis. Matematikawan dan astronom Laplace menganggap alam semesta hanya tersusun atas partikel yang mematuhi hukum Newton. Dengan demikian, apabila keadaan alam semesta pada suatu saat diketahui, seluruh gerak masa depan telah ditentukan. Suatu makhluk hipotetis yang mampu mengetahui keadaan alam semesta pada saat apa pun secara prinsip dapat menghitung seluruh gerak masa depan.

Walaupun mekanika klasik bersifat deterministik, banyak sistem mekanika klasik—misalnya pendulum yang berosilasi di bawah pengaruh gravitasi, gesekan, dan gaya penggerak periodik—menunjukkan perilaku kaotik pada rentang parameter tertentu. Dalam sistem kaotik, gerak sangat peka terhadap nilai awal posisi dan kecepatan partikel serta gaya yang bekerja. Dua keadaan awal yang berbeda dalam jumlah yang tidak dapat dideteksi secara eksperimen pada akhirnya dapat menghasilkan perilaku masa depan yang sangat berbeda. Karena ketelitian pengukuran keadaan awal terbatas, peramalan perilaku jangka panjang sistem klasik kaotik secara praktik tidak mungkin dilakukan walaupun sistem mematuhi persamaan deterministik. Perhitungan komputer orbit planet dalam tata surya selama puluhan juta tahun menunjukkan bahwa gerak planet bersifat kaotik.

Dengan pengetahuan tepat mengenai keadaan sekarang sistem mekanika klasik, keadaan masa depannya dapat diprediksi. Namun, prinsip ketidakpastian Heisenberg menunjukkan bahwa posisi dan kecepatan tepat partikel mikroskopik tidak dapat ditentukan secara bersamaan. Pengetahuan yang diperlukan mekanika klasik untuk meramalkan gerak masa depan sistem tidak dapat diperoleh. Dalam mekanika kuantum, kita harus menerima ramalan yang kurang lengkap daripada lintasan masa depan yang tepat.

Pendekatan terhadap mekanika kuantum dilakukan dengan mempostulatkan prinsip-prinsip dasar, kemudian menggunakan postulat tersebut untuk

menurunkan akibat yang dapat diuji secara eksperimen, seperti tingkat energi atom. Untuk menggambarkan keadaan sistem dalam mekanika kuantum, dipostulatkan keberadaan fungsi Ψ dari koordinat partikel yang disebut fungsi keadaan atau fungsi gelombang. Karena keadaan pada umumnya berubah terhadap waktu, Ψ juga merupakan fungsi waktu. Untuk sistem satu partikel satu dimensi, Ψ = Ψ(x,t). Fungsi gelombang memuat seluruh informasi yang mungkin diketahui mengenai sistem. Karena itu, alih-alih mengatakan "keadaan yang digambarkan oleh fungsi gelombang Ψ", cukup dikatakan "keadaan Ψ". Hukum kedua Newton menentukan keadaan masa depan sistem klasik dari keadaan sekarang. Untuk menentukan keadaan masa depan sistem kuantum dari keadaan sekarang, diperlukan persamaan yang menjelaskan perubahan fungsi gelombang terhadap waktu. Untuk sistem satu partikel satu dimensi, persamaan tersebut dipostulatkan sebagai:

$$-(\hbar/\mathrm{i})\,\partial\Psi(\mathrm{x,t})/\partial\mathrm{t} = -(\hbar^2/2\mathrm{m})\,\partial^2\Psi(\mathrm{x,t})/\partial\mathrm{x}^2 + \mathrm{V(x,t)}\Psi(\mathrm{x,t}) \qquad (1.13)$$

Konstanta $\hbar$—dibaca h-bar—didefinisikan sebagai:

$$\hbar \equiv \mathrm{h}/(2\pi) \qquad (1.14)$$

Konsep fungsi gelombang dan persamaan yang mengatur perubahannya terhadap waktu ditemukan pada tahun 1926 oleh fisikawan Austria Erwin Schrödinger (1887-1961). Persamaan (1.13) dikenal sebagai persamaan Schrödinger bergantung waktu atau persamaan gelombang Schrödinger. Dalam persamaan tersebut $\mathrm{i} = \sqrt{(-1)}$, m adalah massa partikel, dan V(x,t) adalah fungsi energi potensial sistem.

Persamaan Schrödinger bergantung waktu memuat turunan pertama fungsi gelombang terhadap waktu dan memungkinkan perhitungan fungsi gelombang atau keadaan pada waktu mendatang apabila fungsi gelombang pada waktu t_0 diketahui.

Fungsi gelombang memuat seluruh informasi yang mungkin diketahui mengenai sistem. Informasi apa yang diberikan Ψ tentang hasil pengukuran koordinat x partikel? Ψ tidak dapat diharapkan memberikan spesifikasi posisi pasti sebagaimana keadaan sistem mekanika klasik. Jawaban yang benar diberikan Max Born segera setelah Schrödinger menemukan persamaannya. Born mempostulatkan bahwa untuk sistem satu partikel satu dimensi:

$$|\Psi(\mathrm{x,t})|^2\,\mathrm{dx} \qquad (1.15)$$

memberikan probabilitas pada waktu t untuk menemukan partikel pada daerah sumbu x antara x dan x + dx. Tanda garis menyatakan nilai mutlak, dan dx adalah panjang infinitesimal pada sumbu x. Fungsi $|\Psi(\mathrm{x,t})|^2$ adalah kerapatan probabilitas untuk menemukan partikel pada berbagai tempat di sumbu x.

Sebagai contoh, anggap pada waktu t_0 partikel berada dalam keadaan dengan fungsi gelombang $ae^{(-bx^2)}$, dengan a dan b sebagai konstanta real. Jika posisi partikel diukur pada t_0, setiap nilai x mungkin diperoleh karena kerapatan probabilitas $a^2e^{(-2bx^2)}$ tidak nol di semua tempat. Nilai x di sekitar x = 0 lebih mungkin ditemukan daripada nilai lain karena $|\Psi|^2$ maksimum di titik asal.

Untuk menghubungkan $|\Psi|^2$ dengan pengukuran eksperimen, disiapkan banyak sistem identik yang tidak saling berinteraksi dan seluruhnya berada dalam keadaan Ψ yang sama. Posisi partikel dalam setiap sistem kemudian diukur. Apabila terdapat n sistem dan dilakukan n pengukuran, serta dn_x menyatakan jumlah pengukuran yang menemukan partikel antara x dan x + dx, maka dn_x/n adalah probabilitas menemukan partikel pada interval tersebut. Dengan demikian $dn_x/n = |\Psi|^2 dx$, dan grafik $(1/n)(dn_x/dx)$ terhadap x memberikan kerapatan probabilitas $|\Psi|^2$ sebagai fungsi x.

Mungkin tampak bahwa fungsi kerapatan probabilitas dapat diperoleh dengan menggunakan satu sistem dalam keadaan Ψ dan mengukur posisi partikel berulang-ulang. Prosedur tersebut keliru karena proses pengukuran pada umumnya mengubah keadaan sistem, seperti terlihat pada pembahasan prinsip ketidakpastian.

Mekanika kuantum bersifat statistik. Dengan mengetahui keadaan, hasil pengukuran posisi tidak dapat diramalkan dengan pasti; yang dapat diramalkan hanyalah probabilitas berbagai hasil. Teori Bohr tentang atom hidrogen menentukan lintasan elektron secara tepat sehingga bukan gambaran mekanika kuantum yang benar.

Mekanika kuantum tidak menyatakan bahwa elektron tersebar pada daerah ruang yang luas sebagaimana gelombang tersebar. Pola probabilitas—fungsi gelombang—yang digunakan untuk menggambarkan gerak elektronlah yang berperilaku seperti gelombang dan memenuhi persamaan gelombang.

Cara fungsi gelombang memberikan informasi tentang sifat selain posisi dibahas pada bab-bab berikutnya.

Postulat termodinamika—hukum pertama, kedua, dan ketiga—dirumuskan berdasarkan pengalaman makroskopik sehingga relatif mudah dipahami. Postulat mekanika kuantum dirumuskan dalam kerangka dunia mikroskopik dan tampak abstrak. Pembaca tidak perlu berharap memahami seluruh postulat mekanika kuantum sepenuhnya pada pembacaan pertama. Pemahaman akan meningkat ketika berbagai contoh dibahas.

Mungkin terasa mengganggu bahwa persamaan Schrödinger dituliskan tanpa upaya membuktikan kewajarannya. Analogi antara optika geometri dan mekanika klasik di satu sisi serta optika gelombang dan mekanika kuantum di sisi lain dapat menunjukkan kewajaran persamaan Schrödinger. Optika geometri merupakan

pendekatan terhadap optika gelombang yang berlaku ketika panjang gelombang cahaya jauh lebih kecil daripada ukuran peralatan. Demikian pula, mekanika klasik merupakan pendekatan terhadap mekanika gelombang yang berlaku ketika panjang gelombang partikel jauh lebih kecil daripada ukuran peralatan. Hubungan yang diketahui antara persamaan optika geometri dan optika gelombang memungkinkan tebakan yang masuk akal mengenai cara memperoleh persamaan mekanika kuantum dari mekanika klasik. Namun, analogi hanya dapat membuat persamaan Schrödinger tampak masuk akal; analogi tidak dapat menurunkan atau membuktikannya. Persamaan Schrödinger adalah postulat teori yang diuji melalui kesesuaian ramalannya dengan eksperimen.

Mekanika kuantum menyediakan hukum gerak bagi partikel mikroskopik. Secara eksperimen, objek makroskopik mematuhi mekanika klasik. Agar mekanika kuantum merupakan teori yang sahih, teori tersebut harus mereduksi menjadi mekanika klasik ketika dilakukan transisi dari partikel mikroskopik ke makroskopik. Efek kuantum berkaitan dengan panjang gelombang de Broglie $\lambda = h/mv$. Karena h sangat kecil, panjang gelombang de Broglie objek makroskopik pada dasarnya nol. Dalam batas $\lambda \to 0$, persamaan Schrödinger bergantung waktu diharapkan mereduksi menjadi hukum kedua Newton, dan hal tersebut dapat dibuktikan.

Situasi serupa berlaku pada hubungan relativitas khusus dan mekanika klasik. Dalam batas $v/c \to 0$, relativitas khusus mereduksi menjadi mekanika klasik. Bentuk mekanika kuantum yang dikembangkan dalam buku ini bersifat nonrelativistik. Integrasi lengkap relativitas dengan mekanika kuantum belum dicapai dalam kerangka yang dibahas di sini.

Secara historis, mekanika kuantum pertama kali dirumuskan pada tahun 1925 oleh Heisenberg, Born, dan Jordan dengan menggunakan matriks, beberapa bulan sebelum rumusan Schrödinger tahun 1926 yang menggunakan persamaan diferensial. Schrödinger membuktikan bahwa rumusan Heisenberg—mekanika matriks—setara dengan rumusan Schrödinger—mekanika gelombang. Pada tahun 1926, Dirac dan Jordan secara terpisah merumuskan versi abstrak yang disebut teori transformasi, yaitu generalisasi mekanika matriks dan mekanika gelombang. Pada tahun 1948, Feynman mengembangkan formulasi integral lintasan mekanika kuantum.

1.5 Persamaan Schrödinger Tak Bergantung Waktu

Persamaan Schrödinger bergantung waktu (1.13) tampak rumit. Untungnya, banyak penerapan mekanika kuantum dalam kimia tidak menggunakan persamaan tersebut secara langsung, melainkan persamaan Schrödinger tak bergantung waktu yang lebih sederhana. Berikut diturunkan persamaan tak bergantung waktu dari persamaan bergantung waktu untuk kasus satu partikel satu dimensi.

Pembahasan dibatasi pada kasus khusus ketika energi potensial V tidak merupakan fungsi waktu dan hanya bergantung pada x. Kondisi ini berlaku apabila sistem tidak mengalami gaya luar yang bergantung waktu. Persamaan Schrödinger bergantung waktu menjadi:

$$-(\hbar/\mathrm{i})\,\partial\Psi(\mathrm{x,t})/\partial\mathrm{t} = -(\hbar^2/2\mathrm{m})\,\partial^2\Psi(\mathrm{x,t})/\partial\mathrm{x}^2 + \mathrm{V(x)}\Psi(\mathrm{x,t}) \qquad (1.16)$$

Selanjutnya dicari solusi Persamaan (1.16) yang dapat ditulis sebagai hasil kali fungsi waktu dan fungsi x:

$$\Psi(\mathrm{x,t}) = \mathrm{f(t)}\psi(\mathrm{x}) \qquad (1.17)$$

Huruf psi kapital digunakan untuk fungsi gelombang bergantung waktu, sedangkan psi kecil digunakan untuk faktor yang hanya bergantung pada koordinat x. Keadaan yang fungsi gelombangnya berbentuk Persamaan (1.17) mempunyai sifat tertentu yang menjadikannya sangat penting. Tidak semua solusi Persamaan (1.16) memiliki bentuk tersebut.

Dengan mengambil turunan parsial Persamaan (1.17) diperoleh $\partial\Psi/\partial t = [df(t)/dt]\psi(x)$ dan $\partial^2\Psi/\partial x^2 = f(t)d^2\psi(x)/dx^2$. Substitusi ke Persamaan (1.16), kemudian pembagian dengan fψ, menghasilkan:

$$-(\hbar/\mathrm{i})[1/\mathrm{f(t)}]\,\mathrm{df(t)/dt} = -(\hbar^2/2\mathrm{m})[1/\psi(\mathrm{x})]\,\mathrm{d}^2\psi(\mathrm{x})/\mathrm{dx}^2 + \mathrm{V(x)} \qquad (1.18)$$

Secara umum, besaran yang sama dengan kedua ruas Persamaan (1.18) dapat diharapkan merupakan fungsi x dan t. Akan tetapi, ruas kanan tidak bergantung pada t sehingga fungsi tersebut harus bebas dari t. Ruas kiri tidak bergantung pada x sehingga fungsi tersebut juga harus bebas dari x. Karena bebas dari kedua variabel, x dan t, besaran tersebut harus berupa konstanta. Konstanta ini disebut E.

Dengan menyamakan ruas kiri Persamaan (1.18) dengan E diperoleh $[df(t)/f(t)] = -(iE/\hbar)dt$. Integrasi terhadap t memberikan $\ln f(t) = -iEt/\hbar + C$, dengan C sebagai konstanta integrasi. Oleh karena itu f(t) = e^C e^(−iEt/ħ) = A e^(−iEt/ħ). Konstanta A dapat dimasukkan sebagai faktor ke dalam ψ(x), sehingga dapat dihilangkan dari f(t). Dengan demikian f(t) = e^(−iEt/ħ).

Dengan menyamakan ruas kanan Persamaan (1.18) dengan E diperoleh:

$$-(\hbar^2/2\mathrm{m})\,\mathrm{d}^2\psi(\mathrm{x})/\mathrm{dx}^2 + \mathrm{V(x)}\psi(\mathrm{x}) = \mathrm{E}\psi(\mathrm{x}) \qquad (1.19)$$

Persamaan (1.19) adalah persamaan Schrödinger tak bergantung waktu untuk satu partikel bermassa m yang bergerak dalam satu dimensi.

Apakah arti konstanta E? Karena dalam Persamaan (1.19) E muncul bersama V(x), E memiliki dimensi yang sama dengan V, yaitu dimensi energi. Dipostulatkan bahwa E adalah energi sistem. Untuk kasus energi potensial yang hanya merupakan fungsi x, terdapat fungsi gelombang berbentuk:

$$\Psi(x,t) = e^{\wedge}(-iEt/\hbar)\,\psi(x) \qquad (1.20)$$

Fungsi gelombang tersebut bersesuaian dengan keadaan berenergi tetap E. Pembahasan pada beberapa bab berikutnya terutama diarahkan pada pencarian solusi Persamaan (1.19) bagi berbagai sistem.

Fungsi gelombang pada Persamaan (1.20) bersifat kompleks, tetapi besaran yang dapat diamati secara eksperimen adalah kerapatan probabilitas $|\Psi(x,t)|^2$. Kuadrat nilai mutlak suatu besaran kompleks diberikan oleh hasil kali besaran tersebut dengan konjugat kompleksnya. Konjugat kompleks dibentuk dengan mengganti i menjadi −i di setiap tempat. Dengan demikian:

$$|\Psi|^2 = \Psi^*\Psi \qquad (1.21)$$

Tanda bintang menyatakan konjugat kompleks. Untuk fungsi gelombang Persamaan (1.20):

$$\begin{aligned} &|\Psi(x,t)|^2 \\ &= [e^{\wedge}(-iEt/\hbar)\psi(x)]^*\, e^{\wedge}(-iEt/\hbar)\psi(x) \\ &= e^{\wedge}(iEt/\hbar)\psi^*(x)e^{\wedge}(-iEt/\hbar)\psi(x) \\ &= \psi^*(x)\psi(x)|\Psi(x,t)|^2 \\ &= |\psi(x)|^2 \end{aligned} \qquad (1.22)$$

Dalam penurunan Persamaan (1.22), E diasumsikan bilangan real sehingga E = E*. Fakta ini akan dibuktikan pada Bab 7.

Untuk keadaan berbentuk Persamaan (1.20), kerapatan probabilitas diberikan oleh $|\psi(x)|^2$ dan tidak berubah terhadap waktu. Keadaan demikian disebut keadaan stasioner. Karena besaran yang bermakna secara fisis adalah $|\Psi(x,t)|^2$ dan untuk keadaan stasioner $|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2$, fungsi $\psi(x)$ sering disebut fungsi gelombang meskipun fungsi gelombang lengkap keadaan stasioner diperoleh dengan mengalikan $\psi(x)$ dengan $e^{\wedge}(-iEt/\hbar)$. Istilah keadaan stasioner tidak berarti partikel berada dalam keadaan diam. Yang stasioner adalah kerapatan probabilitas $|\Psi|^2$, bukan partikelnya.

Sebagian besar pembahasan akan berkenaan dengan keadaan berenergi tetap atau keadaan stasioner sehingga umumnya digunakan Persamaan Schrödinger tak bergantung waktu (1.19), yang selanjutnya sering disebut secara singkat sebagai "persamaan Schrödinger". Persamaan tersebut memuat dua besaran yang belum diketahui: energi yang diizinkan E dan fungsi gelombang yang diizinkan ψ. Untuk menentukan dua hal tersebut diperlukan syarat tambahan—disebut syarat batas—pada ψ selain keharusan memenuhi Persamaan (1.19). Syarat batas menentukan energi yang diizinkan karena hanya nilai E tertentu yang memungkinkan ψ memenuhi syarat batas. Hal ini akan menjadi lebih jelas pada contoh dalam bab-bab berikutnya.

1.6 Probabilitas

Probabilitas memainkan peran mendasar dalam mekanika kuantum. Bagian ini meninjau kembali matematika probabilitas.

Terdapat banyak perdebatan mengenai definisi probabilitas yang tepat. Salah satu definisi menyatakan: apabila suatu eksperimen memiliki n hasil yang sama mungkin dan m di antaranya mendukung terjadinya peristiwa A, probabilitas A terjadi adalah m/n. Definisi ini bersifat melingkar karena menggunakan istilah "sama mungkin" ketika probabilitas justru sedang didefinisikan. Diasumsikan bahwa hasil-hasil yang sama mungkin dapat dikenali.

Definisi alternatif didasarkan pada pelaksanaan eksperimen berkali-kali. Misalkan eksperimen dilakukan N kali dan pada M percobaan peristiwa A terjadi. Probabilitas terjadinya A didefinisikan sebagai batas M/N ketika N menuju tak hingga.

$$\lim_{N\to\infty} M/N$$

Apabila koin dilempar berulang-ulang, fraksi munculnya sisi kepala akan mendekati 1/2 ketika jumlah lemparan diperbesar.

Sebagai contoh, probabilitas mengambil kartu hati secara acak dari satu set standar 52 kartu yang mengandung 13 kartu hati adalah 13/52 = 1/4.

Kadang-kadang ditanyakan probabilitas dua peristiwa berkaitan terjadi bersamaan. Misalnya, probabilitas mengambil dua kartu hati dari 52 kartu tanpa mengembalikan kartu pertama. Terdapat 52 kemungkinan pengambilan pertama dan untuk masing-masing terdapat 51 kemungkinan pengambilan kedua, sehingga terdapat 52 × 51 hasil. Karena terdapat 13 hati, ada 13 × 12 cara mengambil dua hati. Probabilitasnya adalah (13 × 12)/(52 × 51) = 1/17.

Perhitungan tersebut menggambarkan teorema: probabilitas peristiwa A dan B terjadi bersama adalah probabilitas A terjadi dikalikan probabilitas bersyarat B terjadi setelah A, dengan asumsi A telah terjadi. Probabilitas mengambil hati pada pengambilan pertama adalah 13/52. Setelah sebuah hati diambil, tersisa 12 hati di antara 51 kartu sehingga probabilitas hati pada pengambilan kedua adalah 12/51. Hasil kalinya (13/52)(12/51) = 1/17.

Dalam mekanika kuantum harus ditangani probabilitas yang melibatkan variabel kontinu, misalnya koordinat x. Tidak banyak artinya membicarakan probabilitas partikel ditemukan tepat pada titik seperti x = 0,5000c karena terdapat tak hingga banyak titik pada sumbu x dan probabilitas mendapatkan tepat nilai tersebut pada sejumlah pengukuran berhingga sangat kecil. Sebaliknya, dibicarakan probabilitas menemukan partikel pada interval sangat kecil antara x dan x + dx, dengan dx sebagai elemen panjang infinitesimal.

Probabilitas tersebut sebanding dengan panjang interval dx dan berubah pada daerah berbeda sepanjang sumbu x. Oleh karena itu, probabilitas partikel ditemukan antara x dan x + dx sama dengan g(x)dx, dengan g(x) sebagai fungsi yang menunjukkan variasi probabilitas sepanjang sumbu x. Fungsi g(x) disebut kerapatan probabilitas karena merupakan probabilitas per satuan panjang. Karena probabilitas adalah bilangan real tak negatif, g(x) harus berupa fungsi real yang tidak negatif di semua tempat. Fungsi gelombang Ψ dapat bernilai negatif atau kompleks dan bukan kerapatan probabilitas. Mekanika kuantum mempostulatkan bahwa kerapatan probabilitas adalah $|\Psi|^2$.

Probabilitas partikel berada pada daerah berhingga $a \leq x \leq b$ diperoleh dengan menjumlahkan probabilitas $|\Psi|^2 dx$ pada seluruh daerah infinitesimal antara a dan b, yaitu integral tentu:

$$\int_a^b |\Psi|^2 \, dx = \Pr(a \leq x \leq b) \qquad (1.23)$$

Di sini Pr menyatakan probabilitas. Probabilitas 1 berarti kepastian. Karena partikel pasti berada di suatu tempat pada sumbu x, berlaku syarat:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \, dx = 1 \qquad (1.24)$$

Apabila Ψ memenuhi Persamaan (1.24), Ψ dikatakan ternormalisasi. Untuk keadaan stasioner, $|\Psi|^2 = |\psi|^2$ sehingga $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \, dx = 1$.

Contoh

Sistem satu partikel satu dimensi memiliki $\Psi = a^{-1/2} e^{(-|x|/a)}$ pada t = 0, dengan a = 1,0000 nm. Pada t = 0 posisi partikel diukur. (a) Tentukan probabilitas nilai hasil pengukuran berada antara x = 1,5000 nm dan x = 1,5001 nm. (b) Tentukan probabilitas nilai hasil pengukuran berada antara x = 0 dan x = 2 nm. (c) Buktikan bahwa Ψ ternormalisasi.

(a) Pada interval yang sangat kecil ini, x hanya berubah 0,0001 nm dan Ψ berubah dari $e^{-1.5000}$ $nm^{-1/2}$ = 0,22313 $nm^{-1/2}$ menjadi $e^{-1.5001}$ $nm^{-1/2}$ = 0,22311 $nm^{-1/2}$. Karena Ψ hampir konstan, interval dapat dianggap infinitesimal. Berdasarkan Persamaan (1.15):

$$|\Psi|^2 dx = a^{-1} e^{(-2|x|/a)} dx$$
$$= (1 \text{ nm})^{-1} \, e^{[-2(1{,}5 \text{ nm})/(1 \text{ nm})](0{,}0001 \text{ nm})}$$
$$= 4{,}979 \times 10^{-6}$$

(b) Dengan Persamaan (1.23) dan |x| = x untuk $x \geq 0$:

$$\Pr(0 \leq x \leq 2 \text{ nm})$$
$$= \int_0^{2\text{nm}} a^{-1} e^{(-2x/a)} \, dx$$
$$= -\tfrac{1}{2} \, e^{(-2x/a)}|_0^{2\text{nm}}$$
$$= -\tfrac{1}{2}(e^{-4} - 1)$$
$$= 0{,}4908$$

(c) Dengan memisahkan integral pada x = 0, menggunakan |x| = −x untuk x ≤ 0 dan |x| = x untuk x ≥ 0:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx$$
$$= a^{-1}\int_{-\infty}^{0} e^{(2x/a)}dx + a^{-1}\int_{0}^{\infty} e^{(-2x/a)}dx$$
$$= ½ + ½$$
$$= 1$$

Latihan: Untuk sistem dengan fungsi keadaan pada saat pengukuran posisi $\Psi = (32a^3/\pi)^{1/4} x e^{(-ax^2)}$, dengan a = 1,0000 nm^{-2}, tentukan probabilitas partikel ditemukan antara x = 1,2000 nm dan x = 1,2001 nm. Anggap interval infinitesimal. Jawaban: 0,0000258.

1.7 Bilangan Kompleks

Telah ditunjukkan bahwa fungsi gelombang dapat bersifat kompleks. Karena itu, beberapa sifat bilangan kompleks ditinjau kembali.

Bilangan kompleks z adalah bilangan berbentuk:

$$z = x + iy, \quad \text{dengan } i \equiv \sqrt{(-1)} \tag{1.25}$$

Di sini x dan y adalah bilangan real. Apabila y = 0, z adalah bilangan real. Apabila y ≠ 0, z adalah bilangan imajiner. Apabila x = 0 dan y ≠ 0, z adalah bilangan imajiner murni. Sebagai contoh, 6,83 adalah bilangan real, 5,4 − 3i adalah bilangan imajiner, dan 0,60i adalah bilangan imajiner murni. Bilangan real dan imajiner murni merupakan kasus khusus bilangan kompleks. Dalam Persamaan (1.25), x dan y masing-masing disebut bagian real dan bagian imajiner z: x = Re(z) dan y = Im(z).

Bilangan kompleks z dapat direpresentasikan sebagai titik pada bidang kompleks, seperti Gambar 1.3. Bagian real z digambarkan pada sumbu horizontal dan bagian imajiner pada sumbu vertikal. Diagram tersebut menyarankan dua besaran yang mencirikan z. Jarak r dari titik z ke titik asal disebut nilai mutlak atau modulus z dan ditulis |z|. Sudut θ antara vektor radius menuju titik z dan sumbu horizontal positif disebut fase atau argumen z. Berlaku:

$$|z| = r = (x^2 + y^2)^{1/2}, \quad \tan\theta = y/x$$
$$x = r\cos\theta, \quad y = r\sin\theta \tag{1.26}$$

Karena itu z = x + iy dapat ditulis:

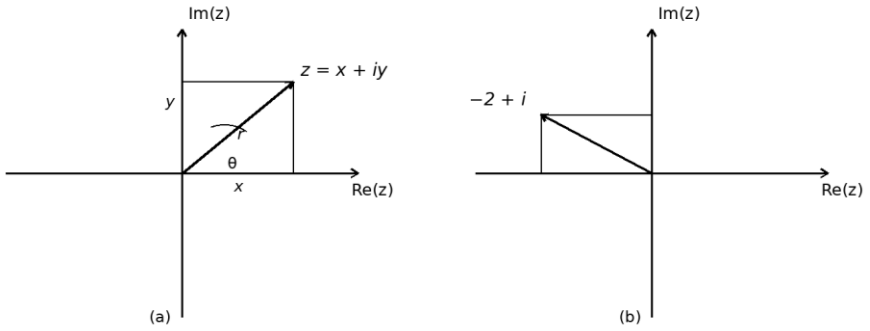
$$z = r\cos\theta + ir\sin\theta = re^{(i\theta)} \tag{1.27}$$

karena:

$$\boxed{e^{(i\theta)} = \cos\theta + i\sin\theta} \tag{1.28}$$

Sudut θ dalam persamaan tersebut dinyatakan dalam radian. Apabila z = x + iy, konjugat kompleks z* didefinisikan sebagai:

$$z^* \equiv x - iy = re^{\wedge}(-i\theta) \tag{1.29}$$



Gambar 1.3. (a) Representasi bilangan kompleks z = x + iy. (b) Representasi bilangan −2 + i.

Apabila z adalah bilangan real, bagian imajinernya nol. Dengan demikian, z real jika dan hanya jika z = z*. Mengambil konjugat kompleks dua kali mengembalikan bilangan semula: (z*)* = z. Dengan mengalikan z dan konjugatnya serta menggunakan $i^2 = -1$ diperoleh:

$$zz^* = (x + iy)(x - iy) = x^2 + y^2 = r^2 = |z|^2 \tag{1.30}$$

Untuk hasil kali dan hasil bagi dua bilangan kompleks $z_1 = r_1 e^{\wedge}(i\theta_1)$ dan $z_2 = r_2 e^{\wedge}(i\theta_2)$, berlaku:

$$\begin{aligned} z_1 z_2 &= r_1 r_2 e^{\wedge}[i(\theta_1+\theta_2)], \quad z_1/z_2 \\ &= (r_1/r_2) e^{\wedge}[i(\theta_1-\theta_2)] \end{aligned} \tag{1.31}$$

Dari definisi konjugat kompleks atau Persamaan (1.31) mudah dibuktikan bahwa:

$$(z_1 z_2)^* = z_1^* z_2^* \tag{1.32}$$

Demikian pula:

$$\begin{aligned} (z_1/z_2)^* &= z_1^*/z_2^*, \\ (z_1+z_2)^* &= z_1^*+z_2^*, \\ (z_1-z_2)^* &= z_1^*-z_2^* \end{aligned} \tag{1.33}$$

Untuk nilai mutlak hasil kali dan hasil bagi, Persamaan (1.31) memberikan:

$$|z_1 z_2| = |z_1||z_2|, \quad |z_1/z_2| = |z_1|/|z_2| \tag{1.34}$$

Karena itu, jika ψ adalah fungsi gelombang kompleks:

$$|\psi^2| = |\psi|^2 = \psi^*\psi \tag{1.35}$$

Selanjutnya dicari rumus akar pangkat n dari bilangan 1. Fase bilangan 1 dapat diambil sebagai 0, 2π, 4π, dan seterusnya; maka $1 = e^{\wedge}(i2\pi k)$, dengan k bilangan bulat, baik nol, negatif, maupun positif. Pertimbangkan bilangan $\omega \equiv e^{\wedge}(i2\pi k/n)$, dengan n bilangan bulat positif. Dengan menggunakan Persamaan (1.31) sebanyak n kali diperoleh $\omega^n = e^{\wedge}(i2\pi k) = 1$. Jadi ω merupakan akar pangkat n

dari satu. Terdapat n akar pangkat n kompleks yang berbeda, dan seluruhnya diperoleh dengan n nilai berurutan k:

$$\omega = e\text{^}(i2\pi k/n), \quad k = 0, 1, 2, ..., n - 1 \tag{1.36}$$

Nilai k lain menghasilkan bilangan yang fasenya berbeda sebesar kelipatan bulat 2π dari salah satu bilangan dalam Persamaan (1.36), sehingga bukan akar berbeda. Untuk n = 2 diperoleh dua akar kuadrat dari 1; untuk n = 3 diperoleh tiga akar pangkat tiga; dan seterusnya.

1.8 Satuan

Buku ini menggunakan satuan SI. Dalam Sistem Internasional, satuan panjang, massa, dan waktu masing-masing adalah meter (m), kilogram (kg), dan sekon (s). Gaya diukur dalam newton (N) dan energi dalam joule (J). Hukum Coulomb untuk besar gaya antara dua muatan Q_1 dan Q_2 yang dipisahkan jarak r dalam vakum ditulis dalam satuan SI sebagai:

$$\boxed{F = Q_1Q_2/(4\pi\varepsilon_0 r^2)} \tag{1.37}$$

Muatan Q_1 dan Q_2 dinyatakan dalam coulomb (C), sedangkan ε_0 adalah konstanta yang disebut permitivitas vakum atau konstanta listrik, dengan nilai $8{,}854 \times 10^{-12}$ $C^2\ N^{-1}\ m^{-2}$. Nilai konstanta fisis yang lebih akurat diberikan dalam lampiran sumber.

1.9 Kalkulus

Kalkulus digunakan secara luas dalam kimia kuantum. Rumus-rumus berikut, dengan c, n, dan b sebagai konstanta serta f dan g sebagai fungsi x, perlu dikuasai.

$$dc/dx = 0; \quad d(cf)/dx = c(df/dx); \quad d(x^n)/dx = nx^{n-1}; \quad d(e\text{^}(cx))/dx = ce\text{^}(cx)$$
$$d(\sin cx)/dx = c\cos cx; \quad d(\cos cx)/dx = -c\sin cx; \quad d(\ln cx)/dx = 1/x$$
$$d(f+g)/dx = df/dx + dg/dx; \quad d(fg)/dx = f(dg/dx) + g(df/dx)$$
$$d(f/g)/dx = d(fg^{-1})/dx = -fg^{-2}(dg/dx) + g^{-1}(df/dx)$$
$$d[f(g(x))]/dx = (df/dg)(dg/dx)$$
$$\int cf(x)dx = c\int f(x)dx; \quad \int[f(x)+g(x)]dx = \int f(x)dx + \int g(x)dx$$
$$\int dx = x; \quad \int x^n dx = x^{n+1}/(n+1),\ n \neq -1; \quad \int dx/x = \ln x$$
$$\int e\text{^}(cx)dx = e\text{^}(cx)/c; \quad \int \sin(cx)dx = -\cos(cx)/c; \quad \int \cos(cx)dx = \sin(cx)/c$$
$$\int_\beta^c f(x)dx = g(c) - g(b), \quad \text{dengan } dg/dx = f(x)$$

Contoh rumus rantai terakhir adalah $d[\sin(cx^2)]/dx = 2cx\cos(cx^2)$, dengan $g(x) = cx^2$ dan f = sin.

Rangkuman Bab 1

Keadaan sistem mekanika kuantum digambarkan oleh fungsi keadaan atau fungsi gelombang Ψ yang merupakan fungsi koordinat partikel-partikel sistem dan waktu. Fungsi keadaan berubah terhadap waktu menurut persamaan Schrödinger bergantung waktu; untuk sistem satu partikel satu dimensi persamaan tersebut adalah Persamaan (1.13).

Untuk sistem satu partikel satu dimensi, besaran $|\Psi(x,t)|^2dx$ memberikan probabilitas bahwa pengukuran posisi partikel pada waktu t menemukan partikel antara x dan x + dx. Fungsi keadaan dinormalisasi menurut $\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2dx = 1$.

Apabila fungsi energi potensial sistem tidak bergantung waktu, sistem dapat berada dalam sejumlah keadaan stasioner berenergi tetap. Untuk keadaan stasioner sistem satu partikel satu dimensi, $\Psi(x,t) = e^{(-iEt/\hbar)}\psi(x)$, dengan $\psi(x)$ sebagai solusi persamaan Schrödinger tak bergantung waktu (1.19).

Catatan Integrasi Sains dan Islam

Ayat tentang pengamatan dan pemikiran terhadap alam

إِنَّ فِي خَلْقِ السَّمَاوَاتِ وَالْأَرْضِ وَاخْتِلَافِ اللَّيْلِ وَالنَّهَارِ لَآيَاتٍ لِأُولِي الْأَلْبَابِ

"Sesungguhnya dalam penciptaan langit dan bumi serta pergantian malam dan siang terdapat tanda-tanda bagi orang-orang yang berakal." (QS Ali 'Imran [3]: 190)

Pembahasan mekanika kuantum menunjukkan bahwa alam pada skala mikroskopik memiliki keteraturan matematis yang tidak selalu dapat divisualisasikan dengan intuisi makroskopik. Ayat tersebut tidak berfungsi sebagai pengganti pembuktian ilmiah, tetapi mendorong pengamatan, penalaran, dan kesadaran akan keteraturan ciptaan.

Hadis tentang kompetensi dalam urusan dunia

أَنْتُمْ أَعْلَمُ بِأَمْرِ دُنْيَاكُمْ

"Kalian lebih mengetahui urusan dunia kalian." (HR Muslim, no. 2363)

Hadis ini dapat dipahami sebagai pengakuan terhadap pentingnya keahlian, observasi, dan metode dalam persoalan teknis. Pengembangan kimia kuantum dan kimia komputasi memerlukan kompetensi matematis serta verifikasi eksperimental, sekaligus tanggung jawab etis dalam pemanfaatannya.

Soal Bab 1

Jawaban soal numerik terpilih tersedia pada bagian *Jawaban Soal Terpilih Bab 1*. Seluruh soal berikut dipertahankan sesuai urutan sumber.

1.1 Benar atau salah?
(a) Semua foton memiliki energi yang sama.
(b) Ketika frekuensi cahaya meningkat, panjang gelombangnya menurun.
(c) Jika cahaya ungu dengan $\lambda = 400$ nm tidak menimbulkan efek fotolistrik pada suatu logam, maka dapat dipastikan bahwa cahaya merah dengan $\lambda = 700$ nm juga tidak menimbulkan efek fotolistrik pada logam tersebut.

1.2
(a) Hitung energi satu foton radiasi inframerah dengan panjang gelombang 1064 nm.
(b) Laser Nd:YAG memancarkan pulsa radiasi 1064 nm dengan daya rata-rata 5×10^6 W dan durasi 2×10^{-8} s. Tentukan jumlah foton yang dipancarkan dalam pulsa tersebut. Ingat bahwa 1 W = 1 J s^{-1}.

1.3 Hitung energi satu mol foton ultraviolet dengan panjang gelombang 300 nm dan bandingkan dengan energi ikatan tunggal tipikal sebesar 400 kJ mol^{-1}.

1.4 Fungsi kerja Na sangat murni adalah 2,75 eV, dengan 1 eV = $1{,}602 \times 10^{-19}$ J.
(a) Hitung energi kinetik maksimum fotoelektron yang dipancarkan dari Na ketika terkena radiasi ultraviolet 200 nm.
(b) Hitung panjang gelombang terpanjang yang masih menimbulkan efek fotolistrik pada Na murni.
(c) Fungsi kerja natrium yang tidak dimurnikan dengan sangat teliti jauh lebih kecil daripada 2,75 eV karena sulfur teradsorpsi dan zat lain dari gas atmosfer. Ketika Na tidak murni terkena radiasi 200 nm, apakah energi kinetik maksimum fotoelektronnya lebih kecil atau lebih besar daripada Na murni?

1.5
(a) Buktikan bahwa pada frekuensi tinggi hukum Wien merupakan pendekatan yang baik terhadap persamaan benda hitam Planck.
(b) Pada Juni 1900, Rayleigh menerapkan teorema ekvipartisi mekanika statistik klasik untuk menurunkan persamaan radiasi benda hitam yang menunjukkan bahwa intensitas radiasi sebanding dengan $\nu^2 T$. Pada tahun 1905, Jeans menunjukkan kesalahan pada konstanta kesebandingan Rayleigh dan memperbaiki rumus menjadi $I = 2\pi\nu^2 kT/c^2$. Buktikan bahwa pada frekuensi rendah rumus Planck dapat didekati oleh rumus Rayleigh–Jeans. Petunjuk: gunakan deret Taylor e^x. Hasil klasik Rayleigh–Jeans secara fisis tidak masuk akal karena meramalkan energi pancaran meningkat tanpa batas ketika ν meningkat.

1.6 Hitung panjang gelombang de Broglie elektron yang bergerak dengan 1/137 kecepatan cahaya. Pada kecepatan ini koreksi relativistik terhadap massa dapat diabaikan.

1.7 Integralkan persamaan $dx/dt = -gt + gt_0 + v_0$ pada paragraf setelah Persamaan (1.11) untuk memperoleh x sebagai fungsi waktu. Gunakan syarat bahwa partikel berada di x_0 pada t_0 untuk menentukan konstanta integrasi dan buktikan:

$$x = x_0 - \tfrac{1}{2}g(t - t_0)^2 + v_0(t - t_0).$$

1.8 Suatu sistem satu partikel satu dimensi memiliki $\Psi = ae^{(-ibt)}e^{(-bmx^2/\hbar)}$, dengan a dan b sebagai konstanta serta m massa partikel. Tentukan fungsi energi potensial V sistem. Petunjuk: gunakan persamaan Schrödinger bergantung waktu.

1.9 Benar atau salah?
(a) Untuk semua keadaan mekanika kuantum, $|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2$.
(b) Untuk semua keadaan mekanika kuantum, $\Psi(x,t)$ merupakan hasil kali fungsi x dan fungsi t.

1.10 Sistem satu partikel satu dimensi memiliki energi potensial $V = 2c^2\hbar^2x^2/m$ dan berada dalam keadaan stasioner dengan $\psi(x) = bxe^{(-cx^2)}$, dengan b konstanta, $c = 2{,}00\ \text{nm}^{-2}$, dan $m = 1{,}00 \times 10^{-27}$ g. Tentukan energi partikel.

1.11 Persamaan Schrödinger manakah yang berlaku untuk semua sistem mekanika kuantum nonrelativistik?
(a) Hanya persamaan bergantung waktu.
(b) Hanya persamaan tak bergantung waktu.
(c) Keduanya.

1.12 Pada suatu saat, sistem satu partikel satu dimensi memiliki $\Psi = (2/b^3)^{1/2}xe^{(-|x|/b)}$, dengan b = 3,000 nm. Jika x diukur pada saat tersebut, tentukan probabilitas bahwa hasilnya:
(a) antara 0,9000 nm dan 0,9001 nm—anggap interval infinitesimal;
(b) antara 0 dan 2 nm;
(c) pada nilai x berapakah kerapatan probabilitas minimum? Tidak perlu menggunakan kalkulus.
(d) Buktikan Ψ ternormalisasi.

1.13 Sistem satu partikel satu dimensi memiliki fungsi keadaan:

$$\Psi = (\sin at)(2/\pi c^2)^{1/4}e^{(-x^2/c^2)} + (\cos at)(32/\pi c^6)^{1/4}xe^{(-x^2/c^2)},$$

dengan a konstanta dan c = 2,000 Å. Jika posisi partikel diukur pada t = 0, perkirakan probabilitas hasil berada antara 2,000 Å dan 2,001 Å.

1.14 Gunakan Persamaan (1.23) untuk memperoleh jawaban bagian (a) contoh pada akhir Bagian 1.6, kemudian bandingkan dengan jawaban pendekatan pada contoh.

1.15 Manakah fungsi berikut yang memenuhi seluruh persyaratan fungsi kerapatan probabilitas? a dan b adalah konstanta positif.
(a) $e^{(iax)}$;

(b) $xe^{(-bx^2)}$;
(c) $e^{(-b^2x^2)}$.

1.16
(a) Frank dan Phyllis Eisenberg memiliki dua anak dan setidaknya satu anak perempuan. Berapakah probabilitas kedua anak mereka perempuan?
(b) Bob dan Barbara Schrödinger memiliki dua anak. Anak yang lebih tua perempuan. Berapakah probabilitas anak yang lebih muda perempuan? Anggap peluang kelahiran laki-laki dan perempuan sama.

1.17 Jika puncak spektrum massa C_2F_6 pada nomor massa 138 mempunyai tinggi 100 satuan, hitung tinggi puncak pada nomor massa 139 dan 140. Kelimpahan isotop: ^{12}C 98,89%; ^{13}C 1,11%; ^{19}F 100%.

1.18 Dalam permainan bridge, masing-masing dari empat pemain A, B, C, dan D menerima 13 kartu. Misalkan A dan C bersama-sama memiliki 11 dari 13 kartu sekop. Berapakah probabilitas dua sekop yang tersisa terbagi sehingga B dan D masing-masing memperoleh satu sekop?

1.19 Fungsi kerapatan probabilitas penting apa yang muncul dalam:
(a) teori kinetik gas;
(b) analisis galat acak pengukuran?

1.20 Klasifikasikan masing-masing sebagai bilangan real atau bilangan imajiner:
(a) -17;
(b) $2 + i$;
(c) $\sqrt{7}$;
(d) $\sqrt{(-1)}$;
(e) $\sqrt{(-6)}$;
(f) $2/3$;
(g) π;
(h) i^2;
(i) $(a + bi)(a - bi)$, dengan a dan b real.

1.21 Gambarkan titik-titik berikut pada bidang kompleks:
(a) 3;
(b) $-i$;
(c) $-2 + 3i$.

1.22 Buktikan bahwa $1/i = -i$.

1.23 Sederhanakan:
(a) i^2;
(b) i^3;
(c) i^4;
(d) i*i;
(e) $(1 + 5i)(2 - 3i)$;
(f) $(1 - 3i)/(4 + 2i)$.

Petunjuk untuk (f): kalikan pembilang dan penyebut dengan konjugat kompleks penyebut.

1.24 Tentukan konjugat kompleks:
(a) −4;
(b) −2i;
(c) 6 + 3i;
(d) 2e^(−iπ/5).

1.25 Tentukan nilai mutlak dan fase:
(a) i;
(b) 2e^(iπ/3);
(c) −2e^(iπ/3);
(d) 1 − 2i.

1.26 Di manakah seluruh titik pada bidang kompleks yang nilai mutlaknya 5 terletak? Di manakah seluruh titik yang fasenya π/4 terletak?

1.27 Tuliskan dalam bentuk re^(iθ):
(a) i;
(b) −1;
(c) 1 − 2i;
(d) −1 − i.

1.28
(a) Tentukan akar pangkat tiga dari 1.
(b) Jelaskan mengapa n akar pangkat n dari 1, apabila digambarkan pada bidang kompleks, terletak pada lingkaran berjari-jari 1 dan terpisah satu sama lain sebesar sudut 2π/n.

1.29 Buktikan:

$$\sin\theta = [e^{(i\theta)} - e^{(-i\theta)}]/(2i)$$

dan

$$\cos\theta = [e^{(i\theta)} + e^{(-i\theta)}]/2.$$

1.30 Nyatakan satuan berikut dalam satuan dasar SI (m, kg, s):
(a) newton;
(b) joule.

1.31 Hitung gaya pada partikel alfa yang melintas dekat inti atom emas pada jarak 0,00300 Å.

1.32 Tentukan:
(a) $d[2x^2 \sin(3x^4) + 5]/dx$;
(b) $\int (3x^2 + 1)^2 \, dx$.

1.33 Benar atau salah?
(a) Kerapatan probabilitas tidak pernah negatif.
(b) Fungsi keadaan Ψ tidak pernah negatif.
(c) Fungsi keadaan Ψ harus berupa fungsi real.
(d) Jika z = z*, maka z harus bilangan real.
(e) $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi \, dx = 1$ untuk sistem satu partikel satu dimensi.
(f) Hasil kali suatu bilangan dan konjugat kompleksnya selalu bilangan real.

BAB 2
PARTIKEL DALAM KOTAK

Fungsi gelombang keadaan stasioner dan tingkat energi suatu sistem satu partikel satu dimensi diperoleh dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger tak bergantung waktu (1.19). Dalam bab ini, kita menyelesaikan persamaan Schrödinger tak bergantung waktu untuk suatu sistem yang sangat sederhana, yaitu partikel dalam kotak satu dimensi (Bagian 2.2). Karena persamaan Schrödinger merupakan persamaan diferensial, terlebih dahulu kita membahas persamaan diferensial.

2.1 Persamaan Diferensial

Bagian ini hanya membahas persamaan diferensial biasa, yaitu persamaan yang hanya mempunyai satu variabel bebas. [Persamaan diferensial parsial mempunyai lebih dari satu variabel bebas. Contohnya adalah persamaan Schrödinger bergantung waktu (1.16), yang variabel bebasnya ialah t dan x.] Persamaan diferensial biasa merupakan hubungan yang melibatkan variabel bebas x, variabel terikat y(x), serta turunan pertama, kedua, ..., hingga turunan ke-n dari y, yaitu y', y'', ..., $y^{(n)}$. Salah satu contohnya adalah

$$y''' + 2x(y')^2 + y^2 \sin x = 3e^x \tag{2.1}$$

Orde suatu persamaan diferensial adalah orde turunan tertinggi yang terdapat di dalam persamaan tersebut. Dengan demikian, Persamaan (2.1) merupakan persamaan diferensial orde ketiga.

Salah satu jenis khusus persamaan diferensial adalah persamaan diferensial linear, yang mempunyai bentuk

$$A_n(x)y^{(n)} + A_{n-1}(x)y^{(n-1)} + \cdots + A_1(x)y' + A_0(x)y = g(x) \tag{2.2}$$

dengan A dan g—sebagian di antaranya dapat bernilai nol—merupakan fungsi x saja. Dalam persamaan diferensial linear orde ke-n (2.2), y dan turunannya muncul dengan pangkat satu. Persamaan diferensial yang tidak dapat dinyatakan dalam bentuk (2.2) disebut nonlinear. Apabila g(x) = 0 dalam (2.2), persamaan diferensial linear tersebut disebut homogen; apabila tidak, disebut tak homogen. Persamaan Schrödinger satu dimensi (1.19) merupakan persamaan diferensial linear homogen orde kedua.

Dengan membagi seluruh suku dengan koefisien y'', setiap persamaan diferensial linear homogen orde kedua dapat ditulis dalam bentuk

$$y'' + P(x)y' + Q(x)y = 0 \tag{2.3}$$

Misalkan y_1 dan y_2 merupakan dua fungsi bebas yang masing-masing memenuhi (2.3). Yang dimaksud dengan bebas ialah y_2 bukan sekadar kelipatan y_1. Maka solusi umum persamaan diferensial linear homogen (2.3) adalah

$$y = c_1 y_1 + c_2 y_2 \tag{2.4}$$

dengan c_1 dan c_2 sebagai konstanta sembarang. Hal ini mudah diverifikasi dengan menyubstitusikan (2.4) ke ruas kiri (2.3):

$$\begin{aligned} &c_1 y_1'' + c_2 y_2'' + P(x) c_1 y_1' + P(x) c_2 y_2' + Q(x) c_1 y_1 + Q(x) c_2 y_2 \\ &= c_1[y_1'' + P(x) y_1' + Q(x) y_1] + c_2[y_2'' + P(x) y_2' + Q(x) y_2] \\ &= c_1 \cdot 0 + c_2 \cdot 0 = 0 \end{aligned} \tag{2.5}$$

Pada baris terakhir telah digunakan fakta bahwa y_1 dan y_2 memenuhi (2.3).

Solusi umum persamaan diferensial orde ke-n biasanya mengandung n konstanta sembarang. Untuk menentukan konstanta-konstanta tersebut, dapat digunakan syarat batas, yaitu syarat yang menentukan nilai y atau berbagai turunannya pada satu atau beberapa titik. Sebagai contoh, apabila y adalah simpangan tali bergetar yang kedua ujungnya dijepit, y harus bernilai nol pada kedua titik tersebut.

Salah satu kasus khusus yang penting adalah persamaan diferensial linear homogen orde kedua dengan koefisien tetap:

$$y'' + py' + qy = 0 \tag{2.6}$$

dengan p dan q sebagai konstanta. Untuk menyelesaikan (2.6), sementara kita mengasumsikan solusi berbentuk $y = e^{sx}$. Kita mencari fungsi yang turunannya, setelah dikalikan konstanta, dapat saling meniadakan dengan fungsi asal. Fungsi eksponensial mengulangi bentuknya ketika diturunkan sehingga merupakan pilihan yang tepat. Substitusi ke (2.6) memberikan

$$\begin{aligned} s^2 e^{sx} + pse^{sx} + qe^{sx} &= 0 \\ s^2 + ps + q &= 0 \end{aligned} \tag{2.7}$$

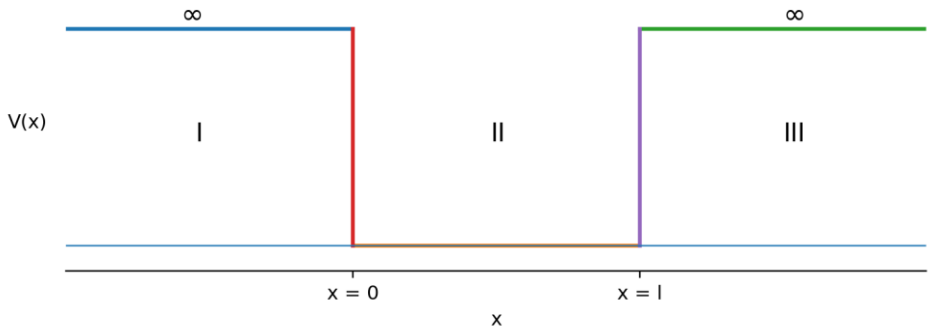
Persamaan (2.7) disebut persamaan bantu. Persamaan ini merupakan persamaan kuadrat dengan dua akar s_1 dan s_2 yang, apabila s_1 dan s_2 tidak sama, memberikan dua solusi bebas untuk (2.6). Dengan demikian, solusi umum (2.6) adalah

$$y = c_1 e^{s1x} + c_2 e^{s2x} \tag{2.8}$$

Sebagai contoh, untuk $y'' + 6y' - 7y = 0$, persamaan bantunya adalah $s^2 + 6s - 7 = 0$. Rumus kuadrat memberikan $s_1 = 1$ dan $s_2 = -7$ sehingga solusi umumnya adalah $c_1 e^x + c_2 e^{-7x}$.

2.2 Partikel dalam Kotak Satu Dimensi

Bagian ini menyelesaikan persamaan Schrödinger tak bergantung waktu untuk partikel dalam kotak satu dimensi. Yang dimaksud ialah partikel yang dikenai fungsi energi potensial yang bernilai tak hingga di sepanjang sumbu x, kecuali pada suatu ruas garis sepanjang l tempat energi potensialnya bernilai nol. Sistem semacam ini mungkin tampak tidak realistis secara fisis, tetapi model tersebut dapat diterapkan dengan cukup berhasil pada molekul terkonjugasi tertentu; lihat Soal 2.17. Titik asal ditempatkan pada ujung kiri ruas garis tersebut (Gambar 2.1).



Gambar 2.1 Fungsi energi potensial V(x) untuk partikel dalam kotak satu dimensi.

Terdapat tiga daerah yang harus dipertimbangkan. Dalam daerah I dan III, energi potensial V sama dengan tak hingga dan persamaan Schrödinger tak bergantung waktu (1.19) adalah

$$-(\hbar^2/2m)(d^2\psi/dx^2) = (E - \infty)\psi$$

Dengan mengabaikan E dibandingkan dengan ∞, diperoleh

$$d^2\psi/dx^2 = \infty\psi, \qquad \psi = (1/\infty)(d^2\psi/dx^2)$$

dan disimpulkan bahwa ψ bernilai nol di luar kotak:

$$\psi^{I} = 0, \qquad \psi^{III} = 0 \tag{2.9}$$

Untuk daerah II, x berada antara nol dan l, energi potensial V bernilai nol, sehingga persamaan Schrödinger (1.19) menjadi

$$d^2\psi^{II}/dx^2 + (2m/\hbar^2)E\psi^{II} = 0 \tag{2.10}$$

dengan m sebagai massa partikel dan E sebagai energinya. Persamaan (2.10) dikenali sebagai persamaan diferensial linear homogen orde kedua dengan koefisien tetap. Persamaan bantu (2.7) memberikan

$$s^2 + 2mE\hbar^{-2} = 0$$
$$s = \pm(-2mE)^{1/2}\hbar^{-1} \tag{2.11}$$

$$s = \pm i(2mE)^{1/2}/\hbar \tag{2.12}$$

dengan $i = \sqrt{(-1)}$. Dengan menggunakan (2.8), diperoleh

$$\psi^{II} = c_1 e^{i(2mE)1/2x}/\hbar + c_2 e^{-i(2mE)1/2x}/\hbar \tag{2.13}$$

Untuk sementara, tetapkan $\theta \equiv (2mE)^{1/2}x/\hbar$, sehingga $\psi^{II} = c_1 e^{i\theta} + c_2 e^{-i\theta}$. Kita mempunyai $e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta$ [Persamaan (1.28)] dan $e^{-i\theta} = \cos(-\theta) + i\sin(-\theta) = \cos\theta - i\sin\theta$, karena

$$\boxed{\cos(-\theta) = \cos\theta \quad \text{dan} \quad \sin(-\theta) = -\sin\theta} \tag{2.14}$$

Oleh karena itu,

$$\psi^{II} = c_1\cos\theta + ic_1\sin\theta + c_2\cos\theta - ic_2\sin\theta$$
$$= (c_1 + c_2)\cos\theta + (ic_1 - ic_2)\sin\theta$$
$$= A\cos\theta + B\sin\theta$$

dengan A dan B sebagai konstanta sembarang yang baru. Dengan demikian,

$$\psi^{II} = A\cos[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2}x] + B\sin[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2}x] \qquad (2.15)$$

Selanjutnya A dan B ditentukan dengan menerapkan syarat batas. Wajar untuk mempostulatkan bahwa fungsi gelombang bersifat kontinu, yaitu tidak mengalami loncatan nilai secara tiba-tiba (lihat Gambar 3.4). Agar ψ kontinu pada x = 0, ψ^I dan ψ^{II} harus mendekati nilai yang sama pada x = 0:

$$\lim_{x\to 0}\psi^I = \lim_{x\to 0}\psi^{II}$$
$$0 = \lim_{x\to 0}\{A\cos[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2}x] + B\sin[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2}x]\}$$
$$0 = A$$

karena

$$\sin 0 = 0 \quad \text{dan} \quad \cos 0 = 1 \qquad (2.16)$$

Dengan A = 0, Persamaan (2.15) menjadi

$$\psi^{II} = B\sin[(2\pi/h)(2mE)^{1/2}x] \qquad (2.17)$$

Penerapan syarat kontinuitas pada x = l memberikan

$$B\sin[(2\pi/h)(2mE)^{1/2}l] = 0 \qquad (2.18)$$

B tidak boleh sama dengan nol karena hal itu akan membuat fungsi gelombang bernilai nol di semua tempat—kotak akan kosong. Oleh karena itu, $\sin[(2\pi/h)(2mE)^{1/2}l] = 0$. Titik nol fungsi sinus terjadi pada 0, $\pm\pi$, $\pm 2\pi$, $\pm 3\pi$, ... = $\pm n\pi$. Maka,

$$(2\pi/h)(2mE)^{1/2}l = \pm n\pi \qquad (2.19)$$

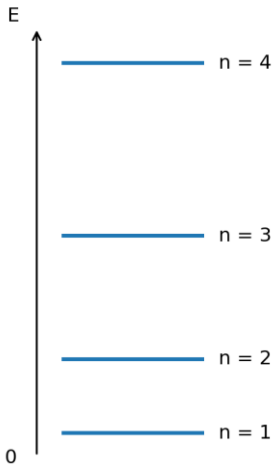
Nilai n = 0 merupakan kasus khusus. Dari (2.19), n = 0 bersesuaian dengan E = 0. Untuk E = 0, akar (2.12) dari persamaan bantu sama dan (2.13) bukan solusi lengkap persamaan Schrödinger. Untuk memperoleh solusi lengkap, kita kembali ke (2.10), yang untuk E = 0 berbentuk $d^2\psi^{II}/dx^2 = 0$. Integrasi memberikan $d\psi^{II}/dx = c$ dan $\psi^{II} = cx + d$, dengan c dan d sebagai konstanta. Syarat batas $\psi^{II} = 0$ pada x = 0 memberikan d = 0, sedangkan syarat $\psi^{II} = 0$ pada x = l kemudian memberikan c = 0. Jadi $\psi^{II} = 0$ untuk E = 0; karena itu E = 0 bukan nilai energi yang diizinkan. Dengan demikian, n = 0 tidak diizinkan.

Dengan menyelesaikan (2.19) terhadap E, diperoleh

$$E = n^2h^2/(8ml^2), \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (2.20)$$

Hanya nilai energi (2.20) yang memungkinkan ψ memenuhi syarat batas kontinuitas pada x = l. Penerapan syarat batas telah memaksa kita menyimpulkan bahwa nilai energi terkuantisasi (Gambar 2.2). Hal ini sangat berbeda dengan hasil klasik bahwa partikel dalam kotak dapat mempunyai energi tak negatif berapa pun. Perhatikan bahwa terdapat nilai minimum energi yang lebih besar daripada nol. Keadaan dengan energi terendah disebut keadaan dasar. Keadaan dengan energi lebih tinggi daripada energi keadaan dasar disebut keadaan

tereksitasi. (Dalam mekanika klasik, energi terendah yang mungkin bagi partikel dalam kotak adalah nol. Partikel klasik dapat diam di dalam kotak dengan energi kinetik nol dan energi potensial nol.)



Gambar 2.2 Empat tingkat energi terendah untuk partikel dalam kotak satu dimensi.

Contoh

Sebuah partikel bermassa 2,00 × 10^{-26} g berada dalam kotak satu dimensi sepanjang 4,00 nm. Tentukan frekuensi dan panjang gelombang foton yang dipancarkan ketika partikel berpindah dari tingkat n = 3 ke tingkat n = 2.

Berdasarkan kekekalan energi, energi hν foton yang dipancarkan sama dengan selisih energi antara kedua keadaan stasioner [Persamaan (1.4); lihat juga Bagian 9.9]:

$$h\nu = E_{atas} - E\_bawah = n^2{}_{atas}h^2/(8ml^2) - n^2\_bawahh^2/(8ml^2)$$

$$\nu = [(n^2{}_{atas} - n^2\_bawah)h]/(8ml^2)$$

$$= [(3^2 - 2^2)(6{,}626 \times 10^{-34}\ \text{J s})]/[8(2{,}00 \times 10^{-29}\ \text{kg})(4{,}00 \times 10^{-9}\ \text{m})^2]$$

$$= 1{,}29 \times 10^{12}\ \text{s}^{-1}$$

Subskrip atas dan bawah masing-masing menyatakan tingkat atas dan tingkat bawah. Dengan menggunakan λν = c diperoleh λ = 2,32 × 10^{-4} m. (Kesalahan mahasiswa yang umum adalah menyamakan hν dengan energi salah satu keadaan, bukan dengan selisih energi antara keadaan.)

Latihan: Untuk sebuah elektron dalam kotak satu dimensi tertentu, transisi dengan panjang gelombang terpanjang terjadi pada 400 nm. Tentukan panjang kotaknya. (Jawaban: 0,603 nm.)

Substitusi (2.19) ke (2.17) memberikan fungsi gelombang

$$\psi^{II} = B \sin(n\pi x/l), \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.21}$$

Penggunaan tanda negatif di depan nπ tidak menghasilkan solusi bebas lain. Karena sin(−u) = −sin u, hasilnya hanya merupakan kelipatan konstanta −1 dari solusi bertanda positif.

Konstanta B dalam Persamaan (2.21) masih sembarang. Untuk menentukan nilainya, digunakan syarat normalisasi, Persamaan (1.24) dan (1.22):

$$\begin{gathered}\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2 dx = 1 \\ \int_{-\infty}^{0}|\psi^{I}|^2 dx + \int_{0}^{l}|\psi^{II}|^2 dx + \int_{l}^{\infty}|\psi^{III}|^2 dx = 1 \\ |B|^2 \int_{0}^{l} \sin^2(n\pi x/l) dx = 1 = |B|^2 l/2\end{gathered} \tag{2.22}$$

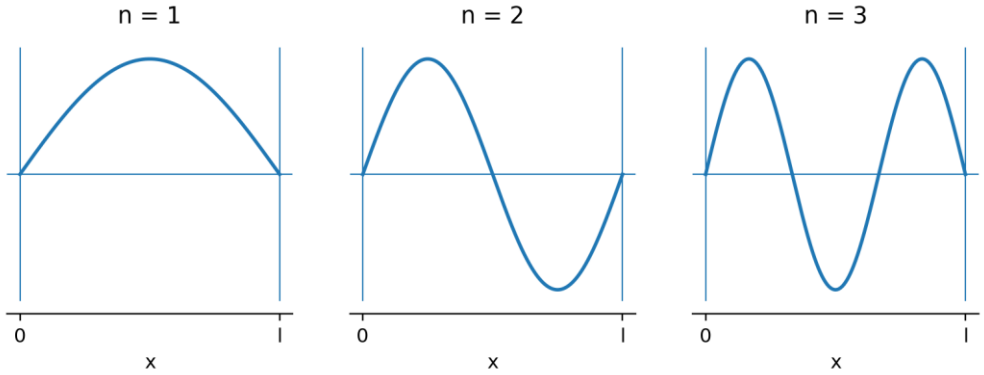
Integral tersebut dievaluasi dengan menggunakan Persamaan (A.2) dalam Lampiran. Diperoleh $|B| = (2/l)^{1/2}$.

Perhatikan bahwa hanya nilai mutlak B yang telah diperoleh. B dapat bernilai $-(2/l)^{1/2}$ maupun $+(2/l)^{1/2}$. Selain itu, B tidak harus merupakan bilangan real. Kita dapat menggunakan bilangan kompleks apa pun yang nilai mutlaknya $(2/l)^{1/2}$. Yang dapat dinyatakan hanyalah $B = (2/l)^{1/2} e^{i\alpha}$, dengan α sebagai fase B yang dapat mempunyai nilai apa pun dalam rentang 0 sampai 2π (Bagian 1.7). Dengan memilih fase nol, fungsi gelombang keadaan stasioner untuk partikel dalam kotak ditulis sebagai

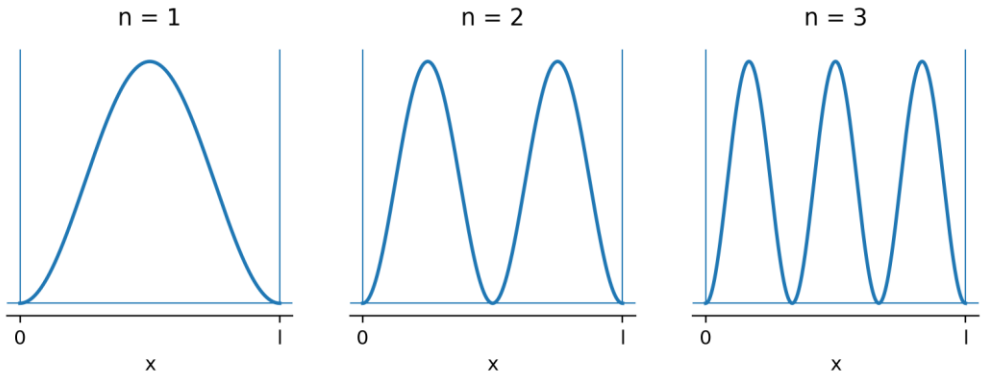
$$\psi^{II} = (2/l)^{1/2} \sin(n\pi x/l), \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.23}$$

Grafik fungsi gelombang dan kerapatan probabilitas diperlihatkan pada Gambar 2.3 dan 2.4.

Bilangan n dalam energi (2.20) dan fungsi gelombang (2.23) disebut bilangan kuantum. Setiap nilai bilangan kuantum n yang berbeda memberikan fungsi gelombang dan keadaan yang berbeda.



Gambar 2.3 Grafik ψ untuk tiga keadaan partikel-dalam-kotak dengan energi terendah.



Gambar 2.4 Grafik $|\psi|^2$ untuk tiga keadaan partikel-dalam-kotak dengan energi terendah.

Fungsi gelombang bernilai nol pada titik-titik tertentu; titik-titik tersebut disebut simpul. Setiap kenaikan satu pada bilangan kuantum n menambah satu simpul pada ψ. Keberadaan simpul dalam ψ dan $|\psi|^2$ mungkin tampak mengejutkan. Sebagai contoh, untuk n = 2, Gambar 2.4 menyatakan bahwa probabilitas menemukan partikel tepat di pusat kotak pada x = l/2 adalah nol. Bagaimana partikel dapat berpindah dari satu sisi kotak ke sisi lainnya tanpa pernah ditemukan di pusat? Paradoks semu ini timbul karena kita mencoba memahami gerak partikel mikroskopik dengan pengalaman sehari-hari mengenai gerak benda makroskopik. Namun, sebagaimana dicatat dalam Bab 1, elektron dan "partikel" mikroskopik lainnya tidak dapat digambarkan secara lengkap dan benar dengan konsep fisika klasik yang berasal dari dunia makroskopik.

Gambar 2.4 memperlihatkan bahwa probabilitas menemukan partikel pada berbagai tempat dalam kotak sangat berbeda dari hasil klasik. Secara klasik, partikel berenergi tetap di dalam kotak memantul elastis bolak-balik antara kedua dinding dengan kecepatan tetap. Karena itu, partikel sama mungkin ditemukan di setiap titik dalam kotak. Secara mekanika kuantum, untuk tingkat energi terendah probabilitas maksimum terdapat di pusat kotak. Ketika berpindah ke tingkat energi yang lebih tinggi dengan lebih banyak simpul, maksimum dan minimum probabilitas semakin berdekatan, dan variasi probabilitas sepanjang kotak pada akhirnya tidak dapat dideteksi. Pada bilangan kuantum yang sangat tinggi, hasil klasik berupa kerapatan probabilitas seragam didekati.

Hasil bahwa dalam batas bilangan kuantum besar mekanika kuantum beralih menjadi mekanika klasik dikenal sebagai prinsip korespondensi Bohr. Karena mekanika Newton berlaku bagi benda makroskopik—yang bergerak dengan kecepatan jauh lebih kecil daripada kecepatan cahaya—mekanika kuantum nonrelativistik diharapkan memberikan jawaban yang sama dengan mekanika klasik bagi benda makroskopik. Karena konstanta Planck sangat kecil, kuantisasi energi tidak teramati pada benda makroskopik. Massa partikel dan kuadrat panjang kotak muncul dalam penyebut Persamaan (2.20); karena itu, benda makroskopik dalam kotak makroskopik yang memiliki energi gerak makroskopik

akan mempunyai nilai n yang sangat besar dan, sesuai prinsip korespondensi, memperlihatkan perilaku klasik.

Kita mempunyai satu himpunan lengkap fungsi gelombang, masing-masing bersesuaian dengan energi berbeda dan dicirikan oleh bilangan kuantum n, yaitu bilangan bulat positif. Misalkan subskrip i menyatakan fungsi gelombang tertentu dengan nilai n_i sebagai bilangan kuantumnya:

$$\psi_i = (2/l)^{1/2} \sin(n_i \pi x/l), \quad 0 < x < l$$
$$\psi_i = 0 \text{ di tempat lain}$$

Karena fungsi gelombang telah dinormalisasi, berlaku

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j \, dx = 1 \quad \text{jika } i = j \tag{2.24}$$

Selanjutnya ditanyakan nilai integral tersebut ketika digunakan fungsi gelombang yang bersesuaian dengan tingkat energi berbeda:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j \, dx = \int_0^l (2/l)^{1/2} \sin(n_i \pi x/l)(2/l)^{1/2} \sin(n_j \pi x/l) dx, \quad n_i \neq n_j$$

Dengan menggunakan Persamaan (A.5) dalam Lampiran diperoleh

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j \, dx \\ &= (2/l)\{\sin[(n_i - n_j)\pi]/[2(n_i - n_j)\pi/l] - \sin[(n_i + n_j)\pi]/[2(n_i + n_j)\pi/l]\} \\ &= 0 \end{aligned} \tag{2.25}$$

karena $\sin(m\pi) = 0$ untuk m bilangan bulat. Dengan demikian,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j \, dx = 0, \qquad i \neq j \tag{2.26}$$

Apabila (2.26) berlaku, fungsi ψ_i dan ψ_j dikatakan saling ortogonal untuk $i \neq j$. Persamaan (2.24) dan (2.26) dapat digabungkan menjadi

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j \, dx = \delta_{ij} \tag{2.27}$$

Simbol δ_{ij} disebut delta Kronecker, sesuai nama seorang matematikawan. Nilainya 1 ketika kedua indeks i dan j sama, dan nilainya 0 ketika i dan j tidak sama:

$$\delta_{ij} \equiv \{ 0 \text{ untuk } i \neq j; \;\; 1 \text{ untuk } i = j \} \tag{2.28}$$

Sifat (2.27) dari fungsi gelombang disebut ortonormalitas. Di sini ortonormalitas baru dibuktikan untuk fungsi gelombang partikel-dalam-kotak. Pembuktian yang lebih umum akan diberikan pada Bagian 7.2.

Pembaca mungkin merasa heran dengan Persamaan (2.26) dan mempertanyakan alasan mengalikan fungsi gelombang suatu keadaan dengan fungsi gelombang keadaan lain. Kelak akan terlihat—misalnya dalam Bagian 7.3—bahwa sering kali berguna memakai persamaan yang mengandung penjumlahan seluruh fungsi gelombang suatu sistem, dan persamaan semacam itu dapat menghasilkan integral seperti dalam (2.26).

Cara yang lebih ketat untuk meninjau partikel dalam kotak berdinding tak hingga ialah terlebih dahulu memperlakukan kotak dengan loncatan energi potensial

berhingga pada dinding, kemudian mengambil batas ketika loncatan V menuju tak hingga. Setelah batas diambil, hasilnya sama dengan (2.20) dan (2.23) (lihat Soal 2.22).

Sejauh ini hanya keadaan stasioner partikel dalam kotak satu dimensi yang dipertimbangkan. Contoh keadaan tak stasioner sistem tersebut diberikan dalam contoh dekat akhir Bagian 7.8.

Beberapa simulasi komputer daring mengenai partikel dalam kotak tersedia pada alamat yang dicantumkan dalam edisi asli: simulasi pengaruh penghalang dengan tinggi dan lebar berubah di tengah kotak; simulasi kuantisasi dengan memplot solusi persamaan Schrödinger ketika energi dan panjang kotak diubah; serta simulasi keadaan tak bergantung waktu dan bergantung waktu. Lihat pula Soal 7.47.

2.3 Partikel Bebas dalam Satu Dimensi

Partikel bebas adalah partikel yang sama sekali tidak dikenai gaya. Untuk partikel bebas, integrasi (1.12) menunjukkan bahwa energi potensial tetap konstan untuk semua nilai x. Karena pemilihan tingkat nol energi bersifat sembarang, dapat ditetapkan V(x) = 0. Persamaan Schrödinger (1.19) menjadi

$$\mathrm{d}^2\psi/\mathrm{d}x^2 + (2m/\hbar^2)E\psi = 0 \tag{2.29}$$

Persamaan (2.29) sama dengan Persamaan (2.10), kecuali syarat batasnya. Oleh karena itu, solusi umum (2.29) adalah (2.13):

$$\psi = c_1 e^{i(2mE)1/2x}/\hbar + c_2 e^{-i(2mE)1/2x}/\hbar \tag{2.30}$$

Syarat batas apa yang dapat diterapkan? Wajar untuk mempostulatkan—karena $\psi^*\psi\,dx$ menyatakan probabilitas—bahwa ψ tetap berhingga ketika x menuju $\pm\infty$. Apabila energi E lebih kecil daripada nol, syarat batas ini dilanggar, sebab untuk $E < 0$ berlaku

$$i(2mE)^{1/2} = i(-2m|E|)^{1/2} = i\cdot i\cdot(2m|E|)^{1/2} = -(2m|E|)^{1/2}$$

dan suku pertama dalam (2.30) menjadi tak hingga ketika x mendekati minus tak hingga. Demikian pula, apabila E negatif, suku kedua dalam (2.30) menjadi tak hingga ketika x mendekati plus tak hingga. Dengan demikian syarat batas menuntut

$$E \geq 0 \tag{2.31}$$

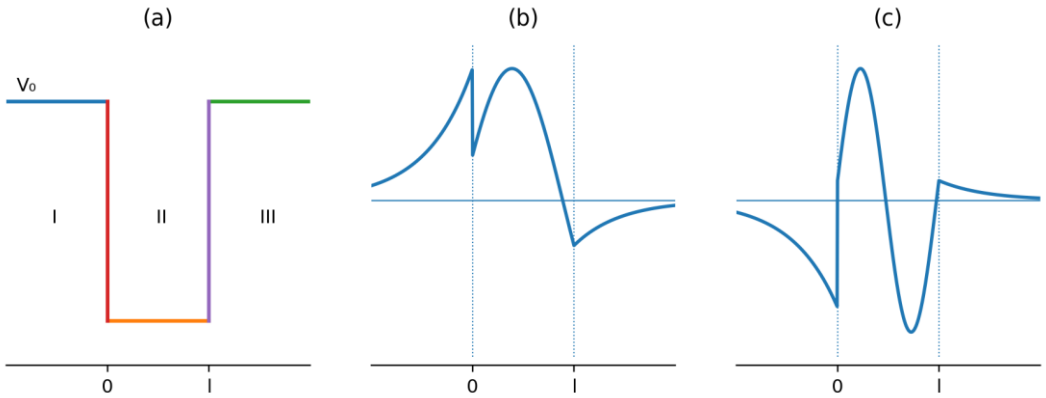
untuk partikel bebas. Fungsi gelombangnya berosilasi dan merupakan kombinasi linear suku sinus dan kosinus [Persamaan (2.15)]. Untuk partikel bebas, energi tidak terkuantisasi; semua energi tak negatif diizinkan. Karena V ditetapkan nol, energi E pada kasus ini seluruhnya merupakan energi kinetik. Apabila konstanta sembarang c_1 dan c_2 hendak ditentukan melalui normalisasi, integral $\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\psi(x)dx$ akan bernilai tak hingga. Dengan kata lain, fungsi gelombang

partikel bebas tidak dapat dinormalisasi dalam pengertian biasa. Hal ini sesuai secara fisis karena tidak ada alasan probabilitas menemukan partikel bebas harus menuju nol ketika x menuju ±∞.

Masalah partikel bebas merupakan keadaan tidak realistis karena dalam kenyataan tidak mungkin terdapat partikel yang sama sekali tidak berinteraksi dengan partikel lain mana pun di alam semesta.

2.4 Partikel dalam Sumur Persegi Panjang

Pertimbangkan partikel dalam kotak satu dimensi dengan dinding berhingga (Gambar 2.5a). Fungsi energi potensialnya adalah $V = V_0$ untuk $x < 0$, $V = 0$ untuk $0 \le x \le l$, dan $V = V_0$ untuk $x > l$. Terdapat dua kasus yang harus diperiksa, bergantung pada apakah energi partikel E lebih kecil atau lebih besar daripada V_0.



Gambar 2.5 (a) Energi potensial partikel dalam sumur persegi panjang satu dimensi. (b) Fungsi gelombang keadaan dasar. (c) Fungsi gelombang keadaan tereksitasi pertama.

Pertama, pertimbangkan $E < V_0$. Persamaan Schrödinger (1.19) dalam daerah I dan III adalah $d^2\psi/dx^2 + (2m/\hbar^2)(E - V_0)\psi = 0$. Persamaan ini linear homogen dengan koefisien tetap, dan persamaan bantu (2.7) adalah $s^2 + (2m/\hbar^2)(E - V_0) = 0$ dengan akar $s = \pm(2m/\hbar^2)^{1/2}(V_0 - E)^{1/2}$. Oleh karena itu,

$$\psi^{I} = C\exp[(2m/\hbar^2)^{1/2}(V_0-E)^{1/2}x] + D\exp[-(2m/\hbar^2)^{1/2}(V_0-E)^{1/2}x]$$
$$\psi^{III} = F\exp[(2m/\hbar^2)^{1/2}(V_0-E)^{1/2}x] + G\exp[-(2m/\hbar^2)^{1/2}(V_0-E)^{1/2}x]$$

dengan C, D, F, dan G sebagai konstanta.

Seperti dalam Bagian 2.3, ψ^I harus dicegah agar tidak menjadi tak hingga ketika $x \to -\infty$. Karena diasumsikan $E < V_0$, besaran $(V_0 - E)^{1/2}$ merupakan bilangan real positif; agar ψ^I tetap berhingga ketika $x \to -\infty$, harus berlaku $D = 0$. Demikian pula, agar ψ^{III} tetap berhingga ketika $x \to +\infty$, harus berlaku $F = 0$. Dengan demikian,

$$\psi^{I} = C\exp[(2m/\hbar^2)^{1/2}(V_0-E)^{1/2}x], \quad \psi^{III} = G\exp[-(2m/\hbar^2)^{1/2}(V_0-E)^{1/2}x]$$

Dalam daerah II, V = 0, persamaan Schrödinger adalah (2.10) dan solusinya adalah (2.15):

$$\psi^{II} = A\cos[(2m/\hbar^2)^{1/2}E^{1/2}x] + B\sin[(2m/\hbar^2)^{1/2}E^{1/2}x] \qquad (2.32)$$

Untuk menyelesaikan masalah ini, syarat batas harus diterapkan. Seperti pada partikel dalam kotak berdinding tak hingga, fungsi gelombang diharuskan kontinu pada x = 0 dan x = l, sehingga $\psi^{I}(0) = \psi^{II}(0)$ dan $\psi^{II}(l) = \psi^{III}(l)$. Fungsi gelombang mempunyai empat konstanta sembarang sehingga diperlukan lebih dari dua syarat batas. Selain mengharuskan ψ kontinu, turunannya dψ/dx juga diharuskan kontinu di semua tempat. Untuk membenarkan syarat ini, perhatikan bahwa apabila dψ/dx berubah secara diskontinu pada suatu titik, turunannya—laju perubahan sesaatnya—$d^2\psi/dx^2$ akan menjadi tak hingga pada titik tersebut. Namun, untuk partikel dalam sumur persegi panjang, persamaan Schrödinger $d^2\psi/dx^2 = (2m/\hbar^2)(V - E)\psi$ tidak mempunyai besaran tak hingga pada ruas kanan, sehingga $d^2\psi/dx^2$ tidak dapat menjadi tak hingga. [Untuk argumen yang lebih ketat, lihat D. Branson, Am. J. Phys., 47, 1000 (1979).] Oleh karena itu, $d\psi^{I}/dx = d\psi^{II}/dx$ pada x = 0 dan $d\psi^{II}/dx = d\psi^{III}/dx$ pada x = l.

Dari $\psi^{I}(0) = \psi^{II}(0)$ diperoleh C = A. Dari $\psi'^{I}(0) = \psi'^{II}(0)$ diperoleh (Soal 2.21a) $B = (V_0 - E)^{1/2}A/E^{1/2}$. Dari $\psi^{II}(l) = \psi^{III}(l)$ diperoleh persamaan yang rumit sehingga G dapat ditentukan dalam bentuk A. Konstanta A ditentukan dengan normalisasi.

Dengan mengambil $\psi'^{II}(l) = \psi'^{III}(l)$, membaginya dengan $\psi^{II}(l) = \psi^{III}(l)$, dan menyatakan B dalam bentuk A, diperoleh persamaan berikut untuk tingkat energi (Soal 2.21b):

$$(2E - V_0)\sin[(2mE)^{1/2}l/\hbar] = 2(V_0E - E^2)^{1/2}\cos[(2mE)^{1/2}l/\hbar] \qquad (2.33)$$

[Walaupun E = 0 memenuhi (2.33), nilai tersebut bukan energi yang diizinkan karena menghasilkan ψ = 0 (Soal 2.30).] Dengan mendefinisikan konstanta tak berdimensi ε dan β sebagai

$$\varepsilon \equiv E/V_0 \quad \text{dan} \quad \beta \equiv (2mV_0)^{1/2}l/\hbar \qquad (2.34)$$

kemudian membagi (2.33) dengan V_0, diperoleh

$$(2\varepsilon - 1)\sin(\beta\varepsilon^{1/2}) - 2(\varepsilon - \varepsilon^2)^{1/2}\cos(\beta\varepsilon^{1/2}) = 0 \qquad (2.35)$$

Hanya nilai E tertentu yang memenuhi (2.33) yang memberikan fungsi gelombang kontinu dengan turunan kontinu; karena itu tingkat energi terkuantisasi untuk $E < V_0$. Untuk menentukan tingkat energi yang diizinkan, ruas kiri (2.35) dapat diplot terhadap ε pada $0 < \varepsilon < 1$ dan titik perpotongan kurva dengan sumbu horizontal dicari (lihat juga Soal 4.31c). Kajian terperinci (Merzbacher, Bagian 6.8) menunjukkan bahwa jumlah tingkat energi yang diizinkan dengan $E < V_0$ adalah N, dengan N memenuhi

$$N - 1 < \beta/\pi \le N, \qquad \text{dengan } \beta \equiv (2mV_0)^{1/2}l/\hbar \qquad (2.36)$$

Sebagai contoh, apabila $V_0 = h^2/(ml^2)$, maka $\beta/\pi = 2(2^{1/2}) = 2{,}83$, dan $N = 3$.

Gambar 2.5 memperlihatkan ψ untuk dua tingkat energi terendah. Fungsi gelombang berosilasi di dalam kotak dan berkurang secara eksponensial menuju nol di luar kotak. Jumlah simpul bertambah satu pada setiap tingkat yang lebih tinggi.

Sejauh ini hanya keadaan dengan $E < V_0$ yang dipertimbangkan. Untuk $E > V_0$, besaran $(V_0 - E)^{1/2}$ bersifat imajiner; alih-alih berkurang menuju nol ketika $x \rightarrow \pm\infty$, ψ^{I} dan ψ^{III} berosilasi, serupa dengan ψ partikel bebas. Tidak ada lagi alasan menetapkan D dalam ψ^{I} dan F dalam ψ^{III} sama dengan nol. Dengan adanya konstanta tambahan tersebut untuk memenuhi syarat batas pada ψ dan ψ', E tidak perlu dibatasi agar menghasilkan fungsi gelombang yang berperilaku baik. Oleh karena itu, semua energi di atas V_0 diizinkan.

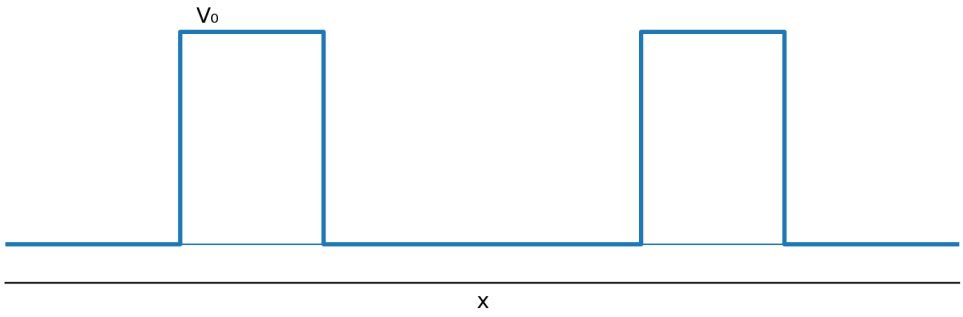
Keadaan dengan $\psi \rightarrow 0$ ketika $x \rightarrow +\infty$ dan $x \rightarrow -\infty$ disebut keadaan terikat. Dalam keadaan terikat, probabilitas yang berarti untuk menemukan partikel hanya terdapat pada daerah ruang yang berhingga. Dalam keadaan tak terikat, ψ tidak menuju nol ketika $x \rightarrow \pm\infty$ dan tidak dapat dinormalisasi. Untuk partikel dalam sumur persegi panjang, keadaan dengan $E < V_0$ bersifat terikat dan keadaan dengan $E > V_0$ bersifat tak terikat. Untuk partikel dalam kotak dengan dinding tak hingga, semua keadaan terikat. Untuk partikel bebas, semua keadaan tak terikat.

Simulasi daring partikel dalam sumur tersedia pada alamat Falstad yang dicantumkan dalam edisi asli dengan memilih “Finite Well” pada kotak pengaturan. Lebar dan kedalaman sumur dapat diubah untuk melihat pengaruhnya terhadap tingkat energi dan fungsi gelombang.

2.5 Penerowongan

Untuk partikel dalam sumur persegi panjang (Bagian 2.4), Gambar 2.5 dan persamaan ψ^{I} serta ψ^{III} menunjukkan bahwa bagi keadaan terikat terdapat probabilitas bukan nol untuk menemukan partikel di daerah I dan III, tempat energi totalnya E lebih kecil daripada energi potensial $V = V_0$. Secara klasik, perilaku ini tidak diizinkan. Persamaan klasik $E = T + V$ dan $T \geq 0$, dengan T sebagai energi kinetik, menyatakan bahwa dalam mekanika klasik E tidak dapat lebih kecil daripada V.

Pertimbangkan partikel dalam kotak satu dimensi dengan dinding yang mempunyai tinggi dan ketebalan berhingga (Gambar 2.6). Secara klasik, partikel tidak dapat keluar dari kotak kecuali energinya lebih besar daripada penghalang energi potensial V_0. Namun, perlakuan mekanika kuantum—yang tidak diturunkan di sini—menunjukkan adanya probabilitas berhingga bahwa partikel dengan energi total lebih kecil daripada V_0 ditemukan di luar kotak.



Gambar 2.6 Energi potensial partikel dalam kotak satu dimensi dengan dinding yang mempunyai tinggi dan ketebalan berhingga.

Istilah penerowongan menyatakan penetrasi partikel ke daerah yang secara klasik terlarang—seperti pada Gambar 2.5—atau lewatnya partikel melalui penghalang energi potensial yang tingginya melebihi energi partikel. Karena penerowongan merupakan efek kuantum, probabilitas terjadinya semakin besar ketika perilaku partikel semakin jauh dari perilaku klasik. Oleh karena itu, penerowongan paling menonjol untuk partikel bermassa kecil. (Perhatikan bahwa semakin besar massa m, semakin cepat fungsi ψ^{I} dan ψ^{III} pada Bagian 2.4 berkurang menuju nol.) Elektron dapat menerowong dengan cukup mudah. Atom dan ion hidrogen menerowong lebih mudah daripada atom yang lebih berat.

Emisi partikel alfa dari inti radioaktif melibatkan penerowongan partikel alfa melalui penghalang energi potensial yang dihasilkan oleh gaya inti tarik berjangkauan pendek dan gaya tolak Coulomb antara inti anak dan partikel alfa. Molekul NH_3 berbentuk piramida. Terdapat penghalang energi potensial terhadap inversi molekul, dengan maksimum energi potensial pada konfigurasi planar. Atom-atom hidrogen dapat menerowong melalui penghalang ini sehingga membalik molekul. Dalam CH_3CH_3 terdapat penghalang terhadap rotasi internal, dengan maksimum energi potensial pada posisi hidrogen yang saling menutupi. Atom hidrogen dapat menerowong melalui penghalang tersebut dari satu posisi berselang-seling ke posisi berselang-seling berikutnya. Penerowongan elektron penting dalam reaksi oksidasi-reduksi dan proses elektrode. Penerowongan biasanya memberikan sumbangan berarti terhadap laju reaksi kimia yang melibatkan perpindahan atom hidrogen. Lihat R. P. Bell, The Tunnel Effect in Chemistry, Chapman & Hall, 1980.

Penerowongan atom H terjadi pada beberapa reaksi yang dikatalisis enzim; lihat Quantum Tunnelling in Enzyme-Catalyzed Reactions, disunting oleh R. Allemann dan N. Scrutton, RSC Publishing, 2009.

Mikroskop penerowongan payar, yang ditemukan pada 1981, memanfaatkan penerowongan elektron melalui ruang antara ujung kawat logam yang sangat halus dan permukaan padatan penghantar listrik untuk menghasilkan citra atom-atom individual pada permukaan padatan. Tegangan kecil diterapkan antara

padatan dan kawat. Ketika ujung kawat digerakkan melintasi permukaan pada ketinggian beberapa angstrom, ketinggian ujung diatur agar arus tetap konstan. Plot ketinggian ujung terhadap posisi memberikan citra permukaan.

RANGKUMAN

Solusi umum persamaan diferensial linear homogen orde kedua dengan koefisien tetap $y''(x) + py'(x) + qy(x) = 0$ adalah $y = c_1e^{s1x} + c_2e^{s2x}$, dengan s_1 dan s_2 sebagai solusi persamaan bantu $s^2 + ps + q = 0$.

Untuk partikel dalam kotak satu dimensi—energi potensial $V = 0$ untuk $0 \leq x \leq l$ dan $V = \infty$ di tempat lain—fungsi gelombang dan energi keadaan stasionernya adalah $\psi = (2/l)^{1/2} \sin(n\pi x/l)$ untuk $0 \leq x \leq l$, $\psi = 0$ di tempat lain, dan $E = n^2h^2/(8ml^2)$, dengan $n = 1, 2, 3, ...$ Jumlah simpul—tempat $\psi = 0$—bertambah satu pada setiap kenaikan satu bilangan kuantum n. Fungsi gelombang bersifat ortonormal [Persamaan (2.27)].

Untuk partikel bebas—$V = 0$ di semua tempat—semua energi tak negatif diizinkan dan fungsi gelombangnya tidak dapat dinormalisasi dalam pengertian biasa.

Partikel dalam sumur persegi panjang satu dimensi berdinding berhingga mempunyai jumlah keadaan terikat yang berhingga [Persamaan (2.36)]. Fungsi gelombang keadaan terikat berosilasi di dalam sumur dan berkurang eksponensial menuju nol di luar sumur. Energi keadaan tak terikat tidak terkuantisasi.

Penerowongan adalah penetrasi partikel ke daerah yang secara klasik terlarang atau lewatnya partikel melalui penghalang energi potensial yang tingginya lebih besar daripada energi partikel.

CATATAN INTEGRASI SAINS DAN ISLAM

Keteraturan, Pengamatan, dan Kerendahan Hati Ilmiah

الَّذِي خَلَقَ سَبْعَ سَمَاوَاتٍ طِبَاقًا ۖ مَا تَرَىٰ فِي خَلْقِ الرَّحْمَٰنِ مِنْ تَفَاوُتٍ ۖ فَارْجِعِ الْبَصَرَ هَلْ تَرَىٰ مِنْ فُطُورٍ ﴿٣﴾ ثُمَّ ارْجِعِ الْبَصَرَ كَرَّتَيْنِ يَنْقَلِبْ إِلَيْكَ الْبَصَرُ خَاسِئًا وَهُوَ حَسِيرٌ

"(Allah) yang menciptakan tujuh langit berlapis-lapis. Tidak akan kamu lihat sesuatu yang tidak seimbang pada ciptaan Tuhan Yang Maha Pengasih. Maka lihatlah sekali lagi, adakah kamu lihat sesuatu yang cacat? Kemudian ulangi pandanganmu sekali lagi dan sekali lagi, niscaya pandanganmu akan kembali kepadamu tanpa menemukan cacat dan dalam keadaan letih." (QS Al-Mulk [67]: 3–4).

Ayat ini tidak digunakan untuk menggantikan penurunan matematis mekanika kuantum. Relevansinya terletak pada dorongan untuk mengamati berulang kali,

memeriksa keteraturan, dan mengakui keterbatasan pengamatan manusia. Model partikel dalam kotak memperlihatkan bahwa hasil ilmiah bergantung pada asumsi, syarat batas, dan domain berlakunya model; karena itu, ketelitian matematis perlu disertai kerendahan hati epistemik.

مَنْ سَلَكَ طَرِيقًا يَلْتَمِسُ فِيهِ عِلْمًا سَهَّلَ اللَّهُ لَهُ بِهِ طَرِيقًا إِلَى الْجَنَّةِ

"Siapa yang menempuh suatu jalan untuk mencari ilmu, Allah akan memudahkan baginya jalan menuju surga." (HR Muslim, no. 2699).

Hadis ini memberikan orientasi etik bahwa ketekunan mempelajari persamaan, menafsirkan model, dan menguji hasil hendaknya diarahkan pada ilmu yang benar, bermanfaat, jujur, dan bertanggung jawab.

SOAL BAB 2

2.1 (a) Selesaikan $y''(x) + y'(x) - 6y(x) = 0$. (b) Tentukan konstanta sembarang dalam solusi apabila syarat batasnya $y = 0$ pada $x = 0$ dan $y' = 1$ pada $x = 0$.

2.2 Apabila $y = c_1e^{(2+i)x} + c_2e^{(2-i)x}$, dengan c_1 dan c_2 sebagai konstanta, tentukan persamaan diferensial linear homogen orde kedua dengan koefisien tetap yang dipenuhi oleh y.

2.3 Untuk kasus akar kembar persamaan bantu, $s_1 = s_2 = s$, baru ditemukan satu solusi bebas persamaan diferensial linear homogen orde kedua, yaitu e^{sx}. Verifikasikan bahwa xe^{sx} merupakan solusi kedua pada kasus ini. (b) Selesaikan $y''(x) - 2y'(x) + y(x) = 0$.

2.4 Untuk setiap pilihan F berikut dalam hukum kedua Newton (1.8), klasifikasikan (1.8) sebagai persamaan diferensial linear atau nonlinear; a, b, c, dan k adalah konstanta. (a) $F = c$; (b) $F = -kx$; (c) $F = -ax^3$; (d) $F = b \sin ax$; (e) $F = a - kx$. [Sistem mekanika klasik yang menunjukkan perilaku kacau (Bagian 1.4) mematuhi persamaan diferensial nonlinear, tetapi tidak semua persamaan diferensial nonlinear menimbulkan perilaku kacau.]

2.5 Benar atau salah? (a) Energi keadaan dasar partikel dalam kotak (PIB) adalah nol. (b) Tingkat energi PIB berjarak sama. (c) Peningkatan energi keadaan stasioner PIB bersesuaian dengan peningkatan jumlah simpul fungsi gelombang. (d) Setiap solusi persamaan Schrödinger tak bergantung waktu PIB merupakan fungsi gelombang keadaan stasioner yang diizinkan. (e) Transisi PIB yang menyerap foton dengan panjang gelombang terpanjang adalah dari tingkat $n = 1$ ke $n = 2$.

2.6 Untuk partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l, pertimbangkan interval infinitesimal sepanjang dl yang berada di dalam kotak. Untuk setiap keadaan stasioner berikut, nyatakan lokasi interval yang memberikan probabilitas maksimum dan minimum untuk menemukan partikel: (a) $n = 1$; (b) $n = 2$; (c) $n = 3$.

2.7 Pertimbangkan partikel dengan bilangan kuantum n yang bergerak dalam kotak satu dimensi sepanjang l. (a) Tentukan probabilitas menemukan partikel

pada seperempat kiri kotak. (b) Untuk nilai n berapakah probabilitas ini maksimum? (c) Berapakah batas probabilitas tersebut ketika $n \rightarrow \infty$? (d) Prinsip apa yang diilustrasikan oleh bagian (c)?

2.8 Pertimbangkan elektron dalam kotak satu dimensi sepanjang 2,000 Å dengan ujung kiri kotak pada x = 0. (a) Misalkan terdapat satu juta sistem semacam ini, semuanya dalam keadaan n = 1, dan koordinat x elektron diukur dalam setiap sistem. Sekitar berapa kali elektron akan ditemukan antara 0,600 Å dan 0,601 Å? Anggap interval tersebut infinitesimal. Petunjuk: periksa apakah kalkulator diatur dalam derajat atau radian. (b) Misalkan terdapat sejumlah besar sistem, semuanya dalam keadaan n = 1, dan hasil pengukuran menemukan elektron antara 0,700 Å dan 0,701 Å sebanyak 126 kali. Dalam sekitar berapa pengukuran elektron ditemukan antara 1,000 Å dan 1,001 Å?

2.9 Gambarkan sketsa kasar ψ dan ψ^2 untuk keadaan partikel-dalam-kotak n = 4 dan n = 5. (b) Gunakan kalkulus untuk menentukan kemiringan kurva ψ^2 untuk n = 4 pada x = ½l dan periksa bahwa kurva telah digambar dengan kemiringan yang benar.

2.10 Gambaran yang sangat kasar mengenai elektron valensi dalam atom atau molekul memperlakukannya sebagai partikel dalam kotak satu dimensi yang panjangnya seorde ukuran atom dan molekul. (a) Untuk elektron dalam kotak satu dimensi sepanjang 1,0 Å, hitung jarak antara dua tingkat energi terendah. (b) Hitung panjang gelombang foton yang bersesuaian dengan transisi antara kedua tingkat tersebut. (c) Pada bagian mana dari spektrum elektromagnetik panjang gelombang tersebut berada?

2.11 Untuk benda makroskopik bermassa 1,0 g yang bergerak dengan kecepatan 1,0 cm/s dalam kotak satu dimensi sepanjang 1,0 cm, tentukan bilangan kuantum n.

2.12 Ketika partikel bermassa $9{,}1 \times 10^{-28}$ g dalam kotak satu dimensi tertentu berpindah dari tingkat n = 5 ke tingkat n = 2, partikel memancarkan foton dengan frekuensi $6{,}0 \times 10^{14}\ s^{-1}$. Tentukan panjang kotak.

2.13 Ketika elektron pada suatu tingkat energi tereksitasi dalam kotak satu dimensi sepanjang 2,00 Å bertransisi ke keadaan dasar, dipancarkan foton dengan panjang gelombang 8,79 nm. Tentukan bilangan kuantum keadaan awal.

2.14 Frekuensi serapan n = 1 ke n = 2 bagi partikel tertentu dalam kotak satu dimensi tertentu adalah $6{,}0 \times 10^{12}\ s^{-1}$. Tentukan frekuensi serapan n = 2 ke n = 3 untuk sistem tersebut.

2.15 Elektron dalam keadaan stasioner kotak satu dimensi sepanjang 0,300 nm memancarkan foton dengan frekuensi $5{,}05 \times 10^{15}\ s^{-1}$. Tentukan bilangan kuantum awal dan akhir transisi ini.

2.16 Pada Bagian 9.9 akan diperlihatkan bahwa ketika partikel bermuatan dalam kotak satu dimensi menyerap atau memancarkan foton, bilangan kuantum n harus berubah sebesar bilangan bulat ganjil: $\Delta n = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \ldots$.

Transisi dengan perubahan n berupa bilangan bulat genap tidak diizinkan untuk PIB. Tunjukkan bahwa frekuensi transisi yang diizinkan berbentuk $\nu = k[h/(8ml^2)]$, dengan k mempunyai nilai bilangan bulat tertentu. Tentukan nilai k terkecil yang memungkinkan dua nilai Δn berbeda memberikan frekuensi emisi yang sama. Petunjuk: pertama periksa pola frekuensi transisi untuk perubahan n sebesar 1 dengan nilai n tingkat bawah 1, 2, 3, ...; kemudian pertimbangkan perubahan n sebesar 3 dengan tingkat bawah 1, 2, 3, ...

2.17 Perlakuan kasar elektron π dalam molekul terkonjugasi menganggap elektron tersebut bergerak dalam potensial partikel-dalam-kotak pada Gambar 2.1, dengan panjang kotak sedikit lebih besar daripada panjang rantai terkonjugasi. Prinsip eksklusi Pauli (Bab 10) mengizinkan paling banyak dua elektron menempati setiap tingkat kotak; kedua elektron tersebut mempunyai spin berlawanan. Untuk 1,3-butadiena, $CH_2{=}CHCH{=}CH_2$, ambil panjang kotak 7,0 Å dan gunakan model ini untuk memperkirakan panjang gelombang cahaya yang diserap ketika elektron π tereksitasi dari tingkat terisi tertinggi ke tingkat kosong terendah pada keadaan dasar elektronik molekul. Nilai eksperimen adalah 217 nm.

2.18 Untuk partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l, titik asal koordinat dapat ditempatkan di pusat kotak. Tentukan fungsi gelombang dan tingkat energi untuk pilihan titik asal ini.

2.19 Persamaan Schrödinger tak bergantung waktu partikel-dalam-kotak mengandung konstanta h dan m, sedangkan syarat batas melibatkan panjang kotak l. Karena itu energi keadaan stasioner diharapkan menjadi fungsi h, m, dan l, yakni $E = f(h,m,l)$. [Diperoleh $E = (n^2/8)(h^2/ml^2)$.] Buktikan bahwa satu-satunya nilai a, b, dan c yang membuat hasil kali $h^a m^b l^c$ berdimensi energi adalah $a = 2$, $b = -1$, dan $c = -2$.

2.20 Tuliskan fungsi gelombang bergantung waktu untuk partikel bebas dengan energi E.

2.21 Untuk partikel dalam sumur persegi panjang (Bagian 2.4), verifikasikan bahwa $B = (V_0 - E)^{1/2}A/E^{1/2}$. (b) Verifikasikan Persamaan (2.33).

2.22 Untuk partikel dalam sumur persegi panjang (Bagian 2.4), tunjukkan bahwa dalam batas $V_0 \to \infty$: (a) Persamaan (2.33) memberikan $E = n^2h^2/(8ml^2)$, seperti dalam Persamaan (2.20); (b) fungsi gelombangnya menuju Persamaan (2.9) dan (2.21).

2.23 Untuk elektron dalam sumur persegi panjang satu dimensi sedalam 15,0 eV dan selebar 2,00 Å, hitung jumlah keadaan terikat. Gunakan (6.107).

2.24 Tentukan tingkat energi keadaan terikat yang diizinkan untuk sistem Soal 2.23 dengan menggunakan kalkulator terprogram atau komputer untuk menghitung ruas kiri (2.35) ketika ε berubah dari 0 sampai 1 dalam langkah kecil.

2.25 Gambarkan ψ untuk tingkat terikat berikutnya setelah dua tingkat terendah pada Gambar 2.5.

2.26 Untuk partikel dalam sumur persegi panjang satu dimensi: (a) apakah harus terdapat sedikitnya satu keadaan terikat? (b) apakah ψ'' kontinu pada $x = 0$?

2.27 Untuk elektron dalam sumur persegi panjang tertentu dengan kedalaman 20,0 eV, tingkat energi terendah berada 3,00 eV di atas dasar sumur. Tentukan lebar sumur tersebut. Petunjuk: gunakan $\tan u = \sin u/\cos u$.

2.28 Untuk elektron dalam sumur persegi panjang tertentu dengan kedalaman 2,00 aJ, terdapat tiga tingkat energi terikat. Tentukan lebar minimum dan maksimum yang mungkin bagi sumur tersebut. Satu attojoule (aJ) sama dengan 10^{-18} J.

2.29 Untuk partikel dalam sumur persegi panjang dengan kedalaman V_0 dan lebar l, nyatakan apakah jumlah tingkat energi keadaan terikat meningkat, menurun, atau tetap: (a) ketika V_0 meningkat pada l tetap; (b) ketika l meningkat pada V_0 tetap.

2.30 Untuk kasus $E = 0$ dari partikel dalam sumur persegi panjang sedalam V_0, solusi persamaan Schrödinger di dalam sumur adalah $\psi^{II} = ax + b$ [lihat pembahasan setelah Persamaan (2.19)]. (a) Gunakan syarat batas untuk memperoleh empat persamaan yang menghubungkan konstanta a dan b dengan C dan G dalam persamaan sebelum (2.32). (b) Tunjukkan bahwa apabila $C > 0$—atau $C < 0$—persamaan pada (a) menghasilkan kontradiksi bahwa G sekaligus lebih kecil dan lebih besar daripada nol. Dengan demikian $C = 0$. (c) Tunjukkan bahwa $C = 0$ memberikan $\psi = 0$ di semua tempat. Jadi $E = 0$ tidak diizinkan.

2.31 Energi sebagian besar bintang berasal dari fusi inti hidrogen menjadi inti helium. Suhu bagian dalam Matahari—sebuah bintang tipikal—adalah 15×10^6 K. Pada suhu ini, praktis tidak ada inti yang mempunyai energi kinetik cukup untuk mengatasi tolakan elektrostatik antarinti dan mendekati satu sama lain sampai cukup dekat untuk mengalami fusi. Karena itu, ketika Eddington mengusulkan pada 1920 bahwa fusi inti merupakan sumber energi bintang, gagasannya ditolak. Jelaskan mengapa fusi tetap terjadi dalam bintang meskipun terdapat kesulitan semu tersebut.

2.32 Benar atau salah? (a) Keadaan dasar partikel-dalam-kotak mempunyai bilangan kuantum $n = 0$. (b) Fungsi gelombang keadaan stasioner PIB diskontinu pada titik-titik tertentu. (c) Turunan pertama setiap fungsi gelombang keadaan stasioner PIB diskontinu pada titik-titik tertentu. (d) Kerapatan probabilitas maksimum setiap keadaan stasioner PIB terdapat di pusat kotak. (e) Untuk keadaan stasioner PIB $n = 2$, probabilitas menemukan partikel pada seperempat kiri kotak sama dengan probabilitas menemukannya pada seperempat kanan kotak. (Jawab bagian ini dan bagian berikutnya tanpa mengevaluasi integral.) (f) Untuk keadaan stasioner PIB $n = 1$, probabilitas menemukan partikel pada sepertiga kiri kotak sama dengan probabilitas menemukannya pada sepertiga tengah. (g) Panjang gelombang transisi serapan

PIB dari bilangan kuantum n ke n + 1 berkurang ketika n bertambah. (h) Kerapatan probabilitas keadaan stasioner PIB konstan sepanjang kotak. (i) PIB mekanika kuantum mempunyai energi keadaan dasar yang lebih besar daripada energi terendah yang mungkin bagi partikel dalam kotak menurut mekanika klasik.

BAB 3
OPERATOR

3.1 Operator

Sekarang kita mengembangkan teori mekanika kuantum dengan cara yang lebih umum daripada sebelumnya. Kita mulai dengan menuliskan persamaan Schrödinger satu-partikel, satu-dimensi, dan tak-bergantung-waktu, Persamaan (1.19), dalam bentuk

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x) \tag{3.1}$$

Entitas di dalam tanda kurung siku pada (3.1) adalah sebuah operator. Persamaan (3.1) menunjukkan bahwa kita memiliki suatu operator energi yang, ketika bekerja pada fungsi gelombang, menghasilkan kembali fungsi gelombang itu, tetapi dikalikan dengan suatu nilai energi yang diizinkan. Oleh karena itu, kita membahas operator.

Operator adalah suatu aturan yang mentransformasikan sebuah fungsi tertentu menjadi fungsi lain. Sebagai contoh, misalkan $\hat{D}$ adalah operator yang mendiferensialkan suatu fungsi terhadap x. Kita menggunakan tanda tudung untuk menyatakan operator. Asalkan $f(x)$ dapat didiferensialkan, hasil pengoperasian $\hat{D}$ pada $f(x)$ adalah $\hat{D}f(x) = f'(x)$. Sebagai contoh, $\hat{D}(x^2 + 3e^{2x}) = 2x + 6e^{2x}$. Jika $\hat{3}$ adalah operator yang mengalikan suatu fungsi dengan 3, maka $\hat{3}(x^2 + 3e^x) = 3x^2 + 9e^x$. Jika $\hat{tan}$ adalah operator yang mengambil tangen dari sebuah fungsi, maka penerapan $\hat{tan}$ pada fungsi $x^2 + 1$ menghasilkan $tan(x^2 + 1)$. Jika operator $\hat{A}$ mentransformasikan fungsi $f(x)$ menjadi fungsi $g(x)$, kita menuliskan $\hat{A}f(x) = g(x)$.

Kita mendefinisikan jumlah dan selisih dua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ dengan

$$\begin{aligned}(\hat{A} + \hat{B})f(x) &\equiv \hat{A}f(x) + \hat{B}f(x) \\ (\hat{A} - \hat{B})f(x) &\equiv \hat{A}f(x) - \hat{B}f(x)\end{aligned} \tag{3.2}$$

Sebagai contoh, jika $\hat{D} \equiv d/dx$, maka

$$(\hat{D} + \hat{3})(x^3 - 5) \equiv \hat{D}(x^3 - 5) + \hat{3}(x^3 - 5) = 3x^2 + 3x^3 - 15 = 3x^3 + 3x^2 - 15.$$

Sebuah operator dapat melibatkan lebih dari satu variabel. Sebagai contoh, operator $\partial^2/\partial\, x^2 + \partial^2/\partial\, y^2$ mempunyai pengaruh berikut:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)g(x,y) = \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial y^2}.$$

Hasil kali dua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ didefinisikan oleh

$$\hat{A}\hat{B}f(x) \equiv \hat{A}\big[\hat{B}f(x)\big]. \tag{3.3}$$

Dengan kata lain, mula-mula kita mengoperasikan $f(x)$ dengan operator yang berada di sebelah kanan dalam hasil kali operator, kemudian fungsi yang dihasilkan dioperasikan dengan operator yang berada di sebelah kiri dalam hasil kali operator. Sebagai contoh, $\hat{3}\hat{D}f(x) = \hat{3}\big[\hat{D}f(x)\big] = \hat{3}f'(x) = 3f'(x)$.

Operator $\hat{A}\hat{B}$ dan $\hat{B}\hat{A}$ mungkin tidak mempunyai pengaruh yang sama. Sebagai contoh, perhatikan operator d/dx dan $\hat{x}$ (dengan $\hat{x}$ berarti perkalian dengan x):

$$\hat{D}\hat{x}f(x) = \frac{d}{dx}[xf(x)] = f(x) + xf'(x) = (\hat{1} + \hat{x}\hat{D})f(x) \tag{3.4}$$

$$\hat{x}\hat{D}f(x) = \hat{x}\left[\frac{d}{dx}f(x)\right] = xf'(x)$$

Jadi, dalam kasus ini $\hat{A}\hat{B}$ dan $\hat{B}\hat{A}$ merupakan operator yang berbeda.

Kita dapat mengembangkan aljabar operator sebagai berikut. Dua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ dikatakan sama jika $\hat{A}f = \hat{B}f$ untuk semua fungsi f. Operator-operator yang sama menghasilkan akibat yang sama ketika bekerja pada suatu fungsi tertentu. Sebagai contoh, (3.4) menunjukkan bahwa

$$\hat{D}\hat{x} = 1 + \hat{x}\hat{D}. \tag{3.5}$$

Operator $\hat{1}$ (perkalian dengan 1) adalah operator satuan. Operator $\hat{0}$ (perkalian dengan 0) adalah operator nol. Biasanya kita menghilangkan tanda tudung di atas operator yang hanya berupa perkalian dengan sebuah konstanta. Operator dapat dipindahkan dari satu ruas persamaan operator ke ruas yang lain (Soal 3.7). Dengan demikian, (3.5) ekuivalen dengan $\hat{D}\hat{x} - \hat{x}\hat{D} - 1 = 0$, dengan tanda tudung di atas operator nol dan operator satuan dihilangkan.

Operator memenuhi hukum asosiatif perkalian:

$$\hat{A}(\hat{B}\hat{C}) = (\hat{A}\hat{B})\hat{C}. \tag{3.6}$$

Pembuktian (3.6) diuraikan garis besarnya dalam Soal 3.10. Sebagai contoh, ambil $\hat{A} = d/dx$, $\hat{B} = \hat{x}$, dan $\hat{C} = 3$. Dengan menggunakan (3.5), kita memperoleh

$$(\hat{A}\hat{B}) = \hat{D}\hat{x} = 1 + \hat{x}\hat{D}$$

$$[(\hat{A}\hat{B})\hat{C}]f = (1 + \hat{x}\hat{D})3f = 3f + 3xf'$$

$$(\hat{B}\hat{C}) = 3\hat{x}$$

$$[\hat{A}(\hat{B}\hat{C})]f = \hat{D}(3xf) = 3f + 3xf'$$

Perbedaan utama antara aljabar operator dan aljabar biasa adalah bahwa bilangan memenuhi hukum komutatif perkalian, sedangkan operator tidak selalu memenuhinya; $ab = ba$ jika a dan b adalah bilangan, tetapi $\hat{A}\hat{B}$ dan $\hat{B}\hat{A}$ tidak selalu merupakan operator yang sama. Kita mendefinisikan komutator $[\hat{A}, \hat{B}]$ dari operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ sebagai operator $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$:

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \tag{3.7}$$

Jika $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$, maka $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, dan kita mengatakan bahwa $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ berkomutasi. Jika $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$, maka $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ tidak berkomutasi. Perhatikan bahwa $[\hat{A}, \hat{B}]f = \hat{A}\hat{B}f - \hat{B}\hat{A}f$. Karena urutan penerapan operator 3 dan d/dx tidak menimbulkan perbedaan, kita mempunyai

$$\left[\hat{3}, \frac{d}{dx}\right] = \hat{3}\frac{d}{dx} - \frac{d}{dx}\hat{3} = 0.$$

Dari Persamaan (3.5), kita mempunyai

$$\left[\frac{d}{dx}, \hat{x}\right] = \hat{D}\hat{x} - \hat{x}\hat{D} = 1. \tag{3.8}$$

Operator d/dx dan $\hat{x}$ tidak berkomutasi.

Contoh

Tentukan $[z^3, d/dz]$.

Untuk menentukan $[z^3, d/dz]$, kita menerapkan operator ini pada suatu fungsi sembarang $g(z)$. Dengan menggunakan definisi komutator (3.7) serta definisi selisih dan hasil kali dua operator, kita memperoleh

$$\left[z^3, \frac{d}{dz}\right] g = \left[z^3 \frac{d}{dz} - \frac{d}{dz} z^3\right] g = z^3 \frac{d}{dz} g - \frac{d}{dz}(z^3 g)$$

$$z^3 g' - 3z^2 g - z^3 g' = -3z^2 g$$

Dengan menghapus fungsi sembarang g, kita memperoleh persamaan operator $[z^3, d/dz] = -3z^2$.

Latihan. Tentukan $[d/dx, 5x^2 + 3x + 4]$. *(Jawaban:* $10x + 3$*.)*

Kuadrat suatu operator didefinisikan sebagai hasil kali operator tersebut dengan dirinya sendiri: $\hat{B}^2 = \hat{B}\hat{B}$. Mari kita tentukan kuadrat operator diferensiasi:

$$\hat{D}^2 f(x) = \hat{D}\left(\hat{D} f\right) = \hat{D} f' = f'', \hat{D}^2 = \frac{d^2}{dx^2}.$$

Sebagai contoh lain, kuadrat operator yang mengambil konjugat kompleks suatu fungsi sama dengan operator satuan, karena pengambilan konjugat kompleks dua kali menghasilkan fungsi semula. Operator $\hat{B}^n$ ($n = 1,2,3, \ldots$) didefinisikan sebagai penerapan operator $\hat{B}$ sebanyak n kali berturut-turut.

Ternyata operator-operator yang muncul dalam mekanika kuantum bersifat linear. $\hat{A}$ adalah operator linear jika dan hanya jika mempunyai dua sifat berikut:

$$\hat{A}[f(x) + g(x)] = \hat{A} f(x) + \hat{A} g(x). \tag{3.9}$$

$$\hat{A}[c f(x)] = c\hat{A} f(x), \tag{3.10}$$

dengan f dan g merupakan fungsi sembarang dan c merupakan konstanta sembarang (tidak harus real). Contoh operator linear mencakup $\hat{x}^2$, d/dx, dan d^2/dx^2. Beberapa operator nonlinear adalah cos dan $(\cdot)^2$, dengan $(\cdot)^2$ menguadratkan fungsi yang dikenainya.

Contoh

Apakah d/dx merupakan operator linear? Apakah $(\cdot)^2$ merupakan operator linear?

Kita mempunyai

$$\frac{d}{dx}[f(x) + g(x)] = \frac{df}{dx} + \frac{dg}{dx} = \left(\frac{d}{dx}\right) f(x) + \left(\frac{d}{dx}\right) g(x),$$

$$\frac{d}{dx}[cf(x)] = c\frac{df(x)}{dx},$$

sehingga d/dx memenuhi (3.9) dan (3.10) serta merupakan operator linear. Akan tetapi,

$$[f(x) + g(x)]^2 = f^2(x) + 2f(x)g(x) + g^2(x) \neq f^2(x) + g^2(x),$$

sehingga $(\cdot)^2$ tidak memenuhi (3.9) dan bersifat nonlinear.

Latihan. Apakah operator $x^2 \times$ (perkalian dengan x^2) bersifat linear? *(Jawaban: Ya.)*

Identitas yang berguna dalam manipulasi operator linear adalah

$$(\hat{A} + \hat{B})\hat{C} = \hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{C}. \tag{3.11}$$

$$\hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) = \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}. \tag{3.12}$$

Contoh

Buktikan hukum distributif (3.11) untuk operator linear.

Cara yang baik untuk memulai sebuah pembuktian adalah terlebih dahulu menuliskan apa yang diketahui dan apa yang harus dibuktikan. Diketahui bahwa $\hat{A}$, $\hat{B}$, dan $\hat{C}$ merupakan operator linear. Kita harus membuktikan bahwa $(\hat{A} + \hat{B})\hat{C} = \hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{C}$.

Untuk membuktikan bahwa operator $(\hat{A} + \hat{B})\hat{C}$ sama dengan operator $\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{C}$, kita harus membuktikan bahwa kedua operator tersebut memberikan hasil yang sama ketika diterapkan pada suatu fungsi sembarang f. Jadi, kita harus membuktikan bahwa

$$[(\hat{A} + \hat{B})\hat{C}]f = (\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{C})f.$$

Kita mulai dari $[(\hat{A} + \hat{B})\hat{C}]f$. Ungkapan ini melibatkan hasil kali dua operator $\hat{A} + \hat{B}$ dan $\hat{C}$. Definisi hasil kali operator (3.3), dengan $\hat{A}$ diganti oleh $\hat{A} + \hat{B}$ dan $\hat{B}$ diganti oleh $\hat{C}$, memberikan $[(\hat{A} + \hat{B})\hat{C}]f = (\hat{A} + \hat{B})(\hat{C}f)$. Entitas $\hat{C}f$ merupakan sebuah fungsi, dan penggunaan definisi (3.2) mengenai jumlah $\hat{A} + \hat{B}$ dari dua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ memberikan $(\hat{A} + \hat{B})(\hat{C}f) = \hat{A}(\hat{C}f) + \hat{B}(\hat{C}f)$. Dengan demikian,

$$[(\hat{A} + \hat{B})\hat{C}]f = (\hat{A} + \hat{B})(\hat{C}f) = \hat{A}(\hat{C}f) + \hat{B}(\hat{C}f).$$

Penggunaan definisi hasil kali operator (3.3) memberikan $\hat{A}(\hat{C}f) = \hat{A}\hat{C}f$ dan $\hat{B}(\hat{C}f) = \hat{B}\hat{C}f$. Oleh karena itu,

$$[(\hat{A} + \hat{B})\hat{C}]f = \hat{A}\hat{C}f + \hat{B}\hat{C}f. \tag{3.13}$$

Penggunaan definisi jumlah operator (3.2), dengan $\hat{A}$ diganti oleh $\hat{A}\hat{C}$ dan $\hat{B}$ diganti oleh $\hat{B}\hat{C}$, memberikan $(\hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{C})f = \hat{A}\hat{C}f + \hat{B}\hat{C}f$, sehingga (3.13) menjadi

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

yang merupakan hal yang hendak kita buktikan. Jadi, $(\hat{A} + \hat{B})\hat{C} = \hat{A}\hat{C} + \hat{B}\hat{C}$.

Perhatikan bahwa kita tidak perlu menggunakan linearitas $\hat{A}$, $\hat{B}$, dan $\hat{C}$. Oleh karena itu, (3.11) berlaku untuk semua operator. Akan tetapi, (3.12) hanya berlaku jika $\hat{A}$ linear (lihat Soal 3.17).

Contoh

Tentukan kuadrat operator $d/dx + \hat{x}$.

Untuk menentukan pengaruh $(d/dx + \hat{x})^2$, kita menerapkan operator ini pada suatu fungsi sembarang $f(x)$. Dengan menetapkan $\hat{D} \equiv d/dx$, kita memperoleh

$$\left(\hat{D} + \hat{x}\right)^2 f(x) = \left(\hat{D} + \hat{x}\right)\left[\left(\hat{D} + \hat{x}\right)f\right] = \left(\hat{D} + \hat{x}\right)(f' + xf)$$

$$f'' + f + xf' + xf' + x^2 f = \left(\hat{D}^2 + 2\hat{x}\hat{D} + \hat{x}^2 + 1\right)f(x)$$

sehingga

$$\left(\hat{D} + \hat{x}\right)^2 = \hat{D}^2 + 2\hat{x}\hat{D} + \hat{x}^2 + 1.$$

Mari kita ulangi perhitungan ini dengan hanya menggunakan persamaan operator:

$$\left(\hat{D} + \hat{x}\right)^2 = \left(\hat{D} + \hat{x}\right)\left(\hat{D} + \hat{x}\right) = \hat{D}\left(\hat{D} + \hat{x}\right) + \hat{x}\left(\hat{D} + \hat{x}\right)$$

$$\hat{D}^2 + \hat{D}\hat{x} + \hat{x}\hat{D} + \hat{x}^2 = \hat{D}^2 + \hat{x}\hat{D} + 1 + \hat{x}\hat{D} + \hat{x}^2$$

$$\hat{D}^2 + 2x\hat{D} + x^2 + 1$$

dengan (3.11), (3.12), dan (3.5) telah digunakan dan tanda tudung di atas operator "perkalian dengan x" dihilangkan. Sampai Anda benar-benar berpengalaman dengan operator, cara paling aman dalam melakukan manipulasi operator adalah selalu membiarkan operator bekerja pada suatu fungsi sembarang f, lalu menghapus f pada akhir perhitungan.

Latihan. Tentukan $(d^2/d\,x^2 + x)^2$. *(Jawaban:* $d^4/d\,x^4 + 2x\,d^2/d\,x^2 + 2\,d/dx + x^2$.*)*

3.2 Fungsi Eigen dan Nilai Eigen

Misalkan akibat pengoperasian suatu fungsi $f(x)$ dengan operator linear $\hat{A}$ hanyalah mengalikan $f(x)$ dengan suatu konstanta tertentu k. Kita mengatakan bahwa $f(x)$ adalah fungsi eigen dari $\hat{A}$ dengan nilai eigen k. (*Eigen* adalah kata bahasa Jerman yang berarti karakteristik.) Sebagai bagian dari definisi, kita mensyaratkan bahwa fungsi eigen $f(x)$ tidak identik dengan nol. Maksudnya, walaupun $f(x)$ dapat bernilai nol pada berbagai titik, fungsi tersebut tidak bernilai nol di semua tempat. Kita mempunyai

$$\hat{A}f(x) = kf(x). \qquad (3.14)$$

Sebagai contoh (3.14), e^{2x} merupakan fungsi eigen dari operator d/dx dengan nilai eigen 2:

$$\left(\frac{d}{dx}\right)e^{2x} = 2e^{2x}.$$

Akan tetapi, $sin2x$ bukan fungsi eigen dari d/dx, karena $(d/dx)(sin2x) = 2cos2x$, yang bukan merupakan suatu konstanta dikalikan $sin2x$.

Contoh

Jika $f(x)$ merupakan fungsi eigen dari operator linear $\hat{A}$ dan c adalah konstanta sembarang, buktikan bahwa $cf(x)$ merupakan fungsi eigen dari $\hat{A}$ dengan nilai eigen yang sama seperti $f(x)$.

Cara yang baik untuk melihat bagaimana melakukan suatu pembuktian adalah menjalankan langkah-langkah berikut:

- Tuliskan informasi yang diberikan dan terjemahkan informasi tersebut dari kata-kata menjadi persamaan.

- Tuliskan apa yang harus dibuktikan dalam bentuk sebuah persamaan atau beberapa persamaan.

1. Manipulasikan persamaan yang diberikan pada langkah 1 sedemikian rupa sehingga berubah menjadi persamaan yang diinginkan pada langkah 2. (b) Sebagai alternatif, mulailah dari salah satu ruas persamaan yang hendak dibuktikan dan gunakan persamaan yang diberikan pada langkah 1 untuk memanipulasi ruas tersebut sampai berubah menjadi ruas yang lain dari persamaan yang hendak dibuktikan.

Kita diberi tiga informasi: f merupakan fungsi eigen dari $\hat{A}$; $\hat{A}$ merupakan operator linear; c merupakan konstanta. Dengan menerjemahkan pernyataan-pernyataan tersebut menjadi persamaan, kita memperoleh [lihat Persamaan (3.14), (3.9), dan (3.10)]

$$\hat{A}f = kf. \tag{3.15}$$

$$\hat{A}(f+g) = \hat{A}f + \hat{A}g \text{dan} \hat{A}(bf) = b\hat{A}f, \tag{3.16}$$

$$c = \text{suatu konstanta},$$

dengan k dan b merupakan konstanta, sedangkan f dan g merupakan fungsi.

Kita hendak membuktikan bahwa cf merupakan fungsi eigen dari $\hat{A}$ dengan nilai eigen yang sama dengan f, yang jika dituliskan sebagai persamaan adalah

$$\hat{A}(cf) = k(cf).$$

Dengan menggunakan strategi langkah 3(b), kita mulai dari ruas kiri $\hat{A}(cf)$ dari persamaan terakhir ini dan mencoba menunjukkan bahwa ruas tersebut sama dengan $k(cf)$. Dengan menggunakan persamaan kedua dalam definisi linearitas (3.16), kita mempunyai $\hat{A}(cf) = c\hat{A}f$. Dengan menggunakan persamaan nilai eigen (3.15), kita mempunyai $c\hat{A}f = ckf$. Jadi,

$$\hat{A}(cf) = c\hat{A}f = ckf = k(cf),$$

yang menyelesaikan pembuktian.

Contoh

- Tentukan fungsi eigen dan nilai eigen operator d/dx. (b) Jika kita menerapkan syarat batas bahwa fungsi eigen tetap berhingga ketika $x \to \pm\infty$, tentukan nilai eigennya.

- Persamaan (3.14), dengan $\hat{A} = d/dx$, menjadi

$$\frac{df(x)}{dx} = kf(x). \tag{3.17}$$

$$\frac{1}{f}df = kdx.$$

Integrasi memberikan

$$lnf = kx + \text{konstanta}$$

$$f = e^{\text{konstanta}} e^{kx}$$

$$f = ce^{kx} \tag{3.18}$$

Fungsi eigen d/dx diberikan oleh (3.18). Nilai eigennya adalah k, yang dapat berupa bilangan apa pun dan (3.17) tetap terpenuhi. Fungsi eigen memuat konstanta pengali sembarang c. Hal ini berlaku bagi fungsi eigen setiap operator linear, sebagaimana dibuktikan dalam contoh sebelumnya. Setiap nilai k yang berbeda dalam (3.18) memberikan fungsi eigen yang berbeda. Akan tetapi, fungsi-fungsi eigen dengan nilai k yang sama tetapi nilai c yang berbeda tidak saling bebas.

1. Karena k dapat berupa bilangan kompleks, kita menuliskannya sebagai $k = a + ib$, dengan a dan b bilangan real. Selanjutnya, $f(x) = ce^{ax}e^{ibx}$. Jika $a > 0$, faktor e^{ax} menuju tak berhingga ketika x menuju tak berhingga. Jika $a < 0$, maka $e^{ax} \to \infty$ dalam limit $x \to -\infty$. Jadi, syarat batas mengharuskan $a = 0$, dan nilai eigennya adalah $k = ib$, dengan b real.

Dalam contoh pertama pada Bagian 3.1, kita menemukan bahwa $[z^3, d/dz]g(z) = -3z^2 g(z)$ untuk setiap fungsi g, lalu kita menyimpulkan bahwa $[z^3, d/dz] = -3z^2$. Sebaliknya, persamaan nilai eigen $\hat{A}f(x) = kf(x)$ [Persamaan (3.14)] tidak berlaku untuk setiap fungsi $f(x)$, sehingga dari persamaan tersebut kita tidak dapat menyimpulkan bahwa $\hat{A} = k$. Jadi, fakta bahwa $(d/dx)e^{2x} = 2e^{2x}$ tidak berarti bahwa operator d/dx sama dengan perkalian oleh 2.

3.3 Operator dan Mekanika Kuantum

Sekarang kita mengkaji hubungan antara operator dan mekanika kuantum. Dengan membandingkan Persamaan (3.1) dengan (3.14), kita melihat bahwa persamaan Schrödinger merupakan suatu masalah nilai eigen. Nilai-nilai energi E adalah nilai eigen. Fungsi eigennya adalah fungsi gelombang tak-bergantung-waktu ψ. Operator yang fungsi eigen dan nilai eigennya hendak dicari adalah $-(\hbar^2/2\,m)\,d^2/d\,x^2 + V(x)$. Operator ini disebut operator Hamiltonian untuk sistem tersebut.

Sir William Rowan Hamilton (1805-1865) menyusun bentuk alternatif persamaan gerak Newton yang melibatkan suatu fungsi H, yaitu fungsi Hamiltonian untuk sistem. Untuk suatu sistem yang energi potensialnya hanya merupakan fungsi koordinat, energi total tetap konstan terhadap waktu; dengan kata lain, E kekal. Kita akan membatasi pembahasan pada sistem konservatif semacam itu. Untuk sistem konservatif, fungsi Hamiltonian mekanika klasik ternyata hanyalah energi total yang dinyatakan dalam koordinat dan momentum konjugat. Untuk koordinat Kartesius x, y, dan z, momentum konjugatnya adalah komponen momentum linear dalam arah x, y, dan z, yaitu p_x, p_y, dan p_z:

$$p_x \equiv mv_x, p_y \equiv mv_y, p_z \equiv mv_z, \tag{3.19}$$

dengan v_x, v_y, dan v_z merupakan komponen kecepatan partikel dalam arah x, y, dan z.

Mari kita tentukan fungsi Hamiltonian mekanika klasik untuk sebuah partikel bermassa m yang bergerak dalam satu dimensi dan dikenai energi potensial $V(x)$. Fungsi Hamiltonian sama dengan energi, yang tersusun atas energi kinetik dan energi potensial. Akan tetapi, bentuk energi kinetik yang lazim, $1/2\,mv_x^2$, tidak dapat digunakan karena kita harus menyatakan Hamiltonian sebagai fungsi koordinat dan momentum, bukan kecepatan. Karena $v_x = p_x/m$, bentuk energi kinetik yang kita perlukan adalah $p_x^2/2\,m$. Fungsi Hamiltoniannya adalah

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + V(x). \tag{3.20}$$

Persamaan Schrödinger tak-bergantung-waktu (3.1) menunjukkan bahwa, bersesuaian dengan fungsi Hamiltonian (3.20), kita mempunyai operator mekanika kuantum

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

yang nilai eigennya merupakan nilai-nilai energi yang mungkin bagi sistem. Korespondensi antara besaran fisik dalam mekanika klasik dan operator dalam mekanika kuantum ini bersifat umum. Salah satu postulat dasar mekanika kuantum menyatakan bahwa setiap sifat fisik (misalnya energi, koordinat x, atau momentum) mempunyai operator mekanika kuantum yang bersesuaian. Kita selanjutnya mempostulatkan bahwa operator yang bersesuaian dengan sifat B diperoleh dengan menuliskan ungkapan mekanika klasik untuk B sebagai fungsi koordinat Kartesius dan momentum yang bersesuaian, kemudian melakukan penggantian berikut.

Setiap koordinat Kartesius q diganti oleh operator perkalian dengan koordinat tersebut:

$$\hat{q} = q\,\times.$$

Setiap komponen Kartesius momentum linear p_q diganti oleh operator

$$\hat{p}_q = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q},$$

dengan $i = \sqrt{-1}$ dan $\partial/\partial\, q$ merupakan operator turunan parsial terhadap koordinat q. Perhatikan bahwa $1/i = i/i^2 = i/(-1) = -i$.

Perhatikan beberapa contoh. Operator yang bersesuaian dengan koordinat x adalah perkalian dengan x:

$$\hat{x} = x\,\times. \tag{3.21}$$

Demikian pula,

$$\hat{y} = y\,\times \text{ dan} \hat{z} = z\,\times. \tag{3.22}$$

Operator untuk komponen-komponen momentum linear adalah

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}. \tag{3.23}$$

Operator yang bersesuaian dengan p_x^2 adalah

$$\hat{p}_x^2 = \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \tag{3.24}$$

dengan ungkapan serupa untuk $\hat{p}_y^2$ dan $\hat{p}_z^2$.

Apakah operator energi potensial dan energi kinetik dalam satu dimensi? Misalkan suatu sistem mempunyai fungsi energi potensial $V(x) = ax^2$, dengan a sebuah konstanta. Dengan mengganti x oleh $x\times$, kita melihat bahwa operator energi potensial hanyalah perkalian dengan ax^2; yaitu, $\hat{V}(x) = ax^2\times$. Secara umum, untuk setiap fungsi energi potensial kita mempunyai

$$\hat{V}(x) = V(x)\times. \tag{3.25}$$

Ungkapan mekanika klasik untuk energi kinetik T dalam (3.20) adalah

$$T = \frac{p_x^2}{2m}. \tag{3.26}$$

Dengan mengganti p_x oleh operator yang bersesuaian pada (3.23), kita memperoleh

$$\hat{T} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}, \tag{3.27}$$

dengan (3.24) telah digunakan dan turunan parsial menjadi turunan biasa dalam satu dimensi. Hamiltonian mekanika klasik (3.20) adalah

$$H = T + V = \frac{p_x^2}{2m} + V(x). \tag{3.28}$$

Operator Hamiltonian (atau energi) mekanika kuantum yang bersesuaian adalah

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x), \tag{3.29}$$

yang sesuai dengan operator dalam persamaan Schrödinger (3.1). Perhatikan bahwa semua operator ini bersifat linear.

Bagaimanakah operator mekanika kuantum berhubungan dengan sifat-sifat sistem yang bersesuaian? Setiap operator tersebut mempunyai himpunan fungsi eigen dan nilai eigennya sendiri. Misalkan $\hat{B}$ adalah operator mekanika kuantum yang bersesuaian dengan sifat fisik B. Dengan ϕ_i dan b_i menyatakan fungsi eigen dan nilai eigen $\hat{B}$, kita mempunyai [Persamaan (3.14)]

$$\hat{B}\phi_i = b_i\phi_i, i = 1,2,3, \ldots. \tag{3.30}$$

Operator $\hat{B}$ mempunyai banyak fungsi eigen dan nilai eigen, dan subskrip i digunakan untuk menunjukkan hal tersebut. $\hat{B}$ biasanya merupakan operator diferensial, dan (3.30) merupakan persamaan diferensial yang penyelesaiannya memberikan fungsi eigen dan nilai eigen. Mekanika kuantum mempostulatkan bahwa, apa pun fungsi keadaan sistem, pengukuran sifat B harus menghasilkan salah satu nilai eigen b_i dari operator $\hat{B}$. Sebagai contoh, satu-satunya nilai yang dapat diperoleh untuk energi suatu sistem adalah nilai eigen dari operator energi (Hamiltonian) $\hat{H}$. Dengan menggunakan ψ_i untuk menyatakan fungsi eigen $\hat{H}$, kita mempunyai, sebagai persamaan nilai eigen (3.30),

$$\hat{H}\psi_i = E_i\psi_i. \tag{3.31}$$

Dengan menggunakan Hamiltonian (3.29) dalam (3.31), untuk sistem satu-dimensi dan satu-partikel kita memperoleh

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi_i = E_i\psi_i, \tag{3.32}$$

yang merupakan persamaan Schrödinger tak-bergantung-waktu (3.1). Jadi, postulat kita tentang operator konsisten dengan pekerjaan sebelumnya. Kelak kita akan memberikan pembenaran lebih lanjut terhadap pilihan (3.23) untuk operator momentum dengan menunjukkan bahwa, dalam peralihan limit menuju mekanika klasik, pilihan ini menghasilkan $p_x = m(dx/dt)$ sebagaimana seharusnya. (Lihat Soal 7.59.)

Dalam Bab 1, kita mempostulatkan bahwa keadaan suatu sistem mekanika kuantum ditentukan oleh fungsi keadaan $\Psi(x,t)$, yang memuat seluruh informasi yang dapat kita ketahui tentang sistem. Bagaimanakah Ψ memberikan informasi tentang sifat B? Kita mempostulatkan bahwa jika Ψ merupakan fungsi eigen $\hat{B}$ dengan nilai eigen b_k, pengukuran B pasti menghasilkan nilai b_k. Sebagai contoh, perhatikan energi. Fungsi eigen operator energi adalah penyelesaian $\psi(x)$ dari persamaan Schrödinger tak-bergantung-waktu (3.32). Misalkan sistem berada dalam keadaan stasioner dengan fungsi keadaan [Persamaan (1.20)]

$$\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(x). \tag{3.33}$$

Apakah $\Psi(x,t)$ merupakan fungsi eigen operator energi $\hat{H}$? Kita mempunyai

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

$\hat{H}$ tidak mengandung turunan terhadap waktu dan karena itu tidak memengaruhi faktor eksponensial $e^{-iEt/\hbar}$. Kita mempunyai

$$\hat{H}\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\hat{H}\psi(x) = Ee^{-iEt/\hbar}\psi(x) = E\Psi(x,t),$$

$$\hat{H}\Psi = E\Psi, \tag{3.34}$$

dengan (3.31) telah digunakan. Jadi, untuk suatu keadaan stasioner, $\Psi(x,t)$ merupakan fungsi eigen $\hat{H}$, dan kita pasti memperoleh nilai E ketika mengukur energi.

Sebagai contoh sifat lain, perhatikan momentum. Fungsi eigen g dari $\hat{p}_x$ diperoleh dengan menyelesaikan

$$\hat{p}_x g = kg,$$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{dg}{dx} = kg. \tag{3.35}$$

Kita memperoleh (Soal 3.29)

$$g = Ae^{ikx/\hbar}, \tag{3.36}$$

dengan A merupakan konstanta sembarang. Agar g tetap berhingga untuk nilai $|x|$ yang besar, nilai eigen k harus real. Jadi, nilai eigen $\hat{p}_x$ adalah semua bilangan real

$$-\infty < k < \infty, \tag{3.37}$$

yang masuk akal. Setiap pengukuran p_x harus menghasilkan salah satu nilai eigen (3.37) dari $\hat{p}_x$. Setiap nilai k yang berbeda pada (3.36) memberikan fungsi eigen g yang

berbeda. Mungkin tampak mengejutkan bahwa operator untuk sifat fisik momentum melibatkan bilangan imajiner i. Sebenarnya, kehadiran i dalam $\hat{p}_x$ memastikan bahwa nilai eigen k bersifat real. Ingat bahwa nilai eigen d/dx bersifat imajiner (Bagian 3.2).

Dengan membandingkan fungsi gelombang partikel bebas (2.30) dengan fungsi eigen (3.36) dari $\hat{p}_x$, kita memperoleh penafsiran fisik berikut. Suku pertama pada (2.30) bersesuaian dengan momentum positif dan menyatakan gerak dalam arah $+x$; suku kedua pada (2.30) bersesuaian dengan momentum negatif dan menyatakan gerak dalam arah $-x$.

Sekarang perhatikan momentum partikel dalam kotak. Fungsi keadaan untuk partikel dalam keadaan stasioner di dalam kotak satu-dimensi adalah [Persamaan (3.33), (2.20), dan (2.23)]

$$\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right), \tag{3.38}$$

dengan $E = n^2\, h^2/8\, ml^2$. Apakah partikel mempunyai nilai p_x yang pasti? Dengan kata lain, apakah $\Psi(x,t)$ merupakan fungsi eigen $\hat{p}_x$? Dengan melihat fungsi eigen (3.36) dari $\hat{p}_x$, kita melihat bahwa tidak ada nilai numerik konstanta real k yang dapat membuat fungsi eksponensial dalam (3.36) menjadi fungsi sinus seperti pada (3.38). Jadi, Ψ bukan fungsi eigen $\hat{p}_x$. Kita dapat memverifikasi hal ini secara langsung; kita mempunyai

$$\hat{p}_x\Psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\left[e^{-iEt/\hbar}\left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right)\right] = \frac{n\pi\hbar}{il}e^{-iEt/\hbar}\left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} cos\left(\frac{n\pi x}{l}\right).$$

Karena $\hat{p}_x\Psi \neq$ konstanta $\times\, \Psi$, fungsi keadaan Ψ bukan fungsi eigen $\hat{p}_x$.

Perhatikan bahwa fungsi keadaan sistem Ψ tidak harus merupakan fungsi eigen ϕ_i dari operator $\hat{B}$ pada (3.30) yang bersesuaian dengan sifat fisik B dari sistem. Jadi, fungsi gelombang keadaan stasioner partikel dalam kotak bukan fungsi eigen $\hat{p}_x$. Walaupun demikian, ketika mengukur p_x untuk partikel dalam keadaan stasioner di dalam kotak, kita tetap harus memperoleh salah satu nilai eigen (3.37) dari $\hat{p}_x$.

Apakah fungsi gelombang keadaan stasioner partikel dalam kotak merupakan fungsi eigen $\hat{p}_x^2$? Kita mempunyai [Persamaan (3.24)]

$$\hat{p}_x^2\Psi = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[e^{-iEt/\hbar}\left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right)\right] = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{l^2}e^{-iEt/\hbar}\left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right),$$

$$\hat{p}_x^2\Psi = \frac{n^2h^2}{4l^2}\Psi. \tag{3.39}$$

Jadi, pengukuran p_x^2 selalu memberikan hasil $n^2\, h^2/4\, l^2$ ketika partikel berada dalam keadaan stasioner dengan bilangan kuantum n. Hal ini seharusnya tidak mengejutkan. Energi potensial di dalam kotak adalah nol, dan operator Hamiltoniannya adalah

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \hat{T} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}.$$

Selanjutnya kita mempunyai [Persamaan (3.34)]

$$\hat{H}\Psi = E\Psi = \frac{\hat{p}_x^2}{2m}\Psi,$$

$$\hat{p}_x^2\Psi = 2mE\Psi = 2m\frac{n^2h^2}{8ml^2}\Psi = \frac{n^2h^2}{4l^2}\Psi, \tag{3.40}$$

sesuai dengan (3.39). Satu-satunya nilai yang mungkin untuk p_x^2 adalah

$$p_x^2 = \frac{n^2h^2}{4l^2}. \tag{3.41}$$

Persamaan (3.41) menunjukkan bahwa pengukuran p_x tampaknya harus menghasilkan salah satu dari dua nilai $\pm 1/2\, nh/l$, yang bersesuaian dengan partikel yang bergerak ke kanan atau ke kiri di dalam kotak. Saran yang masuk akal ini tidak tepat. Analisis dengan metode Bab 7 menunjukkan bahwa terdapat probabilitas tinggi bahwa nilai terukur akan dekat dengan salah satu dari dua nilai $\pm 1/2\, nh/l$, tetapi setiap nilai yang konsisten dengan (3.37) dapat dihasilkan oleh pengukuran p_x untuk partikel di dalam kotak; lihat Soal 7.41.

Kita mempostulatkan bahwa pengukuran sifat B harus memberikan hasil yang merupakan salah satu nilai eigen operator $\hat{B}$. Jika fungsi keadaan Ψ kebetulan merupakan fungsi eigen $\hat{B}$ dengan nilai eigen b, kita pasti memperoleh b ketika mengukur B. Akan tetapi, misalkan Ψ bukan salah satu fungsi eigen $\hat{B}$. Lalu bagaimana? Kita tetap menyatakan bahwa kita akan memperoleh salah satu nilai eigen $\hat{B}$ ketika mengukur B, tetapi kita tidak dapat memprediksi nilai eigen yang mana yang akan diperoleh. Dalam Bab 7 kita akan melihat bahwa probabilitas untuk memperoleh berbagai nilai eigen $\hat{B}$ dapat diprediksi.

Contoh

Energi sebuah partikel bermassa m di dalam kotak satu-dimensi sepanjang l diukur. Nilai apa saja yang mungkin dihasilkan dari pengukuran tersebut jika, pada saat pengukuran dimulai, fungsi keadaan partikel adalah (a) $\Psi = (30/l^5)^{1/2}x(l-x)$ untuk $0 \le x \le l$; (b) $\Psi = (2/l)^{1/2}sin(3\,\pi x/l)$ untuk $0 \le x \le l$?

1. Hasil yang mungkin dari pengukuran sifat E adalah nilai eigen operator energi (Hamiltonian) sistem $\hat{H}$. Oleh karena itu, nilai terukur harus merupakan salah satu bilangan $n^2\, h^2/8\, ml^2$, dengan $n = 1,2,3,$ .... Karena Ψ bukan salah satu fungsi eigen $(2/l)^{1/2}sin(n\pi x/l)$ [Persamaan (2.23)] dari $\hat{H}$, kita tidak dapat memprediksi nilai eigen mana yang akan diperoleh untuk keadaan tidak stasioner ini. (Probabilitas untuk memperoleh nilai-nilai eigen tersebut ditentukan dalam contoh terakhir pada Bagian 7.6.)

2. Karena Ψ merupakan fungsi eigen $\hat{H}$ dengan nilai eigen $3^2\, h^2/8\, ml^2$ [Persamaan (2.20)], pengukuran harus memberikan $9\, h^2/8\, ml^2$.

3.4 Persamaan Schrödinger Tiga-Dimensi dan Banyak-Partikel

Sampai saat ini kita membatasi pembahasan pada sistem satu-dimensi dan satu-partikel. Formalisme operator yang dikembangkan dalam bagian terakhir memungkinkan kita memperluas pembahasan ke sistem tiga-dimensi dan banyak-partikel. Persamaan

Schrödinger bergantung-waktu untuk perkembangan fungsi keadaan terhadap waktu dipostulatkan mempunyai bentuk Persamaan (1.13):

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi. \tag{3.42}$$

Persamaan Schrödinger tak-bergantung-waktu untuk fungsi eigen dan nilai eigen energi adalah

$$\hat{H}\psi=E\psi, \tag{3.43}$$

yang diperoleh dari (3.42) dengan mengambil energi potensial tidak bergantung pada waktu dan menerapkan prosedur pemisahan variabel yang digunakan untuk memperoleh (1.19) dari (1.13).

Untuk sistem satu-partikel tiga-dimensi, Hamiltonian mekanika klasik adalah

$$H=T+V=\frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)+V(x,y,z). \tag{3.44}$$

Dengan memasukkan operator mekanika kuantum [Persamaan (3.24)], untuk operator Hamiltonian kita memperoleh

$$\hat{H}=\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z). \tag{3.45}$$

Operator di dalam tanda kurung pada (3.45) disebut operator Laplace ∇^2 (dibaca "del kuadrat"):

$$\nabla^2\equiv\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}. \tag{3.46}$$

Persamaan Schrödinger tak-bergantung-waktu satu-partikel tiga-dimensi kemudian adalah

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V\psi=E\psi. \tag{3.47}$$

Sekarang perhatikan suatu sistem tiga-dimensi dengan n partikel. Misalkan partikel i mempunyai massa m_i dan koordinat (x_i,y_i,z_i), dengan $i=1,2,3,\dots,n$. Energi kinetik adalah jumlah energi kinetik masing-masing partikel:

$$T=\frac{1}{2m_1}\left(p_{x1}^2+p_{y1}^2+p_{z1}^2\right)+\frac{1}{2m_2}\left(p_{x2}^2+p_{y2}^2+p_{z2}^2\right)+\cdots+\frac{1}{2m_n}\left(p_{xn}^2+p_{yn}^2+p_{zn}^2\right),$$

dengan p_{xi} merupakan komponen-x momentum linear partikel i, dan seterusnya. Operator energi kinetiknya adalah

$$\hat{T}=\frac{-\hbar^2}{2m_1}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_1^2}\right)-\cdots-\frac{\hbar^2}{2m_n}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_n^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_n^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_n^2}\right),$$

$$\hat{T}=-\sum_{i=1}^{n}\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2, \tag{3.48}$$

$$\nabla_i^2\equiv\frac{\partial^2}{\partial x_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_i^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_i^2}. \tag{3.49}$$

Biasanya kita membatasi diri pada kasus-kasus yang energi potensialnya hanya bergantung pada $3n$ koordinat:

$$V = V(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n).$$

Dengan demikian, operator Hamiltonian untuk suatu sistem tiga-dimensi n-partikel adalah

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{n} \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V(x_1, \dots, z_n), \tag{3.50}$$

dan persamaan Schrödinger tak-bergantung-waktunya adalah

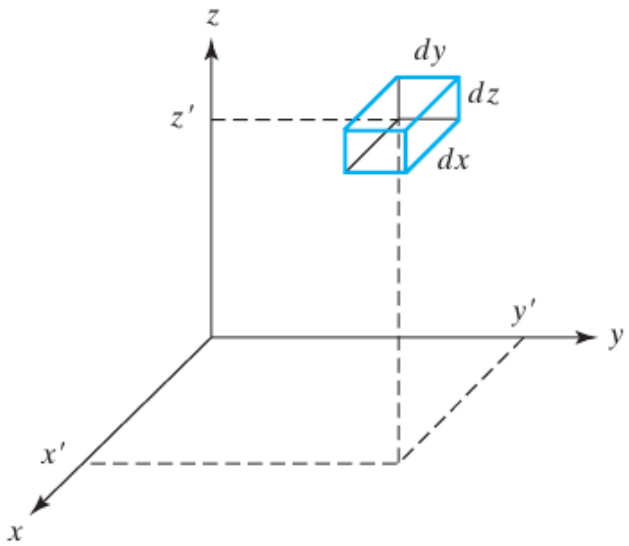
$$\left[-\sum_{i=1}^{n} \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V(x_1, \dots, z_n) \right] \psi = E\psi, \tag{3.51}$$

dengan fungsi gelombang tak-bergantung-waktu merupakan fungsi dari $3n$ koordinat milik n partikel:

$$\psi = \psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n). \tag{3.52}$$

Persamaan Schrödinger (3.51) merupakan persamaan diferensial parsial linear.

Sebagai contoh, perhatikan sistem dua partikel yang berinteraksi sedemikian rupa sehingga energi potensial berbanding terbalik dengan jarak di antara keduanya, dengan c sebagai konstanta perbandingan. Persamaan Schrödinger (3.51) menjadi



Gambar 3.1. Wilayah infinitesimal berbentuk kotak yang terletak pada x', y', dan z'.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}\right) - \frac{\hbar^2}{2m_2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2}\right) + \frac{c}{[(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2]^{1/2}} \right] \psi = E\psi \tag{3.53}$$

$$\psi = \psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2).$$

Walaupun (3.53) tampak sangat rumit, kita akan menyelesaikannya dalam Bab 6.

Untuk sistem satu-partikel satu-dimensi, postulat Born [Persamaan (1.15)] menyatakan bahwa $|\Psi(x', t)|^2 dx$ merupakan probabilitas mengamati partikel di antara x' dan $x' + dx$ pada waktu t, dengan x' suatu nilai tertentu dari x. Kita memperluas postulat ini sebagai berikut. Untuk sistem satu-partikel tiga-dimensi, besaran

$$|\Psi(x', y', z', t)|^2 dx dy dz \tag{3.54}$$

merupakan probabilitas menemukan partikel dalam wilayah infinitesimal ruang yang koordinat x-nya terletak antara x' dan $x' + dx$, koordinat y-nya terletak antara y' dan $y' + dy$, dan koordinat z-nya terletak antara z' dan $z' + dz$ (Gambar 3.1). Karena probabilitas total untuk menemukan partikel adalah 1, syarat normalisasinya adalah

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, y, z, t)|^2 \, dx dy dz = 1. \tag{3.55}$$

Untuk sistem tiga-dimensi n-partikel, kita mempostulatkan bahwa

$$|\Psi(x_1', y_1', z_1', x_2', y_2', z_2', \ldots, x_n', y_n', z_n', t)|^2 dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 dy_2 dz_2 \cdots dx_n d \tag{3.56}$$

merupakan probabilitas pada waktu t untuk secara serentak menemukan partikel 1 di wilayah infinitesimal berbentuk kotak persegi panjang pada (x_1', y_1', z_1') dengan sisi dx_1, dy_1, dan dz_1; partikel 2 di wilayah infinitesimal berbentuk kotak pada (x_2', y_2', z_2') dengan sisi dx_2, dy_2, dan dz_2; dan seterusnya, hingga partikel n di wilayah infinitesimal berbentuk kotak pada (x_n', y_n', z_n') dengan sisi dx_n, dy_n, dan dz_n. Probabilitas total untuk menemukan semua partikel adalah 1, dan syarat normalisasinya adalah

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \, dx_1 dy_1 dz_1 \cdots dx_n dy_n dz_n = 1. \tag{3.57}$$

Dalam mekanika kuantum, lazim digunakan notasi $\int d\tau$ untuk menyatakan integrasi pada seluruh rentang semua koordinat suatu sistem. Bentuk singkat untuk menuliskan (3.55) atau (3.57) adalah

$$\int |\Psi|^2 d\tau = 1. \tag{3.58}$$

Walaupun (3.58) mungkin tampak seperti integral tak tentu, persamaan itu dipahami sebagai integral tentu. Variabel integrasi dan rentangnya dipahami dari konteks.

Untuk keadaan stasioner, $|\Psi|^2 = |\psi|^2$, dan

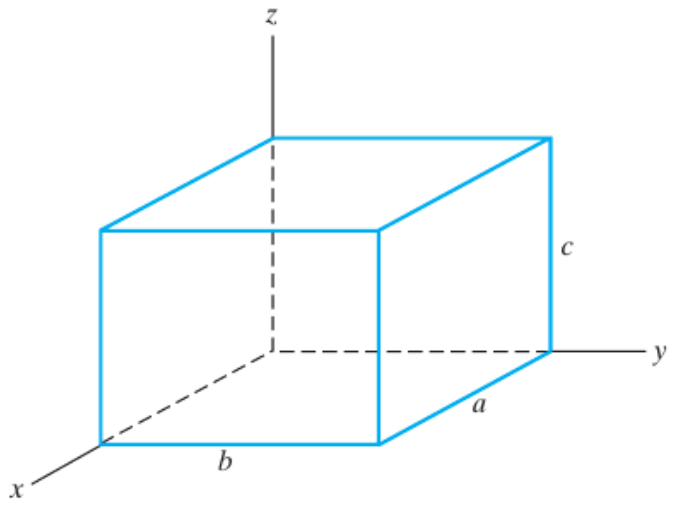
$$\int |\psi|^2 d\tau = 1. \tag{3.59}$$

3.5 Partikel dalam Kotak Tiga-Dimensi

Untuk sementara, kita membatasi diri pada masalah satu-partikel. Dalam bagian ini kita membahas bentuk tiga-dimensi dari masalah yang diselesaikan dalam Bagian 2.2, yaitu partikel dalam kotak.

Terdapat banyak bentuk yang mungkin untuk sebuah kotak tiga-dimensi. Kotak yang kita bahas adalah paralelipipedum persegi panjang dengan rusuk sepanjang a, b, dan c. Kita memilih sistem koordinat sedemikian rupa sehingga salah satu sudut kotak terletak di titik

asal dan kotak berada di oktan pertama ruang (Gambar 3.2). Di dalam kotak, energi potensial bernilai nol. Di luar kotak, nilainya tak berhingga:



Gambar 3.2. Di dalam wilayah berbentuk kotak, $V = 0$.

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & \text{di wilayah } 0 < x < a, 0 < y < b, 0 < z < c, \\ \infty, & \text{di tempat lain.} \end{cases} \tag{3.60}$$

Karena probabilitas partikel mempunyai energi tak berhingga adalah nol, fungsi gelombang harus bernilai nol di luar kotak. Di dalam kotak, operator energi potensial adalah nol dan persamaan Schrödinger (3.47) adalah

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) = E\psi. \tag{3.61}$$

Untuk menyelesaikan (3.61), kita mengasumsikan bahwa penyelesaiannya dapat dituliskan sebagai hasil kali fungsi yang hanya bergantung pada x, fungsi yang hanya bergantung pada y, dan fungsi yang hanya bergantung pada z:

$$\psi(x,y,z) = f(x)g(y)h(z). \tag{3.62}$$

Mungkin diperkirakan bahwa asumsi ini membuang penyelesaian yang tidak berbentuk (3.62). Akan tetapi, dapat ditunjukkan bahwa jika kita dapat menemukan penyelesaian berbentuk (3.62) yang memenuhi syarat batas, tidak ada penyelesaian lain dari persamaan Schrödinger yang akan memenuhi syarat batas tersebut. (Untuk pembuktian, lihat G. F. D. Duff dan

D. Naylor, *Differential Equations of Applied Mathematics*, Wiley, 1966, hlm. 257-258.) Metode yang kita gunakan untuk menyelesaikan (3.62) disebut pemisahan variabel.

Dari (3.62), kita memperoleh

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = f''(x)g(y)h(z), \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = f(x)g''(y)h(z), \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = f(x)g(y)h''(z). \quad (3.63)$$

Substitusi (3.62) dan (3.63) ke dalam (3.61) memberikan

$$\frac{-\hbar^2}{2m}f''gh - \frac{\hbar^2}{2m}fg''h - \frac{\hbar^2}{2m}fgh'' - Efgh = 0. \quad (3.64)$$

Pembagian persamaan ini dengan fgh memberikan

$$\frac{-\hbar^2 f''}{2mf} - \frac{\hbar^2 g''}{2mg} - \frac{\hbar^2 h''}{2mh} - E = 0. \quad (3.65)$$

$$\frac{-\hbar^2 f''(x)}{2mf(x)} = \frac{\hbar^2 g''(y)}{2mg(y)} + \frac{\hbar^2 h''(z)}{2mh(z)} + E. \quad (3.66)$$

Mari kita definisikan E_x sama dengan ruas kiri (3.66):

$$E_x \equiv -\frac{\hbar^2 f''(x)}{2mf(x)}. \quad (3.67)$$

Definisi (3.67) menunjukkan bahwa E_x tidak bergantung pada y dan z. Persamaan (3.66) menunjukkan bahwa E_x sama dengan $\hbar^2 g''(y)/2\,mg(y) + \hbar^2 h''(z)/2\,mh(z) + E$; oleh karena itu, E_x harus tidak bergantung pada x. Karena tidak bergantung pada x, y, maupun z, besaran E_x harus merupakan sebuah konstanta.

Seperti pada (3.67), kita mendefinisikan E_y dan E_z dengan

$$E_y \equiv -\frac{\hbar^2 g''(y)}{2mg(y)}, E_z \equiv -\frac{\hbar^2 h''(z)}{2mh(z)}. \quad (3.68)$$

Karena x, y, dan z muncul secara simetris dalam (3.65), penalaran yang sama yang menunjukkan bahwa E_x merupakan konstanta juga menunjukkan bahwa E_y dan E_z merupakan konstanta. Substitusi definisi (3.67) dan (3.68) ke dalam (3.65) memberikan

$$E_x + E_y + E_z = E. \quad (3.69)$$

Persamaan (3.67) dan (3.68) adalah

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E_x f(x) = 0, \quad (3.70)$$

$$\frac{d^2 g(y)}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E_y g(y) = 0, \frac{d^2 h(z)}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E_z h(z) = 0. \quad (3.71)$$

Kita telah mengubah persamaan diferensial parsial dalam tiga variabel menjadi tiga persamaan diferensial biasa. Apakah syarat batas untuk (3.70)? Karena fungsi gelombang menghilang di luar kotak, kekontinuan ψ mengharuskan fungsi tersebut menghilang pada dinding kotak. Secara khusus, ψ harus bernilai nol pada dinding kotak yang terletak di bidang yz, tempat $x = 0$, dan juga harus bernilai nol pada dinding kotak sejajar yang terletak di $x = a$. Oleh karena itu, $f(0) = 0$ dan $f(a) = 0$.

Sekarang bandingkan Persamaan (3.70) dengan persamaan Schrödinger [Persamaan (2.10)] untuk partikel dalam kotak satu-dimensi. Bentuk kedua persamaan sama, dengan E_x dalam (3.70) bersesuaian dengan E dalam (2.10). Apakah syarat batasnya sama? Ya, kecuali bahwa kita mempunyai $x = a$, bukan $x = l$, sebagai titik kedua tempat variabel

bebas menghilang. Jadi, kita dapat menggunakan hasil dalam Bagian 2.2 untuk menuliskan penyelesaiannya [lihat Persamaan (2.23) dan (2.20)] sebagai

$$f(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right),$$

$$E_x = \frac{n_x^2 h^2}{8ma^2}, n_x = 1,2,3, \ldots.$$

Penalaran yang sama, bila diterapkan pada persamaan y dan z, memberikan

$$g(y) = \left(\frac{2}{b}\right)^{1/2} sin\left(\frac{n_y \pi y}{b}\right), h(z) = \left(\frac{2}{c}\right)^{1/2} sin\left(\frac{n_z \pi z}{c}\right),$$

$$E_y = \frac{n_y^2 h^2}{8mb^2}, n_y = 1,2,3, \ldots, \text{dan} E_z = \frac{n_z^2 h^2}{8mc^2}, n_z = 1,2,3, \ldots.$$

Dari (3.69), energinya adalah

$$E = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2}\right). \tag{3.72}$$

Seperti halnya partikel dalam kotak satu-dimensi, energi keadaan dasar lebih besar daripada nilai energi terendah mekanika klasik, yaitu nol.

Dari (3.62), fungsi gelombang di dalam kotak adalah

$$\psi(x,y,z) = \left(\frac{8}{abc}\right)^{1/2} sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) sin\left(\frac{n_y \pi y}{b}\right) sin\left(\frac{n_z \pi z}{c}\right). \tag{3.73}$$

Fungsi gelombang mempunyai tiga bilangan kuantum, n_x, n_y, dan n_z. Hal ini dapat kita kaitkan dengan sifat tiga-dimensi masalah tersebut. Ketiga bilangan kuantum berubah secara independen satu sama lain.

Dalam masalah satu-partikel satu-dimensi, seperti partikel dalam kotak satu-dimensi, simpul berada di tempat $\psi(x) = 0$, dan dengan menyelesaikan persamaan ini terhadap x, kita memperoleh titik-titik tempat $\psi = 0$. Dalam masalah satu-partikel tiga-dimensi, simpul berada di tempat $\psi(x,y,z) = 0$, dan dengan menyelesaikan persamaan ini terhadap z, kita memperoleh penyelesaian berbentuk $z = f(x,y)$. Setiap penyelesaian semacam itu merupakan persamaan permukaan simpul di ruang tiga-dimensi. Sebagai contoh, untuk keadaan stasioner dengan $n_x = 1$, $n_y = 1$, dan $n_z = 2$, fungsi gelombang ψ dalam (3.73) bernilai nol pada permukaan $z = c/2$; ini merupakan persamaan suatu bidang yang sejajar dengan permukaan atas dan bawah kotak serta berada tepat di tengah kedua permukaan tersebut. Demikian pula, untuk keadaan $n_x = 2$, $n_y = 1$, dan $n_z = 1$, bidang $x = a/2$ merupakan permukaan simpul.

Karena faktor x, y, dan z dalam fungsi gelombang masing-masing telah dinormalisasi secara independen, fungsi gelombang tersebut ternormalisasi:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 \, dxdydz = \int_0^a |f(x)|^2 \, dx \int_0^b |g(y)|^2 \, dy \int_0^c |h(z)|^2 \, dz = 1$$

dengan kita menggunakan (Soal 3.40)

$$\iiint F(x)G(y)H(z)dxdydz = \int F(x)dx \int G(y)dy \int H(z)dz. \quad (3.74)$$

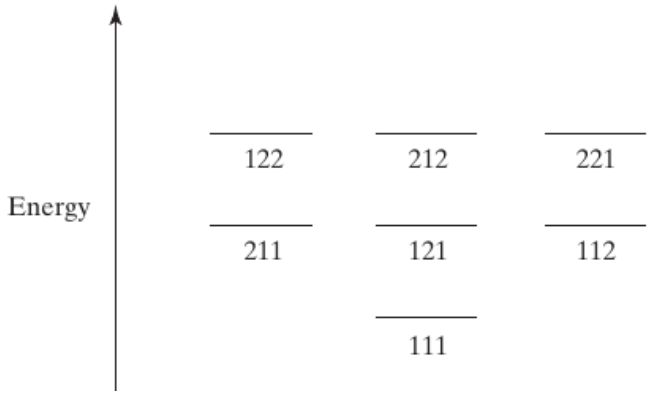
Apakah dimensi $\psi(x,y,z)$ pada (3.73)? Untuk sistem satu-partikel tiga-dimensi, $|\psi|^2 dxdydz$ merupakan probabilitas, dan probabilitas tidak berdimensi. Karena dimensi $dxdydz$ adalah panjang ^{3}, $\psi(x,y,z)$ harus mempunyai dimensi panjang $^{-3/2}$ agar $|\psi|^2 dxdydz$ tidak berdimensi.

Misalkan $a = b = c$. Dengan demikian, kita mempunyai sebuah kubus. Tingkat-tingkat energinya menjadi

$$E = \frac{h^2}{8ma^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right). \quad (3.75)$$

Mari kita tabulasikan beberapa energi yang diizinkan bagi partikel yang terkurung di dalam kubus berdinding kuat tak berhingga:

$n_x n_y n_z$	111	211	121	112	122	212	221	113	131	311	222
$E(8m\,a^2/h^2)$	3	6	6	6	9	9	9	11	11	11	12



Gambar 3.3. Energi beberapa keadaan terendah partikel dalam kotak kubik.

Perhatikan bahwa keadaan dengan bilangan kuantum yang berbeda dapat mempunyai energi yang sama (Gambar 3.3). Sebagai contoh, keadaan ψ_{211}, ψ_{121}, dan ψ_{112} (subskrip menyatakan bilangan kuantum) semuanya mempunyai energi yang sama. Akan tetapi, Persamaan (3.73) menunjukkan bahwa ketiga himpunan bilangan kuantum ini memberikan tiga fungsi gelombang yang berbeda dan independen, sehingga memang menyatakan keadaan sistem yang berbeda. Jika dua atau lebih fungsi gelombang independen bersesuaian dengan keadaan yang mempunyai nilai eigen energi sama, nilai eigen tersebut dikatakan terdegenerasi. Derajat degenerasi (atau cukup disebut degenerasi) suatu tingkat energi adalah jumlah keadaan yang mempunyai energi tersebut. Jadi, tingkat energi terendah kedua partikel dalam kubus mempunyai degenerasi lipat tiga. Degenerasi muncul ketika kita membuat rusuk-rusuk kotak sama panjang. Degenerasi biasanya berkaitan dengan simetri sistem. Perhatikan bahwa fungsi gelombang ψ_{211}, ψ_{121}, dan ψ_{112} dapat ditransformasikan satu sama lain dengan merotasi kotak kubik. Biasanya, tingkat energi keadaan terikat dalam masalah satu-dimensi tidak terdegenerasi.

Dalam evaluasi mekanika statistik terhadap fungsi partisi molekuler suatu gas ideal, tingkat energi translasi setiap molekul gas diambil sebagai tingkat energi partikel dalam kotak persegi panjang tiga-dimensi (kotaknya adalah wadah yang menampung gas); lihat Levine, *Physical Chemistry*, Bagian 21.6 dan 21.7.

Dalam teori elektron bebas untuk logam, elektron valensi suatu logam nontransisi diperlakukan sebagai partikel-partikel tidak berinteraksi di dalam kotak, dengan sisi-sisi kotak berupa permukaan logam. Pendekatan ini, walaupun kasar, memberikan hasil yang cukup baik untuk beberapa sifat logam.

3.6 Degenerasi

Untuk tingkat energi yang terdegenerasi lipat-n, terdapat n fungsi gelombang independen $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$, yang masing-masing mempunyai nilai eigen energi sama, w:

$$\hat{H}\psi_1 = w\psi_1, \hat{H}\psi_2 = w\psi_2, \ldots, \hat{H}\psi_n = w\psi_n. \tag{3.76}$$

Kita hendak membuktikan teorema penting berikut: setiap kombinasi linear

$$\phi \equiv c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n \tag{3.77}$$

dari fungsi-fungsi gelombang suatu tingkat terdegenerasi dengan nilai eigen energi w merupakan fungsi eigen operator Hamiltonian dengan nilai eigen w. [Kombinasi linear fungsi $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$ didefinisikan sebagai fungsi berbentuk (3.77), dengan c merupakan konstanta yang beberapa di antaranya dapat bernilai nol.] Untuk membuktikan teorema ini, kita harus menunjukkan bahwa $\hat{H}\phi = w\phi$, atau

$$\hat{H}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n) = w(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n). \tag{3.78}$$

Karena $\hat{H}$ merupakan operator linear, kita dapat menerapkan Persamaan (3.9) sebanyak $n - 1$ kali pada ruas kiri (3.78) untuk memperoleh

$$\hat{H}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n) = \hat{H}(c_1\psi_1) + \hat{H}(c_2\psi_2) + \cdots + \hat{H}(c_n\psi_n).$$

Penggunaan Persamaan (3.10) dan (3.76) memberikan

$$\hat{H}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n) = c_1\hat{H}\psi_1 + c_2\hat{H}\psi_2 + \cdots + c_n\hat{H}\psi_n$$

$$c_1w\psi_1 + c_2w\psi_2 + \cdots + c_nw\psi_n$$

$$\hat{H}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n) = w(c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n)$$

yang menyelesaikan pembuktian.

Sebagai contoh, fungsi gelombang keadaan stasioner ψ_{211}, ψ_{121}, dan ψ_{112} untuk partikel dalam kotak kubik terdegenerasi, dan kombinasi linear $c_1\psi_{211} + c_2\psi_{121} + c_3\psi_{112}$ merupakan fungsi eigen Hamiltonian partikel-dalam-kotak-kubik dengan nilai eigen $6\,h^2/8\,ma^2$, sama dengan nilai eigen masing-masing ψ_{211}, ψ_{121}, dan ψ_{112}.

Perhatikan bahwa kombinasi linear $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ bukan fungsi eigen $\hat{H}$ jika ψ_1 dan ψ_2 bersesuaian dengan nilai eigen energi yang berbeda ($\hat{H}\psi_1 = E_1\psi_1$ dan $\hat{H}\psi_2 = E_2\psi_2$, dengan $E_1 \neq E_2$).

Karena setiap kombinasi linear fungsi gelombang yang bersesuaian dengan suatu tingkat energi terdegenerasi merupakan fungsi eigen $\hat{H}$ dengan nilai eigen yang sama, kita dapat menyusun tak berhingga banyaknya fungsi gelombang yang berbeda untuk setiap tingkat

energi terdegenerasi. Sebenarnya, kita hanya berkepentingan dengan fungsi eigen yang bebas linear. Fungsi $f_1, \dots, f_n$ dikatakan bebas linear jika persamaan $c_1 f_1 + \cdots + c_n f_n = 0$ hanya dapat dipenuhi jika semua konstanta $c_1, \dots, c_n$ sama dengan nol. Artinya, tidak ada anggota suatu himpunan fungsi bebas linear yang dapat dinyatakan sebagai kombinasi linear anggota-anggota lainnya. Sebagai contoh, fungsi $f_1 = 3x$, $f_2 = 5x^2 - x$, dan $f_3 = x^2$ tidak bebas linear, karena $f_2 = 5f_3 - 1/3\, f_1$. Fungsi $g_1 = 1$, $g_2 = x$, dan $g_3 = x^2$ bebas linear, karena tidak satu pun di antaranya dapat dituliskan sebagai kombinasi linear dua fungsi lainnya.

Derajat degenerasi suatu tingkat energi sama dengan jumlah fungsi gelombang bebas linear yang bersesuaian dengan nilai energi tersebut. Fungsi gelombang partikel bebas satu-dimensi (2.30) merupakan kombinasi linear dua fungsi bebas linear yang masing-masing merupakan fungsi eigen dengan nilai eigen energi sama, E. Jadi, setiap nilai eigen energi tersebut (kecuali $E = 0$) terdegenerasi lipat dua (artinya, derajat degenerasinya adalah dua).

3.7 Nilai Rata-Rata

Dalam Bagian 3.3 telah dikemukakan bahwa ketika fungsi keadaan Ψ bukan fungsi eigen operator $\hat{B}$, pengukuran B akan memberikan salah satu dari sejumlah nilai yang mungkin (nilai eigen $\hat{B}$). Sekarang kita membahas nilai rata-rata sifat B untuk suatu sistem yang keadaannya adalah Ψ.

Untuk menentukan nilai rata-rata B secara eksperimen, kita mengambil banyak sistem identik yang tidak saling berinteraksi dan masing-masing berada dalam keadaan Ψ yang sama, kemudian mengukur B pada setiap sistem. Nilai rata-rata B, yang dilambangkan dengan $\langle B \rangle$, didefinisikan sebagai rata-rata aritmetika nilai teramati $b_1, b_2, \dots, b_N$:

$$\langle B \rangle = \frac{\sum_{j=1}^{N} b_j}{N}, \tag{3.79}$$

dengan N, jumlah sistem, sangat besar.

Alih-alih menjumlahkan nilai-nilai B yang teramati, kita dapat menjumlahkan semua nilai B yang mungkin, dengan mengalikan setiap nilai yang mungkin dengan banyaknya kemunculan nilai tersebut, sehingga diperoleh ungkapan ekuivalen

$$\langle B \rangle = \frac{\sum_b b\, n_b}{N}, \tag{3.80}$$

dengan n_b adalah banyaknya nilai b teramati. Sebuah contoh akan memperjelas hal ini. Misalkan sembilan siswa dalam suatu kelas mengikuti kuis yang terdiri atas lima pertanyaan dan memperoleh nilai berikut: 0, 20, 20, 60, 60, 80, 80, 80, 100. Dengan menghitung nilai rata-rata menurut (3.79), kita mempunyai

$$\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} b_j = \frac{0 + 20 + 20 + 60 + 60 + 80 + 80 + 80 + 100}{9} = 56.$$

Untuk menghitung nilai rata-rata menurut (3.80), kita menjumlahkan nilai yang mungkin: 0, 20, 40, 60, 80, 100. Kita mempunyai

$$\frac{1}{N}\sum_b n_b\, b = \frac{1(0) + 2(20) + 0(40) + 2(60) + 3(80) + 1(100)}{9} = 56.$$

Persamaan (3.80) dapat dituliskan sebagai

$$\langle B \rangle = \sum_b \left(\frac{n_b}{N}\right) b.$$

Karena N sangat besar, n_b/N adalah probabilitas P_b untuk mengamati nilai b, dan

$$\langle B \rangle = \sum_b P_b\, b. \tag{3.81}$$

Sekarang perhatikan nilai rata-rata koordinat x untuk sistem satu-partikel satu-dimensi dalam keadaan $\Psi(x,t)$. Koordinat x mengambil rentang nilai kontinu, dan probabilitas mengamati partikel di antara x dan $x + dx$ adalah $|\Psi|^2 dx$. Penjumlahan atas probabilitas infinitesimal ekuivalen dengan integrasi pada seluruh rentang x, sehingga (3.81) menjadi

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\, |\Psi(x,t)|^2 dx. \tag{3.82}$$

Untuk kasus satu-partikel tiga-dimensi, probabilitas menemukan partikel dalam elemen volume di titik (x,y,z) dengan sisi dx, dy, dan dz adalah

$$|\Psi(x,y,z,t)|^2 dxdydz. \tag{3.83}$$

Jika kita menginginkan probabilitas bahwa partikel berada antara x dan $x + dx$, kita harus mengintegralkan (3.83) terhadap semua nilai y dan z yang mungkin, karena partikel dapat mempunyai nilai apa pun untuk koordinat y dan z ketika koordinat x-nya terletak antara x dan $x + dx$. Oleh karena itu, dalam kasus tiga-dimensi, (3.82) menjadi

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,y,z,t)|^2\, dydz \right] x dx,$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,y,z,t)|^2\, x dxdydz. \tag{3.84}$$

Sekarang perhatikan nilai rata-rata suatu sifat fisik $B(x,y,z)$ yang merupakan fungsi koordinat partikel. Salah satu contohnya adalah energi potensial $V(x,y,z)$. Penalaran yang sama dengan yang menghasilkan Persamaan (3.84) memberikan

$$\langle B(x,y,z) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,y,z,t)|^2\, B(x,y,z) dxdydz. \tag{3.85}$$

$$\langle B(x,y,z) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\, B \Psi dxdydz. \tag{3.86}$$

Bentuk (3.86) mungkin tampak sebagai sedikit permainan notasi, karena tidak berbeda dari (3.85). Sesaat lagi kita akan melihat maknanya.

Secara umum, sifat B bergantung pada koordinat dan momentum:

$$B = B\left(x, y, z, p_x, p_y, p_z\right)$$

untuk kasus satu-partikel tiga-dimensi. Bagaimanakah kita menentukan nilai rata-rata B? Kita mempostulatkan bahwa $\langle B \rangle$ untuk suatu sistem dalam keadaan Ψ adalah

$$\langle B\rangle = \iiint \Psi^* B\left(x, y, z, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}\right)\Psi dxdydz,$$

$$\langle B\rangle = \iiint \Psi^* \hat{B}\Psi dxdydz, \tag{3.87}$$

dengan $\hat{B}$ adalah operator mekanika kuantum untuk sifat B. [Kelak kita akan memberikan sebagian pembenaran bagi postulat ini dengan menggunakan (3.87) untuk menunjukkan bahwa persamaan Schrödinger bergantung-waktu tereduksi menjadi hukum kedua Newton dalam peralihan dari mekanika kuantum ke mekanika klasik; lihat Soal 7.59.] Untuk kasus n-partikel, kita mempostulatkan bahwa

$$\langle B\rangle = \int \Psi^* \hat{B}\Psi d\tau, \tag{3.88}$$

dengan $\int d\tau$ menyatakan integral tentu pada seluruh rentang $3n$ koordinat. Fungsi keadaan dalam (3.88) harus ternormalisasi, karena kita mengambil $\Psi^*\Psi$ sebagai kerapatan probabilitas. Operator harus ditempatkan dengan benar di antara Ψ^* dan Ψ. Besaran $\hat{B}\Psi^*\Psi$ dan $\Psi^*\Psi\hat{B}$ tidak sama dengan $\Psi^*\hat{B}\Psi$, kecuali jika B hanya merupakan fungsi koordinat. Dalam $\int \Psi^*\hat{B}\Psi d\tau$, mula-mula $\hat{B}$ dioperasikan pada Ψ untuk menghasilkan fungsi baru $\hat{B}\Psi$, kemudian fungsi tersebut dikalikan dengan Ψ^*; setelah itu dilakukan integrasi pada seluruh ruang untuk menghasilkan sebuah bilangan, yaitu $\langle B\rangle$.

Untuk keadaan stasioner, kita mempunyai [Persamaan (1.20)]

$$\Psi^*\hat{B}\Psi = e^{iEt/\hbar}\psi^*\hat{B}e^{-iEt/\hbar}\psi = e^0\psi^*\hat{B}\psi = \psi^*\hat{B}\psi,$$

karena $\hat{B}$ tidak mengandung turunan waktu dan tidak memengaruhi faktor waktu dalam Ψ. Jadi, untuk keadaan stasioner,

$$\langle B\rangle = \int \psi^*\hat{B}\psi d\tau. \tag{3.89}$$

Dengan demikian, jika $\hat{B}$ tidak bergantung pada waktu, maka $\langle B\rangle$ tidak bergantung pada waktu dalam keadaan stasioner.

Perhatikan kasus khusus ketika Ψ merupakan fungsi eigen $\hat{B}$. Jika $\hat{B}\Psi = k\Psi$, Persamaan (3.88) menjadi

$$\langle B\rangle = \int \Psi^*\hat{B}\Psi d\tau = \int \Psi^* k\Psi d\tau = k\int \Psi^*\Psi d\tau = k,$$

karena Ψ ternormalisasi. Hasil ini masuk akal, sebab ketika $\hat{B}\Psi = k\Psi$, k merupakan satu-satunya nilai yang mungkin kita peroleh untuk B ketika melakukan pengukuran (Bagian 3.3).

Sifat-sifat nilai rata-rata berikut mudah dibuktikan dari Persamaan (3.88) (lihat Soal 3.49):

$$\langle A + B\rangle = \langle A\rangle + \langle B\rangle, \langle cB\rangle = c\langle B\rangle, \tag{3.90}$$

dengan A dan B merupakan dua sifat sembarang dan c sebuah konstanta. Akan tetapi, nilai rata-rata suatu hasil kali tidak harus sama dengan hasil kali nilai rata-ratanya: $\langle AB\rangle \neq \langle A\rangle\langle B\rangle$.

Istilah *nilai harapan* sering digunakan sebagai pengganti *nilai rata-rata*. Nilai harapan tidak harus merupakan salah satu nilai yang mungkin kita amati.

Contoh

Tentukan $\langle x \rangle$ dan $\langle p_x \rangle$ untuk keadaan stasioner dasar partikel dalam kotak tiga-dimensi.

Substitusi fungsi gelombang keadaan stasioner $\psi = f(x)g(y)h(z)$ [Persamaan (3.62)] ke dalam postulat nilai rata-rata (3.89) memberikan

$$\langle x \rangle = \int \psi^* \hat{x} \psi d\tau = \int_0^a \int_0^b \int_0^c f^* g^* h^* x f g h dx dy dz,$$

karena $\psi = 0$ di luar kotak. Penggunaan (3.74) memberikan

$$\langle x \rangle = \int_0^a x |f(x)|^2 dx \int_0^b |g(y)|^2 dy \int_0^c |h(z)|^2 dz = \int_0^a x |f(x)|^2 dx,$$

karena $g(y)$ dan $h(z)$ masing-masing ternormalisasi. Untuk keadaan dasar, $n_x = 1$ dan $f(x) = (2/a)^{1/2} sin(\pi x/a)$. Jadi,

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a x \, sin^2 \left(\frac{\pi x}{a} \right) dx = \frac{a}{2}, \tag{3.91}$$

dengan integral Lampiran (A.3) telah digunakan. Sekilas pandang pada Gambar 2.4 menunjukkan bahwa hasil ini masuk akal.

Selain itu,

$$\langle p_x \rangle = \int \psi^* \hat{p}_x \psi d\tau = \int_0^a \int_0^b \int_0^c f^* g^* h^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} [f(x)g(y)h(z)] dx dy dz,$$

$$\langle p_x \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_0^a f^*(x) f'(x) dx \int_0^b |g(y)|^2 dy \int_0^c |h(z)|^2 dz,$$

$$\langle p_x \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_0^a f(x) f'(x) dx = \frac{\hbar}{2i} f^2(x) |_0^a = 0, \tag{3.92}$$

dengan syarat batas $f(0) = 0$ dan $f(a) = 0$ telah digunakan. Hasil (3.92) masuk akal karena partikel mempunyai peluang yang sama untuk bergerak dalam arah $+x$ maupun $-x$.

Latihan. Tentukan $\langle p_x^2 \rangle$ untuk keadaan dasar partikel dalam kotak tiga-dimensi. *(Jawaban: $h^2/4\,l^2$.)*

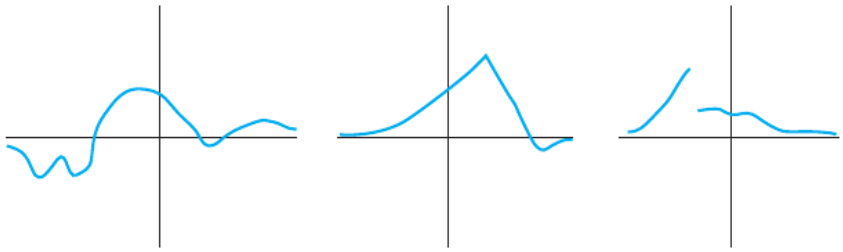
3.8 Persyaratan bagi Fungsi Gelombang yang Dapat Diterima

Dalam menyelesaikan masalah partikel dalam kotak, kita mensyaratkan bahwa ψ kontinu. Sekarang kita membahas persyaratan lain yang harus dipenuhi oleh fungsi gelombang.

Karena $|\psi|^2 d\tau$ adalah probabilitas, kita ingin dapat menormalisasi fungsi gelombang dengan memilih konstanta normalisasi N yang sesuai sebagai pengali fungsi gelombang. Jika ψ belum ternormalisasi dan $N\psi$ ternormalisasi, syarat normalisasi (3.59) memberikan

$$1 = \int |N\psi|^2 d\tau = |N|^2 \int |\psi|^2 d\tau,$$

$$|N| = \left(\int |\psi|^2 d\tau \right)^{-1/2}. \tag{3.93}$$



Gambar 3.4. Fungsi (a) kontinu dan turunan pertamanya kontinu. Fungsi (b) kontinu, tetapi turunan pertamanya mempunyai diskontinuitas. Fungsi (c) diskontinu.

Integral tentu $\int |\psi|^2 d\tau$ hanya akan sama dengan nol jika fungsi ψ bernilai nol di semua tempat. Akan tetapi, ψ tidak dapat bernilai nol di semua tempat (hal ini berarti tidak ada partikel), sehingga integral ini tidak pernah nol. Jika $\int |\psi|^2 d\tau$ tak berhingga, besar konstanta normalisasi $|N|$ adalah nol dan ψ tidak dapat dinormalisasi. Kita dapat menormalisasi ψ jika dan hanya jika $\int |\psi|^2 d\tau$ mempunyai nilai berhingga, bukan tak berhingga. Jika integral pada seluruh ruang berhingga, ψ dikatakan *terintegralkan secara kuadrat*. Jadi, secara umum kita menuntut agar ψ terintegralkan secara kuadrat. Pengecualian penting adalah partikel yang tidak terikat. Dengan demikian, fungsi gelombang untuk keadaan tidak terikat dari partikel dalam sumur (Bagian 2.4) dan untuk partikel bebas tidak terintegralkan secara kuadrat.

Karena $\psi^* \psi$ adalah kerapatan probabilitas, besaran tersebut harus bernilai tunggal. Akan memalukan jika teori kita memberikan dua nilai yang berbeda untuk probabilitas menemukan partikel pada suatu titik tertentu. Jika kita menuntut agar ψ bernilai tunggal, maka tentu $\psi^* \psi$ juga akan bernilai tunggal. Mungkin saja ψ bernilai banyak [misalnya, $\psi(\theta) = -1, +1, i$] tetapi $\psi^* \psi$ tetap bernilai tunggal. Walaupun demikian, kita akan menuntut bahwa ψ bernilai tunggal.

Selain menuntut bahwa ψ kontinu, biasanya kita juga mensyaratkan agar semua turunan parsial $\partial \psi / \partial x$, $\partial \psi / \partial y$, dan seterusnya, kontinu. (Lihat Gambar 3.4.) Akan tetapi, dengan merujuk kembali pada Bagian 2.2, kita mencatat bahwa untuk partikel dalam kotak, $d\psi/dx$ diskontinu pada dinding kotak; ψ dan $d\psi/dx$ bernilai nol di semua tempat di luar kotak, tetapi dari Persamaan (2.23) kita melihat bahwa $d\psi/dx$ tidak menjadi nol pada dinding. Diskontinuitas dalam ψ' disebabkan oleh lonjakan tak berhingga energi potensial pada dinding kotak. Untuk kotak dengan dinding berketinggian berhingga, ψ' kontinu pada dinding (Bagian 2.4).

Sejalan dengan persyaratan keterintegralan kuadrat, kadang-kadang dinyatakan bahwa fungsi gelombang harus berhingga di semua tempat, termasuk di tak berhingga. Akan tetapi, hal ini biasanya merupakan persyaratan yang jauh lebih kuat daripada keterintegralan kuadrat. Kenyataannya, beberapa fungsi gelombang relativistik untuk atom hidrogen bernilai tak berhingga di titik asal tetapi terintegralkan secara kuadrat. Kadang-kadang dijumpai fungsi gelombang nonrelativistik yang tak berhingga di titik asal [L. D. Landau dan E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, edisi ke-3 (1977), Bagian 35]. Jadi, persyaratan mendasarnya adalah keterintegralan kuadrat, bukan keberhinggaan.

Kita mensyaratkan agar fungsi eigen setiap operator yang merepresentasikan suatu besaran fisik memenuhi persyaratan di atas. Fungsi yang memenuhi persyaratan tersebut dikatakan *berperilaku baik*.

Ringkasan

Operator adalah suatu aturan yang mentransformasikan satu fungsi menjadi fungsi lain. Jumlah dan hasil kali operator didefinisikan oleh $(\hat{A}+\hat{B})f(x) \equiv \hat{A}f(x) + \hat{B}f(x)$ dan $\hat{A}\hat{B}f(x) \equiv \hat{A}[\hat{B}f(x)]$. Komutator dua operator adalah $[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Operator dalam mekanika kuantum bersifat linear, yang berarti bahwa operator tersebut memenuhi $\hat{A}[f(x)+g(x)] = \hat{A}f(x) + \hat{A}g(x)$ dan $\hat{A}[cf(x)] = c\hat{A}f(x)$. Fungsi eigen ϕ_i dan nilai eigen b_i dari operator $\hat{B}$ memenuhi $\hat{B}\phi_i = b_i\phi_i$.

Sejauh ini, postulat mekanika kuantum berikut telah diperkenalkan:

1. Keadaan suatu sistem dideskripsikan oleh suatu fungsi Ψ (fungsi keadaan atau fungsi gelombang) dari koordinat partikel dan waktu. Ψ bernilai tunggal, kontinu, dan (kecuali untuk keadaan tidak terikat) terintegralkan secara kuadrat.

2. Untuk setiap sifat fisik B dari suatu sistem, terdapat operator $\hat{B}$ yang bersesuaian. Operator ini diperoleh dengan mengambil ungkapan mekanika klasik untuk sifat tersebut dalam koordinat dan momentum Kartesius, kemudian mengganti setiap koordinat x dengan $x\times$ dan setiap komponen momentum p_x dengan $(\hbar/i)\,\partial/\partial\, x$.

3. Satu-satunya nilai yang mungkin dihasilkan dari pengukuran sifat B adalah nilai eigen b_i dari persamaan $\hat{B}g_i = b_i g_i$, dengan fungsi eigen g_i disyaratkan berperilaku baik.

4. Nilai rata-rata sifat B diberikan oleh $\langle B\rangle = \int \Psi^* \hat{B}\Psi d\tau$, dengan Ψ merupakan fungsi keadaan sistem.

5. Fungsi keadaan suatu sistem yang tidak terganggu berubah terhadap waktu menurut $-(\hbar/i)(\partial\,\Psi/\partial\, t) = \hat{H}\Psi$, dengan $\hat{H}$ merupakan operator Hamiltonian (operator energi) sistem.

6. Untuk sistem tiga-dimensi n-partikel, besaran (3.56) merupakan probabilitas menemukan partikel-partikel sistem dalam wilayah infinitesimal ruang yang dicantumkan sesudah (3.56).

7. Operator Hamiltonian untuk sistem tiga-dimensi n -partikel adalah $\hat{H} = -\sum_{i=1}^{n}(\hbar^2/2\,m_i)\,\nabla_i^2 + V$, dengan $\nabla_i^2 \equiv \partial^2/\partial\, x_i^2 + \partial^2/\partial\, y_i^2 + \partial^2/\partial\, z_i^2$. Persamaan Schrödinger tak-bergantung-waktu adalah $\hat{H}\psi_i = E_i\psi_i$, dengan indeks i menandai keadaan stasioner yang berbeda.

8. Fungsi gelombang keadaan stasioner dan tingkat energi partikel dalam kotak persegi panjang tiga-dimensi diperoleh dengan menggunakan pemisahan variabel. Fungsi-

fungsi gelombang ini dicirikan oleh tiga bilangan kuantum, satu untuk setiap koordinat.

9. Derajat degenerasi suatu tingkat energi adalah jumlah fungsi gelombang bebas linear yang bersesuaian dengan nilai energi tersebut. Setiap kombinasi linear fungsi gelombang suatu tingkat terdegenerasi dengan energi w merupakan fungsi eigen $\hat{H}$ dengan nilai eigen w.

Soal

Bagian	3.1	3.2	3.3	3.4	3.5
Soal	3.1-3.22	3.23-3.27	3.28-3.29	3.30-3.34	3.35-3.42
Bagian	3.6		3.7	Umum	
Soal	3.43-3.47		3.48-3.49	3.50-3.53	

3.1 Jika $g = \hat{A}f$, tentukan g untuk setiap pilihan $\hat{A}$ dan f berikut. (a) $\hat{A} = d/dx$ dan $f = cos(x^2 + 1)$; (b) $\hat{A} = \hat{5}$ dan $f = sinx$; (c) $\hat{A} = (\cdot)^2$ dan $f = sinx$; (d) $\hat{A} = e\hat{x}p$ dan $f = lnx$; (e) $\hat{A} = d^2/d\,x^2$ dan $f = ln(3x)$; (f) $\hat{A} = d^2/d\,x^2 + 3x\,d/dx$ dan $f = 4x^3$; (g) $\hat{A} = \partial/\partial\,y$ dan $f = sin[(xy)^2]$.

3.2 Nyatakan apakah setiap entitas berikut merupakan operator atau fungsi: (a) $\hat{A}\hat{B}$; (b) $\hat{A}f(x)$; (c) $\hat{B}\hat{A}f(x)$; (d) $[\hat{B}, \hat{A}]$; (e) $f(x)\hat{A}$; (f) $f(x)\hat{A}\hat{B}g(x)$.

3.3 Jika $\hat{A}f(x) = 3x^2 f(x) + 2x\,df/dx$, dengan f fungsi sembarang, berikan ungkapan untuk $\hat{A}$.

3.4 Berikan tiga operator $\hat{A}$ yang berbeda yang memenuhi $\hat{A}e^x = e^x$.

3.5 Untuk setiap pasangan fungsi f dan g berikut, berikan dua bentuk $\hat{A}$ yang mungkin sehingga hubungan $g(x) = \hat{A}f(x)$ terpenuhi. (a) $f = 2x^4$, $g = 8x^3$; (b) $f = 2x$, $g = x^2$; (c) $f = x^4$, $g = x^2$.

3.6 Buktikan bahwa $\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}$.

3.7 Buktikan bahwa jika $\hat{A} + \hat{B} = \hat{C}$, maka $\hat{A} = \hat{C} - \hat{B}$.

3.8 Jika $\hat{A} = d^2/d\,x^2$ dan $\hat{B} = x^2\,\times$, tentukan (a) $\hat{A}\hat{B}x^3$; (b) $\hat{B}\hat{A}x^3$; (c) $\hat{A}\hat{B}f(x)$; (d) $\hat{B}\hat{A}f(x)$.

3.9 Ambil $\hat{A} = x^3$ dan $\hat{B} = d/dx$. Tentukan $\hat{A}\hat{B}$ dan $\hat{B}\hat{A}$.

3.10 Dengan penerapan berulang definisi hasil kali dua operator, tunjukkan bahwa

$$[(\hat{A}\hat{B})\hat{C}]f = \hat{A}[\hat{B}(\hat{C}f)],$$
$$[\hat{A}(\hat{B}\hat{C})]f = \hat{A}[\hat{B}(\hat{C}f)].$$

3.11 (a) Tunjukkan bahwa $(\hat{A} + \hat{B})^2 = (\hat{B} + \hat{A})^2$ untuk sembarang dua operator (linear maupun nonlinear). (b) Dalam kondisi apa $(\hat{A} + \hat{B})^2$ sama dengan $\hat{A}^2 + 2\hat{A}\hat{B} + \hat{B}^2$?

3.12 Verifikasi identitas komutator $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$.

3.13 Hitung (a) $[sinz, d/dz]$; (b) $[d^2/d\,x^2, ax^2 + bx + c]$, dengan a , b , dan c merupakan konstanta; (c) $[d/dx\,, d^2/d\,x^2]$.

3.14 Klasifikasikan setiap operator berikut sebagai linear atau nonlinear: (a) $3x^2\,d^2/d\,x^2$; (b) $(\cdot)^2$; (c) $\int \hat{}\, dx$; (d) $e\hat{x}p$; (e) $\partial/\partial\,x + \partial/\partial\,y$; (f) $\sum_{x=1}^{n}$.

3.15 Tuliskan persamaan diferensial linear (2.2) dalam bentuk $\hat{B}y(x) = g(x)$, dengan $\hat{B}$ suatu operator linear tertentu.

3.16 Buktikan bahwa hasil kali dua operator linear merupakan operator linear.

3.17 Buktikan bahwa $\hat{A}\big(\hat{B} + \hat{C}\big) = \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}$ untuk operator linear.

3.18 (a) Jika $\hat{A}$ linear, tunjukkan bahwa

$$\hat{A}(bf + cg) = b\hat{A}f + c\hat{A}g, \tag{3.94}$$

dengan b dan c merupakan konstanta sembarang serta f dan g merupakan fungsi sembarang. (b) Jika (3.94) benar, tunjukkan bahwa $\hat{A}$ linear.

3.19 (a) Berikan contoh operator yang memenuhi Persamaan (3.9) tetapi tidak memenuhi (3.10). (b) Berikan contoh operator yang memenuhi (3.10) tetapi tidak memenuhi (3.9).

3.20 Manakah persamaan berikut yang benar untuk semua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ serta semua fungsi f dan g? (a) $\big(\hat{A} + \hat{B}\big)f = \hat{A}f + \hat{B}f$; (b) $\hat{A}(f + g) = \hat{A}f + \hat{A}g$; (c) $\big(\hat{A}f\big)/f = \hat{A}$, asalkan $f \neq 0$; (d) $\hat{A}\hat{B}f = \hat{B}\hat{A}f$; (e) $\hat{A}f = f\hat{A}$; (f) $\big(\hat{B}f\big)g = \hat{B}(fg)$; (g) $\hat{B}(fg) = \hat{B}(gf)$; (h) $\big(\hat{B}g\big)f = f\big(\hat{B}g\big)$.

3.21 Kita mendefinisikan operator translasi $\hat{T}_h$ dengan $\hat{T}_h f(x) = f(x + h)$. (a) Apakah $\hat{T}_h$ merupakan operator linear? (b) Hitung $\big(\hat{T}_{-1}^2 - 3\hat{T}_1 + 2\big)x^2$.

3.22 Operator $e^{\hat{A}}$ didefinisikan oleh persamaan

$$e^{\hat{A}} = \hat{1} + \hat{A} + \frac{\hat{A}^2}{2!} + \frac{\hat{A}^3}{3!} + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^k}{k!}.$$

Tunjukkan bahwa $e^{\hat{D}} = \hat{T}_1$, dengan $\hat{D} = d/dx$ dan $\hat{T}_1$ didefinisikan dalam Soal 3.21.

3.23 Manakah fungsi berikut yang merupakan fungsi eigen $d^2/d\,x^2$? (a) e^x; (b) x^2; (c) $sinx$; (d) $3cosx$; (e) $sinx + cosx$. Berikan nilai eigen untuk setiap fungsi eigen.

3.24 Manakah fungsi berikut yang merupakan fungsi eigen $\partial^2/\partial\,x^2 + \partial^2/\partial\,y^2$? (a) $e^{2x}e^{3y}$; (b) x^3y^3; (c) $sin2xcos4y$; (d) $sin2x + cos3y$. Untuk setiap fungsi eigen, berikan nilai eigennya.

3.25 Tentukan fungsi eigen $-(\hbar^2/2\,m)\,d^2/d\,x^2$. Jika fungsi eigen harus tetap berhingga ketika $x \to \pm\infty$, apakah nilai eigen yang diizinkan?

3.26 Tentukan fungsi eigen dan nilai eigen operator $\int \hat{}\, dx$.

3.27 Tentukan fungsi eigen dan nilai eigen $d^2/d\,x^2 + 2\,d/dx$.

3.28 Berikan operator mekanika kuantum untuk besaran fisik berikut: (a) p_y^3; (b) $xp_y - yp_x$; (c) $\big(xp_y\big)^2$.

3.29 Lengkapi rincian yang menghasilkan (3.36) dan (3.37) sebagai fungsi eigen dan nilai eigen $\hat{p}_x$.

3.30 Hitung komutator (a) $[\hat{x}, \hat{p}_x]$; (b) $[\hat{x}, \hat{p}_x^2]$; (c) $\left[\hat{x}, \hat{p}_y\right]$; (d) $\left[\hat{x}, \hat{V}(x, y, z)\right]$; (e) $\left[\hat{x}, \hat{H}\right]$, dengan operator Hamiltonian diberikan oleh Persamaan (3.45); (f) $[\hat{x}\hat{y}\hat{z}, \hat{p}_x^2]$.

3.31 Tuliskan operator energi kinetik $\hat{T}$ untuk sistem dua-partikel tiga-dimensi.

3.32 Tuliskan operator Hamiltonian untuk sistem satu-partikel tiga-dimensi, dengan partikel mengalami energi potensial yang sebanding dengan kuadrat jaraknya dari titik asal dan konstanta perbandingannya dinamakan c. Lihat Persamaan (5.52).

3.33 Tuliskan ungkapan probabilitas menemukan partikel nomor 1 dengan koordinat x di antara 0 dan 2 untuk (a) sistem satu-partikel satu-dimensi; (b) sistem satu-partikel tiga-dimensi; (c) sistem dua-partikel tiga-dimensi.

3.34 Jika ψ adalah fungsi gelombang ternormalisasi, apakah satuan SI-nya untuk (a) kasus satu-partikel satu-dimensi; (b) kasus satu-partikel tiga-dimensi; (c) kasus n-partikel tiga-dimensi?

3.35 Sebuah elektron di dalam kotak persegi panjang tiga-dimensi dengan ukuran 5,00 Å, 3,00 Å, dan 6,00 Å melakukan transisi radiasi dari keadaan tereksitasi paling rendah ke keadaan dasar. Hitung frekuensi foton yang dipancarkan.

3.36 Sebuah elektron berada dalam keadaan dasar di dalam kotak tiga-dimensi, dengan V diberikan oleh (3.60), dengan $a = 1{,}00$ nm, $b = 2{,}00$ nm, dan $c = 5{,}00$ nm. Tentukan probabilitas bahwa pengukuran posisi elektron akan menemukannya dalam wilayah (a) $0 \leq x \leq 0{,}40$ nm, $1{,}50$ nm $\leq y \leq 2{,}00$ nm, $2{,}00$ nm $\leq z \leq 3{,}00$ nm; (b) $0 \leq x \leq 0{,}40$ nm, $0 \leq y \leq 2{,}00$ nm, $0 \leq z \leq 5{,}00$ nm. (c) Apakah probabilitas bahwa pengukuran posisi elektron ini akan menemukannya dengan koordinat x antara 0 dan 0,40 nm?

3.37 Fungsi gelombang keadaan stasioner partikel dalam kotak persegi panjang tiga-dimensi merupakan fungsi eigen dari operator manakah berikut ini? (a) $\hat{p}_x$; (b) $\hat{p}_x^2$; (c) $\hat{p}_z^2$; (d) $\hat{x}$. Untuk setiap operator yang menjadikan ψ sebagai fungsi eigen, nyatakan dalam n_x, n_y, dan n_z nilai yang akan diamati ketika sifat yang bersesuaian diukur.

3.38 Deskripsikan bentuk dan lokasi permukaan simpul untuk keadaan stasioner $n_x = 1$, $n_y = 2$, $n_z = 3$ dari partikel dalam kotak dengan rusuk a, b, dan c.

3.39 Untuk setiap keadaan berikut dari partikel dalam kotak dengan rusuk a, b, dan c, nyatakan titik atau titik-titik tempat kerapatan probabilitas maksimum: (a) $n_x = 1, n_y = 1, n_z = 1$; (b) $n_x = 2, n_y = 1, n_z = 1$.

3.40 Buktikan identitas integral lipat (3.74).

3.41 Jelaskan bagaimana degenerasi dapat terjadi untuk partikel dalam kotak persegi panjang dengan $a \neq b \neq c$.

3.42 Selesaikan persamaan Schrödinger satu-partikel tiga-dimensi tak-bergantung-waktu untuk partikel bebas.

3.43 Manakah kombinasi fungsi gelombang keadaan stasioner partikel-dalam-kotak-kubik berikut yang merupakan fungsi eigen operator Hamiltonian partikel-dalam-kotak-

kubik? (a) $2^{-1/2}(\psi_{138} - \psi_{381})$; (b) $2^{-1/2}(\psi_{212} + \psi_{131})$; (c) $1/2\,\psi_{151} - 1/2\,\psi_{333} + 2^{-1/2}\psi_{511}$.

3.44 Istilah *keadaan* dan *tingkat energi* tidak sinonim dalam mekanika kuantum. Untuk partikel dalam kotak kubik, perhatikan rentang energi $E < 15\,h^2/8ma^2$. (a) Berapa banyak keadaan yang berada dalam rentang ini? (b) Berapa banyak tingkat energi yang berada dalam rentang ini?

3.45 Untuk partikel dalam kotak kubik, berapakah derajat degenerasi tingkat energi dengan nilai $8ma^2\,E/h^2$ berikut? (a) 12; (b) 14; (c) 27.

3.46 Manakah berikut ini yang merupakan himpunan fungsi bebas linear? (a) x, x^2, x^6; (b) $8, x, x^2, 3x^2 - 1$; (c) $sinx, cosx$; (d) $sinz, cosz, tanz$; (e) $sinx, cosx, e^{ix}$; (f) $sin^2x, cos^2x, 1$; (g) $sin^2x, cos^2y, 1$.

3.47 Tanpa melihat bab ini, buktikan bahwa setiap kombinasi linear dua fungsi eigen dari suatu tingkat energi terdegenerasi merupakan fungsi eigen $\hat{H}$.

3.48 Untuk partikel yang terkurung dalam kotak dengan ukuran a, b, dan c, tentukan nilai-nilai berikut untuk keadaan dengan bilangan kuantum n_x, n_y, dan n_z. (a) $\langle x \rangle$; (b) $\langle y \rangle$, $\langle z \rangle$. Gunakan pertimbangan simetri dan jawaban bagian (a). (c) $\langle p_x \rangle$; (d) $\langle x^2 \rangle$. Apakah $\langle x^2 \rangle = \langle x \rangle^2$? Apakah $\langle xy \rangle = \langle x \rangle \langle y \rangle$?

3.49 Turunkan hubungan nilai rata-rata dalam (3.90) dari (3.88).

3.50 Manakah fungsi berikut yang, ketika dikalikan dengan konstanta normalisasi, dapat menjadi fungsi gelombang satu-dimensi yang dapat diterima bagi partikel terikat? (a dan b merupakan konstanta positif, dan x berlangsung dari $-\infty$ sampai ∞.) (a) e^{-ax}; (b) e^{-bx^2}; (c) xe^{-bx^2}; (d) ie^{-bx^2}; (e) $f(x) = e^{-bx^2}$ untuk $x < 0$, $f(x) = 2e^{-bx^2}$ untuk $x \geq 0$.

3.51 Tunjukkan bahwa jika Ψ_1 dan Ψ_2 memenuhi persamaan Schrödinger bergantung-waktu, maka $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ memenuhi persamaan tersebut, dengan c_1 dan c_2 merupakan konstanta.

3.52 (a) Tuliskan program komputer yang akan mencari semua himpunan bilangan bulat positif n_x, n_y, dan n_z yang memenuhi $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \leq 60$, mencetak himpunan tersebut dalam urutan kenaikan $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$, dan mencetak nilai $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$. (b) Berapakah degenerasi tingkat partikel-dalam-kotak-kubik dengan $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 54$?

3.53 Benar atau salah? (a) Jika g merupakan fungsi eigen operator linear $\hat{B}$, maka cg merupakan fungsi eigen $\hat{B}$, dengan c suatu konstanta sembarang. (b) Jika kita mengukur sifat B ketika fungsi keadaan sistem bukan fungsi eigen $\hat{B}$, kita dapat memperoleh hasil yang bukan nilai eigen $\hat{B}$. (c) Jika f_1 dan f_2 merupakan fungsi eigen $\hat{B}$, maka $c_1f_1 + c_2f_2$ harus merupakan fungsi eigen $\hat{B}$, dengan c_1 dan c_2 konstanta. (d) Fungsi keadaan Ψ harus merupakan fungsi eigen setiap operator $\hat{B}$ yang merepresentasikan sifat fisik sistem. (e) Kombinasi linear dua penyelesaian persamaan Schrödinger tak-bergantung-waktu harus merupakan penyelesaian persamaan tersebut. (f) Fungsi keadaan sistem Ψ harus merupakan fungsi eigen $\hat{H}$. (g) $5x$ merupakan nilai eigen operator posisi $\hat{x}$. (h) $5x$ merupakan fungsi eigen $\hat{x}$. (i) Untuk keadaan stasioner, Ψ merupakan fungsi eigen $\hat{H}$. (j)

Untuk keadaan stasioner, Ψ sama dengan fungsi waktu dikalikan fungsi koordinat partikel. (k) Untuk keadaan stasioner, kerapatan probabilitas tidak bergantung pada waktu. (l) Dalam persamaan $\langle B \rangle = \int \Psi^* \hat{B} \Psi d\tau$, integral tersebut merupakan integral tak tentu. (m) Jika f merupakan fungsi eigen operator linear $\hat{A}$ dengan nilai eigen a, maka f merupakan fungsi eigen $\hat{A}^2$ dengan nilai eigen a^2. (n) $\langle B \rangle = \int \hat{B} |\Psi|^2 d\tau$. (o) Setiap fungsi x, y, dan z mempunyai bentuk $f(x)g(y)h(z)$.

Integrasi Nilai Keislaman

Al-Qur'an

يَرْفَعِ اللَّهُ الَّذِينَ آمَنُوا مِنكُمْ وَالَّذِينَ أُوتُوا الْعِلْمَ دَرَجَاتٍ ۚ وَاللَّهُ بِمَا تَعْمَلُونَ خَبِيرٌ

"Allah akan meninggikan orang-orang yang beriman di antaramu dan orang-orang yang diberi ilmu beberapa derajat. Allah Mahateliti terhadap apa yang kamu kerjakan." (QS Al-Mujadilah [58]: 11)

Ayat ini menempatkan pencarian ilmu sebagai kegiatan yang bernilai tinggi. Kajian operator dalam mekanika kuantum menuntut ketelitian definisi, konsistensi aljabar, dan kedisiplinan dalam mengikuti hubungan matematis. Keteraturan tersebut dapat menjadi latihan intelektual untuk mengembangkan sikap ilmiah yang jujur dan bertanggung jawab. Ayat ini tidak diposisikan sebagai ramalan atau rumusan langsung mekanika kuantum, melainkan sebagai landasan etis bagi kesungguhan menuntut ilmu.

Hadis

وَمَنْ سَلَكَ طَرِيقًا يَلْتَمِسُ فِيهِ عِلْمًا سَهَّلَ اللَّهُ لَهُ بِهِ طَرِيقًا إِلَى الْجَنَّةِ

"Barang siapa menempuh suatu jalan untuk mencari ilmu, Allah akan memudahkan baginya dengan jalan itu suatu jalan menuju surga." (HR Muslim, no. 2699)

Hadis ini menegaskan keutamaan proses pencarian ilmu. Pemahaman mekanika kuantum tidak diperoleh hanya dengan menghafal persamaan, tetapi melalui latihan bertahap: memahami definisi operator, menguji komutasi, menyelesaikan persamaan nilai eigen, dan menafsirkan makna fisiknya. Ketekunan dalam proses ilmiah tersebut selaras dengan dorongan Islam untuk menempuh jalan ilmu secara serius dan bermanfaat.

BAB 4
OSILATOR HARMONIK

Pada Bagian 13.2 akan diperlihatkan bahwa energi suatu molekul fase gas dapat didekati sebagai jumlah energi translasi, rotasi, vibrasi, dan elektronik. Perhitungan energi elektronik dibahas dalam Bab 13 sampai Bab 17. Energi translasi adalah energi kinetik gerak molekul secara keseluruhan di dalam ruang wadah yang menampung zat tersebut. Tingkat-tingkat energi translasi dapat dipandang sebagai tingkat energi partikel dalam kotak tiga dimensi (Bagian 3.5). Tingkat energi rotasi molekul diatomik (dua atom) dapat didekati dengan tingkat energi rotor tegar dua partikel, yang dibahas pada Bagian 6.4. Beberapa tingkat energi vibrasi terendah molekul diatomik dapat didekati dengan tingkat-tingkat osilator harmonik (Bagian 4.3), sedangkan energi vibrasi molekul poliatomik dapat didekati sebagai jumlah energi vibrasi osilator harmonik dari mode-mode normal (Bagian 15.12). Persamaan Schrödinger untuk osilator harmonik diselesaikan dalam bab ini pada Bagian 4.2. Sebagai pendahuluan, Bagian 4.1 membahas metode deret pangkat untuk menyelesaikan persamaan diferensial, yang digunakan dalam penyelesaian persamaan Schrödinger osilator harmonik. Bagian 4.3 membahas vibrasi molekul. Bagian 4.4 menyajikan metode numerik untuk menentukan nilai eigen dan fungsi eigen persamaan Schrödinger satu dimensi.

4.1 Penyelesaian Persamaan Diferensial dengan Deret Pangkat

Sejauh ini kita hanya mempertimbangkan kasus ketika energi potensial V(x) merupakan suatu konstanta. Hal ini menjadikan persamaan Schrödinger sebagai persamaan diferensial homogen linear orde dua dengan koefisien konstan, yang telah kita ketahui cara penyelesaiannya. Untuk kasus ketika V berubah terhadap x, salah satu pendekatan yang berguna ialah mencoba penyelesaian persamaan Schrödinger dalam bentuk deret pangkat.

Untuk menggambarkan metode tersebut, perhatikan persamaan diferensial berikut.

$$y''(x) + c^2 y(x) = 0 \qquad (4.1)$$

dengan $c^2 > 0$. Tentu saja persamaan diferensial ini mempunyai koefisien konstan, tetapi kita tetap dapat menyelesaikannya menggunakan metode deret pangkat. Mula-mula kita mencari penyelesaiannya dengan persamaan bantu, yaitu $s^2 + c^2 = 0$. Diperoleh $s = \pm ic$. Dengan mengingat pembahasan pada Bagian 2.2 [Persamaan (2.10) dan (4.1) sama], kita memperoleh penyelesaian trigonometri ketika akar persamaan bantu berupa bilangan imajiner murni.

$$y = A \cos cx + B \sin cx \qquad (4.2)$$

dengan A dan B sebagai konstanta integrasi. Bentuk lain dari (4.2) adalah

$$y = D\sin(cx + e) \tag{4.3}$$

dengan D dan ε sebagai konstanta sembarang. Dengan menggunakan rumus sinus jumlah dua sudut, dapat diperlihatkan bahwa (4.3) ekuivalen dengan (4.2).

Sekarang kita selesaikan (4.1) dengan metode deret pangkat. Kita mulai dengan mengasumsikan bahwa penyelesaian dapat dikembangkan dalam deret Taylor (lihat Soal 4.1) di sekitar x = 0; dengan kata lain, diasumsikan bahwa

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \cdots \tag{4.4}$$

dengan a_n merupakan koefisien konstan yang harus ditentukan agar memenuhi (4.1). Dengan mendiferensialkan (4.4), diperoleh

$$y'(x) = a_1 + 2a_2 x + 3a_3 x^2 + \cdots = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n x^{n-1} \tag{4.5}$$

di mana diasumsikan bahwa diferensiasi suku demi suku sah untuk deret tersebut. (Hal ini tidak selalu benar untuk deret tak hingga.) Untuk turunan kedua y, diperoleh

$$y''(x) = 2a_2 + 3(2)a_3 x + \cdots = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)a_n x^{n-2} \tag{4.6}$$

Dengan menyubstitusikan (4.4) dan (4.6) ke dalam (4.1), diperoleh

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)a_n x^{n-2} + \sum_{n=0}^{\infty} c^2 a_n x^n = 0 \tag{4.7}$$

Kita ingin menggabungkan kedua penjumlahan pada (4.7). Jika syarat-syarat tertentu dipenuhi, dua deret tak hingga dapat dijumlahkan suku demi suku untuk memperoleh jumlahnya.

$$\sum_{j=0}^{\infty} b_j x^j + \sum_{j=0}^{\infty} c_j x^j = \sum_{j=0}^{\infty} (b_j + c_j)x^j \tag{4.8}$$

Untuk menerapkan (4.8) pada kedua penjumlahan dalam (4.7), batas penjumlahan pada masing-masing penjumlahan harus sama dan pangkat x juga harus sama. Oleh karena itu, indeks penjumlahan pada penjumlahan pertama dalam (4.7) diubah dengan mendefinisikan k ≡ n − 2. Batas n = 2 sampai ∞ bersesuaian dengan k = 0 sampai ∞, dan penggunaan n = k + 2 memberikan

$$\sum_{n=2}^{\infty} n(n-1)a_n x^{n-2} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+2)(k+1)a_{k+2}x^k = \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1)a_{n+2}x^n \tag{4.9}$$

Persamaan terakhir pada (4.9) sah karena indeks penjumlahan merupakan variabel semu; huruf yang digunakan untuk menyatakan variabel tersebut tidak memengaruhi hasil. Sebagai contoh, penjumlahan $\Sigma_{i=1}^{3}\ c_i x^i$ dan $\Sigma_{m=1}^{3}\ c_m x^m$ sama karena keduanya hanya berbeda pada huruf yang digunakan sebagai indeks semu. Kesamaan ini mudah dilihat jika kedua penjumlahan dituliskan secara lengkap:

$\Sigma_{i=1}^{3}\ c_i x^i = c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3$, dan $\Sigma_{m=1}^{3}\ c_m x^m = c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3$.

Pada kesamaan terakhir dalam (4.9), simbol indeks penjumlahan hanya diubah dari k menjadi n.

Variabel integrasi dalam integral tentu juga merupakan variabel semu, karena nilai integral tentu tidak dipengaruhi oleh huruf yang digunakan untuk variabel tersebut.

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b f(t)\,dt \tag{4.10}$$

Dengan menggunakan (4.9) dalam (4.7), kemudian menerapkan (4.8), diperoleh

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left[(n+2)(n+1)a_{n+2} + c^2 a_n\right]x^n = 0 \tag{4.11}$$

Agar (4.11) benar untuk semua nilai x, koefisien setiap pangkat x harus sama dengan nol. Untuk melihat hal ini, perhatikan persamaan

$$\sum_{j=0}^{\infty} b_j x^j = 0 \tag{4.12}$$

Dengan menetapkan x = 0 dalam (4.12), diperoleh $b_0 = 0$. Mengambil turunan pertama (4.12) terhadap x, kemudian menetapkan x = 0, memberikan $b_1 = 0$. Mengambil turunan ke-n dan menetapkan x = 0 memberikan $b_n = 0$. Karena itu, dari (4.11) diperoleh

$$(n+2)(n+1)a_{n+2} + c^2 a_n = 0 \tag{4.13}$$

$$a_{n+2} = -\frac{c^2}{(n+1)(n+2)}a_n \tag{4.14}$$

Persamaan (4.14) merupakan hubungan rekurensi. Jika nilai a_0 diketahui, (4.14) dapat digunakan untuk menentukan a_2, a_4, a_6, dan seterusnya. Jika a_1 diketahui, dapat ditentukan a_3, a_5, a_7, dan seterusnya. Karena tidak ada pembatasan terhadap nilai a_0 dan a_1, keduanya merupakan konstanta sembarang, yang dinyatakan sebagai A dan Bc.

$$a_0 = A, \quad a_1 = Bc \tag{4.15}$$

Dengan menggunakan (4.14), koefisien-koefisiennya diperoleh sebagai berikut.

$$a_0 = A, \quad a_2 = -\frac{c^2 A}{1 \cdot 2}, \quad a_4 = \frac{c^4 A}{4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1}, \quad a_6 = -\frac{c^6 A}{6!}, \ldots$$

$$a_{2k} = (-1)^k \frac{c^{2k} A}{(2k)!}, \quad k = 0, 1, 2, 3, \ldots \tag{4.16}$$

$$a_1 = Bc, \quad a_3 = -\frac{c^3 B}{2 \cdot 3}, \quad a_5 = \frac{c^5 B}{5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2}, \quad a_7 = -\frac{c^7 B}{7!}, \ldots$$

$$a_{2k+1} = (-1)^k \frac{c^{2k+1} B}{(2k+1)!}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots \tag{4.17}$$

Dari (4.4), (4.16), dan (4.17), diperoleh

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n = \sum_{n=0, 2, 4, \ldots}^{\infty} a_n x^n + \sum_{n=1, 3, 5, \ldots}^{\infty} a_n x^n \tag{4.18}$$

$$y = A \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{c^{2k} x^{2k}}{(2k)!} + B \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{c^{2k+1} x^{2k+1}}{(2k+1)!} \tag{4.19}$$

Kedua deret dalam (4.19) adalah deret Taylor untuk cos cx dan sin cx (Soal 4.2). Karena itu, sesuai dengan (4.2), diperoleh y = A cos cx + B sin cx.

4.2 Osilator Harmonik Satu Dimensi

Pada bagian ini, cakupan mekanika kuantum kita diperluas dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger bagi osilator harmonik satu dimensi. Sistem ini penting sebagai model vibrasi molekul.

Perlakuan Mekanika Klasik

Sebelum menelaah mekanika gelombang osilator harmonik, kita meninjau perlakuan klasiknya. Dipertimbangkan satu partikel bermassa m yang tertarik menuju titik asal oleh gaya yang sebanding dengan simpangan partikel dari titik asal.

$$F_x = -kx \tag{4.20}$$

Konstanta kesebandingan k disebut konstanta gaya. F_x adalah komponen x dari gaya yang bekerja pada partikel. Dalam masalah satu dimensi ini, F_x sekaligus merupakan gaya total. Persamaan (4.20) dipenuhi oleh partikel yang terikat pada pegas, selama pegas tidak diregangkan terlalu jauh dari kedudukan setimbangnya.

Hukum kedua Newton, F = ma, memberikan

$$-kx = m \frac{d^2 x}{dt^2} \tag{4.21}$$

dengan t menyatakan waktu. Persamaan (4.21) sama dengan Persamaan (4.1) jika $c^2 = k/m$; oleh karena itu, penyelesaiannya adalah [Persamaan (4.3) dengan $c = (k/m)^{1/2}$]

$$x = A\sin(2\pi\nu t + b) \tag{4.22}$$

dengan A (amplitudo vibrasi) dan β sebagai konstanta integrasi, sedangkan frekuensi vibrasi ν adalah

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{k}{m}\right)^{1/2} \tag{4.23}$$

Karena fungsi sinus mempunyai nilai maksimum 1 dan minimum −1, x dalam (4.22) berosilasi di antara A dan −A. Fungsi sinus mengulang dirinya setiap 2π radian, dan waktu yang dibutuhkan untuk satu osilasi lengkap, yang disebut periode, ialah waktu yang diperlukan agar argumen fungsi sinus bertambah sebesar 2π. Pada waktu t + 1/ν, argumen fungsi sinus menjadi $2\pi\nu(t + 1/\nu) + \beta = 2\pi\nu t + 2\pi + \beta$, yaitu 2π lebih besar daripada argumen pada waktu t. Dengan demikian, periodenya adalah 1/ν. Kebalikan periode merupakan jumlah vibrasi per satuan waktu, yaitu frekuensi vibrasi; karena itu frekuensinya adalah ν.

Sekarang perhatikan energi. Dalam kasus tiga dimensi, energi potensial V berhubungan dengan komponen-komponen gaya melalui

$$F_x = -\frac{\partial V}{\partial x}, \quad F_y = -\frac{\partial V}{\partial y}, \quad F_z = -\frac{\partial V}{\partial z} \tag{4.24}$$

Persamaan (4.24) merupakan definisi energi potensial. Karena masalah ini satu dimensi, diperoleh [Persamaan (1.12)]

$$F_x = -\frac{dV}{dx} = -kx \tag{4.25}$$

Integrasi (4.25) memberikan $V = \int kx\,dx = \frac{1}{2}kx^2 + C$, dengan C sebagai konstanta. Energi potensial selalu mempunyai konstanta aditif sembarang. Dengan memilih C = 0, diperoleh [Persamaan (4.23)]

$$V = \tfrac{1}{2}kx^2 \tag{4.26}$$

$$V = 2\pi^2\nu^2 m x^2 \tag{4.27}$$

Grafik V(x) berupa parabola (Gambar 4.5). Energi kinetik T adalah

$$T = \tfrac{1}{2}m(dx/dt)^2 \tag{4.28}$$

dan dapat ditentukan dengan mendiferensialkan (4.22) terhadap t. Dengan menjumlahkan T dan V, energi total diperoleh (Soal 4.4)

$$E = T + V = \tfrac{1}{2}kA^2 = 2\pi^2\nu^2 mA^2 \qquad (4.29)$$

dengan menggunakan identitas sin²u + cos²u = 1.

Menurut (4.22), osilator harmonik klasik bergetar bolak-balik di antara x = A dan x = −A. Kedua titik ini merupakan titik balik gerak. Kecepatan partikel nol pada titik-titik tersebut, kemudian meningkat hingga maksimum pada x = 0, tempat energi potensial sama dengan nol dan seluruh energi menjadi energi kinetik. Osilator harmonik klasik menghabiskan waktu lebih lama di daerah dekat x = A dan x = −A, ketika geraknya paling lambat, daripada di daerah dekat x = 0. Soal 4.18 menurunkan rapat probabilitas untuk menemukan osilator harmonik klasik pada berbagai kedudukan. Menariknya, rapat probabilitas tersebut menjadi tak hingga pada titik-titik balik.

Perlakuan Mekanika Kuantum

Operator Hamiltonian osilator harmonik adalah [Persamaan (3.27) dan (4.27)]

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + 2\pi^2\nu^2 mx^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} - \alpha^2 x^2\right) \qquad (4.30)$$

di mana, untuk menghemat penulisan, α didefinisikan sebagai

$$\alpha \equiv 2\pi\nu m/\hbar \qquad (4.31)$$

Persamaan Schrödinger $\hat{H}\psi = E\psi$, setelah dikalikan dengan $2m/\hbar^2$, menjadi

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (2mE\hbar^{-2} - \alpha^2 x^2)\psi = 0 \qquad (4.32)$$

Sekarang kita dapat mencoba penyelesaian deret pangkat untuk (4.32). Jika ψ langsung dicoba dalam bentuk (4.4), akan diperoleh hubungan rekurensi tiga suku, yang lebih sulit ditangani daripada hubungan rekurensi dua suku seperti Persamaan (4.14). Oleh karena itu, bentuk (4.32) dimodifikasi agar ketika dicoba dengan penyelesaian deret, diperoleh hubungan rekurensi dua suku. Substitusi yang mencapai tujuan tersebut adalah f(x) ≡ e^(αx²/2)ψ(x) (lihat Soal 4.22). Dengan demikian,

$$\psi = e^{-\alpha x^2/2} f(x) \qquad (4.33)$$

Persamaan ini sekadar mendefinisikan fungsi baru f(x), yang menggantikan ψ(x) sebagai fungsi tak diketahui yang harus diselesaikan. Dalam persamaan diferensial, kita bebas membuat substitusi yang sesuai. Dengan mendiferensialkan (4.33) dua kali, diperoleh

$$\psi'' = e^{-\alpha x^2/2}(f'' - 2\alpha x f' - \alpha f + \alpha^2 x^2 f) \qquad (4.34)$$

Dengan menyubstitusikan (4.33) dan (4.34) ke dalam (4.32), diperoleh

$$f''(x) - 2\alpha x f'(x) + (2mE\hbar^{-2} - \alpha)f(x) = 0 \qquad (4.35)$$

Sekarang dicoba penyelesaian deret untuk f(x):

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n \qquad (4.36)$$

Dengan mengasumsikan diferensiasi suku demi suku terhadap (4.36) sah, diperoleh

$$f'(x) = \sum_{n=1}^{\infty} n c_n x^{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} n c_n x^{n-1} \qquad (4.37)$$

Suku pertama pada penjumlahan kedua dalam (4.37) sama dengan nol. Selain itu,

$f''(x) = \Sigma_{n=2}^{\infty} n(n-1)c_n x^{n-2} = \Sigma_{j=0}^{\infty} (j+2)(j+1)c_{j+2}x^j = \Sigma_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1)c_{n+2}x^n,$

karena dilakukan substitusi $j = n - 2$, kemudian indeks penjumlahan diubah dari j menjadi n [lihat Persamaan (4.9)]. Substitusi ke dalam (4.35) memberikan

$\Sigma_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1)c_{n+2}x^n - 2\alpha\Sigma_{n=0}^{\infty} n c_n x^n + (2mE\hbar^{-2} - \alpha)\Sigma_{n=0}^{\infty} c_n x^n = 0,$

dan dengan menggabungkan penjumlahan diperoleh

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[(n+2)(n+1)c_{n+2} - 2\alpha n c_n + (2mE\hbar^{-2} - \alpha)c_n \right] x^n = 0 \qquad (4.38)$$

Dengan menetapkan koefisien x^n sama dengan nol, atas alasan yang sama seperti dalam Persamaan (4.11), diperoleh

$$c_{n+2} = \frac{\alpha + 2\alpha n - 2mE\hbar^{-2}}{(n+1)(n+2)} c_n \qquad (4.39)$$

yang merupakan hubungan rekurensi dua suku yang dikehendaki. Persamaan (4.39) mempunyai bentuk yang sama dengan (4.14), karena dengan mengetahui c_n kita dapat menghitung c_{n+2}. Dengan demikian terdapat dua konstanta sembarang, yaitu c_0 dan c_1. Jika c_1 ditetapkan sama dengan nol, penyelesaiannya berupa deret pangkat yang hanya mengandung pangkat genap x, dikalikan faktor eksponensial:

$$\psi = e^{-\alpha x^2/2} f(x) = e^{-\alpha x^2/2} \sum_{n=0,2,4,\ldots}^{\infty} c_n x^n = e^{-\alpha x^2/2} \sum_{l=0}^{\infty} c_{2l} x^{2l} \qquad (4.40)$$

Jika c_0 ditetapkan sama dengan nol, diperoleh penyelesaian bebas yang lain:

$$\psi = e^{-\alpha x^2/2} \sum_{n=1,3,\ldots}^{\infty} c_n x^n = e^{-\alpha x^2/2} \sum_{l=0}^{\infty} c_{2l+1} x^{2l+1} \qquad (4.41)$$

Penyelesaian umum persamaan Schrödinger merupakan kombinasi linear kedua penyelesaian bebas tersebut [ingat Persamaan (2.4)]:

$$\psi = Ae^{-\alpha x^2/2} \sum_{l=0}^{\infty} c_{2l+1} x^{2l+1} + Be^{-\alpha x^2/2} \sum_{l=0}^{\infty} c_{2l} x^{2l} \qquad (4.42)$$

dengan A dan B sebagai konstanta sembarang.

Sekarang harus diperiksa apakah syarat batas fungsi gelombang memberikan pembatasan pada penyelesaian. Untuk mengetahui perilaku kedua deret tak hingga pada x besar, ditelaah rasio koefisien yang berurutan pada masing-masing deret. Rasio koefisien x^{2l+2} terhadap koefisien x^{2l} pada deret kedua, dengan menetapkan n = 2l dalam (4.39), adalah

$c_{2l+2}/c_{2l} = [\alpha + 4\alpha l - 2mE\hbar^{-2}]/[(2l + 1)(2l + 2)]$.

Dengan mengasumsikan bahwa pada x besar suku-suku akhir deret menjadi dominan, rasio ini ditinjau untuk l besar.

$$\frac{c_{2l+2}}{c_{2l}} \quad \frac{4\alpha l}{(2l)(2l)} = \frac{\alpha}{l} \quad \text{for } l \text{ large} \qquad (4.43)$$

Dengan menetapkan n = 2l + 1 dalam (4.39), diperoleh bahwa untuk l besar, rasio koefisien berturutan pada deret pertama juga sama dengan α/l. Sekarang perhatikan pengembangan deret pangkat fungsi e^(αx²). Dengan menggunakan (Soal 4.3)

$$e^z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} = 1 + z + \frac{z^2}{2!} + \cdots \qquad (4.44)$$

diperoleh

$e^{(\alpha x^2)} = 1 + \alpha x^2 + \cdots + \alpha^l x^{2l}/l! + \alpha^{l+1} x^{2l+2}/(l + 1)! + \cdots$.

Rasio koefisien x^{2l+2} dan x^{2l} dalam deret ini adalah

$[\alpha^{l+1}/(l + 1)!] \div [\alpha^l/l!] = \alpha/(l + 1) \approx \alpha/l$ untuk l besar.

Jadi, untuk l besar, rasio koefisien berturutan pada masing-masing deret tak hingga dalam penyelesaian (4.42) sama dengan rasio pada deret e^(αx²). Disimpulkan bahwa untuk x besar, masing-masing deret berperilaku sebagai e^(αx²). Kesimpulan ini bukan pembuktian ketat. Penurunan matematis yang tepat diberikan oleh H. A. Buchdahl, American Journal of Physics, 42, 47 (1974), dan M. Bowen serta J. Coster, American Journal of Physics, 48, 307 (1980).

Jika masing-masing deret berperilaku sebagai e^(αx²), maka (4.42) menunjukkan bahwa ψ akan berperilaku sebagai e^(αx²/2) untuk x besar. Fungsi gelombang akan menjadi tak hingga ketika x menuju tak hingga dan tidak dapat diintegralkan kuadratnya. Jika deret dapat dihentikan setelah sejumlah suku berhingga, faktor e^(−αx²/2) akan menjamin bahwa ψ menuju nol ketika x menjadi tak hingga. Dengan aturan l'Hôpital, mudah diperlihatkan bahwa $x^p e^{(-\alpha x^2/2)}$ menuju nol

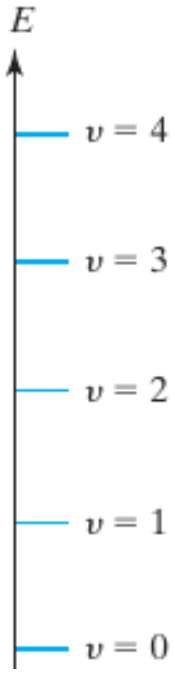
ketika x → ∞ untuk setiap pangkat berhingga p. Agar salah satu deret berhenti setelah sejumlah suku berhingga, koefisien c_n pada hubungan rekurensi (4.39) harus menjadi nol untuk suatu nilai n, misalnya n = v. Hal ini membuat c_{v+2}, c_{v+4}, dan seterusnya sama dengan nol sehingga salah satu deret dalam (4.42) hanya mempunyai jumlah suku berhingga. Dalam hubungan rekurensi (4.39), terdapat satu besaran yang nilainya belum ditentukan dan dapat disesuaikan agar koefisien c_v menjadi nol, yaitu energi E. Dengan menetapkan koefisien c_v sama dengan nol dalam (4.39) dan menggunakan (4.31) untuk α, diperoleh

$\alpha + 2\alpha v - 2mE\hbar^{-2} = 0,$

$2mE\hbar^{-2} = (2v + 1)2\pi\nu m\hbar^{-1},$

$$E = (v + \tfrac{1}{2})h\nu, \quad v = 0, 1, 2, \ldots \qquad \textbf{(4.45)}$$

Tingkat-tingkat energi keadaan stasioner osilator harmonik dalam (4.45) berjarak sama (Gambar 4.1). Jangan mencampuradukkan bilangan kuantum v, yang dibaca "ve", dengan frekuensi vibrasi ν, yang dibaca "nu".



Gambar 4.1. Lima tingkat energi terendah osilator harmonik satu dimensi.

Substitusi (4.45) ke dalam hubungan rekurensi (4.39) memberikan

$$c_{n+2} = \frac{2\alpha(n - v)}{(n + 1)(n + 2)}c_n \qquad (4.46)$$

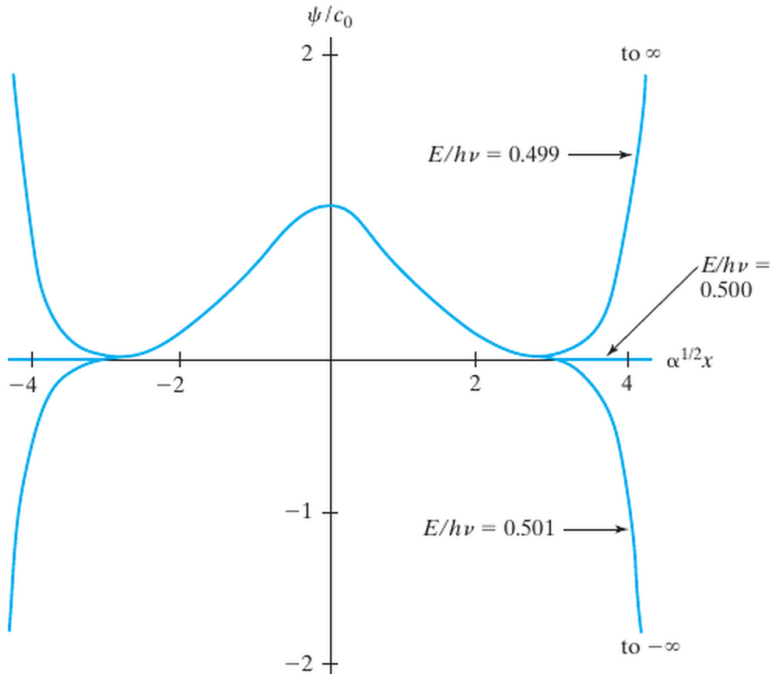
Dengan menguantisasi energi menurut (4.45), salah satu deret dibuat berhenti setelah sejumlah suku berhingga. Untuk menghilangkan deret tak hingga lainnya dalam (4.42), konstanta sembarang yang mengalikannya harus ditetapkan sama

dengan nol. Dengan demikian, fungsi gelombang yang tersisa adalah e^(−αx²/2) dikalikan deret pangkat berhingga yang hanya mengandung pangkat genap atau hanya pangkat ganjil x, bergantung pada apakah v genap atau ganjil. Pangkat x tertinggi dalam deret tersebut adalah x^v, karena E dipilih agar c_{v+2}, c_{v+4}, dan seterusnya sama dengan nol. Fungsi gelombang dalam (4.42) menjadi

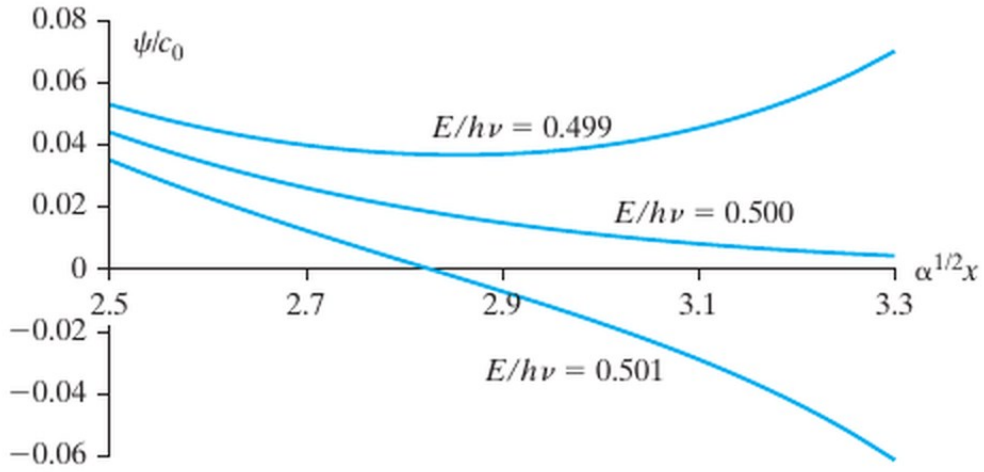
$$\psi_v = \begin{cases} e^{-\alpha x^2/2}(c_0 + c_2 x^2 + \cdots + c_v x^v) & \text{for } v \text{ even} \\ e^{-\alpha x^2/2}(c_1 x + c_3 x^3 + \cdots + c_v x^v) & \text{for } v \text{ odd} \end{cases} \qquad (4.47)$$

dengan konstanta sembarang A dan B dalam (4.42) dapat diserap masing-masing ke dalam c_1 dan c_0 sehingga dapat dihilangkan. Koefisien sesudah c_0 dan c_1 diperoleh dari hubungan rekurensi (4.46). Karena bilangan kuantum v muncul dalam hubungan rekurensi, diperoleh himpunan koefisien c_i yang berbeda untuk setiap nilai v. Sebagai contoh, c_2 pada ψ_4 berbeda dengan c_2 pada ψ_2.

Sebagaimana pada partikel dalam kotak, persyaratan agar fungsi gelombang berperilaku baik memaksa energi menjadi terkuantisasi. Untuk nilai E yang berbeda dari (4.45), ψ tidak dapat diintegralkan kuadratnya. Sebagai contoh, Gambar 4.2 memperlihatkan ψ dari Persamaan (4.40) untuk E/hν = 0,499; 0,500; dan 0,501, dengan hubungan rekurensi (4.39) digunakan untuk menghitung koefisien c_n (lihat juga Soal 4.23). Gambar 4.3 menunjukkan pembesaran kurva-kurva tersebut di sekitar $\alpha^{1/2}x = 3$.



Gambar 4.2. Grafik penyelesaian persamaan Schrödinger osilator harmonik yang hanya memuat pangkat genap x untuk E = 0,499hv, E = 0,500hv, dan E = 0,501hv. Di sekitar x = 0, ketiga kurva hampir berimpit; untuk $|\alpha^{1/2}x| > 3$, kurva E = 0,500hv hampir berimpit dengan sumbu x.



Gambar 4.3. Pembesaran Gambar 4.2 pada daerah $\alpha^{1/2}x = 3$.

Energi keadaan dasar osilator harmonik tidak nol. Energi sebesar ½hν ini disebut energi titik nol. Energi tersebut merupakan energi vibrasi suatu osilator harmonik di dalam kumpulan osilator harmonik pada suhu nol mutlak. Energi titik nol dapat dipahami melalui asas ketidakpastian. Jika keadaan terendah mempunyai energi nol, energi potensial dan energi kinetiknya, yang keduanya tidak negatif, harus sama dengan nol. Energi kinetik nol berarti momentum tepat nol sehingga $\Delta p_x = 0$. Energi potensial nol berarti partikel selalu berada tepat di titik asal sehingga $\Delta x = 0$. Akan tetapi, Δx dan Δp_x tidak mungkin sekaligus sama dengan nol. Karena itu, keadaan dasar harus memiliki energi tidak nol. Gagasan yang sama berlaku bagi partikel dalam kotak. Definisi energi titik nol adalah E_ZPE = E_gs − V_min, dengan E_gs sebagai energi keadaan dasar dan V_min sebagai nilai minimum fungsi energi potensial.

Fungsi Genap dan Fungsi Ganjil

Sebelum membahas fungsi gelombang secara terperinci, didefinisikan fungsi genap dan fungsi ganjil. Jika f(x) memenuhi

$$f(-x) = f(x) \qquad \textbf{(4.48)}$$

maka f adalah fungsi genap terhadap x. Jadi, x^2 dan e^(−bx²) keduanya merupakan fungsi genap karena $(-x)^2 = x^2$ dan e^(−b(−x)²) = e^(−bx²). Grafik fungsi genap simetris terhadap sumbu y, seperti pada Gambar 4.4a. Oleh karena itu,

$$\int_{-a}^{+a} f(x)\,dx = 2\int_{0}^{a} f(x)\,dx \quad \text{for } f(x) \text{ even} \qquad \textbf{(4.49)}$$

Jika g(x) memenuhi

$$g(-x) = -g(x) \qquad \textbf{(4.50)}$$

maka g adalah fungsi ganjil terhadap x. Contohnya adalah x, 1/x, dan $x^3e^{\wedge}(x^2)$. Dengan menetapkan x = 0 dalam (4.50), terlihat bahwa fungsi ganjil harus bernilai nol pada x = 0, asalkan g(0) didefinisikan dan bernilai tunggal. Grafik fungsi ganjil mempunyai bentuk umum seperti Gambar 4.4b. Karena kontribusi positif pada satu sisi sumbu y dibatalkan oleh kontribusi negatif yang bersesuaian pada sisi lainnya, diperoleh

$$\int_{-a}^{+a} g(x)\,dx = 0 \quad \text{for } g(x) \text{ odd} \tag{4.51}$$

Mudah diperlihatkan bahwa hasil kali dua fungsi genap atau dua fungsi ganjil merupakan fungsi genap, sedangkan hasil kali fungsi genap dan fungsi ganjil merupakan fungsi ganjil.

Fungsi Gelombang Osilator Harmonik

Faktor eksponensial $e^{\wedge}(-\alpha x^2/2)$ dalam (4.47) merupakan fungsi genap terhadap x. Jika v genap, faktor polinomial hanya mengandung pangkat genap x sehingga ψ_v merupakan fungsi genap. Jika v ganjil, faktor polinomial hanya mengandung pangkat ganjil x dan ψ_v, sebagai hasil kali fungsi genap dan fungsi ganjil, merupakan fungsi ganjil. Setiap keadaan stasioner osilator harmonik merupakan fungsi genap atau ganjil, sesuai dengan apakah bilangan kuantum v genap atau ganjil. Pada Bagian 7.5 akan diperlihatkan bahwa ketika energi potensial V merupakan fungsi genap, fungsi gelombang tingkat yang tidak terdegenerasi harus berupa fungsi genap atau fungsi ganjil.

Sekarang ditentukan bentuk eksplisit fungsi gelombang untuk tiga tingkat terendah. Untuk keadaan dasar v = 0, Persamaan (4.47) memberikan

$$\psi_0 = c_0 e^{-\alpha x^2/2} \tag{4.52}$$

dengan subskrip pada ψ menyatakan nilai v. Konstanta c_0 ditentukan melalui normalisasi:

$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |c_0|^2 e^{\wedge}(-\alpha x^2)\,dx = 2|c_0|^2 \int_0^{\infty} e^{\wedge}(-\alpha x^2)\,dx,$

dengan menggunakan Persamaan (4.49). Dengan integral (A.9) dalam Lampiran, diperoleh $|c_0| = (\alpha/\pi)^{1/4}$. Karena itu,

$$\psi_0 = (\alpha/\pi)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} \tag{4.53}$$

jika fase konstanta normalisasi dipilih nol. Fungsi gelombang (4.53) merupakan fungsi Gaussian (Gambar 4.4a).

Untuk keadaan v = 1, Persamaan (4.47) memberikan

$$\psi_1 = c_1 x e^{-\alpha x^2/2} \tag{4.54}$$

Setelah dinormalisasi menggunakan integral pada Persamaan (A.10), diperoleh

$$\psi_1 = (4\alpha^3/\pi)^{1/4} x e^{-\alpha x^2/2} \qquad (4.55)$$

Gambar 4.4b memperlihatkan ψ_1.

Untuk v = 2, Persamaan (4.47) memberikan

$\psi_2 = (c_0 + c_2x^2)e^{\wedge}(-\alpha x^2/2)$.

Hubungan rekurensi (4.46) dengan v = 2 memberikan

$c_2 = [2\alpha(-2)/(1\cdot 2)]c_0 = -2\alpha c_0$.

Dengan demikian,

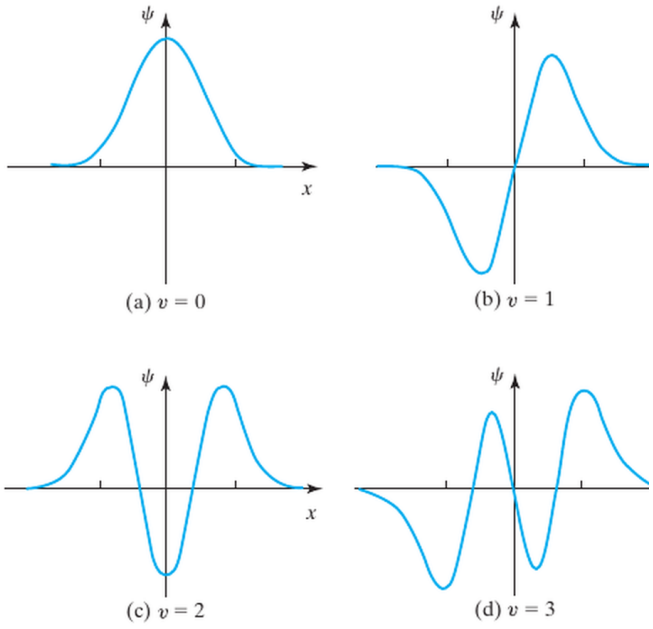
$$\psi_2 = c_0(1 - 2\alpha x^2)e^{-\alpha x^2/2} \qquad (4.56)$$

Dengan menentukan c_0 melalui normalisasi, diperoleh (Soal 4.10)

$$\psi_2 = (\alpha/4\pi)^{1/4}(2\alpha x^2 - 1)e^{-\alpha x^2/2} \qquad (4.57)$$

Perhatikan bahwa c_0 pada ψ_2 tidak sama dengan c_0 pada ψ_0.

Jumlah simpul fungsi gelombang sama dengan bilangan kuantum v. Dapat dibuktikan bahwa untuk keadaan stasioner terikat suatu masalah satu dimensi, jumlah simpul di bagian dalam batas adalah nol untuk fungsi gelombang keadaan dasar dan bertambah satu untuk setiap keadaan tereksitasi berikutnya. Titik batas osilator harmonik adalah $\pm\infty$. Selain itu, fungsi gelombang satu dimensi harus berubah tanda ketika melewati simpul (lihat Soal 4.45).



Gambar 4.4. Fungsi gelombang osilator harmonik. Skala yang sama digunakan untuk semua grafik. Titik-titik pada sumbu x menandai $\alpha^{1/2}x = \pm 2$.

Faktor-faktor polinomial dalam fungsi gelombang osilator harmonik dikenal dalam matematika sebagai polinomial Hermite, dinamai menurut seorang matematikawan Prancis (lihat Soal 4.21).

Menurut penyelesaian mekanika kuantum, terdapat probabilitas untuk menemukan partikel pada setiap titik di sumbu x, kecuali pada simpul. Secara klasik, $E = T + V$ dan energi kinetik T tidak dapat negatif, sehingga $T \geq 0$. Karena itu, $E - V = T \geq 0$ dan $V \leq E$. Energi potensial V merupakan fungsi posisi; partikel klasik terbatas pada daerah ruang yang memenuhi $V \leq E$, yaitu daerah ketika energi potensial tidak melampaui energi total. Pada Gambar 4.5, garis horizontal berlabel E menyatakan energi osilator harmonik dan kurva parabola menyatakan energi potensial $\frac{1}{2}kx^2$. Untuk daerah $x < -a$ dan $x > a$, $V > E$ sehingga daerah-daerah ini terlarang secara klasik. Daerah yang diizinkan secara klasik pada Gambar 4.5 adalah $-a \leq x \leq a$, tempat $V \leq E$.

Dalam mekanika kuantum, fungsi gelombang keadaan stasioner bukan fungsi eigen operator T atau V sehingga tidak dapat diberikan nilai tertentu untuk T atau V pada suatu keadaan stasioner. Sebagai pengganti persamaan klasik $E = T + V$ dan $T \geq 0$, dalam mekanika kuantum berlaku $E = \langle T \rangle + \langle V \rangle$ dan $\langle T \rangle \geq 0$, sehingga $\langle V \rangle \leq E$. Akan tetapi, tidak dapat dituliskan $V \leq E$, dan partikel memiliki probabilitas untuk ditemukan dalam daerah terlarang secara klasik ketika $V > E$.

Mungkin tampak bahwa pernyataan partikel dapat ditemukan di luar daerah yang diizinkan secara klasik berarti partikel diizinkan mempunyai energi kinetik negatif. Sebenarnya tidak ada paradoks dalam pandangan mekanika kuantum. Untuk memastikan partikel berada dalam daerah terlarang secara klasik, posisinya harus diukur. Pengukuran ini mengubah keadaan sistem. Interaksi osilator dengan alat ukur memindahkan cukup energi kepada osilator sehingga ia dapat berada di daerah terlarang secara klasik. Pengukuran x yang teliti menimbulkan ketidakpastian besar pada momentum dan dengan demikian pada energi kinetik. Penetrasi ke daerah terlarang secara klasik telah dibahas pada Bagian 2.4 dan 2.5.

Keadaan stasioner osilator harmonik mempunyai $E = (v + \frac{1}{2})h\nu$ dan $V = \frac{1}{2}kx^2 = 2\pi^2\nu^2mx^2$. Karena itu, daerah yang diizinkan secara klasik, $V \leq E$, memenuhi $2\pi^2\nu^2mx^2 \leq (v + \frac{1}{2})h\nu$, sehingga $x^2 \leq (2v + 1)/\alpha$, dengan $\alpha \equiv 2\pi\nu m/\hbar$ [Persamaan (4.31)]. Jadi, daerah yang diizinkan secara klasik untuk osilator harmonik adalah $-(2v + 1)^{1/2} \leq \alpha^{1/2}x \leq (2v + 1)^{1/2}$.

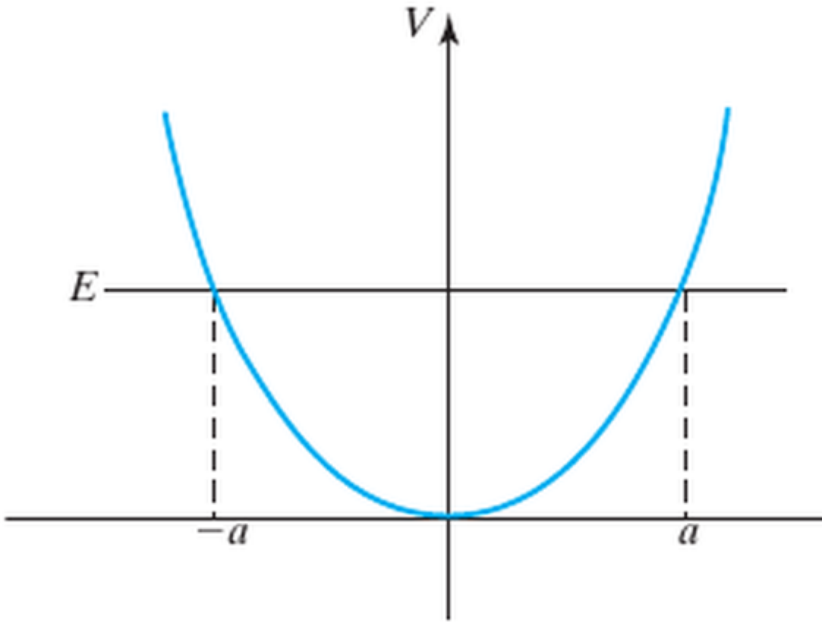
Dari Gambar 4.4 terlihat bahwa ψ berosilasi di daerah yang diizinkan secara klasik dan menurun secara eksponensial menuju nol di daerah yang terlarang secara klasik. Perilaku ini sebelumnya telah terlihat pada partikel dalam sumur persegi panjang (Bagian 2.4).

Gambar 4.4 juga menunjukkan bahwa ketika menuju keadaan osilator harmonik berenergi lebih tinggi, maksimum ψ dan $|\psi|^2$ cenderung semakin jauh dari titik

asal. Karena $V = \frac{1}{2}kx^2$ meningkat ketika semakin jauh dari titik asal, energi potensial rata-rata $\langle V \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 V \, dx$ meningkat ketika bilangan kuantum meningkat. Energi kinetik rata-rata diberikan oleh $\langle T \rangle = -(\hbar^2/2m)\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi'' \, dx$. Integrasi parsial memberikan $\langle T \rangle = (\hbar^2/2m)\int_{-\infty}^{\infty} |d\psi/dx|^2 \, dx$. Jumlah simpul yang lebih banyak pada keadaan dengan bilangan kuantum lebih tinggi menghasilkan laju perubahan ψ yang lebih cepat, sehingga $\langle T \rangle$ meningkat ketika bilangan kuantum meningkat.

Osilator harmonik klasik paling mungkin ditemukan di daerah dekat titik balik gerak, tempat osilator bergerak paling lambat dan V besar. Sebaliknya, untuk keadaan dasar osilator harmonik kuantum, daerah yang paling mungkin adalah daerah sekitar titik asal. Untuk bilangan kuantum osilator yang tinggi, puncak luar $|\psi|^2$ menjadi lebih besar daripada puncak dekat titik asal, dan daerah paling mungkin bergeser mendekati titik balik klasik, tempat V besar (lihat Soal 4.18). Ini merupakan contoh asas korespondensi (Bagian 2.2).

Beberapa simulasi daring osilator harmonik kuantum tersedia pada www.phy.davidson.edu/StuHome/cabell_f/energy.html, yang memperlihatkan tingkat energi dan fungsi gelombang serta menunjukkan bagaimana fungsi gelombang menyimpang ketika energi diubah dari nilai yang diizinkan; www.falstad.com/qm1d/, dengan memilih harmonic oscillator dari menu tarik-turun di bagian atas dan mengklik ganda salah satu lingkaran kecil di bagian bawah untuk menampilkan keadaan stasioner, energi, fungsi gelombang, dan rapat probabilitas serta mengubah m dan k; dan demonstrations.wolfram.com/HarmonicOscillatorEigenfunctions, yang memperlihatkan $|\psi_v|^2$.



Gambar 4.5. Daerah yang diizinkan secara klasik ($-a \le x \le a$) dan daerah terlarang ($x < -a$ dan $x > a$) bagi osilator harmonik.

4.3 Vibrasi Molekul Diatomik

Pada Bagian 13.1 akan diperlihatkan bahwa, dengan pendekatan yang sangat baik, gerak elektron dan gerak inti dalam molekul dapat diperlakukan secara terpisah. Hal ini disebabkan oleh massa inti yang jauh lebih besar. Mula-mula inti dibayangkan diam, kemudian persamaan Schrödinger diselesaikan untuk memperoleh energi elektronik U. Besaran U juga mencakup energi tolak-menolak antarnukleus. Untuk molekul diatomik, energi elektronik U bergantung pada jarak R di antara kedua inti, U = U(R), dan kurva U terhadap R mempunyai bentuk umum seperti Gambar 13.1.

Setelah U(R) diperoleh, persamaan Schrödinger untuk gerak inti diselesaikan dengan menggunakan U(R) sebagai energi potensial gerak inti. Untuk molekul diatomik, persamaan Schrödinger inti merupakan persamaan dua partikel. Pada Bagian 6.3 akan diperlihatkan bahwa ketika energi potensial sistem dua partikel hanya bergantung pada jarak di antara kedua partikel, energi sistem merupakan jumlah: (a) energi kinetik gerak translasi seluruh sistem melalui ruang dan (b) energi gerak internal kedua partikel relatif satu sama lain. Ungkapan klasik untuk energi gerak internal dua partikel ternyata merupakan jumlah energi potensial interaksi antarkeduanya dan energi kinetik suatu partikel hipotetis yang massanya $m_1m_2/(m_1 + m_2)$, dengan koordinat berupa koordinat satu partikel relatif terhadap partikel lainnya. Besaran $m_1m_2/(m_1 + m_2)$ disebut massa tereduksi μ.

Gerak internal molekul diatomik terdiri atas vibrasi, yang bersesuaian dengan perubahan jarak R antara kedua inti, dan rotasi, yang bersesuaian dengan perubahan orientasi ruang garis penghubung kedua inti. Dengan pendekatan yang baik, gerak vibrasi dan rotasi biasanya dapat diperlakukan secara terpisah. Tingkat energi rotasi ditentukan pada Bagian 6.4. Di sini dibahas tingkat vibrasi.

Persamaan Schrödinger vibrasi molekul diatomik mempunyai operator energi kinetik untuk partikel hipotetis bermassa $\mu = m_1m_2/(m_1 + m_2)$ dan suku energi potensial U(R). Jika titik asal ditempatkan pada titik minimum kurva U dan nol energi potensial dipilih pada energi titik minimum tersebut, bagian bawah kurva U(R) hampir berimpit dengan kurva energi potensial osilator harmonik yang memiliki konstanta gaya k yang sesuai (lihat Gambar 4.6 dan Soal 4.28). Minimum kurva U(R) terjadi pada jarak setimbang R_e antara kedua inti. Pada Gambar 4.6, x adalah penyimpangan jarak antarnukleus dari nilai setimbangnya, $x \equiv R - R_e$.

Konstanta gaya osilator harmonik k pada Persamaan (4.26) diperoleh sebagai $k = d^2V/dx^2$. Karena kurva osilator harmonik pada dasarnya berimpit dengan kurva U(R) di $R = R_e$, konstanta gaya molekul adalah $k = (d^2U/dR^2)|R=R_e$ (lihat juga Soal 4.28). Perbedaan massa inti hampir tidak memengaruhi kurva energi elektronik U(R), sehingga spesies isotop berbeda dari molekul yang sama pada dasarnya mempunyai konstanta gaya k yang sama.

Oleh karena itu, pendekatan yang masuk akal untuk tingkat energi vibrasi E_vib molekul diatomik adalah tingkat energi vibrasi osilator harmonik. Persamaan (4.45) dan (4.23) memberikan

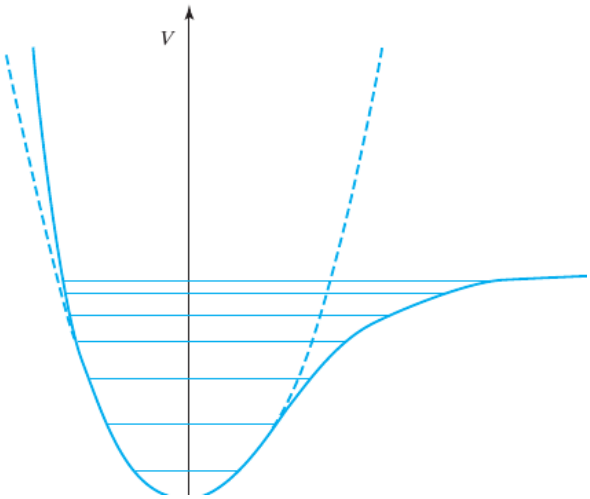
$$E_{\text{vib}} \approx (v + \tfrac{1}{2})h\nu_e, \quad v = 0, 1, 2, \ldots \tag{4.58}$$

$$\nu_e = \frac{1}{2\pi}\left(\frac{k}{\mu}\right)^{1/2}, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad k = \left.\frac{d^2U}{dR^2}\right|_{R=R_e} \tag{4.59}$$

ν_e disebut frekuensi vibrasi setimbang atau frekuensi vibrasi harmonik. Pendekatan ini paling baik untuk tingkat vibrasi rendah. Ketika v meningkat, inti menghabiskan lebih banyak waktu di daerah yang jauh dari jarak setimbang. Pada daerah tersebut, energi potensial menyimpang secara berarti dari energi potensial osilator harmonik sehingga pendekatan osilator harmonik menjadi buruk. Alih-alih berjarak sama, tingkat vibrasi molekul diatomik semakin berdekatan ketika v meningkat (Gambar 4.6). Pada akhirnya, energi vibrasi cukup besar untuk mendisosiasikan molekul diatomik menjadi atom-atom yang tidak lagi terikat. Berbeda dari osilator harmonik, molekul diatomik hanya mempunyai jumlah tingkat vibrasi keadaan terikat yang berhingga. Ungkapan energi vibrasi molekul yang lebih teliti dan memperhitungkan anarmonitas vibrasi adalah

$$E_{\text{vib}} = (v + \tfrac{1}{2})h\nu_e - (v + \tfrac{1}{2})^2 h\nu_e x_e \tag{4.60}$$

dengan konstanta anarmonitas $\nu_e x_e$ bernilai positif pada hampir semua kasus.



Gambar 4.6. Energi potensial vibrasi molekul diatomik (kurva penuh) dan osilator harmonik (kurva putus-putus). Tingkat energi vibrasi keadaan terikat molekul diatomik juga diperlihatkan. Berbeda dari osilator harmonik, molekul diatomik hanya mempunyai sejumlah terbatas tingkat vibrasi terikat.

Dengan menggunakan persamaan Schrödinger bergantung waktu, diperoleh bahwa transisi vibrasi yang paling mungkin ketika molekul diatomik dikenai radiasi elektromagnetik adalah transisi dengan perubahan v sebesar ±1. Selain itu,

agar penyerapan atau pemancaran radiasi elektromagnetik dapat terjadi, vibrasi harus mengubah momen dipol molekul. Karena itu, molekul diatomik homonuklir seperti H_2 atau N_2 tidak dapat mengalami transisi antartingkat vibrasi melalui penyerapan atau pemancaran radiasi. Transisi tersebut dapat terjadi selama tumbukan antarmolekul. Hubungan E_atas − E_bawah = hν, pendekatan (4.58), dan aturan seleksi Δv = 1 untuk penyerapan radiasi menunjukkan bahwa molekul diatomik heteronuklir dengan frekuensi vibrasi ν_e akan menyerap paling kuat cahaya dengan frekuensi ν_cahaya yang kira-kira diberikan oleh

$$\nu_{\text{light}} = (E_2 - E_1)/h \approx \left[(v_2 + \tfrac{1}{2})h\nu_e - (v_1 + \tfrac{1}{2})h\nu_e\right]/h = (v_2 - v_1)\nu_e = \nu_e \quad (4.61)$$

Nilai k dan μ dalam (4.59) untuk molekul diatomik sedemikian rupa sehingga ν_cahaya biasanya berada dalam daerah inframerah spektrum. Transisi dengan Δv = 2, 3, dan seterusnya juga terjadi, tetapi transisi ini, yang disebut nada atas atau overtone, jauh lebih lemah daripada penyerapan Δv = 1.

Penggunaan persamaan yang lebih teliti (4.60) memberikan (Soal 4.27)

$$\nu_{\text{light}} = \nu_e - 2\nu_e x_e(v_1 + 1) \quad (4.62)$$

dengan v_1 sebagai bilangan kuantum tingkat bawah dan Δv = 1.

Populasi relatif dua tingkat energi molekul dalam sistem pada kesetimbangan termal diberikan oleh hukum distribusi Boltzmann:

$$\frac{N_i}{N_j} = \frac{g_i}{g_j} e^{-(E_i - E_j)/kT} \quad \textbf{(4.63)}$$

di mana tingkat energi i dan j mempunyai energi E_i dan E_j, degenerasi g_i dan g_j, serta masing-masing ditempati oleh N_i dan N_j molekul; k adalah konstanta Boltzmann dan T suhu mutlak. Untuk tingkat yang tidak terdegenerasi, $g_i = 1$.

Besarnya $\nu = (1/2\pi)(k/\mu)^{1/2}$ sedemikian rupa sehingga untuk molekul diatomik ringan, misalnya H_2, HCl, dan CO, hanya tingkat vibrasi v = 0 yang memiliki populasi berarti pada suhu kamar. Untuk molekul diatomik berat, misalnya I_2, satu atau lebih tingkat vibrasi tereksitasi memiliki populasi yang berarti pada suhu kamar.

Spektrum serapan vibrasi molekul diatomik polar terdiri atas pita v = 0 → 1, pita nada atas yang jauh lebih lemah, yaitu v = 0 → 2, 0 → 3, dan seterusnya, serta—jika tingkat v > 0 memiliki populasi yang berarti—pita panas seperti v = 1 → 2 dan 2 → 3. Setiap pita yang bersesuaian dengan transisi vibrasi tertentu terdiri atas sejumlah garis yang berjarak rapat. Masing-masing garis bersesuaian dengan perubahan keadaan rotasi yang berbeda, yang terjadi bersamaan dengan perubahan keadaan vibrasi. Setiap garis merupakan hasil transisi vibrasi–rotasi.

Satuan SI untuk frekuensi spektroskopi adalah hertz, Hz, yang didefinisikan sebagai 1 Hz ≡ 1 s^{-1}. Kelipatan seperti megahertz, MHz = 10^6 Hz, dan gigahertz, GHz = 10^9 Hz, sering digunakan. Garis serapan inframerah biasanya dinyatakan dengan bilangan gelombang $\bar{\nu}$ yang didefinisikan sebagai

$$\tilde{\nu} \equiv 1/\lambda = \nu/c \qquad \textbf{(4.64)}$$

dengan λ sebagai panjang gelombang dalam vakum.

Dalam pendekatan osilator harmonik, tingkat energi mekanika kuantum molekul poliatomik adalah $E\_vib = \Sigma_i(v_i + ½)h\nu_i$, dengan ν_i sebagai frekuensi mode normal vibrasi ke-i dan v_i sebagai bilangan kuantum vibrasi mode normal ke-i. Setiap v_i secara bebas dapat bernilai 0, 1, 2, dan seterusnya, tanpa bergantung pada nilai bilangan kuantum vibrasi lainnya. Molekul linear dengan n atom mempunyai 3n − 5 mode normal, sedangkan molekul nonlinear mempunyai 3n − 6 mode normal.

Untuk menghitung massa tereduksi μ dalam (4.59), diperlukan massa spesies isotop. Beberapa massa isotop relatif dicantumkan pada Tabel A.3 dalam Lampiran.

Contoh

Pita inframerah terkuat $^{12}C^{16}O$ terdapat pada $\bar{\nu}$ = 2143 cm^{-1}. Tentukan konstanta gaya $^{12}C^{16}O$. Nyatakan pendekatan yang digunakan.

Pita inframerah terkuat bersesuaian dengan transisi v = 0 → 1. Vibrasi molekul didekati sebagai vibrasi osilator harmonik. Dari (4.61), frekuensi vibrasi setimbang molekul kira-kira adalah

$\nu_e \approx \nu\_cahaya = \bar{\nu}c = (2143\ cm^{-1})(2{,}9979 \times 10^{10}\ cm\ s^{-1}) = 6{,}424 \times 10^{13}\ s^{-1}$.

Untuk menghubungkan k dengan ν_e dalam (4.59), diperlukan massa tereduksi $\mu = m_1m_2/(m_1 + m_2)$. Satu mol ^{12}C bermassa 12 g dan mengandung sejumlah bilangan Avogadro atom. Karena itu, massa satu atom ^{12}C adalah 12 g/(6,02214 × 10^{23}). Massa tereduksi dan konstanta gaya adalah

$\mu = [(12)(15{,}9949)/27{,}9949]\ g \times [1/(6{,}02214 \times 10^{23})] = 1{,}1385 \times 10^{-23}\ g$,

$k = 4\pi^2\nu_e^2\mu = 4\pi^2(6{,}424 \times 10^{13}\ s^{-1})^2(1{,}1385 \times 10^{-26}\ kg) = 1855\ N\ m^{-1}$.

Latihan. (a) Tentukan energi titik nol perkiraan $^{12}C^{16}O$. Jawaban: 2,1 × 10^{-20} J. (b) Perkirakan ν_e untuk $^{13}C^{16}O$. Jawaban: 6,28 × 10^{13} s^{-1}.

4.4 Penyelesaian Numerik Persamaan Schrödinger Satu Dimensi Tak Bergantung Waktu

Metode Numerov

Kita telah menyelesaikan persamaan Schrödinger secara eksak untuk partikel dalam kotak dan osilator harmonik. Untuk banyak fungsi energi potensial V(x), persamaan Schrödinger satu partikel satu dimensi tidak dapat diselesaikan secara eksak. Bagian ini menyajikan metode numerik, yaitu metode Numerov, untuk penyelesaian persamaan Schrödinger satu partikel satu dimensi dengan komputer. Metode ini memungkinkan diperolehnya nilai eigen dan fungsi eigen keadaan terikat yang akurat untuk V(x) sembarang.

Untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger secara numerik, ditinjau suatu bagian sumbu x yang mencakup daerah yang diizinkan secara klasik dan meluas agak jauh ke dalam daerah terlarang secara klasik pada kedua ujung daerah yang diizinkan tersebut. Bagian sumbu x ini dibagi menjadi interval-interval kecil, masing-masing sepanjang s (Gambar 4.7). Titik x_0 dan x_maks merupakan titik ujung bagian tersebut, sedangkan x_n adalah titik ujung interval ke-n. Misalkan ψ_{n-1}, ψ_n, dan ψ_{n+1} menyatakan nilai ψ pada titik $x_n - s$, x_n, dan $x_n + s$, yaitu titik-titik ujung interval yang berdekatan.

$$\psi_{n-1} \equiv \psi(x_n - s), \quad \psi_n \equiv \psi(x_n), \quad \psi_{n+1} \equiv \psi(x_n + s) \tag{4.65}$$

Jangan sampai rancu dengan notasi ini. Subskrip n − 1, n, dan n + 1 tidak menyatakan keadaan yang berbeda, melainkan nilai satu fungsi gelombang tertentu ψ pada titik-titik sumbu x yang terpisah sejauh interval s. Subskrip n berarti ψ dievaluasi pada titik x_n. Persamaan Schrödinger $-(\hbar^2/2m)\psi'' + V\psi = E\psi$ ditulis sebagai

$$\psi'' = G\psi, \quad \text{where } G \equiv m\hbar^{-2}[2V(x) - 2E] \tag{4.66}$$

Dengan mengembangkan $\psi(x_n + s)$ dan $\psi(x_n - s)$ dalam deret Taylor berpangkat s, menjumlahkan kedua pengembangan untuk menghilangkan pangkat ganjil s, menggunakan persamaan Schrödinger untuk menyatakan ψ'' dan $\psi^{(4)}$ dalam ψ, serta mengabaikan suku s^6 dan pangkat s yang lebih tinggi—suatu pendekatan yang akurat jika s kecil—diperoleh (Soal 4.43)

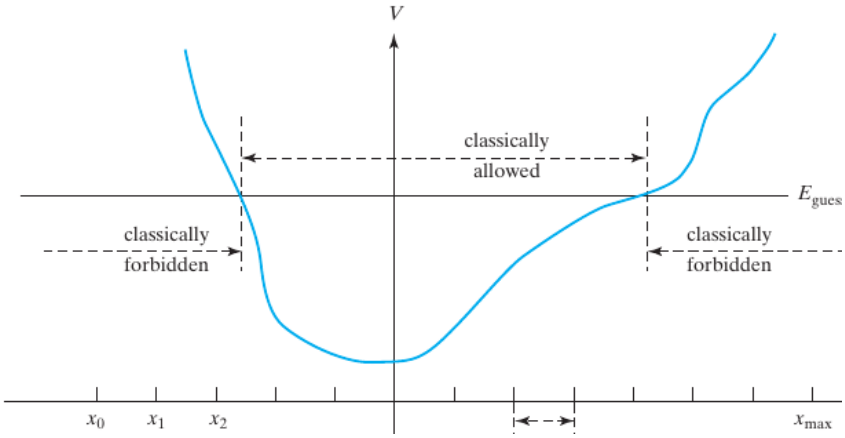
$$\psi_{n+1} \approx \frac{2\psi_n - \psi_{n-1} + 5G_n\psi_n s^2/6 + G_{n-1}\psi_{n-1}s^2/12}{1 - G_{n+1}s^2/12} \tag{4.67}$$

dengan $G_n \equiv G(x_n) \equiv m\hbar^{-2}[2V(x_n) - 2E]$ [Persamaan (4.66) dan (4.65)]. Persamaan (4.67) memungkinkan kita menghitung ψ_{n+1}, yaitu nilai ψ pada $x_n + s$, jika ψ_n dan ψ_{n-1}, yaitu nilai ψ pada dua titik sebelumnya x_n dan $x_n - s$, telah diketahui.

Bagaimana (4.67) digunakan untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger? Mula-mula ditebak suatu nilai E_tebakan untuk nilai eigen energi. Perhitungan dimulai pada titik x_0 yang terletak cukup jauh di dalam daerah terlarang secara klasik sebelah kiri (Gambar 4.7), tempat ψ sangat kecil, dan ψ didekati sama dengan nol pada titik tersebut: $\psi_0 \equiv \psi(x_0) = 0$. Selain itu dipilih titik x_maks cukup jauh di dalam daerah terlarang secara klasik sebelah kanan, tempat ψ juga sangat kecil dan disyaratkan ψ(x_maks) = 0. Dipilih nilai kecil untuk interval s di antara titik-titik berurutan, dan nilai ψ pada $x_0 + s$ diambil sebagai suatu bilangan kecil, misalnya 0,0001: $\psi_1 \equiv \psi(x_1) \equiv \psi(x_0 + s) = 0{,}0001$. Nilai ψ_1 tidak memengaruhi nilai eigen yang ditemukan. Jika ψ_1 dipilih 0,001, bukan 0,0001, Persamaan (4.67) menunjukkan bahwa semua nilai ψ pada titik-titik berikutnya hanya dikalikan 10 (Soal 4.41). Hal ini tidak memengaruhi nilai eigen. Fungsi gelombang dapat dinormalisasi setelah setiap nilai eigen diperoleh.

Setelah memilih ψ_0 dan ψ_1, Persamaan (4.67) dengan n = 1 digunakan untuk menghitung $\psi_2 \equiv \psi(x_2) \equiv \psi(x_1 + s)$, dengan nilai G dihitung menggunakan E_tebakan. Selanjutnya, (4.67) dengan n = 2 memberikan ψ_3, dan seterusnya. Proses diteruskan hingga mencapai x_maks. Jika E_tebakan tidak sama atau tidak sangat dekat dengan suatu nilai eigen, ψ tidak dapat diintegralkan kuadratnya dan $|\psi(x_{maks})|$ akan sangat besar. Jika ψ(x_maks) tidak mendekati nol, proses dimulai kembali dari x_0 dengan E_tebakan baru. Proses diulang sampai ditemukan E_tebakan yang membuat ψ(x_maks) sangat dekat dengan nol. Pada saat itu, E_tebakan pada dasarnya sama dengan suatu nilai eigen.

Cara sistematis untuk menemukan nilai eigen adalah menghitung jumlah simpul pada ψ yang dihasilkan oleh E_tebakan. Ingat bahwa dalam masalah satu dimensi, jumlah simpul di bagian dalam adalah 0 untuk keadaan dasar, 1 untuk keadaan tereksitasi pertama, dan seterusnya. Misalkan E_1, E_2, E_3, dan seterusnya menyatakan energi keadaan dasar, keadaan tereksitasi pertama, keadaan tereksitasi kedua, dan seterusnya. Jika ψ_tebakan tidak mempunyai simpul di antara x_0 dan x_maks, E_tebakan lebih kecil daripada atau sama dengan E_1. Jika ψ_tebakan mempunyai satu simpul di bagian dalam, E_tebakan berada di antara E_1 dan E_2 (Gambar 4.8). Contoh-contoh diberikan kemudian.



Gambar 4.7. V terhadap x bagi sistem satu partikel satu dimensi.

Variabel Tak Berdimensi

Metode Numerov mengharuskan kita menebak nilai E. Berapakah orde besarnya: 10^{-20} J, 10^{-15} J, atau yang lain? Untuk menjawabnya, persamaan Schrödinger dirumuskan kembali menggunakan variabel tak berdimensi, dengan osilator harmonik sebagai contoh.

Osilator harmonik mempunyai $V = \frac{1}{2}kx^2$, dan persamaan Schrödinger osilator harmonik mengandung tiga konstanta, yaitu k, m, dan $\hbar$. Dicari energi tereduksi E_r dan koordinat x tereduksi x_r yang keduanya tak berdimensi, yang didefinisikan oleh

$$E_r \equiv E/A, \quad x_r \equiv x/B \tag{4.68}$$

dengan konstanta A sebagai kombinasi k, m, dan $\hbar$ yang berdimensi energi, sedangkan B sebagai kombinasi yang berdimensi panjang. Dimensi energi adalah massa × panjang² × waktu^{-2}, yang dituliskan sebagai

$$[E] = \mathrm{ML^2T^{-2}} \tag{4.69}$$

di mana tanda kurung siku di sekitar E menyatakan dimensinya, sedangkan M, L, dan T masing-masing menyatakan dimensi massa, panjang, dan waktu. Persamaan $V = \frac{1}{2}kx^2$ menunjukkan bahwa k berdimensi energi × panjang^{-2}, dan (4.69) memberikan $[k] = \mathrm{MT^{-2}}$. Dimensi $\hbar$ adalah energi × waktu. Dengan demikian,

$$[m] = \mathrm{M}, \quad [k] = \mathrm{MT^{-2}}, \quad [\hbar] = \mathrm{ML^2T^{-1}} \tag{4.70}$$

Dimensi A dan B dalam (4.68) masing-masing adalah energi dan panjang, sehingga

$$[A] = \mathrm{ML^2T^{-2}}, \quad [B] = \mathrm{L} \tag{4.71}$$

Misalkan $A = m^a k^b \hbar^c$, dengan a, b, dan c sebagai pangkat yang ditentukan oleh syarat bahwa dimensi A harus $\mathrm{ML^2T^{-2}}$. Diperoleh

$$[A] = [m^a k^b \hbar^c] = \mathrm{M}^a(\mathrm{MT}^{-2})^b(\mathrm{ML}^2\mathrm{T}^{-1})^c = \mathrm{M}^{a+b+c}\mathrm{L}^{2c}\mathrm{T}^{-2b-c} \qquad (4.72)$$

Dengan menyamakan pangkat M, L, dan T dalam (4.71) dan (4.72), diperoleh

$a + b + c = 1$, $2c = 2$, dan $-2b - c = -2$.

Penyelesaian persamaan tersebut memberikan $c = 1$, $b = ½$, dan $a = -½$. Karena itu,

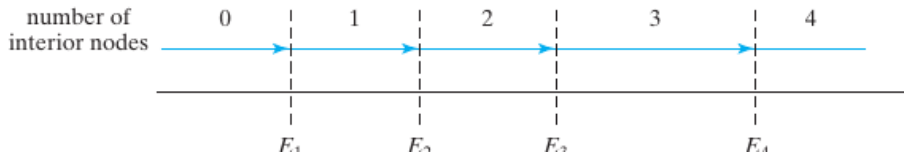
$$A = m^{-1/2}k^{1/2}\hbar \qquad (4.73)$$

Misalkan $B = m^d k^e \hbar^f$. Prosedur analisis dimensi yang sama dengan yang menghasilkan (4.73) memberikan (Soal 4.44)

$$B = m^{-1/4}k^{-1/4}\hbar^{1/2} \qquad (4.74)$$

Dari (4.68), (4.73), dan (4.74), variabel tereduksi untuk osilator harmonik adalah

$$E_r = E/m^{-1/2}k^{1/2}\hbar, \quad x_r = x/m^{-1/4}k^{-1/4}\hbar^{1/2} \qquad (4.75)$$



Gambar 4.8. Jumlah simpul bagian dalam pada penyelesaian metode Numerov sebagai fungsi energi tebakan E_tebakan.

Dengan menggunakan $k^{1/2} = 2\pi\nu m^{1/2}$ [Persamaan (4.23)] untuk menghilangkan k dari (4.75), serta mengingat definisi $\alpha \equiv 2\pi\nu m/\hbar$ [Persamaan (4.31)], diperoleh bentuk alternatif

$$E_r = E/h\nu, \quad x_r = \alpha^{1/2}x \qquad (4.76)$$

Sejalan dengan $E_r \equiv E/A$ [Persamaan (4.68)], fungsi energi potensial tereduksi V_r didefinisikan sebagai

$$V_r \equiv V/A \qquad (4.77)$$

Karena $|\psi(x)|^2dx$ merupakan probabilitas dan probabilitas tidak berdimensi, fungsi gelombang ternormalisasi $\psi(x)$ harus berdimensi panjang$^{-1/2}$. Karena itu, didefinisikan fungsi gelombang tereduksi ternormalisasi ψ_r yang tidak berdimensi. Dari (4.71), B berdimensi panjang sehingga $B^{-1/2}$ mempunyai satuan panjang$^{-1/2}$. Dengan demikian,

$$\psi_r = \psi/B^{-1/2} \qquad (4.78)$$

ψ_r memenuhi $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_r|^2dx_r = 1$; hal ini mengikuti dari (4.68), (4.78), dan $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi|^2dx = 1$.

Sekarang persamaan Schrödinger dituliskan kembali dalam variabel tereduksi x_r, ψ_r, V_r, dan E_r. Diperoleh

$d^2\psi/dx^2 = d^2(B^{-1/2}\psi_r)/dx^2 = B^{-5/2}\, d^2\psi_r/dx_r^2$,

sehingga

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d^2}{dx^2}B^{-1/2}\psi_r = B^{-1/2}\frac{d}{dx}\frac{d\psi_r}{dx} = B^{-1/2}\frac{d}{dx}\frac{d\psi_r}{dx_r}\frac{dx_r}{dx} = B^{-1/2}\frac{d(d\psi_r/dx_r)}{dx_r}\frac{dx_r}{dx}\frac{dx_r}{dx}$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = B^{-5/2}\frac{d^2\psi_r}{dx_r^2} \tag{4.79}$$

karena $dx_r/dx = B^{-1}$ [Persamaan (4.68)]. Substitusi (4.68), (4.77), dan (4.79) ke dalam persamaan Schrödinger $-(\hbar^2/2m)(d^2\psi/dx^2) + V\psi = E\psi$ memberikan

$-(\hbar^2/2m)B^{-5/2}(d^2\psi_r/dx_r^2) + AV_rB^{-1/2}\psi_r = AE_rB^{-1/2}\psi_r$,

kemudian

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{AB^2}\frac{d^2\psi_r}{dx_r^2} + V_r\psi_r = E_r\psi_r \tag{4.80}$$

Dari (4.73) dan (4.74) diperoleh $AB^2 = \hbar^2/m$, sehingga $\hbar^2/(mAB^2) = 1$ untuk osilator harmonik.

Secara lebih umum, misalkan V mengandung satu parameter c yang tidak tak berdimensi. Sebagai contoh, dapat dimiliki $V = cx^4$ atau $V = cx^2[1 + 0{,}05m^{1/2}c^{1/2}\hbar^{-1}x^2]$. Perhatikan bahwa $m^{1/2}c^{1/2}\hbar^{-1}x^2$ tidak berdimensi, sebagaimana seharusnya karena angka 1 tidak berdimensi. Besaran AB^2 dalam (4.80) harus berbentuk $AB^2 = \hbar^r m^s c^t$, dengan r, s, dan t sebagai pangkat tertentu. Karena suku energi kinetik dalam persamaan Schrödinger harus mempunyai dimensi yang sama dengan suku energi potensial, analisis dimensi akan selalu menghasilkan $\hbar^2/(mAB^2) = 1$. Dengan demikian, persamaan Schrödinger tereduksi menjadi

$$\frac{d^2\psi_r}{dx_r^2} = (2V_r - 2E_r)\psi_r \tag{4.81}$$

atau

$$\psi_r'' = G_r\psi_r, \qquad \text{where} \quad G_r \equiv 2V_r - 2E_r \tag{4.82}$$

Untuk osilator harmonik, dari (4.73) dan (4.75) diperoleh

$$V_r = \tfrac{1}{2}x_r^2 \tag{4.83}$$

Setelah persamaan Schrödinger osilator harmonik direduksi ke bentuk (4.81), yang hanya melibatkan besaran-besaran tak berdimensi, dapat diperkirakan bahwa nilai eigen energi terendah mempunyai orde besarnya sekitar 1.

Persamaan Schrödinger tereduksi osilator harmonik (4.82) mempunyai bentuk yang sama dengan (4.66), sehingga rumus Numerov (4.67) dapat digunakan dengan ψ, G, dan s masing-masing diganti oleh ψ_r, G_r, dan s_r, dengan $s_r \equiv s/B$ sebagaimana pada (4.68).

Setelah nilai numerik energi tereduksi E_r ditemukan, energi E diperoleh dari (4.75) atau (4.76).

Pemilihan $x_{r,o}$, x_r,maks, dan s_r

Sekarang harus dipilih nilai awal dan akhir x_r serta nilai interval s_r di antara titik-titik berdekatan. Misalkan ingin ditentukan semua nilai eigen dan fungsi eigen osilator harmonik dengan $E_r \leq 5$. Penyelesaian dimulai dalam daerah terlarang secara klasik sebelah kiri, sehingga terlebih dahulu ditentukan daerah terlarang secara klasik untuk $E_r = 5$. Batas antara daerah yang diizinkan dan terlarang secara klasik terjadi ketika $E_r = V_r$. Dari (4.83), $V_r = \frac{1}{2}x_r^2$. Karena itu $E_r = V_r$ menjadi $5 = \frac{1}{2}x_r^2$ dan daerah yang diizinkan secara klasik untuk $E_r = 5$ adalah dari $x_r = -\sqrt{10} = -3{,}16$ sampai $+3{,}16$. Untuk $E_r < 5$, daerah yang diizinkan secara klasik lebih kecil.

Perhitungan harus dimulai pada titik yang cukup jauh di dalam daerah terlarang secara klasik sebelah kiri, tempat ψ sangat kecil, dan diakhiri cukup jauh di dalam daerah terlarang secara klasik sebelah kanan. Daerah terlarang sebelah kiri berakhir pada $x_r = -3{,}16$ untuk $E_r = 5$, sehingga pilihan yang masuk akal adalah memulai pada $x_r = -5$. Memulai terlalu jauh di dalam daerah terlarang secara klasik kadang-kadang menimbulkan masalah, sebagaimana dibahas berikutnya, sehingga pemilihan titik awal mungkin memerlukan percobaan. Karena V simetris, penyelesaian diakhiri pada $x_r = 5$.

Untuk ketelitian yang memadai, biasanya diperlukan sekurang-kurangnya 100 titik. Karena itu dipilih $s_r = 0{,}1$ sehingga terdapat 100 interval. Sebagaimana tampak dari penurunan metode Numerov, s_r harus kecil. Aturan praktis yang masuk akal ialah memilih s_r tidak lebih besar daripada 0,1.

Jika $V \to \infty$ ketika $x \to \pm\infty$, seperti yang sering terjadi, memulai terlalu jauh di dalam daerah terlarang secara klasik dapat membuat penyebut $1 - G_{n+1}s^2/12$ dalam rumus Numerov (4.67) bernilai negatif. Karena $G_r = 2V_r - 2E_r$, jika perhitungan dimulai pada x_0 ketika V_r sangat besar, G_r pada titik itu mungkin cukup besar untuk menjadikan penyebut Numerov negatif. Metode kemudian gagal bekerja. Karena ψ_0 diambil nol dan ψ_1 positif, rumus Numerov (4.67) menunjukkan bahwa jika penyebut negatif, ψ_2 akan negatif dan terbentuk simpul palsu di antara x_1 dan x_2. Masalah ini dapat dihindari dengan memperkecil ukuran langkah s_r atau memperkecil rentang $x_r,\text{maks} - x_{r,0}$ (lihat Soal 4.46).

Program Komputer untuk Metode Numerov

Tabel 4.1 berisi program komputer C++ yang menerapkan metode Numerov pada persamaan Schrödinger osilator harmonik. Baris kelima dan keenam mendeklarasikan variabel sebagai bilangan bulat atau presisi ganda. m adalah jumlah interval antara $x_{r,o}$ dan $x_{r,maks}$ dan sama dengan $(x_{r,maks} - x_{r,o})/s$. `cout` dan `cin` menyediakan keluaran ke layar komputer dan masukan ke variabel program. Perhatikan tanda titik dua pada akhir baris 13 dan tanda titik koma setelah sebagian besar baris lainnya. Tiga baris yang diawali `g[0]=`, `g[1]=`, dan `g[i+1]=` memuat dua kali fungsi energi potensial. Baris-baris ini harus diubah jika masalah yang ditangani bukan osilator harmonik. Jika terdapat simpul di antara dua nilai x_r berurutan, nilai ψ_r pada kedua titik tersebut mempunyai tanda yang berlawanan (lihat Soal 4.45), dan pernyataan `nn=nn+1` menaikkan penghitung simpul nn sebesar 1.

Kompilator C++ dan lingkungan pengembangan terpadu gratis dapat diunduh; lihat artikel Wikipedia "List of Compilers". Cara yang lebih sederhana ialah memasukkan dan menjalankan program C++ secara daring tanpa mengunduh apa pun. Situs ideone.com menyediakan layanan ini setelah pendaftaran untuk C++ dan bahasa lain. Akan tetapi, pada situs tersebut seluruh masukan harus dimasukkan ke area masukan sebelum program dijalankan karena situs tidak menerima masukan setelah program mulai berjalan; setiap bilangan masukan dipisahkan dari bilangan di sebelahnya dengan spasi.

```
#include <iostream>
#include <math.h>
using namespace std;
int main() {
int m, i, nn;
double x[1000], g[1000], p[1000], E, s, ss;
cout << "Masukkan xr awal ";
cin >> x[0];
cout << "Masukkan kenaikan sr ";
cin >> s;
cout << "Masukkan jumlah interval m ";
cin >> m;
label1:
cout << "Masukkan energi tereduksi Er (masukkan 1e10 untuk berhenti) ";
cin >> E;
if (E > 1e9) {
cout << "Program dihentikan";
return 0;
}
nn = 0; p[0] = 0;
p[1] = 0.0001;
x[1] = x[0] + s;
g[0] = x[0]*x[0] - 2*E;
g[1] = x[1]*x[1] - 2*E;
ss = s*s/12;
for (i = 1; i <= m - 1; i = i + 1) {
x[i+1] = x[i] + s;
g[i+1] = x[i+1]*x[i+1] - 2*E;
p[i+1] = (-p[i-1] + 2*p[i] + 10*g[i]*p[i]*ss + g[i-1]*p[i-1]*ss)/(1 - g[i+1]*ss);
if (p[i+1]*p[i] < 0)
nn = nn + 1;
}
cout << " Er = " << E << " Simpul = " << nn << " Psir(xm) = " << p[m] << endl;
```

```
goto label1;
}
```

Tabel 4.1. Program C++ untuk penyelesaian persamaan Schrödinger satu dimensi dengan metode Numerov.

Sebagai contoh, misalkan dicari energi keadaan dasar osilator harmonik. Program Tabel 4.1 dengan $s_r = 0{,}1$, $x_{r,0} = -5$, dan m = 100 memberikan hasil berikut. Tebakan $E_r = 0$ menghasilkan fungsi gelombang tanpa simpul, nn = 0, yang menunjukkan bahwa energi keadaan dasar tereduksi $E_{r,1}$ berada di atas 0. Selain itu, fungsi gelombang pada titik paling kanan bernilai $9{,}94 \times 10^6$, sangat jauh dari nol. Jika E_r kemudian ditebak 0,9, diperoleh fungsi dengan satu simpul, sehingga 0,9 berada di antara $E_{r,1}$ dan $E_{r,2}$. Jadi, E_r keadaan dasar berada di antara 0 dan 0,9. Rata-rata keduanya adalah 0,45. Nilai ini menghasilkan fungsi tanpa simpul, sehingga 0,45 berada di bawah $E_{r,1}$. Rata-rata 0,45 dan 0,9 adalah 0,675; nilai ini menghasilkan satu simpul sehingga terlalu tinggi. Rata-rata 0,675 dan 0,45 adalah 0,5625; nilai ini juga menghasilkan satu simpul sehingga masih terlalu tinggi. Nilai berikutnya 0,50625, dan seterusnya. Hasil program menunjukkan bahwa ketika semakin dekat dengan $E_{r,1}$ yang benar, $\psi_r(5)$ semakin mendekati nol.

Penggunaan Lembar Kerja untuk Menyelesaikan Persamaan Schrödinger Satu Dimensi

Alternatif terhadap program komputer metode Numerov adalah lembar kerja elektronik. Petunjuk berikut menggunakan Excel untuk menerapkan metode Numerov pada persamaan Schrödinger osilator harmonik. Versi perangkat lunak lain dapat digunakan dengan penyesuaian petunjuk.

Kolom lembar kerja diberi label A, B, C, dan seterusnya, sedangkan baris diberi label 1, 2, 3, dan seterusnya (lihat Gambar 4.9). Lokasi sel dinyatakan oleh baris dan kolomnya. Sebagai contoh, sel di kiri atas adalah A1. Untuk memasukkan sesuatu ke sel, pilih sel tersebut menggunakan penunjuk tetikus atau tombol panah, kemudian ketik isi sel dan tekan Enter atau salah satu tombol panah.

Masukkan judul pada sel A1. Masukkan label E_r pada sel A3. Tebakan E_r akan dimasukkan ke sel B3. Mula-mula dicari nilai eigen keadaan dasar dengan berpura-pura bahwa jawabannya belum diketahui. Nilai minimum V(x) untuk osilator harmonik adalah nol, sehingga E_r tidak dapat negatif. Ambil nol sebagai tebakan awal dan masukkan 0 ke B3. Masukkan label s_r pada C3 dan nilai 0,1 pada D3. Masukkan x_r pada A5, G_r pada B5, dan psi_r pada C5. Masukkan −5, nilai awal x_r, pada A7. Masukkan rumus `=A7+$D$3` pada A8. Tanda sama dengan menunjukkan bahwa suatu rumus dimasukkan. Rumus tersebut menjumlahkan isi A7 dan D3. Tanda dolar pada D3 akan dijelaskan kemudian. Setelah Enter ditekan, nilai −4,9 muncul pada A8.

Pilih sel A8, salin isinya, pilih rentang A9:A107, kemudian tempelkan. Rumus A8 disalin ke setiap sel A9 sampai A107. Ketika rumus `=A7+$D$3` disalin satu baris ke

bawah, A7 berubah menjadi A8, sedangkan tanda dolar mencegah D3 berubah. Dalam rumus lembar kerja, alamat sel tanpa tanda dolar disebut rujukan relatif, sedangkan alamat sel dengan tanda dolar disebut rujukan absolut. Jika rujukan relatif disalin ke baris berikutnya, nomor baris bertambah satu; jika disalin dua baris ke bawah, nomor baris bertambah dua, dan seterusnya. Hasil prosedur ini adalah kolom A berisi bilangan dari −5 sampai 5 dengan kenaikan 0,1.

Selanjutnya diisi kolom G_r. Dari (4.82) dan (4.83), $G_r = x_r^2 - 2E_r$ untuk osilator harmonik. Masukkan `=A7^2-2*$B$3` ke sel B7, yang memuat nilai G_r pada $x_r = -5$. Simbol `^` menyatakan pemangkatan dan `*` menyatakan perkalian. Sel B3 memuat E_r. Salin rumus B7 ke B8:B107 agar nilai G_r lainnya dihitung.

Berikutnya ditentukan nilai ψ_r. Masukkan 0 pada C7. Sel ini memuat nilai ψ_r pada $x_r = -5$. Karena titik tersebut jauh di dalam daerah terlarang secara klasik, ψ_r sangat kecil dan dapat didekati sebagai nol. Sel C8 memuat ψ_r pada $x_r = -4{,}9$. Nilai ini juga sangat kecil dan bilangan kecil apa pun dapat digunakan tanpa memengaruhi nilai eigen. Masukkan `1E-4` pada C8. Setelah nilai ψ_r pada dua titik pertama diketahui, (4.67) digunakan untuk menghitung ψ_r pada $x_r = -4{,}8$. Masukkan rumus berikut ke C9:

```
=(2*C8-C7+5*B8*C8*$D$3^2/6+B7*C7*$D$3^2/12)/(1-B9*$D$3^2/12)
```

Setelah Enter ditekan, nilai 0,000224 muncul pada C9. Salin rumus C9 ke C10:C107. Sebagai pemeriksaan tambahan, C10 harus berisi 0,000401.

Karena jumlah simpul menunjukkan di antara nilai eigen mana tebakan energi berada, jumlah simpul ψ_r perlu dihitung dan ditampilkan. Masukkan rumus `=IF(C9*C8<0,1,0)` ke D9. Rumus ini memasukkan 1 jika hasil kali C9 dan C8 negatif dan memasukkan 0 jika tidak negatif. Jika terdapat simpul di antara nilai x_r pada A8 dan A9, nilai ψ_r pada C8 dan C9 mempunyai tanda berlawanan sehingga nilai 1 dimasukkan ke D9. Salin rumus D9 ke D10:D107. Masukkan label `simpul =` pada E2 dan rumus `=SUM(D9:D107)` pada F2. Rumus ini menjumlahkan nilai D9 sampai D107 dan memberikan jumlah simpul bagian dalam ψ_r.

Selanjutnya, buat grafik ψ_r terhadap x_r dengan menggunakan data A7:A107 dan C7:C107 sebagai diagram pencar dengan garis halus dan penanda. Hapus seri yang tidak diperlukan dan sesuaikan grid agar grafik tampak seperti Gambar 4.9.

Karena $x_r = 5$ terletak jauh di dalam daerah terlarang secara klasik sebelah kanan, ψ_r seharusnya sangat dekat dengan nol pada titik ini. Akan tetapi, grafik menunjukkan bahwa untuk $E_r = 0$, fungsi gelombang sangat besar pada $x_r = 5$. Karena itu $E_r = 0$ tidak menghasilkan ψ_r yang berperilaku baik dan harus dicoba nilai E_r lain. Sel F2 bernilai nol sehingga ψ_r ini tidak mempunyai simpul. Menurut Gambar 4.8, tebakan $E_r = 0$ lebih kecil daripada energi keadaan dasar sebenarnya.

Coba $E_r = 2$ dengan memasukkannya ke B3. Lembar kerja menghitung ulang semua sel kolom B dan C yang bergantung pada E_r dan menggambar ulang grafik.

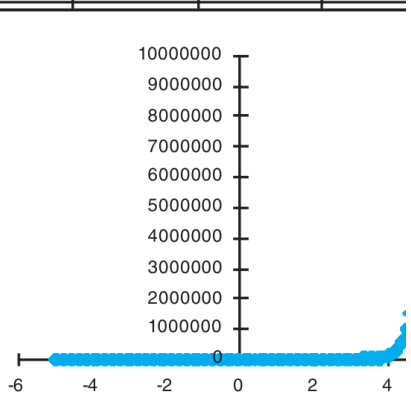
Grafik untuk $E_r = 2$ menuju nilai ψ_r positif yang sangat besar pada $x_r = 5$. Sel F2 menunjukkan dua simpul. Dua simpul ini dapat dilihat dari perubahan tanda ψ_r di antara $x_r = -0{,}4$ dan $-0{,}3$ serta di antara 1,2 dan 1,3. Karena fungsi keadaan dasar tidak mempunyai simpul bagian dalam, $E_r = 2$ terlalu tinggi, bahkan lebih tinggi daripada energi keadaan tereksitasi pertama.

Ubah skala sumbu y agar simpul terlihat lebih jelas, misalnya dengan nilai minimum -10 dan maksimum 10. Selanjutnya ubah E_r menjadi 1,2. Diperoleh ψ_r yang menuju nilai negatif besar di sebelah kanan dan mempunyai satu simpul. Satu simpul menunjukkan bahwa nilai ini berada di bawah energi keadaan kedua tetapi di atas energi keadaan dasar. Dengan demikian, energi keadaan dasar berada di antara 0 dan 1,2. Rata-ratakan kedua nilai tersebut dan coba $E_r = 0{,}6$. Fungsi yang diperoleh masih mempunyai satu simpul, sehingga nilai tersebut masih terlalu tinggi. Skala grafik dapat diubah, misalnya menjadi maksimum 25 dan minimum -25.

Nilai eigen terendah sekarang diketahui berada di antara 0 dan 0,6. Rata-rata kedua nilai ini adalah 0,3. Nilai 0,3 menghasilkan fungsi tanpa simpul, sehingga berada di bawah energi keadaan dasar dan E_r berada di antara 0,3 dan 0,6. Rata-rata keduanya adalah 0,45, yang juga menghasilkan fungsi tanpa simpul. Dengan skala sumbu y yang sesuai, misalnya minimum -15 dan maksimum 30, fungsi untuk $x_r < 0{,}2$ mulai sangat menyerupai fungsi keadaan dasar sehingga nilai eigen semakin dekat. Nilai eigen sekarang berada di antara 0,45 dan 0,60. Rata-rata keduanya adalah 0,525, yang menghasilkan satu simpul sehingga terlalu tinggi. Rata-rata 0,45 dan 0,525 adalah 0,4875, yang terlalu rendah.

Dengan meneruskan proses pembagian dua interval ini, diperoleh berturut-turut 0,50625 terlalu tinggi, 0,496875 terlalu rendah, dan seterusnya, sampai 0,4999995943548 terlalu rendah dan 0,4999996301176 terlalu tinggi. Dengan demikian, nilai eigen terendah yang ditemukan adalah sekitar 0,4999996.

1	Numerov method for Schrodinger equation, V = 0.5kx^2						
2					Nodes=	0	
3	Er =	0	s=	0.1			
4							
5	xr	Gr	psir				
6							
7	-5	25	0				
8	-4.9	24.01	1.00E-04				
9	-4.8	23.04	0.000224	0			
10	-4.7	22.09	0.000401	0			
11	-4.6	21.16	0.000668	0			
12	-4.5	20.25	0.001078	0			
13	-4.4	19.36	0.001709	0			
14	-4.3	18.49	0.002675	0			
15	-4.2	17.64	0.004142	0			
16	-4.1	16.81	0.006348	0			



Gambar 4.9. Lembar kerja untuk penyelesaian osilator harmonik dengan metode Numerov.

Karena $E_r = E/h\nu$, hasil eksak seharusnya 0,5. Selisih kecil tersebut berasal dari pendekatan metode Numerov.

Untuk mencari nilai eigen terendah kedua, sebelumnya diketahui bahwa nilai ini berada di bawah 2,0 sehingga terletak di antara 0,5 dan 2,0. Rata-rata keduanya adalah 1,25. Nilai ini menghasilkan fungsi dengan satu simpul yang dikehendaki, tetapi fungsi menuju nilai negatif besar di sebelah kanan dan tidak kembali ke sumbu x. Karena itu 1,25 terlalu rendah. Rata-rata 1,25 dan 2,0 adalah 1,625, yang menghasilkan dua simpul sehingga terlalu tinggi. Proses dilanjutkan dengan nilai 1,4375 terlalu rendah, 1,53125 terlalu tinggi, 1,484375 terlalu rendah, 1,5078125 terlalu tinggi, dan seterusnya.

Untuk menguji ketelitian nilai eigen, perhitungan dapat diulang dengan s_r setengah dari nilai sebelumnya dan diperiksa apakah nilai eigen baru berbeda secara berarti. Perhitungan juga dapat dimulai lebih jauh di dalam daerah terlarang secara klasik.

Menentukan nilai eigen melalui coba-coba berguna dan menarik untuk beberapa kali pertama, tetapi jika harus mencari banyak nilai eigen, metode yang lebih cepat dapat digunakan. Sebagian besar lembar kerja mempunyai program bawaan yang dapat menyesuaikan nilai pada satu sel untuk menghasilkan nilai yang diinginkan pada sel lain. Dalam Excel, alat ini disebut Solver. Sel yang memuat ψ_r pada $x_r = 5$ dijadikan sasaran bernilai nol, sedangkan sel energi E_r dijadikan variabel yang diubah. Metode pemecahan dipilih sebagai GRG Nonlinear. Pada percobaan awal dari $E_r = 0$, Solver dapat memberikan nilai sekitar 0,500002, tetapi nilai ψ_r di batas kanan belum cukup dekat dengan nol. Menjalankan Solver kembali dari nilai tersebut menghasilkan sekitar 0,4999996089 dengan ψ_r pada batas kanan sekitar $-3{,}66 \times 10^{-9}$, dekat dengan nilai yang ditemukan secara manual.

Solver menggunakan metode kuasi-Newton atau gradien konjugat, yang dibahas dalam Bagian 15.10. Untuk mencari nilai eigen lebih tinggi, mulailah dari E_r yang jauh di atas nilai eigen sebelumnya. Jika program kembali konvergen ke nilai eigen sebelumnya, gunakan nilai awal yang lebih tinggi. Nilai eigen yang diperoleh dapat diperiksa dengan menghitung simpul fungsi gelombang. Jika Solver gagal menemukan nilai eigen yang diinginkan, gunakan coba-coba untuk memperoleh nilai perkiraan, kemudian jalankan Solver dari nilai tersebut.

Fungsi gelombang yang diperoleh belum dinormalisasi. Konstanta normalisasi menurut Persamaan (3.93) adalah $N = [\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_r|^2 dx_r]^{-1/2}$. Dalam pendekatan diskret,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_r|^2 dx_r \approx \int_{-5}^{5} \psi_r^2 dx_r \approx \sum_{i=1}^{100} \psi_{r,i}^2 s_r.$$

Jika nilai ψ_r berada di kolom C, masukkan label `npsir` pada E5. Masukkan rumus `=SUMSQ(C8:C107)*$D$3` pada D109. Fungsi SUMSQ menjumlahkan kuadrat

serangkaian bilangan. Masukkan `=C7/$D$109^0.5` pada E7, kemudian salin ke E8:E107. Kolom E akan memuat nilai ψ_r ternormalisasi jika E_tebakan sama dengan suatu nilai eigen.

Excel digunakan secara luas untuk perhitungan statistik dan ilmiah, tetapi penelitian terhadap Excel 2007 dan versi-versi pendahulunya menemukan banyak kesalahan yang berarti [B. D. McCullough dan D. A. Heiser, *Comput. Statist. Data Anal.*, 52, 4570 (2008)]. Sebagai contoh, McCullough dan Heiser menyatakan bahwa Solver Excel memiliki kecenderungan nyata untuk berhenti pada titik yang bukan penyelesaian dan menyatakan telah menemukan penyelesaian. Karena itu, kebenaran penyelesaian Solver harus selalu diverifikasi. Penelitian terhadap Excel 2010 menemukan bahwa banyak kesalahan pada versi sebelumnya telah diperbaiki, tetapi beberapa masalah tetap ada [G. Mélard, "On the Accuracy of Statistical Procedures in Excel 2010," tersedia pada homepages.ulb.ac.be/~gmelard/rech/gmelard_csda24.pdf]. Mélard menegaskan bahwa Microsoft tidak berusaha memperbaiki seluruh kesalahan dan bahwa hal tersebut perlu dinyatakan dengan tegas. Mélard menemukan bahwa Solver menghasilkan hasil dengan ketelitian nol angka berarti dalam sebagian besar yang cukup besar dari kasus uji.

Penggunaan Mathcad untuk Menyelesaikan Persamaan Schrödinger Satu Dimensi

Sejumlah program yang diklasifikasikan sebagai sistem aljabar komputer dapat melakukan berbagai prosedur matematis, termasuk integrasi dan diferensiasi simbolik, integrasi numerik, manipulasi aljabar, penyelesaian sistem persamaan, pembuatan grafik, dan perhitungan matriks. Contohnya antara lain Maple, Mathematica, MATLAB, Mathcad, dan LiveMath Maker. Prosedur Numerov dapat dilakukan menggunakan program-program tersebut. Salah satu kelebihan Mathcad adalah kemampuannya membuat animasi. Dengan Mathcad dapat dibuat film yang memperlihatkan perubahan ψ_r ketika E_r melewati suatu nilai eigen.

Ringkasan Langkah-Langkah Metode Numerov

Soal 4.30–4.38 menerapkan metode Numerov pada beberapa masalah satu dimensi lain. Untuk menyelesaikannya, langkah-langkah yang diperlukan adalah: (a) menentukan kombinasi konstanta dalam masalah yang menghasilkan energi tereduksi dan panjang tereduksi tak berdimensi [Persamaan (4.68)]; (b) mengubah persamaan Schrödinger ke bentuk tak berdimensi dan menentukan $G_r(x_r)$ dalam (4.82); (c) menentukan nilai maksimum E_r, di bawahnya semua nilai eigen akan dicari; (d) menentukan batas antara daerah yang diizinkan dan terlarang secara klasik untuk nilai maksimum E_r tersebut, kemudian memilih $x_{r,o}$ dan $x_{r,maks}$ di dalam daerah terlarang secara klasik; untuk partikel dalam kotak dengan dinding tak hingga gunakan $x_o = 0$ dan x_maks = l; serta (e) menentukan nilai interval s_r.

Ringkasan

Osilator harmonik satu dimensi mempunyai $V = \frac{1}{2}kx^2$. Energi keadaan stasionernya adalah $E = (v + \frac{1}{2})h\nu$, dengan frekuensi vibrasi $\nu = (1/2\pi)(k/m)^{1/2}$ dan bilangan kuantum $v = 0, 1, 2$, dan seterusnya. Fungsi eigennya merupakan fungsi genap atau ganjil dan diberikan oleh (4.47). Fungsi genap memenuhi $f(-x) = f(x)$, sedangkan fungsi ganjil memenuhi $f(-x) = -f(x)$. Jika f genap, $\int_{-a}^{a} f(x)dx = 2\int_{0}^{a} f(x)dx$. Jika f ganjil, $\int_{-a}^{a} f(x)dx = 0$. Energi vibrasi molekul diatomik dapat didekati secara kasar dengan energi osilator harmonik, dengan $\nu = (1/2\pi)(k/\mu)^{1/2}$ dan massa tereduksi $\mu = m_1m_2/(m_1 + m_2)$.

Metode Numerov merupakan metode numerik yang memungkinkan penentuan energi keadaan terikat dan fungsi gelombang untuk persamaan Schrödinger satu partikel satu dimensi.

Soal

Pembagian soal menurut bagian adalah sebagai berikut: Bagian 4.1 mencakup Soal 4.1–4.3; Bagian 4.2 mencakup Soal 4.4–4.23; Bagian 4.3 mencakup Soal 4.24–4.29; Bagian 4.4 mencakup Soal 4.30–4.48; dan soal umum mencakup Soal 4.49–4.53.

4.1 Dengan syarat-syarat tertentu terpenuhi, fungsi f(x) dapat dikembangkan menjadi deret pangkat tak berhingga di sekitar titik x = a:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(x - a)^n \qquad (4.84)$$

Diferensiasikan (4.84) sebanyak m kali, kemudian tetapkan x = a untuk menunjukkan bahwa $c_n = f^{(n)}(a)/n!$, sehingga diperoleh deret Taylor yang dikenal:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x - a)^n \qquad \textbf{(4.85)}$$

4.2 (a) Gunakan (4.85) untuk menurunkan beberapa suku pertama dalam pengembangan deret Taylor di sekitar x = 0 bagi fungsi sin x, kemudian simpulkan rumus umumnya. (b) Diferensiasikan deret Taylor pada bagian (a) untuk memperoleh deret Taylor bagi cos x.

4.3 (a) Tentukan pengembangan deret Taylor di sekitar x = 0 bagi e^x. (b) Gunakan deret Taylor (di sekitar x = 0) dari sin x, cos x, dan e^x untuk memverifikasi bahwa $e^{i\theta} = \cos\theta + i \sin\theta$ [Persamaan (1.28)].

4.4 Turunkan (4.29) untuk energi E suatu osilator klasik.

4.5 (a) Tentukan hubungan rekurensi bagi koefisien c_n dalam penyelesaian deret pangkat dari

$(1 - x^2)y''(x) - 2xy'(x) + 3y(x) = 0$.

(b) Nyatakan c_4 dalam c_0 dan c_5 dalam c_1.

4.6 Manakah di antara fungsi-fungsi berikut yang merupakan fungsi genap? Manakah yang merupakan fungsi ganjil? (a) sin x; (b) cos x; (c) tan x; (d) e^x; (e) 13; (f) x cos x; (g) $2 - 2x$; (h) $(3 + x^2)(3 - x^2)$.

4.7 Buktikan pernyataan-pernyataan setelah Persamaan (4.51) mengenai hasil kali fungsi genap dan fungsi ganjil.

4.8 (a) Jika f(x) merupakan fungsi genap yang dapat didiferensiasikan di semua titik, buktikan bahwa f′(x) merupakan fungsi ganjil. Jangan menganggap bahwa f(x) dapat dikembangkan menjadi deret Taylor. (b) Buktikan bahwa turunan fungsi ganjil yang dapat didiferensiasikan di semua titik merupakan fungsi genap. (c) Jika f(x) merupakan fungsi genap yang dapat didiferensiasikan di titik asal, tentukan f′(0).

4.9 Untuk keadaan dasar osilator harmonik satu dimensi, tentukan nilai rata-rata energi kinetik dan energi potensial; verifikasi bahwa $\langle T \rangle = \langle V \rangle$ dalam kasus ini.

4.10 Verifikasi faktor normalisasi bagi fungsi gelombang osilator harmonik dengan v = 1 dan v = 2.

4.11 Gunakan hubungan rekurensi (4.46) untuk menentukan fungsi gelombang osilator harmonik ternormalisasi dengan v = 3.

4.12 Tentukan c/c_0 bagi fungsi gelombang osilator harmonik dengan v = 4.

4.13 Untuk keadaan osilator harmonik dengan v = 1, tentukan posisi atau posisi-posisi yang paling mungkin ditempati partikel.

4.14 Gambarkan secara kasar grafik ψ dan ψ^2 bagi keadaan v = 5 dari osilator harmonik satu dimensi tanpa menentukan rumus eksplisit ψ.

4.15 Tentukan $\langle x \rangle$ bagi keadaan osilator harmonik dengan bilangan kuantum v.

4.16 Benar atau salah? (a) Semua fungsi gelombang osilator harmonik dengan v berupa bilangan bulat ganjil harus mempunyai simpul di titik asal. (b) Fungsi gelombang osilator harmonik v = 10 mempunyai 10 simpul bagian dalam. (c) Fungsi gelombang osilator harmonik v = 1 harus bernilai negatif untuk $x < 0$. (d) Tingkat-tingkat energi osilator harmonik berjarak sama. (e) Tingkat energi osilator harmonik satu dimensi tidak terdegenerasi.

4.17 Jelaskan persamaan dan perbedaan antara fungsi gelombang serta energi partikel satu dimensi dalam kotak dan osilator harmonik.

4.18 (a) Selesaikan persamaan osilator harmonik klasik (4.22) untuk memperoleh t sebagai fungsi x. Kemudian diferensiasikan persamaan tersebut untuk memperoleh dt/dx sebagai fungsi x. Anda mungkin perlu mencari rumus

turunannya. Tuliskan hasil dalam bentuk dt = f(x) dx, dengan f(x) suatu fungsi tertentu dari x. Rumus ini memberikan selang waktu infinitesimal yang dihabiskan osilator di dalam daerah infinitesimal selebar dx yang terletak pada x. Waktu yang diperlukan osilator untuk bergerak dari x = −A ke x = A adalah setengah periode. Jika dt dibagi setengah periode, diperoleh probabilitas bahwa osilator ditemukan dalam daerah dari x sampai x + dx. Tunjukkan bahwa probabilitas tersebut adalah

$[1/(\pi A\{1 - (x/A)^2\}^{1/2})]\, dx.$

(b) Berapakah nilai rapat probabilitas klasik $\pi^{-1}(A^2 - x^2)^{-1/2}$ pada titik balik $x = \pm A$? (c) Buat grafik A kali rapat probabilitas klasik terhadap x/A. Gunakan referensi daring kedua atau ketiga pada paragraf terakhir Bagian 4.2 untuk melihat grafik $|\psi|^2$ terhadap x bagi bilangan kuantum tinggi, misalnya v = 14, dan bandingkan grafik rapat probabilitas klasik Anda dengan grafik-grafik tersebut.

4.19 Tentukan nilai eigen dan fungsi eigen $\hat{H}$ bagi sistem satu dimensi dengan $V(x) = \infty$ untuk $x < 0$ dan $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ untuk $x \geq 0$.

4.20 (a) Osilator harmonik tiga dimensi mempunyai fungsi energi potensial

$V = \frac{1}{2}k_x x^2 + \frac{1}{2}k_\gamma y^2 + \frac{1}{2}k\_z\, z^2,$

dengan k_x, k_γ, dan k_z sebagai tiga konstanta gaya. Tentukan nilai eigen energinya dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger. (b) Jika $k_x = k_\gamma = k\_z$, tentukan derajat degenerasi masing-masing dari empat tingkat energi terendah.

4.21 Polinomial Hermite didefinisikan oleh

$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2}[d^n(e^{-z^2})/dz^n].$

(a) Verifikasi bahwa

$H_0 = 1, \quad H_1 = 2z, \quad H_2 = 4z^2 - 2, \quad H_3 = 8z^3 - 12z.$

(b) Polinomial Hermite memenuhi hubungan berikut (Pauling dan Wilson, halaman 77–79):

$zH_n(z) = nH_{n-1}(z) + \frac{1}{2}H_{n+1}(z).$

Verifikasi identitas ini untuk n = 0, 1, dan 2. (c) Fungsi gelombang osilator harmonik ternormalisasi dapat dituliskan sebagai (Pauling dan Wilson, halaman 79–80):

$$\psi_v(x) = (2^v v!)^{-1/2}(\alpha/\pi)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} H_v(\alpha^{1/2}x) \qquad (4.86)$$

Verifikasi (4.86) bagi tiga keadaan terendah.

4.22 Ketika persamaan diferensial homogen linear orde kedua dituliskan dalam bentuk (2.3), setiap titik tempat P(x) atau Q(x) menjadi tak hingga disebut titik

singular atau singularitas. Dalam menyelesaikan persamaan diferensial menggunakan metode deret pangkat, substitusi yang tepat untuk menghasilkan hubungan rekurensi dua suku sering dapat ditemukan dengan menelaah persamaan diferensial di dekat singularitasnya. Bagi persamaan Schrödinger osilator harmonik (4.32), singularitasnya berada pada $x = \pm\infty$. Untuk memeriksa apakah $x = \infty$ merupakan titik singular, lakukan substitusi $z = 1/x$ dan periksa koefisien pada $z = 0$. Verifikasi bahwa $\exp(-\alpha x^2/2)$ merupakan penyelesaian hampiran (4.32) untuk $|x|$ yang sangat besar.

4.23 (a) Tulislah program komputer yang menggunakan hubungan rekurensi (4.39) untuk menghitung ψ/c_0 pada (4.40) terhadap $\alpha^{1/2}x$, untuk nilai $\alpha^{1/2}x$ dari 0 sampai 6 dengan kenaikan 0,5 dan untuk nilai tertentu $mE\hbar^{-2}/\alpha = E/h\nu$. Sertakan pengujian untuk menghentikan penjumlahan suku dalam deret tak berhingga ketika suku terakhir yang dihitung telah cukup kecil. (b) Jalankan program untuk $E/h\nu = 0{,}499$; 0,5; dan 0,501 guna memverifikasi Gambar 4.2.

4.24 (a) Spektrum serapan inframerah $^1H^{35}Cl$ mempunyai pita terkuat pada $8{,}65 \times 10^{13}$ Hz. Hitung konstanta gaya ikatan dalam molekul ini. (b) Tentukan energi vibrasi titik nol hampiran $^1H^{35}Cl$. (c) Prediksikan frekuensi pita inframerah terkuat $^2H^{35}Cl$.

4.25 Pita $v = 0 \rightarrow 1$ dan $v = 0 \rightarrow 2$ dari $^1H^{35}Cl$ terjadi pada 2885,98 cm^{-1} dan 5667,98 cm^{-1}. (a) Hitung ν_e/c dan $\nu_e x_e/c$ bagi molekul ini. (b) Prediksikan bilangan gelombang pita $v = 0 \rightarrow 3$ dari $^1H^{35}Cl$.

4.26 (a) Pita $v = 0 \rightarrow 1$ dari LiH terjadi pada 1359 cm^{-1}. Hitung rasio populasi $v = 1$ terhadap $v = 0$ pada 25 °C dan pada 200 °C. (b) Kerjakan hal yang sama seperti pada bagian (a) untuk ICl, yang pita inframerah terkuatnya terjadi pada 381 cm^{-1}.

4.27 (a) Verifikasi (4.62). (b) Tentukan persamaan yang bersesuaian bagi transisi $v = 0 \rightarrow v_2$.

4.28 Tunjukkan bahwa jika U(R) pada Gambar 4.6 dikembangkan menjadi deret Taylor di sekitar $R = R_e$ dan suku-suku yang mengandung $(R - R_e)^3$ serta pangkat yang lebih tinggi diabaikan—karena suku-suku tersebut kecil untuk R dekat R_e—maka diperoleh potensial osilator harmonik dengan $k = (d^2U/dR^2) \big| R=R_e$.

4.29 Fungsi Morse $U(R) = D_e[1 - e^{-a(R-R_e)}]^2$ sering digunakan untuk menghampiri kurva U(R) suatu molekul diatomik, dengan energi disosiasi kesetimbangan molekul D_e didefinisikan sebagai $D_e \equiv U(\infty) - U(R_e)$. (a) Verifikasi bahwa persamaan D_e tersebut dipenuhi oleh fungsi Morse. (b) Tunjukkan bahwa $a = (k_e/2D_e)^{1/2}$.

Untuk Soal 4.30–4.38, gunakan program yang serupa dengan program pada Tabel 4.1, lembar kerja, atau sistem aljabar komputer seperti Mathcad. Jika nilai eigen

negatif dicari menggunakan Excel 2010, hilangkan tanda centang pada kotak **Make Unconstrained Variables Non-Negative** di kotak **Solver Parameters**.

4.30 Gunakan metode Numerov untuk menentukan tiga energi keadaan stasioner terendah bagi partikel dalam kotak satu dimensi dengan panjang l dan dinding setinggi tak hingga.

4.31 (a) Gunakan metode Numerov untuk menentukan semua nilai eigen keadaan terikat bagi partikel dalam sumur persegi panjang (Bagian 2.4) dengan panjang l dan $V_0 = 20\hbar^2/ml^2$. Perhatikan bahwa V berbeda pada daerah yang berbeda dan $\psi = 0$ pada dinding. (b) Ulangi bagian (a) untuk $V_0 = 50\hbar^2/ml^2$. (c) Periksa hasil Anda dengan menggunakan pemecah otomatis pada program lembar kerja atau Mathcad untuk mencari akar Persamaan (2.35). Sebelum melakukannya, tentukan nilai hampiran dari grafik lembar kerja.

4.32 Gunakan metode Numerov untuk menentukan tiga nilai eigen energi terendah bagi sistem satu partikel dengan $V = cx^4$, dengan c suatu konstanta.

4.33 Gunakan metode Numerov untuk menentukan tiga nilai eigen energi terendah bagi sistem satu partikel dengan $V = ax^8$, dengan a suatu konstanta.

4.34 Gunakan metode Numerov untuk menentukan empat nilai eigen energi terendah bagi sistem satu partikel dengan $V = \infty$ untuk $x \leq 0$ dan $V = bx$ untuk $x > 0$, dengan b suatu konstanta positif. Untuk $b = mg$, sistem ini adalah partikel dalam medan gravitasi.

4.35 Tinjau sistem satu partikel dengan $V = -[1{,}5(\hbar^2/ma^2)]/[e^{x/a} + e^{-x/a}]^2$, dengan a suatu konstanta positif. (a) Tentukan V_r. (b) Gunakan lembar kerja, kalkulator grafik, atau Mathcad untuk menggambarkan V_r terhadap x_r. Lihat Soal 4.39. (c) Gunakan metode Numerov untuk menentukan semua nilai eigen keadaan terikat yang lebih kecil daripada −0,1. Fungsi eksponensial dituliskan sebagai `EXP(A7)` dalam Excel. Perhatikan catatan sebelum Soal 4.30.

4.36 Tinjau sistem satu partikel dengan $V = \frac{1}{4}b^2/c - bx^2 + cx^4$, dengan b dan c konstanta positif. Jika $\hbar$, m, dan b digunakan untuk menentukan A dan B dalam $E_r = E/A$ dan $x_r = x/B$, diperoleh hasil yang sama dengan osilator harmonik, kecuali k digantikan oleh b. Dengan demikian, Persamaan (4.74) memberikan $B = m^{-1/4}b^{-1/4}\hbar^{1/2}$. Persamaan V dalam soal ini menunjukkan bahwa $[bx^2] = [cx^4]$, sehingga $[c] = [b]/L^2$ dan dituliskan $c = ab/B^2 = ab/m^{-1/2}b^{-1/2}\hbar$, dengan a suatu konstanta tak berdimensi. (a) Verifikasi bahwa $V_r = 1/(4a) - x_r^2 + ax_r^4$. (b) Gunakan lembar kerja atau kalkulator grafik untuk menggambarkan V_r terhadap x_r bagi $a = 0{,}05$. Bentuk V_r secara kasar menyerupai energi potensial bagi inversi molekul NH_3. (c) Untuk $a = 0{,}05$, gunakan metode Numerov untuk menentukan semua nilai eigen dengan $E_r < 10$. Petunjuk: beberapa nilai eigen terletak sangat berdekatan. Lihat juga Soal 4.37.

4.37 Potensial sumur ganda satu dimensi mempunyai $V = \infty$ untuk $x < -\frac{1}{2}l$; $V = 0$ untuk $-\frac{1}{2}l \le x \le -\frac{1}{4}l$; $V = V_0$ untuk $-\frac{1}{4}l < x < \frac{1}{4}l$; $V = 0$ untuk $\frac{1}{4}l \le x \le \frac{1}{2}l$; dan $V = \infty$ untuk $x > \frac{1}{2}l$, dengan l dan V_0 konstanta positif. Buat sketsa V. Gunakan metode Numerov untuk menentukan empat nilai eigen terendah dan fungsi eigen tak ternormalisasi yang bersesuaian bagi nilai $V_0/(\hbar^2/ml^2)$ berikut: (a) 1; (b) 100; (c) 1000. Bandingkan fungsi gelombang dan energi pada bagian (a) dengan fungsi dan energi partikel dalam kotak sepanjang l, serta hasil bagian (c) dengan fungsi dan energi partikel dalam kotak sepanjang $\frac{1}{4}l$. Petunjuk: pada bagian (b) dan (c), beberapa nilai eigen sangat berdekatan. Pada bagian (c), nilai eigen perlu ditentukan sampai banyak tempat desimal agar diperoleh fungsi eigen yang bentuknya baik. Fungsi eigen harus berupa fungsi genap atau fungsi ganjil.

4.38 (a) Dalam contoh Numerov bagi osilator harmonik, perhitungan dilakukan dari −5 sampai 5 dengan langkah 0,1 dan diperoleh 0,4999996 sebagai nilai eigen terendah. Untuk pilihan $x_{r,0}$ dan s_r ini, tentukan semua nilai eigen dengan $E_r < 6$; kemudian tentukan nilai eigen yang terletak di antara 11 dan 12 dan jelaskan mengapa hasilnya tidak teliti. Selanjutnya ubah $x_{r,0}$ atau s_r, atau keduanya, untuk memperoleh nilai yang teliti bagi nilai eigen tersebut. (b) Tentukan nilai eigen osilator harmonik dengan $E_r < 6$ jika perhitungan dilakukan dari −5 sampai 5 dengan langkah 0,5. (c) Tentukan nilai eigen osilator harmonik dengan $E_r < 6$ jika perhitungan dilakukan dari −3 sampai 3 dengan langkah 0,1.

4.39 Lembar kerja mengandung jebakan bagi pengguna yang tidak waspada. (a) Jika sel A1 berisi nilai 5, hasil apakah yang Anda harapkan dari rumus `=-A1^2+A1^2`? Perhatikan tanda minus. (b) Dengan Excel, masukkan 5 ke sel A1, masukkan `=-A1^2+A1^2` ke sel A2, dan masukkan `=+A1^2-A1^2` ke sel A3. Hasil apakah yang Anda peroleh?

4.40 Rumus lembar kerja dapat ditulis dengan lebih elegan jika sel-sel yang berisi parameter diberi nama. Cari cara memberi nama sel dalam program lembar kerja yang Anda gunakan. (a) Dalam contoh osilator harmonik, beri nama sel B3 dan D3 masing-masing sebagai Er dan sr. Kemudian ganti `$B$3` dan `$D$3` dengan Er dan sr dalam semua rumus pada lembar kerja. (b) Mengapa x2 tidak diperbolehkan sebagai nama sel lembar kerja?

4.41 Gunakan (4.67) untuk menunjukkan bahwa jika ψ_1 dalam metode Numerov dikalikan dengan suatu konstanta c, maka ψ_2, ψ_3, dan seterusnya semuanya juga dikalikan dengan c. Jadi, seluruh fungsi gelombang dikalikan dengan c, yang tidak memengaruhi nilai eigen yang ditemukan.

4.42 Gunakan fungsi gelombang osilator harmonik ternormalisasi yang diperoleh dengan metode Numerov dari −5 sampai 5 menggunakan langkah 0,1 untuk memperkirakan probabilitas partikel berada di daerah terlarang secara klasik bagi keadaan $v = 0$ dan $v = 1$.

4.43 Dalam deret Taylor (4.85) pada Soal 4.1, sebut titik x = a sebagai x_n, yakni $x_n \equiv a$, dan tetapkan $s \equiv x - a = x - x_n$ sehingga $x = x_n + s$. (a) Dengan notasi ini, tuliskan (4.85) sebagai $f(x_n + s)$ yang sama dengan deret pangkat dalam s dan evaluasi semua suku sampai s^5. (b) Dalam hasil bagian (a), ubah s menjadi −s untuk memperoleh deret bagi $f(x_n - s)$. Kemudian jumlahkan kedua deret dan abaikan suku s^6 serta pangkat yang lebih tinggi untuk menunjukkan bahwa

$$f(x_n + s) + f(x_n - s) \approx 2f(x_n) + f''(x_n)s^2 + (1/12)f^{(iv)}(x_n)s^4,$$

$$f_{n+1} \approx -f_{n-1} + 2f_n + f_n''s^2 + \tfrac{1}{12} f_n^{(\mathrm{iv})}s^4 \tag{4.87}$$

$$\psi_{n+1} \approx -\psi_{n-1} + 2\psi_n + \psi_n''s^2 + \tfrac{1}{12}\psi_n^{(\mathrm{iv})}s^4 \tag{4.88}$$

dengan notasi (4.65), tetapi ψ digantikan oleh f, kemudian f digantikan kembali oleh ψ. (c) Gantikan f dalam (4.87) dengan ψ″, kalikan persamaan yang diperoleh dengan s^2, abaikan suku s^6, selesaikan untuk $\psi_n^{(iv)}s^4$, dan gunakan $\psi'' = G\psi$ [Persamaan (4.66)] untuk menunjukkan bahwa

$$\psi_n^{(\mathrm{iv})}s^4 \approx G_{n+1}\psi_{n+1}s^2 + G_{n-1}\psi_{n-1}s^2 - 2G_n\psi_n s^2 \tag{4.89}$$

Substitusikan (4.89) dan $\psi_n'' = G_n\psi_n$ ke dalam (4.88), kemudian selesaikan untuk ψ_{n+1} guna menunjukkan bahwa Persamaan (4.67) berlaku.

4.44 Gunakan analisis dimensi untuk memverifikasi (4.74) bagi B.

4.45 Dalam menerapkan metode Numerov untuk menghitung simpul ψ_r, telah diasumsikan bahwa ψ berubah tanda ketika melewati suatu simpul. Akan tetapi, terdapat fungsi yang tidak mempunyai tanda berlawanan pada kedua sisi suatu simpul. Sebagai contoh, fungsi $y = x^2$ dan $y = x^4$ bernilai positif pada kedua sisi simpul x = 0. Bagi suatu fungsi y yang positif pada titik-titik tepat di sebelah kiri x = a, nol pada x = a, dan positif tepat di sebelah kanan x = a, definisi $y' = \lim_{\Delta x \to 0} \Delta y/\Delta x$ menunjukkan bahwa turunan y′ bernilai negatif tepat di sebelah kiri x = a dan positif tepat di sebelah kanan x = a. Karena itu, dengan menganggap y′ kontinu, y′ bernilai nol pada x = a. Pengecualiannya adalah fungsi seperti fungsi berbentuk V, y = |x|, yang turunannya diskontinu pada x = a. Akan tetapi, fungsi demikian dikesampingkan oleh syarat bahwa ψ′ harus kontinu. (a) Gunakan persamaan Schrödinger untuk menunjukkan bahwa jika ψ(x) = 0 pada x = a, maka ψ″ = 0 pada x = a, asalkan $V(a) \neq \infty$. (b) Diferensiasikan persamaan Schrödinger untuk menunjukkan bahwa jika ψ dan ψ′ keduanya nol pada x = a, maka ψ‴(a) = 0, asalkan $V'(a) \neq \infty$. Selanjutnya tunjukkan bahwa semua turunan yang lebih tinggi dari ψ bernilai nol pada x = a jika ψ dan ψ′ keduanya nol pada x = a dan tidak ada turunan V yang tak hingga pada x = a. Jika ψ dan seluruh turunannya nol pada x = a, deret Taylor (4.85) menunjukkan bahwa ψ nol di semua tempat. Akan tetapi, fungsi nol tidak diperbolehkan sebagai fungsi gelombang. Karena itu, ψ dan ψ′ tidak dapat keduanya nol pada suatu titik, dan fungsi gelombang harus mempunyai tanda berlawanan pada kedua sisi suatu simpul.

4.46 Misalkan $V = cx^8$, dengan c suatu konstanta positif, dan hendak dicari semua nilai eigen dengan $E_r < 10$. (a) Tunjukkan bahwa $V_r = x_r^8$ dan bahwa untuk $E_r = 10$, batas-batas daerah yang diizinkan secara klasik terletak pada $x_r = \pm 1{,}33$. (b) Siapkan lembar kerja dan verifikasi bahwa jika digunakan $x_{r,0} = -3$, $x_r,\text{maks} = 3$, dan $s_r = 0{,}05$, ψ mengalami osilasi palsu untuk $|x_r| > 2{,}65$. (c) Verifikasi bahwa $1 - G_r s_r^2/12 \approx 0$ untuk $|x_r| = 2{,}65$, sehingga $1 - G_r s_r^2/12$ bernilai negatif untuk $|x_r| > 2{,}65$. (d) Gunakan lembar kerja untuk memverifikasi bahwa osilasi palsu hilang jika digunakan $x_{r,0} = -2{,}5$, $x_r,\text{maks} = 2{,}5$, dan $s_r = 0{,}05$; atau $x_{r,0} = -3$, $x_r,\text{maks} = 3$, dan $s_r = 0{,}02$.

4.47 Modifikasikan program pada Tabel 4.1 untuk menentukan fungsi gelombang ternormalisasi.

4.48 Tuliskan ulang program pada Tabel 4.1 dengan menghilangkan seluruh variabel larik.

4.49 Lembar kerja dan sistem aljabar komputer dapat dengan mudah digunakan untuk menyelesaikan persamaan berbentuk $f(x) = 0$. Sebagai contoh, misalkan hendak diselesaikan $e^x = 2 - x^2$. Grafik yang dibuat komputer menunjukkan bahwa fungsi $e^x - 2 + x^2$ sama dengan nol hanya pada dua titik, satu positif dan satu negatif. Dalam Excel, masukkan tebakan awal 0 bagi x ke sel A1 dan `=EXP(A1)-2+A1^2` ke sel A3. Kemudian klik tab **Data** dan, dalam kelompok **Analysis**, pilih **Solver**. Dalam kotak **Solver Parameters**, masukkan A3 di samping **Set Objective**. Setelah **To**, klik **Value Of** dan masukkan 0. Masukkan A1 setelah **By Changing Cells**; kemudian klik **Options** dan ubah **Precision** menjadi `1E-14`. Klik **OK**, lalu klik **Solve**. Excel memberikan hasil 0,537274449173857, dengan 2×10^{-15} pada sel A3. Untuk mencari akar negatif, mulai dengan -1 pada sel A1 dan gunakan Solver. (a) Gunakan lembar kerja atau Mathcad untuk menyelesaikan Soal 2.24 bagi energi keadaan terikat suatu partikel dalam sumur. (b) Bagi potensial sumur ganda pada Soal 4.37, penerapan prosedur pada Bagian 2.4 menunjukkan bahwa tingkat energi keadaan terikat yang diizinkan memenuhi

$$\left[(V_{0r} - E_r)/E_r\right]^{1/2} \tan\left[(E_r/8)^{1/2}\right] = -(\tanh\{\left[(V_{0r} - E_r)/8\right]^{1/2}\})^p \qquad (4.90)$$

dengan $V_{0r} \equiv V_0/(\hbar^2/ml^2)$, $E_r \equiv E/(\hbar^2/ml^2)$, dan $p = -1$ untuk fungsi gelombang genap serta $p = 1$ untuk fungsi gelombang ganjil. Fungsi tangen hiperbolik, yang didefinisikan sebagai $\tanh z \equiv (e^z - e^{-z})/(e^z + e^{-z})$, dapat dihasilkan dengan mengetik `TANH` dalam Excel. Gunakan (4.90) dan lembar kerja atau Mathcad untuk menentukan empat energi sumur ganda terendah bagi setiap nilai V_{0r} pada Soal 4.37.

4.50 (a) Tunjukkan bahwa jika k_i dan f_i masing-masing merupakan nilai eigen dan fungsi eigen dari operator linear $\hat{A}$, maka ck_i dan f_i masing-masing merupakan nilai eigen dan fungsi eigen dari $c\hat{A}$. (b) Berikan suatu operator yang nilai

eigennya ½, ³⁄₂, ⁵⁄₂, dan seterusnya. (c) Berikan suatu operator yang nilai eigennya 1, 2, 3, dan seterusnya.

4.51 (a) Suatu sistem tertentu dalam keadaan stasioner tertentu mempunyai $\psi = Ne^{-ax^4}$, dengan N konstanta normalisasi. Tentukan fungsi energi potensial sistem V(x) dan energinya E. Petunjuk: tingkat nol energi bersifat sembarang, sehingga pilih V(0) = 0. (b) Buat sketsa V(x). (c) Apakah ψ tersebut merupakan fungsi keadaan dasar? Jelaskan.

4.52 Tunjukkan bahwa penambahan suatu konstanta C pada energi potensial tidak mengubah fungsi gelombang keadaan stasioner dan hanya menambahkan C pada nilai eigen energi.

4.53 Benar atau salah? (a) Dalam daerah terlarang secara klasik, E > V bagi suatu keadaan stasioner. (b) Jika fungsi gelombang osilator harmonik ψ_v merupakan fungsi genap, maka ψ_{v+1} merupakan fungsi ganjil. (c) Bagi fungsi gelombang osilator harmonik, $\int_{-\infty}^{\infty}\psi_v^*(x)\psi_{v+1}(x)dx = 0$. (d) Pada suatu simpul dalam fungsi gelombang keadaan stasioner terikat, ψ'' harus nol asalkan V tidak tak hingga pada simpul tersebut. (e) Jarak antara tingkat vibrasi berdekatan suatu molekul diatomik tetap konstan ketika energi vibrasi meningkat. (f) Bagi fungsi gelombang osilator harmonik v = 25, tanda ψ di daerah terlarang secara klasik sebelah kanan berlawanan dengan tandanya di daerah terlarang secara klasik sebelah kiri. (g) Jumlah puncak pada grafik $|\psi_v|^2$ sama dengan v + 1, dengan v bilangan kuantum.

Integrasi Nilai Keislaman

Bagian ini merupakan tambahan editorial untuk menghubungkan ketertiban matematis dan ketelitian komputasi dalam pembahasan osilator harmonik dengan nilai-nilai keislaman. Bagian ini bukan bagian dari teks asli sumber dan tidak mengubah isi ilmiah Bab 4.

Ukuran dan Keteraturan dalam Penciptaan

إِنَّا كُلَّ شَيْءٍ خَلَقْنَاهُ بِقَدَرٍ

"Sesungguhnya Kami menciptakan segala sesuatu menurut ukuran." (Q.S. Al-Qamar [54]: 49)

Ayat ini menegaskan bahwa ciptaan Allah berlangsung dengan ukuran dan ketetapan. Dalam pembelajaran osilator harmonik, keteraturan tersebut dapat direnungkan melalui hubungan kuantitatif antara massa, konstanta gaya, frekuensi, energi, serta bentuk fungsi gelombang. Ayat ini tidak dimaksudkan sebagai rumus fisika, melainkan sebagai landasan teologis untuk menghargai keteraturan alam dan mengkajinya secara teliti.

Ihsan dan Ketelitian Ilmiah

إِنَّ اللَّهَ كَتَبَ الْإِحْسَانَ عَلَى كُلِّ شَيْءٍ

"Sesungguhnya Allah telah menetapkan ihsan pada segala sesuatu." (H.R. Muslim)

Prinsip ihsan mendorong peneliti dan mahasiswa melakukan pekerjaan dengan sebaik-baiknya. Dalam komputasi kuantum, hal ini diwujudkan melalui pemilihan langkah numerik yang memadai, pengujian konvergensi, pemeriksaan kondisi batas, verifikasi hasil Solver, serta pelaporan ketidakpastian dan keterbatasan metode secara jujur.

BAB 5
MOMENTUM SUDUT

5.1 Penetapan Serentak Beberapa Besaran

Dalam bab ini kita membahas momentum sudut, dan dalam bab berikutnya akan diperlihatkan bahwa untuk keadaan stasioner atom hidrogen, besar momentum sudut elektron adalah konstan. Sebagai pendahuluan, kita mempertimbangkan kriteria yang dapat digunakan untuk memutuskan besaran-besaran mana dari suatu sistem yang dapat diberi nilai pasti secara serentak.

Dalam Bagian 3.3 telah dipostulatkan bahwa apabila fungsi keadaan ψ merupakan fungsi eigen operator Â dengan nilai eigen s, maka pengukuran besaran fisik A pasti memberikan hasil s. Apabila ψ secara serentak merupakan fungsi eigen dua operator Â dan B̂, yaitu apabila Âψ = sψ dan B̂ψ = tψ, maka besaran fisik A dan B dapat diberi nilai pasti secara serentak. Kapan ψ dapat menjadi fungsi eigen dua operator yang berbeda secara serentak? Dalam Bab 7 akan dibuktikan dua teorema berikut. Pertama, syarat perlu bagi keberadaan suatu himpunan lengkap fungsi eigen serentak dari dua operator ialah bahwa kedua operator itu saling komutatif. (Kata *lengkap* digunakan di sini dalam arti teknis tertentu yang belum perlu dibahas sampai Bab 7.) Sebaliknya, apabila Â dan B̂ merupakan dua operator yang saling komutatif dan berkaitan dengan besaran fisik, maka terdapat suatu himpunan lengkap fungsi yang merupakan fungsi eigen bagi Â dan B̂ sekaligus. Jadi, apabila $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, ψ dapat merupakan fungsi eigen kedua operator tersebut.

Ingatlah bahwa komutator Â dan B̂ adalah $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ [Persamaan (3.7)]. Identitas-identitas berikut berguna untuk mengevaluasi komutator. Identitas-identitas ini dibuktikan dengan menuliskan komutator secara lengkap (Soal 5.2).

$$[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}] \tag{5.1}$$

$$[\hat{A}, \hat{A}^n] = 0, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{5.2}$$

$$[k\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}, k\hat{B}] = k[\hat{A}, \hat{B}] \tag{5.3}$$

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \qquad [\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}] \tag{5.4}$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \qquad [\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] \tag{5.5}$$

Dalam persamaan-persamaan tersebut, k adalah suatu konstanta dan operator-operatornya dianggap linear.

Contoh

Dengan bertolak dari $[\partial/\partial x, x] = 1$ [Persamaan (3.8)], gunakan identitas komutator (5.1)–(5.5) untuk menentukan (a) $[\hat{x}, \hat{p}_x]$, (b) $[\hat{x}, \hat{p}_x^2]$, dan (c) $[\hat{x}, \hat{H}]$ bagi sistem satu partikel tiga dimensi.

(a) Penggunaan (5.3), (5.1), dan $[\partial/\partial x, x] = 1$ memberikan

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = \left[x, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right] = \frac{\hbar}{i}\left[x, \frac{\partial}{\partial x}\right] = -\frac{\hbar}{i}\left[\frac{\partial}{\partial x}, x\right] = -\frac{\hbar}{i}$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \tag{5.6}$$

(b) Penggunaan (5.5) dan (5.6) memberikan

$$[\hat{x}, \hat{p}_x^2] = [\hat{x}, \hat{p}_x]\hat{p}_x + \hat{p}_x[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \cdot \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \cdot i\hbar$$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x^2] = 2\hbar^2\frac{\partial}{\partial x} \tag{5.7}$$

(c) Penggunaan (5.4), (5.3), dan (5.7) memberikan

$$= \frac{1}{2m}2\hbar^2\frac{\partial}{\partial x} + 0 + 0$$

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}_x \tag{5.8}$$

Latihan. Tunjukkan bahwa untuk sistem satu partikel tiga dimensi berlaku

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = -i\hbar\,\partial V(x, y, z)/\partial x \tag{5.9}$$

Komutator-komutator tersebut memiliki konsekuensi fisik yang penting. Karena $[\hat{x}, \hat{p}_x] \neq 0$, fungsi keadaan pada umumnya tidak dapat diharapkan menjadi fungsi eigen $\hat{x}$ dan $\hat{p}_x$ secara serentak. Oleh karena itu, nilai pasti x dan p_x tidak dapat ditetapkan secara bersamaan, sesuai dengan prinsip ketidakpastian. Karena $\hat{x}$ dan $\hat{H}$ tidak saling komutatif, energi dan koordinat x juga tidak dapat diharapkan mempunyai nilai pasti pada saat yang sama. Suatu keadaan stasioner, yang mempunyai energi pasti, menunjukkan sebaran nilai x yang mungkin; probabilitas untuk mengamati berbagai nilai x diberikan oleh postulat Born.

Untuk fungsi keadaan ψ yang bukan fungsi eigen $\hat{A}$, pengukuran A pada sistem-sistem identik menghasilkan berbagai kemungkinan keluaran. Kita memerlukan suatu ukuran bagi penyebaran atau dispersi himpunan nilai teramati A_i. Apabila $\langle A \rangle$ adalah rata-rata nilai-nilai tersebut, penyimpangan setiap hasil pengukuran dari rata-rata ialah $A_i - \langle A \rangle$. Rata-rata semua penyimpangan akan bernilai nol karena penyimpangan positif dan negatif saling meniadakan. Agar semua penyimpangan memberikan kontribusi positif, penyimpangan itu dikuadratkan. Rata-rata kuadrat penyimpangan disebut varians A, dilambangkan dalam statistika dengan $\sigma^2(A)$ dan dalam mekanika kuantum dengan $(\Delta A)^2$.

$$(\Delta A)^2 \equiv \sigma^2(A) \equiv \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \int \Psi^* (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \Psi \, d\tau \qquad (5.10)$$

Di sini digunakan ungkapan nilai rata-rata (3.88). Definisi (5.10) ekuivalen dengan hubungan berikut (Soal 5.7).

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \qquad (5.11)$$

Akar kuadrat positif varians disebut simpangan baku, σ(A) atau ΔA. Simpangan baku merupakan ukuran penyebaran yang paling umum digunakan, dan di sini dipakai sebagai ukuran "ketidakpastian" besaran A.

Pada tahun 1929, Robertson membuktikan bahwa hasil kali simpangan baku dua besaran suatu sistem mekanika kuantum yang fungsi keadaannya ψ harus memenuhi pertidaksamaan berikut.

$$\sigma(A)\sigma(B) \equiv \Delta A \, \Delta B \geq \frac{1}{2} \left| \int \Psi^* [\hat{A}, \hat{B}] \Psi \, d\tau \right| \qquad (5.12)$$

Pembuktian (5.12), yang mengikuti postulat-postulat mekanika kuantum, digariskan dalam Soal 7.60. Apabila $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ saling komutatif, integral pada (5.12) bernilai nol, sehingga ΔA dan ΔB dapat sama-sama nol, sesuai dengan pembahasan sebelumnya.

Sebagai contoh penerapan (5.12), dengan menggunakan (5.6), $|z_1 z_2| = |z_1||z_2|$ [Persamaan (1.34)], dan normalisasi, diperoleh

$$\Delta x \, \Delta p_x \geq \frac{1}{2} \left| \int \Psi^* [\hat{x}, \hat{p}_x] \Psi \, d\tau \right| = \frac{1}{2} \left| \int \Psi^* i\hbar \Psi \, d\tau \right| = \frac{1}{2} \hbar |i| \left| \int \Psi^* \Psi \, d\tau \right|$$

$$\sigma(x)\sigma(p_x) \equiv \Delta x \, \Delta p_x \geq \tfrac{1}{2}\hbar \qquad (5.13)$$

Persamaan (5.13) biasanya dianggap sebagai pernyataan kuantitatif prinsip ketidakpastian Heisenberg (Bagian 1.3). Akan tetapi, makna simpangan baku dalam Persamaan (5.12) dan (5.13) agak berbeda dari makna ketidakpastian dalam Bagian 1.3. Untuk menentukan Δx dalam (5.13), kita mengambil sejumlah sangat besar sistem yang semuanya mempunyai fungsi keadaan ψ yang sama, lalu melakukan satu pengukuran x pada masing-masing sistem. Dari nilai-nilai terukur x_i, dihitung $\langle x \rangle$ dan kuadrat penyimpangan $(x_i - \langle x \rangle)^2$. Rata-rata kuadrat penyimpangan memberikan varians, dan akar kuadratnya memberikan simpangan baku $\sigma(x) \equiv \Delta x$. Selanjutnya, diambil banyak sistem lain yang masing-masing berada dalam keadaan ψ yang sama seperti yang digunakan untuk memperoleh Δx, lalu dilakukan satu pengukuran p_x pada setiap sistem dan dihitung Δp_x. Jadi, besaran statistik Δx dan Δp_x pada (5.13) bukan galat pengukuran individual dan tidak diperoleh dari pengukuran x dan p_x secara serentak (lihat Ballentine, hlm. 225–226).

Misalkan $\varepsilon(x)$ adalah galat khas dalam satu pengukuran x dan $\eta(p_x)$ adalah gangguan khas pada p_x yang disebabkan oleh pengukuran x. Pada tahun 1927, Heisenberg menganalisis eksperimen pikiran tertentu yang melakukan pengukuran posisi dan menyimpulkan bahwa hasil kali $\varepsilon(x)\eta(p_x)$ berorde sebesar h atau lebih besar. Heisenberg tidak memberikan definisi yang presisi bagi besaran-besaran itu. Ozawa menuliskan kembali relasi Heisenberg sebagai

$$\varepsilon(x)\eta(p_x) \geq \tfrac{1}{2}\hbar$$

dengan $\varepsilon(x)$ didefinisikan sebagai akar rata-rata kuadrat penyimpangan nilai x terukur dari nilai teoretis, sedangkan $\eta(p_x)$ didefinisikan sebagai akar rata-rata kuadrat perubahan p_x yang dihasilkan oleh pengukuran x. Secara lebih umum, untuk dua besaran sembarang, Ozawa menuliskan prinsip ketidakpastian Heisenberg sebagai

$$\varepsilon(A)\eta(B) \geq \frac{1}{2}\left|\int \Psi^*[\hat{A}, \hat{B}]\Psi \, d\tau\right| \qquad (5.14)$$

Ozawa mengemukakan argumen bahwa dalam keadaan tertentu pertidaksamaan Heisenberg (5.14) dapat dilanggar. Ia menurunkan hubungan berikut untuk menggantikan (5.14) [M. Ozawa, *Phys. Rev. A*, 67, 042105 (2003); tersedia pada arxiv.org/abs/quant-ph/0207121].

$$\varepsilon(A)\eta(B) + \varepsilon(A)\sigma(B) + \sigma(A)\eta(B) \geq \tfrac{1}{2}\,|\int \psi^*[\hat{A}, \hat{B}]\psi \, d\tau|$$

di mana $\sigma(A)$ dan $\sigma(B)$ dihitung dari (5.10). Pada tahun 2012, suatu eksperimen yang mengukur komponen spin neutron menemukan bahwa pertidaksamaan galat–gangguan Heisenberg (5.14) tidak dipenuhi oleh komponen spin, sedangkan pertidaksamaan Ozawa dipenuhi [J. Erhart dkk., *Nature Physics*, 8, 185 (2012); arxiv.org/abs/1201.1833].

Pertidaksamaan lain adalah relasi ketidakpastian Heisenberg untuk pengukuran serentak dua besaran A dan B oleh suatu alat yang mengukur A dan B sekaligus.

$$\varepsilon(A)\varepsilon(B) \geq \tfrac{1}{2}\,|\int \psi^*[\hat{A}, \hat{B}]\psi \, d\tau|$$

di mana $\varepsilon(A)$ dan $\varepsilon(B)$ adalah galat eksperimental pada nilai A dan B yang diukur. Relasi ini telah dibuktikan berlaku, asalkan suatu asumsi yang masuk akal—yang diyakini berlaku bagi semua alat ukur yang tersedia saat ini—dipenuhi (lihat rujukan 6–12 dalam makalah Ozawa yang disebutkan di atas).

Contoh

Persamaan (3.91), (3.92), (3.39), persamaan setelah (3.89), dan Soal 3.48 memberikan hasil berikut untuk keadaan dasar partikel dalam kotak tiga dimensi.

$$\langle x\rangle = a/2, \quad \langle x^2\rangle = (1/3 - 1/2\pi^2)a^2, \quad \langle p_x\rangle = 0, \quad \langle p_x{}^2\rangle = h^2/4a^2$$

Gunakan hasil-hasil ini untuk memeriksa bahwa prinsip ketidakpastian (5.13) dipenuhi.

Kita mempunyai

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = (1/3 - 1/2\pi^2)a^2 - a^2/4 = [(\pi^2 - 6)/12\pi^2]a^2$$

$$\Delta x = [(\pi^2 - 6)/12]^{1/2}(a/\pi)$$

$$(\Delta p_x)^2 = \langle p_x{}^2\rangle - \langle p_x\rangle^2 = h^2/4a^2, \quad \Delta p_x = h/2a$$

$$\Delta x\, \Delta p_x = [(\pi^2 - 6)/12]^{1/2}(h/2\pi) = 0{,}568\hbar > \tfrac{1}{2}\hbar$$

Terdapat pula relasi ketidakpastian yang melibatkan energi dan waktu.

$$\Delta E\, \Delta t \geq \tfrac{1}{2}\hbar \qquad (5.15)$$

Sejumlah buku menyatakan bahwa (5.15) diturunkan dari (5.12) dengan mengambil $i\hbar\partial/\partial t$ sebagai operator energi dan perkalian dengan t sebagai operator waktu. Namun, operator energi adalah Hamiltonian $\hat{H}$, bukan $i\hbar\partial/\partial t$. Selain itu, waktu bukan suatu *observable*, melainkan parameter dalam mekanika kuantum. Karena itu, tidak terdapat operator waktu mekanika kuantum. (Istilah *observable* dalam mekanika kuantum berarti sifat sistem yang dapat diukur secara fisik.) Persamaan (5.15) harus diturunkan melalui perlakuan khusus yang tidak dibahas di sini (lihat Ballentine, Bagian 12.3). Penurunan (5.15) menunjukkan bahwa Δt harus ditafsirkan sebagai waktu hidup keadaan yang energinya tidak pasti sebesar ΔE. Sering dinyatakan bahwa Δt dalam (5.15) adalah lamanya pengukuran energi. Namun, Aharonov dan Bohm menunjukkan bahwa "energi dapat diukur secara dapat-ulang dalam waktu yang sesingkat apa pun" [Y. Aharonov dan D. Bohm, *Phys. Rev.*, 122, 1649 (1961); 134, B1417 (1964); lihat juga S. Massar dan S. Popescu, *Phys. Rev. A*, 71, 042106 (2005); P. Busch, *The Time–Energy Uncertainty Relation*, arxiv.org/abs/quant-ph/0105049].

Sekarang pertimbangkan kemungkinan menetapkan nilai pasti secara serentak bagi tiga besaran fisik A, B, dan C. Misalkan

$$[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \quad \text{and} \quad [\hat{A}, \hat{C}] = 0 \qquad (5.16)$$

Apakah kondisi ini cukup untuk menjamin keberadaan fungsi eigen serentak bagi ketiga operator? Karena $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, kita dapat membangun satu himpunan bersama fungsi eigen $\hat{A}$ dan $\hat{B}$. Karena $[\hat{A}, \hat{C}] = 0$, kita dapat membangun satu himpunan bersama fungsi eigen $\hat{A}$ dan $\hat{C}$. Apabila kedua himpunan fungsi eigen tersebut sama, kita memperoleh satu himpunan bersama fungsi eigen bagi ketiga operator. Oleh sebab itu, pertanyaannya ialah: apakah himpunan fungsi eigen operator linear $\hat{A}$ ditentukan secara unik, selain konstanta pengali sembarang? Secara umum jawabannya tidak. Apabila terdapat lebih dari satu fungsi eigen bebas yang bersesuaian dengan suatu nilai eigen $\hat{A}$, yaitu apabila terjadi degenerasi, maka setiap kombinasi linear fungsi-fungsi eigen dari nilai eigen terdegenerasi itu juga merupakan fungsi eigen $\hat{A}$ (Bagian 3.6). Kombinasi linear yang tepat untuk menghasilkan fungsi eigen $\hat{B}$ mungkin berbeda dari kombinasi linear yang menghasilkan fungsi eigen $\hat{C}$. Ternyata, agar terdapat himpunan

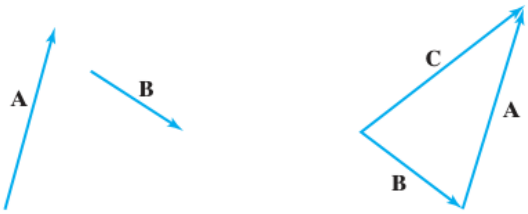
lengkap bersama fungsi eigen bagi ketiga operator, selain (5.16) juga disyaratkan $[\hat{B}, \hat{C}] = 0$. Dengan demikian, agar suatu himpunan lengkap fungsi menjadi fungsi eigen serentak beberapa operator, setiap operator harus saling komutatif dengan semua operator lainnya.

5.2 Vektor

Pada bagian berikutnya akan diselesaikan masalah nilai eigen momentum sudut, yang merupakan besaran vektor. Oleh sebab itu, terlebih dahulu kita meninjau kembali konsep vektor.

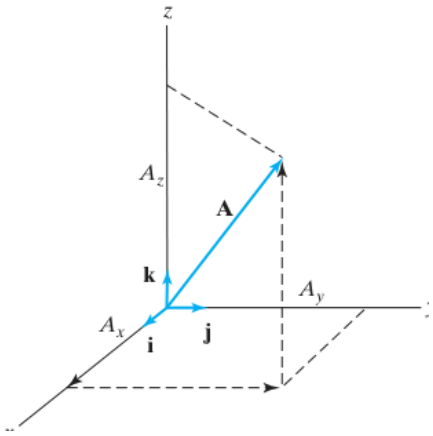
Sifat fisik, misalnya massa, panjang, dan energi, yang sepenuhnya ditentukan oleh besarnya disebut skalar. Sifat fisik, misalnya gaya, kecepatan, dan momentum, yang memerlukan penetapan besar sekaligus arah disebut vektor. Vektor dinyatakan oleh ruas garis berarah; panjang dan arahnya menyatakan besar dan arah sifat tersebut.

Jumlah dua vektor A dan B didefinisikan dengan prosedur berikut. Geser vektor pertama sehingga pangkalnya menyentuh ujung vektor kedua, sambil mempertahankan arah vektor pertama. Kemudian gambarkan vektor baru dari pangkal vektor kedua menuju ujung vektor pertama. Lihat Gambar 5.1. Hasil kali vektor dengan skalar, cA, didefinisikan sebagai vektor yang panjangnya |c| kali panjang A, searah dengan A apabila c positif, atau berlawanan arah dengan A apabila c negatif.



Gambar 5.1. Penjumlahan dua vektor.

Untuk memperoleh cara aljabar, selain cara geometri, dalam menyatakan vektor, kita menetapkan koordinat Kartesius di ruang. Kita menggambar vektor satuan sepanjang satu yang diarahkan sepanjang sumbu x positif dan menamakannya i. (Tidak ada hubungannya dengan $i = \sqrt{-1}$.) Vektor satuan pada arah y dan z positif masing-masing dinamakan j dan k (Gambar 5.2). Untuk menyatakan vektor sembarang A dalam tiga vektor satuan tersebut, mula-mula A digeser sehingga pangkalnya berada di titik asal tanpa mengubah arahnya. Selanjutnya ditentukan proyeksi A pada sumbu x, y, dan z, yaitu A_x, A_γ, dan A_z. Dari definisi penjumlahan vektor diperoleh hubungan berikut (Gambar 5.2).



Gambar 5.2. Vektor satuan i, j, dan k serta komponen-komponen vektor A.

$$\mathbf{A} = A_x\mathbf{i} + A_y\mathbf{j} + A_z\mathbf{k} \qquad \textbf{(5.17)}$$

Vektor A dapat ditentukan dengan menetapkan tiga komponennya, (A_x, A_γ, A_z). Karena itu, vektor dalam ruang tiga dimensi dapat didefinisikan sebagai himpunan berurutan tiga bilangan.

Dua vektor A dan B sama jika dan hanya jika semua komponen yang bersesuaian sama: $A_x = B_x$, $A_\gamma = B_\gamma$, dan A_z = B_z. Dengan demikian, satu persamaan vektor ekuivalen dengan tiga persamaan skalar.

Untuk menjumlahkan dua vektor, komponen-komponen yang bersesuaian dijumlahkan.

$$A + B = A_x i + A_\gamma j + A\_zk + B_x i + B_\gamma j + B\_zk$$

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = (A_x + B_x)\mathbf{i} + (A_y + B_y)\mathbf{j} + (A_z + B_z)\mathbf{k} \qquad \textbf{(5.18)}$$

Selain itu, apabila c adalah skalar, berlaku

$$c\mathbf{A} = cA_x\mathbf{i} + cA_y\mathbf{j} + cA_z\mathbf{k} \qquad \textbf{(5.19)}$$

Besar vektor A adalah panjangnya dan dinyatakan dengan A atau |A|. Besar A merupakan suatu skalar.

Hasil kali titik atau hasil kali skalar A · B dari dua vektor didefinisikan oleh

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = |\mathbf{A}||\mathbf{B}| \cos\theta = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A} \qquad \textbf{(5.20)}$$

di mana θ adalah sudut antara kedua vektor. Karena merupakan hasil kali tiga skalar, hasil kali titik adalah skalar. Perhatikan bahwa |A| cos θ merupakan proyeksi A pada B. Dari definisi penjumlahan vektor, proyeksi vektor A + B pada suatu vektor C sama dengan jumlah proyeksi A pada C dan proyeksi B pada C. Oleh karena itu,

$$(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{C} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{C} \qquad (5.21)$$

Karena ketiga vektor satuan i, j, dan k masing-masing mempunyai panjang satu dan saling tegak lurus, berlaku

$$\mathbf{i}\cdot\mathbf{i} = \mathbf{j}\cdot\mathbf{j} = \mathbf{k}\cdot\mathbf{k} = \cos 0 = 1, \qquad \mathbf{i}\cdot\mathbf{j} = \mathbf{j}\cdot\mathbf{k} = \mathbf{k}\cdot\mathbf{i} = \cos(\pi/2) = 0 \qquad (5.22)$$

Dengan menggunakan (5.22) dan hukum distributif (5.21), diperoleh

$$A \cdot B = (A_x i + A_y j + A\_z k) \cdot (B_x i + B_y j + B\_z k)$$

$$\boxed{\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} = A_xB_x + A_yB_y + A_zB_z} \qquad \textbf{(5.23)}$$

di mana enam dari sembilan suku dalam hasil kali titik bernilai nol.

Persamaan (5.20) memberikan

$$\boxed{\mathbf{A}\cdot\mathbf{A} = |\mathbf{A}|^2} \qquad \textbf{(5.24)}$$

Dengan menggunakan (5.23), diperoleh

$$\boxed{|\mathbf{A}| = (A_x^2 + A_y^2 + A_z^2)^{1/2}} \qquad \textbf{(5.25)}$$

Untuk vektor tiga dimensi terdapat jenis hasil kali lain. Hasil kali silang atau hasil kali vektor A × B adalah vektor yang besarnya

$$|\mathbf{A}\times\mathbf{B}| = |\mathbf{A}|\,|\mathbf{B}|\sin\theta \qquad (5.26)$$

dengan ruas garis yang tegak lurus pada bidang yang ditentukan oleh A dan B, dan arahnya sedemikian rupa sehingga A, B, dan A × B membentuk sistem tangan kanan, sebagaimana sumbu x, y, dan z membentuk sistem tangan kanan. Lihat Gambar 5.3. Dari definisi tersebut diperoleh B × A = −A × B. Selain itu, dapat dibuktikan bahwa (Taylor dan Mann, Bagian 10.2)

$$\mathbf{A}\times(\mathbf{B}+\mathbf{C}) = \mathbf{A}\times\mathbf{B} + \mathbf{A}\times\mathbf{C} \qquad (5.27)$$

Untuk ketiga vektor satuan berlaku

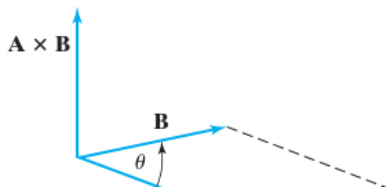
$$i \times i = j \times j = k \times k = \sin 0 = 0$$

$$i \times j = k,\ j \times i = -k,\ j \times k = i,\ k \times j = -i,\ k \times i = j,\ i \times k = -j$$

Dengan menggunakan persamaan-persamaan tersebut dan sifat distributif (5.27), diperoleh

$$A \times B = (A_x i + A_y j + A\_z k) \times (B_x i + B_y j + B\_z k)$$

$$A \times B = (A_y B\_z - A\_z B_y)i + (A\_z B_x - A_x B\_z)j + (A_x B_y - A_y B_x)k$$



Gambar 5.3. Hasil kali silang dua vektor.

Sebagai alat bantu ingatan, hasil kali silang dapat dinyatakan sebagai determinan (lihat Bagian 8.3).

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ A_x & A_y & A_z \\ B_x & B_y & B_z \end{vmatrix} = \mathbf{i}\begin{vmatrix} A_y & A_z \\ B_y & B_z \end{vmatrix} - \mathbf{j}\begin{vmatrix} A_x & A_z \\ B_x & B_z \end{vmatrix} + \mathbf{k}\begin{vmatrix} A_x & A_y \\ B_x & B_y \end{vmatrix} \qquad (5.28)$$

Kita mendefinisikan operator vektor del sebagai

$$\nabla \equiv \mathbf{i}\frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j}\frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k}\frac{\partial}{\partial z} \qquad \textbf{(5.29)}$$

Dari Persamaan (3.23), operator untuk vektor momentum linear ialah $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$.

Gradien fungsi g(x, y, z) didefinisikan sebagai hasil pengoperasian del pada g.

$$\textbf{grad}\, g(x, y, z) \equiv \nabla g(x, y, z) \equiv \mathbf{i}\frac{\partial g}{\partial x} + \mathbf{j}\frac{\partial g}{\partial y} + \mathbf{k}\frac{\partial g}{\partial z} \qquad \textbf{(5.30)}$$

Gradien fungsi skalar adalah fungsi vektor. Vektor ∇g(x, y, z) menyatakan laju perubahan spasial fungsi g: komponen x dari ∇g adalah laju perubahan g terhadap x, dan demikian pula untuk komponen lain. Dapat dibuktikan bahwa vektor ∇g menunjuk ke arah tempat laju perubahan g paling besar. Dari Persamaan (4.24), hubungan antara gaya dan energi potensial ialah

$$\mathbf{F} = -\nabla V(x, y, z) = -\mathbf{i}\frac{\partial V}{\partial x} - \mathbf{j}\frac{\partial V}{\partial y} - \mathbf{k}\frac{\partial V}{\partial z} \qquad (5.31)$$

Misalkan setiap komponen vektor A merupakan fungsi parameter t: $A_x = A_x(t)$, $A_\gamma = A_\gamma(t)$, dan A_z = A_z(t). Turunan A terhadap t didefinisikan sebagai

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \mathbf{i}\frac{dA_x}{dt} + \mathbf{j}\frac{dA_y}{dt} + \mathbf{k}\frac{dA_z}{dt} \qquad (5.32)$$

Notasi vektor merupakan cara yang ringkas untuk menyatakan variabel-variabel suatu fungsi. Fungsi gelombang sistem dua partikel dapat ditulis $\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$. Apabila r_1 adalah vektor dari titik asal menuju partikel 1, r_1 mempunyai komponen x_1, y_1, z_1, dan penetapan r_1 ekuivalen dengan penetapan ketiga koordinat tersebut. Hal yang sama berlaku bagi vektor r_2 dari titik asal menuju partikel 2. Karena itu, fungsi gelombang dapat ditulis $\psi(r_1, r_2)$. Notasi vektor juga dapat digunakan dalam integral. Sebagai contoh, integral atas seluruh ruang pada Persamaan (3.57) sering ditulis $\int\cdots\int|\psi(r_1, \ldots, r_n, t)|^2\, dr_1\cdots dr_n$.

Vektor dalam Ruang n-Dimensi

Definisi vektor dapat diperluas ke lebih dari tiga dimensi. Vektor A dalam ruang tiga dimensi dapat didefinisikan melalui besar |A| dan arahnya, atau melalui tiga komponennya (A_x, A_γ, A_z) dalam sistem koordinat Kartesius. Jadi, vektor tiga dimensi dapat didefinisikan sebagai himpunan tiga bilangan real (A_x, A_γ, A_z) dalam urutan tertentu. Vektor B dalam "ruang" vektor real n-dimensi, kadang-

kadang disebut hiperruang, didefinisikan sebagai himpunan berurutan n bilangan real (B_1, B_2, …, B_n), dengan B_1, B_2, …, B_n sebagai komponen B. Tidak perlu merasa terganggu karena vektor dalam ruang n-dimensi tidak dapat divisualisasikan.

Variabel suatu fungsi sering dinyatakan dengan notasi vektor n-dimensi. Sebagai contoh, alih-alih menulis fungsi gelombang sistem dua partikel sebagai $\psi(r_1, r_2)$, kita dapat mendefinisikan vektor enam dimensi q dengan komponen $q_1 = x_1$, $q_2 = y_1$, $q_3 = z_1$, $q_4 = x_2$, $q_5 = y_2$, dan $q_6 = z_2$, lalu menulis fungsi gelombang sebagai $\psi(q)$. Untuk sistem n partikel, q dapat didefinisikan mempunyai 3n komponen, fungsi gelombangnya ditulis $\psi(q)$, dan integral normalisasi atas seluruh ruang ditulis $\int|\psi(q)|^2\, dq$.

Teori pencarian geometri kesetimbangan molekul menggunakan vektor n-dimensi (Bagian 15.10). Sisa Bagian 5.2 relevan dengan Bagian 15.10 dan tidak perlu dibaca sampai mempelajari bagian tersebut.

Dua vektor n-dimensi sama apabila semua komponen yang bersesuaian sama; B = C jika dan hanya jika $B_1 = C_1$, $B_2 = C_2$, …, $B_n = C_n$. Karena itu, dalam ruang n-dimensi, satu persamaan vektor ekuivalen dengan n persamaan skalar. Jumlah dua vektor n-dimensi B dan D didefinisikan sebagai vektor ($B_1 + D_1$, $B_2 + D_2$, …, $B_n + D_n$). Selisihnya didefinisikan dengan cara serupa. Vektor kB didefinisikan sebagai (kB_1, kB_2, …, kB_n), dengan k suatu skalar. Dalam ruang tiga dimensi, semua vektor kA dengan $k > 0$ berada dalam arah yang sama. Dalam ruang n-dimensi, semua vektor kB juga berada dalam arah yang sama. Sebagaimana bilangan (A_x, A_γ, A_z) menentukan suatu titik dalam ruang tiga dimensi, bilangan (B_1, B_2, …, B_n) menentukan suatu titik dalam ruang n-dimensi.

Panjang, besar, atau norma Euklides |B|—yang kadang-kadang ditulis ‖B‖—dari vektor real n-dimensi didefinisikan sebagai

$$|\mathrm{B}| \equiv (\mathrm{B} \cdot \mathrm{B})^{1/2} = (\mathrm{B_1}^2 + \mathrm{B_2}^2 + \cdots + \mathrm{B_n}^2)^{1/2}$$

Vektor yang panjangnya 1 disebut ternormalisasi.

Hasil kali dalam atau hasil kali skalar B · G dari dua vektor real n-dimensi B dan G didefinisikan sebagai skalar

$$\mathrm{B} \cdot \mathrm{G} \equiv \mathrm{B_1G_1} + \mathrm{B_2G_2} + \cdots + \mathrm{B_nG_n}$$

Apabila B · G = 0, kedua vektor disebut ortogonal. Kosinus sudut θ antara dua vektor n-dimensi B dan C didefinisikan dengan analogi terhadap (5.20) sebagai $\cos\theta \equiv (\mathrm{B} \cdot \mathrm{C})/(|\mathrm{B}||\mathrm{C}|)$. Dapat dibuktikan bahwa definisi ini menghasilkan cos θ dalam rentang −1 sampai 1.

Dalam ruang tiga dimensi, vektor satuan i = (1, 0, 0), j = (0, 1, 0), dan k = (0, 0, 1) saling tegak lurus. Selain itu, setiap vektor dapat ditulis sebagai kombinasi linear ketiga vektor tersebut [Persamaan (5.17)]. Dalam ruang vektor real n-dimensi,

vektor satuan $e_1 \equiv (1, 0, 0, \ldots, 0)$, $e_2 \equiv (0, 1, 0, \ldots, 0)$, …, $e_n \equiv (0, 0, 0, \ldots, 1)$ saling ortogonal. Karena vektor n-dimensi B sama dengan $B_1e_1 + B_2e_2 + \cdots + B_ne_n$, setiap vektor real n-dimensi dapat ditulis sebagai kombinasi linear n vektor satuan $e_1, e_2, \ldots, e_n$. Himpunan n vektor ini disebut basis bagi ruang vektor real n-dimensi. Karena $e_1, e_2, \ldots, e_n$ ortogonal dan ternormalisasi, himpunan itu merupakan basis ortonormal. Hasil kali skalar $B \cdot e_i$ memberikan komponen B pada arah vektor basis e_i. Suatu ruang vektor mempunyai banyak kemungkinan himpunan basis. Setiap himpunan n vektor real yang bebas linear dapat berfungsi sebagai basis ruang vektor real n-dimensi.

Vektor tiga dimensi dapat ditetapkan melalui ketiga komponennya atau melalui panjang dan arahnya. Arah dapat ditentukan dengan memberikan tiga sudut yang dibuat vektor terhadap bagian positif sumbu x, y, dan z. Sudut-sudut tersebut disebut sudut arah dan terletak dalam rentang 0° sampai 180°. Akan tetapi, sudut arah terhadap sumbu z telah ditentukan begitu dua sudut arah lainnya diketahui, sehingga hanya dua sudut arah yang bebas. Jadi, vektor tiga dimensi dapat ditentukan oleh panjang dan dua sudut arah. Dengan cara yang sama, dalam ruang n-dimensi, sudut arah antara suatu vektor dan setiap vektor satuan $e_1, e_2, \ldots, e_n$ dapat dihitung dari rumus kosinus sudut antara dua vektor di atas. Karena itu, vektor n-dimensi dapat ditentukan oleh panjang dan $n - 1$ sudut arah.

Gradien fungsi tiga variabel didefinisikan oleh (5.30). Gradien ∇f dari fungsi $f(q_1, q_2, \ldots, q_n)$ yang mempunyai n variabel didefinisikan sebagai vektor n-dimensi yang komponennya adalah turunan parsial pertama f.

$$\nabla f \equiv (\partial f/\partial q_1)e_1 + (\partial f/\partial q_2)e_2 + \cdots + (\partial f/\partial q_n)e_n$$

Pembahasan di atas berkaitan dengan ruang vektor real n-dimensi. Formulasi mekanika kuantum Dirac menggunakan ruang vektor kompleks berdimensi tak hingga; pembahasannya tidak disertakan di sini.

5.3 Momentum Sudut Sistem Satu Partikel

Dalam Bagian 3.3 telah ditentukan fungsi eigen dan nilai eigen operator momentum linear $\hat{p}_x$. Dalam bagian ini, masalah yang sama dibahas untuk momentum sudut suatu partikel. Momentum sudut berperan penting dalam mekanika kuantum struktur atom. Pembahasan dimulai dengan meninjau mekanika klasik momentum sudut.

Mekanika Klasik Momentum Sudut Satu Partikel

Pertimbangkan sebuah partikel bermassa m yang bergerak. Kita menetapkan sistem koordinat Kartesius yang tetap di ruang. Misalkan r adalah vektor dari titik asal ke posisi sesaat partikel. Maka

$$\mathbf{r} = \mathbf{i}x + \mathbf{j}y + \mathbf{k}z \qquad (5.33)$$

di mana x, y, dan z adalah koordinat partikel pada suatu saat. Koordinat-koordinat ini merupakan fungsi waktu. Dengan mendefinisikan vektor kecepatan v sebagai turunan vektor posisi terhadap waktu, diperoleh [Persamaan (5.32)]

$$\mathbf{v} \equiv \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{i}\frac{dx}{dt} + \mathbf{j}\frac{dy}{dt} + \mathbf{k}\frac{dz}{dt} \qquad (5.34)$$

$$v_x = dx/dt, \quad v_y = dy/dt, \quad v\_z = dz/dt$$

Vektor momentum linear partikel p didefinisikan oleh

$$\boxed{\mathbf{p} \equiv m\mathbf{v}} \qquad \textbf{(5.35)}$$

$$p_x = mv_x, \quad p_y = mv_y, \quad p_z = mv_z \qquad (5.36)$$

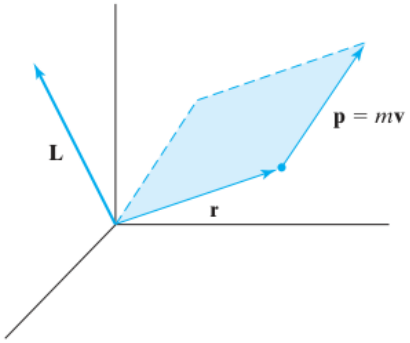
Momentum sudut partikel L terhadap titik asal koordinat dalam mekanika klasik didefinisikan sebagai

$$\boxed{\mathbf{L} \equiv \mathbf{r} \times \mathbf{p}} \qquad \textbf{(5.37)}$$

$$\mathbf{L} = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ x & y & z \\ p_x & p_y & p_z \end{vmatrix} \qquad (5.38)$$

$$L_x = yp_z - zp_y, \quad L_y = zp_x - xp_z, \quad L_z = xp_y - yp_x \qquad (5.39)$$

di mana (5.28) telah digunakan. L_x, L_y, dan L_z adalah komponen L sepanjang sumbu x, y, dan z. Vektor momentum sudut L tegak lurus terhadap bidang yang dibentuk oleh vektor posisi partikel r dan vektor kecepatannya v (Gambar 5.4).



Gambar 5.4. L ≡ r × p.

Torsi τ yang bekerja pada sebuah partikel didefinisikan sebagai hasil kali silang r dan gaya F yang bekerja pada partikel, τ ≡ r × F. Dapat ditunjukkan bahwa τ = dL/dt. Apabila tidak ada torsi yang bekerja pada partikel, laju perubahan momentum sudutnya nol; dengan kata lain, momentum sudutnya tetap atau kekal. Untuk planet yang mengorbit Matahari, gaya gravitasi mengarah secara radial. Karena hasil kali silang dua vektor sejajar bernilai nol, tidak ada torsi pada planet dan momentum sudutnya kekal.

Operator Momentum Sudut Orbital Satu Partikel

Sekarang kita beralih ke perlakuan mekanika kuantum. Dalam mekanika kuantum terdapat dua jenis momentum sudut. Momentum sudut orbital timbul dari gerak partikel melalui ruang dan merupakan analog besaran mekanika klasik L. Momentum sudut spin (Bab 10) adalah sifat intrinsik banyak partikel mikroskopik dan tidak mempunyai analog mekanika klasik. Pada bagian ini hanya momentum sudut orbital yang dipertimbangkan. Operator mekanika kuantum bagi komponen-komponen momentum sudut orbital partikel diperoleh dengan mengganti koordinat dan momentum dalam persamaan klasik (5.39) dengan operator yang bersesuaian [Persamaan (3.21)–(3.23)]. Hasilnya ialah

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{5.40}$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{5.41}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{5.42}$$

Karena $\hat{y}\hat{p}_z = \hat{p}_z\hat{y}$, dan demikian seterusnya, tidak timbul masalah nonkomutativitas ketika operator-operator tersebut dibangun. Dengan menggunakan

$$\hat{L}^2 = |\hat{\mathbf{L}}|^2 = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \tag{5.43}$$

kita dapat membangun operator bagi kuadrat besar momentum sudut dari operator-operator pada (5.40)–(5.42).

Karena relasi komutasi menentukan besaran fisik mana yang dapat diberi nilai pasti secara serentak, kita menyelidiki relasi tersebut untuk momentum sudut. Dengan mengoperasikan $\hat{L}_\gamma$ pada suatu fungsi f(x, y, z), diperoleh

$$\hat{L}_\gamma f = -i\hbar(z\partial f/\partial x - x\partial f/\partial z)$$

Jika persamaan terakhir ini dioperasikan dengan $\hat{L}_x$, diperoleh

$$\hat{L}_x\hat{L}_y f = -\hbar^2\left(y\frac{\partial f}{\partial x} + yz\frac{\partial^2 f}{\partial z\,\partial x} - yx\frac{\partial^2 f}{\partial z^2} - z^2\frac{\partial^2 f}{\partial y\,\partial x} + zx\frac{\partial^2 f}{\partial y\,\partial z}\right) \tag{5.44}$$

Dengan cara serupa,

$$\hat{L}_x f = -i\hbar(y\partial f/\partial z - z\partial f/\partial y)$$

$$\hat{L}_x f = -i\hbar\left(y\frac{\partial f}{\partial z} - z\frac{\partial f}{\partial y}\right)$$

$$\hat{L}_y\hat{L}_x f = -\hbar^2\left(zy\frac{\partial^2 f}{\partial x\,\partial z} - z^2\frac{\partial^2 f}{\partial x\,\partial y} - xy\frac{\partial^2 f}{\partial z^2} + x\frac{\partial f}{\partial y} + xz\frac{\partial^2 f}{\partial z\,\partial y}\right) \tag{5.45}$$

Dengan mengurangkan (5.45) dari (5.44), diperoleh

$$\hat{L}_x\hat{L}_y f - \hat{L}_y\hat{L}_x f = -\hbar^2\left(y\frac{\partial f}{\partial x} - x\frac{\partial f}{\partial y}\right)$$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \tag{5.46}$$

di mana digunakan relasi seperti

$$\boxed{\frac{\partial^2 f}{\partial z\,\partial x} = \frac{\partial^2 f}{\partial x\,\partial z}} \tag{5.47}$$

yang berlaku untuk fungsi-fungsi berperilaku baik. Kita dapat menggunakan prosedur yang sama untuk menentukan [$\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$] dan [$\hat{L}_z$, $\hat{L}_x$], tetapi waktu dapat dihemat dengan memperhatikan suatu bentuk simetri pada (5.40)–(5.42). Permutasi siklik x, y, dan z berarti mengganti x dengan y, y dengan z, dan z dengan x. Jika dilakukan permutasi siklik pada $\hat{L}_x$, diperoleh $\hat{L}_y$; permutasi siklik pada $\hat{L}_y$ menghasilkan $\hat{L}_z$; dan $\hat{L}_z$ berubah menjadi $\hat{L}_x$. Dengan melakukan dua permutasi siklik berturut-turut pada (5.46), diperoleh

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y \tag{5.48}$$

Selanjutnya dievaluasi komutator $\hat{L}^2$ dengan masing-masing komponennya dengan menggunakan identitas komutator pada Bagian 5.1.

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}_x{}^2 + \hat{L}_y{}^2 + \hat{L}_z{}^2, \hat{L}_x]$$
$$= [\hat{L}_x{}^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y{}^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z{}^2, \hat{L}_x]$$
$$= [\hat{L}_y{}^2, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z{}^2, \hat{L}_x]$$
$$= [\hat{L}_y, \hat{L}_x]\hat{L}_y + \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\hat{L}_z + \hat{L}_z[\hat{L}_z, \hat{L}_x]$$
$$= -i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y - i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z + i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z + i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y$$
$$= -i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y - i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z + i\hbar\hat{L}_y\hat{L}_z + i\hbar\hat{L}_z\hat{L}_y$$

$$\boxed{[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0} \tag{5.49}$$

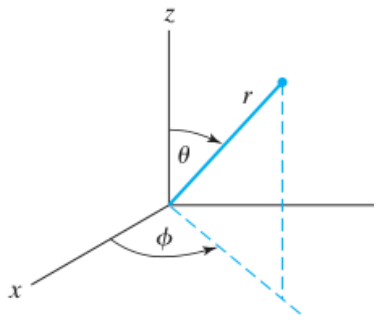
Karena permutasi siklik x, y, dan z tidak mengubah $\hat{L}^2 = \hat{L}_x{}^2 + \hat{L}_y{}^2 + \hat{L}_z{}^2$, dengan melakukan dua permutasi semacam itu pada (5.49) diperoleh

$$\boxed{[\hat{L}^2, \hat{L}_y] = 0, \quad [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0} \tag{5.50}$$

Besaran manakah di antara L^2, L_x, L_y, dan L_z yang dapat diberi nilai pasti secara serentak? Karena $\hat{L}^2$ berkomutasi dengan setiap komponennya, nilai pasti L^2 dan salah satu komponennya dapat ditetapkan. Akan tetapi, tidak ada dua komponen $\hat{L}$ yang saling berkomutasi, sehingga kita tidak dapat menetapkan lebih dari satu komponen secara serentak. (Satu pengecualian akan dibahas tidak lama lagi.) Secara tradisional, L_z dipilih sebagai komponen momentum sudut yang ditetapkan bersama L^2. Perhatikan bahwa penetapan $L^2 = |L|^2$ tidak berarti vektor L telah ditetapkan, melainkan hanya besarnya. Penetapan lengkap L memerlukan

penetapan serentak ketiga komponennya, yang pada umumnya tidak dapat dilakukan. Dalam mekanika klasik, apabila momentum sudut kekal, masing-masing dari ketiga komponennya mempunyai nilai pasti. Dalam mekanika kuantum, apabila momentum sudut kekal, hanya besar dan satu komponennya yang dapat ditetapkan.

Kita dapat mencoba menentukan nilai eigen dan fungsi eigen bersama $\hat{L}^2$ dan $\hat{L}_z$ dengan menggunakan bentuk operator dalam koordinat Kartesius. Akan tetapi, persamaan diferensial parsial yang diperoleh tidak dapat dipisahkan. Karena itu, operator-operator tersebut diubah ke koordinat bola (Gambar 5.5). Koordinat r adalah jarak dari titik asal ke titik (x, y, z). Sudut θ adalah sudut antara vektor r dan sumbu z positif. Sudut yang dibuat proyeksi r pada bidang xy terhadap sumbu x positif adalah φ. (Dalam sejumlah buku matematika, lambang θ dan φ dipertukarkan.) Trigonometri sederhana memberikan



Gambar 5.5. Koordinat bola.

$$x = r\sin\theta\cos\phi, \qquad y = r\sin\theta\sin\phi, \qquad z = r\cos\theta \tag{5.51}$$

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2, \qquad \cos\theta = \frac{z}{(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}}, \qquad \tan\phi = \frac{y}{x} \tag{5.52}$$

Untuk mengubah operator momentum sudut ke koordinat bola, $\partial/\partial x$, $\partial/\partial y$, dan $\partial/\partial z$ harus diubah ke koordinat tersebut. Bagian transformasi berikut dapat dilewati pada pembacaan awal; pembacaan dapat dilanjutkan kembali setelah Persamaan (5.64).

Untuk melakukan transformasi digunakan aturan rantai. Misalkan terdapat fungsi r, θ, dan φ, yaitu f(r, θ, φ). Apabila variabel bebas diubah dengan substitusi

$$r = r(x, y, z), \quad \theta = \theta(x, y, z), \quad \varphi = \varphi(x, y, z)$$

ke dalam f, fungsi tersebut berubah menjadi fungsi x, y, dan z:

$$f[r(x, y, z), \theta(x, y, z), \varphi(x, y, z)] = g(x, y, z)$$

Sebagai contoh, misalkan $f(r, \theta, \varphi) = 3r\cos\theta + 2\tan^2\varphi$. Dengan menggunakan (5.52), diperoleh $g(x, y, z) = 3z + 2y^2x^{-2}$.

Aturan rantai menunjukkan hubungan turunan parsial g(x, y, z) dengan turunan parsial f(r, θ, φ). Hubungan itu ialah

$$\left(\frac{\partial g}{\partial x}\right)_{y,z} = \left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)_{\theta,\phi}\left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)_{y,z} + \left(\frac{\partial f}{\partial \theta}\right)_{r,\phi}\left(\frac{\partial \theta}{\partial x}\right)_{y,z} + \left(\frac{\partial f}{\partial \phi}\right)_{r,\theta}\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{y,z} \tag{5.53}$$

$$\left(\frac{\partial g}{\partial y}\right)_{x,z} = \left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)_{\theta,\phi}\left(\frac{\partial r}{\partial y}\right)_{x,z} + \left(\frac{\partial f}{\partial \theta}\right)_{r,\phi}\left(\frac{\partial \theta}{\partial y}\right)_{x,z} + \left(\frac{\partial f}{\partial \phi}\right)_{r,\theta}\left(\frac{\partial \phi}{\partial y}\right)_{x,z} \tag{5.54}$$

$$\left(\frac{\partial g}{\partial z}\right)_{x,y} = \left(\frac{\partial f}{\partial r}\right)_{\theta,\phi}\left(\frac{\partial r}{\partial z}\right)_{x,y} + \left(\frac{\partial f}{\partial \theta}\right)_{r,\phi}\left(\frac{\partial \theta}{\partial z}\right)_{x,y} + \left(\frac{\partial f}{\partial \phi}\right)_{r,\theta}\left(\frac{\partial \phi}{\partial z}\right)_{x,y} \tag{5.55}$$

Untuk mengubah persamaan-persamaan tersebut menjadi persamaan operator, f dan g dihapus sehingga diperoleh

$$\frac{\partial}{\partial x} = \left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)_{y,z}\frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{\partial \theta}{\partial x}\right)_{y,z}\frac{\partial}{\partial \theta} + \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_{y,z}\frac{\partial}{\partial \phi} \tag{5.56}$$

dengan persamaan serupa untuk $\partial/\partial y$ dan $\partial/\partial z$. Tugas berikutnya ialah mengevaluasi turunan parsial seperti $(\partial r/\partial x)_{\gamma,z}$. Dengan menurunkan persamaan pertama pada (5.52) terhadap x pada y dan z konstan, diperoleh

$$2r(\partial r/\partial x)_{\gamma,z} = 2x = 2r\sin\theta\cos\varphi$$

$$2r\left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)_{y,z} = 2x = 2r\sin\theta\cos\phi$$

$$\left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)_{y,z} = \sin\theta\cos\phi \tag{5.57}$$

Dengan menurunkan $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ terhadap y dan terhadap z, diperoleh

$$\left(\frac{\partial r}{\partial y}\right)_{x,z} = \sin\theta\sin\phi, \qquad \left(\frac{\partial r}{\partial z}\right)_{x,y} = \cos\theta \tag{5.58}$$

Dari persamaan kedua pada (5.52), diperoleh

$$-\sin\theta(\partial\theta/\partial x)_{\gamma,z} = -xz/r^3$$

$$-\sin\theta\left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)_{y,z} = -\frac{xz}{r^3}$$

$$\left(\frac{\partial\theta}{\partial x}\right)_{y,z} = \frac{\cos\theta\cos\phi}{r} \tag{5.59}$$

Selain itu,

$$\left(\frac{\partial\theta}{\partial y}\right)_{x,z} = \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}, \qquad \left(\frac{\partial\theta}{\partial z}\right)_{x,y} = -\frac{\sin\theta}{r} \tag{5.60}$$

Dari $\tan\varphi = y/x$ diperoleh

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{y,z} = -\frac{\sin\phi}{r\sin\theta}, \qquad \left(\frac{\partial\phi}{\partial y}\right)_{x,z} = \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}, \qquad \left(\frac{\partial\phi}{\partial z}\right)_{x,y} = 0 \tag{5.61}$$

Dengan mensubstitusikan (5.57), (5.59), dan (5.61) ke dalam (5.56), diperoleh

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{5.62}$$

Dengan cara serupa,

$$\frac{\partial}{\partial y} = \sin\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta \sin\phi}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\phi}{r \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \tag{5.63}$$

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \tag{5.64}$$

Sekarang komponen momentum sudut dapat dinyatakan dalam koordinat bola. Dengan mensubstitusikan (5.51), (5.63), dan (5.64) ke dalam (5.40), diperoleh suatu bentuk antara yang kemudian menyederhana menjadi

$$\hat{L}_x = -i\hbar\{r \sin\theta \sin\varphi[\cos\theta(\partial/\partial r) - (\sin\theta/r)(\partial/\partial\theta)]$$
$$- r\cos\theta[\sin\theta \sin\varphi(\partial/\partial r) + (\cos\theta \sin\varphi/r)(\partial/\partial\theta) + (\cos\varphi/r \sin\theta)(\partial/\partial\varphi)]\}$$

$$-r\cos\theta\left(\sin\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta \sin\phi}{r} \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\phi}\right)\Bigg]$$

$$\hat{L}_x = i\hbar\left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{5.65}$$

Selain itu, diperoleh

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{5.66}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \tag{5.67}$$

Dengan menguadratkan $\hat{L}_x$, $\hat{L}_\gamma$, dan $\hat{L}\_z$ kemudian menjumlahkan kuadratnya, dapat dibangun $\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_\gamma^2 + \hat{L}\_z^2$ [Persamaan (5.43)]. Hasilnya ialah (Soal 5.17)

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \tag{5.68}$$

Walaupun operator momentum sudut bergantung pada ketiga koordinat Kartesius x, y, dan z, operator tersebut hanya melibatkan dua koordinat bola θ dan φ.

Fungsi Eigen dan Nilai Eigen Momentum Sudut Orbital Satu Partikel

Sekarang ditentukan fungsi eigen bersama $\hat{L}^2$ dan $\hat{L}\_z$, yang dilambangkan dengan Y. Karena kedua operator hanya melibatkan θ dan φ, Y merupakan fungsi kedua koordinat tersebut, Y = Y(θ, φ). Tentu saja, karena operator-operatornya linear, Y dapat dikalikan dengan fungsi r sembarang dan hasilnya tetap merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$ dan $\hat{L}\_z$. Persamaan yang harus diselesaikan adalah

$$\hat{L}_z Y(\theta, \phi) = bY(\theta, \phi) \tag{5.69}$$

$$\hat{L}^2 Y(\theta, \phi) = cY(\theta, \phi) \tag{5.70}$$

di mana b dan c masing-masing adalah nilai eigen $\hat{L}\_z$ dan $\hat{L}^2$.

Dengan menggunakan operator $\hat{L}_z$ diperoleh

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}Y(\theta,\,\phi) = bY(\theta,\,\phi) \tag{5.71}$$

Karena operator pada (5.71) tidak melibatkan θ, dicoba pemisahan variabel dengan menulis

$$Y(\theta,\phi) = S(\theta)T(\phi) \tag{5.72}$$

Persamaan (5.71) menjadi

$$-\mathrm{i}\hbar(\partial/\partial\varphi)[\mathrm{S}(\theta)\mathrm{T}(\varphi)] = \mathrm{bS}(\theta)\mathrm{T}(\varphi)$$

$$-\mathrm{i}\hbar\mathrm{S}(\theta)\mathrm{dT}(\varphi)/\mathrm{d}\varphi = \mathrm{bS}(\theta)\mathrm{T}(\varphi)$$

$$[\mathrm{dT}(\varphi)/\mathrm{T}(\varphi)] = (\mathrm{ib}/\hbar)\mathrm{d}\varphi$$

$$-i\hbar S(\theta)\frac{dT(\phi)}{d\phi} = bS(\theta)T(\phi)$$

$$\frac{dT(\phi)}{T(\phi)} = \frac{ib}{\hbar}d\phi$$

$$T(\phi) = Ae^{ib\phi/\hbar} \tag{5.73}$$

di mana A adalah konstanta sembarang.

Apakah T cocok sebagai fungsi eigen? Secara umum jawabannya tidak, karena T belum tentu bernilai tunggal. Jika 2π ditambahkan pada φ, kita tetap berada pada titik ruang yang sama, sehingga T tidak boleh berubah. Agar T bernilai tunggal, harus berlaku

$$\mathrm{T}(\varphi + 2\pi) = \mathrm{T}(\varphi)$$

$$\mathrm{Ae}^{\mathrm{ibf}}/\hbar\ \mathrm{e}^{\mathrm{ib2p}}/\hbar = \mathrm{Ae}^{\mathrm{ibf}}/\hbar$$

$$T(\phi + 2\pi) = T(\phi)$$

$$Ae^{ib\phi/\hbar}e^{ib2\pi/\hbar} = Ae^{ib\phi/\hbar}$$

$$e^{ib2\pi/\hbar} = 1 \tag{5.74}$$

Agar $e^{i\alpha} = \cos\alpha + i\sin\alpha = 1$, harus berlaku $\alpha = 2\pi m$, dengan $m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$. Oleh karena itu, (5.74) memberikan

$$2\pi b/\hbar = 2\pi m$$

$$b = m\hbar, \qquad m = \ldots -2, -1, 0, 1, 2, \ldots \tag{5.75}$$

dan (5.73) menjadi

$$T(\phi) = Ae^{im\phi}, \quad m = 0,\ \pm1,\ \pm2, \ldots \tag{5.76}$$

Nilai eigen komponen z momentum sudut terkuantisasi.

Konstanta A ditentukan dengan menormalisasi T. Mula-mula, pertimbangkan normalisasi fungsi F dari r, θ, dan φ. Rentang variabel bebas adalah (lihat Gambar 5.5)

$$0 \le r \le \infty, \qquad 0 \le \theta \le \pi, \qquad 0 \le \phi \le 2\pi \tag{5.77}$$

Elemen volume infinitesimal dalam koordinat bola ialah (Taylor dan Mann, Bagian 13.9)

$$d\tau = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi \tag{5.78}$$

Besaran (5.78) adalah volume suatu daerah ruang infinitesimal dengan koordinat bola dalam rentang r sampai r + dr, θ sampai θ + dθ, dan φ sampai φ + dφ. Karena itu, syarat normalisasi F dalam koordinat bola adalah

$$\int_0^\infty \left[\int_0^\pi \left[\int_0^{2\pi} |F(r,\theta,\phi)|^2 \, d\phi \right] \sin\theta \, d\theta \right] r^2 \, dr = 1 \tag{5.79}$$

Jika F mempunyai bentuk

$$\mathrm{F(r,\theta,\varphi) = R(r)S(\theta)T(\varphi)}$$

penggunaan identitas integral (3.74) pada (5.79) memberikan

$$\mathrm{[\int_0\infty |R(r)|^2 r^2 dr][\int_0\pi |S(\theta)|^2 \sin\theta \, d\theta][\int_0{}^2\pi |T(\varphi)|^2 d\varphi] = 1}$$

dan setiap faktor F dapat dinormalisasi secara terpisah dengan mudah:

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 \, dr = 1, \quad \int_0^\pi |S|^2 \sin\theta \, d\theta = 1, \quad \int_0^{2\pi} |T|^2 \, d\phi = 1 \tag{5.80}$$

Oleh karena itu,

$$\mathrm{\int_0{}^2\pi \, (Ae^{imf})^* Ae^{imf} \, d\varphi = 1 = |A|^2 \int_0{}^2\pi \, d\varphi}$$

$$\mathrm{|A| = (2\pi)^{-1/2}}$$

$$T(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{5.81}$$

Selanjutnya diselesaikan $\hat{L}^2 Y = cY$ [Persamaan (5.70)] untuk nilai eigen c dari $\hat{L}^2$. Dengan menggunakan (5.68) untuk $\hat{L}^2$, (5.72) untuk Y, dan (5.81), diperoleh

$$\mathrm{-\hbar^2[\partial^2/\partial\theta^2 + \cot\theta \, \partial/\partial\theta + (1/\sin^2\theta)\partial^2/\partial\varphi^2]\{S(\theta)(1/\sqrt{2}\pi)e^{imf}\}}$$

$$\mathrm{= cS(\theta)(1/\sqrt{2}\pi)e^{imf}}$$

$$-\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta \frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right) \left(S(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \right) = cS(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}$$

$$\frac{d^2S}{d\theta^2} + \cot\theta \frac{dS}{d\theta} - \frac{m^2}{\sin^2\theta} S = -\frac{c}{\hbar^2} S \tag{5.82}$$

Untuk menyelesaikan (5.82), dilakukan beberapa manipulasi yang cukup panjang dan dapat dilewati pada pembacaan awal. Pembacaan dapat dilanjutkan kembali pada Persamaan (5.91). Untuk memudahkan, variabel bebas diubah melalui substitusi

$$w = \cos\theta \tag{5.83}$$

Substitusi ini mengubah S menjadi fungsi baru G dari w:

$$S(\theta) = G(w) \tag{5.84}$$

Aturan rantai memberikan

$$\frac{dS}{d\theta} = \frac{dG}{dw}\frac{dw}{d\theta} = -\sin\theta\frac{dG}{dw} = -(1 - w^2)^{1/2}\frac{dG}{dw} \tag{5.85}$$

Dengan cara serupa diperoleh (Soal 5.25)

$$\frac{d^2S}{d\theta^2} = (1 - w^2)\frac{d^2G}{dw^2} - w\frac{dG}{dw} \tag{5.86}$$

Dengan menggunakan (5.86), (5.85), dan cot θ = cos θ/sin θ = w/(1 − w²)¹′², Persamaan (5.82) menjadi

$$(1 - w^2)\frac{d^2G}{dw^2} - 2w\frac{dG}{dw} + \left[\frac{c}{\hbar^2} - \frac{m^2}{1 - w^2}\right]G(w) = 0 \tag{5.87}$$

Rentang w adalah −1 ≤ w ≤ 1.

Agar diperoleh relasi rekurensi dua suku ketika dicoba penyelesaian deret pangkat, dilakukan perubahan variabel terikat berikut.

$$G(w) = (1 - w^2)^{|m|/2}H(w) \tag{5.88}$$

Dengan menurunkan (5.88), G′ dan G″ dievaluasi. Setelah dibagi dengan (1 − w²)|m|/2, Persamaan (5.87) menjadi

$$(1 - w^2)H'' - 2(|m| + 1)wH' + [c\hbar^{-2} - |m|(|m| + 1)]H = 0 \tag{5.89}$$

Sekarang dicoba deret pangkat untuk H:

$$H(w) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j w^j \tag{5.90}$$

Dengan menurunkan deret tersebut [bandingkan Persamaan (4.36)–(4.38)], diperoleh

$$H'(w) = \Sigma_{j=0}\infty\, j a_j w^{j-1}$$

$$H''(w) = \Sigma_{j=0}\infty\, j(j-1)a_j w^{j-2} = \Sigma_{j=0}\infty\, (j+2)(j+1)a_{j+2}w^j$$

Substitusi deret pangkat ini ke dalam (5.89), setelah jumlah-jumlah digabungkan, memberikan

$$\Sigma_{j=0}\infty\{(j+2)(j+1)a_{j+2} + [-j^2 - j - 2|m|j + c/\hbar^2 - |m| - |m|^2]a_j\}w^j = 0$$

Dengan menyamakan koefisien w^j dengan nol, diperoleh relasi rekurensi

$$a_{j+2} = \frac{(j + |m|)(j + |m| + 1) - c/\hbar^2}{(j + 1)(j + 2)}a_j \tag{5.91}$$

Seperti pada kasus osilator harmonik, penyelesaian umum (5.89) merupakan kombinasi linear sembarang deret berpangkat genap, yang koefisiennya

ditentukan oleh a_0, dan deret berpangkat ganjil, yang koefisiennya ditentukan oleh a_1. Dapat ditunjukkan bahwa deret tak hingga yang ditentukan oleh relasi rekurensi (5.91) tidak menghasilkan fungsi eigen yang berperilaku baik. Banyak buku menunjukkan bahwa deret tak hingga menyimpang pada $w = \pm 1$. Akan tetapi, hal itu sendiri belum cukup untuk menolak deret tak hingga, sebab fungsi eigen mungkin masih terintegralkan secara kuadrat walaupun tak hingga pada dua titik. Untuk pembahasan yang cermat, lihat M. Whippman, *Am. J. Phys.*, 34, 656 (1966). Karena itu, seperti pada kasus osilator harmonik, salah satu deret harus dibuat berhenti, dengan suku terakhir $a_k w^k$. Deret lainnya dihilangkan dengan menetapkan a_0 atau a_1 sama dengan nol, bergantung pada apakah k ganjil atau genap.

Dengan menyamakan koefisien a_k dalam (5.91) dengan nol, diperoleh

$$c = \hbar^2(k + |m|)(k + |m| + 1), \qquad k = 0, 1, 2, \ldots \tag{5.92}$$

Karena |m| mengambil nilai 0, 1, 2, …, besaran k + |m| juga mengambil nilai 0, 1, 2, …. Karena itu, bilangan kuantum l didefinisikan sebagai

$$l \equiv k + |m| \tag{5.93}$$

dan nilai eigen kuadrat besar momentum sudut adalah

$$c = l(l + 1)\hbar^2, \qquad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{5.94}$$

Besar momentum sudut orbital suatu partikel ialah

$$|\mathbf{L}| = [l(l+1)]^{1/2}\hbar \tag{5.95}$$

Dari (5.93) diperoleh $|m| \leq l$. Nilai-nilai m yang mungkin adalah

$$m = -l, -l + 1, -l + 2, \ldots, -1, 0, 1, \ldots, l - 2, l - 1, l \tag{5.96}$$

Sekarang fungsi eigen momentum sudut diperiksa. Dari (5.83), (5.84), (5.88), (5.90), dan (5.93), faktor theta pada fungsi eigen adalah

$$S_{l,m}(\theta) = \sin^{|m|}\theta \sum_{\substack{j=1,3,\ldots \\ \text{or } j=0,2,\ldots}}^{l-|m|} a_j \cos^j\theta \tag{5.97}$$

di mana penjumlahan dilakukan atas nilai j genap atau ganjil, bergantung pada apakah $l - |m|$ genap atau ganjil. Koefisien a_j memenuhi relasi rekurensi (5.91), yang dengan menggunakan (5.94) menjadi

$$a_{j+2} = \frac{(j + |m|)(j + |m| + 1) - l(l+1)}{(j+1)(j+2)} a_j \tag{5.98}$$

Fungsi eigen $\hat{L}^2$ dan $\hat{L}_z$ diberikan oleh Persamaan (5.72) dan (5.81) sebagai

$$\boxed{Y_l^m(\theta, \phi) = S_{l,m}(\theta)T(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} S_{l,m}(\theta)e^{im\phi}} \tag{5.99}$$

Lambang m pada Y_l^m adalah label, bukan pangkat.

Contoh

Tentukan Y_l^m(θ, φ) serta nilai eigen $\hat{L}^2$ dan $\hat{L}_z$ untuk (a) l = 0 dan (b) l = 1.

(a) Untuk l = 0, Persamaan (5.96) memberikan m = 0, dan (5.97) menjadi

$$S_{0,0}(\theta) = a_0 \tag{5.100}$$

Syarat normalisasi (5.80) memberikan

$$\int_0^\pi |a_0|^2 \sin\theta \, d\theta = 1 = 2|a_0|^2$$

$$|a_0| = 2^{-1/2}$$

Persamaan (5.99) memberikan

$$Y_0^0(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \tag{5.101}$$

Jelas bahwa (5.101) merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$, $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, dan $\hat{L}_z$ [Persamaan (5.65)–(5.68)]. Untuk l = 0, fungsi eigen tidak mempunyai kebergantungan sudut; fungsi eigen tersebut dikatakan bersimetri bola untuk l = 0.

Untuk l = 0 dan m = 0, Persamaan (5.69), (5.70), (5.75), dan (5.94) memberikan nilai eigen $\hat{L}^2$, c = 0, serta nilai eigen $\hat{L}_z$, b = 0.

(b) Untuk l = 1, nilai m yang mungkin menurut (5.96) adalah −1, 0, dan 1. Untuk |m| = l, Persamaan (5.97) memberikan

$$S_{1,\pm1}(\theta) = a_0 \sin\theta \tag{5.102}$$

Konstanta a_0 dalam (5.102) tidak harus sama dengan a_0 dalam (5.100). Normalisasi memberikan

$$1 = |a_0|^2 \int_0^\pi \sin^2\theta \sin\theta \, d\theta = |a_0|^2 \int_{-1}^{1} (1 - w^2) dw$$

$$|a_0| = \sqrt{3}/2$$

Di sini digunakan substitusi w = cos θ. Jadi, $S_{1,\pm1} = (\sqrt{3}/2)\sin\theta$ dan (5.99) memberikan

$$Y_1^1 = (3/8\pi)^{1/2} \sin\theta \, e^{i\phi}, \qquad Y_1^{-1} = (3/8\pi)^{1/2} \sin\theta \, e^{-i\phi} \tag{5.103}$$

Untuk l = 1 dan m = 0 diperoleh—lihat latihan berikut—$S_{1,0} = (3/2)^{1/2} \cos\theta$ dan $Y_1^0 = (3/4\pi)^{1/2} \cos\theta$.

Untuk l = 1, Persamaan (5.94) memberikan nilai eigen $\hat{L}^2$ sebesar $2\hbar^2$. Untuk m = −1, 0, dan 1, Persamaan (5.75) masing-masing memberikan nilai eigen $\hat{L}_z$ sebesar $-\hbar$, 0, dan $\hbar$.

Latihan. Verifikasikan ungkapan $S_{1,0}$ dan Y_1^0.

Fungsi S_l,m(θ) dikenal dalam matematika sebagai fungsi Legendre terasosiasi yang dikalikan suatu konstanta normalisasi. Fungsi Legendre terasosiasi didefinisikan dalam Soal 5.34. Tabel 5.1 memberikan fungsi S_l,m(θ) untuk l ≤ 3.

TABLE 5.1 $S_{l,m}(\theta)$

$l = 0$:	$S_{0,0} = \frac{1}{2}\sqrt{2}$
$l = 1$:	$S_{1,0} = \frac{1}{2}\sqrt{6}\cos\theta$
	$S_{1,\pm1} = \frac{1}{2}\sqrt{3}\sin\theta$
$l = 2$:	$S_{2,0} = \frac{1}{4}\sqrt{10}(3\cos^2\theta - 1)$
	$S_{2,\pm1} = \frac{1}{2}\sqrt{15}\sin\theta\cos\theta$
	$S_{2,\pm2} = \frac{1}{4}\sqrt{15}\sin^2\theta$
$l = 3$:	$S_{3,0} = \frac{3}{4}\sqrt{14}(\frac{5}{3}\cos^3\theta - \cos\theta)$
	$S_{3,\pm1} = \frac{1}{8}\sqrt{42}\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)$
	$S_{3,\pm2} = \frac{1}{4}\sqrt{105}\sin^2\theta\cos\theta$
	$S_{3,\pm3} = \frac{1}{8}\sqrt{70}\sin^3\theta$

Tabel 5.1. Fungsi $S_{l,m}(\theta)$ untuk $l \leq 3$.

Fungsi eigen momentum sudut Y_l^m pada (5.99) disebut harmonik bola atau harmonik permukaan.

Sebagai ringkasan, fungsi eigen dan nilai eigen momentum sudut orbital satu partikel adalah [Persamaan (5.69), (5.70), (5.75), dan (5.94)]

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m(\theta, \phi), \quad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{5.104}$$

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta, \phi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \phi), \quad m = -l, -l+1, \ldots, l-1, l \tag{5.105}$$

di mana fungsi eigennya diberikan oleh (5.99). Sering kali lambang m_l digunakan menggantikan m untuk bilangan kuantum L_z. Kelak akan diperlihatkan bahwa harmonik bola adalah fungsi-fungsi ortogonal [Persamaan (7.27)].

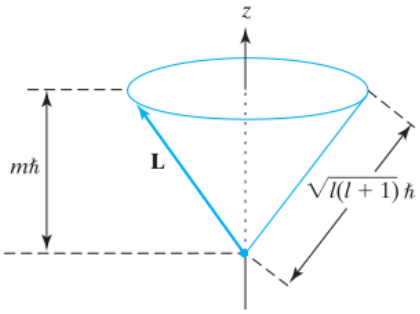
Karena l ≥ |m|, besar momentum sudut orbital L, yaitu $[l(l+1)]^{1/2}\hbar$, lebih besar daripada besar komponen z-nya, $|m|\hbar$, kecuali untuk l = 0. Apabila besar

momentum sudut dapat sama dengan komponen z-nya, komponen x dan y harus bernilai nol sehingga ketiga komponen L telah ditetapkan. Namun, karena komponen-komponen momentum sudut tidak saling komutatif, hal ini tidak dapat dilakukan. Satu-satunya pengecualian terjadi ketika l = 0. Dalam kasus ini, $|L|^2 = L_x^2 + L_\gamma^2 + L\_z^2$ mempunyai nilai eigen nol, sehingga ketiga komponen L_x, L_γ, dan L_z harus mempunyai nilai eigen nol. Dari Persamaan (5.12), ketidakpastian komponen momentum sudut memenuhi

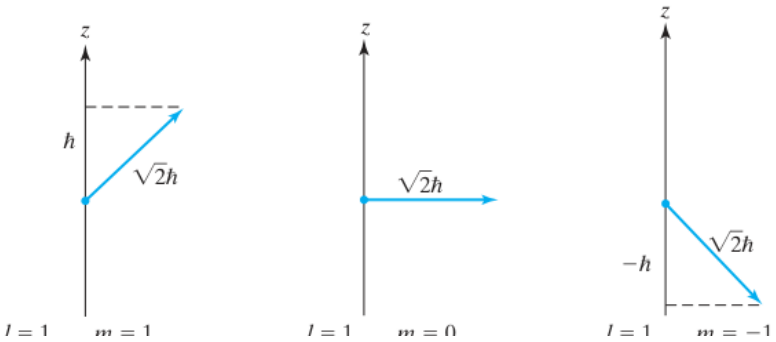
$$\Delta L_x \, \Delta L_y \geq \frac{1}{2}\left|\int \Psi^* [\hat{L}_x, \hat{L}_y] \Psi \, d\tau\right| = \frac{\hbar}{2}\left|\int \Psi^* \hat{L}_z \Psi \, d\tau\right| \qquad (5.106)$$

dan dua persamaan serupa yang diperoleh melalui permutasi siklik. Apabila nilai eigen $\hat{L}$_z, $\hat{L}_x$, dan $\hat{L}_\gamma$ semuanya nol, maka $\hat{L}_x\psi = 0$, $\hat{L}_\gamma\psi = 0$, dan $\hat{L}$_zψ = 0. Ruas kanan (5.106) beserta dua persamaan serupa bernilai nol, sehingga $\Delta L_x = \Delta L_\gamma = \Delta L\_z = 0$ diizinkan. Bagaimana hal ini diselaraskan dengan pernyataan Bagian 5.1 bahwa untuk memiliki fungsi eigen serentak, dua operator harus saling komutatif? Teorema tersebut merujuk pada kemungkinan bahwa satu himpunan lengkap fungsi eigen suatu operator juga merupakan fungsi eigen operator lainnya. Jadi, meskipun $\hat{L}_x$ dan $\hat{L}$_z tidak saling komutatif, beberapa fungsi eigen $\hat{L}$_z—yaitu fungsi dengan l = 0 = m—dapat menjadi fungsi eigen $\hat{L}_x$. Akan tetapi, mustahil semua fungsi eigen $\hat{L}$_z sekaligus menjadi fungsi eigen $\hat{L}_x$.

Karena L_x dan L_γ tidak dapat ditetapkan, vektor L dapat terletak di mana saja pada permukaan kerucut yang sumbunya adalah sumbu z, tingginya $m\hbar$, dan panjang garis pelukisnya $[l(l + 1)]^{1/2}\hbar$ (Gambar 5.6). Orientasi L yang mungkin terhadap sumbu z untuk l = 1 diperlihatkan pada Gambar 5.7. Untuk setiap nilai eigen $\hat{L}^2$ terdapat 2l + 1 fungsi eigen Y_l^m yang berbeda, bersesuaian dengan 2l + 1 nilai m. Nilai eigen $\hat{L}^2$ dikatakan terdegenerasi (2l + 1)-lipat. Istilah degenerasi berlaku bagi nilai eigen operator apa pun, bukan hanya Hamiltonian.



Gambar 5.6. Orientasi L.



Gambar 5.7. Orientasi L terhadap sumbu z untuk l = 1.

Tentu saja tidak ada sesuatu yang istimewa pada sumbu z. Semua arah ruang ekuivalen. Apabila L^2 dan L_x yang dipilih untuk ditetapkan, bukan L_z, nilai eigen L_x akan sama dengan nilai eigen yang diperoleh bagi L_z. Namun, persamaan nilai eigen $\hat{L}$_z lebih mudah diselesaikan karena $\hat{L}$_z mempunyai bentuk sederhana dalam koordinat bola, yang melibatkan sudut rotasi φ terhadap sumbu z.

5.4 Metode Operator Tangga untuk Momentum Sudut

Nilai eigen $\hat{L}^2$ dan $\hat{L}$_z sebelumnya diperoleh dengan menyatakan operator momentum sudut orbital sebagai operator diferensial dan menyelesaikan persamaan diferensial yang dihasilkan. Sekarang akan diperlihatkan bahwa nilai eigen tersebut dapat diperoleh hanya dengan menggunakan relasi komutasi operator. Pembahasan pada bagian ini berlaku bagi setiap operator yang memenuhi relasi komutasi momentum sudut. Secara khusus, metode ini berlaku bagi momentum sudut spin (Bab 10) maupun momentum sudut orbital.

Huruf L digunakan untuk momentum sudut orbital. Di sini huruf M digunakan untuk menunjukkan bahwa yang dibahas adalah momentum sudut jenis apa pun. Terdapat tiga operator linear $\hat{M}_x$, $\hat{M}_\gamma$, dan $\hat{M}$_z, dan satu-satunya informasi yang diketahui tentang ketiganya ialah bahwa operator-operator tersebut memenuhi relasi komutasi yang serupa dengan (5.46) dan (5.48):

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_y] = i\hbar\hat{M}_z, \qquad [\hat{M}_y, \hat{M}_z] = i\hbar\hat{M}_x, \qquad [\hat{M}_z, \hat{M}_x] = i\hbar\hat{M}_y \tag{5.107}$$

Operator $\hat{M}^2$ didefinisikan sebagai

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2 + \hat{M}_z^2 \tag{5.108}$$

Masalah yang hendak diselesaikan ialah menentukan nilai eigen $\hat{M}^2$ dan $\hat{M}$_z.

Pembahasan dimulai dengan mengevaluasi komutator $\hat{M}^2$ dengan masing-masing komponennya menggunakan Persamaan (5.107) dan (5.108). Langkahnya identik dengan penurunan Persamaan (5.49) dan (5.50), sehingga diperoleh

$$[\hat{M}^2, \hat{M}_x] = [\hat{M}^2, \hat{M}_y] = [\hat{M}^2, \hat{M}_z] = 0 \tag{5.109}$$

Dengan demikian, fungsi eigen serentak $\hat{M}^2$ dan $\hat{M}$_z dapat dimiliki.

Selanjutnya didefinisikan dua operator baru, yaitu operator penaik $\hat{M}_+$ dan operator penurun $\hat{M}_-$:

$$\hat{M}_+ \equiv \hat{M}_x + i\hat{M}_y \tag{5.110}$$

$$\hat{M}_- \equiv \hat{M}_x - i\hat{M}_y \tag{5.111}$$

Keduanya merupakan contoh operator tangga. Alasan penamaan tersebut akan menjadi jelas tidak lama lagi. Kita mempunyai

$$\hat{M}_+\hat{M}_- = (\hat{M}_x + i\hat{M}_y)(\hat{M}_x - i\hat{M}_y)$$
$$= \hat{M}_x(\hat{M}_x - i\hat{M}_y) + i\hat{M}_y(\hat{M}_x - i\hat{M}_y)$$
$$= \hat{M}_x{}^2 - i\hat{M}_x\hat{M}_y + i\hat{M}_y\hat{M}_x + \hat{M}_y{}^2$$
$$= \hat{M}^2 - \hat{M}\_z^2 + i[\hat{M}_y, \hat{M}_x]$$
$$= \hat{M}_x^2 - i\hat{M}_x\hat{M}_y + i\hat{M}_y\hat{M}_x + \hat{M}_y^2 = \hat{M}^2 - \hat{M}_z^2 + i[\hat{M}_y, \hat{M}_x]$$
$$\hat{M}_+\hat{M}_- = \hat{M}^2 - \hat{M}_z^2 + \hbar\hat{M}_z \tag{5.112}$$

Dengan cara serupa diperoleh

$$\hat{M}_-\hat{M}_+ = \hat{M}^2 - \hat{M}_z^2 - \hbar\hat{M}_z \tag{5.113}$$

Untuk komutator operator-operator ini dengan $\hat{M}\_z$, diperoleh

$$[\hat{M}_+, \hat{M}\_z] = [\hat{M}_x + i\hat{M}_y, \hat{M}\_z]$$
$$= [\hat{M}_x, \hat{M}\_z] + i[\hat{M}_y, \hat{M}\_z]$$
$$= -i\hbar\hat{M}_y - \hbar\hat{M}_x$$
$$[\hat{M}_+, \hat{M}\_z] = -\hbar\hat{M}_+$$
$$[\hat{M}_+, \hat{M}_z] = -\hbar\hat{M}_+$$
$$\hat{M}_+\hat{M}_z = \hat{M}_z\hat{M}_+ - \hbar\hat{M}_+ \tag{5.114}$$

di mana (5.107) digunakan. Dengan cara serupa diperoleh

$$\hat{M}_-\hat{M}_z = \hat{M}_z\hat{M}_- + \hbar\hat{M}_- \tag{5.115}$$

Dengan menggunakan Y untuk fungsi eigen bersama $\hat{M}^2$ dan $\hat{M}\_z$, berlaku

$$\hat{M}^2 Y = cY \tag{5.116}$$

$$\hat{M}_z Y = bY \tag{5.117}$$

di mana c dan b adalah nilai eigennya. Jika Persamaan (5.117) dioperasikan dengan $\hat{M}_+$, diperoleh

$$\hat{M}_+\hat{M}\_zY = \hat{M}_+bY$$

Dengan menggunakan Persamaan (5.114) dan fakta bahwa $\hat{M}_+$ linear, diperoleh

$$(\hat{M}\_z\hat{M}_+ - \hbar\hat{M}_+)Y = b\hat{M}_+Y$$

$$(\hat{M}_z\hat{M}_+ - \hbar\hat{M}_+)Y = b\hat{M}_+Y$$
$$\hat{M}_z(\hat{M}_+Y) = (b + \hbar)(\hat{M}_+Y) \qquad (5.118)$$

Persamaan terakhir menyatakan bahwa fungsi $\hat{M}_+Y$ merupakan fungsi eigen $\hat{M}\_z$ dengan nilai eigen $b + \hbar$. Dengan kata lain, pengoperasian operator penaik $\hat{M}_+$ pada fungsi eigen Y mengubah Y menjadi fungsi eigen $\hat{M}\_z$ yang lain, dengan nilai eigen lebih tinggi sebesar $\hbar$ daripada nilai eigen Y. Jika operator penaik diterapkan kembali pada (5.118) dan (5.114) digunakan sekali lagi, diperoleh

$$\hat{M}\_z(\hat{M}_+^2Y) = (b + 2\hbar)(\hat{M}_+^2Y)$$

Penerapan operator penaik secara berulang memberikan

$$\hat{M}_z(\hat{M}_+^kY) = (b + k\hbar)(\hat{M}_+^kY), \quad k = 0, 1, 2, \ldots \qquad (5.119)$$

Jika (5.117) dioperasikan dengan operator penurun dan (5.115) digunakan, dengan cara yang sama diperoleh

$$\hat{M}_z(\hat{M}_-Y) = (b - \hbar)(\hat{M}_-Y) \qquad (5.120)$$

$$\hat{M}_z(\hat{M}_-^kY) = (b - k\hbar)(\hat{M}_-^kY) \qquad (5.121)$$

Dengan demikian, penggunaan operator penaik dan penurun pada fungsi eigen bernilai eigen b menghasilkan tangga nilai eigen yang berbeda sebesar $\hbar$ dari satu anak tangga ke anak tangga berikutnya:

$$\ldots, b - 2\hbar, b - \hbar, b, b + \hbar, b + 2\hbar, \ldots$$

Fungsi $\hat{M}_+^kY$ dan $\hat{M}_-^kY$ merupakan fungsi eigen $\hat{M}\_z$ dengan nilai eigen $b \pm k\hbar$ [Persamaan (5.119) dan (5.121)]. Selanjutnya akan diperlihatkan bahwa fungsi-fungsi ini juga merupakan fungsi eigen $\hat{M}^2$, semuanya dengan nilai eigen c yang sama:

$$\hat{M}_z\hat{M}_\pm^kY = (b \pm k\hbar)\hat{M}_\pm^kY \qquad (5.122)$$

$$\hat{M}^2\hat{M}_\pm^kY = c\hat{M}_\pm^kY, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots \qquad (5.123)$$

Untuk membuktikan (5.123), mula-mula ditunjukkan bahwa $\hat{M}^2$ berkomutasi dengan $\hat{M}_+$ dan $\hat{M}_-$:

$$[\hat{M}^2, \hat{M}\pm] = [\hat{M}^2, \hat{M}_x \pm i\hat{M}_y]$$
$$= [\hat{M}^2, \hat{M}_x] \pm i[\hat{M}^2, \hat{M}_y] = 0 \pm 0 = 0$$

Selain itu,

$$[\hat{M}^2, \hat{M}\pm^2] = [\hat{M}^2, \hat{M}\pm]\hat{M}\pm + \hat{M}\pm[\hat{M}^2, \hat{M}\pm] = 0 + 0 = 0$$

Dengan induksi diperoleh

$$[\hat{M}^2, \hat{M}_\pm^k] = 0 \quad \text{or} \quad \hat{M}^2\hat{M}_\pm^k = \hat{M}_\pm^k\hat{M}^2, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots \qquad (5.124)$$

Jika (5.116) dioperasikan dengan $\hat{M}\pm^k$ dan (5.124) digunakan, diperoleh

$$\hat{M}\pm^{k}\hat{M}^{2}Y = \hat{M}\pm^{k}cY$$

$$\hat{M}_{\pm}^{k}\hat{M}^{2}Y = \hat{M}_{\pm}^{k}cY$$

$$\hat{M}^{2}(\hat{M}_{\pm}^{k}Y) = c(\hat{M}_{\pm}^{k}Y) \qquad (5.125)$$

yang merupakan hasil yang hendak dibuktikan.

Selanjutnya diperlihatkan bahwa himpunan nilai eigen $\hat{M}_z$ yang dihasilkan oleh operator tangga harus terbatas. Untuk fungsi eigen tertentu Y dengan nilai eigen $\hat{M}_z$ sebesar b, berlaku $\hat{M}_zY = bY$. Untuk himpunan fungsi eigen dan nilai eigen yang dihasilkan oleh operator tangga, berlaku

$$\hat{M}_z Y_k = b_k Y_k \qquad (5.126)$$

di mana

$$Y_k = \hat{M}_{\pm}^{k} Y \qquad (5.127)$$

$$b_k = b \pm k\hbar \qquad (5.128)$$

Penerapan $\hat{M}_+$ atau $\hat{M}_-$ merusak normalisasi Y, sehingga Y_k tidak ternormalisasi. Untuk konstanta normalisasi, lihat Soal 10.27.

Dengan mengoperasikan $\hat{M}_z$ pada (5.126), diperoleh

$$\hat{M}_z^{2}Y_k = b_k\hat{M}_zY_k$$

$$\hat{M}_z^{2}Y_k = b_k^{2}Y_k \qquad (5.129)$$

Sekarang kurangkan (5.129) dari (5.123), lalu gunakan (5.127) dan (5.108):

$$\hat{M}^{2}Y_k - \hat{M}_z^{2}Y_k = cY_k - b_k^{2}Y_k$$

$$(\hat{M}_x^{2} + \hat{M}_y^{2})Y_k = (c - b_k^{2})Y_k \qquad (5.130)$$

Operator $\hat{M}_x^{2} + \hat{M}_y^{2}$ berkaitan dengan besaran fisik yang tidak negatif sehingga nilai eigennya tidak negatif. Hal ini dibuktikan dalam Soal 7.11. Karena itu, (5.130) menyiratkan $c - b_k^{2} \geq 0$ dan $c^{1/2} \geq |b_k|$. Jadi,

$$c^{1/2} \geq b_k \geq -c^{1/2}, \qquad k = 0, \pm1, \pm2, \ldots \qquad (5.131)$$

Karena c tetap konstan ketika k berubah, (5.131) menunjukkan bahwa himpunan nilai eigen b_k dibatasi dari atas maupun bawah. Misalkan b_maks dan b_min menyatakan nilai maksimum dan minimum b_k. Fungsi eigen yang bersesuaian adalah Y_maks dan Y_min:

$$\hat{M}_z Y_{\max} = b_{\max} Y_{\max} \qquad (5.132)$$

$$\hat{M}_z Y_{\min} = b_{\min} Y_{\min} \qquad (5.133)$$

Sekarang operasikan operator penaik pada (5.132) dan gunakan (5.114):

$$\hat{M}_{+}\hat{M}\_zY\_maks = b\_maks\hat{M}_{+}Y\_maks$$

$$\hat{M}_z(\hat{M}_+ Y_{\max}) = (b_{\max} + \hbar)(\hat{M}_+ Y_{\max}) \qquad (5.134)$$

Persamaan terakhir tampak bertentangan dengan pernyataan bahwa b_maks adalah nilai eigen terbesar $\hat{M}\_z$, sebab persamaan itu menyatakan bahwa $\hat{M}_{+}Y\_maks$ adalah fungsi eigen $\hat{M}\_z$ dengan nilai eigen b_maks + $\hbar$. Satu-satunya jalan keluar ialah $\hat{M}_{+}Y\_maks$ sama dengan nol. Fungsi nol selalu ditolak sebagai fungsi eigen berdasarkan pertimbangan fisik. Jadi,

$$\hat{M}_+ Y_{\max} = 0 \qquad (5.135)$$

Dengan mengoperasikan operator penurun pada (5.135) dan menggunakan (5.113), (5.132), serta (5.116), diperoleh

$$0 = \hat{M}\_\hat{M}_{+}Y\_maks = (\hat{M}^2 - \hat{M}\_z^2 - \hbar\hat{M}\_z)Y\_maks$$

$$= (c - b\_maks^2 - \hbar b\_maks)Y\_maks$$

$$c - b\_maks^2 - \hbar b\_maks = 0$$

$$c = b_{\max}^2 + \hbar b_{\max} \qquad (5.136)$$

Argumen serupa menunjukkan

$$\hat{M}_- Y_{\min} = 0 \qquad (5.137)$$

dan dengan menerapkan operator penaik pada persamaan ini serta menggunakan (5.112), diperoleh

$$c = b\_min^2 - \hbar b\_min$$

Dengan mengurangkan persamaan terakhir dari (5.136), diperoleh

$$b\_maks^2 + \hbar b\_maks + (\hbar b\_min - b\_min^2) = 0$$

Ini merupakan persamaan kuadrat dalam b_maks. Dengan menggunakan rumus kuadrat biasa—yang tetap berlaku dalam mekanika kuantum—diperoleh

$$b\_maks = -b\_min, \quad b\_maks = b\_min - \hbar$$

Akar kedua ditolak karena menyatakan b_maks lebih kecil daripada b_min. Jadi,

$$b_{\min} = -b_{\max} \qquad (5.138)$$

Selain itu, (5.128) menyatakan bahwa b_maks dan b_min berbeda sebesar kelipatan bulat $\hbar$:

$$b_{\max} - b_{\min} = n\hbar, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots \qquad (5.139)$$

Dengan mensubstitusikan (5.138) ke dalam (5.139), untuk nilai eigen $\hat{M}\_z$ diperoleh

$$b_{\max} = \tfrac{1}{2}n\hbar$$

$$b_{\max} = j\hbar, \qquad j = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, 2, \ldots \tag{5.140}$$

$$b_{\min} = -j\hbar$$

$$b = -j\hbar, (-j+1)\hbar, (-j+2)\hbar, \ldots, (j-2)\hbar, (j-1)\hbar, j\hbar \tag{5.141}$$

dan dari (5.136), nilai eigen $\hat{M}^2$ adalah

$$c = j(j+1)\hbar^2, \quad j = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, \ldots \tag{5.142}$$

Dengan demikian,

$$\hat{M}^2 Y = j(j+1)\hbar^2 Y, \quad j = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, 2, \ldots \tag{5.143}$$

$$\hat{M}_z Y = m_j \hbar Y, \quad m_j = -j, -j+1, \ldots, j-1, j \tag{5.144}$$

Nilai eigen $\hat{M}^2$ dan $\hat{M}\_z$ telah diperoleh hanya dengan menggunakan relasi komutasi. Namun, perbandingan (5.143) dan (5.144) dengan (5.104) dan (5.105) menunjukkan bahwa selain nilai bulat bagi bilangan kuantum momentum sudut, l = 0, 1, 2, …, kini terdapat pula kemungkinan nilai setengah bulat, j = 0, 1/2, 1, 3/2, …. Hal ini mengisyaratkan kemungkinan adanya jenis momentum sudut lain selain momentum sudut orbital. Dalam Bab 10 akan diperlihatkan bahwa momentum sudut spin dapat mempunyai bilangan kuantum setengah bulat maupun bulat. Bagi momentum sudut orbital, syarat batas nilai tunggal fungsi eigen T(φ)—lihat persamaan setelah (5.73)—meniadakan nilai setengah bulat bilangan kuantum momentum sudut. Tidak semua pihak menerima nilai tunggal sebagai syarat batas yang sah bagi fungsi gelombang, dan banyak alasan lain telah dikemukakan untuk menolak bilangan kuantum momentum sudut orbital setengah bulat; lihat C. G. Gray, *Am. J. Phys.*, 37, 559 (1969), dan M. L. Whippman, *Am. J. Phys.*, 34, 656 (1966).

Metode operator tangga dapat digunakan untuk menyelesaikan masalah nilai eigen lainnya; lihat Soal 5.36.

Ringkasan

Agar suatu himpunan lengkap fungsi eigen secara serentak merupakan fungsi eigen beberapa operator, setiap operator harus berkomutasi dengan semua operator lainnya.

Simpangan baku ΔA mengukur ketidakpastian besaran mekanika kuantum A, dengan $(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$. Untuk besaran x dan p_x berlaku $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$. Hasil kali simpangan baku dua besaran sembarang memenuhi pertidaksamaan Robertson (5.12).

Vektor B dapat ditulis $B = B_x i + B_\gamma j + B\_z k$, dengan i, j, dan k vektor satuan sepanjang sumbu x, y, dan z, sedangkan B_x, B_γ, dan B_z adalah komponen B.

Besar B adalah $|B| = (B_x^2 + B_\gamma^2 + B\_z^2)^{1/2}$. Hasil kali titik dua vektor yang membentuk sudut θ adalah $B \cdot A = B_xA_x + B_\gamma A_\gamma + B\_zA\_z = |B||A| \cos \theta$. Hasil kali silang diberikan oleh (5.28).

Definisi mekanika klasik momentum sudut orbital adalah $L \equiv r \times p$. Operator $\hat{L}^2$ berkomutasi dengan $\hat{L}_x$, $\hat{L}_\gamma$, dan $\hat{L}\_z$, tetapi $\hat{L}_x$, $\hat{L}_\gamma$, dan $\hat{L}\_z$ tidak saling berkomutasi. Ketika dinyatakan dalam koordinat bola, operator $\hat{L}^2$, $\hat{L}_x$, $\hat{L}_\gamma$, dan $\hat{L}\_z$ hanya bergantung pada sudut θ—sudut antara sumbu z dan r—serta φ—sudut antara proyeksi r pada bidang xy dan sumbu x—dan tidak bergantung pada koordinat radial r.

Rentang koordinat bola adalah $0 \leq r \leq \infty$, $0 \leq \theta \leq \pi$, dan $0 \leq \varphi \leq 2\pi$. Elemen volume infinitesimal dalam koordinat bola adalah $d\tau = r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\varphi$.

Fungsi eigen dan nilai eigen bersama $\hat{L}\_z$ dan $\hat{L}^2$ diberikan oleh $\hat{L}\_zY\_l\hat{}m = m\hbar Y\_l\hat{}m$ dan $\hat{L}^2Y\_l\hat{}m = l(l + 1)\hbar^2Y\_l\hat{}m$, dengan $Y\_l\hat{}m(\theta, \varphi)$ merupakan harmonik bola serta bilangan kuantum momentum sudut $l = 0, 1, 2, \ldots$ dan $m = -l, -l + 1, \ldots, l - 1, l$.

Untuk operator $\hat{M}_x$, $\hat{M}_\gamma$, $\hat{M}\_z$, dan $\hat{M}^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_\gamma^2 + \hat{M}\_z^2$ yang memenuhi relasi komutasi momentum sudut, penggunaan operator tangga $\hat{M}_+ = \hat{M}_x + i\hat{M}_\gamma$ dan $\hat{M}_- = \hat{M}_x - i\hat{M}_\gamma$ memberikan nilai eigen $\hat{M}^2$ yang mungkin sebesar $j(j + 1)\hbar^2$, dengan j dapat bernilai bulat atau setengah bulat, serta nilai eigen $\hat{M}\_z$ sebesar $m\_j\hbar$, dengan m_j berubah dari $-j$ sampai j dalam langkah bilangan bulat.

Integrasi Nilai Keislaman — Tambahan Editorial

Bagian berikut merupakan tambahan editorial untuk menghubungkan sikap ilmiah dalam mempelajari keteraturan alam dengan nilai Islam. Dalil ini bukan bagian dari teks asli sumber dan tidak digunakan sebagai pengganti pembuktian matematika atau eksperimen fisika.

إِنَّا كُلَّ شَيْءٍ خَلَقْنَاهُ بِقَدَرٍ

"Sesungguhnya Kami menciptakan segala sesuatu menurut ukuran." (QS Al-Qamar [54]: 49)

Ayat tersebut menegaskan bahwa ciptaan Allah berlangsung dengan *qadar*, yaitu ukuran, ketentuan, dan keteraturan. Dalam konteks pendidikan, konsep kuantisasi momentum sudut, nilai eigen, dan aturan komutasi dapat dipelajari sebagai bagian dari keteraturan alam yang ditemukan melalui observasi, pemodelan matematika, dan pengujian ilmiah. Ayat ini tidak dimaksudkan sebagai rumus mekanika kuantum, melainkan sebagai landasan etis-spiritual untuk menghargai keteraturan ciptaan dan menumbuhkan kerendahan hati ilmiah.

وَالشَّمْسُ وَالْقَمَرُ بِحُسْبَانٍ

"Matahari dan bulan beredar menurut perhitungan." (QS Ar-Rahman [55]: 5)

Istilah *biḥusbān* menunjukkan perhitungan dan keteraturan. Momentum sudut merupakan konsep mendasar untuk menjelaskan gerak rotasi, sistem atomik, dan berbagai gejala mikroskopik. Ayat ini mengarahkan manusia agar memperhatikan keteraturan alam, sedangkan mekanika kuantum menyediakan bahasa matematis untuk menelaah keteraturan pada skala atom dan partikel.

عَنْ شَدَّادِ بْنِ أَوْسٍ رَضِيَ اللَّهُ عَنْهُ قَالَ: قَالَ رَسُولُ اللَّهِ صَلَّى اللَّهُ عَلَيْهِ وَسَلَّمَ: «إِنَّ اللَّهَ كَتَبَ الْإِحْسَانَ عَلَى كُلِّ شَيْءٍ»

Dari Syaddad bin Aus r.a., Rasulullah saw. bersabda, "Sesungguhnya Allah menetapkan ihsan atas segala sesuatu." (HR Muslim, no. 1955)

Prinsip *ihsan* relevan dengan ketelitian akademik: simbol harus ditulis dengan tepat, asumsi dinyatakan secara jelas, persamaan diturunkan secara tertib, dan hasil pengukuran dipahami bersama batas ketidakpastiannya. Sikap ini mencegah manipulasi data, ketergesa-gesaan dalam menyimpulkan, serta klaim yang melebihi bukti.

Soal

Pembagian soal menurut bagian: Bagian 5.1 mencakup Soal 5.1–5.8; Bagian 5.2 mencakup Soal 5.9–5.15; Bagian 5.3 mencakup Soal 5.16–5.34; Bagian 5.4 mencakup Soal 5.35–5.36; dan Soal 5.37 bersifat umum.

5.1 Nyatakan apakah dua operator pada setiap pasangan berikut saling berkomutasi: (a) $\hat{x}^2$ dan $\partial/\partial x$; (b) $\hat{y}^2$ dan $\partial/\partial z$; (c) $\hat{x}^2$ dan $\hat{z}^2$; (d) $\partial/\partial x$ dan $\partial^2/\partial x^2$; (e) $\partial/\partial x$ dan $\partial/\partial y$.

5.2 Verifikasikan identitas komutator (5.1)–(5.5).

5.3 Tentukan $[\hat{x}, \hat{p}_x^3]$ dengan bertolak dari (5.7) untuk $[\hat{x}, \hat{p}_x^2]$.

5.4 Untuk keadaan dasar osilator harmonik satu dimensi, hitung simpangan baku Δx dan Δp_x, lalu periksa bahwa prinsip ketidakpastian dipenuhi. Gunakan hasil Soal 4.9 untuk menghemat perhitungan.

5.5 Pada suatu saat, sebuah partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l (Gambar 2.1) berada dalam keadaan tidak stasioner dengan $\psi = (105/l^7)^{1/2}x^2(l - x)$ di dalam kotak. Untuk keadaan ini, tentukan Δx dan Δp_x, kemudian verifikasikan bahwa prinsip ketidakpastian $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$ dipenuhi.

5.6 Tunjukkan bahwa simpangan baku ΔA bernilai nol ketika ψ merupakan fungsi eigen $\hat{A}$.

5.7 Turunkan $(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$ [Persamaan (5.11)].

5.8 Misalkan w adalah variabel yang didefinisikan sebagai jumlah sisi kepala yang muncul ketika dua uang logam dilempar secara serentak. Tentukan $\langle w \rangle$ dan σ_w. Petunjuk: gunakan (5.11).

5.9 Klasifikasikan masing-masing besaran berikut sebagai skalar atau vektor: (a) 3B; (b) C × B; (c) C · B; (d) |B|; (e) kecepatan; (f) energi potensial.

5.10 Misalkan A mempunyai komponen (3, −2, 6) dan B mempunyai komponen (−1, 4, 4). Tentukan |A|, |B|, A + B, A − B, A · B, dan A × B. Tentukan pula sudut antara A dan B.

5.11 Gunakan hasil kali titik vektor untuk menentukan sudut tumpul antara dua diagonal sebuah kubus. Apa arti kimia sudut tersebut?

5.12 (a) Gunakan hasil kali titik vektor untuk menunjukkan bahwa dalam $HCBr_3$ berlaku $\cos(\angle BrCBr) = 1 - 1{,}5 \sin^2(\angle HCBr)$. (b) Dalam $HCBr_3$, $\angle HCBr = 107{,}2°$. Tentukan $\angle BrCBr$.

5.13 Misalkan $f = 2x^2 - 5xyz + z^2 - 1$. Tentukan grad f. Tentukan $\nabla^2 f$.

5.14 Divergensi fungsi vektor A adalah fungsi skalar yang didefinisikan oleh

$$\text{div } A \equiv \nabla \cdot A = (i\partial/\partial x + j\partial/\partial y + k\partial/\partial z) \cdot (A_x i + A_\gamma j + A\_z k)$$

$$\text{div } A \equiv \partial A_x/\partial x + \partial A_\gamma/\partial y + \partial A\_z/\partial z$$

(a) Verifikasikan bahwa $\text{div}[\text{grad } g(x, y, z)] \equiv \nabla \cdot \nabla g = \partial^2 g/\partial x^2 + \partial^2 g/\partial y^2 + \partial^2 g/\partial z^2$. Inilah asal notasi ∇^2 untuk $\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$. (b) Tentukan $\nabla \cdot r$, dengan $r = ix + jy + kz$.

5.15 Untuk vektor (3, −2, 0, 1) dalam ruang empat dimensi, tentukan (a) panjangnya dan (b) sudut-sudut arahnya.

5.16 Nyatakan apakah dua operator pada setiap pasangan berikut saling berkomutasi: (a) $\hat{L}_x$ dan $\hat{L}\_z$; (b) $\hat{L}\_z$ dan $\hat{L}^2$; (c) $\hat{L}_x$ dan $\hat{L}^2$; (d) $\hat{L}_x^2$ dan $\hat{L}^2$.

5.17 Turunkan Persamaan (5.68) untuk $\hat{L}^2$ dari Persamaan (5.65)–(5.67).

5.18 Tentukan $[\hat{L}_x^2, \hat{L}_\gamma]$.

5.19 Tentukan koordinat bola titik-titik dengan koordinat (x, y, z) berikut: (a) (1, 2, 0); (b) (−1, 0, 3); (c) (3, 1, −2); (d) (−1, −1, −1).

5.20 Tentukan koordinat (x, y, z) titik-titik dengan koordinat bola berikut: (a) $r = 1, \theta = \pi/2, \varphi = \pi$; (b) $r = 2, \theta = \pi/4, \varphi = 0$.

5.21 Nyatakan bentuk permukaan tempat (a) r konstan; (b) θ konstan; (c) φ konstan.

5.22 Dengan mengintegralkan elemen volume diferensial koordinat bola dτ pada batas yang sesuai, verifikasikan rumus $(4/3)\pi R^3$ untuk volume bola berjari-jari R.

5.23 Hitung sudut-sudut yang mungkin antara L dan sumbu z untuk l = 2.

5.24 (a) Tunjukkan bahwa bagi fungsi eigen momentum sudut orbital, nilai terkecil yang mungkin untuk sudut antara L dan sumbu z memenuhi $\cos^2\theta = l/(l +$

1). (b) Ketika l meningkat, apakah sudut terkecil yang mungkin ini meningkat atau menurun?

5.25 Substitusikan $d/d\theta = -(1 - w^2)^{1/2}(d/dw)$, yang mengikuti (5.85), serta Persamaan (5.85) ke dalam $d^2S/d\theta^2 = (d/d\theta)(dS/d\theta)$ untuk memverifikasikan Persamaan (5.86).

5.26 Turunkan rumus $S_{2,0}$ pada Tabel 5.1 dengan dua cara: (a) menggunakan (5.146) dalam Soal 5.34; (b) menggunakan relasi rekurensi dan normalisasi.

5.27 Gunakan relasi rekurensi (5.98) dan normalisasi untuk menentukan (a) Y_3^0; (b) Y_3^1.

5.28 Terapkan operator $\hat{L}^2$ pada (5.68) kepada Y_2^0 dan verifikasikan bahwa persamaan nilai eigen (5.104) dipenuhi.

5.29 Lengkapi persamaan berikut: $\hat{L}\_z^3 Y\_l\hat{}m = ?$

5.30 Tunjukkan bahwa harmonik bola merupakan fungsi eigen operator $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_\gamma^2$. Pembuktiannya singkat. Tentukan nilai eigennya.

5.31 (a) Apabila L_z suatu partikel yang mempunyai bilangan kuantum momentum sudut l = 2 diukur, apa saja hasil pengukuran yang mungkin? (b) Apabila L_z suatu partikel yang fungsi keadaannya merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$ dengan nilai eigen $12\hbar^2$ diukur, apa saja hasil yang mungkin?

5.32 Apabila L_y suatu partikel yang mempunyai bilangan kuantum momentum sudut l = 1 diukur, apa saja hasil pengukuran yang mungkin?

5.33 Pada suatu saat t′, sebuah partikel mempunyai fungsi keadaan $\psi = Ne^{-\alpha r^2}Y_2^1(\theta, \varphi)$, dengan N dan α konstanta. (a) Apabila L^2 partikel diukur pada waktu t′, apa hasilnya? Berikan jawaban numerik. (b) Apabila L_z partikel diukur pada t′, apa hasilnya? Berikan jawaban numerik.

5.34 Fungsi Legendre terasosiasi P_l^|m|(w) didefinisikan oleh

$$P_l^{|m|}(w) \equiv \frac{1}{2^l l!}(1 - w^2)^{|m|/2}\frac{d^{l+|m|}}{dw^{l+|m|}}(w^2 - 1)^l, \qquad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{5.145}$$

Verifikasikan bahwa $P_0^0(w) = 1$, $P_1^0(w) = w$, $P_1^1(w) = (1 - w^2)^{1/2}$, lalu tentukan $P_2^0(w)$, $P_2^1(w)$, dan $P_2^2(w)$. Dapat ditunjukkan bahwa (Pauling dan Wilson, hlm. 129)

$$S_{l,m}(\theta) = \left[\frac{2l + 1}{2}\frac{(l - |m|)!}{(l + |m|)!}\right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos\theta) \tag{5.146}$$

Persamaan (5.146) dan (5.145) memberikan rumus eksplisit faktor theta ternormalisasi dalam fungsi eigen momentum sudut. Fungsi eigen ternormalisasi $\hat{L}^2$ dan $\hat{L}\_z$, yaitu harmonik bola, diberikan oleh Persamaan (5.146) dan (5.99) sebagai

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \left[\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}\right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\phi} \qquad (5.147)$$

Fase konstanta normalisasi harmonik bola bersifat sembarang (lihat Bagian 1.7). Banyak buku menggunakan konvensi fase yang berbeda dari (5.147). Karena itu, Y_l^m dapat berbeda tanda negatif dari satu buku ke buku lain.

5.35 Terapkan operator penurun $\hat{L}_-$ tiga kali berturut-turut pada $Y_1^1(\theta, \varphi)$ dan verifikasikan bahwa diperoleh fungsi-fungsi yang sebanding dengan Y_1^0, Y_1^{-1}, dan nol.

5.36 Hamiltonian osilator harmonik satu dimensi adalah

$$\hat{H} = \hat{p}_x^2/2m + 2\pi^2\nu^2 m\hat{x}^2$$

Operator penaik dan penurun bagi masalah ini didefinisikan sebagai

$$\hat{A}_+ \equiv (2m)^{-1/2}(\hat{p}_x + 2\pi i\nu m\hat{x}), \quad \hat{A}_- \equiv (2m)^{-1/2}(\hat{p}_x - 2\pi i\nu m\hat{x})$$

Tunjukkan bahwa

$$\hat{A}_+\hat{A}_- = \hat{H} - \tfrac{1}{2}h\nu, \quad \hat{A}_-\hat{A}_+ = \hat{H} + \tfrac{1}{2}h\nu, \quad [\hat{A}_+, \hat{A}_-] = -h\nu$$
$$[\hat{H}, \hat{A}_+] = h\nu\hat{A}_+, \quad [\hat{H}, \hat{A}_-] = -h\nu\hat{A}_-$$

Tunjukkan bahwa $\hat{A}_+$ dan $\hat{A}_-$ benar-benar merupakan operator tangga dan bahwa nilai-nilai eigennya terpisah dalam selang hν. Karena energi kinetik dan energi potensial keduanya tidak negatif, nilai eigen energi diharapkan tidak negatif. Karena itu, harus terdapat keadaan berenergi minimum. Operasikan fungsi gelombang keadaan ini terlebih dahulu dengan $\hat{A}_-$ dan kemudian dengan $\hat{A}_+$, lalu tunjukkan bahwa nilai eigen energi terendah adalah ½hν. Akhirnya simpulkan bahwa

$$E = (n + \tfrac{1}{2})h\nu, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Lihat juga Soal 7.62.

5.37 Benar atau salah? (a) Nilai eigen $\hat{L}^2$ terdegenerasi, kecuali untuk l = 0. (b) Karena $\hat{L}^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, maka $\hat{L}^2 = l(l+1)\hbar^2$. (c) $\hat{L}^2$ berkomutasi dengan $\hat{L}_x$. (d) Y_0^0 adalah konstanta. (e) Y_0^0 merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$, $\hat{L}_x$, $\hat{L}_\gamma$, dan $\hat{L}_z$. (f) Apabila $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ tidak saling komutatif, mustahil suatu fungsi eigen $\hat{A}$ sekaligus menjadi fungsi eigen $\hat{B}$.

BAB 6
ATOM HIDROGEN

6.1 Masalah Gaya Pusat Satu Partikel

Sebelum mempelajari atom hidrogen, kita akan membahas masalah yang lebih umum, yaitu satu partikel yang bergerak di bawah pengaruh gaya pusat. Hasil-hasil pada bagian ini berlaku bagi setiap masalah gaya pusat. Contohnya adalah atom hidrogen (Bagian 6.5) dan osilator harmonik tiga dimensi isotropik (Soal 6.3).

Gaya pusat adalah gaya yang diturunkan dari fungsi energi potensial yang bersimetri bola, artinya fungsi tersebut hanya bergantung pada jarak partikel dari titik asal: V = V(r). Hubungan antara gaya dan energi potensial diberikan oleh Persamaan (5.31) sebagai

$$\mathbf{F} = -\nabla V(x, y, z) = -\mathbf{i}(\partial V/\partial x) - \mathbf{j}(\partial V/\partial y) - \mathbf{k}(\partial V/\partial z) \tag{6.1}$$

Turunan parsial dalam (6.1) dapat dicari dengan aturan rantai [Persamaan (5.53)–(5.55)]. Karena dalam kasus ini V hanya merupakan fungsi r, kita mempunyai $(\partial V/\partial\theta)_{r,\varphi} = 0$ dan $(\partial V/\partial\varphi)_{r,\theta} = 0$. Oleh karena itu,

$$\left(\frac{\partial V}{\partial x}\right)_{y,z} = \frac{dV}{dr}\left(\frac{\partial r}{\partial x}\right)_{y,z} = \frac{x}{r}\frac{dV}{dr} \tag{6.2}$$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial y}\right)_{x,z} = \frac{y}{r}\frac{dV}{dr}, \quad \left(\frac{\partial V}{\partial z}\right)_{x,y} = \frac{z}{r}\frac{dV}{dr} \tag{6.3}$$

Dalam persamaan tersebut digunakan Persamaan (5.57) dan (5.58). Persamaan (6.1) menjadi

$$\mathbf{F} = -\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}(x\mathbf{i} + y\mathbf{j} + z\mathbf{k}) = -\frac{dV(r)}{dr}\frac{\mathbf{r}}{r} \tag{6.4}$$

Dalam penurunan ini digunakan Persamaan (5.33) untuk r. Besaran r/r dalam (6.4) adalah vektor satuan pada arah radial. Dengan demikian, gaya pusat selalu berarah radial.

Sekarang kita membahas mekanika kuantum suatu partikel tunggal yang dikenai gaya pusat. Operator Hamiltoniannya ialah

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -(\hbar^2/2m)\nabla^2 + V(r) \tag{6.5}$$

dengan $\nabla^2 \equiv \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$ [Persamaan (3.46)]. Karena V bersimetri bola, kita akan bekerja dalam koordinat bola. Oleh sebab itu, operator Laplace perlu ditransformasikan ke koordinat ini. Bentuk operator $\partial/\partial x$, $\partial/\partial y$, dan $\partial/\partial z$ dalam

koordinat bola telah diperoleh pada Persamaan (5.62)–(5.64). Dengan menguadratkan masing-masing operator itu dan menjumlahkan kuadratnya, kita memperoleh operator Laplace. Perhitungan ini diserahkan sebagai latihan. Hasilnya ialah (Soal 6.4)

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{1}{r^2}\cot\theta\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \tag{6.6}$$

Dengan melihat kembali Persamaan (5.68), yang memberikan operator $\hat{L}^2$ bagi kuadrat besar momentum sudut orbital satu partikel, kita memperoleh

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r^2\hbar^2}\hat{L}^2 \tag{6.7}$$

Hamiltonian (6.5) kemudian menjadi

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2 + V(r) \tag{6.8}$$

Dalam mekanika klasik, momentum sudut suatu partikel yang dikenai gaya pusat bersifat kekal (Bagian 5.3). Dalam mekanika kuantum kita dapat bertanya apakah terdapat keadaan yang sekaligus mempunyai nilai pasti bagi energi dan momentum sudut. Agar himpunan fungsi eigen $\hat{H}$ juga merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$, komutator $[\hat{H}, \hat{L}^2]$ harus bernilai nol. Kita mempunyai

$$\begin{aligned}
[\hat{H}, \hat{L}^2] &= [\hat{T}, \hat{L}^2] + [\hat{V}, \hat{L}^2] \\
[\hat{T}, \hat{L}^2] &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2, \hat{L}^2\right] \\
[\hat{T}, \hat{L}^2] &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}, \hat{L}^2\right] + \frac{1}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\hat{L}^2, \hat{L}^2\right]
\end{aligned} \tag{6.9}$$

Ingatlah bahwa $\hat{L}^2$ hanya melibatkan θ dan φ, tidak melibatkan r [Persamaan (5.68)]. Karena itu, $\hat{L}^2$ berkomutasi dengan setiap operator yang hanya melibatkan r. Untuk mencapai kesimpulan ini, digunakan hubungan seperti (5.47), dengan x dan z diganti oleh r dan θ. Dengan demikian, komutator pertama dalam (6.9) bernilai nol. Selain itu, karena setiap operator berkomutasi dengan dirinya sendiri, komutator kedua dalam (6.9) juga bernilai nol. Jadi, $[\hat{T}, \hat{L}^2] = 0$. Karena $\hat{L}^2$ tidak melibatkan r dan V hanya merupakan fungsi r, kita juga mempunyai $[\hat{V}, \hat{L}^2] = 0$. Oleh karena itu,

$$[\hat{H}, \hat{L}^2] = 0 \qquad \text{if } V = V(r) \tag{6.10}$$

Hamiltonian $\hat{H}$ berkomutasi dengan $\hat{L}^2$ apabila fungsi energi potensial tidak bergantung pada θ dan φ.

Sekarang pertimbangkan operator $\hat{L}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi$ [Persamaan (5.67)]. Karena $\hat{L}_z$ tidak melibatkan r dan berkomutasi dengan $\hat{L}^2$ [Persamaan (5.50)], $\hat{L}_z$ juga berkomutasi dengan Hamiltonian (6.8):

$$[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0 \qquad \text{if } V = V(r) \tag{6.11}$$

Dengan demikian, untuk masalah gaya pusat dapat diperoleh suatu himpunan fungsi eigen serentak bagi $\hat{H}$, $\hat{L}^2$, dan $\hat{L}_z$. Misalkan ψ menyatakan fungsi-fungsi eigen bersama tersebut:

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{6.12}$$

$$\hat{L}^2\psi = l(l+1)\hbar^2\psi, \quad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{6.13}$$

$$\hat{L}_z\psi = m\hbar\psi, \quad m = -l, \quad -l+1, \ldots, l \tag{6.14}$$

dengan Persamaan (5.104) dan (5.105) telah digunakan.

Dengan memakai (6.8) dan (6.13), persamaan Schrödinger (6.12) menjadi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{2mr^2}\hat{L}^2\psi + V(r)\psi = E\psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\psi + V(r)\psi = E\psi \tag{6.15}$$

Fungsi eigen $\hat{L}^2$ adalah harmonik bola $Y_l^m(\theta,\varphi)$. Karena $\hat{L}^2$ tidak melibatkan r, Y_l^m dapat dikalikan dengan fungsi r yang sembarang dan hasilnya masih merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$ dan $\hat{L}_z$. Oleh sebab itu,

$$\psi = R(r)Y_l^m(\theta, \phi) \tag{6.16}$$

Dengan menggunakan (6.16) dalam (6.15), lalu membagi kedua ruas dengan Y_l^m, diperoleh persamaan diferensial biasa bagi fungsi R(r) yang belum diketahui:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(R'' + \frac{2}{r}R'\right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}R + V(r)R = ER(r) \tag{6.17}$$

Kita telah menunjukkan bahwa, bagi setiap masalah satu partikel dengan fungsi energi potensial bersimetri bola V(r), fungsi gelombang keadaan stasioner berbentuk $\psi = R(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$, sedangkan faktor radial R(r) memenuhi (6.17). Dengan memasukkan bentuk khusus V(r) ke dalam (6.17), persamaan tersebut dapat diselesaikan untuk suatu masalah tertentu.

6.2 Partikel Tidak Berinteraksi dan Pemisahan Variabel

Sampai tahap ini, kita baru menyelesaikan masalah mekanika kuantum satu partikel. Atom hidrogen merupakan sistem dua partikel. Sebagai pendahuluan sebelum menangani atom H, terlebih dahulu dibahas kasus yang lebih sederhana, yaitu dua partikel yang tidak berinteraksi.

Misalkan suatu sistem terdiri atas partikel 1 dan 2 yang tidak berinteraksi. Simbol q_1 dan q_2 menyatakan koordinat (x_1, y_1, z_1) dan (x_2, y_2, z_2) masing-masing partikel. Karena kedua partikel tidak memberikan gaya satu sama lain, energi sistem secara mekanika klasik adalah jumlah energi kedua partikel: $E = E_1 + E_2 = T_1 + V_1 + T_2 + V_2$. Hamiltonian klasik juga merupakan jumlah Hamiltonian masing-masing partikel, $H = H_1 + H_2$. Oleh karena itu, operator Hamiltonian sistem adalah $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$, dengan $\hat{H}_1$ hanya melibatkan koordinat q_1 dan operator momentum $\hat{p}_1$ yang berkaitan dengan q_1. Persamaan Schrödinger sistem tersebut ialah

$$(\hat{H}_1 + \hat{H}_2)\psi(q_1, q_2) = E\psi(q_1, q_2) \tag{6.18}$$

Kita mencoba menyelesaikan (6.18) dengan pemisahan variabel, yaitu menetapkan

$$\psi(q_1, q_2) = G_1(q_1)G_2(q_2) \tag{6.19}$$

Dengan demikian,

$$\hat{H}_1 G_1(q_1)G_2(q_2) + \hat{H}_2 G_1(q_1)G_2(q_2) = EG_1(q_1)G_2(q_2) \tag{6.20}$$

Karena $\hat{H}_1$ hanya melibatkan operator koordinat dan momentum partikel 1, berlaku $\hat{H}_1[G_1(q_1)G_2(q_2)] = G_2(q_2)\hat{H}_1 G_1(q_1)$, sebab dari sudut pandang $\hat{H}_1$, G_2 merupakan konstanta. Dengan menggunakan hubungan ini dan hubungan serupa untuk $\hat{H}_2$, Persamaan (6.20) menjadi

$$G_2(q_2)\hat{H}_1 G_1(q_1) + G_1(q_1)\hat{H}_2 G_2(q_2) = EG_1(q_1)G_2(q_2) \tag{6.21}$$

Setelah dibagi dengan $G_1(q_1)G_2(q_2)$, diperoleh

$$\frac{\hat{H}_1 G_1(q_1)}{G_1(q_1)} + \frac{\hat{H}_2 G_2(q_2)}{G_2(q_2)} = E \tag{6.22}$$

Dengan argumen yang sama seperti yang digunakan dalam pembahasan Persamaan (3.65), setiap suku pada ruas kiri (6.22) harus merupakan konstanta. Dengan menggunakan E_1 dan E_2 untuk menyatakan konstanta-konstanta tersebut, kita memperoleh

$$\frac{\hat{H}_1 G_1(q_1)}{G_1(q_1)} = E_1, \qquad \frac{\hat{H}_2 G_2(q_2)}{G_2(q_2)} = E_2$$

$$E = E_1 + E_2 \tag{6.23}$$

Dengan demikian, apabila sistem terdiri atas dua partikel yang tidak berinteraksi, masalah dua partikel dapat direduksi menjadi dua masalah satu partikel yang terpisah dengan menyelesaikan

$$\hat{H}_1 G_1(q_1) = E_1 G_1(q_1), \qquad \hat{H}_2 G_2(q_2) = E_2 G_2(q_2) \tag{6.24}$$

Persamaan-persamaan tersebut adalah persamaan Schrödinger terpisah untuk setiap partikel.

Dengan memperumum hasil ini untuk n partikel yang tidak berinteraksi, diperoleh

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \cdots + \hat{H}_n$$

$$\boxed{\psi(q_1, q_2, \ldots, q_n) = G_1(q_1) G_2(q_2) \cdots G_n(q_n)} \tag{6.25}$$

$$\boxed{E = E_1 + E_2 + \cdots + E_n} \tag{6.26}$$

$$\boxed{\hat{H}_i G_i = E_i G_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n} \tag{6.27}$$

Untuk sistem partikel-partikel yang tidak berinteraksi, energi total merupakan jumlah energi masing-masing partikel dan fungsi gelombang merupakan hasil kali fungsi gelombang tiap partikel. Fungsi gelombang G_i bagi partikel i diperoleh dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger partikel i menggunakan Hamiltonian $\hat{H}_i$.

Hasil-hasil tersebut juga berlaku bagi satu partikel yang Hamiltoniannya merupakan jumlah suku-suku terpisah untuk setiap koordinat:

$$\hat{H} = \hat{H}_x(\hat{x},\hat{p}_x) + \hat{H}_y(\hat{y},\hat{p}_y) + \hat{H}\_z(\hat{z},\hat{p}\_z)$$

Dalam hal ini, fungsi gelombang dan energinya ialah

$$\psi(x,y,z) = F(x)G(y)K(z), \quad E = E_x + E_y + E\_z$$

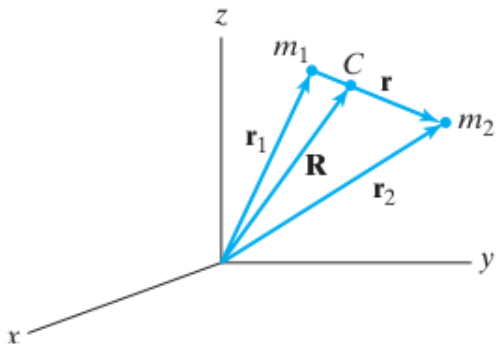
$$\hat{H}_x F(x) = E_x F(x), \quad \hat{H}_y G(y) = E_y G(y), \quad \hat{H}\_z K(z) = E\_z K(z)$$

Contohnya meliputi partikel dalam kotak tiga dimensi (Bagian 3.5), partikel bebas tiga dimensi (Soal 3.42), dan osilator harmonik tiga dimensi (Soal 4.20).

6.3 Reduksi Masalah Dua Partikel menjadi Dua Masalah Satu Partikel

Atom hidrogen mengandung dua partikel, yaitu proton dan elektron. Bagi sistem dua partikel 1 dan 2 dengan koordinat (x_1, y_1, z_1) dan (x_2, y_2, z_2), energi potensial interaksi antarkedua partikel biasanya hanya merupakan fungsi koordinat relatif $x_2 - x_1$, $y_2 - y_1$, dan $z_2 - z_1$. Dalam keadaan ini, masalah dua partikel dapat disederhanakan menjadi dua masalah satu partikel yang terpisah, sebagaimana akan dibuktikan berikut.

Pertimbangkan perlakuan mekanika klasik terhadap dua partikel berinteraksi dengan massa m_1 dan m_2. Kedudukan kedua partikel dinyatakan oleh vektor radius r_1 dan r_2 yang ditarik dari titik asal sistem koordinat Kartesius (Gambar 6.1). Partikel 1 dan 2 mempunyai koordinat (x_1, y_1, z_1) dan (x_2, y_2, z_2). Kita menggambar vektor $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ dari partikel 1 ke partikel 2 dan menyatakan komponen-komponen r dengan x, y, dan z:



Gambar 6.1. Sistem dua partikel dengan pusat massa di C.

$$x = x_2 - x_1, \quad y = y_2 - y_1, \quad z = z_2 - z_1 \tag{6.28}$$

Koordinat x, y, dan z disebut koordinat relatif atau koordinat internal.

Selanjutnya, kita menggambar vektor R dari titik asal menuju pusat massa sistem, yaitu titik C, dan menyatakan koordinat C dengan X, Y, dan Z:

$$\mathbf{R} = \mathbf{i}X + \mathbf{j}Y + \mathbf{k}Z \tag{6.29}$$

Definisi pusat massa bagi sistem dua partikel ini memberikan

$$X = \frac{m_1x_1 + m_2x_2}{m_1 + m_2}, \quad Y = \frac{m_1y_1 + m_2y_2}{m_1 + m_2}, \quad Z = \frac{m_1z_1 + m_2z_2}{m_1 + m_2} \tag{6.30}$$

Ketiga persamaan tersebut ekuivalen dengan persamaan vektor

$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \tag{6.31}$$

Selain itu,

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 \tag{6.32}$$

Persamaan (6.31) dan (6.32) dapat dipandang sebagai persamaan serentak dalam dua besaran yang belum diketahui, r_1 dan r_2. Penyelesaiannya ialah

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} - \frac{m_2}{m_1 + m_2}\mathbf{r}, \qquad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} + \frac{m_1}{m_1 + m_2}\mathbf{r} \tag{6.33}$$

Persamaan (6.31) dan (6.32) menyatakan transformasi koordinat dari x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2 menjadi X, Y, Z, x, y, z. Sekarang kita meninjau perubahan Hamiltonian akibat transformasi ini. Tanda titik di atas suatu besaran menyatakan diferensiasi terhadap waktu. Kecepatan partikel 1 ialah $v_1 = dr_1/dt = \dot{r}_1$ [Persamaan (5.34)]. Energi kinetik sistem adalah jumlah energi kinetik kedua partikel:

$$T = \tfrac{1}{2}m_1|\dot{\mathbf{r}}_1|^2 + \tfrac{1}{2}m_2|\dot{\mathbf{r}}_2|^2 \tag{6.34}$$

Dengan memasukkan turunan waktu Persamaan (6.33) ke dalam (6.34), dan menggunakan $|A|^2 = A\cdot A$ [Persamaan (5.24)], kemudian menerapkan hukum distributif bagi hasil kali titik dan menyederhanakannya, diperoleh

$$T = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)|\dot{\mathbf{R}}|^2 + \frac{1}{2}\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}|\dot{\mathbf{r}}|^2 \tag{6.35}$$

Misalkan M adalah massa total sistem:

$$M \equiv m_1 + m_2 \tag{6.36}$$

Massa tereduksi μ sistem dua partikel didefinisikan sebagai

$$\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{6.37}$$

Dengan demikian,

$$T = \tfrac{1}{2}M|\dot{\mathbf{R}}|^2 + \tfrac{1}{2}\mu|\dot{\mathbf{r}}|^2 \tag{6.38}$$

Suku pertama dalam (6.38) adalah energi kinetik akibat gerak translasi seluruh sistem bermassa M. Gerak translasi adalah gerak ketika setiap partikel mengalami perpindahan yang sama. Besaran $\frac{1}{2}M|\dot{R}|^2$ adalah energi kinetik sebuah partikel hipotesis bermassa M yang terletak di pusat massa. Suku kedua dalam (6.38) adalah energi kinetik gerak internal atau gerak relatif kedua partikel. Gerak internal ini terdiri atas dua jenis. Jarak r antara kedua partikel dapat berubah, yaitu vibrasi, dan arah vektor r dapat berubah, yaitu rotasi. Perhatikan bahwa $|\dot{r}| = |dr/dt|$ tidak sama dengan $d|r|/dt$.

Bersesuaian dengan koordinat semula x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, terdapat enam momentum linear:

$$p_{x_1} = m_1\dot{x}_1, \quad \ldots, \quad p_{z_2} = m_2\dot{z}_2 \tag{6.39}$$

Dengan membandingkan Persamaan (6.34) dan (6.38), enam momentum linear bagi koordinat baru X, Y, Z, x, y, z didefinisikan sebagai p_X ≡ MẊ, p_Y ≡ MẎ, p_Z ≡ MŻ dan p_x ≡ μẋ, p_γ ≡ μẏ, p_z ≡ μż. Dua vektor momentum baru dapat didefinisikan sebagai p_M ≡ iMẊ + jMẎ + kMŻ dan p_μ ≡ iμẋ + jμẏ + kμż. Dengan memasukkan momentum-momentum ini ke dalam (6.38), diperoleh

$$T = \frac{|\mathbf{p}_M|^2}{2M} + \frac{|\mathbf{p}_\mu|^2}{2\mu} \tag{6.40}$$

Sekarang pertimbangkan energi potensial. Kita membatasi V agar hanya merupakan fungsi koordinat relatif x, y, dan z kedua partikel:

$$V = V(x, y, z) \tag{6.41}$$

Contoh (6.41) adalah dua partikel bermuatan yang berinteraksi menurut hukum Coulomb [lihat Persamaan (3.53)]. Dengan pembatasan tersebut, fungsi Hamiltonian menjadi

$$H = \frac{p_M^2}{2M} + \left[\frac{p_\mu^2}{2\mu} + V(x, y, z)\right] \tag{6.42}$$

Sekarang bayangkan suatu sistem yang terdiri atas partikel bermassa M tanpa dikenai gaya dan partikel bermassa μ yang dikenai fungsi energi potensial V(x,y,z). Anggap pula tidak terdapat interaksi antara kedua partikel tersebut. Apabila (X,Y,Z) merupakan koordinat partikel bermassa M dan (x,y,z) koordinat partikel bermassa μ, Hamiltonian sistem hipotesis ini jelas identik dengan (6.42).

Hamiltonian (6.42) dapat dipandang sebagai jumlah Hamiltonian p_M²/2M dan p_μ²/2μ + V(x,y,z) bagi dua partikel hipotesis yang tidak berinteraksi, masing-masing bermassa M dan μ. Karena itu, hasil Bagian 6.2 menunjukkan bahwa energi mekanika kuantum sistem adalah jumlah energi kedua partikel hipotesis [Persamaan (6.23)], yaitu E = E_M + E_μ. Dari Persamaan (6.24) dan (6.42), energi translasi E_M diperoleh dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger partikel bebas bermassa M, sedangkan energi internal E_μ diperoleh dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger bagi satu partikel bermassa μ yang bergerak di bawah energi potensial V(x,y,z):

$$\left[\frac{\hat{p}_\mu^2}{2\mu} + V(x, y, z)\right]\psi_\mu(x, y, z) = E_\mu\psi_\mu(x, y, z) \tag{6.43}$$

Dengan demikian, masalah dua partikel yang saling berinteraksi melalui potensial yang hanya bergantung pada koordinat relatif dapat direduksi menjadi dua masalah satu partikel: gerak translasi pusat massa seperti partikel bebas bermassa M, dan gerak internal seperti partikel tunggal bermassa tereduksi μ dalam potensial interaksi. Biasanya yang berkepentingan secara kimia adalah energi internal E_μ. Energi total adalah E = E_M + E_μ, sedangkan fungsi gelombang total adalah hasil kali fungsi translasi pusat massa dan fungsi internal.

Sebagai contoh, untuk atom hidrogen yang terdiri atas elektron dan proton, fungsi gelombang dapat ditulis sebagai hasil kali fungsi gelombang partikel bebas bagi gerak pusat massa dan fungsi internal yang menggambarkan gerak relatif elektron-proton. Karena massa proton jauh lebih besar daripada massa elektron, massa tereduksi sedikit lebih kecil daripada massa elektron. Untuk sistem molekul, pemisahan pusat massa dengan cara yang sama memisahkan gerak translasi keseluruhan dari gerak internal.

6.4 Rotor Tegar Dua Partikel

Sebelum menyelesaikan persamaan Schrödinger atom hidrogen, terlebih dahulu kita membahas rotor tegar dua partikel. Sistem ini terdiri atas dua partikel yang dipertahankan pada jarak tetap satu sama lain oleh sebuah batang tegar hipotetis dengan panjang d. Untuk masalah ini energi potensial $V(r_1,r_2)$ adalah nol apabila $|r_2 - r_1| = d$ dan tak hingga apabila $|r_2 - r_1| \neq d$. Karena V konstan di daerah yang diizinkan, suku energi potensial tidak muncul dalam persamaan Schrödinger internal.

Persamaan (6.44) merupakan kasus khusus Persamaan (6.41), sehingga masalah rotor tegar dua partikel dapat dipisahkan menjadi gerak translasi pusat massa dan gerak rotasi internal. Kita hanya membahas gerak internal, yang mempunyai energi kinetik dan tidak mempunyai energi potensial.

$$V = 0 \tag{6.44}$$

Persamaan Schrödinger internal diperoleh dari (6.43). Karena jarak r = d tetap, tidak terdapat gerak radial, sehingga hanya bagian sudut operator Laplace yang bekerja. Dengan menggunakan (6.7), persamaan Schrödinger internal dapat ditulis sebagai

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_\mu^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2, \qquad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \tag{6.45}$$

Karena fungsi gelombang hanya bergantung pada sudut θ dan φ, dan operator $\hat{L}^2$ mempunyai fungsi eigen harmonik bola, diperoleh fungsi gelombang rotor

$$\psi = Y_J^m(\theta, \phi) \tag{6.46}$$

Penggunaan Persamaan (6.13) memberikan

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

$$(2\mu d^2)^{-1}\hat{L}^2 Y_J^m(\theta,\phi) = EY_J^m(\theta,\phi)$$

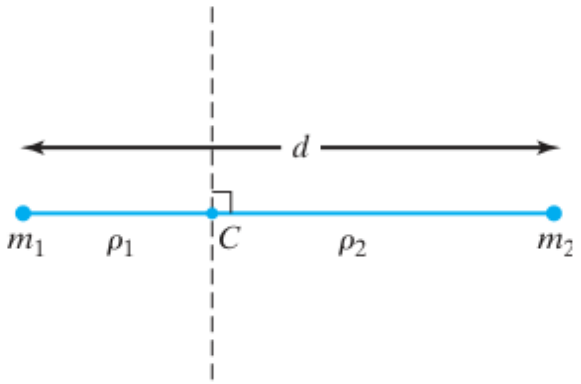
$$(2\mu d^2)^{-1} J(J+1)\hbar^2 Y_J^m(\theta,\phi) = EY_J^m(\theta,\phi)$$

$$E = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2\mu d^2}, \qquad J = 0, 1, 2 \cdots \tag{6.47}$$

Momen inersia I suatu sistem n partikel terhadap suatu sumbu tertentu dalam ruang didefinisikan sebagai

$$I \equiv \sum_{i=1}^{n} m_i \rho_i^2 \tag{6.48}$$

dengan m_i massa partikel ke-i dan r_i jarak tegak lurus partikel tersebut dari sumbu. Untuk rotor tegar dua partikel, sumbu rotasi melewati pusat massa C dan tegak lurus garis yang menghubungkan kedua massa (Gambar 6.2). Jarak kedua partikel dari C dapat diperoleh dari definisi pusat massa. Dengan memilih koordinat sebagaimana pada gambar, kita memperoleh



Gambar 6.2. Sumbu (garis putus-putus) untuk menghitung momen inersia rotor tegar dua partikel. C adalah pusat massa.

$$m_1\rho_1 = m_2\rho_2 \tag{6.49}$$

Momen inersia rotor terhadap sumbu tersebut ialah

$$I = m_1\rho_1^2 + m_2\rho_2^2 \tag{6.50}$$

Dengan menggunakan (6.49), persamaan ini berubah menjadi

$$\boxed{I = \mu d^2} \tag{6.51}$$

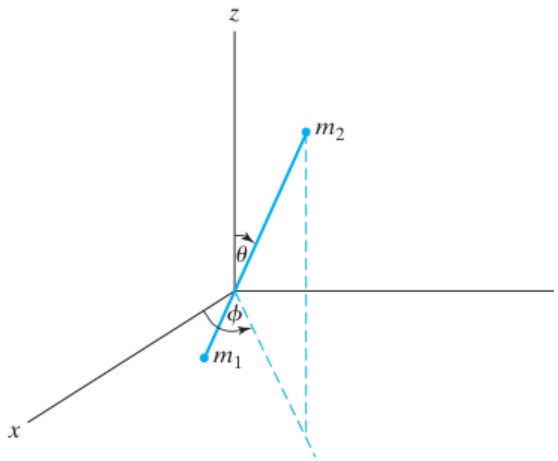
dengan $\mu \equiv m_1 m_2/(m_1 + m_2)$ adalah massa tereduksi sistem dan $d \equiv r_1 + r_2$ adalah jarak antara m_1 dan m_2. Tingkat energi yang diizinkan bagi rotor tegar dua partikel, dari (6.47), adalah

$$E = \frac{J(J+1)\hbar^2}{2I}, \quad J = 0, 1, 2, \ldots \qquad \textbf{(6.52)}$$

Tingkat paling rendah ialah E = 0, sehingga tidak terdapat energi titik-nol rotasi. Energi rotasi nol, dan karena itu momentum sudut rotor nol, tidak melanggar prinsip ketidakpastian; ingat pembahasan sesudah Persamaan (5.105). Perhatikan bahwa E meningkat sebagai $J^2 + J$, sehingga jarak antara tingkat rotasi yang berdekatan meningkat ketika J meningkat.

Apakah tingkat energi rotor (6.52) terdegenerasi? Energi hanya bergantung pada J, tetapi fungsi gelombang (6.46) bergantung pada J dan m, dengan $m\hbar$ sebagai komponen-z momentum sudut rotor. Untuk setiap nilai J terdapat 2J + 1 nilai m, dari −J sampai J. Jadi, setiap tingkat mempunyai degenerasi 2J + 1. Keadaan-keadaan dalam satu tingkat terdegenerasi mempunyai orientasi vektor momentum sudut rotor yang berbeda terhadap sumbu yang tetap di ruang.

Sudut θ dan φ dalam fungsi gelombang (6.46) adalah koordinat relatif kedua massa titik. Apabila dibuat sistem koordinat Kartesius dengan titik asal di pusat massa rotor, θ dan φ akan tampak seperti pada Gambar 6.3. Sistem koordinat ini mengalami gerak translasi yang sama dengan pusat massa rotor, tetapi tidak berotasi di ruang.



Gambar 6.3. Sistem koordinat rotor tegar dua partikel.

Momentum sudut rotasi $[J(J+1)\hbar^2]^{1/2}$ adalah momentum sudut kedua partikel terhadap titik asal di pusat massa sistem C.

Tingkat rotasi molekul diatomik dapat dihampiri dengan baik oleh energi rotor tegar dua partikel (6.52). Ditemukan bahwa apabila molekul diatomik menyerap

atau memancarkan radiasi, transisi rotasi murni yang diizinkan mengikuti aturan seleksi

$$\Delta J = \pm 1 \qquad (6.53)$$

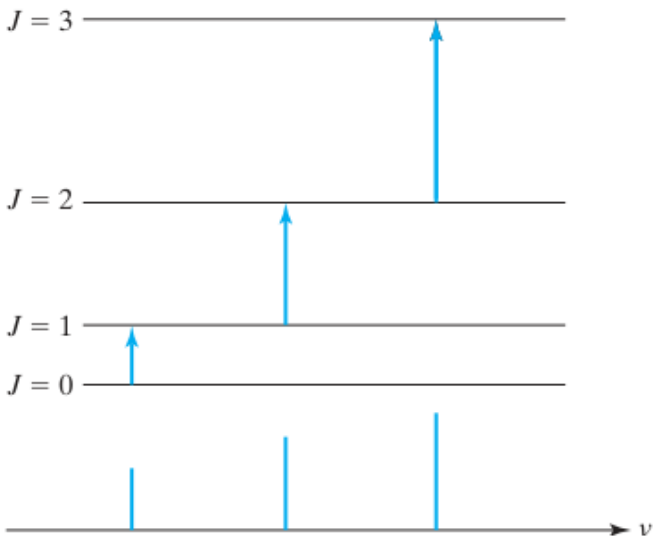
Selain itu, suatu molekul harus mempunyai momen dipol tak-nol agar menunjukkan spektrum rotasi murni. Transisi rotasi murni adalah transisi yang hanya mengubah bilangan kuantum rotasi. Transisi vibrasi-rotasi (Bagian 4.3) melibatkan perubahan bilangan kuantum vibrasi dan rotasi sekaligus. Jarak antara tingkat rotasi rendah yang berdekatan jauh lebih kecil daripada jarak antara tingkat vibrasi berdekatan, sehingga spektrum rotasi murni berada di daerah gelombang mikro atau inframerah jauh. Frekuensi garis spektrum rotasi murni molekul diatomik kemudian, secara hampiran, adalah

$$\nu = \frac{E_{J+1} - E_J}{h} = \frac{[(J+1)(J+2) - J(J+1)]h}{8\pi^2 I} = 2(J+1)B \qquad (6.54)$$

$$B \equiv h/8\pi^2 I, \qquad J = 0, 1, 2, \ldots \qquad (6.55)$$

B disebut konstanta rotasi molekul.

Jarak antara tingkat rotasi diatomik (6.52) pada nilai J rendah dan sedang biasanya lebih kecil daripada atau seorde dengan kT pada suhu kamar. Hukum distribusi Boltzmann (4.63) dengan demikian menunjukkan bahwa banyak tingkat rotasi terpopulasi secara berarti pada suhu kamar. Penyerapan radiasi oleh molekul diatomik dengan J = 0, yaitu transisi J = 0 → 1, menghasilkan garis pada frekuensi 2B; molekul dengan J = 1 menghasilkan garis transisi J = 1 → 2 pada 4B; molekul J = 2 menghasilkan garis pada 6B; dan seterusnya (Gambar 6.4).



Gambar 6.4. Transisi absorpsi rotor tegar dua partikel.

Pengukuran frekuensi absorpsi rotasi memungkinkan B ditentukan. Dari B diperoleh momen inersia I molekul, dan dari I diperoleh jarak ikatan d. Nilai d yang diperoleh merupakan rata-rata selama gerak vibrasi v = 0. Karena ketidaksimetrian kurva energi potensial pada Gambar 4.6 dan 13.1, d sedikit lebih panjang daripada panjang ikatan kesetimbangan R_e pada Gambar 13.1.

Seperti dicatat dalam Bagian 4.3, spesies isotop seperti $^1H^{35}Cl$ dan $^1H^{37}Cl$ mempunyai kurva energi elektronik U(R) yang pada hakikatnya sama sehingga jarak ikatan kesetimbangannya hampir sama. Akan tetapi, massa isotop yang berbeda menghasilkan momen inersia dan frekuensi absorpsi rotasi yang berbeda.

Karena molekul tidak benar-benar tegar, tingkat energi rotasi molekul diatomik sedikit berbeda dari tingkat rotor tegar. Dari (6.52) dan (6.55), tingkat rotor tegar dua partikel ialah E_rot = BhJ(J + 1). Karena vibrasi molekul bersifat anharmonik (Gambar 4.6), jarak antarinti rata-rata meningkat ketika bilangan kuantum vibrasi v meningkat. Akibatnya, ketika v meningkat, momen inersia I meningkat dan konstanta rotasi B menurun. Untuk memperhitungkan ketergantungan B pada v, B dalam E_rot diganti dengan B_v. Konstanta rotasi rata-rata bagi tingkat vibrasi v adalah $B_v = B_e - \alpha_e(v + ½)$, dengan B_e dihitung menggunakan jarak antarinti kesetimbangan R_e pada dasar kurva energi potensial Gambar 4.6 dan α_e adalah konstanta kopling vibrasi-rotasi positif yang nilainya jauh lebih kecil daripada B_e.

Selain itu, ketika energi rotasi meningkat, jarak antarinti rata-rata mengalami kenaikan sangat kecil, suatu gejala yang disebut distorsi sentrifugal. Efek ini menambahkan suku $-hDJ^2(J + 1)^2$ pada E_rot, dengan D adalah konstanta distorsi sentrifugal positif yang sangat kecil dan berbeda bagi tiap molekul. Sebagai contoh, untuk $^{12}C^{16}O$, B_0 = 57.636 MHz, α_e = 540 MHz, dan D = 0,18 MHz. Seperti disebutkan dalam Bagian 4.3, bagi molekul diatomik ringan hampir semua molekul berada pada tingkat vibrasi dasar v = 0 pada suhu kamar, sehingga konstanta rotasi yang diamati adalah B_0.

Untuk pembahasan lebih lanjut mengenai gerak inti dalam molekul diatomik, lihat Bagian 13.2. Untuk energi rotasi molekul poliatomik, lihat Townes dan Schawlow, Bab 2–4.

Contoh

Garis absorpsi rotasi murni berfrekuensi paling rendah bagi $^{12}C^{32}S$ terjadi pada 48.991,0 MHz. Tentukan jarak ikatan dalam $^{12}C^{32}S$.

Absorpsi rotasi berfrekuensi paling rendah adalah garis J = 0 → 1. Persamaan (1.4), (6.52), dan (6.51) memberikan

$$h\nu = E\_atas - E\_bawah = [1(2)\hbar^2/(2\mu d^2)] - [0(1)\hbar^2/(2\mu d^2)]$$

sehingga $d = [h/(4\pi^2\nu\mu)]^{1/2}$. Tabel A.3 dalam Lampiran memberikan

$$\mu = m_1 m_2/(m_1 + m_2) = [12(31{,}972072)/(12 + 31{,}972072)](1/6{,}02214 \times 10^{23})\ \text{g}$$

$$= 1{,}44885 \times 10^{-23}\ \text{g}$$

Satuan SI massa adalah kilogram, sehingga

$$d = (1/2\pi)[h/(\nu_{0\rightarrow 1}\,\mu)]^{1/2}$$

$$= (1/2\pi)\{6{,}62607 \times 10^{-34}\ \text{J s}/[(48.991{,}0 \times 10^{6}\ \text{s}^{-1})(1{,}44885 \times 10^{-26}\ \text{kg})]\}^{1/2}$$

$$= 1{,}5377 \times 10^{-10}\ \text{m} = 1{,}5377\ \text{Å}$$

Latihan. *Transisi rotasi murni J = 1 → J = 2 bagi $^{12}C^{16}O$ terjadi pada 230,538 GHz (1 GHz = 10^9 Hz). Tentukan jarak ikatan molekul tersebut. (Jawaban: 1,1309 × 10^{-10} m.)*

6.5 Atom Hidrogen

Atom hidrogen terdiri atas sebuah proton dan sebuah elektron. Apabila e melambangkan muatan proton, e = +1,6 × 10^{-19} C, muatan elektron adalah −e.

Sejumlah kecil ilmuwan pernah berspekulasi bahwa besar muatan proton dan elektron mungkin tidak sama secara tepat. Eksperimen menunjukkan bahwa besar muatan elektron dan proton sama hingga ketelitian satu bagian dalam 10^{21}. Lihat G. Bressi dkk., *Physical Review A*, 83, 052101 (2011).

Kita akan menganggap elektron dan proton sebagai massa titik yang interaksinya mengikuti hukum Coulomb. Dalam membahas atom dan molekul, pada umumnya kita mempertimbangkan sistem terisolasi dengan mengabaikan interaksi antaratom dan antarmolekul.

Alih-alih hanya memperlakukan atom hidrogen, kita membahas masalah yang sedikit lebih umum, yaitu atom mirip hidrogen yang terdiri atas satu elektron dan sebuah inti bermuatan Ze. Untuk Z = 1 diperoleh atom hidrogen; untuk Z = 2 diperoleh ion He^+; untuk Z = 3 diperoleh ion Li^{2+}; dan seterusnya. Atom mirip hidrogen merupakan sistem terpenting dalam kimia kuantum. Penyelesaian eksak persamaan Schrödinger bagi atom dengan lebih dari satu elektron tidak dapat diperoleh karena adanya tolakan antarelektron. Sebagai hampiran pertama yang kasar, apabila tolakan tersebut diabaikan, elektron-elektron dapat diperlakukan secara independen (lihat Bagian 6.2). Fungsi gelombang atom kemudian dihampiri oleh hasil kali fungsi-fungsi satu elektron yang berbentuk fungsi gelombang mirip hidrogen.

Fungsi gelombang satu elektron, baik mirip hidrogen maupun tidak, disebut orbital. Secara lebih tepat, orbital adalah fungsi gelombang ruang satu elektron; kata *ruang* berarti fungsi gelombang bergantung pada tiga koordinat ruang elektron, x, y, z atau r, θ, φ. Dalam Bab 10 akan ditunjukkan bahwa keberadaan

spin elektron menambahkan koordinat keempat pada fungsi gelombang satu elektron, sehingga diperoleh apa yang disebut spin-orbital. Orbital elektron dalam atom disebut orbital atom. Orbital atom akan digunakan untuk menyusun fungsi gelombang hampiran bagi atom banyak elektron (Bab 11). Orbital juga digunakan untuk menyusun fungsi gelombang hampiran bagi molekul.

Untuk atom mirip hidrogen, misalkan (x,y,z) adalah koordinat elektron relatif terhadap inti dan r = ix + jy + kz. Gaya hukum Coulomb pada elektron dalam atom mirip hidrogen ialah [lihat Persamaan (1.37)]

$$\mathbf{F} = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\frac{\mathbf{r}}{r} \qquad (6.56)$$

dengan r/r adalah vektor satuan dalam arah r. Tanda negatif menunjukkan gaya tarik.

Kemungkinan adanya penyimpangan kecil dari hukum Coulomb pernah diteliti. Eksperimen menunjukkan bahwa apabila gaya hukum Coulomb ditulis sebanding dengan r^(−2+s), maka $|s| < 10^{-16}$. Penyimpangan dari hukum Coulomb dapat ditunjukkan akan mengimplikasikan massa diam foton yang tidak nol. Tidak terdapat bukti bahwa foton mempunyai massa diam tak-nol, dan data menunjukkan bahwa massa seperti itu, apabila ada, harus kurang dari 10^{-51} g. Lihat A. S. Goldhaber dan M. M. Nieto, *Reviews of Modern Physics*, 82, 939 (2010), serta G. Spavieri dkk., *European Physical Journal D*, 61, 531 (2011).

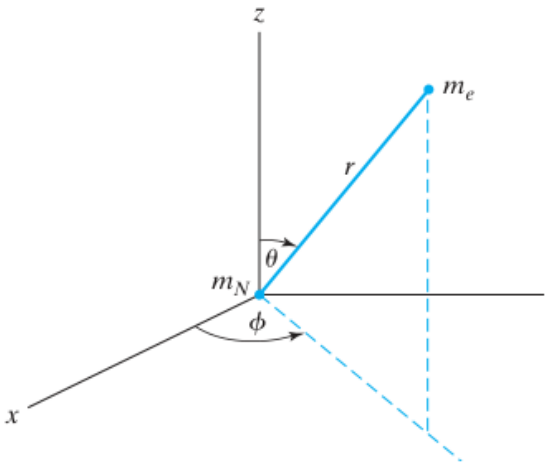
Gaya dalam (6.56) adalah gaya pusat. Perbandingan dengan Persamaan (6.4) memberikan $dV(r)/dr = Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r^2)$. Integrasi menghasilkan

$$V = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\int \frac{1}{r^2}\,dr = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \qquad (6.57)$$

dengan konstanta integrasi diambil nol agar V = 0 ketika jarak pisah kedua muatan tak hingga. Untuk sembarang dua muatan Q_1 dan Q_2 yang terpisah sejauh r_{12}, Persamaan (6.57) menjadi

$$\boxed{V = \frac{Q_1 Q_2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}}} \qquad \textbf{(6.58)}$$

Karena energi potensial sistem dua partikel ini hanya bergantung pada koordinat relatif kedua partikel, hasil Bagian 6.3 dapat digunakan untuk mereduksi masalah menjadi dua masalah satu partikel. Gerak translasi atom sebagai keseluruhan hanya menambahkan suatu konstanta pada energi total dan tidak akan dibahas lebih lanjut. Untuk menangani gerak internal sistem, diperkenalkan partikel semu bermassa



Gambar 6.5. Koordinat bola relatif.

$$\mu = \frac{m_e m_N}{m_e + m_N} \tag{6.59}$$

dengan m_e dan m_N masing-masing massa elektron dan massa inti. Partikel bermassa tereduksi μ bergerak di bawah fungsi energi potensial (6.57), sedangkan koordinatnya (r,θ,φ) adalah koordinat bola satu partikel relatif terhadap partikel lainnya (Gambar 6.5).

Hamiltonian untuk gerak internal adalah [Persamaan (6.43)]

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \tag{6.60}$$

Karena V hanya merupakan fungsi koordinat r, masalah ini adalah masalah gaya pusat satu partikel dan hasil Bagian 6.1 dapat diterapkan. Dengan menggunakan Persamaan (6.16) dan (6.17), fungsi gelombangnya adalah

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y_l^m(\theta,\phi), \qquad l = 0, 1, 2, \ldots, \qquad |m| \le l \tag{6.61}$$

dengan Y_l^m merupakan harmonik bola, sedangkan fungsi radial R(r) memenuhi

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(R'' + \frac{2}{r}R'\right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}R - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}R = ER(r) \tag{6.62}$$

Untuk menyingkat penulisan, didefinisikan konstanta a sebagai

$$a \equiv \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \tag{6.63}$$

sehingga (6.62) menjadi

$$R'' + \frac{2}{r}R' + \left[\frac{8\pi\varepsilon_0 E}{ae^2} + \frac{2Z}{ar} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R = 0 \qquad (6.64)$$

Penyelesaian Persamaan Radial

Kita dapat mencoba menyelesaikan (6.64) dengan deret pangkat, tetapi akan diperoleh hubungan rekurensi tiga suku, bukan dua suku. Karena itu, dicari substitusi yang menghasilkan hubungan rekurensi dua suku. Substitusi yang tepat dapat ditemukan dengan mengamati perilaku solusi pada nilai r yang besar. Untuk r besar, (6.64) menjadi

$$R'' + \frac{8\pi\varepsilon_0 E}{ae^2}R = 0, \qquad r \text{ large} \qquad (6.65)$$

yang dapat diselesaikan menggunakan persamaan bantu (2.7). Solusinya adalah

$$\exp\left[\pm(-8\pi\varepsilon_0 E/ae^2)^{1/2}r\right] \qquad (6.66)$$

Misalkan E positif. Besaran di bawah tanda akar dalam (6.66) bernilai negatif, sehingga faktor yang mengalikan r bersifat imajiner:

$$R(r) \sim e^{\pm i\sqrt{2\mu E}r/\hbar}, \qquad E \geq 0 \qquad (6.67)$$

dengan Persamaan (6.63) telah digunakan. Simbol ~ dalam (6.67) menunjukkan bahwa yang diberikan adalah perilaku R(r) untuk nilai r besar; perilaku ini disebut perilaku asimtotik fungsi. Perhatikan kemiripan (6.67) dengan Persamaan (2.30), yaitu fungsi gelombang partikel bebas.

Persamaan (6.67) tidak memberikan faktor radial lengkap bagi fungsi gelombang berenergi positif. Kajian lebih lanjut menunjukkan bahwa fungsi radial untuk $E \geq 0$ tetap berhingga pada semua nilai r, apa pun nilai E. Jadi, sebagaimana partikel bebas, semua energi atom hidrogen yang tidak negatif diizinkan. Secara fisik, fungsi eigen ini bersesuaian dengan keadaan ketika elektron tidak terikat pada inti, yaitu atom telah terionisasi. Analogi mekanika klasiknya adalah komet yang bergerak dalam orbit hiperbolik mengelilingi Matahari: komet tidak terikat dan hanya sekali mengunjungi tata surya. Karena nilai $E \geq 0$ yang diizinkan bersifat kontinu dan bukan diskret, fungsi eigen berenergi positif disebut fungsi eigen kontinum. Bagian sudut fungsi gelombang kontinum adalah harmonik bola. Seperti fungsi gelombang partikel bebas, fungsi eigen kontinum tidak dapat dinormalisasi dalam arti biasa.

Sekarang kita membahas keadaan terikat atom hidrogen dengan $E < 0$. Untuk keadaan terikat, $\psi \to 0$ ketika $r \to \infty$. Dalam kasus ini, besaran dalam tanda kurung pada (6.66) positif. Karena fungsi gelombang harus tetap berhingga ketika r menuju tak hingga, dipilih tanda negatif pada (6.66). Agar diperoleh hubungan rekurensi dua suku, digunakan substitusi

$$R(r) = e^{-Cr}K(r) \tag{6.68}$$

$$C \equiv \left(-\frac{8\pi\varepsilon_0 E}{ae^2}\right)^{1/2} \tag{6.69}$$

Huruf e dalam (6.68) menyatakan bilangan dasar logaritma alami, bukan muatan proton. Penggunaan substitusi (6.68) dengan sendirinya belum menjamin perilaku fungsi gelombang yang tepat untuk r besar. Persamaan diferensial yang diperoleh dari substitusi ini tetap mempunyai dua solusi bebas linear. Substitusi apa pun boleh dilakukan pada suatu persamaan diferensial; bahkan substitusi R(r) = e^(+Cr)J(r) akan tetap menghasilkan fungsi eigen dan nilai eigen yang benar. Hubungan antara J dan K tentu saja adalah J(r) = e^(−2Cr)K(r).

Dengan meneruskan penggunaan (6.68), kita mengevaluasi R′ dan R″, memasukkannya ke dalam (6.64), mengalikan dengan r²e^(Cr), serta menggunakan (6.69). Diperoleh persamaan diferensial berikut untuk K(r):

$$r^2K'' + (2r - 2Cr^2)K' + \left[(2Za^{-1} - 2C)r - l(l+1)\right]K = 0 \tag{6.70}$$

Selanjutnya dapat dimasukkan deret pangkat berbentuk

$$K = \sum_{k=0}^{\infty} c_k r^k \tag{6.71}$$

untuk K. Jika hal ini dilakukan, pada umumnya beberapa koefisien pertama dalam (6.71) ditemukan bernilai nol. Apabila c_s adalah koefisien pertama yang tidak nol, Persamaan (6.71) dapat ditulis sebagai

$$K = \sum_{k=s}^{\infty} c_k r^k, \qquad c_s \neq 0 \tag{6.72}$$

Dengan menetapkan j ≡ k − s dan kemudian mendefinisikan b_j ≡ c_(j+s), diperoleh

$$K = \sum_{j=0}^{\infty} c_{j+s} r^{j+s} = r^s \sum_{j=0}^{\infty} b_j r^j, \qquad b_0 \neq 0 \tag{6.73}$$

Walaupun berbagai substitusi yang dilakukan mungkin tampak sewenang-wenang, semuanya merupakan prosedur baku dalam menyelesaikan persamaan diferensial dengan deret pangkat. Bilangan bulat s dievaluasi melalui substitusi ke dalam persamaan diferensial. Persamaan (6.73) dapat ditulis

$$K(r) = r^s M(r) \tag{6.74}$$

$$M(r) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j r^j, \qquad b_0 \neq 0 \tag{6.75}$$

Dengan mengevaluasi K′ dan K″ dari (6.74) dan memasukkannya ke dalam (6.70), diperoleh

$$r^2M'' + [(2s + 2)r - 2Cr^2]M' + [s^2 + s + (2Za^{-1} - 2C - 2Cs)r - l(l + 1)]M = 0 \tag{6.76}$$

Untuk mencari s, kita meninjau (6.76) pada r = 0. Dari (6.75) diperoleh

$$M(0) = b_0, \qquad M'(0) = b_1, \qquad M''(0) = 2b_2 \tag{6.77}$$

Dengan menggunakan (6.77) dalam (6.76) pada r = 0, diperoleh

$$b_0(s^2 + s - l^2 - l) = 0 \tag{6.78}$$

Karena b_0 tidak nol, besaran dalam tanda kurung harus bernilai nol, yaitu $s^2 + s - l^2 - l = 0$. Persamaan kuadrat dalam s ini mempunyai akar

$$s = l, \qquad s = -l - 1 \tag{6.79}$$

Kedua akar tersebut bersesuaian dengan dua solusi bebas linear persamaan diferensial. Kita memeriksanya berdasarkan persyaratan perilaku fungsi gelombang yang dapat diterima. Dari Persamaan (6.68), (6.74), dan (6.75), diperoleh

$$R(r) = e^{-Cr}r^s\sum_{j=0}^{\infty} b_j r^j \tag{6.80}$$

Karena e^(−Cr) = 1 − Cr + ⋯, pada r kecil fungsi R(r) berperilaku sebagai b_0r^s. Untuk akar s = l, R(r) berperilaku baik di titik asal. Akan tetapi, untuk s = −l − 1, R(r) sebanding dengan

$$\frac{1}{r^{l+1}} \tag{6.81}$$

pada r kecil. Karena l = 0, 1, 2, …, akar s = −l − 1 membuat faktor radial fungsi gelombang tak hingga di titik asal. Banyak buku mengambil hal ini sebagai alasan yang cukup untuk menolak akar tersebut. Akan tetapi, argumen ini tidak sepenuhnya baik karena fungsi eigen l = 0 bagi atom hidrogen relativistik juga tak hingga pada r = 0. Karena itu, kita meninjau (6.81) dari sudut keterintegralan kuadrat, sebab fungsi eigen keadaan terikat pasti harus dapat dinormalisasi.

Integral normalisasi [Persamaan (5.80)] bagi fungsi radial yang berperilaku seperti (6.81), untuk r kecil, berbentuk

$$\int_0 |R|^2 r^2\, dr \approx \int_0 \frac{1}{r^{2l}}\, dr \tag{6.82}$$

Perilaku integral pada batas bawah integrasi ialah

$$\left.\frac{1}{r^{2l-1}}\right|_{r=0} \tag{6.83}$$

Untuk l = 1, 2, 3, …, (6.83) tak hingga, sehingga integral normalisasi tak hingga. Oleh karena itu, akar s = −l − 1 harus ditolak untuk l ≥ 1. Namun, bagi l = 0, (6.83) berhingga dan tidak terdapat masalah keterintegralan kuadrat. Jadi, secara matematis terdapat solusi persamaan radial yang terintegralkan kuadrat dan berperilaku sebagai r^{-1} pada r kecil.

Kajian lebih lanjut atas solusi ini menunjukkan bahwa solusi tersebut bersesuaian dengan nilai energi yang tidak tampak dalam spektrum atom hidrogen eksperimen. Karena itu, solusi r^{-1} harus ditolak, meskipun terdapat perbedaan pendapat mengenai alasan penolakannya. Salah satu pandangan menyatakan bahwa solusi 1/r memenuhi persamaan Schrödinger di seluruh ruang kecuali pada titik asal sehingga harus ditolak [Dirac, hlm. 156; B. H. Armstrong dan E. A. Power, *American Journal of Physics*, 31, 262 (1963)]. Pandangan kedua menyatakan bahwa solusi 1/r harus ditolak karena operator Hamiltonian tidak Hermitian terhadap solusi tersebut (Merzbacher, Bagian 10.5). Dalam Bab 7 akan didefinisikan operator Hermitian dan ditunjukkan bahwa operator mekanika kuantum harus Hermitian. Pembahasan lebih lanjut diberikan oleh A. A. Khelashvili dan T. P. Nadareishvili, *American Journal of Physics*, 79, 668 (2011), serta Y. C. Cantelaube.

Dengan mengambil akar pertama dalam (6.79), faktor radial (6.80) menjadi

$$R(r) = e^{-Cr} r^{l} M(r) \tag{6.84}$$

Dengan s = l, Persamaan (6.76) berubah menjadi

$$rM'' + (2l + 2 - 2Cr)M' + (2Za^{-1} - 2C - 2Cl)M = 0 \tag{6.85}$$

Dari (6.75) diperoleh deret dan turunannya:

$$M(r) = \sum_{j=0}^{\infty} b_j r^j \tag{6.86}$$

$$M' = \sum_{j=0}^{\infty} j b_j r^{j-1} = \sum_{j=1}^{\infty} j b_j r^{j-1} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+1) b_{k+1} r^k = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) b_{j+1} r^j$$

$$M'' = \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) b_j r^{j-2} = \sum_{j=1}^{\infty} j(j-1) b_j r^{j-2} = \sum_{k=0}^{\infty} (k+1) k b_{k+1} r^{k-1}$$

$$M'' = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) j b_{j+1} r^{j-1} \tag{6.87}$$

Dengan memasukkan ungkapan tersebut ke dalam (6.85), menggabungkan penjumlahan, dan menyamakan koefisien r^j dengan nol, diperoleh hubungan rekurensi

$$b_{j+1} = \frac{2C + 2Cl + 2Cj - 2Za^{-1}}{j(j+1) + 2(l+1)(j+1)} b_j \qquad (6.88)$$

Sekarang harus diperiksa perilaku deret tak hingga (6.86) pada r besar. Prosedur yang sama seperti untuk memeriksa deret pangkat osilator harmonik pada (4.42) menunjukkan bahwa pada r besar deret tak hingga (6.86) berperilaku seperti e^(2Cr) (lihat Soal 6.20). Karena itu, untuk r besar fungsi radial (6.84) berperilaku sebagai

$$R(r) \sim e^{-Cr} r^l e^{2Cr} = r^l e^{Cr} \qquad (6.89)$$

Dengan demikian, R(r) akan menjadi tak hingga ketika r menuju tak hingga dan tidak terintegralkan kuadrat. Satu-satunya cara menghindari "malapetaka ketakterhinggaan" ini, seperti pada kasus osilator harmonik, adalah membuat deret berhenti setelah sejumlah suku yang berhingga. Dalam keadaan ini faktor e^(−Cr) menjamin fungsi gelombang menuju nol ketika r menuju tak hingga. Misalkan suku terakhir dalam deret adalah b_k r^k. Agar b_(k+1), b_(k+2), dan seterusnya semuanya nol, pecahan yang mengalikan b_j dalam hubungan rekurensi (6.88) harus nol ketika j = k. Maka

$$2C(k + l + 1) = 2Za^{-1}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots \qquad (6.90)$$

Karena k dan l adalah bilangan bulat, bilangan bulat baru n didefinisikan dengan

$$n \equiv k + l + 1, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \qquad (6.91)$$

Dari (6.91), bilangan kuantum l harus memenuhi

$$l \leq n - 1 \qquad (6.92)$$

Jadi, l mengambil nilai dari 0 sampai n − 1.

Tingkat Energi

Penggunaan (6.91) dalam (6.90) memberikan

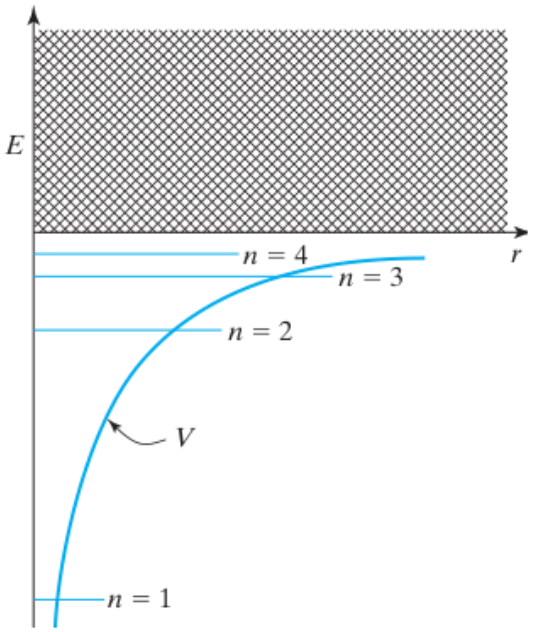
$$Cn = Za^{-1} \qquad (6.93)$$

Dengan memasukkan C ≡ [−8πε₀E/(ae²)]¹′² [Persamaan (6.69)] ke dalam (6.93) dan menyelesaikannya terhadap E, diperoleh

$$E = -\frac{Z^2}{n^2} \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a} = -\frac{Z^2 \mu e^4}{8\varepsilon_0^2 n^2 h^2} \qquad (6.94)$$

dengan a ≡ 4πε₀ħ²/(μe²) [Persamaan (6.63)]. Persamaan tersebut adalah tingkat energi keadaan terikat atom mirip hidrogen dan bersifat diskret. Gambar 6.6 menunjukkan kurva energi potensial [Persamaan (6.57)] dan beberapa tingkat

energi yang diizinkan bagi atom hidrogen (Z = 1). Arsiran menunjukkan bahwa semua energi positif diizinkan.



Gambar 6.6. Tingkat energi atom hidrogen.

Ternyata semua perubahan n diizinkan dalam penyerapan dan pemancaran cahaya. Bilangan gelombang [Persamaan (4.64)] garis spektrum atom H adalah

$$\tilde{\nu} \equiv \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{E_2 - E_1}{hc} = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 ahc}\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \equiv R_H\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \qquad (6.95)$$

dengan R_H = 109.677,6 cm^{-1} adalah konstanta Rydberg bagi hidrogen.

Degenerasi

Apakah tingkat energi atom hidrogen terdegenerasi? Untuk keadaan terikat, energi (6.94) hanya bergantung pada n. Akan tetapi, fungsi gelombang (6.61) bergantung pada ketiga bilangan kuantum n, l, dan m, dengan nilai-nilai yang diizinkan [Persamaan (6.91), (6.92), (5.104), dan (5.105)] sebagai berikut:

$$n = 1, 2, 3, \ldots \qquad \textbf{(6.96)}$$

$$l = 0, 1, 2, \ldots, n - 1 \qquad \textbf{(6.97)}$$

$$m = -l, -l + 1, \ldots, 0, \ldots, l - 1, l \qquad \textbf{(6.98)}$$

Keadaan atom hidrogen dengan nilai l atau m yang berbeda tetapi nilai n yang sama mempunyai energi yang sama. Jadi, tingkat energinya terdegenerasi, kecuali

tingkat n = 1 yang mengharuskan l = 0 dan m = 0. Untuk nilai n tertentu terdapat n nilai l yang berbeda. Untuk setiap l terdapat 2l + 1 nilai m. Derajat degenerasi suatu tingkat keadaan terikat atom H sama dengan n^2 apabila spin diabaikan; lihat Soal 6.16. Untuk tingkat kontinum, pada suatu energi tertentu ternyata tidak terdapat batas nilai maksimum l; oleh karena itu, tingkat kontinum mempunyai degenerasi tak hingga.

Persamaan radial atom hidrogen juga dapat diselesaikan dengan operator tangga, yang dikenal pula sebagai metode faktorisasi; lihat Z. W. Salsburg, *American Journal of Physics*, 33, 36 (1965).

6.6 Fungsi Gelombang Keadaan Terikat Atom Hidrogen

Faktor Radial

Dengan menggunakan (6.93), hubungan rekurensi (6.88) menjadi

$$b_{j+1} = \frac{2Z}{na} \frac{j + l + 1 - n}{(j + 1)(j + 2l + 2)} b_j \tag{6.99}$$

Pembahasan sebelum Persamaan (6.91) menunjukkan bahwa pangkat tertinggi r dalam polinom M(r) = Σ_j b_jr^j [Persamaan (6.86)] adalah k = n − l − 1. Karena itu, penggunaan C = Z/(na) [Persamaan (6.93)] dalam R(r) = e^(−Cr)r^lM(r) [Persamaan (6.84)] memberikan faktor radial dalam fungsi gelombang atom hidrogen sebagai

$$R_{nl}(r) = r^l e^{-Zr/na} \sum_{j=0}^{n-l-1} b_j r^j \tag{6.100}$$

dengan $a \equiv 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(\mu e^2)$ [Persamaan (6.63)]. Fungsi gelombang lengkap keadaan terikat atom mirip hidrogen adalah [Persamaan (6.61)]

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi) = R_{nl}(r) S_{lm}(\theta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \tag{6.101}$$

dengan beberapa fungsi θ pertama diberikan dalam Tabel 5.1.

Berapa jumlah simpul R(r)? Fungsi radial bernilai nol pada r = ∞, pada r = 0 untuk l > 0, dan pada nilai-nilai r yang membuat M(r) nol. M(r) adalah polinom berderajat n − l − 1, dan dapat ditunjukkan bahwa semua akar M(r) = 0 bersifat real dan positif. Dengan demikian, selain titik asal dan tak hingga, terdapat n − l − 1 simpul pada R(r). Simpul harmonik bola dibahas dalam Soal 6.41.

Fungsi Gelombang dan Energi Keadaan Dasar

Untuk keadaan dasar atom mirip hidrogen, n = 1, l = 0, dan m = 0. Faktor radial (6.100) adalah

$$R_{10}(r) = b_0 e^{-Zr/a} \tag{6.102}$$

Konstanta b_0 ditentukan melalui normalisasi [Persamaan (5.80)]. Dengan menggunakan integral Lampiran (A.8), diperoleh

$$R_{10}(r) = 2\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-Zr/a} \tag{6.103}$$

Setelah dikalikan dengan $Y_0^0 = 1/(4\pi)^{1/2}$, fungsi gelombang keadaan dasarnya ialah

$$\psi_{100} = \frac{1}{\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-Zr/a} \tag{6.104}$$

Energi dan fungsi gelombang atom hidrogen melibatkan massa tereduksi, yang dari (6.59) diberikan oleh

$$\mu_{\mathrm{H}} = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} = \frac{m_e}{1 + m_e/m_p} = \frac{m_e}{1 + 0.000544617} = 0.9994557 m_e \tag{6.105}$$

dengan m_p massa proton dan rasio m_e/m_p diperoleh dari Tabel A.1. Massa tereduksi sangat dekat dengan massa elektron. Karena itu, beberapa buku menggunakan massa elektron, bukan massa tereduksi, dalam persamaan Schrödinger atom H. Hal ini bersesuaian dengan anggapan bahwa massa proton tak hingga dibandingkan dengan massa elektron dalam (6.105), sehingga seluruh gerak internal dianggap sebagai gerak elektron. Galat akibat penggunaan massa elektron sebagai pengganti massa tereduksi sekitar satu bagian dalam 2.000 untuk atom hidrogen. Bagi atom yang lebih berat, galat akibat anggapan inti bermassa tak hingga bahkan lebih kecil. Selain itu, untuk atom banyak elektron, bentuk koreksi gerak inti cukup rumit. Karena alasan-alasan ini, pada pembahasan berikutnya inti akan dianggap bermassa tak hingga dan massa elektron akan langsung digunakan dalam penulisan persamaan Schrödinger atom.

Apabila massa tereduksi atom hidrogen diganti dengan massa elektron, besaran a yang didefinisikan oleh (6.63) menjadi

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529177\ \text{Å} \tag{6.106}$$

Subskrip nol menunjukkan penggunaan massa elektron, bukan massa tereduksi. a_0 disebut jari-jari Bohr karena dalam teori Bohr besaran itu merupakan jari-jari lingkaran tempat elektron bergerak pada keadaan dasar atom hidrogen. Tentu saja, karena fungsi gelombang keadaan dasar (6.104) tidak nol untuk setiap nilai r yang berhingga, terdapat probabilitas menemukan elektron pada sembarang jarak dari inti. Elektron jelas tidak dibatasi pada sebuah lingkaran.

Satuan yang mudah digunakan untuk energi elektronik adalah elektronvolt (eV), yang didefinisikan sebagai energi kinetik yang diperoleh sebuah elektron ketika dipercepat melalui beda potensial 1 volt. Beda potensial didefinisikan sebagai energi per satuan muatan. Karena e = 1,6021766 × 10^{-19} C dan 1 V·C = 1 J, maka

$$1\ \text{eV} = 1.6021766 \times 10^{-19}\ \text{J} \qquad (6.107)$$

Contoh

Hitung energi keadaan dasar atom hidrogen dengan satuan SI dan ubah hasilnya ke elektronvolt.

Energi keadaan dasar atom H diberikan oleh (6.94) dengan n = 1 dan Z = 1 sebagai $E = -\mu e^4/(8h^2\varepsilon_0^2)$. Penggunaan (6.105) untuk μ memberikan

$$E = -\{0{,}9994557(9{,}109383 \times 10^{-31}\ \text{kg})(1{,}6021766 \times 10^{-19}\ \text{C})^4 Z^2\}$$
$$/\{8(6{,}626070 \times 10^{-34}\ \text{J s})^2(8{,}8541878 \times 10^{-12}\ \text{C}^2\ \text{N}^{-1}\ \text{m}^{-2})^2 n^2\}$$
$$E = -(2{,}178686 \times 10^{-18}\ \text{J})(Z^2/n^2)[1\ \text{eV}/(1{,}6021766 \times 10^{-19}\ \text{J})]$$
$$E = -(13.598\ \text{eV})(Z^2/n^2) = -13.598\ \text{eV} \qquad (6.108)$$

Nilai ini layak diingat. Energi minimum yang diperlukan untuk mengionisasi atom hidrogen keadaan dasar adalah 13,598 eV.

Latihan. *Tentukan energi n = 2 ion Li^{2+} dalam eV dengan perhitungan sesedikit mungkin. (Jawaban: −30,60 eV.)*

Contoh

Tentukan ⟨T⟩ bagi keadaan dasar atom hidrogen.

Persamaan (3.89) untuk ⟨T⟩ dan (6.7) untuk $\nabla^2\psi$ memberikan

$$\langle T\rangle = \int \psi^* \hat{T}\psi\, d\tau = -(\hbar^2/2\mu)\int \psi^* \nabla^2 \psi\, d\tau$$
$$\nabla^2\psi = \partial^2\psi/\partial r^2 + (2/r)\partial\psi/\partial r - [1/(r^2\hbar^2)]\hat{L}^2\psi$$
$$= \partial^2\psi/\partial r^2 + (2/r)\partial\psi/\partial r$$

karena $\hat{L}^2\psi = l(l+1)\hbar^2\psi$ dan l = 0 untuk keadaan s. Dari (6.104) dengan Z = 1, $\psi = \pi^{-1/2}a^{-3/2}e^{\wedge}(-r/a)$, sehingga $\partial\psi/\partial r = -\pi^{-1/2}a^{-5/2}e^{\wedge}(-r/a)$ dan $\partial^2\psi/\partial r^2 = \pi^{-1/2}a^{-7/2}e^{\wedge}(-r/a)$. Dengan $d\tau = r^2 \sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi$ [Persamaan (5.78)], diperoleh

$$\langle T\rangle = -[\hbar^2/(2\mu\pi a^4)]\int_0^2 \pi d\varphi \int_0 \pi \sin\theta\, d\theta \int_0 \infty [a^{-1}e^{\wedge}(-2r/a) - (2/r)e^{\wedge}(-2r/a)]r^2 dr$$
$$= -[\hbar^2/(2\mu\pi a^4)](2\pi)(2)\int_0 \infty [(r^2/a)e^{\wedge}(-2r/a) - 2re^{\wedge}(-2r/a)]dr$$
$$= \hbar^2/(2\mu a^2) = e^2/(8\pi\varepsilon_0 a)$$

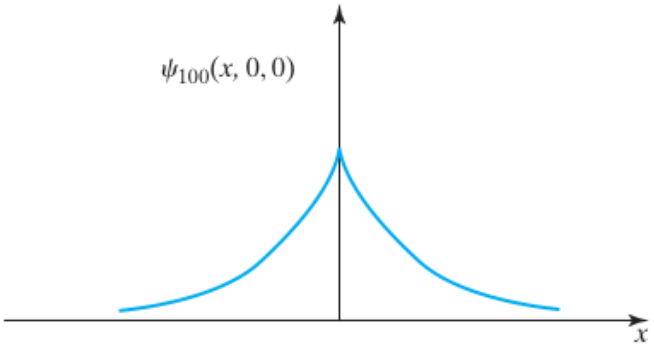
Dalam penurunan ini digunakan integral Lampiran A.8 dan $a = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(\mu e^2)$. Dari (6.94), $e^2/(8\pi\varepsilon_0 a)$ adalah negatif dari energi keadaan dasar atom H, dan (6.108) memberikan $\langle T \rangle = 13{,}598$ eV. Lihat juga Bagian 14.4.

Latihan. *Tentukan $\langle T \rangle$ bagi keadaan $2p_0$ atom hidrogen dengan menggunakan (6.113). (Jawaban: $e^2/(32\pi\varepsilon_0 a) = 13{,}598\ eV/4 = 3{,}40\ eV$.)*

Sekarang kita memeriksa sifat penting fungsi gelombang keadaan dasar (6.104). Kita mempunyai $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$. Untuk titik-titik pada sumbu x, dengan $y = 0$ dan $z = 0$, $r = (x^2)^{1/2} = |x|$, sehingga

$$\psi_{100}(x, 0, 0) = \pi^{-1/2}(Z/a)^{3/2}e^{-Z|x|/a} \qquad (6.109)$$

Gambar 6.7 menunjukkan perubahan (6.109) sepanjang sumbu x. Walaupun ψ_{100} kontinu di titik asal, kemiringan garis singgung kurva positif di sebelah kiri titik asal tetapi negatif di sebelah kanannya. Dengan demikian, $\partial\psi/\partial x$ diskontinu di titik asal. Dikatakan bahwa fungsi gelombang mempunyai *cusp* atau titik runcing di titik asal. Cusp muncul karena energi potensial $V = -Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$ menjadi tak hingga di titik asal. Ingatlah kemiringan diskontinu fungsi gelombang partikel dalam kotak pada dinding kotak.



Gambar 6.7. Cusp pada fungsi gelombang keadaan dasar atom hidrogen.

Fungsi gelombang keadaan terikat atom hidrogen telah dilambangkan dengan tiga subskrip yang memberikan nilai n, l, dan m. Dalam notasi alternatif, nilai l ditunjukkan dengan huruf:

Letter	*s*	*p*	*d*	*f*	*g*	*h*	*i*	*k*	. . .
l	0	1	2	3	4	5	6	7	. . .

(6.110)

Huruf s, p, d, dan f berasal dari spektroskopi dan merupakan singkatan *sharp*, *principal*, *diffuse*, dan *fundamental*. Setelah huruf-huruf ini, penamaan dilanjutkan menurut urutan alfabet, kecuali huruf j dilewati. Di depan huruf kode untuk l dituliskan nilai n. Jadi, fungsi gelombang keadaan dasar ψ_{100} disebut ψ_{1s} atau lebih sederhana 1s.

Fungsi Gelombang untuk n = 2

Untuk n = 2 terdapat keadaan ψ_{200}, ψ_{21-1}, ψ_{210}, dan ψ_{211}. ψ_{200} dilambangkan ψ_{2s} atau cukup 2s. Untuk membedakan tiga fungsi 2p, digunakan subskrip yang menyatakan nilai m, sehingga dinamakan $2p_1$, $2p_0$, dan $2p_{-1}$. Faktor radial fungsi gelombang bergantung pada n dan l, tetapi tidak pada m, sebagaimana tampak dari (6.100). Karena itu, ketiga fungsi gelombang 2p mempunyai faktor radial yang sama. Faktor radial 2s dan 2p dapat diperoleh dengan cara biasa dari (6.100) dan (6.99), lalu dinormalisasi. Hasilnya diberikan dalam Tabel 6.1. Perhatikan bahwa faktor eksponensial dalam fungsi radial n = 2 tidak sama dengan faktor dalam R_{1s}. Fungsi gelombang lengkap diperoleh dengan mengalikan faktor radial dengan harmonik bola yang sesuai. Dengan menggunakan (6.101), Tabel 6.1, dan Tabel 5.1, diperoleh

$$2s = \frac{1}{\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{2a}\right)^{3/2}\left(1 - \frac{Zr}{2a}\right)e^{-Zr/2a} \tag{6.111}$$

$$2p_{-1} = \frac{1}{8\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a}\sin\theta\ e^{-i\phi} \tag{6.112}$$

Wave Functions

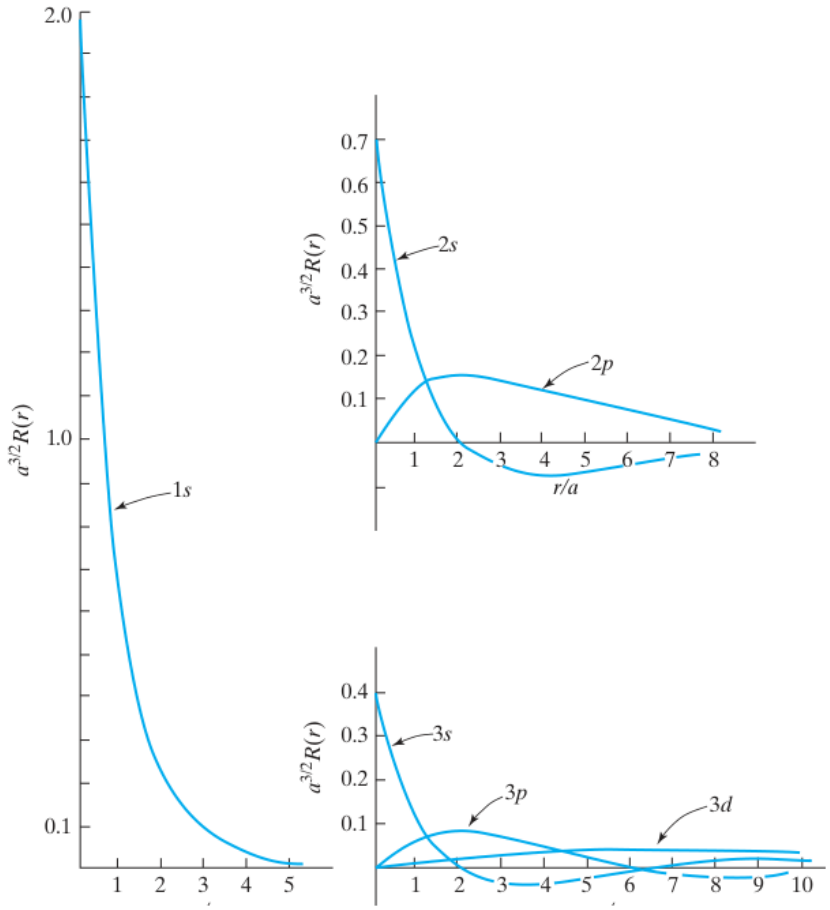
$R_{1s} = 2\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-Zr/a}$
$R_{2s} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\left(1 - \frac{Zr}{2a}\right)e^{-Zr/2a}$
$R_{2p} = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a}$
$R_{3s} = \frac{2}{3\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\left(1 - \frac{2Zr}{3a} + \frac{2Z^2r^2}{27a^2}\right)e^{-Zr/3a}$
$R_{3p} = \frac{8}{27\sqrt{6}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\left(\frac{Zr}{a} - \frac{Z^2r^2}{6a^2}\right)e^{-Zr/3a}$
$R_{\cdots} = \frac{4}{\cdots}\left(\frac{Z}{\cdots}\right)^{7/2} r^2 e^{-Zr/3a}$

Tabel 6.1. Faktor radial dalam fungsi gelombang atom mirip hidrogen.

$$2p_0 = \frac{1}{\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{2a}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a}\cos\theta \tag{6.113}$$

$$2p_1 = \frac{1}{8\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a}\sin\theta\ e^{i\phi} \tag{6.114}$$

Tabel 6.1 memuat beberapa faktor radial ternormalisasi dalam fungsi gelombang atom mirip hidrogen. Gambar 6.8 memperlihatkan grafik beberapa fungsi radial. Faktor r^l membuat fungsi radial bernilai nol pada r = 0, kecuali bagi keadaan s.



Gambar 6.8. Grafik faktor radial $R_{nl}(r)$ dalam fungsi gelombang atom hidrogen (Z = 1); semua grafik menggunakan skala yang sama.

Fungsi Distribusi Radial

Probabilitas menemukan elektron di daerah ruang dengan koordinat dalam rentang r sampai r + dr, θ sampai θ + dθ, dan φ sampai φ + dφ adalah [Persamaan (5.78)]

$$|\psi|^2 d\tau = [R_{nl}(r)]^2 |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 r^2 \sin\theta \; dr \, d\theta \, d\phi \qquad (6.115)$$

Sekarang kita bertanya: berapakah probabilitas bahwa koordinat radial elektron berada antara r dan r + dr tanpa pembatasan nilai θ dan φ? Ini sama dengan probabilitas menemukan elektron dalam kulit bola tipis yang berpusat di titik asal, dengan jari-jari dalam r dan jari-jari luar r + dr. Karena itu, probabilitas infinitesimal (6.115) harus dijumlahkan untuk semua nilai θ dan φ dengan r tetap. Penjumlahan ini sama dengan mengintegralkan (6.115) terhadap θ dan φ. Probabilitas menemukan elektron antara r dan r + dr adalah

$$[R_{nl}(r)]^2 r^2\,dr \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |Y_l^m(\theta,\phi)|^2 \sin\theta\,d\theta\,d\phi = [R_{nl}(r)]^2 r^2\,dr \qquad (6.116)$$

karena harmonik bola ternormalisasi:

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} |Y_l^m(\theta,\phi)|^2 \sin\theta\,d\theta\,d\phi = 1 \qquad \textbf{(6.117)}$$

sebagaimana dapat dilihat dari (5.72) dan (5.80). Fungsi $R^2(r)r^2$, yang menentukan probabilitas menemukan elektron pada jarak r dari inti, disebut fungsi distribusi radial; lihat Gambar 6.9.

Untuk keadaan dasar 1s atom H, kerapatan probabilitas $|\psi|^2$ dari Persamaan (6.104) sama dengan e^(−2r/a) dikalikan suatu konstanta. Karena itu, $|\psi_{1s}|^2$ maksimum pada r = 0 (lihat Gambar 6.14). Akan tetapi, fungsi distribusi radial $[R_{1s}(r)]^2r^2$ bernilai nol di titik asal dan maksimum pada r = a (Gambar 6.9). Kedua fakta ini tidak bertentangan. Kerapatan probabilitas $|\psi|^2$ sebanding dengan probabilitas menemukan elektron di dalam kotak infinitesimal bervolume dx dy dz; probabilitas ini maksimum pada inti. Fungsi distribusi radial sebanding dengan probabilitas menemukan elektron dalam kulit bola tipis dengan jari-jari dalam dan luar r dan r + dr; probabilitas ini maksimum pada r = a.

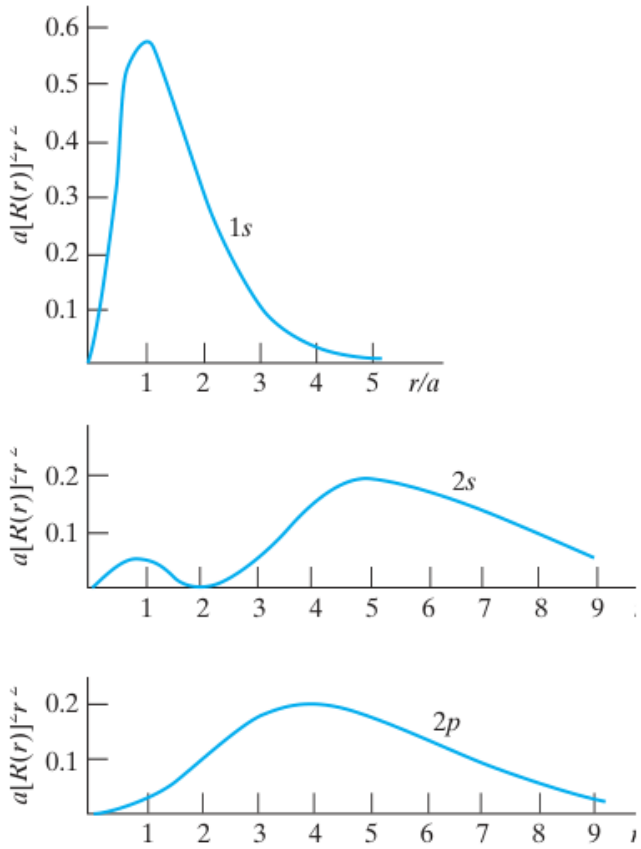
Karena ψ_{1s} hanya bergantung pada r, kerapatan probabilitas 1s pada dasarnya konstan di dalam kulit bola tipis. Apabila kulit tipis dibagi menjadi sejumlah sangat besar kotak infinitesimal yang masing-masing bervolume dx dy dz, probabilitas $|\psi_{1s}|^2$ dx dy dz dalam semua kotak kecil tersebut dapat dijumlahkan. Probabilitas menemukan elektron dalam kulit tipis menjadi $|\psi_{1s}|^2$V_kulit. Volume kulit tipis adalah

$$\text{V\_kulit} = (4/3)\pi(r + dr)^3 - (4/3)\pi r^3 = 4\pi r^2 dr$$

karena suku $(dr)^2$ dan $(dr)^3$ dapat diabaikan dibandingkan suku dr. Maka probabilitas berada dalam kulit tipis adalah

$$|\psi_1 s|^2 \text{V\_kulit} = R_1 s^2 (Y_0{}^0)^2 4\pi r^2 dr = R_1 s^2 [(4\pi)^{-1}] 4\pi r^2 dr = R_1 s^2 r^2 dr$$

sesuai dengan (6.116). Fungsi distribusi radial 1s bernilai nol pada r = 0 karena volume $4\pi r^2 dr$ kulit bola tipis menuju nol ketika r menuju nol. Ketika r meningkat dari nol, kerapatan probabilitas $|\psi_{1s}|^2$ menurun, sedangkan volume kulit tipis $4\pi r^2 dr$ meningkat. Hasil kali keduanya, $|\psi_{1s}|^2 4\pi r^2 dr$, maksimum pada r = a.



Gambar 6.9. Grafik fungsi distribusi radial $[R_{nl}(r)]^2r^2$ untuk atom hidrogen.

Contoh

Tentukan probabilitas bahwa elektron dalam atom H keadaan dasar berada pada jarak kurang dari a dari inti.

Kita mencari probabilitas bahwa koordinat radial berada antara 0 dan a. Probabilitas ini diperoleh dengan mengambil probabilitas infinitesimal (6.116) untuk berada antara r dan r + dr dan menjumlahkannya dari 0 sampai a. Jumlah besaran infinitesimal tersebut adalah integral tentu

$$\int_0^a R_{10}^2 r^2 dr = (4/a^3)\int_0^a e\text{^}(-2r/a)r^2 dr$$

$$= (4/a^3)e\text{^}(-2r/a)[-r^2a/2 - 2ra^2/4 - 2a^3/8]_0^a$$

$$= 4[e^{-2}(-5/4) - (-1/4)] = 0{,}323$$

Dalam perhitungan ini R_{10} diambil dari Tabel 6.1 dan digunakan integral Lampiran A.7.

Latihan. *Tentukan probabilitas bahwa elektron dalam atom H keadaan $2p_1$ berada pada jarak kurang dari a dari inti. Gunakan tabel integral. (Jawaban: 0,00366.)*

Fungsi Mirip Hidrogen Real

Faktor e^(imφ) membuat harmonik bola bersifat kompleks, kecuali apabila m = 0. Daripada bekerja dengan fungsi gelombang kompleks seperti (6.112) dan (6.114), kimiawan sering menggunakan fungsi gelombang mirip hidrogen real yang dibentuk dengan mengambil kombinasi linear fungsi-fungsi kompleks. Pembenaran prosedur ini diberikan oleh teorema Bagian 3.6: setiap kombinasi linear fungsi eigen dari suatu tingkat energi terdegenerasi merupakan fungsi eigen Hamiltonian dengan nilai eigen yang sama. Karena energi atom hidrogen tidak bergantung pada m, keadaan $2p_1$ dan $2p_{-1}$ berada dalam tingkat energi terdegenerasi. Setiap kombinasi linear keduanya merupakan fungsi eigen Hamiltonian dengan nilai eigen energi yang sama.

Salah satu cara menggabungkan kedua fungsi tersebut untuk memperoleh fungsi real ialah

$$2p_x \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(2p_{-1} + 2p_1) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a} \sin\theta \cos\phi \qquad (6.118)$$

dengan menggunakan (6.112), (6.114), dan e^(±iφ) = cosφ ± i sinφ. Faktor $1/\sqrt{2}$ menormalkan $2p_x$. Dalam pembuktian normalisasinya digunakan fakta bahwa $2p_1$ dan $2p_{-1}$ telah ternormalisasi dan saling ortogonal, sebab integral e^(2iφ) dari 0 sampai 2π bernilai nol.

Penamaan $2p_x$ bagi (6.118) menjadi lebih jelas apabila digunakan (5.51), yang memberikan

$$2p_x = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} xe^{-Zr/2a} \qquad (6.119)$$

Cara kedua menggabungkan fungsi-fungsi tersebut adalah

$$2p_y \equiv \frac{1}{i\sqrt{2}}(2p_1 - 2p_{-1}) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} r \sin\theta \sin\phi \; e^{-Zr/2a} \qquad (6.120)$$

$$2p_y = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} ye^{-Zr/2a} \qquad (6.121)$$

Fungsi $2p_0$ bersifat real dan sering ditulis sebagai

$$2p_0 = 2p_z = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{2a}\right)^{5/2} ze^{-Zr/2a} \qquad (6.122)$$

Huruf kapital Z menyatakan jumlah proton dalam inti, sedangkan z kecil adalah koordinat-z elektron. Fungsi $2p_x$, $2p_\gamma$, dan 2p_z saling ortogonal (Soal 6.42). Perhatikan bahwa 2p_z bernilai nol pada bidang xy, positif di atas bidang tersebut, dan negatif di bawahnya.

Fungsi $2p_{-1}$ dan $2p_1$ adalah fungsi eigen $\hat{L}^2$ dengan nilai eigen yang sama, yaitu $2\hbar^2$. Penalaran Bagian 3.6 menunjukkan bahwa kombinasi linear (6.118) dan (6.120) juga merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$ dengan nilai eigen $2\hbar^2$. Akan tetapi, $2p_{-1}$ dan $2p_1$ adalah fungsi eigen $\hat{L}_z$ dengan nilai eigen berbeda, yaitu $-\hbar$ dan $+\hbar$. Karena itu, $2p_x$ dan $2p_y$ bukan fungsi eigen $\hat{L}_z$.

Prosedur ini dapat diperluas untuk membangun fungsi gelombang real bagi keadaan yang lebih tinggi. Karena m mengambil nilai dari −l sampai +l, bagi setiap fungsi kompleks yang mengandung faktor e^(−i|m|φ) terdapat fungsi dengan nilai n dan l yang sama tetapi mengandung faktor e^(+i|m|φ). Penjumlahan dan pengurangan kedua fungsi tersebut menghasilkan dua fungsi real: satu mempunyai faktor cos(|m|φ) dan satu lagi mempunyai faktor sin(|m|φ). Tabel 6.2 mencantumkan fungsi gelombang real bagi atom mirip hidrogen. Subskrip pada fungsi-fungsi tersebut berasal dari pertimbangan yang sama seperti bagi fungsi $2p_x$, $2p_y$, dan $2p_z$. Sebagai contoh, fungsi $3d_{xy}$ sebanding dengan xy (Soal 6.37).

Fungsi mirip hidrogen real diturunkan dari fungsi kompleks dengan mengganti $e^{im\varphi}/(2\pi)^{1/2}$ oleh $\pi^{-1/2}\sin(|m|\varphi)$ atau $\pi^{-1/2}\cos(|m|\varphi)$ untuk $m \neq 0$. Untuk $m = 0$, faktor φ adalah $1/(2\pi)^{1/2}$ bagi fungsi real maupun kompleks.

Dalam pembahasan molekul, orbital mirip hidrogen real lebih berguna daripada orbital kompleks. Sebagai contoh, dalam Bagian 15.5 akan ditunjukkan bahwa orbital atom real $2p_x$, $2p_y$, dan $2p_z$ pada atom oksigen mempunyai simetri yang tepat untuk digunakan dalam menyusun fungsi gelombang molekul H_2O, sedangkan orbital 2p kompleks tidak.

$$1s = \frac{1}{\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2} e^{-Zr/a}$$

$$2s = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\left(2 - \frac{Zr}{a}\right)e^{-Zr/2a}$$

$$2p_z = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a}\cos\theta$$

$$2p_x = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a}\sin\theta\,\cos\phi$$

$$2p_y = \frac{1}{4(2\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2} re^{-Zr/2a}\sin\theta\sin\phi$$

$$3s = \frac{1}{81(3\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{3/2}\left(27 - 18\frac{Zr}{a} + 2\frac{Z^2r^2}{a^2}\right)e^{-Zr/3a}$$

$$3p_z = \frac{2^{1/2}}{81\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2}\left(6 - \frac{Zr}{a}\right)re^{-Zr/3a}\cos\theta$$

$$3p_x = \frac{2^{1/2}}{81\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2}\left(6 - \frac{Zr}{a}\right)re^{-Zr/3a}\sin\theta\cos\phi$$

$$3p_y = \frac{2^{1/2}}{81\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{5/2}\left(6 - \frac{Zr}{a}\right)re^{-Zr/3a}\sin\theta\sin\phi$$

$$3d_{z^2} = \frac{1}{81(6\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{7/2} r^2e^{-Zr/3a}(3\cos^2\theta - 1)$$

$$3d_{xz} = \frac{2^{1/2}}{81\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{7/2} r^2e^{-Zr/3a}\sin\theta\cos\theta\cos\phi$$

$$3d_{yz} = \frac{2^{1/2}}{81\pi^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{7/2} r^2e^{-Zr/3a}\sin\theta\cos\theta\sin\phi$$

$$3d_{x^2-y^2} = \frac{1}{81(2\pi)^{1/2}}\left(\frac{Z}{a}\right)^{7/2} r^2e^{-Zr/3a}\sin^2\theta\cos 2\phi$$

$$3d_{xy} = \frac{1}{\quad}\left(\frac{Z}{\quad}\right)^{7/2} r^2e^{-Zr/3a}\sin^2\theta\sin 2\phi$$

Tabel 6.2. Fungsi gelombang mirip hidrogen real.

6.7 Orbital Mirip Hidrogen

Fungsi gelombang mirip hidrogen adalah fungsi gelombang ruang satu elektron dan dengan demikian merupakan orbital mirip hidrogen (Bagian 6.5). Fungsi-fungsi ini diturunkan untuk atom satu elektron. Karena itu, kita tidak dapat mengharapkan penggunaannya memberikan gambaran fungsi gelombang atom banyak elektron yang benar-benar teliti. Penggunaan konsep orbital untuk menghampiri fungsi gelombang atom banyak elektron dibahas dalam Bab 11. Untuk sementara, pembahasan dibatasi pada atom satu elektron.

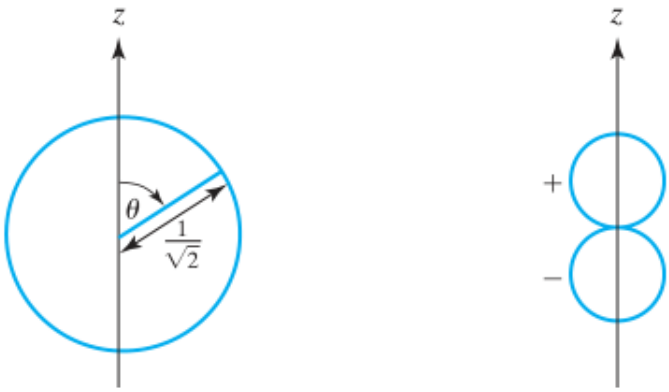
Terdapat dua cara yang secara mendasar berbeda untuk menggambarkan orbital. Cara pertama adalah menggambar grafik fungsinya. Cara kedua adalah menggambar permukaan kontur dengan kerapatan probabilitas konstan.

Pertama, pertimbangkan penggambaran grafik. Untuk menggambarkan perubahan ψ sebagai fungsi tiga variabel bebas r, θ, dan φ, diperlukan empat dimensi. Sifat tiga dimensi dunia kita menghalangi pembuatan grafik seperti itu. Sebagai gantinya, kita menggambar grafik faktor-faktor dalam ψ. Grafik R(r) terhadap r menghasilkan kurva-kurva Gambar 6.8, tetapi tidak memberikan informasi mengenai perubahan sudut ψ.

Sekarang pertimbangkan grafik S(θ). Dari Tabel 5.1,

$$S_{0,0} = 1/\sqrt{2}, \quad S_{1,0} = (\sqrt{6}/2)\cos\theta$$

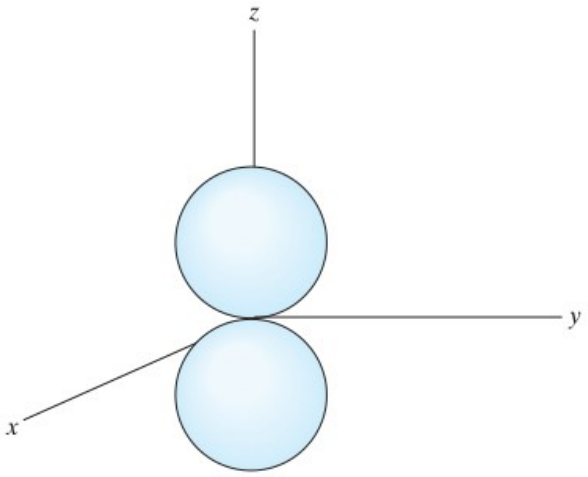
Fungsi tersebut dapat digambarkan menggunakan koordinat Kartesius dua dimensi, dengan S pada sumbu vertikal dan θ pada sumbu horizontal. $S_{0,0}$ menghasilkan garis lurus horizontal, sedangkan $S_{1,0}$ menghasilkan kurva kosinus. Namun, S lebih umum digambarkan dengan koordinat polar bidang. Variabel θ adalah sudut terhadap sumbu z positif, sedangkan S(θ) adalah jarak dari titik asal ke titik pada grafik. Untuk $S_{0,0}$ diperoleh lingkaran; untuk $S_{1,0}$ diperoleh dua lingkaran yang bersinggungan (Gambar 6.10). Tanda negatif pada lingkaran bawah grafik $S_{1,0}$ menunjukkan bahwa $S_{1,0}$ negatif untuk $\pi/2 < \theta \leq \pi$. Secara ketat, grafik cosθ hanya menghasilkan lingkaran atas yang dilalui dua kali. Agar diperoleh dua lingkaran yang bersinggungan, yang digambarkan sebenarnya adalah |cosθ|.



Gambar 6.10. Grafik polar faktor θ dalam fungsi gelombang atom hidrogen s dan p_z.

Daripada menggambarkan faktor sudut secara terpisah, dapat dibuat satu grafik |S(θ)T(φ)| sebagai fungsi θ dan φ. Kita menggunakan koordinat bola, dan jarak dari titik asal ke titik pada grafik adalah |S(θ)T(φ)|. Untuk keadaan s, ST tidak bergantung pada sudut sehingga grafiknya berupa bola berjari-jari $1/(4\pi)^{1/2}$. Untuk keadaan p_z, ST = $\frac{1}{2}(3/\pi)^{1/2}\cos\theta$, dan grafik |ST| terdiri atas dua bola yang pusatnya terletak pada sumbu z dan bersinggungan di titik asal (Gambar 6.11). Gambar ini tidak diragukan lagi sudah dikenal. Sebagian buku menyatakan bahwa gambar tersebut memberikan bentuk orbital p_z, tetapi pernyataan itu keliru. Gambar 6.11 hanyalah grafik faktor sudut fungsi gelombang p_z. Grafik faktor

sudut p_x dan p_γ menghasilkan bola-bola bersinggungan yang masing-masing terletak sepanjang sumbu x dan y. Apabila S^2T^2 digambarkan dalam koordinat bola, diperoleh permukaan dengan penampang seperti angka delapan yang dikenal luas. Sekali lagi, permukaan ini adalah grafik fungsi, bukan bentuk orbital.



Gambar 6.11. Grafik $|Y_1^0(\theta,\varphi)|$, faktor sudut dalam fungsi gelombang p_z.

Sekarang pertimbangkan permukaan kontur dengan kerapatan probabilitas konstan. Kita menggambar permukaan di dalam ruang, dan pada setiap permukaan nilai $|\psi|^2$, yaitu kerapatan probabilitas, adalah konstan. Jika $|\psi|^2$ konstan pada suatu permukaan, $|\psi|$ juga konstan pada permukaan tersebut. Karena itu, permukaan kontur untuk $|\psi|^2$ dan $|\psi|$ identik.

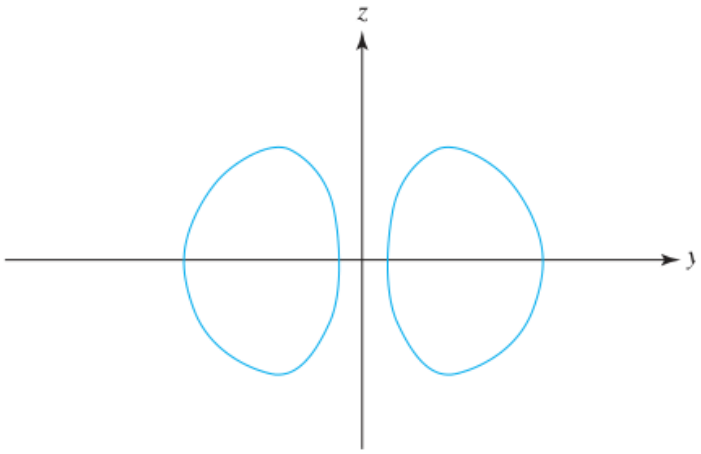
Untuk orbital s, ψ hanya bergantung pada r. Permukaan kontur adalah permukaan dengan r konstan, yaitu sebuah bola yang berpusat di titik asal. Untuk memberikan ukuran orbital secara pasti, dipilih permukaan kontur yang di dalamnya probabilitas menemukan elektron, misalnya, 95%. Jadi, dicari $\int_V |\psi|^2 d\tau = 0{,}95$, dengan V adalah volume yang dibatasi permukaan kontur orbital.

Mari kita memperoleh penampang orbital mirip hidrogen $2p_\gamma$ dalam bidang yz. Dalam bidang ini $\varphi = \pi/2$ (Gambar 6.5) dan $\sin\varphi = 1$. Tabel 6.2 kemudian memberikan orbital pada bidang yz sebagai

$$|2p_y| = k^{5/2}\pi^{-1/2} r e^{-kr} \, |\sin\theta| \qquad (6.123)$$

dengan $\kappa = Z/(2a)$. Untuk mencari penampang orbital, digunakan koordinat polar bidang untuk menggambarkan (6.123) pada suatu nilai $|\psi|$ yang tetap; r adalah jarak dari titik asal dan θ adalah sudut terhadap sumbu z. Hasil bagi suatu kontur tipikal (Soal 6.44) ditunjukkan dalam Gambar 6.12. Karena $ye^{(-\kappa r)} = y \exp[-\kappa(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}]$, orbital $2p_\gamma$ adalah fungsi y dan $x^2 + z^2$. Maka, pada suatu lingkaran yang berpusat pada sumbu y dan sejajar bidang xz, $2p_\gamma$ bernilai konstan. Permukaan kontur tiga dimensi dapat dibentuk dengan memutar penampang

Gambar 6.12 mengelilingi sumbu y sehingga dihasilkan sepasang elipsoid terdistorsi. Bentuk orbital 2p real adalah dua elipsoid terdistorsi yang terpisah, bukan dua bola yang bersinggungan.



Gambar 6.12. Kontur orbital 2p_y.

Sekarang pertimbangkan bentuk dua orbital kompleks 2p_±1. Kita mempunyai

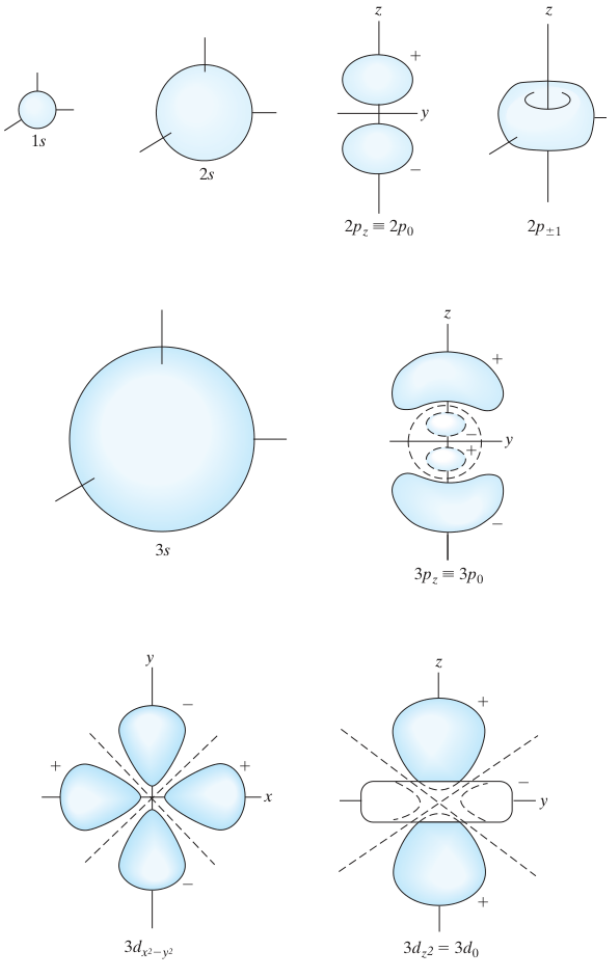
$$2p_{\pm 1} = k^{5/2}\pi^{-1/2} r e^{-kr} \sin\theta \; e^{\pm i\phi}$$
$$|2p_{\pm 1}| = k^{5/2}\pi^{-1/2} e^{-kr} r |\sin\theta| \qquad (6.124)$$

Kedua orbital ini mempunyai bentuk yang sama. Karena ruas kanan (6.124) dan (6.123) identik, Gambar 6.12 juga memberikan penampang orbital 2p_±1 dalam bidang yz. Karena [Persamaan (5.51)]

$$e^{\wedge}(-\kappa r) r|\sin\theta| = \exp[-\kappa(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}](x^2 + y^2)^{1/2}$$

2p_±1 merupakan fungsi z dan $x^2 + y^2$. Dengan demikian, bentuk orbital tiga dimensi diperoleh dengan memutar Gambar 6.12 mengelilingi sumbu z. Permukaan yang diperoleh berbentuk donat.

Beberapa permukaan orbital mirip hidrogen diperlihatkan dalam Gambar 6.13. Orbital 2s mempunyai simpul bola yang tidak terlihat pada gambar; orbital 3s mempunyai dua simpul bola. Orbital 3p_z mempunyai simpul bola, yang ditunjukkan dengan garis putus-putus, serta bidang simpul xy. Orbital $3d_{z^2}$ mempunyai dua kerucut simpul. Orbital $3d_{(x^2-y^2)}$ mempunyai dua bidang simpul. Perhatikan bahwa arah pandang pada gambar tidak sama untuk semua orbital. Tanda relatif fungsi gelombang juga diperlihatkan.



Gambar 6.13. Bentuk beberapa orbital atom hidrogen.

Tiga orbital 3d real lainnya dalam Tabel 6.2 mempunyai bentuk yang sama dengan orbital 3d_(x^2-y^2), tetapi orientasinya berbeda. Orbital 3d_xy mempunyai cuping yang berada di antara sumbu x dan y dan diperoleh dengan memutar orbital 3d_(x^2-y^2) sebesar 45° mengelilingi sumbu z. Orbital 3d_yz dan 3d_xz masing-masing mempunyai cuping di antara sumbu y dan z serta di antara sumbu x dan z.

Gambar 6.14 menggambarkan kerapatan probabilitas dalam bidang yz bagi beberapa orbital. Jumlah titik dalam suatu daerah sebanding dengan nilai $|\psi|^2$ di daerah tersebut. Pemutaran diagram-diagram ini mengelilingi sumbu vertikal atau sumbu z memberikan kerapatan probabilitas tiga dimensi. Orbital 2s mempunyai faktor sudut yang konstan sehingga tidak memiliki simpul sudut; untuk orbital ini $n - l - 1 = 1$, yang menunjukkan satu simpul radial. Bola tempat $\psi_{2s} = 0$ tampak jelas dalam Gambar 6.14.

Gambar 6.14. Kerapatan probabilitas bagi beberapa keadaan atom hidrogen.

Interpretasi asli Schrödinger terhadap $|\psi|^2$ menyatakan bahwa elektron "tersebar" menjadi awan muatan. Apabila dipertimbangkan sebuah elektron yang melintas dari satu medium ke medium lain, $|\psi|^2$ ditemukan tidak nol pada kedua medium. Menurut interpretasi awan muatan, hal ini berarti sebagian elektron dipantulkan dan sebagian diteruskan. Akan tetapi, secara eksperimen tidak pernah terdeteksi pecahan elektron; elektron berperilaku sebagai entitas yang tidak terbagi. Kesulitan ini dihilangkan oleh interpretasi Born, yang menyatakan bahwa nilai $|\psi|^2$ dalam kedua medium memberikan probabilitas pemantulan dan penerusan. Bentuk orbital yang telah digambar menyatakan daerah ruang tempat probabilitas total menemukan elektron adalah 95%.

6.8 Efek Zeeman

Pada tahun 1896, Zeeman mengamati bahwa penerapan medan magnet luar menyebabkan pemisahan garis spektrum atom. Kita akan membahas efek Zeeman ini untuk atom hidrogen. Pembahasan dimulai dengan meninjau kembali magnetisme.

Medan magnet timbul dari muatan listrik yang bergerak. Muatan Q dengan kecepatan v menimbulkan medan magnet B pada titik P dalam ruang, sedemikian sehingga

$$\mathbf{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{Q\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{r^3} \qquad (6.125)$$

dengan r adalah vektor dari Q menuju titik P dan μ_0, yang disebut permeabilitas vakum atau konstanta magnetik, didefinisikan sebagai $4\pi \times 10^{-7}$ N C^{-2} s^2. Persamaan (6.125) hanya berlaku untuk muatan yang tidak dipercepat dan bergerak dengan kecepatan jauh lebih kecil daripada kecepatan cahaya. Vektor B disebut induksi magnetik atau kerapatan fluks magnetik. Dahulu vektor H dianggap sebagai vektor medan magnet mendasar sehingga H disebut kuat medan magnet. Sekarang diketahui bahwa B adalah vektor magnetik mendasar. Persamaan (6.125) dinyatakan dalam satuan SI, dengan Q dalam coulomb dan B dalam tesla (T), dan 1 T = 1 N C^{-1} m^{-1} s.

Dua muatan listrik +Q dan −Q yang dipisahkan oleh jarak kecil b membentuk dipol listrik. Momen dipol listrik didefinisikan sebagai vektor dari −Q ke +Q dengan besar Qb. Untuk loop kecil datar yang dialiri arus listrik, medan magnet yang dihasilkan oleh muatan bergerak dalam arus tersebut diberikan oleh ungkapan matematis yang sama dengan medan listrik suatu dipol listrik, tetapi momen dipol listrik diganti oleh momen dipol magnetik μ. μ adalah vektor dengan besar IA, dengan I arus yang mengalir dalam loop berluas A. Arah μ tegak lurus bidang loop arus.

Pertimbangkan momen magnetik atau momen dipol yang berkaitan dengan muatan Q yang bergerak dalam lingkaran berjari-jari r dengan laju v. Arus adalah aliran muatan per satuan waktu. Keliling lingkaran adalah 2πr dan waktu bagi satu putaran adalah 2πr/v. Karena itu, I = Qv/(2πr). Besar μ ialah

$$|\mathbf{m}| = IA = (Qv/2\pi r)\pi r^2 = Qvr/2 = Qrp/2m \tag{6.126}$$

dengan m massa partikel bermuatan dan p momentum linearnya. Karena vektor radius r tegak lurus p, diperoleh

$$\mathbf{m}_L = \frac{Q\mathbf{r} \times \mathbf{p}}{2m} = \frac{Q}{2m}\mathbf{L} \tag{6.127}$$

dengan definisi momentum sudut orbital L telah digunakan. Subskrip L pada μ menunjukkan bahwa momen magnetik tersebut berasal dari gerak orbital partikel. Walaupun (6.127) diturunkan untuk kasus khusus gerak melingkar, hubungan itu berlaku secara umum. Untuk elektron, Q = −e dan momen magnetik akibat gerak orbitalnya ialah

$$\mathbf{m}_L = -\frac{e}{2m_e}\mathbf{L} \tag{6.128}$$

Besar L diberikan oleh (5.95), sehingga besar momen magnetik orbital elektron dengan bilangan kuantum momentum sudut orbital l adalah

$$|\mathbf{m}_L| = \frac{e\hbar}{2m_e}[l(l+1)]^{1/2} = \mu_B[l(l+1)]^{1/2} \tag{6.129}$$

Konstanta $e\hbar/(2m_e)$ disebut magneton Bohr μ_B:

$$\mu_B \equiv e\hbar/2m_e = 9.2740 \times 10^{-24}\,\mathrm{J/T} \tag{6.130}$$

Sekarang terapkan medan magnet luar pada atom hidrogen. Energi interaksi antara dipol magnetik μ dan medan magnet luar B dapat ditunjukkan sebagai

$$E_B = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B} \tag{6.131}$$

Dengan menggunakan Persamaan (6.128), diperoleh

$$E_B = \frac{e}{2m_e}\mathbf{L}\cdot\mathbf{B} \qquad (6.132)$$

Sumbu z dipilih searah medan yang diterapkan: B = Bk, dengan k vektor satuan pada arah z. Dengan demikian,

$$E\_B = [e/(2m_e)]B(L_x i + L_y j + L\_z k)\cdot k = [e/(2m_e)]BL\_z = (\mu\_B/\hbar)BL\_z$$

dengan L_z komponen-z momentum sudut orbital. L_z sekarang diganti oleh operator $\hat{L}$_z sehingga diperoleh suku tambahan berikut dalam operator Hamiltonian akibat medan magnet luar:

$$\hat{H}_B = \mu_B B\hbar^{-1}\hat{L}_z \qquad (6.133)$$

Persamaan Schrödinger bagi atom hidrogen dalam medan magnet ialah

$$(\hat{H} + \hat{H}_B)\psi = E\psi \qquad (6.134)$$

dengan $\hat{H}$ Hamiltonian atom hidrogen tanpa medan luar. Dapat segera diverifikasi bahwa solusi Persamaan (6.134) adalah fungsi gelombang mirip hidrogen kompleks (6.61):

$$(\hat{H} + \hat{H}_B)R(r)Y_l^m(\theta,\phi) = \hat{H}RY_l^m + \mu_B\hbar^{-1}B\hat{L}_zRY_l^m = \left(-\frac{Z^2}{n^2}\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a} + \mu_B Bm\right)RY_l^m \qquad (6.135)$$

Dalam persamaan tersebut digunakan Persamaan (6.94) dan (5.105). Dengan demikian terdapat suku tambahan μ_BBm dalam energi, dan medan magnet luar menghilangkan degenerasi terhadap m. Karena alasan yang jelas, m sering disebut bilangan kuantum magnetik. Sebenarnya, pergeseran energi yang diamati tidak sama tepat dengan prediksi Persamaan (6.135) karena adanya momen magnetik spin elektron, yang dibahas dalam Bab 10 dan Bagian 11.7.

Dalam Bab 5 ditemukan bahwa secara mekanika kuantum L terletak pada permukaan kerucut. Perlakuan mekanika klasik terhadap gerak L dalam medan magnet yang diterapkan menunjukkan bahwa medan memberikan torsi pada μ_L. Torsi ini menyebabkan L berputar mengelilingi arah B pada frekuensi konstan |μ_L|B/(2π|L|) sambil mempertahankan sudut tetap terhadap B. Gerak giroskopik ini disebut presesi. Dalam mekanika kuantum, penetapan lengkap L tidak mungkin dilakukan. Akan tetapi, ditemukan bahwa ⟨L⟩ berpresesi mengelilingi arah medan (Dicke dan Wittke, Bagian 12-3).

6.9 Penyelesaian Numerik Persamaan Schrödinger Radial

Untuk masalah gaya pusat satu partikel, fungsi gelombang diberikan oleh (6.16) sebagai ψ = R(r)Y_l^m(θ,φ), sedangkan faktor radial R(r) diperoleh dengan menyelesaikan persamaan radial (6.17). Metode Numerov pada Bagian 4.4 berlaku untuk persamaan diferensial berbentuk ψ″ = G(x)ψ(x) [Persamaan (4.66)].

Karena itu, turunan pertama R′ dalam (6.17) perlu dihilangkan. Definisikan F(r) dengan F(r) ≡ rR(r), sehingga

$$R(r) = r^{-1}F(r) \qquad (6.136)$$

Maka $R' = -r^{-2}F + r^{-1}F'$ dan $R'' = 2r^{-3}F - 2r^{-2}F' + r^{-1}F''$. Substitusi ke dalam (6.17) mengubah persamaan radial menjadi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}F''(r) + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right]F(r) = EF(r) \qquad (6.137)$$

$$F''(r) = G(r)F(r), \quad \text{where } G(r) \equiv \frac{m}{\hbar^2}(2V - 2E) + \frac{l(l+1)}{r^2} \qquad (6.138)$$

Persamaan ini mempunyai bentuk yang diperlukan bagi metode Numerov. Dalam menyelesaikan (6.137) secara numerik, setiap nilai l ditangani secara terpisah. Persamaan (6.137) menyerupai persamaan Schrödinger satu dimensi $-(\hbar^2/2m)\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$, tetapi r dengan rentang 0 sampai ∞ menggantikan x dengan rentang −∞ sampai ∞, F(r) ≡ rR(r) menggantikan ψ, dan $V(r) + l(l+1)\hbar^2/(2mr^2)$ menggantikan V(x). Kita dapat mengharapkan bahwa untuk setiap nilai l, solusi berenergi paling rendah mempunyai nol simpul interior, yaitu simpul dengan 0 < r < ∞; solusi terendah berikutnya mempunyai satu simpul interior; dan seterusnya.

Ingat pembahasan setelah (6.81): apabila R(r) berperilaku seperti 1/r^b di dekat titik asal, maka untuk b > 1 fungsi tersebut tidak terintegralkan kuadrat. Nilai b = 1 juga tidak diizinkan, sebagaimana dicatat setelah (6.83). Karena itu, F(r) ≡ rR(r) harus bernilai nol pada r = 0.

Untuk l > 0, G(r) dalam (6.138) tak hingga pada r = 0, yang mengganggu kebanyakan komputer. Untuk menghindari masalah ini, penyelesaian dimulai pada nilai r yang sangat kecil, misalnya 10^{-15} bagi koordinat tak berdimensi r_r, dan F(r) dihampiri nol pada titik tersebut.

Sebagai contoh, metode Numerov digunakan untuk mencari energi keadaan terikat terendah atom H. Di sini $V = -e^2/(4\pi\varepsilon_0 r) = -e'^2/r$, dengan $e' \equiv e/(4\pi\varepsilon_0)^{1/2}$. Persamaan radial (6.62) mengandung tiga konstanta e′, m, dan $\hbar$. e′ mempunyai satuan SI $m\,N^{1/2}$ dan dimensi $[e'] = L^{3/2}M^{1/2}T^{-1}$. Dengan mengikuti prosedur yang digunakan untuk menurunkan Persamaan (4.73), energi tereduksi atom H dan koordinat radial tereduksi diperoleh sebagai (Soal 6.47)

$$E_r = E/\mu e'^4\hbar^{-2}, \qquad r_r = r/B = r/\hbar^2\mu^{-1}e'^{-2} \qquad (6.139)$$

Dengan menggunakan (6.139), (4.76), dan (4.77), mengganti ψ dengan F dan memakai $B = \hbar^2 m^{-1} e'^{-2}$, Persamaan (6.137) bagi atom H berubah menjadi (Soal 6.47)

$$F_r'' = G_r F_r, \qquad \text{where } G_r = l(l+1)/r_r^2 - 2/r_r - 2E_r \tag{6.140}$$

dengan F_r = F/B$^{1/2}$.

Semua energi keadaan terikat atom H kurang dari nol. Misalkan kita ingin mencari nilai eigen keadaan terikat atom H dengan E_r ≤ −0,04. Dengan menyamakan energi ini dengan V_r, diperoleh −0,04 = −1/r_r dan daerah yang diizinkan secara klasik untuk nilai energi ini membentang dari r_r = 0 sampai r_r = 25. Dengan mengambil dua satuan ke dalam daerah yang terlarang secara klasik, dipilih r_(r,maks) = 27 dan disyaratkan F_r(27) = 0. Kita mengambil s_r = 0,1, sehingga terdapat 270 titik dari 0 sampai 27, atau lebih tepatnya dari 10^{-15} sampai $27 + 10^{-15}$.

G_r dalam (6.140) mengandung parameter l, sehingga program pada Tabel 4.1 harus dimodifikasi agar menerima nilai l. Ketika membuat lembar kerja, masukkan nilai l pada suatu sel dan rujuk sel tersebut ketika mengetik rumus sel B7 pada Gambar 4.9 yang mendefinisikan G_r. Mulailah kolom A pada r_r = 1×10^{-15}. Kolom C lembar kerja memuat nilai F_r, bukan nilai ψ_r. F_r praktis tidak berbeda dari nol pada r_r = 1×10^{-15} dan diambil sama dengan nol di titik itu.

Dengan pilihan tersebut, diperoleh (Soal 6.48a) tiga nilai eigen atom H terendah untuk l = 0, yaitu E_r = −0,4970, −0,1246, dan −0,05499. Dua nilai eigen l = 1 terendah yang ditemukan ialah −0,1250 dan −0,05526. Nilai eksaknya [Persamaan (6.94) dan (6.139)] adalah −0,5000, −0,1250, dan −0,05555. Ketelitian yang sedang ini terutama disebabkan oleh perubahan G(r) yang cepat di dekat r = 0. Apabila s_r diambil 0,025, bukan 0,1, sehingga digunakan 1.080 titik, nilai eigen l = 0 membaik menjadi −0,4998, −0,12497, dan −0,05510. Lihat juga Soal 6.48b.

Ringkasan

Untuk sistem satu partikel dengan energi potensial yang hanya merupakan fungsi r, V = V(r), yaitu masalah gaya pusat, fungsi gelombang keadaan stasioner berbentuk ψ = R(r)Y_l^m(θ,φ). R(r) memenuhi persamaan radial (6.17), sedangkan Y_l^m adalah harmonik bola.

Untuk sistem dua partikel 1 dan 2 yang tidak berinteraksi, operator Hamiltonian adalah $\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2$. Fungsi gelombang dan energi keadaan stasioner memenuhi $\psi = \psi_1(q_1)\psi_2(q_2)$ dan $E = E_1 + E_2$, dengan $\hat{H}_1\psi_1 = E_1\psi_1$ dan $\hat{H}_2\psi_2 = E_2\psi_2$; q_1 dan q_2 menyatakan koordinat masing-masing partikel.

Untuk sistem dua partikel berinteraksi dengan Hamiltonian $\hat{H} = \hat{T}_1 + \hat{T}_2 + \hat{V}$, dengan V hanya merupakan fungsi koordinat relatif x, y, z kedua partikel, energi adalah jumlah energi dua partikel hipotesis: E = E_M + E_μ. Partikel hipotesis pertama bermassa $M \equiv m_1 + m_2$, koordinatnya adalah koordinat pusat massa, dan energi E_M merupakan energi partikel bebas. Partikel kedua bermassa $\mu \equiv m_1m_2/(m_1 + m_2)$, koordinatnya adalah koordinat relatif x, y, z, dan energi E_μ

diperoleh dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger bagi gerak internal: $[-(\hbar^2/2\mu)\nabla^2 + V]\psi(x,y,z) = E_\mu\psi(x,y,z)$.

Rotor tegar dua partikel terdiri atas partikel bermassa m_1 dan m_2 yang dipisahkan oleh jarak tetap d. Energinya adalah jumlah energi translasi E_M dan energi rotasi E_μ. Fungsi gelombang rotasi keadaan stasioner adalah $\psi = Y_J^m(\theta,\varphi)$, dengan θ dan φ memberikan orientasi sumbu rotor terhadap titik asal di pusat massa rotor. Bilangan kuantumnya J = 0, 1, 2, … dan m = −J, −J + 1, …, J − 1, J. Tingkat energi rotasinya $E_\mu = J(J + 1)\hbar^2/(2I)$, dengan $I = \mu d^2$ dan $\mu = m_1m_2/(m_1 + m_2)$. Aturan seleksi transisi spektroskopinya adalah $\Delta J = \pm 1$.

Atom mirip hidrogen mempunyai $V = -Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r)$. Setelah energi translasi dipisahkan, gerak internal menjadi masalah gaya pusat dan $\psi = R(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$. Keadaan kontinum mempunyai $E \geq 0$ dan bersesuaian dengan atom yang terionisasi. Keadaan terikat mempunyai energi yang diizinkan $E = -(Z^2/n^2)[e^2/(8\pi\varepsilon_0 a)]$, dengan $a \equiv 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(\mu e^2)$. Fungsi gelombang radial keadaan terikat diberikan oleh (6.100)–(6.101). Bilangan kuantum keadaan terikat adalah n = 1, 2, 3, …; l = 0, 1, 2, …, n − 1; dan m = −l, −l + 1, …, l − 1, l.

Fungsi gelombang ruang satu elektron disebut orbital. Bentuk orbital didefinisikan oleh permukaan kontur dengan $|\psi|$ konstan yang membatasi suatu probabilitas tertentu.

Metode Numerov dapat digunakan untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger radial secara numerik bagi sistem satu partikel dengan energi potensial bersimetri bola.

Soal

Keterkaitan soal dengan bagian: Bagian 6.1—Soal 6.1–6.4; Bagian 6.2—Soal 6.5–6.6; Bagian 6.3—Soal 6.7; Bagian 6.4—Soal 6.8–6.14; Bagian 6.5—Soal 6.15–6.21; Bagian 6.6—Soal 6.22–6.42; Bagian 6.7—Soal 6.43–6.45; Bagian 6.8—Soal 6.46; Bagian 6.9—Soal 6.47–6.51; dan soal umum—Soal 6.52–6.56.

6.1 Benar atau salah? (a) Untuk masalah satu partikel dengan $V = br^3$, dengan b konstanta positif, fungsi gelombang keadaan stasioner berbentuk $\psi = f(r)Y_l^m(\theta,\varphi)$. (b) Setiap operator Hamiltonian satu partikel berkomutasi dengan $\hat{L}^2$ dan $\hat{L}_z$.

6.2 Partikel dalam kotak bola mempunyai V = 0 untuk $r \leq b$ dan $V = \infty$ untuk $r > b$. Untuk sistem ini: (a) Jelaskan mengapa $\psi = R(r)f(\theta,\varphi)$, dengan R(r) memenuhi (6.17). Apakah fungsi $f(\theta,\varphi)$? (b) Selesaikan (6.17) untuk R(r) bagi keadaan l = 0. Petunjuk: substitusi R(r) = g(r)/r mereduksi (6.17) menjadi persamaan yang mudah diselesaikan. Gunakan syarat batas bahwa ψ berhingga pada r = 0 [lihat pembahasan setelah Persamaan (6.83)] dan gunakan syarat batas kedua.

Tunjukkan bahwa untuk keadaan $l = 0$, $\psi = N\{\sin(n\pi r/b)\}/r$ dan $E = n^2h^2/(8mb^2)$, dengan $n = 1, 2, 3, \ldots$. Untuk $l > 0$, rumus tingkat energinya lebih rumit.

6.3 Apabila ketiga konstanta gaya dalam Soal 4.20 sama, diperoleh osilator harmonik isotropik tiga dimensi. (a) Nyatakan alasan fungsi gelombang kasus ini dapat ditulis $\psi = f(r)G(\theta,\varphi)$. (b) Apakah fungsi G? (c) Tuliskan persamaan diferensial yang dipenuhi f(r). (d) Gunakan hasil Soal 4.20 untuk menunjukkan bahwa fungsi gelombang keadaan dasar memang berbentuk $f(r)G(\theta,\varphi)$, dan verifikasi bahwa f(r) keadaan dasar memenuhi persamaan diferensial pada bagian (c).

6.4 Verifikasikan Persamaan (6.6) untuk operator Laplace dalam koordinat bola. Ini merupakan soal panjang dan melelahkan, dan barangkali ada hal lain yang lebih baik untuk dikerjakan dengan waktu Anda.

6.5 Benar atau salah? (a) Untuk sistem n partikel yang tidak berinteraksi, setiap fungsi gelombang keadaan stasioner berbentuk $\psi = \psi_1(q_1) + \psi_2(q_2) + \cdots +$ ψ_n(q_n). (b) Energi sistem partikel-partikel yang tidak berinteraksi adalah jumlah energi setiap partikel, dengan energi masing-masing partikel diperoleh melalui penyelesaian persamaan Schrödinger satu partikel.

6.6 Untuk sistem dua partikel yang tidak berinteraksi, masing-masing bermassa $9{,}0 \times 10^{-26}$ g dan $5{,}0 \times 10^{-26}$ g, di dalam kotak satu dimensi sepanjang $1{,}00 \times 10^{-8}$ cm, hitung energi enam keadaan stasioner terendah.

6.7 Benar atau salah? (a) Massa tereduksi suatu sistem dua partikel selalu lebih kecil daripada m_1 dan lebih kecil daripada m_2. (b) Ketika masalah dua partikel, dengan energi potensial V hanya merupakan fungsi koordinat relatif kedua partikel, diselesaikan melalui dua sistem satu partikel yang terpisah, V menjadi bagian Hamiltonian partikel semu yang massanya sama dengan massa tereduksi.

6.8 Benar atau salah? (a) Degenerasi tingkat energi J = 4 rotor tegar dua partikel adalah 9. (b) Jarak antara tingkat energi rotor tegar dua partikel berturutan tetap konstan ketika J meningkat. (c) Jarak antara frekuensi absorpsi rotor tegar dua partikel berturutan tetap konstan ketika J tingkat bawah meningkat. (d) Molekul $^{1}H^{35}Cl$ dan $^{1}H^{37}Cl$ pada dasarnya mempunyai panjang ikatan kesetimbangan yang sama. (e) Molekul H_2 tidak mempunyai spektrum absorpsi rotasi murni.

6.9 Frekuensi absorpsi gelombang mikro terendah yang diamati bagi $^{12}C^{16}O$ adalah 115.271 MHz. (a) Hitung jarak ikatan dalam $^{12}C^{16}O$. (b) Prediksikan dua frekuensi absorpsi gelombang mikro terendah berikutnya bagi $^{12}C^{16}O$. (c) Prediksikan frekuensi absorpsi gelombang mikro terendah bagi $^{13}C^{16}O$. (d) Untuk $^{12}C^{16}O$ pada 25 °C, hitung rasio populasi J = 1 terhadap populasi J = 0. Ulangi untuk rasio J = 2 terhadap J = 0. Jangan melupakan degenerasi.

6.10 Transisi rotasi J = 2 → 3 dalam suatu molekul diatomik terjadi pada 126,4 GHz, dengan 1 GHz ≡ 10^9 Hz. Tentukan frekuensi absorpsi J = 5 → 6 dalam molekul tersebut.

6.11 Transisi rotasi J = 7 → 8 pada $^{23}Na^{35}Cl$ fase gas terjadi pada 104.189,7 MHz. Massa atom relatif ^{23}Na adalah 22,989770. Tentukan jarak ikatan dalam $^{23}Na^{35}Cl$.

6.12 Bagi suatu molekul diatomik tertentu, dua garis absorpsi rotasi murni berada pada 806,65 GHz dan 921,84 GHz, dengan 1 GHz ≡ 10^9 Hz, dan tidak terdapat garis rotasi murni di antara kedua garis tersebut. Tentukan nilai J awal bagi masing-masing transisi dan tentukan konstanta rotasi molekul B.

6.13 (a) Untuk $^{12}C^{16}O$ pada tingkat vibrasi v = 0, frekuensi absorpsi J = 0 → 1 adalah 115.271,20 MHz dan frekuensi absorpsi J = 4 → 5 adalah 576.267,92 MHz. Hitung konstanta distorsi sentrifugal D molekul tersebut. (b) Untuk $^{12}C^{16}O$ pada tingkat v = 1, absorpsi J = 0 → 1 berada pada 114.221,74 MHz. Tentukan konstanta α_e bagi molekul ini.

6.14 Verifikasikan Persamaan (6.51) untuk I rotor dua partikel. Mulailah dengan mengalikan dan membagi ruas kanan (6.50) dengan $m_1m_2/(m_1 + m_2)$, kemudian gunakan (6.49).

6.15 Hitung rasio gaya listrik terhadap gaya gravitasi antara proton dan elektron. Apakah pengabaian gaya gravitasi dapat dibenarkan?

6.16 (a) Jelaskan mengapa derajat degenerasi tingkat energi atom H diberikan oleh Σ_(l=0)^(n−1)(2l + 1). (b) Pecahlah penjumlahan tersebut menjadi dua penjumlahan. Evaluasi penjumlahan pertama dengan menggunakan hubungan Σ_(j=1)^k j = ½k(k + 1). Tunjukkan bahwa derajat degenerasi tingkat atom H adalah n^2, dengan spin diabaikan. (c) Buktikan Σ_(j=1)^k j = ½k(k + 1) dengan menjumlahkan suku-suku yang bersesuaian dari dua deret 1, 2, 3, …, k dan k, k − 1, k − 2, …, 1.

6.17 (a) Hitung panjang gelombang dan frekuensi garis spektrum yang timbul dari transisi n = 6 → n = 3 dalam atom hidrogen. (b) Ulangi perhitungan untuk He^+; abaikan perubahan massa tereduksi dari H ke He^+.

6.18 Tetapkan setiap panjang gelombang vakum teramati berikut pada transisi antara dua tingkat atom hidrogen: 656,47 nm; 486,27 nm; 434,17 nm; dan 410,29 nm—semuanya termasuk deret Balmer. Prediksikan panjang gelombang dua garis berikutnya dalam deret ini dan panjang gelombang batas deret. Balmer adalah matematikawan Swiss yang pada tahun 1885 menemukan rumus empiris yang cocok dengan garis-garis spektrum hidrogen.

6.19 Setiap garis atom hidrogen dalam Soal 6.18 menunjukkan garis satelit sangat lemah di dekatnya. Dua garis satelit berada pada panjang gelombang vakum 656,29 nm dan 486,14 nm. (a) Jelaskan asalnya. Orang yang pertama kali

menjawab pertanyaan ini memperoleh Hadiah Nobel. (b) Hitung dua panjang gelombang satelit lainnya.

6.20 Verifikasikan bahwa untuk nilai j besar, rasio b_(j+1)/b_j dalam (6.88) sama dengan rasio koefisien r^(j+1) terhadap koefisien r^j dalam deret pangkat e^(2Cr).

6.21 Untuk partikel dalam kotak berdinding tak hingga dan osilator harmonik tidak terdapat fungsi eigen kontinum, sedangkan untuk atom hidrogen terdapat fungsi kontinum. Jelaskan hal ini berdasarkan sifat fungsi energi potensial masing-masing masalah.

6.22 Positron mempunyai muatan +e dan massa sama dengan massa elektron. Hitung dalam elektronvolt energi keadaan dasar positronium, yaitu "atom" yang terdiri atas sebuah positron dan sebuah elektron.

6.23 Untuk keadaan dasar atom mirip hidrogen, tunjukkan bahwa $\langle r \rangle = 3a/(2Z)$.

6.24 Tentukan $\langle r \rangle$ bagi keadaan $2p_0$ atom mirip hidrogen.

6.25 Tentukan $\langle r^2 \rangle$ bagi keadaan $2p_1$ atom mirip hidrogen.

6.26 Untuk atom mirip hidrogen dalam keadaan stasioner dengan bilangan kuantum n, l, dan m, buktikan bahwa

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty r^3 |R_{nl}(r)|^2 dr.$$

6.27 Turunkan fungsi radial mirip hidrogen 2s dan 2p.

6.28 Untuk keadaan atom hidrogen yang mana ψ tidak nol pada inti?

6.29 Berapakah nilai bilangan kuantum momentum sudut l bagi orbital t?

6.30 Apabila tolakan antarelektron dalam helium diabaikan, berapakah energi dan fungsi gelombang keadaan dasarnya? Lihat Bagian 6.2. Hitung persentase galat energinya; energi keadaan dasar eksperimen He adalah −79,0 eV.

6.31 Untuk keadaan dasar atom mirip hidrogen, tentukan nilai r yang paling mungkin.

6.32 Di manakah kerapatan probabilitas maksimum bagi keadaan dasar atom hidrogen?

6.33 (a) Untuk keadaan dasar atom hidrogen, tentukan probabilitas menemukan elektron pada jarak lebih dari 2a dari inti. (b) Untuk keadaan dasar atom H, tentukan probabilitas menemukan elektron dalam daerah yang terlarang secara klasik.

6.34 Fungsi gelombang keadaan stasioner adalah fungsi eigen operator Hamiltonian $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$. Mahasiswa kadang-kadang secara keliru menganggap ψ merupakan fungsi eigen $\hat{T}$ dan $\hat{V}$ secara terpisah. Untuk keadaan dasar atom hidrogen, verifikasikan secara langsung bahwa ψ bukan fungsi eigen $\hat{T}$ maupun $\hat{V}$,

tetapi merupakan fungsi eigen $\hat{T} + \hat{V}$. Dapatkah Anda memikirkan satu masalah yang telah diselesaikan dengan ψ sebagai fungsi eigen $\hat{T}$ dan $\hat{V}$?

6.35 Tunjukkan bahwa $\langle T \rangle + \langle V \rangle = E$ untuk suatu keadaan stasioner.

6.36 Untuk keadaan dasar atom hidrogen: (a) tentukan $\langle V \rangle$; (b) gunakan hasil bagian (a) dan Soal 6.35 untuk menentukan $\langle T \rangle$, kemudian tentukan $\langle T \rangle / \langle V \rangle$; (c) gunakan $\langle T \rangle$ untuk menghitung laju akar-rata-rata-kuadrat elektron, $\langle v^2 \rangle^{1/2}$, lalu hitung nilai numerik $\langle v^2 \rangle^{1/2}/c$, dengan c kecepatan cahaya.

6.37 (a) Fungsi 3d_xy didefinisikan sebagai $3d_{xy} \equiv (3d_2 - 3d_{-2})/(\sqrt{2}\, i)$. Gunakan Tabel 6.1 dan 5.1, Persamaan (6.101), serta identitas sin 2φ untuk menunjukkan bahwa 3d_xy sebanding dengan xy. (b) Nyatakan fungsi 3d real lainnya dalam Tabel 6.2 sebagai kombinasi linear fungsi kompleks $3d_2$, $3d_1$, …, $3d_{-2}$. (c) Gunakan identitas trigonometri untuk menunjukkan bahwa $3d_{(x^2-y^2)}$ mengandung faktor $x^2 - y^2$.

6.38 Fungsi gelombang mirip hidrogen $2p_1$, $2p_0$, dan $2p_{-1}$ dapat dicirikan sebagai fungsi 2p yang merupakan fungsi eigen $\hat{L}_z$. Operator apa yang dapat digunakan untuk mencirikan fungsi $2p_x$, $2p_y$, dan 2p_z, dan berapakah nilai eigen yang bersesuaian?

6.39 Diberikan $\hat{A}f = af$ dan $\hat{A}g = bg$, dengan f dan g fungsi serta a dan b konstanta. Dalam kondisi apa kombinasi linear $c_1 f + c_2 g$ merupakan fungsi eigen operator linear $\hat{A}$?

6.40 Nyatakan di antara ketiga operator $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$, dan Hamiltonian atom H $\hat{H}$, operator mana yang mempunyai setiap fungsi berikut sebagai fungsi eigen: (a) 2p_z; (b) $2p_x$; (c) $2p_1$.

6.41 Untuk fungsi mirip hidrogen real: (a) bagaimana bentuk $n - l - 1$ permukaan simpul tempat faktor radial nol? (b) Permukaan simpul tempat faktor φ nol berbentuk φ = konstan; jadi permukaan tersebut berupa bidang yang tegak lurus bidang xy. Berapa jumlah bidang seperti itu? Nilai φ yang berbeda sebesar π dianggap sebagai bagian bidang yang sama. (c) Dapat ditunjukkan bahwa terdapat $l - |m|$ permukaan tempat faktor θ nol. Bagaimanakah bentuk permukaan-permukaan tersebut? (d) Berapa jumlah keseluruhan permukaan simpul fungsi gelombang mirip hidrogen real?

6.42 Verifikasikan ortogonalitas fungsi $2p_x$, $2p_y$, dan 2p_z.

6.43 Tentukan jari-jari bola yang mendefinisikan orbital hidrogen 1s dengan menggunakan definisi probabilitas 95%.

6.44 Tunjukkan bahwa nilai maksimum $2p_y$ [Persamaan (6.123)] adalah $\kappa^{3/2}\pi^{-1/2}e^{-1}$. Gunakan Persamaan (6.123) untuk menggambar kontur $2p_y$ dengan $\psi = 0{,}316\psi_{maks}$.

6.45 Gambarkan secara kasar kontur $|\psi|$ konstan bagi setiap keadaan berikut dari partikel dalam kotak persegi dua dimensi: $n_x n_\gamma$ = 11, 12, 21, dan 22. Gambar-gambar tersebut mengingatkan Anda pada apa?

6.46 Jawablah berdasarkan Bagian 6.8 yang mengabaikan pengaruh spin elektron. Menjadi berapa tingkat energi tingkat n = 2 atom H terpecah ketika medan magnet luar diterapkan? Berikan degenerasi masing-masing tingkat tersebut.

6.47 (a) Verifikasikan Persamaan (6.139) untuk E_r dan r_r atom H yang tak berdimensi. (b) Verifikasikan (6.140) untuk F_r. (c) Verifikasikan bahwa V_r = −1/r_r bagi atom H.

Untuk Soal 6.48–6.51, gunakan versi program Tabel 4.1 yang telah dimodifikasi, lembar kerja, atau sistem aljabar komputer.

6.48 (a) Verifikasikan energi atom H metode Numerov untuk l = 0 dan l = 1 yang diberikan dalam Bagian 6.9, baik untuk 270 titik maupun 1.080 titik, dengan r_r dari 10^{-15} sampai 27. Pada Excel 2010, kotak *Make Unconstrained Variables Non-Negative* dalam *Solver Parameters* harus tidak dicentang. (b) Untuk 1.080 titik dan r_r sampai 27, nilai E_r Numerov n = 3, l = 0 sebesar −0,05510 masih mempunyai galat cukup besar. Gunakan metode Numerov untuk memperbaiki energi ini secara berarti tanpa memperkecil s_r.

6.49 Gunakan metode Numerov untuk menghitung empat nilai eigen energi l = 0 terendah dan empat nilai eigen l = 1 terendah bagi osilator harmonik isotropik tiga dimensi dengan $V = \frac{1}{2}kr^2$. Bandingkan dengan hasil eksak Soal 4.20.

6.50 Gunakan metode Numerov untuk menghitung dan menggambar fungsi radial tereduksi R_r(r_r) bagi keadaan atom H l = 0 terendah. Lihat Soal 6.48. Jelaskan mengapa nilai R_r pada $r_r = 10^{-15}$ yang dihitung dari R_r = F_r/r_r, yaitu persamaan yang bersesuaian dengan (6.136), salah untuk keadaan ini.

6.51 Untuk partikel dalam kotak bola (Soal 6.2), gunakan metode Numerov untuk menentukan tiga nilai eigen energi l = 0 terendah dan tiga nilai eigen l = 1 terendah. Bandingkan hasil l = 0 dengan hasil eksak Soal 6.2.

6.52 Untuk setiap sistem berikut, berikan ungkapan $d\tau$ dan batas setiap variabel dalam persamaan $\int|\psi|^2 d\tau = 1$. (a) Partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l. (b) Osilator harmonik satu dimensi. (c) Sistem satu partikel tiga dimensi yang menggunakan koordinat Kartesius. (d) Gerak internal atom hidrogen dengan koordinat bola.

6.53 Tentukan rasio populasi tingkat energi n = 2 terhadap n = 1 bagi gas atom hidrogen pada (a) 25 °C; (b) 1.000 K; dan (c) 10.000 K.

6.54 Sebutkan suatu sistem mekanika kuantum yang jarak antara tingkat energi keadaan terikat yang berdekatan: (a) tetap konstan ketika E meningkat; (b) meningkat ketika E meningkat; (c) menurun ketika E meningkat.

6.55 (a) Sebutkan dua sistem mekanika kuantum yang mempunyai jumlah tingkat energi keadaan terikat tak hingga. (b) Sebutkan suatu sistem mekanika kuantum yang mempunyai jumlah tingkat energi keadaan terikat berhingga. (c) Sebutkan suatu sistem mekanika kuantum yang tidak mempunyai energi titik-nol.

6.56 Benar atau salah? (a) Nilai nol tidak pernah diizinkan sebagai nilai eigen. (b) Fungsi f = 0 tidak pernah diizinkan sebagai fungsi eigen. (c) Simbol e menyatakan muatan elektron. (d) Dalam persamaan $\langle B \rangle = \int \psi^* \hat{B} \psi d\tau$, dengan $d\tau = r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\varphi$, $\hat{B}$ hanya beroperasi pada ψ dan tidak beroperasi pada $r^2 \sin\theta$. (e) Dalam keadaan n = 1 atom H, elektron bergerak pada orbit lingkaran yang jari-jarinya adalah jari-jari Bohr. (f) Kerapatan probabilitas elektron pada inti bernilai nol untuk semua keadaan atom H. (g) Dalam keadaan dasar atom H, elektron dibatasi untuk bergerak pada permukaan sebuah bola. (h) Untuk atom H keadaan dasar, kerapatan probabilitas elektron lebih besar daripada nol di semua lokasi berhingga di dalam atom. (i) Semua harmonik bola Y_l^m konstan pada permukaan sebuah bola yang berpusat di titik asal.

Integrasi Nilai Keislaman

Catatan editorial: bagian ini ditambahkan sebagai refleksi keislaman yang relevan dan bukan bagian dari teks asli buku. Ayat dan hadis tidak digunakan untuk menggantikan penalaran ilmiah, melainkan untuk meneguhkan etos tadabur, pencarian ilmu, ketelitian, dan kerendahan hati dalam membaca keteraturan alam.

إِنَّ فِي خَلْقِ السَّمَاوَاتِ وَالْأَرْضِ وَاخْتِلَافِ اللَّيْلِ وَالنَّهَارِ لَآيَاتٍ لِأُولِي الْأَلْبَابِ ۝ الَّذِينَ يَذْكُرُونَ اللَّهَ قِيَامًا وَقُعُودًا وَعَلَىٰ جُنُوبِهِمْ وَيَتَفَكَّرُونَ فِي خَلْقِ السَّمَاوَاتِ وَالْأَرْضِ رَبَّنَا مَا خَلَقْتَ هَٰذَا بَاطِلًا سُبْحَانَكَ فَقِنَا عَذَابَ النَّارِ

"Sesungguhnya dalam penciptaan langit dan bumi serta pergantian malam dan siang terdapat tanda-tanda bagi orang yang berakal, yaitu orang-orang yang mengingat Allah sambil berdiri, duduk, atau berbaring, dan memikirkan penciptaan langit dan bumi seraya berkata: 'Ya Tuhan kami, tidaklah Engkau menciptakan semua ini sia-sia; Mahasuci Engkau, maka lindungilah kami dari azab neraka.'" (QS Āli 'Imrān [3]: 190–191).

Ayat ini menyatukan pengamatan alam, pemikiran, zikir, dan tanggung jawab moral. Ketelitian mekanika kuantum—simetri, operator, syarat batas, normalisasi, dan verifikasi eksperimen—dapat menjadi bahan tadabur, sedangkan rincian teorinya tetap ditetapkan melalui metode ilmiah, bukan dipaksakan dari ayat.

مَنْ سَلَكَ طَرِيقًا يَلْتَمِسُ فِيهِ عِلْمًا سَهَّلَ اللَّهُ لَهُ بِهِ طَرِيقًا إِلَى الْجَنَّةِ

"Barang siapa menempuh suatu jalan untuk mencari ilmu, Allah memudahkan baginya jalan menuju surga." (HR Muslim).

Hadis ini menegaskan kesungguhan mencari ilmu; ketelitian persamaan, pemeriksaan satuan, uji numerik, pembedaan model dan realitas, serta pengakuan atas batas teori merupakan amanah ilmiah.

BAB 7

TEOREMA-TEOREMA MEKANIKA KUANTUM

7.1 Notasi

Persamaan Schrödinger untuk atom berelektron tunggal (Bab 6) dapat diselesaikan secara eksak. Namun, karena adanya suku-suku tolakan antarelektron dalam Hamiltonian, persamaan Schrödinger untuk atom berelektron banyak dan molekul tidak dapat diselesaikan secara eksak. Oleh karena itu, kita harus mencari metode penyelesaian hampiran. Dua metode hampiran utama, yaitu metode variasi dan teori perturbasi, akan disajikan dalam Bab 8 dan Bab 9. Untuk menurunkan metode-metode tersebut, kita harus mengembangkan lebih lanjut teori mekanika kuantum; hal inilah yang dilakukan dalam bab ini.

Sebelum memulai, kita perkenalkan beberapa notasi. Integral tentu pada seluruh ruang dari suatu operator yang diapit oleh dua fungsi sering muncul, dan beberapa bentuk singkatan digunakan:

$$\int f_m \, \hat{A} f_n d\tau \equiv \langle f_m | \hat{A} | f_n \rangle \equiv \langle m | \hat{A} | n \rangle \tag{7.1}$$

Di sini, f_m dan f_n adalah dua fungsi. Apabila fungsi yang dimaksud sudah jelas, kita dapat hanya menggunakan indeksnya, seperti ditunjukkan dalam (7.1). Notasi di atas, yang diperkenalkan oleh Dirac, disebut **notasi braket**. Notasi lainnya adalah

$$\int f_m \, \hat{A} f_n d\tau \equiv A_{mn} \tag{7.2}$$

Notasi A_{mn} dan $\langle m | \hat{A} | n \rangle$ menyiratkan bahwa kita menggunakan konjugat kompleks dari fungsi yang hurufnya muncul pertama. Integral tentu $\langle m | \hat{A} | n \rangle$ disebut **elemen matriks** dari operator $\hat{A}$. Matriks merupakan susunan bilangan berbentuk persegi panjang dan mengikuti aturan-aturan kombinasi tertentu (lihat Bagian 7.10).

Untuk integral tentu pada seluruh ruang antara dua fungsi, kita menuliskan

$$\int f_m \, f_n d\tau \equiv \langle f_m | f_n \rangle \equiv (f_m, f_n) \equiv \langle m | n \rangle \tag{7.3}$$

Perhatikan bahwa

$$\langle f | \hat{B} | g \rangle = \langle f \vee \hat{B} g \rangle$$

di mana f dan g adalah fungsi. Karena

$$\left(\int f_m \, f_n d\tau \right) \quad = \int f_n \;\; f_m d\tau,$$

kita memperoleh identitas

$$\langle m | n \rangle \quad = \langle n | m \rangle \tag{7.4}$$

Karena dalam (7.1) diambil konjugat kompleks dari f_m, diperoleh

$$\langle cf | \hat{B} | g \rangle = c \;\; \langle f | \hat{B} | g \rangle \text{dan} \langle f | \hat{B} | cg \rangle = c \langle f | \hat{B} | g \rangle \tag{7.5}$$

di mana $\hat{B}$ adalah operator linear dan c adalah konstanta.

7.2 Operator Hermitian

Operator mekanika kuantum yang merepresentasikan besaran-besaran fisik bersifat linear (Bagian 3.1). Operator-operator tersebut harus memenuhi satu persyaratan tambahan, yang sekarang akan kita bahas.

Definisi Operator Hermitian

Misalkan $\hat{A}$ adalah operator linear yang merepresentasikan sifat fisik A. Nilai rata-rata A adalah [Pers. (3.88)]

$$\langle A \rangle = \int \Psi \quad \hat{A}\Psi d\tau,$$

di mana Ψ adalah fungsi keadaan sistem. Karena nilai rata-rata suatu besaran fisik harus berupa bilangan real, kita mensyaratkan

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle \quad .$$

Dengan demikian,

$$\int \Psi \quad \hat{A}\Psi d\tau = \left[\int \Psi \quad \hat{A}\Psi d\tau\right] \quad = \int \left(\Psi \quad\right) \quad \left(\hat{A}\Psi\right) \quad d\tau,$$

sehingga

$$\int \Psi \quad \hat{A}\Psi d\tau = \int \Psi \left(\hat{A}\Psi\right) \quad d\tau \tag{7.6}$$

Persamaan (7.6) harus berlaku bagi setiap fungsi Ψ yang dapat merepresentasikan keadaan sistem yang mungkin; dengan kata lain, persamaan tersebut harus berlaku bagi semua fungsi Ψ yang berperilaku baik. Operator linear yang memenuhi (7.6) untuk semua fungsi yang berperilaku baik disebut **operator Hermitian** (diambil dari nama matematikawan Charles Hermite).

Banyak buku mendefinisikan operator Hermitian sebagai operator linear yang memenuhi

$$\int f \quad \hat{A}g d\tau = \int g \left(\hat{A}f\right) \quad d\tau \tag{7.7}$$

bagi semua fungsi f dan g yang berperilaku baik. Perhatikan secara khusus bahwa pada ruas kiri (7.7), $\hat{A}$ bekerja pada g, sedangkan pada ruas kanan $\hat{A}$ bekerja pada f. Untuk kasus khusus $f = g$, (7.7) tereduksi menjadi (7.6). Persamaan (7.7) tampaknya merupakan persyaratan yang lebih ketat daripada (7.6), tetapi kita akan membuktikan bahwa (7.7) merupakan konsekuensi dari (7.6). Oleh sebab itu, kedua definisi operator Hermitian tersebut ekuivalen.

Kita memulai pembuktian dengan menetapkan $\Psi = f + cg$ dalam (7.6), dengan c suatu konstanta sembarang. Diperoleh

$$\int (f + cg) \quad \hat{A}(f + cg) d\tau = \int (f + cg)\left[\hat{A}(f + cg)\right] \quad d\tau,$$

$$\int \left(f \quad + c \quad g \quad\right)\hat{A}f d\tau + \int \left(f \quad + c \quad g \quad\right)\hat{A}(cg) d\tau$$

$$\int (f + cg)\left(\hat{A}f\right) \quad d\tau + \int (f + cg) \left(\hat{A}(cg)\right) \quad d\tau,$$

atau

$$\int f\ \ \hat{A}f d\tau + c\ \ \int g\ \ \hat{A}f d\tau + c\int f\ \ \hat{A}g d\tau + c\ \ c\int g\ \ \hat{A}g d\tau$$

$$\int f(\hat{A}f)\ \ d\tau + c\int g(\hat{A}f)\ \ d\tau + c\ \ \int f(\hat{A}g)\ \ d\tau + cc\ \ \int g(\hat{A}g)\ \ d\tau.$$

Berdasarkan (7.6), suku pertama pada masing-masing ruas persamaan terakhir ini sama satu sama lain; demikian pula suku terakhir pada masing-masing ruas. Oleh karena itu,

$$c\ \ \int g\ \ \hat{A}f d\tau + c\int f\ \ \hat{A}g d\tau = c\int g(\hat{A}f)\ \ d\tau + c\ \ \int f(\hat{A}g)\ \ d\tau \qquad (7.8)$$

Dengan menetapkan $c = 1$ dalam (7.8), kita memperoleh

$$\int g\ \ \hat{A}f d\tau + \int f\ \ \hat{A}g d\tau = \int g(\hat{A}f)\ \ d\tau + \int f(\hat{A}g)\ \ d\tau \qquad (7.9)$$

Dengan menetapkan $c = i$ dalam (7.8), kemudian membagi dengan i, kita memperoleh

$$-\int g\ \ \hat{A}f d\tau + \int f\ \ \hat{A}g d\tau = \int g(\hat{A}f)\ \ d\tau - \int f(\hat{A}g)\ \ d\tau \qquad (7.10)$$

Sekarang kita menjumlahkan (7.9) dan (7.10) untuk memperoleh (7.7). Dengan demikian pembuktian selesai.

Jadi, **operator Hermitian $\hat{A}$ adalah operator linear yang memenuhi**

$$\int f_m\ \hat{A}f_n d\tau = \int f_n(\hat{A}f_m)\ \ d\tau \qquad (7.11)$$

di mana f_m dan f_n adalah fungsi sembarang yang berperilaku baik, dan integral-integralnya merupakan integral tentu pada seluruh ruang. Dengan menggunakan notasi braket dan notasi elemen matriks, kita menuliskan

$$\langle f_m|\hat{A}|f_n\rangle = \langle f_n|\hat{A}|f_m\rangle \qquad (7.12)$$

$$\langle m|\hat{A}|n\rangle = \langle n|\hat{A}|m\rangle \qquad (7.13)$$

$$A_{mn} = (A_{nm}) \qquad (7.14)$$

Kedua ruas (7.12) berbeda karena fungsi-fungsinya dipertukarkan dan konjugat kompleksnya diambil.

Contoh Operator Hermitian

Sekarang kita tunjukkan bahwa beberapa operator yang telah digunakan memang bersifat Hermitian. Demi kesederhanaan, kita akan bekerja dalam satu dimensi. Untuk membuktikan bahwa suatu operator bersifat Hermitian, sebenarnya cukup ditunjukkan bahwa operator itu memenuhi (7.6) untuk semua fungsi yang berperilaku baik. Namun, kita akan menempuh cara yang sedikit lebih sulit dengan membuktikan bahwa (7.11) dipenuhi.

Pertama, tinjau operator energi potensial satu partikel satu dimensi. Ruas kanan (7.11) adalah

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_n(x)[V(x)f_m(x)]\ \ dx \qquad (7.15)$$

Kita mempunyai $V\ \ = V$ karena energi potensial merupakan fungsi real. Selain itu, urutan faktor-faktor dalam (7.15) tidak berpengaruh. Oleh karena itu,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_n\,(Vf_m)\;\;dx = \int_{-\infty}^{\infty} f_n V\;\;f_m\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} f_m\;Vf_n dx,$$

yang membuktikan bahwa $\hat{V}$ bersifat Hermitian.

Operator untuk komponen-x momentum linear adalah $\hat{p}_x = -i\hbar\, d/dx$ [Pers. (3.23)]. Untuk operator ini, ruas kiri (7.11) adalah

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_m\;(x)\left(-i\hbar\frac{df_n(x)}{dx}\right)dx.$$

Sekarang kita menggunakan rumus integrasi parsial:

$$\int_a^b u\,(x)\frac{dv(x)}{dx}\,dx = u(x)v(x)\quad {}_a^b - \int_a^b v\,(x)\frac{du(x)}{dx}\,dx \tag{7.16}$$

Misalkan

$$u(x) \equiv -i\hbar f_m\,(x), v(x) \equiv f_n(x).$$

Maka

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_m\,\left(-i\hbar\frac{df_n}{dx}\right)dx = -i\hbar f_m\,f_n\quad {}_{-\infty}^{\infty} + i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} f_n\,(x)\frac{df_m(x)}{dx}\,dx \tag{7.17}$$

Karena f_m dan f_n adalah fungsi yang berperilaku baik, keduanya lenyap pada $x = \pm\infty$. (Seandainya keduanya tidak lenyap di tak hingga, fungsi-fungsi tersebut tidak akan terintegralkan kuadrat.) Oleh karena itu, (7.17) menjadi

$$\int_{-\infty}^{\infty} f_m\,\left(-i\hbar\frac{df_n}{dx}\right)dx = \int_{-\infty}^{\infty} f_n\left(-i\hbar\frac{df_m}{dx}\right)\;\;dx,$$

yang sama dengan (7.11) dan membuktikan bahwa $\hat{p}_x$ bersifat Hermitian. Pembuktian bahwa operator energi kinetik bersifat Hermitian diserahkan kepada pembaca. Jumlah dua operator Hermitian dapat ditunjukkan bersifat Hermitian. Dengan demikian, operator Hamiltonian $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ bersifat Hermitian.

Teorema tentang Operator Hermitian

Sekarang kita membuktikan beberapa teorema penting mengenai nilai eigen dan fungsi eigen operator Hermitian.

Karena nilai eigen operator $\hat{A}$ yang berkaitan dengan besaran fisik A merupakan hasil-hasil yang mungkin dari pengukuran A (Bagian 3.3), semua nilai eigen tersebut harus berupa bilangan real. Sekarang kita membuktikan bahwa nilai eigen suatu operator Hermitian memang berupa bilangan real.

Diketahui bahwa $\hat{A}$ bersifat Hermitian. Pernyataan ini dapat diterjemahkan ke dalam persamaan [Pers. (7.11)]

$$\int f_m\,\hat{A}f_n d\tau = \int f_n\big(\hat{A}f_m\big)\;\;d\tau \tag{7.18}$$

untuk semua fungsi f_m dan f_n yang berperilaku baik. Kita ingin membuktikan bahwa setiap nilai eigen $\hat{A}$ merupakan bilangan real. Dalam bentuk persamaan, kita ingin menunjukkan bahwa $a_i = a_i$, dengan nilai eigen a_i memenuhi $\hat{A}g_i = a_i g_i$; fungsi g_i adalah fungsi-fungsi eigennya.

Untuk memasukkan nilai eigen a_i ke dalam (7.18), kita menuliskan (7.18) untuk kasus khusus $f_m = g_i$ dan $f_n = g_i$:

$$\int g_i \ \hat{A} g_i d\tau = \int g_i (\hat{A} g_i) \ d\tau.$$

Dengan menggunakan $\hat{A} g_i = a_i g_i$, diperoleh

$$a_i \int g_i \ g_i d\tau = \int g_i (a_i g_i) \ d\tau = a_i \int g_i g_i \ d\tau,$$

atau

$$(a_i - a_i \ ) \int |g_i|^2 d\tau = 0 \tag{7.19}$$

Karena integran $|g_i|^2$ tidak pernah negatif, satu-satunya cara integral dalam (7.19) bernilai nol adalah apabila g_i bernilai nol untuk semua nilai koordinat. Namun, atas dasar fisik, kita selalu menolak $g_i = 0$ sebagai fungsi eigen. Oleh sebab itu, integral dalam (7.19) tidak mungkin nol. Dengan demikian, $(a_i - a_i \ ) = 0$, sehingga $a_i = a_i$. Kita telah membuktikan:

Teorema 1. Nilai eigen suatu operator Hermitian adalah bilangan real.

Untuk membantu membiasakan diri dengan notasi braket, kita mengulangi pembuktian Teorema 1 dengan notasi tersebut. Kita mulai dengan menetapkan $m = i$ dan $n = i$ dalam (7.13), sehingga diperoleh $\langle i|\hat{A}|i\rangle = \langle i|\hat{A}|i\rangle$. Pilih fungsi berindeks i sebagai fungsi eigen $\hat{A}$ dan gunakan persamaan nilai eigen $\hat{A} g_i = a_i g_i$. Maka $\langle i|a_i|i\rangle = \langle i|a_i|i\rangle$. Oleh karena itu, $a_i \langle i|i\rangle = a_i \ \langle i|i\rangle \ = a_i \ \langle i \vee i\rangle$, dan $(a_i - a_i \ )\langle i \vee i\rangle = 0$. Jadi, $a_i = a_i$; dalam langkah ini digunakan (7.4) dengan $m = n$.

Kita telah menunjukkan bahwa dua fungsi eigen energi kotak partikel yang berbeda, ψ_i dan ψ_j, saling ortogonal, yang berarti $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i \ \psi_j dx = 0$ untuk $i \neq j$ [Pers. (2.26)]. Dua fungsi f_1 dan f_2 dari himpunan koordinat yang sama dikatakan **ortogonal** apabila

$$\int f_1 \ f_2 d\tau = 0 \tag{7.20}$$

di mana integral tersebut adalah integral tentu pada seluruh rentang koordinat. Sekarang kita membuktikan teorema umum bahwa fungsi-fungsi eigen operator Hermitian bersifat, atau dapat dipilih agar, saling ortogonal. Diberikan

$$\hat{B} F = sF, \hat{B} G = tG \tag{7.21}$$

di mana F dan G adalah dua fungsi eigen yang bebas linear dari operator Hermitian $\hat{B}$. Kita ingin membuktikan bahwa

$$\int F \ \ G d\tau \equiv \langle F \vee G\rangle = 0.$$

Kita mulai dengan Pers. (7.12), yang menyatakan sifat Hermitian $\hat{B}$:

$$\langle F|\hat{B}|G\rangle = \langle G|\hat{B}|F\rangle \ .$$

Dengan menggunakan (7.21), diperoleh

$$\langle F|t|G\rangle = \langle G|s|F\rangle \ ,$$
$$t\langle F|G\rangle = s \ \ \langle G|F\rangle \ .$$

Karena nilai eigen operator Hermitian adalah real (Teorema 1), kita mempunyai $s \quad = s$. Dengan menggunakan $\langle G|F\rangle \quad = \langle F|G\rangle$ [Pers. (7.4)], diperoleh

$$t\langle F|G\rangle = s\langle F|G\rangle,$$
$$(t-s)\langle F \vee G\rangle = 0.$$

Apabila $s \neq t$, maka

$$\langle F \vee G\rangle = 0 \tag{7.22}$$

Kita telah membuktikan bahwa dua fungsi eigen suatu operator Hermitian yang berkaitan dengan nilai eigen berbeda saling ortogonal. Pertanyaan berikutnya adalah: dapatkah ada dua fungsi eigen bebas yang memiliki nilai eigen yang sama? Jawabannya adalah ya. Dalam kasus degenerasi, satu nilai eigen yang sama dimiliki oleh lebih dari satu fungsi eigen bebas. Karena itu, kita hanya dapat memastikan bahwa dua fungsi eigen bebas suatu operator Hermitian saling ortogonal apabila keduanya tidak berkaitan dengan nilai eigen yang terdegenerasi. Sekarang kita menunjukkan bahwa dalam kasus degenerasi, kita dapat membentuk fungsi-fungsi eigen yang saling ortogonal. Kita akan menggunakan teorema yang dibuktikan dalam Bagian 3.6, yaitu bahwa setiap kombinasi linear fungsi-fungsi eigen yang berkaitan dengan nilai eigen terdegenerasi merupakan fungsi eigen dengan nilai eigen yang sama. Misalkan F dan G adalah fungsi eigen bebas yang mempunyai nilai eigen yang sama:

$$\hat{B}F = sF, \hat{B}G = sG.$$

Kita mengambil kombinasi linear F dan G untuk membentuk dua fungsi eigen baru g_1 dan g_2 yang saling ortogonal. Kita memilih

$$g_1 \equiv F, g_2 \equiv G + cF,$$

di mana konstanta c akan dipilih untuk menjamin ortogonalitas. Kita menghendaki

$$\int g_1 \; g_2 d\tau = 0,$$
$$\int F \quad (G + cF)d\tau = \int F \quad Gd\tau + c\int F \quad Fd\tau = 0.$$

Dengan demikian, jika dipilih

$$c = \frac{-\int F \quad Gd\tau}{\int F \quad Fd\tau} \tag{7.23}$$

kita memperoleh dua fungsi eigen ortogonal g_1 dan g_2 yang berkaitan dengan nilai eigen terdegenerasi tersebut. Prosedur ini (disebut ortogonalisasi Schmidt atau Gram-Schmidt) dapat diperluas ke kasus degenerasi lipat- n untuk menghasilkan n fungsi eigen bebas linear yang saling ortogonal dan berkaitan dengan nilai eigen terdegenerasi tersebut.

Dengan demikian, walaupun tidak ada jaminan bahwa fungsi-fungsi eigen dari nilai eigen terdegenerasi saling ortogonal, kita selalu dapat memilihnya agar ortogonal, apabila diinginkan, dengan menggunakan metode Schmidt atau metode ortogonalisasi lainnya. Bahkan, kecuali dinyatakan lain, kita akan selalu menganggap bahwa fungsi-fungsi eigen telah dipilih saling ortogonal:

$$\int g_i \; g_k d\tau = 0, i \neq k \tag{7.24}$$

di mana g_i dan g_k adalah fungsi eigen bebas dari suatu operator Hermitian. Kita telah membuktikan:

Teorema 2. Dua fungsi eigen dari operator Hermitian $\hat{B}$ yang berkaitan dengan nilai eigen berbeda saling ortogonal. Fungsi-fungsi eigen $\hat{B}$ yang termasuk dalam satu nilai eigen terdegenerasi selalu dapat dipilih agar saling ortogonal.

Suatu fungsi eigen biasanya dapat dikalikan dengan suatu konstanta untuk menormalisasikannya. Kecuali dinyatakan lain, kita akan menganggap semua fungsi eigen telah dinormalisasi:

$$\int g_i \; g_i d\tau = 1 \tag{7.25}$$

Pengecualian terjadi apabila nilai-nilai eigen membentuk suatu kontinum, bukan suatu himpunan nilai diskret. Dalam kasus ini, fungsi-fungsi eigennya tidak terintegralkan kuadrat. Contohnya adalah fungsi eigen momentum linear, fungsi eigen energi partikel bebas, dan fungsi eigen energi kontinum atom hidrogen.

Dengan menggunakan delta Kronecker, yang didefinisikan oleh $\delta_{ik} \equiv 1$ apabila $i = k$ dan $\delta_{ik} \equiv 0$ apabila $i \neq k$ [Pers. (2.28)], kita dapat menggabungkan (7.24) dan (7.25) menjadi satu persamaan:

$$\int g_i \; g_k d\tau = \langle i \vee k \rangle = \delta_{ik} \tag{7.26}$$

di mana g_i dan g_k adalah fungsi-fungsi eigen dari suatu operator Hermitian.

Sebagai contoh, tinjau harmonik sferis. Kita akan membuktikan bahwa

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} [Y_l^m(\theta, \phi)] \quad Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) sin\theta d\theta d\phi = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \tag{7.27}$$

Faktor $sin\theta$ berasal dari elemen volume dalam koordinat sferis, (5.78). Harmonik sferis merupakan fungsi eigen operator Hermitian $\hat{L}^2$ [Pers. (5.104)]. Karena fungsi eigen operator Hermitian yang termasuk pada nilai eigen berbeda bersifat ortogonal, kita menyimpulkan bahwa integral dalam (7.27) bernilai nol kecuali jika $l = l'$. Demikian pula, karena fungsi Y_l^m merupakan fungsi eigen $\hat{L}_z$ [Pers. (5.105)], kita menyimpulkan bahwa integral dalam (7.27) bernilai nol kecuali jika $m = m'$. Selain itu, konstanta pengali dalam Y_l^m [Pers. (5.147) pada Soal 5.34] telah dipilih sedemikian rupa sehingga harmonik sferis ternormalisasi [Pers. (6.117)]. Oleh karena itu, (7.27) berlaku.

Integral $\langle f | \hat{B} | g \rangle$ dapat disederhanakan apabila f atau g merupakan fungsi eigen operator Hermitian $\hat{B}$. Jika $\hat{B}g = cg$, dengan c suatu konstanta, maka

$$\langle f | \hat{B} | g \rangle = \langle f | \hat{B} g \rangle = \langle f | cg \rangle = c \langle f \vee g \rangle.$$

Jika $\hat{B}f = kf$, dengan k suatu konstanta, maka penggunaan sifat Hermitian $\hat{B}$ memberikan

$$\langle f | \hat{B} | g \rangle = \langle g | \hat{B} | f \rangle \quad = \langle g | \hat{B} f \rangle \quad = \langle g | kf \rangle \quad = k \;\; \langle g | f \rangle \quad = k \langle f | g \rangle,$$

karena nilai eigen k adalah real. Hubungan $\langle f|\hat{B}|g\rangle = k\langle f \vee g\rangle$ menunjukkan bahwa operator Hermitian $\hat{B}$ dapat bekerja ke arah kiri dalam $\langle f|\hat{B}|g\rangle$.

Garis besar pembuktian prinsip ketidakpastian diberikan dalam Soal 7.60.

7.3 Penguraian dalam Fungsi-Fungsi Eigen

Dalam bagian sebelumnya, kita membuktikan ortogonalitas fungsi-fungsi eigen suatu operator Hermitian. Sekarang kita membahas sifat penting lainnya dari fungsi-fungsi tersebut. Sifat ini memungkinkan kita menguraikan suatu fungsi sembarang yang berperilaku baik dalam fungsi-fungsi eigen tersebut.

Kita telah menggunakan penguraian deret Taylor (Soal 4.1) untuk menyatakan suatu fungsi sebagai kombinasi linear pangkat-pangkat bulat taknegatif dari $(x-a)$. Dapatkah suatu fungsi diuraikan sebagai kombinasi linear dari suatu himpunan fungsi selain $1, (x-a), (x-a)^2, \ldots$? Jawabannya adalah ya, sebagaimana pertama kali ditunjukkan oleh Fourier pada tahun 1807. Deret Fourier adalah penguraian suatu fungsi sebagai kombinasi linear dari tak berhingga banyak fungsi sinus dan kosinus. Kita tidak akan membahas deret Fourier secara terperinci, tetapi hanya akan meninjau satu contoh.

Penguraian Fungsi Menggunakan Fungsi Gelombang Kotak Partikel

Tinjau penguraian suatu fungsi dalam fungsi-fungsi gelombang keadaan stasioner kotak partikel, yaitu [Pers. (2.23)]

$$\psi_n = \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right), n = 1,2,3, \ldots \tag{7.28}$$

untuk x antara 0 dan l. Sejauh mana kita dapat merepresentasikan fungsi sembarang $f(x)$ pada interval $0 \le x \le l$ dengan deret berbentuk

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n = \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \, sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right), 0 \le x \le l \tag{7.29}$$

Dengan menyubstitusikan $x = 0$ dan $x = l$ ke dalam (7.29), diperoleh persyaratan $f(0) = 0$ dan $f(l) = 0$. Dengan kata lain, $f(x)$ harus memenuhi syarat batas yang sama dengan fungsi-fungsi ψ_n. Kita juga akan menganggap bahwa $f(x)$ berhingga, bernilai tunggal, dan kontinu, tetapi tidak harus dapat didiferensialkan. Dengan anggapan-anggapan ini, dapat ditunjukkan bahwa penguraian (7.29) berlaku. Kita tidak akan membuktikan (7.29), melainkan hanya akan mengilustrasikan penggunaannya untuk merepresentasikan suatu fungsi.

Sebelum dapat menerapkan (7.29) pada suatu $f(x)$ tertentu, kita harus menurunkan ungkapan untuk koefisien penguraian a_n. Kita mulai dengan mengalikan (7.29) dengan ψ_m:

$$\psi_m f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_m \psi_n = \frac{2}{l} \sum_{n=1}^{\infty} a_n \, sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) \tag{7.30}$$

Sekarang kita mengintegralkan persamaan ini dari 0 sampai l. Dengan menganggap bahwa pertukaran urutan integrasi dan penjumlahan tak berhingga sah, kita memperoleh

$$\int_0^l \psi_m \, f(x)dx = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_0^l \psi_m \, \psi_n dx$$

$$\frac{2}{l}\sum_{n=1}^{\infty} a_n \int_0^l sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) sin\left(\frac{m\pi x}{l}\right) dx.$$

Kita telah membuktikan ortonormalitas fungsi-fungsi gelombang kotak partikel [Pers. (2.27)]. Oleh karena itu, persamaan terakhir menjadi

$$\int_0^l \psi_m \, f(x)dx = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \, \delta_{mn} \tag{7.31}$$

Jenis penjumlahan dalam (7.31) sering muncul. Jika dituliskan secara terperinci, diperoleh

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n \, \delta_{mn} = a_1\delta_{m,1} + a_2\delta_{m,2} + \cdots + a_m\delta_{m,m} + a_{m+1}\delta_{m,m+1} + \cdots$$

$$0 + 0 + \cdots + a_m + 0 + \cdots,$$

sehingga

$$\sum_{n=1}^{\infty} a_n \, \delta_{mn} = a_m \tag{7.32}$$

Jadi, karena δ_{mn} bernilai nol kecuali ketika indeks penjumlahan n sama dengan m, semua suku kecuali satu lenyap, dan (7.31) menjadi

$$a_m = \int_0^l \psi_m \, f(x)dx \tag{7.33}$$

yang merupakan ungkapan yang diinginkan untuk koefisien penguraian.

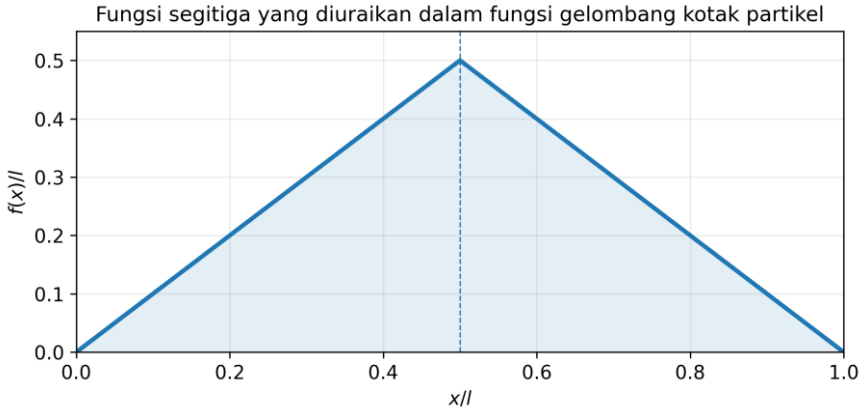
Dengan mengganti m menjadi n dalam (7.33) dan menyubstitusikannya ke dalam (7.29), diperoleh

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \left[\int_0^l \psi_n \; f(x)dx\right] \psi_n(x) \tag{7.34}$$

Inilah ungkapan yang diinginkan untuk menguraikan fungsi sembarang yang berperilaku baik $f(x)$, dengan $0 \leq x \leq l$, sebagai kombinasi linear fungsi-fungsi gelombang kotak partikel ψ_n. Perhatikan bahwa integral tentu $\int_0^l \psi_n \; f(x)dx$ merupakan suatu bilangan, bukan fungsi dari x.

Sekarang kita menggunakan (7.29) untuk merepresentasikan suatu fungsi tertentu, yaitu fungsi pada Gambar 7.1, yang didefinisikan oleh

$$f(x) = \begin{cases} x, & 0 \leq x \leq 1/2 \, l, \\ l - x, & 1/2 \, l \leq x \leq l. \end{cases} \tag{7.35}$$



Gambar 7.1. *Fungsi yang diuraikan dalam fungsi-fungsi kotak partikel. Ilustrasi digambar ulang berdasarkan definisi pada Persamaan (7.35).*

Untuk menentukan koefisien penguraian a_n, kita menyubstitusikan (7.28) dan (7.35) ke dalam (7.33):

$$a_n = \int_0^l \psi_n \; f(x)dx = \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} \int_0^l sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) f(x)dx,$$

$$a_n = \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} \int_0^{l/2} x \, sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx + \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} \int_{l/2}^{l} (l-x) \, sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx.$$

Dengan menggunakan integral Lampiran (A.1), diperoleh

$$a_n = \frac{(2l)^{3/2}}{n^2\pi^2} sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \tag{7.36}$$

Dengan menggunakan (7.36) dalam penguraian (7.29), kita memperoleh—karena $sin(n\pi/2)$ sama dengan nol untuk n genap dan sama dengan $+1$ atau -1 untuk n ganjil—

$$f(x) = \frac{4l}{\pi^2}\left[sin\left(\frac{\pi x}{l}\right) - \frac{1}{3^2} sin\left(\frac{3\pi x}{l}\right) + \frac{1}{5^2} sin\left(\frac{5\pi x}{l}\right) - \cdots\right],$$

atau

$$f(x) = \frac{4l}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{(2n-1)^2} sin\left[\frac{(2n-1)\pi x}{l}\right] \tag{7.37}$$

di mana $f(x)$ diberikan oleh (7.35). Mari kita periksa (7.37) pada $x = l/2$. Kita memperoleh

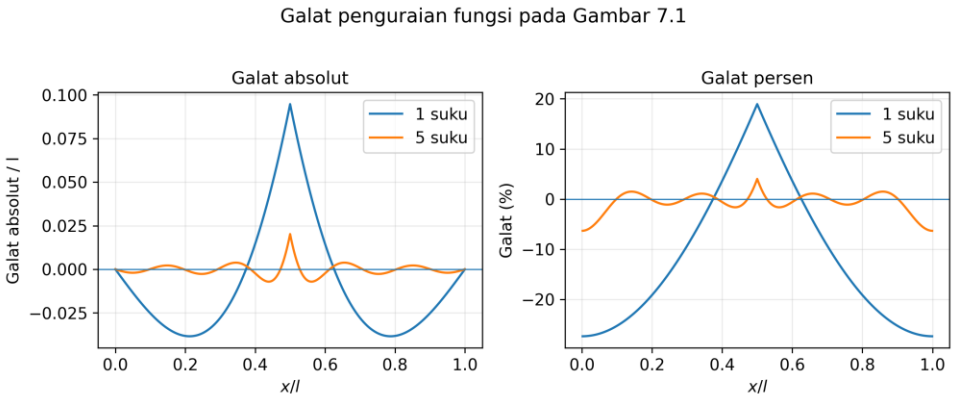
$$f\left(\frac{l}{2}\right) = \frac{4l}{\pi^2}\left(1 + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} + \frac{1}{7^2} + \cdots\right) \tag{7.38}$$

Dengan mentabulasikan ruas kanan (7.38) sebagai fungsi dari banyaknya suku yang diambil dalam deret tak berhingga, diperoleh:

Banyak suku	**1**	**2**	**3**	**4**	**5**	**20**	**100**
Ruas kanan (7.38)	$0{,}405l$	$0{,}450l$	$0{,}467l$	$0{,}475l$	$0{,}480l$	$0{,}495l$	$0{,}499l$

Jika jumlah suku dibuat tak berhingga, deret tersebut seharusnya berjumlah $l/2$, yaitu nilai $f(l/2)$. Dengan menganggap deret tersebut sah, kita memperoleh hasil menarik bahwa jumlah tak berhingga di dalam tanda kurung pada (7.38) sama dengan $\pi^2/8$. Gambar 7.2 memplot $f(x) - \sum_{n=1}^{k} a_n \psi_n$, dengan f, a_n, dan ψ_n

masing-masing diberikan oleh (7.35), (7.36), dan (7.28), untuk $k = 1$ dan $k = 5$. Ketika k, yaitu banyaknya suku dalam penguraian, bertambah, deret semakin mendekati $f(x)$ dan selisih antara f dan deret menuju nol.



Gambar 7.2. *Galat absolut dan galat persen dalam penguraian fungsi pada Gambar 7.1 untuk satu dan lima suku. Ilustrasi dihitung dan digambar ulang dari Persamaan (7.28), (7.35), dan (7.36).*

Penguraian Fungsi dalam Fungsi-Fungsi Eigen

Kita telah melihat satu contoh penguraian fungsi dalam suatu himpunan fungsi, yaitu fungsi-fungsi eigen energi kotak partikel. Banyak himpunan fungsi yang berbeda dapat digunakan untuk menguraikan suatu fungsi sembarang. Himpunan fungsi $g_1, g_2, \ldots, g_i, \ldots$ disebut **himpunan lengkap** apabila setiap fungsi f yang berperilaku baik dan memenuhi syarat batas yang sama dengan fungsi-fungsi g_i dapat diuraikan sebagai kombinasi linear dari fungsi-fungsi g_i menurut

$$f = \sum_i a_i \, g_i \tag{7.39}$$

di mana a_i adalah konstanta. Tentu saja dipahami bahwa f dan semua g_i merupakan fungsi dari himpunan variabel yang sama. Batas penjumlahan dalam (7.39) dihilangkan. Dipahami bahwa penjumlahan tersebut dilakukan terhadap semua anggota himpunan lengkap. Berdasarkan teorema-teorema analisis Fourier, yang tidak kita buktikan di sini, fungsi-fungsi eigen energi kotak partikel dapat ditunjukkan membentuk suatu himpunan lengkap.

Sekarang kita mempostulatkan bahwa himpunan fungsi eigen setiap operator Hermitian yang merepresentasikan suatu besaran fisik merupakan himpunan lengkap. Kelengkapan fungsi-fungsi eigen dapat dibuktikan dalam banyak kasus, tetapi harus dipostulatkan untuk kasus umum. Jadi, setiap fungsi yang berperilaku baik dan memenuhi syarat batas yang sama dengan himpunan fungsi eigen tersebut dapat diuraikan menurut (7.39). Persamaan (7.29) merupakan contoh dari (7.39).

Fungsi gelombang osilator harmonik diberikan oleh polinomial Hermite H_v dikalikan faktor eksponensial [Pers. (4.86) pada Soal 4.21c]. Berdasarkan postulat penguraian, setiap fungsi $f(x)$ yang berperilaku baik dapat diuraikan sebagai kombinasi linear fungsi-fungsi eigen energi osilator harmonik:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \, (2^n n!)^{-1/2} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} H_n\left(\alpha^{1/2} x\right) e^{-\alpha x^2/2}.$$

Bagaimana jika fungsi-fungsi gelombang keadaan terikat atom hidrogen digunakan untuk menguraikan suatu fungsi sembarang $f(r, \theta, \phi)$? Jawabannya adalah fungsi-fungsi tersebut tidak membentuk himpunan lengkap, sehingga kita tidak dapat menguraikan f hanya dengan menggunakannya. Untuk memperoleh himpunan lengkap, kita harus menggunakan semua fungsi eigen dari suatu operator Hermitian tertentu. Selain fungsi eigen keadaan terikat Hamiltonian atom hidrogen, terdapat fungsi eigen kontinum yang berkaitan dengan keadaan terionisasi. Jika fungsi eigen kontinum disertakan bersama fungsi eigen keadaan terikat, kita memperoleh himpunan lengkap. Untuk kotak partikel dan osilator harmonik, tidak terdapat fungsi kontinum. Persamaan (7.39) menyiratkan integrasi terhadap fungsi eigen kontinum apabila fungsi-fungsi tersebut ada. Jadi, apabila $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ adalah fungsi gelombang keadaan terikat atom hidrogen dan $\psi_{Elm}(r, \theta, \phi)$ adalah fungsi eigen kontinum, maka (7.39) menjadi

$$f(r, \theta, \phi) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{l} a_{nlm} \, \psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$$
$$+ \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \int_0^{\infty} a_{lm}(E) \psi_{Elm}(r, \theta, \phi) dE.$$

Sebagai contoh lain, tinjau fungsi eigen $\hat{p}_x$ [Pers. (3.36)]:

$$g_k = e^{ikx/\hbar}, -\infty < k < \infty.$$

Di sini semua nilai eigen bersifat kontinu, dan penguraian fungsi eigen (7.39) untuk fungsi sembarang f menjadi

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} a(k) e^{ikx/\hbar} dk.$$

Pembaca yang memiliki latar belakang matematika yang baik mungkin mengenali bahwa integral ini sangat mirip dengan transformasi Fourier dari $a(k)$.

Sekarang kita menghitung koefisien penguraian dalam $f = \sum_i a_i \, g_i$ [Pers. (7.39)], dengan g_i merupakan himpunan lengkap fungsi eigen suatu operator Hermitian. Prosedurnya sama dengan yang digunakan untuk menurunkan (7.33). Kita mengalikan $f = \sum_i a_i \, g_i$ dengan g_k dan mengintegralkan pada seluruh ruang:

$$g_k \, f = \sum_i a_i \, g_k \, g_i,$$

$$\int g_k \, f d\tau = \sum_i a_i \int g_k \, g_i d\tau = \sum_i a_i \, \delta_{ik} = a_k.$$

Dengan demikian,

$$a_k = \int g_k \, f d\tau \tag{7.40}$$

Dalam penurunan ini digunakan ortonormalitas fungsi-fungsi eigen operator Hermitian, $\int g_k\, g_i d\tau = \delta_{ik}$ [Pers. (7.26)]. Prosedur yang menghasilkan (7.40) akan sering digunakan dan patut diingat. Substitusi (7.40) untuk a_i ke dalam $f = \sum_i a_i\, g_i$ memberikan

$$f = \sum_i \left[\int g_i\ f d\tau\right] g_i = \sum_i \langle g_i \vee f \rangle g_i \tag{7.41}$$

Contoh

Misalkan $F(x) = x(l - x)$ untuk $0 \leq x \leq l$ dan $F(x) = 0$ di tempat lain. Uraikan F dalam fungsi-fungsi eigen energi kotak partikel $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$ untuk $0 \leq x \leq l$.

Kita mulai dengan mencatat bahwa $F(0) = 0$ dan $F(l) = 0$, sehingga F memenuhi syarat batas yang sama dengan ψ_n dan dapat diuraikan dengan menggunakan ψ_n. Penguraiannya adalah $F = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n$, dengan $a_n = \int \psi_n\, F d\tau$ [Pers. (7.39) dan (7.40)]. Jadi,

$$a_n = \int \psi_n\, F d\tau = \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} \int_0^l sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) x(l - x) dx = \frac{2^{3/2} l^{5/2}}{n^3 \pi^3} [1 - (-1)^n].$$

Rincian evaluasi integral diserahkan sebagai soal (Soal 7.18). Penguraian $F = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n$ adalah

$$x(l - x) = \frac{4l^2}{\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1 - (-1)^n}{n^3} sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right), 0 \leq x \leq l.$$

Latihan. Misalkan $G(x) = 1$ untuk $0 \leq x \leq l$ dan $G(x) = 0$ di tempat lain. Uraikan G dalam fungsi-fungsi eigen energi kotak partikel. Karena G tidak bernilai nol pada 0 dan l, penguraian tidak akan merepresentasikan G pada kedua titik tersebut, tetapi akan merepresentasikan G di tempat lain. Gunakan tujuh suku taknol pertama dari penguraian untuk menghitung G pada $x = l/4$. Ulangi dengan menggunakan 70 suku taknol pertama; gunakan kalkulator yang dapat diprogram. Jawaban: 0,1219 dan 0,9977.

Teorema yang bermanfaat berikut ini berlaku:

Teorema 3. Misalkan fungsi-fungsi $g_1, g_2, \ldots$ merupakan himpunan lengkap fungsi eigen operator Hermitian $\hat{A}$, dan fungsi F merupakan fungsi eigen $\hat{A}$ dengan nilai eigen k, yaitu $\hat{A}F = kF$. Jika F diuraikan sebagai $F = \sum_i a_i\, g_i$, satu-satunya koefisien a_i yang tidak nol adalah koefisien yang fungsi g_i-nya memiliki nilai eigen k. Karena degenerasi, beberapa g_i dapat memiliki nilai eigen k yang sama.

Jadi, dalam penguraian F, kita hanya menyertakan fungsi-fungsi eigen yang mempunyai nilai eigen sama dengan F. Pembuktian Teorema 3 langsung mengikuti dari $a_k = \int g_k\, F d\tau$ [Pers. (7.40)]. Jika F dan g_k berkaitan dengan nilai eigen berbeda dari operator Hermitian $\hat{A}$, keduanya akan ortogonal [Pers. (7.22)] dan a_k akan lenyap.

Kita sesekali akan menggunakan suatu notasi yang disebut **notasi ket**, di mana fungsi f dinyatakan dengan simbol $f\rangle$. Pada tahap ini mungkin notasi tersebut tampak tidak memberikan keuntungan, tetapi dalam formulasi mekanika kuantum yang lebih lanjut notasi itu memiliki makna khusus. Dalam notasi ket, Pers. (7.41) berbunyi

$$|f\rangle = \sum_i \quad |g_i\rangle\langle g_i|f\rangle = \sum_i \quad |i\rangle\langle i \vee f\rangle \tag{7.42}$$

Notasi ket dapat digunakan secara ringkas untuk menetapkan fungsi eigen dengan mencantumkan nilai-nilai eigennya. Sebagai contoh, fungsi gelombang atom hidrogen dengan bilangan kuantum n, l, m dinyatakan sebagai $\psi_{nlm} = nlm\rangle$.

Isi Bagian 7.2 dan 7.3 dapat diringkas dengan pernyataan bahwa fungsi-fungsi eigen suatu operator Hermitian membentuk himpunan lengkap dan ortonormal, sedangkan nilai-nilai eigennya bersifat real.

7.4 Fungsi Eigen Operator-Operator yang Saling Komut

Jika fungsi keadaan Ψ secara bersamaan merupakan fungsi eigen dari dua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ dengan nilai eigen masing-masing a_j dan b_j, maka pengukuran sifat fisik A akan menghasilkan a_j, sedangkan pengukuran B akan menghasilkan b_j. Jadi, sifat A dan B mempunyai nilai tertentu ketika Ψ secara bersamaan merupakan fungsi eigen $\hat{A}$ dan $\hat{B}$.

Dalam Bagian 5.1 telah dikemukakan beberapa pernyataan mengenai fungsi eigen bersama dari dua operator. Sekarang kita membuktikan pernyataan-pernyataan tersebut.

Pertama, kita menunjukkan bahwa apabila terdapat suatu himpunan lengkap fungsi eigen bersama bagi dua operator linear, kedua operator itu saling komut. Misalkan $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ adalah dua operator linear yang mempunyai himpunan lengkap fungsi eigen bersama $g_1, g_2, \ldots$:

$$\hat{A}g_i = a_i g_i, \hat{B}g_i = b_i g_i \tag{7.43}$$

di mana a_i dan b_i adalah nilai eigennya. Kita harus membuktikan bahwa

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{0} \tag{7.44}$$

Persamaan (7.44) adalah persamaan operator. Agar dua operator sama, hasil kerja masing-masing operator pada fungsi sembarang f yang berperilaku baik harus sama. Karena itu, kita harus menunjukkan bahwa

$$\left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right)f = \hat{0}f = 0,$$

di mana f adalah fungsi sembarang. Kita memulai pembuktian dengan menguraikan f, dengan anggapan bahwa f memenuhi syarat batas yang tepat, dalam himpunan lengkap fungsi eigen g_i:

$$f = \sum_i c_i \, g_i.$$

Dengan mengoperasikan $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ pada kedua ruas persamaan terakhir, diperoleh

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})f = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\sum_i c_i\, g_i.$$

Karena hasil kali $\hat{A}\hat{B}$ dan $\hat{B}\hat{A}$ merupakan operator linear (Soal 3.16), kita mempunyai

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})f = \sum_i c_i\,(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})g_i = \sum_i c_i\,[\hat{A}(\hat{B}g_i) - \hat{B}(\hat{A}g_i)],$$

dengan menggunakan definisi penjumlahan dan perkalian operator. Pemakaian persamaan nilai eigen (7.43) memberikan

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})f = \sum_i c_i\,[\hat{A}(b_i g_i) - \hat{B}(a_i g_i)] = \sum_i c_i\,(b_i a_i g_i - a_i b_i g_i) = 0.$$

Pembuktian ini menghasilkan:

Teorema 4. Jika operator linear $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ mempunyai suatu himpunan lengkap fungsi eigen bersama, maka $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ saling komut.

Kadang-kadang dinyatakan secara keliru bahwa apabila terdapat sebuah fungsi eigen bersama bagi $\hat{A}$ dan $\hat{B}$, kedua operator tersebut pasti saling komut. Contoh yang menunjukkan bahwa pernyataan ini salah adalah harmonik sferis Y_0^0, yang merupakan fungsi eigen bagi $\hat{L}_z$ dan $\hat{L}_x$, walaupun kedua operator tersebut tidak saling komut (Bagian 5.3). Penting untuk memeriksa apa yang disebut sebagai "pembuktian" bagi pernyataan keliru tersebut. Misalkan g adalah fungsi eigen bersama: $\hat{A}g = ag$ dan $\hat{B}g = bg$. Kita mempunyai

$$\hat{A}\hat{B}g = \hat{A}(bg) = abg, \hat{B}\hat{A}g = \hat{B}(ag) = bag = abg,$$

sehingga

$$\hat{A}\hat{B}g = \hat{B}\hat{A}g \tag{7.45}$$

"Pembuktian" tersebut kemudian diselesaikan dengan mencoret g dari kedua ruas (7.45) untuk memperoleh

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}(?) \tag{7.46}$$

Kesalahan terjadi pada langkah dari (7.45) menuju (7.46). Fakta bahwa dua operator $\hat{A}\hat{B}$ dan $\hat{B}\hat{A}$ memberikan hasil yang sama ketika bekerja pada satu fungsi g tidak cukup untuk menyimpulkan bahwa $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Sebagai contoh, d/dx dan $d^2/d\,x^2$ memberikan hasil yang sama ketika bekerja pada e^x, tetapi jelas d/dx tidak sama dengan $d^2/d\,x^2$. Kedua operator harus memberikan hasil yang sama ketika bekerja pada setiap fungsi yang berperilaku baik sebelum kita dapat menyimpulkan bahwa keduanya sama. Jadi, walaupun $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ tidak saling komut, satu atau beberapa fungsi eigen bersama dari keduanya mungkin tetap ada. Namun, seperti telah dibuktikan sebelumnya dalam bagian ini, dua operator yang tidak saling komut tidak mungkin mempunyai suatu himpunan lengkap fungsi eigen bersama.

Kita telah menunjukkan bahwa apabila terdapat himpunan lengkap fungsi eigen bersama dari operator linear $\hat{A}$ dan $\hat{B}$, kedua operator tersebut saling komut. Sekarang kita membuktikan:

Teorema 5. Jika operator Hermitian $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ saling komut, kita dapat memilih suatu himpunan lengkap fungsi eigen bersama bagi keduanya.

Pembuktiannya sebagai berikut. Misalkan fungsi g_i dan bilangan a_i merupakan fungsi eigen dan nilai eigen $\hat{A}$:

$$\hat{A}g_i = a_i g_i.$$

Dengan mengoperasikan $\hat{B}$ pada kedua ruas persamaan ini, diperoleh

$$\hat{B}\hat{A}g_i = \hat{B}(a_i g_i).$$

Karena $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ saling komut dan $\hat{B}$ bersifat linear, kita mempunyai

$$\hat{A}(\hat{B}g_i) = a_i(\hat{B}g_i) \tag{7.47}$$

Persamaan ini menyatakan bahwa fungsi $\hat{B}g_i$ merupakan fungsi eigen operator $\hat{A}$ dengan nilai eigen a_i yang sama seperti fungsi eigen g_i. Misalkan nilai-nilai eigen $\hat{A}$ tidak terdegenerasi, sehingga untuk setiap nilai eigen tertentu a_i hanya ada satu fungsi eigen bebas linear. Jika demikian, kedua fungsi eigen g_i dan $\hat{B}g_i$, yang berkaitan dengan nilai eigen a_i yang sama, harus bergantung linear; dengan kata lain, salah satu fungsi merupakan kelipatan sederhana dari yang lain:

$$\hat{B}g_i = k_i g_i \tag{7.48}$$

di mana k_i adalah konstanta. Persamaan ini menyatakan bahwa fungsi-fungsi g_i merupakan fungsi eigen $\hat{B}$, dan inilah yang hendak dibuktikan. Dalam Bagian 7.3 kita mempostulatkan bahwa fungsi-fungsi eigen setiap operator yang merepresentasikan suatu besaran fisik membentuk suatu himpunan lengkap. Jadi, fungsi-fungsi g_i membentuk himpunan lengkap.

Kita baru saja membuktikan teorema yang diinginkan untuk kasus tidak terdegenerasi. Bagaimana dengan kasus terdegenerasi? Misalkan nilai eigen a_i terdegenerasi lipat-n. Berdasarkan Pers. (7.47), kita mengetahui bahwa $\hat{B}g_i$ merupakan fungsi eigen $\hat{A}$ dengan nilai eigen a_i. Oleh karena itu, Teorema 3 dalam Bagian 7.3 menyatakan bahwa apabila fungsi $\hat{B}g_i$ diuraikan dalam himpunan lengkap fungsi eigen $\hat{A}$, semua koefisien penguraian akan bernilai nol kecuali koefisien yang fungsi eigen $\hat{A}$-nya mempunyai nilai eigen a_i. Dengan kata lain, $\hat{B}g_i$ harus merupakan kombinasi linear dari n fungsi eigen $\hat{A}$ yang bebas linear dan berkaitan dengan nilai eigen a_i:

$$\hat{B}g_i = \sum_{k=1}^{n} c_k\, g_k, \hat{A}g_k = a_i g_k \text{untuk} k = 1 \text{sampai} n \tag{7.49}$$

di mana $g_1, \ldots, g_n$ menyatakan fungsi-fungsi eigen $\hat{A}$ yang mempunyai nilai eigen terdegenerasi a_i. Persamaan (7.49) menunjukkan bahwa g_i belum tentu merupakan fungsi eigen $\hat{B}$. Akan tetapi, dengan mengambil kombinasi linear yang sesuai dari n fungsi eigen $\hat{A}$ yang bebas linear dan berkaitan dengan nilai eigen

terdegenerasi a_i, kita dapat membentuk suatu himpunan baru yang terdiri atas n fungsi eigen $\hat{A}$ yang bebas linear dan sekaligus merupakan fungsi eigen $\hat{B}$. Pembuktian pernyataan ini diberikan dalam Merzbacher, Bagian 8.5.

Jadi, apabila $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ saling komut, selalu mungkin dipilih suatu himpunan lengkap fungsi eigen bersama bagi keduanya. Sebagai contoh, tinjau atom hidrogen, yang operator $\hat{L}_z$ dan $\hat{H}$-nya telah ditunjukkan saling komut. Seandainya diinginkan, kita dapat mengambil faktor phi dalam fungsi eigen $\hat{H}$ sebagai $sinm\phi$ dan $cosm\phi$ (Bagian 6.6). Jika hal ini dilakukan, fungsi-fungsi tersebut bukan merupakan fungsi eigen $\hat{L}_z$, kecuali untuk $m = 0$. Namun, kombinasi linear

$$R(r)S(\theta)(cosm\phi + isinm\phi) = RSe^{im\phi}, m = -l, \dots, l,$$

memberikan fungsi eigen $\hat{L}_z$ yang tetap merupakan fungsi eigen $\hat{H}$ berdasarkan teorema dalam Bagian 3.6.

Perluasan pembuktian di atas untuk kasus lebih dari dua operator menunjukkan bahwa bagi suatu himpunan operator Hermitian $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots$, terdapat suatu himpunan lengkap fungsi eigen bersama jika dan hanya jika setiap operator saling komut dengan setiap operator lainnya.

Teorema yang berguna dan berkaitan dengan Teorema 5 adalah:

Teorema 6. Jika g_m dan g_n adalah fungsi eigen operator Hermitian $\hat{A}$ dengan nilai eigen berbeda, yaitu $\hat{A}g_m = a_m g_m$ dan $\hat{A}g_n = a_n g_n$ dengan $a_m \neq a_n$, dan jika operator linear $\hat{B}$ saling komut dengan $\hat{A}$, maka

$$\langle g_n | \hat{B} | g_m \rangle = 0 \text{untuk } a_n \neq a_m \tag{7.50}$$

Untuk membuktikan (7.50), kita mulai dengan

$$\langle g_n | \hat{A}\hat{B} | g_m \rangle = \langle g_n | \hat{B}\hat{A} | g_m \rangle \tag{7.51}$$

Dengan menggunakan sifat Hermitian $\hat{A}$, ruas kiri (7.51) menjadi

$$\langle g_n | \hat{A}\hat{B} | g_m \rangle = \langle g_n | \hat{A} | \hat{B} g_m \rangle = \langle \hat{B} g_m | \hat{A} | g_n \rangle \quad = \langle \hat{B} g_m | a_n | g_n \rangle$$
$$a_n \langle g_n | \hat{B} g_m \rangle = a_n \langle g_n | \hat{B} \vee g_m \rangle.$$

Ruas kanan (7.51) adalah

$$\langle g_n | \hat{B}\hat{A} | g_m \rangle = \langle g_n | \hat{B} | \hat{A} g_m \rangle = a_m \langle g_n | \hat{B} | g_m \rangle.$$

Dengan menyamakan ungkapan akhir untuk ruas kiri dan ruas kanan (7.51), diperoleh

$$a_n \langle g_n | \hat{B} | g_m \rangle = a_m \langle g_n | \hat{B} | g_m \rangle,$$
$$(a_n - a_m) \langle g_n | \hat{B} | g_m \rangle = 0.$$

Karena $a_m \neq a_n$, kita mempunyai $\langle g_n | \hat{B} | g_m \rangle = 0$, sehingga pembuktian selesai.

7.5 Paritas

Beberapa operator mekanika kuantum tidak mempunyai analog klasik. Salah satu contohnya adalah operator paritas. Ingat bahwa fungsi-fungsi gelombang osilator

harmonik dapat berupa fungsi genap atau fungsi ganjil. Kita akan menunjukkan bagaimana sifat ini berkaitan dengan operator paritas.

Operator paritas $\hat{P}$ didefinisikan melalui pengaruhnya pada suatu fungsi sembarang f:

$$\hat{P}f(x,y,z) = f(-x,-y,-z) \tag{7.52}$$

Operator paritas mengganti setiap koordinat Kartesius dengan negatifnya. Sebagai contoh,

$$\hat{P}(x^2 - ze^{ay}) = x^2 + ze^{-ay}.$$

Seperti halnya untuk setiap operator mekanika kuantum, kita tertarik pada nilai eigen c_i dan fungsi eigen g_i dari operator paritas:

$$\hat{P}g_i = c_i g_i \tag{7.53}$$

Kunci persoalannya adalah menghitung kuadrat $\hat{P}$:

$$\hat{P}^2 f(x,y,z) = \hat{P}\big[\hat{P}f(x,y,z)\big] = \hat{P}[f(-x,-y,-z)] = f(x,y,z).$$

Karena f sembarang, kita menyimpulkan bahwa $\hat{P}^2$ sama dengan operator identitas:

$$\hat{P}^2 = \hat{1} \tag{7.54}$$

Sekarang kita mengoperasikan $\hat{P}$ pada (7.53), sehingga diperoleh $\hat{P}\hat{P}g_i = \hat{P}c_i g_i$. Karena $\hat{P}$ bersifat linear (Soal 7.26), kita memperoleh $\hat{P}^2 g_i = c_i \hat{P} g_i$, yang menjadi

$$\hat{P}^2 g_i = c_i^2 g_i \tag{7.55}$$

setelah menggunakan persamaan nilai eigen (7.53). Karena $\hat{P}^2$ merupakan operator identitas, ruas kiri (7.55) hanyalah g_i, sehingga

$$g_i = c_i^2 g_i.$$

Fungsi g_i tidak mungkin bernilai nol di semua tempat; atas dasar fisik, fungsi nol selalu ditolak sebagai fungsi eigen. Karena itu, kita dapat membagi dengan g_i untuk memperoleh $c_i^2 = 1$ dan

$$c_i = \pm 1 \tag{7.56}$$

Nilai eigen $\hat{P}$ adalah $+1$ dan -1. Perhatikan bahwa penurunan ini berlaku untuk setiap operator yang kuadratnya merupakan operator identitas.

Apakah fungsi eigen g_i itu? Persamaan nilai eigen (7.53) berbunyi

$$\hat{P}g_i(x,y,z) = \pm g_i(x,y,z),$$
$$g_i(-x,-y,-z) = \pm g_i(x,y,z).$$

Jika nilai eigennya $+1$, maka $g_i(-x,-y,-z) = g_i(x,y,z)$ dan g_i merupakan fungsi genap. Jika nilai eigennya -1, maka g_i merupakan fungsi ganjil: $g_i(-x,-y,-z) = -g_i(x,y,z)$. Dengan demikian, fungsi-fungsi eigen operator paritas $\hat{P}$ adalah semua fungsi genap dan ganjil yang berperilaku baik.

Apabila operator paritas saling komut dengan operator Hamiltonian $\hat{H}$, kita dapat memilih suatu himpunan fungsi eigen bersama bagi kedua operator tersebut,

sebagaimana dibuktikan dalam Bagian 7.4. Fungsi-fungsi eigen $\hat{H}$ adalah fungsi gelombang keadaan stasioner ψ_i. Jadi, apabila

$$\left[\hat{P}, \hat{H}\right] = 0 \tag{7.57}$$

fungsi gelombang ψ_i dapat dipilih sebagai fungsi eigen $\hat{P}$. Kita baru saja membuktikan bahwa fungsi eigen $\hat{P}$ bersifat genap atau ganjil. Karena itu, apabila (7.57) berlaku, setiap fungsi gelombang dapat dipilih sebagai fungsi genap atau fungsi ganjil. Sekarang kita mencari syarat kapan operator paritas dan Hamiltonian saling komut.

Untuk sistem satu partikel, kita mempunyai

$$\left[\hat{H}, \hat{P}\right] = \left[\hat{T}, \hat{P}\right] + \left[\hat{V}, \hat{P}\right]$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \hat{P}\right] + \left[\frac{\partial^2}{\partial y^2}, \hat{P}\right] + \left[\frac{\partial^2}{\partial z^2}, \hat{P}\right]\right) + \left[\hat{V}, \hat{P}\right].$$

Karena

$$\hat{P}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x,y,z)\right] = \frac{\partial}{\partial(-x)}\frac{\partial}{\partial(-x)} f(-x,-y,-z)$$
$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} f(-x,-y,-z) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}\hat{P} f(x,y,z),$$

di mana f adalah fungsi sembarang, kita menyimpulkan bahwa

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}, \hat{P}\right] = 0.$$

Persamaan serupa berlaku bagi koordinat y dan z, sehingga $\left[\hat{H}, \hat{P}\right]$ menjadi

$$\left[\hat{H}, \hat{P}\right] = \left[\hat{V}, \hat{P}\right] \tag{7.58}$$

Sekarang,

$$\hat{P}[V(x,y,z)f(x,y,z)] = V(-x,-y,-z)f(-x,-y,-z) \tag{7.59}$$

Jika energi potensial merupakan fungsi genap, yaitu $V(-x,-y,-z) = V(x,y,z)$, maka (7.59) menjadi

$$\hat{P}[V(x,y,z)f(x,y,z)] = V(x,y,z)f(-x,-y,-z) = V(x,y,z)\hat{P}f(x,y,z),$$

sehingga $\left[\hat{V}, \hat{P}\right] = 0$. Jadi, apabila energi potensial merupakan fungsi genap, operator paritas saling komut dengan Hamiltonian:

$$\left[\hat{H}, \hat{P}\right] = 0 \text{jika } V \text{ genap} \tag{7.60}$$

Hasil-hasil ini mudah diperluas ke kasus n partikel. Untuk sistem n partikel, operator paritas didefinisikan oleh

$$\hat{P}f(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) = f(-x_1, -y_1, -z_1, \dots, -x_n, -y_n, -z_n) \tag{7.61}$$

Mudah dilihat bahwa (7.57) berlaku apabila

$$V(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) = V(-x_1, -y_1, -z_1, \dots, -x_n, -y_n, -z_n) \tag{7.62}$$

Jika V memenuhi persamaan ini, V disebut fungsi genap dari $3n$ koordinat. Sebagai rangkuman, kita memperoleh:

Teorema 7. Apabila energi potensial V merupakan fungsi genap, fungsi-fungsi gelombang keadaan stasioner dapat dipilih sehingga setiap ψ_i merupakan fungsi genap atau fungsi ganjil.

Fungsi yang bersifat genap atau ganjil disebut mempunyai **paritas tertentu**.

Jika semua tingkat energi tidak terdegenerasi, seperti biasanya berlaku dalam persoalan satu dimensi, hanya ada satu fungsi gelombang bebas yang berkaitan dengan setiap nilai eigen energi, sehingga tidak terdapat kebebasan pemilihan fungsi gelombang selain konstanta pengali sembarang. Karena itu, untuk kasus tidak terdegenerasi, fungsi-fungsi gelombang keadaan stasioner harus mempunyai paritas tertentu apabila V merupakan fungsi genap. Sebagai contoh, osilator harmonik satu dimensi mempunyai $V = 1/2\, kx^2$, yang merupakan fungsi genap, dan fungsi-fungsi gelombangnya mempunyai paritas tertentu.

Fungsi energi potensial atom hidrogen bersifat genap, dan orbital-orbital serupa hidrogen dapat dipilih agar mempunyai paritas tertentu (Soal 7.22 dan 7.29).

Dalam kasus terdegenerasi, kita mempunyai kebebasan memilih fungsi gelombang karena kombinasi linear sembarang dari fungsi-fungsi yang berkaitan dengan tingkat terdegenerasi merupakan fungsi eigen $\hat{H}$. Untuk suatu tingkat energi terdegenerasi, dengan mengambil kombinasi linear yang tepat kita dapat memilih fungsi-fungsi gelombang yang mempunyai paritas tertentu, tetapi tidak ada keharusan bahwa fungsi-fungsi tersebut harus mempunyai paritas tertentu.

Paritas membantu evaluasi integral. Kita telah menunjukkan bahwa $\int_{-\infty}^{\infty} f\,(x)dx = 0$ ketika $f(x)$ merupakan fungsi ganjil [Pers. (4.51)]. Sekarang kita memperluas hasil ini ke kasus $3n$ dimensi. Fungsi ganjil dari $3n$ variabel memenuhi

$$g(-x_1, -y_1, -z_1, \dots, -x_n, -y_n, -z_n) = -g(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) \quad (7.63)$$

Jika g adalah fungsi ganjil dari $3n$ variabel tersebut, maka

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} g\,(x_1, \dots, z_n)dx_1 \cdots dz_n = 0 \quad (7.64)$$

di mana integrasi dilakukan terhadap seluruh $3n$ koordinat. Persamaan ini berlaku karena kontribusi terhadap integral dari nilai g pada $(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n)$ ditiadakan oleh kontribusi dari $(-x_1, -y_1, -z_1, \dots, -x_n, -y_n, -z_n)$. Persamaan (7.64) juga berlaku apabila integrannya merupakan fungsi ganjil terhadap sebagian variabel, tidak harus terhadap semuanya. Lihat Soal 7.30.

7.6 Pengukuran dan Superposisi Keadaan

Mekanika kuantum dapat dipandang sebagai suatu skema untuk menghitung probabilitas berbagai kemungkinan hasil pengukuran. Sebagai contoh, jika kita mengetahui fungsi keadaan $\Psi(x,t)$, probabilitas bahwa pengukuran posisi partikel pada waktu t menghasilkan nilai antara x dan $x + dx$ diberikan oleh $|\Psi(x,t)|^2 dx$. Sekarang kita meninjau pengukuran sifat umum B. Tujuannya adalah mengetahui bagaimana menggunakan Ψ untuk menghitung probabilitas

setiap kemungkinan hasil pengukuran B. Hasil-hasil dalam bagian ini, yang menjelaskan informasi apa yang terkandung dalam fungsi keadaan Ψ, merupakan inti mekanika kuantum.

Kita akan membahas sistem n partikel dan menggunakan q untuk melambangkan $3n$ koordinat. Kita telah mempostulatkan bahwa nilai eigen b_i dari operator $\hat{B}$ merupakan satu-satunya hasil yang mungkin dari pengukuran sifat B. Dengan menggunakan g_i untuk fungsi eigen $\hat{B}$, kita mempunyai

$$\hat{B}g_i(q) = b_i g_i(q) \tag{7.65}$$

Dalam Bagian 7.3 kita mempostulatkan bahwa fungsi-fungsi eigen setiap operator Hermitian yang merepresentasikan sifat yang dapat diamati secara fisik membentuk suatu himpunan lengkap. Karena fungsi-fungsi g_i membentuk himpunan lengkap, fungsi keadaan Ψ dapat diuraikan sebagai

$$\Psi(q,t) = \sum_i c_i\,(t) g_i(q) \tag{7.66}$$

Agar perubahan Ψ terhadap waktu dapat diakomodasi, koefisien penguraian c_i berubah terhadap waktu.

Karena $|\Psi|^2$ merupakan kerapatan probabilitas, kita mensyaratkan

$$\int \Psi \;\; \Psi d\tau = 1 \tag{7.67}$$

Dengan menyubstitusikan (7.66) ke dalam syarat normalisasi dan menggunakan (1.33) serta (1.32), diperoleh

$$1 = \int \left(\sum_i c_i \;\; g_i \;\right)\left(\sum_k c_k\, g_k\right) d\tau = \int \; \sum_i \sum_k c_i \;\; c_k g_i \;\; g_k d\tau \tag{7.68}$$

Karena indeks penjumlahan dalam kedua penjumlahan pada (7.68) tidak harus mempunyai nilai yang sama, simbol yang berbeda harus digunakan untuk kedua indeks semu tersebut. Sebagai contoh, tinjau hasil kali dua penjumlahan berikut:

$$\sum_{i=1}^{2} s_i \sum_{i=1}^{2} t_i = (s_1 + s_2)(t_1 + t_2) = s_1 t_1 + s_1 t_2 + s_2 t_1 + s_2 t_2.$$

Jika kita secara ceroboh menuliskan

$$\sum_{i=1}^{2} s_i \sum_{i=1}^{2} t_i = \sum_{i=1}^{2}\sum_{i=1}^{2} s_i\, t_i = 2(s_1 t_1 + s_2 t_2)\backslash(\text{salah}\backslash),$$

kita memperoleh jawaban yang salah. Cara yang benar untuk menuliskan hasil kali tersebut adalah

$$\sum_{i=1}^{2} s_i \sum_{k=1}^{2} t_k = \sum_{i=1}^{2}\sum_{k=1}^{2} s_i\, t_k = \sum_{i=1}^{2} (s_i t_1 + s_i t_2) = s_1 t_1 + s_1 t_2 + s_2 t_1 + s_2 t_2,$$

yang memberikan jawaban benar.

Dengan menganggap pertukaran antara penjumlahan tak berhingga dan integrasi dalam (7.68) sah, kita mempunyai

$$\sum_i \sum_k c_i \;\; c_k \int g_i \;\; g_k d\tau = 1.$$

Karena $\hat{B}$ bersifat Hermitian, fungsi-fungsi eigennya g_i ortonormal [Pers. (7.26)]; karena itu,

$$\sum_i \sum_k c_i \ \ c_k \delta_{ik} = 1,$$

dan

$$\sum_i |c_i|^2 = 1 \tag{7.69}$$

Makna penting (7.69) akan segera dijelaskan.

Ingat postulat pada Bagian 3.7 bahwa apabila Ψ adalah fungsi keadaan ternormalisasi suatu sistem, nilai rata-rata sifat B adalah

$$\langle B \rangle = \int \Psi \ \ (q,t) \hat{B} \Psi(q,t) d\tau.$$

Dengan menggunakan penguraian (7.66) dalam ungkapan nilai rata-rata, diperoleh

$$\langle B \rangle = \int \left(\sum_i c_i \ \ g_i \ \right) \hat{B} \left(\sum_k c_k \, g_k \right) d\tau = \sum_i \sum_k c_i \ \ c_k \int g_i \ \ \hat{B} g_k d\tau,$$

di mana linearitas $\hat{B}$ digunakan. Penggunaan $\hat{B} g_k = b_k g_k$ [Pers. (7.65)] memberikan

$$\langle B \rangle = \sum_i \sum_k c_i \ \ c_k b_k \int g_i \ \ g_k d\tau = \sum_i \sum_k c_i \ \ c_k b_k \delta_{ik},$$

sehingga

$$\langle B \rangle = \sum_i |c_i|^2 \, b_i \tag{7.70}$$

Bagaimana kita menafsirkan (7.70)? Dalam Bagian 3.3 kita mempostulatkan bahwa nilai eigen suatu operator merupakan satu-satunya bilangan yang dapat diperoleh ketika kita mengukur sifat yang direpresentasikan operator tersebut. Dalam setiap pengukuran B, kita memperoleh salah satu nilai b_i, dengan anggapan tidak terdapat kesalahan eksperimen. Sekarang ingat Pers. (3.81):

$$\langle B \rangle = \sum_{b_i} P \, (b_i) b_i \tag{7.71}$$

di mana $P(b_i)$ adalah probabilitas memperoleh b_i dalam pengukuran B. Penjumlahan dalam (7.71) dilakukan terhadap nilai-nilai eigen berbeda b_i, sedangkan penjumlahan dalam (7.70) dilakukan terhadap fungsi-fungsi eigen berbeda g_i karena penguraian (7.66) dilakukan terhadap fungsi-fungsi g_i. Jika hanya ada satu fungsi eigen bebas untuk setiap nilai eigen, penjumlahan terhadap fungsi eigen sama dengan penjumlahan terhadap nilai eigen. Perbandingan (7.71) dan (7.70) menunjukkan bahwa apabila tidak terdapat degenerasi pada nilai eigen $\hat{B}$, $|c_i|^2$ adalah probabilitas memperoleh nilai b_i dalam pengukuran sifat B. Perhatikan bahwa nilai-nilai $|c_i|^2$ berjumlah 1, sebagaimana seharusnya bagi probabilitas [Pers. (7.69)].

Misalkan nilai eigen b_i terdegenerasi. Berdasarkan (7.71), $P(b_i)$ diberikan oleh besaran yang mengalikan b_i. Dalam keadaan degenerasi, lebih dari satu suku dalam (7.70) mengandung b_i. Oleh karena itu, probabilitas $P(b_i)$ untuk memperoleh b_i dalam suatu pengukuran ditentukan dengan menjumlahkan nilai-

nilai $|c_i|^2$ bagi fungsi-fungsi eigen yang mempunyai nilai eigen sama b_i. Kita telah membuktikan:

Teorema 8. Jika b_m adalah nilai eigen tak terdegenerasi dari operator $\hat{B}$ dan g_m adalah fungsi eigen ternormalisasi yang bersesuaian, $\hat{B}g_m = b_m g_m$, maka ketika sifat B diukur dalam suatu sistem mekanika kuantum yang fungsi keadaannya pada waktu pengukuran adalah Ψ, probabilitas memperoleh hasil b_m diberikan oleh $|c_m|^2$, dengan c_m merupakan koefisien g_m dalam penguraian $\Psi = \sum_i c_i\, g_i$. Jika nilai eigen b_m terdegenerasi, probabilitas memperoleh b_m ketika B diukur ditentukan dengan menjumlahkan nilai-nilai $|c_i|^2$ untuk fungsi-fungsi eigen yang nilai eigennya adalah b_m.

Kapan hasil pengukuran B dapat diprediksi dengan pasti? Hal ini dapat dilakukan jika semua koefisien dalam penguraian $\Psi = \sum_i c_i\, g_i$ bernilai nol kecuali satu: $c_i = 0$ untuk semua $i \neq k$ dan $c_k \neq 0$. Dalam kasus ini, Pers. (7.69) memberikan $|c_k|^2 = 1$, sehingga kita pasti memperoleh hasil b_k. Dalam kasus tersebut, fungsi keadaan $\Psi = \sum_i c_i\, g_i$ diberikan oleh $\Psi = g_k$, selain kemungkinan faktor fase yang tidak berpengaruh. Ketika Ψ merupakan fungsi eigen $\hat{B}$ dengan nilai eigen b_k, kita pasti memperoleh nilai b_k ketika mengukur B.

Dengan demikian, penguraian $\Psi = \sum_i c_i\, g_i$ [Pers. (7.66)] dapat dipandang sebagai pernyataan keadaan umum Ψ sebagai **superposisi** keadaan-keadaan eigen g_i dari operator $\hat{B}$. Setiap keadaan eigen g_i berkaitan dengan nilai b_i bagi sifat B. Derajat kemunculan setiap fungsi eigen g_i dalam penguraian Ψ, yang diukur oleh $|c_i|^2$, menentukan probabilitas memperoleh nilai b_i dalam pengukuran B.

Bagaimana menghitung koefisien penguraian c_i agar probabilitas $|c_i|^2$ dapat diperoleh? Kita mengalikan $\Psi = \sum_i c_i\, g_i$ dengan g_j , mengintegralkan pada seluruh ruang, dan menggunakan ortonormalitas fungsi-fungsi eigen operator Hermitian $\hat{B}$:

$$\int g_j\ \Psi d\tau = \sum_i c_i \int g_j\ g_i d\tau = \sum_i c_i\, \delta_{ij}.$$

Dengan demikian,

$$c_j = \int g_j\ \Psi d\tau = \langle g_j \vee \Psi \rangle \tag{7.72}$$

Probabilitas memperoleh nilai eigen tak terdegenerasi b_j dalam pengukuran B adalah

$$\left|c_j\right|^2 = \left|\int g_j\ \Psi d\tau\right|^2 = \left|\langle g_j|\Psi\rangle\right|^2 \tag{7.73}$$

di mana $\hat{B}g_j = b_j g_j$. Besaran $\langle g_j \vee \Psi \rangle$ disebut **amplitudo probabilitas**.

Jadi, apabila kita mengetahui keadaan sistem yang ditentukan oleh fungsi keadaan Ψ, kita dapat menggunakan (7.73) untuk memprediksi probabilitas berbagai kemungkinan hasil pengukuran sifat apa pun B. Penentuan fungsi eigen g_j dan nilai eigen b_j dari $\hat{B}$ merupakan persoalan matematika.

Untuk menentukan secara eksperimen probabilitas menemukan g_j ketika B diukur, kita mengambil sejumlah sangat besar n sistem identik yang tidak saling berinteraksi, masing-masing berada dalam keadaan yang sama Ψ, kemudian mengukur sifat B pada setiap sistem. Jika n_j dari pengukuran tersebut menghasilkan b_j, maka $P(b_j) = n_j/n = |\langle g_j|\Psi\rangle|^2$.

Bagian pertama Teorema 8 dapat dinyatakan kembali sebagai berikut:

Teorema 9. Jika sifat B diukur dalam suatu sistem mekanika kuantum yang fungsi keadaannya pada waktu pengukuran adalah Ψ, probabilitas mengamati nilai eigen tak terdegenerasi b_j dari $\hat{B}$ adalah $|\langle g_j|\Psi\rangle|^2$, dengan g_j merupakan fungsi eigen ternormalisasi yang bersesuaian dengan nilai eigen b_j.

Integral $\langle g_j \vee \Psi\rangle = \int g_j\ \Psi d\tau$ mempunyai nilai mutlak yang cukup besar apabila fungsi ternormalisasi g_j dan Ψ sangat menyerupai satu sama lain, sehingga keduanya mempunyai besar yang serupa di setiap daerah ruang. Jika g_j dan Ψ tidak menyerupai satu sama lain, pada daerah tempat g_j besar, Ψ akan kecil, dan sebaliknya. Akibatnya, hasil kali $g_j\ \Psi$ selalu kecil dan nilai mutlak integral $\int g_j\ \Psi d\tau$ akan kecil; probabilitas $|\langle g_j|\Psi\rangle|^2$ untuk memperoleh b_j juga kecil.

Contoh

Misalkan kita mengukur L_z elektron dalam atom hidrogen yang pada saat pengukuran dimulai berada dalam keadaan $2p_x$. Tentukan hasil-hasil yang mungkin dari pengukuran dan probabilitas setiap hasil. Gunakan probabilitas tersebut untuk menghitung $\langle L_z\rangle$ bagi keadaan $2p_x$.

Dari (6.118),

$$\Psi = 2p_x = 2^{-1/2}(2p_1) + 2^{-1/2}(2p_{-1}).$$

Persamaan ini merupakan penguraian Ψ sebagai kombinasi linear fungsi eigen $\hat{L}_z$. Satu-satunya koefisien taknol adalah koefisien untuk $2p_1$ dan $2p_{-1}$, yang masing-masing merupakan fungsi eigen $\hat{L}_z$ dengan nilai eigen $\hbar$ dan $-\hbar$. Ingat bahwa subskrip 1 dan -1 memberikan bilangan kuantum m, sedangkan nilai eigen $\hat{L}_z$ adalah $m\hbar$. Dengan menggunakan Teorema 8, kita mengambil kuadrat nilai mutlak koefisien dalam penguraian Ψ untuk memperoleh probabilitas. Jadi, probabilitas memperoleh $\hbar$ ketika L_z diukur adalah $\left|2^{-1/2}\right|^2 = 0{,}5$, dan probabilitas memperoleh $-\hbar$ adalah $\left|2^{-1/2}\right|^2 = 0{,}5$. Untuk menentukan $\langle L_z\rangle$ dari probabilitas, kita menggunakan Pers. (7.71):

$$\langle L_z\rangle = \sum_{L_{z,i}} P\left(L_{z,i}\right) L_{z,i} = 0{,}5\hbar + 0{,}5(-\hbar) = 0,$$

di mana $P(L_{z,i})$ adalah probabilitas mengamati nilai $L_{z,i}$ dan semua probabilitas selain dua nilai tersebut adalah nol. Tentu saja, $\langle L_z \rangle$ juga dapat dihitung dari persamaan nilai rata-rata (3.88) sebagai $\langle 2p_x | \hat{L}_z | 2p_x \rangle$.

Latihan. Tuliskan suatu fungsi gelombang atom hidrogen yang probabilitasnya memperoleh energi $n = 2$ ketika E diukur sama dengan 1, probabilitasnya memperoleh $2\hbar^2$ ketika L^2 diukur sama dengan 1, dan probabilitasnya sama besar untuk memperoleh $-\hbar$, 0, dan $\hbar$ ketika L_z diukur. Apakah hanya ada satu jawaban yang mungkin? Jawaban parsial: tidak.

Contoh

Misalkan energi E diukur untuk sebuah partikel dalam kotak yang panjangnya l, dan pada saat pengukuran partikel berada dalam keadaan tak stasioner $\Psi = 30^{1/2} l^{-5/2} x(l - x)$ untuk $0 \leq x \leq l$. Tentukan hasil-hasil pengukuran yang mungkin dan probabilitas setiap hasil tersebut.

Hasil-hasil yang mungkin diberikan oleh postulat (c) Bagian 3.9 sebagai nilai-nilai eigen operator energi $\hat{H}$. Nilai eigen Hamiltonian kotak partikel adalah $E_n = n^2 h^2/(8ml^2)$, dengan $n = 1,2,3, \ldots$, dan nilai-nilai tersebut tidak terdegenerasi. Probabilitas ditentukan dengan menguraikan Ψ dalam fungsi-fungsi eigen ψ_n dari $\hat{H}$: $\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n$, dengan $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$. Dalam contoh setelah Pers. (7.41), fungsi $x(l - x)$ diuraikan dalam fungsi-fungsi eigen energi kotak partikel. Fungsi keadaan $30^{1/2} l^{-5/2} x(l - x)$ sama dengan $x(l - x)$ dikalikan konstanta normalisasi $30^{1/2} l^{-5/2}$. Oleh karena itu, koefisien penguraian c_n diperoleh dengan mengalikan koefisien a_n pada contoh sebelumnya dengan $30^{1/2} l^{-5/2}$:

$$c_n = \frac{\sqrt{240}}{n^3 \pi^3} [1 - (-1)^n].$$

Probabilitas $P(E_n)$ untuk mengamati nilai $E_n = n^2 h^2/(8ml^2)$ sama dengan $|c_n|^2$:

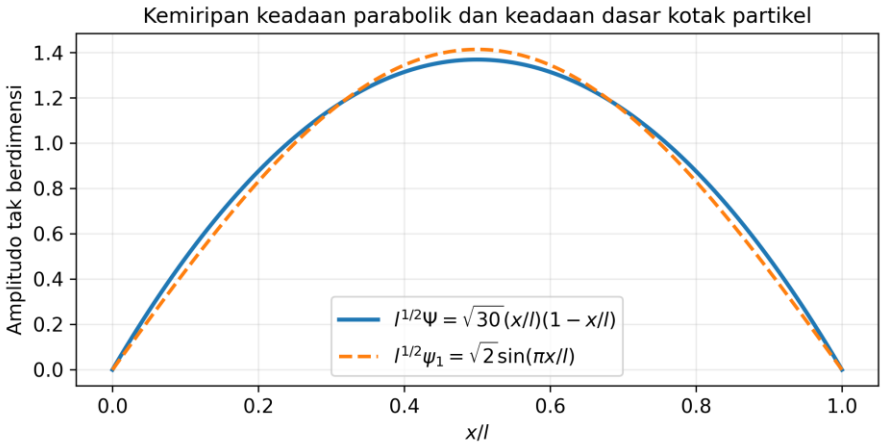
$$P(E_n) = \frac{240}{n^6 \pi^6} [1 - (-1)^n]^2 \qquad (7.74)$$

Beberapa probabilitas pertama adalah

n	1	2	3	4	5
E_n	$h^2/(8ml^2)$	$4\,h^2/(8ml^2)$	$9\,h^2/(8ml^2)$	$16\,h^2/(8ml^2)$	$25\,h^2/(8ml^2)$
$P(E_n)$	0,99855	0	0,001370	0	0,000064

Probabilitas yang sangat tinggi untuk menemukan energi $n = 1$ berkaitan dengan fakta bahwa fungsi keadaan parabolik $30^{1/2} l^{-5/2} x(l - x)$ sangat menyerupai fungsi gelombang kotak partikel $n = 1$, yaitu $(2/l)^{1/2} sin(\pi x/l)$, sebagaimana digambarkan pada Gambar 7.3. Probabilitas nol untuk $n = 2,4,6, \ldots$ disebabkan oleh kenyataan bahwa apabila titik asal ditempatkan di pusat kotak, fungsi keadaan $\Psi = 30^{1/2} l^{-5/2} x(l - x)$ merupakan fungsi genap, sedangkan fungsi-

fungsi $n = 2,4,6, \ldots$ merupakan fungsi ganjil (Gambar 2.3), sehingga tidak dapat menyumbang pada penguraian Ψ. Integral $\langle g_n \vee \Psi \rangle$ lenyap ketika integrannya merupakan fungsi ganjil.



Gambar 7.3. *Perbandingan fungsi keadaan parabolik dengan fungsi gelombang keadaan dasar kotak partikel. Ilustrasi digambar ulang dari persamaan yang dibahas dalam teks.*

Jika sifat B mempunyai rentang nilai eigen kontinu, misalnya posisi pada Bagian 7.7, penjumlahan dalam penguraian (7.66) untuk Ψ diganti dengan integrasi terhadap nilai b:

$$\Psi = \int c_b g_b(q) db \tag{7.75}$$

dan $|\langle g_b(q)|\Psi\rangle|^2$ ditafsirkan sebagai kerapatan probabilitas. Dengan kata lain, probabilitas menemukan nilai B antara b dan $b + db$ bagi sistem dalam keadaan Ψ adalah

$$|\langle g_b(q)|\Psi(q,t)\rangle|^2 db \tag{7.76}$$

7.7 Fungsi Eigen Posisi

Kita telah menurunkan fungsi eigen operator momentum linear dan momentum sudut. Sekarang kita bertanya: apakah fungsi eigen operator posisi $\hat{x}$?

Operator $\hat{x}$ adalah perkalian dengan x. Dengan menyatakan fungsi eigen posisi sebagai $g_a(x)$, kita menuliskan

$$x g_a(x) = a g_a(x) \tag{7.77}$$

di mana a melambangkan nilai-nilai eigen yang mungkin. Dari sini diperoleh

$$(x - a) g_a(x) = 0 \tag{7.78}$$

Dari (7.78) kita menyimpulkan bahwa

$$g_a(x) = 0 \text{untuk } x \neq a \tag{7.79}$$

Selain itu, karena fungsi eigen yang bernilai nol di seluruh tempat tidak dapat diterima, kita mempunyai

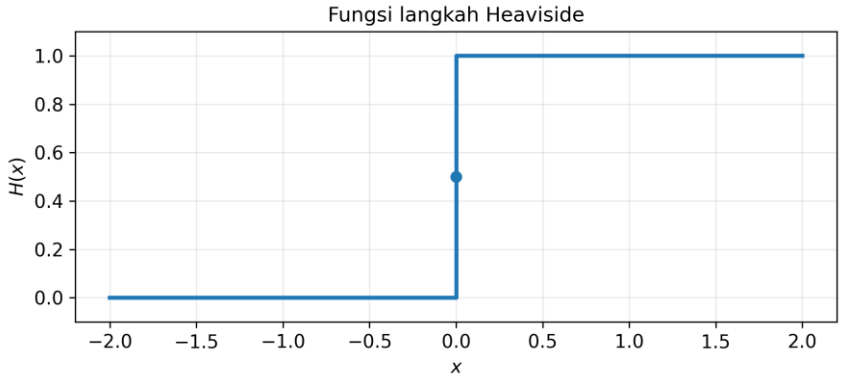
$$g_a(x) \neq 0 \text{untuk } x = a \tag{7.80}$$

Kesimpulan ini masuk akal. Jika fungsi keadaan merupakan fungsi eigen $\hat{x}$ dengan nilai eigen a, yaitu $\Psi = g_a(x)$, kita mengetahui dari Bagian 7.6 bahwa

pengukuran x pasti memberikan nilai a. Hal ini hanya mungkin apabila kerapatan probabilitas $|\Psi|^2$ bernilai nol untuk $x \neq a$, sesuai dengan (7.79).

Sebelum meninjau sifat-sifat lebih lanjut dari $g_a(x)$, kita mendefinisikan fungsi langkah Heaviside $H(x)$ dengan (lihat Gambar 7.4)

$$H(x) = \begin{cases} 1, & x > 0, \\ 0, & x < 0, \\ 1/2\,, & x = 0. \end{cases} \tag{7.81}$$



Gambar 7.4. *Fungsi langkah Heaviside. Ilustrasi digambar ulang berdasarkan Persamaan (7.81) dan (7.82).*

Selanjutnya kita mendefinisikan fungsi delta Dirac $\delta(x)$ sebagai turunan fungsi langkah Heaviside:

$$\delta(x) \equiv \frac{dH(x)}{dx} \tag{7.82}$$

Dari (7.81) dan (7.82), segera diperoleh, lihat juga Gambar 7.4,

$$\delta(x) = 0 \text{untuk}\, x \neq 0 \tag{7.83}$$

Karena $H(x)$ mengalami loncatan tiba-tiba pada $x = 0$, turunannya tidak berhingga pada titik asal:

$$\delta(x) = \infty \text{untuk}\, x = 0 \tag{7.84}$$

Kita dapat sedikit menggeneralisasi persamaan-persamaan ini dengan menetapkan $x = t - a$, kemudian mengganti simbol t dengan x. Persamaan (7.81) sampai (7.84) menjadi

$$H(x-a) = 1, x > a \tag{7.85}$$

$$H(x-a) = 0, x < a \tag{7.86}$$

$$H(x-a) = \frac{1}{2}, x = a \tag{7.87}$$

$$\delta(x-a) = \frac{dH(x-a)}{dx} \tag{7.88}$$

$$\delta(x-a) = 0 \text{untuk}\, x \neq a, \delta(x-a) = \infty \text{untuk}\, x = a \tag{7.89}$$

Sekarang tinjau integral berikut:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f\,(x)\delta(x-a)dx.$$

Kita mengevaluasinya dengan integrasi parsial:

$$\int udv = uv - \int vdu,$$
$$u = f(x), dv = \delta(x-a)dx.$$

Dengan menggunakan (7.88), kita mempunyai

$$du = f'(x)dx, v = H(x-a).$$

Jadi,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(x)H(x-a) \quad {}_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} H(x-a)f'(x)dx,$$

atau

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(\infty) - \int_{-\infty}^{\infty} H(x-a)f'(x)dx \qquad (7.90)$$

Dalam penurunan ini digunakan (7.85) dan (7.86). Karena $H(x-a)$ lenyap untuk $x < a$, (7.90) menjadi

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(\infty) - \int_{a}^{\infty} H(x-a)f'(x)dx$$

$$f(\infty) - \int_{a}^{\infty} f'(x)dx = f(\infty) - f(x) \quad {}_{a}^{\infty}.$$

Dengan demikian,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a) \qquad (7.91)$$

Dengan membandingkan (7.91) dengan persamaan $\sum_k c_k \delta_{ik} = c_i$, kita melihat bahwa fungsi delta Dirac memainkan peran dalam integral yang sama seperti peran delta Kronecker dalam penjumlahan. Kasus khusus (7.91) dengan $f(x) = 1$ adalah

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)dx = 1.$$

Sifat-sifat (7.89) dari fungsi delta Dirac sesuai dengan sifat-sifat (7.79) dan (7.80) dari fungsi eigen posisi $g_a(x)$. Oleh karena itu, untuk sementara kita menetapkan

$$g_a(x) = \delta(x-a) \qquad (7.92)$$

Untuk memverifikasi (7.92), sekarang kita menunjukkan bahwa persamaan tersebut sesuai dengan postulat Born bahwa $|\Psi(a,t)|^2 da$ adalah probabilitas mengamati nilai x antara a dan $a + da$. Menurut (7.76), probabilitas ini diberikan oleh

$$|\langle g_a(x)|\Psi(x,t)\rangle \quad {}^2 da = \left|\int_{-\infty}^{\infty} g_a \ (x)\Psi(x,t)dx\right|^2 da \qquad (7.93)$$

Dengan menggunakan (7.92), kemudian (7.91), untuk (7.93) kita memperoleh

$$\left|\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)\Psi(x,t)dx\right|^2 da = |\Psi(a,t)|^2 da,$$

yang menyelesaikan pembuktian.

Karena besaran a dalam $\delta(x-a)$ dapat mempunyai nilai real apa pun, nilai eigen $\hat{x}$ membentuk suatu kontinum: $-\infty < a < \infty$. Seperti biasa bagi fungsi eigen kontinum, $\delta(x-a)$ tidak terintegralkan kuadrat (Soal 7.43).

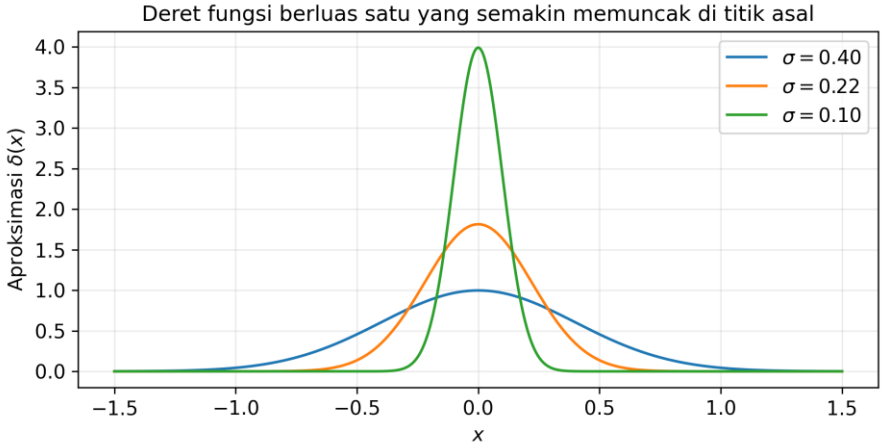
Sebagai rangkuman, fungsi eigen dan nilai eigen posisi memenuhi

$$\hat{x}\delta(x-a) = a\delta(x-a) \tag{7.94}$$

di mana a adalah bilangan real sembarang.

Fungsi delta mempunyai perilaku matematis yang tidak biasa. Akibatnya, manipulasi yang kita lakukan kurang ketat secara matematis dan dapat membuat seorang matematikawan merasa tidak nyaman. Namun, perumusan yang ketat dapat dibuat dengan memandang fungsi delta sebagai kasus limit suatu fungsi yang semakin lama semakin memuncak pada titik asal, sebagaimana pada Gambar 7.5. Fungsi delta sebenarnya bukan fungsi dalam pengertian biasa, melainkan objek yang oleh matematikawan disebut **distribusi**.

Sumber daring yang dicantumkan dalam buku sumber: https://en.wikipedia.org/wiki/Dirac_delta_function.



Gambar 7.5. *Fungsi-fungsi berluas satu yang menghampiri $\delta(x)$ dengan ketelitian yang semakin meningkat. Ilustrasi digambar ulang sebagai keluarga fungsi Gaussian ternormalisasi.*

7.8 Postulat-Postulat Mekanika Kuantum

Bagian ini merangkum postulat-postulat mekanika kuantum yang telah diperkenalkan dalam bab-bab sebelumnya.

Postulat 1. Keadaan suatu sistem dijelaskan oleh fungsi Ψ dari koordinat partikel-partikel dan waktu. Fungsi ini, yang disebut fungsi keadaan atau fungsi gelombang, memuat semua informasi yang dapat ditentukan mengenai sistem. Selanjutnya dipostulatkan bahwa Ψ bernilai tunggal, kontinu, dan terintegralkan kuadrat. Untuk keadaan kontinum, persyaratan keterintegralan kuadrat dihilangkan.

Sebutan "fungsi gelombang" untuk Ψ mungkin bukan pilihan terbaik. Gelombang fisik yang bergerak dalam ruang tiga dimensi merupakan fungsi dari tiga koordinat ruang dan waktu. Namun, untuk sistem n partikel, fungsi Ψ merupakan fungsi dari $3n$ koordinat ruang dan waktu. Karena itu, untuk sistem banyak partikel kita tidak dapat menafsirkan Ψ sebagai suatu gelombang fisik. Fungsi keadaan paling baik dipandang sebagai fungsi yang memungkinkan kita

menghitung berbagai sifat sistem. Hakikat informasi yang terkandung dalam Ψ merupakan pokok Postulat 5 dan konsekuensi-konsekuensinya.

Postulat 2. Setiap sifat yang dapat diamati secara fisik bersesuaian dengan suatu operator linear Hermitian. Untuk menentukan operator ini, tuliskan ungkapan mekanika klasik bagi besaran teramati tersebut dalam koordinat Kartesius dan komponen momentum linear yang bersesuaian, kemudian gantilah setiap koordinat x dengan operator $\hat{x}$ dan setiap komponen momentum p_x dengan operator $-i\hbar\,\partial/\partial\,x$.

Dalam Bagian 7.2 kita melihat bahwa pembatasan pada operator Hermitian berasal dari persyaratan bahwa nilai rata-rata besaran fisik harus berupa bilangan real. Persyaratan linearitas berkaitan erat dengan superposisi keadaan yang dibahas dalam Bagian 7.6. Dalam penurunan (7.70) untuk nilai rata-rata sifat B bagi keadaan yang diuraikan sebagai superposisi fungsi-fungsi eigen $\hat{B}$, linearitas $\hat{B}$ memainkan peran utama.

Apabila besaran klasik memuat hasil kali suatu koordinat Kartesius dan momentum konjugatnya, kita menghadapi persoalan ketidakkomutan dalam membangun operator mekanika kuantum yang benar. Beberapa aturan berbeda telah diusulkan untuk menangani kasus ini. Lihat J. R. Shewell, *American Journal of Physics*, 27, 16 (1959); E. H. Kerner dan W. G. Sutcliffe, *Journal of Mathematical Physics*, 11, 391 (1970); A. de Souza Dutra, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 39, 203 (2006), https://arxiv.org/abs/0705.3247.

Proses menentukan operator mekanika kuantum dalam koordinat non-Kartesius bersifat rumit. Lihat K. Simon, *American Journal of Physics*, 33, 60 (1965); G. R. Gruber, *Foundations of Physics*, 1, 227 (1971).

Postulat 3. Satu-satunya nilai yang mungkin dihasilkan oleh pengukuran sifat fisik teramati B adalah nilai eigen b_i dalam persamaan $\hat{B}g_i = b_i g_i$, dengan $\hat{B}$ merupakan operator yang bersesuaian dengan sifat B. Fungsi eigen g_i disyaratkan berperilaku baik.

Perhatian utama kita adalah tingkat energi atom dan molekul. Tingkat-tingkat tersebut diberikan oleh nilai eigen operator energi, yaitu Hamiltonian $\hat{H}$. Persamaan nilai eigen bagi $\hat{H}$, yaitu $\hat{H}\psi = E\psi$, merupakan persamaan Schrödinger tak bergantung waktu. Namun, penentuan nilai-nilai yang mungkin bagi sifat apa pun melibatkan penyelesaian suatu persamaan nilai eigen.

Postulat 4. Jika $\hat{B}$ adalah operator linear Hermitian yang merepresentasikan sifat yang dapat diamati secara fisik, fungsi-fungsi eigen g_i dari $\hat{B}$ membentuk suatu himpunan lengkap.

Terdapat operator Hermitian yang fungsi-fungsi eigennya tidak membentuk himpunan lengkap; lihat Griffiths, hlm. 99 dan 106; Messiah, hlm. 188; Ballentine, Bagian 1.3. Persyaratan kelengkapan sangat penting bagi pengembangan teori mekanika kuantum. Karena itu, perlu dipostulatkan bahwa

semua operator Hermitian yang bersesuaian dengan sifat teramati mempunyai suatu himpunan lengkap fungsi eigen. Postulat 4 memungkinkan kita menguraikan fungsi gelombang setiap keadaan sebagai superposisi fungsi-fungsi eigen ortonormal dari setiap operator mekanika kuantum:

$$\Psi = \sum_i c_i \, g_i = \sum_i |g_i\rangle\langle g_i| \, \Psi\rangle \tag{7.95}$$

Postulat 5. Jika $\Psi(q,t)$ adalah fungsi keadaan ternormalisasi suatu sistem pada waktu t, nilai rata-rata sifat fisik teramati B pada waktu t adalah

$$\langle B\rangle = \int \Psi \quad \hat{B}\Psi d\tau \tag{7.96}$$

Definisi nilai rata-rata mekanika kuantum diberikan dalam Bagian 3.7 dan tidak boleh disamakan dengan rata-rata waktu yang digunakan dalam mekanika klasik.

Dari Postulat 4 dan Postulat 5, dalam Bagian 7.6 kita menunjukkan bahwa probabilitas mengamati nilai eigen tak terdegenerasi b_i dalam pengukuran B adalah $P(b_i) = \left|\int g_i \; \Psi d\tau\right|^2 = |\langle g_i|\Psi\rangle \quad ^2$, dengan $\hat{B}g_i = b_i g_i$. Jika Ψ kebetulan merupakan salah satu fungsi eigen $\hat{B}$, yaitu $\Psi = g_k$, maka $P(b_i)$ menjadi $P(b_i) = \left|\int g_i \; g_k d\tau\right|^2 = |\delta_{ik}|^2 = \delta_{ik}$, dengan menggunakan ortonormalitas fungsi-fungsi eigen operator Hermitian $\hat{B}$. Kita pasti mengamati nilai b_k apabila $\Psi = g_k$.

Postulat 6. Perkembangan waktu keadaan suatu sistem mekanika kuantum yang tidak mengalami gangguan diberikan oleh persamaan Schrödinger bergantung waktu

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \tag{7.97}$$

di mana $\hat{H}$ adalah operator Hamiltonian, yaitu operator energi sistem.

Persamaan Schrödinger bergantung waktu merupakan persamaan diferensial orde pertama terhadap waktu. Karena itu, seperti dalam mekanika klasik, keadaan sekarang dari suatu sistem yang tidak terganggu menentukan keadaan masa depannya. Namun, berbeda dengan pengetahuan keadaan dalam mekanika klasik, pengetahuan keadaan dalam mekanika kuantum hanya melibatkan pengetahuan tentang probabilitas berbagai kemungkinan hasil pengukuran. Misalkan terdapat beberapa sistem identik yang tidak saling berinteraksi, masing-masing mempunyai fungsi keadaan sama $\Psi(t_0)$ pada waktu t_0. Jika setiap sistem dibiarkan tidak terganggu, fungsi keadaan masing-masing akan berubah sesuai (7.97). Karena setiap sistem mempunyai Hamiltonian yang sama, setiap sistem akan mempunyai fungsi keadaan sama $\Psi(t_1)$ pada waktu mendatang t_1. Akan tetapi, misalkan pada waktu t_2 kita mengukur sifat B pada setiap sistem. Walaupun setiap sistem mempunyai fungsi keadaan sama $\Psi(t_2)$ pada saat pengukuran dimulai, kita tidak akan memperoleh hasil yang sama untuk setiap sistem. Sebaliknya, kita memperoleh sebaran nilai yang mungkin b_i, dengan b_i merupakan nilai eigen $\hat{B}$. Frekuensi relatif diperolehnya setiap b_i dapat dihitung dari besaran $|c_i|^2$, dengan $\Psi(t_2) = \sum_i c_i \, g_i$ dan g_i merupakan fungsi eigen $\hat{B}$.

Jika Hamiltonian tidak bergantung pada waktu, terdapat kemungkinan keadaan dengan energi tertentu E. Untuk keadaan seperti itu, fungsi keadaan harus memenuhi

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \tag{7.98}$$

dan persamaan Schrödinger bergantung waktu menjadi

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

yang setelah diintegralkan memberikan $\Psi = Ae^{-iEt/\hbar}$, dengan A, yaitu "konstanta" integrasi, tidak bergantung pada waktu. Fungsi Ψ bergantung pada koordinat dan waktu, sehingga A merupakan suatu fungsi koordinat, yang kita nyatakan sebagai $\psi(q)$. Kita memperoleh

$$\Psi(q,t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(q) \tag{7.99}$$

untuk keadaan berenergi tetap. Fungsi $\psi(q)$ memenuhi persamaan Schrödinger tak bergantung waktu

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

yang mengikuti dari (7.98) dan (7.99). Faktor $e^{-iEt/\hbar}$ hanya menunjukkan perubahan fase fungsi gelombang $\Psi(q,t)$ terhadap waktu dan tidak mempunyai makna fisik langsung. Karena itu, pada umumnya kita menyebut $\psi(q)$ sebagai "fungsi gelombang". Operator Hamiltonian memainkan peran unik dalam mekanika kuantum karena muncul dalam persamaan dinamika fundamental, yaitu persamaan Schrödinger bergantung waktu. Keadaan eigen $\hat{H}$, yang dikenal sebagai keadaan stasioner, mempunyai sifat khusus bahwa kerapatan probabilitas $|\Psi|^2$ tidak bergantung pada waktu.

Persamaan Schrödinger bergantung waktu (7.97) dapat ditulis $\left(i\hbar\,\partial/\partial\,t - \hat{H}\right)\Psi = 0$. Karena operator $i\hbar\,\partial/\partial\,t - \hat{H}$ bersifat linear, setiap kombinasi linear penyelesaian persamaan Schrödinger bergantung waktu (7.97) juga merupakan penyelesaian (7.97). Sebagai contoh, jika Hamiltonian $\hat{H}$ tidak bergantung pada waktu, terdapat penyelesaian keadaan stasioner $\Psi_n = e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(q)$ [Pers. (7.99)] bagi persamaan Schrödinger bergantung waktu. Setiap kombinasi linear

$$\Psi = \sum_n c_n\,\Psi_n = \sum_n c_n\,e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(q) \tag{7.100}$$

di mana c_n adalah konstanta yang tidak bergantung pada waktu, merupakan penyelesaian persamaan Schrödinger bergantung waktu, walaupun bukan fungsi eigen $\hat{H}$. Karena kelengkapan fungsi-fungsi eigen ψ_n, setiap fungsi keadaan dapat dituliskan dalam bentuk (7.100) apabila $\hat{H}$ tidak bergantung pada waktu; lihat juga Bagian 9.8. Fungsi keadaan (7.100) merepresentasikan keadaan yang tidak mempunyai energi tertentu. Sebaliknya, ketika energi diukur, probabilitas memperoleh E_n adalah $\left|c_ne^{-iE_nt/\hbar}\right|^2 = |c_n|^2$.

Untuk menentukan konstanta c_n dalam (7.100), kita menuliskan (7.100) pada waktu t_0 sebagai $\Psi(q,t_0) = \sum_n c_n\, e^{-iE_n t_0/\hbar}\psi_n(q)$. Perkalian dengan $\psi_j\ (q)$ yang diikuti integrasi pada seluruh ruang memberikan

$$\langle\psi_j(q)\Big|\Psi(q,t_0)\rangle = \sum_n c_n\, e^{-iE_n t_0/\hbar}\langle\psi_j\Big|\psi_n\rangle$$

$$\sum_n c_n\, e^{-iE_n t_0/\hbar}\delta_{jn} = c_j e^{-iE_j t_0/\hbar}.$$

Jadi, $c_j = \langle\psi_j \vee \Psi(q,t_0)\rangle e^{iE_j t_0/\hbar}$ dan (7.100) menjadi

$$\Psi(q,t) = \sum_j\langle\,\psi_j(q) \vee \Psi(q,t_0)\rangle e^{-iE_j(t-t_0)/\hbar}\psi_j(q)\text{jika}$$
$$\hat{H}\ \text{tidak bergantung pada}\ t \qquad (7.101)$$

di mana $\hat{H}\psi_j = E_j\psi_j$ dan fungsi-fungsi ψ_j telah dipilih ortonormal. Persamaan (7.101) menjelaskan cara menentukan Ψ pada waktu t dari Ψ pada waktu awal t_0, dan merupakan penyelesaian umum persamaan Schrödinger bergantung waktu ketika $\hat{H}$ tidak bergantung pada t. Persamaan (7.101) juga dapat diturunkan langsung dari persamaan Schrödinger bergantung waktu; lihat Soal 7.46.

Contoh

Sebuah partikel dalam kotak satu dimensi dengan panjang l mempunyai Hamiltonian yang tidak bergantung pada waktu dan pada waktu $t = 0$ mempunyai fungsi keadaan $\Psi = 2^{-1/2}\psi_1 + 2^{-1/2}\psi_2$, dengan ψ_1 dan ψ_2 masing-masing merupakan fungsi eigen energi tak bergantung waktu kotak partikel [Pers. (2.23)] untuk $n = 1$ dan $n = 2$. (a) Tentukan kerapatan probabilitas sebagai fungsi waktu. (b) Tunjukkan bahwa $|\Psi|^2$ berosilasi dengan periode $T = 8m\,l^2/(3h)$. (c) Gunakan lembar kerja elektronik atau perangkat lunak komputasi untuk memplot $l|\Psi|^2$ terhadap x/l pada setiap waktu $jT/8$, dengan $j = 0,1,2,\ldots,8$.

(a) Karena $\hat{H}$ tidak bergantung pada waktu, Ψ pada setiap waktu berikutnya diberikan oleh (7.100) dengan $c_1 = 2^{-1/2}$, $c_2 = 2^{-1/2}$, dan semua c lainnya sama dengan nol. Karena itu,

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_1 t/\hbar}\psi_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_2 t/\hbar}\psi_2$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_1 t/\hbar}\left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} sin\left(\frac{\pi x}{l}\right) + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-iE_2 t/\hbar}\left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} sin\left(\frac{2\pi x}{l}\right).$$

Untuk kerapatan probabilitas diperoleh, lihat Soal 7.47,

$$\Psi\ \ \Psi = \tfrac{1}{2}\psi_1^2 + \tfrac{1}{2}\psi_2^2 + \psi_1\psi_2 cos[(E_2 - E_1)\,t/\hbar] \qquad (7.102)$$

(b) Bagian yang bergantung pada waktu dalam $|\Psi|^2$ adalah faktor kosinus pada (7.102). Periode T adalah waktu yang diperlukan argumen kosinus bertambah sebesar 2π, sehingga $(E_2 - E_1)\,T/\hbar = 2\pi$ dan

$$T = \frac{2\pi\hbar}{E_2 - E_1} = \frac{8ml^2}{3h},$$

karena $E_n = n^2\, h^2/(8ml^2)$.

(c) Dengan menggunakan (7.102), ungkapan untuk ψ_1 dan ψ_2, serta $T = 2\pi\,\hbar/(E_2 - E_1)$, kita memperoleh

$$l|\Psi|^2 = sin^2(\pi x_r) + sin^2(2\pi x_r) + 2sin(\pi x_r)sin(2\pi x_r)cos(2\,\pi t/T) \quad (7.103)$$

di mana $x_r \equiv x/l$. Dengan $t = jT/8$, grafik mudah diplot untuk setiap nilai j. Plot tersebut menunjukkan bahwa maksimum kerapatan probabilitas berosilasi antara sisi kiri dan sisi kanan kotak. Dengan perangkat lunak komputasi, dapat dibuat animasi $|\Psi|^2$ ketika waktu berubah, lihat Soal 7.47. Sumber daring yang dicantumkan dalam buku sumber untuk mengikuti $|\Psi|^2$ sebagai fungsi waktu pada sistem seperti partikel dalam kotak atau osilator harmonik, dengan campuran awal keadaan stasioner yang dipilih pengguna, tersedia pada https://www.falstad.com/qm1d. Campuran dipilih dengan mengklik lingkaran kecil di bagian bawah dan menyeret setiap panah yang berputar di dalam lingkaran.

Persamaan (7.100), dengan c_n konstan, merupakan penyelesaian umum persamaan Schrödinger bergantung waktu ketika $\hat{H}$ tidak bergantung pada waktu. Untuk suatu sistem yang dikenai gaya luar bergantung waktu, Hamiltonian memuat bagian yang bergantung pada waktu: $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'(t)$, dengan $\hat{H}^0$ adalah Hamiltonian sistem tanpa gaya luar dan $\hat{H}'(t)$ adalah energi potensial interaksi yang bergantung pada waktu antara sistem dan gaya luar. Dalam kasus ini, fungsi eigen keadaan stasioner tak bergantung waktu dari $\hat{H}^0$ dapat digunakan untuk menguraikan Ψ dalam persamaan seperti (7.100), kecuali bahwa sekarang c_n bergantung pada t. Contohnya adalah atom atau molekul yang terpapar medan listrik bergantung waktu dari radiasi elektromagnetik atau cahaya; lihat Bagian 9.8.

Apa yang menentukan apakah suatu sistem berada dalam keadaan stasioner seperti (7.99) atau keadaan tak stasioner seperti (7.100)? Jawabannya adalah riwayat sistem menentukan keadaannya sekarang. Sebagai contoh, jika kita mengambil sistem yang berada dalam keadaan stasioner kemudian memaparkannya pada radiasi, persamaan Schrödinger bergantung waktu menunjukkan bahwa radiasi menyebabkan keadaan berubah menjadi keadaan tak stasioner; lihat Bagian 9.8.

Pembaca mungkin bertanya mengapa postulat Born bahwa $|\Psi(x,t)|^2 dx$ adalah probabilitas menemukan partikel antara x dan $x + dx$ tidak tercantum dalam daftar postulat. Postulat ini merupakan konsekuensi Postulat 5, sebagaimana sekarang ditunjukkan. Persamaan (3.81) adalah $\langle B \rangle = \sum_b P_b\, b$, dengan P_b merupakan probabilitas mengamati nilai b dalam pengukuran sifat B yang mempunyai nilai diskret. Persamaan yang bersesuaian bagi variabel kontinu x

adalah $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} P\,(x) x dx$, dengan $P(x)$ merupakan kerapatan probabilitas untuk mengamati berbagai nilai x. Menurut Postulat 5, kita mempunyai $\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \quad \hat{x} \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 \, x dx$. Perbandingan kedua ungkapan $\langle x \rangle$ menunjukkan bahwa $|\Psi|^2$ adalah kerapatan probabilitas $P(x)$.

Bab 10 memberikan dua postulat mekanika kuantum tambahan yang membahas spin dan teorema spin-statistik.

7.9 Pengukuran dan Interpretasi Mekanika Kuantum

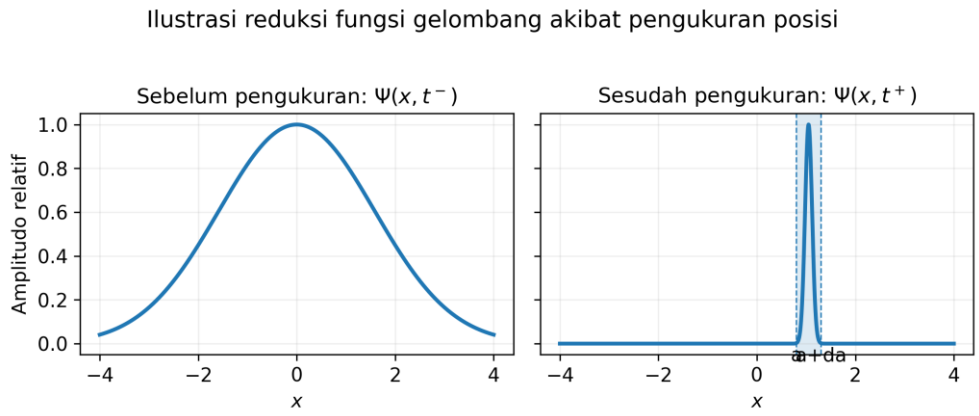
Dalam mekanika kuantum, fungsi keadaan suatu sistem berubah melalui dua cara. Lihat E. P. Wigner, *American Journal of Physics*, 31, 6 (1963). Pertama, terdapat perubahan kontinu dan kausal terhadap waktu yang diberikan oleh persamaan Schrödinger bergantung waktu (7.97). Kedua, terdapat perubahan mendadak, tidak kontinu, dan probabilistik yang terjadi ketika suatu pengukuran dilakukan pada sistem. Perubahan jenis kedua tidak dapat diprediksi dengan pasti karena hasil pengukuran tidak dapat diprediksi dengan pasti; hanya probabilitasnya, yaitu (7.73), yang dapat diprediksi. Perubahan mendadak pada Ψ yang disebabkan pengukuran disebut **reduksi** atau **kolaps fungsi gelombang**. Pengukuran sifat B yang menghasilkan b_k mengubah fungsi keadaan menjadi g_k, yaitu fungsi eigen $\hat{B}$ yang nilai eigennya b_k. Jika b_k terdegenerasi, Ψ berubah menjadi kombinasi linear fungsi-fungsi eigen yang berkaitan dengan b_k. Probabilitas menemukan nilai eigen tak terdegenerasi b_k diberikan oleh Pers. (7.73) dan Teorema 9 sebagai $|\langle g_k|\Psi\rangle|^2$. Jadi, besaran $|\langle g_k|\Psi\rangle|^2$ adalah probabilitas bahwa sistem melakukan transisi dari keadaan Ψ ke keadaan g_k ketika B diukur.

Tinjau suatu contoh. Misalkan pada waktu t kita mengukur posisi sebuah partikel. Misalkan Ψ adalah fungsi keadaan partikel sesaat sebelum pengukuran dilakukan. Selanjutnya, misalkan hasil pengukuran menunjukkan bahwa partikel ditemukan dalam daerah ruang kecil

$$a < x < a + da \tag{7.104}$$

Kita bertanya: apakah fungsi keadaan Ψ sesaat setelah pengukuran? Untuk menjawab pertanyaan ini, misalkan kita melakukan pengukuran posisi kedua pada waktu t^+.

Karena t^+ berbeda dari waktu t pengukuran pertama hanya sebesar selang infinitesimal, kita masih harus menemukan bahwa partikel terbatas pada daerah (7.104). Jika partikel berpindah sejauh jarak berhingga dalam waktu infinitesimal, kecepatannya akan tidak berhingga, yang tidak dapat diterima. Karena merupakan kerapatan probabilitas untuk menemukan berbagai nilai x, kita menyimpulkan bahwa Ψ harus bernilai nol di luar daerah (7.104) dan harus mempunyai bentuk seperti yang ditunjukkan secara skematik pada Gambar 7.6b. Jadi, pengukuran posisi pada waktu t telah mereduksi Ψ dari suatu fungsi yang tersebar di seluruh ruang menjadi fungsi yang terlokalisasi dalam daerah (7.104). Perubahan dari Ψ ke Ψ merupakan perubahan probabilistik.



Gambar 7.6. *Ilustrasi skematis reduksi fungsi gelombang akibat pengukuran posisi: (a) sebelum pengukuran dan (b) segera setelah pengukuran. Ilustrasi digambar ulang berdasarkan uraian setelah Persamaan (7.104).*

Proses pengukuran merupakan salah satu bidang paling kontroversial dalam mekanika kuantum. Bagaimana tepatnya dan pada tahap mana dalam proses pengukuran reduksi terjadi masih belum jelas. Sebagian fisikawan memandang reduksi Ψ sebagai postulat tambahan mekanika kuantum, sedangkan yang lain menyatakan bahwa reduksi merupakan teorema yang dapat diturunkan dari postulat-postulat lainnya. Sebagian fisikawan menolak gagasan reduksi; lihat M. Jammer, *The Philosophy of Quantum Mechanics*, Wiley, 1974, Bagian 11.4; L. E. Ballentine, *American Journal of Physics*, 55, 785 (1987). Ballentine mendukung interpretasi ansambel statistik Einstein terhadap mekanika kuantum. Dalam interpretasi tersebut, fungsi gelombang tidak menjelaskan keadaan satu sistem tunggal, sebagaimana dalam interpretasi ortodoks, tetapi memberikan deskripsi statistik bagi kumpulan sangat banyak sistem yang masing-masing dipersiapkan dengan cara sama, yaitu suatu ansambel. Dalam interpretasi ini, kebutuhan akan reduksi fungsi gelombang tidak muncul; lihat L. E. Ballentine, *American Journal of Physics*, 40, 1763 (1972); *Reviews of Modern Physics*, 42, 358 (1970). Terdapat banyak masalah serius pada interpretasi ansambel statistik; lihat Whitaker, hlm. 213–217; D. Home dan M. A. B. Whitaker, *Physics Reports*, 210, 223 (1992); Soal 10.4. Karena itu, interpretasi tersebut sebagian besar telah ditolak.

“Bagi mayoritas fisikawan, persoalan menemukan teori pengukuran kuantum yang konsisten dan masuk akal masih belum terselesaikan. … Keragaman pendapat yang sangat besar … mengenai pengukuran kuantum … merupakan cerminan ketidaksepakatan mendasar mengenai interpretasi mekanika kuantum secara keseluruhan.” M. Jammer, *The Philosophy of Quantum Mechanics*, hlm. 519 dan 521.

Sifat probabilistik mekanika kuantum mengusik banyak fisikawan, termasuk Einstein, de Broglie, dan Schrödinger. Para fisikawan tersebut dan yang lainnya mengusulkan bahwa mekanika kuantum mungkin tidak memberikan deskripsi lengkap mengenai realitas fisik. Hukum probabilistik mekanika kuantum mungkin hanya merupakan cerminan hukum deterministik yang bekerja pada tingkat

submekanika-kuantum dan melibatkan "variabel tersembunyi". Analogi yang diberikan fisikawan Bohm adalah gerak Brown partikel debu di udara. Partikel mengalami fluktuasi posisi acak dan geraknya tidak sepenuhnya ditentukan oleh posisi serta kecepatannya. Tentu saja, gerak Brown merupakan akibat tumbukan dengan molekul gas dan ditentukan oleh variabel yang ada pada tingkat gerak molekular. Secara analog, gerak elektron mungkin ditentukan oleh variabel tersembunyi yang berada pada tingkat submekanika-kuantum. Interpretasi ortodoks mekanika kuantum, yang sering disebut interpretasi Kopenhagen dan dikembangkan oleh Heisenberg serta Bohr, menyangkal keberadaan variabel tersembunyi dan menyatakan bahwa hukum mekanika kuantum memberikan deskripsi lengkap mengenai realitas fisik. Teori variabel tersembunyi dibahas dalam F. J. Belinfante, *A Survey of Hidden-Variables Theories*, Pergamon, 1973.

Pada tahun 1964, J. S. Bell membuktikan bahwa dalam eksperimen tertentu yang melibatkan pengukuran terhadap dua partikel yang terpisah jauh tetapi semula berada dalam daerah ruang yang sama, setiap teori variabel tersembunyi lokal yang mungkin harus memberikan prediksi yang berbeda dari prediksi mekanika kuantum; lihat Ballentine, Bab 20. Dalam teori lokal, dua sistem yang sangat berjauhan bertindak saling bebas. Hasil eksperimen tersebut sesuai dengan prediksi mekanika kuantum. Hal ini memberikan bukti sangat kuat terhadap semua teori variabel tersembunyi lokal yang deterministik, tetapi tidak menyingkirkan teori variabel tersembunyi nonlokal. Eksperimen-eksperimen ini dijelaskan dalam A. Aspect, dalam *The Wave-Particle Dualism*, S. Diner dkk., ed., Reidel, 1984, hlm. 377–390; A. Shimony, *Scientific American*, Januari 1988, hlm. 46; A. Zeilinger, *Reviews of Modern Physics*, 71, S288 (1999).

Analisis lebih lanjut oleh Bell dan yang lain menunjukkan bahwa hasil-hasil eksperimen tersebut serta prediksi mekanika kuantum tidak sesuai dengan pandangan dunia yang mempertahankan realisme dan lokalitas sekaligus. Realisme, yang juga disebut objektivitas, adalah doktrin bahwa realitas eksternal ada dan mempunyai sifat tertentu yang tidak bergantung pada apakah kita mengamati realitas tersebut. Lokalitas meniadakan aksi seketika dari kejauhan dan menyatakan bahwa setiap pengaruh dari satu sistem ke sistem lain harus merambat dengan kecepatan yang tidak melebihi kecepatan cahaya. Clauser dan Shimony menyatakan bahwa mekanika kuantum membawa pada kesimpulan yang "mengejutkan secara filosofis": kita harus "sepenuhnya meninggalkan filsafat realistis sebagian besar ilmuwan yang bekerja" atau "merevisi secara dramatis konsep ruang-waktu" untuk mengizinkan "suatu jenis aksi dari kejauhan"; lihat J. F. Clauser dan A. Shimony, *Reports on Progress in Physics*, 41, 1881 (1978); juga B. d'Espagnat, *Scientific American*, November 1979, hlm. 158; A. Aspect, *Nature*, 446, 866 (2007); S. Gröblacher dkk., *Nature*, 446, 871 (2007).

Teori kuantum memprediksi dan eksperimen mengonfirmasi bahwa ketika pengukuran dilakukan pada dua partikel yang pernah berinteraksi tetapi kini

dipisahkan oleh jarak tak terbatas, hasil pengukuran pada satu partikel bergantung pada hasil pengukuran partikel kedua dan juga bergantung pada sifat apa dari partikel kedua yang diukur. Partikel-partikel demikian dikatakan **terbelit** atau *entangled*. Untuk uraian lebih lanjut tentang keterbelitan, lihat https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_entanglement; bab 7–10 dalam J. Baggott, *Beyond Measure*, Oxford, 2004; L. Gilder, *The Age of Entanglement*, Vintage, 2009; Bagian II A. Whitaker, *The New Quantum Age*, Oxford, 2012. "Aksi menyeramkan dari kejauhan" yang seketika, menurut ungkapan Einstein, membuat seorang fisikawan berkomentar bahwa "mekanika kuantum adalah sihir", D. Greenberger sebagaimana dikutip dalam N. D. Mermin, *Physics Today*, April 1985, hlm. 38.

Hubungan antara mekanika kuantum dan pikiran telah menjadi bahan banyak spekulasi. Wigner berpendapat bahwa reduksi fungsi gelombang terjadi ketika hasil pengukuran memasuki kesadaran seorang pengamat. Karena itu, "makhluk yang mempunyai kesadaran harus memiliki peran berbeda dalam mekanika kuantum dibandingkan perangkat pengukur tak bernyawa." Ia menilai mungkin bahwa makhluk sadar mengikuti hukum alam yang berbeda dari benda mati dan mengusulkan agar ilmuwan mencari pengaruh kesadaran yang tidak biasa terhadap materi; lihat E. P. Wigner, "Remarks on the Mind-Body Question," dalam *The Scientist Speculates*, I. J. Good, ed., Capricorn, 1965, hlm. 284; *Proceedings of the American Philosophical Society*, 113, 95 (1969); *Foundations of Physics*, 1, 35 (1970).

Pada tahun 1952, David Bohm, mengikuti saran de Broglie pada tahun 1927 bahwa fungsi gelombang mungkin bertindak sebagai gelombang pemandu yang menuntun gerak partikel, merumuskan teori variabel tersembunyi nonlokal deterministik yang memprediksi hasil eksperimen sama dengan mekanika kuantum; D. Bohm, *Physical Review*, 85, 166 dan 180 (1952). Dalam teori Bohm, pada setiap saat suatu partikel mempunyai posisi dan momentum tertentu, walaupun besaran-besaran tersebut tidak dapat diamati, dan bergerak melalui lintasan tertentu. Partikel juga mempunyai fungsi gelombang Ψ yang perkembangan waktunya mengikuti persamaan Schrödinger bergantung waktu. Dalam teori Bohm, fungsi gelombang merupakan entitas fisik nyata yang menentukan gerak partikel.

Jika diberikan sebuah partikel pada posisi tertentu, dengan fungsi gelombang tertentu, pada waktu tertentu t, teori Bohm mempostulatkan suatu persamaan yang memungkinkan kita menghitung kecepatan partikel pada waktu itu dari fungsi gelombang dan posisinya. Dengan mengetahui posisi dan kecepatan pada t, kita dapat menentukan posisi pada waktu $t + dt$ dan menggunakan persamaan Schrödinger bergantung waktu untuk menentukan fungsi gelombang pada $t + dt$. Selanjutnya kecepatan pada $t + dt$ dihitung dari posisi dan fungsi gelombang pada $t + dt$, dan proses ini diteruskan. Jadi, lintasan dapat dihitung dari posisi

awal dan fungsi gelombang, dengan anggapan energi potensial diketahui. Dalam teori Bohm, posisi partikel ternyata mengikuti persamaan yang menyerupai hukum kedua Newton, $md^2x/dt^2 = -\partial V/\partial x$ [Pers. (1.8) dan (1.12)], kecuali bahwa energi potensial V diganti dengan $V + Q$, dengan Q merupakan potensial kuantum yang dihitung dengan cara tertentu dari fungsi gelombang. Dalam teori Bohm, kolaps fungsi gelombang tidak terjadi. Sebaliknya, interaksi sistem dengan alat pengukur mengikuti persamaan teori Bohm, tetapi interaksi tersebut menyebabkan sistem berevolusi setelah pengukuran dengan cara yang sama seperti jika fungsi gelombang telah dikolapskan.

Karya Bohm sebagian besar diabaikan selama bertahun-tahun, tetapi minat terhadap teorinya kemudian meningkat. Untuk penjelasan lebih lanjut mengenai teori Bohm, lihat Whitaker, Bab 7; D. Bohm dan B. J. Hiley, *The Undivided Universe*, Routledge, 1992; D. Z. Albert, *Scientific American*, Mei 1994, hlm. 58; S. Goldstein, "Bohmian Mechanics," *Stanford Encyclopedia of Philosophy*, https://plato.stanford.edu/entries/qm-bohm/; dan https://en.wikipedia.org/wiki/De_Broglie-Bohm_theory. Salah satu tokoh utama dalam novel Rebecca Goldstein *Properties of Light*, Houghton Mifflin, 2000, sebagian dimodelkan dari David Bohm.

Sebagian fisikawan berpendapat bahwa fungsi gelombang hanya merepresentasikan pengetahuan kita mengenai keadaan sistem; interpretasi epistemik ini digunakan dalam sudut pandang Kopenhagen. Sebagian lainnya berpendapat bahwa fungsi gelombang secara langsung bersesuaian dengan unsur realitas fisik, yaitu interpretasi ontik. Sebuah makalah yang diterbitkan pada tahun 2012 menggunakan sejumlah anggapan ringan untuk membuktikan hasil yang oleh para penulisnya dinilai sangat mendukung interpretasi ontik: M. F. Pusey, J. Barrett, dan T. Rudolph, *Nature Physics*, 8, 476 (2012), https://arxiv.org/abs/1111.3328. Untuk pembahasan hasil ini, yang disebut teorema PBR, lihat https://www.aps.org/units/gqi/newsletters/upload/vol6num3.pdf dan https://mattleifer.info/2011/11/20/can-the-quantum-state-be-interpreted-statistically/.

Walaupun prediksi eksperimen mekanika kuantum tidak diperdebatkan, interpretasi konseptualnya masih menjadi bahan perdebatan sengit. Bibliografi yang sangat baik beserta komentar mengenai persoalan ini adalah B. S. DeWitt dan R. N. Graham, *American Journal of Physics*, 39, 724 (1971); L. E. Ballentine, *American Journal of Physics*, 55, 785 (1987). Lihat juga B. d'Espagnat, *Conceptual Foundations of Quantum Mechanics*, edisi ke-2, Benjamin, 1976; M. Jammer, *The Philosophy of Quantum Mechanics*, Wiley, 1974; Whitaker, Bab 8; P. Yam, *Scientific American*, Juni 1997, hlm. 124. Bibliografi daring A. Cabello mengenai landasan mekanika kuantum mencantumkan dua belas interpretasi mekanika kuantum (https://arxiv.org/abs/quant-ph/0012089), sedangkan artikel

Wikipedia yang dirujuk buku sumber mencantumkan empat belas interpretasi (https://en.wikipedia.org/wiki/Interpretations_of_quantum_mechanics).

7.10 Matriks

Aljabar matriks merupakan alat matematika utama dalam perhitungan mekanika kuantum modern pada molekul. Matriks juga menyediakan cara yang praktis untuk merumuskan sebagian besar teori mekanika kuantum. Metode matriks akan digunakan dalam beberapa bab berikutnya, tetapi buku ini ditulis sedemikian rupa sehingga materi tentang matriks dapat dilewati apabila waktu tidak memungkinkan pembahasannya.

Matriks adalah susunan bilangan berbentuk persegi panjang. Bilangan-bilangan penyusun matriks disebut **elemen matriks**. Misalkan matriks A mempunyai m baris dan n kolom, dan a_{ij}, dengan $i = 1,2,\dots,m$ dan $j = 1,2,\dots,n$, menyatakan elemen pada baris i dan kolom j. Maka

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}.$$

A disebut matriks m kali n. Jangan mencampuradukkan A dengan determinan (Bagian 8.3); suatu matriks tidak harus berbentuk persegi dan tidak sama dengan satu bilangan tunggal.

Matriks baris, yang juga disebut vektor baris, adalah matriks yang hanya mempunyai satu baris. **Matriks kolom** atau vektor kolom hanya mempunyai satu kolom.

Dua matriks R dan S sama apabila keduanya mempunyai jumlah baris sama, jumlah kolom sama, dan elemen-elemen yang bersesuaian sama. Jika $R = S$, maka $r_{jk} = s_{jk}$ untuk $j = 1,\dots,m$ dan $k = 1,\dots,n$, dengan m dan n merupakan dimensi R dan S. Dengan demikian, satu persamaan matriks ekuivalen dengan mn persamaan skalar.

Jumlah dua matriks A dan B didefinisikan sebagai matriks yang dibentuk dengan menjumlahkan elemen-elemen bersesuaian dari A dan B. Jumlah tersebut hanya didefinisikan apabila A dan B mempunyai dimensi sama. Jika $P = A + B$, kita mempunyai mn persamaan skalar $p_{jk} = a_{jk} + b_{jk}$ untuk $j = 1,\dots,m$ dan $k = 1,\dots,n$.

$$\text{Jika } P = A + B, p_{jk} = a_{jk} + b_{jk} \tag{7.105}$$

Hasil kali skalar c dengan matriks A didefinisikan sebagai matriks yang dibentuk dengan mengalikan setiap elemen A dengan c.

$$\text{Jika } D = cA, d_{jk} = ca_{jk} \tag{7.106}$$

Jika A adalah matriks m kali n dan B adalah matriks n kali p, hasil kali matriks $R = AB$ didefinisikan sebagai matriks m kali p yang elemen-elemennya adalah

$$r_{jk} \equiv a_{j1}b_{1k} + a_{j2}b_{2k} + \cdots + a_{jn}b_{nk} = \sum_{i=1}^{n} a_{ji}\, b_{ik} \qquad (7.107)$$

Untuk menghitung r_{jk}, kita mengambil baris j dari A, yang elemen-elemennya $a_{j1}, a_{j2}, \ldots, a_{jn}$, mengalikan setiap elemen baris itu dengan elemen yang bersesuaian pada kolom k dari B, yang elemen-elemennya $b_{1k}, b_{2k}, \ldots, b_{nk}$, kemudian menjumlahkan n hasil kali tersebut. Sebagai contoh, misalkan

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 3 & 1/2 \\ 0 & 4 & 1 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 2 & 5 & 6 \\ -8 & 3 & 10 \end{pmatrix}.$$

Jumlah kolom A sama dengan jumlah baris B, sehingga hasil kali matriks AB terdefinisi. AB adalah hasil kali matriks 2 kali 3, yaitu A, dan matriks 3 kali 3, yaitu B, sehingga $R \equiv AB$ merupakan matriks 2 kali 3. Elemen r_{21} ditentukan dari baris kedua A dan kolom pertama B sebagai berikut: $r_{21} = 0(1) + 4(2) + 1(-8) = 0$. Perhitungan elemen-elemen lainnya memberikan

$$R = AB = \begin{pmatrix} 1 & 33/2 & 25 \\ 0 & 23 & 34 \end{pmatrix}.$$

Perkalian matriks tidak bersifat komutatif; hasil kali AB dan BA tidak harus sama. Dalam contoh sebelumnya, hasil kali BA kebetulan tidak terdefinisi. Perkalian matriks dapat ditunjukkan bersifat asosiatif, yang berarti $A(BC) = (AB)C$, dan bersifat distributif, yang berarti $A(B + C) = AB + AC$ serta $(B + C)D = BD + CD$.

Matriks dengan jumlah baris dan kolom sama disebut **matriks persegi**. Orde suatu matriks persegi sama dengan jumlah barisnya.

Jika A merupakan matriks persegi, kuadrat, pangkat tiga, dan seterusnya didefinisikan oleh $A^2 \equiv AA$, $A^3 \equiv AAA$, dan seterusnya.

Elemen $a_{11}, a_{22}, \ldots, a_{nn}$ dari matriks persegi orde n terletak pada diagonal utamanya. **Matriks diagonal** adalah matriks persegi yang setiap elemen di luar diagonal utamanya bernilai nol.

Jejak atau *trace* suatu matriks persegi adalah jumlah elemen pada diagonal utama. Jika A adalah matriks persegi orde n, jejaknya adalah $TrA = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}$.

Matriks diagonal yang setiap elemen diagonalnya sama dengan 1 disebut **matriks satuan** atau **matriks identitas**. Elemen ke-(j, k) dari matriks satuan adalah delta Kronecker δ_{jk}; $(I)_{jk} = \delta_{jk}$, dengan I merupakan matriks satuan. Sebagai contoh, matriks satuan orde 3 adalah

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Misalkan B adalah matriks persegi yang ordonya sama dengan matriks satuan I. Elemen ke-(j, k) dari hasil kali IB diberikan oleh (7.107) sebagai $(IB)_{jk} = \sum_i (I)_{ji}\, b_{ik} = \sum_i \delta_{ji}\, b_{ik} = b_{jk}$. Karena elemen ke-$(j, k)$ dari IB dan B sama bagi semua j dan k, kita mempunyai $IB = B$. Dengan cara serupa diperoleh $BI = B$. Perkalian dengan matriks satuan tidak mengubah matriks.

Matriks yang semua elemennya nol disebut **matriks nol**, dilambangkan dengan 0. Matriks taknol mempunyai sekurang-kurangnya satu elemen yang tidak sama dengan nol. Definisi ini juga berlaku bagi vektor baris dan vektor kolom.

Sebagian besar matriks dalam kimia kuantum berupa matriks persegi atau matriks baris maupun kolom.

Matriks dan Mekanika Kuantum

Dalam Bagian 7.1, integral $\int f_m \, \hat{A} f_n d\tau$ disebut elemen matriks $\hat{A}$. Sekarang kita membenarkan nama ini dengan menunjukkan bahwa integral demikian mengikuti aturan aljabar matriks.

Misalkan fungsi $f_1, f_2, \ldots$ membentuk himpunan lengkap dan ortonormal, serta simbol $\{f_i\}$ menyatakan himpunan lengkap tersebut. Bilangan $A_{mn} \equiv \langle f_m | \hat{A} | f_n \rangle \equiv \int f_m \, \hat{A} f_n d\tau$ disebut elemen matriks operator linear $\hat{A}$ dalam basis $\{f_i\}$. Matriks persegi

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle f_1 | \hat{A} | f_1 \rangle & \langle f_1 | \hat{A} | f_2 \rangle & \cdots \\ \langle f_2 | \hat{A} | f_1 \rangle & \langle f_2 | \hat{A} | f_2 \rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \tag{7.108}$$

disebut **representasi matriks** operator linear $\hat{A}$ dalam basis $\{f_i\}$. Karena $\{f_i\}$ biasanya terdiri atas jumlah fungsi tak berhingga, A merupakan matriks berorde tak berhingga.

Tinjau penjumlahan integral elemen matriks. Misalkan $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$. Elemen matriks umum $\hat{C}$ dalam basis $\{f_i\}$ adalah

$$C_{mn} = \langle f_m | \hat{C} | f_n \rangle = \langle f_m | \hat{A} + \hat{B} | f_n \rangle$$

$$\int f_m \left(\hat{A} + \hat{B}\right) f_n d\tau = \int f_m \, \hat{A} f_n d\tau + \int f_m \, \hat{B} f_n d\tau = A_{mn} + B_{mn}.$$

Jadi, apabila $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$, maka $C_{mn} = A_{mn} + B_{mn}$, yang merupakan aturan (7.105) untuk penjumlahan matriks. Dengan demikian, apabila $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$, maka $C = A + B$, dengan A, B, C merupakan representasi matriks operator $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$.

Dengan cara serupa, jika $\hat{P} = c\hat{S}$, dengan c suatu konstanta, kita memperoleh, lihat Soal 7.52, $P_{jk} = cS_{jk}$, yang merupakan aturan perkalian matriks dengan skalar.

Terakhir, misalkan $\hat{R} = \hat{S}\hat{T}$. Kita mempunyai

$$R_{mn} = \int f_m \, \hat{R} f_n d\tau = \int f_m \, \hat{S}\hat{T} f_n d\tau \tag{7.109}$$

Fungsi $\hat{T} f_n$ dapat diuraikan dalam himpunan lengkap ortonormal $\{f_i\}$ sebagai [Pers. (7.41)]

$$\hat{T} f_n = \sum_i c_i f_i = \sum_i \langle f_i \left| \hat{T} f_n \right\rangle f_i = \sum_i \langle f_i \left| \hat{T} \vee f_n \right\rangle f_i = \sum_i T \quad f_i.$$

Dengan demikian, R_{mn} menjadi

$$R_{mn} = \int f_m \hat{S} \sum_i T \quad f_i d\tau = \sum_i \left(\int f_m \hat{S} f_i d\tau \right) T \quad ,$$

sehingga

$$R_{mn} = \sum_i S_{mi} T \tag{7.110}$$

Persamaan $R_{mn} = \sum_i S_{mi} T$ adalah aturan (7.107) untuk perkalian matriks. Jadi, jika $\hat{R} = \hat{S}\hat{T}$, maka $R = ST$.

Kita telah membuktikan bahwa representasi matriks operator linear dalam suatu himpunan basis lengkap ortonormal mengikuti persamaan yang sama dengan yang diikuti oleh operatornya. Dengan menggabungkan Pers. (7.109) dan (7.110), kita memperoleh aturan penjumlahan yang berguna

$$\sum_i \langle m|\hat{S}|i\rangle\langle i|\hat{T}|n\rangle = \langle m|\hat{S}\hat{T}|n\rangle \tag{7.111}$$

Misalkan himpunan basis $\{f_i\}$ dipilih sebagai himpunan lengkap ortonormal fungsi eigen g_i dari $\hat{A}$, dengan $\hat{A}g_i = a_i g_i$. Elemen matriks A_{mn} kemudian adalah

$$A_{mn} = \langle g_m|\hat{A}|g_n\rangle = \langle g_m|\hat{A}g_n\rangle = \langle g_m|a_n g_n\rangle = a_n\langle g_m \vee g_n\rangle = a_n\delta_{mn}.$$

Matriks yang merepresentasikan $\hat{A}$ dalam basis fungsi eigen ortonormal $\hat{A}$ dengan demikian merupakan matriks diagonal, dengan elemen diagonal berupa nilai eigen $\hat{A}$. Sebaliknya, dapat dibuktikan, lihat Soal 7.53, bahwa apabila representasi matriks $\hat{A}$ menggunakan suatu himpunan lengkap ortonormal merupakan matriks diagonal, fungsi-fungsi basis tersebut adalah fungsi eigen $\hat{A}$ dan elemen matriks diagonalnya merupakan nilai eigen $\hat{A}$.

Kita telah menggunakan basis lengkap ortonormal $\{f_i\}$ untuk merepresentasikan operator $\hat{A}$ dengan matriks A dalam (7.108). Basis $\{f_i\}$ juga dapat digunakan untuk merepresentasikan fungsi sembarang u. Kita menguraikan u dalam himpunan lengkap $\{f_i\}$ menurut $u = \sum_i u_i f_i$, dengan koefisien penguraian u_i berupa bilangan, bukan fungsi, yang diberikan oleh Pers. (7.40) sebagai $u_i = \langle f_i \vee u\rangle$. Himpunan koefisien penguraian $u_1, u_2, \ldots$ dibentuk menjadi matriks kolom atau vektor kolom, yang kita sebut u, dan u disebut representasi fungsi u dalam basis $\{f_i\}$. Jika $\hat{A}u = w$, dengan w suatu fungsi lain, dapat ditunjukkan, lihat Soal 7.54, bahwa $Au = w$, dengan A, u, w masing-masing merupakan representasi matriks $\hat{A}, u, w$ dalam basis $\{f_i\}$. Jadi, pengaruh operator linear $\hat{A}$ pada fungsi sembarang u dapat ditentukan apabila representasi matriks A dari $\hat{A}$ diketahui. Dengan demikian, mengetahui representasi matriks A ekuivalen dengan mengetahui operator $\hat{A}$.

Rangkuman

Operator mekanika kuantum linear $\hat{A}$ yang merepresentasikan suatu besaran fisik harus bersifat Hermitian, yang berarti memenuhi $\int f \quad \hat{A}u d\tau = \int u\left(\hat{A}f\right) \, d\tau$ untuk semua fungsi f dan u yang berperilaku baik. Nilai eigen operator Hermitian berupa bilangan real. Untuk operator Hermitian, fungsi-fungsi eigen yang

berkaitan dengan nilai eigen berbeda saling ortogonal, sedangkan fungsi-fungsi eigen yang berkaitan dengan nilai eigen terdegenerasi dapat dipilih agar saling ortogonal.

Kita mempostulatkan bahwa fungsi-fungsi eigen g_i dari setiap operator Hermitian yang merepresentasikan suatu besaran fisik membentuk himpunan lengkap. Artinya, setiap fungsi f yang berperilaku baik dapat diuraikan sebagai $f = \sum_k c_k\, g_k$, dengan fungsi-fungsi g_k ortonormal dan $c_k = \int g_k\, f d\tau$.

Jika dua operator mekanika kuantum saling komut, keduanya mempunyai suatu himpunan lengkap fungsi eigen bersama. Dua operator mekanika kuantum yang mempunyai suatu himpunan lengkap fungsi eigen bersama harus saling komut.

Jika energi potensial V merupakan fungsi genap, setiap fungsi gelombang keadaan stasioner dapat dipilih sebagai fungsi genap atau fungsi ganjil.

Jika sifat B diukur dalam sistem yang fungsi keadaannya Ψ, probabilitas menemukan nilai eigen tak terdegenerasi b_i diberikan oleh $|\langle g_i|\Psi\rangle|^2$, dengan $\hat{B} g_i = b_i g_i$.

Postulat-postulat mekanika kuantum dirangkum dalam Bagian 7.8.

Matriks adalah susunan bilangan berbentuk persegi panjang dan mengikuti aturan (7.105)–(7.107) untuk penjumlahan, perkalian skalar, dan perkalian matriks. Jika $\{f_i\}$ adalah himpunan fungsi lengkap ortonormal, matriks A dengan elemen $A_{mn} \equiv \langle f_m|\hat{A}|f_n\rangle$ merepresentasikan operator linear $\hat{A}$ dalam basis $\{f_i\}$. Demikian pula, matriks kolom u, yang elemennya u_i sama dengan koefisien linear dalam penguraian $u = \sum_i u_i\, f_i$, merepresentasikan fungsi u dalam basis $\{f_i\}$. Representasi matriks operator dan fungsi dalam suatu basis mengikuti hubungan yang sama seperti operator dan fungsinya. Sebagai contoh, jika $\hat{C} = \hat{A} + \hat{B}$, $\hat{R} = \hat{S}\hat{T}$, dan $w = \hat{A}u$, maka $C = A + B$, $R = ST$, dan $w = Au$.

Catatan Integratif: Ketelitian Ilmiah, Pengukuran, dan Batas Pengetahuan

> **Catatan ini merupakan tambahan integratif, bukan bagian dari teks asli buku sumber.** Mekanika kuantum menegaskan bahwa pengetahuan ilmiah tentang suatu sistem diperoleh melalui definisi operasional, pengukuran, probabilitas, dan pengujian matematis. Sikap ini sejalan dengan prinsip kehati-hatian epistemik dalam Al-Qur'an: manusia tidak boleh mengikuti klaim yang tidak didukung pengetahuan dan harus mempertanggungjawabkan penggunaan pendengaran, penglihatan, dan hati.

وَلَا تَقْفُ مَا لَيْسَ لَكَ بِهِ عِلْمٌ ۚ إِنَّ السَّمْعَ وَالْبَصَرَ وَالْفُؤَادَ كُلُّ أُولَٰئِكَ كَانَ عَنْهُ مَسْئُولًا

"Janganlah engkau mengikuti sesuatu yang tidak engkau ketahui. Sesungguhnya pendengaran, penglihatan, dan hati nurani, semuanya itu akan diminta pertanggungjawabannya." (Q.S. Al-Isrā' [17]: 36)

Ayat tersebut tidak dimaksudkan sebagai rumus fisika atau pembenaran langsung atas suatu interpretasi mekanika kuantum. Relevansinya bersifat metodologis: pernyataan ilmiah harus dibedakan dari dugaan, ditopang bukti, dan dibatasi oleh jangkauan metode yang digunakan. Dalam konteks bab ini, fungsi keadaan memungkinkan prediksi probabilitas hasil pengukuran, tetapi tidak membenarkan klaim yang melampaui postulat, perhitungan, dan data eksperimen.

Nabi Muhammad ﷺ juga menegaskan pentingnya kompetensi dalam urusan teknis dan pengalaman empiris:

أَنْتُمْ أَعْلَمُ بِأَمْرِ دُنْيَاكُمْ

"Kalian lebih mengetahui urusan dunia kalian." (H.R. Muslim, no. 2363)

Hadis ini, dalam konteks peristiwa penyerbukan kurma, menunjukkan pengakuan terhadap keahlian manusia dalam persoalan empiris. Dalam pembelajaran kimia kuantum, prinsip tersebut mendorong penggunaan matematika, eksperimen, komputasi, dan penilaian sejawat secara bertanggung jawab, tanpa mencampuradukkan kesimpulan ilmiah yang teruji dengan spekulasi filosofis yang belum dipastikan.

Soal

Bagian	Nomor Soal	Bagian	Nomor Soal
7.1	7.1–7.3	7.6	7.31–7.41
7.2	7.4–7.17	7.7	7.42–7.45
7.3	7.18–7.19	7.8	7.46–7.48
7.4	7.20	7.10	7.49–7.55
7.5	7.21–7.30	Umum	7.56–7.64

7.1 Benar atau salah? Jika suatu hubungan kadang-kadang benar dan kadang-kadang salah, jawablah "salah". Di sini f dan g adalah fungsi, c adalah konstanta, dan $\hat{B}$ adalah operator linear. (a) $\langle f|\hat{B}|g\rangle = \langle f \vee \hat{B}g\rangle$; (b) $\langle f|\hat{B}|cg\rangle = c\langle f|\hat{B}|g\rangle$; (c) $\langle cf|\hat{B}|g\rangle = c\langle f|\hat{B}|g\rangle$.

7.2 Jika c adalah konstanta, dalam kondisi apa $\langle cf_m|\hat{A}|f_n\rangle$ sama dengan $\langle f_m|\hat{A}|cf_n\rangle$?

7.3 Verifikasilah persamaan setelah (7.3). Verifikasilah persamaan-persamaan dalam (7.5).

7.4 Operator apakah yang ditunjukkan bersifat Hermitian oleh persamaan $\langle m|n\rangle = \langle n|m\rangle$?

7.5 Jika $\hat{B}$ bersifat Hermitian, buktikan bahwa $\langle f|\hat{B}|g\rangle = \langle \hat{B}f \vee g\rangle$.

7.6 Misalkan $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ adalah operator Hermitian dan c adalah konstanta. (a) Tunjukkan bahwa $c\hat{A}$ bersifat Hermitian jika c merupakan bilangan real dan

bahwa $c\hat{A}$ tidak bersifat Hermitian jika c tidak real. (b) Tunjukkan bahwa $\hat{A} + \hat{B}$ bersifat Hermitian.

7.7 (a) Tunjukkan bahwa $d^2/d\,x^2$ dan $\hat{T}_x$ bersifat Hermitian, dengan $\hat{T}_x \equiv -(\hbar^2/2\,m)\,d^2/d\,x^2$. Lihat Soal 7.6a. (b) Tunjukkan bahwa $\langle T_x \rangle = (\hbar^2/2\,m)\int |\partial\,\Psi/\partial\,x|^2 d\tau$. (c) Untuk sistem satu partikel, apakah $\langle T \rangle$ sama dengan $\langle T_x \rangle + \langle T_y \rangle + \langle T_z \rangle$? (d) Tunjukkan bahwa $\langle T \rangle \geq 0$ bagi sistem satu partikel.

7.8 Manakah dari operator berikut yang bersifat Hermitian: d/dx , $i\,d/dx$, $4\,d^2/d\,x^2$, dan $i\,d^2/d\,x^2$? Lihat Soal 7.6.

7.9 Manakah dari operator berikut yang memenuhi persyaratan sebagai operator mekanika kuantum untuk merepresentasikan suatu besaran fisik: (a) $(\quad)^{1/2}$; (b) d/dx; (c) $d^2/d\,x^2$; (d) $i\,d/dx$?

7.10 Verifikasilah bahwa $\hat{L}_z$ bersifat Hermitian dengan menggunakan koordinat sferis.

7.11 Misalkan $\hat{A}$ adalah operator Hermitian. Tunjukkan bahwa $\langle A^2 \rangle = \int \left|\hat{A}\psi\right|^2 d\tau$ dan karena itu $\langle A^2 \rangle \geq 0$. Hasil ini dapat digunakan untuk menurunkan Pers. (5.131) secara lebih ketat daripada dalam teks. Karena $\hat{M}^2 - \hat{M}_z^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2$, kita mempunyai $\langle M^2 \rangle - \langle M_z^2 \rangle = \langle M_x^2 \rangle + \langle M_y^2 \rangle$. Sekarang $\langle M^2 \rangle = c$, $\langle M_z^2 \rangle = b_k^2$, dan berdasarkan teorema dalam soal ini $\langle M_x^2 \rangle \geq 0$, $\langle M_y^2 \rangle \geq 0$. Oleh sebab itu, $c - b_k^2 \geq 0$.

7.12 (a) Jika $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ adalah operator Hermitian, buktikan bahwa hasil kali $\hat{A}\hat{B}$ bersifat Hermitian jika dan hanya jika $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ saling komut. (b) Jika $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ bersifat Hermitian, buktikan bahwa $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ bersifat Hermitian. Operator $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ disebut **antikomutator** $\hat{A}$ dan $\hat{B}$. (c) Apakah $\hat{x}\hat{p}_x$ bersifat Hermitian? (d) Apakah $1/2\,(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x})$ bersifat Hermitian?

7.13 Operator linear $\hat{C}$ disebut anti-Hermitian apabila $\langle f|\hat{C}|g\rangle = -\langle g|\hat{C}|f\rangle$ bagi setiap pasangan fungsi yang berperilaku baik. (a) Tunjukkan bahwa d/dx bersifat anti-Hermitian. (b) Jika $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ bersifat Hermitian, buktikan bahwa komutatornya $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ bersifat anti-Hermitian.

7.14 Jelaskan mengapa setiap integral berikut harus bernilai nol, dengan fungsi-fungsinya berupa fungsi gelombang serupa hidrogen: (a) $\langle 2p_1|\hat{L}_z|3p_{-1}\rangle$; (b) $\langle 3p_0|\hat{L}_z|3p_0\rangle$.

7.15 Evaluasilah $\langle \psi_m|\hat{H}|\psi_n\rangle$ apabila (a) $\hat{H}$ adalah operator Hamiltonian osilator harmonik dan ψ_m serta ψ_n adalah fungsi gelombang keadaan stasioner osilator harmonik dengan bilangan kuantum vibrasi m dan n; (b) $\hat{H}$ adalah Hamiltonian kotak partikel dan ψ_m serta ψ_n adalah fungsi eigen energi kotak partikel dengan bilangan kuantum m dan n.

7.16 Jika ψ_2 adalah fungsi gelombang osilator harmonik dengan $v = 2$ dan $\hat{H}$ adalah Hamiltonian osilator harmonik, sederhanakan integral $\langle \psi_2 | \hat{H} | f(x) \rangle$.

7.17 (a) Tunjukkan bahwa fungsi gelombang serupa hidrogen $2p_x$ dan $2p_1$ tidak ortogonal. (b) Gunakan prosedur Schmidt untuk membentuk kombinasi linear $2p_x$ dan $2p_1$ yang saling ortogonal. Kemudian normalkan fungsi-fungsi tersebut. Kombinasi linear yang dihasilkan merupakan fungsi eigen dari operator mana di antara $\hat{H}$, $\hat{L}^2$, dan $\hat{L}_z$?

7.18 (a) Lengkapilah rincian evaluasi koefisien penguraian a_n dalam contoh pada Bagian 7.3. (b) Tuliskan penguraian $x(l - x)$ pada contoh tersebut untuk $x = l/2$, kemudian gunakan lima suku taknol pertama untuk menghampiri π^3. (c) Hitung galat persen penguraian $x(l - x)$ tersebut pada $x = l/4$ ketika diambil 1, 3, dan 5 suku taknol pertama.

7.19 (a) Uraikan fungsi $f(x) = -1$ untuk $0 \leq x \leq l/2$ dan $f(x) = 1$ untuk $l/2 < x \leq l$ dalam fungsi-fungsi gelombang kotak partikel. Karena f tidak kontinu pada $l/2$, penguraian tidak diharapkan merepresentasikan f pada titik tersebut. Karena f tidak memenuhi syarat batas kotak partikel berupa nilai nol pada $x = 0$ dan $x = l$, penguraian tidak merepresentasikan f pada kedua titik tersebut. Penguraian akan merepresentasikan f pada titik-titik lainnya. (b) Hitung galat persen pada $x = l/4$ ketika 1, 3, 5, dan 7 suku taknol pertama digunakan dalam penguraian.

7.20 Benar atau salah? (a) Jika dua operator Hermitian tidak saling komut, keduanya tidak mungkin mempunyai fungsi eigen bersama apa pun. (b) Jika dua operator Hermitian saling komut, setiap fungsi eigen salah satunya harus merupakan fungsi eigen operator lainnya. (c) Integral $\langle 2p_x | \hat{L}_z | 3p_x \rangle$ yang melibatkan orbital serupa hidrogen harus sama dengan nol.

7.21 Misalkan $\hat{P}$ adalah operator paritas dan m adalah bilangan bulat positif. Apakah $\hat{P}^m$ jika m genap? Jika m ganjil?

7.22 Untuk atom serupa hidrogen, $V = -Z(e^2/4\pi\varepsilon_0)(x^2 + y^2 + z^2)^{-1/2}$, sehingga energi potensial merupakan fungsi genap dari koordinat. (a) Apakah paritas fungsi gelombang $2s$? (b) Apakah paritas $2p_x$? (c) Tinjau $2s + 2p_x$. Apakah fungsi ini merupakan fungsi eigen $\hat{H}$? Apakah mempunyai paritas tertentu?

7.23 Misalkan $\hat{P}$ adalah operator paritas dan $\psi_m(x)$ adalah fungsi gelombang osilator harmonik ternormalisasi. Kita mendefinisikan elemen matriks P_{mn} sebagai $P_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m \hat{P} \psi_n dx$. Tunjukkan bahwa $P_{mn} = 0$ untuk $m \neq n$ dan $P_{mm} = \pm 1$.

7.24 Gunakan paritas untuk menentukan integral mana berikut ini yang harus bernilai nol: (a) $\langle 2s|x|2p_x \rangle$; (b) $\langle 2s|x^2|2p_x \rangle$; (c) $\langle 2p_y|x|2p_x \rangle$. Fungsi-fungsi dalam integral ini adalah fungsi gelombang serupa hidrogen.

7.25 Misalkan $\hat{R}$ adalah operator linear sedemikian rupa sehingga $\hat{R}^n = \hat{1}$, dengan n bilangan bulat positif dan tidak ada pangkat $\hat{R}$ yang lebih rendah sama dengan $\hat{1}$. Tentukan nilai eigen $\hat{R}$.

7.26 (a) Tunjukkan bahwa operator paritas bersifat linear. (b) Tunjukkan bahwa operator paritas bersifat Hermitian; pembuktian dalam satu dimensi sudah memadai.

7.27 Karena operator paritas bersifat Hermitian, lihat Soal 7.26, dua fungsi eigen $\hat{P}$ yang berkaitan dengan nilai eigen berbeda harus saling ortogonal. Tunjukkan secara langsung bahwa hal ini benar.

7.28 Tinjau integral $\langle v_2|x|v_1\rangle$, dengan fungsi-fungsinya berupa fungsi gelombang osilator harmonik satu dimensi yang mempunyai bilangan kuantum v_2 dan v_1. Dalam kondisi apa pertimbangan paritas memungkinkan kita menyimpulkan bahwa integral tersebut harus nol? Mungkinkah integral bernilai nol pada kasus lain? Integral ini penting dalam pembahasan transisi radiasi.

7.29 (a) Dalam koordinat Kartesius, operator paritas $\hat{P}$ bersesuaian dengan transformasi variabel $x \to -x$, $y \to -y$, dan $z \to -z$. Tunjukkan bahwa dalam koordinat sferis operator paritas bersesuaian dengan transformasi $r \to r$, $\theta \to \pi - \theta$, dan $\phi \to \phi + \pi$. (b) Tunjukkan bahwa $\hat{P}e^{im\phi} = (-1)^m e^{im\phi}$. (c) Gunakan Pers. (5.97) untuk menunjukkan bahwa

$$\hat{P}S_{l,m}(\theta) = (-1)^{l-|m|}S_{l,m}(\theta) = (-1)^{l-m}S_{l,m}(\theta).$$

- Gabungkan hasil (b) dan (c) untuk menyimpulkan bahwa harmonik sferis $Y_l^m(\theta, \phi)$ merupakan fungsi genap jika l genap dan fungsi ganjil jika l ganjil.

7.30 Misalkan f merupakan fungsi ganjil hanya terhadap sebagian variabelnya, yang berarti

$$f(-q_1, -q_2, \dots, -q_k, q_{k+1}, q_{k+2}, \dots, q_m) = -f(q_1, q_2, \dots, q_k, q_{k+1}, q_{k+2}, \dots, q_m),$$

dengan $1 \le k \le m$. Jelaskan mengapa

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f\,(q_1, \dots, q_m) dq_1 \cdots dq_m = 0.$$

Petunjuk: tuliskan integral sebagai

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f\,(q_1, \dots, q_k, q_{k+1}, \dots, q_m) dq_1 \cdots dq_k \right] dq_{k+1} \cdots dq_m.$$

7.31 Untuk atom hidrogen dalam keadaan p, hasil yang mungkin dari pengukuran L_z adalah $-\hbar$, 0, dan $\hbar$. Untuk setiap fungsi gelombang berikut, berikan probabilitas masing-masing dari ketiga hasil tersebut: (a) $2p_z$; (b) $2p_y$; (c) $2p_1$. Kemudian gunakan hasil tersebut untuk menentukan $\langle L_z \rangle$ bagi masing-masing fungsi gelombang.

7.32 Misalkan pada waktu t' suatu atom hidrogen berada dalam keadaan tak stasioner

$$\Psi = 6^{-1/2}(2p_1) - 2^{-1/2}i(2p_0) - 3^{-1/2}(3d_1).$$

Jika L_z diukur pada t', berikan hasil-hasil yang mungkin dan probabilitas setiap hasil. Kemudian tentukan $\langle L_z \rangle$ untuk keadaan ini.

7.33 Jika L^2 diukur dalam atom hidrogen yang fungsi keadaannya seperti pada Soal 7.32, berikan hasil-hasil yang mungkin beserta probabilitasnya. Kemudian hitung $\langle L^2 \rangle$ untuk keadaan tersebut.

7.34 Jika E diukur dalam atom hidrogen yang fungsi keadaannya seperti pada Soal 7.32, berikan hasil-hasil yang mungkin beserta probabilitasnya. Kemudian hitung $\langle E \rangle$ untuk keadaan tersebut.

7.35 Suatu pengukuran menghasilkan $2\hbar^2$ untuk kuadrat besar momentum sudut orbital suatu partikel. Jika L_x kemudian diukur, apakah hasil-hasil yang mungkin?

7.36 Misalkan sebuah partikel dalam kotak sepanjang l berada dalam keadaan tak stasioner dengan $\Psi = 0$ untuk $x < 0$ dan $x > l$, sedangkan

$$\Psi = \frac{1}{2}e^{-ih^2t/(8ml^2\hbar)}\left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} sin\left(\frac{\pi x}{l}\right) + \frac{\sqrt{3}}{2}e^{i\pi}e^{-ih^2t/(2ml^2\hbar)}\left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} sin\left(\frac{2\pi x}{l}\right)$$

untuk $0 \leq x \leq l$. Jika energi diukur pada waktu t, berikan hasil-hasil yang mungkin dan probabilitasnya.

7.37 Misalkan sebuah partikel dalam kotak sepanjang l berada dalam keadaan tak stasioner $\Psi = (105/l^7)^{1/2}x^2(l-x)$ untuk $0 \leq x \leq l$, dan $\Psi = 0$ di tempat lain, pada saat energi diukur. Berikan hasil-hasil yang mungkin dan probabilitasnya. Hitung probabilitas untuk $n = 1,2,3$.

7.38 Misalkan elektron dalam atom hidrogen mempunyai fungsi keadaan $\Psi = (27/\pi\, a^3)^{1/2}e^{-3r/a}$, dengan $a = 4\pi\varepsilon_0\, \hbar^2/(\mu e^2)$, pada saat energinya diukur. Tentukan probabilitas bahwa nilai energi $-e^2/(8\pi\varepsilon_0 a)$ diperoleh.

7.39 (a) Gabungkan Pers. (2.30) dan (3.33) untuk menuliskan Ψ bagi partikel bebas dalam satu dimensi. (b) Tunjukkan bahwa Ψ tersebut merupakan kombinasi linear dari dua fungsi eigen $\hat{p}_x$. Apakah nilai eigen kedua fungsi eigen tersebut? (c) Jika p_x suatu partikel bebas dalam satu dimensi diukur, berikan hasil-hasil yang mungkin dan probabilitasnya.

7.40 Gunakan hasil contoh terakhir dalam Bagian 7.6 untuk mengevaluasi $\sum_{m=0}^{\infty}[1/(2m+1)^6]$.

7.41 (a) Tunjukkan bahwa untuk partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l, probabilitas mengamati nilai p_x antara p dan $p + dp$ adalah

$$\frac{4|N|^2s^2}{l(s^2-b^2)^2}[1-(-1)^n cos(bl)]dp \qquad (7.112)$$

di mana $s \equiv n\pi l^{-1}$ dan $b \equiv p\hbar^{-1}$. Konstanta N harus dipilih sehingga integral (7.112) dari minus tak hingga sampai plus tak hingga sama dengan satu. Jangan mengevaluasi N. (b) Evaluasilah (7.112) dalam $|N|$ untuk $p = \pm nh/(2l)$. Pada

nilai p_x ini, penyebut (7.112) sama dengan nol dan probabilitas mencapai nilai besar tetapi berhingga.

7.42 Tentukan: (a) $\int_{-1}^{1} \delta\,(x)dx$; (b) $\int_{-\infty}^{\infty} \delta\,(x)dx$; (c) $\int_{-1}^{2} \delta\,(x)dx$; (d) $\int_{1}^{2} f\,(x)\delta(x-3)dx$.

7.43 Tunjukkan bahwa $\int_{-\infty}^{\infty} |\delta(x-a)|^2\,dx = \infty$.

7.44 Berapakah nilai $\int_{0}^{\infty} f\,(x)\delta(x)dx$?

7.45 Fungsi-fungsi pada Gambar 7.5 menghampiri fungsi delta Dirac. Gambarlah grafik fungsi-fungsi bersesuaian yang menghampiri fungsi langkah Heaviside dengan ketelitian yang semakin meningkat.

7.46 Mekanika kuantum mempostulatkan bahwa keadaan sekarang suatu sistem yang tidak terganggu menentukan keadaan masa depannya. Tinjau kasus khusus sistem dengan Hamiltonian tak bergantung waktu $\hat{H}$. Misalkan diketahui bahwa pada waktu t_0 fungsi keadaannya adalah $\Psi(x, t_0)$. Turunkan Pers. (7.101) dengan menyubstitusikan penguraian (7.66), dengan $g_i = \psi_i$, ke dalam persamaan Schrödinger bergantung waktu (7.97); kalikan hasilnya dengan ψ_m, integralkan pada seluruh ruang, kemudian selesaikan untuk c_m.

7.47 Untuk keadaan kotak partikel bergantung waktu yang pada $t = 0$ mempunyai $\Psi = 2^{-1/2}\psi_1 + 2^{-1/2}\psi_2$ dalam contoh setelah Pers. (7.101): (a) hitung periode T untuk elektron dalam kotak sepanjang 2,00 Å; (b) verifikasilah (7.102) untuk $|\Psi|^2$; (c) gunakan lembar kerja elektronik atau program seperti Mathcad untuk memplot $l|\Psi|^2$ dalam (7.103) untuk $t = jT/8$, dengan $j = 0,1, \ldots ,8$; (d) gunakan Mathcad untuk menghasilkan animasi $|\Psi|^2$ ketika waktu berubah.

7.48 Tinjau keadaan kotak partikel bergantung waktu yang pada $t = 0$ diberikan oleh $\Psi = 2^{-1/2}\psi_1 + 2^{-1/2}\psi_n$, dengan $n \neq 1$. (a) Tentukan persamaan yang bersesuaian dengan (7.102) dan (7.103) untuk $|\Psi|^2$ dan $l|\Psi|^2$. (b) Buat animasi $|\Psi|^2$ ketika waktu berubah untuk $n = 3$, $n = 4$, dan $n = 5$. Untuk nilai mana di antara $n = 2,3,4,5$, $|\Psi|^2$ tetap simetris terhadap titik tengah kotak ketika waktu berubah?

7.49 Untuk matriks

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & -3 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 4 & 4 \end{pmatrix},$$

tentukan (a) AB; (b) BA; (c) $A + B$; (d) $3A$; (e) $A - 4B$.

7.50 Hitung hasil kali matriks CD dan DC, dengan

$$C = \begin{pmatrix} 5 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, D = (i \quad 2 \quad 1).$$

7.51 Tentukan representasi matriks operator identitas $\hat{1}$ dalam suatu basis lengkap ortonormal.

7.52 Jika $\hat{P} = c\hat{S}$, dengan c suatu konstanta, tunjukkan bahwa $P_{jk} = cS_{jk}$.

7.53 Jika $\{f_i\}$ adalah basis lengkap ortonormal sedemikian rupa sehingga $\langle f_m|\hat{A}|f_n\rangle = a_m\delta_{mn}$ untuk semua m dan n, yaitu representasi matriks $\hat{A}$ diagonal, buktikan bahwa fungsi-fungsi $\{f_i\}$ merupakan fungsi eigen $\hat{A}$ dan a_i merupakan nilai eigen $\hat{A}$. Petunjuk: uraikan $\hat{A}f_n$ dalam himpunan $\{f_i\}$.

7.54 (a) Jika $\hat{A}$ adalah operator linear, $\{f_i\}$ adalah basis lengkap ortonormal, dan u adalah fungsi sembarang, tunjukkan bahwa

$$\hat{A}u = \sum_j \left(\sum_i \langle f_j|\hat{A}|f_i\rangle\langle f_i \vee u\rangle \right) f_j.$$

Petunjuk: uraikan u dalam himpunan $\{f_i\}$, terapkan $\hat{A}$ pada penguraian ini, kemudian uraikan $\hat{A}f_i$. (b) Jika $\hat{A}u = w$, dengan $w = \sum_j w_j f_j$ dan $u = \sum_i u_i f_i$, dengan koefisien penguraian w_j dan u_i berupa bilangan, tunjukkan bahwa persamaan pada (a) menyatakan $w_j = \sum_i A_{ji} u_i$, dan karena itu $w = Au$, dengan w, A, u masing-masing merupakan representasi $w, \hat{A}, u$.

7.55 Tuliskan bagian $l = 2$ dari representasi matriks $\hat{L}_z$ dalam basis $\{Y_l^m\}$.

7.56 Hitung ketidakpastian ΔL_z untuk keadaan stasioner atom hidrogen berikut: (a) $2p_z$; (b) $2p_x$.

7.57 Untuk sistem pada Soal 7.36: (a) gunakan ortonormalitas [Pers. (2.27)] untuk memverifikasi bahwa Ψ ternormalisasi; (b) tentukan $\langle E\rangle$ pada waktu t; (c) tentukan $\langle x\rangle$ pada waktu t, kemudian tentukan nilai maksimum dan minimum $\langle x\rangle$ sebagai fungsi t.

7.58 Tinjau operator $\hat{A}$ yang memuat waktu sebagai parameter. Kita tertarik pada perubahan nilai rata-rata sifat A terhadap waktu, dan mempunyai

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\int \Psi \quad \hat{A}\Psi d\tau.$$

Integral tentu pada ruas kanan persamaan ini merupakan fungsi parameter t. Secara umum, operasi matematika yang sah adalah menghitung turunannya terhadap t dengan mendiferensialkan integran terhadap t:

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \int \frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi \quad \hat{A}\Psi\right)d\tau$$

$$\int \frac{\partial \Psi}{\partial t}\hat{A}\Psi d\tau + \int \Psi \quad \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi d\tau + \int \Psi \quad \hat{A}\frac{\partial \Psi}{\partial t}d\tau.$$

Gunakan persamaan Schrödinger bergantung waktu, konjugat kompleksnya, dan sifat Hermitian $\hat{H}$ untuk menunjukkan bahwa

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \int \Psi \quad \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi d\tau + \frac{i}{\hbar}\int \Psi \quad \left(\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}\right)\Psi d\tau,$$

atau

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle \hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H} \rangle \tag{7.113}$$

7.59 Gunakan (7.113) dan (5.8) untuk menunjukkan bahwa

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{1}{m}\langle p_x \rangle = \frac{1}{m}\int \Psi \quad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial x} d\tau \tag{7.114}$$

Dari (7.114) diperoleh

$$\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = \frac{1}{m}\frac{d\langle p_x\rangle}{dt}.$$

Gunakan (7.113), (5.9), dan (4.24) untuk menunjukkan bahwa

$$\langle F_x \rangle = m\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} \tag{7.115}$$

Jika kita meninjau partikel mekanika klasik, fungsi gelombangnya besar hanya dalam daerah sangat kecil yang bersesuaian dengan posisinya. Dalam keadaan demikian, tanda rata-rata dalam (7.115) dapat dihilangkan untuk memperoleh hukum kedua Newton. Jadi, mekanika klasik merupakan kasus khusus mekanika kuantum. Persamaan (7.115) dikenal sebagai **teorema Ehrenfest**, mengikuti nama fisikawan yang menurunkannya pada tahun 1927.

7.60 Buktikan prinsip ketidakpastian (5.12) bagi dua operator Hermitian sembarang $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ sebagai berikut. (a) Definisikan fungsi u sebagai $u \equiv f - cg$, dengan $c \equiv \langle g|f\rangle/\langle g|g\rangle$, sedangkan f dan g adalah dua fungsi terintegralkan kuadrat sembarang. Tinjau integral $\langle u \vee u\rangle$. Karena $u \quad u = |u|^2 \geq 0$, integrannya tidak pernah negatif, sehingga $\langle u \vee u\rangle \geq 0$. Substusikan definisi u ke dalam pertidaksamaan terakhir, kalikan hasilnya dengan besaran positif $\langle g \vee g\rangle$, dan tunjukkan bahwa hal ini menghasilkan $\langle f|f\rangle\langle g|g\rangle - \langle f|g\rangle\langle g|f\rangle \geq 0$, atau $\langle f|f\rangle\langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle \quad|^2$, yang dikenal sebagai pertidaksamaan Schwarz.

- Tetapkan $f \equiv \left(\hat{A} - \langle A\rangle\right)\Psi$ dan $g \equiv \left(\hat{B} - \langle B\rangle\right)\Psi$. Gunakan sifat Hermitian $\hat{A} - \langle A\rangle$ dan $\hat{B} - \langle B\rangle$ untuk menunjukkan bahwa $(\Delta A)^2 = \langle f \vee f\rangle$ dan $(\Delta B)^2 = \langle g \vee g\rangle$, dengan ketidakpastian didefinisikan oleh Pers. (5.11).

- Untuk bilangan kompleks $z \equiv x + iy$, dengan x dan y real, kita mempunyai $|z|^2 = x^2 + y^2 \geq y^2$. Verifikasilah bahwa $y = \left(z - z \quad\right)/(2i)$. Oleh karena itu, $|z|^2 \geq \left[\left(z - z \quad\right)/(2i)\right]^2$. Tetapkan $z \equiv \langle f \vee g\rangle$. Maka $|\langle f|g\rangle \quad|^2 \geq [(\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle)/(2i)]^2$. Gabungkan hasil ini dengan hasil bagian (a) dan (b) untuk menunjukkan bahwa $(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq -1/4\,(\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle)^2$, dengan f dan g didefinisikan dalam (b).

- Gunakan definisi f dan g serta normalisasi Ψ untuk memverifikasi bahwa $\langle f|g\rangle = \langle g|f\rangle \quad = \langle \Psi|\hat{A}\hat{B}|\Psi\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$. Dari definisi f dan g, pertukaran f dan g menukar A dan B, sehingga $\langle g|f\rangle = \langle \Psi|\hat{B}\hat{A} \vee$

$\Psi\rangle - \langle B\rangle\langle A\rangle$. Verifikasilah bahwa hasil bagian (c) menjadi $(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq -1/4\,\langle\Psi\big|\big[\hat{A},\hat{B}\big]\big|\Psi\rangle^2$.

- Gunakan hasil Soal 7.13 untuk menunjukkan bahwa $\langle\Psi\big|\big[\hat{A},\hat{B}\big]\big|\Psi\rangle = -\langle\Psi\big|\big[\hat{A},\hat{B}\big]\big|\Psi\rangle$. Kemudian substitusikan hasil ini untuk salah satu integral pada ruas kanan pertidaksamaan dalam bagian (d), sehingga diperoleh $(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq 1/4\,|\langle\Psi|\big[\hat{A},\hat{B}\big]|\Psi\rangle|^2$, yang memberikan prinsip ketidakpastian (5.12).

7.61 Tulislah program komputer yang menggunakan penguraian (7.37) untuk menghitung fungsi (7.35) pada nilai $x = 0{,}0, 1l, 0{,}2l, \ldots, l$. Program harus melakukan perhitungan dengan mengambil 5, 10, 15, dan 20 suku dalam penguraian.

7.62 Dalam menentukan nilai eigen dengan menyelesaikan persamaan diferensial, kuantisasi hanya terjadi ketika kita menerapkan syarat bahwa fungsi eigen harus berperilaku baik. Operator tangga digunakan dalam Bagian 5.4 untuk menentukan nilai eigen $\hat{M}^2$ dan $\hat{M}_z$, serta dalam Soal 5.36 untuk menentukan nilai eigen energi osilator harmonik. Di bagian mana syarat bahwa fungsi eigen harus berperilaku baik digunakan dalam penurunan di Bagian 5.4 dan Soal 5.36? Petunjuk: lihat Soal 7.11.

7.63 Tanpa melihat teks, buktikan bahwa (a) nilai eigen operator Hermitian bersifat real; (b) fungsi-fungsi eigen operator Hermitian yang berkaitan dengan nilai eigen berbeda saling ortogonal.

7.64 Benar atau salah? (a) Fungsi keadaan selalu sama dengan fungsi waktu dikalikan fungsi koordinat. (b) Dalam mekanika klasik maupun mekanika kuantum, pengetahuan tentang keadaan sekarang suatu sistem terisolasi memungkinkan keadaan masa depannya dihitung. (c) Fungsi keadaan selalu merupakan fungsi eigen Hamiltonian. (d) Setiap kombinasi linear fungsi eigen Hamiltonian merupakan fungsi eigen operator Hamiltonian. (e) Jika fungsi keadaan bukan fungsi eigen operator $\hat{A}$, pengukuran sifat A mungkin memberikan nilai yang bukan salah satu nilai eigen $\hat{A}$. (f) Kerapatan probabilitas tidak bergantung pada waktu bagi keadaan stasioner. (g) Jika dua operator Hermitian tidak saling komut, keduanya tidak mungkin mempunyai fungsi eigen bersama. (h) Jika dua operator Hermitian saling komut, setiap fungsi eigen salah satunya harus merupakan fungsi eigen yang lain. (i) Dua fungsi eigen bebas linear dari operator Hermitian yang sama selalu saling ortogonal. (j) Jika operator $\hat{B}$ bersesuaian dengan sifat fisik suatu sistem mekanika kuantum, fungsi keadaan Ψ harus merupakan fungsi eigen $\hat{B}$. (k) Setiap kombinasi linear penyelesaian persamaan Schrödinger bergantung waktu merupakan penyelesaian persamaan tersebut. (l) Fungsi keadaan ternormalisasi Ψ tidak berdimensi atau tidak mempunyai satuan. (m) Semua fungsi eigen operator Hermitian harus berupa

fungsi real. (n) Besaran $\langle f_m|\hat{A}|f_n\rangle$ dan $\langle f_m \vee f_n\rangle$ adalah bilangan. (o) Ketika Ψ merupakan fungsi eigen $\hat{B}$ dengan nilai eigen b_k, kita pasti mengamati nilai b_k ketika sifat B diukur. (p) Hubungan $\langle f|\hat{B}|g\rangle = \langle g|\hat{B}|f\rangle$ hanya berlaku ketika f dan g merupakan fungsi eigen operator Hermitian $\hat{B}$. (q) Persamaan Schrödinger bergantung waktu lebih fundamental daripada persamaan Schrödinger tak bergantung waktu. (r) Untuk semua keadaan, $(\hat{H}\Psi)/\Psi$ sama dengan energi E keadaan tersebut.

BAB 8

METODE VARIASI

8.1 Teorema Variasi

Untuk menangani persamaan Schrödinger tak bergantung waktu bagi sistem yang mengandung partikel-partikel saling berinteraksi, seperti atom atau molekul, kita harus menggunakan metode pendekatan. Bab ini membahas metode variasi, yang memungkinkan kita memperkirakan energi keadaan dasar suatu sistem tanpa menyelesaikan persamaan Schrödinger secara eksak. Metode variasi didasarkan pada teorema berikut.

TEOREMA VARIASI

Diberikan suatu sistem yang operator Hamiltoniannya $\hat{H}$ tidak bergantung waktu dan yang nilai eigen energinya paling rendah adalah E_1. Jika φ adalah sembarang fungsi ternormalisasi yang berperilaku baik, bergantung pada koordinat partikel-partikel sistem, dan memenuhi syarat batas masalah, maka nilai harapan Hamiltonian tidak lebih kecil daripada E_1.

$$\int \varphi^* \hat{H} \varphi \, d\tau \geq E_1, \quad \varphi \text{ ternormalisasi} \tag{8.1}$$

Teorema variasi memungkinkan kita menghitung batas atas bagi energi keadaan dasar sistem.

Untuk membuktikan (8.1), kita ekspansikan φ dalam himpunan lengkap dan ortonormal fungsi eigen $\hat{H}$, yaitu fungsi eigen keadaan stasioner ψ_k:

$$\varphi = \Sigma_k a_k \psi_k \tag{8.2}$$

dengan

$$\hat{H}\psi_k = E_k\psi_k \tag{8.3}$$

Perhatikan bahwa ekspansi (8.2) mensyaratkan φ memenuhi syarat batas yang sama seperti fungsi-fungsi ψ_k. Substitusi (8.2) ke ruas kiri (8.1) memberikan

$$\begin{aligned}\int \varphi^*\hat{H}\varphi \, d\tau &= \int (\Sigma_k a_k^*\psi_k^*) \, \hat{H}(\Sigma_j a_j\psi_j)d\tau \\ &= \int (\Sigma_k a_k^*\psi_k^*)(\Sigma_j a_j\hat{H}\psi_j)d\tau\end{aligned}$$

Dengan menggunakan persamaan nilai eigen (8.3), serta dengan menganggap bahwa urutan integrasi dan penjumlahan tak hingga boleh dipertukarkan, diperoleh

$$\begin{aligned}\int \varphi^*\hat{H}\varphi \, d\tau &= \int (\Sigma_k a_k^*\psi_k^*)(\Sigma_j a_jE_j\psi_j)d\tau \\ &= \Sigma_k\Sigma_j a_k^*a_jE_j\int \psi_k^*\psi_j d\tau \\ &= \Sigma_k\Sigma_j a_k^*a_jE_j\delta_{kj}\end{aligned}$$

Pada langkah terakhir digunakan ortonormalitas fungsi eigen ψ_k. Penjumlahan terhadap j kemudian dilakukan; seperti biasa, delta Kronecker membuat semua suku bernilai nol kecuali suku dengan j = k, sehingga

$$\int \varphi^* \hat{H} \varphi \, d\tau = \Sigma_k \, a_k^* a_k E_k = \Sigma_k |a_k|^2 E_k \tag{8.4}$$

Karena E_1 adalah nilai eigen energi terendah dari $\hat{H}$, berlaku $E_k \geq E_1$. Karena $|a_k|^2$ tidak pernah negatif, ketaksamaan $E_k \geq E_1$ dapat dikalikan dengan $|a_k|^2$ tanpa mengubah arah tanda ketaksamaan. Jadi $|a_k|^2 E_k \geq |a_k|^2 E_1$. Dengan menjumlahkan atas k dan menggunakan (8.4), diperoleh

$$\int \varphi^* \hat{H} \varphi \, d\tau = \Sigma_k |a_k|^2 E_k \geq \Sigma_k |a_k|^2 E_1 = E_1 \Sigma_k |a_k|^2 \tag{8.5}$$

Karena φ ternormalisasi, $\int \varphi^* \varphi \, d\tau = 1$. Substitusi ekspansi (8.2) ke syarat normalisasi memberikan

$$\begin{aligned} 1 = \int \varphi^* \varphi \, d\tau &= \int (\Sigma_k a_k^* \psi_k^*)(\Sigma_j a_j \psi_j) d\tau \\ &= \Sigma_k \Sigma_j a_k^* a_j \int \psi_k^* \psi_j d\tau = \Sigma_k \Sigma_j a_k^* a_j \delta_{kj} \end{aligned}$$

$$1 = \Sigma_k |a_k|^2 \tag{8.6}$$

Perhatikan bahwa dalam menurunkan (8.4) dan (8.6), pada dasarnya kita mengulangi penurunan Pers. (7.70) dan (7.69). Penggunaan (8.6) dalam (8.5) memberikan teorema variasi (8.1):

$$\int \varphi^* \hat{H} \varphi \, d\tau \geq E_1, \quad \varphi \text{ ternormalisasi} \tag{8.7}$$

Misalkan kita mempunyai fungsi φ yang belum ternormalisasi. Untuk menerapkan teorema variasi, φ dikalikan dengan konstanta normalisasi N sehingga $N\varphi$ ternormalisasi. Dengan mengganti φ oleh $N\varphi$ dalam (8.7), diperoleh

$$|N|^2 \int \varphi^* \hat{H} \varphi \, d\tau \geq E_1 \tag{8.8}$$

Konstanta N ditentukan oleh $\int (N\varphi)^* N\varphi \, d\tau = |N|^2 \int \varphi^* \varphi \, d\tau = 1$. Jadi $|N|^2 = 1/\int \varphi^* \varphi \, d\tau$, dan (8.8) menjadi

$$\left(\int \varphi^* \hat{H} \varphi \, d\tau\right) / \left(\int \varphi^* \varphi \, d\tau\right) \geq E_1 \tag{8.9}$$

di mana φ adalah sembarang fungsi yang berperilaku baik, tidak harus ternormalisasi, tetapi harus memenuhi syarat batas masalah.

Fungsi φ disebut fungsi variasi coba, sedangkan integral pada (8.1), atau rasio integral pada (8.9), disebut integral variasional. Untuk memperoleh pendekatan yang baik terhadap energi keadaan dasar E_1, kita mencoba banyak fungsi variasi coba dan mencari fungsi yang memberikan nilai integral variasional paling rendah. Dari (8.1), semakin rendah nilai integral variasional, semakin baik pendekatan terhadap E_1. Salah satu cara untuk menggugurkan mekanika kuantum

adalah menemukan fungsi variasi coba yang membuat integral variasional lebih kecil daripada E_1 pada suatu sistem yang E_1-nya telah diketahui.

Misalkan ψ_1 adalah fungsi gelombang keadaan dasar sejati:

$$\hat{H}\psi_1 = E_1\psi_1 \tag{8.10}$$

Apabila secara kebetulan kita memilih fungsi variasi yang sama dengan ψ_1, maka penggunaan (8.10) dalam (8.1) menunjukkan bahwa integral variasional sama dengan E_1. Dengan demikian, fungsi gelombang keadaan dasar memberikan nilai minimum integral variasional. Karena itu kita mengharapkan bahwa semakin rendah integral variasional, semakin dekat fungsi variasi coba kepada fungsi gelombang keadaan dasar sejati. Akan tetapi, integral variasional mendekati E_1 jauh lebih cepat daripada fungsi variasi coba mendekati ψ_1. Dengan demikian, pendekatan yang cukup baik terhadap E_1 dapat diperoleh bahkan dengan φ yang relatif kurang baik.

Dalam praktik, biasanya beberapa parameter dimasukkan ke dalam fungsi coba φ, kemudian parameter-parameter itu divariasikan untuk meminimumkan integral variasional. Keberhasilan metode variasi bergantung pada kemampuan memilih bentuk fungsi coba yang baik.

Sekarang kita melihat beberapa contoh metode variasi. Kegunaan utama metode ini sebenarnya adalah untuk masalah yang penyelesaian eksaknya tidak diketahui. Namun, mula-mula kita memakai masalah yang dapat diselesaikan secara eksak agar ketelitian hasil variasional dapat dinilai.

Contoh: partikel dalam kotak satu dimensi

Rancang fungsi variasi coba untuk partikel dalam kotak satu dimensi dengan panjang l.

Fungsi gelombang bernilai nol di luar kotak dan syarat batas mengharuskan $\psi = 0$ pada $x = 0$ dan $x = l$. Fungsi variasi φ harus memenuhi syarat batas yang sama, yaitu bernilai nol pada kedua ujung kotak. Seperti dicatat setelah Pers. (4.57), fungsi keadaan dasar ψ tidak mempunyai simpul di bagian dalam antara kedua titik batas, sehingga diinginkan agar φ juga tidak mempunyai simpul di bagian dalam. Fungsi parabola sederhana yang mempunyai sifat-sifat ini adalah

$$\varphi = x(l - x), \quad 0 \le x \le l \tag{8.11}$$

dan $\varphi = 0$ di luar kotak. Karena φ belum dinormalisasi, kita menggunakan (8.9). Di dalam kotak Hamiltoniannya adalah $-(\hbar^2/2m)d^2/dx^2$. Untuk pembilang dan penyebut (8.9), diperoleh

$$\begin{aligned} \int \varphi^* \hat{H} \varphi \, d\tau &= -(\hbar^2/2m)\int_0^l (lx - x^2)[d^2(lx - x^2)/dx^2]dx \\ &= (\hbar^2/m)\int_0^l (lx - x^2)dx = \hbar^2 l^3/(6m) \end{aligned} \tag{8.12}$$

$$\int \varphi^*\varphi \, d\tau = \int_0^l x^2(l-x)^2 dx = l^5/30 \qquad (8.13)$$

Substitusi ke teorema variasi (8.9) memberikan

$$E_1 \leq 5h^2/(4\pi^2 ml^2) = 0{,}1266515\, h^2/(ml^2)$$

Dari Pers. (2.20), $E_1 = h^2/(8ml^2) = 0{,}125h^2/(ml^2)$, sehingga galat energinya 1,3%. Karena $\int|\varphi|^2 d\tau = l^5/30$, bentuk ternormalisasi dari (8.11) adalah $(30/l^5)^{1/2}x(l-x)$. Gambar 7.3 dalam sumber menunjukkan bahwa fungsi ini cukup dekat dengan fungsi gelombang keadaan dasar partikel dalam kotak yang sejati.

Latihan. Sistem satu partikel satu dimensi memiliki $V = V_0$ untuk $0 \leq x \leq l$ dan $V = \infty$ di tempat lain, dengan V_0 konstanta. (a) Gunakan fungsi variasi $\varphi = \sin(\pi x/l)$ untuk $0 \leq x \leq l$ dan $\varphi = 0$ di tempat lain untuk memperkirakan energi keadaan dasar sistem. (b) Jelaskan mengapa hasil bagian (a) merupakan energi keadaan dasar eksak. Petunjuk: lihat salah satu soal Bab 4. Jawaban sumber: $V_0 + h^2/(8ml^2)$.

Contoh sebelumnya tidak memuat parameter di dalam fungsi coba. Contoh berikut memuat satu parameter.

Contoh: osilator harmonik satu dimensi

Untuk osilator harmonik satu dimensi, rancang fungsi variasi yang mengandung parameter, tentukan nilai optimum parameter tersebut, dan perkirakan energi keadaan dasarnya.

Fungsi variasi φ harus terintegralkan-kuadrat, sehingga harus menuju nol ketika x menuju $\pm\infty$. Fungsi e^{-x} mempunyai perilaku yang benar pada $+\infty$ tetapi menjadi tak hingga pada $-\infty$. Fungsi e^{-x^2} mempunyai perilaku yang benar pada $\pm\infty$. Namun, bentuk e^{-x^2} tidak memuaskan secara dimensional karena pangkat e harus tak berdimensi. Hal ini terlihat dari deret Taylor $e^z = 1 + z + z^2/2! + \cdots$ [Pers. (4.44)]; semua suku dalam deret harus mempunyai dimensi yang sama, sehingga z harus berdimensi sama dengan 1. Karena itu e^{-x^2} diubah menjadi e^{-cx^2}, dengan c bersatuan panjang^{-2}. Parameter c dipakai sebagai parameter variasi.

Fungsi gelombang keadaan dasar sejati tidak boleh mempunyai simpul. Selain itu, karena $V = \frac{1}{2}kx^2$ adalah fungsi genap, fungsi keadaan dasar harus mempunyai paritas tertentu dan harus genap, sebab fungsi ganjil mempunyai simpul di titik asal. Fungsi coba e^{-cx^2} mempunyai sifat yang diinginkan: tidak memiliki simpul dan merupakan fungsi genap.

Dengan menggunakan bentuk Hamiltonian pada (4.30) dan integral-integral pada Lampiran, diperoleh (Soal 8.3)

$$\int \varphi^* \hat{H} \varphi \, d\tau = -(\hbar^2/2m) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-cx^2} [d^2 e^{-cx^2}/dx^2] dx + 2\pi^2 \nu^2 m \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-2cx^2} dx$$
$$= (\hbar^2/m)(\pi c/8)^{1/2} + \nu^2 m (\pi^5/8)^{1/2} c^{-3/2}$$

$$\int \varphi^* \varphi \, d\tau = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2cx^2} dx = 2 \int_0^{\infty} e^{-2cx^2} dx = (\pi/2c)^{1/2}$$

Integral variasional W adalah

$$W \equiv \left(\int \varphi^* \hat{H} \varphi \, d\tau\right) / \left(\int \varphi^* \varphi \, d\tau\right) = \hbar^2 c/(2m) + \pi^2 \nu^2 m/(2c) \qquad (8.14)$$

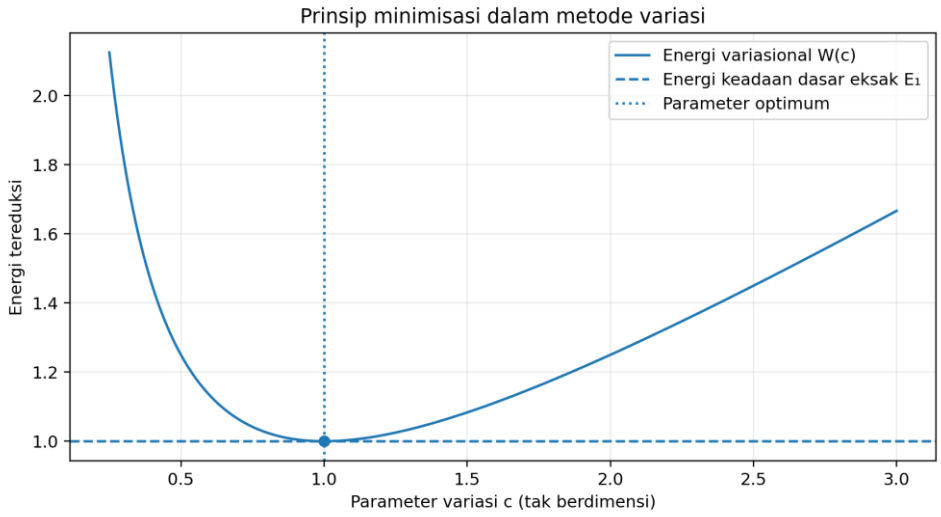
Sekarang c divariasikan untuk meminimumkan integral variasional (8.14). Syarat perlu bagi minimum W adalah

$$dW/dc = 0 = \hbar^2/(2m) - \pi^2 \nu^2 m/(2c^2)$$
$$c = \pm \pi \nu m/\hbar \qquad (8.15)$$

Akar negatif $c = -\pi\nu m/\hbar$ ditolak karena akan membuat $\varphi = e^{-cx^2}$ tidak terintegralkan-kuadrat. Substitusi $c = \pi\nu m/\hbar$ ke (8.14) memberikan $W = \frac{1}{2}h\nu$, tepat sama dengan energi keadaan dasar osilator harmonik. Dengan $c = \pi\nu m/\hbar$, fungsi variasi φ sama dengan fungsi gelombang keadaan dasar osilator harmonik pada (4.53) dan (4.31), kecuali faktor normalisasinya.

Untuk fungsi variasi osilator harmonik ternormalisasi $\varphi = (2c/\pi)^{1/4} e^{-cx^2}$, nilai c yang besar membuat φ turun sangat cepat dari nilai maksimumnya pada $x = 0$. Hal ini membuat rapat probabilitas besar hanya di dekat $x = 0$. Energi potensial $V = \frac{1}{2}kx^2$ rendah di dekat $x = 0$, sehingga c besar berarti nilai $\langle V \rangle = \langle \varphi | V | \varphi \rangle$ rendah; $\langle V \rangle$ adalah suku kedua pada ruas kanan (8.14). Akan tetapi, karena c besar membuat φ turun sangat cepat, nilai $|d\varphi/dx|$ menjadi besar di daerah dekat $x = 0$. Dari Soal 7.7b, turunan yang besar berarti nilai $\langle T \rangle$ besar; $\langle T \rangle$ adalah suku pertama pada ruas kanan (8.14). Nilai optimum c meminimumkan jumlah $\langle T \rangle + \langle V \rangle = W$.

Dalam atom dan molekul, fungsi gelombang sejati merupakan kompromi antara kecenderungan meminimumkan $\langle V \rangle$ dengan mengurung elektron pada daerah ber-V rendah, yaitu dekat inti, dan kecenderungan meminimumkan $\langle T \rangle$ dengan membiarkan rapat probabilitas elektron menyebar pada daerah yang luas.



Gambar 8.A. Ilustrasi orisinal prinsip batas atas dan minimisasi energi variasional; gambar ini bukan salinan dari sumber.

Latihan. Tinjau sistem satu partikel satu dimensi dengan $V = 0$ untuk $-l/2 \le x \le l/2$ dan $V = b\hbar^2/(ml^2)$ di tempat lain, dengan b konstanta positif. (a) Untuk fungsi variasi $\varphi = (x-c)(x+c) = x^2-c^2$ pada $-c \le x \le c$ dan $\varphi = 0$ di tempat lain, dengan $c > l/2$, integral variasionalnya adalah $W = (\hbar^2/ml^2)\{5l^2/(4c^2) + b[1 - 15l/(16c) + 5l^3/(32c^3) - 3l^5/(256c^5)]\}$. Sketsalah φ dan V pada grafik yang sama. Tentukan persamaan yang dipenuhi nilai c yang meminimumkan W. (b) Tentukan c optimum dan W untuk $V_0 = 20\hbar^2/(ml^2)$, lalu bandingkan dengan energi keadaan dasar sejati $2{,}814\hbar^2/(ml^2)$ pada Soal 4.31c. Petunjuk: Solver pada lembar kerja atau kalkulator terprogram dapat digunakan untuk memperoleh c/l. Jawaban sumber: (a) $48t^4 - 24t^2 - 128t^3/b + 3 = 0$, dengan $t \equiv c/l$; (b) $c = 0{,}6715l$ dan $W = 3{,}454\hbar^2/(ml^2)$.

8.2 Perluasan Metode Variasi

Metode variasi sebagaimana disajikan pada bagian sebelumnya hanya memberikan informasi tentang energi dan fungsi gelombang keadaan dasar. Sekarang metode ini diperluas untuk keadaan tereksitasi. Lihat pula Bagian 8.5.

Pertimbangkan cara memperkirakan energi keadaan tereksitasi pertama. Keadaan-keadaan stasioner sistem diberi nomor 1, 2, 3, ... menurut kenaikan energi:

$$E_1 \le E_2 \le E_3 \le \cdots$$

Untuk fungsi variasi ternormalisasi φ, Pers. (8.4) dan (8.6) memberikan $\int\varphi^*\hat{H}\varphi d\tau = \Sigma_{k=1}^{\infty}|a_k|^2E_k$ dan $\int\varphi^*\varphi d\tau = \Sigma_{k=1}^{\infty}|a_k|^2 = 1$, dengan a_k koefisien ekspansi dalam $\varphi = \Sigma_k a_k\psi_k$. Dari Pers. (7.40), $a_k = \langle\psi_k|\varphi\rangle$. Sekarang kita membatasi diri pada fungsi ternormalisasi φ yang ortogonal terhadap fungsi gelombang keadaan dasar sejati ψ_1. Maka $a_1 = \langle\psi_1|\varphi\rangle = 0$ dan

$$\int \varphi^* \hat{H} \varphi d\tau = \Sigma_{k=2}\infty |a_k|^2 E_k, \quad \int \varphi^* \varphi d\tau = \Sigma_{k=2}\infty |a_k|^2 = 1 \tag{8.16}$$

Untuk $k \geq 2$ berlaku $E_k \geq E_2$ dan $|a_k|^2 E_k \geq |a_k|^2 E_2$. Karena itu

$$\Sigma_{k=2}\infty |a_k|^2 E_k \geq \Sigma_{k=2}\infty |a_k|^2 E_2 = E_2 \Sigma_{k=2}\infty |a_k|^2 = E_2 \tag{8.17}$$

Dengan menggabungkan (8.16) dan (8.17), diperoleh hasil yang diinginkan:

$$\int \varphi^* \hat{H} \varphi d\tau \geq E_2 \quad \text{jika} \quad \int \psi_1^* \varphi d\tau = 0 \text{ dan } \int \varphi^* \varphi d\tau = 1 \tag{8.18}$$

Ketaksamaan (8.18) memberi batas atas bagi energi E_2 keadaan tereksitasi pertama. Akan tetapi, pembatasan $\langle \psi_1 | \varphi \rangle = 0$ membuat metode ini sulit diterapkan.

Untuk sistem tertentu, kita dapat menjamin $\langle \psi_1 | \varphi \rangle = 0$ meskipun fungsi gelombang keadaan dasar sejati belum diketahui. Contohnya adalah masalah satu dimensi dengan V sebagai fungsi genap x. Dalam kasus ini, fungsi keadaan dasar selalu genap, sedangkan fungsi keadaan tereksitasi pertama ganjil. Semua fungsi gelombang harus mempunyai paritas tertentu. Fungsi keadaan dasar tidak mempunyai simpul dan, karena fungsi ganjil bernilai nol di titik asal, fungsi keadaan dasar harus genap. Fungsi keadaan tereksitasi pertama mempunyai satu simpul dan harus ganjil.

Oleh karena itu, untuk fungsi coba ganjil, $\langle \psi_1 | \varphi \rangle$ pasti nol: hasil kali fungsi genap ψ_1 dengan fungsi ganjil φ adalah integran ganjil yang integralnya dari $-\infty$ sampai ∞ bernilai nol.

Contoh lain adalah partikel yang bergerak dalam medan pusat (Bagian 6.1). Bentuk energi potensial dapat sedemikian rupa sehingga faktor radial R(r) dalam fungsi eigen tidak dapat diselesaikan. Namun, faktor sudut dalam ψ adalah harmonik bola [Pers. (6.16)], dan harmonik bola dengan nilai l yang berbeda saling ortogonal. Karena itu kita dapat memperoleh batas atas bagi energi keadaan terendah dengan momentum sudut tertentu l dengan menggunakan faktor Y_l^m dalam fungsi coba. Hasil ini bergantung pada perluasan (8.18) ke keadaan tereksitasi yang lebih tinggi:

$$\begin{gathered}(\int \varphi^* \hat{H} \varphi d\tau)/(\int \varphi^* \varphi d\tau) \geq E_{k+1} \\ \text{jika } \int \psi_1^* \varphi d\tau = \int \psi_2^* \varphi d\tau = \cdots = \int \psi_k^* \varphi d\tau = 0\end{gathered} \tag{8.19}$$

8.3 Determinan

Bagian 8.5 membahas suatu jenis fungsi variasi yang menghasilkan persamaan yang melibatkan determinan. Oleh karena itu, pada bagian ini matematika determinan ditinjau.

Determinan adalah susunan persegi yang terdiri atas n^2 kuantitas, yang disebut elemen. Nilai determinan dihitung dari elemen-elemennya menurut aturan yang

akan diberikan. Bilangan n disebut orde determinan. Dengan a_{ij} sebagai elemen umum, determinan orde n ditulis

$$\det(a_{ij}) = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} \tag{8.20}$$

Garis vertikal pada (8.20) tidak berhubungan dengan nilai mutlak. Sebelum membahas definisi nilai determinan orde n, kita meninjau determinan orde satu, dua, dan tiga.

Determinan orde satu mempunyai satu elemen dan nilainya sama dengan nilai elemen itu:

$$|a_{11}| = a_{11} \tag{8.21}$$

Dalam persamaan ini garis vertikal menyatakan determinan, bukan nilai mutlak. Determinan orde dua memiliki empat elemen dan nilainya didefinisikan oleh

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \tag{8.22}$$

Nilai determinan orde tiga didefinisikan oleh

$$\begin{aligned} |a_{11}\ a_{12}\ a_{13}| & \\ |a_{21}\ a_{22}\ a_{23}| &= a_{11}|a_{22}\ a_{23}| - a_{12}|a_{21}\ a_{23}| + a_{13}|a_{21}\ a_{22}| \\ |a_{31}\ a_{32}\ a_{33}| \quad |a_{32}\ a_{33}| & \quad |a_{31}\ a_{33}| \quad |a_{31}\ a_{32}| \end{aligned} \tag{8.23}$$

$$\begin{aligned} = a_{11}a_{22}a_{33} - a_{11}a_{32}a_{23} - a_{12}a_{21}a_{33} + a_{12}a_{31}a_{23} \\ + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{13}a_{31}a_{22} \end{aligned} \tag{8.24}$$

Determinan orde tiga dievaluasi dengan menuliskan elemen-elemen baris teratas dengan tanda plus dan minus bergantian, kemudian mengalikan setiap elemen dengan determinan orde dua tertentu. Determinan orde dua yang mengalikan suatu elemen diperoleh dengan mencoret baris dan kolom tempat elemen itu berada.

Determinan orde (n−1) yang diperoleh dengan mencoret baris ke-i dan kolom ke-j dari determinan orde n disebut minor elemen a_{ij}. Kofaktor a_{ij} didefinisikan sebagai minornya dikalikan faktor $(-1)^{i+j}$. Jadi (8.23) menyatakan bahwa determinan orde tiga dievaluasi dengan mengalikan setiap elemen baris teratas dengan kofaktornya dan menjumlahkan ketiga hasil kali. Pers. (8.22) juga sesuai dengan evaluasi melalui kofaktor, karena kofaktor a_{11} adalah a_{22} dan kofaktor a_{12} adalah $-a_{21}$.

Contoh numerik adalah

$$\begin{vmatrix} 5 & 10 & 2 \\ 0{,}1 & 3 & 1 \\ 0 & 4 & 4 \end{vmatrix} = 5\begin{vmatrix} 3 & 1 \\ 4 & 4 \end{vmatrix} - 10\begin{vmatrix} 0{,}1 & 1 \\ 0 & 4 \end{vmatrix} + 2\begin{vmatrix} 0{,}1 & 3 \\ 0 & 4 \end{vmatrix}$$
$$= 5(8) - 10(0{,}4) + 2(0{,}4) = 36{,}8$$

Dengan M_{ij} sebagai minor a_{ij} dan C_{ij} sebagai kofaktornya, berlaku

$$C_{ij} = (-1)^{i+j} M_{ij} \tag{8.25}$$

Ekspansi (8.23) dapat ditulis

$$\det(a_{ij}) = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}C_{11} + a_{12}C_{12} + a_{13}C_{13} \tag{8.26}$$

Determinan orde tiga dapat diekspansikan dengan elemen-elemen baris mana pun dan kofaktor-kofaktor yang bersesuaian. Misalnya, dengan baris kedua

$$\det(a_{ij}) = a_{21}C_{21} + a_{22}C_{22} + a_{23}C_{23} \tag{8.27}$$

$$\det(a_{ij}) = -a_{21}\begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} + a_{22}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} - a_{23}\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} \tag{8.28}$$

Ekspansi determinan orde dua pada (8.28) menunjukkan bahwa hasilnya sama dengan (8.24). Kita juga dapat menggunakan elemen-elemen kolom mana pun bersama kofaktor yang bersesuaian. Untuk determinan orde tiga, bentuk ekspansi baris dan kolom dapat dirangkum sebagai $\Sigma_l a_{kl}C_{kl}$ dan $\Sigma_l a_{lk}C_{lk}$.

Determinan berorde lebih tinggi didefinisikan dengan ekspansi baris atau kolom yang analog. Untuk determinan orde n,

$$\det(a_{ij}) = \Sigma_{l=1}^{n} a_{kl}C_{kl} = \Sigma_{l=1}^{n} a_{lk}C_{lk}, \quad k = 1, 2, \ldots, n \tag{8.29}$$

Beberapa teorema determinan berikut digunakan selanjutnya; bukti dapat dilihat dalam Sokolnikoff dan Redheffer, hlm. 702–707.

I. Jika setiap elemen suatu baris atau kolom determinan adalah nol, nilai determinan adalah nol.

II. Pertukaran sembarang dua baris atau dua kolom mengalikan nilai determinan dengan −1.

III. Jika dua baris atau dua kolom determinan identik, nilai determinan adalah nol.

IV. Perkalian setiap elemen pada satu baris atau satu kolom dengan konstanta k mengalikan nilai determinan dengan k.

V. Penambahan kepada setiap elemen suatu baris kelipatan konstan yang sama dari elemen yang bersesuaian pada baris lain tidak mengubah nilai determinan.

Teorema ini juga berlaku untuk penambahan kelipatan satu kolom kepada kolom lain.

VI. Pertukaran semua baris dan kolom yang bersesuaian tidak mengubah nilai determinan. Artinya, kolom pertama menjadi baris pertama, kolom kedua menjadi baris kedua, dan seterusnya.

Contoh: evaluasi determinan dengan operasi baris

Gunakan Teorema V untuk mengevaluasi determinan berikut:

$$\begin{aligned} B = &|1\ 2\ 3\ 4| \\ &|4\ 1\ 2\ 3| \\ &|3\ 4\ 1\ 2| \\ &|2\ 3\ 4\ 1| \end{aligned} \tag{8.30}$$

Penambahan −2 kali elemen baris pertama kepada elemen yang bersesuaian pada baris keempat mengubah baris keempat menjadi 0, −1, −2, −7. Selanjutnya, penambahan −3 kali baris pertama kepada baris ketiga dan −4 kali baris pertama kepada baris kedua memberikan

$$\begin{aligned} B = &|1\ \ 2\ \ 3\ \ 4\ | \\ &|0\ -7\ -10\ -13| \\ &|0\ -2\ \ -8\ -10| \\ &|0\ -1\ \ -2\ \ -7| \\ = 1&|-7\ -10\ -13| \\ &|-2\ \ -8\ -10| \\ &|-1\ \ -2\ \ -7| \end{aligned} \tag{8.31}$$

Pada langkah terakhir B diekspansikan terhadap elemen-elemen kolom pertama. Dengan mengurangkan dua kali baris ketiga dari baris kedua dan tujuh kali baris ketiga dari baris pertama, diperoleh

$$\begin{aligned} B = &|0\ \ 4\ \ 36| \\ |0\ -4\ \ \ 4| = (-1)&|-4\ 4| = -(16+144) = -160 \\ &|-1\ -2\ -7| \quad |-2\ -7| \end{aligned} \tag{8.32}$$

Diagonal determinan yang berjalan dari kiri atas ke kanan bawah disebut diagonal utama. Determinan diagonal adalah determinan yang semua elemennya nol kecuali elemen pada diagonal utama. Untuk determinan diagonal, ekspansi berulang memberikan

$$\begin{vmatrix} a_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22}a_{33}\cdots a_{nn} \tag{8.33}$$

Jadi determinan diagonal sama dengan hasil kali elemen diagonalnya.

Determinan yang elemen tak nolnya hanya muncul dalam blok-blok persegi yang berpusat pada diagonal utama disebut berbentuk blok-diagonal. Jika setiap blok persegi dipandang sebagai determinan, determinan blok-diagonal sama dengan hasil kali determinan blok-blok tersebut. Misalnya

$$\begin{vmatrix} a & b & 0 & 0 & 0 & 0 \\ c & d & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f & g & h \\ 0 & 0 & 0 & i & j & k \\ 0 & 0 & 0 & l & m & n \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} \cdot e \cdot \begin{vmatrix} f & g & h \\ i & j & k \\ l & m & n \end{vmatrix} \tag{8.34}$$

Garis putus-putus dalam sumber mengelilingi blok-blok tersebut. Pers. (8.34) dapat dibuktikan dengan mengekspansikan ruas kiri terhadap elemen baris teratas, lalu mengekspansikan beberapa determinan berikutnya terhadap baris teratasnya; lihat Soal 8.21.

8.4 Persamaan Linear Simultan

Untuk menangani fungsi variasi yang dibahas pada bagian berikut, kita perlu memahami persamaan linear simultan.

Tinjau sistem n persamaan linear dalam n peubah tak diketahui berikut:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n \end{aligned} \tag{8.35}$$

Semua a dan b adalah konstanta yang diketahui, sedangkan x_1, x_2, ..., x_n adalah peubah tak diketahui. Jika sekurang-kurangnya satu b tidak nol, sistem ini disebut sistem persamaan linear tak homogen. Sistem demikian dapat diselesaikan dengan aturan Cramer. Bukti aturan Cramer dapat dilihat dalam Sokolnikoff dan Redheffer, hlm. 708.

Misalkan det(a_{ij}) adalah determinan koefisien peubah tak diketahui pada (8.35). Aturan Cramer menyatakan bahwa x_k, untuk k = 1, 2, ..., n, diberikan oleh determinan yang diperoleh dengan mengganti kolom ke-k dari det(a_{ij}) dengan b_1, b_2, ..., b_n, dibagi det(a_{ij}):

$$x_k = \det(\text{A dengan kolom ke-k diganti oleh b})/\det(a_{ij}), \quad k = 1,2,\ldots,n \tag{8.36}$$

Walaupun aturan Cramer penting secara teoretis, aturan ini tidak seharusnya digunakan untuk perhitungan numerik karena eliminasi peubah secara berturut-turut jauh lebih efisien.

Prosedur eliminasi berturut-turut yang luas digunakan adalah eliminasi Gaussian. Pertama, bagi persamaan pertama dalam (8.35) dengan koefisien a_{11} agar koefisien x_1 pada persamaan pertama menjadi 1. Kemudian kurangi persamaan kedua dengan a_{21} kali persamaan pertama, persamaan ketiga dengan a_{31} kali persamaan pertama, dan seterusnya sampai persamaan ke-n dengan a_{n1} kali persamaan pertama. Langkah ini menghilangkan x_1 dari semua persamaan kecuali persamaan pertama.

Selanjutnya, bagi persamaan kedua dengan koefisien x_2-nya. Kurangkan kelipatan yang sesuai dari persamaan kedua pada persamaan ketiga, keempat, ..., ke-n untuk menghilangkan x_2 dari semua persamaan kecuali persamaan pertama dan kedua. Proses dilanjutkan. Pada akhirnya, persamaan ke-n hanya mengandung x_n, persamaan ke-$(n-1)$ hanya mengandung x_{n-1} dan x_n, dan seterusnya. Nilai x_n dari persamaan ke-n disubstitusikan ke persamaan ke-$(n-1)$ untuk memperoleh x_{n-1}; nilai-nilai ini kemudian disubstitusikan ke persamaan ke-$(n-2)$, dan seterusnya. Jika pada suatu tahap koefisien pembagi bernilai nol, persamaan tersebut dipertukarkan dengan persamaan berikutnya yang mempunyai koefisien tak nol pada posisi yang diperlukan. Prosedur eliminasi Gaussian juga memberikan cara efisien mengevaluasi determinan; lihat Soal 8.25.

Metode yang berhubungan adalah eliminasi Gauss–Jordan. Prosedurnya sama dengan eliminasi Gaussian, tetapi x_2 dihilangkan tidak hanya dari persamaan ketiga sampai ke-n, melainkan juga dari persamaan pertama; x_3 kemudian dihilangkan dari persamaan pertama, kedua, keempat, ..., ke-n; dan seterusnya. Pada akhir eliminasi Gauss–Jordan, persamaan pertama hanya mengandung x_1, persamaan kedua hanya x_2, dan persamaan ke-n hanya x_n. Eliminasi Gauss–Jordan memerlukan komputasi lebih banyak daripada eliminasi Gaussian.

Jika semua b pada (8.35) bernilai nol, diperoleh sistem persamaan linear homogen:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= 0 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= 0 \\ &\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= 0 \end{aligned} \tag{8.37}$$

Salah satu penyelesaian yang jelas adalah $x_1 = x_2 = \cdots = x_n = 0$, yang disebut penyelesaian trivial. Jika determinan koefisien pada (8.37) tidak nol, $\det(a_{ij}) \neq 0$, aturan Cramer menghasilkan $x_k = 0$ untuk semua k karena determinan pembilang

mempunyai satu kolom yang semua elemennya nol. Jadi, jika $\det(a_{ij}) \neq 0$, satu-satunya penyelesaian adalah penyelesaian trivial yang tidak menarik.

TEOREMA PERSAMAAN LINEAR HOMOGEN

Sistem n persamaan linear homogen dalam n peubah tak diketahui mempunyai penyelesaian nontrivial jika dan hanya jika determinan koefisiennya sama dengan nol.

Syarat determinan nol dapat dibuktikan bukan hanya perlu, melainkan juga cukup untuk menjamin adanya penyelesaian nontrivial.

Misalkan $\det(a_{ij}) = 0$ sehingga (8.37) mempunyai penyelesaian nontrivial. Aturan Cramer langsung memberikan bentuk 0/0 yang tak tentu. Selain itu, jika $x_1 = d_1$, $x_2 = d_2$, ..., $x_n = d_n$ merupakan penyelesaian, maka $x_1 = cd_1$, $x_2 = cd_2$, ..., $x_n = cd_n$ juga merupakan penyelesaian untuk setiap konstanta c. Jadi penyelesaian sistem homogen mengandung konstanta sembarang dan nilai unik setiap peubah tidak dapat ditentukan.

Untuk menyelesaikan (8.37), tetapkan nilai sembarang pada salah satu peubah, misalnya $x_n = c$. Suku terakhir dari setiap persamaan dipindahkan ke ruas kanan, sehingga

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1,n-1}x_{n-1} &= -a_{1n}c \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2,n-1}x_{n-1} &= -a_{2n}c \\ &\vdots \\ a_{n-1,1}x_1 + \cdots + a_{n-1,n-1}x_{n-1} &= -a_{n-1,n}c \\ a_{n1}x_1 + \cdots + a_{n,n-1}x_{n-1} &= -a_{nn}c \end{aligned} \qquad (8.38)$$

Sekarang terdapat n persamaan dalam n−1 peubah, satu persamaan lebih banyak daripada yang diperlukan. Salah satu persamaan dapat dibuang, misalnya persamaan terakhir, sehingga diperoleh sistem n−1 persamaan tak homogen dalam n−1 peubah. Aturan Cramer kemudian dapat dipakai untuk x_1, ..., x_{n-1}. Karena semua konstanta ruas kanan mengandung faktor c, Teorema IV determinan menunjukkan bahwa semua peubah juga mengandung c sebagai faktor. Bentuk penyelesaian adalah

$$x_1 = ce_1,\ x_2 = ce_2,\ \ldots,\ x_{n-1} = ce_{n-1},\ x_n = c \qquad (8.39)$$

dengan e_1, ..., e_{n-1} berupa bilangan dan c konstanta sembarang.

Contoh: sistem homogen tiga peubah

Selesaikan sistem $3x_1 + 4x_2 + x_3 = 0$; $x_1 + 3x_2 - 2x_3 = 0$; $x_1 - 2x_2 + 5x_3 = 0$.

Determinannya adalah $|3\ 4\ 1;\ 1\ 3\ -2;\ 1\ -2\ 5| = 0$, sehingga terdapat penyelesaian nontrivial. Tetapkan $x_3 = c$ dan buang persamaan ketiga. Diperoleh $3x_1 + 4x_2 = -c$ dan $x_1 + 3x_2 = 2c$. Dengan mengurangkan tiga kali persamaan kedua dari

persamaan pertama, diperoleh $-5x_2 = -7c$, sehingga $x_2 = 7c/5$. Substitusi ke $x_1 + 3x_2 = 2c$ memberi $x_1 = -11c/5$. Jadi penyelesaian umum adalah $x_1 = -11c/5$, $x_2 = 7c/5$, $x_3 = c$. Untuk menghindari pecahan, definisikan $s \equiv c/5$ sehingga $x_1 = -11s$, $x_2 = 7s$, dan $x_3 = 5s$.

Latihan. (a) Verifikasilah bahwa determinan koefisien pada contoh ini nol. (b) Verifikasilah bahwa persamaan ketiga dapat diperoleh dengan menambahkan suatu kelipatan tertentu dari persamaan kedua kepada persamaan pertama.

Prosedur di atas gagal jika determinan sistem tak homogen berorde $n-1$ yang tersisa juga nol. Aturan Cramer kemudian mempunyai penyebut nol. Kesulitan ini dapat dicoba diatasi dengan memberi nilai sembarang pada peubah lain, atau membuang persamaan lain. Yang dicari adalah minor berorde $n-1$ yang tidak nol dari determinan koefisien (8.37). Jika minor demikian ada, pemilihan yang tepat menghasilkan penyelesaian bentuk (8.39). Jika tidak ada, dua peubah harus diberi nilai sembarang dan proses diulangi. Dengan demikian, penyelesaian (8.37) dapat mengandung dua atau lebih konstanta sembarang.

Cara efisien untuk menyelesaikan sistem persamaan linear homogen adalah eliminasi Gauss–Jordan. Jika hanya penyelesaian trivial yang ada, himpunan akhir menjadi $x_1 = 0$, $x_2 = 0$, ..., $x_n = 0$. Jika terdapat penyelesaian nontrivial, sekurang-kurangnya satu persamaan akan tereduksi menjadi $0 = 0$. Jika m persamaan $0 = 0$ diperoleh, tetapkan konstanta sembarang pada m peubah dan nyatakan peubah lainnya dalam m peubah tersebut.

Contoh: penyelesaian dengan eliminasi Gauss–Jordan

Gunakan eliminasi Gauss–Jordan untuk menyelesaikan sistem pada contoh sebelumnya. Dalam eliminasi Gaussian atau Gauss–Jordan, penulisan dapat dipersingkat dengan menghilangkan simbol x_1, ..., x_n dan hanya menulis susunan koefisien dan konstanta. Untuk menghindari satu pembagian, persamaan pertama dan kedua dipertukarkan sehingga koefisien pertama bernilai 1:

$$\begin{matrix} [1\ \ 3\ -2 \mid 0] & \rightarrow & [1\ \ 3\ -2 \mid 0] & \rightarrow & [1\ \ 3\ -2 \mid 0] & \rightarrow & [1\ \ 0\ \ 11/5 \mid 0] \\ [3\ \ 4\ \ 1 \mid 0] & & [0\ -5\ \ 7 \mid 0] & & [0\ \ 1\ -7/5 \mid 0] & & [0\ \ 1\ -7/5 \mid 0] \\ [1\ -2\ \ 5 \mid 0] & & [0\ -5\ \ 7 \mid 0] & & [0\ -5\ \ 7 \mid 0] & & [0\ \ 0\ \ \ 0\ \ \mid 0] \end{matrix}$$

Susunan pertama adalah sistem semula dengan persamaan pertama dan kedua dipertukarkan. Untuk menghilangkan x_1 dari baris kedua dan ketiga, dikurangkan tiga kali baris pertama dari baris kedua dan satu kali baris pertama dari baris ketiga. Pembagian baris kedua dengan -5 memberikan susunan ketiga. Untuk menghilangkan x_2 dari baris pertama dan ketiga, dikurangkan tiga kali baris kedua dari baris pertama dan -5 kali baris kedua dari baris ketiga. Baris terakhir menjadi $0 = 0$, sehingga $x_3 = k$ ditetapkan sebagai konstanta sembarang. Dua baris pertama memberi $x_1 + (11/5)x_3 = 0$ dan $x_2 - (7/5)x_3 = 0$. Penyelesaian umum adalah $x_1 = -11k/5$, $x_2 = 7k/5$, $x_3 = k$.

8.5 Fungsi Variasi Linear

Jenis khusus fungsi variasi yang banyak digunakan dalam kajian molekul adalah fungsi variasi linear. Fungsi variasi linear merupakan kombinasi linear dari n fungsi yang bebas linear, f_1, f_2, ..., f_n:

$$\varphi = c_1 f_1 + c_2 f_2 + \cdots + c_n f_n = \Sigma_{j=1}^{n} c_j f_j \tag{8.40}$$

Di sini φ adalah fungsi variasi coba, sedangkan koefisien c_j adalah parameter yang harus ditentukan dengan meminimumkan integral variasional. Fungsi-fungsi f_j, yang disebut fungsi basis, harus memenuhi syarat batas masalah. Untuk sementara pembahasan dibatasi pada φ real, sehingga semua c_j dan f_j real. Fungsi f_j dalam (8.40) merupakan fungsi yang diketahui.

Sekarang teorema variasi (8.9) diterapkan. Untuk fungsi variasi linear real, penyebut integral variasional adalah

$$\begin{aligned} \int \varphi^* \varphi d\tau &= \int (\Sigma_{j=1}^{n} c_j f_j)(\Sigma_{k=1}^{n} c_k f_k) d\tau \\ &= \Sigma_{j=1}^{n} \Sigma_{k=1}^{n} c_j c_k \int f_j f_k d\tau \equiv \Sigma_{j=1}^{n} \Sigma_{k=1}^{n} c_j c_k S_{jk} \end{aligned} \tag{8.41}$$

Integral tumpang-tindih S_{jk} didefinisikan sebagai

$$S_{jk} \equiv \int f_j^* f_k d\tau \tag{8.42}$$

Perhatikan bahwa S_{jk} tidak harus sama dengan δ_{jk} karena tidak ada alasan untuk menganggap fungsi-fungsi f_j saling ortogonal. Fungsi basis ini juga tidak harus merupakan fungsi eigen suatu operator. Pembilang (8.9) adalah

$$\begin{aligned} \int \varphi^* \hat{H} \varphi d\tau &= \int (\Sigma_{j=1}^{n} c_j f_j) \hat{H} (\Sigma_{k=1}^{n} c_k f_k) d\tau \\ &= \Sigma_{j=1}^{n} \Sigma_{k=1}^{n} c_j c_k \int f_j \hat{H} f_k d\tau \equiv \Sigma_{j=1}^{n} \Sigma_{k=1}^{n} c_j c_k H_{jk} \end{aligned}$$

Elemen Hamiltonian H_{jk} didefinisikan sebagai

$$H_{jk} \equiv \int f_j^* \hat{H} f_k d\tau \tag{8.43}$$

Integral variasional W adalah

$$\begin{aligned} W &\equiv (\int \varphi^* \hat{H} \varphi d\tau)/(\int \varphi^* \varphi d\tau) \\ &= [\Sigma_{j=1}^{n} \Sigma_{k=1}^{n} c_j c_k H_{jk}]/[\Sigma_{j=1}^{n} \Sigma_{k=1}^{n} c_j c_k S_{jk}] \end{aligned} \tag{8.44}$$

$$W \Sigma_{j=1}^{n} \Sigma_{k=1}^{n} c_j c_k S_{jk} = \Sigma_{j=1}^{n} \Sigma_{k=1}^{n} c_j c_k H_{jk} \tag{8.45}$$

Sekarang W diminimumkan agar sedekat mungkin dengan E_1, dengan tetap memenuhi $W \geq E_1$. Integral variasional W adalah fungsi dari n peubah bebas c_1, c_2, ..., c_n: $W = W(c_1, c_2, ..., c_n)$. Syarat perlu agar suatu fungsi beberapa peubah memiliki minimum adalah bahwa turunan parsialnya terhadap setiap peubah bernilai nol pada titik minimum:

$$\partial W / \partial c_i = 0, \quad i = 1,2,...,n \tag{8.46}$$

Pers. (8.45) kemudian didiferensialkan secara parsial terhadap setiap c_i, menghasilkan n persamaan:

$$(\partial W/\partial c_i)\Sigma_j\Sigma_k c_j c_k S_{jk} + W\partial/\partial c_i(\Sigma_j\Sigma_k c_j c_k S_{jk}) = \partial/\partial c_i(\Sigma_j\Sigma_k c_j c_k H_{jk}), \quad i=1,2,...,n \tag{8.47}$$

Untuk mengevaluasi turunan pada (8.47), perhatikan bahwa

$$\partial/\partial c_i(\Sigma_j\Sigma_k c_j c_k S_{jk}) = \Sigma_j\Sigma_k[(\partial c_j/\partial c_i)c_k + c_j(\partial c_k/\partial c_i)]S_{jk}$$

Koefisien c_j merupakan peubah bebas, sehingga $\partial c_j/\partial c_i = 0$ jika $j \neq i$ dan sama dengan 1 jika j = i. Dengan delta Kronecker,

$$\partial c_j/\partial c_i = \delta_{ij} \tag{8.48}$$

Karena itu

$$\begin{aligned}&\partial/\partial c_i(\Sigma_j\Sigma_k c_j c_k S_{jk})\\ &= \Sigma_k\Sigma_j c_k\delta_{ij}S_{jk} + \Sigma_j\Sigma_k c_j\delta_{ik}S_{jk}\\ &= \Sigma_k c_k S_{ik} + \Sigma_j c_j S_{ji}\end{aligned}$$

Salah satu penjumlahan dalam setiap penjumlahan ganda telah dievaluasi dengan Pers. (7.32). Penggunaan (7.4) memberikan

$$S_{ji} = S_{ij}^* = S_{ij} \tag{8.49}$$

Kesamaan terakhir berlaku karena semua fungsi yang sedang dibahas real. Maka

$$\begin{aligned}&\partial/\partial c_i(\Sigma_j\Sigma_k c_j c_k S_{jk})\\ &= \Sigma_k c_k S_{ik} + \Sigma_j c_j S_{ij} = 2\Sigma_k c_k S_{ik}\end{aligned} \tag{8.50}$$

Pada langkah terakhir digunakan fakta bahwa indeks j hanyalah indeks semu. Dengan mengganti S_{jk} oleh H_{jk} dalam manipulasi yang sama, diperoleh

$$\partial/\partial c_i(\Sigma_j\Sigma_k c_j c_k H_{jk}) = 2\Sigma_k c_k H_{ik} \tag{8.51}$$

Hasil ini bergantung pada hubungan

$$H_{ji} = H_{ij}^* = H_{ij} \tag{8.52}$$

yang benar karena $\hat{H}$ Hermitian serta f_i, f_j, dan $\hat{H}$ real. Substitusi (8.46), (8.50), dan (8.51) ke (8.47) menghasilkan

$$\begin{aligned}&2W\Sigma_{k=1}^{n} c_k S_{ik} = 2\Sigma_{k=1}^{n} c_k H_{ik}\\ &\Sigma_{k=1}^{n}[(H_{ik} - S_{ik}W)c_k] = 0, \quad i = 1,2,...,n\end{aligned} \tag{8.53}$$

Pers. (8.53) merupakan himpunan n persamaan linear homogen simultan dalam n peubah c_1, c_2, ..., c_n, yaitu koefisien fungsi variasi linear (8.40). Untuk n = 2, bentuknya adalah

$$(H_{11}-S_{11}W)c_1 + (H_{12}-S_{12}W)c_2 = 0$$
$$(H_{21}-S_{21}W)c_1 + (H_{22}-S_{22}W)c_2 = 0 \tag{8.54}$$

Untuk kasus umum n fungsi basis, (8.53) menjadi

$$\begin{aligned}(H_{11}-S_{11}W)c_1 + (H_{12}-S_{12}W)c_2 + \cdots + (H_{1n}-S_{1n}W)c_n = 0\\ (H_{21}-S_{21}W)c_1 + (H_{22}-S_{22}W)c_2 + \cdots + (H_{2n}-S_{2n}W)c_n = 0\\ \vdots\\ (H_{n1}-S_{n1}W)c_1 + (H_{n2}-S_{n2}W)c_2 + \cdots + (H_{nn}-S_{nn}W)c_n = 0\end{aligned} \tag{8.55}$$

Menurut teorema Bagian 8.4, agar persamaan homogen (8.55) mempunyai penyelesaian selain penyelesaian trivial $c_1 = c_2 = \cdots = c_n = 0$, yang akan membuat $\varphi = 0$, determinan koefisiennya harus nol. Untuk n = 2,

$$\begin{vmatrix}H_{11}-S_{11}W & H_{12}-S_{12}W\\ H_{21}-S_{21}W & H_{22}-S_{22}W\end{vmatrix} = 0 \tag{8.56}$$

dan untuk kasus umum

$$\det(H_{ij} - S_{ij}W) = 0 \tag{8.57}$$

$$\begin{vmatrix}H_{11}-S_{11}W & H_{12}-S_{12}W & \cdots & H_{1n}-S_{1n}W\\ H_{21}-S_{21}W & H_{22}-S_{22}W & \cdots & H_{2n}-S_{2n}W\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ H_{n1}-S_{n1}W & H_{n2}-S_{n2}W & \cdots & H_{nn}-S_{nn}W\end{vmatrix} = 0 \tag{8.58}$$

Ekspansi determinan (8.58) memberikan persamaan aljabar berderajat n dalam peubah W. Persamaan ini mempunyai n akar yang dapat dibuktikan real. Dengan menyusun akar menurut nilai yang meningkat, ditulis

$$W_1 \le W_2 \le \cdots \le W_n \tag{8.59}$$

Jika keadaan terikat sistem diberi nomor menurut kenaikan energi,

$$E_1 \le E_2 \le \cdots \le E_n \le E_{n+1} \le \cdots \tag{8.60}$$

Dari teorema variasi diketahui $E_1 \le W_1$. Lebih jauh dapat dibuktikan bahwa

$$E_1 \le W_1,\ E_2 \le W_2,\ E_3 \le W_3,\ \ldots,\ E_n \le W_n \tag{8.61}$$

Bukti formal dikaitkan dalam sumber dengan J. K. L. MacDonald, Physical Review 43, 830 (1933), R. H. Young, International Journal of Quantum Chemistry 6, 596 (1972), dan Soal 8.40. Jadi metode variasi linear memberikan batas atas bagi energi n keadaan terikat terendah. Akar W_1, W_2, ..., W_n dipakai sebagai pendekatan bagi energi keadaan-keadaan terendah. Jika pendekatan bagi lebih banyak keadaan diperlukan, lebih banyak fungsi f_k ditambahkan ke fungsi coba. Penambahan fungsi basis dapat dibuktikan meningkatkan, atau setidaknya tidak mengurangi, ketelitian energi yang telah dihitung. Jika fungsi-fungsi f_k

membentuk himpunan lengkap, fungsi gelombang sejati sistem akan diperoleh. Sayangnya, biasanya diperlukan jumlah fungsi tak hingga agar himpunan benar-benar lengkap.

Ahli kimia kuantum dapat menggunakan puluhan, ratusan, ribuan, bahkan jutaan suku dalam fungsi variasi linear untuk memperoleh hasil molekuler yang teliti. Komputer jelas sangat diperlukan. Cara paling efisien untuk menyelesaikan (8.58), yang disebut persamaan sekuler, beserta persamaan linear (8.55), adalah dengan metode matriks pada Bagian 8.6.

Untuk memperoleh pendekatan fungsi gelombang keadaan dasar, akar terendah W_1 dari persamaan sekuler disubstitusikan ke (8.55). Himpunan persamaan itu kemudian diselesaikan untuk koefisien $c_1^{(1)}$, $c_2^{(1)}$, ..., $c_n^{(1)}$. Superskrip (1) menunjukkan bahwa koefisien-koefisien tersebut bersesuaian dengan W_1. Seperti dicatat pada bagian sebelumnya, hanya rasio koefisien yang dapat ditentukan dari persamaan homogen. Koefisien $c_2^{(1)}$, ..., $c_n^{(1)}$ dinyatakan dalam $c_1^{(1)}$, kemudian $c_1^{(1)}$ ditentukan dengan normalisasi. Setelah koefisien ditemukan, $\varphi_1 = \Sigma_k c_k^{(1)} f_k$ digunakan sebagai pendekatan fungsi gelombang keadaan dasar. Akar-akar yang lebih tinggi memberikan pendekatan fungsi gelombang keadaan tereksitasi. Fungsi-fungsi pendekatan ini dapat dibuktikan saling ortogonal; lihat Soal 8.40.

Penyelesaian (8.58) dan (8.55) dipermudah jika sebanyak mungkin integral dibuat nol. Beberapa H_{ij} di luar diagonal dapat dibuat nol dengan memilih f_k sebagai fungsi eigen operator $\hat{A}$ yang berkomutasi dengan $\hat{H}$. Jika f_i dan f_j bersesuaian dengan nilai eigen $\hat{A}$ yang berbeda, H_{ij} lenyap menurut Teorema 6 Bagian 7.4. Jika fungsi basis ortonormal, elemen S_{ij} di luar diagonal juga lenyap, $S_{ij} = \delta_{ij}$. Jika fungsi awal tidak ortogonal, prosedur Schmidt atau prosedur lain dapat digunakan untuk membentuk n kombinasi linear yang ortogonal. Pers. (8.55) dan (8.58) tetap berlaku ketika pembatasan fungsi variasi real dihilangkan; lihat Soal 8.39.

Contoh: empat fungsi basis untuk partikel dalam kotak

Tambahkan fungsi-fungsi kepada $x(l-x)$ pada contoh pertama Bagian 8.1 untuk membentuk fungsi variasi linear bagi partikel dalam kotak satu dimensi panjang l. Temukan energi dan fungsi gelombang pendekatan bagi empat keadaan terendah.

Dalam $\varphi = \Sigma_{k=1}^{n} c_k f_k$, dipilih $f_1 = x(l-x)$. Karena empat keadaan terendah hendak diperkirakan, diperlukan sekurang-kurangnya n = 4. Terdapat tak hingga banyak fungsi berperilaku baik yang dapat dipilih untuk f_2, f_3, dan f_4. Fungsi $x^2(l-x)^2$ memenuhi syarat batas $x = 0$ dan $x = l$ serta menghasilkan integral sederhana, sehingga dipilih $f_2 = x^2(l-x)^2$.

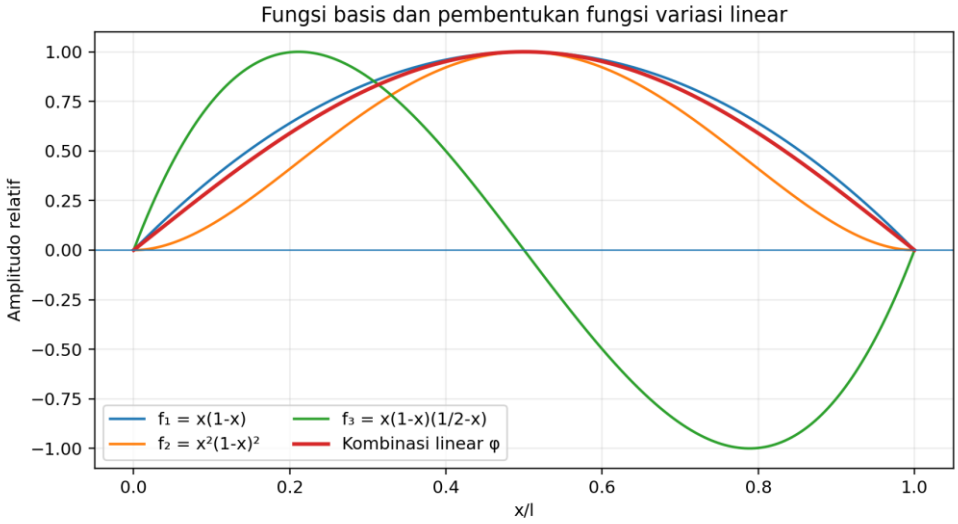
Apabila titik asal ditempatkan di pusat kotak, energi potensial merupakan fungsi genap. Fungsi gelombang kemudian berselang-seling genap dan ganjil. Istilah genap dan ganjil pada contoh ini selalu mengacu pada titik asal di pusat kotak. Fungsi f_1 dan f_2 sama-sama genap. Jika hanya $\varphi = c_1 x(l-x) + c_2 x^2(l-x)^2$ yang

digunakan, hasilnya adalah batas atas bagi dua keadaan genap terendah, yaitu keadaan n = 1 dan n = 3, beserta fungsi gelombang pendekatannya.

Untuk memperkirakan keadaan n = 2 dan n = 4, ditambahkan dua fungsi ganjil. Fungsi ganjil harus nol di titik asal, yang sekarang berada di x = l/2, serta harus nol di x = 0 dan x = l. Fungsi sederhana yang memenuhi ketiga syarat adalah $f_3 = x(l-x)(l/2-x)$. Fungsi keempat diperoleh dengan mengalikan f_2 dengan $(l/2-x)$. Jadi

$$f_1 = x(l-x), \quad f_2 = x^2(l-x)^2, \\ f_3 = x(l-x)(l/2-x), \quad f_4 = x^2(l-x)^2(l/2-x) \tag{8.62}$$

Keempat fungsi ini bebas linear, sebagaimana diasumsikan dalam (8.40).



Gambar 8.B. Ilustrasi orisinal beberapa fungsi basis pada kotak satu dimensi dan pembentukan kombinasi linear; bukan salinan gambar sumber.

Karena f_1 dan f_2 genap, sedangkan f_3 dan f_4 ganjil, banyak integral lenyap. Untuk integral tumpang-tindih,

$$S_{13}=S_{31}=0,\ S_{14}=S_{41}=0,\ S_{23}=S_{32}=0,\ S_{24}=S_{42}=0 \tag{8.63}$$

sebab integran setiap integral tersebut ganjil terhadap titik asal di pusat kotak. Fungsi f_1, f_2, f_3, dan f_4 merupakan fungsi eigen operator paritas $\hat{P}$; f_1 dan f_2 memiliki nilai eigen +1, sedangkan f_3 dan f_4 memiliki nilai eigen −1. Operator paritas berkomutasi dengan $\hat{H}$ karena V genap. Berdasarkan Teorema 6 Bagian 7.4, H_{ij} lenyap jika f_i ganjil dan f_j genap atau sebaliknya:

$$H_{13}=H_{31}=0,\ H_{14}=H_{41}=0,\ H_{23}=H_{32}=0,\ H_{24}=H_{42}=0 \tag{8.64}$$

Dari (8.63) dan (8.64), persamaan sekuler n = 4 menjadi determinan blok-diagonal

$$\begin{vmatrix} H_{11}-S_{11}W & H_{12}-S_{12}W & 0 & 0 \\ H_{21}-S_{21}W & H_{22}-S_{22}W & 0 & 0 \\ 0 & 0 & H_{33}-S_{33}W & H_{34}-S_{34}W \\ 0 & 0 & H_{43}-S_{43}W & H_{44}-S_{44}W \end{vmatrix} = 0 \tag{8.65}$$

Determinan sekuler ini sama dengan hasil kali dua bloknya, sehingga empat akar diperoleh dari dua persamaan orde dua:

$$\begin{vmatrix} H_{11}-S_{11}W & H_{12}-S_{12}W \\ H_{21}-S_{21}W & H_{22}-S_{22}W \end{vmatrix} = 0 \tag{8.66}$$

$$\begin{vmatrix} H_{33}-S_{33}W & H_{34}-S_{34}W \\ H_{43}-S_{43}W & H_{44}-S_{44}W \end{vmatrix} = 0 \tag{8.67}$$

Akar-akar (8.66), yang mendekati energi n = 1 dan n = 3, disebut W_1 dan W_3. Akar-akar (8.67) disebut W_2 dan W_4. Setelah persamaan sekuler diselesaikan, setiap W disubstitusikan ke (8.55) untuk menentukan koefisien c_k. Untuk akar W_1, diperoleh dua pasang persamaan:

$$\begin{aligned} (H_{11}-S_{11}W_1)c_1^{(1)} + (H_{12}-S_{12}W_1)c_2^{(1)} &= 0 \\ (H_{21}-S_{21}W_1)c_1^{(1)} + (H_{22}-S_{22}W_1)c_2^{(1)} &= 0 \end{aligned} \tag{8.68a}$$

$$\begin{aligned} (H_{33}-S_{33}W_1)c_3^{(1)} + (H_{34}-S_{34}W_1)c_4^{(1)} &= 0 \\ (H_{43}-S_{43}W_1)c_3^{(1)} + (H_{44}-S_{44}W_1)c_4^{(1)} &= 0 \end{aligned} \tag{8.68b}$$

Karena W_1 merupakan akar (8.66), determinan koefisien pada (8.68a) nol dan terdapat penyelesaian nontrivial bagi $c_1^{(1)}$ dan $c_2^{(1)}$. Akan tetapi W_1 bukan akar (8.67), sehingga determinan koefisien (8.68b) tidak nol dan hanya terdapat penyelesaian trivial $c_3^{(1)} = c_4^{(1)} = 0$. Dengan alasan yang sama, φ_3 merupakan kombinasi linear f_1 dan f_2, sedangkan φ_2 dan φ_4 merupakan kombinasi linear f_3 dan f_4:

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= c_1^{(1)}f_1 + c_2^{(1)}f_2, \quad \varphi_3 = c_1^{(3)}f_1 + c_2^{(3)}f_2 \\ \varphi_2 &= c_3^{(2)}f_3 + c_4^{(2)}f_4, \quad \varphi_4 = c_3^{(4)}f_3 + c_4^{(4)}f_4 \end{aligned} \tag{8.69}$$

Fungsi gelombang genap ψ_1 dan ψ_3 didekati dengan kombinasi linear fungsi genap f_1 dan f_2; fungsi gelombang ganjil ψ_2 dan ψ_4 didekati dengan kombinasi linear fungsi ganjil f_3 dan f_4. Secara umum, ketika persamaan sekuler berbentuk blok-diagonal, persamaan itu memfaktor menjadi dua atau lebih persamaan sekuler yang lebih kecil dan sistem persamaan simultan (8.55) juga terpecah menjadi himpunan-himpunan yang lebih kecil.

Untuk menyelesaikan (8.66) dan (8.67), integral H_{ij} dan S_{ij} harus dievaluasi. Dengan (8.12) dan (8.13),

$$H_{11} = \langle f_1|\hat{H}|f_1\rangle = \int_0^l x(l-x)[-\hbar^2/(2m)]d^2[x(l-x)]/dx^2\,dx = \hbar^2 l^3/(6m)$$
$$S_{11} = \langle f_1|f_1\rangle = \int_0^l x^2(l-x)^2 dx = l^5/30$$

Evaluasi integral lainnya dengan (8.62), (8.49), dan (8.52) memberikan (Soal 8.35)

$$H_{12}=H_{21}=\hbar^2 l^5/(30m),\ \ H_{22}=\hbar^2 l^7/(105m)$$
$$H_{33}=\hbar^2 l^5/(40m),\ \ H_{44}=\hbar^2 l^9/(1260m),\ \ H_{34}=H_{43}=\hbar^2 l^7/(280m)$$
$$S_{12}=S_{21}=l^7/140,\ \ S_{22}=l^9/630$$
$$S_{33}=l^7/840,\ \ S_{44}=l^{11}/27720,\ \ S_{34}=S_{43}=l^9/5040$$

Pers. (8.66) kemudian menjadi

$$\begin{vmatrix} \hbar^2 l^3/(6m) - (l^5/30)W & \hbar^2 l^5/(30m) - (l^7/140)W \\ \hbar^2 l^5/(30m) - (l^7/140)W & \hbar^2 l^7/(105m) - (l^9/630)W \end{vmatrix} = 0 \qquad (8.70)$$

Dengan Teorema IV Bagian 8.3, pecahan dihilangkan dengan mengalikan baris pertama oleh $420m/l^3$ dan baris kedua oleh $1260m/l^5$. Hasilnya adalah

$$\begin{vmatrix} 70\hbar^2 - 14ml^2W & 14\hbar^2 l^2 - 3ml^4W \\ 42\hbar^2 - 9ml^2W & 12\hbar^2 l^2 - 2ml^4W \end{vmatrix} = 0$$

$$m^2 l^4 W^2 - 56ml^2\hbar^2 W + 252\hbar^4 = 0$$

$$W = (\hbar^2/ml^2)(28 \pm \sqrt{532}) = 0{,}1250018\ h^2/(ml^2),\ 1{,}293495\ h^2/(ml^2) \qquad (8.71)$$

Substitusi integral ke (8.67) memberikan akar-akar

$$W = (\hbar^2/ml^2)(60 \pm \sqrt{1620}) = 0{,}5002930\ h^2/(ml^2),\ 2{,}5393425\ h^2/(ml^2) \qquad (8.72)$$

Nilai pendekatan $(ml^2/h^2)W$ adalah 0,1250018; 0,5002930; 1,293495; dan 2,5393425. Nilai eksak dari Pers. (2.20) adalah 0,125; 0,5; 1,125; dan 2 untuk empat keadaan terendah. Galat persennya berturut-turut 0,0014%, 0,059%, 15,0%, dan 27,0% untuk n = 1, 2, 3, dan 4. Pendekatan sangat baik bagi n = 1 dan 2, tetapi buruk bagi n = 3 dan 4.

Selanjutnya dicari fungsi gelombang pendekatan yang bersesuaian dengan W tersebut. Substitusi $W_1 = 0{,}1250018h^2/(ml^2)$ ke (8.68a), setelah pembagian oleh h^2, memberikan

$$\begin{aligned} 0{,}023095c_1^{(1)} - 0{,}020381l^2c_2^{(1)} &= 0 \\ -0{,}061144c_1^{(1)} + 0{,}053960l^2c_2^{(1)} &= 0 \end{aligned} \qquad (8.73)$$

Sebagai contoh, koefisien pertama berasal dari $70\hbar^2 - 14ml^2W = 70h^2/(4\pi^2) - 14(0{,}1250018)h^2 = 0{,}023095h^2$. Untuk menyelesaikan persamaan homogen (8.73), persamaan kedua dapat dibuang, suku $c_2^{(1)}$ dipindahkan ke ruas kanan, dan rasio koefisien ditentukan. Diperoleh $c_1^{(1)} = k$ dan $c_2^{(1)} = 1{,}133k/l^2$.

Konstanta k ditentukan dari normalisasi:

$$1 = \langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = \langle kf_1 + 1{,}133kf_2/l^2 \mid kf_1 + 1{,}133kf_2/l^2\rangle$$
$$= k^2[S_{11} + 2{,}266S_{12}/l^2 + 1{,}284S_{22}/l^4] = 0{,}05156k^2l^5$$

Karena itu $k = 4{,}404/l^{5/2}$ dan

$$\varphi_1 = c_1^{(1)}f_1 + c_2^{(1)}f_2 = 4{,}404f_1/l^{5/2} + 4{,}990f_2/l^{9/2}$$
$$= l^{-1/2}[4{,}404(x/l)(1-x/l) + 4{,}990(x/l)^2(1-x/l)^2] \tag{8.74}$$

Dengan menggunakan W_2, W_3, dan W_4 secara bergantian dalam (8.55), diperoleh fungsi variasi linear ternormalisasi berikut, dengan $X \equiv x/l$:

$$\varphi_2 = l^{-1/2}[16{,}78X(1-X)(1/2-X) + 71{,}85X^2(1-X)^2(1/2-X)]$$
$$\varphi_3 = l^{-1/2}[28{,}65X(1-X) - 132{,}7X^2(1-X)^2] \tag{8.75}$$
$$\varphi_4 = l^{-1/2}[98{,}99X(1-X)(1/2-X) - 572{,}3X^2(1-X)^2(1/2-X)]$$

8.6 Matriks, Nilai Eigen, dan Vektor Eigen

Aljabar matriks, yang diperkenalkan pada Bagian 7.10, dikembangkan pada 1855–1858 oleh matematikawan Inggris Arthur Cayley sebagai cara singkat menangani persamaan linear simultan dan transformasi linear dari satu himpunan peubah ke himpunan lain. Cayley harus bekerja sebagai pengacara selama 14 tahun untuk menghidupi diri sebelum memperoleh jabatan profesor pada 1860. Selama bekerja sebagai pengacara, ia menerbitkan ratusan makalah matematika dan secara teratur mendiskusikan matematika dengan sesama pengacara John Joseph Sylvester. Sylvester menciptakan istilah matrix untuk susunan persegi panjang, dari kata Latin yang berarti "rahim", dan memperoleh jabatan profesor matematika pada 1855.

Aljabar matriks tidak dikenal oleh kebanyakan fisikawan selama bertahun-tahun. Ketika Heisenberg menemukan formulasi mekanika matriks pada 1925, ia tidak menyadari bahwa entitas yang digunakannya adalah matriks. Setelah pekerjaannya ditunjukkan kepada Born, Born yang terlatih dalam matematika mengenali struktur matriks tersebut. Kini aljabar matriks merupakan alat penting dalam komputasi kimia kuantum dan digunakan luas dalam hampir semua cabang fisika.

Sistem persamaan linear tak homogen (8.35) dapat ditulis sebagai persamaan matriks

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \tag{8.76}$$

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{8.77}$$

A adalah matriks koefisien, sedangkan x dan b adalah matriks kolom. Kesetaraan (8.35) dan (8.76) dapat diverifikasi langsung dengan aturan perkalian matriks (7.107).

Determinan suatu matriks persegi A adalah determinan yang elemen-elemennya sama dengan elemen A. Jika det $A \neq 0$, matriks A disebut nonsingular.

Invers matriks persegi A berorde n adalah matriks persegi yang hasil kalinya dengan A sama dengan matriks satuan berorde n. Dengan A^{-1} sebagai invers,

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I \tag{8.78}$$

Dapat dibuktikan bahwa A^{-1} ada jika dan hanya jika det $A \neq 0$. Metode efisien menghitung A^{-1} dibahas dalam Press dan kawan-kawan, Bagian 2.3, Shoup, Bagian 3.3, serta Soal 8.51; banyak lembar kerja memiliki fungsi bawaan untuk invers matriks.

Jika det $A \neq 0$ pada (8.76), kalikan (8.77) dari kiri dengan A^{-1}. Karena perkalian matriks asosiatif, $A^{-1}(Ax) = (A^{-1}A)x = Ix = x$. Jadi penyelesaian sistem tak homogen adalah $x = A^{-1}b$.

Metode variasi linear banyak digunakan untuk mencari fungsi gelombang molekul pendekatan, dan aljabar matriks memberi cara komputasi paling efisien untuk menyelesaikan persamaan metode variasi linear. Jika fungsi $f_1, \ldots, f_n$ pada $\varphi = \Sigma_k c_k f_k$ dibuat ortonormal, maka $S_{ij} = \int f_i^* f_j d\tau = \delta_{ij}$. Persamaan homogen (8.55) menjadi

$$\begin{aligned} H_{11}c_1 + H_{12}c_2 + \cdots + H_{1n}c_n &= Wc_1 \\ H_{21}c_1 + H_{22}c_2 + \cdots + H_{2n}c_n &= Wc_2 \\ &\vdots \\ H_{n1}c_1 + H_{n2}c_2 + \cdots + H_{nn}c_n &= Wc_n \end{aligned} \tag{8.79a}$$

$$\begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} = W \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \tag{8.79b}$$

$$Hc = Wc \tag{8.79c}$$

H adalah matriks persegi yang elemennya $H_{ij} = \langle f_i | \hat{H} | f_j \rangle$ dan c adalah vektor kolom koefisien. Matriks H diketahui, sedangkan c dan W harus dicari.

Secara umum, jika

$$Ac = \lambda c \tag{8.80}$$

dengan A matriks persegi, c vektor kolom yang sekurang-kurangnya mempunyai satu elemen tak nol, dan λ skalar, maka c disebut vektor eigen atau vektor karakteristik A dan λ disebut nilai eigen atau nilai karakteristik A.

Perbandingan (8.80) dan (8.79c) menunjukkan bahwa penyelesaian masalah variasi linear dengan $S_{ij} = \delta_{ij}$ setara dengan mencari nilai dan vektor eigen matriks H. Persamaan Hc = Wc setara dengan persamaan homogen (8.55), yang mempunyai penyelesaian nontrivial jika dan hanya jika $\det(H_{ij} - \delta_{ij}W) = 0$. Untuk matriks persegi umum A berorde n, nilai eigennya memenuhi

$$\det(A_{ij} - \delta_{ij}\lambda) = 0 \tag{8.81}$$

Pers. (8.81) disebut persamaan karakteristik A. Ekspansi determinan menghasilkan polinom karakteristik berderajat n dalam λ. Polinom ini mempunyai n akar, beberapa dapat sama dan beberapa dapat kompleks, sehingga matriks persegi orde n mempunyai n nilai eigen dengan memperhitungkan kelipatannya. Himpunan nilai eigen matriks kadang-kadang disebut spektrum matriks.

Elemen-elemen vektor eigen A memenuhi sistem persamaan

$$\begin{aligned} A_{11}c_1 + A_{12}c_2 + \cdots + A_{1n}c_n &= \lambda c_1 \\ &\vdots \\ A_{n1}c_1 + A_{n2}c_2 + \cdots + A_{nn}c_n &= \lambda c_n \end{aligned} \tag{8.82}$$

Untuk setiap nilai eigen yang berbeda, terdapat sistem (8.82) yang berbeda dan sekumpulan $c_1, c_2, \ldots, c_n$ yang berbeda, sehingga diperoleh vektor eigen berbeda.

Jika semua nilai eigen matriks berbeda, penyelesaian (8.82) menghasilkan n vektor eigen yang bebas linear. Kebebasan linear berarti tidak ada satu vektor eigen yang dapat ditulis sebagai kombinasi linear vektor eigen lainnya. Jika beberapa nilai eigen sama, matriks umum mungkin mempunyai kurang dari n vektor eigen bebas linear. Matriks yang muncul dalam mekanika kuantum biasanya Hermitian; matriks Hermitian orde n selalu mempunyai n vektor eigen bebas linear sekalipun beberapa nilai eigennya sama.

Jika A adalah matriks diagonal, determinan dalam (8.81) juga diagonal. Karena determinan diagonal sama dengan hasil kali elemen diagonalnya, persamaan karakteristik adalah $(a_{11}-\lambda)(a_{22}-\lambda)\cdots(a_{nn}-\lambda) = 0$. Jadi nilai eigen matriks diagonal sama dengan elemen diagonalnya. Vektor eigennya dibahas pada Soal 8.46.

Jika c merupakan vektor eigen A, maka d ≡ kc juga merupakan vektor eigen A untuk setiap konstanta k. Jika k dipilih sehingga

$$\Sigma_{i=1}^{n}|d_i|^2 = 1 \tag{8.83}$$

vektor kolom d disebut ternormalisasi. Dua vektor kolom b dan c, masing-masing dengan n elemen, disebut ortogonal jika

$$\Sigma_{i=1}^{n}b_i^*c_i = 0 \tag{8.84}$$

Nyatakan n nilai eigen dan vektor eigen yang bersesuaian dari H dalam persamaan variasi (8.79) sebagai $W_1, W_2, \ldots, W_n$ dan $c^{(1)}, c^{(2)}, \ldots, c^{(n)}$, sehingga

$$Hc^{(i)} = W_i c^{(i)}, \quad i = 1,2,...,n \tag{8.85}$$

Setiap $c^{(i)}$ adalah vektor kolom dengan elemen $c_1^{(i)}$, ..., $c_n^{(i)}$, dan fungsi basis diasumsikan ortonormal. Misalkan C adalah matriks persegi yang kolom-kolomnya merupakan vektor eigen H, sedangkan W adalah matriks diagonal yang elemen diagonalnya adalah nilai eigen H:

$$\begin{gathered} C = [c^{(1)}\ c^{(2)}\ \cdots\ c^{(n)}], \\ W = \mathrm{diag}(W_1, W_2, ..., W_n) \end{gathered} \tag{8.86}$$

Himpunan n persamaan nilai eigen (8.85) dapat ditulis sebagai satu persamaan matriks:

$$HC = CW \tag{8.87}$$

Untuk memverifikasi (8.87), aturan perkalian matriks memberikan $(HC)_{ij} = \Sigma_k H_{ik} C_{kj} = \Sigma_k H_{ik} c_k^{(j)}$. Dari persamaan nilai eigen $Hc^{(j)} = W_j c^{(j)}$, elemen baris ke-i memberikan $\Sigma_k H_{ik} c_k^{(j)} = W_j c_i^{(j)}$. Sementara itu, $(CW)_{ij} = \Sigma_k C_{ik} W_{kj} = \Sigma_k c_i^{(k)} \delta_{kj} W_k = c_i^{(j)} W_j$. Jadi setiap elemen HC sama dengan elemen CW yang bersesuaian.

Asalkan C mempunyai invers, kedua ruas (8.87) dapat dikalikan dari kiri dengan C^{-1}. Karena perkalian matriks tidak komutatif, faktor C^{-1} harus ditempatkan pada sisi yang sama. Dengan asosiativitas, $C^{-1}HC = C^{-1}(CW) = (C^{-1}C)W = IW = W$, sehingga

$$C^{-1}HC = W \tag{8.88}$$

Untuk menyederhanakan (8.88), diperlukan beberapa definisi matriks. Matriks persegi B disebut simetris jika $b_{mn} = b_{nm}$. Elemen matriks simetris tersusun simetris terhadap diagonal utama. Matriks persegi D disebut Hermitian jika $d_{mn} = d_{nm}^*$. Sebagai contoh,

$$\begin{gathered} M = [2 \quad 5 \quad 0] \\ \quad\ [5 \quad i \quad 2i] \\ [0 \quad 2i \quad 4], \quad N = [6 \quad 1+2i \quad 8] \\ \quad\ [1-2i \quad -1 \quad -i] \\ \quad\ [8 \quad\ i \quad 0] \end{gathered} \tag{8.89}$$

M simetris dan N Hermitian. Elemen diagonal matriks Hermitian harus real karena $d_{mm} = d_{mm}^*$. Matriks real adalah matriks yang semua elemennya bilangan real. Matriks Hermitian real adalah matriks simetris.

Transpos A^T diperoleh dengan mempertukarkan baris dan kolom A, sehingga kolom pertama menjadi baris pertama, kolom kedua menjadi baris kedua, dan seterusnya. Elemen-elemennya memenuhi $(A^T)_{mn} = A_{nm}$. Untuk matriks persegi, transpos dapat dipandang sebagai pencerminan terhadap diagonal utama. Matriks simetris sama dengan transposnya; misalnya $M^T = M$ untuk M pada (8.89).

Konjugat kompleks A* diperoleh dengan mengambil konjugat kompleks setiap elemen A. Transpos konjugat A†, dibaca "A dagger", diperoleh dengan mentranspos A*. Jadi $A† = (A^*)^T$ dan

$$(A†)_{mn} = (A_{nm})^* \tag{8.90}$$

Fisikawan juga menyebut A† sebagai adjoint, walaupun matematikawan pernah memakai istilah adjoint untuk matriks yang berbeda. Misalnya, jika B = [[2, 3+i],[0, 4i]], maka B^T = [[2,0],[3+i,4i]] dan B† = [[2,0],[3−i,−4i]]. Untuk matriks Hermitian A, Pers. (8.90) memberikan A† = A. Karena itu matriks Hermitian sama dengan transpos konjugatnya; istilah self-adjoint juga sering digunakan.

Matriks ortogonal adalah matriks persegi yang inversnya sama dengan transposnya:

$$A^{-1} = A^T \quad \text{jika A ortogonal} \tag{8.91}$$

Matriks uniter adalah matriks yang inversnya sama dengan transpos konjugatnya:

$$U^{-1} = U† \quad \text{jika U uniter} \tag{8.92}$$

Dari U†U = I dan dengan menyamakan elemen (m,n), diperoleh

$$\Sigma_k u_{km}{}^* u_{kn} = \delta_{mn} \tag{8.93}$$

Jadi kolom-kolom matriks uniter, dipandang sebagai vektor kolom, ortogonal dan ternormalisasi atau ortonormal. Sebaliknya, jika (8.93) berlaku bagi semua kolom, U uniter. Jika U uniter dan real, $U† = U^T$ dan U merupakan matriks ortogonal.

Dapat dibuktikan bahwa dua vektor eigen matriks Hermitian H yang bersesuaian dengan nilai eigen berbeda saling ortogonal. Untuk nilai eigen yang sama, kombinasi linear dapat dipilih agar vektor-vektor eigennya ortogonal. Elemen suatu vektor eigen juga dapat dikalikan dengan konstanta untuk menormalisasikannya. Karena itu vektor eigen matriks Hermitian dapat dipilih ortonormal.

Jika vektor eigen dipilih ortonormal, matriks vektor eigen C pada (8.86) uniter dan $C^{-1} = C†$. Pers. (8.88) menjadi

$$C†HC = W \quad \text{jika H Hermitian} \tag{8.94}$$

Untuk kasus umum H real dan Hermitian, yaitu H real dan simetris, koefisien dalam (8.79a) real dan C real sekaligus uniter, sehingga C ortogonal dan $C^{-1} = C^T$. Pers. (8.94) menjadi

$$C^THC = W \quad \text{jika H real dan simetris} \tag{8.95}$$

Nilai eigen matriks Hermitian dapat dibuktikan semuanya real.

Contoh: nilai dan vektor eigen matriks Hermitian 2 × 2

Cari nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi matriks Hermitian A = [[3,2i], [−2i,0]] dengan menyelesaikan persamaan aljabar. Kemudian verifikasilah bahwa C†AC diagonal.

Persamaan karakteristiknya adalah $|3-\lambda, 2i; -2i, -\lambda| = 0$, sehingga $\lambda^2 - 3\lambda - 4 = 0$ dan diperoleh $\lambda_1 = 4$, $\lambda_2 = -1$. Sebagai pemeriksaan, jumlah elemen diagonal matriks sama dengan jumlah nilai eigennya: $3 + 0 = 4 - 1 = 3$. Hasil umum ini menyatakan bahwa trace matriks persegi sama dengan jumlah nilai eigennya.

Untuk $\lambda_1 = 4$, persamaan vektor eigen adalah $-c_1^{(1)} + 2ic_2^{(1)} = 0$ dan $-2ic_1^{(1)} - 4c_2^{(1)} = 0$. Salah satu persamaan dibuang dan diperoleh $c_1^{(1)} = 2ic_2^{(1)}$. Normalisasi memberikan $1 = |c_1^{(1)}|^2 + |c_2^{(1)}|^2 = 5|c_2^{(1)}|^2$. Dengan fase $c_2^{(1)}$ dipilih nol, $c_2^{(1)} = 1/\sqrt{5}$ dan $c_1^{(1)} = 2i/\sqrt{5}$.

Dengan cara serupa untuk $\lambda_2 = -1$ diperoleh $c_1^{(2)} = -i/\sqrt{5}$ dan $c_2^{(2)} = 2/\sqrt{5}$. Kedua vektor eigen ternormalisasi dan ortogonal. Karena itu C uniter dan $C^{-1} = C^\dagger$. Perkalian langsung memberikan C†AC = diag(4,−1), yaitu matriks diagonal nilai eigen.

Jika H real simetris mempunyai nilai eigen W_i dan vektor eigen ortonormal $c^{(i)}$, maka $C^T H C = W$. Kebalikannya juga benar: jika H real simetris, B real ortogonal, dan $B^T H B$ diagonal, maka kolom B adalah vektor eigen H dan elemen diagonal $B^T H B$ adalah nilai eigen H.

Untuk mencari nilai dan vektor eigen matriks Hermitian orde n terdapat dua prosedur. Pertama, selesaikan persamaan karakteristik $\det(H_{ij} - \delta_{ij} W) = 0$ untuk W_1, ..., W_n, lalu substitusikan setiap W_k ke persamaan (8.79a) dan selesaikan elemen vektor eigen. Kedua, carilah matriks uniter C sehingga C†HC diagonal. Elemen diagonalnya adalah nilai eigen H dan kolom C adalah vektor eigen ortonormal H. Untuk matriks besar dalam kimia kuantum, prosedur kedua, yang disebut diagonalisasi matriks, jauh lebih cepat secara komputasi.

Pengembangan determinan karakteristik dan penyelesaian polinom karakteristik bukan cara yang baik untuk matriks besar. Perubahan yang sangat kecil pada suatu koefisien polinom karakteristik dapat menghasilkan perubahan sangat besar pada akar-akarnya; lihat Soal 8.54. Koefisien polinom mungkin harus dihitung hingga ratusan atau ribuan angka desimal agar nilai eigen akurat beberapa angka desimal. Memang, pada matriks tertentu perubahan kecil elemen dapat menyebabkan perubahan besar nilai eigen. Namun, untuk matriks Hermitian dapat dibuktikan bahwa perubahan kecil elemen selalu hanya menghasilkan perubahan kecil nilai eigen. Inilah alasan metode diagonalisasi langsung lebih tepat untuk memperoleh nilai eigen yang akurat.

Salah satu cara sistematis mendiagonalkan matriks real simetris H adalah metode Jacobi siklik. Dibentuk matriks ortogonal O_1 sehingga $H_1 \equiv O_1^T H O_1$ mempunyai nol pada posisi elemen di luar diagonal H_{12} dan H_{21}. Karena H simetris, $H_{12} = H_{21}$, dan semua matriks tertransformasi tetap simetris. Selanjutnya dibentuk O_2 sehingga $H_2 \equiv O_2^T H_1 O_2$ mempunyai nol pada posisi (1,3) dan (3,1), dan seterusnya.

Sayangnya, ketika sepasang elemen di luar diagonal dibuat nol pada suatu langkah, elemen lain yang telah dibuat nol pada langkah sebelumnya dapat menjadi tak nol kembali. Karena itu seluruh pasangan elemen harus disikluskan berulang-ulang; secara teori dapat diperlukan langkah tak hingga. Dalam praktik, suatu langkah dilewati jika nilai mutlak elemen yang hendak dinolkan sudah lebih kecil daripada bilangan sangat kecil tertentu, dan prosedur dihentikan ketika semua elemen di luar diagonal lebih kecil daripada toleransi. Nilai eigen kemudian adalah elemen diagonal matriks tertransformasi $\cdots O_3^T O_2^T O_1^T H O_1 O_2 O_3 \cdots$, sedangkan matriks vektor eigen adalah $O_1 O_2 O_3 \cdots$. Metode Jacobi siklik kurang efisien untuk matriks besar pada komputer serial tetapi efisien pada komputer paralel.

Pendekatan yang lebih efisien dimulai dengan serangkaian transformasi ortogonal untuk mereduksi H menjadi matriks tridiagonal simetris T. Matriks tridiagonal mempunyai elemen tak nol hanya pada diagonal utama dan diagonal tepat di atas dan di bawahnya. Hubungan antara T dan H adalah $T = O^T H O$, dengan O matriks ortogonal yang merupakan hasil kali matriks transformasi setiap tahap. Dua metode efisien untuk tridiagonalisasi dikembangkan oleh Givens dan Householder.

Metode efisien untuk mencari nilai eigen matriks tridiagonal simetris adalah metode QR. Matriks T dinyatakan sebagai hasil kali matriks ortogonal Q dan matriks segitiga atas R. Serangkaian langkah iteratif menghasilkan matriks yang konvergen ke matriks diagonal; elemen diagonalnya adalah nilai eigen T, yang sama dengan nilai eigen H. Dengan penyempurnaan tertentu, metode QR sangat efisien untuk nilai dan vektor eigen. Rincian prosedur dan program komputer dibahas dalam Press dan kawan-kawan Bab 11, Acton Bab 8 dan 13, serta Shoup Bab 4.

Sumber asli juga menunjuk kompilasi prosedur dan program ilmiah pada Numerical Recipes, layanan Netlib, GAMS/NIST, serta perangkat lunak matematika seperti Mathcad dan Maple. Rujukan web yang dicantumkan dalam sumber meliputi www.nr.com, amath.colorado.edu/computing/Fortran/numrec.html, www.netlib.org, gams.nist.gov, dan archives.math.utk.edu. Rujukan ini dipertahankan sebagai bagian dari materi sumber, meskipun ketersediaan alamat dapat berubah.

Prosedur matriks untuk metode variasi linear dengan fungsi basis nonortonormal diuraikan pada Soal 8.57. Lembar kerja Excel dapat digunakan untuk mencari nilai dan vektor eigen; lihat Soal 8.53. Sistem aljabar komputer seperti Maple, Mathematica, dan Mathcad, serta sejumlah kalkulator elektronik, memiliki perintah bawaan untuk menghitung nilai dan vektor eigen.

Metode yang dibahas pada bagian ini berguna untuk matriks sampai orde sekitar 10^3. Metode khusus digunakan untuk mencari beberapa nilai eigen terendah dan vektor eigen terkait dari matriks berorde sampai sekitar 10^9 yang muncul dalam perhitungan kimia kuantum tertentu; lihat Bagian 16.2.

Sebagaimana dicatat setelah (8.80), untuk fungsi variasi linear $\Sigma_i c_i f_i$ dengan basis ortonormal, nilai eigen matriks H yang tersusun dari $H_{ik} = \langle f_i|\hat{H}|f_k\rangle$ adalah akar persamaan sekuler. Vektor eigen yang bersesuaian dengan W_m memberikan koefisien fungsi variasi yang bersesuaian dengan W_m. Soal 8.60–8.65 menerapkan metode ini pada sumur ganda, osilator harmonik, osilator kuartik, dan atom hidrogen dengan basis fungsi partikel dalam kotak dan program aljabar komputer.

Pembahasan diagonalisasi matriks ditempatkan dalam konteks metode variasi linear, tetapi pencarian nilai eigen a_k dan fungsi eigen g_k dari sembarang operator Hermitian $\hat{A}$, dengan $\hat{A}g_k = a_k g_k$, juga dapat dirumuskan sebagai masalah diagonalisasi matriks. Jika dipilih basis lengkap ortonormal $\{f_i\}$ dan $g_k = \Sigma_i c_i^{(k)} f_i$, maka nilai eigen matriks A dengan elemen $a_{ij} = \langle f_i|\hat{A}|f_j\rangle$ adalah nilai eigen operator $\hat{A}$. Elemen vektor eigen $c^{(k)}$ memberi koefisien ekspansi fungsi eigen g_k; lihat Soal 8.59.

Materi bagian ini mempertegas korespondensi antara operator linear dan matriks serta antara fungsi dan vektor kolom sebagaimana dibahas pada Bagian 7.10.

Sebagai contoh di luar kimia kuantum, PageRank halaman web yang diindeks Google dihitung dengan membentuk matriks tertentu, yang disebut matriks Google, dan mencari vektor eigennya yang bersesuaian dengan nilai eigen 1. Orde matriks ini sama dengan jumlah halaman yang diindeks; pada 2012 jumlahnya berada antara $10^{10.5}$ dan 10^{11}. Komponen vektor eigen tersebut adalah PageRank. Sumber asli merujuk www.ams.org/samplings/featurecolumn/fcarc-pagerank.

Ringkasan

Teorema variasi menyatakan bahwa untuk suatu sistem dengan Hamiltonian $\hat{H}$ yang tidak bergantung waktu dan energi keadaan dasar E_1, berlaku $(\int \varphi^* \hat{H} \varphi \, d\tau)/(\int \varphi^* \varphi \, d\tau) \geq E_1$, dengan φ sembarang fungsi yang berperilaku baik dan memenuhi syarat batas masalah. Teorema variasi memungkinkan kita memperoleh pendekatan bagi energi dan fungsi gelombang keadaan dasar.

Matematika determinan ditinjau dalam Bagian 8.3. Suatu himpunan n persamaan linear homogen dalam n peubah mempunyai penyelesaian nontrivial jika dan hanya jika determinan koefisiennya sama dengan nol.

Untuk fungsi variasi linear $\varphi = \Sigma_{i=1}^{n} c_i f_i$, variasi koefisien c_i untuk meminimumkan integral variasional W menghasilkan persamaan sekuler $\det(H_{ij} - S_{ij}W) = 0$. Akar-akarnya $W_1, \ldots, W_n$ merupakan batas atas bagi n nilai eigen energi keadaan terikat terendah; di sini $H_{ij} \equiv \langle f_i|\hat{H}|f_j\rangle$ dan $S_{ij} \equiv \langle f_i|f_j\rangle$. Substitusi $W_1, \ldots, W_n$ satu per satu ke persamaan homogen serentak (8.55) memungkinkan koefisien c_i yang bersesuaian dengan setiap W ditentukan.

Nilai eigen λ_i dan vektor eigen c_i suatu matriks persegi A memenuhi $Ac_i = \lambda_i c_i$. Untuk matriks Hermitian H, matriks vektor eigen C—yang kolom-kolomnya merupakan vektor eigen H—bersifat uniter, yakni inversnya sama dengan transpos konjugat C†, dan C†HC sama dengan matriks diagonal yang elemen diagonalnya adalah nilai eigen H. Untuk matriks real simetris, matriks vektor eigennya ortogonal. Untuk fungsi variasi linear $\varphi = \Sigma_i c_i f_i$ yang dibentuk dari fungsi-fungsi ortonormal f_i, setiap himpunan koefisien optimum c_i merupakan vektor eigen matriks dengan elemen $\langle f_i|\hat{H}|f_j\rangle$, sedangkan nilai integral variasional yang bersesuaian merupakan nilai eigen matriks tersebut.

CATATAN INTEGRATIF: RELEVANSI AL-QUR'AN DAN HADIS

Catatan berikut merupakan refleksi integratif yang ditambahkan oleh penyusun; bagian ini bukan teks asli buku dan bukan dalil langsung bagi teorema atau persamaan mekanika kuantum.

وَلَا تَقْفُ مَا لَيْسَ لَكَ بِهِۦ عِلْمٌ ۚ إِنَّ ٱلسَّمْعَ وَٱلْبَصَرَ وَٱلْفُؤَادَ كُلُّ أُو۟لَٰٓئِكَ كَانَ عَنْهُ مَسْـُٔولًا

"Janganlah engkau mengikuti sesuatu yang tidak kauketahui. Sesungguhnya pendengaran, penglihatan, dan hati nurani, semua itu akan diminta pertanggungjawabannya." (Q.S. Al-Isrā' [17]: 36; terjemahan diselaraskan dengan Terjemahan Kementerian Agama RI).

Relevansi: metode variasi menuntut disiplin epistemik—fungsi coba harus memenuhi syarat batas, normalisasi, dan asumsi matematis yang benar; hasilnya juga harus dinyatakan sebagai batas atas, bukan sebagai nilai eksak tanpa pembuktian. Ayat ini memberi prinsip tanggung jawab pengetahuan secara umum, bukan pembenaran tekstual atas metode variasi.

وَمَنْ سَلَكَ طَرِيقًا يَلْتَمِسُ فِيهِ عِلْمًا سَهَّلَ اللَّهُ لَهُ بِهِ طَرِيقًا إِلَى الْجَنَّةِ

"Barang siapa menempuh jalan untuk mencari ilmu, Allah memudahkan baginya jalan menuju surga." (H.R. Muslim, Ṣaḥīḥ Muslim, no. 2699; hadis sahih).

Relevansi: penurunan matematis, pemeriksaan galat, dan pengujian konvergensi merupakan bagian dari kesungguhan menempuh jalan ilmu. Hadis ini mendorong pencarian ilmu yang bertanggung jawab; ia tidak digunakan sebagai bukti matematis bagi teorema variasi.

Soal

Bagian	8.1	8.2	8.3	8.4	8.5	8.6	Umum
Soal	8.1–8.16	8.17–8.18	8.19–8.22	8.23–8.28	8.29–8.40	8.41–8.56	8.57–8.66

8.1 Perhitungan pada atom Li dengan tiga fungsi variasi yang berperilaku baik memberikan nilai integral variasional berikut: -203,2 eV, -192,0 eV, dan -201,2 eV. Karena itu, energi keadaan dasar sejati atom Li harus lebih kecil atau sama dengan, atau lebih besar atau sama dengan, nilai berapa eV? Pilih salah satu tanda ketaksamaan yang benar dan gantilah tanda tanya dengan sebuah angka.

8.2 (a) Tinjau sistem satu partikel satu dimensi dengan energi potensial $V = V_0$ untuk $1/4\ l \le x \le 3/4\ l$, $V = 0$ untuk $0 \le x \le 1/4\ l$ dan $3/4\ l \le x \le l$, serta $V = \infty$ di tempat lain. Gambarkan V terhadap x. Gunakan fungsi variasi coba $f_1 = (2/l)^{1/2} \sin(\pi x/l)$ untuk $0 \le x \le l$ guna memperkirakan energi keadaan dasar untuk $V_0 = \hbar^2/(ml^2)$, lalu bandingkan dengan energi keadaan dasar sejati $E = 5{,}750345\ \hbar^2/(ml^2)$. Untuk menghemat waktu dalam mengevaluasi integral, perhatikan bahwa $\langle f_1|H|f_1\rangle = \langle f_1|T|f_1\rangle + \langle f_1|V|f_1\rangle$, dan jelaskan mengapa $\langle f_1|T|f_1\rangle$ sama dengan energi keadaan dasar partikel dalam kotak, $h^2/(8ml^2)$. (b) Untuk sistem ini, gunakan fungsi variasi $f_2 = x(l - x)$. Untuk menghemat waktu, perhatikan bahwa $\langle f_2|T|f_2\rangle$ diberikan oleh Pers. (8.12). Mengapa demikian?

8.3 Verifikasilah hasil untuk $\langle f|H|f\rangle$ pada contoh terakhir dalam Bagian 8.1.

8.4 Jika fungsi variasi ternormalisasi $f = (3/l^3)^{1/2}\ x$ untuk $0 \le x \le l$ diterapkan pada masalah partikel dalam kotak satu dimensi, diperoleh bahwa integral variasional sama dengan nol, yaitu lebih kecil daripada energi keadaan dasar sejati. Apa yang salah?

8.5 Untuk partikel dalam kotak tiga dimensi dengan sisi a, b, dan c, tuliskan fungsi variasi yang merupakan perluasan tiga dimensi dari fungsi $f = x(l - x)$ yang digunakan pada Bagian 8.1 untuk partikel dalam kotak satu dimensi. Gunakan integral pada Pers. (8.12) dan (8.13) untuk mengevaluasi integral variasional kasus tiga dimensi. Tentukan galat persen pada energi keadaan dasar.

8.6 (a) Sebuah partikel dalam kotak bola berjari-jari b memiliki $V = 0$ untuk $0 \le r \le b$ dan $V = \infty$ untuk $r > b$. Gunakan fungsi coba $f = b - r$ untuk $0 \le r \le b$ dan $f = 0$ untuk $r > b$ untuk memperkirakan energi keadaan dasar dan bandingkan dengan nilai sejati $h^2/(8mb^2)$ (Soal 6.2). (b) Rancang fungsi variasi sederhana lain yang memenuhi syarat batas masalah ini dan hitung galat persen energi keadaan dasar yang diberikan oleh fungsi tersebut.

8.7 Penerapan fungsi variasi $f = e^{(-cx^2)}$, dengan c sebagai parameter variasi, pada suatu masalah dengan $V = a\ f(x)$, di mana a adalah konstanta positif dan f(x) fungsi tertentu dari x, menghasilkan integral variasional $W = c\hbar^2/(2m) + 15a/(64c^3)$. Tentukan nilai minimum W, dalam a dan konstanta fisika, untuk fungsi variasi ini.

8.8 Tinjau partikel yang bergerak satu dimensi dengan $V(x) = \infty$ untuk $x < 0$ dan $V(x) = bx$ untuk $x \ge 0$, dengan b konstanta positif. Jika $b = mg$, ini adalah partikel yang memantul pada permukaan tak tertembus dalam medan gravitasi. (a) Apa yang

harus berlaku bagi ψ pada x = 0? (b) Terapkan fungsi variasi f = x e^(-cx) untuk x ≥ 0 dan f = 0 untuk x < 0. Tentukan nilai optimum parameter variasi c dan bandingkan hasil energinya dengan nilai energi keadaan dasar akurat $1{,}855757081(\hbar^{2/3}\, b^{2/3}/m^{1/3})$. Lihat juga Soal 4.34. Secara mengagumkan, keadaan terkuantisasi neutron dalam medan gravitasi Bumi telah diamati; lihat rujukan pada arxiv.org/abs/hep-ph/0602093.

8.9 Tinjau fungsi variasi $f_1 = af + bg$ dan $f_2 = f + cg$, dengan f dan g pada f_1 adalah fungsi yang sama seperti f dan g pada f_2, sedangkan a, b, dan c adalah parameter yang nilainya dipilih untuk meminimumkan integral variasional W. Jelaskan mengapa f_1 dan f_2 memberikan hasil W yang sama ketika diterapkan pada masalah yang sama.

8.10 Terapkan fungsi variasi f = e^(-cr) pada atom hidrogen. Pilih parameter real c untuk meminimumkan integral variasional, lalu hitung galat persen energi keadaan dasarnya.

8.11 Osilator kuartik satu dimensi memiliki $V = cx^4$, dengan c sebuah konstanta. Rancang fungsi variasi yang mengandung parameter untuk masalah ini, tentukan nilai optimum parameter tersebut untuk meminimumkan integral variasional, dan perkirakan energi keadaan dasar dalam c. Bandingkan dengan energi keadaan dasar metode Numerov yang diperoleh pada Soal 4.32.

8.12 Untuk partikel dalam kotak panjang l, gunakan fungsi variasi $f = x^k(l - x)^k$ untuk $0 \le x \le l$. Diperlukan integral $\int_0^l x^s(l - x)^t\, dx = l^{(s+t+1)}\, \Gamma(s+1)\Gamma(t+1)/\Gamma(s+t+2)$, dengan fungsi gamma memenuhi $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$. Definisi Γ(z) tidak perlu diperhatikan karena fungsi gamma akhirnya saling menghilangkan. (a) Tunjukkan bahwa integral variasional sama dengan $(\hbar^2/ml^2)(4k^2 + k)/(2k - 1)$. (b) Tentukan nilai optimum k dan hitung galat persen energi keadaan dasar untuk k tersebut.

8.13 Tinjau sistem satu partikel satu dimensi dengan V = 0 untuk $0 \le x \le l$ dan $V = V_0$ di tempat lain (Gambar 2.5). (a) Gunakan fungsi variasi $f = \sin[\pi(x+c)/(l+2c)]$ untuk $-c \le x \le l+c$ dan f = 0 di tempat lain, dengan c parameter variasi positif. Gambarkan f dan V pada grafik yang sama. Pilih c untuk meminimumkan integral variasional W dan tentukan ekspresi W. Petunjuk: gunakan substitusi sederhana agar integral berbentuk seperti integral pada Lampiran. (b) Tentukan W untuk $V_0 = 20\hbar^2/(ml^2)$ dan bandingkan dengan energi keadaan dasar sejati $2{,}814\hbar^2/(ml^2)$ (Soal 4.31c).

8.14 Buktikan bahwa untuk sistem dengan keadaan dasar tak terdegenerasi, $\int f^* H f\, d\tau > E_1$ jika f adalah fungsi ternormalisasi, berperilaku baik, dan tidak sama dengan fungsi gelombang keadaan dasar sejati. Petunjuk: misalkan b konstanta positif sehingga $E_1 + b < E_2$. Ubah Pers. (8.4) menjadi ketaksamaan dengan mengganti semua E_k kecuali E_1 dengan $E_1 + b$. Notasi E_1, E_2, dan seterusnya sama seperti pada Bagian 8.2.

8.15 Sebuah makalah tahun 1971 menerapkan fungsi variasi ternormalisasi $N \exp(-br^2/a_0^2 - cr/a_0)$ pada atom hidrogen dan menyatakan bahwa minimisasi integral variasional terhadap parameter b dan c memberikan energi 0,7% di atas energi keadaan dasar sejati untuk massa inti tak hingga. Tanpa melakukan perhitungan apa pun, nyatakan mengapa hasil ini pasti keliru.

8.16 (a) Gunakan fungsi segitiga (7.35) sebagai fungsi variasi untuk keadaan dasar partikel dalam kotak. Perhatikan bahwa f''(x) tak hingga pada x = l/2 karena diskontinuitas f'(x) di titik tersebut. Karena itu, dalam mengevaluasi $\int f^* H f \, dx$ muncul kesulitan pada integral ff''. Salah satu cara mengatasinya adalah lebih dahulu menunjukkan bahwa untuk setiap fungsi yang memenuhi syarat batas berlaku

$$\int_0^l \varphi\varphi'' \, dx = -\int_0^l (\varphi')^2 dx = -\int_0^{l/2} (\varphi')^2 dx - \int^{l/2l} (\varphi')^2 dx \qquad (8.96)$$

Buktikan Pers. (8.96), lalu hitung galat persen energi keadaan dasar dengan fungsi segitiga ini. Tidak ada parameter dalam fungsi coba ini. Jika ingin mencoba cara alternatif, gunakan fakta bahwa f'(x) melibatkan fungsi tangga Heaviside sehingga f''(x) melibatkan delta Dirac; gunakan sifat delta Dirac untuk mengevaluasi $\int_0^l ff'' \, dx$ dan tentukan galat persen. (b) Fungsi variasi f pada contoh pertama Bagian 8.1 memiliki diskontinuitas pada f' di x = 0 dan x = l, sehingga secara ketat salah satu prosedur pada bagian (a) seharusnya dipakai untuk mengevaluasi <f|H|f>. Lakukan hal itu dan tunjukkan bahwa nilai <f|H|f> yang sama diperoleh.

8.17 (a) Untuk keadaan dasar atom hidrogen, gunakan fungsi coba Gaussian $f = \exp(-cr^2/a_0^2)$. Tentukan nilai optimum c dan galat persen energinya. Fungsi variasi Gaussian banyak digunakan dalam mekanika kuantum molekul; lihat Bagian 15.4. (b) Kalikan fungsi pada bagian (a) dengan harmonik bola Y_2^0, lalu minimumkan integral variasional. Ini memberikan batas atas bagi energi keadaan atom hidrogen yang mana?

8.18 Untuk sistem pada Soal 8.2, jelaskan mengapa fungsi variasi $f = (2/l)^{1/2} \sin(2\pi x/l)$ memberikan batas atas bagi energi E_2 dari keadaan tereksitasi pertama. Petunjuk: dengan titik asal di pusat kotak, V adalah fungsi genap. Gunakan f ini untuk mengevaluasi integral variasi bagi $V_0 = \hbar^2/(ml^2)$ dan bandingkan dengan nilai sejati $E_2 = 20{,}23604\hbar^2/(ml^2)$.

8.19 Evaluasilah determinan-determinan berikut:

(a)

$$\begin{vmatrix} 3 & 1 & i \\ -2 & 4 & 0 \\ 5 & 7 & 1/2 \end{vmatrix}$$

(b)

$$\begin{vmatrix} 2 & 5 & 1 & 3 \\ 8 & 0 & 4 & -1 \\ 6 & 6 & 6 & 1 \\ 5 & -2 & -2 & 2 \end{vmatrix}$$

8.20 (a) Buktikan bahwa nilai determinan yang semua elemennya di bawah diagonal utama bernilai nol sama dengan hasil kali elemen-elemen diagonalnya. Determinan semacam itu disebut segitiga atas. (b) Berapa banyak suku dalam ekspansi determinan orde n?

8.21 Verifikasilah persamaan determinan blok diagonal (8.34).

8.22 (a) Tinjau suatu permutasi dari bilangan bulat 1, 2, 3, ..., n. Permutasi disebut genap jika diperlukan jumlah pertukaran pasangan bilangan yang genap untuk mengembalikannya ke urutan alami 1, 2, 3, ..., n. Permutasi disebut ganjil jika diperlukan jumlah pertukaran pasangan yang ganjil. Misalnya, permutasi 3124 adalah genap karena dua pertukaran mengembalikannya ke urutan alami: 3124 -> 1324 -> 1234. Tuliskan dan klasifikasikan semua permutasi 123 sebagai genap atau ganjil. (b) Verifikasilah bahwa definisi determinan orde tiga pada Pers. (8.24) ekuivalen dengan penjumlahan bertanda atas semua permutasi ijk dari 123, yaitu suku-suku $a_{1i}a_{2j}a_{3k}$ diberi tanda plus atau minus bergantung pada apakah permutasinya genap atau ganjil. (c) Bagaimana determinan orde n didefinisikan dengan jenis definisi seperti ini?

8.23 Gunakan eliminasi Gaussian dengan koefisien terpisah untuk menyelesaikan sistem persamaan berikut:

$$2x_1 - x_2 + 4x_3 + 2x_4 = 16$$
$$3x_1 - x_3 + 4x_4 = -5$$
$$2x_1 + x_2 + x_3 - 2x_4 = 8$$
$$-4x_1 + 6x_2 + 2x_3 + x_4 = 3$$

8.24 Ketika eliminasi Gaussian diprogram pada komputer atau dilakukan dengan kalkulator elektronik, pertukaran persamaan sebaiknya digunakan untuk menghindari pembagian oleh koefisien yang nilai mutlaknya jauh lebih kecil daripada koefisien lain dalam persamaan. Jelaskan mengapa pembagian oleh koefisien yang sangat kecil dapat menghasilkan galat besar pada hasil.

8.25 Eliminasi Gaussian dapat digunakan untuk mengevaluasi determinan secara efisien sebagai berikut. Bagi setiap elemen baris pertama determinan (8.20) dengan a_{11} dan letakkan faktor a_{11} di depan determinan. Kemudian kurangkan kelipatan yang sesuai dari elemen baris pertama pada baris kedua, ketiga, ..., ke-n agar a_{21}, a_{31}, ..., a_{n1} menjadi nol. Selanjutnya bagi elemen baris kedua dengan nilai a_{22} saat itu dan letakkan faktor a_{22} di depan determinan, dan seterusnya. Akhirnya diperoleh determinan yang semua elemennya di bawah diagonal utama nol. Dari Soal 8.20, determinan ini sama dengan hasil kali elemen diagonalnya. Gunakan prosedur ini untuk mengevaluasi determinan pada Soal 8.19b.

8.26 Selesaikan setiap sistem persamaan serentak berikut, dengan $i = \sqrt{(-1)}$.

(a)

$$8x - 15y = 0$$
$$-3x + 4y = 0$$

(b)

$$-4x + 3iy = 0$$
$$5ix + (15/4)y = 0$$

8.27 Selesaikan setiap sistem persamaan serentak berikut dengan eliminasi Gauss–Jordan menggunakan koefisien terpisah atau dengan metode lain.

(a)

$$x + 2y + 3z = 0$$
$$3x + y + 2z = 0$$
$$2x + 3y + z = 0$$

(b)

$$x + 2y + 3z = 0$$
$$x - y + z = 0$$
$$7x - y + 11z = 0$$

8.28 Tulislah program komputer yang menggunakan eliminasi Gaussian untuk menyelesaikan sistem n persamaan linear simultan tak homogen dengan n peubah, dengan $n \leq 10$. Ujilah program tersebut pada beberapa contoh.

8.29 Tinjau fungsi variasi linear $f = \Sigma_i c_i f_i$. Nyatakan benar atau salah untuk setiap pernyataan berikut tentang fungsi basis f_i: (a) setiap f_i harus ternormalisasi; (b) setiap f_i harus berperilaku baik; (c) himpunan $\{f_i\}$ harus saling ortogonal; (d) setiap f_i harus merupakan fungsi eigen operator Hamiltonian sistem.

8.30 Ketika fungsi variasi $f = c_1f_1 + c_2f_2$ diterapkan pada suatu masalah mekanika kuantum, diperoleh $\langle f_1|H|f_1\rangle = 4a$, $\langle f_1|H|f_2\rangle = a$, $\langle f_2|H|f_2\rangle = 6a$, $\langle f_1|f_1\rangle = 2b$, $\langle f_2|f_2\rangle = 3b$, dan $\langle f_1|f_2\rangle = b$, dengan a dan b konstanta positif yang diketahui. Gunakan f untuk menentukan, dalam a dan b, batas atas bagi dua energi terendah, dan untuk setiap W tentukan c_1 dan c_2 bagi f ternormalisasi.

8.31 Selesaikan persamaan sekuler orde dua (8.56) untuk kasus khusus $H_{11} = H_{22}$ dan $S_{11} = S_{22}$. Ingat bahwa f_1 dan f_2 adalah fungsi real. Kemudian tentukan c_1/c_2 untuk masing-masing akar W_1 dan W_2.

8.32 Untuk sistem pada Soal 8.2 dengan $V_0 = \hbar^2/(ml^2)$, yaitu partikel dalam kotak dengan tonjolan persegi panjang di tengah, tinjau fungsi variasi linear $f = c_1f_1 + c_2f_2 = c_1(2/l)^{1/2} \sin(\pi x/l) + c_2(2/l)^{1/2} \sin(3\pi x/l)$ untuk $0 \leq x \leq l$. (a) Jelaskan mengapa fungsi variasi ini memberi batas atas bagi energi E_1 dan E_3. (b) Jelaskan mengapa f_1 dan f_2 ortonormal. (c) Perhatikan bahwa $\langle f_i|H|f_j\rangle = \langle f_i|T|f_j\rangle + \langle f_i|V|f_j\rangle$. Jelaskan mengapa $Tf_j = e_jf_j$ untuk $0 \leq x \leq l$, dan berikan nilai eigen T, yaitu e_1 dan e_2. Tunjukkan bahwa $\langle f_i|T|f_j\rangle = \delta_{ij}e_j$. (d) Dengan bantuan hasil (b) dan (c), susun dan selesaikan persamaan sekuler. Kemudian tentukan fungsi variasi f_1 dan f_2 yang bersesuaian dengan W_1 dan W_2. Bandingkan W_1 dan W_2 dengan energi sejati $E_1 = 5{,}750345\hbar^2/(ml^2)$ dan $E_3 = 44{,}808373\hbar^2/(ml^2)$. Bandingkan W_1 dengan $W = 5{,}753112\hbar^2/(ml^2)$ yang diperoleh pada Soal 8.2 dengan $f = f_1$. (e) Jika ingin memperbaiki hasil (d) dengan fungsi variasi linear tiga suku, pilihan logis apa untuk f_1, f_2, dan f_3?

8.33 Terapkan fungsi variasi linear $f = c_1x^2(l - x) + c_2x(l - x)^2$, $0 \leq x \leq l$, pada partikel dalam kotak satu dimensi. Lihat Soal 8.31. Hitung galat persen untuk energi n = 1 dan n = 2. Sketsalah $x^2(l - x)$, $x(l - x)^2$, dan dua fungsi gelombang aproksimasi yang diperoleh. Untuk membantu sketsa, tentukan simpul serta maksimum dan minimum setiap fungsi.

8.34 Tunjukkan bahwa jika perubahan variabel x' = x - l/2, yang bersesuaian dengan memindahkan titik asal ke pusat kotak, diterapkan pada fungsi-fungsi (8.62), maka f_1 dan f_2 adalah fungsi genap terhadap x', sedangkan f_3 dan f_4 adalah fungsi ganjil.

8.35 Verifikasilah nilai H_{12}, H_{22}, S_{12}, dan S_{22} yang diberikan pada contoh dalam Bagian 8.5.

8.36 Turunkan akar-akar (8.72) dari persamaan sekuler fungsi ganjil pada contoh Bagian 8.5.

8.37 Gunakan lembar kerja atau program seperti Mathcad untuk memplot deviasi persen fungsi variasi (8.74) dari fungsi gelombang keadaan dasar sejati terhadap x/l.

8.38 Turunkan fungsi f_2 dan f_3 dalam Pers. (8.75) pada contoh Bagian 8.5.

8.39 Misalkan fungsi variasi pada (8.40) bersifat kompleks. Maka $c_j = a_j + ib_j$, dengan a_j dan b_j bilangan real. Ada 2n parameter yang divariasikan, yaitu semua a_j dan b_j. (a) Gunakan aturan rantai untuk menunjukkan bahwa syarat minimisasi $\partial W/\partial a_i = 0$ dan $\partial W/\partial b_i = 0$ ekuivalen dengan syarat $\partial W/\partial c_i = 0$ dan $\partial W/\partial c_i^* = 0$. (b) Tunjukkan bahwa minimisasi W menghasilkan Pers. (8.53) dan konjugat kompleksnya, yang dapat diabaikan. Karena itu Pers. (8.53) dan (8.58) berlaku untuk fungsi variasi kompleks.

8.40 Kita ingin membuktikan bahwa fungsi gelombang aproksimasi yang diperoleh dalam metode variasi linear bersifat ortogonal dan energi aproksimasi yang diperoleh merupakan batas atas bagi energi n keadaan terendah. Misalkan fungsi aproksimasi f_a memiliki nilai W_a untuk integral variasional dan koefisien c_k^(a) pada (8.40). Pers. (8.53) dapat ditulis ulang sebagai

$$\Sigma_k[\{\langle f_i|\hat{H}|f_k\rangle - \langle f_i|f_k\rangle W_a\}c_k^{(a)}] = 0, \quad i = 1, ..., n \tag{8.97}$$

(a) Tunjukkan bahwa $\langle f_i|H - W_a|f_a\rangle = 0$ dengan menunjukkan bahwa integral ini sama dengan ruas kiri persamaan tersebut. (b) Gunakan hasil (a) untuk menunjukkan $\langle f_\beta|H - W_a|f_a\rangle = 0$ dan $\langle f_a|H - W_\beta|f_\beta\rangle^* = 0$ untuk semua a dan b. (c) Samakan dua integral pada (b), gunakan sifat Hermitian H, dan tunjukkan bahwa $\langle f_\beta|f_a\rangle(W_\beta - W_a) = 0$. Simpulkan bahwa untuk $W_a \neq W_\beta$, f_a dan f_β ortogonal; untuk $W_a = W_\beta$, kombinasi linear ortogonal dapat dibentuk. (d) Misalkan f_1, f_2, ..., f_n adalah fungsi aproksimasi ternormalisasi yang disusun menurut kenaikan nilai integral variasional. Tinjau $g = \Sigma_{a=1}^m b_a f_a$, dengan $m \leq n$, dan pilih b_a agar $\langle g|\psi_1\rangle = 0$, $\langle g|\psi_2\rangle = 0$, ..., $\langle g|\psi_{m-1}\rangle = 0$ serta g ternormalisasi. Di sini ψ_1, ψ_2, ... adalah fungsi gelombang sejati energi terendah. (e) Gunakan hasil (b) dan (c) untuk menunjukkan $\langle f_a|H|f_\beta\rangle = 0$ untuk $a \neq b$. (f) Gunakan hasil (e) untuk menunjukkan $\langle g|H|g\rangle = \Sigma_{a=1}^m |b_a|^2 W_a$. Jelaskan mengapa $\langle g|H|g\rangle \geq E_m$. (g) Gunakan ortonormalitas f untuk menunjukkan $\Sigma_{a=1}^m |b_a|^2 = 1$. (h) Gunakan hasil (f) dan (g) untuk menunjukkan $\langle g|H|g\rangle \leq W_m$. (i) Gabungkan (h) dan (d) untuk memperoleh hasil yang diinginkan: $W_m \geq E_m$ untuk m = 1, 2, ..., n.

8.41 Tentukan A*, A^T, dan A† untuk matriks A berikut:

$$A = \begin{bmatrix} 7 & 3 & 0 \\ 2-i & 2i & i \\ 1+i & 4 & 2 \end{bmatrix}$$

8.42 (a) Matriks manakah yang real? (b) Matriks manakah yang simetris? (c) Matriks manakah yang Hermitian?

$$B = \begin{bmatrix} i & 2+i \\ 2-i & 3 \end{bmatrix} \quad C = \begin{bmatrix} i & 2+i \\ 2+i & -1 \end{bmatrix}$$

$$D = \begin{bmatrix} 3 & 2-i \\ 2+i & -1 \end{bmatrix} \quad F = \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & -1 \end{bmatrix}$$

8.43 Verifikasilah persamaan ortonormalitas (8.93) untuk vektor-vektor kolom dari matriks uniter.

8.44 Jika fungsi v dan w ternormalisasi dan ortogonal, serta v dan w diekspansikan dalam himpunan lengkap ortonormal $\{f_i\}$ sebagai $v = \Sigma_i v_i f_i$ dan $w = \Sigma_i w_i f_i$, dengan koefisien ekspansi v_i dan w_i berupa konstanta, tunjukkan bahwa vektor kolom v dan w yang terdiri atas koefisien v_1, v_2, ... dan w_1, w_2, ... ternormalisasi dan ortogonal sebagaimana didefinisikan oleh (8.83) dan (8.84).

8.45 Tanpa menggunakan komputer, tentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi dari setiap matriks berikut. Mulailah dengan menyelesaikan persamaan karakteristik. Periksa bahwa jumlah nilai eigen sama dengan trace matriks.

$$A = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 9 & 2 \end{bmatrix} \quad C = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}$$

8.46 Jika A adalah matriks diagonal persegi orde tiga dengan elemen diagonal tak sama a_{11}, a_{22}, dan a_{33}, tentukan vektor-vektor eigen ternormalisasi A.

8.47 (a) Tanpa menggunakan komputer, tentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi dari matriks A = [[2, 2], [2, -1]]. (b) Apakah A real dan simetris? Apakah A Hermitian? (c) Apakah matriks vektor eigen C ortogonal? Apakah C uniter? (d) Tuliskan C^{-1} tanpa melakukan perhitungan. (e) Verifikasilah bahwa $C^{-1}AC$ sama dengan matriks diagonal nilai eigen. (f) Verifikasilah Pers. (8.80) untuk setiap vektor eigen.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & -1 \end{bmatrix}$$

8.48 Untuk A = [[2, -2i], [2i, 2]], tentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi, lalu jawablah pertanyaan pada Soal 8.47(b)-(e).

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -2i \\ 2i & 2 \end{bmatrix}$$

8.49 Tentukan vektor eigen c^(2) untuk nilai eigen λ_2 pada contoh dalam Bagian 8.6.

8.50 Tentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi dari matriks A = [[-1, 0, -2], [0, 5, 0], [-2, 4, 2]]. Anda dapat menghindari penyelesaian persamaan kubik jika mengembangkan determinan karakteristik dengan cara paling sederhana dan tidak mengalikan penuh polinom karakteristiknya.

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 0 & -2 \\ 0 & 5 & 0 \\ -2 & 4 & 2 \end{bmatrix}$$

8.51 Cara efisien untuk menghitung invers matriks persegi A orde n adalah sebagai berikut. (a) Letakkan matriks satuan orde n, I, di sebelah kanan matriks A untuk membentuk susunan n baris dan 2n kolom, ditulis (A|I). (b) Lakukan eliminasi Gauss-Jordan pada baris-baris (A|I) untuk mereduksi bagian A menjadi matriks satuan. Pada akhir proses, susunan berbentuk (I|B). Matriks B adalah A^{-1}. Jika A^{-1} tidak ada, bagian A tidak mungkin direduksi menjadi I. Gunakan prosedur ini untuk menentukan invers matriks pada Soal 8.50.

8.52 Gunakan sistem aljabar komputer untuk menentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi dari matriks persegi B orde enam dengan elemen $b_{jk} = (j^2 + k^2)/(j + k)$.

8.53 Excel dapat menentukan nilai eigen dan vektor eigen matriks real simetris sebagai berikut. Jika nilai eigen matriks real simetris H orde n disusun menaik $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq ... \leq \lambda_n$, perluasan teorema Rayleigh-Ritz menyatakan $\lambda_1 = \min(x^THx/x^Tx)$, dengan x vektor kolom tak nol orde n yang elemennya divariasikan untuk meminimumkan kuantitas tersebut; $\lambda_2 = \min(y^THy/y^Ty)$ jika $y^Tc_1 = 0$, dengan c_1 vektor eigen untuk λ_1; $\lambda_3 = \min(z^THz/z^Tz)$ jika $z^Tc_1 = 0$ dan $z^Tc_2 = 0$; dan seterusnya. Gunakan teorema ini agar Excel menemukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi matriks pada Soal 8.47. Petunjuk: beri nama pada berbagai matriks di Excel; untuk mengalikan A dan B, pilih rentang sel ukuran sesuai, ketik =MMULT(A,B), lalu tekan Control, Shift, dan Enter bersamaan; transpose C diperoleh dengan =TRANSPOSE(C). Untuk λ_1, mulai dengan tebakan x dan gunakan Solver untuk memvariasikan x agar x^THx minimum dengan kendala $x^Tx = 1$. Setelah nilai eigen dan vektor eigen pertama diperoleh, tambahkan kendala ortogonalitas yang relevan ke Solver dan temukan nilai serta vektor eigen berikutnya.

8.54 Untuk matriks orde 20 yang nilai eigennya 1, 2, 3, ..., 20, persamaan karakteristik dapat ditulis $\Pi_{m=1}^{20}(\lambda - m) = 0$, dengan notasi hasil kali $\Pi_{k=1}^{n} b_k = b_1b_2...b_n$. Gunakan lembar kerja atau sistem aljabar komputer untuk menggrafikkan polinom karakteristik untuk λ dalam rentang 0,9 sampai 20,1. Pilih skala sumbu vertikal agar titik potong kurva dengan sumbu horizontal tampak jelas. Kemudian tambahkan kuantitas $1\times10^{-8}\,\lambda^{19}$ pada polinom karakteristik, grafikkan polinom yang telah diubah, dan perhatikan apa yang terjadi pada akar-akar polinom karakteristik. Jika Anda melihat kurang dari 20 akar pada polinom yang diubah, jelaskan di mana akar-akar yang hilang. Dalam polinom karakteristik asli, koefisien λ^{19} adalah jumlah bilangan bulat 1 sampai 20, yaitu 210; perubahan yang dibuat kurang dari satu bagian dalam 10^{10} pada koefisien λ^{19}, tetapi menyebabkan perubahan besar pada nilai eigen.

8.55 Jika $B = M^{-1}AM$, buktikan bahwa matriks persegi A dan B memiliki nilai eigen yang sama. Nyatakan pula vektor eigen B dalam vektor eigen A. Petunjuk: mulai dari persamaan nilai eigen A, gantikan A dengan ekspresinya dalam B, lalu kalikan persamaan yang diperoleh dengan M^{-1} dari kiri untuk mendapatkan persamaan nilai eigen B.

8.56 Jika $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$ adalah nilai eigen A, tentukan nilai eigen dan vektor eigen A^2.

8.57 Soal ini membahas penyelesaian matriks metode variasi linear ketika fungsi basis tidak ortogonal. (a) Jika $\{f_i\}$ dalam $f = \Sigma_{i=1}^{n} c_i f_i$ bukan himpunan ortonormal, ambil kombinasi linear fungsi $\{f_i\}$ untuk memperoleh himpunan baru $\{g_m\}$ yang ortonormal, dengan $g_m = \Sigma_k a_{km} f_k$ dan $\langle g_j | g_m \rangle = \delta_{jm}$. Substitusikan ekspansi g ke dalam $\langle g_j | g_m \rangle = \delta_{jm}$ dan tunjukkan bahwa persamaan tersebut ekuivalen dengan persamaan matriks A†SA = I, dengan I matriks satuan, S matriks overlap berunsur S_{jk}, dan A matriks koefisien a_{km}. (b) Verifikasilah bahwa himpunan persamaan (8.53) dapat ditulis Hc = WSc, dengan c vektor kolom koefisien $c_1, c_2, ..., c_n$. Dengan indeks i untuk melabeli nilai dan vektor eigen, tulis Hc^(i) = W_iSc^(i), i = 1, 2, ..., n, dan verifikasilah HC = SCW. (c) Karena $AA^{-1} = I$, tulis HC = SCW sebagai $HAA^{-1}C = SAA^{-1}CW$. Kalikan persamaan ini dengan A† dari kiri. Gunakan hasil (a) untuk menunjukkan diperoleh H' C' = C'W, dengan C' = $A^{-1}C$ dan H' = A†HA. Bandingkan dengan (8.87) untuk melihat bahwa H'C' = C'W adalah persamaan nilai eigen bagi matriks H'. Prosedur matriksnya: hitung H dan S dalam basis nonortogonal; temukan A yang mengubah $\{f_i\}$ menjadi $\{g_i\}$ ortonormal; hitung H' = A†HA; cari nilai eigen W_i dan vektor eigen C' matriks H'; gunakan C = AC' untuk memperoleh koefisien. Nilai W_i dan koefisien ini adalah estimasi energi dan koefisien fungsi variasi yang diinginkan.

8.58 Prosedur ortogonalisasi simetris atau Löwdin sering digunakan untuk mengortogonalkan himpunan basis. Diberikan basis nonortogonal $\{f_i\}$, bentuk fungsi $\{g_m\}$ sebagai kombinasi linear $g_m = \Sigma_k a_{km} f_k$. Agar $\{g_m\}$ ortogonal, matriks A harus memenuhi A†SA = I, dengan S matriks overlap. Jika matriks B memenuhi $B^2 = S$, maka B disebut akar kuadrat S dan ditulis $S^{1/2}$; inversnya ditulis $S^{-1/2}$. (a) Karena S Hermitian, S dapat didiagonalkan oleh matriks uniter U dari vektor eigen ortonormalnya sehingga U†SU = s, dengan s matriks diagonal nilai eigen S. Tunjukkan bahwa S = UsU†. (b) Misalkan s dan $s^{-1/2}$ adalah matriks diagonal yang elemennya s_i dan $1/\sqrt{s_i}$. Tunjukkan bahwa M = $Us^{1/2}U$† memenuhi M^2 = UsU† = S sehingga $M = S^{1/2}$. (c) Tunjukkan bahwa N = $Us^{-1/2}U$† memenuhi MN = I, sehingga N = $S^{-1/2}$ dan $S^{-1/2}$ = $Us^{-1/2}U$†. (d) Dalam ortogonalisasi simetris, A = $S^{-1/2}$ = $Us^{-1/2}U$†. Untuk menunjukkan pilihan ini memenuhi A†SA = I, buktikan dahulu (BC)† = C†B† dengan membandingkan elemen (i,j), lalu perluas menjadi (BDE)† = E†D†B†. Selanjutnya tunjukkan A† = $Us^{-1/2}U$† dan akhirnya A†SA = I. Jadi, untuk memakai ortogonalisasi simetris, tentukan nilai eigen dan vektor eigen ortonormal S, bentuk $s^{-1/2}$, bentuk U, hitung A = $Us^{-1/2}U$†, dan ambil fungsi ortonormal $g_m = \Sigma_k a_{km} f_k$.

8.59 Misalkan $\hat{A}g_n = a_n g_n$. Fungsi eigen g_n diekspansikan dalam himpunan lengkap ortonormal $\{f_i\}$ sebagai $g_n = \Sigma_k c_k^{(n)} f_k$. Substitusikan ekspansi ini ke dalam $\hat{A}g_n = a_n g_n$, kalikan dengan f_i^*, integrasikan pada seluruh ruang, dan tunjukkan bahwa diperoleh $\Sigma_k(A_{ik} - a_n\delta_{ik})c_k^{(n)} = 0$ untuk i = 1, 2, 3, ..., dengan $A_{ik} = \langle f_i | \hat{A} | f_k \rangle$. Himpunan persamaan ini berbentuk sama dengan (8.53) untuk $S_{ik} = \delta_{ik}$. Jadi, sebagaimana nilai W dan koefisien c_k dalam (8.53) dengan $S_{ik} = \delta_{ik}$ dapat ditemukan dari nilai dan vektor eigen matriks H, nilai eigen a_n operator $\hat{A}$ dan koefisien

ekspansi c_k^(n) fungsi eigen g_n dapat ditemukan dari nilai dan vektor eigen matriks A.

8.60 Tinjau potensial sumur ganda dengan $V = \infty$ untuk $x < 0$, $V = 0$ untuk $0 \le x \le l/4$, $V = V_0$ untuk $l/4 < x < 3l/4$, $V = 0$ untuk $3l/4 \le x \le l$, dan $V = \infty$ untuk $x > l$. Gunakan Mathcad atau program aljabar komputer lain untuk menerapkan metode variasi linear dengan mengambil m fungsi gelombang partikel-dalam-kotak terendah sebagai fungsi basis. Gunakan variabel tak berdimensi dan susun program agar V_0 dan m mudah diubah. Gunakan kemampuan program mencari nilai dan vektor eigen untuk memperoleh energi dan fungsi gelombang aproksimasi. Grafikkan empat fungsi gelombang aproksimasi terendah. Tunjukkan bahwa $T_{jk} = \delta_{jk}\, k^2\pi^2\hbar^2/(2ml^2)$, tetapi biarkan program mengevaluasi integral V_{jk}. Petunjuk: dalam Mathcad mungkin perlu menyesuaikan nilai TOL. (a) Untuk $V_0 = 100\hbar^2/(ml^2)$, tentukan empat tingkat energi terendah dengan jumlah fungsi basis PIB 4, 8, 16, dan 32. Bandingkan dengan energi tereduksi eksak 45,802165653; 46,107222914; 113,938076461; dan 143,353993916. Fungsi basis mana yang berkontribusi besar pada fungsi gelombang keadaan dasar? Fungsi basis mana yang berkontribusi besar pada keadaan tereksitasi pertama? (b) Dengan empat fungsi basis, energi variasional fungsi satu simpul yang bersesuaian dengan keadaan tereksitasi pertama dapat berada di bawah energi variasional fungsi genap yang bersesuaian dengan keadaan dasar. Apakah ini melanggar ketaksamaan teorema variasi (8.59)-(8.61)?

8.61 Revisi penyelesaian Soal 8.60 agar fungsi genap dan ganjil diperlakukan secara terpisah. Lakukan dengan memperkenalkan parameter yang bernilai 1 atau 0 bergantung pada apakah fungsi gelombang yang ditangani genap atau ganjil. Hitung dua nilai eigen Hamiltonian terendah dengan 16 fungsi PIB genap pertama. Ulangi dengan 16 fungsi PIB ganjil terendah. Bandingkan hasilnya dengan Soal 8.60.

8.62 Tinjau masalah satu partikel satu dimensi dengan $V = V_0(\hbar^2/ml^2)x$ untuk $0 \le x \le l$ dan $V = \infty$ di tempat lain. Modifikasi penyelesaian Soal 8.60 untuk memperkirakan empat nilai eigen energi terendah bagi $V_0 = 200$ dengan jumlah fungsi basis partikel-dalam-kotak: (a) 8; (b) 12. Perhatikan bentuk empat fungsi gelombang terendah. Keadaan partikel-dalam-kotak mana yang berkontribusi besar pada keadaan dasar? Pada keadaan tereksitasi pertama?

8.63 Revisi penyelesaian Soal 8.60 untuk menangani osilator harmonik satu dimensi dengan fungsi basis partikel-dalam-kotak. Ingat bahwa pada Bagian 4.4 untuk $E_r \le 5$, fungsi gelombang dapat dianggap nol di luar daerah $-5 \le x_r \le 5$. Karena itu, ambil fungsi basis PIB dari -5 sampai 5, dengan pusat kotak di $x_r = 0$. Karena panjang kotak 10 satuan dalam x_r, $f_j = (2/10)^{1/2} \sin[j\pi(x_r+5)/10]$ untuk $|x_r| \le 5$ dan $f_j = 0$ di tempat lain. Revisi pula elemen matriks energi kinetik dan potensial. Tingkatkan jumlah fungsi basis PIB sampai semua energi dengan $E_r < 5$ akurat hingga tiga desimal. Periksa bentuk tiga fungsi variasi terendah. Fungsi basis PIB mana yang paling berkontribusi pada keadaan dasar? Pada keadaan tereksitasi pertama?

8.64 Revisi penyelesaian Soal 8.60 untuk menerapkan fungsi basis PIB pada osilator kuartik satu dimensi dengan $V = cx^4$. Lihat petunjuk Soal 8.63. Ambil kotak dari $x_r = -3{,}5$ sampai 3,5, dengan x_r seperti pada Soal 4.32. Tingkatkan jumlah fungsi basis PIB sampai tiga energi terendah stabil hingga tiga desimal. Bandingkan tiga energi terendah dengan hasil metode Numerov pada Soal 4.32. Periksa bentuk tiga fungsi

variasi terendah. Ulangi untuk kotak dari x_r = -4,5 sampai 4,5. Untuk panjang kotak mana konvergensi menuju energi sejati lebih cepat?

8.65 Terapkan fungsi basis partikel-dalam-kotak pada persamaan radial atom hidrogen untuk keadaan l = 0. Ingat bahwa pada Bagian 6.9 faktor radial fungsi gelombang atom H ditulis $R(r) = r^{-1}F(r)$, dengan F(r) = 0 pada r = 0. Fungsi variasi pada soal ini berbentuk $f = r^{-1}F(r)Y\_l\hat{}m(\theta,\varphi)$; ambil fungsi tak berdimensi $F_r(r_r)$ sebagai kombinasi linear dari 28 fungsi basis PIB, dengan kotak dari r_r = 0 sampai 27. Susun bentuk yang benar untuk integral H_{jk} dan S_{jk}. Tentukan estimasi untuk tiga energi l = 0 terendah. Untuk fungsi variasi keadaan dasar, berapa banyak fungsi basis PIB yang memiliki koefisien lebih besar daripada 0,1?

8.66 Benar atau salah? (a) Transpos vektor kolom adalah vektor baris. (b) Hasil kali matriks bc dari vektor baris b dengan n elemen dan vektor kolom c dengan n elemen adalah skalar. (c) Elemen diagonal matriks Hermitian harus bilangan real. (d) Nilai eigen matriks diagonal sama dengan elemen diagonalnya. (e) Untuk matriks persegi yang semua elemennya di bawah diagonal utama nol, nilai eigennya sama dengan elemen diagonalnya; lihat Soal 8.20. (f) Setiap vektor kolom tak nol dengan n elemen adalah vektor eigen matriks satuan orde n. (g) Setiap kombinasi linear tak nol dari dua vektor eigen yang bersesuaian dengan nilai eigen yang sama dari suatu matriks adalah vektor eigen matriks tersebut. (h) Nol tidak diperbolehkan sebagai nilai eigen matriks. (i) Vektor kolom nol tidak diperbolehkan sebagai vektor eigen matriks. (j) Setiap matriks persegi memiliki invers. (k) Jika AB = AC, maka matriks B dan C pasti sama. (l) Jika A matriks persegi orde n dan c vektor kolom dengan n elemen, maka Ac adalah vektor kolom dengan n elemen. (m) Setiap matriks real simetris adalah matriks Hermitian. (n) Jumlah nilai eigen matriks persegi selalu sama dengan trace matriks.

BAB 9
TEORI GANGGUAN

9.1 Teori Gangguan

Bab ini membahas metode pendekatan utama kedua dalam mekanika kuantum, yaitu teori gangguan (perturbation theory).

Misalkan kita mempunyai suatu sistem dengan operator Hamiltonian tak bergantung waktu $\hat{H}$ dan kita tidak mampu menyelesaikan persamaan Schrödinger berikut untuk memperoleh fungsi eigen dan nilai eigen keadaan stasioner terikat.

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \tag{9.1}$$

Misalkan pula bahwa Hamiltonian $\hat{H}$ hanya sedikit berbeda dari Hamiltonian $\hat{H}^0$ milik suatu sistem yang persamaan Schrödingernya dapat kita selesaikan.

$$\hat{H}^0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)} \tag{9.2}$$

Contohnya adalah osilator anharmonik satu dimensi dengan Hamiltonian berikut.

$$\hat{H} = -(\hbar^2/2m)(d^2/dx^2) + \tfrac{1}{2}kx^2 + cx^3 + dx^4 \tag{9.3}$$

Hamiltonian (9.3) berhubungan erat dengan Hamiltonian osilator harmonik berikut.

$$\hat{H}^0 = -(\hbar^2/2m)(d^2/dx^2) + \tfrac{1}{2}kx^2 \tag{9.4}$$

Apabila konstanta c dan d dalam (9.3) kecil, kita mengharapkan fungsi eigen dan nilai eigen osilator anharmonik berhubungan erat dengan fungsi eigen dan nilai eigen osilator harmonik.

Sistem dengan Hamiltonian $\hat{H}^0$ akan kita sebut sistem tak terganggu (unperturbed system). Sistem dengan Hamiltonian $\hat{H}$ disebut sistem terganggu (perturbed system). Selisih antara kedua Hamiltonian tersebut adalah gangguan $\hat{H}'$.

$$\hat{H}' \equiv \hat{H} - \hat{H}^0 \tag{9.5}$$

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}' \tag{9.6}$$

Tanda prima tidak menyatakan pendiferensialan. Untuk osilator anharmonik dengan Hamiltonian (9.3), gangguan terhadap osilator harmonik yang berkaitan ialah $\hat{H}' = cx^3 + dx^4$.

Dalam $\hat{H}^0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$ [Persamaan (9.2)], $E_n^{(0)}$ dan $\psi_n^{(0)}$ masing-masing disebut energi tak terganggu dan fungsi gelombang tak terganggu bagi keadaan n. Jika $\hat{H}^0$ sama dengan Hamiltonian osilator harmonik (9.4), maka $E_n^{(0)} = (n + \frac{1}{2})h\nu$ [Persamaan (4.45)], dengan n bilangan bulat tak-negatif. Huruf n digunakan sebagai pengganti v agar konsisten dengan notasi teori gangguan. Superskrip (0) tidak berarti keadaan dasar; teori gangguan dapat diterapkan pada keadaan mana

pun. Subskrip n memberi label keadaan yang sedang dibahas, sedangkan superskrip (0) menunjukkan sistem tak terganggu.

Tugas kita adalah menghubungkan nilai eigen dan fungsi eigen sistem terganggu yang belum diketahui dengan nilai eigen dan fungsi eigen sistem tak terganggu yang telah diketahui. Untuk membantu melakukannya, kita membayangkan bahwa gangguan diterapkan secara bertahap sehingga terjadi perubahan kontinu dari sistem tak terganggu menuju sistem terganggu. Secara matematis, hal ini dilakukan dengan memasukkan parameter λ ke dalam Hamiltonian.

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \lambda\hat{H}' \tag{9.7}$$

Ketika $\lambda = 0$, kita memperoleh sistem tak terganggu. Ketika λ bertambah, besar gangguan meningkat; pada $\lambda = 1$ gangguan telah sepenuhnya "dihidupkan". Parameter λ dimasukkan untuk membantu menghubungkan fungsi eigen terganggu dengan fungsi eigen tak terganggu. Pada akhirnya kita menetapkan $\lambda = 1$ sehingga parameter tersebut hilang.

Bagian 9.1 sampai 9.7 membahas Hamiltonian tak bergantung waktu dan keadaan stasioner. Bagian 9.8 membahas gangguan yang bergantung waktu.

9.2 Teori Gangguan Nondegenerasi

Perlakuan gangguan terhadap tingkat energi terdegenerasi berbeda dari perlakuan terhadap tingkat energi nondegenerasi. Bagian ini mengkaji pengaruh suatu gangguan terhadap tingkat nondegenerasi. Jika sebagian tingkat energi sistem tak terganggu terdegenerasi sedangkan yang lain nondegenerasi, perlakuan pada bagian ini hanya berlaku bagi tingkat nondegenerasi.

Teori Gangguan Nondegenerasi

Misalkan $\psi_n^{(0)}$ merupakan fungsi gelombang suatu tingkat nondegenerasi tak terganggu tertentu dengan energi $E_n^{(0)}$. Misalkan ψ_n adalah fungsi gelombang terganggu yang terbentuk dari $\psi_n^{(0)}$ ketika gangguan diterapkan. Berdasarkan (9.1) dan (9.7), persamaan Schrödinger bagi keadaan terganggu ialah

$$\hat{H}\psi_n = (\hat{H}^0 + \lambda\hat{H}')\psi_n = E_n\psi_n \tag{9.8}$$

Karena Hamiltonian dalam (9.8) bergantung pada parameter λ, fungsi eigen ψ_n dan nilai eigen E_n juga bergantung pada λ: $\psi_n = \psi_n(\lambda,q)$ dan $E_n = E_n(\lambda)$, dengan q menyatakan koordinat-koordinat sistem. Kita mengembangkan ψ_n dan E_n sebagai deret Taylor dalam pangkat λ [Soal 4.1].

$$\psi_n = \psi_n|_{\lambda=0} + (\partial\psi_n/\partial\lambda)|_{\lambda=0}\,\lambda + (\partial^2\psi_n/\partial\lambda^2)|_{\lambda=0}\,\lambda^2/2! + \cdots \tag{9.9}$$

$$E_n = E_n|_{\lambda=0} + (dE_n/d\lambda)|_{\lambda=0}\,\lambda + (d^2E_n/d\lambda^2)|_{\lambda=0}\,\lambda^2/2! + \cdots \tag{9.10}$$

Menurut hipotesis, ketika λ menuju nol, ψ_n dan E_n masing-masing menuju $\psi_n^{(0)}$ dan $E_n^{(0)}$.

$$\psi_n|\lambda_{=0} = \psi_n{}^{(0)} \text{ dan } E_n|\lambda_{=0} = E_n{}^{(0)} \tag{9.11}$$

Kita memperkenalkan singkatan berikut.

$$\psi_n{}^{(k)} \equiv (1/k!)(\partial^k\psi_n/\partial\lambda^k)|\lambda_{=0}, \quad E_n{}^{(k)} \equiv (1/k!)(d^kE_n/d\lambda^k)|\lambda_{=0}, \quad k = 1, 2, \ldots \tag{9.12}$$

Persamaan (9.9) dan (9.10) kemudian menjadi

$$\psi_n = \psi_n{}^{(0)} + \lambda\psi_n{}^{(1)} + \lambda^2\psi_n{}^{(2)} + \cdots + \lambda^k\psi_n{}^{(k)} + \cdots \tag{9.13}$$

$$E_n = E_n{}^{(0)} + \lambda E_n{}^{(1)} + \lambda^2 E_n{}^{(2)} + \cdots + \lambda^k E_n{}^{(k)} + \cdots \tag{9.14}$$

Untuk k = 1, 2, 3, dan seterusnya, $\psi_n{}^{(k)}$ serta $E_n{}^{(k)}$ disebut koreksi orde ke-k terhadap fungsi gelombang dan energi. Kita mengasumsikan bahwa deret (9.13) dan (9.14) konvergen untuk $\lambda = 1$. Untuk gangguan kecil, diharapkan beberapa suku pertama deret memberikan pendekatan yang baik terhadap energi dan fungsi gelombang sebenarnya. Deret teori gangguan cukup sering tidak konvergen; meskipun demikian, beberapa suku awal dari deret yang tidak konvergen sering tetap memberikan pendekatan yang berguna.

Kita mengambil $\psi_n{}^{(0)}$ dalam keadaan ternormalisasi, yaitu $\langle\psi_n{}^{(0)}|\psi_n{}^{(0)}\rangle = 1$. Alih-alih menuntut ψ_n ternormalisasi, kita mensyaratkan

$$\langle\psi_n{}^{(0)}|\psi_n\rangle = 1 \tag{9.15}$$

Jika ψ_n tidak memenuhi persamaan ini, perkalian ψ_n dengan konstanta $1/\langle\psi_n{}^{(0)}|\psi_n\rangle$ menghasilkan fungsi gelombang terganggu yang mempunyai sifat tersebut. Syarat (9.15), yang disebut normalisasi antara (intermediate normalization), menyederhanakan penurunan. Perkalian ψ_n dengan suatu konstanta tidak mengubah energi dalam persamaan Schrödinger $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$; oleh sebab itu, penggunaan normalisasi antara tidak memengaruhi hasil koreksi energi. Jika dikehendaki, pada akhir perhitungan ψ_n yang ternormalisasi antara dapat dikalikan dengan konstanta untuk menormalisasikannya dalam pengertian biasa.

Substitusi (9.13) ke dalam $1 = \langle\psi_n{}^{(0)}|\psi_n\rangle$ [Persamaan (9.15)] memberikan $1 = \langle\psi_n{}^{(0)}|\psi_n{}^{(0)}\rangle + \lambda\langle\psi_n{}^{(0)}|\psi_n{}^{(1)}\rangle + \lambda^2\langle\psi_n{}^{(0)}|\psi_n{}^{(2)}\rangle + \cdots$. Karena persamaan ini benar untuk setiap nilai λ dalam rentang 0 hingga 1, koefisien pangkat λ yang sama pada kedua ruas harus sama, sebagaimana dibuktikan setelah Persamaan (4.11). Dengan menyamakan koefisien λ^0, kita memperoleh $1 = \langle\psi_n{}^{(0)}|\psi_n{}^{(0)}\rangle$, yang terpenuhi karena $\psi_n{}^{(0)}$ ternormalisasi. Dengan menyamakan koefisien λ^1, λ^2, dan seterusnya, diperoleh

$$\langle\psi_n{}^{(0)}|\psi_n{}^{(1)}\rangle = 0, \quad \langle\psi_n{}^{(0)}|\psi_n{}^{(2)}\rangle = 0, \quad \text{dan seterusnya} \tag{9.16}$$

Dengan normalisasi antara, koreksi-koreksi fungsi gelombang bersifat ortogonal terhadap $\psi_n{}^{(0)}$.

Substitusi (9.13) dan (9.14) ke dalam persamaan Schrödinger (9.8), kemudian pengumpulan suku-suku dengan pangkat λ yang sama, memberikan

$$\hat{H}^0\psi_n^{(0)} + \lambda(\hat{H}'\psi_n^{(0)} + \hat{H}^0\psi_n^{(1)}) + \lambda^2(\hat{H}^0\psi_n^{(2)} + \hat{H}'\psi_n^{(1)}) + \cdots = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)} + \lambda(E_n^{(1)}\psi_n^{(0)} + E_n^{(0)}\psi_n^{(1)}) + \lambda^2(E_n^{(2)}\psi_n^{(0)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(0)}\psi_n^{(2)}) + \cdots \quad (9.17)$$

Dengan mengasumsikan konvergensi yang memadai, agar kedua deret pada ruas-ruas (9.17) sama untuk semua nilai λ, koefisien pangkat λ yang sama harus sama. Penyamaan koefisien λ^0 menghasilkan $\hat{H}^0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$, yaitu persamaan Schrödinger sistem tak terganggu, sehingga tidak memberikan informasi baru. Penyamaan koefisien λ^1 memberikan

$$\hat{H}^0\psi_n^{(1)} - E_n^{(0)}\psi_n^{(1)} = E_n^{(1)}\psi_n^{(0)} - \hat{H}'\psi_n^{(0)} \quad (9.18)$$

Koreksi Energi Orde Pertama

Untuk menentukan $E_n^{(1)}$, kita mengalikan (9.18) dengan $\psi_m^{(0)*}$ dan mengintegrasikannya pada seluruh ruang.

$$\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}^0|\psi_n^{(1)}\rangle - E_n^{(0)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle - \langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle \quad (9.19)$$

Notasi kurung [Persamaan (7.1) dan (7.3)] digunakan. Karena $\hat{H}^0$ Hermitian, sifat Hermitian (7.12) memberikan hasil berikut untuk suku pertama pada ruas kiri (9.19).

$$\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}^0|\psi_n^{(1)}\rangle = \langle\psi_n^{(1)}|\hat{H}^0|\psi_m^{(0)}\rangle^* = E_m^{(0)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle \quad (9.20)$$

Di sini digunakan persamaan Schrödinger tak terganggu $\hat{H}^0\psi_m^{(0)} = E_m^{(0)}\psi_m^{(0)}$, kenyataan bahwa $E_m^{(0)}$ real, dan Persamaan (7.4). Substitusi (9.20) ke dalam (9.19), serta penggunaan hubungan ortonormalitas $\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle = \delta_{mn}$, menghasilkan

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)}\delta_{mn} - \langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle \quad (9.21)$$

Untuk m = n, ruas kiri (9.21) sama dengan nol, sehingga

$$E_n^{(1)} = \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle = \int \psi_n^{(0)*}\hat{H}'\psi_n^{(0)}\,d\tau \quad (9.22)$$

Koreksi orde pertama terhadap energi diperoleh dengan merata-ratakan gangguan $\hat{H}'$ menggunakan fungsi gelombang tak terganggu yang sesuai. Dengan menetapkan λ = 1 dalam (9.14), diperoleh

$$E_n \approx E_n^{(0)} + E_n^{(1)} = E_n^{(0)} + \int \psi_n^{(0)*}\hat{H}'\psi_n^{(0)}\,d\tau \quad (9.23)$$

Contoh

Untuk osilator anharmonik dengan Hamiltonian (9.3), tentukan $E_0^{(1)}$ bagi keadaan dasar apabila sistem tak terganggu diambil sebagai osilator harmonik.

Gangguan menurut Persamaan (9.3)-(9.5) adalah $\hat{H}' = \hat{H} - \hat{H}^0 = cx^3 + dx^4$. Koreksi energi orde pertama untuk keadaan dengan bilangan kuantum v diberikan oleh (9.22): $E_v^{(1)} = \langle\psi_v^{(0)}|cx^3 + dx^4|\psi_v^{(0)}\rangle$. Untuk keadaan dasar v = 0, penggunaan $\psi_0^{(0)} = (\alpha/\pi)^{1/4}e^{-\alpha x^2/2}$ [Persamaan (4.53)] memberikan $E_0^{(1)} = (\alpha/\pi)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}(cx^3 +$

$dx^4)dx$. Integral dari $-\infty$ sampai ∞ untuk fungsi ganjil $cx^3e^{-\alpha x^2}$ sama dengan nol. Dengan integral Lampiran (A.10) untuk n = 2 dan α dari (4.31), diperoleh $E_0^{(1)} = 2d(\alpha/\pi)^{1/2}\int_0^{\infty}e^{-\alpha x^2}x^4dx = 3d/(4\alpha^2) = 3dh^2/(64\pi^4\nu^2m^2)$. Energi keadaan dasar tak terganggu ialah $E_0^{(0)} = \frac{1}{2}h\nu$, sehingga $E_0^{(0)} + E_0^{(1)} = \frac{1}{2}h\nu + 3dh^2/(64\pi^4\nu^2m^2)$.

Latihan

Tinjau sistem satu partikel satu dimensi dengan $V = \infty$ untuk $x < 0$ dan $x > l$, serta $V = cx$ untuk $0 \le x \le l$, dengan c suatu konstanta. (a) Gambarkan V untuk $c > 0$. (b) Perlakukan sistem sebagai partikel dalam kotak yang terganggu dan tentukan $E_n^{(1)}$ untuk keadaan dengan bilangan kuantum n. Kemudian gunakan Persamaan (3.88) untuk menjelaskan mengapa jawaban tersebut memang diharapkan. Jawaban sebagian: (b) ½cl.

Koreksi Fungsi Gelombang Orde Pertama

Untuk $m \neq n$, Persamaan (9.21) menjadi

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = -\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle, \quad m \neq n \tag{9.24}$$

Untuk menentukan $\psi_n^{(1)}$, kita mengembangkannya dalam himpunan lengkap dan ortonormal fungsi eigen tak terganggu $\psi_m^{(0)}$ dari operator Hermitian $\hat{H}^0$.

$$\psi_n^{(1)} = \Sigma_m a_m\psi_m^{(0)}, \quad \text{dengan } a_m = \langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle \tag{9.25}$$

Persamaan (7.41) digunakan untuk koefisien pengembangan a_m. Dengan memasukkan $a_m = \langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$ ke dalam (9.24), dan karena tingkat $E_n^{(0)}$ nondegenerasi sehingga $E_m^{(0)} \neq E_n^{(0)}$ untuk $m \neq n$, diperoleh

$$a_m = \langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle/(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}), \quad m \neq n \tag{9.26}$$

Koefisien a_m dalam pengembangan (9.25) ditentukan oleh (9.26), kecuali a_n, yaitu koefisien $\psi_n^{(0)}$. Dari persamaan kedua (9.25), $a_n = \langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$. Pemilihan normalisasi antara menjadikan besaran ini nol [Persamaan (9.16)]. Dengan demikian, koreksi orde pertama terhadap fungsi gelombang ialah

$$\psi_n^{(1)} = \Sigma_{m\neq n}[\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle/(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})]\psi_m^{(0)} \tag{9.27}$$

Lambang $\Sigma_{m\neq n}$ berarti penjumlahan dilakukan atas semua keadaan tak terganggu kecuali keadaan n. Dengan menetapkan $\lambda = 1$ dalam (9.13) dan hanya menggunakan koreksi fungsi gelombang orde pertama, pendekatan terhadap fungsi gelombang terganggu adalah

$$\psi_n \approx \psi_n^{(0)} + \Sigma_{m\neq n}[\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle/(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})]\psi_m^{(0)} \tag{9.28}$$

Untuk $\psi_n^{(2)}$ dan normalisasi ψ, lihat Kemble, Bab XI.

Koreksi Energi Orde Kedua

Dengan menyamakan koefisien suku λ^2 dalam (9.17), diperoleh

$$\hat{H}^0\psi_n^{(2)} - E_n^{(0)}\psi_n^{(2)} = E_n^{(2)}\psi_n^{(0)} + E_n^{(1)}\psi_n^{(1)} - \hat{H}'\psi_n^{(1)} \tag{9.29}$$

Perkalian dengan $\psi_m^{(0)*}$ yang diikuti integrasi atas seluruh ruang memberikan

$$\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}^0|\psi_n^{(2)}\rangle - E_n^{(0)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(0)}\rangle + E_n^{(1)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle - \langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(1)}\rangle \tag{9.30}$$

Integral pertama pada (9.30) sama dengan integral dalam (9.20), hanya $\psi_n^{(1)}$ digantikan oleh $\psi_n^{(2)}$. Karena itu,

$$\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}^0|\psi_n^{(2)}\rangle = E_m^{(0)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle \tag{9.31}$$

Penggunaan (9.31) dan ortonormalitas fungsi tak terganggu dalam (9.30) menghasilkan

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(2)}\rangle = E_n^{(2)}\delta_{mn} + E_n^{(1)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle - \langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(1)}\rangle \tag{9.32}$$

Untuk m = n, ruas kiri (9.32) sama dengan nol. Karena $\langle\psi_n^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = 0$ [Persamaan (9.16)], diperoleh

$$E_n^{(2)} = \langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(1)}\rangle \tag{9.33}$$

Persamaan (9.33) menunjukkan bahwa untuk menentukan koreksi energi orde kedua kita hanya perlu mengetahui koreksi fungsi gelombang orde pertama. Bahkan dapat ditunjukkan bahwa pengetahuan tentang $\psi_n^{(1)}$ juga cukup untuk menentukan $E_n^{(3)}$. Secara umum, jika koreksi fungsi gelombang diketahui sampai orde k, koreksi energi dapat dihitung sampai orde 2k + 1 (lihat Bates, Jilid I, hlm. 184).

Substitusi (9.27) untuk $\psi_n^{(1)}$ ke dalam (9.33) memberikan

$$E_n^{(2)} = \Sigma_{m\neq n}\,[\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle/(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})]\langle\psi_n^{(0)}|\hat{H}'|\psi_m^{(0)}\rangle \tag{9.34}$$

Karena $\hat{H}'$ Hermitian, hasil kali dua elemen matriks pada (9.34) sama dengan kuadrat modulus elemen matriks tersebut. Dengan demikian,

$$E_n^{(2)} = \Sigma_{m\neq n}\,|\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle|^2/(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) \tag{9.35}$$

Inilah ungkapan yang dicari untuk $E_n^{(2)}$ dalam fungsi gelombang dan energi tak terganggu. Dengan memasukkan $E_n^{(2)}$ ke dalam (9.14) pada $\lambda = 1$, energi pendekatan keadaan terganggu adalah

$$E_n \approx E_n^{(0)} + H'_{nn} + \Sigma_{m\neq n}\,|H'_{mn}|^2/(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) \tag{9.36}$$

Di sini $H'_{mn} = \langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle$ dan integral dihitung menggunakan fungsi gelombang tak terganggu yang ternormalisasi. Rumus koreksi energi orde lebih tinggi diberikan dalam Bates, Jilid I, hlm. 181-185. Bentuk teori gangguan yang dikembangkan pada bagian ini disebut teori gangguan Rayleigh-Schrödinger; pendekatan lain juga ada.

Pembahasan

Persamaan (9.28) menunjukkan bahwa pengaruh gangguan terhadap fungsi gelombang $\psi_n^{(0)}$ adalah "mencampurkan" sumbangan dari keadaan-keadaan lain $\psi_m^{(0)}$, $m \neq n$. Karena terdapat faktor $1/(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})$, sumbangan yang paling penting—selain $\psi_n^{(0)}$ sendiri—berasal dari keadaan yang energinya paling dekat dengan keadaan n.

Untuk menghitung koreksi energi orde pertama, hanya diperlukan satu integral H'_{nn}. Sebaliknya, untuk koreksi energi orde kedua, kita harus menghitung elemen matriks $\hat{H}'$ antara keadaan ke-n dan semua keadaan m lainnya, lalu melakukan jumlah tak berhingga dalam (9.35). Dalam banyak kasus, koreksi energi orde kedua tidak dapat dihitung secara eksak. Koreksi energi orde ketiga dan yang lebih tinggi bahkan lebih sulit.

Penjumlahan dalam (9.28) dan (9.36) merupakan jumlah atas keadaan yang berlainan, bukan hanya atas nilai energi yang berlainan. Jika beberapa tingkat energi selain tingkat ke-n terdegenerasi, setiap fungsi gelombang bebas linear yang berkaitan dengan tingkat terdegenerasi tersebut harus memberikan satu suku tersendiri dalam penjumlahan.

Penjumlahan atas keadaan diperlukan dalam (9.28) dan (9.36) karena pengembangan (9.25) memerlukan himpunan fungsi yang lengkap. Oleh sebab itu, semua fungsi gelombang bebas linear harus dimasukkan. Jika masalah tak terganggu mempunyai fungsi gelombang kontinu—seperti atom hidrogen—integrasi atas fungsi-fungsi kontinu juga harus disertakan. Jika $\psi^{E(0)}$ menyatakan fungsi gelombang kontinu tak terganggu dengan energi $E^{(0)}$, maka (9.27) dan (9.35) menjadi

$$\psi_n^{(1)} = \Sigma_{m\neq n}\,[H'_{mn}/(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})]\psi_m^{(0)} + \int [H'^{E}{}_{,n}/(E_n^{(0)} - E^{(0)})]\psi^{E(0)}dE^{(0)}; \quad E_n^{(2)} = \Sigma_{m\neq n}\,|H'_{mn}|^2/(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) + \int |H'^{E}{}_{,n}|^2/(E_n^{(0)} - E^{(0)})dE^{(0)} \tag{9.37}$$

Dengan $H'^{E}{}_{,n} \equiv \langle\psi^{E(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle$. Integral dilakukan pada seluruh rentang energi keadaan kontinu, misalnya dari nol sampai tak berhingga untuk atom hidrogen. Keberadaan keadaan kontinu dalam masalah tak terganggu membuat penentuan $E_n^{(2)}$ semakin sulit.

Perbandingan Metode Variasi dan Metode Gangguan

Metode gangguan berlaku bagi semua keadaan terikat suatu sistem. Walaupun teorema variasi dalam Bagian 8.1 hanya berlaku bagi keadaan terendah dengan simetri tertentu, metode variasi linear dapat digunakan untuk menangani keadaan terikat tereksitasi.

Perhitungan gangguan sering sukar karena harus mengevaluasi jumlah tak berhingga atas keadaan diskret dan integral atas keadaan kontinu yang muncul dalam koreksi energi orde kedua dan lebih tinggi.

Dalam metode gangguan, energi dapat dihitung jauh lebih teliti—sampai orde 2k + 1—daripada fungsi gelombang—sampai orde k. Keadaan serupa berlaku pada metode variasi: energi yang cukup baik dapat diperoleh dari fungsi gelombang yang relatif kurang teliti. Jika sifat selain energi dihitung, hasilnya pada umumnya tidak seandal energi terhitung.

Metode Variasi-Gangguan

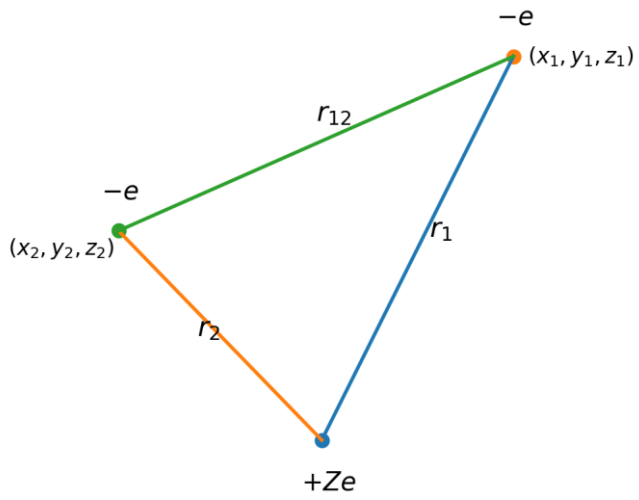
Metode variasi-gangguan memungkinkan perkiraan yang teliti terhadap $E_g^{(2)}$ dan koreksi energi teori gangguan orde lebih tinggi bagi keadaan dasar tanpa mengevaluasi jumlah tak berhingga dalam (9.36). Metode ini didasarkan pada pertidaksamaan berikut.

$$\langle u|\hat{H}^0 - E_g^{(0)}|u\rangle + \langle u|\hat{H}' - E_g^{(1)}|\psi_g^{(0)}\rangle + \langle \psi_g^{(0)}|\hat{H}' - E_g^{(1)}|u\rangle \geq E_g^{(2)} \qquad (9.38)$$

Di sini u adalah sembarang fungsi berperilaku baik yang memenuhi syarat batas, dan subskrip g menyatakan keadaan dasar. Untuk bukti (9.38), lihat Hameka, Bagian 7-9. Dengan mengambil u sebagai fungsi coba yang mengandung parameter-parameter dan memvariasikan parameter tersebut untuk meminimumkan ruas kiri (9.38), kita dapat memperkirakan $E_g^{(2)}$. Fungsi u ternyata merupakan pendekatan terhadap $\psi_g^{(1)}$, yaitu koreksi orde pertama terhadap fungsi gelombang keadaan dasar, dan kemudian dapat pula digunakan untuk memperkirakan $E_g^{(3)}$. Integral variasi yang serupa dapat dipakai untuk mencari koreksi orde lebih tinggi terhadap energi dan fungsi gelombang keadaan dasar.

9.3 Perlakuan Gangguan terhadap Keadaan Dasar Atom Helium

Atom helium mempunyai dua elektron dan inti bermuatan +2e. Inti dianggap diam (Bagian 6.6), dan titik asal sistem koordinat ditempatkan pada inti. Koordinat elektron 1 dan 2 masing-masing adalah (x_1,y_1,z_1) dan (x_2,y_2,z_2); lihat Gambar 9.1.



Gambar 9.1 *Jarak antarpartikel dalam atom helium. Gambar digambar ulang: inti bermuatan +Ze berada pada titik asal, elektron 1 dan 2 berada pada posisi r_1 dan r_2, sedangkan r_{12} adalah jarak antarelektron.*

Jika muatan inti diambil sebesar +Ze, bukan +2e, ion-ion mirip helium seperti H^-, Li^+, dan Be^{2+} juga dapat diperlakukan. Operator Hamiltoniannya adalah

$$\hat{H} = -(\hbar^2/2m_e)\nabla_1^2 - (\hbar^2/2m_e)\nabla_2^2 - Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r_1) - Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r_2) + e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12}) \quad (9.39)$$

Di sini m_e adalah massa elektron; r_1 dan r_2 adalah jarak elektron 1 dan 2 dari inti; dan r_{12} adalah jarak antara elektron 1 dan elektron 2. Dua suku pertama adalah operator energi kinetik elektron [Persamaan (3.48)]. Suku ketiga dan keempat adalah energi potensial tarik-menarik antara elektron dengan inti. Suku terakhir adalah energi potensial tolakan antarelektron [Persamaan (6.58)]. Energi potensial sistem partikel yang saling berinteraksi tidak dapat ditulis sebagai jumlah energi potensial masing-masing partikel; energi potensial merupakan sifat sistem secara keseluruhan.

Persamaan Schrödinger melibatkan enam variabel bebas, yaitu tiga koordinat bagi setiap elektron. Dalam koordinat bola, $\psi = \psi(r_1,\theta_1,\varphi_1,r_2,\theta_2,\varphi_2)$. Operator ∇_1^2 diberikan oleh Persamaan (6.6) dengan r_1,θ_1,φ_1 menggantikan r,θ,φ. Jarak antarelektron ialah $r_{12} = [(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2]^{1/2}$. Dengan hubungan antara koordinat Kartesius dan koordinat bola, r_{12} dapat dinyatakan dalam $r_1,\theta_1,\varphi_1,r_2,\theta_2,\varphi_2$.

Karena terdapat suku $e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$, persamaan Schrödinger helium tidak dapat dipisahkan dalam sistem koordinat mana pun sehingga metode pendekatan harus digunakan. Metode gangguan memisahkan Hamiltonian (9.39) menjadi $\hat{H}^0$ dan $\hat{H}'$, dengan $\hat{H}^0$ merupakan Hamiltonian masalah yang dapat diselesaikan secara eksak. Dipilih

$$\hat{H}^0 = -(\hbar^2/2m_e)\nabla_1^2 - Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r_1) - (\hbar^2/2m_e)\nabla_2^2 - Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r_2) \quad (9.40)$$

$$\hat{H}' = e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12}) \quad (9.41)$$

Dengan demikian $\hat{H}^0$ merupakan jumlah dua Hamiltonian mirip hidrogen, satu untuk setiap elektron.

$$\hat{H}^0 = \hat{H}_1^0 + \hat{H}_2^0 \quad (9.42)$$

$$\hat{H}_1^0 \equiv -(\hbar^2/2m_e)\nabla_1^2 - Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r_1), \quad \hat{H}_2^0 \equiv -(\hbar^2/2m_e)\nabla_2^2 - Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r_2) \quad (9.43)$$

Sistem tak terganggu adalah atom helium hipotetis yang kedua elektronnya tidak memberikan gaya satu sama lain. Walaupun sistem seperti itu tidak ada, teori gangguan tetap dapat diterapkan terhadapnya.

Karena Hamiltonian tak terganggu (9.42) merupakan jumlah Hamiltonian dua partikel bebas, hasil pemisahan variabel pada Persamaan (6.18)-(6.24) memberikan bentuk fungsi gelombang tak terganggu berikut.

$$\psi^{(0)}(r_1,\theta_1,\varphi_1,r_2,\theta_2,\varphi_2) = F_1(r_1,\theta_1,\varphi_1)F_2(r_2,\theta_2,\varphi_2) \quad (9.44)$$

Energi tak terganggunya ialah

$$E^{(0)} = E_1 + E_2 \quad (9.45)$$

$$\hat{H}_1^0 F_1 = E_1 F_1, \quad \hat{H}_2^0 F_2 = E_2 F_2 \quad (9.46)$$

Karena $\hat{H}_1^0$ dan $\hat{H}_2^0$ adalah Hamiltonian mirip hidrogen, penyelesaian (9.46) adalah fungsi eigen dan nilai eigen mirip hidrogen. Dari Persamaan (6.94),

$$E_1 = -Z^2e^2/(n_1^2 8\pi\varepsilon_0 a_0), \quad E_2 = -Z^2e^2/(n_2^2 8\pi\varepsilon_0 a_0) \quad (9.47)$$

$$E^{(0)} = -Z^2(1/n_1^2 + 1/n_2^2)e^2/(8\pi\varepsilon_0 a_0), \quad n_1,n_2 = 1,2,3,\ldots \quad (9.48)$$

Di sini a_0 adalah jari-jari Bohr. Persamaan (9.48) memberikan energi orde nol bagi keadaan yang kedua elektronnya terikat pada inti. Atom He juga memiliki keadaan kontinu.

Tingkat terendah mempunyai $n_1 = 1$ dan $n_2 = 1$. Fungsi gelombang orde nolnya [Persamaan (6.104)] ialah

$$\psi_1 s^{2(0)} = (1/\pi^1/^2)(Z/a_0)^3/^2 \exp(-Zr_1/a_0) \cdot (1/\pi^1/^2)(Z/a_0)^3/^2 \exp(-Zr_2/a_0) = 1s(1)1s(2) \quad (9.49)$$

Notasi 1s(1)1s(2) menyatakan hasil kali fungsi 1s mirip hidrogen bagi elektron 1 dan 2; subskrip menunjukkan bahwa kedua elektron berada dalam orbital 1s mirip hidrogen. Penetapan elektron pada orbital dan penulisan fungsi gelombang atom sebagai hasil kali fungsi orbital satu-elektron merupakan suatu pendekatan. Energi keadaan dasar tak terganggu adalah

$$E_1 s^{2(0)} = -Z^2(2)e^2/(8\pi\varepsilon_0 a_0) \quad (9.50)$$

Besaran $-e^2/(8\pi\varepsilon_0 a_0)$ adalah energi keadaan dasar atom hidrogen jika inti dianggap bermassa tak berhingga, yakni −13,606 eV [Persamaan (6.105)-(6.108)]. Jika

massa elektron m_e dalam a_0 diganti dengan massa tereduksi untuk ^{4}He, nilainya menjadi −13,604 eV; nilai inilah yang digunakan untuk memperbaiki sebagian pengaruh gerak inti pada He. Untuk helium, Z = 2, dan (9.50) memberikan −8(13,604 eV) = −108,83 eV.

$$E_1s^{2(0)} = -108{,}83 \text{ eV} \tag{9.51}$$

Bagaimana energi orde nol ini dibandingkan dengan energi keadaan dasar helium sebenarnya? Energi ionisasi pertama He secara eksperimen adalah 24,587 eV. Energi ionisasi kedua mudah dihitung karena merupakan energi ionisasi ion mirip hidrogen He^+, yaitu 2^2(13,604 eV) = 54,416 eV. Jika nol energi dipilih pada atom yang terionisasi sempurna—pilihan yang tersirat dalam (9.39)—energi keadaan dasar helium ialah −(24,587 + 54,416) eV = −79,00 eV. Energi orde nol (9.51) menyimpang sebesar 38%. Penyimpangan besar ini memang diharapkan karena suku gangguan $e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$ tidak kecil.

Langkah berikutnya adalah menghitung koreksi gangguan orde pertama terhadap energi. Keadaan dasar tak terganggu tidak terdegenerasi. Penggunaan (9.22) dan (9.49) memberikan

$$E^{(1)} = \langle\psi^{(0)}|\hat{H}'|\psi^{(0)}\rangle = [Z^6e^2/(4\pi\varepsilon_0\pi^2a_0{}^6)]\int_0{}^2\pi\int_0{}^2\pi\int_0\pi\int_0\pi\int_0\infty\int_0\infty \exp(-2Zr_1/a_0)\exp(-2Zr_2/a_0)(1/r_{12})r_1{}^2\sin\theta_1 r_2{}^2\sin\theta_2 dr_1 dr_2 d\theta_1 d\theta_2 d\varphi_1 d\varphi \tag{9.52}$$

2

Elemen volume masalah dua-elektron ini mengandung koordinat kedua elektron, $d\tau = d\tau_1 d\tau_2$. Integral dalam (9.52) dapat dihitung dengan mengembangkan $1/r_{12}$ dalam harmonik bola, sebagaimana diuraikan dalam Soal 9.14. Hasilnya ialah

$$E^{(1)} = (5Z/8)[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)] \tag{9.53}$$

Dengan mengingat bahwa $\frac{1}{2}e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)$ = 13,604 eV ketika massa tereduksi ^{4}He digunakan, dan dengan Z = 2, koreksi energi gangguan orde pertama keadaan dasar helium adalah $E^{(1)}$ = (10/4)(13,604 eV) = 34,01 eV.

Pendekatan terhadap energi sekarang menjadi

$$E^{(0)} + E^{(1)} = -108{,}83 \text{ eV} + 34{,}01 \text{ eV} = -74{,}82 \text{ eV} \tag{9.54}$$

Dibandingkan dengan nilai eksperimen −79,00 eV, hasil ini menyimpang 5,3%.

Untuk menghitung koreksi orde pertama terhadap fungsi gelombang serta koreksi energi orde lebih tinggi, diperlukan elemen matriks $1/r_{12}$ antara keadaan dasar tak terganggu dan seluruh keadaan tereksitasi, termasuk kontinum, kemudian penjumlahan dan integrasi yang sesuai. Belum ditemukan cara mengevaluasi secara langsung seluruh sumbangan terhadap koreksi tersebut. Pengaruh $\psi^{(1)}$ adalah mencampurkan ke dalam fungsi gelombang sumbangan konfigurasi lain selain $1s^2$; hal ini disebut interaksi konfigurasi (configuration interaction). Sumbangan terbesar terhadap fungsi gelombang keadaan dasar helium yang

sebenarnya tetap berasal dari konfigurasi $1s^2$, yaitu fungsi gelombang tak terganggu atau orde nol.

Koreksi orde kedua $E^{(2)}$ bagi keadaan dasar helium telah dihitung dengan metode variasi-gangguan, Persamaan (9.38). Scherr dan Knight menggunakan fungsi coba 100 suku untuk memperoleh pendekatan yang sangat teliti terhadap koreksi fungsi gelombang sampai orde keenam dan dengan demikian koreksi energi sampai orde ketiga belas [C. W. Scherr dan R. E. Knight, Rev. Mod. Phys., 35, 436 (1963)]. Untuk perhitungan koreksi energi sampai orde 401, lihat J. D. Baker dkk., Phys. Rev. A, 41, 1247 (1990). Koreksi orde kedua $E^{(2)}$ adalah −4,29 eV dan $E^{(3)}$ adalah +0,12 eV. Sampai orde ketiga, energi keadaan dasar menjadi $E \approx -108{,}83 + 34{,}01 - 4{,}29 + 0{,}12 = -78{,}99$ eV, dekat dengan nilai eksperimen −79,00 eV. Dengan koreksi sampai orde ketiga belas, Scherr dan Knight memperoleh energi keadaan dasar helium $-2{,}90372433[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)]$, dekat dengan nilai $-2{,}90372438[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)]$ dari perhitungan variasi murni yang dibahas pada bagian berikutnya.

Deret teori gangguan untuk energi atom He dapat dibuktikan konvergen [R. Ahlrichs, Phys. Rev. A, 5, 605 (1972)].

Fungsi gelombang dan energi eksak tidak dapat diperoleh bagi atom He dua-elektron keadaan dasar. Namun, terdapat masalah dua-elektron hipotetis yang penyelesaian eksak keadaan dasarnya telah ditemukan, yaitu atom hukum Hooke atau harmonium, dengan Hamiltonian $\hat{H} = -(\hbar^2/2m_e)\nabla_1^2 - (\hbar^2/2m_e)\nabla_2^2 + \frac{1}{2}k(r_1^2 + r_2^2) + e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$. Untuk nilai-nilai tertentu konstanta gaya k, fungsi gelombang dan energi keadaan dasar eksak telah diperoleh.

9.4 Perlakuan Variasi terhadap Keadaan Dasar Helium

Pada bagian sebelumnya, Hamiltonian atom helium ditulis sebagai $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'$, dengan fungsi eigen keadaan dasar $\psi_g^{(0)}$ dari $\hat{H}^0$ diberikan oleh (9.49). Apakah yang terjadi jika fungsi gelombang keadaan dasar orde nol teori gangguan $\psi_g^{(0)}$ dipakai sebagai fungsi variasi f? Integral variasi $\langle f|\hat{H}|f\rangle$ menjadi

$$\langle f|\hat{H}|f\rangle = \langle \psi_g^{(0)}|(\hat{H}^0 + \hat{H}')|\psi_g^{(0)}\rangle = E_g^{(0)} + E_g^{(1)} \tag{9.55}$$

Karena $\hat{H}^0\psi_g^{(0)} = E_g^{(0)}\psi_g^{(0)}$, $\langle \psi_g^{(0)}|\psi_g^{(0)}\rangle = 1$, dan $E_g^{(1)} = \langle \psi_g^{(0)}|\hat{H}'|\psi_g^{(0)}\rangle$ [Persamaan (9.22)]. Jadi, penggunaan $\psi_g^{(0)}$ sebagai fungsi variasi memberikan hasil energi yang sama dengan teori gangguan orde pertama.

Sekarang dipertimbangkan fungsi variasi untuk keadaan dasar helium. Jika $\psi_g^{(0)}$ [Persamaan (9.49)] digunakan sebagai fungsi coba, hasilnya adalah −74,82 eV. Untuk memperbaiki hasil ini, parameter variasi dimasukkan ke dalam (9.49) melalui fungsi ternormalisasi berikut.

$$f = (1/\pi)(\zeta/a_0)^3 \exp(-\zeta r_1/a_0)\exp(-\zeta r_2/a_0) \tag{9.56}$$

Fungsi ini diperoleh dari (9.49) dengan mengganti nomor atom sebenarnya Z oleh parameter variasi ζ (zeta). Parameter ζ memiliki makna fisik sederhana. Satu elektron cenderung menapis elektron lain dari inti, sehingga setiap elektron mengalami muatan inti efektif yang sedikit lebih kecil daripada muatan inti penuh Z. Jika satu elektron menapis elektron lain sepenuhnya, muatan inti efektif adalah Z − 1. Karena kedua elektron menempati orbital yang sama, penapisan hanya sebagian; karenanya ζ diperkirakan berada antara Z − 1 dan Z.

Untuk menghitung integral variasi, Hamiltonian helium (9.39) ditulis ulang dengan menambah dan mengurangkan suku yang mengandung ζ.

$$\hat{H} = [-(\hbar^2/2m_e)\nabla_1{}^2 - \zeta e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_1) - (\hbar^2/2m_e)\nabla_2{}^2 - \zeta e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_2)] + (\zeta - Z)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_1) + (\zeta - Z)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_2) + e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12}) \quad (9.57)$$

Suku dalam kurung siku pada (9.57) adalah jumlah dua Hamiltonian mirip hidrogen dengan muatan inti ζ. Fungsi coba (9.56) adalah hasil kali dua fungsi 1s mirip hidrogen untuk muatan inti ζ. Ketika suku-suku tersebut bekerja pada f, diperoleh persamaan nilai eigen dengan nilai eigen sama dengan jumlah dua energi 1s mirip hidrogen untuk muatan inti ζ.

$$[-(\hbar^2/2m_e)\nabla_1{}^2 - \zeta e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_1) - (\hbar^2/2m_e)\nabla_2{}^2 - \zeta e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_2)]f = -\zeta^2(2)e^2/(8\pi\varepsilon_0 a_0)f \quad (9.58)$$

Dengan menggunakan (9.57) dan (9.58),

$$\int f^*\hat{H}f\,d\tau = -\zeta^2[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)]\int f^*f\,d\tau + [(\zeta - Z)e^2/(4\pi\varepsilon_0)]\int (f^*f/r_1)d\tau + [(\zeta - Z)e^2/(4\pi\varepsilon_0)]\int (f^*f/r_2)d\tau + [e^2/(4\pi\varepsilon_0)]\int (f^*f/r_{12})d\tau \quad (9.59)$$

Misalkan φ_1 adalah orbital 1s mirip hidrogen ternormalisasi untuk muatan inti ζ yang ditempati elektron 1, dan φ_2 fungsi yang sama untuk elektron 2.

$$\varphi_1 = (1/\pi^1/^2)(\zeta/a_0)^3/^2\exp(-\zeta r_1/a_0), \quad \varphi_2 = (1/\pi^1/^2)(\zeta/a_0)^3/^2\exp(-\zeta r_2/a_0) \quad (9.60)$$

Dengan $f = \varphi_1\varphi_2$, integral-integral dalam (9.59) dihitung sebagai berikut. Normalisasi memberikan $\int f^*f\,d\tau = 1$. Integral $\int(f^*f/r_1)d\tau = \zeta/a_0$; integral dengan r_2 memberikan nilai yang sama. Integral tolakan elektron sama dengan integral (9.52), hanya Z diganti oleh ζ, sehingga dari (9.53), $[e^2/(4\pi\varepsilon_0)]\int(f^*f/r_{12})d\tau = 5\zeta e^2/(32\pi\varepsilon_0 a_0)$.

Integral variasi (9.59) dengan demikian bernilai

$$\int f^*\hat{H}f\,d\tau = (\zeta^2 - 2Z\zeta + 5\zeta/8)e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0) \quad (9.61)$$

Sebagai pemeriksaan, jika ζ = Z dalam (9.61), diperoleh hasil teori gangguan orde pertama, yaitu (9.50) ditambah (9.53). Selanjutnya ζ divariasikan untuk meminimumkan integral variasi.

$$\partial/\partial\zeta \int f^*\hat{H}f\,d\tau = (2\zeta - 2Z + 5/8)e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0) = 0, \quad \zeta = Z - 5/16 \quad (9.62)$$

Sesuai perkiraan, muatan inti efektif berada antara Z dan Z − 1. Dengan (9.62) dan (9.61), diperoleh

$$\int f^* \hat{H} f \, d\tau = -(Z - 5/16)^2 e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0) \quad (9.63)$$

Untuk Z = 2, pendekatan energi keadaan dasar helium adalah $-(27/16)^2[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)] = -(729/256)(2)(13{,}604 \text{ eV}) = -77{,}48$ eV, sedangkan nilai sebenarnya −79,00 eV. Penggunaan ζ sebagai pengganti Z menurunkan kesalahan dari 5,3% menjadi 1,9%. Sesuai teorema variasi, energi keadaan dasar sebenarnya lebih rendah daripada integral variasi.

Bagaimana hasil variasi dapat diperbaiki? Bentuk umum (9.56), yaitu hasil kali dua fungsi satu-elektron, dapat dipertahankan, tetapi fungsi u yang lebih beragam dapat dicoba.

$$f = u(1)u(2) \quad (9.64)$$

Prosedur sistematis untuk menentukan u yang memberikan nilai integral variasi terendah dibahas pada Bagian 11.1. Untuk pilihan u terbaik dalam (9.64), integral variasi bernilai −77,86 eV, masih menyimpang 1,5%. Bentuk (9.64) tidak pernah memberikan energi keadaan dasar eksak karena penulisan fungsi coba sebagai hasil kali fungsi terpisah setiap elektron adalah pendekatan. Suku $e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$ membuat persamaan Schrödinger helium tidak dapat dipisahkan; fungsi gelombang keadaan dasar sebenarnya tidak dapat ditulis sebagai hasil kali fungsi satu-elektron terpisah. Untuk mencapai energi keadaan dasar sebenarnya, harus digunakan fungsi yang melampaui bentuk (9.64).

Model Bohr memberikan energi atom hidrogen yang benar tetapi gagal ketika diterapkan pada helium. Karena itu, pada masa awal mekanika kuantum penting untuk menunjukkan bahwa teori baru dapat menangani helium secara teliti. Pekerjaan perintis tentang keadaan dasar helium dilakukan Hylleraas pada 1928-1930. Untuk memasukkan pengaruh satu elektron terhadap gerak elektron lain, Hylleraas menggunakan fungsi variasi yang mengandung jarak antarelektron r_{12}. Salah satu fungsi yang digunakannya adalah

$$f = N \exp[-\zeta(r_1 + r_2)/a_0](1 + br_{12}) \quad (9.65)$$

$$r_{12} = [(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2]^{1}/^{2} \quad (9.66)$$

N adalah konstanta normalisasi, sedangkan ζ dan b adalah parameter variasi. Karena mengandung r_{12}, fungsi (9.65) melampaui bentuk hasil kali sederhana (9.64). Peminimuman integral variasi terhadap parameter memberikan ζ = 1,849, $b = 0{,}364/a_0$, dan energi keadaan dasar −78,7 eV, hanya menyimpang 0,3 eV. Faktor $1 + br_{12}$ memperbesar fungsi gelombang pada r_{12} besar, sesuai dengan fakta bahwa tolakan antarelektron membuat keadaan dengan elektron saling menghindar lebih menguntungkan secara energetik. Dengan fungsi coba enam suku yang lebih rumit dan mengandung r_{12}, Hylleraas memperoleh energi hanya 0,01 eV di atas energi keadaan dasar sebenarnya.

Pekerjaan Hylleraas kemudian diperluas. Dengan fungsi variasi 1078 suku, Pekeris memperoleh energi keadaan dasar $-2{,}903724375[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)]$ [C. L.

Pekeris, Phys. Rev., 115, 1216 (1959)]. Setelah koreksi relativistik dan gerak inti ditambahkan, energi ionisasi helium yang diperoleh adalah E_i/hc = 198310,69 cm^{-1}, dibandingkan dengan nilai eksperimen 198310,67 cm^{-1}. Frankowski dan Pekeris menggunakan fungsi variasi yang ditingkatkan dan memperoleh $-2{,}90372437703[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)]$, yang diyakini berada dalam $10^{-11}[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)]$ dari energi keadaan dasar nonrelativistik untuk massa inti tak berhingga [K. Frankowski dan C. L. Pekeris, Phys. Rev., 146, 46 (1966)]. Drake dan Yan menggunakan fungsi variasi linear yang mengandung r_{12} untuk menghitung energi keadaan dasar dan banyak keadaan tereksitasi He dengan ketelitian sekitar satu bagian dalam 10^{14} atau lebih baik [G. W. F. Drake dan Z-C. Yan, Chem. Phys. Lett., 229, 486 (1994); Phys. Rev. A, 46, 2378 (1992)]. Mereka juga menghitung energi variasi Li bagi keadaan dasar dan dua keadaan tereksitasi dengan ketelitian satu bagian dalam 10^9 atau lebih baik [Z-C. Yan dan G. W. F. Drake, Phys. Rev. A, 52, 3711 (1995)]. Dengan memasukkan koreksi relativistik dan gerak inti, frekuensi transisi spektroskopi teoritis He dan Li bersesuaian baik dengan eksperimen.

Melalui serangkaian perhitungan variasi dengan jumlah suku yang terus ditambah dan ekstrapolasi ke batas jumlah suku tak berhingga, Drake dan rekan-rekannya memperoleh energi He nonrelativistik, bermassa inti tak berhingga, sebesar $-2{,}903724377034119598311[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)]$, yang diyakini teliti hingga 21 angka penting [G. W. F. Drake dkk., Phys. Rev. A, 65, 054501 (2002)].

9.5 Teori Gangguan untuk Tingkat Energi Terdegenerasi

Sekarang kita membahas perlakuan gangguan terhadap suatu tingkat energi yang derajat degenerasinya d. Terdapat d fungsi gelombang tak terganggu yang bebas linear dan bersesuaian dengan tingkat terdegenerasi tersebut. Kita menggunakan label 1, 2, …, d bagi keadaan-keadaan tingkat terdegenerasi tanpa menyiratkan bahwa keadaan-keadaan itu harus merupakan keadaan dengan energi paling rendah. Persamaan Schrödinger tak terganggu ialah

$$\hat{H}^0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)} \tag{9.67}$$

dengan

$$E_1^{(0)} = E_2^{(0)} = \cdots = E\_d^{(0)} \tag{9.68}$$

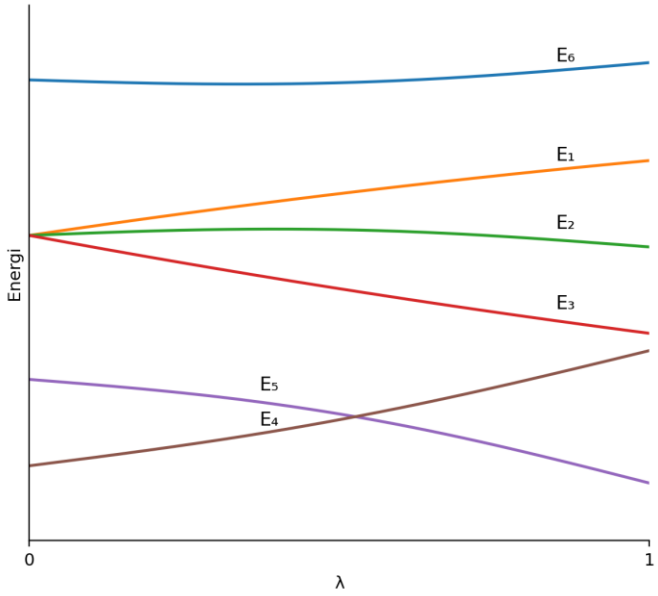
Masalah terganggunya ialah

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \tag{9.69}$$

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \lambda\hat{H}' \tag{9.70}$$

Ketika λ menuju nol, nilai eigen dalam (9.69) menuju nilai eigen dalam (9.67); jadi $\lim\_\{\lambda\to 0\}\ E_n = E_n^{(0)}$. Gambar 9.2 memperlihatkan keadaan ini bagi sistem hipotetis dengan enam keadaan dan satu tingkat tak terganggu yang terdegenerasi tiga kali. Perhatikan bahwa gangguan memecah tingkat energi terdegenerasi.

Dalam beberapa kasus, gangguan mungkin sama sekali tidak memengaruhi degenerasi atau hanya menghilangkannya sebagian.



Gambar 9.2 *Pengaruh suatu gangguan terhadap tingkat-tingkat energi. Tingkat tak terganggu yang terdegenerasi tiga kali pada λ = 0 terpecah ketika λ bertambah menuju 1.*

Ketika $\lambda \to 0$, fungsi eigen yang memenuhi (9.69) mendekati fungsi eigen yang memenuhi (9.67). Apakah ini berarti $\lim_{\lambda\to 0} \psi_n = \psi_n^{(0)}$? Tidak selalu. Jika $E_n^{(0)}$ nondegenerasi, hanya ada satu fungsi eigen ternormalisasi $\psi_n^{(0)}$ dari $\hat{H}^0$ dengan nilai eigen $E_n^{(0)}$, sehingga dapat dipastikan $\lim_{\lambda\to 0} \psi_n = \psi_n^{(0)}$. Akan tetapi, jika $E_n^{(0)}$ merupakan nilai eigen suatu tingkat terdegenerasi d kali, maka setiap kombinasi linear berikut merupakan penyelesaian (9.67) dengan nilai eigen (9.68).

$$c_1\psi_1^{(0)} + c_2\psi_2^{(0)} + \cdots + c\_d\psi\_d^{(0)} \tag{9.71}$$

Himpunan fungsi bebas linear ternormalisasi $\psi_1^{(0)}, \psi_2^{(0)}, \ldots, \psi\_d^{(0)}$ yang digunakan sebagai fungsi eigen bagi keadaan-keadaan tingkat terdegenerasi tidak unik. Dengan (9.71), dapat dibentuk tak berhingga banyak himpunan yang masing-masing terdiri atas d fungsi eigen bebas linear dan ternormalisasi. Bagi masalah tak terganggu, salah satu himpunan sama baiknya dengan himpunan lain. Sebagai contoh, untuk tiga keadaan 2p atom hidrogen yang terdegenerasi, kita dapat menggunakan fungsi $2p_1$, $2p_0$, dan $2p_{-1}$; fungsi $2p_x$, $2p_y$, dan 2p_z; atau himpunan lain yang terdiri atas tiga fungsi bebas linear yang dibangun sebagai kombinasi linear anggota salah satu himpunan tersebut.

Bagi fungsi eigen terganggu yang bersesuaian dengan tingkat tak terganggu yang terdegenerasi d kali, yang dapat dinyatakan hanyalah bahwa ketika λ mendekati nol, setiap fungsi itu mendekati suatu kombinasi linear fungsi eigen tak terganggu.

$$\lim_{\lambda\to 0} \psi_n = \Sigma_{i=1}^{d} c_i\psi_i^{(0)}, \quad 1 \le n \le d \tag{9.72}$$

Tugas pertama kita dengan demikian ialah menentukan fungsi gelombang orde nol yang benar dalam (9.72) untuk gangguan $\hat{H}'$. Dengan menyebut fungsi orde nol yang benar ini $\varphi_n^{(0)}$, diperoleh

$$\varphi_n^{(0)} = \lim_{\lambda\to 0}\{\psi_n = \Sigma_{i=1}^{d} c_i\psi_i^{(0)}, \quad 1 \le n \le d \tag{9.73}$$

Setiap fungsi $\varphi_n^{(0)}$ mempunyai himpunan koefisien yang berbeda dalam (9.73). Himpunan fungsi orde nol yang benar bergantung pada bentuk gangguan $\hat{H}'$.

Perlakuan terhadap tingkat terdegenerasi d kali berlangsung seperti perlakuan nondegenerasi pada Bagian 9.2, kecuali bahwa $\varphi_n^{(0)}$ digunakan sebagai pengganti $\psi_n^{(0)}$. Sebagai pengganti Persamaan (9.13) dan (9.14), digunakan

$$\psi_n = \varphi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \cdots, \quad n = 1, 2, ..., d \tag{9.74}$$

$$E_n = E\_d^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots, \quad n = 1, 2, ..., d \tag{9.75}$$

di mana (9.68) telah digunakan. Substitusi ke dalam $\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n$ menghasilkan $(\hat{H}^0 + \lambda\hat{H}')(\varphi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \cdots) = (E\_d^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \cdots)(\varphi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \cdots)$.

Dengan menyamakan koefisien λ^0, diperoleh $\hat{H}^0\varphi_n^{(0)} = E\_d^{(0)}\varphi_n^{(0)}$. Berdasarkan teorema pada Bagian 3.6, setiap kombinasi linear $\varphi_n^{(0)}$, n = 1, 2, …, d, merupakan fungsi eigen $\hat{H}^0$ dengan nilai eigen $E\_d^{(0)}$; karena itu, persamaan tersebut tidak memberikan informasi baru.

Dengan menyamakan koefisien suku λ^1, diperoleh

$$\hat{H}^0\psi_n^{(1)} - E\_d^{(0)}\psi_n^{(1)} = E_n^{(1)}\varphi_n^{(0)} - \hat{H}'\varphi_n^{(0)}, \quad n = 1, 2, ..., d \tag{9.76}$$

Persamaan (9.76) dikalikan dengan $\psi_m^{(0)*}$ dan diintegralkan pada seluruh ruang, dengan m merupakan salah satu keadaan pada tingkat tak terganggu terdegenerasi d kali yang sedang dibahas, yaitu $1 \le m \le d$. Hasilnya ialah

$$\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}^0|\psi_n^{(1)}\rangle - E\_d^{(0)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle = E_n^{(1)}\langle\psi_m^{(0)}|\varphi_n^{(0)}\rangle - \langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\varphi_n^{(0)}\rangle, \quad 1 \le m \le d \tag{9.77}$$

Dari Persamaan (9.20), $\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}^0|\psi_n^{(1)}\rangle = E_m^{(0)}\langle\psi_m^{(0)}|\psi_n^{(1)}\rangle$. Berdasarkan (9.68), $E_m^{(0)} = E\_d^{(0)}$ untuk $1 \le m \le d$, sehingga ruas kiri (9.77) sama dengan nol. Dengan demikian, $\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\varphi_n^{(0)}\rangle - E_n^{(1)}\langle\psi_m^{(0)}|\varphi_n^{(0)}\rangle = 0$, m = 1, 2, …, d.

Substitusi kombinasi linear (9.73) untuk $\varphi_n^{(0)}$ memberikan

$$\Sigma_{i=1}^{d} c_i\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_i^{(0)}\rangle - E_n^{(1)}\Sigma_{i=1}^{d} c_i\langle\psi_m^{(0)}|\psi_i^{(0)}\rangle = 0 \tag{9.78}$$

Fungsi gelombang orde nol $\psi_i^{(0)}$, i = 1, 2, …, d, untuk tingkat terdegenerasi selalu dapat dipilih ortonormal, dan kita menganggap hal itu telah dilakukan.

$$\langle\psi_m^{(0)}|\psi_i^{(0)}\rangle = \delta_{mi} \tag{9.79}$$

untuk m dan i dalam rentang 1 sampai d. Persamaan (9.78) menjadi

$$\Sigma_{i=1}^{d}[\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_i^{(0)}\rangle - E_n^{(1)}\delta_{mi}]c_i = 0, \quad m = 1, 2, ..., d \tag{9.80}$$

Ini adalah himpunan d persamaan linear homogen dalam d besaran tak diketahui c_1, c_2, …, c_d, yaitu koefisien fungsi gelombang orde nol yang benar $\varphi_n^{(0)}$ dalam (9.73). Jika ditulis lengkap, persamaan tersebut ialah

$$(H'_{11} - E_n^{(1)})c_1 + H'_{12}c_2 + \cdots + H'_1dc\_d = 0; \quad H'_{21}c_1 + (H'_{22} - E_n^{(1)})c_2 + \cdots + H'_2dc\_d = 0; \quad \vdots; \quad H'\_\{d1\}c_1 + H'\_\{d2\}c_2 + \cdots + (H'\_\{dd\} - E_n^{(1)})c\_d = 0, \quad H'_{mi} \equiv \langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_i^{(0)} \rangle \tag{9.81}$$

Agar himpunan persamaan linear homogen tersebut mempunyai penyelesaian tak-trivial, determinan koefisiennya harus nol (Bagian 8.4).

$$\det[\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_i^{(0)} \rangle - E_n^{(1)} \delta_{mi}] = 0 \tag{9.82}$$

$$\det \begin{vmatrix} H'_{11} - E_n^{(1)} & H'_{12} & \cdots & H'_1d; & H'_{21} & H'_{22} - E_n^{(1)} & \cdots & H'_2d; & \vdots & \vdots \\ \ddots & \vdots; & H'\_\{d1\} & H'\_\{d2\} & \cdots & H'\_\{dd\} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \tag{9.83}$$

Persamaan sekuler (9.83) adalah persamaan aljabar berderajat d dalam $E_n^{(1)}$. Persamaan ini mempunyai d akar, $E_1^{(1)}$, $E_2^{(1)}$, …, $E\_d^{(1)}$, yang merupakan koreksi orde pertama terhadap energi tingkat tak terganggu yang terdegenerasi d kali. Jika semua akar berbeda, koreksi gangguan orde pertama memecah tingkat tak terganggu tersebut menjadi d tingkat terganggu berbeda dengan energi, benar sampai orde pertama, $E\_d^{(0)} + E_1^{(1)}$, $E\_d^{(0)} + E_2^{(1)}$, …, $E\_d^{(0)} + E\_d^{(1)}$. Jika dua atau lebih akar persamaan sekuler sama, degenerasi tidak dihilangkan sepenuhnya pada orde pertama. Dalam bagian selebihnya diasumsikan semua akar (9.83) berbeda.

Sesudah memperoleh d koreksi energi orde pertama, kita kembali ke himpunan persamaan (9.81) untuk memperoleh c_i yang menentukan fungsi gelombang orde nol yang benar. Untuk memperoleh fungsi orde nol yang benar berikut,

$$\varphi_n^{(0)} = c_1\psi_1^{(0)} + c_2\psi_2^{(0)} + \cdots + c\_d\psi\_d^{(0)} \tag{9.84}$$

yang bersesuaian dengan akar $E_n^{(1)}$, persamaan (9.81) diselesaikan untuk c_2, c_3, …, c_d dalam c_1, kemudian c_1 ditentukan melalui normalisasi. Penggunaan (9.79) dalam $\langle \varphi_n^{(0)} | \varphi_n^{(0)} \rangle = 1$ memberikan (Soal 9.21)

$$\Sigma_{k=1}^{d} |c_k|^2 = 1 \tag{9.85}$$

Untuk setiap akar $E_n^{(1)}$, n = 1, 2, …, d, terdapat himpunan koefisien c_1, c_2, …, c_d yang berbeda dan menghasilkan fungsi gelombang orde nol benar yang berbeda.

Pada bagian berikutnya akan ditunjukkan bahwa

$$E_n^{(1)} = \langle \varphi_n^{(0)} | \hat{H}' | \varphi_n^{(0)} \rangle, \quad n = 1, 2, ..., d \tag{9.86}$$

yang serupa dengan rumus kasus nondegenerasi (9.22), kecuali bahwa fungsi orde nol yang benar harus digunakan.

Dengan prosedur yang serupa dengan kasus nondegenerasi, koreksi orde pertama terhadap fungsi gelombang orde nol yang benar serta koreksi energi orde kedua dapat ditentukan. Hasilnya dapat dilihat dalam Bates, Jilid I, halaman 197–198, dan Hameka, halaman 230–231.

Sebagai contoh, pertimbangkan pengaruh gangguan $\hat{H}'$ terhadap tingkat energi terdegenerasi terendah suatu partikel dalam kotak kubus. Terdapat tiga keadaan yang bersesuaian dengan tingkat ini, yaitu $\psi_{211}^{(0)}$, $\psi_{121}^{(0)}$, dan $\psi_{112}^{(0)}$. Fungsi gelombang tak terganggu ini ortonormal, dan persamaan sekuler (9.83) ialah

$$\det\begin{vmatrix} \langle 211|\hat{H}'|211\rangle - E_n^{(1)} & \langle 211|\hat{H}'|121\rangle & \langle 211|\hat{H}'|112\rangle; & \langle 121|\hat{H}'|211\rangle \\ \langle 121|\hat{H}'|121\rangle - E_n^{(1)} & \langle 121|\hat{H}'|112\rangle; & \langle 112|\hat{H}'|211\rangle & \langle 112|\hat{H}'|121\rangle \\ & \langle 112|\hat{H}'|112\rangle - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \tag{9.87}$$

Dengan menyelesaikan persamaan ini diperoleh koreksi energi orde pertama $E_1^{(1)}$, $E_2^{(1)}$, dan $E_3^{(1)}$. Tingkat tak terganggu yang terdegenerasi tiga kali terpecah menjadi tiga tingkat dengan energi, sampai orde pertama, $6h^2/(8ma^2) + E_1^{(1)}$, $6h^2/(8ma^2) + E_2^{(1)}$, dan $6h^2/(8ma^2) + E_3^{(1)}$. Dengan menggunakan masing-masing akar $E_1^{(1)}$, $E_2^{(1)}$, dan $E_3^{(1)}$, diperoleh himpunan persamaan simultan (9.81) yang berbeda. Penyelesaian setiap himpunan memberikan tiga himpunan koefisien yang menentukan tiga fungsi gelombang orde nol yang benar.

Bagi pembaca yang mengenal aljabar matriks, penyelesaian (9.83) dan (9.81) sama dengan mencari nilai eigen dan vektor eigen matriks yang unsur-unsurnya $\langle \psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_i^{(0)}\rangle$.

9.6 Penyederhanaan Persamaan Sekuler

Persamaan sekuler (9.83) lebih mudah diselesaikan apabila beberapa unsur luar-diagonal determinan sekuler bernilai nol. Dalam kasus yang paling menguntungkan, semua unsur luar-diagonal nol, sehingga

$$\det\begin{vmatrix} H'_{11} - E_n^{(1)} & 0 & \cdots & 0; & 0 & H'_{22} - E_n^{(1)} & \cdots & 0; & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots; & 0 & 0 \\ & & & & & \cdots & H'\_\{dd\} - E_n^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \tag{9.88}$$

atau

$$(H'_{11} - E_n^{(1)})(H'_{22} - E_n^{(1)})\cdots(H'\_\{dd\} - E_n^{(1)}) = 0; \quad E_1^{(1)} = H'_{11}, \quad E_2^{(1)} = H'_{22}, \quad \ldots, \quad E\_d^{(1)} = H'\_\{dd\} \tag{9.89}$$

Sekarang hendak ditentukan fungsi gelombang orde nol yang benar. Kita menganggap semua akar (9.89) berbeda. Untuk akar $E_n^{(1)} = H'_{11}$, himpunan persamaan (9.81) menjadi $0 = 0$, $(H'_{22} - H'_{11})c_2 = 0$, …, $(H'\_\{dd\} - H'_{11})c\_d = 0$. Karena semua akar dianggap tidak sama, $H'_{22} - H'_{11}$, …, $H'\_\{dd\} - H'_{11}$ semuanya tidak nol. Oleh sebab itu, $c_2 = c_3 = \cdots = c\_d = 0$. Syarat normalisasi (9.85) memberikan $c_1 = 1$. Fungsi gelombang orde nol yang benar yang bersesuaian dengan koreksi energi H'_{11} dengan demikian ialah $\varphi_1^{(0)} = \psi_1^{(0)}$. Untuk akar H'_{22}, penalaran yang sama memberikan $\varphi_2^{(0)} = \psi_2^{(0)}$. Dengan menggunakan akar-akar yang tersisa, diperoleh $\varphi_3^{(0)} = \psi_3^{(0)}$, …, $\varphi\_d^{(0)} = \psi\_d^{(0)}$.

Jika determinan sekuler berbentuk diagonal, fungsi gelombang $\psi_1^{(0)}$, $\psi_2^{(0)}$, …, $\psi\_d^{(0)}$ yang dipilih pada awalnya adalah fungsi gelombang orde nol yang benar bagi gangguan $\hat{H}'$.

Kebalikannya juga benar. Jika fungsi yang dipilih pada awalnya merupakan fungsi orde nol yang benar, determinan sekuler berbentuk diagonal. Hal ini dapat dilihat sebagai berikut. Dari $\varphi_1^{(0)} = \psi_1^{(0)}$, diketahui bahwa koefisien dalam pengembangan $\varphi_1^{(0)} = \sum_{i=1}^{d} c_i\psi_i^{(0)}$ adalah $c_1 = 1$ dan $c_2 = c_3 = \cdots = 0$. Karena itu, untuk n = 1, himpunan persamaan simultan (9.81) menjadi $H'_{11} - E_1^{(1)} = 0$, $H'_{21} = 0$, …, H′_{d1} = 0. Penalaran yang sama diterapkan pada fungsi $\varphi_n^{(0)}$ lainnya menghasilkan $H'_{mi} = 0$ untuk $i \neq m$. Dengan demikian, penggunaan fungsi orde nol yang benar membuat determinan sekuler diagonal. Perhatikan pula bahwa koreksi orde pertama terhadap energi dapat diperoleh dengan merata-ratakan gangguan terhadap fungsi gelombang orde nol yang benar.

$$E_n^{(1)} = H'_{nn} = \langle \varphi_n^{(0)} | \hat{H}' | \varphi_n^{(0)} \rangle \tag{9.90}$$

Ini adalah hasil yang telah disebutkan dalam Persamaan (9.86).

Sering kali determinan sekuler tidak berbentuk diagonal, melainkan diagonal-blok. Sebagai contoh, mungkin diperoleh

$$\det \begin{vmatrix} H'_{11} - E_n^{(1)} & H'_{12} & 0 & 0; & H'_{21} & H'_{22} - E_n^{(1)} & 0 & 0; & 0 & 0 \\ & H'_{33} - E_n^{(1)} & H'_{34}; & 0 & 0 & H'_{43} & H'_{44} - E_n^{(1)} & & & \end{vmatrix} = 0 \tag{9.91}$$

Determinan sekuler dalam (9.91) mempunyai bentuk yang sama dengan determinan sekuler variasi linear (8.65) dengan $S_{ij} = \delta_{ij}$. Dengan penalaran yang sama seperti yang digunakan untuk menunjukkan bahwa dua fungsi variasi merupakan kombinasi linear f_1 dan f_2 serta dua lainnya merupakan kombinasi linear f_3 dan f_4 [Persamaan (8.69)], dua fungsi gelombang orde nol yang benar adalah kombinasi linear $\psi_1^{(0)}$ dan $\psi_2^{(0)}$, sedangkan dua lainnya adalah kombinasi linear $\psi_3^{(0)}$ dan $\psi_4^{(0)}$: $\varphi_1^{(0)} = c_1\psi_1^{(0)} + c_2\psi_2^{(0)}$, $\varphi_2^{(0)} = c'_1\psi_1^{(0)} + c'_2\psi_2^{(0)}$, $\varphi_3^{(0)} = c_3\psi_3^{(0)} + c_4\psi_4^{(0)}$, dan $\varphi_4^{(0)} = c'_3\psi_3^{(0)} + c'_4\psi_4^{(0)}$. Tanda prima digunakan untuk membedakan koefisien yang berbeda.

Jika determinan sekuler teori gangguan degenerasi berbentuk diagonal-blok, persamaan sekuler terpecah menjadi dua atau lebih persamaan sekuler yang lebih kecil, dan himpunan persamaan simultan (9.81) untuk koefisien c_i terpecah menjadi dua atau lebih himpunan persamaan simultan yang lebih kecil.

Sebaliknya, jika terdapat, misalnya, suatu tingkat tak terganggu yang terdegenerasi empat kali dan diketahui bahwa $\varphi_1^{(0)}$ serta $\varphi_2^{(0)}$ masing-masing hanya merupakan kombinasi linear $\psi_1^{(0)}$ dan $\psi_2^{(0)}$, sedangkan $\varphi_3^{(0)}$ serta $\varphi_4^{(0)}$ masing-masing hanya merupakan kombinasi linear $\psi_3^{(0)}$ dan $\psi_4^{(0)}$, maka yang perlu ditangani ialah dua determinan sekuler orde kedua, bukan satu determinan sekuler orde keempat.

Bagaimanakah fungsi gelombang orde nol yang tepat dapat dipilih terlebih dahulu sehingga persamaan sekuler menjadi lebih sederhana? Misalkan terdapat suatu operator $\hat{A}$ yang berkomutasi dengan $\hat{H}^0$ maupun $\hat{H}'$. Fungsi tak terganggu dapat dipilih sebagai fungsi eigen $\hat{A}$. Karena $\hat{A}$ berkomutasi dengan $\hat{H}'$, pilihan fungsi

tak terganggu ini membuat integral H'_{ij} nol apabila $\psi_i^{(0)}$ dan $\psi_j^{(0)}$ mempunyai nilai eigen $\hat{A}$ yang berbeda [lihat Persamaan (7.50)]. Jadi, jika nilai eigen $\hat{A}$ bagi $\psi_1^{(0)}$, $\psi_2^{(0)}$, …, $\psi\_d^{(0)}$ semuanya berbeda, determinan sekuler berbentuk diagonal dan fungsi orde nol yang benar telah diperoleh. Jika sebagian nilai eigen $\hat{A}$ sama, bentuknya menjadi diagonal-blok, bukan diagonal. Secara umum, fungsi orde nol yang benar merupakan kombinasi linear fungsi-fungsi tak terganggu yang mempunyai nilai eigen $\hat{A}$ yang sama. Hal ini memang diharapkan karena $\hat{A}$ berkomutasi dengan $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}'$, sehingga fungsi eigen terganggu $\hat{H}$ dapat dipilih sebagai fungsi eigen $\hat{A}$. Lihat Soal 9.23 untuk contoh.

9.7 Perlakuan Gangguan terhadap Keadaan Tereksitasi Pertama Helium

Bagian 9.3 menerapkan teori gangguan pada keadaan dasar atom helium. Sekarang dibahas keadaan tereksitasi He yang paling rendah. Energi tak terganggu diberikan oleh (9.48). Keadaan tereksitasi tak terganggu terendah mempunyai $n_1 = 1$, $n_2 = 2$ atau $n_1 = 2$, $n_2 = 1$; substitusi ke dalam (9.48) memberikan

$$E^{(0)} = -(5Z^2/8)[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)] = -(20/8)[e^2/(8\pi\varepsilon_0 a_0)] = -5(13{,}606\text{ eV}) = -68{,}03\text{ eV} \tag{9.92}$$

Ingat bahwa tingkat $n = 2$ suatu atom mirip hidrogen terdegenerasi empat kali; keadaan 2s dan tiga keadaan 2p semuanya mempunyai energi yang sama. Tingkat energi tereksitasi tak terganggu pertama He terdegenerasi delapan kali. Delapan fungsi gelombang tak terganggunya ialah [Persamaan (9.44)]

$$\psi_1^{(0)} = 1s(1)2s(2),\quad \psi_2^{(0)} = 2s(1)1s(2),\quad \psi_3^{(0)} = 1s(1)2p_x(2),\quad \psi_4^{(0)} = 2p_x(1)1s(2);\quad \psi_5^{(0)} = 1s(1)2p_\gamma(2),\quad \psi_6^{(0)} = 2p_\gamma(1)1s(2),\quad \psi_7^{(0)} = 1s(1)2p\_z(2),\quad \psi_8^{(0)} = 2p\_z(1)1s(2) \tag{9.93}$$

Notasi 1s(1)2s(2) menyatakan hasil kali fungsi 1s mirip hidrogen untuk elektron 1 dan fungsi 2s mirip hidrogen untuk elektron 2. Bentuk eksplisit $\psi_8^{(0)}$, sebagai contoh, diberikan oleh Tabel 6.2: $\psi_8^{(0)} = [1/(4(2\pi)^{1/2})](Z/a_0)^{5/2}\, r_1 \exp(-Zr_1/2a_0) \cos\theta_1 \cdot (1/\pi)^{1/2}(Z/a_0)^{3/2} \exp(-Zr_2/a_0)$. Digunakan orbital mirip hidrogen 2p nyata, bukan orbital kompleks.

Karena tingkat tak terganggu terdegenerasi, persamaan sekuler harus diselesaikan. Persamaan sekuler (9.83) menganggap fungsi $\psi_1^{(0)}$, $\psi_2^{(0)}$, …, $\psi_8^{(0)}$ ortonormal. Syarat ini dipenuhi. Sebagai contoh, $\int \psi_1^{(0)*}\psi_1^{(0)} d\tau = \iint 1s(1)^*2s(2)^*1s(1)2s(2)d\tau_1 d\tau_2 = \int |1s(1)|^2 d\tau_1 \int |2s(2)|^2 d\tau_2 = 1 \cdot 1 = 1$; dan $\int \psi_3^{(0)*}\psi_5^{(0)} d\tau = \int |1s(1)|^2 d\tau_1 \int 2p_x(2)^*2p_\gamma(2) d\tau_2 = 1 \cdot 0 = 0$, dengan menggunakan ortonormalitas orbital mirip hidrogen.

Determinan sekuler mempunyai $8^2 = 64$ unsur. Operator $\hat{H}'$ Hermitian, sehingga $H'_{ij} = (H'_{ji})^*$. Karena $\hat{H}'$ serta $\psi_1^{(0)}$, …, $\psi_8^{(0)}$ semuanya nyata, $(H'_{ji})^* = H'_{ji}$; jadi $H'_{ij} = H'_{ji}$. Determinan sekuler simetris terhadap diagonal utama. Hal ini hampir membagi dua pekerjaan evaluasi integral.

Dengan pertimbangan paritas, dapat ditunjukkan bahwa sebagian besar integral H'_{ij} bernilai nol. Pertama, pertimbangkan $H'_{13} = \int\cdots\int 1s(1)2s(2)[e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})]1s(1)2p_x(2)dx_1dy_1dz_1dx_2dy_2dz_2$. Fungsi s mirip hidrogen hanya bergantung pada $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ dan dengan demikian merupakan fungsi genap. Fungsi $2p_x(2)$ merupakan fungsi ganjil terhadap x_2 [Persamaan (6.119)]. r_{12} diberikan oleh (9.66), dan apabila keenam koordinat dibalik tandanya, r_{12} tidak berubah. Karena itu, integran H'_{13} berubah menjadi negatifnya sendiri, sehingga berdasarkan Persamaan (7.64), $H'_{13} = 0$. Penalaran yang sama memberikan $H'_{14} = H'_{15} = H'_{16} = H'_{17} = H'_{18} = 0$ dan $H'_{23} = H'_{24} = H'_{25} = H'_{26} = H'_{27} = H'_{28} = 0$.

Selanjutnya, pertimbangkan $H'_{35} = \int\cdots\int 1s(1)2p_x(2)[e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})]1s(1)2p_\gamma(2)dx_1\cdots dz_2$. Jika koordinat x dibalik, $x_1 \rightarrow -x_1$ dan $x_2 \rightarrow -x_2$, r_{12} tidak berubah. Fungsi 1s(1) dan $2p_\gamma(2)$ tidak berubah, sedangkan $2p_x(2)$ berubah menjadi negatifnya. Akibatnya integran H'_{35} berubah menjadi negatifnya sendiri dan $H'_{35} = 0$. Demikian pula $H'_{36} = H'_{37} = H'_{38} = H'_{45} = H'_{46} = H'_{47} = H'_{48} = 0$. Dengan transformasi $y_1 \rightarrow -y_1$ dan $y_2 \rightarrow -y_2$, diperoleh $H'_{57} = H'_{58} = H'_{67} = H'_{68} = 0$.

Persamaan sekuler dengan demikian berbentuk diagonal-blok yang terdiri atas empat blok 2 × 2, dengan $b_{ii} \equiv H'_{ii} - E^{(1)}$ dan unsur luar-diagonal masing-masing H'_{12}, H'_{34}, H'_{56}, serta H'_{78}. Determinan itu terfaktorkan menjadi empat determinan orde kedua. Oleh karena itu, fungsi orde nol yang benar mempunyai bentuk

$$\varphi_1^{(0)} = c_1\psi_1^{(0)} + c_2\psi_2^{(0)}, \quad \varphi_2^{(0)} = \bar{c}_1\psi_1^{(0)} + \bar{c}_2\psi_2^{(0)}; \quad \varphi_3^{(0)} = c_3\psi_3^{(0)} + c_4\psi_4^{(0)}, \quad \varphi_4^{(0)} = \bar{c}_3\psi_3^{(0)} + \bar{c}_4\psi_4^{(0)}; \quad \varphi_5^{(0)} = c_5\psi_5^{(0)} + c_6\psi_6^{(0)}, \quad \varphi_6^{(0)} = \bar{c}_5\psi_5^{(0)} + \bar{c}_6\psi_6^{(0)}; \quad \varphi_7^{(0)} = c_7\psi_7^{(0)} + c_8\psi_8^{(0)}, \quad \varphi_8^{(0)} = \bar{c}_7\psi_7^{(0)} + \bar{c}_8\psi_8^{(0)} \tag{9.94}$$

Koefisien tanpa garis atas bersesuaian dengan salah satu akar setiap determinan orde kedua, sedangkan koefisien bergaris atas bersesuaian dengan akar kedua.

Determinan pertama ialah

$$\det\begin{vmatrix} H'_{11} - E^{(1)} & H'_{12} \\ H'_{12} & H'_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \tag{9.95}$$

Kita mempunyai $H'_{11} = \iint [1s(1)]^2[2s(2)]^2[e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})]d\tau_1 d\tau_2$ dan $H'_{22} = \iint [1s(2)]^2[2s(1)]^2[e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})]d\tau_1 d\tau_2$. Variabel integrasi adalah variabel semu dan dapat diberi lambang apa saja. Jika x_1 dan x_2, y_1 dan y_2, serta z_1 dan z_2 dipertukarkan dalam H'_{22}, r_{12} tidak berubah, sehingga

$$H'_{22} = \iint [1s(1)]^2[2s(2)]^2[e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})]d\tau_2 d\tau_1 = H'_{11} \tag{9.96}$$

Argumen yang sama menunjukkan $H'_{33} = H'_{44}$, $H'_{55} = H'_{66}$, dan $H'_{77} = H'_{88}$. H'_{11} dilambangkan J_{1s2s}.

$$H'_{11} = J_{1s2s} = \iint [1s(1)]^2[2s(2)]^2[e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})]d\tau_1 d\tau_2 \tag{9.97}$$

Ini adalah contoh integral Coulomb. Nama tersebut timbul karena J_{1s2s} sama dengan energi elektrostatik tolakan antara elektron dengan fungsi kerapatan probabilitas $[1s]^2$ dan elektron dengan fungsi kerapatan probabilitas $[2s]^2$.

Integral H'_{12} dilambangkan K_{1s2s}.

$$H'_{12} = K_{1s2s} = \iint 1s(1)2s(2)[e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})]2s(1)1s(2)d\tau_1 d\tau_2 \tag{9.98}$$

Ini adalah integral pertukaran: fungsi di sebelah kiri dan kanan $e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$ berbeda karena pertukaran elektron 1 dan 2.

Definisi umum integral Coulomb J_{mn} dan integral pertukaran K_{mn} adalah

$$J_{mn} \equiv \langle f_m(1)f_n(2)|e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})|f_m(1)f_n(2)\rangle \tag{9.99}$$

$$K_{mn} \equiv \langle f_m(1)f_n(2)|e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})|f_n(1)f_m(2)\rangle \tag{9.100}$$

Integral berlangsung atas seluruh rentang koordinat spasial elektron 1 dan 2, sedangkan f_m dan f_n adalah orbital spasial.

Substitusi (9.96)–(9.98) ke dalam (9.95) memberikan

$$\det\begin{vmatrix} J_{1s2s}-E^{(1)} & K_{1s2s}; \\ K_{1s2s} & J_{1s2s}-E^{(1)} \end{vmatrix} = 0; \quad (J_{1s2s}-E^{(1)})^2 = K_{1s2s}{}^2 \tag{9.101}$$

$$E_1{}^{(1)} = J_{1s2s} - K_{1s2s}, \quad E_2{}^{(1)} = J_{1s2s} + K_{1s2s} \tag{9.102}$$

Sekarang ditentukan koefisien fungsi gelombang orde nol yang benar yang bersesuaian dengan kedua akar ini. Penggunaan $E_1^{(1)}$ dalam (9.81) memberikan $K_{1s2s}\, c_1 + K_{1s2s}\, c_2 = 0$ pada kedua persamaan; jadi $c_2 = -c_1$. Normalisasi memberikan $\langle\varphi_1^{(0)}|\varphi_1^{(0)}\rangle = |c_1|^2 + |c_1|^2 = 1$, sehingga $c_1 = 2^{-1/2}$. Fungsi gelombang orde nol yang bersesuaian dengan $E_1^{(1)}$ ialah

$$\varphi_1{}^{(0)} = 2^{-1/2}(\psi_1{}^{(0)} - \psi_2{}^{(0)}) = 2^{-1/2}[1s(1)2s(2) - 2s(1)1s(2)] \tag{9.103}$$

Dengan cara serupa, fungsi yang bersesuaian dengan $E_2^{(1)}$ ialah

$$\varphi_2{}^{(0)} = 2^{-1/2}(\psi_1{}^{(0)} + \psi_2{}^{(0)}) = 2^{-1/2}[1s(1)2s(2) + 2s(1)1s(2)] \tag{9.104}$$

Masih terdapat tiga determinan orde kedua berikut.

$$\det\begin{vmatrix} H'_{33}-E^{(1)} & H'_{34}; \\ H'_{34} & H'_{33}-E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \tag{9.105}$$

$$\det\begin{vmatrix} H'_{55}-E^{(1)} & H'_{56}; \\ H'_{56} & H'_{55}-E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \tag{9.106}$$

$$\det\begin{vmatrix} H'_{77}-E^{(1)} & H'_{78}; \\ H'_{78} & H'_{77}-E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \tag{9.107}$$

Pertimbangkan H'_{33} dan H'_{55}. Kedua integral ini sama; satu-satunya perbedaan ialah penggantian $2p_x(2)$ oleh $2p_y(2)$, sedangkan kedua orbital hanya berbeda orientasi dalam ruang. Secara formal, jika variabel integrasi semu dalam H'_{33} diberi label ulang menurut $x_2 \rightarrow y_2$, $y_2 \rightarrow x_2$, $x_1 \rightarrow y_1$, dan $y_1 \rightarrow x_1$, r_{12} tidak berubah dan H'_{33} berubah menjadi H'_{55}. Penalaran serupa menunjukkan $H'_{77} = H'_{33}$. Dengan memperkenalkan lambang J_{1s2p} bagi integral Coulomb ini, $H'_{33} =$

$H'_{55} = H'_{77} = J_{1s2p}$. Demikian pula integral pertukaran yang melibatkan orbital 2p sama: $H'_{34} = H'_{56} = H'_{78} = K_{1s2p}$.

Ketiga determinan (9.105)–(9.107) identik dan berbentuk $\det[J_{1s2p} - E^{(1)}, K_{1s2p}; K_{1s2p}, J_{1s2p} - E^{(1)}] = 0$. Dengan analogi terhadap (9.102)–(9.104), diperoleh

$$E_3^{(1)} = E_5^{(1)} = E_7^{(1)} = J_{1s2p} - K_{1s2p} \tag{9.108}$$

$$E_4^{(1)} = E_6^{(1)} = E_8^{(1)} = J_{1s2p} + K_{1s2p} \tag{9.109}$$

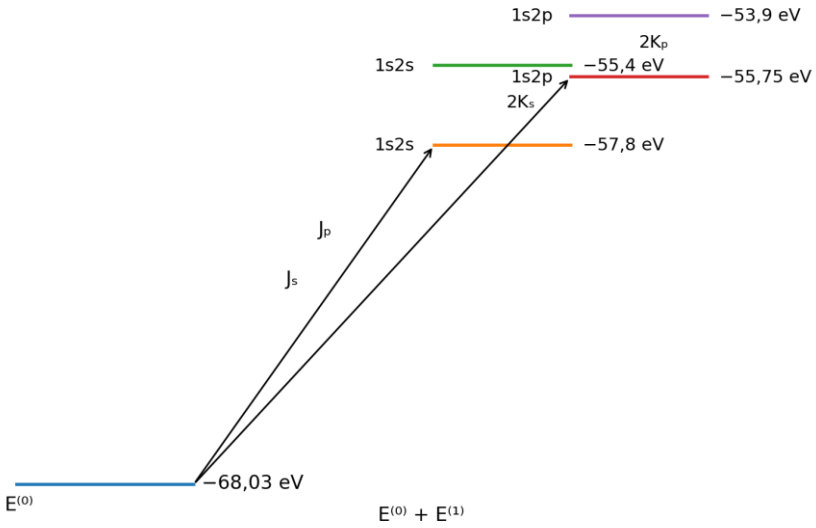
$$\varphi_3^{(0)} = 2^{-1/2}[1s(1)2p_x(2) - 1s(2)2p_x(1)]; \quad \varphi_4^{(0)} = 2^{-1/2}[1s(1)2p_x(2) + 1s(2)2p_x(1)]; \quad \varphi_5^{(0)} = 2^{-1/2}[1s(1)2p_Y(2) - 1s(2)2p_Y(1)]; \quad \varphi_6^{(0)} = 2^{-1/2}[1s(1)2p_Y(2) + 1s(2)2p_Y(1)]; \quad \varphi_7^{(0)} = 2^{-1/2}[1s(1)2p\_z(2) - 1s(2)2p\_z(1)]; \quad \varphi_8^{(0)} = 2^{-1/2}[1s(1)2p\_z(2) + 1s(2)2p\_z(1)] \tag{9.110}$$

Tolakan elektrostatik $e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$ di antara elektron telah menghilangkan sebagian degenerasi. Tingkat tak terganggu hipotetis yang semula terdegenerasi delapan kali terpecah menjadi dua tingkat nondegenerasi yang berkaitan dengan konfigurasi 1s2s dan dua tingkat terdegenerasi tiga kali yang berkaitan dengan konfigurasi 1s2p. Mungkin diduga bahwa koreksi energi orde lebih tinggi akan menghilangkan degenerasi tersebut lebih lanjut. Sebenarnya, medan magnet luar diperlukan untuk menghilangkan degenerasi sepenuhnya. Karena gangguan $e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$ belum sepenuhnya menghilangkan degenerasi, setiap kombinasi linear ternormalisasi dari $\varphi_3^{(0)}$, $\varphi_5^{(0)}$, dan $\varphi_7^{(0)}$ serta dari $\varphi_4^{(0)}$, $\varphi_6^{(0)}$, dan $\varphi_8^{(0)}$ dapat digunakan sebagai fungsi gelombang orde nol yang benar.

Untuk mengevaluasi integral Coulomb dan pertukaran dalam $E^{(1)}$ pada (9.102) dan (9.108), digunakan pengembangan $1/r_{12}$ yang diberikan dalam Soal 9.14. Hasilnya ialah

$$J_{1s2s} = (17/81)[Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)] = 11{,}42 \text{ eV}, \quad J_{1s2p} = (59/243)[Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)] = 13{,}21 \text{ eV}; \quad K_{1s2s} = (16/729)[Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)] = 1{,}19 \text{ eV}, \quad K_{1s2p} = (112/6561)[Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)] = 0{,}93 \text{ eV} \tag{9.111}$$

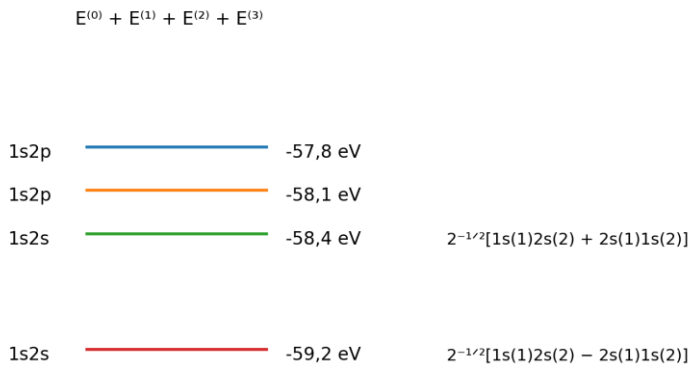
Di sini digunakan $Z = 2$ dan $e^2/(8\pi\varepsilon_0 a_0) = 13{,}606$ eV. Dengan mengingat $E^{(0)} = -68{,}03$ eV [Persamaan (9.92)], diperoleh $E^{(0)} + E_1^{(1)} = E^{(0)} + J_{1s2s} - K_{1s2s} = -57{,}8$ eV; $E^{(0)} + E_2^{(1)} = E^{(0)} + J_{1s2s} + K_{1s2s} = -55{,}4$ eV; $E^{(0)} + E_3^{(1)} = E^{(0)} + J_{1s2p} - K_{1s2p} = -55{,}75$ eV; dan $E^{(0)} + E_4^{(1)} = E^{(0)} + J_{1s2p} + K_{1s2p} = -53{,}9$ eV (Gambar 9.3).



Gambar 9.3 *Tingkat tereksitasi pertama atom helium menurut energi orde nol dan koreksi orde pertama. Pemisahan konfigurasi 1s2s dan 1s2p ditentukan oleh integral Coulomb J dan integral pertukaran K.*

Koreksi energi orde pertama tampaknya menunjukkan bahwa tingkat yang lebih rendah dari dua tingkat konfigurasi 1s2p terletak di bawah tingkat yang lebih tinggi dari dua tingkat konfigurasi 1s2s. Kajian spektrum helium menunjukkan bahwa hal itu tidak benar. Kesalahan timbul karena koreksi energi gangguan orde lebih tinggi diabaikan.

Dengan metode variasi–gangguan (Bagian 9.2), Knight dan Scherr menghitung koreksi orde kedua dan ketiga $E^{(2)}$ serta $E^{(3)}$ untuk keempat tingkat tereksitasi ini [R. E. Knight dan C. W. Scherr, Rev. Mod. Phys., 35, 431 (1963); untuk koreksi energi sampai orde ke-17, lihat F. C. Sanders dan C. W. Scherr, Phys. Rev., 181, 84 (1969)]. Gambar 9.4 memperlihatkan hasil mereka, yang berada dalam 0,1 eV dari energi eksperimen. Gambar 9.4 menunjukkan bahwa Gambar 9.3 cukup tidak akurat. Karena gangguan $e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$ sebenarnya tidak terlalu kecil, perlakuan gangguan yang hanya memasukkan koreksi $E^{(1)}$ tidak menghasilkan nilai yang akurat.



Gambar 9.4 *Nilai $E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + E^{(3)}$ untuk tingkat tereksitasi pertama helium. Fungsi gelombang orde nol yang benar untuk tingkat 1s2s juga diperlihatkan.*

Koreksi orde pertama terhadap fungsi gelombang, $\psi^{(1)}$, memuat sumbangan konfigurasi lain, yaitu interaksi konfigurasi. Apabila suatu tingkat disebut termasuk konfigurasi 1s2s, maksudnya ialah konfigurasi tersebut memberikan sumbangan terbesar pada fungsi gelombang sebenarnya.

Kita memulai dengan delapan fungsi orde nol terdegenerasi (9.93). Fungsi-fungsi ini mempunyai tiga jenis degenerasi. Pertama, degenerasi antara fungsi mirip hidrogen dengan n yang sama tetapi l berbeda; fungsi 2s dan 2p mempunyai energi sama. Kedua, degenerasi antara fungsi mirip hidrogen dengan n dan l sama tetapi m berbeda; fungsi $2p_1$, $2p_0$, dan $2p_{-1}$ mempunyai energi sama. Untuk kemudahan digunakan fungsi nyata $2p_x$, $2p_\gamma$, dan 2p_z, tetapi fungsi $2p_1$, $2p_0$, dan $2p_{-1}$ dapat pula dipakai. Ketiga, degenerasi antara fungsi yang hanya berbeda karena kedua elektron saling dipertukarkan di antara orbital. Fungsi $\psi_1^{(0)}$ = 1s(1)2s(2) dan $\psi_2^{(0)}$ = 1s(2)2s(1) mempunyai energi sama. Jenis terakhir ini disebut degenerasi pertukaran.

Ketika tolakan antarelektron $e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$ dimasukkan sebagai gangguan, degenerasi pertukaran dan degenerasi yang berkaitan dengan bilangan kuantum l hilang. Degenerasi yang berkaitan dengan m tetap ada; setiap tingkat helium 1s2p terdegenerasi tiga kali, dan orbital $2p_1$, $2p_0$, serta $2p_{-1}$ dapat digunakan sebagai pengganti orbital nyata dalam membangun fungsi gelombang orde nol yang benar. Berikut dipertimbangkan alasan hilangnya degenerasi l dan degenerasi pertukaran.

Tolakan antarelektron dalam helium membuat energi orbital 2s lebih rendah daripada energi 2p. Gambar 6.9 dan 6.8 menunjukkan bahwa elektron 2s mempunyai probabilitas lebih besar daripada elektron 2p untuk berada lebih dekat ke inti daripada elektron 1s. Elektron 2s tidak ditapis dari inti oleh elektron 1s seefektif elektron 2p, sehingga energinya lebih rendah daripada elektron 2p. Menurut Persamaan (6.94), semakin besar muatan inti, semakin rendah energi.

Secara matematis, perbedaan antara energi 1s2s dan 1s2p berasal dari integral Coulomb J_{1s2s} yang lebih kecil daripada J_{1s2p}.

Integral Coulomb tersebut menyatakan tolakan elektrostatik antara distribusi muatan yang sesuai. Ketika elektron 2s menembus distribusi muatan elektron 1s, elektron itu hanya merasakan tolakan dari bagian distribusi muatan 1s yang belum ditembus. Oleh sebab itu, tolakan elektrostatik 1s–2s lebih kecil daripada tolakan 1s–2p, dan tingkat 1s2s terletak di bawah tingkat 1s2p. Tolakan antarelektron dalam atom berelektron banyak menghilangkan degenerasi l, dan untuk nilai n yang sama, energi orbital meningkat dengan meningkatnya l.

Sekarang pertimbangkan hilangnya degenerasi pertukaran. Fungsi (9.93) yang digunakan pada awal perlakuan gangguan menempatkan setiap elektron pada suatu orbital tertentu. Sebagai contoh, $\psi_1^{(0)} = 1s(1)2s(2)$ menempatkan elektron 1 pada orbital 1s dan elektron 2 pada orbital 2s; untuk $\psi_2^{(0)}$ berlaku sebaliknya. Determinan sekuler tidak diagonal, sehingga fungsi awal tersebut bukan fungsi gelombang orde nol yang benar. Fungsi orde nol yang benar tidak menempatkan masing-masing elektron pada orbital tertentu. Dua fungsi orde nol yang benar pertama ialah $\varphi_1^{(0)} = 2^{-1/2}[1s(1)2s(2) - 1s(2)2s(1)]$ dan $\varphi_2^{(0)} = 2^{-1/2}[1s(1)2s(2) + 1s(2)2s(1)]$. Kita tidak dapat mengatakan orbital mana yang ditempati elektron 1 dalam $\varphi_1^{(0)}$ ataupun $\varphi_2^{(0)}$. Sifat fungsi gelombang sistem yang mengandung lebih dari satu elektron ini berasal dari ketakterbedaan partikel identik dalam mekanika kuantum dan dibahas lebih lanjut pada Bab 10. Karena $\varphi_1^{(0)}$ dan $\varphi_2^{(0)}$ mempunyai energi berbeda, degenerasi pertukaran dihilangkan ketika fungsi orde nol yang benar digunakan.

9.8 Teori Gangguan Bergantung Waktu

Dalam spektroskopi, mula-mula sistem berada dalam suatu keadaan stasioner, kemudian dikenai radiasi elektromagnetik atau cahaya, dan selanjutnya diamati apakah sistem mengalami transisi ke keadaan stasioner lain. Radiasi menghasilkan suku energi potensial yang bergantung waktu dalam Hamiltonian, sehingga persamaan Schrödinger bergantung waktu harus digunakan. Pendekatan yang paling sesuai untuk keadaan ini adalah pendekatan hampiran yang disebut teori gangguan bergantung waktu (time-dependent perturbation theory).

Misalkan sistem, berupa atom atau molekul, mempunyai Hamiltonian tak bergantung waktu $\hat{H}^0$ ketika radiasi atau gangguan bergantung waktu lain tidak ada, dan $\hat{H}'(t)$ merupakan gangguan bergantung waktu. Persamaan Schrödinger tak bergantung waktu untuk masalah tak terganggu ialah

$$\hat{H}^0\psi_k^0 = E_k^0\psi_k^0 \tag{9.112}$$

dengan E_k^0 dan ψ_k^0 masing-masing merupakan energi dan fungsi gelombang keadaan stasioner. Persamaan Schrödinger bergantung waktu (7.97) ketika radiasi hadir ialah

$$-(\hbar/\mathrm{i})(\partial\Psi/\partial\mathrm{t}) = [\hat{\mathrm{H}}^0 + \hat{\mathrm{H}}'(\mathrm{t})]\Psi \tag{9.113}$$

Fungsi keadaan Ψ bergantung pada koordinat spasial dan spin, yang dilambangkan q, serta pada waktu: $\Psi = \Psi(\mathrm{q,t})$. Koordinat spin dibahas dalam Bab 10.

Pertama, misalkan $\hat{\mathrm{H}}'(\mathrm{t})$ tidak ada. Persamaan Schrödinger bergantung waktu tak terganggu ialah

$$-(\hbar/\mathrm{i})(\partial\Psi^0/\partial\mathrm{t}) = \hat{\mathrm{H}}^0\Psi^0 \tag{9.114}$$

Fungsi keadaan stasioner yang mungkin bagi sistem diberikan oleh (7.99), yaitu $\Psi_k{}^o = \exp(-\mathrm{i}E_k{}^o\mathrm{t}/\hbar)\psi_k{}^o$, dengan fungsi $\psi_k{}^o$ merupakan fungsi eigen $\hat{\mathrm{H}}^o$ [Persamaan (9.112)]. Setiap $\Psi_k{}^o$ adalah penyelesaian (9.114). Selain itu, kombinasi linear berikut juga merupakan penyelesaian persamaan Schrödinger bergantung waktu (9.114), sebagaimana dibuktikan dalam pembahasan yang menghasilkan Persamaan (7.100).

$$\Psi^0 = \Sigma_k\, c_k\Psi_k{}^0 = \Sigma_k\, c_k \exp(-\mathrm{i}E_k{}^0\mathrm{t}/\hbar)\psi_k{}^0 \tag{9.115}$$

Koefisien c_k adalah konstanta sebarang yang tidak bergantung waktu. Fungsi $\Psi_k{}^o$ membentuk himpunan lengkap karena merupakan fungsi eigen operator Hermitian $\hat{\mathrm{H}}^o$, sehingga setiap penyelesaian (9.114) dapat dinyatakan dalam bentuk (9.115). Dengan demikian, (9.115) merupakan penyelesaian umum persamaan Schrödinger bergantung waktu (9.114) untuk $\hat{\mathrm{H}}^o$ yang tidak bergantung waktu.

Sekarang misalkan $\hat{\mathrm{H}}'(\mathrm{t})$ hadir. Fungsi (9.115) bukan lagi penyelesaian persamaan Schrödinger bergantung waktu. Akan tetapi, karena fungsi tak terganggu $\Psi_k{}^o$ membentuk himpunan lengkap, fungsi keadaan sebenarnya Ψ pada setiap saat dapat dikembangkan sebagai kombinasi linear fungsi $\Psi_k{}^o$. Karena $\hat{\mathrm{H}}$ bergantung waktu, Ψ berubah terhadap waktu dan koefisien pengembangan b_k juga berubah terhadap waktu. Jadi,

$$\Psi = \Sigma_k\, b_k(\mathrm{t}) \exp(-\mathrm{i}E_k{}^0\mathrm{t}/\hbar)\psi_k{}^0 \tag{9.116}$$

Dalam batas $\hat{\mathrm{H}}'(\mathrm{t}) \to 0$, pengembangan (9.116) mereduksi menjadi (9.115).

Substitusi (9.116) ke dalam persamaan Schrödinger bergantung waktu (9.113) dan penggunaan (9.112) menghasilkan $-(\hbar/\mathrm{i})\Sigma_k(\mathrm{d}b_k/\mathrm{d}t)\exp(-\mathrm{i}E_k{}^o\mathrm{t}/\hbar)\psi_k{}^o = \Sigma_k b_k \exp(-\mathrm{i}E_k{}^o\mathrm{t}/\hbar)\hat{\mathrm{H}}'\psi_k{}^o$. Persamaan ini kemudian dikalikan dengan $\psi_m{}^{o*}$ dan diintegralkan atas koordinat spasial dan spin. Dengan menggunakan ortonormalitas $\langle\psi_m{}^o|\psi_k{}^o\rangle = \delta_{mk}$, semua suku pada jumlah ruas kiri kecuali satu menjadi nol. Hasilnya ialah

$$\mathrm{d}b_m/\mathrm{d}t = -(\mathrm{i}/\hbar)\Sigma_k\, b_k \exp[\mathrm{i}(E_m{}^0 - E_k{}^0)\mathrm{t}/\hbar]\langle\psi_m{}^0|\hat{\mathrm{H}}'(\mathrm{t})|\psi_k{}^0\rangle \tag{9.117}$$

Misalkan gangguan $\hat{\mathrm{H}}'(\mathrm{t})$ diterapkan pada t = 0, dan sebelum gangguan diterapkan sistem berada dalam keadaan stasioner n dengan energi $E_n{}^o$. Fungsi keadaan pada t = 0 karena itu adalah $\Psi = \exp(-\mathrm{i}E_n{}^o\mathrm{t}/\hbar)\psi_n{}^o$ [Persamaan (7.99)], sehingga nilai

koefisien pengembangan dalam (9.116) pada t = 0 ialah $b_n(0) = 1$ dan $b_k(0) = 0$ untuk $k \neq n$.

$$b_k(0) = \delta_{kn} \tag{9.118}$$

Diasumsikan gangguan $\hat{H}'$ kecil dan hanya bekerja dalam waktu singkat. Dalam keadaan ini, perubahan koefisien pengembangan b_k dari nilai awalnya ketika gangguan diterapkan akan kecil. Sebagai pendekatan yang baik, koefisien pengembangan pada ruas kanan (9.117) dapat diganti dengan nilai awalnya dalam (9.118). Dengan demikian,

$$db_m/dt \approx -(i/\hbar)\exp[i(E_m^0 - E_n^0)t/\hbar]\langle\psi_m^0|\hat{H}'(t)|\psi_n^0\rangle \tag{9.119}$$

Misalkan gangguan $\hat{H}'$ bekerja dari t = 0 sampai t = t′. Integrasi dari t = 0 sampai t = t′ dan penggunaan (9.118) memberikan

$$b_m(t') \approx \delta_{mn} - (i/\hbar)\int_0^{t'} \exp[i(E_m^0 - E_n^0)t/\hbar]\langle\psi_m^0|\hat{H}'(t)|\psi_n^0\rangle dt \tag{9.120}$$

Penggunaan hasil hampiran (9.120) bagi koefisien pengembangan dalam (9.116) memberikan pendekatan yang diinginkan terhadap fungsi keadaan pada waktu t′ untuk kasus gangguan bergantung waktu $\hat{H}'$ diterapkan pada t = 0 kepada suatu sistem dalam keadaan stasioner n. Seperti pada teori gangguan tak bergantung waktu, pendekatan orde lebih tinggi dapat dikembangkan; lihat Fong, halaman 234–244.

Untuk waktu sesudah t′, gangguan telah berhenti bekerja dan $\hat{H}' = 0$. Persamaan (9.117) memberikan $db_m/dt = 0$ untuk $t > t'$, sehingga $b_m = b_m(t')$ bagi $t \geq t'$. Karena itu, untuk waktu sesudah sistem terkena gangguan, fungsi keadaan Ψ ialah

$$\Psi = \Sigma_m\, b_m(t')\exp(-iE_m^0 t/\hbar)\psi_m^0, \quad t \geq t' \tag{9.121}$$

dengan $b_m(t')$ diberikan oleh (9.120). Dalam (9.121), Ψ merupakan superposisi fungsi eigen ψ_m^0 dari operator energi $\hat{H}^0$, dengan koefisien pengembangan $b_m(t')\exp(-iE_m^0 t/\hbar)$. Bandingkan (9.121) dan (7.66). Pembahasan Bagian 7.6 menunjukkan bahwa pengukuran energi sistem pada waktu sesudah t′ memberikan salah satu nilai eigen E_m^0 dari operator energi $\hat{H}^0$, dan probabilitas memperoleh E_m^0 sama dengan kuadrat nilai mutlak koefisien pengembangan yang mengalikan ψ_m^0, yaitu $|b_m(t')\exp(-iE_m^0 t/\hbar)|^2 = |b_m(t')|^2$.

Gangguan bergantung waktu mengubah fungsi keadaan sistem dari $\exp(-iE_n^0 t/\hbar)\psi_n^0$ menjadi superposisi (9.121). Pengukuran energi selanjutnya mengubah Ψ menjadi salah satu fungsi eigen energi $\exp(-iE_m^0 t/\hbar)\psi_m^0$, yaitu reduksi fungsi gelombang sebagaimana dibahas pada Bagian 7.9. Hasil akhirnya adalah transisi dari keadaan stasioner n ke keadaan stasioner m, dengan probabilitas transisi $|b_m(t')|^2$.

9.9 Interaksi Radiasi dan Materi

Sekarang dipertimbangkan interaksi atom atau molekul dengan radiasi elektromagnetik. Pendekatan mekanika kuantum yang semestinya memperlakukan atom dan radiasi secara kuantum. Untuk menyederhanakan persoalan, cahaya diperlakukan secara klasik sebagai gelombang elektromagnetik yang terdiri atas medan listrik dan medan magnet berosilasi.

Kajian terperinci yang tidak disajikan di sini menunjukkan bahwa pada umumnya interaksi medan magnet radiasi dengan muatan dalam atom jauh lebih lemah daripada interaksi medan listrik radiasi dengan muatan. Oleh karena itu, hanya interaksi yang terakhir dipertimbangkan. Dalam spektroskopi resonansi magnetik inti, interaksi penting adalah antara momen dipol magnetik inti dan medan magnet radiasi; kasus tersebut tidak dibahas di sini.

Misalkan medan listrik $\mathscr{E}$ dari gelombang elektromagnetik hanya mengarah pada sumbu x; ini adalah radiasi terpolarisasi bidang. Medan listrik didefinisikan sebagai gaya per satuan muatan, sehingga gaya pada muatan Q_i ialah $F = Q_i\mathscr{E}_x = -dV/dx$, dengan menggunakan (4.24). Integrasi memberikan energi potensial interaksi antara medan listrik radiasi dan muatan sebagai $V = -Q_i\mathscr{E}_x x$, dengan konstanta integrasi sebarang dipilih nol. Untuk sistem dengan beberapa muatan, $V = -\Sigma_i Q_i x_i \mathscr{E}_x$. Inilah gangguan bergantung waktu $\hat{H}'(t)$.

Kebergantungan ruang dan waktu medan listrik gelombang elektromagnetik yang bergerak ke arah z, dengan panjang gelombang λ dan frekuensi ν, diberikan oleh $\mathscr{E}_x = \mathscr{E}_0 \sin(2\pi\nu t - 2\pi z/\lambda)$, dengan $\mathscr{E}_0$ nilai maksimum $\mathscr{E}_x$ atau amplitudonya. Oleh karena itu, $\hat{H}'(t) = -\mathscr{E}_0 \Sigma_i Q_i x_i \sin(2\pi\nu t - 2\pi z_i/\lambda)$, dengan penjumlahan meliputi seluruh elektron dan inti atom atau molekul.

Dengan mendefinisikan ω dan ω_{mn} sebagai

$$\omega \equiv 2\pi\nu, \quad \omega_{mn} \equiv (E_m^{\,0} - E_n^{\,0})/\hbar \tag{9.122}$$

dan mensubstitusikan $\hat{H}'(t)$ ke dalam (9.120), diperoleh koefisien pengembangan fungsi keadaan Ψ dalam (9.116): $b_m \approx \delta_{mn} + (i\mathscr{E}_0/\hbar)\int_0^{t'} \exp(i\omega_{mn}t)\langle\psi_m^{\,0}|\Sigma_i Q_i x_i \sin(\omega t - 2\pi z_i/\lambda)|\psi_n^{\,0}\rangle dt$.

Integral $\langle\psi_m^{\,0}|\cdots|\psi_n^{\,0}\rangle$ meliputi seluruh ruang, tetapi sumbangan yang berarti terhadap besarnya integral hanya berasal dari daerah tempat $\psi_m^{\,0}$ dan $\psi_n^{\,0}$ bernilai cukup besar. Jauh di luar atom atau molekul, kedua fungsi itu sangat kecil dan daerah tersebut dapat diabaikan. Ambil titik asal koordinat di dalam atom atau molekul. Karena daerah yang sangat jauh dapat diabaikan, koordinat z_i dapat dianggap mempunyai besar maksimum kira-kira satu nanometer. Untuk cahaya ultraviolet, λ berorde 10^2 nm; bagi radiasi tampak, inframerah, gelombang mikro, dan frekuensi radio, λ lebih besar lagi. Dengan demikian, $2\pi z_i/\lambda$ sangat kecil dan dapat diabaikan, sehingga di dalam integral tersisa $\Sigma_i Q_i x_i \sin\omega t$.

Identitas $\sin\omega t = [\exp(i\omega t) - \exp(-i\omega t)]/(2i)$ menghasilkan $b_m(t') \approx \delta_{mn} + [\mathscr{E}_0/(2\hbar)]\langle\psi_m^0|\Sigma_i Q_i x_i|\psi_n^0\rangle\int_0^{t'}\{\exp[i(\omega_{mn}+\omega)t] - \exp[i(\omega_{mn}-\omega)t]\}dt$. Dengan menggunakan $\int_0^{t'} e^{at}dt = a^{-1}(e^{at'} - 1)$, diperoleh

$$b_m(t') \approx \delta_{mn} + [\mathcal{E}_0/(2i\hbar)]\langle\psi_m^0|\Sigma_i Q_i x_i|\psi_n^0\rangle\{[\exp(i(\omega_{mn}+\omega)t')-1]/(\omega_{mn}+\omega) - [\exp(i(\omega_{mn}-\omega)t')-1]/(\omega_{mn}-\omega)\} \quad (9.123)$$

Untuk $m \neq n$, suku δ_{mn} sama dengan nol.

Sebagaimana dinyatakan pada akhir Bagian 9.8, $|b_m(t')|^2$ memberikan probabilitas transisi dari keadaan n ke keadaan m. Terdapat dua keadaan ketika probabilitas ini menjadi cukup besar. Jika $\omega_{mn} = \omega$, penyebut pecahan kedua di dalam kurung sama dengan nol dan nilai mutlak pecahan tersebut besar, walaupun tidak tak berhingga; lihat Soal 9.27. Jika $\omega_{mn} = -\omega$, pecahan pertama mempunyai penyebut nol dan nilai mutlak yang besar.

Untuk $\omega_{mn} = \omega$, Persamaan (9.122) memberikan $E_m^0 - E_n^0 = h\nu$. Pemaparan atom terhadap radiasi berfrekuensi ν menghasilkan transisi dari keadaan stasioner n ke keadaan stasioner m, dengan $E_m^0 > E_n^0$ karena ν positif. Energi transisi dapat dipandang berasal dari penyerapan foton berenergi $h\nu$ oleh sistem. Pandangan ini dibenarkan oleh perlakuan mekanika kuantum penuh, yang disebut teori medan kuantum, tempat radiasi diperlakukan secara kuantum, bukan klasik. Peristiwa ini adalah penyerapan radiasi yang meningkatkan energi sistem.

Untuk $\omega_{mn} = -\omega$, diperoleh $E_n^0 - E_m^0 = h\nu$. Pemaparan terhadap radiasi berfrekuensi ν menginduksi transisi dari keadaan stasioner n ke keadaan stasioner m dengan $E_n^0 > E_m^0$. Sistem turun ke tingkat energi yang lebih rendah, dan perlakuan teori medan kuantum menunjukkan bahwa sebuah foton berenergi $h\nu$ dipancarkan. Peristiwa ini adalah emisi terstimulasi radiasi. Emisi terstimulasi terjadi dalam laser.

Kekurangan perlakuan ini adalah tidak diprediksinya emisi spontan, yaitu pemancaran foton oleh sistem yang tidak sedang terkena radiasi dan turun ke tingkat energi lebih rendah. Teori medan kuantum memprediksi emisi spontan.

Dari (9.123), probabilitas penyerapan sebanding dengan $|\langle\psi_m^0|\Sigma_i Q_i x_i|\psi_n^0\rangle|^2$. Besaran $\Sigma_i Q_i x_i$ adalah komponen x operator momen dipol listrik sistem $\hat{\mu}$. Secara lengkap, $\hat{\mu} = i\Sigma_i Q_i x_i + j\Sigma_i Q_i y_i + k\Sigma_i Q_i z_i = i\hat{\mu}_x + j\hat{\mu}_\gamma + k\hat{\mu}\_z$, dengan i, j, dan k vektor satuan sepanjang sumbu koordinat. Pada penurunan sebelumnya diasumsikan radiasi terpolarisasi dengan medan listrik hanya pada arah x. Jika radiasi juga mempunyai komponen medan listrik pada arah y dan z, probabilitas penyerapan sebanding dengan $|\langle\psi_m^0|\hat{\mu}_x|\psi_n^0\rangle|^2 + |\langle\psi_m^0|\hat{\mu}_\gamma|\psi_n^0\rangle|^2 + |\langle\psi_m^0|\hat{\mu}\_z|\psi_n^0\rangle|^2 = |\langle\psi_m^0|\hat{\mu}|\psi_n^0\rangle|^2$, dengan menggunakan Persamaan (5.25). Integral $\langle\psi_m^0|\hat{\mu}|\psi_n^0\rangle = \mu_{mn}$ disebut momen transisi atau momen dipol transisi.

Apabila $\mu_{mn} = 0$, transisi antara keadaan m dan n melalui penyerapan atau emisi radiasi dikatakan terlarang. Transisi yang diizinkan mempunyai $\mu_{mn} \neq 0$. Karena sejumlah pendekatan digunakan dalam penurunan (9.123), transisi terlarang masih mungkin terjadi dengan probabilitas kecil.

Sebagai contoh, pertimbangkan partikel dalam kotak satu dimensi pada Bagian 2.2. Momen dipol transisinya ialah $\langle \psi_m^0 | Qx | \psi_n^0 \rangle$, dengan Q muatan partikel, x koordinatnya, $\psi_m^0 = (2/l)^{1/2} \sin(m\pi x/l)$, dan $\psi_n^0 = (2/l)^{1/2} \sin(n\pi x/l)$. Evaluasi integral tersebut pada Soal 9.28 menunjukkan bahwa nilainya tidak nol hanya jika $m - n = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \ldots$, dan sama dengan nol jika $m - n = 0, \pm 2, \pm 4, \ldots$. Aturan seleksi untuk partikel bermuatan dalam kotak satu dimensi adalah bahwa bilangan kuantum harus berubah sebesar bilangan bulat ganjil ketika radiasi diserap atau dipancarkan.

Evaluasi momen transisi bagi osilator harmonik dan rotor tegar dua partikel menghasilkan aturan seleksi $\Delta v = \pm 1$ dan $\Delta J = \pm 1$, sebagaimana dinyatakan pada Bagian 4.3 dan 6.4.

Besaran $|b_m|^2$ dalam (9.123) berpuncak tajam pada $\omega = \omega_{mn}$ dan $\omega = -\omega_{mn}$, tetapi tetap terdapat probabilitas tidak nol bahwa transisi terjadi ketika ω tidak tepat sama dengan $|\omega_{mn}|$, yakni ketika $h\nu$ tidak tepat sama dengan $|E_m^0 - E_n^0|$. Kenyataan ini berkaitan dengan hubungan ketidakpastian energi–waktu (5.15). Keadaan dengan waktu hidup terbatas mempunyai ketidakpastian energi.

Radiasi bukan satu-satunya gangguan bergantung waktu yang menghasilkan transisi antarkeadaan. Ketika suatu atom atau molekul mendekati atom atau molekul lain, sistem mengalami gangguan bergantung waktu yang dapat mengubah keadaannya. Aturan seleksi yang diturunkan bagi transisi radiatif tidak harus berlaku bagi proses tumbukan karena $\hat{H}'(t)$ berbeda untuk kedua proses tersebut.

Rangkuman

Untuk sistem yang persamaan Schrödinger tak bergantung waktunya adalah $(\hat{H}^0 + \hat{H}')\psi_n = E_n\psi_n$, teori gangguan menyatakan energi dan fungsi gelombang tingkat nondegenerasi sebagai $E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + \cdots$ dan $\psi_n = \psi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} + \psi_n^{(2)} + \cdots$, dengan fungsi gelombang tak terganggu $\psi_n^{(0)}$ dan energi $E_n^{(0)}$ memenuhi $\hat{H}^0\psi_n^{(0)} = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$. Koreksi energi orde pertama ialah $E_n^{(1)} = \int \psi_n^{(0)*} \hat{H}' \psi_n^{(0)} d\tau$. Koreksi energi orde kedua diberikan oleh (9.35). Koreksi orde pertama terhadap fungsi gelombang ialah $\psi_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} a_m \psi_m^{(0)}$, dengan koefisien pengembangan a_m diberikan oleh (9.26).

Untuk suatu tingkat terdegenerasi dengan derajat degenerasi d, $\psi_n = \varphi_n^{(0)} + \psi_n^{(1)} + \cdots$, dengan fungsi gelombang orde nol yang benar $\varphi_n^{(0)} = \sum_{i=1}^{d} c_i \psi_i^{(0)}$ bagi $n = 1, \ldots, d$. Koreksi energi orde pertama untuk tingkat terdegenerasi diperoleh dari

persamaan sekuler $\det[\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_i^{(0)}\rangle - E_n^{(1)}\delta_{mi}] = 0$, kemudian koefisien c_i diperoleh dengan menyelesaikan (9.81).

Teori gangguan diterapkan pada atom helium dengan $\hat{H}'$ diambil sebagai $e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$. Fungsi gelombang keadaan dasar tak terganggu ialah $\psi^{(0)} = 1s(1)1s(2)$. Koreksi energi orde pertama dihitung untuk keadaan dasar. Teori gangguan degenerasi diterapkan pada kelompok pertama keadaan tereksitasi helium. Ditemukan bahwa konfigurasi 1s2s menghasilkan dua tingkat energi nondegenerasi dengan fungsi gelombang orde nol yang benar $[1s(1)2s(2) \pm 1s(2)2s(1)]/\sqrt{2}$; konfigurasi 1s2p menghasilkan dua tingkat yang masing-masing terdegenerasi tiga kali, dengan fungsi gelombang orde nol yang benar $[1s(1)2p(2) \pm 1s(2)2p(1)]/\sqrt{2}$, di mana 2p dapat berupa $2p_x$, $2p_\gamma$, atau 2p_z. Kesimpulan ini dimodifikasi ketika spin elektron diperhitungkan dalam Bab 10. Tingkat 1s2s terletak di bawah tingkat 1s2p.

Teori gangguan bergantung waktu menunjukkan bahwa ketika atom atau molekul dalam keadaan stasioner dikenai radiasi elektromagnetik berfrekuensi ν, molekul dapat mengalami transisi antara dua keadaan stasioner m dan n yang selisih energinya $h\nu$, asalkan momen dipol transisi $\langle\psi_m^0|\hat{\mu}|\psi_n^0\rangle$ tidak nol.

Soal

Pembagian soal menurut bagian: Bagian 9.2—Soal 9.1–9.11; Bagian 9.3—Soal 9.12–9.16; Bagian 9.4—Soal 9.17; Bagian 9.5—Soal 9.18–9.22; Bagian 9.6—Soal 9.23; Bagian 9.7—Soal 9.24–9.26; Bagian 9.8—Soal 9.27–9.29; soal umum—Soal 9.30–9.31.

9.1 Pertimbangkan sistem satu partikel satu dimensi dengan $V = \infty$ untuk $x < 0$ dan $x > l$, serta $V = C$ untuk $0 \le x \le l$, dengan C suatu konstanta. (a) Buat sketsa V untuk $C > 0$. (b) Perlakukan sistem sebagai partikel dalam kotak yang terganggu dan tentukan $E_n^{(1)}$ untuk keadaan dengan bilangan kuantum n.

9.2 (a) Untuk partikel dalam kotak terganggu pada Soal 9.1, tentukan $E_n^{(2)}$ bagi keadaan dengan bilangan kuantum n. (b) Tentukan $\psi_n^{(1)}$ untuk sistem ini. (c) Gunakan hasil Soal 4.52 untuk menjelaskan mengapa hasil Soal 9.1 dan 9.2 masuk akal.

9.3 Untuk osilator anharmonik dengan Hamiltonian (9.3), evaluasi $E^{(1)}$ bagi keadaan tereksitasi pertama dengan mengambil sistem tak terganggu sebagai osilator harmonik. Berapakah $E^{(0)}$?

9.4 Pertimbangkan sistem satu partikel satu dimensi dengan energi potensial $V = V_0$ untuk $\frac{1}{4}l < x < \frac{3}{4}l$, $V = 0$ untuk $0 \le x \le \frac{1}{4}l$ dan $\frac{3}{4}l \le x \le l$, serta $V = \infty$ di tempat lain, dengan $V_0 = \hbar^2/(ml^2)$. Perlakukan sistem sebagai partikel dalam kotak yang terganggu. (a) Tentukan koreksi energi orde pertama bagi keadaan stasioner umum dengan bilangan kuantum n. (b) Untuk keadaan dasar dan

keadaan tereksitasi pertama, bandingkan $E^{(0)} + E^{(1)}$ dengan energi sebenarnya $5{,}750345\hbar^2/(ml^2)$ dan $20{,}23604\hbar^2/(ml^2)$. Jelaskan mengapa $E^{(0)} + E^{(1)}$ untuk masing-masing keadaan ini sama dengan hasil perlakuan variasi pada Soal 8.2a dan 8.18.

9.5 Untuk partikel dalam kotak terganggu pada Soal 9.4, jelaskan tanpa melakukan perhitungan mengapa $E^{(1)}$ diperkirakan paling besar bagi keadaan $n = 1$.

9.6 Untuk partikel dalam kotak terganggu pada Soal 9.4, tentukan koreksi orde pertama terhadap fungsi gelombang keadaan stasioner dengan bilangan kuantum n.

9.7 Pertimbangkan partikel dalam kotak terganggu pada Soal 9.4. (a) Jelaskan mengapa $\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle = 0$ ketika $n = 1$ dan m bilangan bulat genap. (b) Gunakan komputer untuk mengevaluasi $E^{(2)}$ bagi keadaan dasar dengan menjumlahkan nilai m ganjil dalam (9.35). Terus tambahkan suku hingga suku terakhir yang ditambahkan dapat diabaikan besarnya. Bandingkan $E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)}$ dengan energi keadaan dasar sebenarnya $5{,}750345\hbar^2/(ml^2)$.

9.8 Pertimbangkan sistem satu partikel satu dimensi dengan $V = V_0$ untuk $(0{,}25 + c)l < x < (0{,}75 + c)l$, $V = 0$ untuk $0 \le x \le (0{,}25 + c)l$ dan $(0{,}75 + c)l \le x \le l$, serta $V = \infty$ di tempat lain. V_0 dan c adalah konstanta dan $0 \le c \le 0{,}25$. (a) Ambil sistem tak terganggu sebagai partikel dalam kotak satu dimensi dan tentukan $E^{(1)}$ dalam V_0 dan c. (b) Gambarkan $E^{(1)}/V_0$ terhadap c bagi keadaan dasar.

9.9 Anggap muatan proton terdistribusi seragam di seluruh volume bola berjari-jari 10^{-13} cm. Gunakan teori gangguan untuk memperkirakan pergeseran energi keadaan dasar atom hidrogen akibat ukuran proton yang berhingga. Energi potensial yang dialami elektron setelah menembus inti dan berada pada jarak r dari pusat inti ialah $-eQ/(4\pi\varepsilon_0 r)$, dengan Q jumlah muatan proton di dalam bola berjari-jari r. Evaluasi integral dipermudah dengan memperhatikan bahwa faktor eksponensial dalam ψ pada hakikatnya sama dengan 1 di dalam inti.

9.10 Benar atau salah? Koreksi orde kedua $E^{(2)}$ terhadap energi keadaan dasar tidak pernah positif.

9.11 Untuk osilator anharmonik dengan $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2 + \frac{1}{2}kx^2 + cx^3$, ambil $\hat{H}' = cx^3$. (a) Tentukan $E^{(1)}$ bagi keadaan dengan bilangan kuantum v. (b) Tentukan $E^{(2)}$ bagi keadaan dengan bilangan kuantum v. Gunakan integral berikut [Levine, Molecular Spectroscopy, hlm. 154]: $\langle\psi_v'^{(0)}|x^3|\psi_v^{(0)}\rangle = [(v+1)(v+2)(v+3)/(8a^3)]^{1/2}\delta_{v',v+3} + 3[(v+1)/(2a)]^{3/2}\delta_{v',v+1} + 3[v/(2a)]^{3/2}\delta_{v',v-1} + [v(v-1)(v-2)/(8a^3)]^{1/2}\delta_{v',v-3}$, dengan $\psi^{(0)}$ fungsi gelombang osilator harmonik

dan a didefinisikan oleh (4.31). (c) Keadaan tak terganggu mana yang memberikan sumbangan terhadap $\psi_v^{(1)}$?

9.12 Ketika Hylleraas memulai perhitungannya pada helium, belum diketahui apakah ion hidrida terisolasi H^- merupakan entitas stabil. Hitung energi keadaan dasar H^- yang diprediksi fungsi coba (9.56). Bandingkan hasilnya dengan energi keadaan dasar atom hidrogen, −13,60 eV, dan tunjukkan bahwa fungsi variasi sederhana ini secara keliru menunjukkan H^- tidak stabil terhadap ionisasi menjadi atom hidrogen dan elektron. Fungsi variasi yang lebih rumit memberikan energi keadaan dasar −14,35 eV.

9.13 Ada lebih dari satu cara membagi Hamiltonian $\hat{H}$ menjadi bagian tak terganggu $\hat{H}^0$ dan gangguan $\hat{H}'$. Sebagai pengganti pembagian (9.40) dan (9.41), pertimbangkan pembagian Hamiltonian atom helium berikut: $\hat{H}^0 = -(\hbar^2/2m_e)\nabla_1^2 - (\hbar^2/2m_e)\nabla_2^2 - (Z-5/16)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_1) - (Z-5/16)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_2)$, dan $\hat{H}' = -(5/16)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_1) - (5/16)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_2) + e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$. Apakah fungsi gelombang tak terganggunya? Hitung $E^{(0)}$ dan $E^{(1)}$ bagi keadaan dasar. Lihat Bagian 9.4.

9.14 Dapat ditunjukkan bahwa [lihat Eyring, Walter, dan Kimball, hlm. 369]

$$1/r_{12} = \Sigma_{l=0}^{\infty} \Sigma_{m=-l}^{l} [4\pi/(2l+1)](r_<^l/r_>^{l+1})[Y_l^m(\theta_1,\varphi_1)]^* Y_l^m(\theta_2,\varphi_2) \qquad (9.124)$$

Pada (9.124), $r_<$ berarti nilai yang lebih kecil dari r_1 dan r_2, sedangkan $r_>$ adalah yang lebih besar. Substitusikan pengembangan ini ke dalam (9.52). Kemudian kalikan ruas kanan dengan $Y_0^0(\theta_1,\varphi_1)[Y_0^0(\theta_2,\varphi_2)]^*(4\pi)$, yang menurut (5.101) sama dengan 1. Gunakan ortonormalitas harmonik sferis [Persamaan (7.27)] untuk mengevaluasi integral sudut dalam delta Kronecker. Lakukan penjumlahan untuk menunjukkan bahwa $E^{(1)} = [16Z^6e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0^6)]\int_0^\infty\int_0^\infty \exp(-2Zr_1/a_0)\exp(-2Zr_2/a_0)(r_1^2r_2^2/r_>)dr_1dr_2$. Selanjutnya, integralkan lebih dahulu terhadap r_1 dan tuliskan integral r_1 sebagai jumlah integral dari 0 sampai r_2 dan dari r_2 sampai ∞. Pada rentang $0 \le r_1 \le r_2$, $r_> = r_2$; pada rentang $r_2 \le r_1 < \infty$, $r_> = r_1$. Gunakan integral tak tentu dalam Lampiran untuk melakukan integral r_1 sehingga diperoleh integral r_2, yang kemudian dievaluasi menggunakan integral dalam Lampiran. Tunjukkan bahwa hasilnya adalah (9.53).

9.15 Sebagian besar, walaupun tidak seluruh, pengaruh gerak inti dalam helium dapat dikoreksi dengan mengganti massa elektron m_e oleh massa tereduksi (6.59) dalam ungkapan energi. Energi helium berbanding lurus dengan pangkat berapakah dari m_e? Lihat Persamaan (9.63). Penggunaan μ sebagai pengganti m_e mengalikan energi yang dihitung berdasarkan massa inti tak berhingga dengan faktor berapa?

9.16 Gunakan (9.53) untuk memperkirakan $\langle 1/r_{12}\rangle^{-1}$ bagi atom He keadaan dasar.

9.17 Hitung $\langle r_1 \rangle$ untuk fungsi coba helium (9.56). Untuk menghemat waktu, gunakan hasil Soal 6.23.

9.18 Suatu sistem tak terganggu mempunyai tingkat energi terdegenerasi dua kali yang integral gangguannya bernilai $H'_{11} = 4b$, $H'_{12} = 2b$, dan $H'_{22} = 6b$, dengan b konstanta positif, $H'_{jk} \equiv \langle \psi_j^{(0)} | \hat{H}' | \psi_k^{(0)} \rangle$, serta $\langle \psi_j^{(0)} | \psi_k^{(0)} \rangle = \delta_{jk}$. (a) Dalam b, tentukan nilai $E^{(1)}$ untuk sistem terganggu. (b) Tentukan fungsi gelombang orde nol yang benar dan ternormalisasi.

9.19 Jelaskan mengapa tanpa menyelesaikan nilai-nilai $E^{(1)}$ pada Soal 9.18, kita dapat memastikan bahwa jumlah nilai $E^{(1)}$ adalah 10b.

9.20 Tunjukkan bahwa persamaan sekuler (9.82) dapat ditulis sebagai $\det[\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H} | \psi_i^{(0)} \rangle - (E_n^{(0)} + E_n^{(1)})\delta_{mi}] = 0$.

9.21 Verifikasi syarat normalisasi (9.85) bagi koefisien dalam suatu fungsi gelombang orde nol yang benar.

9.22 (a) Untuk partikel dalam kotak persegi bersisi l dengan titik asal pada x = 0, y = 0, tuliskan fungsi gelombang dan tingkat energinya. (b) Jika sistem pada bagian (a) diganggu oleh $\hat{H}' = b$ untuk $\frac{1}{4}l \leq x \leq \frac{3}{4}l$ dan $\frac{1}{4}l \leq y \leq \frac{3}{4}l$, dengan b suatu konstanta, sedangkan $\hat{H}' = 0$ di tempat lain, tentukan $E^{(1)}$ bagi keadaan dasar. Untuk tingkat energi tereksitasi pertama, tentukan nilai $E^{(1)}$ dan fungsi gelombang orde nol yang benar.

9.23 Untuk atom hidrogen yang diganggu oleh medan listrik seragam pada arah z, Hamiltonian gangguannya ialah $\hat{H}' \equiv e\mathscr{E}z = e\mathscr{E}r\cos\theta$, dengan $\mathscr{E}$ besar medan listrik. Pertimbangkan pengaruh $\hat{H}'$ terhadap tingkat energi n = 2 yang terdegenerasi empat kali. Karena $\hat{H}'$ berkomutasi dengan operator momentum sudut $\hat{L}_z$, gagasan Bagian 9.6 mengarahkan kita menyusun determinan sekuler dengan orbital kompleks atom hidrogen 2s, $2p_1$, $2p_0$, dan $2p_{-1}$ yang merupakan fungsi eigen $\hat{L}_z$. Susun determinan sekuler dengan menggunakan fakta bahwa unsur matriks $\hat{H}'$ antara keadaan yang mempunyai nilai bilangan kuantum m berbeda akan nol. Gunakan pula pertimbangan paritas untuk menunjukkan bahwa integral tertentu lainnya nol; lihat Soal 7.29. Evaluasi integral yang tidak nol, lalu tentukan koreksi energi orde pertama dan fungsi gelombang orde nol yang benar. Petunjuk: pilih urutan orbital agar determinan sekuler berbentuk diagonal-blok.

9.24 Pertimbangkan perlakuan gangguan terhadap konfigurasi helium 1s3s, 1s3p, dan 1s3d. Tanpa menyusun persamaan sekuler, tetapi hanya dengan analogi terhadap hasil Bagian 9.7, tuliskan 18 fungsi gelombang orde nol yang benar. Berapa banyak tingkat energi yang bersesuaian dengan masing-masing ketiga konfigurasi tersebut dan berapakah degenerasi setiap tingkat energi? Tingkat konfigurasi mana yang paling rendah? Yang paling tinggi?

9.25 Kita telah membahas konfigurasi helium yang hanya mengeksitasi satu elektron. Gunakan Persamaan (9.48) untuk memperoleh perkiraan kasar energi konfigurasi $2s^2$. Bandingkan dengan energi keadaan dasar ion He^+ untuk menunjukkan bahwa konfigurasi helium $2s^2$ tidak stabil terhadap ionisasi menjadi He^+ dan satu elektron. Jika perkiraan energi $2s^2$ yang lebih akurat diperoleh dengan memasukkan koreksi energi orde pertama, apakah perkiraan energi $2s^2$ tersebut bertambah atau berkurang?

9.26 Untuk helium, koreksi energi gangguan orde pertama adalah $e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$ yang dirata-ratakan terhadap fungsi gelombang tak terganggu yang benar. Tunjukkan bahwa apabila $\langle e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})\rangle$ dievaluasi menggunakan fungsi orde nol yang tidak benar 1s(1)2s(2) atau 1s(2)2s(1), hasilnya J_{1s2s} dalam setiap kasus. Kemudian tunjukkan bahwa ketika fungsi yang benar (9.103) dan (9.104) digunakan untuk mengevaluasi $\langle e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})\rangle$, hasilnya $J_{1s2s} \mp K_{1s2s}$, sebagaimana diperoleh dari persamaan sekuler. Sumbangan integral pertukaran terhadap energi dengan demikian timbul dari ketakterbedaan elektron dalam atom yang sama.

9.27 Evaluasi lim_{s→0}$(e^{as} - 1)/s$. Dalam (9.123), s bersesuaian dengan $\omega_{mn} \pm \omega$.

9.28 Evaluasi $\langle \psi_m^0 | Qx | \psi_n^0 \rangle$ bagi partikel dalam kotak satu dimensi.

9.29 Tentukan aturan seleksi bagi partikel bermuatan dalam kotak tiga dimensi yang dikenai radiasi tak terpolarisasi.

9.30 (a) Tetapkan f dalam (7.41) sama dengan $\hat{B}S$ dan operasikan $\hat{A}$ pada kedua ruas persamaan yang diperoleh. Kemudian kalikan dengan R* dan integralkan pada seluruh ruang untuk memperoleh aturan jumlah $\Sigma_i \langle R|\hat{A}|g_i\rangle\langle g_i|\hat{B}|S\rangle = \langle R|\hat{A}\hat{B}|S\rangle$, dengan fungsi g_i membentuk himpunan lengkap ortonormal, fungsi R dan S adalah sembarang fungsi yang berperilaku baik, operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ linear, dan penjumlahan meliputi seluruh anggota himpunan lengkap. Lihat pula Persamaan (7.111); untuk aturan jumlah lain, lihat A. Dalgarno, Rev. Mod. Phys., 35, 522 (1963). (b) Cara hampiran untuk mengevaluasi $E_n^{(2)}$ dalam (9.35) adalah mengganti $E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ dengan ΔE, suatu energi eksitasi rata-rata bagi masalah yang nilainya dapat diperkirakan secara kasar dari jarak tingkat tak terganggu. Gunakan aturan jumlah bagian (a) untuk menunjukkan bahwa penggantian tersebut memberikan $E_n^{(2)} \approx (1/\Delta E)\{\langle n|(\hat{H}')^2|n\rangle - [\langle n|\hat{H}'|n\rangle]^2\}$, dengan n menyatakan $\psi_n^{(0)}$.

9.31 Benar atau salah: (a) Setiap kombinasi linear penyelesaian persamaan Schrödinger bergantung waktu merupakan penyelesaian persamaan tersebut. (b) Setiap kombinasi linear penyelesaian persamaan Schrödinger tak bergantung waktu merupakan penyelesaian persamaan tersebut. (c) Rumus teori gangguan nondegenerasi $E^{(1)} = \langle \psi^{(0)}|\hat{H}'|\psi^{(0)}\rangle$ hanya berlaku bagi keadaan

dasar. (d) Fungsi gelombang eksak keadaan dasar atom He berbentuk f(1)f(2), dengan f(i), i = 1, 2, fungsi koordinat elektron i.

CATATAN INTEGRATIF: RELEVANSI AL-QUR'AN DAN HADIS

Catatan berikut merupakan materi tambahan untuk refleksi metodologis dan bukan bagian dari naskah asli. Ayat dan hadis tidak digunakan sebagai penurunan atau pembuktian matematis teori gangguan, melainkan sebagai landasan etika dan sikap ilmiah.

الَّذِي خَلَقَ سَبْعَ سَمَاوَاتٍ طِبَاقًا ۖ مَا تَرَىٰ فِي خَلْقِ الرَّحْمَٰنِ مِنْ تَفَاوُتٍ ۖ فَارْجِعِ الْبَصَرَ هَلْ تَرَىٰ مِنْ فُطُورٍ ۝ ثُمَّ ارْجِعِ الْبَصَرَ كَرَّتَيْنِ يَنْقَلِبْ إِلَيْكَ الْبَصَرُ خَاسِئًا وَهُوَ حَسِيرٌ

"(Dia juga) yang menciptakan tujuh langit berlapis-lapis. Kamu tidak akan melihat pada ciptaan Tuhan Yang Maha Pengasih ketidakseimbangan sedikit pun. Maka, lihatlah sekali lagi, adakah kamu melihat suatu cela? Kemudian, lihatlah sekali lagi dan sekali lagi. Niscaya pandanganmu akan kembali kepadamu dalam keadaan kecewa dan letih." (QS Al-Mulk [67]: 3–4; terjemahan makna)

Relevansinya terletak pada dorongan untuk melakukan pengamatan dan pemeriksaan berulang secara teliti. Dalam teori gangguan, validitas pendekatan diperiksa melalui orde koreksi, konvergensi deret, perbandingan dengan eksperimen, dan pengujian terhadap batas-batas penerapan. Ayat ini tidak menyatakan rumus teori gangguan; hubungan yang dikemukakan adalah refleksi metodologis tentang ketelitian dan pemeriksaan berulang terhadap keteraturan alam.

أَنْتُمْ أَعْلَمُ بِأَمْرِ دُنْيَاكُمْ

"Kalian lebih mengetahui urusan dunia kalian." (HR Muslim, Ṣaḥīḥ Muslim, Kitāb al-Faḍā'il, hadis tentang penyerbukan kurma; hadis sahih)

Hadis ini menegaskan pentingnya keahlian dan pengetahuan teknis dalam urusan empiris. Pengembangan teori kuantum, perhitungan gangguan, spektroskopi, dan kimia komputasi menuntut kompetensi matematika, eksperimen, serta verifikasi ilmiah. Relevansinya bersifat etis-epistemologis: penggunaan metode ilmiah merupakan amanah keahlian, sedangkan hadis tersebut bukan dalil langsung bagi bentuk persamaan fisika tertentu.

BAB 10
SPIN ELEKTRON DAN TEOREMA SPIN-STATISTIK

10.1 Spin Elektron

Semua kimiawan mengenal warna kuning yang diberikan atom natrium kepada nyala. Garis kuning terkuat (garis D) dalam spektrum natrium sebenarnya terdiri atas dua garis yang terletak sangat berdekatan. Garis D natrium berasal dari transisi konfigurasi tereksitasi $1s^2 2s^2 2p^6 3p$ menuju keadaan dasar. Sifat dublet garis ini dan garis-garis lain dalam spektrum Na menunjukkan adanya pelipatan dua jumlah keadaan yang semula diperkirakan tersedia bagi elektron valensi.

Untuk menjelaskan struktur halus spektrum atom ini, Uhlenbeck dan Goudsmit pada tahun 1925 mengusulkan bahwa elektron mempunyai momentum sudut intrinsik (bawaan), selain momentum sudut orbital yang timbul karena geraknya mengelilingi inti. Apabila elektron dibayangkan sebagai bola bermuatan yang berputar pada salah satu diameternya, asal momentum sudut intrinsik tersebut tampak mudah dibayangkan. Dari sinilah muncul istilah momentum sudut spin, atau singkatnya spin. Akan tetapi, "spin" elektron bukanlah efek klasik dan gambaran elektron yang berputar pada suatu sumbu tidak mempunyai realitas fisik. Momentum sudut intrinsiknya nyata, tetapi tidak ada model yang mudah divisualisasikan yang dapat menerangkan asalnya dengan benar. Kita tidak dapat berharap memahami partikel mikroskopik semata-mata berdasarkan model yang diambil dari pengalaman dunia makroskopik. Partikel elementer lain selain elektron juga mempunyai momentum sudut spin.

Pada tahun 1928, Dirac mengembangkan mekanika kuantum relativistik bagi elektron; dalam perlakuan tersebut, spin elektron muncul secara alamiah.

Dalam mekanika kuantum nonrelativistik yang dibahas di sini, spin elektron harus dimasukkan sebagai hipotesis tambahan. Kita telah mempelajari bahwa setiap sifat fisik mempunyai operator linear Hermitian yang bersesuaian dalam mekanika kuantum. Untuk sifat seperti momentum sudut orbital, operator kuantum dapat dibentuk dari ungkapan klasik dengan mengganti p_x, p_γ, dan p_z dengan operator yang sesuai. Momentum sudut spin intrinsik suatu partikel mikroskopik tidak mempunyai analog dalam mekanika klasik, sehingga cara tersebut tidak dapat digunakan untuk membangun operator spin. Untuk keperluan kita, operator spin cukup dinyatakan dengan simbol tanpa memberikan bentuk eksplisitnya.

Sebagai analog operator momentum sudut orbital $\hat{L}^2$, $\hat{L}_x$, $\hat{L}_\gamma$, dan $\hat{L}_z$, diperkenalkan operator momentum sudut spin $\hat{S}^2$, $\hat{S}_x$, $\hat{S}_\gamma$, dan $\hat{S}_z$, yang dipostulatkan linear dan Hermitian. $\hat{S}^2$ adalah operator untuk kuadrat besar

momentum sudut spin total suatu partikel, sedangkan $\hat{S}\_z$ adalah operator untuk komponen-z momentum sudut spin partikel.

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x{}^2 + \hat{S}_y{}^2 + \hat{S}\_z^2 \tag{10.1}$$

Operator momentum sudut spin dipostulatkan memenuhi relasi komutasi yang sama dengan operator momentum sudut orbital. Dengan analogi terhadap $[\hat{L}_x,\hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}\_z$, $[\hat{L}_y,\hat{L}\_z] = i\hbar\hat{L}_x$, dan $[\hat{L}\_z,\hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$, diperoleh

$$[\hat{S}_x,\hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}\_z, \quad [\hat{S}_y,\hat{S}\_z] = i\hbar\hat{S}_x, \quad [\hat{S}\_z,\hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y \tag{10.2}$$

Dari (10.1) dan (10.2), dengan aljabar operator yang sama seperti yang dipakai untuk memperoleh persamaan momentum sudut orbital, diperoleh

$$[\hat{S}^2,\hat{S}_x] = [\hat{S}^2,\hat{S}_y] = [\hat{S}^2,\hat{S}\_z] = 0 \tag{10.3}$$

Karena Pers. (10.1) dan (10.2) mempunyai bentuk yang sama dengan relasi momentum sudut umum, nilai eigen $\hat{S}^2$ adalah

$$s(s+1)\hbar^2, \quad s = 0, ½, 1, 3/2, \ldots \tag{10.4}$$

dan nilai eigen $\hat{S}\_z$ adalah

$$m_s\hbar, \quad m_s = -s, -s+1, \ldots, s-1, s \tag{10.5}$$

Bilangan kuantum s disebut spin partikel. Walaupun pembahasan momentum sudut umum tidak membatasi elektron pada satu nilai s, eksperimen menunjukkan bahwa semua elektron mempunyai s = ½. Proton dan neutron juga mempunyai s = ½. Pion mempunyai s = 0, sedangkan foton mempunyai s = 1. Namun, Pers. (10.5) tidak berlaku untuk foton. Karena foton bergerak dengan kelajuan c dalam vakum dan bersifat relativistik, foton hanya dapat mempunyai $m_s = +1$ atau $m_s = -1$, tetapi tidak $m_s = 0$. Kedua nilai tersebut bersesuaian dengan cahaya terpolarisasi sirkular kiri dan kanan.

Untuk s = ½, besar momentum sudut spin total elektron adalah akar kuadrat dari nilai eigen pada (10.4):

$$[½(½+1)\hbar^2]^{1/2} = (\sqrt{3}/2)\hbar \tag{10.6}$$

Untuk s = ½, Pers. (10.5) memberikan dua nilai eigen $\hat{S}\_z$, yaitu $+½\hbar$ dan $-½\hbar$. Fungsi eigen spin elektron yang bersesuaian dilambangkan dengan α dan β:

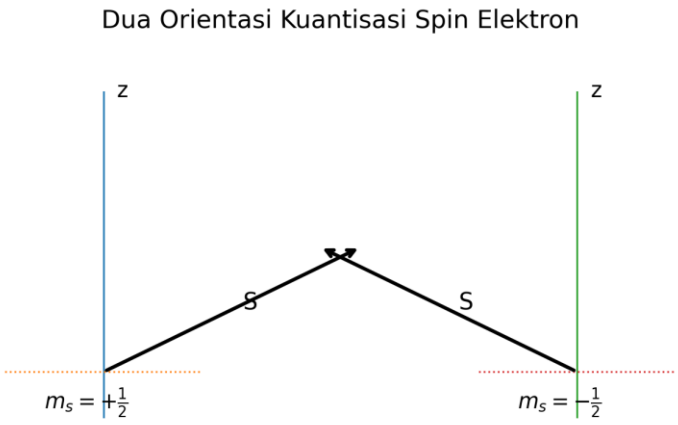
$$\hat{S}\_z\,\alpha = +½\hbar\,\alpha \tag{10.7}$$

$$\hat{S}\_z\,\beta = -½\hbar\,\beta \tag{10.8}$$

Karena $\hat{S}_z$ berkomutasi dengan $\hat{S}^2$, fungsi eigen $\hat{S}_z$ dapat sekaligus dipilih sebagai fungsi eigen $\hat{S}^2$ dengan nilai eigen $s(s+1)\hbar^2$ untuk $s = ½$:

$$\hat{S}^2\alpha = ¾\hbar^2\alpha, \quad \hat{S}^2\beta = ¾\hbar^2\beta \tag{10.9}$$

$\hat{S}_z$ tidak berkomutasi dengan $\hat{S}_x$ atau $\hat{S}_y$, sehingga α dan β bukan fungsi eigen kedua operator tersebut. Istilah spin atas dan spin bawah masing-masing merujuk pada $m_s = +½$ dan $m_s = -½$. Dua kemungkinan nilai m_s inilah yang kemudian menjelaskan pelipatan dua garis spektrum logam alkali.



Gambar 10.1. Dua orientasi yang diizinkan bagi vektor spin elektron terhadap sumbu z. Vektor spin terkuantisasi dan bukan menggambarkan rotasi klasik elektron.

Fungsi gelombang yang telah dibahas sebelumnya merupakan fungsi koordinat ruang partikel, $\psi = \psi(x,y,z)$. Pertanyaan yang muncul ialah: variabel apakah yang dipakai untuk fungsi eigen spin α dan β? Kadang-kadang diperkenalkan suatu koordinat spin ω tanpa benar-benar menentukan hakikatnya. Cara yang paling sering dipakai adalah menjadikan bilangan kuantum spin m_s sebagai variabel fungsi eigen spin. Cara ini tidak biasa dibandingkan fungsi gelombang ruang, tetapi karena hanya ada dua fungsi eigen spin elektron dan dua nilai eigennya, pilihan ini sangat praktis.

$$\alpha = \alpha(m_s), \quad \beta = \beta(m_s) \tag{10.10}$$

Seperti biasa, fungsi eigen harus dinormalisasi. Untuk fungsi gelombang ruang satu partikel, tiga variabel kontinu membentang dari $-\infty$ sampai $+\infty$ sehingga normalisasi dinyatakan oleh $\iiint |\psi(x,y,z)|^2\, dx\, dy\, dz = 1$. Variabel m_s pada fungsi spin elektron hanya mengambil dua nilai diskret, +½ dan −½. Karena itu, normalisasi fungsi spin satu elektron berarti

$$\Sigma_{m_s} |\alpha(m_s)|^2 = 1, \quad \Sigma_{m_s} |\beta(m_s)|^2 = 1 \qquad (m_s = -½, +½) \tag{10.11}$$

Karena α dan β berhubungan dengan nilai eigen berbeda dari operator Hermitian $\hat{S}_z$, keduanya ortogonal:

$$\Sigma_{ms}\, \alpha^*(m_s)\beta(m_s) = 0 \tag{10.12}$$

Dengan memilih $\alpha(m_s) = \delta_{ms,½}$ dan $\beta(m_s) = \delta_{ms,-½}$, dengan δ sebagai delta Kronecker, Pers. (10.11) dan (10.12) dapat dipenuhi.

Apabila fungsi gelombang lengkap elektron mencakup variabel ruang dan spin, normalisasinya ditulis

$$\Sigma_{ms} \iiint |\psi(x,y,z,m_s)|^2\, dx\, dy\, dz = 1 \tag{10.13}$$

Notasi $\int|\psi(x,y,z,m_s)|^2\, d\tau$ akan dipakai untuk menyatakan penjumlahan atas variabel spin sekaligus integrasi pada seluruh rentang variabel ruang, seperti dalam (10.13). Simbol $\int dy$ akan digunakan untuk integrasi pada seluruh rentang variabel ruang sistem.

Elektron saat ini dipandang sebagai partikel elementer titik tanpa substruktur. Eksperimen tumbukan elektron–positron berenergi tinggi tidak menunjukkan bukti ukuran elektron yang tidak nol dan memberikan batas atas 3×10^{-19} m bagi jari-jari elektron [D. Bourilkov, Phys. Rev. D, 62, 076005 (2000)]. Proton dan neutron tersusun atas kuark sehingga bukan partikel elementer. Jari-jari muatan rms proton sekitar $0{,}88 \times 10^{-15}$ m.

10.2 Spin dan Atom Hidrogen

Fungsi gelombang yang menetapkan keadaan suatu elektron bergantung tidak hanya pada koordinat x, y, dan z, tetapi juga pada keadaan spin elektron. Kita sekarang menanyakan pengaruhnya terhadap fungsi gelombang dan tingkat energi atom hidrogen.

Dengan ketelitian yang sangat baik, operator Hamilton untuk sistem elektron tidak melibatkan variabel spin, melainkan hanya fungsi koordinat ruang dan turunan terhadap koordinat ruang. Karena itu, fungsi gelombang keadaan stasioner satu elektron dapat dipisahkan menjadi hasil kali bagian ruang dan bagian spin:

$$\psi(x,y,z)\, g(m_s)$$

Di sini $g(m_s)$ adalah α atau β, bergantung pada $m_s = +½$ atau $-½$. Secara lebih umum, $g(m_s)$ dapat berupa kombinasi linear α dan β, yaitu $g(m_s) = c_1\alpha + c_2\beta$. Karena operator Hamilton tidak bekerja pada fungsi spin,

$$\hat{H}[\psi(x,y,z)g(m_s)] = g(m_s)\hat{H}\psi(x,y,z) = E[\psi(x,y,z)g(m_s)]$$

dan energi yang diperoleh sama seperti sebelum spin diperhitungkan. Satu-satunya perubahan ialah pelipatan dua jumlah keadaan yang mungkin. Alih-alih

satu keadaan $\psi(x,y,z)$, terdapat dua keadaan $\psi(x,y,z)\alpha$ dan $\psi(x,y,z)\beta$. Dengan memasukkan spin, degenerasi tingkat energi atom hidrogen menjadi $2n^2$, bukan n^2.

10.3 Teorema Spin-Statistik

Misalkan terdapat suatu sistem yang tersusun atas beberapa partikel identik. Dalam mekanika klasik, identitas partikel tidak menimbulkan konsekuensi khusus. Bola-bola biliar identik yang menggelinding di atas meja, misalnya, tetap dapat dibedakan dengan mengikuti lintasan setiap bola. Bola nomor satu bergerak pada lintasan tertentu, bola nomor dua pada lintasan lain, dan seterusnya, sesuai hukum Newton. Jadi, walaupun identik, masing-masing bola dapat dibedakan melalui lintasannya.

Dalam mekanika kuantum, prinsip ketidakpastian menyatakan bahwa lintasan tepat suatu "partikel" mikroskopik tidak dapat diikuti. Apabila partikel-partikel mempunyai massa, muatan, atau spin yang berbeda, sifat tersebut dapat dipakai untuk membedakannya. Akan tetapi, apabila semuanya identik, satu-satunya cara klasik untuk membedakan—yakni mengikuti lintasan—hilang. Karena itu, fungsi gelombang sistem partikel identik yang saling berinteraksi tidak boleh membedakan partikel-partikel tersebut. Dalam perlakuan perturbasi keadaan tereksitasi helium pada Bab 9, fungsi 1s(1)2s(2), yang menyatakan elektron 1 berada pada orbital 1s dan elektron 2 pada orbital 2s, bukan fungsi orde-nol yang benar. Fungsi yang benar adalah $2^{-1/2}[1s(1)2s(2) \pm 1s(2)2s(1)]$, yang tidak menetapkan elektron mana yang menempati orbital tertentu. Jika partikel identik berjauhan sehingga fungsi gelombangnya tidak tumpang tindih, partikel-partikel itu dapat diperlakukan sebagai dapat dibedakan.

Fungsi gelombang sistem n partikel mikroskopik identik bergantung pada variabel ruang dan spin masing-masing partikel. Untuk partikel 1, variabel tersebut adalah x_1, y_1, z_1, dan m_{s1}. Kita gunakan q_1 untuk menyatakan keempat variabel ini, sehingga $\psi = \psi(q_1,q_2,\ldots,q_n)$. Operator pertukaran atau permutasi $\hat{P}_{12}$ didefinisikan sebagai operator yang menukar seluruh koordinat partikel 1 dan 2:

$$\hat{P}_{12}\, f(q_1,q_2,q_3,\ldots,q_n) = f(q_2,q_1,q_3,\ldots,q_n) \tag{10.14}$$

Sebagai contoh, pengaruh $\hat{P}_{12}$ pada fungsi dengan elektron 1 berada pada orbital 1s berspin atas dan elektron 2 berada pada orbital 3s berspin bawah adalah

$$\hat{P}_{12}[1s(1)\alpha(1)\ 3s(2)\beta(2)] = 1s(2)\alpha(2)\ 3s(1)\beta(1) \tag{10.15}$$

Menerapkan $\hat{P}_{12}$ dua kali tidak menghasilkan perubahan bersih, sehingga $\hat{P}_{12}^2 = 1$. Jika w_i adalah fungsi eigen $\hat{P}_{12}$ dengan nilai eigen c_i, maka $\hat{P}_{12}w_i = c_i w_i$. Penerapan kedua kalinya memberikan $w_i = c_i^2 w_i$; karena fungsi eigen tidak nol, $c_i^2 = 1$ dan $c_i = \pm 1$. Jadi, nilai eigen operator pertukaran adalah +1 dan −1.

Untuk nilai eigen +1,

$$w_+(q_2,q_1,...,q_n) = w_+(q_1,q_2,...,q_n) \tag{10.16}$$

Fungsi yang tidak berubah ketika partikel 1 dan 2 ditukar disebut simetris terhadap pertukaran kedua partikel. Untuk nilai eigen −1,

$$w_-(q_2,q_1,...,q_n) = -w_-(q_1,q_2,...,q_n) \tag{10.17}$$

Fungsi w_- disebut antisimetris terhadap pertukaran partikel 1 dan 2. Fungsi sembarang tidak harus simetris atau antisimetris. Sifat simetri terhadap pertukaran partikel jangan disamakan dengan sifat genap atau ganjil terhadap inversi ruang. Sebagai contoh, $x_1 + x_2$ simetris terhadap pertukaran 1 dan 2 tetapi merupakan fungsi ganjil terhadap inversi; $x_1^2 + x_2^2$ simetris dan genap.

Secara umum, operator $\hat{P}_{ik}$ didefinisikan oleh

$$\hat{P}_{ik}\, f(q_1,...,q_i,...,q_k,...,q_n) = f(q_1,...,q_k,...,q_i,...,q_n) \tag{10.18}$$

Nilai eigen $\hat{P}_{ik}$ juga +1 dan −1. Karena partikel identik tidak dapat dibedakan, cara pemberian label tidak boleh mengubah keadaan sistem. Dua fungsi gelombang yang berbeda hanya karena label i dan k dipertukarkan harus menyatakan keadaan yang sama, sehingga keduanya hanya boleh berbeda dengan suatu faktor konstan. Maka fungsi gelombang sistem n partikel identik harus merupakan fungsi eigen setiap $\hat{P}_{ik}$, dan oleh sebab itu harus simetris atau antisimetris terhadap pertukaran setiap pasangan partikel identik. Pernyataan ini disebut postulat simetrisasi.

Bukti eksperimen—termasuk struktur tabel periodik—menunjukkan bahwa untuk elektron hanya kasus antisimetris yang terjadi. Dengan demikian, fungsi gelombang sistem elektron harus antisimetris terhadap pertukaran sembarang dua elektron.

Pada tahun 1926, Dirac menyimpulkan bahwa elektron memerlukan fungsi gelombang antisimetris, sedangkan foton memerlukan fungsi gelombang simetris. Data eksperimen tahun 1930 kemudian menunjukkan bahwa partikel α, yang mempunyai s = 0, memerlukan fungsi simetris. Akhirnya disadari bahwa jenis simetri ditentukan oleh spin partikel. Partikel dengan spin setengah-bulat, s = ½, 3⁄2, dan seterusnya, memerlukan fungsi gelombang antisimetris. Partikel dengan spin bulat, s = 0, 1, dan seterusnya, memerlukan fungsi gelombang simetris. Pauli pada tahun 1940 membuktikan hasil ini menggunakan teori medan kuantum relativistik. Partikel yang memerlukan fungsi antisimetris disebut fermion, sedangkan partikel yang memerlukan fungsi simetris disebut boson. Pernyataan hubungan antara spin dan sifat statistik ini disebut teorema spin-statistik.

Berbagai pembuktian teorema spin-statistik telah diajukan. Lihat I. Duck dan E. C. G. Sudarshan, Pauli and the Spin-Statistics Theorem, World Scientific, 1997; Am. J. Phys., 66, 284 (1998); serta Sudarshan dan Duck, Pramana-J. Phys., 61,

645 (2003). Sejumlah eksperimen mengonfirmasi validitas teorema ini dengan ketelitian sangat tinggi; lihat G. M. Tino, Fortschr. Phys., 48, 537 (2000).

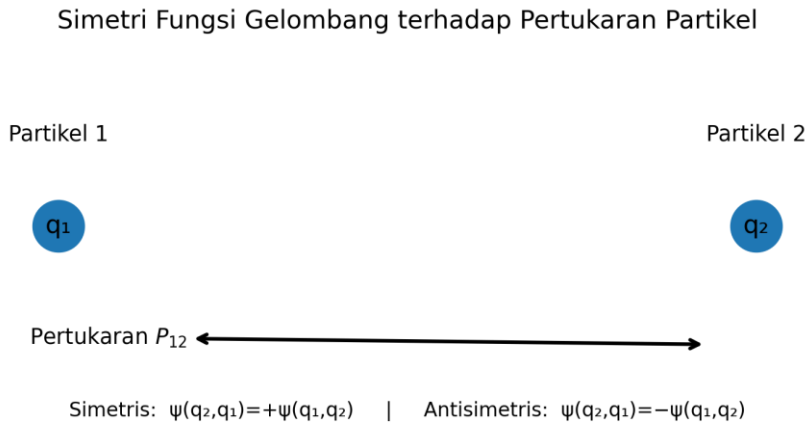
Teorema spin-statistik mempunyai konsekuensi penting bagi sistem fermion identik. Syarat antisimetri menyatakan

$$\psi(q_1,q_2,q_3,\ldots,q_n) = -\psi(q_2,q_1,q_3,\ldots,q_n) \tag{10.19}$$

Jika elektron 1 dan 2 mempunyai koordinat yang sama—$x_1 = x_2$, $y_1 = y_2$, $z_1 = z_2$, dan $m_{s1} = m_{s2}$—maka $q_2 = q_1$. Memasukkannya ke (10.19) menghasilkan

$$\begin{aligned}&\psi(q_1,q_1,q_3,\ldots,q_n) = -\psi(q_1,q_1,q_3,\ldots,q_n)\\ &\Rightarrow\ 2\psi = 0\ \Rightarrow\ \psi(q_1,q_1,q_3,\ldots,q_n) = 0\end{aligned} \tag{10.20}$$

Jadi, dua elektron dengan spin yang sama mempunyai probabilitas nol untuk ditemukan pada titik yang sama dalam ruang tiga dimensi. Karena ψ kontinu, probabilitas menemukan dua elektron berspin sama sangat berdekatan juga kecil. Syarat antisimetri memaksa elektron berspin sejajar untuk cenderung saling berjauhan. Hal ini sering disebut tolakan Pauli, tetapi "tolakan" tersebut bukan gaya fisik baru; ia merupakan konsekuensi bentuk antisimetris fungsi gelombang.



Gambar 10.2. Pertukaran label partikel identik menghasilkan fungsi gelombang simetris untuk boson dan antisimetris untuk fermion.

Syarat fungsi simetris atau antisimetris juga berlaku bagi sistem yang mengandung dua atau lebih partikel komposit identik. Sebagai contoh, inti ^{16}O mempunyai 8 proton dan 8 neutron. Setiap proton dan neutron adalah fermion dengan s = ½. Pertukaran dua inti ^{16}O menukar 16 fermion dan mengalikan fungsi gelombang molekul dengan $(-1)^{16} = +1$. Karena itu, fungsi gelombang molekul $^{16}O_2$ harus simetris terhadap pertukaran koordinat inti. Syarat ini memengaruhi degenerasi fungsi gelombang molekul dan menimbulkan bilangan simetri dalam fungsi partisi rotasi.

Untuk pertukaran dua partikel komposit identik yang masing-masing mengandung m boson identik dan n fermion identik, fungsi gelombang dikalikan oleh

$(+1)^m(-1)^n = (-1)^n$. Dengan demikian, partikel komposit adalah fermion jika mengandung jumlah fermion ganjil dan menjadi boson jika jumlah fermionnya genap.

Dalam penerapan prinsip variasi untuk memperoleh fungsi gelombang elektronik hampiran atom dan molekul, syarat bahwa fungsi coba harus berperilaku baik mencakup syarat antisimetri.

10.4 Atom Helium

Kita meninjau kembali atom helium dari sudut pandang spin elektron dan syarat antisimetri. Dalam perlakuan perturbasi helium pada Bagian 9.3, fungsi gelombang orde-nol keadaan dasar adalah 1s(1)1s(2). Untuk memasukkan spin, fungsi ruang ini harus dikalikan dengan fungsi eigen spin. Karena setiap elektron mempunyai dua keadaan spin, sepintas terdapat empat fungsi spin dua-elektron: α(1)α(2), β(1)β(2), α(1)β(2), dan α(2)β(1).

Dua fungsi pertama tidak bermasalah, tetapi fungsi ketiga dan keempat melanggar ketakterbedaan partikel identik. Misalnya, α(1)β(2) secara eksplisit mengatakan elektron 1 berspin atas dan elektron 2 berspin bawah. Jika $\hat{P}_{12}$ diterapkan, dua fungsi pertama simetris, sedangkan dua fungsi terakhir tidak simetris maupun antisimetris sehingga tidak dapat diterima.

Seperti pada keadaan tereksitasi helium, kombinasi linear ternormalisasi yang benar adalah

$$2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) \pm \beta(1)\alpha(2)] \tag{10.21}$$

Kombinasi bertanda plus simetris dan kombinasi bertanda minus antisimetris terhadap pertukaran elektron. Normalisasinya mengikuti ortonormalitas α dan β. Dengan demikian, empat fungsi eigen spin dua-elektron yang ternormalisasi dan mempunyai sifat pertukaran yang benar adalah:

$$\alpha(1)\alpha(2) \tag{10.22}$$

$$\beta(1)\beta(2) \tag{10.23}$$

$$[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)]/\sqrt{2} \tag{10.24}$$

$$[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]/\sqrt{2} \tag{10.25}$$

Tiga fungsi pertama simetris; fungsi terakhir antisimetris. Fungsi ruang 1s(1)1s(2) untuk keadaan dasar helium bersifat simetris. Karena fungsi gelombang elektronik lengkap harus antisimetris, fungsi ruang ini harus dikalikan oleh satu-satunya fungsi spin antisimetris. Maka fungsi gelombang orde-nol keadaan dasar helium, termasuk spin, adalah

$$\psi^{(0)} = 1s(1)1s(2) \cdot 2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)] \tag{10.26}$$

Fungsi $\psi^{(0)}$ adalah fungsi eigen $\hat{P}_{12}$ dengan nilai eigen -1. Karena Hamiltonian tidak mengandung suku spin dengan ketelitian sangat baik, faktor spin tidak mengubah energi. Keadaan dasar helium tetap tidak terdegenerasi ketika spin diperhitungkan.

Untuk memperlihatkan hal ini pada kalkulasi variasi, ambillah fungsi coba $\Phi = f(r_1,r_2,r_{12})2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$, dengan f ternormalisasi dan simetris terhadap pertukaran koordinat kedua elektron. Karena $\hat{H}$ tidak bekerja pada fungsi spin, jumlah atas m_{s1} dan m_{s2} hanya memberikan satu akibat normalisasi spin, dan integral variasi kembali menjadi $\iint f^*\hat{H}f\, dv_1 dv_2$, sama seperti sebelum spin dimasukkan.

Untuk keadaan tereksitasi terendah helium, fungsi ruang orde-nol adalah $2^{-1/2}[1s(1)2s(2) - 2s(1)1s(2)]$, yang antisimetris. Karena itu, fungsi ini harus dikalikan oleh salah satu dari tiga fungsi spin simetris, sehingga tingkat yang sebelumnya tidak terdegenerasi menjadi terdegenerasi tiga kali:

$$2^{-1/2}[1s(1)2s(2) - 2s(1)1s(2)]\ \alpha(1)\alpha(2) \tag{10.27}$$

$$2^{-1/2}[1s(1)2s(2) - 2s(1)1s(2)]\ \beta(1)\beta(2) \tag{10.28}$$

$$2^{-1/2}[1s(1)2s(2) - 2s(1)1s(2)] \cdot 2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] \tag{10.29}$$

Untuk keadaan tereksitasi berikutnya, syarat antisimetri fungsi total memberikan

$$2^{-1/2}[1s(1)2s(2) + 2s(1)1s(2)] \cdot 2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)] \tag{10.30}$$

Pertimbangan yang sama berlaku untuk keadaan 1s2p.

10.5 Prinsip Eksklusi Pauli

Pada atom hidrogen dan helium, faktor spin dan syarat antisimetri terutama mengubah degenerasi tingkat energi dan, kecuali efek kecil yang dibahas kemudian, tidak mengubah energi yang telah diperoleh. Untuk litium, situasinya sangat berbeda.

Jika tolakan antarelektron pada atom Li diperlakukan sebagai perturbasi, fungsi gelombang tak terganggu merupakan hasil kali tiga fungsi mirip-hidrogen. Dugaan awal untuk keadaan dasar adalah

$$\psi^{(0)} = 1s(1)1s(2)1s(3) \tag{10.31}$$

Energi orde-nolnya ialah $E^{(0)} = -27(e^2/8\pi\varepsilon_0 a_0) = -27(13{,}606\text{ eV}) = -367{,}4\text{ eV}$. Koreksi energi orde pertama berasal dari tiga tolakan pasangan elektron. Karena ketiga integral sama setelah pelabelan variabel integrasi dipertukarkan, $E^{(1)} = 3(5Z/4)(e^2/8\pi\varepsilon_0 a_0) = 153{,}1\text{ eV}$, sehingga $E^{(0)} + E^{(1)} = -214{,}3\text{ eV}$.

Menurut prinsip variasi, nilai ini seharusnya sama dengan atau lebih tinggi daripada energi keadaan dasar sejati. Energi eksperimen, yang diperoleh dari jumlah tiga energi ionisasi, adalah −203,5 eV. Hasil −214,3 eV justru lebih rendah dan melanggar prinsip variasi. Konfigurasi $1s^3$ juga bertentangan dengan energi ionisasi pertama yang rendah dan seluruh bukti kimia. Jika pola ini diteruskan, unsur bernomor atom Z akan mempunyai konfigurasi dasar $1s^z$ dan periodisitas unsur tidak akan muncul.

Kesalahannya adalah mengabaikan spin dan syarat antisimetri. Fungsi 1s(1)1s(2)1s(3) simetris terhadap pertukaran semua elektron. Agar fungsi total antisimetris, fungsi ruang ini harus dikalikan oleh fungsi spin tiga-elektron yang sepenuhnya antisimetris. Fungsi spin simetris mudah dibentuk, misalnya α(1)α(2)α(3), tetapi fungsi spin tiga-elektron yang sepenuhnya antisimetris dan tidak nol tidak dapat dibentuk dari hanya dua fungsi α dan β.

Untuk membangun fungsi antisimetris secara sistematis, gunakan f, g, dan h sebagai tiga fungsi koordinat elektron—ruang, spin, atau keduanya—dan mulai dari

$$f(1)g(2)h(3) \tag{10.32}$$

Penerapan $\hat{P}_{12}$, $\hat{P}_{13}$, dan $\hat{P}_{23}$ menghasilkan

$$f(2)g(1)h(3),\quad f(3)g(2)h(1),\quad f(1)g(3)h(2) \tag{10.33}$$

Penerapan pertukaran lebih lanjut menghasilkan dua permutasi yang belum tercakup:

$$f(3)g(1)h(2),\quad f(2)g(3)h(1) \tag{10.34}$$

Keenam fungsi tersebut adalah semua 3! permutasi tiga elektron pada f, g, dan h. Jika salah satu merupakan solusi persamaan Schrödinger dengan nilai eigen E, semuanya juga merupakan solusi dengan E yang sama karena identitas partikel; setiap kombinasi linearnya juga merupakan fungsi eigen dengan nilai eigen yang sama.

Kombinasi linear umum berbentuk

$$\begin{aligned} &c_1 f(1)g(2)h(3) + c_2 f(2)g(1)h(3) + \\ &c_3 f(3)g(2)h(1) + c_4 f(1)g(3)h(2) \\ &+ c_5 f(3)g(1)h(2) + c_6 f(2)g(3)h(1) \end{aligned} \tag{10.35}$$

Syarat nilai eigen −1 terhadap setiap pertukaran memberikan $c_2 = -c_1$, $c_3 = -c_1$, $c_4 = -c_1$, $c_5 = c_1$, dan $c_6 = c_1$. Karena itu, kombinasi antisimetris adalah

$$\begin{aligned} &c_1\{f(1)g(2)h(3) - f(2)g(1)h(3) - \\ &\quad f(3)g(2)h(1) - f(1)g(3)h(2) \\ &\quad + f(3)g(1)h(2) + f(2)g(3)h(1)\} \end{aligned} \tag{10.36}$$

Jika f, g, dan h ortonormal, semua suku silang menghilang saat normalisasi dan diperoleh $c_1 = 1/\sqrt{6}$. Kombinasi (10.36) merupakan ekspansi determinan orde tiga:

$$\begin{aligned} &1/\sqrt{6} \cdot | \, f(1) \;\; g(1) \;\; h(1) \, | \\ &\qquad | \, f(2) \;\; g(2) \;\; h(2) \, | \\ &\qquad | \, f(3) \;\; g(3) \;\; h(3) \, | \end{aligned} \tag{10.37}$$

Antisimetrinya langsung tampak karena pertukaran dua elektron sama dengan pertukaran dua baris determinan, yang mengalikan determinan dengan −1.

Untuk membuktikan tidak adanya fungsi spin antisimetris tiga-elektron, ambillah f = α, g = β, dan h = α. Determinan menjadi

$$\begin{aligned} &1/\sqrt{6} \cdot | \, \alpha(1) \;\; \beta(1) \;\; \alpha(1) \, | \\ &\qquad | \, \alpha(2) \;\; \beta(2) \;\; \alpha(2) \, | \\ &\qquad | \, \alpha(3) \;\; \beta(3) \;\; \alpha(3) \, | \end{aligned} \tag{10.38}$$

Walaupun bentuk ini antisimetris, nilainya nol karena kolom pertama dan ketiga identik. Bagaimanapun f, g, dan h dipilih dari α dan β, setidaknya dua kolom akan sama. Jadi, tidak ada fungsi spin tiga-elektron antisimetris yang tidak nol.

Sekarang fungsi f, g, dan h diambil sebagai fungsi gabungan ruang dan spin. Pilihan pertama adalah

$$f(1) = 1s(1)\alpha(1) \tag{10.39}$$

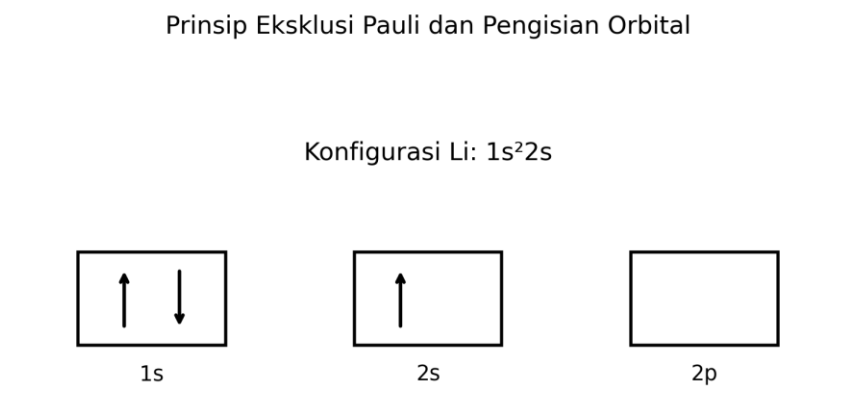
Fungsi seperti ini disebut spin-orbital: hasil kali orbital ruang satu elektron dengan fungsi spin satu elektron. Jika g(1) juga dipilih 1s(1)α(1), dua kolom determinan identik dan fungsi gelombang menghilang. Ini adalah kasus khusus prinsip eksklusi Pauli: tidak ada dua elektron yang dapat menempati spin-orbital yang sama. Dengan kata lain, tidak ada dua elektron dalam atom yang mempunyai semua bilangan kuantum yang sama.

Karena itu, pilih g(1) = 1s(1)β(1), sehingga dua elektron dengan spin berlawanan menempati orbital 1s. Untuk h, tidak dapat digunakan 1sα atau 1sβ karena determinan akan nol. Pilihan h(1) = 2s(1)α(1) menghasilkan konfigurasi keadaan dasar Li yang dikenal, $1s^2 2s$, dan fungsi gelombang orde-nol

$$\begin{aligned} \psi^{(0)} = 1/\sqrt{6} \cdot | \, &1s(1)\alpha(1) \;\; 1s(1)\beta(1) \;\; 2s(1)\alpha(1) \, | \\ | \, &1s(2)\alpha(2) \;\; 1s(2)\beta(2) \;\; 2s(2)\alpha(2) \, | \\ | \, &1s(3)\alpha(3) \;\; 1s(3)\beta(3) \;\; 2s(3)\alpha(3) \, | \end{aligned} \tag{10.40}$$

Perhatikan bahwa (10.40) bukan sekadar hasil kali bagian ruang dan bagian spin, melainkan kombinasi linear suku-suku yang masing-masing merupakan hasil kali bagian ruang dan spin.

Pilihan h = 2sβ juga diperbolehkan. Karena itu, keadaan dasar litium—seperti hidrogen—terdegenerasi dua kali, sesuai dua orientasi spin elektron 2s. Setiap orbital ruang, seperti 1s atau $2p_0$, dapat menampung dua elektron dengan spin berlawanan. Setiap spin-orbital, seperti 2sα, hanya dapat menampung satu elektron. Konfigurasi $1s^2 2p$ mempunyai energi tak terganggu yang sama dengan $1s^2 2s$, tetapi setelah tolakan elektron dimasukkan, konfigurasi $1s^2 2s$ lebih rendah dengan alasan yang sama seperti pada helium.



Gambar 10.3. Diagram orbital konfigurasi keadaan dasar litium dan ilustrasi prinsip eksklusi Pauli.

Secara ketat, dalam sistem n partikel yang saling berinteraksi hanya ada satu fungsi gelombang sistem yang bergantung pada 4n variabel. Karena interaksi, fungsi ini tidak dapat ditulis sebagai hasil kali fungsi gelombang partikel individual; oleh sebab itu, secara ketat kita berbicara tentang keadaan seluruh sistem, bukan keadaan setiap partikel. Jika interaksi tidak terlalu besar, pendekatan awal dapat mengabaikannya dan menulis fungsi orde-nol sebagai hasil kali fungsi satu partikel. Dalam fungsi orde-nol ini, tidak ada dua fermion yang boleh mempunyai fungsi satu-partikel yang sama.

Boson memerlukan fungsi gelombang simetris, sehingga tidak ada batas jumlah boson yang dapat menempati keadaan yang sama. Einstein pada tahun 1925 menunjukkan bahwa dalam gas ideal boson tak berinteraksi terdapat suhu kondensasi sangat rendah T_c. Di atas T_c, fraksi f boson dalam keadaan dasar dapat diabaikan, sedangkan di bawahnya fraksi tersebut berarti dan mendekati 1 saat $T \to 0$. Untuk boson tak berinteraksi dalam kotak kubus, $f = 1 - (T/T_c)^{3/2}$ untuk $T < T_c$. Fenomena ini disebut kondensasi Bose–Einstein.

Kondensasi Bose–Einstein penting bagi sifat helium cair superfluida ^{4}He. Pada tahun 1995, kondensasi Bose–Einstein berhasil dihasilkan dalam gas atom $^{87}_{37}$Rb. Atom ini mempunyai 87 nukleon dan 37 elektron, sehingga jumlah fermion totalnya 124—genap—dan atomnya bersifat boson. Dengan kombinasi cahaya laser, medan magnet tak homogen, dan radiasi radiofrekuensi, sekitar 10^4 atom didinginkan hingga 10^{-7} K; sebagian besar atom tereksitasi kemudian disingkirkan sehingga tersisa kondensat sekitar 2000 atom, hampir semuanya pada keadaan dasar potensial osilator harmonik tiga dimensi yang dibentuk medan magnet.

10.6 Determinan Slater

Slater pada tahun 1929 menunjukkan bahwa determinan berbentuk (10.40) memenuhi syarat antisimetri untuk atom berelektron banyak. Determinan seperti itu disebut determinan Slater. Semua elemen dalam satu kolom melibatkan spin-orbital yang sama, sedangkan semua elemen dalam satu baris melibatkan elektron yang sama. Karena pertukaran baris dan kolom tidak mengubah nilai determinan selain konvensi penulisan, bentuk ekuivalen lain juga dapat digunakan.

Untuk konfigurasi keadaan dasar helium $1s^2$, spin-orbitalnya adalah $1s\alpha$ dan $1s\beta$, sehingga determinan Slaternya

$$\begin{aligned} &1/\sqrt{2}\cdot\begin{vmatrix} 1s(1)\alpha(1) & 1s(1)\beta(1) \\ 1s(2)\alpha(2) & 1s(2)\beta(2) \end{vmatrix} \\ &= 1s(1)1s(2)\cdot[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]/\sqrt{2} \end{aligned} \tag{10.41}$$

yang sesuai dengan (10.26). Untuk konfigurasi tereksitasi 1s2s, spin-orbital yang tersedia adalah $1s\alpha$, $1s\beta$, $2s\alpha$, dan $2s\beta$. Empat determinan Slater D_1, D_2, D_3, dan D_4 yang mungkin dapat dibentuk dari pasangan spin-orbital tersebut. Fungsi orde-nol 1s2s berhubungan dengan determinan-determinan itu sebagai berikut:

$$2^{-1/2}[1s(1)2s(2)-2s(1)1s(2)]\,\alpha(1)\alpha(2)=D_1 \tag{10.42}$$

$$2^{-1/2}[1s(1)2s(2)-2s(1)1s(2)]\,\beta(1)\beta(2)=D_4 \tag{10.43}$$

$$2^{-1/2}[1s(1)2s(2)-2s(1)1s(2)]\cdot 2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]=2^{-1/2}(D_2+D_3) \tag{10.44}$$

$$2^{-1/2}[1s(1)2s(2)+2s(1)1s(2)]\cdot 2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]=2^{-1/2}(D_2-D_3) \tag{10.45}$$

Untuk memperoleh fungsi orde-nol yang sekaligus merupakan fungsi eigen operator spin dan momentum sudut orbital, kadang-kadang diperlukan kombinasi

linear beberapa determinan Slater dari satu konfigurasi; hal ini dibahas pada Bab 11.

Dalam notasi determinan Slater, fungsi spin β sering ditunjukkan dengan garis di atas orbital ruang, sedangkan orbital tanpa garis berarti faktor spin α. Dengan menuliskan spin secara eksplisit agar tidak ambigu, Pers. (10.40) dapat dinyatakan sebagai

$$\psi^{(0)} = 1/\sqrt{6} \cdot \begin{vmatrix} 1s\alpha(1) & 1s\beta(1) & 2s\alpha(1) \\ 1s\alpha(2) & 1s\beta(2) & 2s\alpha(2) \\ 1s\alpha(3) & 1s\beta(3) & 2s\alpha(3) \end{vmatrix} \tag{10.46}$$

Karena determinan dapat langsung dibangun jika spin-orbital yang ditempati diketahui, sering dipakai notasi singkat

$$\psi^{(0)} = |1s\alpha\ 1s\beta\ 2s\alpha| \tag{10.47}$$

Garis vertikal menyatakan pembentukan determinan dan perkalian dengan $1/\sqrt{6}$. Secara umum, determinan orde n mempunyai n! suku. Untuk determinan Slater orde n yang dibangun dari spin-orbital ortonormal, konstanta normalisasi adalah $1/\sqrt{(n!)}$. Faktor ini selalu tercakup dalam definisi determinan Slater.

10.7 Perlakuan Perturbasi Keadaan Dasar Litium

Sekarang dilakukan perlakuan perturbasi bagi keadaan dasar atom litium. Dengan mendefinisikan $e' \equiv e/(4\pi\varepsilon_0)^{1/2}$ sehingga $e'^2 = e^2/(4\pi\varepsilon_0)$, Hamiltonian dipisahkan menjadi jumlah tiga Hamiltonian mirip-hidrogen dan perturbasi tolakan antarelektron: $\hat{H}_0 = -(\hbar^2/2m_e)(\nabla_1^2+\nabla_2^2+\nabla_3^2) - Ze'^2(1/r_1+1/r_2+1/r_3)$, sedangkan $\hat{H}' = e'^2/r_{12} + e'^2/r_{23} + e'^2/r_{13}$.

Dari Bagian 10.5 diketahui bahwa konfigurasi keadaan dasar yang memenuhi antisimetri adalah $1s^22s$. Ekspansi eksplisit fungsi orde-nol (10.40) adalah

$$\begin{aligned}\psi^{(0)} = 6^{-1/2}\{&1s(1)1s(2)2s(3)\alpha(1)\beta(2)\alpha(3) - \\ &1s(1)2s(2)1s(3)\alpha(1)\alpha(2)\beta(3) \\ &- 1s(1)1s(2)2s(3)\beta(1)\alpha(2)\alpha(3) + \\ &1s(1)2s(2)1s(3)\beta(1)\alpha(2)\alpha(3) \\ &+ 2s(1)1s(2)1s(3)\alpha(1)\alpha(2)\beta(3) - \\ &2s(1)1s(2)1s(3)\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)\}\end{aligned} \tag{10.48}$$

Setiap suku dalam $\psi^{(0)}$ mengandung dua fungsi 1s mirip-hidrogen dan satu fungsi 2s, dikalikan faktor spin. Karena $\hat{H}_0$ tidak melibatkan spin, semua suku mempunyai nilai eigen $E_{1s}^{(0)} + E_{1s}^{(0)} + E_{2s}^{(0)}$. Dengan Pers. energi atom hidrogen,

$$\begin{aligned}E^{(0)} = &-(1/1^2 + 1/1^2 + 1/2^2)(Z^2e'^2/2a_0) = \\ &-(81/4)(13{,}606\ \text{eV}) = -275{,}5\ \text{eV}\end{aligned} \tag{10.49}$$

Evaluasi $E^{(1)} = \langle\psi^{(0)}|\hat{H}'|\psi^{(0)}\rangle$ dirinci dalam Soal 10.15. Hasilnya

$$E^{(1)} = 2\iint 1s^2(1)2s^2(2)\,(e'^2/r_{12})\,dv_1dv_2 + \iint 1s^2(1)1s^2(2)\,(e'^2/r_{12})\,dv_1dv_2 - \iint 1s(1)2s(2)1s(2)2s(1)\,(e'^2/r_{12})\,dv_1dv_2 \quad (10.50)$$

Ketiga integral tersebut adalah integral Coulomb dan pertukaran:

$$E^{(1)} = 2J_{1s,2s} + J_{1s,1s} - K_{1s,2s} \quad (10.51)$$

Dengan $J_{1s,1s} = (5/8)(Ze'^2/a_0)$, $J_{1s,2s} = (17/81)(Ze'^2/a_0)$, dan $K_{1s,2s} = (16/729)(Ze'^2/a_0)$, diperoleh $E^{(1)} = (5965/972)(e'^2/2a_0) = 83{,}5$ eV. Energi sampai orde pertama adalah −192,0 eV, dibandingkan energi keadaan dasar sejati −203,5 eV. Perbaikan dapat dilakukan dengan menghitung koreksi orde lebih tinggi. Hal ini mencampurkan kontribusi determinan Slater dari konfigurasi selain $1s^22s$, yang disebut interaksi konfigurasi.

10.8 Perlakuan Variasi Keadaan Dasar Litium

Fungsi perturbasi orde-nol (10.40) memakai muatan inti penuh Z = 3 untuk orbital 1s maupun 2s. Elektron 2s sebagian terlindung dari inti oleh dua elektron 1s, sehingga muatan inti efektif yang dirasakannya jauh lebih kecil daripada 3. Elektron 1s pun saling melindungi sebagian. Karena itu, diperkenalkan dua parameter variasi b_1 dan b_2.

Sebagai ganti fungsi 1s untuk Z = 3, digunakan

$$f \equiv (1/\pi^{1/2})(b_1/a_0)^{3/2}\exp(-b_1r/a_0) \quad (10.52)$$

dengan b_1 sebagai parameter variasi yang mewakili muatan inti efektif bagi elektron 1s. Sebagai ganti fungsi 2s untuk Z = 3, digunakan

$$g = [1/(4\sqrt{(2\pi)})](b_2/a_0)^{3/2}(2 - b_2r/a_0)\exp(-b_2r/2a_0) \quad (10.53)$$

Fungsi coba variasinya adalah

$$\Phi = 1/\sqrt{6}\cdot\begin{vmatrix} f(1)\alpha(1) & f(1)\beta(1) & g(1)\alpha(1) \\ f(2)\alpha(2) & f(2)\beta(2) & g(2)\alpha(2) \\ f(3)\alpha(3) & f(3)\beta(3) & g(3)\alpha(3) \end{vmatrix} \quad (10.54)$$

Penggunaan muatan efektif berbeda b_1 dan b_2 membuat orbital 1s dan 2s tidak lagi ortogonal, sehingga (10.54) tidak ternormalisasi. Nilai optimum parameter variasi diperoleh dari $\partial W/\partial b_1 = 0$ dan $\partial W/\partial b_2 = 0$, dengan W sebagai hasil bagi variasi. Wilson memperoleh $b_1 = 2{,}686$, $b_2 = 1{,}776$, dan W = −201,2 eV [E. B. Wilson, Jr., J. Chem. Phys., 1, 210 (1933)]. Nilai W jauh lebih dekat pada energi sejati −203,5 eV daripada hasil −192,0 eV dari perturbasi orde pertama. Nilai b_2 menunjukkan pelindungan elektron 2s yang besar, tetapi tidak sempurna.

Bentuk orbital lain dapat dicoba untuk memperbaiki fungsi variasi. Namun, selama fungsi coba dibatasi pada satu determinan berbentuk (10.54), energi

keadaan dasar sejati tidak dapat dicapai. Perbaikan lebih lanjut memerlukan koordinat antarelektron r_{12}, r_{23}, dan r_{13} dalam fungsi coba, atau kombinasi linear beberapa determinan Slater dari konfigurasi berbeda—interaksi konfigurasi.

10.9 Momen Magnetik Spin

Momentum sudut orbital elektron L mempunyai momen magnetik $-(e/2m_e)L$. Secara alamiah, momentum sudut spin S juga mempunyai momen magnetik μ_S. Dugaan klasik sederhana akan memberikan faktor yang sama, tetapi spin merupakan fenomena relativistik sehingga hubungannya tidak identik dengan momen orbital. Perlakuan relativistik Dirac memberikan, dalam satuan SI,

$$\mu\_S = -g_e(e/2m_e)\, S \tag{10.55}$$

Dirac memperoleh faktor-g elektron $g_e = 2$. Teori dan eksperimen berikutnya menunjukkan bahwa g_e sedikit lebih besar dari 2: $g_e = 2(1 + \alpha/2\pi + \ldots) \approx 2{,}0023$, dengan konstanta struktur halus

$$\alpha \equiv e^2/(4\pi\varepsilon_0\hbar c) = 0{,}00729735257 \tag{10.56}$$

Nilai g_e telah diukur dengan ketelitian sangat tinggi: $g_e = 2{,}002319304361$ [D. Hanneke et al., Phys. Rev. A, 83, 052122 (2011)]. Sebagian penulis menghilangkan tanda minus dalam (10.55) dan menggunakan konvensi g_e negatif.

Besar momen magnetik spin elektron ialah

$$|\mu\_S| = g_e(e/2m_e)|S| = g_e\sqrt{(3/4)}\cdot(e\hbar/2m_e) \tag{10.57}$$

Feromagnetisme besi berasal dari momen magnetik elektron. Dua orientasi spin elektron dan momen magnetiknya terhadap suatu sumbu menghasilkan dua tingkat energi dalam medan magnet luar. Spektroskopi resonansi spin elektron (ESR) mengamati transisi di antara kedua tingkat ini. ESR berlaku bagi spesies seperti radikal bebas dan ion logam transisi yang mempunyai satu atau lebih elektron tak berpasangan, sehingga spin elektron total dan momen magnetik spinnya tidak nol.

Spektroskopi NMR

Banyak inti atom mempunyai momentum sudut spin I yang tidak nol. Besarnya adalah $[I(I+1)]^{1/2}\hbar$, dengan bilangan kuantum spin inti I = 0, ½, 1, dan seterusnya. Komponen-z mempunyai nilai $M\_I\hbar$, dengan $M\_I = -I, -I+1, \ldots, I$. Contoh: I = 0 untuk inti dengan jumlah proton dan neutron sama-sama genap, seperti ^{16}O dan ^{12}C; I = ½ untuk ^{1}H, ^{13}C, ^{19}F, dan ^{31}P; I = 1 untuk ^{2}H dan ^{14}N; serta I = 3⁄2 untuk ^{11}B, ^{23}Na, dan ^{35}Cl.

Jika $I \neq 0$, inti mempunyai momen magnetik spin μ_I yang dinyatakan oleh

$$\mu\_I = g\_N(e/2m\_p)\, I \equiv \gamma I \tag{10.58}$$

Di sini m_p adalah massa proton, g_N adalah faktor-g inti yang khas untuk setiap inti, dan γ adalah rasio magnetogirik, γ ≡ μ_I/I = g_Ne/(2m_p). Beberapa nilainya ditunjukkan dalam tabel berikut.

Inti	I	g_N	γ/(10⁶ rad s⁻¹ T⁻¹)
^{1}H	1/2	5,58569	267,522
^{12}C	0	—	—
^{13}C	1/2	1,40482	67,283
^{15}N	1/2	−0,56638	−27,126
^{19}F	1/2	5,25773	251,815
^{31}P	1/2	2,2632	108,39

Tabel 10.1. Bilangan kuantum spin inti, faktor-g inti, dan rasio magnetogirik beberapa nuklida.

Dalam spektroskopi resonansi magnetik inti (NMR), diamati transisi antara tingkat energi spin inti dalam medan magnet luar. Sampel—biasanya larutan encer—ditempatkan di antara kutub magnet kuat. Energi interaksi momen magnetik inti terisolasi μ_I dengan medan B adalah E = −μ_I·B. Dengan sumbu z searah B, bentuk klasiknya E = −γBI_z. Mengganti I_z dengan operator Î_z menghasilkan Ĥ = −γBÎ_z. Jika |M_I⟩ merupakan fungsi eigen Î² dan Î_z,

$$\hat{H}|M_I\rangle = -\gamma B\hat{I}_z|M_I\rangle = -\gamma B M_I \hbar|M_I\rangle \tag{10.59}$$

Jadi tingkat energi spin inti terisolasi adalah E = −γħBM_I. Radiasi elektromagnetik menginduksi transisi dengan aturan seleksi ΔM_I = ±1. Frekuensi NMR diperoleh dari

$$\begin{aligned} h\nu &= |\Delta E| = |\gamma|\hbar B|\Delta M_I| = |\gamma|\hbar B \\ \nu &= (|\gamma|/2\pi)B = |g_N|(e/4\pi m_p)B \end{aligned} \tag{10.60}$$

Nilai γ sangat berbeda untuk inti yang berbeda. Dalam satu eksperimen biasanya hanya satu jenis inti yang diamati. Inti yang paling umum dipelajari adalah proton ^{1}H, disusul ^{13}C yang kelimpahan alaminya sekitar 1%.

Persamaan (10.60) berlaku bagi inti terisolasi dalam medan luar B. Dalam molekul, elektron memberikan kontribusi pada medan magnet yang dirasakan inti. Pada kebanyakan molekul keadaan dasar, spin elektron berpasangan dan momentum sudut orbital elektronik total nol. Namun, medan luar mengganggu fungsi gelombang elektron dan menginduksi medan elektronik, biasanya berlawanan arah dengan B. Medan efektif pada inti i adalah (1 − σ_i)B, dengan σ_i konstanta perisai yang jauh lebih kecil dari satu. Karena itu,

$$\nu_i = (|\gamma|/2\pi)(1-\sigma_i)B \tag{10.61}$$

Inti yang berada dalam lingkungan elektronik sama mempunyai σ_i yang sama. Dalam etanol CH_3CH_2OH, tiga proton CH_3 ekuivalen dan dua proton CH_2 ekuivalen karena rotasi internal cepat merata-ratakan lingkungannya pada suhu

kamar. Tanpa efek lain, spektrum ^{1}H-NMR etanol akan mempunyai tiga kelompok puncak untuk CH_3, CH_2, dan OH dengan rasio intensitas total 3:2:1.

Terdapat efek tambahan, yaitu kopling spin-spin. Spin inti proton pada satu karbon memengaruhi medan magnet yang dirasakan proton pada karbon tetangga. Dua proton CH_2 mempunyai empat orientasi spin inti yang mungkin:

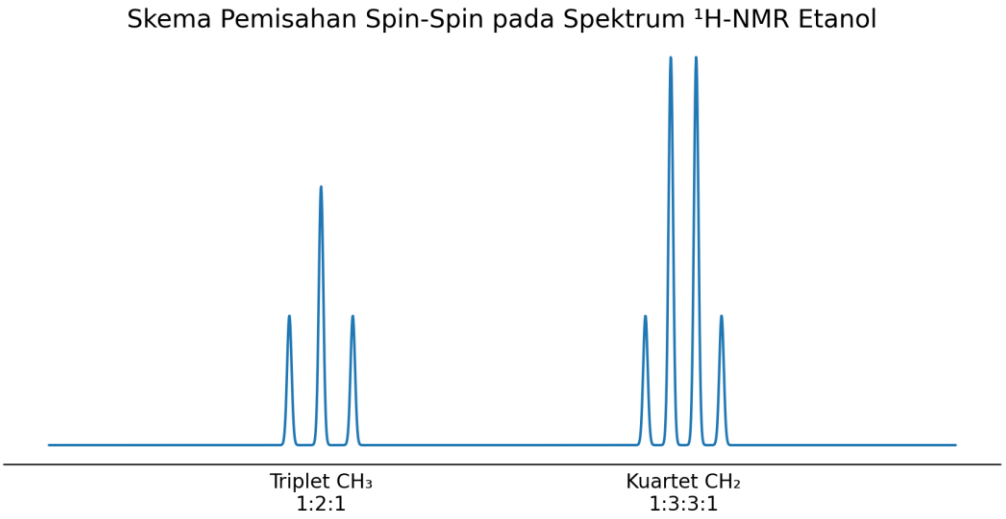
$$\uparrow\uparrow \quad \uparrow\downarrow \quad \downarrow\uparrow \quad \downarrow\downarrow \tag{10.62}$$

Panah atas dan bawah menyatakan M_I = +½ dan −½. Karena ketakterbedaan partikel identik, dua keadaan tengah secara ketat harus diganti oleh kombinasi linear simetris dan antisimetris, analog dengan fungsi spin elektron (10.22)–(10.25). Kedua keadaan tengah menghasilkan pengaruh medan yang sama pada proton CH_3, sehingga empat keadaan spin CH_2 menghasilkan tiga medan efektif berbeda dan memecah garis CH_3 menjadi triplet dengan intensitas relatif 1:2:1. Jejak air mengatalisis pertukaran cepat proton OH antar molekul etanol, sehingga pemecahan garis OH biasanya hilang.

Analisis serupa menunjukkan bahwa tiga proton CH_3 memecah garis CH_2 menjadi empat garis dengan intensitas 1:3:3:1. Aturan umumnya: n proton ekuivalen pada satu atom memecah garis NMR proton pada atom tetangga menjadi n+1 garis. Kopling biasanya terlalu lemah untuk memengaruhi proton yang berjarak lebih dari tiga ikatan. Pada $CH_3CH_2C(O)H$, proton CH_3 memecah garis CH_2 menjadi empat, dan setiap garis kemudian dipecah dua oleh proton aldehida sehingga total menjadi delapan garis.

Inti dengan I = 0, seperti ^{12}C dan ^{16}O, tidak memecah puncak proton. Inti dengan I > ½, seperti ^{35}Cl, ^{37}Cl, dan ^{14}N, pada umumnya juga tidak memberikan pemecahan proton yang teramati karena relaksasi kuadrupol cepat. Inti ^{19}F mempunyai I = ½ dan dapat memecah puncak proton. Interaksi spin-spin antar proton ekuivalen tidak mengubah spektrum NMR.

Analisis di atas disebut analisis orde pertama dan hanya valid jika pemecahan spin-spin jauh lebih kecil daripada semua perbedaan frekuensi NMR inti yang tidak ekuivalen secara kimia. Pada molekul sangat besar, perbedaan frekuensi dapat kecil sehingga analisis orde pertama gagal. Medan magnet yang lebih kuat memperbesar pemisahan frekuensi dan kekuatan sinyal, sehingga instrumen riset modern menggunakan medan yang bersesuaian dengan frekuensi proton sekitar 300–1000 MHz. NMR merupakan alat utama penentuan struktur dalam kimia organik dan teknik khusus NMR memungkinkan struktur protein kecil ditentukan.



Gambar 10.4. Skema pemisahan spin-spin orde pertama pada spektrum ¹H-NMR etanol: triplet untuk CH_3 dan kuartet untuk CH_2.

10.10 Operator Tangga untuk Spin Elektron

Operator momentum sudut spin memenuhi relasi komutasi momentum sudut umum. Karena itu, operator tangga spin sangat berguna. Operator penaik dan penurun didefinisikan sebagai

$$\hat{S}_+ = \hat{S}_x + i\hat{S}_y, \quad \hat{S}_- = \hat{S}_x - i\hat{S}_y \tag{10.63}$$

Relasi operatornya adalah

$$\hat{S}_+\hat{S}_- = \hat{S}^2 - \hat{S}\_z^2 + \hbar\hat{S}\_z \tag{10.64}$$

$$\hat{S}_-\hat{S}_+ = \hat{S}^2 - \hat{S}\_z^2 - \hbar\hat{S}\_z \tag{10.65}$$

Fungsi α dan β adalah fungsi eigen $\hat{S}\_z$ dengan nilai eigen $+\frac{1}{2}\hbar$ dan $-\frac{1}{2}\hbar$. Karena $\hat{S}_+$ menaikkan nilai m_s, fungsi $\hat{S}_+\beta$ harus sebanding dengan α:

$$\hat{S}_+\beta = c\alpha \tag{10.66}$$

Konstanta c ditentukan dari normalisasi. Dengan sifat Hermitian $\hat{S}_x$ dan $\hat{S}_y$ serta relasi (10.65), diperoleh

$$|c|^2 = \Sigma_{ms}(\hat{S}_+\beta)^*\hat{S}_+\beta = \Sigma_{ms}\,\beta^*(\hat{S}_-\hat{S}_+)\beta = \hbar^2 \tag{10.67}$$

Untuk operator yang bekerja pada variabel diskret m_s, sifat Hermitian ditulis

$$\Sigma_{ms}\, f^*(m_s)\hat{S}_x g(m_s) = \Sigma_{ms}\, g(m_s)[\hat{S}_x f(m_s)]^* \tag{10.68}$$

Dengan memilih fase c sama dengan nol, $c = \hbar$ dan

$$\hat{S}_+\beta = \hbar\alpha \tag{10.69}$$

Perhitungan serupa memberikan

$$\hat{S}_-\alpha = \hbar\beta \tag{10.70}$$

Karena α sudah mempunyai nilai m_s tertinggi, $\hat{S}_+\alpha = 0$; karena β mempunyai nilai m_s terendah, $\hat{S}_-\beta = 0$. Maka

$$(\hat{S}_+ + \hat{S}_-)\beta = \hbar\alpha, \quad (\hat{S}_+ - \hat{S}_-)\beta = \hbar\alpha \tag{10.71}$$

Menggunakan definisi (10.63), diperoleh

$$\hat{S}_x\beta = \tfrac{1}{2}\hbar\alpha, \quad \hat{S}_y\beta = -\tfrac{1}{2}i\hbar\alpha \tag{10.72}$$

dan dengan cara yang sama

$$\hat{S}_x\alpha = \tfrac{1}{2}\hbar\beta, \quad \hat{S}_y\alpha = \tfrac{1}{2}i\hbar\beta \tag{10.73}$$

Representasi matriks operator spin dibahas dalam Soal 10.28. Untuk operator momentum sudut umum $\hat{M}$, hasil operator tangga yang diperlukan dalam Soal 10.27 adalah

$$\hat{M}_+ Y_{jm} = [j(j+1) - m(m+1)]^{1/2}\,\hbar Y_{j,m+1} \tag{10.74}$$

$$\hat{M}_- Y_{jm} = [j(j+1) - m(m-1)]^{1/2}\,\hbar Y_{j,m-1} \tag{10.75}$$

CATATAN INTEGRATIF ISLAM (BUKAN BAGIAN DARI TEKS SUMBER)

إِنَّا كُلَّ شَيْءٍ خَلَقْنَاهُ بِقَدَرٍ

"Sesungguhnya Kami menciptakan segala sesuatu menurut ukuran." (Terjemahan makna QS al-Qamar [54]:49).

Hadis: "Barang siapa menempuh suatu jalan untuk mencari ilmu, Allah memudahkan baginya jalan menuju surga." (Ringkasan makna Ṣaḥīḥ Muslim no. 2699).

Ayat ini tidak dimaksudkan sebagai "pembuktian" langsung teori spin elektron. Relevansinya terletak pada etos intelektual: alam dipahami memiliki keteraturan, ukuran, dan hukum yang dapat ditelaah dengan pengamatan, matematika, serta sikap ilmiah yang rendah hati.

Hadis tentang menempuh jalan ilmu mendorong ketekunan belajar. Dalam konteks kimia kuantum, ketekunan itu tampak pada usaha memahami konsep abstrak secara bertahap, memeriksa persamaan, membedakan model dari realitas fisik, dan menguji teori terhadap eksperimen.

Rujukan: Al-Qur'an, Surah al-Qamar [54]:49; Ṣaḥīḥ Muslim, no. 2699.

Ringkasan

Partikel elementer mempunyai momentum sudut spin dengan besar $[s(s+1)]^{1/2}\hbar$ dan komponen-z $m_s\hbar$, dengan $m_s = -s, -s+1, \ldots, s$. Untuk elektron, $s = ½$. Operator $\hat{S}_x$, $\hat{S}_\gamma$, $\hat{S}\_z$, dan $\hat{S}^2$ memenuhi relasi yang analog dengan operator momentum sudut orbital. Fungsi eigen spin elektron untuk $m_s = +½$ dan $-½$ dilambangkan α dan β. Keduanya ortonormal. Untuk sistem satu elektron, fungsi gelombang stasioner lengkap merupakan hasil kali fungsi ruang dengan fungsi spin α, β, atau kombinasi linearnya.

Menurut teorema spin-statistik, fungsi gelombang lengkap sistem partikel identik berspin setengah-bulat harus antisimetris terhadap pertukaran dua partikel, sedangkan fungsi gelombang partikel identik berspin bulat harus simetris. Partikel yang memerlukan fungsi antisimetris disebut fermion; partikel yang memerlukan fungsi simetris disebut boson.

Fungsi spin dua-elektron terdiri atas tiga fungsi simetris $\alpha(1)\alpha(2)$, $\beta(1)\beta(2)$, dan $[\alpha(1)\beta(2)+\beta(1)\alpha(2)]/\sqrt{2}$, serta satu fungsi antisimetris $[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]/\sqrt{2}$. Pada helium, fungsi stasioner merupakan hasil kali fungsi ruang simetris dengan fungsi spin antisimetris, atau fungsi ruang antisimetris dengan fungsi spin simetris.

Spin-orbital adalah hasil kali fungsi ruang satu elektron dengan fungsi spin satu elektron. Fungsi gelombang hampiran sistem elektron dapat ditulis sebagai determinan Slater spin-orbital. Pertukaran dua elektron menukar dua baris determinan dan mengalikan fungsi dengan -1, sehingga antisimetri terjamin. Dalam fungsi hampiran tersebut, tidak ada dua elektron yang dapat menempati spin-orbital yang sama; inilah prinsip eksklusi Pauli.

Elektron mempunyai momen magnetik spin yang sebanding dengan momentum sudut spinnya. Transisi antar tingkat energi spin inti dalam medan magnet luar menghasilkan spektrum NMR. Operator tangga memungkinkan pengaruh $\hat{S}_x$ dan $\hat{S}_\gamma$ terhadap α dan β diturunkan secara sistematis.

Soal

10.1 Hitung besar momentum sudut spin sebuah proton. Berikan jawaban numerik.

10.2 Hitung sudut antara vektor spin S dan sumbu z untuk elektron dengan fungsi spin α.

10.3 Fungsi spin paling umum bagi elektron adalah $c_1\alpha + c_2\beta$. (a) Lengkapi: $\hat{S}^2(c_1\alpha+c_2\beta)=?$, $\hat{S}\_z(c_1\alpha+c_2\beta)=?$, dan $\hat{S}\_z^2(c_1\alpha+c_2\beta)=?$. (b) Syarat normalisasi memberikan hubungan apa antara c_1 dan c_2?

10.4 (a) Jika S_z partikel dengan bilangan kuantum spin s diukur, hasil apa yang mungkin? (b) Jika S_x diukur, hasil apa yang mungkin? (c) Dalam interpretasi ensemble statistik, semua sifat partikel dianggap mempunyai nilai tepat setiap saat. Untuk $s = ½, 1,$

dan 3⁄2, periksa apakah hubungan $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S\_z^2$ dapat dipenuhi jika S^2, S_x, S_y, dan S_z sekaligus mempunyai nilai yang dapat diamati secara eksperimen.

10.5 Nyatakan apakah masing-masing merupakan boson atau fermion: (a) elektron; (b) proton; (c) neutron; (d) foton; (e) inti ^{12}C; (f) inti ^{13}C; (g) atom ^{12}C; (h) atom ^{13}C; (i) atom ^{14}N; (j) atom ^{15}N.

10.6 (a) Tunjukkan bahwa $\hat{P}_{12}$ berkomutasi dengan Hamiltonian atom litium. (b) Tunjukkan bahwa $\hat{P}_{12}$ dan $\hat{P}_{23}$ tidak saling berkomutasi. (c) Tunjukkan bahwa keduanya berkomutasi ketika diterapkan pada fungsi antisimetris.

10.7 Tunjukkan bahwa $\hat{P}_{12}$ adalah Hermitian.

10.8 Klasifikasikan setiap fungsi sebagai simetris, antisimetris, atau bukan keduanya: (a) $f(1)g(2)\alpha(1)\alpha(2)$; (b) $f(1)f(2)[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$; (c) $f(1)f(2)f(3)\beta(1)\beta(2)\beta(3)$; (d) $\exp[-a|r_1-r_2|]$; (e) $[f(1)g(2)-g(1)f(2)][\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]$; (f) $r_{12}^2\exp[-a(r_1+r_2)]$.

10.9 Jika elektron mempunyai spin nol, apakah fungsi gelombang orde-nol untuk keadaan dasar dan keadaan tereksitasi pertama litium?

10.10 Jelaskan mengapa fungsi $N\, e^{-cr_1}\, e^{-cr_2}(r_1-r_2)$ tidak boleh digunakan sebagai fungsi coba variasi keadaan dasar helium.

10.11 Operator antisimetri $\hat{A}$ didefinisikan sebagai operator yang mengantisimetrikan hasil kali n fungsi satu-elektron dan mengalikannya dengan $(n!)^{-1/2}$. Untuk n = 2, $\hat{A}f(1)g(2) = (1/\sqrt{2})|f(1)\ g(1);\ f(2)\ g(2)|$. (a) Nyatakan $\hat{A}$ untuk n = 2 dalam $\hat{P}_{12}$. (b) Untuk n = 3, nyatakan $\hat{A}$ dalam $\hat{P}_{12}$, $\hat{P}_{13}$, dan $\hat{P}_{23}$.

10.12 Gunakan teorema determinan untuk menunjukkan bahwa pemilihan spin-orbital litium 1sα, 1sβ, dan $1s(c_1\alpha+c_2\beta)$ dalam suatu determinan Slater menghasilkan fungsi gelombang nol.

10.13 Permanen didefinisikan dengan ekspansi yang sama seperti determinan, tetapi semua suku diberi tanda plus. Permanen orde dua adalah $|a\ b;\ c\ d|_+ = ad + bc$. Pikirkan penggunaan permanen dalam mekanika kuantum.

10.14 Muon mempunyai muatan dan spin yang sama dengan elektron, tetapi massanya lebih besar. Apakah konfigurasi keadaan dasar atom litium yang mengandung dua elektron dan satu muon?

10.15 Turunkan Pers. (10.50) untuk $E^{(1)}$ litium. (a) Kelompokkan suku $\psi^{(0)}$ yang mempunyai faktor spin sama menjadi $\psi^{(0)} = a\beta(1)\alpha(2)\alpha(3)+b\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)+c\alpha(1)\alpha(2)\beta(3) \equiv A+B+C$. Tunjukkan bahwa enam integral silang hilang karena ortogonalitas fungsi spin. (b) Gunakan normalisasi spin untuk menghilangkan variabel spin. (c) Gunakan pelabelan ulang variabel integrasi untuk menunjukkan tiga integral ruang sama. (d) Gunakan ortonormalitas orbital 1s dan 2s untuk membuktikan (10.50).

10.16 Jika secara keliru digunakan fungsi keadaan dasar Li yang tidak antisimetris 1s(1)1s(2)2s(3), berapakah $E^{(1)}$ yang dihitung?

10.17 Hitung besar momen magnetik spin elektron.

10.18 (a) Gunakan Pers. (6.131) untuk memperoleh tingkat energi momen magnetik spin elektron μ_S dalam medan B. (b) Hitung frekuensi absorpsi ESR elektron dalam medan 1,00 T.

10.19 Inti ^{35}Cl mempunyai I = 3⁄2. (a) Hitung besar momentum sudut spinnya. (b) Tentukan nilai yang mungkin dari pengukuran komponen-z. (c) Ulangi untuk komponen-y.

10.20 (a) Verifikasi nilai γ untuk ^{1}H pada tabel sesudah (10.58). (b) Hitung frekuensi absorpsi NMR proton dalam medan 1,00 T.

10.21 (a) Untuk inti dengan I = ½ dan g_N > 0, gambarkan tingkat energi spin inti sebagai fungsi medan B. (b) Ulangi untuk I = 1 dan g_N > 0.

10.22 Untuk tiga proton CH_3 dalam etanol, gambarkan orientasi spin inti seperti (10.62). Tentukan jumlah garis pemecahan transisi NMR proton CH_2 yang berdekatan dan intensitas relatifnya.

10.23 Spektrum proton NMR etanol mempunyai triplet 1:2:1 untuk CH_3, kuartet 1:3:3:1 untuk CH_2, dan singlet OH; intensitas totalnya 3:2:1. Berikan deskripsi serupa untuk: (a) $CH_3CH_2C(O)H$; (b) $CH_3CH_2OCH_2CH_3$; (c) benzena; (d) 1,4-diklorobenzena; (e) 1,3-diklorobenzena.

10.24 Verifikasi persamaan operator spin (10.70) dan (10.73).

10.25 Tunjukkan bahwa α dan β masing-masing merupakan fungsi eigen $\hat{S}_x^2$, tetapi bukan $\hat{S}_x$. Berikan penjelasan fisik mengapa hasil ini masuk akal.

10.26 (a) Jika komponen spin S_x elektron diukur, nilai apa yang mungkin? (b) Gunakan (10.72) dan (10.73) untuk membangun dua fungsi eigen ternormalisasi $\hat{S}_x$ dengan nilai eigen +½ħ dan −½ħ. (c) Jika pengukuran S_z memberi +½ħ lalu S_x diukur, tentukan probabilitas setiap hasil. (d) Lakukan hal yang sama untuk $\hat{S}_\gamma$. Hubungkan hasilnya dengan eksperimen Stern–Gerlach berturut-turut pada arah z dan x.

10.27 (a) Untuk fungsi eigen Y_{jm} dari $\hat{M}^2$ dan $\hat{M}_z$, gunakan prosedur operator tangga untuk membuktikan (10.74) dan (10.75). (b) Tunjukkan konsistensinya dengan (10.69) dan (10.70). (c) Dengan M = L dan $Y_{jm} = Y^l_m(\theta,\varphi)$, verifikasi (10.74) secara langsung untuk l = 2, m = −1. Untuk konsistensi fase, perhatikan konvensi tanda harmonik sferis yang digunakan sumber.

10.28 Fungsi eigen α dan β dari operator Hermitian $\hat{S}_z$ membentuk himpunan ortonormal lengkap, dan setiap fungsi spin satu elektron dapat ditulis sebagai $c_1\alpha + c_2\beta$. Untuk representasi yang menggunakan α dan β sebagai fungsi basis: (a) tuliskan vektor kolom yang bersesuaian dengan fungsi α, β, dan $c_1\alpha + c_2\beta$; (b) gunakan hasil Bagian 10.10 untuk menunjukkan bahwa matriks yang bersesuaian dengan $\hat{S}_x$, $\hat{S}_\gamma$, $\hat{S}_z$, dan $\hat{S}^2$ masing-masing adalah $\hat{S}_x = (\hbar/2)[[0,1],[1,0]]$, $\hat{S}_\gamma = (\hbar/2)[[0,-i],[i,0]]$, $\hat{S}_z = (\hbar/2)[[1,0],[0,-1]]$, dan $\hat{S}^2 = (\hbar^2/4)[[3,0],[0,3]]$; (c) verifikasi bahwa matriks pada bagian (b) memenuhi $\hat{S}_x\hat{S}_\gamma - \hat{S}_\gamma\hat{S}_x = i\hbar\hat{S}_z$ [Pers. (10.2)]; (d) tentukan nilai eigen dan vektor eigen matriks $\hat{S}_x$, lalu bandingkan hasilnya dengan Soal 10.26.

10.29 Benar atau salah? (a) Nilai yang diizinkan bagi bilangan kuantum s suatu elektron adalah −½ dan +½. (b) Besar komponen-z S_z dari momentum sudut spin sebuah partikel yang mempunyai spin tidak nol selalu harus lebih kecil daripada besar |S| momentum sudut spinnya. (c) Untuk setiap sistem dua elektron, faktor spin dalam fungsi gelombang harus antisimetris. (d) Untuk setiap sistem yang terdiri atas beberapa fermion, pertukaran label dua fermion dalam

fungsi gelombang harus mengalikan fungsi gelombang dengan −1. (e) Atom ^{79}Br adalah boson. (f) Atom ^{3}He adalah fermion. (g) Momen magnetik inti jauh lebih kecil daripada momen magnetik elektron. (h) Untuk sebuah proton di dalam medan magnet luar yang mengarah ke sumbu z positif, keadaan $M_I = -½$ lebih tinggi energinya daripada keadaan $M_I = +½$.

BAB 11
ATOM BERELEKTRON BANYAK

11.1 Metode Medan Konsisten-Diri Hartree–Fock

Untuk atom hidrogen, fungsi gelombang eksak telah diketahui. Untuk helium dan litium, fungsi gelombang yang sangat akurat telah dihitung dengan memasukkan jarak antarelektron ke dalam fungsi variasi. Bagi atom dengan nomor atom yang lebih tinggi, salah satu cara untuk memperoleh fungsi gelombang yang akurat ialah terlebih dahulu menentukan fungsi gelombang hampiran menggunakan prosedur Hartree–Fock, yang garis besarnya akan diuraikan dalam bagian ini. Metode Hartree–Fock merupakan landasan penggunaan orbital atom dan orbital molekul pada sistem berelektron banyak.

Operator Hamilton untuk atom dengan n elektron adalah

$$\hat{H}_n = -(\hbar^2/2m_e)\,\Sigma_{i=1}^{n}\,\nabla_i^2 - \Sigma_{i=1}^{n}\,[Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r_i)] + \Sigma_{i=1}^{n-1}\;\Sigma_{j=i+1}^{n}\,[e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{ij})] \tag{11.1}$$

Dalam persamaan ini diasumsikan inti berupa titik yang massanya tak berhingga (Bagian 6.6). Jumlah pertama dalam (11.1) memuat operator energi kinetik untuk n elektron. Jumlah kedua adalah energi potensial [Pers. (6.58)] untuk tarik-menarik antara elektron dan inti bermuatan Ze. Untuk atom netral, Z = n. Jumlah terakhir adalah energi potensial tolakan antarelektron. Pembatasan j > i mencegah setiap tolakan antarelektron dihitung dua kali dan sekaligus meniadakan suku seperti $e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{ii})$. Hamiltonian (11.1) belum lengkap karena mengabaikan interaksi spin–orbit dan interaksi lainnya. Suku-suku yang diabaikan tersebut kecil—kecuali pada atom dengan Z tinggi—dan akan dibahas dalam Bagian 11.6 dan 11.7.

Metode SCF Hartree

Karena adanya suku tolakan antarelektron $e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{ij})$, persamaan Schrödinger untuk sebuah atom tidak dapat dipisahkan. Dengan mengingat perlakuan perturbasi terhadap helium (Bagian 9.3), kita dapat memperoleh fungsi gelombang orde nol dengan mengabaikan tolakan-tolakan tersebut. Persamaan Schrödinger kemudian akan terpisah menjadi n persamaan satu-elektron mirip hidrogen. Fungsi gelombang orde nol akan berupa hasil kali n orbital mirip hidrogen (satu-elektron):

$$\psi^{(0)} = \varphi_1(r_1, \theta_1, \phi_1)\,\varphi_2(r_2, \theta_2, \phi_2)\cdots\varphi_n(r_n, \theta_n, \phi_n) \tag{11.2}$$

Orbital mirip hidrogen itu adalah

$$\varphi = R_{nl}(r)\,Y_l^m(\theta, \phi) \tag{11.3}$$

Untuk keadaan dasar atom, dua elektron dengan spin berlawanan ditempatkan ke dalam masing-masing orbital berenergi terendah, sesuai dengan asas larangan Pauli, sehingga diperoleh konfigurasi keadaan dasar. Walaupun fungsi gelombang hampiran (11.2) berguna secara kualitatif, ketelitiannya secara kuantitatif sangat buruk. Salah satu sebabnya ialah semua orbital menggunakan muatan inti penuh Z. Dengan mengingat perlakuan variasi kita terhadap helium dan litium, kita mengetahui bahwa hampiran yang lebih baik dapat diperoleh dengan memakai nomor atom efektif yang berbeda bagi orbital-orbital yang berbeda untuk memperhitungkan efek pemerisaian elektron. Penggunaan nomor atom efektif menghasilkan perbaikan yang besar, tetapi kita masih jauh dari fungsi gelombang yang akurat. Langkah berikutnya ialah menggunakan fungsi variasi yang bentuknya sama dengan (11.2), tetapi

orbitalnya tidak dibatasi harus berbentuk orbital mirip hidrogen atau bentuk tertentu lainnya. Jadi, kita mengambil

$$\psi = g_1(r_1, \theta_1, \phi_1)\, g_2(r_2, \theta_2, \phi_2) \cdots g_n(r_n, \theta_n, \phi_n) \tag{11.4}$$

dan mencari fungsi g_1, g_2, …, g_n yang meminimumkan integral variasi $\langle\psi|\hat{H}_n|\psi\rangle/\langle\psi|\psi\rangle$. Tugas ini lebih sukar daripada perhitungan variasi sebelumnya, ketika kita menebak fungsi coba yang memuat beberapa parameter, kemudian memvariasikan parameter-parameter tersebut. Dalam (11.4), yang harus divariasikan adalah fungsi g_i itu sendiri. [Bahkan setelah fungsi g_i terbaik ditemukan, Pers. (11.4) tetap hanya merupakan fungsi gelombang hampiran. Persamaan Schrödinger berelektron banyak tidak dapat dipisahkan, sehingga fungsi gelombang sejatinya tidak dapat dituliskan sebagai hasil kali n fungsi satu-elektron.]

Untuk sedikit menyederhanakan masalah, orbital atom terbaik yang mungkin dihampiri dengan orbital yang merupakan hasil kali faktor radial dan harmonik sferis:

$$g_i = h_i(r_i)\, Y_{li}^{mi}(\theta_i, \phi_i) \tag{11.5}$$

Hampiran ini lazim digunakan dalam perhitungan atom.

Prosedur untuk menentukan fungsi g_i diperkenalkan oleh Hartree pada tahun 1928 dan disebut metode medan konsisten-diri Hartree (Hartree self-consistent-field, SCF). Hartree sampai pada prosedur SCF melalui argumen fisika yang intuitif. Bukti bahwa prosedur Hartree memberikan fungsi variasi terbaik yang mungkin dari bentuk (11.4) diberikan oleh Slater dan Fock pada tahun 1930. [Untuk pembuktian dan tinjauan metode SCF, lihat S. M. Blinder, *Am. J. Phys.*, **33**, 431 (1965).]

Prosedur Hartree adalah sebagai berikut. Mula-mula kita menebak fungsi gelombang hasil kali

$$\psi_0 = s_1(r_1, \theta_1, \phi_1)\, s_2(r_2, \theta_2, \phi_2) \cdots s_n(r_n, \theta_n, \phi_n) \tag{11.6}$$

dengan setiap s_i berupa fungsi r yang ternormalisasi dikalikan harmonik sferis. Tebakan yang masuk akal untuk ψ_0 adalah hasil kali orbital mirip hidrogen dengan nomor atom efektif. Untuk fungsi (11.6), rapat probabilitas elektron i adalah $|s_i|^2$. Sekarang perhatian dipusatkan pada elektron 1, sedangkan elektron 2, 3, …, n dianggap tersebar membentuk distribusi muatan listrik tetap yang dilalui elektron 1. Dengan demikian, interaksi sesaat antara elektron 1 dan elektron-elektron lainnya dirata-ratakan.

Energi potensial interaksi antara muatan titik Q_1 dan Q_2 adalah $V_{12} = Q_1Q_2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$ [Pers. (6.58)]. Sekarang Q_2 dianggap tersebar menjadi distribusi muatan kontinu dengan ρ_2 sebagai rapat muatan, yakni muatan per satuan volume. Muatan infinitesimal dalam volume infinitesimal $d\tau_2$ adalah $\rho_2 d\tau_2$. Dengan menjumlahkan interaksi antara Q_1 dan unsur-unsur muatan infinitesimal itu, diperoleh

$$V_{12} = (Q_1/4\pi\varepsilon_0) \int (\rho_2/r_{12})\, d\tau_2$$

Untuk elektron 2 yang bermuatan $-e$, rapat muatan awan hipotetis adalah $\rho_2 = -e|s_2|^2$, sedangkan untuk elektron 1, $Q_1 = -e$. Karena itu,

$$V_{12} = (e^2/4\pi\varepsilon_0) \int (|s_2|^2/r_{12})\, d\tau_2$$

Dengan menambahkan interaksi dengan elektron-elektron lainnya, diperoleh

$$V_{12} + V_{13} + \cdots + V_{1n} = \Sigma_{j=2}^{n} (e^2/4\pi\varepsilon_0) \int (|s_j|^2/r_{1j})\, d\tau_j$$

Energi potensial interaksi antara elektron 1 dengan elektron-elektron lainnya dan inti kemudian adalah

$$V_1(r_1, \theta_1, \phi_1) = \Sigma_{j=2}^{n} (e^2/4\pi\varepsilon_0) \int [|s_j|^2/r_{1j}]\, d\tau_j - Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r_1) \tag{11.7}$$

Sekarang dibuat hampiran tambahan, di luar anggapan bahwa fungsi gelombang merupakan hasil kali orbital satu-elektron. Kita menganggap bahwa potensial efektif yang

bekerja pada sebuah elektron dalam atom dapat dihampiri secara memadai oleh fungsi yang hanya bergantung pada r. Hampiran medan-pusat ini dapat ditunjukkan umumnya cukup akurat. Oleh karena itu, $V_1(r_1, \theta_1, \phi_1)$ dirata-ratakan terhadap sudut untuk memperoleh energi potensial yang hanya bergantung pada r_1:

$$V_1(r_1) = \{\int_0^2\pi \int_0\pi V_1(r_1, \theta_1, \phi_1) \sin\theta_1 \, d\theta_1 \, d\phi_1\}/\{\int_0^2\pi \int_0\pi \sin\theta \, d\theta \, d\phi\} \tag{11.8}$$

Selanjutnya $V_1(r_1)$ digunakan sebagai energi potensial dalam persamaan Schrödinger satu-elektron,

$$[-(\hbar^2/2m_e)\nabla_1^2 + V_1(r_1)] \tau_1(1) = \varepsilon_1\tau_1(1) \tag{11.9}$$

dan persamaan itu diselesaikan untuk $\tau_1(1)$, yang merupakan orbital elektron 1 yang telah diperbaiki. Dalam (11.9), ε_1 ialah energi orbital elektron 1 pada tahap hampiran ini. Karena energi potensial dalam (11.9) bersimetri sferis, faktor sudut dalam $\tau_1(1)$ adalah harmonik sferis yang melibatkan bilangan kuantum l_1 dan m_1 (Bagian 6.1). Faktor radial $R_1(r_1)$ dalam τ_1 merupakan solusi persamaan Schrödinger satu-dimensi berbentuk (6.17). Diperoleh sekumpulan solusi $R_1(r_1)$, dengan jumlah simpul k di antara titik batas r = 0 dan r = ∞ dimulai dari nol untuk energi terendah dan bertambah satu pada setiap energi yang lebih tinggi (Bagian 4.2).

Bilangan kuantum n kemudian didefinisikan sebagai $n \equiv l + 1 + k$, dengan k = 0, 1, 2, …. Dengan demikian, diperoleh orbital 1s, 2s, 2p, dan seterusnya—dengan energi orbital ε meningkat bersama n—sebagaimana pada atom mirip hidrogen; jumlah simpul radial bagian dalam, $n - l - 1$, juga sama seperti pada atom mirip hidrogen (Bagian 6.6). Akan tetapi, karena $V_1(r_1)$ bukan potensial Coulomb sederhana, faktor radial $R_1(r_1)$ bukan fungsi mirip hidrogen. Dari himpunan solusi $R_1(r_1)$, dipilih solusi yang sesuai dengan orbital yang sedang diperbaiki. Sebagai contoh, jika elektron 1 adalah elektron 1s dalam konfigurasi berilium $1s^22s^2$, maka $V_1(r_1)$ dihitung dari orbital tebakan satu elektron 1s dan dua elektron 2s, lalu solusi radial (11.9) dengan k = 0 digunakan untuk memperoleh orbital 1s yang lebih baik.

Kemudian kita beralih ke elektron 2 dan menganggapnya bergerak dalam awan muatan dengan rapat

$$-e[|\tau_1(1)|^2 + |s_3(3)|^2 + |s_4(4)|^2 + \cdots + |s_n(n)|^2]$$

yang berasal dari elektron-elektron lainnya. Energi potensial efektif $V_2(r_2)$ dihitung dan persamaan Schrödinger satu-elektron untuk elektron 2 diselesaikan guna memperoleh orbital yang lebih baik, $\tau_2(2)$. Proses ini dilanjutkan sampai diperoleh satu set orbital yang telah diperbaiki untuk seluruh n elektron. Setelah itu, proses kembali ke elektron 1 dan diulangi. Orbital terus diperbaiki sampai tidak ada lagi perubahan dari satu iterasi ke iterasi berikutnya. Himpunan orbital terakhir memberikan fungsi gelombang medan konsisten-diri Hartree.

Bagaimana energi atom diperoleh dalam hampiran SCF? Tampaknya wajar mengambil jumlah energi orbital elektron, $\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \cdots + \varepsilon_n$, tetapi hal ini keliru. Dalam menghitung energi orbital ε_1, persamaan Schrödinger satu-elektron (11.9) diselesaikan secara iteratif. Energi potensial dalam (11.9) memuat, secara rata-rata, energi tolakan antara elektron 1 dan 2, 1 dan 3, …, 1 dan n. Ketika ε_2 dihitung, persamaan Schrödinger satu-elektron yang diselesaikan memuat tolakan antara elektron 2 dan 1, 2 dan 3, …, 2 dan n. Jika $\Sigma_i\varepsilon_i$ diambil begitu saja, setiap tolakan antarelektron akan terhitung dua kali. Untuk memperoleh energi total atom E dengan benar, harus digunakan

$$E = \Sigma_{i=1}^{n} \varepsilon_i - \Sigma_{i=1}^{n-1} \Sigma_{j=i+1}^{n} \iint [e^2|g_i(i)|^2|g_j(j)|^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{ij})] \, d\tau_i d\tau_j = \Sigma_i \varepsilon_i - \Sigma_i\Sigma_{j(j>i)} J_{ij} \tag{11.10}$$

Dalam persamaan ini, tolakan rata-rata elektron pada orbital Hartree dalam (11.4) dikurangkan dari jumlah energi orbital; notasi J_{ij} digunakan untuk integral Coulomb [Pers. (9.99)].

Himpunan orbital yang memiliki bilangan kuantum utama n tertentu membentuk sebuah kulit. Kulit n = 1, 2, 3, … masing-masing dinamakan kulit K, L, M, …. Orbital-orbital dengan n dan l tertentu membentuk subkulit. Pertimbangkan jumlah rapat probabilitas Hartree bagi elektron-elektron dalam subkulit penuh. Dengan menggunakan (11.5), diperoleh

$$2\Sigma_{m=-l}^{l} |h_{n,l}(r)|^2 |Y_l^m(\theta,\phi)|^2 = 2|h_{n,l}(r)|^2 \Sigma_{m=-l}^{l} |Y_l^m(\theta,\phi)|^2 \tag{11.11}$$

Faktor 2 berasal dari pasangan elektron dalam setiap orbital. Teorema penjumlahan harmonik sferis (Merzbacher, Bagian 9.7) menunjukkan bahwa jumlah di ruas kanan (11.11) sama dengan $(2l + 1)/(4\pi)$. Dengan demikian, jumlah rapat probabilitas adalah $[(2l + 1)/(2\pi)]|h_{n,l}(r)|^2$, yang tidak bergantung pada sudut. Subkulit tertutup menghasilkan rapat probabilitas yang bersimetri sferis; hasil ini disebut teorema Unsöld. Untuk subkulit setengah penuh, faktor 2 dihilangkan dari (11.11), dan dalam hal ini juga diperoleh rapat probabilitas bersimetri sferis.

Metode SCF Hartree–Fock

Pembaca yang cermat mungkin telah menyadari bahwa fungsi gelombang hasil kali Hartree (11.4) mengandung kekeliruan mendasar. Walaupun spin dan asas larangan Pauli telah sedikit diperhatikan dengan membatasi paling banyak dua elektron pada setiap orbital ruang, setiap hampiran terhadap fungsi gelombang sejati seharusnya memasukkan spin secara eksplisit dan harus bersifat antisimetris terhadap pertukaran elektron (Bab 10). Karena itu, sebagai pengganti orbital ruang, harus digunakan spin-orbital dan harus diambil kombinasi linear antisimetris dari hasil kali spin-orbital. Hal ini ditunjukkan oleh Fock—dan juga Slater—pada tahun 1930; perhitungan SCF yang memakai spin-orbital terantisimetrikan disebut perhitungan Hartree–Fock.

Telah diketahui bahwa determinan Slater dari spin-orbital memberikan antisimetrisasi yang tepat. Sebagai contoh, untuk melakukan perhitungan Hartree–Fock keadaan dasar litium, kita memulai dengan fungsi (10.54), dengan f dan g sebagai tebakan bagi orbital 1s dan 2s. Proses iterasi SCF kemudian dilakukan sampai tidak ada lagi perbaikan pada f dan g. Hasilnya adalah fungsi gelombang Hartree–Fock keadaan dasar litium.

Persamaan diferensial untuk menentukan orbital Hartree–Fock memiliki bentuk umum yang sama dengan (11.9):

$$\hat{F}u_i = \varepsilon_i u_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n \tag{11.12}$$

Di sini u_i adalah spin-orbital ke-i; operator $\hat{F}$, yang disebut operator Fock atau operator Hartree–Fock, merupakan Hamiltonian efektif Hartree–Fock; dan nilai eigen ε_i adalah energi orbital spin-orbital i. Akan tetapi, operator Hartree–Fock $\hat{F}$ memiliki suku tambahan dibandingkan Hamiltonian efektif Hartree yang diberikan oleh suku dalam kurung pada (11.9). Ungkapan Hartree–Fock untuk energi total atom melibatkan integral pertukaran K_{ij} selain integral Coulomb yang terdapat dalam ungkapan Hartree (11.10). Lihat Bagian 14.3. [Sesungguhnya, Pers. (11.12) hanya berlaku ketika fungsi gelombang Hartree–Fock dapat ditulis sebagai satu determinan Slater, seperti pada atom bersubkulit tertutup dan atom dengan hanya satu elektron di luar subkulit tertutup. Ketika fungsi gelombang Hartree–Fock memuat lebih dari satu determinan Slater, persamaan Hartree–Fock lebih rumit daripada (11.12).]

Energi orbital ε_i dalam persamaan Hartree–Fock (11.12) dapat ditunjukkan sebagai hampiran yang baik terhadap negatif energi yang diperlukan untuk mengionisasi atom

bersubkulit tertutup dengan melepaskan sebuah elektron dari spin-orbital i. Pernyataan ini dikenal sebagai teorema Koopmans (Bagian 15.5).

Pada mulanya, perhitungan atom Hartree–Fock dilakukan dengan metode numerik untuk menyelesaikan persamaan diferensial Hartree–Fock (11.12), dan orbital yang dihasilkan diberikan sebagai tabel fungsi radial untuk berbagai nilai r. [Metode Numerov (Bagian 4.4 dan 6.9) dapat digunakan untuk menyelesaikan persamaan radial Hartree–Fock bagi faktor radial dalam orbital Hartree–Fock; faktor sudutnya berupa harmonik sferis. Lihat D. R. Hartree, *The Calculation of Atomic Structures*, Wiley, 1957; C. Froese Fischer, *The Hartree–Fock Method for Atoms*, Wiley, 1977.]

Pada tahun 1951, Roothaan mengusulkan agar orbital Hartree–Fock dinyatakan sebagai kombinasi linear dari satu himpunan lengkap fungsi yang diketahui, yang disebut fungsi basis. Jadi, untuk litium orbital ruang Hartree–Fock 1s dan 2s ditulis sebagai

$$f = \Sigma_i b_i \chi_i, \quad g = \Sigma_i c_i \chi_i \tag{11.13}$$

Fungsi χ_i membentuk suatu himpunan lengkap, sedangkan b_i dan c_i adalah koefisien ekspansi yang ditentukan melalui prosedur iterasi SCF. Karena fungsi χ_i membentuk himpunan lengkap, ekspansi tersebut sah. Prosedur ekspansi Roothaan memungkinkan fungsi gelombang Hartree–Fock ditentukan dengan aljabar matriks (lihat Bagian 14.3 untuk rincian). Prosedur Roothaan mudah diterapkan pada komputer dan sering digunakan untuk menentukan fungsi gelombang atom Hartree–Fock, serta hampir selalu digunakan untuk menentukan fungsi gelombang molekul Hartree–Fock.

Salah satu himpunan fungsi basis yang umum digunakan dalam perhitungan atom Hartree–Fock adalah himpunan orbital tipe Slater (Slater-type orbitals, STO) yang bentuk ternormalisasinya ialah

$$\chi_{nlm\zeta}(r,\theta,\phi) = [(2\zeta/a_0)^{n+1/2}/\sqrt{((2n)!)}]\, r^{n-1} e^{-\zeta r/a_0} Y_l^m(\theta,\phi) \tag{11.14}$$

Himpunan semua fungsi semacam ini—dengan n, l, dan m berupa bilangan bulat yang memenuhi (6.96)–(6.98), sedangkan ζ mengambil semua nilai positif yang mungkin—membentuk suatu himpunan lengkap. Parameter ζ disebut eksponen orbital. Untuk merepresentasikan orbital Hartree–Fock secara sungguh-sungguh akurat, harus digunakan jumlah orbital Slater yang tak berhingga dalam ekspansi. Dalam praktik, hasil yang sangat akurat dapat diperoleh hanya dengan beberapa orbital Slater yang dipilih secara cermat. Kemungkinan lain ialah menggunakan fungsi basis tipe Gaussian; lihat Bagian 15.4.

Clementi dan Roetti melakukan perhitungan Hartree–Fock untuk keadaan dasar dan beberapa keadaan tereksitasi dari 54 unsur pertama dalam tabel periodik [E. Clementi dan C. Roetti, *At. Data Nucl. Data Tables*, **14**, 177 (1974); Bunge dan rekan-rekannya kemudian menghitung ulang fungsi gelombang ini: C. F. Bunge et al., *At. Data Nucl. Data Tables*, **53**, 113 (1993); *Phys. Rev. A*, **46**, 3691 (1992)]. Sebagai contoh, pertimbangkan fungsi gelombang keadaan dasar Hartree–Fock helium, yang berbentuk [lihat Pers. (10.41)]

$$\psi = f(1)f(2)\cdot 2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)]$$

Clementi dan Roetti menyatakan fungsi orbital 1s, f, sebagai kombinasi berikut dari lima orbital tipe Slater 1s:

$$f = \pi^{-1/2} \Sigma_{i=1}^{5} c_i(\zeta_i/a_0)^{3/2} e^{-\zeta_i r/a0}$$

Koefisien ekspansinya adalah $c_1 = 0{,}76838$; $c_2 = 0{,}22346$; $c_3 = 0{,}04082$; $c_4 = -0{,}00994$; dan $c_5 = 0{,}00230$. Eksponen orbitalnya adalah $\zeta_1 = 1{,}41714$; $\zeta_2 = 2{,}37682$; $\zeta_3 = 4{,}39628$; $\zeta_4 = 6{,}52699$; dan $\zeta_5 = 7{,}94252$. [Suku terbesar dalam ekspansi mempunyai eksponen orbital yang mirip dengan eksponen orbital (9.62) untuk fungsi coba sederhana (9.56).] Energi Hartree–Fock adalah −77,9 eV, dibandingkan energi nonrelativistik sejati −79,0 eV. Energi orbital 1s

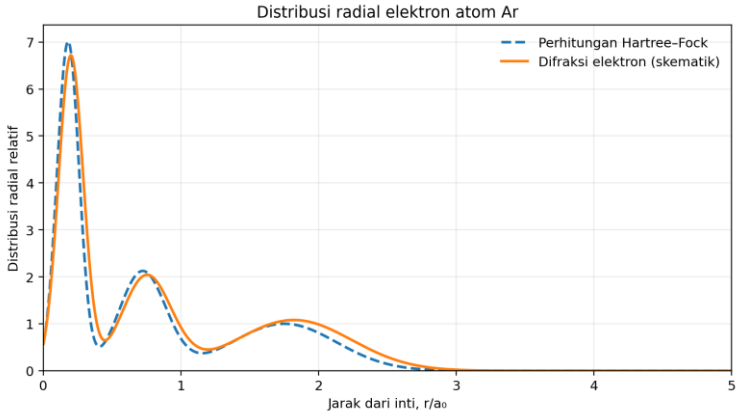
yang bersesuaian dengan f ditemukan sebesar −25,0 eV, dibandingkan energi ionisasi helium eksperimen sebesar 24,6 eV.

Untuk keadaan dasar litium, Clementi dan Roetti menggunakan himpunan basis yang terdiri atas dua STO 1s dengan eksponen orbital berbeda dan empat STO 2s dengan eksponen orbital berbeda. Orbital Hartree–Fock 1s dan 2s litium masing-masing dinyatakan sebagai kombinasi linear keenam fungsi basis tersebut. Energi Hartree–Fock adalah −202,3 eV, dibandingkan energi sejati −203,5 eV.

Rapat elektron yang dihitung dari fungsi gelombang Hartree–Fock cukup akurat. Gambar 11.1 membandingkan fungsi distribusi radial argon—yang diperoleh dengan mengintegralkan rapat elektron terhadap sudut θ dan ϕ, kemudian mengalikan hasilnya dengan r^2—hasil perhitungan metode Hartree–Fock, dengan fungsi distribusi radial eksperimen yang diperoleh melalui difraksi elektron. (Ingat dari Bagian 6.6 bahwa fungsi distribusi radial sebanding dengan probabilitas menemukan elektron dalam kulit bola tipis pada jarak r dari inti.) Perhatikan struktur kulit elektron pada Gambar 11.1. Muatan inti yang tinggi pada ^{18}Ar menyebabkan jarak rata-rata elektron 1s dari inti jauh lebih kecil daripada pada H atau He. Karena itu, hanya terjadi kenaikan ukuran atom yang sedang ketika bergerak ke bawah dalam satu golongan tabel periodik.

Perhitungan menunjukkan bahwa jari-jari bola yang memuat 98% rapat probabilitas elektron Hartree–Fock menghasilkan jari-jari atom yang sesuai dengan baik dengan jari-jari van der Waals yang ditentukan secara empiris. [Lihat C. W. Kammeyer dan D. R. Whitman, *J. Chem. Phys.*, **56**, 4419 (1972).]

Walaupun fungsi distribusi radial suatu atom memperlihatkan struktur kulit, rapat probabilitas elektron yang diintegralkan terhadap sudut dan diplot terhadap r tidak berosilasi. Untuk atom keadaan dasar, rapat probabilitas ini maksimum di inti—karena adanya elektron s—dan terus menurun ketika r bertambah. Demikian pula dalam molekul, maksimum rapat probabilitas elektron biasanya berada pada inti; lihat, misalnya, Gambar 13.7. [Untuk pembahasan lebih lanjut, lihat H. Weinstein, P. Politzer, dan S. Srebnik, *Theor. Chim. Acta*, **38**, 159 (1975).]



Gambar 11.1 *Fungsi distribusi radial argon sebagai fungsi r. Garis putus-putus menunjukkan hasil perhitungan Hartree–Fock, sedangkan garis penuh menunjukkan hasil data difraksi elektron. Gambar dibuat ulang secara konseptual berdasarkan uraian dan bentuk kurva sumber.*

Representasi akurat suatu orbital atom (OA) berelektron banyak memerlukan kombinasi linear beberapa orbital tipe Slater. Untuk perhitungan kasar, akan lebih mudah jika tersedia hampiran OA yang sederhana. Kita dapat memakai orbital mirip hidrogen dengan muatan inti efektif, tetapi Slater mengusulkan cara yang bahkan lebih sederhana: menghampiri suatu OA dengan satu fungsi berbentuk (11.14), dengan eksponen orbital ζ diambil sebagai

$$\zeta = (Z - s)/n \tag{11.15}$$

Di sini Z adalah nomor atom, n bilangan kuantum utama orbital, dan s konstanta pemerisaian yang dihitung dengan seperangkat aturan (lihat Soal 15.62). Orbital Slater menggantikan polinom dalam r pada orbital mirip hidrogen dengan satu pangkat r. Karena itu, satu orbital Slater tidak memiliki jumlah simpul radial yang semestinya dan tidak merepresentasikan bagian dalam orbital dengan baik.

Diperlukan komputasi yang sangat banyak untuk melakukan perhitungan SCF Hartree–Fock bagi atom berelektron banyak. Hartree melakukan beberapa perhitungan SCF pada dasawarsa 1930-an, ketika komputer elektronik belum ada. Beruntung, ayah Hartree, seorang insinyur pensiunan, gemar melakukan komputasi numerik sebagai hobi dan membantu putranya. Dewasa ini, komputer telah menggantikan ayah Hartree.

11.2 Orbital dan Tabel Periodik

Konsep orbital dan asas larangan Pauli memungkinkan kita memahami tabel periodik unsur. Orbital adalah fungsi gelombang ruang satu-elektron. Orbital telah digunakan untuk memperoleh fungsi gelombang hampiran bagi atom berelektron banyak dengan menuliskan fungsi gelombang sebagai determinan Slater dari spin-orbital satu-elektron. Dalam hampiran paling kasar, seluruh tolakan antarelektron diabaikan dan diperoleh orbital mirip hidrogen. Orbital terbaik yang mungkin ialah fungsi SCF Hartree–Fock. Tabel periodik dibangun dengan memasukkan elektron ke dalam orbital-orbital ini, yang masing-masing dapat ditempati sepasang elektron dengan spin berlawanan.

Latter [R. Latter, *Phys. Rev.*, **99**, 510 (1955)] menghitung energi orbital hampiran bagi atom-atom dalam tabel periodik dengan mengganti bentuk rumit energi potensial Hartree–Fock dalam persamaan radial Hartree–Fock dengan fungsi yang jauh lebih sederhana, yang diperoleh melalui metode Thomas–Fermi–Dirac. Metode tersebut menggunakan gagasan mekanika statistik untuk memperoleh hampiran fungsi energi potensial efektif bagi sebuah elektron dan fungsi rapat elektron dalam atom (Bethe dan Jackiw, Bab 5). Gambar 11.2 memperlihatkan energi orbital yang dihasilkan Latter untuk atom netral dalam keadaan dasar. Energi OA tersebut cukup sesuai dengan energi orbital Hartree–Fock maupun energi orbital eksperimen (lihat J. C. Slater, *Quantum Theory of Matter*, edisi ke-2, McGraw-Hill, 1968, hlm. 146, 147, 325, 326).

Energi orbital berubah ketika nomor atom Z berubah. Dengan bertambahnya Z, energi orbital menurun karena tarikan antara inti dan elektron semakin kuat. Penurunan ini paling cepat untuk orbital dalam, yang kurang terlindungi dari inti.

Untuk $Z > 1$, orbital dengan nilai n yang sama tetapi l berbeda memiliki energi yang berbeda. Sebagai contoh, untuk energi orbital $n = 3$ berlaku $\varepsilon_{3s} < \varepsilon_{3p} < \varepsilon_{3d}$ pada $Z > 1$. Pemisahan tingkat-tingkat yang terdegenerasi dalam atom hidrogen ini timbul akibat tolakan antarelektron. (Ingat perlakuan perturbasi helium dalam Bagian 9.7.) Pada limit $Z \to \infty$, orbital dengan n yang sama kembali terdegenerasi karena tolakan antarelektron menjadi tidak berarti dibandingkan tarikan elektron–inti.

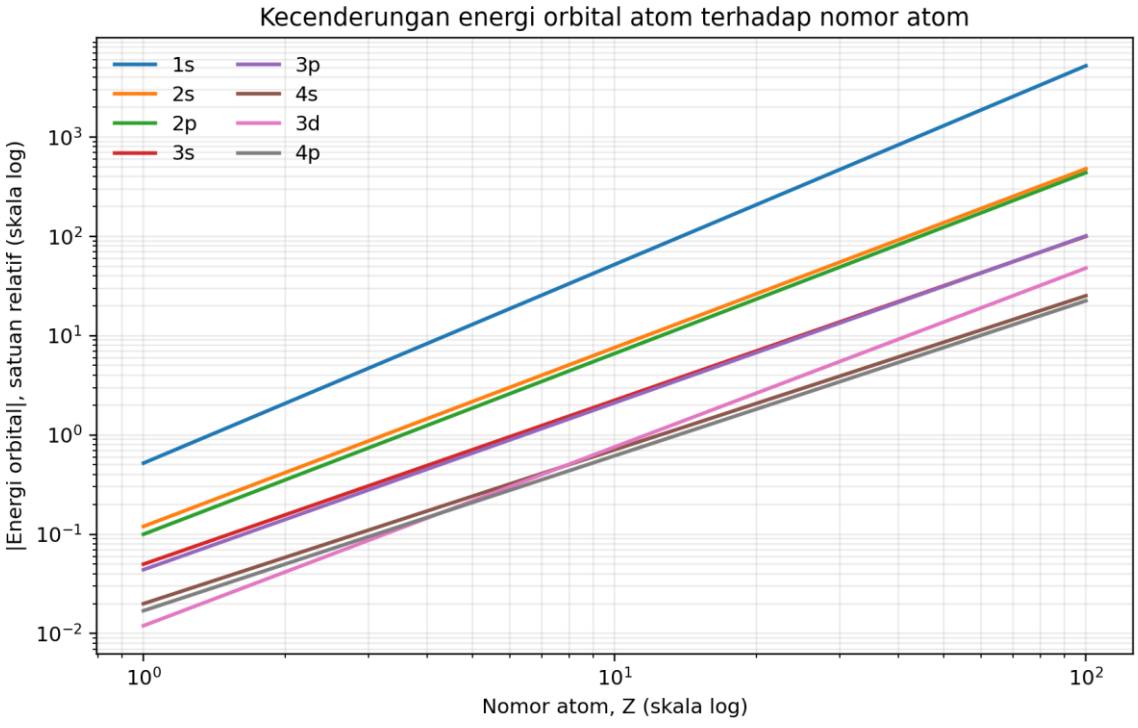
Kedudukan relatif beberapa orbital berubah bersama Z. Pada hidrogen, orbital 3d berada di bawah orbital 4s, tetapi untuk Z antara 7 dan 20, orbital 4s berada di bawah 3d. Pada Z besar, 3d kembali lebih rendah. Pada $Z = 19$, 4s lebih rendah; karena itu ^{19}K memiliki konfigurasi keadaan dasar $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s$. Ingat bahwa orbital s lebih menembus dibandingkan orbital p atau d; sifat ini memungkinkan orbital 4s berada di bawah 3d untuk beberapa nilai Z.

Perhatikan penurunan mendadak energi 3d yang dimulai pada Z = 21, ketika pengisian orbital 3d mulai berlangsung. Elektron-elektron pada orbital 3d tidak saling memerisaikan dengan baik; akibatnya energi 3d turun tajam. Penurunan serupa terjadi pada orbital-orbital lain.

Untuk membantu menjelaskan konfigurasi elektron yang diamati pada unsur transisi dan ionnya, Vanquickenborne dan rekan-rekannya menghitung energi orbital Hartree–Fock 3d dan 4s bagi atom dan ion dengan Z = 1 sampai Z = 29 [L. G. Vanquickenborne et al., *Inorg. Chem.*, **28**, 1805 (1989); *J. Chem. Educ.*, **71**, 469 (1994)].

Salah satu kerumitannya ialah bahwa satu konfigurasi elektron dapat menghasilkan banyak keadaan. [Sebagai contoh, ingat beberapa keadaan dari konfigurasi He 1s2s dan 1s2p (Bagian 9.7 dan 10.4).] Untuk menghindari kerumitan ini, Vanquickenborne dan rekan-rekannya menghitung orbital Hartree–Fock dan energi orbital dengan meminimumkan energi rata-rata E_{rata} dari keadaan-keadaan yang berasal dari konfigurasi elektron tertentu, bukan dengan meminimumkan energi setiap keadaan secara terpisah. Orbital rata-rata yang diperoleh hanya sedikit berbeda dari orbital Hartree–Fock sejati untuk suatu keadaan tertentu dari konfigurasi tersebut.

Untuk setiap atom dari ^{1}H sampai ^{19}K, mereka menghitung energi orbital rata-rata 3d, ε_{3d}, bagi konfigurasi elektron yang dibentuk dengan memindahkan satu elektron dari orbital terisi tertinggi pada konfigurasi keadaan dasar ke orbital 3d. Energi ε_{4s} dihitung dengan cara serupa. Sesuai dengan Gambar 11.2, untuk atom netral diperoleh $\varepsilon_{3d} < \varepsilon_{4s}$ pada Z < 6 dan $\varepsilon_{4s} < \varepsilon_{3d}$ pada Z = 7 sampai 19.



Gambar 11.2 *Energi orbital atom sebagai fungsi nomor atom Z untuk atom netral, berdasarkan kecenderungan perhitungan Latter. Kedua sumbu menggunakan skala logaritmik. E_H adalah energi keadaan dasar atom hidrogen, −13,6 eV. Diagram dibuat ulang secara konseptual dengan kurva tingkat orbital 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, dan orbital yang lebih tinggi.*

Untuk membahas unsur transisi dengan Z dari 21 sampai 29, Gambar 11.2 tidak memadai karena hanya memberikan satu nilai ε_{3d} bagi setiap unsur, sedangkan ε_{3d}—dan ε_{4s}—untuk suatu atom bergantung pada orbital mana yang ditempati. Hal ini terjadi karena medan listrik

yang dialami suatu elektron bergantung pada orbital yang terisi. Vanquickenborne dan rekan-rekannya menghitung $\varepsilon_{3\mathcal{d}}$ dan ε_{4s} untuk setiap konfigurasi elektron valensi $3d^n4s^2$, $3d^{n+1}4s^1$, dan $3d^{n+2}4s^0$. Mereka menemukan $\varepsilon_{3\mathcal{d}} < \varepsilon_{4s}$ pada masing-masing konfigurasi atom netral, ion +1, dan ion +2 unsur transisi ^{21}Sc sampai ^{29}Cu, sesuai urutan yang diperlihatkan pada Gambar 11.2.

Karena 3d berada di bawah 4s untuk Z di atas 20, mungkin timbul pertanyaan mengapa konfigurasi keadaan dasar, misalnya ^{21}Sc, adalah $3d^14s^2$ dan bukan $3d^3$. Walaupun $\varepsilon_{3\mathcal{d}} < \varepsilon_{4s}$ pada masing-masing konfigurasi, hal ini tidak berarti konfigurasi $3d^3$ mempunyai jumlah energi orbital yang lebih rendah. Ketika satu elektron dipindahkan dari 4s ke 3d, baik ε_{4s} maupun $\varepsilon_{3\mathcal{d}}$ meningkat. Energi orbital ditentukan dengan menyelesaikan persamaan Hartree–Fock satu-elektron yang memuat suku energi potensial untuk tolakan rata-rata antara elektron pada orbital i dan elektron-elektron lain dalam atom. Karena itu, ε_i bergantung pada besarnya tolakan-tolakan tersebut dan pada orbital mana yang ditempati.

Untuk deret pertama unsur transisi, orbital 4s jauh lebih besar daripada orbital 3d. Sebagai contoh, Vanquickenborne dan rekan-rekannya memperoleh nilai $\langle r \rangle$ berikut pada Sc: untuk konfigurasi $3d^14s^2$, $\langle r \rangle_{3\mathcal{d}} = 0{,}89$ Å dan $\langle r \rangle_{4s} = 2{,}09$ Å; untuk konfigurasi $3d^24s^1$, $\langle r \rangle_{3\mathcal{d}} = 1{,}11$ Å dan $\langle r \rangle_{4s} = 2{,}29$ Å. Karena perbedaan ukuran ini, tolakan yang melibatkan elektron 4s jauh lebih kecil daripada tolakan yang melibatkan elektron 3d, sehingga berlaku

$$(4s,4s) < (4s,3d) < (3d,3d)$$

Di sini (4s,3d) menyatakan tolakan rata-rata antara elektron yang tersebar pada orbital 3d dan elektron dalam orbital 4s. (Tolakan-tolakan ini dinyatakan melalui integral Coulomb dan integral pertukaran.) Ketika satu elektron dipindahkan dari 4s ke 3d, kenaikan tolakan antarelektron yang mengikuti pertidaksamaan di atas menaikkan energi orbital $\varepsilon_{3\mathcal{d}}$ dan ε_{4s}.

Sebagai contoh, untuk ^{21}Sc, konfigurasi $3d^14s^2$ mempunyai $\varepsilon_{3\mathcal{d}} = -9{,}35$ eV dan $\varepsilon_{4s} = -5{,}72$ eV, sedangkan konfigurasi $3d^24s^1$ mempunyai $\varepsilon_{3\mathcal{d}} = -5{,}23$ eV dan $\varepsilon_{4s} = -5{,}06$ eV. Untuk konfigurasi $3d^14s^2$, jumlah energi orbital elektron valensi adalah $-9{,}35$ eV + 2($-5{,}72$ eV) = $-20{,}79$ eV, sedangkan untuk konfigurasi $3d^24s^1$ jumlahnya 2($-5{,}23$ eV) − 5,06 eV = $-15{,}52$ eV. Jadi, walaupun $\varepsilon_{3\mathcal{d}} < \varepsilon_{4s}$ untuk setiap konfigurasi, pemindahan elektron dari 4s ke 3d menaikkan jumlah energi orbital elektron valensi pada Sc. [Sebagaimana terlihat pada Pers. (11.10) untuk metode Hartree dan akan diperlihatkan dalam Bagian 14.3 untuk metode Hartree–Fock, ungkapan energi atom Hartree dan Hartree–Fock memuat suku selain jumlah energi orbital. Karena itu, kestabilan relatif konfigurasi tidak dapat ditentukan hanya dari jumlah energi orbital.]

Pada ion +2 logam transisi, berkurangnya pemerisaian menyebabkan elektron valensi 3d dan 4s merasakan muatan inti efektif $Z_{e}ff$ yang lebih besar daripada pada atom netral. Dengan analogi terhadap persamaan atom H $E = -(Z^2/n^2)[e^2/(8\pi\varepsilon_0 a_0)]$ [Pers. (6.94)], energi orbital $\varepsilon_{3\mathcal{d}}$ dan ε_{4s} masing-masing kira-kira sebanding dengan $Z_{e}ff^2$, dan selisih energi $\varepsilon_{4s} - \varepsilon_{3\mathcal{d}}$ juga kira-kira sebanding dengan $Z_{e}ff^2$. Dengan demikian, selisih $\varepsilon_{4s} - \varepsilon_{3\mathcal{d}}$ jauh lebih besar pada ion logam transisi daripada pada atom netral. Kenaikan tolakan elektron valensi tidak lagi cukup untuk membuat perpindahan 4s ke 3d tidak menguntungkan secara energi; akibatnya, ion +2 mempunyai konfigurasi keadaan dasar tanpa elektron 4s.

Untuk pembahasan lebih lanjut mengenai konfigurasi elektron, lihat W. H. E. Schwarz, *J. Chem. Educ.*, **87**, 444 (2010); Schwarz dan R. L. Rich, *ibid.*, **87**, 435.

Gambar 11.2 menunjukkan bahwa pemisahan antara orbital ns dan np jauh lebih kecil daripada pemisahan antara np dan nd, sehingga menghasilkan oktet stabil ns^2np^6 yang sudah dikenal.

Konsep orbital merupakan dasar kebanyakan pembahasan kualitatif mengenai kimia atom dan molekul. Namun, penggunaan orbital adalah suatu hampiran. Untuk mencapai fungsi gelombang sejati, kita harus melampaui satu determinan Slater dari spin-orbital.

11.3 Korelasi Elektron

Energi yang dihitung dengan metode Hartree–Fock biasanya memiliki galat sekitar 1/2% untuk atom ringan. Secara absolut nilai ini tampak kecil, tetapi bagi kimiawan galat tersebut terlalu besar. Sebagai contoh, energi total atom karbon kira-kira −1000 eV, dan 1/2% dari nilai ini adalah 5 eV. Energi ikatan tunggal kimia umumnya juga sekitar 5 eV. Menghitung energi ikatan dengan mengambil selisih antara energi molekul dan atom Hartree–Fock—yang pada atom ringan masing-masing dapat salah beberapa elektronvolt—merupakan prosedur yang tidak dapat diandalkan. Oleh karena itu, harus dicari cara untuk memperbaiki fungsi gelombang dan energi Hartree–Fock. (Pembahasan ini berlaku bagi molekul maupun atom.)

Fungsi gelombang SCF Hartree–Fock memperhitungkan interaksi antarelektron hanya secara rata-rata. Sebenarnya, interaksi sesaat antarelektron harus diperhatikan. Karena elektron saling menolak, elektron cenderung saling menghindar. Sebagai contoh, pada helium, jika pada suatu saat satu elektron berada dekat inti, secara energi lebih menguntungkan apabila elektron lainnya berada jauh dari inti pada saat yang sama. Kadang-kadang dikatakan bahwa setiap elektron dalam atom dikelilingi oleh lubang Coulomb, yaitu daerah dengan probabilitas kecil untuk menemukan elektron lain. Gerak elektron saling berkorelasi; gejala ini disebut korelasi elektron. Karena itu, korelasi elektron sesaat harus dimasukkan ke dalam fungsi gelombang.

Sesungguhnya, fungsi gelombang Hartree–Fock telah memuat sebagian korelasi elektron sesaat. Fungsi Hartree–Fock memenuhi syarat antisimetris. Oleh sebab itu [Pers. (10.20)], fungsi tersebut bernilai nol ketika dua elektron dengan spin yang sama mempunyai koordinat ruang yang sama. Dalam fungsi Hartree–Fock, probabilitas menemukan elektron berspin sama pada daerah ruang yang sama sangat kecil, sehingga fungsi tersebut memuat korelasi tertentu antara gerak elektron yang berspin sama. Hal ini membuat energi Hartree–Fock lebih rendah daripada energi Hartree. Kadang-kadang digunakan istilah lubang Fermi di sekitar setiap elektron dalam fungsi gelombang Hartree–Fock, yang menunjukkan daerah dengan probabilitas kecil untuk menemukan elektron lain yang memiliki spin sama.

Energi korelasi E_{kor} adalah selisih antara energi nonrelativistik eksak E_{nonrel} dan energi Hartree–Fock nonrelativistik E_HF:

$$E_{kor} \equiv E_{nonrel} - E\_HF \tag{11.16}$$

E_{nonrel} dan E_HF harus sama-sama memasukkan koreksi gerak inti atau sama-sama mengabaikannya. Untuk atom He, energi Hartree–Fock nonrelativistik yang belum dikoreksi terhadap gerak inti adalah $-2{,}861681[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)]$ [E. Clementi dan C. Roetti, *At. Data Nucl. Data Tables*, **14**, 177 (1974)], sedangkan perhitungan variasi (Bagian 9.4) memberikan energi nonrelativistik eksak yang juga belum dikoreksi terhadap gerak inti sebesar $-2{,}903721[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)]$. Karena itu,

$$E_{kor},He = -2{,}903721[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)] + 2{,}861681[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)] = -0{,}042041[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)] = -1{,}14 \text{ eV}$$

Untuk atom dan molekul yang E_{nonrel}-nya tidak dapat dihitung secara akurat, energi eksperimen digabungkan dengan taksiran koreksi relativistik dan koreksi gerak inti untuk memperoleh E_{nonrel}. Bagi atom netral dalam keadaan dasar, $|E_{kor}|$ ditemukan meningkat kira-kira secara linear terhadap pangkat 1,31 dari jumlah elektron n:

$$E_{kor} \approx -0{,}0170n^{1.31}[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)] = -0{,}0170n^{1.31}(27{,}2 \text{ eV})$$

[E. Clementi dan G. Corongiu, *Int. J. Quantum Chem.*, **62**, 571 (1997)]. Persentase $(E_{kor}/E_{nonrel}) \times 100\%$ menurun ketika nomor atom meningkat. Beberapa nilainya ialah 0,6% untuk Li, 0,4% untuk C, 0,2% untuk Na, dan 0,1% untuk K.

Dua cara untuk memasukkan korelasi elektron sesaat telah disinggung. Cara pertama ialah memasukkan jarak antarelektron r_{ij} secara eksplisit ke dalam fungsi gelombang (Bagian 9.4).

Cara kedua ialah interaksi konfigurasi. Dalam Bagian 9.3 dan 10.4, fungsi gelombang orde nol untuk keadaan dasar atom helium $1s^2$ diperoleh sebagai

$$1s(1)1s(2)[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]/\sqrt{2}$$

Telah dinyatakan bahwa koreksi orde pertama dan orde lebih tinggi terhadap fungsi gelombang akan mencampurkan sumbangan dari konfigurasi tereksitasi, sehingga menimbulkan interaksi konfigurasi (configuration interaction, CI), yang juga disebut pencampuran konfigurasi (configuration mixing, CM).

Cara yang paling umum untuk melakukan perhitungan interaksi konfigurasi pada atom atau molekul menggunakan metode variasi. Mula-mula dipilih himpunan basis fungsi satu-elektron χ_i. Secara prinsip, himpunan basis ini harus lengkap. Dalam praktik, kita dibatasi pada himpunan basis berukuran hingga. Diharapkan bahwa pemilihan fungsi basis yang baik akan memberikan hampiran yang baik terhadap himpunan lengkap. Dalam perhitungan atom, STO [Pers. (11.14)] sering dipilih sebagai fungsi basis.

Orbital atom atau molekul SCF, φ_i, dituliskan sebagai kombinasi linear anggota himpunan basis [lihat (11.13)], lalu persamaan Hartree–Fock (11.12) diselesaikan untuk memperoleh koefisien dalam kombinasi linear tersebut. Jumlah orbital atom atau molekul yang diperoleh sama dengan jumlah fungsi basis yang digunakan. Orbital berenergi paling rendah menjadi orbital terisi untuk keadaan dasar. Orbital sisanya yang tidak terisi disebut orbital virtual.

Dengan memakai himpunan spin-orbital terisi dan virtual, dapat dibentuk fungsi berelektron banyak antisimetris yang mempunyai okupansi orbital berbeda. Sebagai contoh, untuk helium dapat dibentuk fungsi yang bersesuaian dengan konfigurasi elektron $1s^2$, 1s2s, 1s2p, $2s^2$, 2s2p, $2p^2$, 1s3s, dan seterusnya. Selain itu, lebih dari satu fungsi dapat bersesuaian dengan satu konfigurasi elektron. Ingat fungsi (10.27) sampai (10.30) yang bersesuaian dengan konfigurasi helium 1s2s.

Setiap fungsi berelektron banyak Φ_i tersebut berupa determinan Slater atau kombinasi linear beberapa determinan Slater. Penggunaan lebih dari satu determinan Slater diperlukan bagi beberapa fungsi kulit terbuka seperti (10.44) dan (10.45). Setiap Φ_i disebut fungsi keadaan konfigurasi, fungsi konfigurasi, atau cukup "konfigurasi". (Nama terakhir kurang menguntungkan karena menimbulkan kerancuan antara konfigurasi elektron seperti $1s^2$ dan fungsi konfigurasi seperti |1s 1s|.)

Sebagaimana terlihat dalam teori perturbasi, fungsi gelombang atom atau molekul sejati ψ memuat sumbangan dari konfigurasi selain konfigurasi yang memberikan sumbangan utama. Karena itu, ψ dinyatakan sebagai kombinasi linear fungsi konfigurasi Φ_i:

$$\psi = \Sigma_i c_i \Phi_i \tag{11.17}$$

Persamaan (11.17) kemudian diperlakukan sebagai fungsi variasi linear (Bagian 8.5). Variasi koefisien c_i untuk meminimumkan integral variasi menghasilkan persamaan

$$\det(H_{ij} - ES_{ij}) = 0 \tag{11.18}$$

dengan $H_{ij} \equiv \langle \Phi_i | \hat{H} | \Phi_j \rangle$ dan $S_{ij} \equiv \langle \Phi_i | \Phi_j \rangle$. Umumnya fungsi Φ_i ortonormal; jika tidak ortogonal, fungsi-fungsi itu dapat diortogonalkan dengan metode Schmidt. [Hanya fungsi konfigurasi yang nilai eigen momentum sudutnya sama dengan nilai eigen keadaan ψ yang dapat menyumbang pada ekspansi (11.17); lihat Bagian 11.5.]

Karena fungsi konfigurasi berelektron banyak Φ_i pada akhirnya dibangun dari himpunan basis satu-elektron yang lengkap, himpunan seluruh fungsi konfigurasi yang mungkin merupakan himpunan lengkap bagi masalah berelektron banyak. Setiap fungsi berelektron banyak yang antisimetris—termasuk fungsi gelombang eksak—dapat dinyatakan sebagai kombinasi linear fungsi Φ_i. (Untuk pembuktiannya, lihat Szabo dan Ostlund, Bagian 2.2.7.) Oleh sebab itu, jika dimulai dengan himpunan basis satu-elektron lengkap dan dimasukkan semua fungsi konfigurasi yang mungkin, perhitungan CI akan memberikan fungsi gelombang atom atau molekul eksak ψ untuk keadaan yang dikaji.

Dalam praktik, kita dibatasi pada himpunan basis hingga yang tidak lengkap, bukan himpunan basis tak berhingga yang lengkap. Bahkan dengan himpunan basis berukuran sedang, jumlah fungsi konfigurasi yang mungkin sangat besar, sehingga biasanya tidak semua fungsi konfigurasi dimasukkan. Sebagian "seni" metode CI terletak pada pemilihan konfigurasi yang akan memberikan sumbangan terbesar.

Karena diperlukan sangat banyak fungsi konfigurasi untuk menghasilkan fungsi gelombang yang benar-benar akurat, perhitungan interaksi konfigurasi bagi sistem dengan lebih dari beberapa elektron memerlukan waktu yang lama, bahkan pada superkomputer. Metode lain untuk memperhitungkan korelasi elektron dibahas dalam Bab 16.

Ringkasnya—tanpa mengurangi langkah apa pun—perhitungan CI dilakukan dengan memilih himpunan basis satu-elektron χ_i; menyelesaikan secara iteratif persamaan Hartree–Fock (11.12) untuk menentukan orbital atom atau molekul satu-elektron φ_i sebagai kombinasi linear himpunan basis; membentuk fungsi konfigurasi berelektron banyak Φ_i dari orbital φ_i; menyatakan fungsi gelombang ψ sebagai kombinasi linear fungsi konfigurasi tersebut; menyelesaikan (11.18) untuk energi; dan menyelesaikan persamaan linear simultan yang terkait untuk koefisien c_i dalam (11.17). [Dalam praktik, (11.18) dan persamaan simultannya diselesaikan dengan metode matriks; lihat Bagian 8.6.]

Sebagai contoh, pertimbangkan keadaan dasar berilium. Metode SCF Hartree–Fock menentukan bentuk terbaik orbital 1s dan 2s dalam determinan Slater |1s 1s 2s 2s| dan menggunakan determinan itu sebagai fungsi gelombang keadaan dasar. [Notasi yang digunakan adalah notasi Pers. (10.47).] Untuk melampaui metode Hartree–Fock, sumbangan fungsi konfigurasi tereksitasi—misalnya |1s 1s 3s 3s|—dimasukkan ke dalam fungsi variasi linear bagi keadaan dasar.

Bunge melakukan perhitungan CI keadaan dasar berilium dengan kombinasi linear 650 fungsi konfigurasi [C. F. Bunge, *Phys. Rev. A*, **14**, 1965 (1976)]. Energi Hartree–Fock adalah $-14{,}5730[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)]$, hasil CI Bunge adalah $-14{,}6669[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)]$, dan energi nonrelativistik eksak adalah $-14{,}6674[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)]$. Bunge berhasil memperoleh 99,5% energi korelasi.

Perhitungan CI rinci untuk atom He disajikan dalam Bagian 16.2.

11.4 Penjumlahan Momentum Sudut

Untuk atom berelektron banyak, operator momentum sudut masing-masing elektron tidak komutatif dengan operator Hamiltonian, tetapi jumlahnya komutatif. Oleh karena itu, kita perlu mempelajari cara menjumlahkan momentum sudut.

Misalkan terdapat suatu sistem dengan dua vektor momentum sudut $\mathbf{M}_1$ dan $\mathbf{M}_2$. Keduanya dapat berupa vektor momentum sudut orbital dua elektron dalam atom; dapat pula berupa vektor momentum sudut spin dua elektron; atau yang satu dapat merupakan momentum sudut spin dan yang lain momentum sudut orbital dari satu elektron. Nilai eigen $\hat{M}_1^2$, $\hat{M}_2^2$, $\hat{M}_{1z}$, dan $\hat{M}_{2z}$ berturut-turut adalah $j_1(j_1+1)\hbar^2$, $j_2(j_2+1)\hbar^2$, $m_1\hbar$, dan $m_2\hbar$, dengan bilangan kuantum yang memenuhi pembatasan biasa. Komponen $\hat{M}_1$ dan $\hat{M}_2$ memenuhi relasi komutasi momentum sudut [Pers. (5.46), (5.48), dan (5.107)]:

$$[\hat{M}_1x, \hat{M}_1y] = i\hbar\hat{M}_1z, \text{ dan seterusnya}; \quad [\hat{M}_2x, \hat{M}_2y] = i\hbar\hat{M}_2z, \text{ dan seterusnya} \tag{11.19}$$

Kita mendefinisikan momentum sudut total **M** sistem sebagai jumlah vektor

$$M = M_1 + M_2 \tag{11.20}$$

M adalah vektor dengan tiga komponen:

$$M = M_x\, i + M_\gamma\, j + M\_z\, k \tag{11.21}$$

Persamaan vektor (11.20) menghasilkan tiga persamaan skalar

$$M_x = M_1x + M_2x, \quad M_\gamma = M_1y + M_2y, \quad M\_z = M_1z + M_2z \tag{11.22}$$

Untuk operator $\hat{M}^2$, diperoleh

$$\hat{M}^2 = \hat{M} \cdot \hat{M} = \hat{M}_x{}^2 + \hat{M}_\gamma{}^2 + \hat{M}\_z{}^2 \tag{11.23}$$

$$\hat{M}^2 = (\hat{M}_1 + \hat{M}_2) \cdot (\hat{M}_1 + \hat{M}_2) = \hat{M}_1{}^2 + \hat{M}_2{}^2 + \hat{M}_1 \cdot \hat{M}_2 + \hat{M}_2 \cdot \hat{M}_1 \tag{11.24}$$

Jika $\hat{M}_1$ dan $\hat{M}_2$ merujuk pada elektron yang berbeda, keduanya komutatif karena masing-masing hanya bekerja pada fungsi koordinat satu elektron dan bukan elektron lainnya. Bahkan jika $\hat{M}_1$ dan $\hat{M}_2$ merupakan momentum sudut orbital dan spin dari elektron yang sama, keduanya tetap komutatif, sebab yang satu hanya bekerja pada fungsi koordinat ruang sedangkan yang lain bekerja pada fungsi koordinat spin. Dengan demikian, (11.24) menjadi

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_1{}^2 + \hat{M}_2{}^2 + 2\hat{M}_1 \cdot \hat{M}_2 \tag{11.25}$$

$$\hat{M}^2 = \hat{M}_1{}^2 + \hat{M}_2{}^2 + 2(\hat{M}_1x\hat{M}_2x + \hat{M}_1y\hat{M}_2y + \hat{M}_1z\hat{M}_2z) \tag{11.26}$$

Sekarang kita tunjukkan bahwa komponen momentum sudut total memenuhi relasi komutasi momentum sudut biasa. Berdasarkan Pers. (5.4),

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_\gamma] = [\hat{M}_1x + \hat{M}_2x, \hat{M}_1y + \hat{M}_2y]$$
$$= [\hat{M}_1x, \hat{M}_1y + \hat{M}_2y] + [\hat{M}_2x, \hat{M}_1y + \hat{M}_2y]$$
$$= [\hat{M}_1x, \hat{M}_1y] + [\hat{M}_1x, \hat{M}_2y] + [\hat{M}_2x, \hat{M}_1y] + [\hat{M}_2x, \hat{M}_2y]$$

Karena semua komponen $\hat{M}_1$ komutatif dengan semua komponen $\hat{M}_2$, maka

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_\gamma] = [\hat{M}_1x, \hat{M}_1y] + [\hat{M}_2x, \hat{M}_2y] = i\hbar\hat{M}_1z + i\hbar\hat{M}_2z$$

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_\gamma] = i\hbar\hat{M}\_z \tag{11.27}$$

Permutasi siklik x, y, dan z memberikan

$$[\hat{M}_\gamma, \hat{M}\_z] = i\hbar\hat{M}_x, \quad [\hat{M}\_z, \hat{M}_x] = i\hbar\hat{M}_\gamma \tag{11.28}$$

Aljabar komutator yang sama seperti yang digunakan untuk menurunkan (5.109) memberikan

$$[\hat{M}^2, \hat{M}_x] = [\hat{M}^2, \hat{M}_\gamma] = [\hat{M}^2, \hat{M}\_z] = 0 \tag{11.29}$$

Dengan demikian, M^2 dan salah satu komponennya—misalnya M_z—dapat dikuantisasi secara serentak. Karena komponen momentum sudut total memenuhi relasi komutasi momentum sudut, pembahasan Bagian 5.4 menunjukkan bahwa nilai eigen $\hat{M}^2$ adalah

$$J(J+1)\hbar^2, \quad J = 0, 1/2, 1, 3/2, 2, \ldots \tag{11.30}$$

sedangkan nilai eigen $\hat{M}\_z$ adalah

$$M\_J\hbar, \quad M\_J = -J, -J+1, \ldots, J-1, J \tag{11.31}$$

Kita ingin mengetahui hubungan bilangan kuantum momentum sudut total J dan M_J dengan bilangan kuantum j_1, j_2, m_1, dan m_2 dari dua momentum sudut yang dijumlahkan dalam (11.20). Kita juga ingin memperoleh fungsi eigen $\hat{M}^2$ dan $\hat{M}\_z$. Fungsi eigen ini dicirikan oleh bilangan kuantum J dan M_J dan, dengan menggunakan notasi ket (Bagian

7.3), ditulis $|JM\_J\rangle$. Demikian pula, $|j_1m_1\rangle$ menyatakan fungsi eigen $\hat{M}_1^2$ dan $\hat{M}_1z$, sedangkan $|j_2m_2\rangle$ menyatakan fungsi eigen $\hat{M}_2^2$ dan $\hat{M}_2z$. Dapat ditunjukkan dengan mudah (Soal 11.10) bahwa

$$[\hat{M}_x, \hat{M}_1^2] = [\hat{M}_y, \hat{M}_1^2] = [\hat{M}\_z, \hat{M}_1^2] = [\hat{M}^2, \hat{M}_1^2] = 0 \tag{11.32}$$

serta persamaan serupa dengan $\hat{M}_2^2$ menggantikan $\hat{M}_1^2$. Dengan demikian, dapat diperoleh fungsi eigen serentak dari keempat operator $\hat{M}_1^2$, $\hat{M}_2^2$, $\hat{M}^2$, dan $\hat{M}\_z$, sehingga fungsi eigen $|JM\_J\rangle$ dapat ditulis lebih lengkap sebagai $|j_1j_2JM\_J\rangle$. Akan tetapi, ternyata $\hat{M}^2$ tidak komutatif dengan $\hat{M}_1z$ maupun $\hat{M}_2z$ (Soal 11.12); oleh sebab itu, fungsi eigen $|j_1j_2JM\_J\rangle$ tidak harus merupakan fungsi eigen $\hat{M}_1z$ atau $\hat{M}_2z$.

Jika diambil himpunan lengkap fungsi $|j_1m_1\rangle$ untuk partikel 1 dan himpunan lengkap $|j_2m_2\rangle$ untuk partikel 2, lalu dibentuk semua hasil kali yang mungkin berbentuk $|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$, akan diperoleh himpunan fungsi lengkap untuk dua partikel tersebut. Setiap fungsi eigen yang belum diketahui $|j_1j_2JM\_J\rangle$ kemudian dapat diekspansikan dengan himpunan lengkap ini:

$$|j_1j_2JM\_J\rangle = \Sigma_{m1,m2}\, C(j_1j_2JM\_J;\, m_1m_2)|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle \tag{11.33}$$

Koefisien ekspansi tersebut adalah $C(j_1j_2JM\_J;\, m_1m_2)$. Fungsi $|j_1j_2JM\_J\rangle$ merupakan fungsi eigen operator-operator komutatif $\hat{M}_1^2$, $\hat{M}_2^2$, $\hat{M}^2$, dan $\hat{M}\_z$ dengan nilai eigen berikut:

Operator	$\hat{M}_1^2$	$\hat{M}_2^2$	$\hat{M}^2$	$\hat{M}\_z$
Nilai eigen	$j_1(j_1+1)\hbar^2$	$j_2(j_2+1)\hbar^2$	$J(J+1)\hbar^2$	$M\_J\hbar$

Fungsi $|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$ merupakan fungsi eigen operator komutatif $\hat{M}_1^2$, $\hat{M}_1z$, $\hat{M}_2^2$, dan $\hat{M}_2z$ dengan nilai eigen berikut:

Operator	$\hat{M}_1^2$	$\hat{M}_1z$	$\hat{M}_2^2$	$\hat{M}_2z$
Nilai eigen	$j_1(j_1+1)\hbar^2$	$m_1\hbar$	$j_2(j_2+1)\hbar^2$	$m_2\hbar$

Karena fungsi $|j_1j_2JM\_J\rangle$ yang diekspansikan dalam (11.33) merupakan fungsi eigen $\hat{M}_1^2$ dengan nilai eigen $j_1(j_1+1)\hbar^2$, dalam penjumlahan hanya dimasukkan suku yang mempunyai nilai j_1 sama dengan yang terdapat pada fungsi $|j_1j_2JM\_J\rangle$. (Lihat Teorema 3 pada akhir Bagian 7.3.) Demikian pula, hanya suku dengan nilai j_2 yang sama dengan nilai j_2 dalam $|j_1j_2JM\_J\rangle$ yang dimasukkan. Oleh karena itu, penjumlahan hanya dilakukan atas nilai m_1 dan m_2. Selain itu, dengan menggunakan $\hat{M}\_z = \hat{M}_1z + \hat{M}_2z$ dapat dibuktikan (Soal 11.11) bahwa koefisien C sama dengan nol kecuali jika

$$m_1 + m_2 = M\_J \tag{11.34}$$

Untuk menemukan fungsi eigen momentum sudut total, koefisien dalam (11.33) harus dihitung. Koefisien tersebut disebut koefisien Clebsch–Gordan, Wigner, atau penjumlahan vektor. Cara menghitungnya dapat dilihat dalam Merzbacher, Bagian 16.6.

Jadi, setiap fungsi eigen momentum sudut total $|j_1j_2JM\_J\rangle$ merupakan kombinasi linear dari fungsi hasil kali $|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$ yang nilai m-nya memenuhi $m_1 + m_2 = M\_J$.

Sekarang kita menentukan kemungkinan nilai bilangan kuantum momentum sudut total J yang dihasilkan oleh penjumlahan momentum sudut dengan bilangan kuantum individual j_1 dan j_2.

Sebelum membahas kasus umum, tinjau kasus $j_1 = 1$ dan $j_2 = 2$. Nilai m_1 yang mungkin ialah −1, 0, dan 1, sedangkan nilai m_2 yang mungkin ialah −2, −1, 0, 1, dan 2. Jika sistem dideskripsikan dengan bilangan kuantum j_1, j_2, m_1, dan m_2, jumlah keadaan yang mungkin adalah lima belas, sesuai dengan tiga kemungkinan m_1 dan lima kemungkinan m_2. Sebagai alternatif, sistem dapat dideskripsikan dengan bilangan kuantum j_1, j_2, J, dan M_J, dan jumlah keadaannya harus tetap sama. Dengan menggunakan (11.34), kelima belas kemungkinan nilai M_J dapat ditabulasikan sebagai berikut; setiap nilai di dalam tabel merupakan jumlah nilai m_1 di bagian atas dan m_2 di sebelah kiri.

$m_2 \setminus m_1$	−1	0	1
−2	−3	−2	−1
−1	−2	−1	0
0	−1	0	1
1	0	1	2
2	1	2	3

Jumlah kemunculan setiap nilai M_J adalah

Nilai M_J	3	2	1	0	−1	−2	−3
Jumlah kemunculan	1	2	3	3	3	2	1

Nilai M_J tertinggi adalah +3. Karena M_J berkisar dari −J sampai +J, nilai J tertinggi harus 3. Untuk J = 3 terdapat tujuh nilai M_J, dari −3 hingga +3. Setelah ketujuh nilai ini dikeluarkan, tersisa

Nilai M_J	2	1	0	−1	−2
Jumlah kemunculan	1	2	2	2	1

Nilai tertinggi yang tersisa, M_J = 2, harus bersesuaian dengan J = 2. Untuk J = 2 terdapat lima nilai M_J; setelah kelimanya dikeluarkan, tersisa

Nilai M_J	1	0	−1
Jumlah kemunculan	1	1	1

Nilai M_J yang tersisa ini jelas bersesuaian dengan J = 1. Jadi, untuk bilangan kuantum momentum sudut individual $j_1 = 1$ dan $j_2 = 2$, kemungkinan nilai bilangan kuantum momentum sudut total J ialah 3, 2, dan 1.

Sekarang tinjau kasus umum. Terdapat $2j_1 + 1$ nilai m_1—dari $-j_1$ hingga $+j_1$—dan $2j_2 + 1$ nilai m_2. Oleh sebab itu, terdapat $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ keadaan $|j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle$ yang mungkin untuk nilai j_1 dan j_2 yang tetap. Nilai maksimum m_1 dan m_2 masing-masing ialah j_1 dan j_2. Maka, nilai maksimum $M_J = m_1 + m_2$ adalah $j_1 + j_2$ [Pers. (11.34)]. Karena M_J berkisar dari −J hingga +J, nilai maksimum J juga harus $j_1 + j_2$:

$$J_{maks} = j_1 + j_2 \tag{11.35}$$

Nilai M_J tertinggi kedua adalah $j_1 + j_2 - 1$, yang dapat diperoleh dengan dua cara: $m_1 = j_1 - 1$, $m_2 = j_2$ atau $m_1 = j_1$, $m_2 = j_2 - 1$. Kombinasi linear kedua keadaan ini harus menghasilkan satu keadaan dengan $J = j_1 + j_2$, $M_J = j_1 + j_2 - 1$ dan satu keadaan dengan $J = j_1 + j_2 - 1$, $M_J = j_1 + j_2 - 1$. Dengan melanjutkan cara ini, diperoleh bahwa kemungkinan nilai J ialah

$$j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \ldots, J_{min}$$

dengan J_min sebagai nilai J terkecil yang mungkin.

Kita menentukan J_min dengan syarat bahwa jumlah keseluruhan keadaan harus $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. Untuk suatu nilai J tertentu terdapat $2J + 1$ nilai M_J, sehingga $2J + 1$ keadaan bersesuaian dengan setiap nilai J. Jumlah seluruh keadaan $|j_1 j_2 J M_J\rangle$ untuk nilai j_1 dan j_2 tetap diperoleh dengan menjumlahkan $2J + 1$ untuk setiap J dari J_min sampai J_maks:

$$\text{jumlah keadaan} = \Sigma_{(J=J_{min})}^{(J_{maks})} (2J + 1) \tag{11.36}$$

Penjumlahan ini berlangsung dari J_min sampai J_maks. Sekarang ambil batas bawah penjumlahan sebagai J = 0, bukan J_min. Perubahan ini menambahkan suku-suku dengan nilai J = 0, 1, 2, …, J_min − 1. Sebagai kompensasi, jumlah yang bersesuaian dari J = 0 sampai J = J_min − 1 harus dikurangkan. Oleh karena itu, (11.36) menjadi

$$\text{jumlah keadaan} = \Sigma_{(J=0)}^{(J_{maks})}(2J + 1) - \Sigma_{(J=0)}^{(J_{min}-1)}(2J + 1)$$

Soal 6.16 memberikan $\Sigma_{(l=0)}^{(n-1)}(2l + 1) = n^2$. Dengan mengganti $n - 1$ oleh b, diperoleh $\Sigma_{(J=0)}^{b}(2J + 1) = (b + 1)^2$. Maka,

$$\text{jumlah keadaan} = (J_{maks} + 1)^2 - J_{min}^2 = J_{maks}^2 + 2J_{maks} + 1 - J_{min}^2$$

Mengganti J_maks dengan $j_1 + j_2$ [Pers. (11.35)] dan menyamakan jumlah keadaan dengan $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = 4j_1j_2 + 2j_1 + 2j_2 + 1$, diperoleh

$$(j_1 + j_2)^2 + 2(j_1 + j_2) + 1 - J\_min^2 = 4j_1j_2 + 2j_1 + 2j_2 + 1$$

$$J\_min^2 = {j_1}^2 - 2j_1j_2 + {j_2}^2 = (j_1 - j_2)^2$$

$$J\_min = \pm(j_1 - j_2) \tag{11.37}$$

Jika $j_1 = j_2$, maka J_min = 0. Jika $j_1 \neq j_2$, salah satu nilai dalam (11.37) negatif dan harus ditolak [Pers. (11.30)]. Jadi,

$$J\_min = |j_2 - j_1| \tag{11.38}$$

Sebagai rangkuman, telah ditunjukkan bahwa penjumlahan dua momentum sudut yang dicirikan oleh bilangan kuantum j_1 dan j_2 menghasilkan momentum sudut total dengan kemungkinan bilangan kuantum J

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, ..., |j_1 - j_2| \tag{11.39}$$

Contoh. Tentukan kemungkinan nilai bilangan kuantum momentum sudut total yang dihasilkan dari penjumlahan momentum sudut dengan bilangan kuantum $j_1 = 2$ dan $j_2 = 3$.

Nilai maksimum dan minimum J menurut (11.39) adalah $j_1 + j_2 = 2 + 3 = 5$ dan $|j_1 - j_2| = |2 - 3| = 1$. Dengan demikian, kemungkinan nilai J ialah

$$J = 5, 4, 3, 2, 1$$

Latihan. Tentukan kemungkinan nilai bilangan kuantum momentum sudut total yang dihasilkan dari penjumlahan momentum sudut dengan bilangan kuantum $j_1 = 3$ dan $j_2 = 3/2$. *(Jawaban: J = 9/2, 7/2, 5/2, 3/2.)*

Contoh. Tentukan kemungkinan nilai J jika momentum sudut dengan bilangan kuantum $j_1 = 1$, $j_2 = 2$, dan $j_3 = 3$ dijumlahkan.

Untuk menjumlahkan lebih dari dua momentum sudut, (11.39) diterapkan berulang kali. Penjumlahan $j_1 = 1$ dan $j_2 = 2$ memberikan kemungkinan bilangan kuantum 3, 2, dan 1. Penjumlahan j_3 dengan masing-masing nilai tersebut menghasilkan kemungkinan bilangan kuantum momentum sudut total berikut:

$$6, 5, 4, 3, 2, 1, 0; \quad 5, 4, 3, 2, 1; \quad 4, 3, 2 \tag{11.40}$$

Terdapat satu himpunan keadaan dengan bilangan kuantum momentum sudut total 6, dua himpunan keadaan dengan J = 5, tiga himpunan dengan J = 4, dan seterusnya.

Latihan. Tentukan kemungkinan nilai J jika momentum sudut dengan bilangan kuantum $j_1 = 1$, $j_2 = 1$, dan $j_3 = 1$ dijumlahkan. *(Jawaban: J = 3, 2, 2, 1, 1, 1, 0.)*

11.5 Momentum Sudut dalam Atom Berelektron Banyak

Momentum Sudut Orbital dan Spin Elektronik Total

Momentum sudut orbital elektronik total suatu atom berelektron n didefinisikan sebagai jumlah vektor momentum sudut orbital masing-masing elektron:

$$L = \Sigma_{i=1}^{n} L_i \tag{11.41}$$

Meskipun operator momentum sudut orbital individual $\hat{L}_i$ tidak komutatif dengan Hamiltonian atom (11.1), dapat ditunjukkan (Bethe dan Jackiw, hlm. 102–103) bahwa $\hat{L}$ komutatif dengan Hamiltonian atom [asalkan interaksi spin–orbit (Bagian 11.6) diabaikan]. Dengan demikian, suatu keadaan atom dapat dicirikan oleh bilangan kuantum L, dengan $L(L + 1)\hbar^2$ sebagai kuadrat besar momentum sudut orbital elektronik total. Fungsi gelombang elektronik ψ suatu atom memenuhi $\hat{L}^2\psi = L(L + 1)\hbar^2\psi$. Bilangan kuantum momentum sudut orbital elektronik total L dinyatakan dengan huruf kode berikut:

L	0	1	2	3	4	5	6	7	8
Huruf	S	P	D	F	G	H	I	K	L

$$L = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 \leftrightarrow S, P, D, F, G, H, I, K, L \tag{11.42}$$

Momentum sudut orbital total dinyatakan dengan huruf kapital, sedangkan huruf kecil dipakai untuk momentum sudut orbital elektron individual.

Contoh. Tentukan kemungkinan nilai bilangan kuantum L bagi keadaan atom karbon yang timbul dari konfigurasi elektron $1s^2 2s^2 2p3d$.

Elektron s mempunyai bilangan kuantum $l = 0$ sehingga tidak memberikan sumbangan pada momentum sudut orbital total. Elektron 2p mempunyai $l = 1$ dan elektron 3d mempunyai $l = 2$. Berdasarkan kaidah penjumlahan momentum sudut (11.39), bilangan kuantum momentum sudut orbital total berkisar dari $1 + 2 = 3$ sampai $|1 - 2| = 1$; kemungkinan nilainya adalah $L = 3, 2, 1$. Konfigurasi $1s^2 2s^2 2p3d$ menghasilkan keadaan P, D, dan F. [Dalam hampiran medan-pusat Hartree–Fock, setiap elektron bergerak dalam potensial medan-pusat $V = V(r)$. Oleh sebab itu, dalam hampiran ini momentum sudut orbital individual elektron tetap, sehingga diperoleh fungsi gelombang yang tersusun atas satu konfigurasi yang menentukan momentum sudut orbital individual. Ketika kita melampaui hampiran SCF medan-pusat, konfigurasi lain dicampurkan sehingga momentum sudut orbital individual tidak lagi ditentukan secara tepat. Walaupun demikian, kaidah (11.39) tetap dapat digunakan untuk menentukan kemungkinan nilai momentum sudut orbital total.]

Latihan. Tentukan kemungkinan nilai L bagi keadaan yang timbul dari konfigurasi elektron $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p4p$. *(Jawaban: 2, 1, 0.)*

Momentum sudut spin elektronik total **S** suatu atom didefinisikan sebagai jumlah vektor spin elektron individual:

$$S = \Sigma_{i=1}^{n} S_i \tag{11.43}$$

Hamiltonian atom $\hat{H}$ pada (11.1)—yang mengabaikan interaksi spin–orbit—tidak melibatkan spin dan karena itu komutatif dengan operator spin total $\hat{S}^2$ dan $\hat{S}_z$. Fakta bahwa $\hat{S}^2$ komutatif dengan $\hat{H}$ belum cukup untuk menunjukkan bahwa fungsi gelombang atom ψ merupakan fungsi eigen $\hat{S}^2$. Syarat antisimetris mengharuskan setiap ψ menjadi fungsi eigen operator pertukaran $\hat{P}_{ik}$ dengan nilai eigen -1 (Bagian 10.3). Maka, agar terdapat fungsi eigen serentak $\hat{H}$, $\hat{S}^2$, dan $\hat{P}_{ik}$, $\hat{S}^2$ juga harus komutatif dengan $\hat{P}_{ik}$. Soal 11.19 menunjukkan bahwa $[\hat{S}^2, \hat{P}_{ik}] = 0$, sehingga fungsi gelombang atom merupakan fungsi eigen $\hat{S}^2$. Kita mempunyai $\hat{S}^2\psi = S(S + 1)\hbar^2\psi$ dan setiap keadaan atom dapat dicirikan oleh bilangan kuantum spin elektronik total S.

Contoh. Tentukan kemungkinan nilai bilangan kuantum S bagi keadaan yang timbul dari konfigurasi elektron $1s^2 2s^2 2p3d$.

Pertama, tinjau dua elektron 1s. Untuk memenuhi prinsip eksklusi, salah satu elektron harus mempunyai $m_s = +1/2$, sedangkan yang lain $m_s = -1/2$. Jika M_S adalah bilangan kuantum yang menentukan komponen z spin total elektron 1s, satu-satunya nilai M_S yang mungkin ialah $1/2 - 1/2 = 0$ [Pers. (11.34)]. Satu nilai M_S ini jelas berarti spin total kedua elektron 1s sama dengan nol. Jadi, meskipun secara umum penjumlahan spin $s_1 = 1/2$ dan $s_2 = 1/2$ dua elektron menurut kaidah (11.39) memberikan dua kemungkinan $S = 0$ dan $S = 1$, pembatasan prinsip Pauli hanya menyisakan $S = 0$ dalam kasus ini. Demikian pula, spin elektron 2s berjumlah nol. Prinsip eksklusi tidak membatasi nilai m_s elektron 2p dan 3d. Penerapan kaidah (11.39) pada spin $s_1 = 1/2$ dan $s_2 = 1/2$ elektron 2p dan 3d memberikan $S = 0$ dan $S = 1$. Inilah kemungkinan nilai bilangan kuantum spin total karena elektron 1s dan 2s tidak memberikan sumbangan pada S.

Latihan. Tentukan kemungkinan nilai S bagi keadaan yang timbul dari konfigurasi elektron $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p4p$. *(Jawaban: 0 dan 1.)*

Term Atom

Suatu konfigurasi elektron tertentu pada umumnya menghasilkan beberapa keadaan atom yang berbeda. Sebagian keadaan mempunyai energi sama dan sebagian lainnya mempunyai energi berbeda, bergantung pada apakah tolakan antarelektronnya sama atau berbeda bagi keadaan-keadaan tersebut. Sebagai contoh, konfigurasi helium 1s2s menghasilkan empat keadaan: tiga keadaan dengan fungsi gelombang orde nol (10.27) sampai (10.29) semuanya mempunyai energi sama, sedangkan keadaan tunggal (10.30) mempunyai energi berbeda. Konfigurasi elektron 1s2p menghasilkan dua belas keadaan: sembilan keadaan yang diperoleh dengan mengganti 2s dalam (10.27) sampai (10.29) dengan $2p_x$, $2p_\gamma$, atau 2p_z mempunyai energi sama; tiga keadaan yang diperoleh dengan mengganti 2s dalam (10.30) dengan $2p_x$, $2p_\gamma$, atau 2p_z juga mempunyai energi sama, tetapi berbeda dari energi sembilan keadaan lainnya.

Jadi, keadaan atom yang timbul dari suatu konfigurasi elektron dapat dikelompokkan menjadi himpunan keadaan berenergi sama. Dapat ditunjukkan bahwa keadaan yang berasal dari konfigurasi elektron yang sama dan mempunyai energi yang sama—dengan interaksi spin–orbit diabaikan—akan mempunyai nilai L yang sama dan nilai S yang sama (lihat Kemble, Bagian 63a). Himpunan keadaan atom berenergi sama yang berasal dari konfigurasi elektron yang sama serta mempunyai nilai L dan S yang sama disebut **term atom**. Untuk nilai L tetap, bilangan kuantum M_L—dengan M_L$\hbar$ sebagai komponen z momentum sudut orbital elektronik total—mempunyai 2L + 1 nilai, dari −L sampai +L. Untuk nilai S tetap, M_S mempunyai 2S + 1 nilai. Energi atom tidak bergantung pada M_L atau M_S, dan setiap term terdiri atas (2L + 1)(2S + 1) keadaan atom berenergi sama. Degenerasi suatu term atom adalah (2L + 1)(2S + 1), jika interaksi spin–orbit diabaikan.

Setiap term atom dinyatakan dengan simbol term yang dibentuk dengan menuliskan nilai numerik 2S + 1 sebagai superskrip kiri pada huruf kode (11.42) yang menyatakan nilai L. Sebagai contoh, term dengan L = 2 dan S = 1 mempunyai simbol ^3D karena 2S + 1 = 3.

Contoh. Tentukan term yang timbul dari setiap konfigurasi elektron berikut: (a) 1s2p; (b) $1s^2 2s^2 2p3d$. Nyatakan degenerasi setiap term.

(a) Elektron 1s mempunyai l = 0 dan elektron 2p mempunyai l = 1. Kaidah penjumlahan (11.39) memberikan L = 1 sebagai satu-satunya kemungkinan. Huruf kode bagi L = 1 adalah P. Setiap elektron mempunyai s = 1/2 dan (11.39) memberikan S = 1, 0 sebagai kemungkinan nilai S. Kemungkinan nilai 2S + 1 ialah 3 dan 1. Jadi, term yang mungkin ialah ^3P dan ^1P. Term ^3P mempunyai L = 1 dan S = 1, sehingga degenerasinya (2L + 1)(2S + 1) = 3(3) = 9. Term ^1P mempunyai L = 1 dan S = 0, sehingga degenerasinya (2L + 1)(2S + 1) = 3(1) = 3. [Kesembilan keadaan term ^3P diperoleh dengan mengganti 2s dalam (10.27) sampai (10.29) dengan $2p_x$, $2p_\gamma$, atau 2p_z. Ketiga keadaan term ^1P diperoleh dengan mengganti 2s dalam (10.30) dengan fungsi 2p.]

(b) Dalam dua contoh sebelumnya pada bagian ini, telah diperoleh bahwa konfigurasi $1s^2 2s^2 2p3d$ mempunyai kemungkinan nilai L = 3, 2, 1 dan S = 1, 0. Huruf kode bagi nilai L tersebut ialah F, D, P, sehingga term-termnya adalah

$$^1P,\ ^3P,\ ^1D,\ ^3D,\ ^1F,\ ^3F \tag{11.44}$$

Degenerasinya, yang dihitung seperti pada bagian (a), berturut-turut ialah 3, 9, 5, 15, 7, dan 21.

Penurunan Term Atom

Sekarang kita menelaah cara menurunkan secara sistematis term yang muncul dari suatu konfigurasi elektron.

Mula-mula tinjau konfigurasi yang hanya memuat subkulit penuh. Dalam konfigurasi semacam ini, untuk setiap elektron dengan $m_s = +1/2$ terdapat elektron dengan $m_s = -1/2$. Misalkan bilangan kuantum yang menentukan komponen z momentum sudut spin elektronik total adalah M_S. Satu-satunya nilai yang mungkin bagi M_S adalah nol, $M_S = \Sigma_i m_{s_i} = 0$. Karena itu, S harus nol. Untuk setiap elektron dalam subkulit tertutup yang mempunyai bilangan kuantum magnetik m, terdapat elektron dengan bilangan kuantum magnetik $-m$. Sebagai contoh, bagi konfigurasi $2p^6$ terdapat dua elektron dengan $m = +1$, dua elektron dengan $m = -1$, dan dua elektron dengan $m = 0$. Dengan menyatakan bilangan kuantum yang menentukan komponen z momentum sudut orbital elektronik total sebagai M_L, diperoleh $M_L = \Sigma_i m_i = 0$. Disimpulkan bahwa L harus nol. Ringkasnya, konfigurasi subkulit tertutup hanya menghasilkan satu term, yaitu ^1S. Untuk konfigurasi yang terdiri atas subkulit tertutup dan terbuka, subkulit tertutup tidak memberikan sumbangan pada L maupun S dan dapat diabaikan ketika menentukan term.

Sekarang tinjau dua elektron pada subkulit berbeda; elektron semacam itu disebut elektron **tak ekuivalen**. Elektron tak ekuivalen mempunyai nilai n atau l yang berbeda, atau keduanya berbeda, dan ketika term diturunkan tidak perlu dipertimbangkan pembatasan yang diberlakukan oleh prinsip eksklusi. Kemungkinan nilai L cukup diperoleh dari l_1 dan l_2 menurut (11.39); penggabungan s_1 dan s_2 memberikan S = 0, 1. Kasus pd telah dikerjakan sebelumnya dan menghasilkan term dalam (11.44). Jika terdapat lebih dari dua elektron tak ekuivalen, nilai l individual digabungkan untuk memperoleh nilai L dan nilai s individual digabungkan untuk memperoleh nilai S.

Sebagai contoh, tinjau konfigurasi pdf. Kemungkinan nilai L diberikan oleh (11.40). Penggabungan tiga momentum sudut spin, masing-masing bernilai 1/2, memberikan S = 3/2, 1/2, 1/2. Masing-masing dari tiga kemungkinan dalam (11.40) dengan L = 3 dapat digabungkan dengan masing-masing dari dua kemungkinan S = 1/2, sehingga menghasilkan enam term ^2F. Dengan melanjutkan cara yang sama, diperoleh term berikut dari konfigurasi pdf: $^2S(2)$, $^2P(4)$, $^2D(6)$, $^2F(6)$, $^2G(6)$, $^2H(4)$, $^2I(2)$, ^4S, $^4P(2)$, $^4D(3)$, $^4F(3)$, $^4G(3)$, $^4H(2)$, ^4I. Angka di dalam tanda kurung menunjukkan berapa kali setiap jenis term muncul.

Selanjutnya, tinjau dua elektron pada subkulit yang sama, yaitu **elektron ekuivalen**. Elektron ekuivalen mempunyai nilai n dan l yang sama; keadaannya menjadi lebih rumit karena dua elektron tidak boleh diberi empat bilangan kuantum yang sama. Oleh sebab itu, tidak semua term yang diturunkan untuk elektron tak ekuivalen diperbolehkan. Sebagai contoh, tinjau term yang timbul dari dua elektron p ekuivalen, yaitu konfigurasi np^2. (Konfigurasi keadaan dasar karbon adalah $1s^2 2s^2 2p^2$.) Kemungkinan nilai m dan m_s untuk kedua elektron dicantumkan dalam Tabel 11.1, bersama dengan M_L dan M_S.

Tabel 11.1 Bilangan Kuantum untuk Dua Elektron p Ekuivalen

m_1	m_{s_1}	m_2	m_{s_2}	$M_L = m_1 + m_2$	$M_S = m_{s_1} + m_{s_2}$
1	1/2	1	−1/2	2	0
1	1/2	0	1/2	1	1
1	1/2	0	−1/2	1	0
1	−1/2	0	1/2	1	0
1	−1/2	0	−1/2	1	−1
1	1/2	−1	1/2	0	1
1	1/2	−1	−1/2	0	0
1	−1/2	−1	1/2	0	0

m_1	m_{s_1}	m_2	m_{s_2}	$M_L = m_1 + m_2$	$M_S = m_{s_1} + m_{s_2}$
1	−1/2	−1	−1/2	0	−1
0	1/2	0	−1/2	0	0
0	1/2	−1	1/2	−1	1
0	1/2	−1	−1/2	−1	0
0	−1/2	−1	1/2	−1	0
0	−1/2	−1	−1/2	−1	−1
−1	1/2	−1	−1/2	−2	0

Perhatikan bahwa kombinasi tertentu tidak terdapat dalam tabel. Misalnya, $m_1 = 1$, $m_{s_1} = 1/2$, $m_2 = 1$, $m_{s_2} = 1/2$ tidak ada karena melanggar prinsip eksklusi. Kombinasi lain yang tidak ada ialah $m_1 = 1$, $m_{s_1} = -1/2$, $m_2 = 1$, $m_{s_2} = 1/2$. Kombinasi ini hanya berbeda dari $m_1 = 1$, $m_{s_1} = 1/2$, $m_2 = 1$, $m_{s_2} = -1/2$—baris pertama—karena pertukaran elektron 1 dan 2. Setiap baris Tabel 11.1 mewakili sebuah determinan Slater, yang bila diekspansi memuat suku untuk semua kemungkinan pertukaran elektron di antara spin-orbital. Dua baris yang hanya berbeda karena pertukaran dua elektron bersesuaian dengan determinan Slater yang sama, sehingga hanya salah satunya dicantumkan dalam tabel.

Nilai M_L tertinggi pada Tabel 11.1 adalah 2, yang harus bersesuaian dengan term L = 2, yakni term D. Nilai M_L = 2 muncul bersama M_S = 0, yang menunjukkan S = 0 bagi term D. Jadi terdapat term ^{1}D yang bersesuaian dengan lima keadaan

$$M\_L = 2, 1, 0, -1, -2; \quad M\_S = 0, 0, 0, 0, 0 \tag{11.45}$$

Nilai M_S tertinggi pada Tabel 11.1 adalah 1, yang menunjukkan term dengan S = 1. M_S = 1 muncul bersama M_L = 1, 0, −1, yang menunjukkan term P. Dengan demikian, terdapat term ^{3}P yang bersesuaian dengan sembilan keadaan

$$M\_L = 1, 1, 1, 0, 0, 0, -1, -1, -1; \quad M\_S = 1, 0, -1, 1, 0, -1, 1, 0, -1 \tag{11.46}$$

Setelah keadaan (11.45) dan (11.46) dikeluarkan dari Tabel 11.1, hanya tersisa satu keadaan dengan M_L = 0 dan M_S = 0, yang bersesuaian dengan term ^{1}S. Jadi, konfigurasi p^2 menghasilkan term ^{1}S, ^{3}P, dan ^{1}D. Sebaliknya, dua elektron p tak ekuivalen menghasilkan enam term: ^{1}S, ^{3}S, ^{1}P, ^{3}P, ^{1}D, dan ^{3}D.

Tabel 11.2a mencantumkan term yang timbul dari berbagai konfigurasi elektron ekuivalen. Hasil ini dapat diturunkan dengan cara yang sama seperti term p^2, tetapi prosedur tersebut dapat menjadi sangat panjang. Penurunan term konfigurasi f^7 akan memerlukan tabel dengan 3432 baris. Tersedia metode yang lebih efisien [R. F. Curl dan J. E. Kilpatrick, *Am. J. Phys.*, **28**, 357 (1960); K. E. Hyde, *J. Chem. Educ.*, **52**, 87 (1975)].

Tabel 11.2 Term yang Timbul dari Berbagai Konfigurasi Elektron

(a) Elektron ekuivalen

Konfigurasi	Term
s^2; p^6; d^{10}	^{1}S
p; p^5	^{2}P
p^2; p^4	^{3}P, ^{1}D, ^{1}S
p^3	^{4}S, ^{2}D, ^{2}P
d; d^9	^{2}D
d^2; d^8	^{3}F, ^{3}P, ^{1}G, ^{1}D, ^{1}S
d^3; d^7	^{4}F, ^{4}P, ^{2}H, ^{2}G, ^{2}F, ^{2}D(2), ^{2}P
d^4; d^6	^{5}D, ^{3}H, ^{3}G, ^{3}F(2), ^{3}D, ^{3}P(2), ^{1}I, ^{1}G(2), ^{1}F, ^{1}D(2), ^{1}S(2)
d^5	^{6}S, ^{4}G, ^{4}F, ^{4}D, ^{4}P, ^{2}I, ^{2}H, ^{2}G(2), ^{2}F(2), ^{2}D(3), ^{2}P, ^{2}S

(b) Elektron tak ekuivalen

Konfigurasi	Term
ss	^1S, ^3S
sp	^1P, ^3P
sd	^1D, ^3D
pp	^3D, ^1D, ^3P, ^1P, ^3S, ^1S

Perhatikan dari Tabel 11.2a bahwa term yang timbul dari subkulit berisi N elektron sama dengan term dari subkulit yang kekurangan N elektron untuk menjadi penuh. Sebagai contoh, term bagi p^2 dan p^4 sama. Elektron suatu subkulit tertutup dapat dibagi menjadi dua kelompok dan term bagi masing-masing kelompok ditentukan. Karena subkulit tertutup hanya menghasilkan term ^1S, term kedua kelompok tersebut harus sama. Tabel 11.2b memberikan term yang timbul dari beberapa konfigurasi elektron tak ekuivalen.

Untuk menangani konfigurasi yang memuat elektron ekuivalen sekaligus tak ekuivalen, mula-mula tentukan secara terpisah term dari elektron tak ekuivalen dan term dari elektron ekuivalen. Kemudian ambil semua kemungkinan kombinasi nilai L dan S dari kedua himpunan term tersebut. Sebagai contoh, tinjau konfigurasi sp^3. Elektron s menghasilkan term ^2S. Tiga elektron p ekuivalen menghasilkan term ^2P, ^2D, dan ^4S (Tabel 11.2a). Dengan menggabungkan nilai L dan S term tersebut, diperoleh term konfigurasi sp^3

$$^3P, ^1P, ^3D, ^1D, ^5S, ^3S \tag{11.47}$$

Kaidah Hund

Untuk menentukan term berenergi terendah di antara term-term yang timbul dari satu konfigurasi elektron, digunakan kaidah empiris Hund: **Bagi term yang timbul dari konfigurasi elektron yang sama, term dengan nilai S terbesar terletak paling rendah. Jika terdapat lebih dari satu term dengan nilai S terbesar, term dengan S terbesar dan L terbesar terletak paling rendah.**

Contoh. Gunakan Tabel 11.2 untuk meramalkan term terendah dari: (a) konfigurasi keadaan dasar karbon $1s^22s^22p^2$; (b) konfigurasi $1s^22s^22p^63s^23p^63d^24s^2$.

(a) Tabel 11.2a memberikan term konfigurasi p^2 sebagai ^3P, ^1D, dan ^1S. Term dengan S terbesar mempunyai nilai superskrip kiri 2S + 1 terbesar. Kaidah Hund meramalkan ^3P sebagai term terendah.

(b) Tabel 11.2a memberikan term d^2 sebagai ^3F, ^3P, ^1G, ^1D, dan ^1S. Di antara term tersebut, ^3F dan ^3P mempunyai S tertinggi. Term ^3F mempunyai L = 3, sedangkan ^3P mempunyai L = 1. Oleh karena itu, ^3F diramalkan sebagai term terendah.

Latihan. Ramalkan term terendah konfigurasi $1s^22s2p^3$ dengan menggunakan (11.47). *(Jawaban: ^5S.)*

Kaidah Hund bekerja sangat baik untuk konfigurasi keadaan dasar, tetapi kadang-kadang gagal untuk konfigurasi tereksitasi (Soal 11.30).

Kaidah Hund hanya memberikan term terendah suatu konfigurasi dan tidak boleh digunakan untuk menentukan urutan term lainnya. Sebagai contoh, untuk konfigurasi karbon $1s^22s2p^3$, urutan term yang teramati ialah

$$^5S < ^3D < ^3P < ^1D < ^3S < ^1P$$

Term ^3S terletak di atas term ^1D meskipun ^3S mempunyai spin S yang lebih tinggi.

Tidak perlu melihat Tabel 11.2a untuk menemukan term terendah konfigurasi subkulit yang terisi sebagian. Elektron cukup ditempatkan pada orbital sedemikian rupa sehingga memberikan jumlah spin paralel terbesar. Jadi, bagi konfigurasi d^3 diperoleh

$$\text{m: } +2\uparrow \quad +1\uparrow \quad 0\uparrow \quad -1 \quad -2 \tag{11.48}$$

Term terendah mempunyai tiga spin paralel, sehingga S = 3/2 dan 2S + 1 = 4. Nilai maksimum M_L adalah 3, yang bersesuaian dengan L = 3, yakni term F. Karena itu, kaidah Hund meramalkan ^{4}F sebagai term terendah konfigurasi d^3.

Penjelasan tradisional kaidah Hund adalah sebagai berikut. Elektron dengan spin yang sama cenderung saling menjauh—ingat gagasan lubang Fermi—sehingga tolakan Coulomb di antara elektron diperkecil. Term dengan jumlah spin paralel terbanyak, yaitu nilai S terbesar, karena itu diperkirakan mempunyai energi paling rendah. Sebagai contoh, term ^{3}S konfigurasi helium 1s2s mempunyai fungsi ruang antisimetris yang bernilai nol ketika koordinat ruang kedua elektron sama. Oleh sebab itu, term ^{3}S berada lebih rendah daripada term ^{1}S.

Ternyata penjelasan tradisional tersebut salah untuk sebagian besar kasus. Memang, probabilitas dua elektron berada sangat berdekatan lebih kecil bagi term helium ^{3}S 1s2s daripada bagi term ^{1}S 1s2s. Akan tetapi, perhitungan dengan fungsi gelombang akurat menunjukkan bahwa probabilitas kedua elektron berada sangat berjauhan juga lebih kecil bagi term ^{3}S. Hasil bersihnya ialah jarak rata-rata antarelektron sedikit lebih kecil bagi term ^{3}S daripada term ^{1}S, sehingga tolakan antarelektron sedikit lebih besar bagi term ^{3}S. Perhitungan menunjukkan bahwa term ^{3}S terletak di bawah term ^{1}S karena tarikan elektron–inti yang jauh lebih besar pada term ^{3}S dibandingkan term ^{1}S. Hasil serupa ditemukan untuk term atom berilium dan karbon [J. Katriel dan R. Pauncz, *Adv. Quantum Chem.*, **10**, 143 (1977)]. Penjelasan berikut telah diajukan [I. Shim dan J. P. Dahl, *Theor. Chim. Acta*, **48**, 165 (1978)]. "Tolakan" Pauli di antara elektron berspin sama membuat sudut rata-rata antara vektor radius kedua elektron lebih besar untuk term ^{3}S daripada term ^{1}S. Hal ini mengurangi pemerisaian inti oleh elektron dan memungkinkan elektron mendekati inti dalam term ^{3}S, sehingga tarikan elektron–inti menjadi lebih besar bagi term ^{3}S. [Lihat pula R. E. Boyd, *Nature*, **310**, 480 (1984); T. Oyamada dkk., *J. Chem. Phys.*, **133**, 164113 (2010).]

Nilai Eigen Fungsi Spin Dua Elektron

Konfigurasi helium 1s2s menghasilkan term ^{3}S dengan degenerasi (2L + 1)(2S + 1) = 1(3) = 3 dan term ^{1}S dengan degenerasi 1(1) = 1. Tiga fungsi gelombang orde nol helium (10.27) sampai (10.29) harus bersesuaian dengan term ^{3}S yang terdegenerasi tiga kali, sedangkan fungsi tunggal (10.30) harus bersesuaian dengan term ^{1}S. Karena S = 1 dan M_S = 1, 0, −1 bagi term ^{3}S, tiga fungsi spin pada (10.27) sampai (10.29) seharusnya merupakan fungsi eigen $\hat{S}^2$ dengan nilai eigen $S(S+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$ dan fungsi eigen $\hat{S}_z$ dengan nilai eigen $M_S\hbar = \hbar$, 0, dan $-\hbar$. Fungsi spin pada (10.30) seharusnya merupakan fungsi eigen $\hat{S}^2$ dan $\hat{S}_z$ dengan nilai eigen nol dalam kedua kasus, karena di sini S = 0 dan M_S = 0. Pernyataan ini sekarang diverifikasi.

Dari Pers. (11.43), operator spin elektron total adalah jumlah operator spin setiap elektron:

$$\hat{S} = \hat{S}_1 + \hat{S}_2 \tag{11.49}$$

Dengan mengambil komponen z dari (11.49), diperoleh

$$\hat{S}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z} \tag{11.50}$$

$$\begin{aligned}\hat{S}_z\,\alpha(1)\alpha(2) &= \hat{S}_{1z}\alpha(1)\alpha(2) + \hat{S}_{2z}\alpha(1)\alpha(2)\\ &= \alpha(2)\hat{S}_{1z}\alpha(1) + \alpha(1)\hat{S}_{2z}\alpha(2)\\ &= (1/2)\hbar\alpha(1)\alpha(2) + (1/2)\hbar\alpha(1)\alpha(2)\end{aligned}$$

$$\hat{S}_z\,\alpha(1)\alpha(2) = \hbar\alpha(1)\alpha(2) \tag{11.51}$$

dengan menggunakan Pers. (10.7). Dengan cara serupa diperoleh

$$\hat{S}_z\,\beta(1)\beta(2) = -\hbar\beta(1)\beta(2) \tag{11.52}$$

$$\hat{S}_z[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] = 0 \tag{11.53}$$

$$\hat{S}_z[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)] = 0 \tag{11.54}$$

Sekarang tinjau $\hat{S}^2$. Berdasarkan Pers. (11.26),

$$\hat{S}^2 = (\hat{S}_1 + \hat{S}_2)\cdot(\hat{S}_1 + \hat{S}_2) = \hat{S}_1{}^2 + \hat{S}_2{}^2 + 2(\hat{S}_1x\hat{S}_2x + \hat{S}_1y\hat{S}_2y + \hat{S}_1z\hat{S}_2z) \tag{11.55}$$

$$\hat{S}^2\alpha(1)\alpha(2) = \alpha(2)\hat{S}_1{}^2\alpha(1) + \alpha(1)\hat{S}_2{}^2\alpha(2) + 2\hat{S}_1x\alpha(1)\hat{S}_2x\alpha(2) + 2\hat{S}_1y\alpha(1)\hat{S}_2y\alpha(2) + 2\hat{S}_1z\alpha(1)\hat{S}_2z\alpha(2)$$

Dengan menggunakan Pers. (10.7) sampai (10.9), (10.72), dan (10.73), diperoleh

$$\hat{S}^2\alpha(1)\alpha(2) = 2\hbar^2\alpha(1)\alpha(2) \tag{11.56}$$

Jadi, $\alpha(1)\alpha(2)$ merupakan fungsi eigen $\hat{S}^2$ yang bersesuaian dengan S = 1. Dengan cara serupa diperoleh

$$\hat{S}^2\beta(1)\beta(2) = 2\hbar^2\beta(1)\beta(2)$$

$$\hat{S}^2[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)] = 2\hbar^2[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)]$$

$$\hat{S}^2[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)] = 0$$

Dengan demikian, fungsi eigen spin dalam (10.27) sampai (10.30) bersesuaian dengan nilai bilangan kuantum spin total berikut:

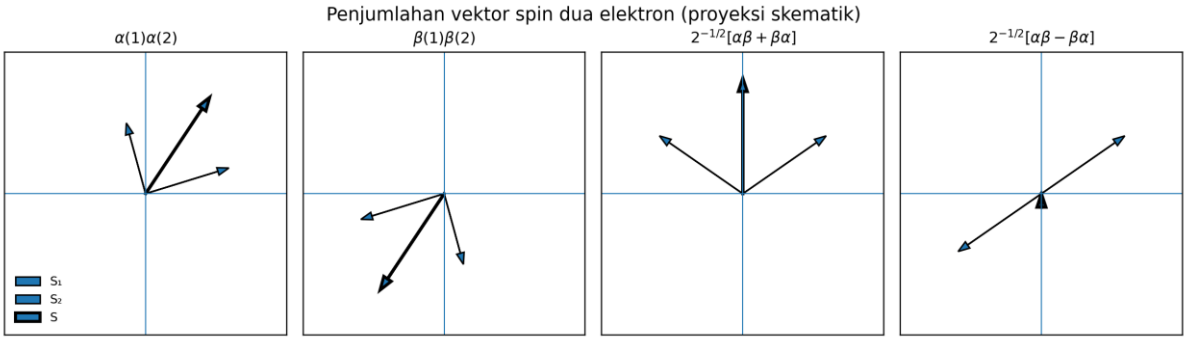
$$\text{Triplet: } \alpha(1)\alpha(2), \quad S = 1, M_S = 1 \tag{11.57}$$

$$\text{Triplet: } 2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)], \quad S = 1, M_S = 0 \tag{11.58}$$

$$\text{Triplet: } \beta(1)\beta(2), \quad S = 1, M_S = -1 \tag{11.59}$$

$$\text{Singlet: } 2^{-1/2}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)], \quad S = 0, M_S = 0 \tag{11.60}$$

[Dalam notasi Bagian 11.4, kita sedang membahas penjumlahan dua momentum sudut dengan bilangan kuantum $j_1 = 1/2$ dan $j_2 = 1/2$ untuk menghasilkan fungsi eigen dengan bilangan kuantum momentum sudut total J = 1 dan J = 0. Koefisien pada (11.57) sampai (11.60) bersesuaian dengan koefisien C pada (11.33) dan merupakan contoh koefisien Clebsch–Gordan.]



Gambar 11.3 *Penjumlahan vektor spin dua elektron. Untuk α(1)α(2) dan β(1)β(2), proyeksi S_1 dan S_2 pada bidang xy membentuk sudut 90° satu sama lain (Soal 11.18c).*

Gambar 11.3 memperlihatkan penjumlahan vektor $\mathbf{S}_1$ dan $\mathbf{S}_2$ untuk membentuk $\mathbf{S}$. Mungkin tampak mengejutkan bahwa fungsi spin (11.58), yang komponen z spin kedua elektronnya menunjuk ke arah berlawanan, dapat mempunyai bilangan kuantum spin total S = 1. Gambar 11.3 menunjukkan bagaimana hal ini mungkin terjadi.

Fungsi Gelombang Atom

Dalam Bagian 10.6 telah ditunjukkan bahwa dua dari empat fungsi gelombang orde nol konfigurasi helium 1s2s dapat ditulis sebagai determinan Slater tunggal, sedangkan dua fungsi lainnya harus dinyatakan sebagai kombinasi linear dua determinan Slater. Karena $\hat{L}^2$ dan $\hat{S}^2$

komutatif dengan Hamiltonian (11.1) dan operator pertukaran $\hat{P}_{ik}$, fungsi orde nol seharusnya merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$ dan $\hat{S}^2$. Determinan Slater D_2 dan D_3 pada Bagian 10.6 bukan fungsi eigen operator tersebut dan karena itu tidak cocok sebagai fungsi orde nol. Baru saja ditunjukkan bahwa kombinasi linear (10.44) dan (10.45) merupakan fungsi eigen $\hat{S}^2$; keduanya juga dapat ditunjukkan sebagai fungsi eigen $\hat{L}^2$.

Untuk konfigurasi subkulit tertutup—misalnya keadaan dasar helium—hanya satu determinan Slater yang dapat ditulis. Determinan ini merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$ dan $\hat{S}^2$ serta merupakan fungsi orde nol yang benar bagi term ^1S yang tidak terdegenerasi. Konfigurasi dengan satu elektron di luar subkulit tertutup—misalnya konfigurasi dasar boron—hanya menghasilkan satu term. Determinan Slater bagi konfigurasi semacam itu berbeda satu sama lain hanya dalam nilai m dan m_s elektron tersebut dan merupakan fungsi orde nol yang benar bagi keadaan-keadaan term. Jika semua elektron dalam orbital yang terisi tunggal mempunyai spin sama—semuanya α atau semuanya β—fungsi orde nol yang benar adalah satu determinan Slater [misalnya, lihat (10.42)]. Jika tidak demikian, kombinasi linear beberapa determinan Slater harus diambil untuk memperoleh fungsi orde nol yang benar, yaitu fungsi eigen $\hat{L}^2$ dan $\hat{S}^2$. Kombinasi linear yang benar dapat ditemukan dengan menyelesaikan persamaan sekuler teori perturbasi terdegenerasi atau menggunakan teknik operator. Tabulasi kombinasi yang benar untuk berbagai konfigurasi tersedia dalam Slater, *Atomic Structure*, Jilid II. Perhitungan Hartree–Fock energi term atom menggunakan kombinasi linear ini dan menemukan bentuk fungsi orbital terbaik bagi determinan Slater.

Setiap fungsi gelombang suatu term atom merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$, $\hat{S}^2$, $\hat{L}_z$, dan $\hat{S}_z$. Oleh karena itu, dalam perhitungan interaksi konfigurasi, hanya fungsi konfigurasi yang mempunyai nilai eigen $\hat{L}^2$, $\hat{S}^2$, $\hat{L}_z$, dan $\hat{S}_z$ sama dengan keadaan yang dikaji yang dimasukkan ke dalam ekspansi (11.17). Sebagai contoh, term dasar helium $1s^2$ adalah ^1S, dengan $L = 0$ dan $S = 0$. Konfigurasi elektron 1s2p hanya menghasilkan term ^1P dan ^3P, sehingga hanya menghasilkan keadaan dengan $L = 1$. Tidak ada fungsi konfigurasi yang timbul dari konfigurasi 1s2p yang dapat muncul dalam fungsi gelombang CI (11.17) bagi keadaan dasar He.

Paritas Keadaan Atom

Tinjau Hamiltonian atom (11.1). Dalam Bagian 7.5 telah ditunjukkan bahwa operator paritas $\hat{P}$ komutatif dengan operator energi kinetik. Besaran $1/r_i$ pada (11.1) adalah $r_i^{-1} = (x_i^2 + y_i^2 + z_i^2)^{-1/2}$. Penggantian setiap koordinat oleh negatifnya tidak mengubah $1/r_i$. Selain itu,

$$r_{ij}^{-1} = [(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2]^{-1/2}$$

dan inversi tidak memengaruhi $1/r_{ij}$. Jadi, $\hat{P}$ komutatif dengan Hamiltonian atom dan fungsi gelombang atom dapat dipilih mempunyai paritas tertentu.

Bagi atom satu-elektron, fungsi gelombang ruang adalah $\psi = R(r)Y_l^m(\theta, \varphi)$. Fungsi radial tidak berubah oleh inversi, dan paritas ditentukan oleh faktor sudut. Dalam Soal 7.29 telah ditunjukkan bahwa Y_l^m merupakan fungsi genap jika l genap dan fungsi ganjil jika l ganjil. Dengan demikian, keadaan atom satu-elektron mempunyai paritas genap atau ganjil menurut apakah l genap atau ganjil.

Sekarang tinjau atom berelektron n. Dalam hampiran medan-pusat Hartree–Fock, fungsi gelombang ditulis sebagai determinan Slater—atau kombinasi linear determinan Slater—dari spin-orbital. Fungsi gelombang merupakan jumlah suku yang faktor ruang setiap sukunya berbentuk

$$R_1(r_1)\ldots R_n(r_n)Y_{l_1}^{m_1}(\theta_1,\varphi_1)\ldots Y_{l_n}^{m_n}(\theta_n,\varphi_n)$$

Paritas hasil kali ini ditentukan oleh faktor harmonik sferis. Hasil kali tersebut merupakan fungsi genap atau ganjil menurut apakah $l_1 + l_2 + \ldots + l_n$ merupakan bilangan genap atau

ganjil. Jadi, paritas suatu keadaan atom diperoleh dengan menjumlahkan nilai l elektron dalam konfigurasi elektron yang menghasilkan keadaan itu: jika $\Sigma_i l_i$ genap, ψ merupakan fungsi genap; jika $\Sigma_i l_i$ ganjil, ψ merupakan fungsi ganjil. Sebagai contoh, konfigurasi $1s^2 2s 2p^3$ mempunyai $\Sigma_i l_i = 0 + 0 + 0 + 1 + 1 + 1 = 3$, sehingga semua keadaan yang timbul dari konfigurasi ini mempunyai paritas ganjil. (Argumen ini didasarkan pada hampiran SCF terhadap ψ, tetapi kesimpulannya berlaku bagi ψ sejati.)

Momentum Sudut Elektronik Total dan Tingkat Atom

Momentum sudut elektronik total **J** suatu atom adalah jumlah vektor momentum sudut orbital dan spin elektronik total:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \tag{11.61}$$

Operator $\hat{J}$ untuk momentum sudut elektronik total komutatif dengan Hamiltonian atom; karena itu, suatu keadaan atom dapat dicirikan oleh bilangan kuantum J dengan kemungkinan nilai [Pers. (11.39)]

$$L + S, L + S - 1, ..., |L - S| \tag{11.62}$$

Kita mempunyai $\hat{J}^2\psi = J(J + 1)\hbar^2\psi$.

Bagi Hamiltonian atom (11.1), semua keadaan yang termasuk dalam term yang sama mempunyai energi sama. Akan tetapi, ketika interaksi spin–orbit (Bagian 11.6) dimasukkan ke dalam $\hat{H}$, nilai bilangan kuantum J sedikit memengaruhi energi. Karena itu, keadaan yang termasuk term yang sama tetapi mempunyai nilai J berbeda akan mempunyai energi yang sedikit berbeda. Himpunan keadaan yang termasuk term yang sama dan mempunyai nilai J yang sama disebut **tingkat atom**. Energi tingkat berbeda yang termasuk dalam term yang sama sedikit berbeda. (Lihat Gambar 11.6 dalam Bagian 11.7.) Untuk menyatakan tingkat, nilai J ditambahkan sebagai subskrip kanan pada simbol term. Setiap tingkat terdegenerasi (2J + 1) kali, sesuai dengan 2J + 1 nilai M_J, dengan M_J$\hbar$ sebagai komponen z momentum sudut elektronik total **J**. Setiap tingkat terdiri atas 2J + 1 keadaan berenergi sama.

Contoh. Tentukan tingkat-tingkat suatu term ^3P dan degenerasi setiap tingkat.

Bagi term ^3P, 2S + 1 = 3 sehingga S = 1; selain itu, dari (11.42), L = 1. Dengan L = 1 dan S = 1, (11.62) memberikan J = 2, 1, 0. Tingkat-tingkatnya adalah $^3P_2$, $^3P_1$, dan $^3P_0$.

Tingkat $^3P_2$ mempunyai J = 2 dan 2J + 1 = 5 nilai M_J, yakni −2, −1, 0, 1, dan 2. Jadi, tingkat $^3P_2$ terdegenerasi lima kali. Tingkat $^3P_1$ terdegenerasi 2(1) + 1 = 3 kali. Tingkat $^3P_0$ mempunyai 2J + 1 = 1 dan tidak terdegenerasi.

Jumlah keadaan untuk ketiga tingkat $^3P_2$, $^3P_1$, dan $^3P_0$ ialah 5 + 3 + 1 = 9. Ketika interaksi spin–orbit diabaikan, terdapat term ^3P yang terdiri atas (2L + 1)(2S + 1) = 3(3) = 9 keadaan berenergi sama. Dengan interaksi spin–orbit, term yang terdegenerasi sembilan kali terpecah menjadi tiga tingkat yang berdekatan: $^3P_2$ dengan lima keadaan, $^3P_1$ dengan tiga keadaan, dan $^3P_0$ dengan satu keadaan. Jumlah keseluruhan keadaan sama untuk term ^3P dan ketiga tingkat yang timbul dari term itu.

Latihan. Tentukan tingkat-tingkat term ^2D dan degenerasi tingkatnya. *(Jawaban: $^2D_{5/2}$, $^2D_{3/2}$; 6, 4.)*

Besaran 2S + 1 disebut **multipisitas spin elektron**, atau cukup **multipisitas**, suatu term. Jika L ≥ S, kemungkinan nilai J pada (11.62) berkisar dari L + S hingga L − S dan jumlahnya 2S + 1. Jika L ≥ S, multipisitas spin menyatakan jumlah tingkat yang timbul dari suatu term. Jika L < S, nilai J berkisar dari S + L hingga S − L dan jumlahnya 2L + 1. Dalam kasus ini, multipisitas spin lebih besar daripada jumlah tingkat. Sebagai contoh, jika L = 0 dan S = 1—term ^3S—multipisitas spin adalah 3, tetapi hanya terdapat satu kemungkinan nilai J, yaitu J =

1. Untuk 2S + 1 = 1, 2, 3, 4, 5, 6, … digunakan istilah singlet, doublet, triplet, kuartet, kuintet, sekstet, dan seterusnya. Simbol tingkat $^3P_1$ dibaca "triplet P satu".

Bagi atom ringan, interaksi spin–orbit sangat kecil dan pemisahan antartingkat dalam suatu term juga sangat kecil. Perhatikan pada Gambar 11.6 di Bagian 11.7 bahwa pemisahan antara tingkat $^3P_0$, $^3P_1$, dan $^3P_2$ dari term helium 1s2p ^3P jauh, jauh lebih kecil daripada pemisahan antara term ^1P dan ^3P konfigurasi 1s2p.

Term dan Tingkat Hidrogen serta Helium

Atom hidrogen mempunyai satu elektron. Karena itu, L = l dan S = s = 1/2. Kemungkinan nilai J adalah L + 1/2 dan L − 1/2, kecuali untuk L = 0, ketika J = 1/2 menjadi satu-satunya kemungkinan. Setiap konfigurasi elektron hanya menghasilkan satu term, yang tersusun atas satu tingkat jika L = 0 dan dua tingkat jika L ≠ 0. Konfigurasi keadaan dasar 1s menghasilkan term ^2S, yang terdiri atas satu tingkat $^2S_{1/2}$; tingkat ini terdegenerasi dua kali, M_J = −1/2, 1/2. Konfigurasi 2s juga menghasilkan tingkat $^2S_{1/2}$. Konfigurasi 2p menghasilkan tingkat $^2P_{3/2}$ dan $^2P_{1/2}$; tingkat $^2P_{3/2}$ terdegenerasi empat kali, sedangkan tingkat $^2P_{1/2}$ terdegenerasi dua kali. Terdapat 2 + 4 + 2 = 8 keadaan dengan n = 2, sesuai dengan hasil sebelumnya.

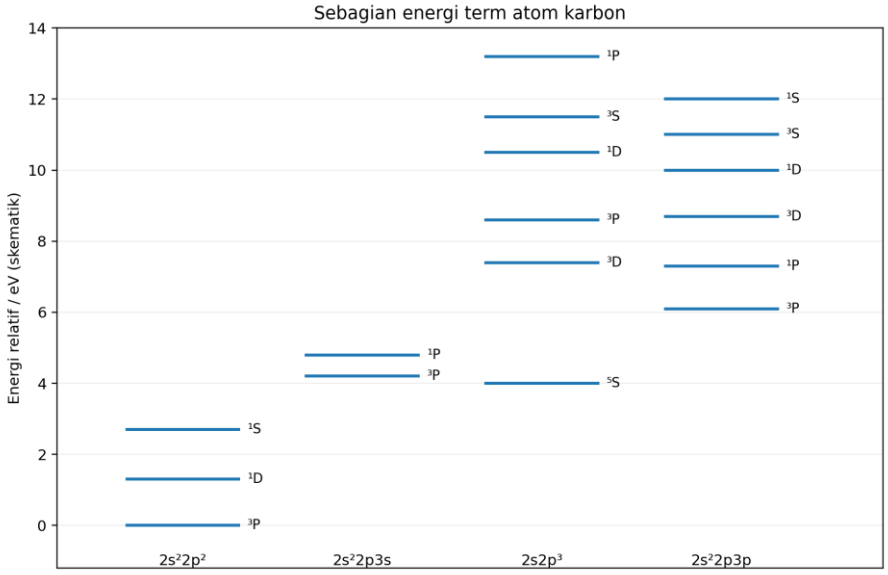
Konfigurasi keadaan dasar helium $1s^2$ merupakan subkulit tertutup dan menghasilkan satu tingkat $^1S_0$ yang tidak terdegenerasi, M_J = 0. Konfigurasi tereksitasi 1s2s menghasilkan dua term ^1S dan ^3S, yang masing-masing mempunyai satu tingkat. Tingkat $^1S_0$ tidak terdegenerasi; tingkat $^3S_1$ terdegenerasi tiga kali. Konfigurasi 1s2p menghasilkan term ^1P dan ^3P. Tingkat-tingkat ^3P adalah $^3P_2$, $^3P_1$, dan $^3P_0$; term ^1P mempunyai satu tingkat $^1P_1$.

Tabel Tingkat Energi Atom

Tingkat energi yang ditentukan secara spektroskopi bagi atom dengan nomor atom kurang dari 90 diberikan dalam tabel C. E. Moore dan rekan-rekan: C. E. Moore, *Atomic Energy Levels*, National Bureau of Standards Circular 467, Jilid I, II, dan III, 1949, 1952, dan 1958, Washington, D.C.; karya ini dicetak ulang sebagai *Natl. Bur. Stand. Publ.* NSRDS-NBS 35, 1971; W. C. Martin dkk., *Atomic Energy Levels—The Rare-Earth Elements*, *Natl. Bur. Stand. Publ.* NSRDS-NBS 60, Washington, D.C., 1978. Data tingkat energi atom dalam tabel Moore beserta revisi berikutnya tersedia secara daring dalam NIST Atomic Spectra Database.

Tabel tersebut juga mencantumkan tingkat banyak ion atom. Spektroskopis menggunakan simbol I untuk menyatakan atom netral, simbol II untuk atom terionisasi satu kali, dan seterusnya. Untuk melihat data tingkat energi ion C^{2+} dalam basis data daring NIST, pilih "Levels", kemudian masukkan C III pada kolom "Spectrum".

Tabel mengambil tingkat energi nol pada tingkat energi atom yang paling rendah dan mencantumkan energi tingkat E_i sebagai E_i/hc dalam cm^{-1}, dengan h dan c berturut-turut konstanta Planck dan laju cahaya. Selisih nilai E/hc dua tingkat memberikan bilangan gelombang [Pers. (4.64)] transisi spektral di antara tingkat tersebut, asalkan transisinya diperbolehkan. Energi E sebesar 1 eV bersesuaian dengan E/hc = 8065,544 cm^{-1} (Soal 11.29).



Gambar 11.4 *Sebagian energi term atom karbon. Pemisahan antartingkat dalam setiap term terlalu kecil untuk tampak pada gambar ini.*

Gambar 11.4 memperlihatkan sebagian energi term atom karbon. Pemisahan antartingkat setiap term terlalu kecil untuk terlihat dalam gambar tersebut.

11.6 Interaksi Spin–Orbit

Hamiltonian atom (11.1) tidak melibatkan spin elektron. Pada kenyataannya, keberadaan spin menambahkan satu suku tambahan—biasanya kecil—pada Hamiltonian. Suku ini, yang disebut **interaksi spin–orbit**, memecah suatu term atom menjadi tingkat-tingkat. Interaksi spin–orbit merupakan efek relativistik dan secara tepat diturunkan dengan menggunakan perlakuan relativistik Dirac terhadap elektron. Bagian ini memberikan pembahasan kualitatif mengenai asal interaksi spin–orbit.

Jika kita membayangkan berada pada sebuah elektron dalam atom, dari sudut pandang kita inti bergerak mengelilingi elektron—seperti Matahari tampak bergerak mengelilingi Bumi. Gerak semu inti ini menghasilkan medan magnet yang berinteraksi dengan momen magnet intrinsik—spin—elektron, sehingga menimbulkan suku interaksi spin–orbit dalam Hamiltonian. Energi interaksi antara momen magnet $\boldsymbol{\mu}$ dan medan magnet $\mathbf{B}$ menurut (6.131) adalah $-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{B}$. Momen magnet spin elektron $\boldsymbol{\mu}_S$ sebanding dengan spin $\mathbf{S}$ [Pers. (10.57)], sedangkan medan magnet yang muncul dari gerak semu inti sebanding dengan momentum sudut orbital elektron $\mathbf{L}$. Karena itu, interaksi spin–orbit sebanding dengan $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$. Hasil kali titik $\mathbf{L}$ dan $\mathbf{S}$ bergantung pada orientasi relatif kedua vektor. Momentum sudut elektronik total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ juga bergantung pada orientasi relatif $\mathbf{L}$ dan $\mathbf{S}$, sehingga energi interaksi spin–orbit bergantung pada J [Pers. (11.67)].

Ketika penurunan relativistik yang tepat dilakukan terhadap suku interaksi spin–orbit $\hat{H}_{S.O.}$ dalam Hamiltonian atom, bagi atom satu-elektron diperoleh (lihat Bethe dan Jackiw, Bab 8 dan 23)

$$\hat{H}_{S.O.} = [1/(2m_e{}^2c^2)](1/r)(dV/dr)\hat{L}\cdot\hat{S} \tag{11.63}$$

dengan V sebagai energi potensial yang dialami elektron dalam atom dan c sebagai laju cahaya. Salah satu cara menghitung $\hat{H}_{S.O.}$ bagi atom berelektron banyak ialah mula-mula mengabaikan $\hat{H}_{S.O.}$ dan melakukan perhitungan SCF (Bagian 11.1) dengan hampiran medan-pusat untuk memperoleh energi potensial efektif $V_i(r_i)$ bagi setiap elektron i dalam

medan inti dan elektron lain yang dipandang sebagai awan muatan [Pers. (11.7) dan (11.8)]. Kemudian (11.63) dijumlahkan atas semua elektron sehingga diperoleh

$$\hat{H}\_S.O. \approx [1/(2m_e{}^2c^2)]\Sigma_i[(1/r_i)(dV_i(r_i)/dr_i)\hat{L}_i\cdot\hat{S}_i] = \Sigma_i\xi_i(r_i)\hat{L}_i\cdot\hat{S}_i \tag{11.64}$$

dengan definisi $\xi_i(r_i)$ jelas dari persamaan tersebut, sedangkan $\hat{L}_i$ dan $\hat{S}_i$ ialah operator momentum sudut orbital dan spin elektron i.

Menghitung energi interaksi spin–orbit E_S.O. dengan mencari fungsi eigen dan nilai eigen operator $\hat{H}$_(11.1) + $\hat{H}$_S.O.—dengan $\hat{H}$_(11.1) sebagai Hamiltonian Pers. (11.1)—merupakan pekerjaan sulit. Karena itu, E_S.O. biasanya ditaksir menggunakan teori perturbasi. Kecuali pada atom berat, pengaruh $\hat{H}$_S.O. kecil dibandingkan pengaruh $\hat{H}$_(11.1), sehingga teori perturbasi orde pertama dapat digunakan untuk menaksir E_S.O.

Persamaan (9.22) memberikan E_S.O. ≈ $\langle\psi|\hat{H}\_S.O.|\psi\rangle$, dengan ψ sebagai fungsi eigen $\hat{H}$_(11.1). Untuk atom satu-elektron,

$$E\_S.O. \approx \langle\psi|\xi(r)\hat{L}\cdot\hat{S}|\psi\rangle \tag{11.65}$$

Kita mempunyai

$$J\cdot J = (L+S)\cdot(L+S) = L^2 + S^2 + 2L\cdot S$$

$$L\cdot S = 1/2(J^2 - L^2 - S^2)$$

$$(\hat{L}\cdot\hat{S})\psi = 1/2(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)\psi = (1/2)[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]\hbar^2\psi$$

karena ψ tak terperturbasi merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$, $\hat{S}^2$, dan $\hat{J}^2$. Oleh sebab itu,

$$E\_S.O. \approx (1/2)\langle\xi\rangle\hbar^2[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \tag{11.66}$$

Bagi atom berelektron banyak, dapat ditunjukkan (Bethe dan Jackiw, hlm. 164) bahwa energi interaksi spin–orbit adalah

$$E\_S.O. \approx (1/2)A\hbar^2[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)] \tag{11.67}$$

dengan A sebagai konstanta bagi suatu term tertentu; artinya, A bergantung pada L dan S, tetapi tidak pada J.

Persamaan (11.67) menunjukkan bahwa ketika interaksi spin–orbit dimasukkan, energi suatu keadaan atom bergantung pada momentum sudut elektronik total J. Jadi, setiap term atom terpecah menjadi beberapa tingkat, dan setiap tingkat mempunyai nilai J berbeda. Sebagai contoh, konfigurasi natrium $1s^22s^22p^63p$ mempunyai satu term ^2P yang terdiri atas dua tingkat $^2P_{3/2}$ dan $^2P_{1/2}$. Pemecahan tingkat ini menghasilkan struktur halus garis D natrium yang teramati (Gambar 11.5). Tingkat-tingkat suatu term dikatakan membentuk **struktur multiplet** term tersebut.

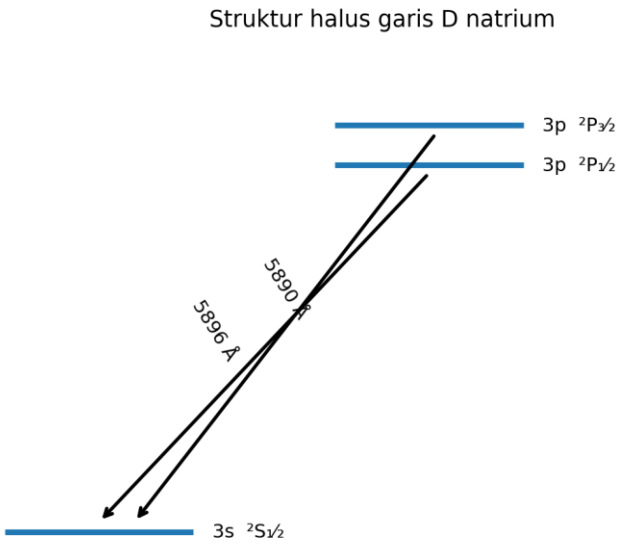
Bagaimana urutan tingkat di dalam satu term? Karena L dan S sama bagi tingkat-tingkat tersebut, energi relatifnya menurut Pers. (11.67) ditentukan oleh AJ(J + 1). Jika A positif, tingkat dengan nilai J terendah berada paling rendah dan multiplet disebut **regular**. Jika A negatif, tingkat dengan nilai J tertinggi berada paling rendah dan multiplet disebut **terbalik**. Kaidah berikut biasanya berlaku bagi konfigurasi yang hanya mempunyai satu subkulit terisi sebagian: jika subkulit tersebut kurang dari setengah penuh, multiplet regular; jika lebih dari setengah penuh, multiplet terbalik. (Terdapat beberapa pengecualian.) Untuk kasus setengah penuh, lihat Soal 11.28.

Contoh. Tentukan tingkat dasar atom oksigen.

Konfigurasi elektron keadaan dasarnya adalah $1s^22s^22p^4$. Tabel 11.2 memberikan ^1S, ^1D, dan ^3P sebagai term konfigurasi ini. Menurut kaidah Hund, ^3P adalah term terendah. [Sebagai alternatif, diagram seperti (11.48) dapat digunakan untuk menyimpulkan bahwa ^3P merupakan term terendah.] Term ^3P mempunyai L = 1 dan S = 1, sehingga kemungkinan nilai J adalah 2, 1, dan 0. Tingkat-tingkat ^3P adalah $^3P_2$, $^3P_1$, dan $^3P_0$. Subkulit 2p lebih dari setengah penuh;

karena itu, kaidah di atas meramalkan bahwa multiplet terbalik dan tingkat $^3P_2$ terletak paling rendah. Inilah tingkat dasar O.

Latihan. Tentukan tingkat dasar atom Cl. *(Jawaban: $^2P_{3/2}$.)*



Gambar 11.5 *Struktur halus garis D natrium. Transisi dari tingkat $^2P_{3/2}$ dan $^2P_{1/2}$ konfigurasi 3p menuju tingkat $^2S_{1/2}$ konfigurasi 3s menghasilkan garis sekitar 5890 Å dan 5896 Å.*

11.7 Hamiltonian Atom

Operator Hamiltonian suatu atom dapat dibagi menjadi tiga bagian:

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}\_rep + \hat{H}\_S.O. \tag{11.68}$$

dengan $\hat{H}^0$ sebagai jumlah Hamiltonian menyerupai hidrogen,

$$\hat{H}^0 = \Sigma_{i=1}^{n}[-(\hbar^2/2m_e)\nabla_i^2 - Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r_i)] \tag{11.69}$$

$\hat{H}$_rep terdiri atas tolakan antarelektron,

$$\hat{H}\_rep = \Sigma_i\Sigma\_(j>i)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{ij}) \tag{11.70}$$

dan $\hat{H}$_S.O. adalah interaksi spin–orbit (11.64):

$$\hat{H}\_S.O. = \Sigma_{i=1}^{n}\,\xi_i\hat{L}_i\cdot\hat{S}_i \tag{11.71}$$

Jika hanya $\hat{H}^0$ yang dipertimbangkan, semua keadaan atom yang bersesuaian dengan konfigurasi elektron yang sama terdegenerasi. Penambahan $\hat{H}$_rep menghilangkan degenerasi antara keadaan dengan L berbeda, S berbeda, atau keduanya, sehingga setiap konfigurasi terpecah menjadi term-term. Selanjutnya $\hat{H}$_S.O. ditambahkan; suku ini memecah setiap term menjadi tingkat-tingkat. Setiap tingkat tersusun atas keadaan dengan nilai J yang sama dan terdegenerasi (2J + 1) kali, sesuai dengan kemungkinan nilai M_J.

Degenerasi setiap tingkat dapat dihilangkan dengan menerapkan medan magnet luar—efek Zeeman. Jika **B** adalah medan yang diterapkan, terdapat suku tambahan dalam Hamiltonian [Pers. (6.131)]

$$\hat{H}\_B = -\hat{\mu}\cdot B = -(\hat{\mu}\_L + \hat{\mu}\_S)\cdot B \tag{11.72}$$

dengan momen magnet orbital maupun spin telah dimasukkan. Dengan menggunakan $\boldsymbol{\mu}$_L $= -(e/2m_e)\mathbf{L}$, $\boldsymbol{\mu}$_S $= -(e/m_e)\mathbf{S}$, dan μ_B $\equiv e\hbar/(2m_e)$ [Pers. (6.128), (10.55) dengan g_e ≈ 2, dan (6.130)], diperoleh

$$\hat{H}_B = \mu_B \hbar^{-1}(\hat{L} + 2\hat{S})\cdot B = \mu_B \hbar^{-1}(\hat{J} + \hat{S})\cdot B = \mu_B B \hbar^{-1}(\hat{J}_z + \hat{S}_z) \tag{11.73}$$

dengan μ_B sebagai magneton Bohr dan sumbu z dipilih searah medan.

Jika medan luar cukup lemah, pengaruhnya lebih kecil daripada interaksi spin–orbit dan dapat dihitung menggunakan teori perturbasi orde pertama. Karena $\hat{J}_z\psi = M_J\hbar\psi$, energi interaksi dengan medan yang diterapkan adalah

$$E_B = \langle\psi|\hat{H}_B|\psi\rangle = \mu_B B M_J + \mu_B B \hbar^{-1}\langle S_z\rangle$$

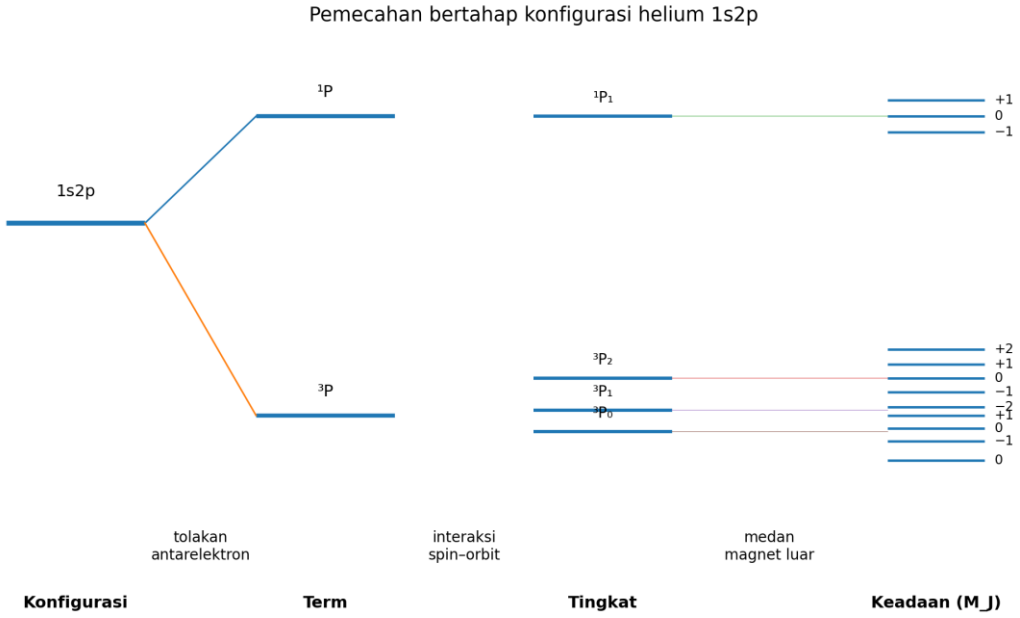
Evaluasi $\langle S_z\rangle$ (Bethe dan Jackiw, hlm. 169) memberikan hasil akhir untuk medan lemah:

$$E_B = \mu_B g B M_J \tag{11.74}$$

dengan g—faktor g Landé—diberikan oleh

$$g = 1 + [J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)]/[2J(J+1)] \tag{11.75}$$

Jadi, medan luar memecah setiap tingkat menjadi 2J + 1 keadaan, masing-masing mempunyai nilai M_J berbeda.



Gambar 11.6 *Pengaruh penambahan berturut-turut suku-suku dalam Hamiltonian atom pada konfigurasi helium 1s2p. $\hat{H}_B$ bukan bagian Hamiltonian atom, melainkan berasal dari medan magnet luar.*

Gambar 11.6 memperlihatkan apa yang terjadi ketika interaksi berturut-turut dipertimbangkan dalam atom, dengan konfigurasi helium 1s2p sebagai contoh.

Pembahasan sejauh ini didasarkan pada skema yang terlebih dahulu menjumlahkan momentum sudut orbital elektronik individual untuk membentuk vektor momentum sudut orbital total dan melakukan hal yang sama bagi spin: $\mathbf{L} = \Sigma_i \mathbf{L}_i$ dan $\mathbf{S} = \Sigma_i \mathbf{S}_i$. Kemudian **L** dan **S** digabungkan untuk memperoleh **J**. Skema ini disebut **kopling Russell–Saunders**, atau **kopling L–S**, dan sesuai jika energi interaksi spin–orbit kecil dibandingkan energi tolakan antarelektron. Operator $\hat{L}$ dan $\hat{S}$ komutatif dengan $\hat{H}^0 + \hat{H}_{rep}$, tetapi ketika $\hat{H}_{S.O.}$ dimasukkan ke dalam Hamiltonian, $\hat{L}$ dan $\hat{S}$ tidak lagi komutatif dengan $\hat{H}$. ($\hat{J}$ tetap komutatif dengan $\hat{H}^0 + \hat{H}_{rep} + \hat{H}_{S.O.}$) Jika interaksi spin–orbit kecil, $\hat{L}$ dan $\hat{S}$ "hampir" komutatif dengan $\hat{H}$, sehingga kopling L–S berlaku.

Ketika nomor atom meningkat, laju rata-rata elektron v meningkat. Dengan meningkatnya v/c, efek relativistik seperti interaksi spin–orbit juga meningkat. Bagi atom dengan nomor

atom sangat tinggi, interaksi spin–orbit melampaui energi tolakan antarelektron sehingga $\hat{L}$ dan $\hat{S}$ tidak lagi dapat dianggap komutatif dengan $\hat{H}$; meskipun demikian, operator $\hat{J}$ tetap komutatif dengan $\hat{H}$. Dalam kasus ini, $\hat{H}$_S.O. terlebih dahulu ditambahkan pada $\hat{H}^o$, kemudian $\hat{H}$_rep dipertimbangkan. Hal ini bersesuaian dengan penggabungan momentum sudut spin dan orbital setiap elektron untuk memberikan momentum sudut total $\mathbf{j}_i$ bagi setiap elektron: $\mathbf{j}_i = \mathbf{L}_i + \mathbf{S}_i$. Selanjutnya semua $\mathbf{j}_i$ dijumlahkan untuk memperoleh momentum sudut elektronik total: $\mathbf{J} = \Sigma_i \mathbf{j}_i$. Skema ini disebut **kopling j–j**. Untuk sebagian besar atom berat, situasinya berada di antara kopling j–j dan L–S sehingga perhitungannya sulit.

Beberapa efek lain seharusnya dimasukkan ke dalam Hamiltonian atom. Ukuran inti yang berhingga dan pengaruh gerak inti sedikit mengubah energi (Bethe dan Salpeter, hlm. 102, 166, 351). Terdapat suku relativistik kecil akibat interaksi antara momen magnet spin elektron—interaksi spin–spin. Perubahan relativistik massa elektron terhadap kecepatan juga harus diperhitungkan. Efek ini penting bagi elektron kulit dalam atom berat, yang laju elektron rata-ratanya tidak dapat diabaikan dibandingkan laju cahaya.

Jika inti mempunyai spin bukan nol, momen magnet spin inti berinteraksi dengan momen magnet spin dan orbital elektronik, sehingga menghasilkan struktur hiperhalus atom. Momentum sudut spin inti **I** dijumlahkan secara vektor dengan momentum sudut elektronik total **J** untuk memberikan momentum sudut total atom **F**: $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J}$. Sebagai contoh, tinjau keadaan dasar atom hidrogen. Spin proton adalah 1/2, sehingga I = 1/2; selain itu, J = 1/2. Karena itu, bilangan kuantum F dapat bernilai 0 atau 1, yang bersesuaian dengan spin proton dan elektron antiparalel atau paralel. Transisi $F = 1 \rightarrow 0$ menghasilkan garis 1420 MHz, yaitu garis 21 cm yang dipancarkan atom hidrogen di ruang angkasa. Pada 1951, Ewen dan Purcell menjulurkan antena berbentuk corong keluar jendela laboratorium fisika Harvard dan mendeteksi garis ini. Frekuensi pemecahan hiperhalus keadaan dasar hidrogen merupakan salah satu konstanta fisika yang diukur paling teliti: 1420,405751768 ± 0,000000002 MHz [S. G. Karshenboim, *Can. J. Phys.*, **78**, 639 (2000); arxiv.org/abs/physics/0008051].

11.8 Kaidah Condon–Slater

Dalam hampiran Hartree–Fock, fungsi gelombang atom—atau molekul—merupakan determinan Slater atau kombinasi linear beberapa determinan Slater [misalnya Pers. (10.44)]. Fungsi gelombang interaksi konfigurasi seperti (11.17) merupakan kombinasi linear banyak determinan Slater. Untuk mengevaluasi energi dan sifat lain atom serta molekul dengan fungsi gelombang Hartree–Fock atau interaksi konfigurasi, kita harus dapat mengevaluasi integral berbentuk $\langle D'|\hat{B}|D\rangle$, dengan D dan D′ sebagai determinan Slater dari spin-orbital ortonormal dan $\hat{B}$ sebagai suatu operator.

Setiap spin-orbital u_i merupakan hasil kali orbital ruang υ_i dan fungsi spin s_i, dengan s_i berupa α atau β. Kita mempunyai $u_i = \upsilon_i s_i$ dan $\langle u_i(1)|u_j(1)\rangle = \delta_{ij}$, dengan $\langle u_i(1)|u_j(1)\rangle$ melibatkan penjumlahan atas koordinat spin elektron 1 dan integrasi atas koordinat ruangnya. Jika u_i dan u_j mempunyai fungsi spin berbeda, (10.12) menjamin ortogonalitas u_i dan u_j. Jika u_i dan u_j mempunyai fungsi spin sama, ortogonalitasnya berasal dari ortogonalitas orbital ruang υ_i dan υ_j.

Bagi sistem berelektron n, D adalah

$$D = (n!)^{-1/2} \det[u_j(i)] = (n!)^{-1/2} \begin{vmatrix} u_1(1) & u_2(1) & \dots & u_n(1); \\ u_1(2) & u_2(2) & \dots & u_n(2); \dots; \\ u_1(n) & u_2(n) & \dots & u_n(n) \end{vmatrix} \tag{11.76}$$

Contoh untuk n = 3 diberikan dalam Pers. (10.40). D′ mempunyai bentuk yang sama dengan D, kecuali $u_1, u_2, \dots, u_n$ diganti dengan $u'_1, u'_2, \dots, u'_n$.

Kita akan menganggap kolom-kolom D dan D′ disusun agar sebanyak mungkin kolom di sebelah kiri cocok. Sebagai contoh, jika determinan Slater yang digunakan adalah |1s 1s 2s 3p|

dan |1s 1s 3p 4s|, kolom ketiga dan keempat determinan pertama dipertukarkan—sehingga determinannya dikalikan −1—kemudian diambil D = |1s 1s 3p 2s| dan D′ = |1s 1s 3p 4s|.

Operator $\hat{B}$ biasanya berbentuk

$$\hat{B} = \Sigma_{i=1}^{n} \hat{f}_i + \Sigma_{i=1}^{n-1}\Sigma_{-}(j>i)\, \hat{g}_{ij} \tag{11.77}$$

dengan operator satu-elektron $\hat{f}_i$ hanya melibatkan operator koordinat dan momentum elektron i, sedangkan operator dua-elektron $\hat{g}_{ij}$ melibatkan elektron i dan j. Sebagai contoh, jika $\hat{B}$ adalah operator Hamiltonian atom (11.1), maka $\hat{f}_i = -(\hbar^2/2m_e)\nabla_i^2 - Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r_i)$ dan $\hat{g}_{ij} = e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{ij})$.

Condon dan Slater menunjukkan bahwa integral berelektron n $\langle D'|\hat{B}|D\rangle$ dapat direduksi menjadi jumlah integral satu-elektron dan dua-elektron tertentu. Penurunan rumus Condon–Slater menggunakan pernyataan determinan pada Soal 8.22 bersama ortonormalitas spin-orbital. (Lihat Parr, hlm. 23–27 untuk penurunannya.) Tabel 11.3 memberikan rumus Condon–Slater.

Dalam Tabel 11.3, setiap elemen matriks $\hat{g}_{12}$ melibatkan penjumlahan atas koordinat spin elektron 1 dan 2 serta integrasi atas seluruh rentang koordinat ruang elektron 1 dan 2. Setiap elemen matriks $\hat{f}_1$ melibatkan penjumlahan atas koordinat spin elektron 1 dan integrasi atas koordinat ruangnya. Variabel dalam penjumlahan dan integral tentu merupakan variabel semu.

Tabel 11.3 Kaidah Condon–Slater

Perbedaan antara D dan D′	**⟨D′**	**$\Sigma_i\hat{f}_i$**	**D⟩**	**⟨D′**	**$\Sigma_i\Sigma_{-}(j>i)\hat{g}_{ij}$**	**D⟩**		
Tidak berbeda spin-orbital	$\Sigma_i\langle u_i(1)$	$\hat{f}_1$	$u_i(1)\rangle$	$\Sigma_i\Sigma_{-}(j>i)\{\langle u_i(1)u_j(2)$	$\hat{g}_{12}$	$u_i(1)u_j(2)\rangle - \langle u_i(1)u_j(2)$	$\hat{g}_{12}$	$u_j(1)u_i(2)\rangle\}$
Berbeda satu spin-orbital, $u'_n \neq u_n$	$\langle u'_n(1)$	$\hat{f}_1$	$u_n(1)\rangle$	$\Sigma_{j=1}^{n-1}\{\langle u'_n(1)u_j(2)$	$\hat{g}_{12}$	$u_n(1)u_j(2)\rangle - \langle u'_n(1)u_j(2)$	$\hat{g}_{12}$	$u_j(1)u_n(2)\rangle\}$
Berbeda dua spin-orbital, $u'_n \neq u_n$ dan $u'_{n-1} \neq u_{n-1}$	0	$\langle u'_n(1)u'_{n-1}(2)$	$\hat{g}_{12}$	$u_n(1)u_{n-1}(2)\rangle - \langle u'_n(1)u'_{n-1}(2)$	$\hat{g}_{12}$	$u_{n-1}(1)u_n(2)\rangle$		
Berbeda tiga spin-orbital atau lebih	0	0						

Jika operator $\hat{f}_i$ dan $\hat{g}_{ij}$ tidak melibatkan spin, pernyataan dalam Tabel 11.3 dapat disederhanakan lebih lanjut. Kita mempunyai $u_i = \upsilon_i s_i$ dan

$$\langle u_i(1)|\hat{f}_1|u_i(1)\rangle = \int \upsilon_i^*(1)\hat{f}_1\upsilon_i(1)d\tau_1\, \Sigma_{-}(m_{s_1})s_i^*(1)s_i(1)$$
$$= \int \upsilon_i^*(1)\hat{f}_1\upsilon_i(1)d\tau_1 = \langle \upsilon_i(1)|\hat{f}_1|\upsilon_i(1)\rangle$$

karena s_i ternormalisasi. Dengan menggunakan hasil ini dan ortonormalitas s_i serta s_j, bagi kasus D = D′ diperoleh (Soal 11.37)

$$\langle D|\Sigma_{i=1}^{n}\hat{f}_i|D\rangle = \Sigma_{i=1}^{n}\langle \upsilon_i(1)|\hat{f}_1|\upsilon_i(1)\rangle \tag{11.78}$$

$$\langle D|\Sigma_{i=1}^{n-1}\Sigma_{-}(j>i)\hat{g}_{ij}|D\rangle = \Sigma_{i=1}^{n-1}\Sigma_{-}(j>i)\{\langle \upsilon_i(1)\upsilon_j(2)|\hat{g}_{12}|\upsilon_i(1)\upsilon_j(2)\rangle - \delta_{-}(m_{s_i},m_{s_j})\langle \upsilon_i(1)\upsilon_j(2)|\hat{g}_{12}|\upsilon_j(1)\upsilon_i(2)\rangle\} \tag{11.79}$$

dengan $\delta_{-}(m_{s_i},m_{s_j})$ sama dengan 0 atau 1 menurut apakah $m_{s_i} \neq m_{s_j}$ atau $m_{s_i} = m_{s_j}$. Persamaan serupa berlaku bagi integral lainnya.

Sekarang terapkan persamaan ini untuk mengevaluasi $\langle D|\hat{H}|D\rangle$, dengan $\hat{H}$ sebagai Hamiltonian atom berelektron n tanpa interaksi spin–orbit dan D sebagai determinan Slater n spin-orbital. Kita mempunyai $\hat{H} = \Sigma_i\hat{f}_i + \Sigma_i\Sigma_{-}(j>i)\hat{g}_{ij}$, dengan $\hat{f}_i = -(\hbar^2/2m_e)\nabla_i^2 - Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r_i)$ dan $\hat{g}_{ij} = e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{ij})$. Dengan memperkenalkan integral Coulomb dan pertukaran (9.99) serta (9.100), lalu menggunakan (11.78) dan (11.79), diperoleh

$$\langle D|\hat{H}|D\rangle = \Sigma_{i=1}{}^{n}\langle \upsilon_i(1)|\hat{f}_1|\upsilon_i(1)\rangle + \Sigma_{i=1}{}^{n-1}\Sigma_{-}(j>i)[J_{ij} - \delta_{-}(m_{-}s_i,m_{-}s_j)K_{ij}] \tag{11.80}$$

$$J_{ij} = \langle \upsilon_i(1)\upsilon_j(2)|e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})|\upsilon_i(1)\upsilon_j(2)\rangle; \quad K_{ij} = \langle \upsilon_i(1)\upsilon_j(2)|e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})|\upsilon_j(1)\upsilon_i(2)\rangle \tag{11.81}$$

$$\hat{f}_1 = -(\hbar^2/2m_e)\nabla_1{}^2 - Ze^2/(4\pi\varepsilon_0 r_1) \tag{11.82}$$

Delta Kronecker dalam (11.80) berasal dari ortonormalitas fungsi spin satu-elektron.

Sebagai contoh, tinjau Li. Hampiran SCF bagi keadaan dasar ψ adalah determinan Slater $D = |1s\ 1s\ 2s|$. Spin-orbitalnya ialah $u_1 = 1s\alpha$, $u_2 = 1s\beta$, dan $u_3 = 2s\alpha$. Orbital ruangnya ialah $\upsilon_1 = 1s$, $\upsilon_2 = 1s$, dan $\upsilon_3 = 2s$. Kita mempunyai $J_{12} = J_{1s,1s}$ dan $J_{13} = J_{23} = J_{1s,2s}$. Karena $m_{-}s_1 \neq m_{-}s_2$ dan $m_{-}s_2 \neq m_{-}s_3$, satu-satunya integral pertukaran yang muncul dalam pernyataan energi adalah $K_{13} = K_{1s,2s}$. Integral pertukaran hanya diperoleh antara spin-orbital yang mempunyai spin sama. Persamaan (11.80) memberikan energi SCF

$$E = \langle D|\hat{H}|D\rangle = 2\langle 1s(1)|\hat{f}_1|1s(1)\rangle + \langle 2s(1)|\hat{f}_1|2s(1)\rangle + J_{1s,1s} + 2J_{1s,2s} - K_{1s,2s}$$

Suku yang melibatkan $\hat{f}_1$ merupakan energi menyerupai hidrogen, dan jumlahnya sama dengan $E^{(0)}$ pada Pers. (10.49). Suku sisanya sama dengan $E^{(1)}$ pada Pers. (10.51). Sebagaimana dicatat pada awal Bagian 9.4, $E^{(0)} + E^{(1)}$ sama dengan integral variasi $\langle D|\hat{H}|D\rangle$; jadi, kaidah Condon–Slater telah diperiksa dalam kasus ini.

Bagi atom yang hanya mempunyai subkulit tertutup—misalnya Be keadaan dasar dengan konfigurasi $1s^2 2s^2$—n elektron menempati n/2 orbital ruang berbeda, sehingga $\upsilon_1 = \upsilon_2$, $\upsilon_3 = \upsilon_4$, dan seterusnya. Misalkan $\varphi_1 \equiv \upsilon_1 = \upsilon_2$, $\varphi_2 \equiv \upsilon_3 = \upsilon_4$, …, $\varphi_{-}(n/2) \equiv \upsilon_{n-1} = \upsilon_n$. Jika (11.80) ditulis ulang menggunakan φ, bukan υ, diperoleh (Soal 11.38) energi SCF term ^1S yang dihasilkan konfigurasi subkulit tertutup:

$$E = \langle D|\hat{H}|D\rangle = 2\Sigma_{i=1}{}^{n/2}\langle \varphi_i(1)|\hat{f}_1|\varphi_i(1)\rangle + \Sigma_{j=1}{}^{n/2}\Sigma_{i=1}{}^{n/2}(2J_{ij} - K_{ij}) \tag{11.83}$$

dengan $\hat{f}_1$ diberikan oleh (11.82), sedangkan J_{ij} dan K_{ij} mempunyai bentuk pada (11.81), tetapi υ_i dan υ_j diganti dengan φ_i dan φ_j. Setiap penjumlahan pada (11.83) meliputi semua n/2 orbital ruang yang berbeda.

Sebagai contoh, tinjau konfigurasi elektron $1s^2 2s^2$. Di sini n = 4 dan dua orbital ruang yang berbeda adalah 1s dan 2s. Penjumlahan ganda dalam Pers. (11.83) sama dengan

$$2J_{1s,1s} - K_{1s,1s} + 2J_{1s,2s} - K_{1s,2s} + 2J_{2s,1s} - K_{2s,1s} + 2J_{2s,2s} - K_{2s,2s}$$

Dari definisi (11.81), diperoleh $J_{ii} = K_{ii}$. Label 1 dan 2 dalam (11.81) adalah variabel semu dan pertukarannya tidak dapat memengaruhi integral. Pertukaran 1 dan 2 dalam J_{ij} mengubahnya menjadi J_{ji}; karena itu, $J_{ij} = J_{ji}$. Penalaran yang sama memberikan $K_{ij} = K_{ji}$. Jadi,

$$J_{ii} = K_{ii}, \quad J_{ij} = J_{ji}, \quad K_{ij} = K_{ji} \tag{11.84}$$

Penggunaan (11.84) memberikan pernyataan integral Coulomb dan pertukaran bagi konfigurasi $1s^2 2s^2$ sebagai $J_{1s,1s} + J_{2s,2s} + 4J_{1s,2s} - 2K_{1s,2s}$. Di antara dua elektron pada orbital 1s hanya terdapat satu interaksi Coulomb, sehingga muncul suku $J_{1s,1s}$. Setiap elektron 1s berinteraksi dengan dua elektron 2s, sehingga total terdapat empat interaksi 1s–2s dan muncul suku $4J_{1s,2s}$. Seperti telah dicatat, integral pertukaran hanya terdapat antara spin-orbital dengan spin yang sama. Terdapat satu integral pertukaran antara spin-orbital $1s\alpha$ dan $2s\alpha$ serta satu antara spin-orbital $1s\beta$ dan $2s\beta$, sehingga diperoleh suku $-2K_{1s,2s}$.

Besar integral pertukaran pada umumnya jauh lebih kecil daripada besar integral Coulomb [misalnya, lihat Pers. (9.111)].

Ringkasan

Metode SCF Hartree menghampiri fungsi gelombang atom sebagai hasil kali orbital ruang satu-elektron [Pers. (11.2)] dan menemukan bentuk orbital terbaik yang mungkin melalui perhitungan iteratif. Dalam perhitungan tersebut, setiap elektron dianggap bergerak dalam medan yang dihasilkan oleh inti dan awan muatan hipotetis akibat elektron lainnya.

Metode Hartree–Fock yang lebih akurat menghampiri fungsi gelombang sebagai hasil kali terantisimetriskan—determinan Slater atau beberapa determinan—dari spin-orbital satu-elektron dan menemukan bentuk orbital ruang terbaik yang mungkin dalam spin-orbital tersebut. Perhitungan Hartree–Fock biasanya dilakukan dengan mengekspansikan setiap orbital sebagai kombinasi linear fungsi basis dan menyelesaikan secara iteratif persamaan Hartree–Fock (11.12). Orbital tipe Slater (11.14) sering digunakan sebagai fungsi basis dalam perhitungan atom. Selisih antara energi nonrelativistik eksak dan energi Hartree–Fock adalah energi korelasi atom—atau molekul.

Untuk melampaui hampiran Hartree–Fock dan mendekati fungsi gelombang serta energi sejati, dapat digunakan interaksi konfigurasi—CI—dengan menyatakan ψ sebagai kombinasi linear fungsi konfigurasi yang bersesuaian dengan berbagai konfigurasi elektron [Pers. (11.17)].

Misalkan $\mathbf{M}_1$ dan $\mathbf{M}_2$ adalah dua momentum sudut dengan bilangan kuantum j_1, m_1 dan j_2, m_2, serta $\mathbf{M}$ adalah jumlahnya: $\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2$. Telah ditunjukkan bahwa bagi jumlah momentum sudut, $\hat{M}^2$ mempunyai nilai eigen $J(J + 1)\hbar^2$ dan $\hat{M}_z$ mempunyai nilai eigen $M_J\hbar$, dengan kemungkinan nilai J dan M_J berupa $J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \ldots, |j_1 - j_2|$ dan $M_J = J, J - 1, \ldots, -J$.

Bagi atom berelektron banyak dengan interaksi spin–orbit kecil, momentum sudut orbital elektronik individual dijumlahkan untuk memberikan momentum sudut orbital elektronik total, $\mathbf{L} = \Sigma_i \mathbf{L}_i$, dan demikian pula momentum sudut spin dijumlahkan, $\mathbf{S} = \Sigma_i \mathbf{S}_i$. Nilai eigen operator $\hat{L}^2$ dan $\hat{S}^2$ bagi kuadrat besar momentum sudut orbital dan spin elektronik total berturut-turut adalah $L(L + 1)\hbar^2$ dan $S(S + 1)\hbar^2$. Bagi elektron tak ekuivalen—elektron dalam subkulit berbeda—kemungkinan nilai L yang timbul dari suatu konfigurasi elektron mudah diperoleh menggunakan kaidah penjumlahan momentum sudut (11.39), dengan mengabaikan semua subkulit tertutup. Bagi elektron ekuivalen, kemungkinan nilai L dapat ditemukan dengan menggunakan Tabel 11.2a. Kemungkinan nilai S diperoleh menggunakan (11.39) dengan mengabaikan semua elektron yang berpasangan.

Jika interaksi spin–orbit diabaikan, keadaan atom yang mempunyai energi sama mempunyai nilai L yang sama dan nilai S yang sama. Himpunan keadaan berenergi sama dengan L dan S yang sama membentuk suatu term. Term dinyatakan dengan simbol term $^{2s+1}(L)$, dengan $2S + 1$ disebut multipisitas spin dan (L) merupakan huruf kode yang memberikan nilai L [lihat (11.42)]. Degenerasi term atom adalah $(2L + 1)(2S + 1)$.

Ketika interaksi spin–orbit dimasukkan, setiap term terpecah menjadi sejumlah tingkat dan setiap tingkat mempunyai nilai bilangan kuantum momentum sudut elektronik total J yang berbeda. Momentum sudut elektronik total adalah $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, sedangkan nilai eigen $\hat{J}^2$ adalah $J(J + 1)\hbar^2$, dengan J berkisar dari $L + S$ sampai $|L - S|$ dalam langkah bilangan bulat. Simbol suatu tingkat adalah $^{2s+1}(L)\_J$. Setiap tingkat terdegenerasi $(2J + 1)$ kali, sesuai dengan $2J + 1$ nilai M_J yang berkisar dari J sampai $-J$. Degenerasi tingkat atom dapat dihilangkan dengan penerapan medan magnet luar, yang memecah setiap tingkat menjadi $2J + 1$ keadaan dengan energi sedikit berbeda.

Secara ringkas,

$$\text{Konfigurasi} \xrightarrow{\text{(tolakan antarelektron)}} \text{Term} \xrightarrow{\text{(interaksi spin–orbit)}} \text{Tingkat} \xrightarrow{\text{(medan luar)}} \text{Keadaan}$$

Kaidah Condon–Slater memberikan nilai integral satu-elektron dan dua-elektron yang melibatkan determinan Slater serta dapat digunakan untuk mengevaluasi sifat—misalnya energi—bagi fungsi gelombang yang merupakan kombinasi linear determinan Slater.

Soal

Bagian	11.1	11.2	11.3	11.4	11.5	11.6
Soal	11.1–11.4	11.5–11.6	11.7	11.8–11.12	11.13–11.32	11.33–11.35

Bagian	11.7	11.8	Umum
Soal	11.36	11.37–11.39	11.40–11.42

11.1 Berapa banyak elektron yang dapat ditempatkan dalam masing-masing bagian berikut: (a) kulit dengan bilangan kuantum utama n; (b) subkulit dengan bilangan kuantum n dan l; (c) orbital; (d) spin-orbital?

11.2 Tanpa melihat teks, tuliskan operator Hamiltonian atom litium tanpa menggunakan simbol penjumlahan. Anggap inti mempunyai massa tak berhingga dan abaikan interaksi spin–orbit.

11.3 Jika $R(r_1)$ adalah faktor radial dalam fungsi τ_1 pada persamaan diferensial Hartree (11.9), tuliskan persamaan diferensial yang dipenuhi oleh R.

11.4 STO manakah yang mempunyai bentuk sama dengan orbital atom menyerupai hidrogen?

11.5 Taksir energi orbital 1s nonrelativistik dalam Ar. Periksa hasilnya dengan Gambar 11.2.

11.6 Pada nomor atom berapakah persilangan kedua energi orbital 3d dan 4s terjadi dalam Gambar 11.2? Perhitungkan skala logaritmik. (Data spektrum atom menunjukkan bahwa persilangan sebenarnya terjadi antara 20 dan 21.)

11.7 (a) Gunakan rumus Clementi–Corongiu untuk menaksir energi korelasi atom He keadaan dasar dan bandingkan hasilnya dengan nilai sebenarnya. (b) Gunakan rumus Clementi–Corongiu untuk menaksir energi korelasi atom N keadaan dasar. Temukan energi keadaan dasar atom N dengan menggunakan data pada rujukan daring dalam Bagian 10.5 untuk menjumlahkan seluruh energi ionisasi N. Kira-kira berapa persen energi sejati yang berupa energi korelasi dalam N?

11.8 Berikan kemungkinan nilai bilangan kuantum momentum sudut total J yang dihasilkan dari penjumlahan momentum sudut dengan bilangan kuantum: (a) 3/2 dan 4; (b) 2, 3, dan 1/2.

11.9 Benar atau salah? Kaidah penjumlahan momentum sudut (11.39) menunjukkan bahwa jumlah nilai J yang diperoleh dengan menjumlahkan j_1 dan j_2 selalu $2j_< + 1$, dengan $j_<$ sebagai nilai yang lebih kecil di antara j_1 dan j_2, atau j_1 jika $j_1 = j_2$.

11.10 Verifikasi relasi komutasi momentum sudut (11.32).

11.11 Buktikan bahwa $m_1 + m_2 = M_J$ [Pers. (11.34)] dengan langkah berikut: terapkan $\hat{M}_z = \hat{M}_{1z} + \hat{M}_{2z}$ pada (11.33), substitusikan (11.33) ke dalam persamaan yang dihasilkan, gabungkan suku-suku, kemudian gunakan kebebasan linear fungsi-fungsi yang terlibat untuk menurunkan (11.34).

11.12 Tunjukkan bahwa $[\hat{M}^2, \hat{M}_{1z}] = 2i\hbar(\hat{M}_{1x}\hat{M}_{2y} - \hat{M}_{1y}\hat{M}_{2x})$, dengan $\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 + \mathbf{M}_2$.

11.13 Benar atau salah? Jawablah tanpa melihat tabel Bab 11. (a) Term yang timbul dari konfigurasi $1s^22s^22p3p$ sama dengan term yang timbul dari $1s^22s^22p^2$. (b) Term yang timbul dari konfigurasi $3d^3$ sama dengan term yang timbul dari konfigurasi $3d^7$.

11.14 Verifikasi term-term dalam Tabel 11.2b.

11.15 Tentukan term yang timbul dari setiap konfigurasi elektron berikut: (a) $1s^22s^22p^63s^23p5g$; (b) $1s^22s^22p3p3d$; (c) $1s^22s^22p^44d$. Tabel 11.2a dapat digunakan untuk bagian (c).

11.16 Manakah konfigurasi elektron berikut yang memberikan fungsi konfigurasi pada perhitungan CI keadaan dasar He? (a) 1s2s; (b) 1s2p; (c) $2s^2$; (d) 2s2p; (e) $2p^2$; (f) $3d^2$.

11.17 Verifikasi persamaan fungsi eigen spin (11.52) sampai (11.54), (11.56), dan tiga persamaan setelah (11.56).

11.18 (a) Hitung sudut dalam Gambar 11.3 antara sumbu z dan **S** bagi fungsi spin $\alpha(1)\alpha(2)$. (b) Hitung sudut antara $\mathbf{S}_1$ dan $\mathbf{S}_2$ bagi setiap fungsi (11.57) sampai (11.60). [Petunjuk: gunakan $\mathbf{S}\cdot\mathbf{S} = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)\cdot(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)$.] (c) Jika vektor **A** mempunyai komponen (A_x, A_γ, A_z), apakah komponen proyeksi **A** pada bidang xy? Gunakan jawaban pertanyaan ini untuk menemukan sudut antara proyeksi $\mathbf{S}_1$ dan $\mathbf{S}_2$ pada bidang xy bagi fungsi $\alpha(1)\alpha(2)$.

11.19 (a) Jika $\hat{S}^2 = (\hat{S}_1 + \hat{S}_2 + \ldots)\cdot(\hat{S}_1 + \hat{S}_2 + \ldots)$, tunjukkan bahwa $[\hat{S}^2, \hat{P}_{ik}] = 0$, dengan $\hat{P}_{ik}$ sebagai operator pertukaran. (b) Tunjukkan bahwa $[\hat{L}^2, \hat{P}_{ik}] = 0$, dengan **L** sebagai momentum sudut orbital elektronik total.

11.20 Di antara atom-atom dengan $Z \leq 10$, manakah yang mempunyai keadaan dasar berparitas ganjil?

11.21 Berikan jumlah keadaan yang termasuk dalam setiap term berikut: (a) ^{4}F; (b) ^{1}S; (c) ^{3}P; (d) ^{2}D.

11.22 Berapa banyak keadaan yang termasuk dalam setiap konfigurasi karbon berikut: (a) $1s^22s^22p^2$; (b) $1s^22s^22p3p$?

11.23 Berikan kemungkinan multipisitas spin term yang timbul dari setiap konfigurasi elektron berikut: (a) f; (b) f^2; (c) f^3; (d) f^7; (e) f^{12}; (f) f^{13}.

11.24 Berikan tingkat yang timbul dari setiap term berikut dan degenerasi setiap tingkat: (a) ^{1}S; (b) ^{2}S; (c) ^{3}F; (d) ^{4}D.

11.25 Bagi suatu keadaan yang termasuk tingkat $^3D_3$, berikan besar: (a) momentum sudut orbital elektronik total; (b) momentum sudut spin elektronik total; (c) momentum sudut elektronik total.

11.26 Berikan simbol tingkat dasar setiap atom dengan $Z \leq 10$.

11.27 Berikan simbol tingkat dasar setiap atom dengan $21 \leq Z \leq 30$. Atom manakah yang mempunyai tingkat dasar paling terdegenerasi?

11.28 (a) Gunakan diagram seperti (11.48) untuk menunjukkan bahwa term terendah dari konfigurasi satu subkulit setengah penuh mempunyai L = 0. (b) Berapa banyak tingkat yang timbul dari term dengan L = 0? Jelaskan mengapa tidak diperlukan kaidah untuk menemukan tingkat terendah dari term terendah suatu konfigurasi subkulit setengah penuh.

11.29 Verifikasi bahwa jika E = 1 eV, maka E/hc = 8065,54 cm^{-1}.

11.30 Gunakan tabel tingkat energi atom Moore—Bagian 11.5—untuk menemukan sedikitnya tiga konfigurasi elektron atom karbon netral yang tidak diramalkan dengan benar oleh kaidah Hund mengenai term terendahnya.

11.31 Kaidah seleksi transisi spektral atom ketika kopling Russell–Saunders berlaku adalah (Bethe dan Jackiw, Bab 11): $\Delta L = 0, \pm1$; $\Delta S = 0$; $\Delta J = 0, \pm1$—tetapi J = 0 ke J = 0 terlarang; $\Delta(\Sigma_i l_i) = \pm1$, yang berarti perubahan konfigurasi harus mengubah jumlah nilai l elektron sebesar ±1. Untuk sebagian besar garis spektrum atom, hanya satu elektron yang berpindah subkulit; dalam kasus ini kaidah $\Delta(\Sigma_i l_i) = \pm1$ menjadi $\Delta l = \pm1$ bagi elektron yang melakukan transisi.

Bagi atom karbon, tingkat-tingkat yang timbul dari konfigurasi $1s^22s^22p^2$ adalah

Tingkat	$^3P_0$	$^3P_1$	$^3P_2$	$^1D_2$	$^1S_0$
(E/hc)/cm^{-1}	0	16,4	43,4	10192,6	21648,0

sedangkan tingkat energi konfigurasi $1s^22s2p^3$ adalah

Tingkat	$^5S_2$	$^3D_3$	$^3D_1$	$^3D_2$	$^3P_1$	$^3P_2$	$^3P_0$
(E/hc)/cm^{-1}	33735,2	64086,9	64089,8	64090,9	75254,0	75255,3	75256,1

Tingkat	$^1D_2$	$^3S_1$	$^1P_1$
(E/hc)/cm^{-1}	97878	105798,7	119878

Gunakan kaidah seleksi di atas untuk menemukan bilangan gelombang semua transisi yang diperbolehkan antara pasangan dari kelima belas tingkat tersebut.

11.32 Buka NIST Atomic Spectra Database, pilih "Levels", masukkan C I pada "Spectrum", kemudian pilih "Retrieve Data" untuk memperoleh tingkat energi konfigurasi $2s^2 2p3s$ atom C. Selanjutnya gunakan kaidah seleksi pada Soal 11.31 untuk menentukan bilangan gelombang dan panjang gelombang semua transisi yang diperbolehkan antara tingkat $2s^2 2p3s$ dan tingkat $2s^2 2p^2$ yang diberikan dalam Soal 11.31. Periksa panjang gelombang Anda dengan memilih "Lines", bukan "Levels".

11.33 Gunakan Pers. (11.66) untuk menghitung pemisahan antara tingkat $^2P_{3/2}$ dan $^2P_{1/2}$ dari konfigurasi 2p atom hidrogen. Karena terdapat efek relativistik lain, hasilnya tidak akan sesuai secara akurat dengan eksperimen.

11.34 Apakah Gambar 11.6 memuat pelanggaran terhadap kaidah dalam Bagian 11.6 untuk menentukan apakah suatu multiplet regular atau terbalik?

11.35 Gambarkan diagram yang serupa dengan Gambar 11.6 bagi konfigurasi karbon $1s^2 2s^2 2p^2$. Term ^1S merupakan term tertinggi.

11.36 Gunakan Pers. (11.74) untuk menghitung pemisahan energi antara keadaan $M_J = 1/2$ dan $M_J = -1/2$ dari tingkat $2p\ ^2P_{1/2}$ atom hidrogen jika medan magnet 0,200 T diterapkan.

11.37 (a) Turunkan Pers. (11.78). (b) Turunkan Pers. (11.79).

11.38 Bagi konfigurasi subkulit tertutup: (a) tunjukkan bahwa penjumlahan ganda dalam (11.80) sama dengan

$$\Sigma_{j>i}\Sigma_{i=1}^{n/2}(4J_{ij} - 2K_{ij}) + \Sigma_{i=1}^{n/2}J_{ii}$$

dengan integral Coulomb dan pertukaran didefinisikan menggunakan n/2 orbital ruang φ_i yang berbeda; (b) gunakan (11.84) dan hasil bagian (a) untuk menurunkan (11.83).

11.39 Gunakan kaidah Condon–Slater untuk membuktikan ortonormalitas dua determinan Slater berelektron n yang dibentuk dari spin-orbital ortonormal.

11.40 Jelaskan mengapa salah jika energi keadaan dasar eksperimen litium dihitung sebagai $-(E_{2s} + 2E_{1s})$, dengan E_{2s} sebagai energi eksperimen yang diperlukan untuk melepaskan elektron 2s dari litium dan E_{1s} sebagai energi eksperimen yang diperlukan untuk melepaskan sebuah elektron 1s dari litium.

11.41 Momen magnet total $\boldsymbol{\mu}$ suatu atom mengandung sumbangan momen magnet $\boldsymbol{\mu}_L$, $\boldsymbol{\mu}_S$, dan $\boldsymbol{\mu}_I$ yang berkaitan dengan momentum sudut orbital elektronik total **L**, momentum sudut spin elektronik total **S**, dan momentum sudut spin inti **I**. (a) Untuk atom dengan L, S, dan I semuanya tidak nol, manakah dari ketiga sumbangan pada $\boldsymbol{\mu}$ tersebut yang jauh paling kecil? (b) Untuk keadaan elektronik dasar ^{87}Rb—yang digunakan dalam eksperimen kondensasi Bose–Einstein pada Bagian 10.5—manakah dari ketiga sumbangan tersebut yang bernilai nol?

11.42 Benar atau salah? (a) Multipisitas spin setiap term atom dengan jumlah elektron ganjil harus berupa bilangan genap. (b) Multipisitas spin setiap term atom dengan jumlah elektron genap harus berupa bilangan ganjil. (c) Multipisitas spin suatu term selalu sama dengan jumlah tingkat term tersebut. (d) Dalam metode SCF Hartree, energi atom sama dengan jumlah energi orbital elektron. (e) Metode Hartree–Fock mampu memberikan energi nonrelativistik eksak atom berelektron banyak.

Catatan Integrasi Keislaman — Tambahan Penerjemah

Bagian berikut merupakan tambahan kontekstual, bukan bagian dari teks sumber. Tambahan ini tidak dimaksudkan menggantikan penjelasan ilmiah atau menjadikan ayat dan hadis sebagai penurunan matematis metode Hartree–Fock.

Isyarat untuk Meneliti Keteraturan Alam

Allah Swt. berfirman:

إِنَّ فِي خَلْقِ السَّمَاوَاتِ وَالْأَرْضِ وَاخْتِلَافِ اللَّيْلِ وَالنَّهَارِ لَآيَاتٍ لِأُولِي الْأَلْبَابِ ۝ الَّذِينَ يَذْكُرُونَ اللَّهَ قِيَامًا وَقُعُودًا وَعَلَىٰ جُنُوبِهِمْ وَيَتَفَكَّرُونَ فِي خَلْقِ السَّمَاوَاتِ وَالْأَرْضِ رَبَّنَا مَا خَلَقْتَ هَٰذَا بَاطِلًا سُبْحَانَكَ فَقِنَا عَذَابَ النَّارِ

"Sesungguhnya dalam penciptaan langit dan bumi serta pergantian malam dan siang terdapat tanda-tanda bagi orang yang berakal, yaitu orang-orang yang mengingat Allah sambil berdiri, duduk, atau berbaring, dan mereka memikirkan penciptaan langit dan bumi seraya berkata, 'Ya Tuhan kami, tidaklah Engkau menciptakan semua ini sia-sia. Mahasuci Engkau; lindungilah kami dari azab neraka.'" (QS Āli 'Imrān [3]: 190–191)

Ayat tersebut menempatkan pengamatan, pemikiran, dan kesadaran etik dalam satu rangkaian. Kajian atom berelektron banyak memperlihatkan bahwa perilaku mikroskopik tidak dapat dipahami hanya dengan intuisi sederhana; diperlukan model, operator, fungsi gelombang, iterasi numerik, dan pengujian terhadap data. Bagi seorang Muslim, ketelitian ilmiah tersebut dapat menjadi bentuk *tafakkur* yang disertai kerendahan hati: model Hartree–Fock sangat berguna, tetapi tetap merupakan hampiran yang mempunyai batas, khususnya karena korelasi elektron tidak tercakup secara lengkap.

Keutamaan Menempuh Jalan Ilmu

Rasulullah saw. bersabda:

مَنْ سَلَكَ طَرِيقًا يَلْتَمِسُ فِيهِ عِلْمًا، سَهَّلَ اللَّهُ لَهُ بِهِ طَرِيقًا إِلَى الْجَنَّةِ

"Barang siapa menempuh suatu jalan untuk mencari ilmu, Allah akan memudahkan baginya dengan jalan itu suatu jalan menuju surga." (HR Muslim)

Hadis ini memberi landasan moral bagi aktivitas belajar dan penelitian. Dalam konteks kimia kuantum, "menempuh jalan ilmu" mencakup ketekunan mengikuti penurunan persamaan, kejujuran melaporkan galat dan keterbatasan metode, keterbukaan terhadap koreksi, serta pemanfaatan komputasi bagi kemaslahatan. Kompleksitas atom berelektron banyak juga mengajarkan bahwa penyederhanaan harus dinyatakan secara jujur: medan rata-rata, medan-pusat, basis hingga, dan pemotongan ruang konfigurasi adalah keputusan metodologis yang harus dipahami konsekuensinya.

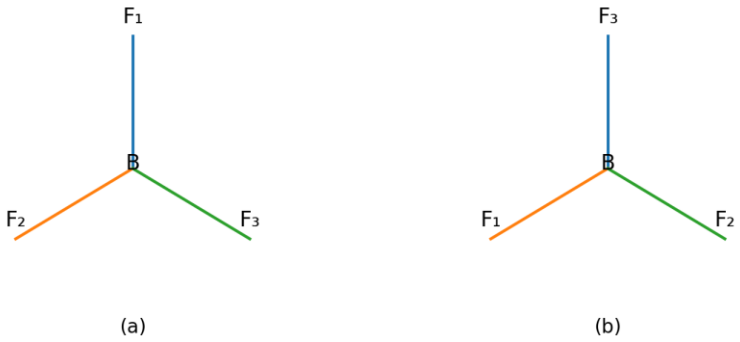
BAB 12
SIMETRI MOLEKUL

12.1 Unsur dan Operasi Simetri

Informasi kualitatif mengenai fungsi gelombang molekul dan sifat-sifat molekul sering kali dapat diperoleh dari simetri molekul. Yang dimaksud dengan simetri suatu molekul adalah simetri kerangka yang dibentuk oleh inti-inti yang dipertahankan tetap pada posisi kesetimbangannya. (Titik awal kita untuk mekanika kuantum molekul adalah pendekatan Born-Oppenheimer, yang menganggap inti tetap ketika fungsi gelombang elektronik diselesaikan; lihat Bagian 13.1.) Simetri suatu molekul dapat berbeda pada keadaan elektronik yang berbeda. Sebagai contoh, HCN berbentuk linear pada keadaan elektronik dasarnya, tetapi tidak linear pada keadaan tereksitasi tertentu. Kecuali dinyatakan lain, kita akan membahas simetri keadaan elektronik dasar.

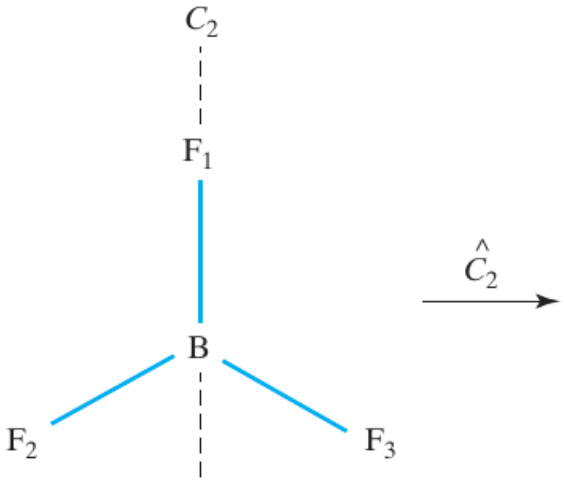
Unsur Simetri dan Operasi Simetri

Operasi simetri adalah transformasi suatu benda sedemikian rupa sehingga posisi akhirnya secara fisik tidak dapat dibedakan dari posisi awalnya, dan jarak antara setiap pasangan titik dalam benda tetap dipertahankan. Sebagai contoh, perhatikan molekul BF_3 yang berbentuk trigonal-planar (Gambar 12.1a), dengan inti-inti fluor diberi nomor untuk memudahkan pembahasan. Jika molekul diputar berlawanan arah jarum jam sebesar 120° mengelilingi sumbu yang melalui inti boron dan tegak lurus terhadap bidang molekul, posisi barunya menjadi seperti pada Gambar 12.1b. Karena pada kenyataannya inti-inti fluor secara fisik tidak dapat dibedakan satu sama lain, transformasi tersebut merupakan operasi simetri. Sumbu yang digunakan untuk memutar molekul adalah contoh unsur simetri. Unsur simetri dan operasi simetri saling berkaitan, tetapi merupakan dua hal yang berbeda dan sering tertukar. Unsur simetri adalah entitas geometris—titik, garis, atau bidang—yang menjadi acuan pelaksanaan suatu operasi simetri.



Gambar 12.1. (a) Molekul BF_3. (b) BF_3 setelah rotasi 120° terhadap sumbu yang melalui B dan tegak lurus terhadap bidang molekul.

Suatu benda dikatakan memiliki sumbu simetri lipat-n—juga disebut sumbu sejati lipat-n atau sumbu rotasi lipat-n—jika rotasi sebesar 360°/n terhadap sumbu tersebut, dengan n bilangan bulat, menghasilkan konfigurasi yang secara fisik tidak dapat dibedakan dari posisi asalnya. Bilangan n disebut orde sumbu. Sebagai contoh, BF_3 memiliki sumbu simetri lipat-tiga yang tegak lurus terhadap bidang molekul. Simbol sumbu rotasi lipat-n adalah C_n; dengan demikian, sumbu lipat-tiga BF_3 adalah sumbu C_3. Operasi rotasi berlawanan arah jarum jam sebesar (360°/n) dilambangkan dengan $\hat{C}_n$. Tanda topi membedakan operasi simetri dari unsur simetri. BF_3 memiliki tiga sumbu rotasi tambahan; setiap ikatan B-F merupakan sumbu simetri lipat-dua, sebagaimana ditunjukkan pada Gambar 12.2.



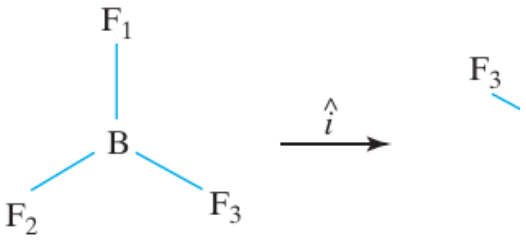
Gambar 12.2. Salah satu sumbu C_2 pada BF_3.

Jenis unsur simetri kedua adalah bidang simetri. Molekul mempunyai bidang simetri jika pencerminan semua inti melalui bidang tersebut menghasilkan konfigurasi yang secara fisik tidak dapat dibedakan dari konfigurasi semula. Simbol bidang simetri adalah σ, huruf sigma kecil. Kata Spiegel dalam bahasa Jerman berarti cermin. Simbol operasi pencerminan adalah $\hat{\sigma}$. BF_3 memiliki empat bidang simetri. Bidang molekul itu sendiri merupakan bidang simetri karena inti-inti yang terletak pada bidang pencerminan tidak berpindah ketika pencerminan dilakukan. Bidang yang melalui inti B dan F_1 serta tegak lurus terhadap bidang molekul juga merupakan bidang simetri, sebab pencerminan terhadap bidang ini hanya mempertukarkan F_2 dan F_3.

Sekilas, pencerminan tersebut mungkin dianggap sama dengan rotasi 180° terhadap sumbu C_2 yang melalui B dan F_1, karena rotasi itu juga mempertukarkan F_2 dan F_3. Anggapan ini tidak benar. Pencerminan membawa titik-titik yang berada di atas bidang molekul ke titik-titik yang juga berada di atas bidang molekul, sedangkan rotasi $\hat{C}_2$ membawa titik-titik di atas bidang molekul ke bawah bidang molekul. Dua operasi simetri hanya sama apabila keduanya merepresentasikan transformasi yang sama atas ruang tiga dimensi. Dua bidang

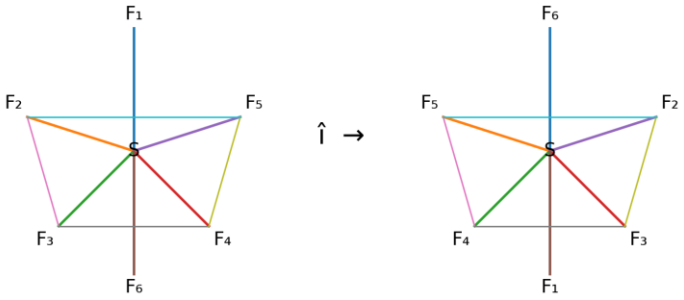
simetri BF_3 lainnya melalui B-F_2 dan B-F_3 serta tegak lurus terhadap bidang molekul.

Jenis unsur simetri ketiga adalah pusat simetri, yang dilambangkan dengan i dan tidak berkaitan dengan $\sqrt{-1}$. Molekul mempunyai pusat simetri jika operasi inversi seluruh inti melalui pusat tersebut menghasilkan konfigurasi yang tidak dapat dibedakan dari konfigurasi asal. Dalam sistem koordinat Kartesius, operasi inversi melalui titik asal, yang dilambangkan $\hat{i}$, membawa inti yang semula berada pada (x, y, z) ke (−x, −y, −z). Apakah BF_3 memiliki pusat simetri? Dengan titik asal pada inti boron, inversi memberikan hasil pada Gambar 12.3. Karena konfigurasi yang dihasilkan secara fisik dapat dibedakan dari konfigurasi asal, BF_3 tidak mempunyai pusat simetri.



Gambar 12.3. Pengaruh inversi terhadap BF_3.

Untuk SF_6, inversi melalui inti sulfur ditunjukkan pada Gambar 12.4, dan jelas bahwa SF_6 mempunyai pusat simetri. Suatu operasi seperti $\hat{i}$ atau $\hat{C}_n$ dapat merupakan atau bukan merupakan operasi simetri, bergantung pada bendanya. Jadi, $\hat{i}$ merupakan operasi simetri pada SF_6, tetapi bukan pada BF_3.

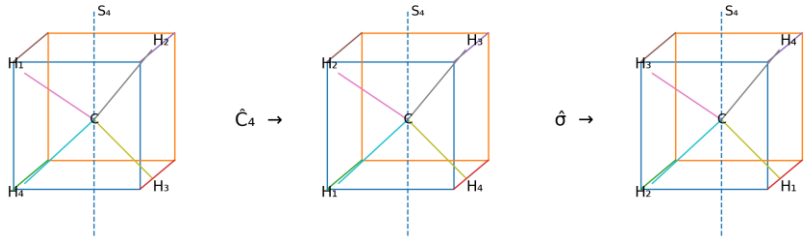


Gambar 12.4. Pengaruh inversi terhadap SF_6.

Jenis unsur simetri keempat dan terakhir adalah sumbu simetri rotasi-pencerminan lipat-n, yang juga disebut sumbu tak sejati atau sumbu alternasi dan dilambangkan S_n. Suatu benda mempunyai sumbu S_n apabila rotasi sebesar (360°/n), dengan n bilangan bulat, terhadap sumbu tersebut yang diikuti pencerminan pada bidang yang tegak lurus terhadap sumbu membawa benda ke posisi yang secara fisik tidak dapat dibedakan dari posisi semula. Jika suatu benda mempunyai sumbu C_n sekaligus bidang simetri yang tegak lurus terhadap sumbu tersebut, sumbu C_n itu

juga merupakan sumbu S_n. Dengan demikian, sumbu C_3 pada BF_3 juga merupakan sumbu S_3.

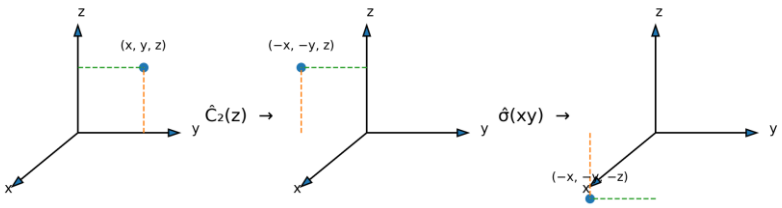
Sumbu S_n dapat ada tanpa adanya sumbu C_n yang bersesuaian. Contohnya adalah CH_4. Pada Gambar 12.5 mula-mula dilakukan rotasi sejati 90°, $\hat{C}_4$, terhadap sumbu yang dinyatakan sebagai sumbu S_4. Seperti terlihat, operasi ini tidak menghasilkan konfigurasi ekuivalen. Akan tetapi, jika operasi $\hat{C}_4$ diikuti pencerminan pada bidang yang tegak lurus terhadap sumbu dan melalui atom karbon, diperoleh konfigurasi yang tidak dapat dibedakan dari konfigurasi sebelum rotasi dan pencerminan. Oleh karena itu, CH_4 mempunyai sumbu S_4. Sumbu S_4 bukan sumbu C_4, walaupun sumbu tersebut merupakan sumbu C_2. Metana mempunyai dua sumbu S_4 lain, masing-masing tegak lurus terhadap sepasang muka kubus tempat molekul tetrahedral tersebut dapat dianggap terinskripsi.



Gambar 12.5. Salah satu sumbu S_4 pada CH_4.

Operasi rotasi berlawanan arah jarum jam sebesar (360°/n) terhadap suatu sumbu, diikuti pencerminan pada bidang yang tegak lurus terhadap sumbu, dilambangkan $\hat{S}_n$. Operasi $\hat{S}_1$ adalah rotasi 360° terhadap suatu sumbu yang diikuti pencerminan pada bidang yang tegak lurus terhadap sumbu. Karena rotasi 360° mengembalikan benda ke posisi semula, operasi $\hat{S}_1$ sama dengan pencerminan pada suatu bidang; dengan demikian, $\hat{S}_1 = \hat{\sigma}$. Setiap bidang simetri mempunyai sumbu S_1 yang tegak lurus terhadapnya.

Sekarang perhatikan operasi $\hat{S}_2$. Misalkan sumbu S_2 adalah sumbu z, seperti pada Gambar 12.6. Rotasi 180° terhadap sumbu S_2 mengubah koordinat x dan y suatu titik menjadi −x dan −y, tetapi tidak mengubah koordinat z. Pencerminan pada bidang xy kemudian mengubah koordinat z menjadi −z. Pengaruh total operasi $\hat{S}_2$ adalah membawa titik (x, y, z) ke (−x, −y, −z), yang sama dengan inversi melalui titik asal. Jadi, $\hat{S}_2 = \hat{\imath}$. Setiap sumbu yang melalui pusat simetri merupakan sumbu S_2. Pencerminan pada bidang dan inversi merupakan kasus khusus operasi $\hat{S}_n$.

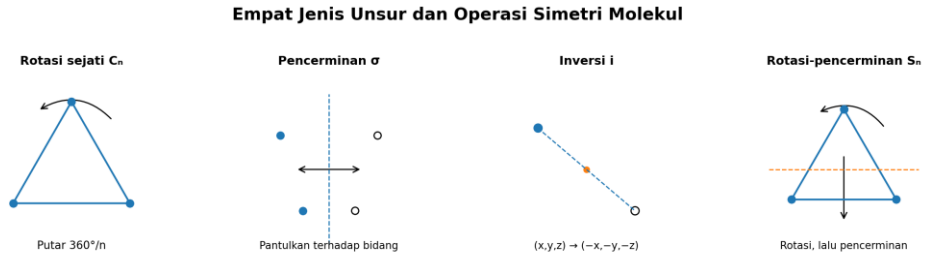


Gambar 12.6. Operasi $\hat{S}_2$.

Operasi $\hat{S}_n$ mungkin tampak sebagai jenis operasi yang dibuat-buat, tetapi operasi ini harus dimasukkan ke dalam jenis-jenis operasi simetri. Transformasi dari konfigurasi pertama ke konfigurasi ketiga CH_4 pada Gambar 12.5 jelas memenuhi definisi operasi simetri, tetapi transformasi tersebut bukan rotasi sejati, bukan pencerminan, dan bukan inversi.

Pelaksanaan suatu operasi simetri pada molekul menghasilkan konfigurasi inti yang secara fisik tidak dapat dibedakan dari konfigurasi asal. Karena itu, pusat massa harus menempati posisi ruang yang sama sebelum dan sesudah operasi simetri. Dalam operasi $\hat{C}_n$, satu-satunya titik yang tidak berpindah adalah titik-titik pada sumbu C_n. Oleh sebab itu, sumbu simetri C_n harus melalui pusat massa molekul. Demikian pula, pusat simetri harus berimpit dengan pusat massa; bidang simetri dan sumbu simetri S_n harus melalui pusat massa. Pusat massa adalah titik perpotongan bersama seluruh unsur simetri molekul.

Dalam membahas simetri molekul, molekul sering ditempatkan pada sistem koordinat Kartesius dengan pusat massa molekul pada titik asal. Sumbu rotasi berorde tertinggi ditetapkan sebagai sumbu z. Bidang simetri yang memuat sumbu ini disebut σ_v, yaitu bidang vertikal, sedangkan bidang simetri yang tegak lurus terhadap sumbu tersebut disebut σ_h, yaitu bidang horizontal.



Gambar Tambahan 12.A. Peta visual empat jenis unsur dan operasi simetri molekul. Gambar ini merupakan ilustrasi tambahan, bukan gambar asli buku sumber.

Hasil Kali Operasi Simetri

Operasi simetri adalah operator yang mentransformasi ruang tiga dimensi. Seperti pada operator lain, hasil kali dua operator simetri didefinisikan sebagai penerapan operator-operator tersebut secara berturut-turut, dengan operator di sebelah kanan

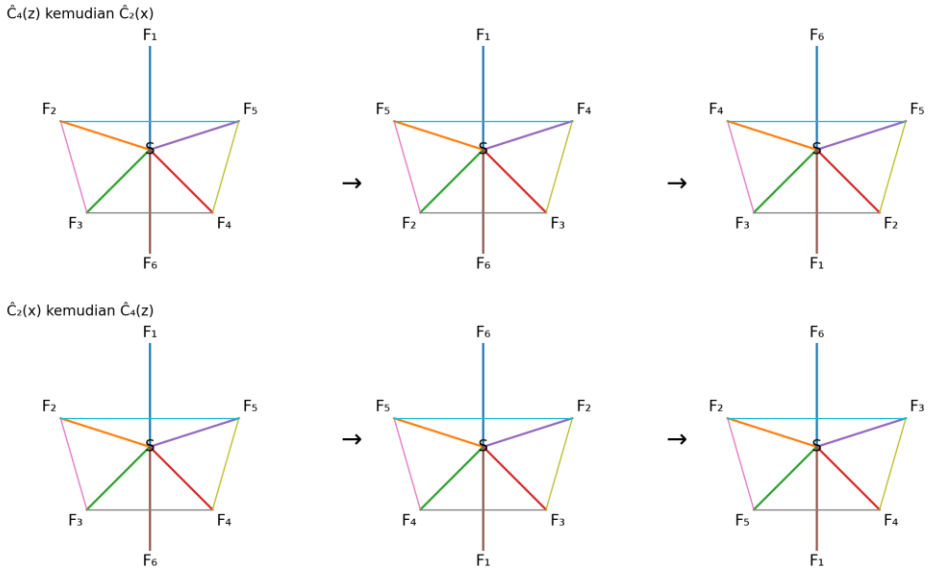
hasil kali diterapkan terlebih dahulu. Jelas bahwa hasil kali dua operasi simetri suatu molekul harus merupakan operasi simetri molekul itu.

Sebagai contoh, perhatikan BF_3. Hasil kali operator $\hat{C}_3$ dengan dirinya sendiri, $\hat{C}_3\hat{C}_3 = \hat{C}_3^2$, memutar molekul 240° berlawanan arah jarum jam. Jika dilakukan $\hat{C}_3\hat{C}_3\hat{C}_3 = \hat{C}_3^3$, terjadi rotasi 360° yang mengembalikan molekul ke posisi semula. Operasi identitas $\hat{E}$ didefinisikan sebagai operasi yang tidak melakukan apa pun terhadap suatu benda. Dengan demikian, $\hat{C}_3^3 = \hat{E}$. Simbol E berasal dari kata Jerman Einheit, yang berarti kesatuan.

Sekarang perhatikan molekul dengan sumbu simetri lipat-enam, misalnya C_6H_6. Operasi $\hat{C}_6$ adalah rotasi 60°, sedangkan $\hat{C}_6^2$ adalah rotasi 120°; dengan demikian, $\hat{C}_6^2 = \hat{C}_3$. Demikian pula, $\hat{C}_6^3 = \hat{C}_2$. Karena itu, sumbu simetri C_6 sekaligus merupakan sumbu C_3 dan C_2.

Karena dua pencerminan berturut-turut pada bidang yang sama mengembalikan semua inti ke posisi semula, berlaku $\hat{\sigma}^2 = \hat{E}$. Demikian pula, $\hat{\imath}^2 = \hat{E}$. Secara lebih umum, $\hat{\sigma}^n = \hat{E}$ dan $\hat{\imath}^n = \hat{E}$ untuk n genap, sedangkan $\hat{\sigma}^n = \hat{\sigma}$ dan $\hat{\imath}^n = \hat{\imath}$ untuk n ganjil.

Apakah operator simetri selalu komutatif? Perhatikan SF_6. Kita membandingkan hasil kali rotasi $\hat{C}_4$ terhadap sumbu z dan rotasi $\hat{C}_2$ terhadap sumbu x. Gambar 12.7 menunjukkan bahwa $\hat{C}_4(z)\hat{C}_2(x) \neq \hat{C}_2(x)\hat{C}_4(z)$. Jadi, operasi simetri tidak selalu komutatif. Perlu diperhatikan bahwa operasi simetri dijelaskan terhadap sistem koordinat tetap yang tidak bergerak bersama molekul saat operasi simetri dilakukan. Dengan demikian, sumbu $C_2(x)$ tidak berpindah ketika operasi $\hat{C}_4(z)$ dilaksanakan.

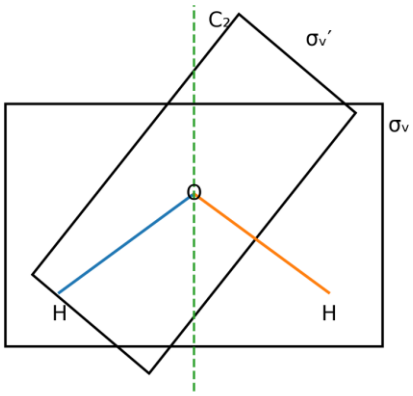


Gambar 12.7. Hasil kali dua operasi simetri pada SF_6. Atas: $\hat{C}_2(x)\hat{C}_4(z)$. Bawah: $\hat{C}_4(z)\hat{C}_2(x)$.

Simetri dan Momen Dipol

Sebagai penerapan simetri, kita membahas momen dipol molekul. Karena suatu operasi simetri menghasilkan konfigurasi yang secara fisik tidak dapat dibedakan dari konfigurasi asal, arah vektor momen dipol harus tetap tidak berubah setelah operasi simetri. Argumen ini bersifat tidak ketat dan sederhana. Jadi, apabila terdapat sumbu simetri C_n, momen dipol harus terletak sepanjang sumbu tersebut. Jika terdapat dua atau lebih sumbu simetri yang tidak berimpit, molekul tidak dapat mempunyai momen dipol, sebab momen dipol tidak mungkin berada pada dua sumbu yang berbeda. CH_4, yang mempunyai empat sumbu C_3 yang tidak berimpit, tidak mempunyai momen dipol.

Jika terdapat bidang simetri, momen dipol harus terletak di dalam bidang tersebut. Jika terdapat beberapa bidang simetri, momen dipol harus terletak sepanjang garis perpotongan bidang-bidang itu. Pada H_2O, momen dipol terletak pada sumbu C_2, yang sekaligus merupakan garis perpotongan dua bidang simetri, seperti pada Gambar 12.8. Molekul yang mempunyai pusat simetri tidak dapat mempunyai momen dipol karena inversi membalik arah suatu vektor. Molekul monoatomik mempunyai pusat simetri; oleh sebab itu, atom tidak mempunyai momen dipol. Terdapat satu pengecualian terhadap pernyataan ini; lihat Soal 14.4. Dengan demikian, simetri dapat digunakan untuk menentukan apakah suatu molekul mempunyai momen dipol. Dalam banyak kasus, simetri juga menunjukkan garis tempat momen dipol tersebut berada.



Gambar 12.8. Unsur-unsur simetri H_2O.

Simetri dan Aktivitas Optik

Molekul tertentu memutar bidang polarisasi cahaya terpolarisasi bidang yang dilewatkan melaluinya. Bukti eksperimen dan perlakuan mekanika kuantum, sebagaimana dibahas oleh Kauzmann, hlm. 703-713, menunjukkan bahwa daya putar optik dua molekul yang merupakan bayangan cermin satu sama lain sama besar tetapi berlawanan tanda. Oleh karena itu, jika suatu molekul identik dengan

bayangan cerminnya sendiri, molekul tersebut tidak aktif optik: $\alpha = -\alpha$, sehingga $2\alpha = 0$ dan $\alpha = 0$, dengan α menyatakan daya putar optik. Jika molekul tidak dapat ditumpangtindihkan dengan bayangan cerminnya, molekul itu mungkin aktif optik. Jika konformasi bayangan cermin berbeda dari konformasi molekul asal hanya melalui rotasi terhadap suatu ikatan yang mempunyai penghalang rotasi rendah, molekul tersebut tidak akan aktif optik.

Apa hubungan antara simetri dan aktivitas optik? Perhatikan operasi $\hat{S}_n$. Operasi tersebut terdiri atas rotasi $\hat{C}_n$ dan pencerminan $\hat{\sigma}$. Bagian pencerminan dari operasi $\hat{S}_n$ mengubah molekul menjadi bayangan cerminnya. Jika $\hat{S}_n$ merupakan operasi simetri bagi molekul tersebut, rotasi $\hat{C}_n$ akan menumpangtindihkan molekul dengan bayangan cerminnya:

$$\text{molekul} \xrightarrow{\hat{C}_n} \text{molekul terotasi} \xrightarrow{\hat{\sigma}} \text{bayangan cermin terotasi}$$

Kita menyimpulkan bahwa molekul yang mempunyai sumbu S_n tidak aktif optik. Jika molekul tidak mempunyai sumbu S_n, molekul tersebut mungkin aktif optik.

Karena $\hat{S}_1 = \hat{\sigma}$ dan $\hat{S}_2 = \hat{\imath}$, molekul yang mempunyai bidang simetri ataupun pusat simetri tidak aktif optik. Namun, sumbu S_n dengan orde berapa pun meniadakan aktivitas optik.

Suatu molekul dapat mempunyai unsur simetri dan tetap aktif optik. Apabila hanya terdapat sumbu C_n dan tidak terdapat sumbu S_n, molekul tersebut dapat aktif optik.

Operasi Simetri dan Mekanika Kuantum

Bagaimana hubungan antara operasi simetri molekul dan mekanika kuantum? Untuk mengklasifikasikan keadaan suatu sistem mekanika kuantum, kita mempertimbangkan operator-operator yang komut dengan operator Hamiltonian dan saling komut satu sama lain. Sebagai contoh, keadaan atom banyak elektron diklasifikasikan menggunakan bilangan kuantum L, S, J, dan M_j, yang masing-masing bersesuaian dengan operator $\hat{L}^2$, $\hat{S}^2$, $\hat{J}^2$, dan $\hat{J}_z$. Semua operator tersebut saling komut dan komut dengan Hamiltonian apabila interaksi spin-orbit diabaikan.

Operasi simetri yang dibahas dalam bab ini bekerja pada titik-titik dalam ruang tiga dimensi dan mentransformasikan setiap titik ke titik yang bersesuaian. Semua operator mekanika kuantum yang telah dibahas bekerja pada fungsi dan mentransformasikan setiap fungsi menjadi fungsi yang bersesuaian. Untuk setiap operasi simetri $\hat{R}$, didefinisikan operator $\hat{O}_R$ yang bekerja pada fungsi sebagai berikut. Misalkan $\hat{R}$ membawa titik yang semula berada pada (x, y, z) ke lokasi (x′, y′, z′):

$$\hat{R}(x, y, z) \rightarrow (x', y', z') \tag{12.1}$$

Operator $\hat{O}\_R$ didefinisikan sedemikian rupa sehingga fungsi $\hat{O}\_R$ f mempunyai nilai pada (x′, y′, z′) yang sama dengan nilai fungsi f pada (x, y, z):

$$\hat{O}\_R\, f(x', y', z') = f(x, y, z) \tag{12.2}$$

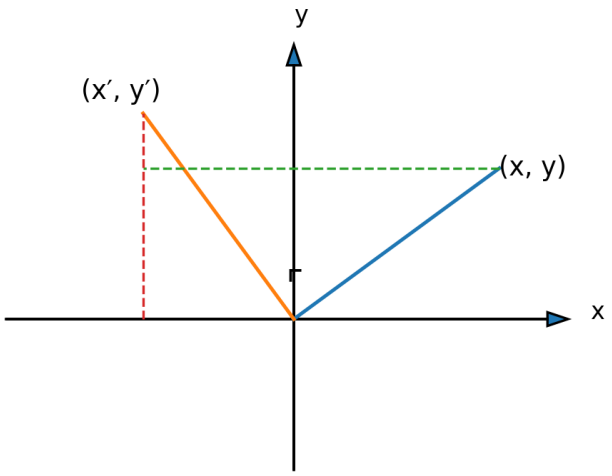
Sebagai contoh, misalkan $\hat{R}$ adalah rotasi 90° berlawanan arah jarum jam terhadap sumbu z, yaitu $\hat{R} = \hat{C}_4(z)$, dan f adalah orbital hidrogen $2p_x$:

$$f = 2p_x = N\, x\, \exp[-k(x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}]$$

Bentuk orbital $2p_x$ adalah dua elipsoid putar terdistorsi yang berorientasi sepanjang sumbu x, sebagaimana dibahas pada Bagian 6.7. Misalkan elipsoid-elipsoid itu berpusat di sekitar titik (a, 0, 0) dan (−a, 0, 0), dengan a > 0 dan $2p_x$ > 0 pada elipsoid sebelah kanan. Operator $\hat{C}_4(z)$ mempunyai pengaruh berikut, seperti diperlihatkan pada Gambar 12.9:

$$\hat{C}_4(z)(x, y, z) \rightarrow (-y, x, z) \tag{12.3}$$

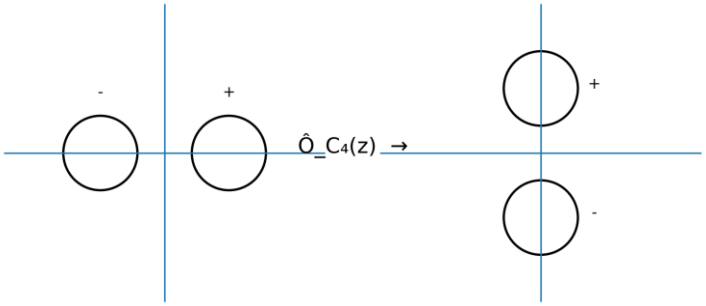
Sebagai contoh, titik yang semula berada pada (a, 0, 0) dipindahkan ke (0, a, 0), sedangkan titik pada (−a, 0, 0) dipindahkan ke (0, −a, 0). Berdasarkan Persamaan (12.2), fungsi $\hat{O}\_C_4(z)2p_x$ harus mempunyai kontur yang masing-masing berpusat di sekitar (0, a, 0) dan (0, −a, 0).



Gambar 12.9. Rotasi $\hat{C}_4(z)$ memindahkan titik (x, y) ke (x', y'). Trigonometri memberikan x′ = −y dan y′ = x.

Dengan demikian, seperti pada Gambar 12.10, diperoleh:

$$\hat{O}\_C_4(z)\ 2p_x = 2p_y \tag{12.4}$$



Gambar 12.10. Pengaruh operator Ô_C₄(z) pada orbital p_x.

Untuk operasi inversi berlaku:

$$\hat{\imath}(x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z) \tag{12.5}$$

Persamaan (12.2) kemudian menjadi:

$$\hat{O}\_i\, f(-x, -y, -z) = f(x, y, z)$$

Sekarang variabel diganti sebagai berikut: $\bar{x} = -x$, $\bar{y} = -y$, dan $\bar{z} = -z$. Oleh karena itu:

$$\hat{O}\_i\, f(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) = f(-\bar{x}, -\bar{y}, -\bar{z})$$

Titik $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ adalah titik umum dalam ruang, sehingga tanda garis atas dapat dihilangkan dan diperoleh:

$$\hat{O}\_i\, f(x, y, z) = f(-x, -y, -z)$$

Kita menyimpulkan bahwa Ô_i adalah operator paritas, sebagaimana dibahas pada Bagian 7.5: Ô_i = $\hat{P}$.

Fungsi gelombang sistem n-partikel merupakan fungsi dari 4n variabel. Definisi Ô_R pada Persamaan (12.2) diperluas menjadi:

$$\hat{O}\_R\, f(x'_1, y'_1, z'_1, m_{s1}, \ldots, x'_n, y'_n, z'_n, m_{sn}) = f(x_1, y_1, z_1, m_{s1}, \ldots, x_n, y_n, z_n, m_{sn})$$

Perhatikan bahwa Ô_R tidak memengaruhi koordinat spin. Karena itu, ketika membahas paritas keadaan atom pada Bagian 11.5, kita hanya meninjau faktor ruang dalam setiap suku ekspansi determinan Slater dan tidak mempertimbangkan faktor spin, sebab faktor spin tidak dipengaruhi oleh $\hat{P}$.

Jika suatu sistem dicirikan oleh operasi simetri $\hat{R}_1$, $\hat{R}_2$, dan seterusnya, operator-operator yang bersesuaian Ô_R_1, Ô_R_2, dan seterusnya komut dengan Hamiltonian. Pembuktiannya dapat dilihat pada Schonland, Bagian 7.1-7.3. Sebagai contoh, jika kerangka inti molekul mempunyai pusat simetri, operator paritas $\hat{P}$ komut dengan Hamiltonian gerak elektronik. Keadaan elektronik atau fungsi gelombang kemudian dapat dipilih sebagai fungsi genap atau ganjil menurut nilai eigen $\hat{P}$. Tentu saja, tidak semua operasi simetri saling komut, sebagaimana ditunjukkan pada Gambar 12.7. Oleh karena itu, fungsi gelombang secara umum tidak dapat dipilih sebagai fungsi eigen semua operator simetri Ô_R.

Pembahasan lebih lanjut mengenai hubungan operator simetri dan fungsi gelombang molekul diberikan pada Bagian 15.2.

Terdapat hubungan erat antara simetri dan tetapan gerak, yaitu sifat-sifat yang operatornya komut dengan Hamiltonian $\hat{H}$. Untuk sistem yang Hamiltoniannya invarian—tidak berubah—terhadap setiap translasi koordinat ruang, operator momentum linear $\hat{p}$ komut dengan $\hat{H}$ dan p dapat diberi nilai tertentu dalam keadaan stasioner. Contohnya adalah partikel bebas. Untuk sistem dengan $\hat{H}$ yang invarian terhadap setiap rotasi koordinat, operator komponen momentum sudut komut dengan $\hat{H}$, sehingga momentum sudut total dan salah satu komponennya dapat ditentukan. Contohnya adalah atom. Molekul linear mempunyai simetri aksial, bukan simetri bola seperti atom; pada molekul linear hanya komponen aksial momentum sudut yang dapat ditentukan, sebagaimana dibahas pada Bab 13.

Matriks dan Operasi Simetri

Operasi simetri $\hat{R}$ memindahkan titik yang semula berada pada x, y, z ke lokasi baru x′, y′, z′. Setiap koordinat baru merupakan kombinasi linear x, y, dan z; pembuktiannya dapat dilihat pada Schonland, hlm. 52-53:

$$x' = r_{11}x + r_{12}y + r_{13}z$$

$$y' = r_{21}x + r_{22}y + r_{23}z$$

$$z' = r_{31}x + r_{32}y + r_{33}z$$

Dalam bentuk matriks, persamaan tersebut ditulis:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

Besaran r_{11}, r_{12}, …, r_{33} adalah konstanta yang nilainya bergantung pada jenis $\hat{R}$. Operasi simetri $\hat{R}$ dikatakan direpresentasikan oleh matriks R yang unsur-unsurnya adalah r_{11}, r_{12}, …, r_{33}. Himpunan fungsi x, y, z yang transformasinya dijelaskan oleh R disebut basis bagi representasi tersebut.

Sebagai contoh, berdasarkan Persamaan (12.3) dan (12.5), untuk operasi $\hat{C}_4(z)$ berlaku $x' = -y$, $y' = x$, dan $z' = z$; untuk $\hat{i}$ berlaku $x' = -x$, $y' = -y$, dan $z' = -z$. Matriks yang merepresentasikan $\hat{C}_4(z)$ dan $\hat{i}$ dalam basis x, y, z adalah:

$$C_4(z) = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad i = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

Jika hasil kali $\hat{R}\hat{S}$ dari dua operasi simetri adalah $\hat{T}$, matriks yang merepresentasikan operasi-operasi tersebut dalam basis x, y, z dikalikan dengan

cara yang sama. Dengan kata lain, jika $\hat{R}\hat{S} = \hat{T}$, maka RS = T. Pembuktiannya dapat dilihat pada Schonland, hlm. 56-57.

12.2 Kelompok Titik Simetri

Sekarang kita membahas kombinasi unsur simetri yang mungkin. Kombinasi unsur simetri dalam molekul tidak dapat dipilih secara sembarang. Misalnya, anggap suatu molekul mempunyai satu dan hanya satu sumbu C_3. Setiap operasi simetri harus membawa sumbu ini ke dirinya sendiri. Karena itu, molekul tersebut tidak dapat mempunyai bidang simetri pada sudut sembarang terhadap sumbu C_3; setiap bidang simetri harus memuat sumbu tersebut atau tegak lurus terhadapnya. Pada BF_3 terdapat tiga bidang σ_v dan satu bidang σ_h. Satu-satunya kemungkinan sumbu C_n yang tidak berimpit dengan sumbu C_3 adalah sumbu C_2 yang tegak lurus terhadap sumbu C_3. Operasi $\hat{C}_2$ yang bersesuaian membawa sumbu C_3 ke dirinya sendiri. Karena $\hat{C}_3$ dan $\hat{C}_3^2$ merupakan operasi simetri, jika terdapat satu sumbu C_2 yang tegak lurus terhadap sumbu C_3, harus terdapat total tiga sumbu seperti itu, sebagaimana pada BF_3.

Himpunan seluruh operasi simetri suatu molekul membentuk suatu grup matematis. Grup adalah himpunan entitas, yang disebut unsur atau anggota grup, serta aturan untuk menggabungkan dua anggota untuk membentuk hasil kalinya, dengan syarat-syarat tertentu. Misalkan A, B, C, D, dan seterusnya—semuanya berbeda—merupakan anggota grup, dan B * C menyatakan hasil kali B dan C. Hasil kali B * C tidak harus sama dengan C * B. Syarat-syarat suatu grup adalah sebagai berikut: (1) hasil kali setiap dua unsur, termasuk hasil kali suatu unsur dengan dirinya sendiri, harus merupakan anggota grup; ini adalah syarat ketertutupan; (2) terdapat satu unsur tunggal I, yang disebut unsur identitas, sedemikian rupa sehingga K * I = K dan I * K = K untuk setiap unsur K; (3) setiap unsur K mempunyai invers K^{-1} yang juga merupakan anggota grup dan memenuhi $K * K^{-1} = I$ serta $K^{-1} * K = I$; dan (4) perkalian grup bersifat asosiatif, yaitu (B * D) * G = B * (D * G) selalu berlaku bagi unsur-unsur grup.

Jumlah unsur dalam suatu grup disebut orde grup. Grup yang memenuhi B * C = C * B untuk setiap pasangan unsur disebut grup komutatif atau Abelian.

Contoh suatu grup adalah himpunan semua bilangan bulat—positif, negatif, dan nol—dengan aturan penggabungan berupa penjumlahan biasa. Ketertutupan terpenuhi karena jumlah dua bilangan bulat adalah bilangan bulat. Unsur identitasnya adalah 0. Invers bilangan bulat n adalah bilangan bulat −n. Penjumlahan bersifat asosiatif. Grup ini berorde tak hingga dan bersifat Abelian.

Himpunan seluruh operasi simetri suatu benda tiga dimensi, dengan aturan penggabungan $\hat{R}$ dan $\hat{S}$ berupa pelaksanaan $\hat{R}$ dan $\hat{S}$ secara berturut-turut, membentuk suatu grup. Ketertutupan dipenuhi karena hasil kali dua operasi simetri harus merupakan operasi simetri. Unsur identitas grup adalah operasi

identitas $\hat{E}$, yang tidak melakukan apa pun. Sifat asosiatif dipenuhi sebagaimana Persamaan (3.6). Invers suatu operasi simetri $\hat{R}$ adalah operasi simetri yang membatalkan pengaruh $\hat{R}$. Sebagai contoh, invers operasi inversi $\hat{i}$ adalah $\hat{i}$ itu sendiri karena $\hat{i}\hat{i} = \hat{E}$. Invers rotasi $\hat{C}_3$ sebesar 120° berlawanan arah jarum jam adalah rotasi 120° searah jarum jam, yang sama dengan rotasi 240° berlawanan arah jarum jam: $\hat{C}_3\hat{C}_3^2 = \hat{E}$ dan $\hat{C}_3^{-1} = \hat{C}_3^2$. Perhatikan bahwa operasi simetri molekul, bukan unsur simetrinya, merupakan anggota grup. Teori grup akan digunakan pada Bagian 15.2, tetapi pengembangan penuh teori grup dan penerapannya tidak diberikan di sini; lihat Cotton atau Schonland.

Dalam setiap operasi simetri molekul, titik pusat massa tetap tidak berpindah. Oleh karena itu, grup simetri molekul terisolasi disebut kelompok titik. Pada kristal yang luasnya tak hingga dapat terdapat operasi simetri, misalnya translasi, yang tidak mempertahankan satu titik tetap; operasi demikian menghasilkan kelompok ruang. Kelompok ruang tidak dibahas di sini.

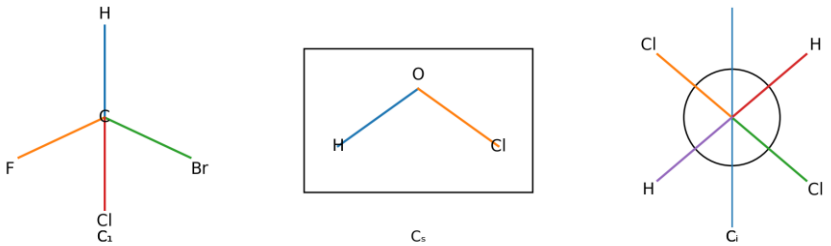
Setiap molekul termasuk ke dalam salah satu kelompok titik simetri yang didaftarkan berikut. Untuk memudahkan, kelompok titik dibagi menjadi empat golongan. Pada sumber asli, huruf bergaya skrip digunakan untuk menyatakan kelompok titik; dalam terjemahan ini digunakan notasi standar C, D, T, O, I, dan K.

I. Kelompok tanpa sumbu C_n: C_1, C_s, C_i

C_1: Jika suatu molekul sama sekali tidak mempunyai unsur simetri, molekul itu termasuk kelompok ini. Satu-satunya operasi simetri adalah $\hat{E}$, yang dapat dipandang sebagai rotasi $\hat{C}_1$. CHFClBr termasuk kelompok titik C_1.

C_s: Molekul yang satu-satunya unsur simetrinya adalah bidang simetri termasuk kelompok ini. Operasi simetrinya adalah $\hat{E}$ dan $\hat{\sigma}$. Contohnya adalah HOCl, seperti pada Gambar 12.11.

C_i: Molekul yang satu-satunya unsur simetrinya adalah pusat simetri termasuk kelompok ini. Operasi simetrinya adalah $\hat{i}$ dan $\hat{E}$.



Gambar 12.11. Contoh molekul tanpa sumbu C_n: kelompok C_1, C_s, dan C_i.

II. Kelompok dengan satu sumbu C_n: C_n, C_{nh}, C_{nv}, S_{2n}

C_n, n = 2, 3, 4, …: Molekul yang satu-satunya unsur simetrinya adalah sumbu C_n termasuk kelompok ini. Operasi simetrinya adalah $\hat{C}_n$, $\hat{C}_n^2$, …, $\hat{C}_n^{n-1}$, dan $\hat{E}$. Contoh molekul kelompok C_2 ditunjukkan pada Gambar 12.12.

C_{nh}, n = 2, 3, 4, …: Jika ditambahkan bidang simetri yang tegak lurus terhadap sumbu C_n, molekul termasuk kelompok ini. Karena $\hat{\sigma}_h\hat{C}_n = \hat{S}_n$, sumbu C_n juga merupakan sumbu S_n. Jika n genap, sumbu C_n sekaligus merupakan sumbu C_2, dan molekul memiliki operasi $\hat{\sigma}_h\hat{C}_2 = \hat{S}_2 = \hat{\imath}$. Jadi, untuk n genap, molekul C_{nh} mempunyai pusat simetri. Kelompok C_{1h} identik dengan kelompok C_s yang telah dibahas. Contoh kelompok C_{2h} dan C_{3h} ditunjukkan pada Gambar 12.12.

C_{nv}, n = 2, 3, 4, …: Molekul dalam kelompok ini mempunyai sumbu C_n dan n bidang simetri vertikal yang melalui sumbu C_n. Kelompok C_{1v} identik dengan C_s. H_2O, yang mempunyai satu sumbu C_2 dan dua bidang simetri vertikal, termasuk C_{2v}. NH_3 termasuk C_{3v}. Lihat Gambar 12.12.

S_n, n = 4, 6, 8, …: Kelompok S_n adalah grup operasi simetri yang berkaitan dengan sumbu S_n. Untuk n ganjil berlaku $\hat{S}_n = \hat{\sigma}_h\hat{C}_n$. Operasi $\hat{C}_n$ hanya memengaruhi koordinat x dan y, sedangkan $\hat{\sigma}_h$ hanya memengaruhi koordinat z. Karena itu, keduanya komut.

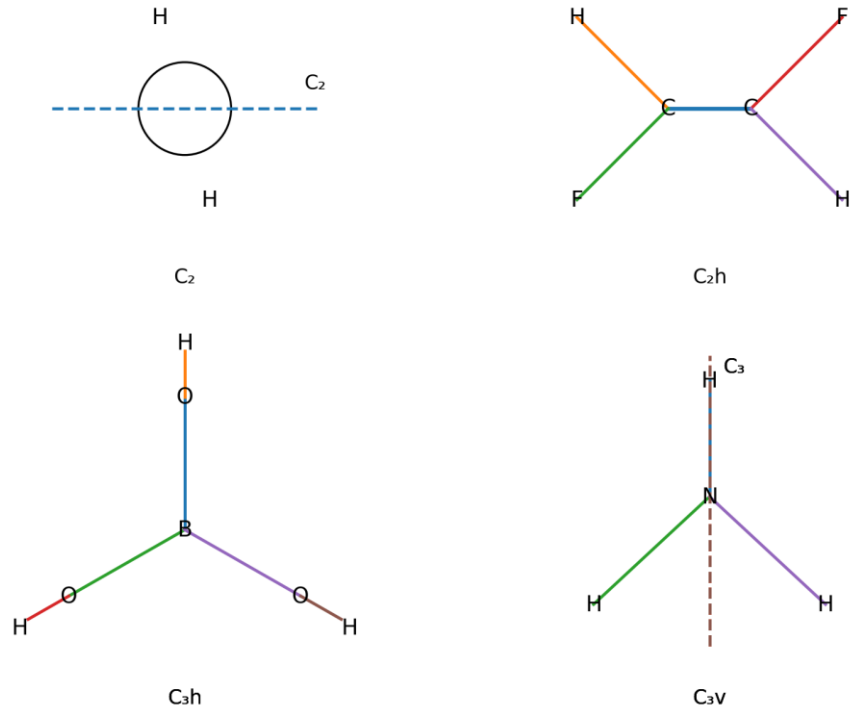
$$\hat{S}_n^{\,n} = (\hat{\sigma}_h\hat{C}_n)^n = \hat{\sigma}_h^{\,n}\,\hat{C}_n^{\,n}$$

Karena $\hat{C}_n^n = \hat{E}$ dan, untuk n ganjil, $\hat{\sigma}_h^n = \hat{\sigma}_h$, maka $\hat{S}_n^n = \hat{\sigma}_h$ untuk n ganjil; dengan demikian, kelompok S_n mempunyai bidang simetri horizontal jika n ganjil. Selain itu:

$$\hat{S}_n^{\,n+1} = \hat{S}_n^{\,n}\hat{S}_n = \hat{\sigma}_h\hat{S}_n = \hat{\sigma}_h\hat{\sigma}_h\hat{C}_n = \hat{C}_n,\ \text{n ganjil}$$

Jadi, molekul mempunyai sumbu C_n jika n ganjil, dan kelompok S_n identik dengan C_{nh} untuk n ganjil. Untuk n genap, karena $\hat{S}_2 = \hat{\imath}$, kelompok S_2 identik dengan C_i. Oleh sebab itu, hanya n = 4, 6, 8, … yang memberikan kelompok S_n baru. Sumbu S_{2n} juga merupakan sumbu C_n karena:

$$\hat{S}_{2n}^{\,2} = \hat{\sigma}_h^{\,2}\,\hat{C}_{2n}^{\,2} = \hat{E}\,\hat{C}_n = \hat{C}_n$$



Gambar 12.12. Contoh molekul dengan satu sumbu C_n.

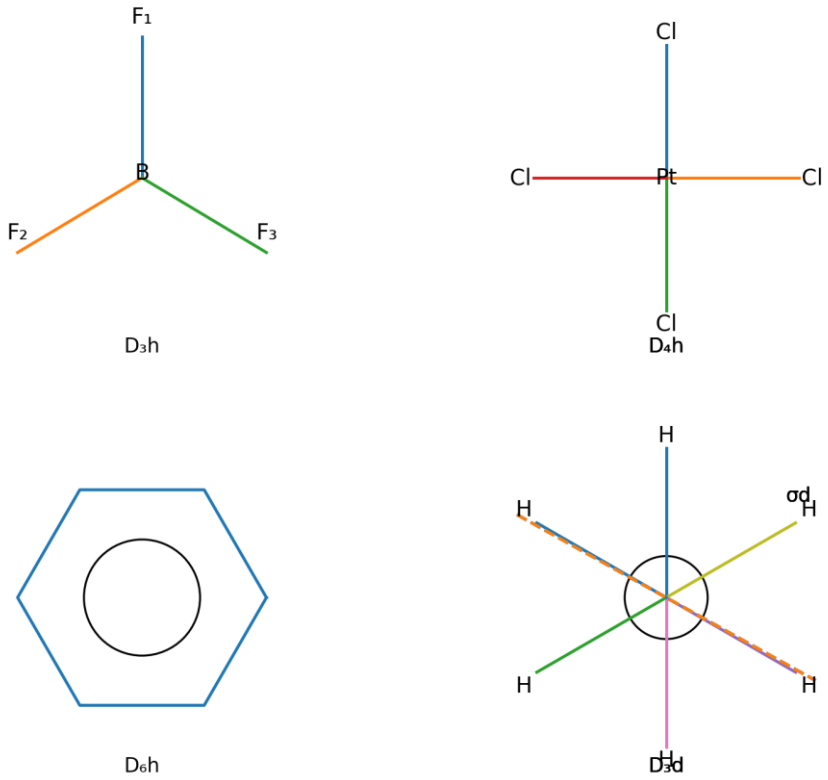
III. Kelompok dengan satu sumbu C_n dan n sumbu C_2: D_n, D_{nh}, D_nd

D_n, n = 2, 3, 4, …: Molekul yang mempunyai satu sumbu C_n dan n sumbu C_2 yang tegak lurus terhadap sumbu C_n, tanpa bidang simetri, termasuk D_n. Sudut antara dua sumbu C_2 berdekatan adalah π/n radian. Kelompok D_2 mempunyai tiga sumbu C_2 yang saling tegak lurus, dengan operasi $\hat{E}$, $\hat{C}_2(x)$, $\hat{C}_2(y)$, dan $\hat{C}_2(z)$.

D_{nh}, n = 2, 3, 4, …: Kelompok ini mencakup molekul dengan sumbu C_n, n sumbu C_2, dan bidang simetri σ_h yang tegak lurus terhadap sumbu C_n. Seperti pada C_{nh}, sumbu C_n juga merupakan sumbu S_n. Jika n genap, sumbu C_n merupakan sumbu C_2 sekaligus S_2, sehingga molekul mempunyai pusat simetri. Molekul D_{nh} juga mempunyai n bidang simetri vertikal, dan setiap bidang tersebut melalui sumbu C_n serta salah satu sumbu C_2. Pembuktiannya diberikan pada Soal 12.29. BF_3 termasuk D_{3h}, $PtCl_4^{2-}$ termasuk D_{4h}, dan benzena termasuk D_{6h}, seperti pada Gambar 12.13.

D_nd, n = 2, 3, 4, …: Molekul dengan sumbu C_n, n sumbu C_2, dan n bidang simetri vertikal yang melalui sumbu C_n serta membagi dua sudut antara sumbu-sumbu C_2 yang berdekatan termasuk kelompok ini. Bidang vertikal tersebut disebut bidang diagonal dan dilambangkan σd. Sumbu C_n dapat ditunjukkan sekaligus merupakan sumbu S_{2n}. Konformasi etana berselang-seling

merupakan contoh kelompok $D_{3}d$. Simetri molekul yang mengalami rotasi internal, seperti etana, sebenarnya memerlukan pertimbangan khusus; lihat H. C. Longuet-Higgins, Mol. Phys., 6, 445 (1963).



Gambar 12.13. Contoh molekul dengan satu sumbu C_n dan n sumbu C_2.

IV. Kelompok dengan lebih dari satu sumbu C_n, n > 2: T_d, T, T_h, O_h, O, I_h, I, K_h

Kelompok-kelompok ini berkaitan dengan simetri padatan Platonik, yaitu padatan yang dibatasi poligon beraturan kongruen dan mempunyai sudut polihedral kongruen. Terdapat lima padatan semacam itu: tetrahedron mempunyai empat muka segitiga; kubus mempunyai enam muka persegi; oktahedron mempunyai delapan muka segitiga; dodekahedron pentagonal mempunyai dua belas muka pentagonal; dan ikosahedron mempunyai dua puluh muka segitiga.

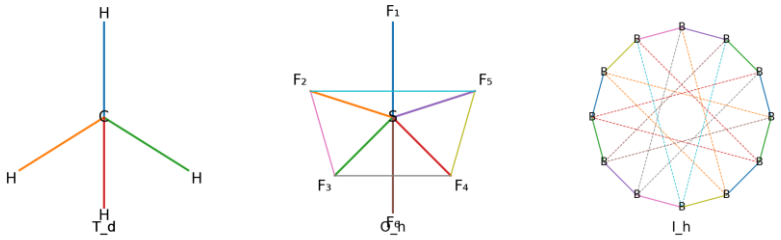
T_d: Operasi simetri tetrahedron beraturan membentuk kelompok ini. Contoh utamanya adalah CH_4. Unsur simetri metana terdiri atas empat sumbu C_3—setiap ikatan C-H—tiga sumbu S_4 yang juga merupakan sumbu C_2, seperti pada Gambar 12.5, dan enam bidang simetri, dengan setiap bidang memuat dua ikatan C-H. Banyaknya kombinasi empat benda yang diambil dua sekaligus adalah 4!/(2!2!) = 6.

O_h: Operasi simetri kubus atau oktahedron beraturan membentuk kelompok ini. Kubus dan oktahedron bersifat dual satu sama lain: jika titik tengah muka-

muka yang berdekatan pada kubus dihubungkan, diperoleh oktahedron, dan sebaliknya. Karena itu, kubus dan oktahedron mempunyai unsur serta operasi simetri yang sama. Kubus mempunyai enam muka, delapan titik sudut, dan dua belas rusuk. Unsur simetrinya adalah satu pusat simetri; tiga sumbu C_4 yang melalui pusat pasangan muka berhadapan, yang juga merupakan sumbu S_4 dan C_2; empat sumbu C_3 yang melalui pasangan sudut berhadapan, yang juga merupakan sumbu S_6; enam sumbu C_2 yang menghubungkan titik tengah pasangan rusuk berhadapan; tiga bidang simetri yang sejajar dengan pasangan muka berhadapan; serta enam bidang simetri yang melalui pasangan rusuk berhadapan. Molekul oktahedral seperti SF_6 termasuk O_h.

I_h: Operasi simetri dodekahedron pentagonal beraturan atau ikosahedron beraturan, yang saling dual, membentuk kelompok ini. Ion $B_{12}H_{12}^{2-}$ termasuk I_h. Dua belas atom boron berada pada titik-titik sudut ikosahedron beraturan, seperti pada Gambar 12.14. Molekul C_{60} berbentuk bola sepak, buckminsterfullerena, juga termasuk I_h. Bentuknya adalah ikosahedron terpotong yang diperoleh dengan memotong masing-masing dari 12 titik sudut ikosahedron beraturan. Pemotongan itu menghasilkan 12 muka pentagonal—lima muka bertemu pada setiap titik sudut ikosahedron asal—20 muka heksagonal yang berasal dari 20 muka segitiga asal, dan 12 × 5 = 60 titik sudut, sebab lima titik sudut baru terbentuk ketika setiap titik sudut asal dipotong.

K_h: Kelompok ini adalah kelompok operasi simetri bola. Kata Kugel dalam bahasa Jerman berarti bola. Suatu atom termasuk kelompok ini.



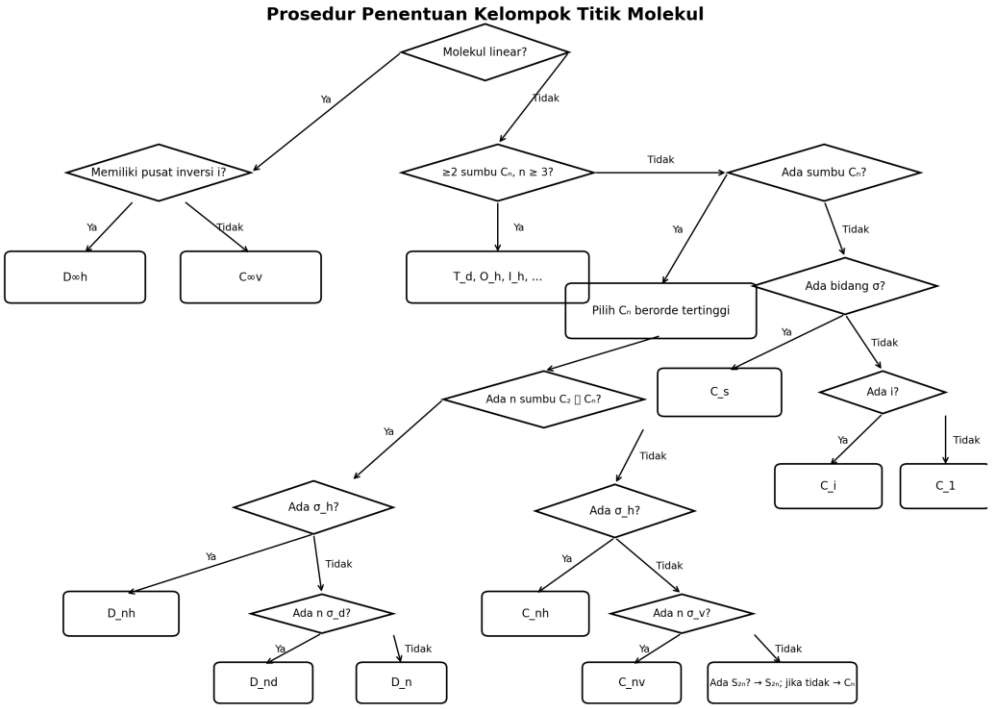
Gambar 12.14. Contoh molekul dengan lebih dari satu sumbu C_n, $n > 2$. Untuk $B_{12}H_{12}^{2-}$, atom hidrogen tidak ditampilkan agar gambar lebih jelas.

Untuk melengkapi daftar, kelompok lain yang berkaitan dengan padatan Platonik disebutkan berikut, walaupun kurang penting secara kimia. Kelompok T, O, dan I masing-masing merupakan kelompok rotasi sejati tetrahedron, kubus, dan ikosahedron. Kelompok-kelompok ini tidak memuat pencerminan dan rotasi tak sejati dari padatan tersebut maupun operasi inversi pada kubus dan ikosahedron. Kelompok T_h memuat rotasi simetri tetrahedron, operasi inversi, serta pencerminan dan rotasi tak sejati tertentu.

Kelompok apakah yang dimiliki molekul linear? Rotasi dengan sudut berapa pun terhadap sumbu internuklir molekul linear merupakan operasi simetri. Poligon

beraturan bersisi n mempunyai sumbu C_n; pada limit $n \rightarrow \infty$ diperoleh lingkaran yang mempunyai sumbu $C\infty$. Sumbu internuklir molekul linear adalah sumbu $C\infty$. Setiap bidang yang memuat sumbu ini merupakan bidang simetri. Jika molekul linear tidak mempunyai pusat simetri, misalnya CO dan HCN, molekul termasuk kelompok $C\infty v$. Jika molekul linear mempunyai pusat simetri, misalnya H_2 dan C_2H_2, molekul juga mempunyai bidang σ_h dan tak hingga banyak sumbu C_2 yang tegak lurus terhadap sumbu molekul. Karena itu, molekul tersebut termasuk $D\infty h$.

Bagaimana menentukan kelompok titik suatu molekul? Salah satu cara adalah menemukan semua unsur simetri, kemudian membandingkannya dengan daftar kelompok di atas. Prosedur yang lebih sistematis diberikan pada Gambar 12.15, yang diadaptasi dari J. B. Calvert, Am. J. Phys., 31, 659 (1963). Prosedur tersebut didasarkan pada empat golongan kelompok titik.



Gambar 12.15. Cara menentukan kelompok titik suatu molekul. Diagram digambar ulang dalam bahasa Indonesia berdasarkan prosedur pada sumber.

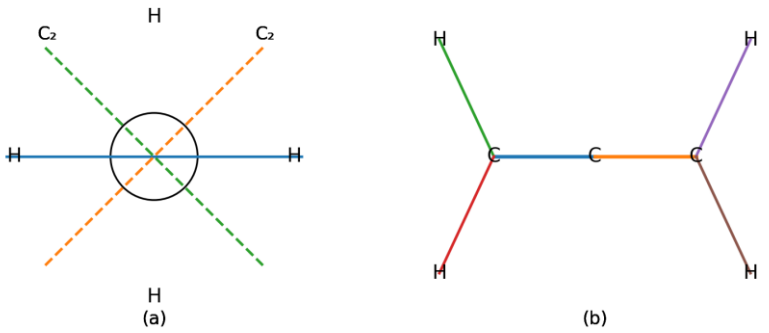
Prosedur dimulai dengan memeriksa apakah molekul linear. Molekul linear diklasifikasikan sebagai $D\infty h$ atau $C\infty v$ menurut ada atau tidaknya pusat simetri. Jika molekul tidak linear, dicari dua atau lebih sumbu rotasi berorde tiga atau lebih tinggi. Jika sumbu-sumbu tersebut ada, molekul diklasifikasikan ke dalam salah satu kelompok yang berkaitan dengan simetri polihedron beraturan, yaitu golongan IV. Jika tidak ada, dicari apakah terdapat sumbu C_n apa pun. Jika tidak terdapat sumbu C_n, molekul termasuk C_s, C_i, atau C_1, yaitu golongan I. Jika terdapat sekurang-kurangnya satu sumbu C_n, sumbu dengan orde tertinggi dipilih sebagai sumbu simetri utama sebelum melanjutkan ke langkah berikutnya. Jika

terdapat tiga sumbu C_2 yang saling tegak lurus, salah satu sumbu boleh dipilih sebagai sumbu utama.

Selanjutnya diperiksa keberadaan n sumbu C_2 yang tegak lurus terhadap sumbu utama C_n. Jika sumbu-sumbu tersebut ada, molekul termasuk salah satu kelompok golongan III; jika tidak, molekul termasuk salah satu kelompok golongan II. Apabila n sumbu C_2 ditemukan, dicari bidang simetri yang tegak lurus terhadap sumbu utama C_n. Jika bidang ini ada, kelompoknya D_{nh}. Jika tidak, dicari n bidang simetri yang memuat sumbu utama C_n. Jika molekul mempunyai tiga sumbu C_2 yang saling tegak lurus, setiap sumbu harus dicoba sebagai sumbu utama ketika mencari dua bidang σ_v; ketiga sumbu C_2 ekuivalen pada kelompok D_{nh} dan D_n, tetapi tidak ekuivalen pada D_nd. Jika ditemukan n bidang σ_v diagonal, kelompoknya D_nd; jika tidak, kelompoknya D_n.

Jika molekul tidak mempunyai n sumbu C_2 yang tegak lurus terhadap sumbu utama C_n, molekul diklasifikasikan sebagai C_{nh}, C_{nv}, S_{2n}, atau C_n. Pemeriksaan dilakukan secara berturut-turut terhadap bidang σ_h, n bidang σ_v, dan—jika keduanya tidak ada—apakah sumbu C_n merupakan sumbu S_{2n}. Prosedur pada Gambar 12.15 tidak menemukan seluruh unsur simetri. Setelah molekul diklasifikasikan, keberadaan semua unsur simetri yang dipersyaratkan harus diperiksa. Meskipun prosedur ini tampak panjang, pada praktiknya cukup sederhana dan mudah diingat.

Kesalahan yang paling sering dilakukan mahasiswa dalam mengklasifikasikan molekul adalah tidak menemukan n sumbu C_2 yang tegak lurus terhadap sumbu C_n pada molekul kelompok D_nd. Sebagai contoh, sumbu C=C=C pada alena mudah dikenali sebagai sumbu C_2, tetapi dua sumbu C_2 lainnya pada Gambar 12.16 sering terlewatkan. Molekul yang terdiri atas dua bagian sama yang tersusun berselang-seling satu terhadap yang lain umumnya termasuk D_nd. Model molekul dapat membantu pembaca yang mengalami kesulitan visualisasi.



Gambar 12.16. Dua pandangan alena. Pada (a), sumbu C=C=C tegak lurus terhadap bidang kertas.

Ringkasan

Operasi simetri mentransformasikan suatu objek ke posisi yang secara fisik tidak dapat dibedakan dari posisi asal dan mempertahankan jarak antara setiap pasangan titik dalam objek. Unsur simetri adalah entitas geometris yang menjadi acuan pelaksanaan operasi simetri. Bagi molekul terdapat empat jenis unsur simetri, yaitu sumbu simetri lipat-n C_n, bidang simetri σ, pusat simetri i, dan sumbu simetri rotasi-pencerminan lipat-n S_n. Hasil kali operasi simetri berarti pelaksanaan operasi-operasi tersebut secara berturut-turut. Berlaku $\hat{C}_n^n = \hat{E}$, dengan $\hat{E}$ sebagai operasi identitas; juga $\hat{S}_1 = \hat{\sigma}$ dan $\hat{S}_2 = \hat{\imath}$, dengan inversi membawa titik (x, y, z) ke (−x, −y, −z). Dua operasi simetri dapat komutatif ataupun tidak komutatif.

Untuk operasi simetri $\hat{R}$ yang membawa titik (x, y, z) ke (x′, y′, z′), operator $\hat{O}\_R$ didefinisikan melalui $\hat{O}\_R\ f(x', y', z') = f(x, y, z)$. Jika molekul mempunyai operasi simetri $\hat{R}_1$, $\hat{R}_2$, dan seterusnya, operator $\hat{O}\_R_1$, $\hat{O}\_R_2$, dan seterusnya komut dengan Hamiltonian molekul $\hat{H}$. Jika $\hat{R}_1$, $\hat{R}_2$, dan seterusnya juga saling komut, fungsi gelombang molekul dapat dipilih sebagai fungsi eigen $\hat{O}\_R_1$, $\hat{O}\_R_2$, dan seterusnya.

Himpunan seluruh operasi simetri suatu molekul membentuk kelompok titik matematis. Kelompok titik molekul yang mungkin adalah sebagai berikut. I. Kelompok tanpa sumbu C_n: C_1, C_s, C_i. II. Kelompok dengan satu sumbu C_n: C_n, C_{nh}, C_{nv}, S_{2n}. III. Kelompok dengan satu sumbu C_n dan n sumbu C_2: D_n, D_{nh}, D_nd. IV. Kelompok dengan lebih dari satu sumbu C_n, n > 2: T_d, O_h, I_h, dan kelompok lain.

CATATAN INTEGRATIF: RELEVANSI AL-QUR'AN DAN HADIS

Catatan: Bagian ini merupakan refleksi integratif tambahan dan bukan bagian dari teks asli buku. Ayat dan hadis tidak dipakai sebagai pembuktian langsung teori simetri molekul, melainkan sebagai landasan refleksi tentang keteraturan ciptaan, keindahan, dan kerendahan hati ilmiah.

ٱلَّذِي خَلَقَ سَبۡعَ سَمَٰوَٰتٖ طِبَاقٗاۖ مَّا تَرَىٰ فِي خَلۡقِ ٱلرَّحۡمَٰنِ مِن تَفَٰوُتٖۖ فَٱرۡجِعِ ٱلۡبَصَرَ هَلۡ تَرَىٰ مِن فُطُورٖ ﴿٣﴾ ثُمَّ ٱرۡجِعِ

ٱلۡبَصَرَ كَرَّتَيۡنِ يَنقَلِبۡ إِلَيۡكَ ٱلۡبَصَرُ خَاسِئٗا وَهُوَ حَسِيرٞ ﴿٤﴾

"(Dia juga) yang menciptakan tujuh langit berlapis-lapis. Kamu tidak akan melihat pada ciptaan Tuhan Yang Maha Pengasih ketidakseimbangan sedikit pun. Maka, lihatlah sekali lagi! Adakah kamu melihat suatu cela? Kemudian, lihatlah sekali lagi (dan) sekali lagi! Niscaya pandanganmu akan kembali kepadamu dengan kecewa dan dalam keadaan letih." (QS. Al-Mulk [67]: 3-4; terjemahan Kementerian Agama RI).

Relevansi: ayat ini mengarahkan manusia untuk mengamati ciptaan secara berulang dan teliti serta merenungkan keteraturan yang terdapat di dalamnya. Dalam konteks pembelajaran, simetri molekul menunjukkan bahwa keteraturan geometris dapat dirumuskan secara matematis dan digunakan untuk menjelaskan sifat molekul. Batas penafsiran harus dijaga: ayat tersebut menyampaikan pesan teologis mengenai kesempurnaan dan keteraturan ciptaan, bukan merumuskan secara khusus teori kelompok atau operasi simetri molekul.

إِنَّ اللَّهَ جَمِيلٌ يُحِبُّ الْجَمَالَ، الْكِبْرُ بَطَرُ الْحَقِّ وَ غَمْطُ النَّاسِ

"Sesungguhnya Allah itu indah dan menyukai keindahan. Kesombongan adalah menolak kebenaran dan meremehkan manusia." (HR. Muslim, Kitab al-Īmān, hadis sahih; nomor 91 dalam banyak penomoran modern).

Relevansi: simetri sering berkaitan dengan keteraturan dan keindahan bentuk. Namun, inti hadis ini adalah keindahan yang disertai penerimaan terhadap kebenaran serta larangan bersikap sombong. Dalam kegiatan ilmiah, pesan tersebut relevan dengan ketelitian, keterbukaan terhadap bukti, dan kerendahan hati ketika model simetri memiliki batas penerapan.

Soal

Bagian	12.1	12.2	Umum
Nomor soal	12.1-12.15	12.16-12.34	12.35

12.1 Benar atau salah? (a) Operasi simetri selalu komutatif. (b) Operasi simetri tidak pernah komutatif. (c) Hasil kali dua operasi simetri suatu molekul harus merupakan operasi simetri bagi molekul tersebut.

12.2 Tuliskan semua unsur simetri dari setiap molekul berikut: (a) H_2S; (b) NH_3; (c) CHF_3; (d) HOCl; (e) 1,3,5-triklorobenzena; (f) CH_2F_2; (g) CHFClBr.

12.3 Daftarkan semua operasi simetri dari setiap molekul pada Soal 12.2.

12.4 Perhatikan ion $PtCl_4^{2-}$ berbentuk segiempat-planar. Misalkan dua atom Cl yang cis satu sama lain dipertukarkan. Apakah pertukaran ini memenuhi definisi operasi simetri pada Bagian 12.1? Jika ya, nyatakan pertukaran tersebut sebagai suatu kombinasi dari empat jenis operasi simetri yang dibahas.

12.5 Operasi simetri apakah yang setara dengan setiap hasil kali operasi berikut? (a) $\hat{\sigma}^4$; (b) $\hat{\sigma}^7$; (c) $\hat{C}_4^2$; (d) $\hat{C}_4^6$; (e) $\hat{S}_4^2$; (f) $\hat{S}_6^3$; (g) $\hat{C}_{12}^3$; (h) $\hat{\imath}^3$.

12.6 Gunakan Gambar 12.7 untuk menyatakan operasi simetri pada SF_6 yang setara dengan setiap hasil kali berikut: (a) $\hat{C}_2(x)\hat{C}_4(z)$; (b) $\hat{C}_4(z)\hat{C}_2(x)$.

12.7 Untuk SF_6, pasangan operasi berikut manakah yang komutatif? (a) $\hat{C}_4(z)$, $\hat{\sigma}(xy)$; (b) $\hat{C}_4(z)$, $\hat{\sigma}(yz)$; (c) $\hat{C}_2(z)$, $\hat{C}_2(x)$; (d) $\hat{\sigma}(xy)$, $\hat{\sigma}(yz)$; (e) $\hat{\imath}$, $\hat{\sigma}(xy)$.

12.8 Informasi apakah yang diberikan simetri mengenai momen dipol setiap molekul pada Soal 12.2?

12.9 (a) Apakah H_2O_2 pada Gambar 12.12 mempunyai sumbu S_n? (b) Apakah molekul tersebut aktif optik? Jelaskan.

12.10 Untuk setiap operasi simetri berikut, tentukan matriks representatifnya dalam basis x, y, z: (a) $\hat{E}$; (b) $\hat{\sigma}(xy)$; (c) $\hat{\sigma}(yz)$; (d) $\hat{C}_2(x)$; (e) $\hat{S}_4(z)$; (f) $\hat{C}_3(z)$.

12.11 (a) Gunakan SF_6 pada Gambar 12.7 untuk memverifikasi bahwa $\hat{C}_2(x)\hat{\sigma}(xy) = \hat{\sigma}(xz)$. (b) Tuliskan matriks representatif dalam basis x, y, z bagi ketiga operasi pada bagian (a). Verifikasikan bahwa matriks-matriks tersebut dikalikan dengan cara yang sama seperti operasi simetrinya.

12.12 (a) Apakah nilai eigen operator $\hat{O}\_C_4$? (b) Apakah operator ini Hermitian?

12.13 Kerjakan hal yang sama seperti pada Soal 12.12 untuk operator $\hat{O}\_C_2$.

12.14 Orbital hidrogenik 2p_z diubah menjadi fungsi apa oleh (a) $\hat{O}\_C_4(z)$; (b) $\hat{O}\_C_4(y)$?

12.15 Sumbu rotasi-inversi, bukan sumbu rotasi-pencerminan, lazim digunakan untuk mengklasifikasikan simetri kristal. Setiap sumbu S_n ekuivalen dengan sumbu rotasi-inversi, dilambangkan $\bar{p}$, yang ordenya p dapat berbeda dari n. Operasi rotasi-inversi terdiri atas rotasi sebesar $2\pi/p$ radian yang diikuti inversi. Tunjukkan bahwa $\hat{S}_n(z) = \hat{\imath}[\hat{C}_n(z)\hat{C}_2(z)]$. Dengan demikian diperoleh korespondensi S_n: 1, 2, 3, 4 dan $\bar{p}$: $\bar{2}$, $\bar{1}$, $\bar{6}$, $\bar{4}$. Berikan tiga pasangan entri berikutnya dalam tabel tersebut.

12.16 Nyatakan apakah setiap himpunan berikut merupakan grup. (a) Semua bilangan real dengan aturan pembentukan "hasil kali" dua unsur berupa penjumlahan. (b) Semua bilangan bulat positif dengan aturan pembentukan hasil kali dua unsur berupa perkalian. (c) Semua bilangan real kecuali nol dengan aturan pembentukan hasil kali berupa perkalian.

12.17 Apakah himpunan semua matriks persegi berorde empat membentuk grup jika aturan pembentukan "hasil kali" dua unsur adalah penjumlahan matriks?

12.18 Apakah himpunan akar-akar pangkat n dari satu [Persamaan (1.36)] dengan aturan penggabungan berupa perkalian biasa membentuk grup? Berikan alasan.

12.19 Tentukan kelompok titik setiap molekul berikut: (a) CH_4; (b) CH_3F; (c) CH_2F_2; (d) CHF_3; (e) SF_6; (f) SF_5Br; (g) trans-SF_4Br_2; (h) CDH_3.

12.20 Tentukan kelompok titik: (a) $CH_2{=}CH_2$; (b) $CH_2{=}CHF$; (c) $CH_2{=}CF_2$; (d) cis-CHF=CHF; (e) trans-CHF=CHF.

12.21 Tentukan kelompok titik: (a) benzena; (b) fluorobenzena; (c) o-difluorobenzena; (d) m-difluorobenzena; (e) p-difluorobenzena; (f) 1,3,5-trifluorobenzena; (g) 1,4-difluoro-2,5-dibromobenzena; (h) naftalena; (i) 2-kloronaftalena.

12.22 Tentukan kelompok titik: (a) HCN; (b) H_2S; (c) CO_2; (d) CO; (e) C_2H_2; (f) CH_3OH; (g) ND_3; (h) OCS; (i) P_4; (j) PCl_3; (k) PCl_5; (l) $B_{12}Cl_{12}^{2-}$; (m) UF_6; (n) Ar.

12.23 Tentukan kelompok titik: (a) FeF_6^{3-}; (b) IF_5; (c) $CH_2{=}C{=}CH_2$; (d) C_8H_8, kubana; (e) $C_6H_6Cr(CO)_3$; (f) B_2H_6; (g) XeF_4; (h) F_2O; (i) spiropentana.

12.24 Tentukan orde setiap grup berikut: (a) C_{3v}; (b) C_s; (c) $C\infty v$; (d) D_{3h}.

12.25 Hasil kali dua anggota grup harus merupakan anggota grup tersebut. (a) Daftarkan anggota—operasi simetri—grup C_{2v} dengan menggunakan sumbu x, y, dan z untuk menentukan sumbu atau bidang acuan setiap operasi. (b) Untuk setiap hasil kali dua anggota yang mungkin, nyatakan operasi simetri yang setara dengannya. Perhatikan bahwa operasi simetri tidak harus komutatif. (c) Tabel perkalian grup menampilkan seluruh hasil kali dua anggota grup yang mungkin. Tuliskan tabel perkalian C_{2v} dengan setiap anggota ditampilkan di bagian atas dan di sebelah kiri tabel; setiap entri adalah hasil kali anggota di sebelah kiri baris dan anggota di bagian atas kolom entri tersebut.

12.26 Nyatakan apakah setiap grup berikut Abelian: (a) C_3; (b) C_{3v}.

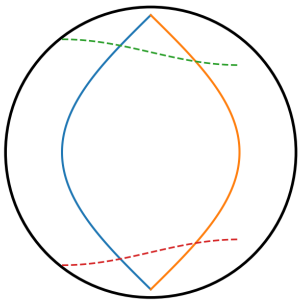
12.27 Struktur ferosena, $C_5H_5FeC_5H_5$, terdiri atas atom besi yang berada tepat di antara dua pentagon beraturan sejajar. Pada konformasi bertumpuk, titik-titik sudut kedua pentagon sejajar; pada konformasi berselang-seling, satu pentagon diputar sebesar $2\pi/10$ radian terhadap pentagon lainnya. Hasil difraksi elektron menunjukkan bahwa konformasi kesetimbangan fase gas adalah konformasi bertumpuk, dengan penghalang rotasi internal cincin yang cukup rendah [S. Coriani dkk., ChemPhysChem, 7, 245 (2006)]. Tentukan kelompok titik: (a) ferosena bertumpuk; (b) ferosena berselang-seling.

12.28 Apakah kelompok titik ion kompleks tris(etilendiamina)kobalt(III)? Setiap gugus $NH_2CH_2CH_2NH_2$ menempati dua posisi yang berdekatan pada bola koordinasi oktahedral.

12.29 Perhatikan molekul D_{nh} dengan sumbu z berimpit dengan sumbu C_n dan sumbu x berimpit dengan salah satu sumbu C_2. Tunjukkan bahwa hasil kali $\hat{\sigma}(xy)\hat{C}_2(x)$ memindahkan titik yang semula berada pada (x, y, z) ke (x, −y, z). Karena itu, $\hat{\sigma}(xy)\hat{C}_2(x) = \hat{\sigma}(xz)$. Karena $\hat{C}_2(x)$ dan $\hat{\sigma}(xy)$

merupakan operasi simetri, hasil kalinya harus merupakan operasi simetri. Jadi, bidang xz adalah bidang simetri. Argumen yang sama berlaku bagi setiap sumbu C_2, sehingga molekul mempunyai n bidang σ_v.

12.30 Tentukan kelompok titik: (a) piramida beralas persegi; (b) kerucut lingkaran tegak; (c) lamina persegi; (d) lamina persegi yang sisi atas dan bawahnya dicat dengan warna berbeda; (e) silinder lingkaran tegak; (f) silinder lingkaran tegak yang kedua ujungnya dicat dengan warna berbeda; (g) silinder lingkaran tegak dengan satu garis yang dicat sejajar sumbu; (h) keping salju; (i) donat atau torus; (j) bola bisbol, Gambar 12.17; (k) orbital 2p_z; (l) manusia, dengan mengabaikan organ internal dan sedikit asimetri eksternal kiri-kanan.



Gambar 12.17. Bola bisbol. Bagian jahitan yang digambar putus-putus dan utuh berada pada belahan yang berbeda.

12.31 (a) Padatan Platonik apakah yang dual terhadap tetrahedron beraturan? (b) Berapa banyak titik sudut yang dimiliki dodekahedron pentagonal?

12.32 (a) Untuk nilai n berapakah keberadaan sumbu S_n mengimplikasikan adanya bidang simetri? (b) Untuk nilai n berapakah keberadaan sumbu S_n mengimplikasikan adanya pusat simetri? (c) Kelompok D_nd mempunyai sumbu S_{2n}. Untuk nilai n berapakah kelompok tersebut mempunyai pusat simetri?

12.33 Untuk kelompok titik manakah suatu molekul dapat mempunyai momen dipol?

12.34 Untuk kelompok titik manakah suatu molekul dapat aktif optik?

12.35 Dua orang memainkan permainan berikut. Secara bergiliran, masing-masing meletakkan satu koin pada permukaan papan catur besar. Koin dapat diletakkan di mana saja pada papan selama tidak bertumpang-tindih dengan koin yang telah ditempatkan. Satu koin boleh menutupi lebih dari satu petak. Setelah diletakkan, koin tidak boleh dipindahkan. Ketika salah seorang pemain tidak menemukan ruang untuk meletakkan koin lain pada papan, ia kalah. Dengan permainan terbaik, apakah pemain yang

meletakkan koin pertama atau lawannya yang menang? Berikan strategi kemenangan.

DAFTAR PUSTAKA

Al-Qur'an, QS Ali 'Imran [3]: 190.

Allemann, R., dan N. Scrutton (eds.). Quantum Tunnelling in Enzyme-Catalyzed Reactions. RSC Publishing, 2009.

Bell, R. P. The Tunnel Effect in Chemistry. Chapman & Hall, 1980.

Branson, D. "Continuity Conditions for the Wave Function." American Journal of Physics, 47, 1000 (1979).

Brush, S. G. (2002). "Planck's 1900 paper and the discovery of quantization." American Journal of Physics, 70, 119.

Darrigol, O. (2001). Kajian historis mengenai kuantisasi Planck. Centaurus, 43, 219.

Dirac, P. A. M. (1958). The Principles of Quantum Mechanics, edisi ke-4. Oxford University Press.

Feynman, R. P. (1948). "Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics." Reviews of Modern Physics, 20, 367.

Feynman, R. P., & Hibbs, A. R. (1965). Quantum Mechanics and Path Integrals. McGraw-Hill.

Hawking, S. (1988). A Brief History of Time. Bantam.

Jammer, M. (1966). The Conceptual Development of Quantum Mechanics. McGraw-Hill.

Juffmann, T., dkk. (2012). Interferensi molekul bermassa besar. Nature Nanotechnology, 7, 297.

Kragh, H. (2000). Ulasan sejarah revolusi kuantum. Physics World, Desember 2000.

Levine, I. N. (2014). Quantum Chemistry, edisi ke-7. Pearson.

Levine, Ira N. Quantum Chemistry. Edisi ketujuh. Sumber utama terjemahan Bab 2.

Lissauer, J. J. (1999). Kajian dinamika dan kekacauan tata surya. Reviews of Modern Physics, 71, 835.

Merzbacher. Rujukan pembahasan jumlah tingkat terikat, Bagian 6.8, sebagaimana dikutip dalam sumber utama.

Muslim ibn al-Hajjaj. Sahih Muslim, hadis no. 2363.

Peterson, I. (1993). Newton's Clock: Chaos in the Solar System. Freeman.

GLOSARIUM

A - Angstrom (Å): Satuan panjang 10^{-10} m; masih sering digunakan untuk ukuran atom dan ikatan.

A. Amplitudo: faktor pengali fungsi gelombang yang ditentukan oleh syarat batas dan normalisasi.

B - Benda hitam: Objek ideal yang menyerap seluruh radiasi elektromagnetik yang datang.

B. Bound state/keadaan terikat: keadaan yang fungsi gelombangnya menuju nol pada jarak tak hingga dan dapat dinormalisasi.

C - Cahaya: Dalam buku ini mencakup seluruh radiasi elektromagnetik, bukan hanya cahaya tampak.

C. Continuum/kontinuum energi: rentang energi berkesinambungan pada keadaan tak terikat.

D - Difraksi: Pembelokan atau penyebaran gelombang ketika melewati celah atau penghalang.

D. Delta Kronecker: simbol δ_{ij} yang bernilai 1 untuk $i = j$ dan 0 untuk $i \neq j$.

E - Elektron: Partikel bermuatan negatif yang struktur dan geraknya menentukan banyak sifat kimia.

E. Energi eigen: nilai energi yang diizinkan oleh persamaan Schrödinger dan syarat batas.

F - Foton: Kuantum radiasi elektromagnetik dengan energi $E = h\nu$.

F. Fungsi gelombang: fungsi ψ yang memuat informasi keadaan kuantum sistem.

G - Gelombang de Broglie: Gelombang materi dengan panjang gelombang $\lambda = h/p$.

G. Ground state/keadaan dasar: keadaan dengan energi paling rendah.

H - H-bar ($\hbar$): Konstanta Planck tereduksi, $\hbar = h/(2\pi)$.

H. Homogen: persamaan diferensial linear dengan ruas sumber g(x) sama dengan nol.

I - Interferensi: Penggabungan dua atau lebih gelombang sehingga amplitudonya saling memperkuat atau meniadakan.

I. Infinite well/sumur tak hingga: model kotak dengan energi potensial tak hingga di luar daerah yang diizinkan.

J - Joule (J): Satuan SI untuk energi.

J. Joule: satuan SI untuk energi.

K - Kuantisasi: Pembatasan suatu besaran fisis pada nilai-nilai diskret tertentu.

K. Kuantisasi: pembatasan suatu besaran, seperti energi, pada nilai-nilai diskret tertentu.

L - Laplace, determinisme: Gagasan bahwa keadaan masa depan sistem klasik sepenuhnya ditentukan oleh keadaan awalnya.

L. Lebar kotak: panjang l daerah tempat partikel diizinkan bergerak.

M - Mekanika kuantum: Kerangka hukum fisis untuk menggambarkan sistem mikroskopik.

M. Massa partikel: besaran m yang memengaruhi jarak tingkat energi dan probabilitas penerowongan.

N - Normalisasi: Syarat bahwa integral kerapatan probabilitas di seluruh ruang sama dengan satu.

N. Node/simpul: titik tempat fungsi gelombang bernilai nol.

O - Orde besaran: Perkiraan skala atau tingkat besar suatu besaran, seperti pada hubungan ketidakpastian.

O. Ortonormalitas: gabungan sifat normalisasi dan ortogonalitas fungsi gelombang.

P - Probabilitas: Ukuran peluang terjadinya suatu hasil; dalam mekanika kuantum diperoleh dari $|\Psi|^2$.

P. Prinsip korespondensi Bohr: peralihan hasil mekanika kuantum menuju mekanika klasik pada bilangan kuantum besar.

Q - Quantum dot: Nanostruktur yang ketiga dimensinya berada pada skala nanometer dan menunjukkan pengungkungan kuantum.

Q. Quantum number/bilangan kuantum: bilangan n yang memberi label keadaan dan tingkat energi.

R - Radiasi elektromagnetik: Gelombang medan listrik dan magnet yang merambat dengan kecepatan cahaya dalam vakum.

R. Rectangular well/sumur persegi panjang: potensial satu dimensi dengan daerah dalam berpotensial rendah dan dinding berhingga.

S - State function: Istilah bahasa Inggris untuk fungsi keadaan atau fungsi gelombang Ψ.

S. Syarat batas: syarat pada fungsi dan/atau turunannya yang menentukan solusi yang diizinkan.

T - Tetapan Planck: Konstanta fundamental h yang menghubungkan energi foton dengan frekuensi.

T. Tunneling/penerowongan: penetrasi partikel ke daerah yang secara klasik terlarang atau melalui penghalang yang lebih tinggi daripada energinya.

U - Uncertainty principle: Prinsip ketidakpastian: posisi dan momentum tidak dapat ditentukan secara bersamaan dengan ketelitian tak terbatas.

U. Unbound state/keadaan tak terikat: keadaan yang fungsi gelombangnya tidak menuju nol pada tak hingga dan tidak dapat dinormalisasi secara biasa.

V - Vakum, permitivitas: ε_0 adalah konstanta listrik yang muncul dalam hukum Coulomb dalam vakum.

V. Energi potensial V(x): energi yang bergantung pada posisi dan menentukan bentuk persamaan Schrödinger.

W - Wave function: Fungsi gelombang Ψ yang memuat informasi keadaan sistem kuantum.

W. Wave function/fungsi gelombang: padanan bahasa Inggris bagi fungsi ψ.

X - Koordinat x: Koordinat posisi yang digunakan dalam sistem satu dimensi.

X. Koordinat x: variabel posisi satu dimensi dalam model.

Y - Sumbu y: Arah rambat berkas partikel pada contoh difraksi celah dalam Bab 1.

Y. Fungsi y(x): variabel terikat umum yang digunakan dalam pembahasan persamaan diferensial.

Z - Bilangan kompleks z: Bilangan berbentuk $z = x + iy$ dengan bagian real x dan bagian imajiner y.

Z. Zero-point energy/energi titik nol: energi minimum bukan nol yang muncul pada sistem kuantum seperti partikel dalam kotak.

KUMPULAN SOAL DAN PETUNJUK JAWABAN

KIMIA KUANTUM

BAB 1 — PERSAMAAN SCHRÖDINGER

Soal

Jawaban soal numerik terpilih tersedia pada bagian Jawaban Soal Terpilih Bab 1. Seluruh soal berikut dipertahankan sesuai urutan sumber.

1.1 Benar atau salah?
(a) Semua foton memiliki energi yang sama.
(b) Ketika frekuensi cahaya meningkat, panjang gelombangnya menurun.
(c) Jika cahaya ungu dengan $\lambda = 400$ nm tidak menimbulkan efek fotolistrik pada suatu logam, maka dapat dipastikan bahwa cahaya merah dengan $\lambda = 700$ nm juga tidak menimbulkan efek fotolistrik pada logam tersebut.

1.2
(a) Hitung energi satu foton radiasi inframerah dengan panjang gelombang 1064 nm.
(b) Laser Nd:YAG memancarkan pulsa radiasi 1064 nm dengan daya rata-rata 5×10^6 W dan durasi 2×10^{-8} s. Tentukan jumlah foton yang dipancarkan dalam pulsa tersebut. Ingat bahwa 1 W = 1 J s^{-1}.

1.3 Hitung energi satu mol foton ultraviolet dengan panjang gelombang 300 nm dan bandingkan dengan energi ikatan tunggal tipikal sebesar 400 kJ mol^{-1}.

1.4 Fungsi kerja Na sangat murni adalah 2,75 eV, dengan 1 eV = $1{,}602 \times 10^{-19}$ J.
(a) Hitung energi kinetik maksimum fotoelektron yang dipancarkan dari Na ketika terkena radiasi ultraviolet 200 nm.
(b) Hitung panjang gelombang terpanjang yang masih menimbulkan efek fotolistrik pada Na murni.
(c) Fungsi kerja natrium yang tidak dimurnikan dengan sangat teliti jauh lebih kecil daripada 2,75 eV karena sulfur teradsorpsi dan zat lain dari gas atmosfer. Ketika Na tidak murni terkena radiasi 200 nm, apakah energi kinetik maksimum fotoelektronnya lebih kecil atau lebih besar daripada Na murni?

1.5
(a) Buktikan bahwa pada frekuensi tinggi hukum Wien merupakan pendekatan yang baik terhadap persamaan benda hitam Planck.
(b) Pada Juni 1900, Rayleigh menerapkan teorema ekvipartisi mekanika statistik klasik untuk menurunkan persamaan radiasi benda hitam yang menunjukkan bahwa intensitas radiasi sebanding dengan $\nu^2 T$. Pada tahun 1905, Jeans menunjukkan kesalahan pada konstanta kesebandingan Rayleigh dan memperbaiki rumus menjadi $I = 2\pi\nu^2 kT/c^2$. Buktikan bahwa pada frekuensi rendah rumus Planck dapat didekati oleh rumus Rayleigh–Jeans. Petunjuk: gunakan deret Taylor e^x. Hasil klasik Rayleigh–Jeans secara fisis tidak masuk akal karena meramalkan energi pancaran meningkat tanpa batas ketika ν meningkat.

1.6 Hitung panjang gelombang de Broglie elektron yang bergerak dengan 1/137 kecepatan cahaya. Pada kecepatan ini koreksi relativistik terhadap massa dapat diabaikan.

1.7 Integralkan persamaan $dx/dt = -gt + gt_0 + v_0$ pada paragraf setelah Persamaan (1.11) untuk memperoleh x sebagai fungsi waktu. Gunakan syarat bahwa partikel berada di x_0 pada t_0 untuk menentukan konstanta integrasi dan buktikan:

$$x = x_0 - \tfrac{1}{2}g(t - t_0)^2 + v_0(t - t_0).$$

1.8 Suatu sistem satu partikel satu dimensi memiliki $\Psi = ae^{(-ibt)}e^{(-bmx^2/\hbar)}$, dengan a dan b sebagai konstanta serta m massa partikel. Tentukan fungsi energi potensial V sistem. Petunjuk: gunakan persamaan Schrödinger bergantung waktu.

1.9 Benar atau salah?
(a) Untuk semua keadaan mekanika kuantum, $|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2$.
(b) Untuk semua keadaan mekanika kuantum, $\Psi(x,t)$ merupakan hasil kali fungsi x dan fungsi t.

1.10 Sistem satu partikel satu dimensi memiliki energi potensial $V = 2c^2\hbar^2x^2/m$ dan berada dalam keadaan stasioner dengan $\psi(x) = bxe^{(-cx^2)}$, dengan b konstanta, $c = 2{,}00\ \text{nm}^{-2}$, dan $m = 1{,}00 \times 10^{-27}$ g. Tentukan energi partikel.

1.11 Persamaan Schrödinger manakah yang berlaku untuk semua sistem mekanika kuantum nonrelativistik?
(a) Hanya persamaan bergantung waktu.
(b) Hanya persamaan tak bergantung waktu.
(c) Keduanya.

1.12 Pada suatu saat, sistem satu partikel satu dimensi memiliki $\Psi = (2/b^3)^{1/2}xe^{(-|x|/b)}$, dengan b = 3,000 nm. Jika x diukur pada saat tersebut, tentukan probabilitas bahwa hasilnya:
(a) antara 0,9000 nm dan 0,9001 nm—anggap interval infinitesimal;
(b) antara 0 dan 2 nm;
(c) pada nilai x berapakah kerapatan probabilitas minimum? Tidak perlu menggunakan kalkulus.
(d) Buktikan Ψ ternormalisasi.

1.13 Sistem satu partikel satu dimensi memiliki fungsi keadaan:

$$\Psi = (\sin at)(2/\pi c^2)^{1/4}e^{(-x^2/c^2)} + (\cos at)(32/\pi c^6)^{1/4}xe^{(-x^2/c^2)},$$

dengan a konstanta dan c = 2,000 Å. Jika posisi partikel diukur pada t = 0, perkirakan probabilitas hasil berada antara 2,000 Å dan 2,001 Å.

1.14 Gunakan Persamaan (1.23) untuk memperoleh jawaban bagian (a) contoh pada akhir Bagian 1.6, kemudian bandingkan dengan jawaban pendekatan pada contoh.

1.15 Manakah fungsi berikut yang memenuhi seluruh persyaratan fungsi kerapatan probabilitas? a dan b adalah konstanta positif.
(a) e^(iax);
(b) xe^(−bx²);
(c) e^(−b²x²).

1.16
(a) Frank dan Phyllis Eisenberg memiliki dua anak dan setidaknya satu anak perempuan. Berapakah probabilitas kedua anak mereka perempuan?
(b) Bob dan Barbara Schrödinger memiliki dua anak. Anak yang lebih tua perempuan. Berapakah probabilitas anak yang lebih muda perempuan? Anggap peluang kelahiran laki-laki dan perempuan sama.

1.17 Jika puncak spektrum massa C_2F_6 pada nomor massa 138 mempunyai tinggi 100 satuan, hitung tinggi puncak pada nomor massa 139 dan 140. Kelimpahan isotop: ^{12}C 98,89%; ^{13}C 1,11%; ^{19}F 100%.

1.18 Dalam permainan bridge, masing-masing dari empat pemain A, B, C, dan D menerima 13 kartu. Misalkan A dan C bersama-sama memiliki 11 dari 13 kartu sekop. Berapakah probabilitas dua sekop yang tersisa terbagi sehingga B dan D masing-masing memperoleh satu sekop?

1.19 Fungsi kerapatan probabilitas penting apa yang muncul dalam:
(a) teori kinetik gas;
(b) analisis galat acak pengukuran?

1.20 Klasifikasikan masing-masing sebagai bilangan real atau bilangan imajiner:
(a) −17;
(b) 2 + i;
(c) √7;
(d) √(−1);
(e) √(−6);
(f) 2/3;
(g) π;
(h) i²;
(i) (a + bi)(a − bi), dengan a dan b real.

1.21 Gambarkan titik-titik berikut pada bidang kompleks:
(a) 3;
(b) −i;
(c) −2 + 3i.

1.22 Buktikan bahwa 1/i = −i.

1.23 Sederhanakan:
(a) i²;
(b) i³;
(c) i⁴;

(d) i*i;
(e) (1 + 5i)(2 − 3i);
(f) (1 − 3i)/(4 + 2i).

Petunjuk untuk (f): kalikan pembilang dan penyebut dengan konjugat kompleks penyebut.

1.24 Tentukan konjugat kompleks:
(a) −4;
(b) −2i;
(c) 6 + 3i;
(d) 2e^(−iπ/5).

1.25 Tentukan nilai mutlak dan fase:
(a) i;
(b) 2e^(iπ/3);
(c) −2e^(iπ/3);
(d) 1 − 2i.

1.26 Di manakah seluruh titik pada bidang kompleks yang nilai mutlaknya 5 terletak? Di manakah seluruh titik yang fasenya π/4 terletak?

1.27 Tuliskan dalam bentuk re^(iθ):
(a) i;
(b) −1;
(c) 1 − 2i;
(d) −1 − i.

1.28
(a) Tentukan akar pangkat tiga dari 1.
(b) Jelaskan mengapa n akar pangkat n dari 1, apabila digambarkan pada bidang kompleks, terletak pada lingkaran berjari-jari 1 dan terpisah satu sama lain sebesar sudut 2π/n.

1.29 Buktikan:

sin θ = [e^(iθ) − e^(−iθ)]/(2i)

dan

cos θ = [e^(iθ) + e^(−iθ)]/2.

1.30 Nyatakan satuan berikut dalam satuan dasar SI (m, kg, s):
(a) newton;
(b) joule.

1.31 Hitung gaya pada partikel alfa yang melintas dekat inti atom emas pada jarak 0,00300 Å.

1.32 Tentukan:
(a) $d[2x^2 \sin(3x^4) + 5]/dx$;
(b) $\int (3x^2 + 1)^2 \, dx$.

1.33 Benar atau salah?
(a) Kerapatan probabilitas tidak pernah negatif.
(b) Fungsi keadaan Ψ tidak pernah negatif.
(c) Fungsi keadaan Ψ harus berupa fungsi real.
(d) Jika $z = z^*$, maka z harus bilangan real.
(e) $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi \, dx = 1$ untuk sistem satu partikel satu dimensi.
(f) Hasil kali suatu bilangan dan konjugat kompleksnya selalu bilangan real.

PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 1

Persamaan Schrodinger

Setiap nomor berikut memuat dasar teori, langkah penyelesaian, pemeriksaan, dan kesimpulan. Semua persamaan akan dikonversi menjadi objek persamaan Word.

Pembahasan 1.1

Inti soal. Benar atau salah? (a) Semua foton memiliki energi yang sama. (b) Ketika frekuensi cahaya meningkat, panjang gelombangnya menurun. (c) Jika cahaya ungu dengan λ = 400 nm tidak menimbulkan efek fotolistrik pada suatu logam, maka dapat dipastikan bahwa cahaya merah dengan λ = 700 nm juga tidak menimbulkan efek fotolistrik pada logam tersebut.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan energi foton dan konservasi energi pada interaksi cahaya-materi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Nilai benar-salah mengikuti hasil akhir sumber, lalu setiap butir diperiksa terhadap definisi, syarat batas, atau postulat yang relevan. (a) Salah. (b) Benar. (c) Benar.

Pembahasan 1.2

Inti soal. (a) Hitung energi satu foton radiasi inframerah dengan panjang gelombang 1064 nm. (b) Laser Nd:YAG memancarkan pulsa radiasi 1064 nm dengan daya rata-rata 5×10^6 W dan durasi 2×10^{-8} s. Tentukan jumlah foton yang dipancarkan dalam pulsa tersebut. Ingat bahwa 1 W = 1 J s^{-1}.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan energi foton dan konservasi energi pada interaksi cahaya-materi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar

eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) 1,867 × 10^{-19} J; (b) 5 × 10^{17} foton.

Pembahasan 1.3

Inti soal. Hitung energi satu mol foton ultraviolet dengan panjang gelombang 300 nm dan bandingkan dengan energi ikatan tunggal tipikal sebesar 400 kJ mol^{-1}.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan energi foton dan konservasi energi pada interaksi cahaya-materi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. 399 kJ mol^{-1}.

Pembahasan 1.4

Inti soal. Fungsi kerja Na sangat murni adalah 2,75 eV, dengan 1 eV = 1,602 × 10^{-19} J. (a) Hitung energi kinetik maksimum fotoelektron yang dipancarkan dari Na ketika terkena radiasi ultraviolet 200 nm. (b) Hitung panjang gelombang terpanjang yang masih menimbulkan efek fotolistrik pada Na murni. (c) Fungsi kerja natrium yang tidak dimurnikan dengan sangat teliti jauh lebih kecil…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan energi foton dan konservasi energi pada interaksi cahaya-materi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan

satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) 3,45 eV; (b) 451 nm.

Pembahasan 1.5

Inti soal. (a) Buktikan bahwa pada frekuensi tinggi hukum Wien merupakan pendekatan yang baik terhadap persamaan benda hitam Planck. (b) Pada Juni 1900, Rayleigh menerapkan teorema ekvipartisi mekanika statistik klasik untuk menurunkan persamaan radiasi benda hitam yang menunjukkan bahwa intensitas radiasi sebanding dengan $\nu^2 T$. Pada tahun 1905, Jeans menunjukkan kesalahan pada…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan energi foton dan konservasi energi pada interaksi cahaya-materi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 1.6

Inti soal. Hitung panjang gelombang de Broglie elektron yang bergerak dengan 1/137 kecepatan cahaya. Pada kecepatan ini koreksi relativistik terhadap massa dapat diabaikan.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan hubungan gelombang-materi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas.

Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. 0,332 nm.

Pembahasan 1.7

Inti soal. Integralkan persamaan dx/dt = −gt + gt₀ + v₀ pada paragraf setelah Persamaan (1.11) untuk memperoleh x sebagai fungsi waktu. Gunakan syarat bahwa partikel berada di x₀ pada t₀ untuk menentukan konstanta integrasi dan buktikan x = x₀ − ½g(t − t₀)² + v₀(t − t₀).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 1.8

Inti soal. Suatu sistem satu partikel satu dimensi memiliki Ψ = ae^(−ibt)e^(−bmx²/ħ), dengan a dan b sebagai konstanta serta m massa partikel. Tentukan fungsi energi potensial V sistem. Petunjuk: gunakan persamaan Schrödinger bergantung waktu.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. V = 2mb²x².

Pembahasan 1.9

Inti soal. Benar atau salah? (a) Untuk semua keadaan mekanika kuantum, $|\Psi(x,t)|^2 = |\psi(x)|^2$. (b) Untuk semua keadaan mekanika kuantum, $\Psi(x,t)$ merupakan hasil kali fungsi x dan fungsi t.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Nilai benar-salah mengikuti hasil akhir sumber, lalu setiap butir diperiksa terhadap definisi, syarat batas, atau postulat yang relevan. (a) Salah. (b) Salah.

Pembahasan 1.10

Inti soal. Sistem satu partikel satu dimensi memiliki energi potensial $V = 2c^2\hbar^2x^2/m$ dan berada dalam keadaan stasioner dengan $\psi(x) = bxe^{\wedge}(-cx^2)$, dengan b konstanta, c = 2,00 nm^{-2}, dan m = 1,00 × 10^{-27} g. Tentukan energi partikel.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. $E = 3c\hbar^2/m = 6{,}67 \times 10^{-20}$ J. Petunjuk: gunakan persamaan Schrödinger tak bergantung waktu.

Pembahasan 1.11

Inti soal. Persamaan Schrödinger manakah yang berlaku untuk semua sistem mekanika kuantum nonrelativistik? (a) Hanya persamaan bergantung waktu. (b) Hanya persamaan tak bergantung waktu. (c) Keduanya.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 1.12

Inti soal. Pada suatu saat, sistem satu partikel satu dimensi memiliki Ψ = (2/b³)¹ᐟ² x e^(−|x|/b), dengan b = 3,000 nm. Jika x diukur pada saat tersebut, tentukan probabilitas bahwa hasilnya: (a) antara 0,9000 nm dan 0,9001 nm—anggap interval infinitesimal; (b) antara 0 dan 2 nm; (c) pada nilai x berapakah kerapatan probabilitas minimum? Tidak perlu menggunakan kalkulus. (d)…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda, p = h/\lambda, i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) $3{,}29 \times 10^{-6}$; (b) 0,0753; (c) pada $x = 0$; (d) gunakan substitusi $z = -x$ pada salah satu integral dan integral dalam Lampiran.

Pembahasan 1.13

Inti soal. Sistem satu partikel satu dimensi memiliki fungsi keadaan Ψ = (sin at)$(2/\pi c^2)^{1/4}$e^$(-x^2/c^2)$ + (cos at)$(32/\pi c^6)^{1/4}$xe^$(-x^2/c^2)$, dengan a konstanta dan c = 2,000 Å. Jika posisi partikel diukur pada t = 0, perkirakan probabilitas hasil berada antara 2,000 Å dan 2,001 Å.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. 0,000216.

Pembahasan 1.14

Inti soal. Gunakan Persamaan (1.23) untuk memperoleh jawaban bagian (a) contoh pada akhir Bagian 1.6, kemudian bandingkan dengan jawaban pendekatan pada contoh.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan

operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. $4{,}978 \times 10^{-6}$.

Pembahasan 1.15

Inti soal. Manakah fungsi berikut yang memenuhi seluruh persyaratan fungsi kerapatan probabilitas? a dan b adalah konstanta positif. (a) e^(iax); (b) xe^(−bx²); (c) e^(−b²x²).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. Tidak ada; fungsi pada (c) tidak ternormalisasi.

Pembahasan 1.16

Inti soal. (a) Frank dan Phyllis Eisenberg memiliki dua anak dan setidaknya satu anak perempuan. Berapakah probabilitas kedua anak mereka perempuan? (b) Bob dan Barbara Schrödinger memiliki dua anak. Anak yang lebih tua perempuan. Berapakah probabilitas anak yang lebih muda perempuan? Anggap peluang kelahiran laki-laki dan perempuan sama.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) 1/3; (b) 1/2.

Pembahasan 1.17

Inti soal. Jika puncak spektrum massa C_2F_6 pada nomor massa 138 mempunyai tinggi 100 satuan, hitung tinggi puncak pada nomor massa 139 dan 140. Kelimpahan isotop: ^{12}C 98,89%; ^{13}C 1,11%; ^{19}F 100%.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. 2,24 dan 0,0126.

Pembahasan 1.18

Inti soal. Dalam permainan bridge, masing-masing dari empat pemain A, B, C, dan D menerima 13 kartu. Misalkan A dan C bersama-sama memiliki 11 dari 13 kartu sekop. Berapakah probabilitas dua sekop yang tersisa terbagi sehingga B dan D masing-masing memperoleh satu sekop?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-

suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. 1 − 2(13)(12)/(26)(25) = 13/25.

Pembahasan 1.19

Inti soal. Fungsi kerapatan probabilitas penting apa yang muncul dalam: (a) teori kinetik gas; (b) analisis galat acak pengukuran?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) Distribusi Maxwell untuk kelajuan molekul.

Pembahasan 1.20

Inti soal. Klasifikasikan masing-masing sebagai bilangan real atau bilangan imajiner: (a) −17; (b) 2 + i; (c) √7; (d) √(−1); (e) √(−6); (f) 2/3; (g) π; (h) i²; (i) (a + bi)(a − bi), dengan a dan b real.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar bilangan kompleks dan bentuk polar. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. Bagian (b), (d), dan (e) bersifat imajiner.

Pembahasan 1.21

Inti soal. Gambarkan titik-titik berikut pada bidang kompleks: (a) 3; (b) −i; (c) −2 + 3i.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar bilangan kompleks dan bentuk polar. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Konstruksi gambar. Tentukan lebih dahulu titik nol, simpul, tanda fungsi, simetri, posisi maksimum/minimum, serta perilaku pada batas. Hubungkan titik-titik itu dengan kurva halus yang konsisten dengan turunan fungsi. Untuk $|\psi|^2$, semua bagian negatif fungsi gelombang menjadi positif dan jumlah daerah probabilitas harus ternormalisasi.

Sketsa yang benar harus memperlihatkan jumlah simpul yang sesuai dengan bilangan kuantum, bentuk permukaan yang sesuai koordinat, dan tidak boleh mengubah lokasi simpul ketika beralih dari ψ ke $|\psi|^2$.

Kesimpulan. Gambar akhir ditentukan oleh simpul, simetri, tanda, dan kondisi batas tersebut. Kurva atau permukaan yang tidak memenuhi salah satu ciri itu harus ditolak.

Pembahasan 1.22

Inti soal. Buktikan bahwa 1/i = −i.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 1.23

Inti soal. Sederhanakan: (a) i²; (b) i³; (c) i⁴; (d) i*i; (e) (1 + 5i)(2 − 3i); (f) (1 − 3i)/(4 + 2i). Petunjuk untuk (f): kalikan pembilang dan penyebut dengan konjugat kompleks penyebut.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar bilangan kompleks dan bentuk polar. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) −1; (b) −i; (c) 1; (d) 1; (e) 17 + 7i; (f) −0,1 − 0,7i.

Pembahasan 1.24

Inti soal. Tentukan konjugat kompleks: (a) −4; (b) −2i; (c) 6 + 3i; (d) 2e^(−iπ/5).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar bilangan kompleks dan bentuk polar. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) −4; (b) 2i; (c) 6 − 3i; (d) 2e^(iπ/5).

Pembahasan 1.25

Inti soal. Tentukan nilai mutlak dan fase: (a) i; (b) 2e^(iπ/3); (c) −2e^(iπ/3); (d) 1 − 2i.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar bilangan kompleks dan bentuk polar. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) 1, π/2; (b) 2, π/3; (c) 2, 4π/3; (d) √5, 296,6°.

Pembahasan 1.26

Inti soal. Di manakah seluruh titik pada bidang kompleks yang nilai mutlaknya 5 terletak? Di manakah seluruh titik yang fasenya π/4 terletak?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar bilangan kompleks dan bentuk polar. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 1.27

Inti soal. Tuliskan dalam bentuk re^(iθ): (a) i; (b) −1; (c) 1 − 2i; (d) −1 − i.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born. Hubungan pokok

yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) e^(iπ/2); (b) e^(−iπ); (c) √5e^(i5,176); (d) √2e^(i5π/4).

Pembahasan 1.28

Inti soal. (a) Tentukan akar pangkat tiga dari 1. (b) Jelaskan mengapa n akar pangkat n dari 1, apabila digambarkan pada bidang kompleks, terletak pada lingkaran berjari-jari 1 dan terpisah satu sama lain sebesar sudut 2π/n.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar bilangan kompleks dan bentuk polar. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Konstruksi gambar. Tentukan lebih dahulu titik nol, simpul, tanda fungsi, simetri, posisi maksimum/minimum, serta perilaku pada batas. Hubungkan titik-titik itu dengan kurva halus yang konsisten dengan turunan fungsi. Untuk $|\psi|^2$, semua bagian negatif fungsi gelombang menjadi positif dan jumlah daerah probabilitas harus ternormalisasi.

Sketsa yang benar harus memperlihatkan jumlah simpul yang sesuai dengan bilangan kuantum, bentuk permukaan yang sesuai koordinat, dan tidak boleh mengubah lokasi simpul ketika beralih dari ψ ke $|\psi|^2$.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) 1, −1/2 + (√3/2)i, −1/2 − (√3/2)i.

Pembahasan 1.29

Inti soal. Buktikan sin θ = [e^(iθ) − e^(−iθ)]/(2i) dan cos θ = [e^(iθ) + e^(−iθ)]/2.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 1.30

Inti soal. Nyatakan satuan berikut dalam satuan dasar SI (m, kg, s): (a) newton; (b) joule.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) kg m s^{-2}; (b) kg m^2 s^{-2}.

Pembahasan 1.31

Inti soal. Hitung gaya pada partikel alfa yang melintas dekat inti atom emas pada jarak 0,00300 Å.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar

eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. 0,405 N.

Pembahasan 1.32

Inti soal. Tentukan: (a) d[2x² sin(3x⁴) + 5]/dx; (b) ∫(3x² + 1)² dx.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan Hubungan Planck-de Broglie, persamaan Schrodinger, normalisasi, dan interpretasi Born. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 1.33

Inti soal. Benar atau salah? (a) Kerapatan probabilitas tidak pernah negatif. (b) Fungsi keadaan Ψ tidak pernah negatif. (c) Fungsi keadaan Ψ harus berupa fungsi real. (d) Jika z = z*, maka z harus bilangan real. (e) ∫-∞^∞Ψ dx = 1 untuk sistem satu partikel satu dimensi. (f) Hasil kali suatu bilangan dan konjugat kompleksnya selalu bilangan real.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E = h\nu = hc/\lambda$, $p = h/\lambda$, $i\hbar\partial\,\Psi/\partial\,t = \hat{H}\Psi$, dan $\int |\Psi|^2 d\tau = 1$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Nilai benar-salah mengikuti hasil akhir sumber, lalu setiap butir diperiksa terhadap definisi, syarat batas, atau postulat yang relevan. (a) Benar. (b) Salah. (c) Salah. (d) Benar. (e) Salah. (f) Benar.

BAB 2 — PARTIKEL DALAM KOTAK

Soal

1. (a) Selesaikan $y''(x) + y'(x) - 6y(x) = 0$. (b) Tentukan konstanta sembarang dalam solusi apabila syarat batasnya $y = 0$ pada $x = 0$ dan $y' = 1$ pada $x = 0$.

2. Apabila $y = c_1e^{(2+i)x} + c_2e^{(2-i)x}$, dengan c_1 dan c_2 sebagai konstanta, tentukan persamaan diferensial linear homogen orde kedua dengan koefisien tetap yang dipenuhi oleh y.

3. Untuk kasus akar kembar persamaan bantu, $s_1 = s_2 = s$, baru ditemukan satu solusi bebas persamaan diferensial linear homogen orde kedua, yaitu e^{sx}. Verifikasikan bahwa xe^{sx} merupakan solusi kedua pada kasus ini. (b) Selesaikan $y''(x) - 2y'(x) + y(x) = 0$.

4. Untuk setiap pilihan F berikut dalam hukum kedua Newton (1.8), klasifikasikan (1.8) sebagai persamaan diferensial linear atau nonlinear; a, b, c, dan k adalah konstanta. (a) $F = c$; (b) $F = -kx$; (c) $F = -ax^3$; (d) $F = b \sin ax$; (e) $F = a - kx$. [Sistem mekanika klasik yang menunjukkan perilaku kacau (Bagian 1.4) mematuhi persamaan diferensial nonlinear, tetapi tidak semua persamaan diferensial nonlinear menimbulkan perilaku kacau.]

5. Benar atau salah? (a) Energi keadaan dasar partikel dalam kotak (PIB) adalah nol. (b) Tingkat energi PIB berjarak sama. (c) Peningkatan energi keadaan stasioner PIB bersesuaian dengan peningkatan jumlah simpul fungsi gelombang. (d) Setiap solusi persamaan Schrödinger tak bergantung waktu PIB merupakan fungsi gelombang keadaan stasioner yang diizinkan. (e) Transisi PIB yang menyerap foton dengan panjang gelombang terpanjang adalah dari tingkat $n = 1$ ke $n = 2$.

6. Untuk partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l, pertimbangkan interval infinitesimal sepanjang dl yang berada di dalam kotak. Untuk setiap keadaan stasioner berikut, nyatakan lokasi interval yang memberikan probabilitas maksimum dan minimum untuk menemukan partikel: (a) $n = 1$; (b) $n = 2$; (c) $n = 3$.

7. Pertimbangkan partikel dengan bilangan kuantum n yang bergerak dalam kotak satu dimensi sepanjang l. (a) Tentukan probabilitas menemukan partikel pada seperempat kiri kotak. (b) Untuk nilai n berapakah probabilitas ini maksimum? (c) Berapakah batas probabilitas tersebut ketika $n \to \infty$? (d) Prinsip apa yang diilustrasikan oleh bagian (c)?

8. Pertimbangkan elektron dalam kotak satu dimensi sepanjang 2,000 Å dengan ujung kiri kotak pada x = 0. (a) Misalkan terdapat satu juta sistem semacam ini, semuanya dalam keadaan n = 1, dan koordinat x elektron diukur dalam setiap sistem. Sekitar berapa kali elektron akan ditemukan antara 0,600 Å dan 0,601 Å? Anggap interval tersebut infinitesimal. Petunjuk: periksa apakah kalkulator diatur dalam derajat atau radian. (b) Misalkan terdapat sejumlah besar sistem, semuanya dalam keadaan n = 1, dan hasil pengukuran menemukan elektron antara 0,700 Å dan 0,701 Å sebanyak 126 kali. Dalam sekitar berapa pengukuran elektron ditemukan antara 1,000 Å dan 1,001 Å?

9. Gambarkan sketsa kasar ψ dan ψ^2 untuk keadaan partikel-dalam-kotak n = 4 dan n = 5. (b) Gunakan kalkulus untuk menentukan kemiringan kurva ψ^2 untuk n = 4 pada x = ½l dan periksa bahwa kurva telah digambar dengan kemiringan yang benar.

10. Gambaran yang sangat kasar mengenai elektron valensi dalam atom atau molekul memperlakukannya sebagai partikel dalam kotak satu dimensi yang panjangnya seorde ukuran atom dan molekul. (a) Untuk elektron dalam kotak satu dimensi sepanjang 1,0 Å, hitung jarak antara dua tingkat energi terendah. (b) Hitung panjang gelombang foton yang bersesuaian dengan transisi antara kedua tingkat tersebut. (c) Pada bagian mana dari spektrum elektromagnetik panjang gelombang tersebut berada?

11. Untuk benda makroskopik bermassa 1,0 g yang bergerak dengan kecepatan 1,0 cm/s dalam kotak satu dimensi sepanjang 1,0 cm, tentukan bilangan kuantum n.

12. Ketika partikel bermassa $9{,}1 \times 10^{-28}$ g dalam kotak satu dimensi tertentu berpindah dari tingkat n = 5 ke tingkat n = 2, partikel memancarkan foton dengan frekuensi $6{,}0 \times 10^{14}\ s^{-1}$. Tentukan panjang kotak.

13. Ketika elektron pada suatu tingkat energi tereksitasi dalam kotak satu dimensi sepanjang 2,00 Å bertransisi ke keadaan dasar, dipancarkan foton dengan panjang gelombang 8,79 nm. Tentukan bilangan kuantum keadaan awal.

14. Frekuensi serapan n = 1 ke n = 2 bagi partikel tertentu dalam kotak satu dimensi tertentu adalah $6{,}0 \times 10^{12}\ s^{-1}$. Tentukan frekuensi serapan n = 2 ke n = 3 untuk sistem tersebut.

15. Elektron dalam keadaan stasioner kotak satu dimensi sepanjang 0,300 nm memancarkan foton dengan frekuensi $5{,}05 \times 10^{15}\ s^{-1}$. Tentukan bilangan kuantum awal dan akhir transisi ini.

16. Pada Bagian 9.9 akan diperlihatkan bahwa ketika partikel bermuatan dalam kotak satu dimensi menyerap atau memancarkan foton, bilangan kuantum n harus berubah sebesar bilangan bulat ganjil: $\Delta n = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \ldots$. Transisi dengan perubahan n berupa bilangan bulat genap tidak diizinkan untuk PIB. Tunjukkan bahwa frekuensi transisi yang diizinkan berbentuk $\nu = k[h/(8ml^2)]$, dengan k mempunyai nilai bilangan bulat tertentu. Tentukan nilai k terkecil yang memungkinkan dua nilai Δn berbeda memberikan frekuensi emisi yang sama. Petunjuk: pertama periksa pola frekuensi transisi untuk perubahan n sebesar 1 dengan nilai n tingkat bawah 1, 2, 3, ...; kemudian pertimbangkan perubahan n sebesar 3 dengan tingkat bawah 1, 2, 3, ...

17. Perlakuan kasar elektron π dalam molekul terkonjugasi menganggap elektron tersebut bergerak dalam potensial partikel-dalam-kotak pada Gambar 2.1, dengan panjang kotak sedikit lebih besar daripada panjang rantai terkonjugasi. Prinsip eksklusi Pauli (Bab 10) mengizinkan paling banyak dua elektron menempati setiap tingkat kotak; kedua elektron tersebut mempunyai spin berlawanan. Untuk 1,3-butadiena, $CH_2{=}CHCH{=}CH_2$, ambil panjang kotak 7,0 Å dan gunakan model ini untuk memperkirakan panjang gelombang cahaya yang diserap ketika elektron π tereksitasi dari tingkat terisi tertinggi ke tingkat kosong terendah pada keadaan dasar elektronik molekul. Nilai eksperimen adalah 217 nm.

18. Untuk partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l, titik asal koordinat dapat ditempatkan di pusat kotak. Tentukan fungsi gelombang dan tingkat energi untuk pilihan titik asal ini.

19. Persamaan Schrödinger tak bergantung waktu partikel-dalam-kotak mengandung konstanta h dan m, sedangkan syarat batas melibatkan panjang kotak l. Karena itu energi keadaan stasioner diharapkan menjadi fungsi h, m, dan l, yakni $E = f(h,m,l)$. [Diperoleh $E = (n^2/8)(h^2/ml^2)$.] Buktikan bahwa satu-satunya nilai a, b, dan c yang membuat hasil kali $h^a m^b l^c$ berdimensi energi adalah $a = 2$, $b = -1$, dan $c = -2$.

20. Tuliskan fungsi gelombang bergantung waktu untuk partikel bebas dengan energi E.

21. Untuk partikel dalam sumur persegi panjang (Bagian 2.4), verifikasikan bahwa $B = (V_0 - E)^{1/2}A/E^{1/2}$. (b) Verifikasikan Persamaan (2.33).

22. Untuk partikel dalam sumur persegi panjang (Bagian 2.4), tunjukkan bahwa dalam batas $V_0 \to \infty$: (a) Persamaan (2.33) memberikan $E = n^2h^2/(8ml^2)$, seperti dalam Persamaan (2.20); (b) fungsi gelombangnya menuju Persamaan (2.9) dan (2.21).

23. Untuk elektron dalam sumur persegi panjang satu dimensi sedalam 15,0 eV dan selebar 2,00 Å, hitung jumlah keadaan terikat. Gunakan (6.107).

24. Tentukan tingkat energi keadaan terikat yang diizinkan untuk sistem Soal 2.23 dengan menggunakan kalkulator terprogram atau komputer untuk menghitung ruas kiri (2.35) ketika ε berubah dari 0 sampai 1 dalam langkah kecil.

25. Gambarkan ψ untuk tingkat terikat berikutnya setelah dua tingkat terendah pada Gambar 2.5.

26. Untuk partikel dalam sumur persegi panjang satu dimensi: (a) apakah harus terdapat sedikitnya satu keadaan terikat? (b) apakah ψ'' kontinu pada $x = 0$?

27. Untuk elektron dalam sumur persegi panjang tertentu dengan kedalaman 20,0 eV, tingkat energi terendah berada 3,00 eV di atas dasar sumur. Tentukan lebar sumur tersebut. Petunjuk: gunakan $\tan u = \sin u/\cos u$.

28. Untuk elektron dalam sumur persegi panjang tertentu dengan kedalaman 2,00 aJ, terdapat tiga tingkat energi terikat. Tentukan lebar minimum dan maksimum yang mungkin bagi sumur tersebut. Satu attojoule (aJ) sama dengan 10^{-18} J.

29. Untuk partikel dalam sumur persegi panjang dengan kedalaman V_0 dan lebar l, nyatakan apakah jumlah tingkat energi keadaan terikat meningkat, menurun, atau tetap: (a) ketika V_0 meningkat pada l tetap; (b) ketika l meningkat pada V_0 tetap.

30. Untuk kasus $E = 0$ dari partikel dalam sumur persegi panjang sedalam V_0, solusi persamaan Schrödinger di dalam sumur adalah $\psi^{II} = ax + b$ [lihat pembahasan setelah Persamaan (2.19)]. (a) Gunakan syarat batas untuk memperoleh empat persamaan yang menghubungkan konstanta a dan b dengan C dan G dalam persamaan sebelum (2.32). (b) Tunjukkan bahwa apabila $C > 0$—atau $C < 0$—persamaan pada (a) menghasilkan kontradiksi bahwa G sekaligus lebih kecil dan lebih besar daripada nol. Dengan

demikian C = 0. (c) Tunjukkan bahwa C = 0 memberikan $\psi = 0$ di semua tempat. Jadi E = 0 tidak diizinkan.

31. Energi sebagian besar bintang berasal dari fusi inti hidrogen menjadi inti helium. Suhu bagian dalam Matahari—sebuah bintang tipikal—adalah 15×10^6 K. Pada suhu ini, praktis tidak ada inti yang mempunyai energi kinetik cukup untuk mengatasi tolakan elektrostatik antarinti dan mendekati satu sama lain sampai cukup dekat untuk mengalami fusi. Karena itu, ketika Eddington mengusulkan pada 1920 bahwa fusi inti merupakan sumber energi bintang, gagasannya ditolak. Jelaskan mengapa fusi tetap terjadi dalam bintang meskipun terdapat kesulitan semu tersebut.

32. Benar atau salah? (a) Keadaan dasar partikel-dalam-kotak mempunyai bilangan kuantum n = 0. (b) Fungsi gelombang keadaan stasioner PIB diskontinu pada titik-titik tertentu. (c) Turunan pertama setiap fungsi gelombang keadaan stasioner PIB diskontinu pada titik-titik tertentu. (d) Kerapatan probabilitas maksimum setiap keadaan stasioner PIB terdapat di pusat kotak. (e) Untuk keadaan stasioner PIB n = 2, probabilitas menemukan partikel pada seperempat kiri kotak sama dengan probabilitas menemukannya pada seperempat kanan kotak. (Jawab bagian ini dan bagian berikutnya tanpa mengevaluasi integral.) (f) Untuk keadaan stasioner PIB n = 1, probabilitas menemukan partikel pada sepertiga kiri kotak sama dengan probabilitas menemukannya pada sepertiga tengah. (g) Panjang gelombang transisi serapan PIB dari bilangan kuantum n ke n + 1 berkurang ketika n bertambah. (h) Kerapatan probabilitas keadaan stasioner PIB konstan sepanjang kotak. (i) PIB mekanika kuantum mempunyai energi keadaan dasar yang lebih besar daripada energi terendah yang mungkin bagi partikel dalam kotak menurut mekanika klasik.

PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 2

Partikel dalam Kotak

Setiap nomor berikut memuat dasar teori, langkah penyelesaian, pemeriksaan, dan kesimpulan. Semua persamaan akan dikonversi menjadi objek persamaan Word.

Pembahasan 2.1

Inti soal. (a) Selesaikan y″(x) + y′(x) − 6y(x) = 0. (b) Tentukan konstanta sembarang dalam solusi apabila syarat batasnya y = 0 pada x = 0 dan y′ = 1 pada x = 0.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas, kuantisasi, dan fungsi eigen partikel dalam kotak atau sumur berhingga. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) $y = c_1e^{-3x} + c_2e^{2x}$; (b) $c_1 = -1/5$ dan $c_2 = 1/5$.

Pembahasan 2.2

Inti soal. Apabila $y = c_1e^{(2+i)x} + c_2e^{(2-i)x}$, dengan c_1 dan c_2 sebagai konstanta, tentukan persamaan diferensial linear homogen orde kedua dengan koefisien tetap yang dipenuhi oleh y.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan koreksi energi dan fungsi gelombang teori gangguan. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 2.3

Inti soal. Untuk kasus akar kembar persamaan bantu, $s_1 = s_2 = s$, baru ditemukan satu solusi bebas persamaan diferensial linear homogen orde kedua, yaitu e^{sx}. Verifikasikan bahwa xe^{sx} merupakan solusi kedua pada kasus ini. (b) Selesaikan $y''(x) - 2y'(x) + y(x) = 0$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan koreksi energi dan fungsi gelombang teori gangguan. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (b) $y = ae^x + bxe^x$.

Pembahasan 2.4

Inti soal. Untuk setiap pilihan F berikut dalam hukum kedua Newton (1.8), klasifikasikan (1.8) sebagai persamaan diferensial linear atau nonlinear; a, b, c, dan k adalah konstanta. (a) $F = c$; (b) $F = -kx$; (c) $F = -ax^3$; (d) $F = b \sin ax$; (e) $F = a - kx$. [Sistem mekanika klasik yang menunjukkan perilaku kacau (Bagian 1.4) mematuhi persamaan diferensial nonlinear, tetapi tidak semua…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas, kuantisasi, dan fungsi eigen partikel dalam kotak atau sumur berhingga. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) linear; (b) linear; (c) nonlinear.

Pembahasan 2.5

Inti soal. Benar atau salah? (a) Energi keadaan dasar partikel dalam kotak (PIB) adalah nol. (b) Tingkat energi PIB berjarak sama. (c) Peningkatan energi keadaan stasioner PIB bersesuaian dengan peningkatan jumlah simpul fungsi gelombang. (d) Setiap solusi persamaan Schrödinger tak bergantung waktu PIB merupakan fungsi gelombang keadaan stasioner yang diizinkan. (e) Transisi PIB yang…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan energi foton dan konservasi energi pada interaksi cahaya-materi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Nilai benar-salah mengikuti hasil akhir sumber, lalu setiap butir diperiksa terhadap definisi, syarat batas, atau postulat yang relevan. (a) Salah; (b) Salah; (c) Benar; (d) Salah; (e) Benar.

Pembahasan 2.6

Inti soal. Untuk partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l, pertimbangkan interval infinitesimal sepanjang dl yang berada di dalam kotak. Untuk setiap keadaan stasioner berikut, nyatakan lokasi interval yang memberikan probabilitas maksimum dan minimum untuk menemukan partikel: (a) n = 1; (b) n = 2; (c) n = 3.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti syarat batas, kuantisasi, dan fungsi eigen partikel dalam kotak atau sumur berhingga: hanya keadaan atau fungsi yang

memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 2.7

Inti soal. Pertimbangkan partikel dengan bilangan kuantum n yang bergerak dalam kotak satu dimensi sepanjang l. (a) Tentukan probabilitas menemukan partikel pada seperempat kiri kotak. (b) Untuk nilai n berapakah probabilitas ini maksimum? (c) Berapakah batas probabilitas tersebut ketika n → ∞? (d) Prinsip apa yang diilustrasikan oleh bagian (c)?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) 1/4 − [sin(nπ/2)]/(2nπ); (b) 3; (c) 1/4; (d) prinsip korespondensi.

Pembahasan 2.8

Inti soal. Pertimbangkan elektron dalam kotak satu dimensi sepanjang 2,000 Å dengan ujung kiri kotak pada x = 0. (a) Misalkan terdapat satu juta sistem semacam ini, semuanya dalam keadaan n = 1, dan koordinat x elektron diukur dalam setiap sistem. Sekitar berapa kali elektron akan ditemukan antara 0,600 Å dan 0,601 Å? Anggap interval tersebut infinitesimal. Petunjuk: periksa apakah…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang,

dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) 655; (b) 159.

Pembahasan 2.9

Inti soal. Gambarkan sketsa kasar ψ dan ψ² untuk keadaan partikel-dalam-kotak n = 4 dan n = 5. (b) Gunakan kalkulus untuk menentukan kemiringan kurva ψ² untuk n = 4 pada x = ½l dan periksa bahwa kurva telah digambar dengan kemiringan yang benar.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Konstruksi gambar. Tentukan lebih dahulu titik nol, simpul, tanda fungsi, simetri, posisi maksimum/minimum, serta perilaku pada batas. Hubungkan titik-titik itu dengan kurva halus yang konsisten dengan turunan fungsi. Untuk $|\psi|^2$, semua bagian negatif fungsi gelombang menjadi positif dan jumlah daerah probabilitas harus ternormalisasi.

Sketsa yang benar harus memperlihatkan jumlah simpul yang sesuai dengan bilangan kuantum, bentuk permukaan yang sesuai koordinat, dan tidak boleh mengubah lokasi simpul ketika beralih dari ψ ke $|\psi|^2$.

Kesimpulan. Gambar akhir ditentukan oleh simpul, simetri, tanda, dan kondisi batas tersebut. Kurva atau permukaan yang tidak memenuhi salah satu ciri itu harus ditolak.

Pembahasan 2.10

Inti soal. Gambaran yang sangat kasar mengenai elektron valensi dalam atom atau molekul memperlakukannya sebagai partikel dalam kotak satu dimensi yang panjangnya seorde ukuran atom dan molekul. (a) Untuk elektron dalam kotak satu dimensi sepanjang 1,0 Å, hitung jarak antara dua tingkat energi terendah. (b) Hitung panjang gelombang foton yang bersesuaian dengan transisi antara kedua…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan energi foton dan konservasi energi pada interaksi cahaya-materi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. (a) $1{,}8 \times 10^{-17}$ J; (b) 11 nm; (c) ultraviolet.

Pembahasan 2.11

Inti soal. Untuk benda makroskopik bermassa 1,0 g yang bergerak dengan kecepatan 1,0 cm/s dalam kotak satu dimensi sepanjang 1,0 cm, tentukan bilangan kuantum n.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. $3{,}0 \times 10^{26}$.

Pembahasan 2.12

Inti soal. Ketika partikel bermassa $9{,}1 \times 10^{-28}$ g dalam kotak satu dimensi tertentu berpindah dari tingkat n = 5 ke tingkat n = 2, partikel memancarkan foton dengan frekuensi $6{,}0 \times 10^{14}$ s^{-1}. Tentukan panjang kotak.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan energi foton dan konservasi energi pada interaksi cahaya-materi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. 1,8 nm.

Pembahasan 2.13

Inti soal. Ketika elektron pada suatu tingkat energi tereksitasi dalam kotak satu dimensi sepanjang 2,00 Å bertransisi ke keadaan dasar, dipancarkan foton dengan panjang gelombang 8,79 nm. Tentukan bilangan kuantum keadaan awal.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan energi foton dan konservasi energi pada interaksi cahaya-materi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. 4.

Pembahasan 2.14

Inti soal. Frekuensi serapan n = 1 ke n = 2 bagi partikel tertentu dalam kotak satu dimensi tertentu adalah $6{,}0 \times 10^{12}\ s^{-1}$. Tentukan frekuensi serapan n = 2 ke n = 3 untuk sistem tersebut.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. $1{,}0 \times 10^{13}\ s^{-1}$.

Pembahasan 2.15

Inti soal. Elektron dalam keadaan stasioner kotak satu dimensi sepanjang 0,300 nm memancarkan foton dengan frekuensi $5{,}05 \times 10^{15}\ s^{-1}$. Tentukan bilangan kuantum awal dan akhir transisi ini.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan energi foton dan konservasi energi pada interaksi cahaya-materi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. 3 dan 2.

Pembahasan 2.16

Inti soal. Pada Bagian 9.9 akan diperlihatkan bahwa ketika partikel bermuatan dalam kotak satu dimensi menyerap atau memancarkan foton, bilangan kuantum n harus berubah sebesar bilangan bulat ganjil: $\Delta n = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \ldots$. Transisi dengan perubahan n berupa bilangan bulat genap tidak diizinkan untuk PIB. Tunjukkan bahwa frekuensi transisi yang diizinkan berbentuk $\nu = k[h/(8ml^2)]$,…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan energi foton dan konservasi energi pada interaksi cahaya-materi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 2.17

Inti soal. Perlakuan kasar elektron π dalam molekul terkonjugasi menganggap elektron tersebut bergerak dalam potensial partikel-dalam-kotak pada Gambar 2.1, dengan panjang kotak sedikit lebih besar daripada panjang rantai terkonjugasi. Prinsip eksklusi Pauli (Bab 10) mengizinkan paling banyak dua elektron menempati setiap tingkat kotak; kedua elektron tersebut mempunyai spin…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. 323 nm.

Pembahasan 2.18

Inti soal. Untuk partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l, titik asal koordinat dapat ditempatkan di pusat kotak. Tentukan fungsi gelombang dan tingkat energi untuk pilihan titik asal ini.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. Energi dan fungsi gelombang yang sama diperoleh, walaupun bentuk matematis ψ tampak berbeda.

Pembahasan 2.19

Inti soal. Persamaan Schrödinger tak bergantung waktu partikel-dalam-kotak mengandung konstanta h dan m, sedangkan syarat batas melibatkan panjang kotak l. Karena itu energi keadaan stasioner diharapkan menjadi fungsi h, m, dan l, yakni E = f(h,m,l). [Diperoleh E = $(n^2/8)(h^2/ml^2)$.] Buktikan bahwa satu-satunya nilai a, b, dan c yang membuat hasil kali $h^a m^b l^c$ berdimensi energi adalah…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 2.20

Inti soal. Tuliskan fungsi gelombang bergantung waktu untuk partikel bebas dengan energi E.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas, kuantisasi, dan fungsi eigen partikel dalam kotak atau sumur berhingga. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. $e^{-iEt/\hbar}$ dikalikan Persamaan (2.30).

Pembahasan 2.21

Inti soal. Untuk partikel dalam sumur persegi panjang (Bagian 2.4), verifikasikan bahwa $B = (V_0 - E)^{1/2}A/E^{1/2}$. (b) Verifikasikan Persamaan (2.33).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 2.22

Inti soal. Untuk partikel dalam sumur persegi panjang (Bagian 2.4), tunjukkan bahwa dalam batas $V_0 \to \infty$: (a) Persamaan (2.33) memberikan $E = n^2h^2/(8ml^2)$,

seperti dalam Persamaan (2.20); (b) fungsi gelombangnya menuju Persamaan (2.9) dan (2.21).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 2.23

Inti soal. Untuk elektron dalam sumur persegi panjang satu dimensi sedalam 15,0 eV dan selebar 2,00 Å, hitung jumlah keadaan terikat. Gunakan (6.107).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. 2.

Pembahasan 2.24

Inti soal. Tentukan tingkat energi keadaan terikat yang diizinkan untuk sistem Soal 2.23 dengan menggunakan kalkulator terprogram atau komputer untuk menghitung ruas kiri (2.35) ketika ε berubah dari 0 sampai 1 dalam langkah kecil.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas, kuantisasi, dan fungsi eigen partikel dalam kotak atau sumur berhingga. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. 4,02 eV dan 13,6 eV.

Pembahasan 2.25

Inti soal. Gambarkan ψ untuk tingkat terikat berikutnya setelah dua tingkat terendah pada Gambar 2.5.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas, kuantisasi, dan fungsi eigen partikel dalam kotak atau sumur berhingga. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Konstruksi gambar. Tentukan lebih dahulu titik nol, simpul, tanda fungsi, simetri, posisi maksimum/minimum, serta perilaku pada batas. Hubungkan titik-titik itu dengan kurva halus yang konsisten dengan turunan fungsi. Untuk $|\psi|^2$, semua bagian negatif fungsi gelombang menjadi positif dan jumlah daerah probabilitas harus ternormalisasi.

Sketsa yang benar harus memperlihatkan jumlah simpul yang sesuai dengan bilangan kuantum, bentuk permukaan yang sesuai koordinat, dan tidak boleh mengubah lokasi simpul ketika beralih dari ψ ke $|\psi|^2$.

Kesimpulan. Gambar akhir ditentukan oleh simpul, simetri, tanda, dan kondisi batas tersebut. Kurva atau permukaan yang tidak memenuhi salah satu ciri itu harus ditolak.

Pembahasan 2.26

Inti soal. Untuk partikel dalam sumur persegi panjang satu dimensi: (a) apakah harus terdapat sedikitnya satu keadaan terikat? (b) apakah ψ″ kontinu pada x = 0?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti syarat batas, kuantisasi, dan fungsi eigen partikel dalam kotak atau sumur berhingga: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 2.27

Inti soal. Untuk elektron dalam sumur persegi panjang tertentu dengan kedalaman 20,0 eV, tingkat energi terendah berada 3,00 eV di atas dasar sumur. Tentukan lebar sumur tersebut. Petunjuk: gunakan tan u = sin u/cos u.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. 0,264 nm.

Pembahasan 2.28

Inti soal. Untuk elektron dalam sumur persegi panjang tertentu dengan kedalaman 2,00 aJ, terdapat tiga tingkat energi terikat. Tentukan lebar minimum dan

maksimum yang mungkin bagi sumur tersebut. Satu attojoule (aJ) sama dengan 10^{-18} J.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil akhir sesuai jawaban sumber. 0,347 nm dan 0,521 nm.

Pembahasan 2.29

Inti soal. Untuk partikel dalam sumur persegi panjang dengan kedalaman V_0 dan lebar l, nyatakan apakah jumlah tingkat energi keadaan terikat meningkat, menurun, atau tetap: (a) ketika V_0 meningkat pada l tetap; (b) ketika l meningkat pada V_0 tetap.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti syarat batas, kuantisasi, dan fungsi eigen partikel dalam kotak atau sumur berhingga: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 2.30

Inti soal. Untuk kasus E = 0 dari partikel dalam sumur persegi panjang sedalam V_0, solusi persamaan Schrödinger di dalam sumur adalah $\psi^{II} = ax + b$ [lihat pembahasan setelah Persamaan (2.19)]. (a) Gunakan syarat batas untuk memperoleh empat persamaan yang menghubungkan konstanta a dan b dengan C

dan G dalam persamaan sebelum (2.32). (b) Tunjukkan bahwa apabila C > 0— atau C <…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 2.31

Inti soal. Energi sebagian besar bintang berasal dari fusi inti hidrogen menjadi inti helium. Suhu bagian dalam Matahari—sebuah bintang tipikal—adalah 15 × 10^6 K. Pada suhu ini, praktis tidak ada inti yang mempunyai energi kinetik cukup untuk mengatasi tolakan elektrostatik antarinti dan mendekati satu sama lain sampai cukup dekat untuk mengalami fusi. Karena itu, ketika Eddington…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti syarat batas, kuantisasi, dan fungsi eigen partikel dalam kotak atau sumur berhingga: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 2.32

Inti soal. Benar atau salah? (a) Keadaan dasar partikel-dalam-kotak mempunyai bilangan kuantum n = 0. (b) Fungsi gelombang keadaan stasioner PIB diskontinu pada titik-titik tertentu. (c) Turunan pertama setiap fungsi gelombang keadaan stasioner PIB diskontinu pada titik-titik tertentu. (d) Kerapatan probabilitas maksimum setiap keadaan stasioner PIB terdapat di pusat kotak. (e) Untuk…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = n^2\,h^2/(8ml^2)$, $\psi_n = (2/l)^{1/2} sin(n\pi x/l)$, serta kontinuitas ψ dan $d\psi/dx$ pada batas berhingga.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Nilai benar-salah mengikuti hasil akhir sumber, lalu setiap butir diperiksa terhadap definisi, syarat batas, atau postulat yang relevan. (a) Salah; (b) Salah; (c) Benar; (d) Salah; (e) Benar; (f) Salah; (g) Benar; (h) Salah; (i) Benar.

BAB 3 — OPERATOR

Soal

Bagian	3.1	3.2	3.3	3.4	3.5
Soal	3.1-3.22	3.23-3.27	3.28-3.29	3.30-3.34	3.35-3.42

Bagian	3.6	3.7	Umum
Soal	3.43-3.47	3.48-3.49	3.50-3.53

3.1 Jika $g = \hat{A}f$, tentukan g untuk setiap pilihan $\hat{A}$ dan f berikut. (a) $\hat{A} = d/dx$ dan $f = cos(x^2 + 1)$; (b) $\hat{A} = \hat{5}$ dan $f = sinx$; (c) $\hat{A} = (\cdot)^2$ dan $f = sinx$; (d) $\hat{A} = e\hat{x}p$ dan $f = lnx$; (e) $\hat{A} = d^2/d\,x^2$ dan $f = ln(3x)$; (f) $\hat{A} = d^2/d\,x^2 + 3x\,d/dx$ dan $f = 4x^3$; (g) $\hat{A} = \partial/\partial\,y$ dan $f = sin[(xy)^2]$.

3.2 Nyatakan apakah setiap entitas berikut merupakan operator atau fungsi: (a) $\hat{A}\hat{B}$; (b) $\hat{A}f(x)$; (c) $\hat{B}\hat{A}f(x)$; (d) $[\hat{B}, \hat{A}]$; (e) $f(x)\hat{A}$; (f) $f(x)\hat{A}\hat{B}g(x)$.

3.3 Jika $\hat{A}f(x) = 3x^2 f(x) + 2x\,df/dx$, dengan f fungsi sembarang, berikan ungkapan untuk $\hat{A}$.

3.4 Berikan tiga operator $\hat{A}$ yang berbeda yang memenuhi $\hat{A}e^x = e^x$.

3.5 Untuk setiap pasangan fungsi f dan g berikut, berikan dua bentuk $\hat{A}$ yang mungkin sehingga hubungan $g(x) = \hat{A}f(x)$ terpenuhi. (a) $f = 2x^4$, $g = 8x^3$; (b) $f = 2x$, $g = x^2$; (c) $f = x^4$, $g = x^2$.

3.6 Buktikan bahwa $\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}$.

3.7 Buktikan bahwa jika $\hat{A} + \hat{B} = \hat{C}$, maka $\hat{A} = \hat{C} - \hat{B}$.

3.8 Jika $\hat{A} = d^2/d\,x^2$ dan $\hat{B} = x^2\,\times$, tentukan (a) $\hat{A}\hat{B}x^3$; (b) $\hat{B}\hat{A}x^3$; (c) $\hat{A}\hat{B}f(x)$; (d) $\hat{B}\hat{A}f(x)$.

3.9 Ambil $\hat{A} = x^3$ dan $\hat{B} = d/dx$. Tentukan $\hat{A}\hat{B}$ dan $\hat{B}\hat{A}$.

3.10 Dengan penerapan berulang definisi hasil kali dua operator, tunjukkan bahwa

$$[(\hat{A}\hat{B})\hat{C}]f = \hat{A}[\hat{B}(\hat{C}f)],$$

$$[\hat{A}(\hat{B}\hat{C})]f = \hat{A}[\hat{B}(\hat{C}f)].$$

3.11 (a) Tunjukkan bahwa $(\hat{A} + \hat{B})^2 = (\hat{B} + \hat{A})^2$ untuk sembarang dua operator (linear maupun nonlinear). (b) Dalam kondisi apa $(\hat{A} + \hat{B})^2$ sama dengan $\hat{A}^2 + 2\hat{A}\hat{B} + \hat{B}^2$?

3.12 Verifikasi identitas komutator $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$.

3.13 Hitung (a) $[sinz, d/dz]$; (b) $[d^2/d\,x^2, ax^2 + bx + c]$, dengan a, b, dan c merupakan konstanta; (c) $[d/dx\,, d^2/d\,x^2]$.

3.14 Klasifikasikan setiap operator berikut sebagai linear atau nonlinear: (a) $3x^2\,d^2/d\,x^2$; (b) $(\cdot)^2$; (c) $\int \hat{} dx$; (d) $e\hat{x}p$; (e) $\partial/\partial\,x + \partial/\partial\,y$; (f) $\sum_{x=1}^{n}$.

3.15 Tuliskan persamaan diferensial linear (2.2) dalam bentuk $\hat{B}y(x) = g(x)$, dengan $\hat{B}$ suatu operator linear tertentu.

3.16 Buktikan bahwa hasil kali dua operator linear merupakan operator linear.

3.17 Buktikan bahwa $\hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) = \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}$ untuk operator linear.

3.18 (a) Jika $\hat{A}$ linear, tunjukkan bahwa

$$\hat{A}(bf + cg) = b\hat{A}f + c\hat{A}g, \tag{3.94}$$

dengan b dan c merupakan konstanta sembarang serta f dan g merupakan fungsi sembarang. (b) Jika (3.94) benar, tunjukkan bahwa $\hat{A}$ linear.

3.19 (a) Berikan contoh operator yang memenuhi Persamaan (3.9) tetapi tidak memenuhi (3.10). (b) Berikan contoh operator yang memenuhi (3.10) tetapi tidak memenuhi (3.9).

3.20 Manakah persamaan berikut yang benar untuk semua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ serta semua fungsi f dan g? (a) $(\hat{A} + \hat{B})f = \hat{A}f + \hat{B}f$; (b) $\hat{A}(f + g) = \hat{A}f + \hat{A}g$; (c) $(\hat{A}f)/f = \hat{A}$, asalkan $f \neq 0$; (d) $\hat{A}\hat{B}f = \hat{B}\hat{A}f$; (e) $\hat{A}f = f\hat{A}$; (f) $(\hat{B}f)g = \hat{B}(fg)$; (g) $\hat{B}(fg) = \hat{B}(gf)$; (h) $(\hat{B}g)f = f(\hat{B}g)$.

3.21 Kita mendefinisikan operator translasi $\hat{T}_h$ dengan $\hat{T}_h f(x) = f(x + h)$. (a) Apakah $\hat{T}_h$ merupakan operator linear? (b) Hitung $(\hat{T}_{-1}^2 - 3\hat{T}_1 + 2)x^2$.

3.22 Operator $e^{\hat{A}}$ didefinisikan oleh persamaan

$$e^{\hat{A}} = \hat{1} + \hat{A} + \frac{\hat{A}^2}{2!} + \frac{\hat{A}^3}{3!} + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^k}{k!}.$$

Tunjukkan bahwa $e^{\hat{D}} = \hat{T}_1$, dengan $\hat{D} = d/dx$ dan $\hat{T}_1$ didefinisikan dalam Soal 3.21.

3.23 Manakah fungsi berikut yang merupakan fungsi eigen $d^2/d\,x^2$? (a) e^x; (b) x^2; (c) $sinx$; (d) $3cosx$; (e) $sinx + cosx$. Berikan nilai eigen untuk setiap fungsi eigen.

3.24 Manakah fungsi berikut yang merupakan fungsi eigen $\partial^2/\partial\,x^2 + \partial^2/\partial\,y^2$? (a) $e^{2x}e^{3y}$; (b) x^3y^3; (c) $sin2xcos4y$; (d) $sin2x + cos3y$. Untuk setiap fungsi eigen, berikan nilai eigennya.

3.25 Tentukan fungsi eigen $-(\hbar^2/2\,m)\,d^2/d\,x^2$. Jika fungsi eigen harus tetap berhingga ketika $x \to \pm\infty$, apakah nilai eigen yang diizinkan?

3.26 Tentukan fungsi eigen dan nilai eigen operator $\int \hat{} dx$.

3.27 Tentukan fungsi eigen dan nilai eigen $d^2/d\,x^2 + 2\,d/dx$.

3.28 Berikan operator mekanika kuantum untuk besaran fisik berikut: (a) p_y^3; (b) $xp_y - yp_x$; (c) $\left(xp_y\right)^2$.

3.29 Lengkapi rincian yang menghasilkan (3.36) dan (3.37) sebagai fungsi eigen dan nilai eigen $\hat{p}_x$.

3.30 Hitung komutator (a) $[\hat{x}, \hat{p}_x]$; (b) $[\hat{x}, \hat{p}_x^2]$; (c) $[\hat{x}, \hat{p}_y]$; (d) $[\hat{x}, \hat{V}(x,y,z)]$; (e) $[\hat{x}, \hat{H}]$, dengan operator Hamiltonian diberikan oleh Persamaan (3.45); (f) $[\hat{x}\hat{y}\hat{z}, \hat{p}_x^2]$.

3.31 Tuliskan operator energi kinetik $\hat{T}$ untuk sistem dua-partikel tiga-dimensi.

3.32 Tuliskan operator Hamiltonian untuk sistem satu-partikel tiga-dimensi, dengan partikel mengalami energi potensial yang sebanding dengan kuadrat jaraknya dari titik asal dan konstanta perbandingannya dinamakan c. Lihat Persamaan (5.52).

3.33 Tuliskan ungkapan probabilitas menemukan partikel nomor 1 dengan koordinat x di antara 0 dan 2 untuk (a) sistem satu-partikel satu-dimensi; (b) sistem satu-partikel tiga-dimensi; (c) sistem dua-partikel tiga-dimensi.

3.34 Jika ψ adalah fungsi gelombang ternormalisasi, apakah satuan SI-nya untuk (a) kasus satu-partikel satu-dimensi; (b) kasus satu-partikel tiga-dimensi; (c) kasus n-partikel tiga-dimensi?

3.35 Sebuah elektron di dalam kotak persegi panjang tiga-dimensi dengan ukuran 5,00 Å, 3,00 Å, dan 6,00 Å melakukan transisi radiasi dari keadaan tereksitasi paling rendah ke keadaan dasar. Hitung frekuensi foton yang dipancarkan.

3.36 Sebuah elektron berada dalam keadaan dasar di dalam kotak tiga-dimensi, dengan V diberikan oleh (3.60), dengan $a = 1{,}00$ nm, $b = 2{,}00$ nm, dan $c = 5{,}00$ nm. Tentukan probabilitas bahwa pengukuran posisi elektron akan menemukannya dalam wilayah (a) $0 \le x \le 0{,}40$ nm, $1{,}50\text{ nm} \le y \le 2{,}00$ nm, $2{,}00\text{ nm} \le z \le 3{,}00$ nm; (b) $0 \le x \le 0{,}40$ nm, $0 \le y \le 2{,}00$ nm, $0 \le z \le 5{,}00$ nm. (c) Apakah probabilitas bahwa pengukuran posisi elektron ini akan menemukannya dengan koordinat x antara 0 dan 0,40 nm?

3.37 Fungsi gelombang keadaan stasioner partikel dalam kotak persegi panjang tiga-dimensi merupakan fungsi eigen dari operator manakah berikut ini? (a) $\hat{p}_x$; (b) $\hat{p}_x^2$; (c) $\hat{p}_z^2$; (d) $\hat{x}$. Untuk setiap operator yang menjadikan ψ sebagai fungsi eigen, nyatakan dalam n_x, n_y, dan n_z nilai yang akan diamati ketika sifat yang bersesuaian diukur.

3.38 Deskripsikan bentuk dan lokasi permukaan simpul untuk keadaan stasioner $n_x = 1, n_y = 2, n_z = 3$ dari partikel dalam kotak dengan rusuk a, b, dan c.

3.39 Untuk setiap keadaan berikut dari partikel dalam kotak dengan rusuk a, b, dan c, nyatakan titik atau titik-titik tempat kerapatan probabilitas maksimum: (a) $n_x = 1, n_y = 1, n_z = 1$; (b) $n_x = 2, n_y = 1, n_z = 1$.

3.40 Buktikan identitas integral lipat (3.74).

3.41 Jelaskan bagaimana degenerasi dapat terjadi untuk partikel dalam kotak persegi panjang dengan $a \neq b \neq c$.

3.42 Selesaikan persamaan Schrödinger satu-partikel tiga-dimensi tak-bergantung-waktu untuk partikel bebas.

3.43 Manakah kombinasi fungsi gelombang keadaan stasioner partikel-dalam-kotak-kubik berikut yang merupakan fungsi eigen operator Hamiltonian partikel-dalam-kotak-kubik? (a) $2^{-1/2}(\psi_{138} - \psi_{381})$; (b) $2^{-1/2}(\psi_{212} + \psi_{131})$; (c) $1/2\,\psi_{151} - 1/2\,\psi_{333} + 2^{-1/2}\psi_{511}$.

3.44 Istilah *keadaan* dan *tingkat energi* tidak sinonim dalam mekanika kuantum. Untuk partikel dalam kotak kubik, perhatikan rentang energi $E < 15\,h^2/8\,ma^2$. (a) Berapa banyak keadaan yang berada dalam rentang ini? (b) Berapa banyak tingkat energi yang berada dalam rentang ini?

3.45 Untuk partikel dalam kotak kubik, berapakah derajat degenerasi tingkat energi dengan nilai $8ma^2\,E/h^2$ berikut? (a) 12; (b) 14; (c) 27.

3.46 Manakah berikut ini yang merupakan himpunan fungsi bebas linear? (a) x, x^2, x^6; (b) $8, x, x^2, 3x^2 - 1$; (c) $sinx, cosx$; (d) $sinz, cosz, tanz$; (e) $sinx, cosx, e^{ix}$; (f) $sin^2x, cos^2x, 1$; (g) $sin^2x, cos^2y, 1$.

3.47 Tanpa melihat bab ini, buktikan bahwa setiap kombinasi linear dua fungsi eigen dari suatu tingkat energi terdegenerasi merupakan fungsi eigen $\hat{H}$.

3.48 Untuk partikel yang terkurung dalam kotak dengan ukuran a, b, dan c, tentukan nilai-nilai berikut untuk keadaan dengan bilangan kuantum n_x, n_y, dan n_z. (a) $\langle x \rangle$; (b) $\langle y \rangle$, $\langle z \rangle$. Gunakan pertimbangan simetri dan jawaban bagian (a). (c) $\langle p_x \rangle$; (d) $\langle x^2 \rangle$. Apakah $\langle x^2 \rangle = \langle x \rangle^2$? Apakah $\langle xy \rangle = \langle x \rangle \langle y \rangle$?

3.49 Turunkan hubungan nilai rata-rata dalam (3.90) dari (3.88).

3.50 Manakah fungsi berikut yang, ketika dikalikan dengan konstanta normalisasi, dapat menjadi fungsi gelombang satu-dimensi yang dapat diterima bagi partikel terikat? (a dan b merupakan konstanta positif, dan x berlangsung dari $-\infty$ sampai ∞.) (a) e^{-ax}; (b) e^{-bx^2}; (c) xe^{-bx^2}; (d) ie^{-bx^2}; (e) $f(x) = e^{-bx^2}$ untuk $x < 0$, $f(x) = 2e^{-bx^2}$ untuk $x \geq 0$.

3.51 Tunjukkan bahwa jika Ψ_1 dan Ψ_2 memenuhi persamaan Schrödinger bergantung-waktu, maka $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ memenuhi persamaan tersebut, dengan c_1 dan c_2 merupakan konstanta.

3.52 (a) Tuliskan program komputer yang akan mencari semua himpunan bilangan bulat positif n_x, n_y, dan n_z yang memenuhi $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \leq 60$, mencetak himpunan tersebut dalam urutan kenaikan $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$, dan mencetak nilai $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$. (b) Berapakah degenerasi tingkat partikel-dalam-kotak-kubik dengan $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = 54$?

3.53 Benar atau salah? (a) Jika g merupakan fungsi eigen operator linear $\hat{B}$, maka cg merupakan fungsi eigen $\hat{B}$, dengan c suatu konstanta sembarang. (b) Jika kita mengukur sifat B ketika fungsi keadaan sistem bukan fungsi eigen $\hat{B}$, kita dapat memperoleh hasil yang bukan nilai eigen $\hat{B}$. (c) Jika f_1 dan f_2 merupakan fungsi eigen $\hat{B}$, maka $c_1f_1 + c_2f_2$ harus merupakan fungsi eigen $\hat{B}$, dengan c_1 dan c_2 konstanta. (d) Fungsi keadaan Ψ harus merupakan fungsi eigen setiap operator $\hat{B}$ yang merepresentasikan sifat fisik sistem. (e) Kombinasi linear dua penyelesaian persamaan Schrödinger tak-bergantung-waktu harus merupakan penyelesaian persamaan tersebut. (f) Fungsi keadaan sistem Ψ harus merupakan fungsi eigen $\hat{H}$. (g) $5x$ merupakan nilai eigen operator posisi $\hat{x}$. (h) $5x$ merupakan fungsi eigen $\hat{x}$. (i) Untuk keadaan stasioner, Ψ merupakan fungsi eigen $\hat{H}$. (j) Untuk keadaan stasioner, Ψ sama dengan fungsi waktu dikalikan fungsi koordinat partikel. (k) Untuk keadaan stasioner, kerapatan probabilitas tidak bergantung pada waktu. (l) Dalam persamaan $\langle B \rangle = \int \Psi^* \hat{B} \Psi d\tau$, integral tersebut merupakan integral tak tentu. (m) Jika f merupakan fungsi eigen operator linear $\hat{A}$ dengan nilai eigen a, maka f merupakan fungsi eigen $\hat{A}^2$ dengan nilai eigen a^2. (n) $\langle B \rangle = \int \hat{B}|\Psi|^2 d\tau$. (o) Setiap fungsi x, y, dan z mempunyai bentuk $f(x)g(y)h(z)$.

PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 3

Operator

Setiap nomor berikut memuat dasar teori, langkah penyelesaian, pemeriksaan, dan kesimpulan. Semua persamaan akan dikonversi menjadi objek persamaan Word.

Pembahasan 3.1

Inti soal. Jika $g = \hat{A}f$, tentukan g untuk setiap pilihan $\hat{A}$ dan f berikut. (a) $\hat{A} = d/dx$ dan $f = cos(x^2 + 1)$; (b) $\hat{A} = \hat{5}$ dan $f = sinx$; (c) $\hat{A} = (\cdot)^2$ dan $f = sinx$; (d) $\hat{A} = e\hat{x}p$ dan $f = lnx$; (e) $\hat{A} = d^2/d\,x^2$ dan $f = ln(3x)$; (f) =…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.2

Inti soal. Nyatakan apakah setiap entitas berikut merupakan operator atau fungsi: (a) $\hat{A}\hat{B}$; (b) $\hat{A}f(x)$; (c) $\hat{B}\hat{A}f(x)$; (d) $\left[\hat{B}, \hat{A}\right]$; (e) $f(x)\hat{A}$; (f) $f(x)\hat{A}\hat{B}g(x)$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.3

Inti soal. Jika $\hat{A}f(x) = 3x^2 f(x) + 2x\, df/dx$, dengan f fungsi sembarang, berikan ungkapan untuk $\hat{A}$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.4

Inti soal. Berikan tiga operator $\hat{A}$ yang berbeda yang memenuhi $\hat{A}e^x = e^x$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.5

Inti soal. Untuk setiap pasangan fungsi f dan g berikut, berikan dua bentuk $\hat{A}$ yang mungkin sehingga hubungan $g(x) = \hat{A}f(x)$ terpenuhi. (a) $f = 2x^4$, $g = 8x^3$; (b) $f = 2x$, $g = x^2$; (c) $f = x^4$, $g = x^2$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.6

Inti soal. Buktikan bahwa $\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 3.7

Inti soal. Buktikan bahwa jika $\hat{A} + \hat{B} = \hat{C}$, maka $\hat{A} = \hat{C} - \hat{B}$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 3.8

Inti soal. Jika $\hat{A} = d^2/d\,x^2$ dan $\hat{B} = x^2\,\times$, tentukan (a) $\hat{A}\hat{B}x^3$; (b) $\hat{B}\hat{A}x^3$; (c) $\hat{A}\hat{B}f(x)$; (d) $\hat{B}\hat{A}f(x)$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.9

Inti soal. Ambil $\hat{A} = x^3$ dan $\hat{B} = d/dx$. Tentukan $\hat{A}\hat{B}$ dan $\hat{B}\hat{A}$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.10

Inti soal. Dengan penerapan berulang definisi hasil kali dua operator, tunjukkan bahwa

$$[(\hat{A}\hat{B})\hat{C}]f = \hat{A}[\hat{B}(\hat{C}f)],$$

( ) f = (f…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan

pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 3.11

Inti soal. Tunjukkan bahwa $\left(\hat{A}+\hat{B}\right)^2 = \left(\hat{B}+\hat{A}\right)^2$ untuk sembarang dua operator (linear maupun nonlinear). (b) Dalam kondisi apa $\left(\hat{A}+\hat{B}\right)^2$ sama dengan $\hat{A}^2 + 2\hat{A}\hat{B} + \hat{B}^2$?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 3.12

Inti soal. Verifikasi identitas komutator $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = -\left[\hat{B},\hat{A}\right]$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai

eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 3.13

Inti soal. Hitung (a) $[sinz, d/dz]$; (b) $[d^2/d\,x^2, ax^2 + bx + c]$, dengan a, b, dan c merupakan konstanta; (c) $[d/dx\,, d^2/d\,x^2]$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.14

Inti soal. Klasifikasikan setiap operator berikut sebagai linear atau nonlinear: (a) $3x^2\,d^2/d\,x^2$; (b) $(\cdot)^2$; (c) $\int \hat{} dx$; (d) $e\hat{x}p$; (e) $\partial/\partial\,x + \partial/\partial\,y$; (f) $\sum_{x=1}^{n}$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.15

Inti soal. Tuliskan persamaan diferensial linear (2.2) dalam bentuk $\hat{B}y(x) = g(x)$, dengan $\hat{B}$ suatu operator linear tertentu.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.16

Inti soal. Buktikan bahwa hasil kali dua operator linear merupakan operator linear.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan

pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 3.17

Inti soal. Buktikan bahwa $\hat{A}(\hat{B}+\hat{C}) = \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}$ untuk operator linear.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 3.18

Inti soal. Jika $\hat{A}$ linear, tunjukkan bahwa

$$\hat{A}(bf + cg) = b\hat{A}f + c\hat{A}g,$$

(3.94) dengan b dan c merupakan konstanta sembarang…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 3.19

Inti soal. Berikan contoh operator yang memenuhi Persamaan (3.9) tetapi tidak memenuhi (3.10). (b) Berikan contoh operator yang memenuhi (3.10) tetapi tidak memenuhi (3.9).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.20

Inti soal. Manakah persamaan berikut yang benar untuk semua operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ serta semua fungsi f dan g? (a) $\left(\hat{A} + \hat{B}\right)f = \hat{A}f + \hat{B}f$; (b) $\hat{A}(f + g) = \hat{A}f + \hat{A}g$; (c) $\left(\hat{A}f\right)/f = \hat{A}$, asalkan $f \neq 0$; (d) f =…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.21

Inti soal. Kita mendefinisikan operator translasi $\hat{T}_h$ dengan $\hat{T}_h f(x) = f(x+h)$. (a) Apakah $\hat{T}_h$ merupakan operator linear? (b) Hitung $\left(\hat{T}_{-1}^2 - 3\hat{T}_1 + 2\right)x^2$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.22

Inti soal. Operator $e^{\hat{A}}$ didefinisikan oleh persamaan

$$e^{\hat{A}} = \hat{1} + \hat{A} + \frac{\hat{A}^2}{2!} + \frac{\hat{A}^3}{3!} + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\hat{A}^k}{k!}.$$

Tunjukkan bahwa $e^{\hat{D}} = \hat{T}_1$, dengan $\hat{D} = d/dx$ dan $\hat{T}_1$ didefinisikan dalam Soal 3.21.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-

suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 3.23

Inti soal. Manakah fungsi berikut yang merupakan fungsi eigen $d^2/d\,x^2$? (a) e^x; (b) x^2; (c) $sinx$; (d) $3cosx$; (e) $sinx + cosx$. Berikan nilai eigen untuk setiap fungsi eigen.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.24

Inti soal. Manakah fungsi berikut yang merupakan fungsi eigen $\partial^2/\partial\,x^2 + \partial^2/\partial\,y^2$? (a) $e^{2x}e^{3y}$; (b) x^3y^3; (c) $sin2xcos4y$; (d) $sin2x + cos3y$. Untuk setiap fungsi eigen, berikan nilai eigennya.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau

simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.25

Inti soal. Tentukan fungsi eigen $-(\hbar^2/2\,m)\,d^2/d\,x^2$. Jika fungsi eigen harus tetap berhingga ketika $x \to \pm\infty$, apakah nilai eigen yang diizinkan?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.26

Inti soal. Tentukan fungsi eigen dan nilai eigen operator $\int \hat{d}x$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.27

Inti soal. Tentukan fungsi eigen dan nilai eigen $d^2/d\,x^2 + 2\,d/dx$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.28

Inti soal. Berikan operator mekanika kuantum untuk besaran fisik berikut: (a) p_y^3; (b) $xp_y - yp_x$; (c) $\left(xp_y\right)^2$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.29

Inti soal. Lengkapi rincian yang menghasilkan (3.36) dan (3.37) sebagai fungsi eigen dan nilai eigen $\hat{p}_x$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.30

Inti soal. Hitung komutator (a) $[\hat{x}, \hat{p}_x]$; (b) $[\hat{x}, \hat{p}_x^2]$; (c) $[\hat{x}, \hat{p}_y]$; (d) $[\hat{x}, \hat{V}(x, y, z)]$; (e) $[\hat{x}, \hat{H}]$, dengan operator Hamiltonian diberikan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.31

Inti soal. Tuliskan operator energi kinetik $\hat{T}$ untuk sistem dua-partikel tiga-dimensi.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.32

Inti soal. Tuliskan operator Hamiltonian untuk sistem satu-partikel tiga-dimensi, dengan partikel mengalami energi potensial yang sebanding dengan kuadrat jaraknya dari titik asal dan konstanta perbandingannya dinamakan c. Lihat Persamaan (5.52).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.33

Inti soal. Tuliskan ungkapan probabilitas menemukan partikel nomor 1 dengan koordinat x di antara 0 dan 2 untuk (a) sistem satu-partikel satu-dimensi; (b) sistem satu-partikel tiga-dimensi; (c) sistem dua-partikel tiga-dimensi.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.34

Inti soal. Jika ψ adalah fungsi gelombang ternormalisasi, apakah satuan SI-nya untuk (a) kasus satu-partikel satu-dimensi; (b) kasus satu-partikel tiga-dimensi; (c) kasus n-partikel tiga-dimensi?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.35

Inti soal. Sebuah elektron di dalam kotak persegi panjang tiga-dimensi dengan ukuran 5,00 Å, 3,00 Å, dan 6,00 Å melakukan transisi radiasi dari keadaan tereksitasi paling rendah ke keadaan dasar. Hitung frekuensi foton yang dipancarkan.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan energi foton dan konservasi energi pada interaksi cahaya-materi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.36

Inti soal. Sebuah elektron berada dalam keadaan dasar di dalam kotak tiga-dimensi, dengan V diberikan oleh (3.60), dengan $a = 1{,}00$ nm, $b = 2{,}00$ nm, dan $c = 5{,}00$ nm. Tentukan probabilitas bahwa pengukuran posisi elektron akan menemukannya dalam wilayah (a) $0 \leq x \leq 0{,}40$ nm, $1{,}50\ \text{nm} \leq y \leq 2{,}00$ nm, $2{,}00\ \text{nm} \leq z \leq 3{,}00$ nm; (b) 0 x …

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.37

Inti soal. Fungsi gelombang keadaan stasioner partikel dalam kotak persegi panjang tiga-dimensi merupakan fungsi eigen dari operator manakah berikut ini? (a) $\hat{p}_x$; (b) $\hat{p}_x^2$; (c) $\hat{p}_z^2$; (d) $\hat{x}$. Untuk setiap operator yang menjadikan ψ sebagai fungsi eigen, nyatakan dalam n_x, n_y, dan n_z nilai yang…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.38

Inti soal. Deskripsikan bentuk dan lokasi permukaan simpul untuk keadaan stasioner $n_x = 1$, $n_y = 2$, $n_z = 3$ dari partikel dalam kotak dengan rusuk a, b, dan c.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.39

Inti soal. Untuk setiap keadaan berikut dari partikel dalam kotak dengan rusuk a, b, dan c, nyatakan titik atau titik-titik tempat kerapatan probabilitas maksimum: (a) $n_x = 1, n_y = 1, n_z = 1$; (b) $n_x = 2, n_y = 1, n_z = 1$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.40

Inti soal. Buktikan identitas integral lipat (3.74).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 3.41

Inti soal. Jelaskan bagaimana degenerasi dapat terjadi untuk partikel dalam kotak persegi panjang dengan $a \neq b \neq c$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.42

Inti soal. Selesaikan persamaan Schrödinger satu-partikel tiga-dimensi tak-bergantung-waktu untuk partikel bebas.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.43

Inti soal. Manakah kombinasi fungsi gelombang keadaan stasioner partikel-dalam-kotak-kubik berikut yang merupakan fungsi eigen operator Hamiltonian

partikel-dalam-kotak-kubik? (a) $2^{-1/2}(\psi_{138} - \psi_{381})$; (b) $2^{-1/2}(\psi_{212} + \psi_{131})$; (c) $\frac{1}{2}\psi_{151} - \frac{1}{2}\psi_{333} + 2^{-1/2}\psi_{511}$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.44

Inti soal. Istilah *keadaan* dan *tingkat energi* tidak sinonim dalam mekanika kuantum. Untuk partikel dalam kotak kubik, perhatikan rentang energi $E < 15\,h^2/8\,ma^2$. (a) Berapa banyak keadaan yang berada dalam rentang ini? (b) Berapa banyak tingkat energi yang berada dalam rentang ini?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.45

Inti soal. Untuk partikel dalam kotak kubik, berapakah derajat degenerasi tingkat energi dengan nilai $8ma^2\,E/h^2$ berikut? (a) 12; (b) 14; (c) 27.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.46

Inti soal. Manakah berikut ini yang merupakan himpunan fungsi bebas linear? (a) x, x^2, x^6 ; (b) $8, x, x^2, 3x^2 - 1$; (c) $sinx, cosx$; (d) $sinz, cosz, tanz$; (e) $sinx, cosx, e^{ix}$; (f) $sin^2x, cos^2x, 1$; (g) $sin^2x, cos^2y, 1$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A},\hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.47

Inti soal. Tanpa melihat bab ini, buktikan bahwa setiap kombinasi linear dua fungsi eigen dari suatu tingkat energi terdegenerasi merupakan fungsi eigen $\hat{H}$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 3.48

Inti soal. Untuk partikel yang terkurung dalam kotak dengan ukuran a, b, dan c, tentukan nilai-nilai berikut untuk keadaan dengan bilangan kuantum n_x, n_y, dan n_z. (a) $\langle x \rangle$; (b) $\langle y \rangle$, $\langle z \rangle$. Gunakan pertimbangan simetri dan jawaban bagian (a). (c) $\langle p_x \rangle$; (d) $\langle x^2 \rangle$. Apakah …

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar

eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 3.49

Inti soal. Turunkan hubungan nilai rata-rata dalam (3.90) dari (3.88).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 3.50

Inti soal. Manakah fungsi berikut yang, ketika dikalikan dengan konstanta normalisasi, dapat menjadi fungsi gelombang satu-dimensi yang dapat diterima bagi partikel terikat? (a dan b merupakan konstanta positif, dan x berlangsung dari $-\infty$ sampai ∞.) (a) e^{-ax}; (b) e^{-bx^2}; (c) xe^{-bx^2}; (d) ie^{-bx^2}; (e) $f(x) = e^{-bx^2}$ untuk x <…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau

simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 3.51

Inti soal. Tunjukkan bahwa jika Ψ_1 dan Ψ_2 memenuhi persamaan Schrödinger bergantung-waktu, maka $c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ memenuhi persamaan tersebut, dengan c_1 dan c_2 merupakan konstanta.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar operator, persamaan nilai eigen, komutator, dan pemisahan variabel. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 3.52

Inti soal. Tuliskan program komputer yang akan mencari semua himpunan bilangan bulat positif n_x , n_y , dan n_z yang memenuhi $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \leq 60$, mencetak himpunan tersebut dalam urutan kenaikan $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$, dan mencetak nilai $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$. (b) Berapakah degenerasi tingkat partikel-dalam-kotak-kubik…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 3.53

Inti soal. Benar atau salah? (a) Jika g merupakan fungsi eigen operator linear $\hat{B}$, maka cg merupakan fungsi eigen $\hat{B}$, dengan c suatu konstanta sembarang. (b) Jika kita mengukur sifat B ketika fungsi keadaan sistem bukan fungsi eigen $\hat{B}$, kita dapat memperoleh hasil yang bukan nilai eigen $\hat{B}$. (c) Jika f_1 dan f_2 merupakan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\hat{A}f = af$, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, dan $\hat{H}\psi = E\psi$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Setiap pernyataan diuji satu per satu: pernyataan yang mengikuti definisi dan domain operator dinyatakan benar, sedangkan yang melanggar syarat batas, normalisasi, komutasi, atau spektrum nilai eigen dinyatakan salah. Alasan fisiknya harus dicantumkan, bukan hanya label benar/salah.

BAB 4 — OSILATOR HARMONIK

Soal

Pembagian soal menurut bagian adalah sebagai berikut: Bagian 4.1 mencakup Soal 4.1–4.3; Bagian 4.2 mencakup Soal 4.4–4.23; Bagian 4.3 mencakup Soal 4.24–4.29; Bagian 4.4 mencakup Soal 4.30–4.48; dan soal umum mencakup Soal 4.49–4.53.

4.1 Dengan syarat-syarat tertentu terpenuhi, fungsi f(x) dapat dikembangkan menjadi deret pangkat tak berhingga di sekitar titik x = a:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n (x - a)^n \qquad (4.84)$$

Diferensiasikan (4.84) sebanyak m kali, kemudian tetapkan x = a untuk menunjukkan bahwa $c_n = f^{(n)}(a)/n!$, sehingga diperoleh deret Taylor yang dikenal:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x - a)^n \qquad \textbf{(4.85)}$$

4.2 (a) Gunakan (4.85) untuk menurunkan beberapa suku pertama dalam pengembangan deret Taylor di sekitar x = 0 bagi fungsi sin x, kemudian simpulkan rumus umumnya. (b) Diferensiasikan deret Taylor pada bagian (a) untuk memperoleh deret Taylor bagi cos x.

4.3 (a) Tentukan pengembangan deret Taylor di sekitar x = 0 bagi e^x. (b) Gunakan deret Taylor (di sekitar x = 0) dari sin x, cos x, dan e^x untuk memverifikasi bahwa $e^{i\theta} = \cos\theta + i \sin\theta$ [Persamaan (1.28)].

4.4 Turunkan (4.29) untuk energi E suatu osilator klasik.

4.5 (a) Tentukan hubungan rekurensi bagi koefisien c_n dalam penyelesaian deret pangkat dari

$(1 - x^2)y''(x) - 2xy'(x) + 3y(x) = 0.$

(b) Nyatakan c_4 dalam c_0 dan c_5 dalam c_1.

4.6 Manakah di antara fungsi-fungsi berikut yang merupakan fungsi genap? Manakah yang merupakan fungsi ganjil? (a) sin x; (b) cos x; (c) tan x; (d) e^x; (e) 13; (f) x cos x; (g) 2 − 2x; (h) $(3 + x^2)(3 - x^2)$.

4.7 Buktikan pernyataan-pernyataan setelah Persamaan (4.51) mengenai hasil kali fungsi genap dan fungsi ganjil.

4.8 (a) Jika f(x) merupakan fungsi genap yang dapat didiferensiasikan di semua titik, buktikan bahwa f′(x) merupakan fungsi ganjil. Jangan menganggap

bahwa f(x) dapat dikembangkan menjadi deret Taylor. (b) Buktikan bahwa turunan fungsi ganjil yang dapat didiferensiasikan di semua titik merupakan fungsi genap. (c) Jika f(x) merupakan fungsi genap yang dapat didiferensiasikan di titik asal, tentukan f'(0).

4.9 Untuk keadaan dasar osilator harmonik satu dimensi, tentukan nilai rata-rata energi kinetik dan energi potensial; verifikasi bahwa $\langle T \rangle = \langle V \rangle$ dalam kasus ini.

4.10 Verifikasi faktor normalisasi bagi fungsi gelombang osilator harmonik dengan $v = 1$ dan $v = 2$.

4.11 Gunakan hubungan rekurensi (4.46) untuk menentukan fungsi gelombang osilator harmonik ternormalisasi dengan $v = 3$.

4.12 Tentukan c/c_0 bagi fungsi gelombang osilator harmonik dengan $v = 4$.

4.13 Untuk keadaan osilator harmonik dengan $v = 1$, tentukan posisi atau posisi-posisi yang paling mungkin ditempati partikel.

4.14 Gambarkan secara kasar grafik ψ dan ψ^2 bagi keadaan $v = 5$ dari osilator harmonik satu dimensi tanpa menentukan rumus eksplisit ψ.

4.15 Tentukan $\langle x \rangle$ bagi keadaan osilator harmonik dengan bilangan kuantum v.

4.16 Benar atau salah? (a) Semua fungsi gelombang osilator harmonik dengan v berupa bilangan bulat ganjil harus mempunyai simpul di titik asal. (b) Fungsi gelombang osilator harmonik $v = 10$ mempunyai 10 simpul bagian dalam. (c) Fungsi gelombang osilator harmonik $v = 1$ harus bernilai negatif untuk $x < 0$. (d) Tingkat-tingkat energi osilator harmonik berjarak sama. (e) Tingkat energi osilator harmonik satu dimensi tidak terdegenerasi.

4.17 Jelaskan persamaan dan perbedaan antara fungsi gelombang serta energi partikel satu dimensi dalam kotak dan osilator harmonik.

4.18 (a) Selesaikan persamaan osilator harmonik klasik (4.22) untuk memperoleh t sebagai fungsi x. Kemudian diferensiasikan persamaan tersebut untuk memperoleh dt/dx sebagai fungsi x. Anda mungkin perlu mencari rumus turunannya. Tuliskan hasil dalam bentuk $dt = f(x)\,dx$, dengan f(x) suatu fungsi tertentu dari x. Rumus ini memberikan selang waktu infinitesimal yang dihabiskan osilator di dalam daerah infinitesimal selebar dx yang terletak pada x. Waktu yang diperlukan osilator untuk bergerak dari $x = -A$ ke $x = A$ adalah setengah periode. Jika dt dibagi setengah periode, diperoleh probabilitas bahwa osilator ditemukan dalam daerah dari x sampai $x + dx$. Tunjukkan bahwa probabilitas tersebut adalah

$[1/(\pi A\{1 - (x/A)^2\}^{1/2})]\,dx$.

(b) Berapakah nilai rapat probabilitas klasik $\pi^{-1}(A^2 - x^2)^{-1/2}$ pada titik balik $x = \pm A$? (c) Buat grafik A kali rapat probabilitas klasik terhadap x/A. Gunakan referensi daring kedua atau ketiga pada paragraf terakhir Bagian 4.2 untuk melihat grafik $|\psi|^2$ terhadap x bagi bilangan kuantum tinggi, misalnya v = 14, dan bandingkan grafik rapat probabilitas klasik Anda dengan grafik-grafik tersebut.

4.19 Tentukan nilai eigen dan fungsi eigen $\hat{H}$ bagi sistem satu dimensi dengan $V(x) = \infty$ untuk $x < 0$ dan $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ untuk $x \geq 0$.

4.20 (a) Osilator harmonik tiga dimensi mempunyai fungsi energi potensial

$V = \frac{1}{2}k_x x^2 + \frac{1}{2}k_\gamma y^2 + \frac{1}{2}k\_z\, z^2$,

dengan k_x, k_γ, dan k_z sebagai tiga konstanta gaya. Tentukan nilai eigen energinya dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger. (b) Jika $k_x = k_\gamma = k\_z$, tentukan derajat degenerasi masing-masing dari empat tingkat energi terendah.

4.21 Polinomial Hermite didefinisikan oleh

$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2}[d^n(e^{-z^2})/dz^n]$.

(a) Verifikasi bahwa

$H_0 = 1, \quad H_1 = 2z, \quad H_2 = 4z^2 - 2, \quad H_3 = 8z^3 - 12z.$

(b) Polinomial Hermite memenuhi hubungan berikut (Pauling dan Wilson, halaman 77–79):

$zH_n(z) = nH_{n-1}(z) + \frac{1}{2}H_{n+1}(z)$.

Verifikasi identitas ini untuk n = 0, 1, dan 2. (c) Fungsi gelombang osilator harmonik ternormalisasi dapat dituliskan sebagai (Pauling dan Wilson, halaman 79–80):

$$\psi_v(x) = (2^v v!)^{-1/2}(\alpha/\pi)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} H_v(\alpha^{1/2} x) \qquad (4.86)$$

Verifikasi (4.86) bagi tiga keadaan terendah.

4.22 Ketika persamaan diferensial homogen linear orde kedua dituliskan dalam bentuk (2.3), setiap titik tempat P(x) atau Q(x) menjadi tak hingga disebut titik singular atau singularitas. Dalam menyelesaikan persamaan diferensial menggunakan metode deret pangkat, substitusi yang tepat untuk menghasilkan hubungan rekurensi dua suku sering dapat ditemukan dengan menelaah persamaan diferensial di dekat singularitasnya. Bagi persamaan Schrödinger osilator harmonik (4.32), singularitasnya berada pada $x = \pm\infty$. Untuk memeriksa apakah $x = \infty$ merupakan titik singular, lakukan substitusi $z = 1/x$ dan periksa koefisien pada $z = 0$. Verifikasi bahwa $\exp(-\alpha x^2/2)$ merupakan penyelesaian hampiran (4.32) untuk $|x|$ yang sangat besar.

4.23 (a) Tulislah program komputer yang menggunakan hubungan rekurensi (4.39) untuk menghitung ψ/c_0 pada (4.40) terhadap $\alpha^{1/2}x$, untuk nilai $\alpha^{1/2}x$ dari 0 sampai 6 dengan kenaikan 0,5 dan untuk nilai tertentu $mE\hbar^{-2}/\alpha = E/h\nu$. Sertakan pengujian untuk menghentikan penjumlahan suku dalam deret tak berhingga ketika suku terakhir yang dihitung telah cukup kecil. (b) Jalankan program untuk $E/h\nu$ = 0,499; 0,5; dan 0,501 guna memverifikasi Gambar 4.2.

4.24 (a) Spektrum serapan inframerah $^1H^{35}Cl$ mempunyai pita terkuat pada $8{,}65 \times 10^{13}$ Hz. Hitung konstanta gaya ikatan dalam molekul ini. (b) Tentukan energi vibrasi titik nol hampiran $^1H^{35}Cl$. (c) Prediksikan frekuensi pita inframerah terkuat $^2H^{35}Cl$.

4.25 Pita $v = 0 \rightarrow 1$ dan $v = 0 \rightarrow 2$ dari $^1H^{35}Cl$ terjadi pada 2885,98 cm^{-1} dan 5667,98 cm^{-1}. (a) Hitung ν_e/c dan $\nu_e x_e/c$ bagi molekul ini. (b) Prediksikan bilangan gelombang pita $v = 0 \rightarrow 3$ dari $^1H^{35}Cl$.

4.26 (a) Pita $v = 0 \rightarrow 1$ dari LiH terjadi pada 1359 cm^{-1}. Hitung rasio populasi $v = 1$ terhadap $v = 0$ pada 25 °C dan pada 200 °C. (b) Kerjakan hal yang sama seperti pada bagian (a) untuk ICl, yang pita inframerah terkuatnya terjadi pada 381 cm^{-1}.

4.27 (a) Verifikasi (4.62). (b) Tentukan persamaan yang bersesuaian bagi transisi $v = 0 \rightarrow v_2$.

4.28 Tunjukkan bahwa jika U(R) pada Gambar 4.6 dikembangkan menjadi deret Taylor di sekitar $R = R_e$ dan suku-suku yang mengandung $(R - R_e)^3$ serta pangkat yang lebih tinggi diabaikan—karena suku-suku tersebut kecil untuk R dekat R_e—maka diperoleh potensial osilator harmonik dengan $k = (d^2U/dR^2)\,\big|\,_{R=R_e}$.

4.29 Fungsi Morse $U(R) = D_e[1 - e^{-a(R-R_e)}]^2$ sering digunakan untuk menghampiri kurva U(R) suatu molekul diatomik, dengan energi disosiasi kesetimbangan molekul D_e didefinisikan sebagai $D_e \equiv U(\infty) - U(R_e)$. (a) Verifikasi bahwa persamaan D_e tersebut dipenuhi oleh fungsi Morse. (b) Tunjukkan bahwa $a = (k_e/2D_e)^{1/2}$.

Untuk Soal 4.30–4.38, gunakan program yang serupa dengan program pada Tabel 4.1, lembar kerja, atau sistem aljabar komputer seperti Mathcad. Jika nilai eigen negatif dicari menggunakan Excel 2010, hilangkan tanda centang pada kotak **Make Unconstrained Variables Non-Negative** di kotak **Solver Parameters**.

4.30 Gunakan metode Numerov untuk menentukan tiga energi keadaan stasioner terendah bagi partikel dalam kotak satu dimensi dengan panjang l dan dinding setinggi tak hingga.

4.31 (a) Gunakan metode Numerov untuk menentukan semua nilai eigen keadaan terikat bagi partikel dalam sumur persegi panjang (Bagian 2.4) dengan panjang l dan $V_0 = 20\hbar^2/ml^2$. Perhatikan bahwa V berbeda pada daerah yang berbeda dan $\psi = 0$ pada dinding. (b) Ulangi bagian (a) untuk $V_0 = 50\hbar^2/ml^2$. (c) Periksa hasil Anda dengan menggunakan pemecah otomatis pada program lembar kerja atau Mathcad untuk mencari akar Persamaan (2.35). Sebelum melakukannya, tentukan nilai hampiran dari grafik lembar kerja.

4.32 Gunakan metode Numerov untuk menentukan tiga nilai eigen energi terendah bagi sistem satu partikel dengan $V = cx^4$, dengan c suatu konstanta.

4.33 Gunakan metode Numerov untuk menentukan tiga nilai eigen energi terendah bagi sistem satu partikel dengan $V = ax^8$, dengan a suatu konstanta.

4.34 Gunakan metode Numerov untuk menentukan empat nilai eigen energi terendah bagi sistem satu partikel dengan $V = \infty$ untuk $x \leq 0$ dan $V = bx$ untuk $x > 0$, dengan b suatu konstanta positif. Untuk b = mg, sistem ini adalah partikel dalam medan gravitasi.

4.35 Tinjau sistem satu partikel dengan $V = -[1{,}5(\hbar^2/ma^2)]/[e^{x/a} + e^{-x/a}]^2$, dengan a suatu konstanta positif. (a) Tentukan V_r. (b) Gunakan lembar kerja, kalkulator grafik, atau Mathcad untuk menggambarkan V_r terhadap x_r. Lihat Soal 4.39. (c) Gunakan metode Numerov untuk menentukan semua nilai eigen keadaan terikat yang lebih kecil daripada −0,1. Fungsi eksponensial dituliskan sebagai EXP(A7) dalam Excel. Perhatikan catatan sebelum Soal 4.30.

4.36 Tinjau sistem satu partikel dengan $V = \frac{1}{4}b^2/c - bx^2 + cx^4$, dengan b dan c konstanta positif. Jika $\hbar$, m, dan b digunakan untuk menentukan A dan B dalam $E_r = E/A$ dan $x_r = x/B$, diperoleh hasil yang sama dengan osilator harmonik, kecuali k digantikan oleh b. Dengan demikian, Persamaan (4.74) memberikan $B = m^{-1/4}b^{-1/4}\hbar^{1/2}$. Persamaan V dalam soal ini menunjukkan bahwa $[bx^2] = [cx^4]$, sehingga $[c] = [b]/L^2$ dan dituliskan $c = ab/B^2 = ab/m^{-1/2}b^{-1/2}\hbar$, dengan a suatu konstanta tak berdimensi. (a) Verifikasi bahwa $V_r = 1/(4a) - x_r^2 + ax_r^4$. (b) Gunakan lembar kerja atau kalkulator grafik untuk menggambarkan V_r terhadap x_r bagi a = 0,05. Bentuk V_r secara kasar menyerupai energi potensial bagi inversi molekul NH_3. (c) Untuk a = 0,05, gunakan metode Numerov untuk menentukan semua nilai eigen dengan $E_r < 10$. Petunjuk: beberapa nilai eigen terletak sangat berdekatan. Lihat juga Soal 4.37.

4.37 Potensial sumur ganda satu dimensi mempunyai $V = \infty$ untuk $x < -\frac{1}{2}l$; $V = 0$ untuk $-\frac{1}{2}l \le x \le -\frac{1}{4}l$; $V = V_0$ untuk $-\frac{1}{4}l < x < \frac{1}{4}l$; $V = 0$ untuk $\frac{1}{4}l \le x \le \frac{1}{2}l$; dan $V = \infty$ untuk $x > \frac{1}{2}l$, dengan l dan V_0 konstanta positif. Buat sketsa V. Gunakan metode Numerov untuk menentukan empat nilai eigen terendah dan fungsi eigen tak ternormalisasi yang bersesuaian bagi nilai $V_0/(\hbar^2/ml^2)$ berikut: (a) 1; (b) 100; (c) 1000. Bandingkan fungsi gelombang dan energi pada bagian (a) dengan fungsi dan energi partikel dalam kotak sepanjang l, serta hasil bagian (c) dengan fungsi dan energi partikel dalam kotak sepanjang $\frac{1}{4}l$. Petunjuk: pada bagian (b) dan (c), beberapa nilai eigen sangat berdekatan. Pada bagian (c), nilai eigen perlu ditentukan sampai banyak tempat desimal agar diperoleh fungsi eigen yang bentuknya baik. Fungsi eigen harus berupa fungsi genap atau fungsi ganjil.

4.38 (a) Dalam contoh Numerov bagi osilator harmonik, perhitungan dilakukan dari −5 sampai 5 dengan langkah 0,1 dan diperoleh 0,4999996 sebagai nilai eigen terendah. Untuk pilihan $x_{r,0}$ dan s_r ini, tentukan semua nilai eigen dengan $E_r < 6$; kemudian tentukan nilai eigen yang terletak di antara 11 dan 12 dan jelaskan mengapa hasilnya tidak teliti. Selanjutnya ubah $x_{r,0}$ atau s_r, atau keduanya, untuk memperoleh nilai yang teliti bagi nilai eigen tersebut. (b) Tentukan nilai eigen osilator harmonik dengan $E_r < 6$ jika perhitungan dilakukan dari −5 sampai 5 dengan langkah 0,5. (c) Tentukan nilai eigen osilator harmonik dengan $E_r < 6$ jika perhitungan dilakukan dari −3 sampai 3 dengan langkah 0,1.

4.39 Lembar kerja mengandung jebakan bagi pengguna yang tidak waspada. (a) Jika sel A1 berisi nilai 5, hasil apakah yang Anda harapkan dari rumus =−A1^2+A1^2? Perhatikan tanda minus. (b) Dengan Excel, masukkan 5 ke sel A1, masukkan =−A1^2+A1^2 ke sel A2, dan masukkan =+A1^2−A1^2 ke sel A3. Hasil apakah yang Anda peroleh?

4.40 Rumus lembar kerja dapat ditulis dengan lebih elegan jika sel-sel yang berisi parameter diberi nama. Cari cara memberi nama sel dalam program lembar kerja yang Anda gunakan. (a) Dalam contoh osilator harmonik, beri nama sel B3 dan D3 masing-masing sebagai Er dan sr. Kemudian ganti B3 dan D3 dengan Er dan sr dalam semua rumus pada lembar kerja. (b) Mengapa x2 tidak diperbolehkan sebagai nama sel lembar kerja?

4.41 Gunakan (4.67) untuk menunjukkan bahwa jika ψ_1 dalam metode Numerov dikalikan dengan suatu konstanta c, maka ψ_2, ψ_3, dan seterusnya semuanya juga dikalikan dengan c. Jadi, seluruh fungsi gelombang dikalikan dengan c, yang tidak memengaruhi nilai eigen yang ditemukan.

4.42 Gunakan fungsi gelombang osilator harmonik ternormalisasi yang diperoleh dengan metode Numerov dari −5 sampai 5 menggunakan langkah 0,1

untuk memperkirakan probabilitas partikel berada di daerah terlarang secara klasik bagi keadaan v = 0 dan v = 1.

4.43 Dalam deret Taylor (4.85) pada Soal 4.1, sebut titik x = a sebagai x_n, yakni $x_n \equiv a$, dan tetapkan $s \equiv x - a = x - x_n$ sehingga $x = x_n + s$. (a) Dengan notasi ini, tuliskan (4.85) sebagai $f(x_n + s)$ yang sama dengan deret pangkat dalam s dan evaluasi semua suku sampai s^5. (b) Dalam hasil bagian (a), ubah s menjadi −s untuk memperoleh deret bagi $f(x_n - s)$. Kemudian jumlahkan kedua deret dan abaikan suku s^6 serta pangkat yang lebih tinggi untuk menunjukkan bahwa

$$f(x_n + s) + f(x_n - s) \approx 2f(x_n) + f''(x_n)s^2 + (1/12)f^{(iv)}(x_n)s^4,$$

$$f_{n+1} \approx -f_{n-1} + 2f_n + f_n''s^2 + \tfrac{1}{12} f_n^{(\mathrm{iv})}s^4 \qquad (4.87)$$

$$\psi_{n+1} \approx -\psi_{n-1} + 2\psi_n + \psi_n''s^2 + \tfrac{1}{12}\psi_n^{(\mathrm{iv})}s^4 \qquad (4.88)$$

dengan notasi (4.65), tetapi ψ digantikan oleh f, kemudian f digantikan kembali oleh ψ. (c) Gantikan f dalam (4.87) dengan ψ″, kalikan persamaan yang diperoleh dengan s^2, abaikan suku s^6, selesaikan untuk $\psi_n^{(iv)}s^4$, dan gunakan $\psi'' = G\psi$ [Persamaan (4.66)] untuk menunjukkan bahwa

$$\psi_n^{(\mathrm{iv})}s^4 \approx G_{n+1}\psi_{n+1}s^2 + G_{n-1}\psi_{n-1}s^2 - 2G_n\psi_n s^2 \qquad (4.89)$$

Substitusikan (4.89) dan $\psi_n'' = G_n\psi_n$ ke dalam (4.88), kemudian selesaikan untuk ψ_{n+1} guna menunjukkan bahwa Persamaan (4.67) berlaku.

4.44 Gunakan analisis dimensi untuk memverifikasi (4.74) bagi B.

4.45 Dalam menerapkan metode Numerov untuk menghitung simpul ψ_r, telah diasumsikan bahwa ψ berubah tanda ketika melewati suatu simpul. Akan tetapi, terdapat fungsi yang tidak mempunyai tanda berlawanan pada kedua sisi suatu simpul. Sebagai contoh, fungsi $y = x^2$ dan $y = x^4$ bernilai positif pada kedua sisi simpul x = 0. Bagi suatu fungsi y yang positif pada titik-titik tepat di sebelah kiri x = a, nol pada x = a, dan positif tepat di sebelah kanan x = a, definisi $y' = \lim\Delta x \to 0\ \Delta y/\Delta x$ menunjukkan bahwa turunan y′ bernilai negatif tepat di sebelah kiri x = a dan positif tepat di sebelah kanan x = a. Karena itu, dengan menganggap y′ kontinu, y′ bernilai nol pada x = a. Pengecualiannya adalah fungsi seperti fungsi berbentuk V, y = |x|, yang turunannya diskontinu pada x = a. Akan tetapi, fungsi demikian dikesampingkan oleh syarat bahwa ψ′ harus kontinu. (a) Gunakan persamaan Schrödinger untuk menunjukkan bahwa jika ψ(x) = 0 pada x = a, maka ψ″ = 0 pada x = a, asalkan $V(a) \neq \infty$. (b) Diferensiasikan persamaan Schrödinger untuk menunjukkan bahwa jika ψ dan ψ′ keduanya nol pada x = a, maka ψ‴(a) = 0, asalkan $V'(a) \neq \infty$. Selanjutnya tunjukkan bahwa semua turunan yang lebih tinggi dari ψ bernilai nol pada x = a jika

ψ dan ψ′ keduanya nol pada x = a dan tidak ada turunan V yang tak hingga pada x = a. Jika ψ dan seluruh turunannya nol pada x = a, deret Taylor (4.85) menunjukkan bahwa ψ nol di semua tempat. Akan tetapi, fungsi nol tidak diperbolehkan sebagai fungsi gelombang. Karena itu, ψ dan ψ′ tidak dapat keduanya nol pada suatu titik, dan fungsi gelombang harus mempunyai tanda berlawanan pada kedua sisi suatu simpul.

4.46 Misalkan $V = cx^8$, dengan c suatu konstanta positif, dan hendak dicari semua nilai eigen dengan $E_r < 10$. (a) Tunjukkan bahwa $V_r = x_r^8$ dan bahwa untuk $E_r = 10$, batas-batas daerah yang diizinkan secara klasik terletak pada $x_r = \pm 1{,}33$. (b) Siapkan lembar kerja dan verifikasi bahwa jika digunakan $x_{r,o} = -3$, x_r,maks = 3, dan $s_r = 0{,}05$, ψ mengalami osilasi palsu untuk $|x_r| > 2{,}65$. (c) Verifikasi bahwa $1 - G_r s_r^2/12 \approx 0$ untuk $|x_r| = 2{,}65$, sehingga $1 - G_r s_r^2/12$ bernilai negatif untuk $|x_r| > 2{,}65$. (d) Gunakan lembar kerja untuk memverifikasi bahwa osilasi palsu hilang jika digunakan $x_{r,o} = -2{,}5$, x_r,maks = 2,5, dan $s_r = 0{,}05$; atau $x_{r,o} = -3$, x_r,maks = 3, dan $s_r = 0{,}02$.

4.47 Modifikasikan program pada Tabel 4.1 untuk menentukan fungsi gelombang ternormalisasi.

4.48 Tuliskan ulang program pada Tabel 4.1 dengan menghilangkan seluruh variabel larik.

4.49 Lembar kerja dan sistem aljabar komputer dapat dengan mudah digunakan untuk menyelesaikan persamaan berbentuk f(x) = 0. Sebagai contoh, misalkan hendak diselesaikan $e^x = 2 - x^2$. Grafik yang dibuat komputer menunjukkan bahwa fungsi $e^x - 2 + x^2$ sama dengan nol hanya pada dua titik, satu positif dan satu negatif. Dalam Excel, masukkan tebakan awal 0 bagi x ke sel A1 dan =EXP(A1)-2+A1^2 ke sel A3. Kemudian klik tab **Data** dan, dalam kelompok **Analysis**, pilih **Solver**. Dalam kotak **Solver Parameters**, masukkan A3 di samping **Set Objective**. Setelah **To**, klik **Value Of** dan masukkan 0. Masukkan A1 setelah **By Changing Cells**; kemudian klik **Options** dan ubah **Precision** menjadi 1E-14. Klik **OK**, lalu klik **Solve**. Excel memberikan hasil 0,537274449173857, dengan 2×10^{-15} pada sel A3. Untuk mencari akar negatif, mulai dengan −1 pada sel A1 dan gunakan Solver. (a) Gunakan lembar kerja atau Mathcad untuk menyelesaikan Soal 2.24 bagi energi keadaan terikat suatu partikel dalam sumur. (b) Bagi potensial sumur ganda pada Soal 4.37, penerapan prosedur pada Bagian 2.4 menunjukkan bahwa tingkat energi keadaan terikat yang diizinkan memenuhi

$$\left[(V_{0r} - E_r)/E_r\right]^{1/2} \tan\left[(E_r/8)^{1/2}\right] = -\left(\tanh\left\{\left[(V_{0r} - E_r)/8\right]^{1/2}\right\}\right)^p \qquad (4.90)$$

dengan $V_{0r} \equiv V_0/(\hbar^2/ml^2)$, $E_r \equiv E/(\hbar^2/ml^2)$, dan p = −1 untuk fungsi gelombang genap serta p = 1 untuk fungsi gelombang ganjil. Fungsi tangen hiperbolik, yang

didefinisikan sebagai $\tanh z \equiv (e^z - e^{-z})/(e^z + e^{-z})$, dapat dihasilkan dengan mengetik TANH dalam Excel. Gunakan (4.90) dan lembar kerja atau Mathcad untuk menentukan empat energi sumur ganda terendah bagi setiap nilai V_{0r} pada Soal 4.37.

4.50 (a) Tunjukkan bahwa jika k_i dan f_i masing-masing merupakan nilai eigen dan fungsi eigen dari operator linear $\hat{A}$, maka ck_i dan f_i masing-masing merupakan nilai eigen dan fungsi eigen dari $c\hat{A}$. (b) Berikan suatu operator yang nilai eigennya ½, ³⁄₂, ⁵⁄₂, dan seterusnya. (c) Berikan suatu operator yang nilai eigennya 1, 2, 3, dan seterusnya.

4.51 (a) Suatu sistem tertentu dalam keadaan stasioner tertentu mempunyai $\psi = Ne^{-ax^4}$, dengan N konstanta normalisasi. Tentukan fungsi energi potensial sistem V(x) dan energinya E. Petunjuk: tingkat nol energi bersifat sembarang, sehingga pilih V(0) = 0. (b) Buat sketsa V(x). (c) Apakah ψ tersebut merupakan fungsi keadaan dasar? Jelaskan.

4.52 Tunjukkan bahwa penambahan suatu konstanta C pada energi potensial tidak mengubah fungsi gelombang keadaan stasioner dan hanya menambahkan C pada nilai eigen energi.

4.53 Benar atau salah? (a) Dalam daerah terlarang secara klasik, E > V bagi suatu keadaan stasioner. (b) Jika fungsi gelombang osilator harmonik ψ_v merupakan fungsi genap, maka ψ_{v+1} merupakan fungsi ganjil. (c) Bagi fungsi gelombang osilator harmonik, $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_v^*(x)\psi_{v+1}(x)dx = 0$. (d) Pada suatu simpul dalam fungsi gelombang keadaan stasioner terikat, ψ'' harus nol asalkan V tidak tak hingga pada simpul tersebut. (e) Jarak antara tingkat vibrasi berdekatan suatu molekul diatomik tetap konstan ketika energi vibrasi meningkat. (f) Bagi fungsi gelombang osilator harmonik v = 25, tanda ψ di daerah terlarang secara klasik sebelah kanan berlawanan dengan tandanya di daerah terlarang secara klasik sebelah kiri. (g) Jumlah puncak pada grafik $|\psi_v|^2$ sama dengan v + 1, dengan v bilangan kuantum.

PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 4

Osilator Harmonik

Setiap nomor berikut memuat dasar teori, langkah penyelesaian, pemeriksaan, dan kesimpulan. Semua persamaan akan dikonversi menjadi objek persamaan Word.

Pembahasan 4.1

Inti soal. Dengan syarat-syarat tertentu terpenuhi, fungsi f(x) dapat dikembangkan menjadi deret pangkat tak berhingga di sekitar titik x = a: [gambar pada soal] Diferensiasikan (4.84) sebanyak m kali, kemudian tetapkan x = a untuk menunjukkan bahwa $c_n = f^{(n)}(a)/n!$, sehingga diperoleh deret Taylor yang dikenal: [gambar pada soal]

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.2

Inti soal. Gunakan (4.85) untuk menurunkan beberapa suku pertama dalam pengembangan deret Taylor di sekitar x = 0 bagi fungsi sin x, kemudian simpulkan rumus umumnya. (b) Diferensiasikan deret Taylor pada bagian (a) untuk memperoleh deret Taylor bagi cos x.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.3

Inti soal. Tentukan pengembangan deret Taylor di sekitar x = 0 bagi e^x. (b) Gunakan deret Taylor (di sekitar x = 0) dari sin x, cos x, dan e^x untuk memverifikasi bahwa $e^{i\theta} = \cos\theta + i \sin\theta$ [Persamaan (1.28)].

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.4

Inti soal. Turunkan (4.29) untuk energi E suatu osilator klasik.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.5

Inti soal. Tentukan hubungan rekurensi bagi koefisien c_n dalam penyelesaian deret pangkat dari $(1 - x^2)y''(x) - 2xy'(x) + 3y(x) = 0$. (b) Nyatakan c_4 dalam c_0 dan c_5 dalam c_1.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 4.6

Inti soal. Manakah di antara fungsi-fungsi berikut yang merupakan fungsi genap? Manakah yang merupakan fungsi ganjil? (a) sin x; (b) cos x; (c) tan x; (d) e^x; (e) 13; (f) x cos x; (g) 2 − 2x; (h) $(3 + x^2)(3 - x^2)$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan simetri paritas dan sifat integral pada batas simetris. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 4.7

Inti soal. Buktikan pernyataan-pernyataan setelah Persamaan (4.51) mengenai hasil kali fungsi genap dan fungsi ganjil.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan simetri paritas dan sifat integral pada batas simetris. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.8

Inti soal. Jika f(x) merupakan fungsi genap yang dapat didiferensiasikan di semua titik, buktikan bahwa f′(x) merupakan fungsi ganjil. Jangan menganggap bahwa f(x) dapat dikembangkan menjadi deret Taylor. (b) Buktikan bahwa turunan fungsi ganjil yang dapat didiferensiasikan di semua titik merupakan fungsi genap. (c) Jika f(x) merupakan fungsi genap yang dapat didiferensiasikan di…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan simetri paritas dan sifat integral pada batas simetris. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.9

Inti soal. Untuk keadaan dasar osilator harmonik satu dimensi, tentukan nilai rata-rata energi kinetik dan energi potensial; verifikasi bahwa ⟨T⟩ = ⟨V⟩ dalam kasus ini.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika

melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.10

Inti soal. Verifikasi faktor normalisasi bagi fungsi gelombang osilator harmonik dengan v = 1 dan v = 2.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.11

Inti soal. Gunakan hubungan rekurensi (4.46) untuk menentukan fungsi gelombang osilator harmonik ternormalisasi dengan v = 3.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau

simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 4.12

Inti soal. Tentukan c/c_0 bagi fungsi gelombang osilator harmonik dengan v = 4.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 4.13

Inti soal. Untuk keadaan osilator harmonik dengan v = 1, tentukan posisi atau posisi-posisi yang paling mungkin ditempati partikel.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 4.14

Inti soal. Gambarkan secara kasar grafik ψ dan ψ² bagi keadaan v = 5 dari osilator harmonik satu dimensi tanpa menentukan rumus eksplisit ψ.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Konstruksi gambar. Tentukan lebih dahulu titik nol, simpul, tanda fungsi, simetri, posisi maksimum/minimum, serta perilaku pada batas. Hubungkan titik-titik itu dengan kurva halus yang konsisten dengan turunan fungsi. Untuk $|\psi|^2$, semua bagian negatif fungsi gelombang menjadi positif dan jumlah daerah probabilitas harus ternormalisasi.

Sketsa yang benar harus memperlihatkan jumlah simpul yang sesuai dengan bilangan kuantum, bentuk permukaan yang sesuai koordinat, dan tidak boleh mengubah lokasi simpul ketika beralih dari ψ ke $|\psi|^2$.

Kesimpulan. Gambar akhir ditentukan oleh simpul, simetri, tanda, dan kondisi batas tersebut. Kurva atau permukaan yang tidak memenuhi salah satu ciri itu harus ditolak.

Pembahasan 4.15

Inti soal. Tentukan ⟨x⟩ bagi keadaan osilator harmonik dengan bilangan kuantum v.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 4.16

Inti soal. Benar atau salah? (a) Semua fungsi gelombang osilator harmonik dengan v berupa bilangan bulat ganjil harus mempunyai simpul di titik asal. (b) Fungsi gelombang osilator harmonik v = 10 mempunyai 10 simpul bagian dalam. (c) Fungsi gelombang osilator harmonik v = 1 harus bernilai negatif untuk x < 0. (d) Tingkat-tingkat energi osilator harmonik berjarak sama. (e) Tingkat…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Setiap pernyataan diuji satu per satu: pernyataan yang mengikuti definisi dan domain operator dinyatakan benar, sedangkan yang melanggar syarat batas, normalisasi, komutasi, atau spektrum nilai eigen dinyatakan salah. Alasan fisiknya harus dicantumkan, bukan hanya label benar/salah.

Pembahasan 4.17

Inti soal. Jelaskan persamaan dan perbedaan antara fungsi gelombang serta energi partikel satu dimensi dalam kotak dan osilator harmonik.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi

domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 4.18

Inti soal. Selesaikan persamaan osilator harmonik klasik (4.22) untuk memperoleh t sebagai fungsi x. Kemudian diferensiasikan persamaan tersebut untuk memperoleh dt/dx sebagai fungsi x. Anda mungkin perlu mencari rumus turunannya. Tuliskan hasil dalam bentuk dt = f(x) dx, dengan f(x) suatu fungsi tertentu dari x. Rumus ini memberikan selang waktu infinitesimal yang dihabiskan osilator…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.19

Inti soal. Tentukan nilai eigen dan fungsi eigen $\hat{H}$ bagi sistem satu dimensi dengan $V(x) = \infty$ untuk $x < 0$ dan $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ untuk $x \geq 0$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 4.20

Inti soal. Osilator harmonik tiga dimensi mempunyai fungsi energi potensial $V = ½k_x x^2 + ½k_\gamma y^2 + ½k\_z\ z^2$, dengan k_x, k_γ, dan k_z sebagai tiga konstanta gaya. Tentukan nilai eigen energinya dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger. (b) Jika $k_x = k_\gamma =$ k_z, tentukan derajat degenerasi masing-masing dari empat tingkat energi terendah.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 4.21

Inti soal. Polinomial Hermite didefinisikan oleh $H_n(z) = (-1)^n e^{z^2}[d^n(e^{-z^2})/dz^n]$. (a) Verifikasi bahwa $H_0 = 1$, $H_1 = 2z$, $H_2 = 4z^2 - 2$, $H_3 = 8z^3 - 12z$. (b) Polinomial Hermite memenuhi hubungan berikut (Pauling dan Wilson, halaman 77–79): $zH_n(z) = nH_{n-1}(z) + ½H_{n+1}(z)$. Verifikasi identitas ini untuk n = 0, 1, dan 2. (c) Fungsi gelombang osilator harmonik ternormalisasi dapat…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.22

Inti soal. Ketika persamaan diferensial homogen linear orde kedua dituliskan dalam bentuk (2.3), setiap titik tempat P(x) atau Q(x) menjadi tak hingga disebut titik singular atau singularitas. Dalam menyelesaikan persamaan diferensial menggunakan metode deret pangkat, substitusi yang tepat untuk menghasilkan hubungan rekurensi dua suku sering dapat ditemukan dengan menelaah persamaan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.23

Inti soal. Tulislah program komputer yang menggunakan hubungan rekurensi (4.39) untuk menghitung ψ/c_0 pada (4.40) terhadap $\alpha^{1/2}x$, untuk nilai $\alpha^{1/2}x$ dari 0 sampai 6 dengan kenaikan 0,5 dan untuk nilai tertentu $mE\hbar^{-2}/\alpha = E/h\nu$. Sertakan pengujian untuk menghentikan penjumlahan suku dalam deret tak berhingga ketika suku terakhir yang dihitung telah cukup kecil. (b) Jalankan program untuk…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 4.24

Inti soal. Spektrum serapan inframerah $^{1}H^{35}Cl$ mempunyai pita terkuat pada $8{,}65 \times 10^{13}$ Hz. Hitung konstanta gaya ikatan dalam molekul ini. (b) Tentukan energi vibrasi titik nol hampiran $^{1}H^{35}Cl$. (c) Prediksikan frekuensi pita inframerah terkuat $^{2}H^{35}Cl$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang,

dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 4.25

Inti soal. Pita v = 0 → 1 dan v = 0 → 2 dari $^{1}H^{35}Cl$ terjadi pada 2885,98 cm^{-1} dan 5667,98 cm^{-1}. (a) Hitung ν_e/c dan $\nu_e x_e/c$ bagi molekul ini. (b) Prediksikan bilangan gelombang pita v = 0 → 3 dari $^{1}H^{35}Cl$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 4.26

Inti soal. Pita v = 0 → 1 dari LiH terjadi pada 1359 cm^{-1}. Hitung rasio populasi v = 1 terhadap v = 0 pada 25 °C dan pada 200 °C. (b) Kerjakan hal yang sama seperti pada bagian (a) untuk ICl, yang pita inframerah terkuatnya terjadi pada 381 cm^{-1}.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 4.27

Inti soal. Verifikasi (4.62). (b) Tentukan persamaan yang bersesuaian bagi transisi v = 0 → v_2.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.28

Inti soal. Tunjukkan bahwa jika U(R) pada Gambar 4.6 dikembangkan menjadi deret Taylor di sekitar $R = R_e$ dan suku-suku yang mengandung $(R - R_e)^3$ serta pangkat yang lebih tinggi diabaikan—karena suku-suku tersebut kecil untuk R dekat R_e—maka diperoleh potensial osilator harmonik dengan $k = (d^2U/dR^2)\,\big|\,R=R_e$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.29

Inti soal. Fungsi Morse $U(R) = D_e[1 - e^{-a(R-R_e)}]^2$ sering digunakan untuk menghampiri kurva U(R) suatu molekul diatomik, dengan energi disosiasi kesetimbangan molekul D_e didefinisikan sebagai $D_e \equiv U(\infty) - U(R_e)$. (a) Verifikasi bahwa persamaan D_e tersebut dipenuhi oleh fungsi Morse. (b) Tunjukkan bahwa $a = (k_e/2D_e)^{1/2}$. Untuk Soal 4.30–4.38, gunakan program yang serupa dengan program…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 4.30

Inti soal. Gunakan metode Numerov untuk menentukan tiga energi keadaan stasioner terendah bagi partikel dalam kotak satu dimensi dengan panjang l dan dinding setinggi tak hingga.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 4.31

Inti soal. Gunakan metode Numerov untuk menentukan semua nilai eigen keadaan terikat bagi partikel dalam sumur persegi panjang (Bagian 2.4) dengan panjang l dan $V_0 = 20\hbar^2/ml^2$. Perhatikan bahwa V berbeda pada daerah yang berbeda dan $\psi = 0$ pada dinding. (b) Ulangi bagian (a) untuk $V_0 = 50\hbar^2/ml^2$. (c) Periksa hasil Anda dengan menggunakan pemecah otomatis pada program lembar kerja atau…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 4.32

Inti soal. Gunakan metode Numerov untuk menentukan tiga nilai eigen energi terendah bagi sistem satu partikel dengan $V = cx^4$, dengan c suatu konstanta.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 4.33

Inti soal. Gunakan metode Numerov untuk menentukan tiga nilai eigen energi terendah bagi sistem satu partikel dengan $V = ax^8$, dengan a suatu konstanta.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 4.34

Inti soal. Gunakan metode Numerov untuk menentukan empat nilai eigen energi terendah bagi sistem satu partikel dengan V = ∞ untuk x ≤ 0 dan V = bx untuk x > 0, dengan b suatu konstanta positif. Untuk b = mg, sistem ini adalah partikel dalam medan gravitasi.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 4.35

Inti soal. Tinjau sistem satu partikel dengan $V = -[1{,}5(\hbar^2/ma^2)]/[e^{x/a} + e^{-x/a}]^2$, dengan a suatu konstanta positif. (a) Tentukan V_r. (b) Gunakan lembar kerja, kalkulator grafik, atau Mathcad untuk menggambarkan V_r terhadap x_r. Lihat Soal 4.39. (c) Gunakan metode Numerov untuk menentukan semua nilai eigen keadaan terikat yang lebih kecil daripada −0,1. Fungsi eksponensial…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 4.36

Inti soal. Tinjau sistem satu partikel dengan $V = \frac{1}{4}b^2/c - bx^2 + cx^4$, dengan b dan c konstanta positif. Jika $\hbar$, m, dan b digunakan untuk menentukan A dan B dalam $E_r = E/A$ dan $x_r = x/B$, diperoleh hasil yang sama dengan osilator harmonik, kecuali k digantikan oleh b. Dengan demikian, Persamaan (4.74) memberikan $B = m^{-1/4}b^{-1/4}\hbar^{1/2}$. Persamaan V dalam soal ini menunjukkan bahwa $[bx^2] =$…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 4.37

Inti soal. Potensial sumur ganda satu dimensi mempunyai $V = \infty$ untuk $x < -\frac{1}{2}l$; $V = 0$ untuk $-\frac{1}{2}l \le x \le -\frac{1}{4}l$; $V = V_0$ untuk $-\frac{1}{4}l < x < \frac{1}{4}l$; $V = 0$ untuk $\frac{1}{4}l \le x \le \frac{1}{2}l$; dan $V = \infty$ untuk $x > \frac{1}{2}l$, dengan l dan V_0 konstanta positif. Buat sketsa V. Gunakan metode Numerov untuk menentukan empat nilai eigen terendah dan fungsi eigen tak ternormalisasi yang bersesuaian bagi nilai $V_0/(\hbar^2/ml^2)$ berikut:…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai

eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.38

Inti soal. Dalam contoh Numerov bagi osilator harmonik, perhitungan dilakukan dari −5 sampai 5 dengan langkah 0,1 dan diperoleh 0,4999996 sebagai nilai eigen terendah. Untuk pilihan $x_{r,0}$ dan s_r ini, tentukan semua nilai eigen dengan $E_r < 6$; kemudian tentukan nilai eigen yang terletak di antara 11 dan 12 dan jelaskan mengapa hasilnya tidak teliti. Selanjutnya ubah $x_{r,0}$ atau s_r, atau…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.39

Inti soal. Lembar kerja mengandung jebakan bagi pengguna yang tidak waspada. (a) Jika sel A1 berisi nilai 5, hasil apakah yang Anda harapkan dari rumus =−A1^2+A1^2? Perhatikan tanda minus. (b) Dengan Excel, masukkan 5 ke sel A1, masukkan =−A1^2+A1^2 ke sel A2, dan masukkan =+A1^2−A1^2 ke sel A3. Hasil apakah yang Anda peroleh?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 4.40

Inti soal. Rumus lembar kerja dapat ditulis dengan lebih elegan jika sel-sel yang berisi parameter diberi nama. Cari cara memberi nama sel dalam program lembar kerja yang Anda gunakan. (a) Dalam contoh osilator harmonik, beri nama sel B3 dan D3 masing-masing sebagai Er dan sr. Kemudian ganti B3 dan D3 dengan Er dan sr dalam semua rumus pada lembar kerja. (b) Mengapa x2 tidak…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 4.41

Inti soal. Gunakan (4.67) untuk menunjukkan bahwa jika ψ_1 dalam metode Numerov dikalikan dengan suatu konstanta c, maka ψ_2, ψ_3, dan seterusnya semuanya juga dikalikan dengan c. Jadi, seluruh fungsi gelombang dikalikan dengan c, yang tidak memengaruhi nilai eigen yang ditemukan.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 4.42

Inti soal. Gunakan fungsi gelombang osilator harmonik ternormalisasi yang diperoleh dengan metode Numerov dari −5 sampai 5 menggunakan langkah 0,1 untuk memperkirakan probabilitas partikel berada di daerah terlarang secara klasik bagi keadaan v = 0 dan v = 1.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan

pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.43

Inti soal. Dalam deret Taylor (4.85) pada Soal 4.1, sebut titik x = a sebagai x_n, yakni $x_n \equiv a$, dan tetapkan $s \equiv x - a = x - x_n$ sehingga $x = x_n + s$. (a) Dengan notasi ini, tuliskan (4.85) sebagai $f(x_n + s)$ yang sama dengan deret pangkat dalam s dan evaluasi semua suku sampai s^5. (b) Dalam hasil bagian (a), ubah s menjadi −s untuk memperoleh deret bagi $f(x_n - s)$. Kemudian jumlahkan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.44

Inti soal. Gunakan analisis dimensi untuk memverifikasi (4.74) bagi B.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.45

Inti soal. Dalam menerapkan metode Numerov untuk menghitung simpul ψ_r, telah diasumsikan bahwa ψ berubah tanda ketika melewati suatu simpul. Akan tetapi, terdapat fungsi yang tidak mempunyai tanda berlawanan pada kedua sisi suatu simpul. Sebagai contoh, fungsi $y = x^2$ dan $y = x^4$ bernilai positif pada kedua sisi simpul $x = 0$. Bagi suatu fungsi y yang positif pada titik-titik tepat di…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v\left(\alpha^{1/2}x\right)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.46

Inti soal. Misalkan $V = cx^8$, dengan c suatu konstanta positif, dan hendak dicari semua nilai eigen dengan $E_r < 10$. (a) Tunjukkan bahwa $V_r = x_r^8$ dan bahwa untuk $E_r = 10$, batas-batas daerah yang diizinkan secara klasik terletak pada $x_r = \pm 1{,}33$.

(b) Siapkan lembar kerja dan verifikasi bahwa jika digunakan $x_{r,0} = -3$, $x_{r,maks} = 3$, dan $s_r = 0{,}05$, ψ mengalami osilasi palsu untuk $|x_r| > \ldots$

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 4.47

Inti soal. Modifikasikan program pada Tabel 4.1 untuk menentukan fungsi gelombang ternormalisasi.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 4.48

Inti soal. Tuliskan ulang program pada Tabel 4.1 dengan menghilangkan seluruh variabel larik.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti persamaan osilator harmonik, polinomial Hermite, paritas, dan normalisasi: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 4.49

Inti soal. Lembar kerja dan sistem aljabar komputer dapat dengan mudah digunakan untuk menyelesaikan persamaan berbentuk f(x) = 0. Sebagai contoh, misalkan hendak diselesaikan $e^x = 2 - x^2$. Grafik yang dibuat komputer menunjukkan bahwa fungsi $e^x - 2 + x^2$ sama dengan nol hanya pada dua titik, satu positif dan satu negatif. Dalam Excel, masukkan tebakan awal 0 bagi x ke sel A1 dan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 4.50

Inti soal. Tunjukkan bahwa jika k_i dan f_i masing-masing merupakan nilai eigen dan fungsi eigen dari operator linear Â, maka ck_i dan f_i masing-masing merupakan nilai eigen dan fungsi eigen dari cÂ. (b) Berikan suatu operator yang nilai eigennya ½, ³⁄₂, ⁵⁄₂, dan seterusnya. (c) Berikan suatu operator yang nilai eigennya 1, 2, 3, dan seterusnya.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.51

Inti soal. Suatu sistem tertentu dalam keadaan stasioner tertentu mempunyai ψ = Ne^{-ax^4}, dengan N konstanta normalisasi. Tentukan fungsi energi potensial sistem V(x) dan energinya E. Petunjuk: tingkat nol energi bersifat sembarang, sehingga pilih V(0) = 0. (b) Buat sketsa V(x). (c) Apakah ψ tersebut merupakan fungsi keadaan dasar? Jelaskan.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Konstruksi gambar. Tentukan lebih dahulu titik nol, simpul, tanda fungsi, simetri, posisi maksimum/minimum, serta perilaku pada batas. Hubungkan titik-titik itu dengan kurva halus yang konsisten dengan turunan fungsi. Untuk $|\psi|^2$, semua bagian negatif fungsi gelombang menjadi positif dan jumlah daerah probabilitas harus ternormalisasi.

Sketsa yang benar harus memperlihatkan jumlah simpul yang sesuai dengan bilangan kuantum, bentuk permukaan yang sesuai koordinat, dan tidak boleh mengubah lokasi simpul ketika beralih dari ψ ke $|\psi|^2$.

Kesimpulan. Gambar akhir ditentukan oleh simpul, simetri, tanda, dan kondisi batas tersebut. Kurva atau permukaan yang tidak memenuhi salah satu ciri itu harus ditolak.

Pembahasan 4.52

Inti soal. Tunjukkan bahwa penambahan suatu konstanta C pada energi potensial tidak mengubah fungsi gelombang keadaan stasioner dan hanya menambahkan C pada nilai eigen energi.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 4.53

Inti soal. Benar atau salah? (a) Dalam daerah terlarang secara klasik, E > V bagi suatu keadaan stasioner. (b) Jika fungsi gelombang osilator harmonik ψ_v merupakan fungsi genap, maka ψ_{v+1} merupakan fungsi ganjil. (c) Bagi fungsi gelombang osilator harmonik, $\int_{-\infty}^{\infty}\psi_v^*(x)\psi_{v+1}(x)dx = 0$. (d) Pada suatu simpul dalam fungsi gelombang keadaan stasioner terikat, ψ'' harus nol asalkan V tidak…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_v = (v + 1/2)h\nu$, $\psi_v = N_v H_v(\alpha^{1/2}x)e^{-\alpha x^2/2}$, dengan $\alpha = m\omega/\hbar$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Setiap pernyataan diuji satu per satu: pernyataan yang mengikuti definisi dan domain operator dinyatakan benar, sedangkan yang melanggar syarat batas, normalisasi, komutasi, atau spektrum nilai eigen dinyatakan salah. Alasan fisiknya harus dicantumkan, bukan hanya label benar/salah.

BAB 5 — MOMENTUM SUDUT

Soal

Pembagian soal menurut bagian: Bagian 5.1 mencakup Soal 5.1–5.8; Bagian 5.2 mencakup Soal 5.9–5.15; Bagian 5.3 mencakup Soal 5.16–5.34; Bagian 5.4 mencakup Soal 5.35–5.36; dan Soal 5.37 bersifat umum.

5.1 Nyatakan apakah dua operator pada setiap pasangan berikut saling berkomutasi: (a) $\hat{x}^2$ dan $\partial/\partial x$; (b) $\hat{y}^2$ dan $\partial/\partial z$; (c) $\hat{x}^2$ dan $\hat{z}^2$; (d) $\partial/\partial x$ dan $\partial^2/\partial x^2$; (e) $\partial/\partial x$ dan $\partial/\partial y$.

5.2 Verifikasikan identitas komutator (5.1)–(5.5).

5.3 Tentukan $[\hat{x}, \hat{p}_x^3]$ dengan bertolak dari (5.7) untuk $[\hat{x}, \hat{p}_x^2]$.

5.4 Untuk keadaan dasar osilator harmonik satu dimensi, hitung simpangan baku Δx dan Δp_x, lalu periksa bahwa prinsip ketidakpastian dipenuhi. Gunakan hasil Soal 4.9 untuk menghemat perhitungan.

5.5 Pada suatu saat, sebuah partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l (Gambar 2.1) berada dalam keadaan tidak stasioner dengan $\psi = (105/l^7)^{1/2}x^2(l - x)$ di dalam kotak. Untuk keadaan ini, tentukan Δx dan Δp_x, kemudian verifikasikan bahwa prinsip ketidakpastian $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$ dipenuhi.

5.6 Tunjukkan bahwa simpangan baku ΔA bernilai nol ketika ψ merupakan fungsi eigen $\hat{A}$.

5.7 Turunkan $(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$ [Persamaan (5.11)].

5.8 Misalkan w adalah variabel yang didefinisikan sebagai jumlah sisi kepala yang muncul ketika dua uang logam dilempar secara serentak. Tentukan $\langle w \rangle$ dan σ_w. Petunjuk: gunakan (5.11).

5.9 Klasifikasikan masing-masing besaran berikut sebagai skalar atau vektor: (a) 3B; (b) C × B; (c) C · B; (d) |B|; (e) kecepatan; (f) energi potensial.

5.10 Misalkan A mempunyai komponen (3, −2, 6) dan B mempunyai komponen (−1, 4, 4). Tentukan |A|, |B|, A + B, A − B, A · B, dan A × B. Tentukan pula sudut antara A dan B.

5.11 Gunakan hasil kali titik vektor untuk menentukan sudut tumpul antara dua diagonal sebuah kubus. Apa arti kimia sudut tersebut?

5.12 (a) Gunakan hasil kali titik vektor untuk menunjukkan bahwa dalam $HCBr_3$ berlaku $\cos(\angle BrCBr) = 1 - 1{,}5 \sin^2(\angle HCBr)$. (b) Dalam $HCBr_3$, $\angle HCBr = 107{,}2°$. Tentukan ∠BrCBr.

5.13 Misalkan $f = 2x^2 - 5xyz + z^2 - 1$. Tentukan grad f. Tentukan $\nabla^2 f$.

5.14 Divergensi fungsi vektor A adalah fungsi skalar yang didefinisikan oleh

$$\text{div } A \equiv \nabla \cdot A = (i\partial/\partial x + j\partial/\partial y + k\partial/\partial z) \cdot (A_x i + A_\gamma j + A\_zk)$$

$$\text{div } A \equiv \partial A_x/\partial x + \partial A_\gamma/\partial y + \partial A\_z/\partial z$$

(a) Verifikasikan bahwa $\text{div}[\text{grad } g(x, y, z)] \equiv \nabla \cdot \nabla g = \partial^2 g/\partial x^2 + \partial^2 g/\partial y^2 + \partial^2 g/\partial z^2$. Inilah asal notasi ∇^2 untuk $\partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$. (b) Tentukan $\nabla \cdot r$, dengan $r = ix + jy + kz$.

5.15 Untuk vektor (3, −2, 0, 1) dalam ruang empat dimensi, tentukan (a) panjangnya dan (b) sudut-sudut arahnya.

5.16 Nyatakan apakah dua operator pada setiap pasangan berikut saling berkomutasi: (a) $\hat{L}_x$ dan $\hat{L}\_z$; (b) $\hat{L}\_z$ dan $\hat{L}^2$; (c) $\hat{L}_x$ dan $\hat{L}^2$; (d) $\hat{L}_x^2$ dan $\hat{L}^2$.

5.17 Turunkan Persamaan (5.68) untuk $\hat{L}^2$ dari Persamaan (5.65)–(5.67).

5.18 Tentukan $[\hat{L}_x^2, \hat{L}_\gamma]$.

5.19 Tentukan koordinat bola titik-titik dengan koordinat (x, y, z) berikut: (a) (1, 2, 0); (b) (−1, 0, 3); (c) (3, 1, −2); (d) (−1, −1, −1).

5.20 Tentukan koordinat (x, y, z) titik-titik dengan koordinat bola berikut: (a) $r = 1, \theta = \pi/2, \varphi = \pi$; (b) $r = 2, \theta = \pi/4, \varphi = 0$.

5.21 Nyatakan bentuk permukaan tempat (a) r konstan; (b) θ konstan; (c) φ konstan.

5.22 Dengan mengintegralkan elemen volume diferensial koordinat bola $d\tau$ pada batas yang sesuai, verifikasikan rumus $(4/3)\pi R^3$ untuk volume bola berjari-jari R.

5.23 Hitung sudut-sudut yang mungkin antara L dan sumbu z untuk $l = 2$.

5.24 (a) Tunjukkan bahwa bagi fungsi eigen momentum sudut orbital, nilai terkecil yang mungkin untuk sudut antara L dan sumbu z memenuhi $\cos^2\theta = l/(l + 1)$. (b) Ketika l meningkat, apakah sudut terkecil yang mungkin ini meningkat atau menurun?

5.25 Substitusikan $d/d\theta = -(1 - w^2)^{1/2}(d/dw)$, yang mengikuti (5.85), serta Persamaan (5.85) ke dalam $d^2S/d\theta^2 = (d/d\theta)(dS/d\theta)$ untuk memverifikasikan Persamaan (5.86).

5.26 Turunkan rumus $S_{2,0}$ pada Tabel 5.1 dengan dua cara: (a) menggunakan (5.146) dalam Soal 5.34; (b) menggunakan relasi rekurensi dan normalisasi.

5.27 Gunakan relasi rekurensi (5.98) dan normalisasi untuk menentukan (a) Y_3^0; (b) Y_3^1.

5.28 Terapkan operator $\hat{L}^2$ pada (5.68) kepada Y_2^0 dan verifikasikan bahwa persamaan nilai eigen (5.104) dipenuhi.

5.29 Lengkapi persamaan berikut: $\hat{L}_z^3 Y_l^m = ?$

5.30 Tunjukkan bahwa harmonik bola merupakan fungsi eigen operator $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_\gamma^2$. Pembuktiannya singkat. Tentukan nilai eigennya.

5.31 (a) Apabila L_z suatu partikel yang mempunyai bilangan kuantum momentum sudut $l = 2$ diukur, apa saja hasil pengukuran yang mungkin? (b) Apabila L_z suatu partikel yang fungsi keadaannya merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$ dengan nilai eigen $12\hbar^2$ diukur, apa saja hasil yang mungkin?

5.32 Apabila L_y suatu partikel yang mempunyai bilangan kuantum momentum sudut $l = 1$ diukur, apa saja hasil pengukuran yang mungkin?

5.33 Pada suatu saat t', sebuah partikel mempunyai fungsi keadaan $\psi = Ne^{-\alpha r^2} Y_2^1(\theta, \varphi)$, dengan N dan α konstanta. (a) Apabila L^2 partikel diukur pada waktu t', apa hasilnya? Berikan jawaban numerik. (b) Apabila L_z partikel diukur pada t', apa hasilnya? Berikan jawaban numerik.

5.34 Fungsi Legendre terasosiasi $P_l^{|m|}(w)$ didefinisikan oleh

$$P_l^{|m|}(w) \equiv \frac{1}{2^l l!}(1 - w^2)^{|m|/2} \frac{d^{l+|m|}}{dw^{l+|m|}}(w^2 - 1)^l, \qquad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{5.145}$$

Verifikasikan bahwa $P_0^0(w) = 1$, $P_1^0(w) = w$, $P_1^1(w) = (1 - w^2)^{1/2}$, lalu tentukan $P_2^0(w)$, $P_2^1(w)$, dan $P_2^2(w)$. Dapat ditunjukkan bahwa (Pauling dan Wilson, hlm. 129)

$$S_{l,m}(\theta) = \left[\frac{2l + 1}{2} \frac{(l - |m|)!}{(l + |m|)!}\right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos\theta) \tag{5.146}$$

Persamaan (5.146) dan (5.145) memberikan rumus eksplisit faktor theta ternormalisasi dalam fungsi eigen momentum sudut. Fungsi eigen ternormalisasi $\hat{L}^2$ dan $\hat{L}_z$, yaitu harmonik bola, diberikan oleh Persamaan (5.146) dan (5.99) sebagai

$$Y_l^m(\theta, \phi) = \left[\frac{2l + 1}{4\pi} \frac{(l - |m|)!}{(l + |m|)!}\right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos\theta) e^{im\phi} \tag{5.147}$$

Fase konstanta normalisasi harmonik bola bersifat sembarang (lihat Bagian 1.7). Banyak buku menggunakan konvensi fase yang berbeda dari (5.147). Karena itu, Y_l^m dapat berbeda tanda negatif dari satu buku ke buku lain.

5.35 Terapkan operator penurun $\hat{L}_-$ tiga kali berturut-turut pada $Y_1^1(\theta, \varphi)$ dan verifikasikan bahwa diperoleh fungsi-fungsi yang sebanding dengan Y_1^0, Y_1^{-1}, dan nol.

5.36 Hamiltonian osilator harmonik satu dimensi adalah

$$\hat{H} = \hat{p}_x^2/2m + 2\pi^2\nu^2 m\hat{x}^2$$

Operator penaik dan penurun bagi masalah ini didefinisikan sebagai

$$\hat{A}_+ \equiv (2m)^{-1/2}(\hat{p}_x + 2\pi i\nu m\hat{x}), \quad \hat{A}_- \equiv (2m)^{-1/2}(\hat{p}_x - 2\pi i\nu m\hat{x})$$

Tunjukkan bahwa

$$\hat{A}_+\hat{A}_- = \hat{H} - \tfrac{1}{2}h\nu, \quad \hat{A}_-\hat{A}_+ = \hat{H} + \tfrac{1}{2}h\nu, \quad [\hat{A}_+, \hat{A}_-] = -h\nu$$

$$[\hat{H}, \hat{A}_+] = h\nu\hat{A}_+, \quad [\hat{H}, \hat{A}_-] = -h\nu\hat{A}_-$$

Tunjukkan bahwa $\hat{A}_+$ dan $\hat{A}_-$ benar-benar merupakan operator tangga dan bahwa nilai-nilai eigennya terpisah dalam selang $h\nu$. Karena energi kinetik dan energi potensial keduanya tidak negatif, nilai eigen energi diharapkan tidak negatif. Karena itu, harus terdapat keadaan berenergi minimum. Operasikan fungsi gelombang keadaan ini terlebih dahulu dengan $\hat{A}_-$ dan kemudian dengan $\hat{A}_+$, lalu tunjukkan bahwa nilai eigen energi terendah adalah $\tfrac{1}{2}h\nu$. Akhirnya simpulkan bahwa

$$E = (n + \tfrac{1}{2})h\nu, \quad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Lihat juga Soal 7.62.

5.37 Benar atau salah? (a) Nilai eigen $\hat{L}^2$ terdegenerasi, kecuali untuk $l = 0$. (b) Karena $\hat{L}^2 Y_l^m = l(l + 1)\hbar^2 Y_l^m$, maka $\hat{L}^2 = l(l + 1)\hbar^2$. (c) $\hat{L}^2$ berkomutasi dengan $\hat{L}_x$. (d) Y_0^0 adalah konstanta. (e) Y_0^0 merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$, $\hat{L}_x$, $\hat{L}_\gamma$, dan $\hat{L}_z$. (f) Apabila $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ tidak saling komutatif, mustahil suatu fungsi eigen $\hat{A}$ sekaligus menjadi fungsi eigen $\hat{B}$.

PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 5

Momentum Sudut

Setiap nomor berikut memuat dasar teori, langkah penyelesaian, pemeriksaan, dan kesimpulan. Semua persamaan akan dikonversi menjadi objek persamaan Word.

Pembahasan 5.1

Inti soal. Nyatakan apakah dua operator pada setiap pasangan berikut saling berkomutasi: (a) $\hat{x}^2$ dan $\partial/\partial x$; (b) $\hat{y}^2$ dan $\partial/\partial z$; (c) $\hat{x}^2$ dan $\hat{z}^2$; (d) $\partial/\partial x$ dan $\partial^2/\partial x^2$; (e) $\partial/\partial x$ dan $\partial/\partial y$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 5.2

Inti soal. Verifikasikan identitas komutator (5.1)–(5.5).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 5.3

Inti soal. Tentukan $[\hat{x}, \hat{p}_x^3]$ dengan bertolak dari (5.7) untuk $[\hat{x}, \hat{p}_x^2]$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\left[L_x, L_y\right] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 5.4

Inti soal. Untuk keadaan dasar osilator harmonik satu dimensi, hitung simpangan baku Δx dan Δp_x, lalu periksa bahwa prinsip ketidakpastian dipenuhi. Gunakan hasil Soal 4.9 untuk menghemat perhitungan.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\left[L_x, L_y\right] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. $\Delta x = \sqrt{\hbar/(2m\omega)}$, $\Delta p_x = \sqrt{m\hbar\,\omega/2}$, sehingga $\Delta x \Delta p_x = \hbar/2$; keadaan dasar tepat mencapai batas minimum Heisenberg.

Pembahasan 5.5

Inti soal. Pada suatu saat, sebuah partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l (Gambar 2.1) berada dalam keadaan tidak stasioner dengan $\psi = (105/l^7)^{1/2}x^2(l - x)$ di dalam kotak. Untuk keadaan ini, tentukan Δx dan Δp_x, kemudian verifikasikan bahwa prinsip ketidakpastian $\Delta x \Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$ dipenuhi.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A, B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 5.6

Inti soal. Tunjukkan bahwa simpangan baku ΔA bernilai nol ketika ψ merupakan fungsi eigen $\hat{A}$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A, B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 5.7

Inti soal. Turunkan $(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$ [Persamaan (5.11)].

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\left[L_x, L_y\right] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\, |\langle [A, B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 5.8

Inti soal. Misalkan w adalah variabel yang didefinisikan sebagai jumlah sisi kepala yang muncul ketika dua uang logam dilempar secara serentak. Tentukan ⟨w⟩ dan σ_w. Petunjuk: gunakan (5.11).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Peluang $w = 0{,}1{,}2$ berturut-turut $1/4\,, 1/2\,, 1/4$. Maka $\langle w \rangle = 1$, $\langle w^2 \rangle = 3/2$, dan $\sigma_w = 1/\sqrt{2}$.

Pembahasan 5.9

Inti soal. Klasifikasikan masing-masing besaran berikut sebagai skalar atau vektor: (a) 3B; (b) C × B; (c) C · B; (d) |B|; (e) kecepatan; (f) energi potensial.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 5.10

Inti soal. Misalkan A mempunyai komponen (3, −2, 6) dan B mempunyai komponen (−1, 4, 4). Tentukan |A|, |B|, A + B, A − B, A · B, dan A × B. Tentukan pula sudut antara A dan B.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. $|A| = 7$, $|B| = \sqrt{33}$, $A + B = (2,2,10)$, $A - B = (4,-6,2)$, $A \cdot B = 13$, dan $A \times B = (-32,-18,10)$. Sudutnya $cos^{-1}\left[13/\left(7\sqrt{33}\right)\right] \approx 71,2°$.

Pembahasan 5.11

Inti soal. Gunakan hasil kali titik vektor untuk menentukan sudut tumpul antara dua diagonal sebuah kubus. Apa arti kimia sudut tersebut?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 5.12

Inti soal. Gunakan hasil kali titik vektor untuk menunjukkan bahwa dalam $HCBr_3$ berlaku $\cos(\angle BrCBr) = 1 - 1{,}5\sin^2(\angle HCBr)$. (b) Dalam $HCBr_3$, $\angle HCBr = 107{,}2°$. Tentukan $\angle BrCBr$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 5.13

Inti soal. Misalkan $f = 2x^2 - 5xyz + z^2 - 1$. Tentukan grad f. Tentukan $\nabla^2 f$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. $\nabla f = (4x - 5yz)i - 5xzj + (-5xy + 2z)k$ dan $\nabla^2 f = 6$.

Pembahasan 5.14

Inti soal. Divergensi fungsi vektor A adalah fungsi skalar yang didefinisikan oleh div A ≡ ∇ · A = (i∂/∂x + j∂/∂y + k∂/∂z) · (A_xi + A_γj + A_zk) div A ≡ ∂A_x/∂x + ∂A_γ/∂y + ∂A_z/∂z (a) Verifikasikan bahwa div[grad g(x, y, z)] ≡ ∇ · ∇g = ∂²g/∂x² + ∂²g/∂y² + ∂²g/∂z². Inilah asal notasi ∇² untuk ∂²/∂x² + ∂²/∂y² + ∂²/∂z². (b) Tentukan ∇ · r, dengan r = ix + jy + kz.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A, B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Hasil khusus. Dari definisi gradien, divergensi gradien langsung memberi $\nabla^2 g$. Untuk $r = xi + yj + zk$, diperoleh $\nabla \cdot r = 1 + 1 + 1 = 3$.

Pembahasan 5.15

Inti soal. Untuk vektor (3, −2, 0, 1) dalam ruang empat dimensi, tentukan (a) panjangnya dan (b) sudut-sudut arahnya.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A, B] \rangle|$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 5.16

Inti soal. Nyatakan apakah dua operator pada setiap pasangan berikut saling berkomutasi: (a) $\hat{L}_x$ dan $\hat{L}\_z$; (b) $\hat{L}\_z$ dan $\hat{L}^2$; (c) $\hat{L}_x$ dan $\hat{L}^2$; (d) $\hat{L}_x^2$ dan $\hat{L}^2$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\left[L_x, L_y\right] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 5.17

Inti soal. Turunkan Persamaan (5.68) untuk $\hat{L}^2$ dari Persamaan (5.65)–(5.67).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\left[L_x, L_y\right] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai

eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 5.18

Inti soal. Tentukan $[\hat{L}_x^2, \hat{L}_\gamma]$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\left[L_x, L_y\right] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Dengan $[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B$ dan $\left[L_x, L_y\right] = i\hbar L_z$, diperoleh $\left[L_x^2, L_y\right] = i\hbar(L_x L_z + L_z L_x)$.

Pembahasan 5.19

Inti soal. Tentukan koordinat bola titik-titik dengan koordinat (x, y, z) berikut: (a) (1, 2, 0); (b) (−1, 0, 3); (c) (3, 1, −2); (d) (−1, −1, −1).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\left[L_x, L_y\right] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 5.20

Inti soal. Tentukan koordinat (x, y, z) titik-titik dengan koordinat bola berikut: (a) r = 1, θ = π/2, φ = π; (b) r = 2, θ = π/4, φ = 0.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 5.21

Inti soal. Nyatakan bentuk permukaan tempat (a) r konstan; (b) θ konstan; (c) φ konstan.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Konstruksi gambar. Tentukan lebih dahulu titik nol, simpul, tanda fungsi, simetri, posisi maksimum/minimum, serta perilaku pada batas. Hubungkan titik-titik itu dengan kurva halus yang konsisten dengan turunan fungsi. Untuk $|\psi|^2$, semua bagian negatif fungsi gelombang menjadi positif dan jumlah daerah probabilitas harus ternormalisasi.

Sketsa yang benar harus memperlihatkan jumlah simpul yang sesuai dengan bilangan kuantum, bentuk permukaan yang sesuai koordinat, dan tidak boleh mengubah lokasi simpul ketika beralih dari ψ ke $|\psi|^2$.

Kesimpulan. Gambar akhir ditentukan oleh simpul, simetri, tanda, dan kondisi batas tersebut. Kurva atau permukaan yang tidak memenuhi salah satu ciri itu harus ditolak.

Pembahasan 5.22

Inti soal. Dengan mengintegralkan elemen volume diferensial koordinat bola dτ pada batas yang sesuai, verifikasikan rumus $(4/3)\pi R^3$ untuk volume bola berjari-jari R.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\left[L_x, L_y\right] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 5.23

Inti soal. Hitung sudut-sudut yang mungkin antara L dan sumbu z untuk l = 2.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang

digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Untuk $l = 2$, $m = -2, -1, 0, 1, 2$ dan $cos\theta = m/\sqrt{l(l+1)} = m/\sqrt{6}$. Jadi sudutnya kira-kira $144,7°$, $114,1°$, $90°$, $65,9°$, dan $35,3°$.

Pembahasan 5.24

Inti soal. Tunjukkan bahwa bagi fungsi eigen momentum sudut orbital, nilai terkecil yang mungkin untuk sudut antara L dan sumbu z memenuhi $\cos^2\theta = l/(l+1)$. (b) Ketika l meningkat, apakah sudut terkecil yang mungkin ini meningkat atau menurun?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 5.25

Inti soal. Substitusikan $d/d\theta = -(1 - w^2)^{1/2}(d/dw)$, yang mengikuti (5.85), serta Persamaan (5.85) ke dalam $d^2S/d\theta^2 = (d/d\theta)(dS/d\theta)$ untuk memverifikasikan Persamaan (5.86).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A, B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 5.26

Inti soal. Turunkan rumus $S_{2,0}$ pada Tabel 5.1 dengan dua cara: (a) menggunakan (5.146) dalam Soal 5.34; (b) menggunakan relasi rekurensi dan normalisasi.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A, B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai

eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 5.27

Inti soal. Gunakan relasi rekurensi (5.98) dan normalisasi untuk menentukan (a) Y_3^0; (b) Y_3^1.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 5.28

Inti soal. Terapkan operator $\hat{L}^2$ pada (5.68) kepada Y_2^0 dan verifikasikan bahwa persamaan nilai eigen (5.104) dipenuhi.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai

eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 5.29

Inti soal. Lengkapi persamaan berikut: L̂_z³Y_l^m = ?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan komutator momentum sudut, ketidakpastian, koordinat bola, dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil khusus. $L_z^3 Y_l^m = (m\hbar)^3 Y_l^m$.

Pembahasan 5.30

Inti soal. Tunjukkan bahwa harmonik bola merupakan fungsi eigen operator $\hat{L}_x^2 + \hat{L}_\gamma^2$. Pembuktiannya singkat. Tentukan nilai eigennya.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Hasil khusus. Karena $L_x^2 + L_y^2 = L^2 - L_z^2$, maka Y_l^m adalah fungsi eigennya dengan nilai eigen $[l(l+1) - m^2]\hbar^2$.

Pembahasan 5.31

Inti soal. Apabila L_z suatu partikel yang mempunyai bilangan kuantum momentum sudut l = 2 diukur, apa saja hasil pengukuran yang mungkin? (b) Apabila L_z suatu partikel yang fungsi keadaannya merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$ dengan nilai eigen $12\hbar^2$ diukur, apa saja hasil yang mungkin?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\left[L_x, L_y\right] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil khusus. Untuk $l = 2$, hasil L_z ialah $m\hbar$ dengan $m = -2, -1, 0, 1, 2$. Nilai $L^2 = 12\hbar^2$ memberi $l(l+1) = 12$, yakni $l = 3$, sehingga hasil $L_z = -3\hbar$ sampai $+3\hbar$.

Pembahasan 5.32

Inti soal. Apabila L_y suatu partikel yang mempunyai bilangan kuantum momentum sudut l = 1 diukur, apa saja hasil pengukuran yang mungkin?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan nilai eigen momentum sudut dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\left[L_x, L_y\right] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil khusus. Komponen pada sumbu mana pun mempunyai spektrum yang sama. Untuk $l = 1$, hasil L_y yang mungkin ialah $-\hbar, 0, +\hbar$.

Pembahasan 5.33

Inti soal. Pada suatu saat t′, sebuah partikel mempunyai fungsi keadaan ψ = $Ne^{-\alpha r^2} Y_2^1(\theta, \varphi)$, dengan N dan α konstanta. (a) Apabila L^2 partikel diukur pada waktu t′, apa hasilnya? Berikan jawaban numerik. (b) Apabila L_z partikel diukur pada t′, apa hasilnya? Berikan jawaban numerik.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan nilai eigen momentum sudut dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\left[L_x, L_y\right] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil khusus. Karena faktor sudutnya Y_2^1, pengukuran memberi $L^2 = 2(3)\hbar^2 = 6\hbar^2$ dan $L_z = \hbar$, masing-masing dengan probabilitas satu.

Pembahasan 5.34

Inti soal. Fungsi Legendre terasosiasi P_l^|m|(w) didefinisikan oleh [gambar pada soal] Verifikasikan bahwa $P_0^0(w) = 1$, $P_1^0(w) = w$, $P_1^1(w) = (1 - w^2)^{1/2}$, lalu tentukan $P_2^0(w)$, $P_2^1(w)$, dan $P_2^2(w)$. Dapat ditunjukkan bahwa (Pauling dan Wilson, hlm. 129) [gambar pada soal] Persamaan (5.146) dan (5.145) memberikan rumus eksplisit faktor theta ternormalisasi dalam fungsi eigen momentum…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A, B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 5.35

Inti soal. Terapkan operator penurun $\hat{L}_-$ tiga kali berturut-turut pada $Y_1^1(\theta, \varphi)$ dan verifikasikan bahwa diperoleh fungsi-fungsi yang sebanding dengan Y_1^0, Y_1^{-1}, dan nol.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A, B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 5.36

Inti soal. Hamiltonian osilator harmonik satu dimensi adalah $\hat{H} = \hat{p}_x^2/2m + 2\pi^2\nu^2 m\hat{x}^2$ Operator penaik dan penurun bagi masalah ini didefinisikan sebagai $\hat{A}_+ \equiv (2m)^{-1/2}(\hat{p}_x + 2\pi i\nu m\hat{x})$, $\hat{A}_- \equiv (2m)^{-1/2}(\hat{p}_x - 2\pi i\nu m\hat{x})$ Tunjukkan bahwa $\hat{A}_+\hat{A}_- = \hat{H} - \frac{1}{2}h\nu$, $\hat{A}_-\hat{A}_+ = \hat{H} + \frac{1}{2}h\nu$, $[\hat{A}_+, \hat{A}_-] = -h\nu$ $[\hat{H}, \hat{A}_+] = h\nu\hat{A}_+$, $[\hat{H}, \hat{A}_-] = -h\nu\hat{A}_-$ Tunjukkan bahwa $\hat{A}_+$ dan $\hat{A}_-$ benar-benar merupakan operator tangga dan bahwa…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A,B] \rangle|$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 5.37

Inti soal. Benar atau salah? (a) Nilai eigen $\hat{L}^2$ terdegenerasi, kecuali untuk l = 0. (b) Karena $\hat{L}^2$Y_l^m = l(l + 1)$\hbar^2$Y_l^m, maka $\hat{L}^2$ = l(l + 1)$\hbar^2$. (c) $\hat{L}^2$ berkomutasi dengan $\hat{L}_x$. (d) Y_0^0 adalah konstanta. (e) Y_0^0 merupakan fungsi eigen $\hat{L}^2$, $\hat{L}_x$, $\hat{L}_\gamma$, dan $\hat{L}$_z. (f) Apabila $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ tidak saling komutatif, mustahil suatu fungsi eigen $\hat{A}$ sekaligus menjadi fungsi eigen $\hat{B}$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\left[L_x, L_y\right] = i\hbar L_z$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m$, serta $\Delta A \Delta B \geq 1/2\,|\langle [A, B] \rangle|$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. (a) Benar; (b) Salah; (c) Benar; (d) Benar; (e) Benar; (f) Salah.

BAB 6 — ATOM HIDROGEN

Soal

Keterkaitan soal dengan bagian: Bagian 6.1—Soal 6.1–6.4; Bagian 6.2—Soal 6.5–6.6; Bagian 6.3—Soal 6.7; Bagian 6.4—Soal 6.8–6.14; Bagian 6.5—Soal 6.15–6.21; Bagian 6.6—Soal 6.22–6.42; Bagian 6.7—Soal 6.43–6.45; Bagian 6.8—Soal 6.46; Bagian 6.9—Soal 6.47–6.51; dan soal umum—Soal 6.52–6.56.

6.1 Benar atau salah? (a) Untuk masalah satu partikel dengan $V = br^3$, dengan b konstanta positif, fungsi gelombang keadaan stasioner berbentuk $\psi = f(r)Y\_l\hat{}m(\theta,\varphi)$. (b) Setiap operator Hamiltonian satu partikel berkomutasi dengan $\hat{L}^2$ dan $\hat{L}\_z$.

6.2 Partikel dalam kotak bola mempunyai $V = 0$ untuk $r \leq b$ dan $V = \infty$ untuk $r > b$. Untuk sistem ini: (a) Jelaskan mengapa $\psi = R(r)f(\theta,\varphi)$, dengan R(r) memenuhi (6.17). Apakah fungsi $f(\theta,\varphi)$? (b) Selesaikan (6.17) untuk R(r) bagi keadaan $l = 0$. Petunjuk: substitusi $R(r) = g(r)/r$ mereduksi (6.17) menjadi persamaan yang mudah diselesaikan. Gunakan syarat batas bahwa ψ berhingga pada $r = 0$ [lihat pembahasan setelah Persamaan (6.83)] dan gunakan syarat batas kedua. Tunjukkan bahwa untuk keadaan $l = 0$, $\psi = N\{\sin(n\pi r/b)\}/r$ dan $E = n^2h^2/(8mb^2)$, dengan $n = 1, 2, 3, \ldots$. Untuk $l > 0$, rumus tingkat energinya lebih rumit.

6.3 Apabila ketiga konstanta gaya dalam Soal 4.20 sama, diperoleh osilator harmonik isotropik tiga dimensi. (a) Nyatakan alasan fungsi gelombang kasus ini dapat ditulis $\psi = f(r)G(\theta,\varphi)$. (b) Apakah fungsi G? (c) Tuliskan persamaan diferensial yang dipenuhi f(r). (d) Gunakan hasil Soal 4.20 untuk menunjukkan bahwa fungsi gelombang keadaan dasar memang berbentuk $f(r)G(\theta,\varphi)$, dan verifikasi bahwa f(r) keadaan dasar memenuhi persamaan diferensial pada bagian (c).

6.4 Verifikasikan Persamaan (6.6) untuk operator Laplace dalam koordinat bola. Ini merupakan soal panjang dan melelahkan, dan barangkali ada hal lain yang lebih baik untuk dikerjakan dengan waktu Anda.

6.5 Benar atau salah? (a) Untuk sistem n partikel yang tidak berinteraksi, setiap fungsi gelombang keadaan stasioner berbentuk $\psi = \psi_1(q_1) + \psi_2(q_2) + \cdots + \psi\_n(q\_n)$. (b) Energi sistem partikel-partikel yang tidak berinteraksi adalah jumlah energi setiap partikel, dengan energi masing-masing partikel diperoleh melalui penyelesaian persamaan Schrödinger satu partikel.

6.6 Untuk sistem dua partikel yang tidak berinteraksi, masing-masing bermassa $9{,}0 \times 10^{-26}$ g dan $5{,}0 \times 10^{-26}$ g, di dalam kotak satu dimensi sepanjang $1{,}00 \times 10^{-8}$ cm, hitung energi enam keadaan stasioner terendah.

6.7 Benar atau salah? (a) Massa tereduksi suatu sistem dua partikel selalu lebih kecil daripada m_1 dan lebih kecil daripada m_2. (b) Ketika masalah dua partikel, dengan energi potensial V hanya merupakan fungsi koordinat relatif kedua partikel, diselesaikan melalui dua sistem satu partikel yang terpisah, V menjadi bagian Hamiltonian partikel semu yang massanya sama dengan massa tereduksi.

6.8 Benar atau salah? (a) Degenerasi tingkat energi J = 4 rotor tegar dua partikel adalah 9. (b) Jarak antara tingkat energi rotor tegar dua partikel berturutan tetap konstan ketika J meningkat. (c) Jarak antara frekuensi absorpsi rotor tegar dua partikel berturutan tetap konstan ketika J tingkat bawah meningkat. (d) Molekul $^{1}H^{35}Cl$ dan $^{1}H^{37}Cl$ pada dasarnya mempunyai panjang ikatan kesetimbangan yang sama. (e) Molekul H_2 tidak mempunyai spektrum absorpsi rotasi murni.

6.9 Frekuensi absorpsi gelombang mikro terendah yang diamati bagi $^{12}C^{16}O$ adalah 115.271 MHz. (a) Hitung jarak ikatan dalam $^{12}C^{16}O$. (b) Prediksikan dua frekuensi absorpsi gelombang mikro terendah berikutnya bagi $^{12}C^{16}O$. (c) Prediksikan frekuensi absorpsi gelombang mikro terendah bagi $^{13}C^{16}O$. (d) Untuk $^{12}C^{16}O$ pada 25 °C, hitung rasio populasi J = 1 terhadap populasi J = 0. Ulangi untuk rasio J = 2 terhadap J = 0. Jangan melupakan degenerasi.

6.10 Transisi rotasi J = 2 → 3 dalam suatu molekul diatomik terjadi pada 126,4 GHz, dengan 1 GHz ≡ 10^9 Hz. Tentukan frekuensi absorpsi J = 5 → 6 dalam molekul tersebut.

6.11 Transisi rotasi J = 7 → 8 pada $^{23}Na^{35}Cl$ fase gas terjadi pada 104.189,7 MHz. Massa atom relatif ^{23}Na adalah 22,989770. Tentukan jarak ikatan dalam $^{23}Na^{35}Cl$.

6.12 Bagi suatu molekul diatomik tertentu, dua garis absorpsi rotasi murni berada pada 806,65 GHz dan 921,84 GHz, dengan 1 GHz ≡ 10^9 Hz, dan tidak terdapat garis rotasi murni di antara kedua garis tersebut. Tentukan nilai J awal bagi masing-masing transisi dan tentukan konstanta rotasi molekul B.

6.13 (a) Untuk $^{12}C^{16}O$ pada tingkat vibrasi v = 0, frekuensi absorpsi J = 0 → 1 adalah 115.271,20 MHz dan frekuensi absorpsi J = 4 → 5 adalah 576.267,92 MHz. Hitung konstanta distorsi sentrifugal D molekul tersebut. (b) Untuk $^{12}C^{16}O$ pada tingkat v = 1, absorpsi J = 0 → 1 berada pada 114.221,74 MHz. Tentukan konstanta α_e bagi molekul ini.

6.14 Verifikasikan Persamaan (6.51) untuk I rotor dua partikel. Mulailah dengan mengalikan dan membagi ruas kanan (6.50) dengan $m_1m_2/(m_1 + m_2)$, kemudian gunakan (6.49).

6.15 Hitung rasio gaya listrik terhadap gaya gravitasi antara proton dan elektron. Apakah pengabaian gaya gravitasi dapat dibenarkan?

6.16 (a) Jelaskan mengapa derajat degenerasi tingkat energi atom H diberikan oleh $\Sigma_{l=0}^{n-1}(2l + 1)$. (b) Pecahlah penjumlahan tersebut menjadi dua penjumlahan. Evaluasi penjumlahan pertama dengan menggunakan hubungan $\Sigma_{j=1}^{k} j = \frac{1}{2}k(k + 1)$. Tunjukkan bahwa derajat degenerasi tingkat atom H adalah n^2, dengan spin diabaikan. (c) Buktikan $\Sigma_{j=1}^{k} j = \frac{1}{2}k(k + 1)$ dengan menjumlahkan suku-suku yang bersesuaian dari dua deret 1, 2, 3, …, k dan k, k − 1, k − 2, …, 1.

6.17 (a) Hitung panjang gelombang dan frekuensi garis spektrum yang timbul dari transisi $n = 6 \rightarrow n = 3$ dalam atom hidrogen. (b) Ulangi perhitungan untuk He^+; abaikan perubahan massa tereduksi dari H ke He^+.

6.18 Tetapkan setiap panjang gelombang vakum teramati berikut pada transisi antara dua tingkat atom hidrogen: 656,47 nm; 486,27 nm; 434,17 nm; dan 410,29 nm—semuanya termasuk deret Balmer. Prediksikan panjang gelombang dua garis berikutnya dalam deret ini dan panjang gelombang batas deret. Balmer adalah matematikawan Swiss yang pada tahun 1885 menemukan rumus empiris yang cocok dengan garis-garis spektrum hidrogen.

6.19 Setiap garis atom hidrogen dalam Soal 6.18 menunjukkan garis satelit sangat lemah di dekatnya. Dua garis satelit berada pada panjang gelombang vakum 656,29 nm dan 486,14 nm. (a) Jelaskan asalnya. Orang yang pertama kali menjawab pertanyaan ini memperoleh Hadiah Nobel. (b) Hitung dua panjang gelombang satelit lainnya.

6.20 Verifikasikan bahwa untuk nilai j besar, rasio b_{j+1}/b_j dalam (6.88) sama dengan rasio koefisien r^{j+1} terhadap koefisien r^j dalam deret pangkat e^{2Cr}.

6.21 Untuk partikel dalam kotak berdinding tak hingga dan osilator harmonik tidak terdapat fungsi eigen kontinum, sedangkan untuk atom hidrogen terdapat fungsi kontinum. Jelaskan hal ini berdasarkan sifat fungsi energi potensial masing-masing masalah.

6.22 Positron mempunyai muatan +e dan massa sama dengan massa elektron. Hitung dalam elektronvolt energi keadaan dasar positronium, yaitu "atom" yang terdiri atas sebuah positron dan sebuah elektron.

6.23 Untuk keadaan dasar atom mirip hidrogen, tunjukkan bahwa $\langle r \rangle = 3a/(2Z)$.

6.24 Tentukan $\langle r \rangle$ bagi keadaan $2p_0$ atom mirip hidrogen.

6.25 Tentukan $\langle r^2 \rangle$ bagi keadaan $2p_1$ atom mirip hidrogen.

6.26 Untuk atom mirip hidrogen dalam keadaan stasioner dengan bilangan kuantum n, l, dan m, buktikan bahwa

$\langle r \rangle = \int_0^\infty r^3 |R_{nl}(r)|^2 dr.$

6.27 Turunkan fungsi radial mirip hidrogen 2s dan 2p.

6.28 Untuk keadaan atom hidrogen yang mana ψ tidak nol pada inti?

6.29 Berapakah nilai bilangan kuantum momentum sudut l bagi orbital t?

6.30 Apabila tolakan antarelektron dalam helium diabaikan, berapakah energi dan fungsi gelombang keadaan dasarnya? Lihat Bagian 6.2. Hitung persentase galat energinya; energi keadaan dasar eksperimen He adalah −79,0 eV.

6.31 Untuk keadaan dasar atom mirip hidrogen, tentukan nilai r yang paling mungkin.

6.32 Di manakah kerapatan probabilitas maksimum bagi keadaan dasar atom hidrogen?

6.33 (a) Untuk keadaan dasar atom hidrogen, tentukan probabilitas menemukan elektron pada jarak lebih dari 2a dari inti. (b) Untuk keadaan dasar atom H, tentukan probabilitas menemukan elektron dalam daerah yang terlarang secara klasik.

6.34 Fungsi gelombang keadaan stasioner adalah fungsi eigen operator Hamiltonian $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$. Mahasiswa kadang-kadang secara keliru menganggap ψ merupakan fungsi eigen $\hat{T}$ dan $\hat{V}$ secara terpisah. Untuk keadaan dasar atom hidrogen, verifikasikan secara langsung bahwa ψ bukan fungsi eigen $\hat{T}$ maupun $\hat{V}$, tetapi merupakan fungsi eigen $\hat{T} + \hat{V}$. Dapatkah Anda memikirkan satu masalah yang telah diselesaikan dengan ψ sebagai fungsi eigen $\hat{T}$ dan $\hat{V}$?

6.35 Tunjukkan bahwa $\langle T \rangle + \langle V \rangle = E$ untuk suatu keadaan stasioner.

6.36 Untuk keadaan dasar atom hidrogen: (a) tentukan $\langle V \rangle$; (b) gunakan hasil bagian (a) dan Soal 6.35 untuk menentukan $\langle T \rangle$, kemudian tentukan $\langle T \rangle / \langle V \rangle$; (c) gunakan $\langle T \rangle$ untuk menghitung laju akar-rata-rata-kuadrat elektron, $\langle v^2 \rangle^{1/2}$, lalu hitung nilai numerik $\langle v^2 \rangle^{1/2}/c$, dengan c kecepatan cahaya.

6.37 (a) Fungsi 3d_xy didefinisikan sebagai $3d_{xy} \equiv (3d_2 - 3d_{-2})/(\sqrt{2}\, i)$. Gunakan Tabel 6.1 dan 5.1, Persamaan (6.101), serta identitas sin 2φ untuk menunjukkan bahwa 3d_xy sebanding dengan xy. (b) Nyatakan fungsi 3d real lainnya dalam Tabel 6.2 sebagai kombinasi linear fungsi kompleks $3d_2$, $3d_1$, …, $3d_{-2}$. (c) Gunakan identitas trigonometri untuk menunjukkan bahwa $3d_{(x^2-y^2)}$ mengandung faktor $x^2 - y^2$.

6.38 Fungsi gelombang mirip hidrogen $2p_1$, $2p_0$, dan $2p_{-1}$ dapat dicirikan sebagai fungsi 2p yang merupakan fungsi eigen $\hat{L}_z$. Operator apa yang dapat digunakan untuk mencirikan fungsi $2p_x$, $2p_y$, dan 2p_z, dan berapakah nilai eigen yang bersesuaian?

6.39 Diberikan $\hat{A}f = af$ dan $\hat{A}g = bg$, dengan f dan g fungsi serta a dan b konstanta. Dalam kondisi apa kombinasi linear $c_1f + c_2g$ merupakan fungsi eigen operator linear $\hat{A}$?

6.40 Nyatakan di antara ketiga operator $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$, dan Hamiltonian atom H $\hat{H}$, operator mana yang mempunyai setiap fungsi berikut sebagai fungsi eigen: (a) 2p_z; (b) $2p_x$; (c) $2p_1$.

6.41 Untuk fungsi mirip hidrogen real: (a) bagaimana bentuk $n - l - 1$ permukaan simpul tempat faktor radial nol? (b) Permukaan simpul tempat faktor φ nol berbentuk φ = konstan; jadi permukaan tersebut berupa bidang yang tegak lurus bidang xy. Berapa jumlah bidang seperti itu? Nilai φ yang berbeda sebesar π dianggap sebagai bagian bidang yang sama. (c) Dapat ditunjukkan bahwa terdapat $l - |m|$ permukaan tempat faktor θ nol. Bagaimanakah bentuk permukaan-permukaan tersebut? (d) Berapa jumlah keseluruhan permukaan simpul fungsi gelombang mirip hidrogen real?

6.42 Verifikasikan ortogonalitas fungsi $2p_x$, $2p_y$, dan 2p_z.

6.43 Tentukan jari-jari bola yang mendefinisikan orbital hidrogen 1s dengan menggunakan definisi probabilitas 95%.

6.44 Tunjukkan bahwa nilai maksimum $2p_y$ [Persamaan (6.123)] adalah $\kappa^{3/2}\pi^{-1/2}e^{-1}$. Gunakan Persamaan (6.123) untuk menggambar kontur $2p_y$ dengan $\psi = 0{,}316\psi_{maks}$.

6.45 Gambarkan secara kasar kontur $|\psi|$ konstan bagi setiap keadaan berikut dari partikel dalam kotak persegi dua dimensi: $n_x n_y$ = 11, 12, 21, dan 22. Gambar-gambar tersebut mengingatkan Anda pada apa?

6.46 Jawablah berdasarkan Bagian 6.8 yang mengabaikan pengaruh spin elektron. Menjadi berapa tingkat energi tingkat n = 2 atom H terpecah ketika medan magnet luar diterapkan? Berikan degenerasi masing-masing tingkat tersebut.

6.47 (a) Verifikasikan Persamaan (6.139) untuk E_r dan r_r atom H yang tak berdimensi. (b) Verifikasikan (6.140) untuk F_r. (c) Verifikasikan bahwa $V_r = -1/r_r$ bagi atom H.

Untuk Soal 6.48–6.51, gunakan versi program Tabel 4.1 yang telah dimodifikasi, lembar kerja, atau sistem aljabar komputer.

6.48 (a) Verifikasikan energi atom H metode Numerov untuk l = 0 dan l = 1 yang diberikan dalam Bagian 6.9, baik untuk 270 titik maupun 1.080 titik, dengan

r_r dari 10^{-15} sampai 27. Pada Excel 2010, kotak *Make Unconstrained Variables Non-Negative* dalam *Solver Parameters* harus tidak dicentang. (b) Untuk 1.080 titik dan r_r sampai 27, nilai E_r Numerov n = 3, l = 0 sebesar −0,05510 masih mempunyai galat cukup besar. Gunakan metode Numerov untuk memperbaiki energi ini secara berarti tanpa memperkecil s_r.

6.49 Gunakan metode Numerov untuk menghitung empat nilai eigen energi l = 0 terendah dan empat nilai eigen l = 1 terendah bagi osilator harmonik isotropik tiga dimensi dengan $V = \frac{1}{2}kr^2$. Bandingkan dengan hasil eksak Soal 4.20.

6.50 Gunakan metode Numerov untuk menghitung dan menggambar fungsi radial tereduksi R_r(r_r) bagi keadaan atom H l = 0 terendah. Lihat Soal 6.48. Jelaskan mengapa nilai R_r pada $r\_r = 10^{-15}$ yang dihitung dari R_r = F_r/r_r, yaitu persamaan yang bersesuaian dengan (6.136), salah untuk keadaan ini.

6.51 Untuk partikel dalam kotak bola (Soal 6.2), gunakan metode Numerov untuk menentukan tiga nilai eigen energi l = 0 terendah dan tiga nilai eigen l = 1 terendah. Bandingkan hasil l = 0 dengan hasil eksak Soal 6.2.

6.52 Untuk setiap sistem berikut, berikan ungkapan $d\tau$ dan batas setiap variabel dalam persamaan $\int|\psi|^2 d\tau = 1$. (a) Partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l. (b) Osilator harmonik satu dimensi. (c) Sistem satu partikel tiga dimensi yang menggunakan koordinat Kartesius. (d) Gerak internal atom hidrogen dengan koordinat bola.

6.53 Tentukan rasio populasi tingkat energi n = 2 terhadap n = 1 bagi gas atom hidrogen pada (a) 25 °C; (b) 1.000 K; dan (c) 10.000 K.

6.54 Sebutkan suatu sistem mekanika kuantum yang jarak antara tingkat energi keadaan terikat yang berdekatan: (a) tetap konstan ketika E meningkat; (b) meningkat ketika E meningkat; (c) menurun ketika E meningkat.

6.55 (a) Sebutkan dua sistem mekanika kuantum yang mempunyai jumlah tingkat energi keadaan terikat tak hingga. (b) Sebutkan suatu sistem mekanika kuantum yang mempunyai jumlah tingkat energi keadaan terikat berhingga. (c) Sebutkan suatu sistem mekanika kuantum yang tidak mempunyai energi titik-nol.

6.56 Benar atau salah? (a) Nilai nol tidak pernah diizinkan sebagai nilai eigen. (b) Fungsi f = 0 tidak pernah diizinkan sebagai fungsi eigen. (c) Simbol e menyatakan muatan elektron. (d) Dalam persamaan $\langle B\rangle = \int\psi^*\hat{B}\psi d\tau$, dengan $d\tau = r^2\sin\theta\, dr\, d\theta\, d\varphi$, $\hat{B}$ hanya beroperasi pada ψ dan tidak beroperasi pada $r^2\sin\theta$. (e) Dalam keadaan n = 1 atom H, elektron bergerak pada orbit lingkaran yang jari-jarinya adalah jari-jari Bohr. (f) Kerapatan probabilitas elektron pada inti bernilai nol untuk semua keadaan atom H. (g) Dalam keadaan dasar atom H, elektron dibatasi untuk bergerak pada permukaan

sebuah bola. (h) Untuk atom H keadaan dasar, kerapatan probabilitas elektron lebih besar daripada nol di semua lokasi berhingga di dalam atom. (i) Semua harmonik bola Y_l^m konstan pada permukaan sebuah bola yang berpusat di titik asal.

PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 6

Atom Hidrogen

Setiap nomor berikut memuat dasar teori, langkah penyelesaian, pemeriksaan, dan kesimpulan. Semua persamaan akan dikonversi menjadi objek persamaan Word.

Pembahasan 6.1

Inti soal. Benar atau salah? (a) Untuk masalah satu partikel dengan V = br³, dengan b konstanta positif, fungsi gelombang keadaan stasioner berbentuk ψ = f(r)Y_l^m(θ,φ). (b) Setiap operator Hamiltonian satu partikel berkomutasi dengan $\hat{L}^2$ dan $\hat{L}_z$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Setiap pernyataan diuji satu per satu: pernyataan yang mengikuti definisi dan domain operator dinyatakan benar, sedangkan yang melanggar syarat batas, normalisasi, komutasi, atau spektrum nilai eigen dinyatakan salah. Alasan fisiknya harus dicantumkan, bukan hanya label benar/salah.

Pembahasan 6.2

Inti soal. Partikel dalam kotak bola mempunyai V = 0 untuk r ≤ b dan V = ∞ untuk r > b. Untuk sistem ini: (a) Jelaskan mengapa ψ = R(r)f(θ,φ), dengan R(r) memenuhi (6.17). Apakah fungsi f(θ,φ)? (b) Selesaikan (6.17) untuk R(r) bagi keadaan l = 0. Petunjuk: substitusi R(r) = g(r)/r mereduksi (6.17) menjadi persamaan yang mudah diselesaikan. Gunakan syarat batas bahwa ψ berhingga pada…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika

melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.3

Inti soal. Apabila ketiga konstanta gaya dalam Soal 4.20 sama, diperoleh osilator harmonik isotropik tiga dimensi. (a) Nyatakan alasan fungsi gelombang kasus ini dapat ditulis ψ = f(r)G(θ,φ). (b) Apakah fungsi G? (c) Tuliskan persamaan diferensial yang dipenuhi f(r). (d) Gunakan hasil Soal 4.20 untuk menunjukkan bahwa fungsi gelombang keadaan dasar memang berbentuk f(r)G(θ,φ), dan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.4

Inti soal. Verifikasikan Persamaan (6.6) untuk operator Laplace dalam koordinat bola. Ini merupakan soal panjang dan melelahkan, dan barangkali ada hal lain yang lebih baik untuk dikerjakan dengan waktu Anda.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.5

Inti soal. Benar atau salah? (a) Untuk sistem n partikel yang tidak berinteraksi, setiap fungsi gelombang keadaan stasioner berbentuk $\psi = \psi_1(q_1) + \psi_2(q_2) + \cdots +$ ψ_n(q_n). (b) Energi sistem partikel-partikel yang tidak berinteraksi adalah jumlah energi setiap partikel, dengan energi masing-masing partikel diperoleh melalui penyelesaian persamaan Schrödinger satu partikel.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Setiap pernyataan diuji satu per satu: pernyataan yang mengikuti definisi dan domain operator dinyatakan benar, sedangkan yang melanggar syarat batas, normalisasi, komutasi, atau spektrum nilai eigen dinyatakan salah. Alasan fisiknya harus dicantumkan, bukan hanya label benar/salah.

Pembahasan 6.6

Inti soal. Untuk sistem dua partikel yang tidak berinteraksi, masing-masing bermassa $9{,}0 \times 10^{-26}$ g dan $5{,}0 \times 10^{-26}$ g, di dalam kotak satu dimensi sepanjang $1{,}00 \times 10^{-8}$ cm, hitung energi enam keadaan stasioner terendah.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.7

Inti soal. Benar atau salah? (a) Massa tereduksi suatu sistem dua partikel selalu lebih kecil daripada m_1 dan lebih kecil daripada m_2. (b) Ketika masalah dua partikel, dengan energi potensial V hanya merupakan fungsi koordinat relatif kedua partikel, diselesaikan melalui dua sistem satu partikel yang terpisah, V menjadi bagian Hamiltonian partikel semu yang massanya sama dengan massa…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Setiap pernyataan diuji satu per satu: pernyataan yang mengikuti definisi dan domain operator dinyatakan benar, sedangkan yang melanggar syarat batas, normalisasi, komutasi, atau spektrum nilai eigen dinyatakan salah. Alasan fisiknya harus dicantumkan, bukan hanya label benar/salah.

Pembahasan 6.8

Inti soal. Benar atau salah? (a) Degenerasi tingkat energi J = 4 rotor tegar dua partikel adalah 9. (b) Jarak antara tingkat energi rotor tegar dua partikel berturutan tetap konstan ketika J meningkat. (c) Jarak antara frekuensi absorpsi rotor tegar dua partikel berturutan tetap konstan ketika J tingkat bawah meningkat. (d) Molekul $^{1}H^{35}Cl$ dan $^{1}H^{37}Cl$ pada dasarnya mempunyai panjang…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spektrum rotor tegar dan aturan seleksi rotasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Setiap pernyataan diuji satu per satu: pernyataan yang mengikuti definisi dan domain operator dinyatakan benar, sedangkan yang melanggar syarat batas, normalisasi, komutasi, atau spektrum nilai eigen dinyatakan salah. Alasan fisiknya harus dicantumkan, bukan hanya label benar/salah.

Pembahasan 6.9

Inti soal. Frekuensi absorpsi gelombang mikro terendah yang diamati bagi $^{12}C^{16}O$ adalah 115.271 MHz. (a) Hitung jarak ikatan dalam $^{12}C^{16}O$. (b) Prediksikan dua frekuensi absorpsi gelombang mikro terendah berikutnya bagi $^{12}C^{16}O$. (c) Prediksikan frekuensi absorpsi gelombang mikro terendah bagi $^{13}C^{16}O$. (d) Untuk $^{12}C^{16}O$ pada 25 °C, hitung rasio populasi J = 1 terhadap populasi J = 0. Ulangi…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spektrum rotor tegar dan aturan seleksi rotasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.10

Inti soal. Transisi rotasi J = 2 → 3 dalam suatu molekul diatomik terjadi pada 126,4 GHz, dengan 1 GHz ≡ 10^9 Hz. Tentukan frekuensi absorpsi J = 5 → 6 dalam molekul tersebut.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spektrum rotor tegar dan aturan seleksi rotasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.11

Inti soal. Transisi rotasi J = 7 → 8 pada $^{23}Na^{35}Cl$ fase gas terjadi pada 104.189,7 MHz. Massa atom relatif ^{23}Na adalah 22,989770. Tentukan jarak ikatan dalam $^{23}Na^{35}Cl$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar bilangan kompleks dan bentuk polar. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.12

Inti soal. Bagi suatu molekul diatomik tertentu, dua garis absorpsi rotasi murni berada pada 806,65 GHz dan 921,84 GHz, dengan 1 GHz ≡ 10^9 Hz, dan tidak terdapat garis rotasi murni di antara kedua garis tersebut. Tentukan nilai J awal bagi masing-masing transisi dan tentukan konstanta rotasi molekul B.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spektrum rotor tegar dan aturan seleksi rotasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.13

Inti soal. Untuk $^{12}C^{16}O$ pada tingkat vibrasi v = 0, frekuensi absorpsi J = 0 → 1 adalah 115.271,20 MHz dan frekuensi absorpsi J = 4 → 5 adalah 576.267,92 MHz. Hitung konstanta distorsi sentrifugal D molekul tersebut. (b) Untuk $^{12}C^{16}O$ pada tingkat v = 1, absorpsi J = 0 → 1 berada pada 114.221,74 MHz. Tentukan konstanta α_e bagi molekul ini.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan

satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.14

Inti soal. Verifikasikan Persamaan (6.51) untuk I rotor dua partikel. Mulailah dengan mengalikan dan membagi ruas kanan (6.50) dengan $m_1m_2/(m_1 + m_2)$, kemudian gunakan (6.49).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spektrum rotor tegar dan aturan seleksi rotasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.15

Inti soal. Hitung rasio gaya listrik terhadap gaya gravitasi antara proton dan elektron. Apakah pengabaian gaya gravitasi dapat dibenarkan?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang,

dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Rasionya $F_e/F_g = k_e\, e^2/\left(Gm_p m_e\right) \approx 2{,}27 \times 10^{39}$. Karena gaya listrik sekitar 10^{39} kali lebih kuat, gravitasi aman diabaikan pada skala atom.

Pembahasan 6.16

Inti soal. Jelaskan mengapa derajat degenerasi tingkat energi atom H diberikan oleh Σ_(l=0)^(n−1)(2l + 1). (b) Pecahlah penjumlahan tersebut menjadi dua penjumlahan. Evaluasi penjumlahan pertama dengan menggunakan hubungan Σ_(j=1)^k j = ½k(k + 1). Tunjukkan bahwa derajat degenerasi tingkat atom H adalah n², dengan spin diabaikan. (c) Buktikan Σ_(j=1)^k j = ½k(k + 1) dengan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spin, simetri pertukaran, dan statistik partikel identik. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Hasil khusus. $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = 2[n\,(n-1)/2] + n = n^2$. Dengan spin elektron, degenerasi menjadi $2n^2$.

Pembahasan 6.17

Inti soal. Hitung panjang gelombang dan frekuensi garis spektrum yang timbul dari transisi n = 6 → n = 3 dalam atom hidrogen. (b) Ulangi perhitungan untuk He^+; abaikan perubahan massa tereduksi dari H ke He^+.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.18

Inti soal. Tetapkan setiap panjang gelombang vakum teramati berikut pada transisi antara dua tingkat atom hidrogen: 656,47 nm; 486,27 nm; 434,17 nm; dan 410,29 nm—semuanya termasuk deret Balmer. Prediksikan panjang gelombang dua garis berikutnya dalam deret ini dan panjang gelombang batas deret. Balmer adalah matematikawan Swiss yang pada tahun 1885 menemukan rumus empiris yang…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 6.19

Inti soal. Setiap garis atom hidrogen dalam Soal 6.18 menunjukkan garis satelit sangat lemah di dekatnya. Dua garis satelit berada pada panjang gelombang vakum 656,29 nm dan 486,14 nm. (a) Jelaskan asalnya. Orang yang pertama kali

menjawab pertanyaan ini memperoleh Hadiah Nobel. (b) Hitung dua panjang gelombang satelit lainnya.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.20

Inti soal. Verifikasikan bahwa untuk nilai j besar, rasio b_(j+1)/b_j dalam (6.88) sama dengan rasio koefisien r^(j+1) terhadap koefisien r^j dalam deret pangkat e^(2Cr).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.21

Inti soal. Untuk partikel dalam kotak berdinding tak hingga dan osilator harmonik tidak terdapat fungsi eigen kontinum, sedangkan untuk atom hidrogen terdapat fungsi kontinum. Jelaskan hal ini berdasarkan sifat fungsi energi potensial masing-masing masalah.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 6.22

Inti soal. Positron mempunyai muatan +e dan massa sama dengan massa elektron. Hitung dalam elektronvolt energi keadaan dasar positronium, yaitu “atom” yang terdiri atas sebuah positron dan sebuah elektron.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Massa tereduksi positronium ialah $m_e/2$, sehingga energinya setengah energi hidrogen: $E_1 \approx -6{,}80eV$.

Pembahasan 6.23

Inti soal. Untuk keadaan dasar atom mirip hidrogen, tunjukkan bahwa ⟨r⟩ = 3a/(2Z).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.24

Inti soal. Tentukan ⟨r⟩ bagi keadaan $2p_0$ atom mirip hidrogen.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar

eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.25

Inti soal. Tentukan $\langle r^2 \rangle$ bagi keadaan $2p_1$ atom mirip hidrogen.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.26

Inti soal. Untuk atom mirip hidrogen dalam keadaan stasioner dengan bilangan kuantum n, l, dan m, buktikan bahwa $\langle r \rangle = \int_0^\infty r^3 |R_{nl}(r)|^2 dr$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika

melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.27

Inti soal. Turunkan fungsi radial mirip hidrogen 2s dan 2p.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.28

Inti soal. Untuk keadaan atom hidrogen yang mana ψ tidak nol pada inti?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil khusus. Hanya keadaan dengan $l = 0$ (orbital s) yang tidak nol pada inti; untuk $l > 0$, faktor radial memuat r^l dan lenyap ketika $r = 0$.

Pembahasan 6.29

Inti soal. Berapakah nilai bilangan kuantum momentum sudut l bagi orbital t?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan nilai eigen momentum sudut dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Urutan huruf orbital sesudah s, p, d, f, g, h, i, k, … memberi orbital t dengan $l = 14$.

Pembahasan 6.30

Inti soal. Apabila tolakan antarelektron dalam helium diabaikan, berapakah energi dan fungsi gelombang keadaan dasarnya? Lihat Bagian 6.2. Hitung persentase galat energinya; energi keadaan dasar eksperimen He adalah −79,0 eV.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.31

Inti soal. Untuk keadaan dasar atom mirip hidrogen, tentukan nilai r yang paling mungkin.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Untuk distribusi radial keadaan dasar, $P(r) \propto r^2 e^{-2Zr/a}$; syarat $dP/dr = 0$ memberi $r_{mp} = a/Z$.

Pembahasan 6.32

Inti soal. Di manakah kerapatan probabilitas maksimum bagi keadaan dasar atom hidrogen?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil khusus. Kerapatan ruang $|\psi_{1s}|^2 \propto e^{-2r/a}$ maksimum pada $r = 0$, yaitu di inti. Ini berbeda dari distribusi radial, yang maksimum pada $r = a$.

Pembahasan 6.33

Inti soal. Untuk keadaan dasar atom hidrogen, tentukan probabilitas menemukan elektron pada jarak lebih dari 2a dari inti. (b) Untuk keadaan dasar atom H, tentukan probabilitas menemukan elektron dalam daerah yang terlarang secara klasik.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.34

Inti soal. Fungsi gelombang keadaan stasioner adalah fungsi eigen operator Hamiltonian $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$. Mahasiswa kadang-kadang secara keliru menganggap ψ merupakan fungsi eigen $\hat{T}$ dan $\hat{V}$ secara terpisah. Untuk keadaan dasar atom hidrogen, verifikasikan secara langsung bahwa ψ bukan fungsi eigen $\hat{T}$ maupun $\hat{V}$, tetapi merupakan fungsi eigen $\hat{T} + \hat{V}$. Dapatkah Anda memikirkan satu masalah…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika

melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.35

Inti soal. Tunjukkan bahwa ⟨T⟩ + ⟨V⟩ = E untuk suatu keadaan stasioner.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.36

Inti soal. Untuk keadaan dasar atom hidrogen: (a) tentukan ⟨V⟩; (b) gunakan hasil bagian (a) dan Soal 6.35 untuk menentukan ⟨T⟩, kemudian tentukan ⟨T⟩/⟨V⟩; (c) gunakan ⟨T⟩ untuk menghitung laju akar-rata-rata-kuadrat elektron, $\langle v^2\rangle^{1/2}$, lalu hitung nilai numerik $\langle v^2\rangle^{1/2}/c$, dengan c kecepatan cahaya.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas.

Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.37

Inti soal. Fungsi 3d_xy didefinisikan sebagai 3d_xy ≡ (3d_2 − 3d_{-2})/(√2 i). Gunakan Tabel 6.1 dan 5.1, Persamaan (6.101), serta identitas sin 2φ untuk menunjukkan bahwa 3d_xy sebanding dengan xy. (b) Nyatakan fungsi 3d real lainnya dalam Tabel 6.2 sebagai kombinasi linear fungsi kompleks 3d_2, 3d_1, …, 3d_{-2}. (c) Gunakan identitas trigonometri untuk menunjukkan bahwa 3d_(x^2−y^2)…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar bilangan kompleks dan bentuk polar. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 6.38

Inti soal. Fungsi gelombang mirip hidrogen 2p_1, 2p_0, dan 2p_{-1} dapat dicirikan sebagai fungsi 2p yang merupakan fungsi eigen L̂_z. Operator apa yang dapat digunakan untuk mencirikan fungsi 2p_x, 2p_γ, dan 2p_z, dan berapakah nilai eigen yang bersesuaian?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas.

Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.39

Inti soal. Diberikan Âf = af dan Âg = bg, dengan f dan g fungsi serta a dan b konstanta. Dalam kondisi apa kombinasi linear c_1f + c_2g merupakan fungsi eigen operator linear Â?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 6.40

Inti soal. Nyatakan di antara ketiga operator $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$, dan Hamiltonian atom H $\hat{H}$, operator mana yang mempunyai setiap fungsi berikut sebagai fungsi eigen: (a) 2p_z; (b) $2p_x$; (c) $2p_1$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 6.41

Inti soal. Untuk fungsi mirip hidrogen real: (a) bagaimana bentuk n − l − 1 permukaan simpul tempat faktor radial nol? (b) Permukaan simpul tempat faktor φ nol berbentuk φ = konstan; jadi permukaan tersebut berupa bidang yang tegak lurus bidang xy. Berapa jumlah bidang seperti itu? Nilai φ yang berbeda sebesar π dianggap sebagai bagian bidang yang sama. (c) Dapat ditunjukkan bahwa…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.42

Inti soal. Verifikasikan ortogonalitas fungsi $2p_x$, $2p_\gamma$, dan 2p_z.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.43

Inti soal. Tentukan jari-jari bola yang mendefinisikan orbital hidrogen 1s dengan menggunakan definisi probabilitas 95%.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.44

Inti soal. Tunjukkan bahwa nilai maksimum $2p_\gamma$ [Persamaan (6.123)] adalah $\kappa^{3/2}\pi^{-1/2}e^{-1}$. Gunakan Persamaan (6.123) untuk menggambar kontur $2p_\gamma$ dengan $\psi = 0{,}316\psi\_maks$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.45

Inti soal. Gambarkan secara kasar kontur |ψ| konstan bagi setiap keadaan berikut dari partikel dalam kotak persegi dua dimensi: $n_x n_\gamma$ = 11, 12, 21, dan 22. Gambar-gambar tersebut mengingatkan Anda pada apa?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Konstruksi gambar. Tentukan lebih dahulu titik nol, simpul, tanda fungsi, simetri, posisi maksimum/minimum, serta perilaku pada batas. Hubungkan titik-titik itu dengan kurva halus yang konsisten dengan turunan fungsi. Untuk $|\psi|^2$, semua bagian negatif fungsi gelombang menjadi positif dan jumlah daerah probabilitas harus ternormalisasi.

Sketsa yang benar harus memperlihatkan jumlah simpul yang sesuai dengan bilangan kuantum, bentuk permukaan yang sesuai koordinat, dan tidak boleh mengubah lokasi simpul ketika beralih dari ψ ke $|\psi|^2$.

Kesimpulan. Gambar akhir ditentukan oleh simpul, simetri, tanda, dan kondisi batas tersebut. Kurva atau permukaan yang tidak memenuhi salah satu ciri itu harus ditolak.

Pembahasan 6.46

Inti soal. Jawablah berdasarkan Bagian 6.8 yang mengabaikan pengaruh spin elektron. Menjadi berapa tingkat energi tingkat n = 2 atom H terpecah ketika medan magnet luar diterapkan? Berikan degenerasi masing-masing tingkat tersebut.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spin, simetri pertukaran, dan statistik partikel identik. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.47

Inti soal. Verifikasikan Persamaan (6.139) untuk E_r dan r_r atom H yang tak berdimensi. (b) Verifikasikan (6.140) untuk F_r. (c) Verifikasikan bahwa V_r = −1/r_r bagi atom H. Untuk Soal 6.48–6.51, gunakan versi program Tabel 4.1 yang telah dimodifikasi, lembar kerja, atau sistem aljabar komputer.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 6.48

Inti soal. Verifikasikan energi atom H metode Numerov untuk l = 0 dan l = 1 yang diberikan dalam Bagian 6.9, baik untuk 270 titik maupun 1.080 titik, dengan r_r dari 10^{-15} sampai 27. Pada Excel 2010, kotak *Make Unconstrained Variables Non-Negative* dalam *Solver Parameters* harus tidak dicentang. (b) Untuk 1.080 titik dan r_r sampai 27, nilai E_r Numerov n = 3, l = 0 sebesar −0,05510…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 6.49

Inti soal. Gunakan metode Numerov untuk menghitung empat nilai eigen energi l = 0 terendah dan empat nilai eigen l = 1 terendah bagi osilator harmonik isotropik tiga dimensi dengan V = ½kr². Bandingkan dengan hasil eksak Soal 4.20.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan

satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.50

Inti soal. Gunakan metode Numerov untuk menghitung dan menggambar fungsi radial tereduksi R_r(r_r) bagi keadaan atom H l = 0 terendah. Lihat Soal 6.48. Jelaskan mengapa nilai R_r pada r_r = 10^{-15} yang dihitung dari R_r = F_r/r_r, yaitu persamaan yang bersesuaian dengan (6.136), salah untuk keadaan ini.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.51

Inti soal. Untuk partikel dalam kotak bola (Soal 6.2), gunakan metode Numerov untuk menentukan tiga nilai eigen energi l = 0 terendah dan tiga nilai eigen l = 1 terendah. Bandingkan hasil l = 0 dengan hasil eksak Soal 6.2.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau

simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 6.52

Inti soal. Untuk setiap sistem berikut, berikan ungkapan dτ dan batas setiap variabel dalam persamaan $\int|\psi|^2 d\tau = 1$. (a) Partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l. (b) Osilator harmonik satu dimensi. (c) Sistem satu partikel tiga dimensi yang menggunakan koordinat Kartesius. (d) Gerak internal atom hidrogen dengan koordinat bola.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 6.53

Inti soal. Tentukan rasio populasi tingkat energi n = 2 terhadap n = 1 bagi gas atom hidrogen pada (a) 25 °C; (b) 1.000 K; dan (c) 10.000 K.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 6.54

Inti soal. Sebutkan suatu sistem mekanika kuantum yang jarak antara tingkat energi keadaan terikat yang berdekatan: (a) tetap konstan ketika E meningkat; (b) meningkat ketika E meningkat; (c) menurun ketika E meningkat.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 6.55

Inti soal. Sebutkan dua sistem mekanika kuantum yang mempunyai jumlah tingkat energi keadaan terikat tak hingga. (b) Sebutkan suatu sistem mekanika kuantum yang mempunyai jumlah tingkat energi keadaan terikat berhingga. (c) Sebutkan suatu sistem mekanika kuantum yang tidak mempunyai energi titik-nol.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti pemisahan gerak radial-sudut, rotor tegar, atom mirip hidrogen, dan spektrum: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 6.56

Inti soal. Benar atau salah? (a) Nilai nol tidak pernah diizinkan sebagai nilai eigen. (b) Fungsi f = 0 tidak pernah diizinkan sebagai fungsi eigen. (c) Simbol e menyatakan muatan elektron. (d) Dalam persamaan $\langle B\rangle = \int \psi^* \hat{B} \psi d\tau$, dengan $d\tau$ =

$r^2 \sin\theta\ dr\ d\theta\ d\varphi$, $\hat{B}$ hanya beroperasi pada ψ dan tidak beroperasi pada $r^2 \sin\theta$. (e) Dalam keadaan n = 1 atom H, elektron bergerak pada orbit lingkaran…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n = -\mu Z^2\, e^4/[2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2]$, $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$, dan $E_J = BJ(J+1)$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Setiap pernyataan diuji satu per satu: pernyataan yang mengikuti definisi dan domain operator dinyatakan benar, sedangkan yang melanggar syarat batas, normalisasi, komutasi, atau spektrum nilai eigen dinyatakan salah. Alasan fisiknya harus dicantumkan, bukan hanya label benar/salah.

BAB 7 — TEOREMA-TEOREMA MEKANIKA KUANTUM

Soal

Bagian	Nomor Soal	Bagian	Nomor Soal
7.1	7.1–7.3	7.6	7.31–7.41
7.2	7.4–7.17	7.7	7.42–7.45
7.3	7.18–7.19	7.8	7.46–7.48
7.4	7.20	7.10	7.49–7.55
7.5	7.21–7.30	Umum	7.56–7.64

7.1 Benar atau salah? Jika suatu hubungan kadang-kadang benar dan kadang-kadang salah, jawablah "salah". Di sini f dan g adalah fungsi, c adalah konstanta, dan $\hat{B}$ adalah operator linear. (a) $\langle f|\hat{B}|g\rangle = \langle f \vee \hat{B}g\rangle$; (b) $\langle f|\hat{B}|cg\rangle = c\langle f|\hat{B}|g\rangle$; (c) $\langle cf|\hat{B}|g\rangle = c\langle f|\hat{B}|g\rangle$.

7.2 Jika c adalah konstanta, dalam kondisi apa $\langle cf_m|\hat{A}|f_n\rangle$ sama dengan $\langle f_m|\hat{A}|cf_n\rangle$?

7.3 Verifikasilah persamaan setelah (7.3). Verifikasilah persamaan-persamaan dalam (7.5).

7.4 Operator apakah yang ditunjukkan bersifat Hermitian oleh persamaan $\langle m|n\rangle = \langle n|m\rangle$?

7.5 Jika $\hat{B}$ bersifat Hermitian, buktikan bahwa $\langle f|\hat{B}|g\rangle = \langle \hat{B}f \vee g\rangle$.

7.6 Misalkan $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ adalah operator Hermitian dan c adalah konstanta. (a) Tunjukkan bahwa $c\hat{A}$ bersifat Hermitian jika c merupakan bilangan real dan bahwa $c\hat{A}$ tidak bersifat Hermitian jika c tidak real. (b) Tunjukkan bahwa $\hat{A} + \hat{B}$ bersifat Hermitian.

7.7 (a) Tunjukkan bahwa d^2/dx^2 dan $\hat{T}_x$ bersifat Hermitian, dengan $\hat{T}_x \equiv -(\hbar^2/2m)\,d^2/dx^2$. Lihat Soal 7.6a. (b) Tunjukkan bahwa $\langle T_x\rangle = (\hbar^2/2m)\int |\partial\Psi/\partial x|^2 d\tau$. (c) Untuk sistem satu partikel, apakah $\langle T\rangle$ sama dengan $\langle T_x\rangle + \langle T_y\rangle + \langle T_z\rangle$? (d) Tunjukkan bahwa $\langle T\rangle \geq 0$ bagi sistem satu partikel.

7.8 Manakah dari operator berikut yang bersifat Hermitian: d/dx , $i\,d/dx$, $4\,d^2/dx^2$, dan $i\,d^2/dx^2$? Lihat Soal 7.6.

7.9 Manakah dari operator berikut yang memenuhi persyaratan sebagai operator mekanika kuantum untuk merepresentasikan suatu besaran fisik: (a) $(\quad)^{1/2}$; (b) d/dx; (c) $d^2/d\,x^2$; (d) $i\,d/dx$?

7.10 Verifikasilah bahwa $\hat{L}_z$ bersifat Hermitian dengan menggunakan koordinat sferis.

7.11 Misalkan $\hat{A}$ adalah operator Hermitian. Tunjukkan bahwa $\langle A^2\rangle = \int \left|\hat{A}\psi\right|^2 d\tau$ dan karena itu $\langle A^2\rangle \geq 0$. Hasil ini dapat digunakan untuk menurunkan Pers. (5.131) secara lebih ketat daripada dalam teks. Karena $\hat{M}^2 - \hat{M}_z^2 = \hat{M}_x^2 + \hat{M}_y^2$, kita mempunyai $\langle M^2\rangle - \langle M_z^2\rangle = \langle M_x^2\rangle + \langle M_y^2\rangle$. Sekarang $\langle M^2\rangle = c$, $\langle M_z^2\rangle = b_k^2$, dan berdasarkan teorema dalam soal ini $\langle M_x^2\rangle \geq 0$, $\langle M_y^2\rangle \geq 0$. Oleh sebab itu, $c - b_k^2 \geq 0$.

7.12 (a) Jika $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ adalah operator Hermitian, buktikan bahwa hasil kali $\hat{A}\hat{B}$ bersifat Hermitian jika dan hanya jika $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ saling komut. (b) Jika $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ bersifat Hermitian, buktikan bahwa $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ bersifat Hermitian. Operator $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ disebut **antikomutator** $\hat{A}$ dan $\hat{B}$. (c) Apakah $\hat{x}\hat{p}_x$ bersifat Hermitian? (d) Apakah $1/2\,(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x})$ bersifat Hermitian?

7.13 Operator linear $\hat{C}$ disebut anti-Hermitian apabila $\langle f\left|\hat{C}\right|g\rangle = -\langle g\left|\hat{C}\right|f\rangle$ bagi setiap pasangan fungsi yang berperilaku baik. (a) Tunjukkan bahwa d/dx bersifat anti-Hermitian. (b) Jika $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ bersifat Hermitian, buktikan bahwa komutatornya $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ bersifat anti-Hermitian.

7.14 Jelaskan mengapa setiap integral berikut harus bernilai nol, dengan fungsi-fungsinya berupa fungsi gelombang serupa hidrogen: (a) $\langle 2p_1\left|\hat{L}_z\right|3p_{-1}\rangle$; (b) $\langle 3p_0\left|\hat{L}_z\right|3p_0\rangle$.

7.15 Evaluasilah $\langle\psi_m\left|\hat{H}\right|\psi_n\rangle$ apabila (a) $\hat{H}$ adalah operator Hamiltonian osilator harmonik dan ψ_m serta ψ_n adalah fungsi gelombang keadaan stasioner osilator harmonik dengan bilangan kuantum vibrasi m dan n; (b) $\hat{H}$ adalah Hamiltonian kotak partikel dan ψ_m serta ψ_n adalah fungsi eigen energi kotak partikel dengan bilangan kuantum m dan n.

7.16 Jika ψ_2 adalah fungsi gelombang osilator harmonik dengan $v = 2$ dan $\hat{H}$ adalah Hamiltonian osilator harmonik, sederhanakan integral $\langle\psi_2\left|\hat{H}\right|f(x)\rangle$.

7.17 (a) Tunjukkan bahwa fungsi gelombang serupa hidrogen $2p_x$ dan $2p_1$ tidak ortogonal. (b) Gunakan prosedur Schmidt untuk membentuk kombinasi linear $2p_x$ dan $2p_1$ yang saling ortogonal. Kemudian normalkan fungsi-fungsi tersebut. Kombinasi linear yang dihasilkan merupakan fungsi eigen dari operator mana di antara $\hat{H}$, $\hat{L}^2$, dan $\hat{L}_z$?

7.18 (a) Lengkapilah rincian evaluasi koefisien penguraian a_n dalam contoh pada Bagian 7.3. (b) Tuliskan penguraian $x(l-x)$ pada contoh tersebut untuk $x = l/2$, kemudian gunakan lima suku taknol pertama untuk menghampiri π^3. (c) Hitung galat persen penguraian $x(l-x)$ tersebut pada $x = l/4$ ketika diambil 1, 3, dan 5 suku taknol pertama.

7.19 (a) Uraikan fungsi $f(x) = -1$ untuk $0 \leq x \leq l/2$ dan $f(x) = 1$ untuk $l/2 < x \leq l$ dalam fungsi-fungsi gelombang kotak partikel. Karena f tidak kontinu pada $l/2$, penguraian tidak diharapkan merepresentasikan f pada titik tersebut. Karena f tidak memenuhi syarat batas kotak partikel berupa nilai nol pada $x = 0$ dan $x = l$, penguraian tidak merepresentasikan f pada kedua titik tersebut. Penguraian akan merepresentasikan f pada titik-titik lainnya. (b) Hitung galat persen pada $x = l/4$ ketika 1, 3, 5, dan 7 suku taknol pertama digunakan dalam penguraian.

7.20 Benar atau salah? (a) Jika dua operator Hermitian tidak saling komut, keduanya tidak mungkin mempunyai fungsi eigen bersama apa pun. (b) Jika dua operator Hermitian saling komut, setiap fungsi eigen salah satunya harus merupakan fungsi eigen operator lainnya. (c) Integral $\langle 2p_x|\hat{L}_z|3p_x\rangle$ yang melibatkan orbital serupa hidrogen harus sama dengan nol.

7.21 Misalkan $\hat{P}$ adalah operator paritas dan m adalah bilangan bulat positif. Apakah $\hat{P}^m$ jika m genap? Jika m ganjil?

7.22 Untuk atom serupa hidrogen, $V = -Z(e^2/4\pi\varepsilon_0)(x^2+y^2+z^2)^{-1/2}$, sehingga energi potensial merupakan fungsi genap dari koordinat. (a) Apakah paritas fungsi gelombang $2s$? (b) Apakah paritas $2p_x$? (c) Tinjau $2s + 2p_x$. Apakah fungsi ini merupakan fungsi eigen $\hat{H}$? Apakah mempunyai paritas tertentu?

7.23 Misalkan $\hat{P}$ adalah operator paritas dan $\psi_m(x)$ adalah fungsi gelombang osilator harmonik ternormalisasi. Kita mendefinisikan elemen matriks P_{mn} sebagai $P_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m \hat{P}\psi_n dx$. Tunjukkan bahwa $P_{mn} = 0$ untuk $m \neq n$ dan $P_{mm} = \pm 1$.

7.24 Gunakan paritas untuk menentukan integral mana berikut ini yang harus bernilai nol: (a) $\langle 2s|x|2p_x\rangle$; (b) $\langle 2s|x^2|2p_x\rangle$; (c) $\langle 2p_y|x|2p_x\rangle$. Fungsi-fungsi dalam integral ini adalah fungsi gelombang serupa hidrogen.

7.25 Misalkan $\hat{R}$ adalah operator linear sedemikian rupa sehingga $\hat{R}^n = \hat{1}$, dengan n bilangan bulat positif dan tidak ada pangkat $\hat{R}$ yang lebih rendah sama dengan $\hat{1}$. Tentukan nilai eigen $\hat{R}$.

7.26 (a) Tunjukkan bahwa operator paritas bersifat linear. (b) Tunjukkan bahwa operator paritas bersifat Hermitian; pembuktian dalam satu dimensi sudah memadai.

7.27 Karena operator paritas bersifat Hermitian, lihat Soal 7.26, dua fungsi eigen $\hat{P}$ yang berkaitan dengan nilai eigen berbeda harus saling ortogonal. Tunjukkan secara langsung bahwa hal ini benar.

7.28 Tinjau integral $\langle v_2|x|v_1\rangle$, dengan fungsi-fungsinya berupa fungsi gelombang osilator harmonik satu dimensi yang mempunyai bilangan kuantum v_2 dan v_1 . Dalam kondisi apa pertimbangan paritas memungkinkan kita menyimpulkan bahwa integral tersebut harus nol? Mungkinkah integral bernilai nol pada kasus lain? Integral ini penting dalam pembahasan transisi radiasi.

7.29 (a) Dalam koordinat Kartesius, operator paritas $\hat{P}$ bersesuaian dengan transformasi variabel $x \to -x$, $y \to -y$, dan $z \to -z$. Tunjukkan bahwa dalam koordinat sferis operator paritas bersesuaian dengan transformasi $r \to r, \theta \to \pi - \theta$, dan $\phi \to \phi + \pi$. (b) Tunjukkan bahwa $\hat{P}e^{im\phi} = (-1)^m e^{im\phi}$. (c) Gunakan Pers. (5.97) untuk menunjukkan bahwa

$$\hat{P}S_{l,m}(\theta) = (-1)^{l-|m|}S_{l,m}(\theta) = (-1)^{l-m}S_{l,m}(\theta).$$

- Gabungkan hasil (b) dan (c) untuk menyimpulkan bahwa harmonik sferis $Y_l^m(\theta, \phi)$ merupakan fungsi genap jika l genap dan fungsi ganjil jika l ganjil.

7.30 Misalkan f merupakan fungsi ganjil hanya terhadap sebagian variabelnya, yang berarti

$$\begin{aligned} &f(-q_1, -q_2, \dots, -q_k, q_{k+1}, q_{k+2}, \dots, q_m) \\ &= -f(q_1, q_2, \dots, q_k, q_{k+1}, q_{k+2}, \dots, q_m), \end{aligned}$$

dengan $1 \le k \le m$. Jelaskan mengapa

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f\,(q_1, \dots, q_m) dq_1 \cdots dq_m = 0.$$

Petunjuk: tuliskan integral sebagai

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f\,(q_1, \dots, q_k, q_{k+1}, \dots, q_m) dq_1 \cdots dq_k \right] dq_{k+1} \cdots dq_m.$$

7.31 Untuk atom hidrogen dalam keadaan p, hasil yang mungkin dari pengukuran L_z adalah $-\hbar$, 0, dan $\hbar$. Untuk setiap fungsi gelombang berikut, berikan probabilitas masing-masing dari ketiga hasil tersebut: (a) $2p_z$; (b) $2p_y$; (c) $2p_1$. Kemudian gunakan hasil tersebut untuk menentukan $\langle L_z \rangle$ bagi masing-masing fungsi gelombang.

7.32 Misalkan pada waktu t' suatu atom hidrogen berada dalam keadaan tak stasioner

$$\Psi = 6^{-1/2}(2p_1) - 2^{-1/2}i(2p_0) - 3^{-1/2}(3d_1).$$

Jika L_z diukur pada t', berikan hasil-hasil yang mungkin dan probabilitas setiap hasil. Kemudian tentukan $\langle L_z \rangle$ untuk keadaan ini.

7.33 Jika L^2 diukur dalam atom hidrogen yang fungsi keadaannya seperti pada Soal 7.32, berikan hasil-hasil yang mungkin beserta probabilitasnya. Kemudian hitung $\langle L^2 \rangle$ untuk keadaan tersebut.

7.34 Jika E diukur dalam atom hidrogen yang fungsi keadaannya seperti pada Soal 7.32, berikan hasil-hasil yang mungkin beserta probabilitasnya. Kemudian hitung $\langle E \rangle$ untuk keadaan tersebut.

7.35 Suatu pengukuran menghasilkan $2\hbar^2$ untuk kuadrat besar momentum sudut orbital suatu partikel. Jika L_x kemudian diukur, apakah hasil-hasil yang mungkin?

7.36 Misalkan sebuah partikel dalam kotak sepanjang l berada dalam keadaan tak stasioner dengan $\Psi = 0$ untuk $x < 0$ dan $x > l$, sedangkan

$$\Psi = \frac{1}{2} e^{-ih^2 t/(8ml^2\hbar)} \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} sin\left(\frac{\pi x}{l}\right)$$
$$+ \frac{\sqrt{3}}{2} e^{i\pi} e^{-ih^2 t/(2ml^2\hbar)} \left(\frac{2}{l}\right)^{1/2} sin\left(\frac{2\pi x}{l}\right)$$

untuk $0 \leq x \leq l$. Jika energi diukur pada waktu t, berikan hasil-hasil yang mungkin dan probabilitasnya.

7.37 Misalkan sebuah partikel dalam kotak sepanjang l berada dalam keadaan tak stasioner $\Psi = (105/l^7)^{1/2} x^2 (l - x)$ untuk $0 \leq x \leq l$, dan $\Psi = 0$ di tempat lain, pada saat energi diukur. Berikan hasil-hasil yang mungkin dan probabilitasnya. Hitung probabilitas untuk $n = 1,2,3$.

7.38 Misalkan elektron dalam atom hidrogen mempunyai fungsi keadaan $\Psi = (27/\pi\, a^3)^{1/2} e^{-3r/a}$, dengan $a = 4\pi\varepsilon_0\, \hbar^2/(\mu e^2)$, pada saat energinya diukur. Tentukan probabilitas bahwa nilai energi $-e^2/(8\pi\varepsilon_0 a)$ diperoleh.

7.39 (a) Gabungkan Pers. (2.30) dan (3.33) untuk menuliskan Ψ bagi partikel bebas dalam satu dimensi. (b) Tunjukkan bahwa Ψ tersebut merupakan kombinasi linear dari dua fungsi eigen $\hat{p}_x$. Apakah nilai eigen kedua fungsi eigen tersebut? (c) Jika p_x suatu partikel bebas dalam satu dimensi diukur, berikan hasil-hasil yang mungkin dan probabilitasnya.

7.40 Gunakan hasil contoh terakhir dalam Bagian 7.6 untuk mengevaluasi $\sum_{m=0}^{\infty} [1/(2m+1)^6]$.

7.41 (a) Tunjukkan bahwa untuk partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l, probabilitas mengamati nilai p_x antara p dan $p + dp$ adalah

$$\frac{4|N|^2 s^2}{l(s^2-b^2)^2}[1-(-1)^n cos(bl)]dp \quad (7.112)$$

di mana $s \equiv n\pi l^{-1}$ dan $b \equiv p\hbar^{-1}$. Konstanta N harus dipilih sehingga integral (7.112) dari minus tak hingga sampai plus tak hingga sama dengan satu. Jangan mengevaluasi N. (b) Evaluasilah (7.112) dalam $|N|$ untuk $p = \pm nh/(2l)$. Pada nilai p_x ini, penyebut (7.112) sama dengan nol dan probabilitas mencapai nilai besar tetapi berhingga.

7.42 Tentukan: (a) $\int_{-1}^{1} \delta(x)dx$; (b) $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)dx$; (c) $\int_{-1}^{2} \delta(x)dx$; (d) $\int_{1}^{2} f(x)\delta(x-3)dx$.

7.43 Tunjukkan bahwa $\int_{-\infty}^{\infty} |\delta(x-a)|^2 \, dx = \infty$.

7.44 Berapakah nilai $\int_{0}^{\infty} f(x)\delta(x)dx$?

7.45 Fungsi-fungsi pada Gambar 7.5 menghampiri fungsi delta Dirac. Gambarlah grafik fungsi-fungsi bersesuaian yang menghampiri fungsi langkah Heaviside dengan ketelitian yang semakin meningkat.

7.46 Mekanika kuantum mempostulatkan bahwa keadaan sekarang suatu sistem yang tidak terganggu menentukan keadaan masa depannya. Tinjau kasus khusus sistem dengan Hamiltonian tak bergantung waktu $\hat{H}$. Misalkan diketahui bahwa pada waktu t_0 fungsi keadaannya adalah $\Psi(x, t_0)$. Turunkan Pers. (7.101) dengan menyubstitusikan penguraian (7.66), dengan $g_i = \psi_i$, ke dalam persamaan Schrödinger bergantung waktu (7.97); kalikan hasilnya dengan ψ_m, integralkan pada seluruh ruang, kemudian selesaikan untuk c_m.

7.47 Untuk keadaan kotak partikel bergantung waktu yang pada $t = 0$ mempunyai $\Psi = 2^{-1/2}\psi_1 + 2^{-1/2}\psi_2$ dalam contoh setelah Pers. (7.101): (a) hitung periode T untuk elektron dalam kotak sepanjang 2,00 Å; (b) verifikasilah (7.102) untuk $|\Psi|^2$; (c) gunakan lembar kerja elektronik atau program seperti Mathcad untuk memplot $l|\Psi|^2$ dalam (7.103) untuk $t = jT/8$, dengan $j = 0,1,\ldots,8$; (d) gunakan Mathcad untuk menghasilkan animasi $|\Psi|^2$ ketika waktu berubah.

7.48 Tinjau keadaan kotak partikel bergantung waktu yang pada $t = 0$ diberikan oleh $\Psi = 2^{-1/2}\psi_1 + 2^{-1/2}\psi_n$, dengan $n \neq 1$. (a) Tentukan persamaan yang bersesuaian dengan (7.102) dan (7.103) untuk $|\Psi|^2$ dan $l|\Psi|^2$. (b) Buat animasi $|\Psi|^2$ ketika waktu berubah untuk $n = 3$, $n = 4$, dan $n = 5$. Untuk nilai mana di antara $n = 2,3,4,5$, $|\Psi|^2$ tetap simetris terhadap titik tengah kotak ketika waktu berubah?

7.49 Untuk matriks

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & -3 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 4 & 4 \end{pmatrix},$$

tentukan (a) AB; (b) BA; (c) $A + B$; (d) $3A$; (e) $A - 4B$.

7.50 Hitung hasil kali matriks CD dan DC, dengan

$$C = \begin{pmatrix} 5 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, D = (i \quad 2 \quad 1).$$

7.51 Tentukan representasi matriks operator identitas $\hat{1}$ dalam suatu basis lengkap ortonormal.

7.52 Jika $\hat{P} = c\hat{S}$, dengan c suatu konstanta, tunjukkan bahwa $P_{jk} = cS_{jk}$.

7.53 Jika $\{f_i\}$ adalah basis lengkap ortonormal sedemikian rupa sehingga $\langle f_m|\hat{A}|f_n\rangle = a_m\delta_{mn}$ untuk semua m dan n, yaitu representasi matriks $\hat{A}$ diagonal, buktikan bahwa fungsi-fungsi $\{f_i\}$ merupakan fungsi eigen $\hat{A}$ dan a_i merupakan nilai eigen $\hat{A}$. Petunjuk: uraikan $\hat{A}f_n$ dalam himpunan $\{f_i\}$.

7.54 (a) Jika $\hat{A}$ adalah operator linear, $\{f_i\}$ adalah basis lengkap ortonormal, dan u adalah fungsi sembarang, tunjukkan bahwa

$$\hat{A}u = \sum_j \left(\sum_i \langle f_j|\hat{A}|f_i\rangle\langle f_i \vee u\rangle \right) f_j.$$

Petunjuk: uraikan u dalam himpunan $\{f_i\}$, terapkan $\hat{A}$ pada penguraian ini, kemudian uraikan $\hat{A}f_i$. (b) Jika $\hat{A}u = w$, dengan $w = \sum_j w_j f_j$ dan $u = \sum_i u_i f_i$, dengan koefisien penguraian w_j dan u_i berupa bilangan, tunjukkan bahwa persamaan pada (a) menyatakan $w_j = \sum_i A_{ji} u_i$, dan karena itu $w = Au$, dengan w, A, u masing-masing merupakan representasi $w, \hat{A}, u$.

7.55 Tuliskan bagian $l = 2$ dari representasi matriks $\hat{L}_z$ dalam basis $\{Y_l^m\}$.

7.56 Hitung ketidakpastian ΔL_z untuk keadaan stasioner atom hidrogen berikut: (a) $2p_z$; (b) $2p_x$.

7.57 Untuk sistem pada Soal 7.36: (a) gunakan ortonormalitas [Pers. (2.27)] untuk memverifikasi bahwa Ψ ternormalisasi; (b) tentukan $\langle E\rangle$ pada waktu t; (c) tentukan $\langle x\rangle$ pada waktu t, kemudian tentukan nilai maksimum dan minimum $\langle x\rangle$ sebagai fungsi t.

7.58 Tinjau operator $\hat{A}$ yang memuat waktu sebagai parameter. Kita tertarik pada perubahan nilai rata-rata sifat A terhadap waktu, dan mempunyai

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\int \Psi \quad \hat{A}\Psi d\tau.$$

Integral tentu pada ruas kanan persamaan ini merupakan fungsi parameter t. Secara umum, operasi matematika yang sah adalah menghitung turunannya terhadap t dengan mendiferensialkan integran terhadap t:

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \int \frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi \quad \hat{A}\Psi\right)d\tau$$

$$\int \frac{\partial \Psi}{\partial t}\hat{A}\Psi d\tau + \int \Psi \quad \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi d\tau + \int \Psi \quad \hat{A}\frac{\partial \Psi}{\partial t}d\tau.$$

Gunakan persamaan Schrödinger bergantung waktu, konjugat kompleksnya, dan sifat Hermitian $\hat{H}$ untuk menunjukkan bahwa

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \int \Psi \quad \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\Psi d\tau + \frac{i}{\hbar}\int \Psi \quad \left(\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}\right)\Psi d\tau,$$

atau

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}\right\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle \hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}\rangle \qquad (7.113)$$

7.59 Gunakan (7.113) dan (5.8) untuk menunjukkan bahwa

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{1}{m}\langle p_x\rangle = \frac{1}{m}\int \Psi \quad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial x}d\tau \quad (7.114)$$

Dari (7.114) diperoleh

$$\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = \frac{1}{m}\frac{d\langle p_x\rangle}{dt}.$$

Gunakan (7.113), (5.9), dan (4.24) untuk menunjukkan bahwa

$$\langle F_x\rangle = m\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} \qquad (7.115)$$

Jika kita meninjau partikel mekanika klasik, fungsi gelombangnya besar hanya dalam daerah sangat kecil yang bersesuaian dengan posisinya. Dalam keadaan demikian, tanda rata-rata dalam (7.115) dapat dihilangkan untuk memperoleh hukum kedua Newton. Jadi, mekanika klasik merupakan kasus khusus mekanika kuantum. Persamaan (7.115) dikenal sebagai **teorema Ehrenfest**, mengikuti nama fisikawan yang menurunkannya pada tahun 1927.

7.60 Buktikan prinsip ketidakpastian (5.12) bagi dua operator Hermitian sembarang $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ sebagai berikut. (a) Definisikan fungsi u sebagai $u \equiv f - cg$, dengan $c \equiv \langle g|f\rangle/\langle g|g\rangle$, sedangkan f dan g adalah dua fungsi terintegralkan kuadrat sembarang. Tinjau integral $\langle u \vee u\rangle$. Karena $u \quad u = |u|^2 \geq 0$, integrannya tidak pernah negatif, sehingga $\langle u \vee u\rangle \geq 0$.

Substitusikan definisi u ke dalam pertidaksamaan terakhir, kalikan hasilnya dengan besaran positif $\langle g \vee g \rangle$, dan tunjukkan bahwa hal ini menghasilkan $\langle f|f\rangle\langle g|g\rangle - \langle f|g\rangle\langle g|f\rangle \geq 0$, atau $\langle f|f\rangle\langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2$, yang dikenal sebagai pertidaksamaan Schwarz.

- Tetapkan $f \equiv \left(\hat{A} - \langle A\rangle\right)\Psi$ dan $g \equiv \left(\hat{B} - \langle B\rangle\right)\Psi$. Gunakan sifat Hermitian $\hat{A} - \langle A\rangle$ dan $\hat{B} - \langle B\rangle$ untuk menunjukkan bahwa $(\Delta A)^2 = \langle f \vee f\rangle$ dan $(\Delta B)^2 = \langle g \vee g\rangle$, dengan ketidakpastian didefinisikan oleh Pers. (5.11).
- Untuk bilangan kompleks $z \equiv x + iy$, dengan x dan y real, kita mempunyai $|z|^2 = x^2 + y^2 \geq y^2$. Verifikasilah bahwa $y = \left(z - z^*\right)/(2i)$. Oleh karena itu, $|z|^2 \geq \left[\left(z - z^*\right)/(2i)\right]^2$. Tetapkan $z \equiv \langle f \vee g\rangle$. Maka $|\langle f|g\rangle|^2 \geq [(\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle)/(2i)]^2$. Gabungkan hasil ini dengan hasil bagian (a) dan (b) untuk menunjukkan bahwa $(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq -1/4\,(\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle)^2$, dengan f dan g didefinisikan dalam (b).
- Gunakan definisi f dan g serta normalisasi Ψ untuk memverifikasi bahwa $\langle f|g\rangle = \langle g|f\rangle^* = \langle\Psi\left|\hat{A}\hat{B}\right|\Psi\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$. Dari definisi f dan g, pertukaran f dan g menukar A dan B, sehingga $\langle g|f\rangle = \langle\Psi|\hat{B}\hat{A} \vee \Psi\rangle - \langle B\rangle\langle A\rangle$. Verifikasilah bahwa hasil bagian (c) menjadi $(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq -1/4\,\langle\Psi\left|\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right|\Psi\rangle^2$.
- Gunakan hasil Soal 7.13 untuk menunjukkan bahwa $\langle\Psi\left|\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right|\Psi\rangle = -\langle\Psi\left|\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right|\Psi\rangle^*$. Kemudian substitusikan hasil ini untuk salah satu integral pada ruas kanan pertidaksamaan dalam bagian (d), sehingga diperoleh $(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq 1/4\,|\langle\Psi|\left[\hat{A},\hat{B}\right]|\Psi\rangle|^2$, yang memberikan prinsip ketidakpastian (5.12).

7.61 Tulislah program komputer yang menggunakan penguraian (7.37) untuk menghitung fungsi (7.35) pada nilai $x = 0{,}0{,}1l, 0{,}2l, \ldots, l$. Program harus melakukan perhitungan dengan mengambil 5, 10, 15, dan 20 suku dalam penguraian.

7.62 Dalam menentukan nilai eigen dengan menyelesaikan persamaan diferensial, kuantisasi hanya terjadi ketika kita menerapkan syarat bahwa fungsi eigen harus berperilaku baik. Operator tangga digunakan dalam Bagian 5.4 untuk menentukan nilai eigen $\hat{M}^2$ dan $\hat{M}_z$, serta dalam Soal 5.36 untuk menentukan nilai eigen energi osilator harmonik. Di bagian mana syarat bahwa fungsi eigen harus berperilaku baik digunakan dalam penurunan di Bagian 5.4 dan Soal 5.36? Petunjuk: lihat Soal 7.11.

7.63 Tanpa melihat teks, buktikan bahwa (a) nilai eigen operator Hermitian bersifat real; (b) fungsi-fungsi eigen operator Hermitian yang berkaitan dengan nilai eigen berbeda saling ortogonal.

7.64 Benar atau salah? (a) Fungsi keadaan selalu sama dengan fungsi waktu dikalikan fungsi koordinat. (b) Dalam mekanika klasik maupun mekanika kuantum, pengetahuan tentang keadaan sekarang suatu sistem terisolasi memungkinkan keadaan masa depannya dihitung. (c) Fungsi keadaan selalu merupakan fungsi eigen Hamiltonian. (d) Setiap kombinasi linear fungsi eigen Hamiltonian merupakan fungsi eigen operator Hamiltonian. (e) Jika fungsi keadaan bukan fungsi eigen operator $\hat{A}$, pengukuran sifat A mungkin memberikan nilai yang bukan salah satu nilai eigen $\hat{A}$. (f) Kerapatan probabilitas tidak bergantung pada waktu bagi keadaan stasioner. (g) Jika dua operator Hermitian tidak saling komut, keduanya tidak mungkin mempunyai fungsi eigen bersama. (h) Jika dua operator Hermitian saling komut, setiap fungsi eigen salah satunya harus merupakan fungsi eigen yang lain. (i) Dua fungsi eigen bebas linear dari operator Hermitian yang sama selalu saling ortogonal. (j) Jika operator $\hat{B}$ bersesuaian dengan sifat fisik suatu sistem mekanika kuantum, fungsi keadaan Ψ harus merupakan fungsi eigen $\hat{B}$. (k) Setiap kombinasi linear penyelesaian persamaan Schrödinger bergantung waktu merupakan penyelesaian persamaan tersebut. (l) Fungsi keadaan ternormalisasi Ψ tidak berdimensi atau tidak mempunyai satuan. (m) Semua fungsi eigen operator Hermitian harus berupa fungsi real. (n) Besaran $\langle f_m|\hat{A}|f_n\rangle$ dan $\langle f_m \vee f_n\rangle$ adalah bilangan. (o) Ketika Ψ merupakan fungsi eigen $\hat{B}$ dengan nilai eigen b_k, kita pasti mengamati nilai b_k ketika sifat B diukur. (p) Hubungan $\langle f|\hat{B}|g\rangle = \langle g|\hat{B}|f\rangle$ hanya berlaku ketika f dan g merupakan fungsi eigen operator Hermitian $\hat{B}$. (q) Persamaan Schrödinger bergantung waktu lebih fundamental daripada persamaan Schrödinger tak bergantung waktu. (r) Untuk semua keadaan, $(\hat{H}\Psi)/\Psi$ sama dengan energi E keadaan tersebut.

PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 7

Teorema-teorema Mekanika Kuantum

Setiap nomor berikut memuat dasar teori, langkah penyelesaian, pemeriksaan, dan kesimpulan. Semua persamaan akan dikonversi menjadi objek persamaan Word.

Pembahasan 7.1

Inti soal. Benar atau salah? Jika suatu hubungan kadang-kadang benar dan kadang-kadang salah, jawablah "salah". Di sini f dan g adalah fungsi, c adalah konstanta, dan $\hat{B}$ adalah operator linear. (a) $\langle f|\hat{B}|g\rangle = \langle f \vee \hat{B}g\rangle$; (b) f| |cg= cf| …

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Setiap pernyataan diuji satu per satu: pernyataan yang mengikuti definisi dan domain operator dinyatakan benar, sedangkan yang melanggar syarat batas, normalisasi, komutasi, atau spektrum nilai eigen dinyatakan salah. Alasan fisiknya harus dicantumkan, bukan hanya label benar/salah.

Pembahasan 7.2

Inti soal. Jika c adalah konstanta, dalam kondisi apa $\langle cf_m|\hat{A}|f_n\rangle$ sama dengan $\langle f_m|\hat{A}|cf_n\rangle$?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.3

Inti soal. Verifikasilah persamaan setelah (7.3). Verifikasilah persamaan-persamaan dalam (7.5).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.4

Inti soal. Operator apakah yang ditunjukkan bersifat Hermitian oleh persamaan $\langle m|n\rangle = \langle n|m\rangle$?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.5

Inti soal. Jika $\hat{B}$ bersifat Hermitian, buktikan bahwa $\langle f|\hat{B}|g\rangle = \langle \hat{B}f \vee g\rangle$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.6

Inti soal. Misalkan $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ adalah operator Hermitian dan c adalah konstanta. (a) Tunjukkan bahwa $c\hat{A}$ bersifat Hermitian jika c merupakan bilangan real dan bahwa $c\hat{A}$ tidak bersifat Hermitian jika c tidak real. (b) Tunjukkan bahwa $\hat{A} + \hat{B}$ bersifat Hermitian.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-

suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.7

Inti soal. Tunjukkan bahwa $d^2/d\,x^2$ dan $\hat{T}_x$ bersifat Hermitian, dengan $\hat{T}_x \equiv -(\hbar^2/2\,m)\,d^2/d\,x^2$. Lihat Soal 7.6a. (b) Tunjukkan bahwa $\langle T_x \rangle = (\hbar^2/2\,m)\int |\partial\,\Psi/\partial\,x|^2 d\tau$. (c) Untuk sistem satu partikel, apakah $\langle T \rangle$ sama dengan T_{x}…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n\,\psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n\,\psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.8

Inti soal. Manakah dari operator berikut yang bersifat Hermitian: d/dx, $i\,d/dx$, $4\,d^2/d\,x^2$, dan $i\,d^2/d\,x^2$? Lihat Soal 7.6.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.9

Inti soal. Manakah dari operator berikut yang memenuhi persyaratan sebagai operator mekanika kuantum untuk merepresentasikan suatu besaran fisik: (a) $(\quad)^{1/2}$; (b) d/dx; (c) $d^2/d\,x^2$; (d) $i\,d/dx$?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.10

Inti soal. Verifikasilah bahwa $\hat{L}_z$ bersifat Hermitian dengan menggunakan koordinat sferis.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-

suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.11

Inti soal. Misalkan $\hat{A}$ adalah operator Hermitian. Tunjukkan bahwa $\langle A^2 \rangle = \int \left|\hat{A}\psi\right|^2 d\tau$ dan karena itu $\langle A^2 \rangle \geq 0$. Hasil ini dapat digunakan untuk menurunkan Pers. (5.131) secara lebih ketat daripada dalam teks. Karena {}^{2} - {}{z}^{2} = {}{x}^{2} +…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.12

Inti soal. Jika $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ adalah operator Hermitian, buktikan bahwa hasil kali $\hat{A}\hat{B}$ bersifat Hermitian jika dan hanya jika $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ saling komut. (b) Jika $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ bersifat Hermitian, buktikan bahwa $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ bersifat Hermitian. Operator…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.13

Inti soal. Operator linear $\hat{C}$ disebut anti-Hermitian apabila $\langle f|\hat{C}|g\rangle = -\langle g|\hat{C}|f\rangle$ bagi setiap pasangan fungsi yang berperilaku baik. (a) Tunjukkan bahwa d/dx bersifat anti-Hermitian. (b) Jika $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ bersifat Hermitian, buktikan bahwa komutatornya -…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai

eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.14

Inti soal. Jelaskan mengapa setiap integral berikut harus bernilai nol, dengan fungsi-fungsinya berupa fungsi gelombang serupa hidrogen: (a) $\langle 2p_1 \left| \hat{L}_z \right| 3p_{-1} \rangle$; (b) $\langle 3p_0 \left| \hat{L}_z \right| 3p_0 \rangle$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m \left| \hat{A} \right| n \rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.15

Inti soal. Evaluasilah $\langle \psi_m \left| \hat{H} \right| \psi_n \rangle$ apabila (a) $\hat{H}$ adalah operator Hamiltonian osilator harmonik dan ψ_m serta ψ_n adalah fungsi gelombang keadaan stasioner osilator harmonik dengan bilangan kuantum vibrasi m dan n; (b) $\hat{H}$ adalah Hamiltonian kotak partikel dan ψ_m serta ψ_n adalah…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m \left| \hat{A} \right| n \rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan

satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 7.16

Inti soal. Jika ψ_2 adalah fungsi gelombang osilator harmonik dengan $v = 2$ dan $\hat{H}$ adalah Hamiltonian osilator harmonik, sederhanakan integral $\langle \psi_2 | \hat{H} | f(x) \rangle$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m | \hat{A} | n \rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 7.17

Inti soal. Tunjukkan bahwa fungsi gelombang serupa hidrogen $2p_x$ dan $2p_1$ tidak ortogonal. (b) Gunakan prosedur Schmidt untuk membentuk kombinasi linear $2p_x$ dan $2p_1$ yang saling ortogonal. Kemudian normalkan fungsi-fungsi tersebut. Kombinasi linear yang dihasilkan merupakan fungsi eigen dari operator mana di antara $\hat{H}$, $\hat{L}^2$, dan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m | \hat{A} | n \rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan

operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.18

Inti soal. Lengkapilah rincian evaluasi koefisien penguraian a_n dalam contoh pada Bagian 7.3. (b) Tuliskan penguraian $x(l-x)$ pada contoh tersebut untuk $x = l/2$, kemudian gunakan lima suku taknol pertama untuk menghampiri π^3. (c) Hitung galat persen penguraian $x(l-x)$ tersebut pada $x = l/4$ ketika diambil 1, 3, dan 5 suku taknol pertama.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 7.19

Inti soal. Uraikan fungsi $f(x) = -1$ untuk $0 \leq x \leq l/2$ dan $f(x) = 1$ untuk $l/2 < x \leq l$ dalam fungsi-fungsi gelombang kotak partikel. Karena f tidak kontinu pada $l/2$, penguraian tidak diharapkan merepresentasikan f pada titik tersebut. Karena f tidak memenuhi syarat batas kotak partikel berupa nilai nol pada $x = 0$ dan $x = l$, penguraian tidak…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 7.20

Inti soal. Benar atau salah? (a) Jika dua operator Hermitian tidak saling komut, keduanya tidak mungkin mempunyai fungsi eigen bersama apa pun. (b) Jika dua operator Hermitian saling komut, setiap fungsi eigen salah satunya harus merupakan fungsi eigen operator lainnya. (c) Integral $\langle 2p_x|\hat{L}_z|3p_x\rangle$ yang melibatkan orbital serupa hidrogen…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Setiap pernyataan diuji satu per satu: pernyataan yang mengikuti definisi dan domain operator dinyatakan benar, sedangkan yang melanggar syarat batas,

normalisasi, komutasi, atau spektrum nilai eigen dinyatakan salah. Alasan fisiknya harus dicantumkan, bukan hanya label benar/salah.

Pembahasan 7.21

Inti soal. Misalkan $\hat{P}$ adalah operator paritas dan m adalah bilangan bulat positif. Apakah $\hat{P}^m$ jika m genap? Jika m ganjil?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.22

Inti soal. Untuk atom serupa hidrogen, $V = -Z(e^2/4\pi\varepsilon_0)(x^2 + y^2 + z^2)^{-1/2}$, sehingga energi potensial merupakan fungsi genap dari koordinat. (a) Apakah paritas fungsi gelombang $2s$? (b) Apakah paritas $2p_x$? (c) Tinjau $2s + 2p_x$. Apakah fungsi ini merupakan fungsi eigen $\hat{H}$? Apakah mempunyai paritas tertentu?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.23

Inti soal. Misalkan $\hat{P}$ adalah operator paritas dan $\psi_m(x)$ adalah fungsi gelombang osilator harmonik ternormalisasi. Kita mendefinisikan elemen matriks P_{mn} sebagai $P_{mn} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m \hat{P} \psi_n dx$. Tunjukkan bahwa $P_{mn} = 0$ untuk $m \neq n$ dan $P_{mm} = \pm 1$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.24

Inti soal. Gunakan paritas untuk menentukan integral mana berikut ini yang harus bernilai nol: (a) $\langle 2s|x|2p_x\rangle$; (b) $\langle 2s|x^2|2p_x\rangle$; (c) $\langle 2p_y|x|2p_x\rangle$. Fungsi-fungsi dalam integral ini adalah fungsi gelombang serupa hidrogen.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan simetri paritas dan sifat integral pada batas simetris. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.25

Inti soal. Misalkan $\hat{R}$ adalah operator linear sedemikian rupa sehingga $\hat{R}^n = \hat{1}$, dengan n bilangan bulat positif dan tidak ada pangkat $\hat{R}$ yang lebih rendah sama dengan $\hat{1}$. Tentukan nilai eigen $\hat{R}$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 7.26

Inti soal. Tunjukkan bahwa operator paritas bersifat linear. (b) Tunjukkan bahwa operator paritas bersifat Hermitian; pembuktian dalam satu dimensi sudah memadai.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.27

Inti soal. Karena operator paritas bersifat Hermitian, lihat Soal 7.26, dua fungsi eigen $\hat{P}$ yang berkaitan dengan nilai eigen berbeda harus saling ortogonal. Tunjukkan secara langsung bahwa hal ini benar.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.28

Inti soal. Tinjau integral $\langle v_2|x|v_1\rangle$, dengan fungsi-fungsinya berupa fungsi gelombang osilator harmonik satu dimensi yang mempunyai bilangan kuantum v_2 dan v_1. Dalam kondisi apa pertimbangan paritas memungkinkan kita menyimpulkan bahwa integral tersebut harus nol? Mungkinkah integral bernilai nol pada kasus lain? Integral ini penting dalam pembahasan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau

simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.29

Inti soal. Dalam koordinat Kartesius, operator paritas $\hat{P}$ bersesuaian dengan transformasi variabel $x \to -x$, $y \to -y$, dan $z \to -z$. Tunjukkan bahwa dalam koordinat sferis operator paritas bersesuaian dengan transformasi $r \to r$, $\theta \to \pi - \theta$, dan $\phi \to \phi + \pi$. (b) Tunjukkan bahwa…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.30

Inti soal. Misalkan f merupakan fungsi ganjil hanya terhadap sebagian variabelnya, yang berarti

$$f(-q_1, -q_2, \dots, -q_k, q_{k+1}, q_{k+2}, \dots, q_m) = -f(q_1, q_2, \dots, q_k, q_{k+1}, q_{k+2}, \dots, q_m),$$

dengan $1 \le k \le m$. Jelaskan mengapa {- }^{}{- }^{}f(…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan simetri paritas dan sifat integral pada batas simetris. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.31

Inti soal. Untuk atom hidrogen dalam keadaan p, hasil yang mungkin dari pengukuran L_z adalah $-\hbar$, 0, dan $\hbar$. Untuk setiap fungsi gelombang berikut, berikan probabilitas masing-masing dari ketiga hasil tersebut: (a) $2p_z$; (b) $2p_y$; (c) $2p_1$. Kemudian gunakan hasil tersebut untuk menentukan $\langle L_z \rangle$ bagi masing-masing fungsi gelombang.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.32

Inti soal. Misalkan pada waktu t' suatu atom hidrogen berada dalam keadaan tak stasioner

$$\Psi = 6^{-1/2}(2p_1) - 2^{-1/2}i(2p_0) - 3^{-1/2}(3d_1).$$

Jika L_z diukur pada t', berikan hasil-hasil yang mungkin dan probabilitas setiap hasil. Kemudian tentukan $\langle L_z \rangle$ untuk keadaan ini.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas.

Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 7.33

Inti soal. Jika L^2 diukur dalam atom hidrogen yang fungsi keadaannya seperti pada Soal 7.32, berikan hasil-hasil yang mungkin beserta probabilitasnya. Kemudian hitung $\langle L^2 \rangle$ untuk keadaan tersebut.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 7.34

Inti soal. Jika E diukur dalam atom hidrogen yang fungsi keadaannya seperti pada Soal 7.32, berikan hasil-hasil yang mungkin beserta probabilitasnya. Kemudian hitung $\langle E \rangle$ untuk keadaan tersebut.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 7.35

Inti soal. Suatu pengukuran menghasilkan $2\hbar^2$ untuk kuadrat besar momentum sudut orbital suatu partikel. Jika L_x kemudian diukur, apakah hasil-hasil yang mungkin?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan nilai eigen momentum sudut dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.36

Inti soal. Misalkan sebuah partikel dalam kotak sepanjang l berada dalam keadaan tak stasioner dengan $\Psi = 0$ untuk $x < 0$ dan $x > l$, sedangkan = e^{- ih^{2}t/(8ml^{2})}( )^{1/2}( ) + e^{{i}e{- ih^{2}t/(2ml^{2})}(…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.37

Inti soal. Misalkan sebuah partikel dalam kotak sepanjang l berada dalam keadaan tak stasioner $\Psi = (105/l^7)^{1/2} x^2 (l - x)$ untuk $0 \leq x \leq l$, dan $\Psi = 0$ di tempat lain, pada saat energi diukur. Berikan hasil-hasil yang mungkin dan probabilitasnya. Hitung probabilitas untuk $n = 1,2,3$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 7.38

Inti soal. Misalkan elektron dalam atom hidrogen mempunyai fungsi keadaan $\Psi = (27/\pi\, a^3)^{1/2} e^{-3r/a}$, dengan $a = 4\pi\varepsilon_0\, \hbar^2/(\mu e^2)$, pada saat energinya diukur. Tentukan probabilitas bahwa nilai energi $-e^2/(8\pi\varepsilon_0 a)$ diperoleh.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.39

Inti soal. Gabungkan Pers. (2.30) dan (3.33) untuk menuliskan Ψ bagi partikel bebas dalam satu dimensi. (b) Tunjukkan bahwa Ψ tersebut merupakan kombinasi linear dari dua fungsi eigen $\hat{p}_x$. Apakah nilai eigen kedua fungsi eigen tersebut? (c) Jika p_x suatu partikel bebas dalam satu dimensi diukur, berikan hasil-hasil yang mungkin dan probabilitasnya.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan

pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.40

Inti soal. Gunakan hasil contoh terakhir dalam Bagian 7.6 untuk mengevaluasi $\sum_{m=0}^{\infty}[1/(2m+1)^6]$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 7.41

Inti soal. Tunjukkan bahwa untuk partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang l, probabilitas mengamati nilai p_x antara p dan $p+dp$ adalah $\frac{4|N|^2 s^2}{l(s^2-b^2)^2}[1-(-1)^n cos(bl)]dp$ (7.112) di mana $s \equiv n\pi l^{-1}$ dan $b \equiv p\hbar^{-1}$. Konstanta N harus dipilih sehingga integral (7.112)…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.42

Inti soal. Tentukan: (a) $\int_{-1}^{1} \delta\,(x)dx$; (b) $\int_{-\infty}^{\infty} \delta\,(x)dx$; (c) $\int_{-1}^{2} \delta\,(x)dx$; (d) $\int_{1}^{2} f\,(x)\delta(x-3)dx$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n\,\psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n\,\psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Hasilnya: (a) 1; (b) 1; (c) 1; (d) 0 karena titik dukung $x = 3$ berada di luar selang integrasi $[1,2]$.

Pembahasan 7.43

Inti soal. Tunjukkan bahwa $\int_{-\infty}^{\infty} |\delta(x-a)|^2\,dx = \infty$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n\,\psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n\,\psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.44

Inti soal. Berapakah nilai $\int_0^\infty f\,(x)\delta(x)dx$?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n\,\psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n\,\psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m\big|\hat{A}\big|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 7.45

Inti soal. Fungsi-fungsi pada Gambar 7.5 menghampiri fungsi delta Dirac. Gambarlah grafik fungsi-fungsi bersesuaian yang menghampiri fungsi langkah Heaviside dengan ketelitian yang semakin meningkat.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.46

Inti soal. Mekanika kuantum mempostulatkan bahwa keadaan sekarang suatu sistem yang tidak terganggu menentukan keadaan masa depannya. Tinjau kasus khusus sistem dengan Hamiltonian tak bergantung waktu $\hat{H}$. Misalkan diketahui bahwa pada waktu t_0 fungsi keadaannya adalah $\Psi(x, t_0)$. Turunkan Pers. (7.101) dengan menyubstitusikan penguraian (7.66), dengan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.47

Inti soal. Untuk keadaan kotak partikel bergantung waktu yang pada $t = 0$ mempunyai $\Psi = 2^{-1/2}\psi_1 + 2^{-1/2}\psi_2$ dalam contoh setelah Pers. (7.101): (a) hitung periode *T* untuk elektron dalam kotak sepanjang 2,00 Å; (b) verifikasilah (7.102) untuk $|\Psi|^2$; (c) gunakan lembar kerja elektronik atau program seperti Mathcad untuk memplot $l|\Psi|^2$ dalam…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 7.48

Inti soal. Tinjau keadaan kotak partikel bergantung waktu yang pada $t = 0$ diberikan oleh $\Psi = 2^{-1/2}\psi_1 + 2^{-1/2}\psi_n$, dengan $n \neq 1$. (a) Tentukan persamaan yang bersesuaian dengan (7.102) dan (7.103) untuk $|\Psi|^2$ dan $l|\Psi|^2$. (b) Buat animasi $|\Psi|^2$ ketika waktu berubah untuk $n = 3, n = 4,$ dan $n = 5$. Untuk nilai mana di antara n =…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 7.49

Inti soal. Untuk matriks

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & -3 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 4 & 4 \end{pmatrix},$$

tentukan (a) AB; (b) BA; (c) $A + B$; (d) $3A$; (e) $A - 4B$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. $AB = \begin{pmatrix} 6 & 2 \\ -12 & -12 \end{pmatrix}$, $BA = \begin{pmatrix} 2 & 4 \\ 8 & -8 \end{pmatrix}$, $A + B = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$, $3A = \begin{pmatrix} 6 & 3 \\ 0 & -9 \end{pmatrix}$, dan $A - 4B = \begin{pmatrix} -2 & 5 \\ -16 & -19 \end{pmatrix}$.

Pembahasan 7.50

Inti soal. Hitung hasil kali matriks CD dan DC, dengan

$$C = \begin{pmatrix} 5 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, D = \begin{pmatrix} i & 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas.

Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 7.51

Inti soal. Tentukan representasi matriks operator identitas $\hat{1}$ dalam suatu basis lengkap ortonormal.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Dalam basis ortonormal, $I_{mn} = \langle f_m|\hat{1}|f_n\rangle = \delta_{mn}$; representasinya adalah matriks identitas.

Pembahasan 7.52

Inti soal. Jika $\hat{P} = c\hat{S}$, dengan c suatu konstanta, tunjukkan bahwa $P_{jk} = cS_{jk}$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.53

Inti soal. Jika $\{f_i\}$ adalah basis lengkap ortonormal sedemikian rupa sehingga $\langle f_m|\hat{A}|f_n\rangle = a_m\delta_{mn}$ untuk semua m dan n, yaitu representasi matriks $\hat{A}$ diagonal, buktikan bahwa fungsi-fungsi $\{f_i\}$ merupakan fungsi eigen $\hat{A}$ dan a_i merupakan nilai eigen $\hat{A}$. Petunjuk: uraikan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.54

Inti soal. Jika $\hat{A}$ adalah operator linear, $\{f_i\}$ adalah basis lengkap ortonormal, dan u adalah fungsi sembarang, tunjukkan bahwa

$$\hat{A}u = \sum_j \left(\sum_i \langle f_j | \hat{A} | f_i \rangle \langle f_i \vee u \rangle \right) f_j.$$

Petunjuk: uraikan u dalam himpunan $\{f_i\}$, terapkan $\hat{A}$ pada penguraian ini,…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m | \hat{A} | n \rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.55

Inti soal. Tuliskan bagian $l = 2$ dari representasi matriks $\hat{L}_z$ dalam basis $\{Y_l^m\}$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m | \hat{A} | n \rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan

atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.56

Inti soal. Hitung ketidakpastian ΔL_z untuk keadaan stasioner atom hidrogen berikut: (a) $2p_z$; (b) $2p_x$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 7.57

Inti soal. Untuk sistem pada Soal 7.36: (a) gunakan ortonormalitas [Pers. (2.27)] untuk memverifikasi bahwa Ψ ternormalisasi; (b) tentukan $\langle E\rangle$ pada waktu t; (c) tentukan $\langle x\rangle$ pada waktu t, kemudian tentukan nilai maksimum dan minimum $\langle x\rangle$ sebagai fungsi t.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika

melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.58

Inti soal. Tinjau operator $\hat{A}$ yang memuat waktu sebagai parameter. Kita tertarik pada perubahan nilai rata-rata sifat A terhadap waktu, dan mempunyai

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\int \Psi \quad \hat{A}\Psi d\tau.$$

Integral tentu pada ruas kanan persamaan ini merupakan fungsi parameter t. Secara umum, operasi matematika yang sah adalah menghitung…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar bilangan kompleks dan bentuk polar. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 7.59

Inti soal. Gunakan (7.113) dan (5.8) untuk menunjukkan bahwa $\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{1}{m}\langle p_x\rangle = \frac{1}{m}\int \Psi \quad \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial x} d\tau$ (7.114) Dari (7.114) diperoleh

$$\frac{d^2\langle x\rangle}{dt^2} = \frac{1}{m}\frac{d\langle p_x\rangle}{dt}.$$

Gunakan (7.113), (5.9), dan (4.24) untuk menunjukkan bahwa…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.60

Inti soal. Buktikan prinsip ketidakpastian (5.12) bagi dua operator Hermitian sembarang $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ sebagai berikut. (a) Definisikan fungsi u sebagai $u \equiv f - cg$, dengan $c \equiv \langle g|f\rangle/\langle g|g\rangle$, sedangkan f dan g adalah dua fungsi terintegralkan kuadrat sembarang. Tinjau integral $\langle u \vee u\rangle$. Karena u^{*}u…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.61

Inti soal. Tulislah program komputer yang menggunakan penguraian (7.37) untuk menghitung fungsi (7.35) pada nilai $x = 0{,}0{,}1l, 0{,}2l, \dots, l$. Program harus melakukan perhitungan dengan mengambil 5, 10, 15, dan 20 suku dalam penguraian.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 7.62

Inti soal. Dalam menentukan nilai eigen dengan menyelesaikan persamaan diferensial, kuantisasi hanya terjadi ketika kita menerapkan syarat bahwa fungsi eigen harus berperilaku baik. Operator tangga digunakan dalam Bagian 5.4 untuk menentukan nilai eigen $\hat{M}^2$ dan $\hat{M}_z$, serta dalam Soal 5.36 untuk menentukan nilai eigen energi osilator harmonik. Di bagian…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti postulat pengukuran, operator Hermitian, ekspansi basis lengkap, evolusi waktu, dan representasi matriks: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 7.63

Inti soal. Tanpa melihat teks, buktikan bahwa (a) nilai eigen operator Hermitian bersifat real; (b) fungsi-fungsi eigen operator Hermitian yang berkaitan dengan nilai eigen berbeda saling ortogonal.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 7.64

Inti soal. Benar atau salah? (a) Fungsi keadaan selalu sama dengan fungsi waktu dikalikan fungsi koordinat. (b) Dalam mekanika klasik maupun mekanika kuantum, pengetahuan tentang keadaan sekarang suatu sistem terisolasi memungkinkan keadaan masa depannya dihitung. (c) Fungsi keadaan selalu merupakan fungsi eigen Hamiltonian. (d) Setiap kombinasi linear fungsi eigen Hamiltonian…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $\Psi = \sum_n c_n \psi_n$, $P(a_n) = |c_n|^2$, $\Psi(t) = \sum_n c_n \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$, serta $A_{mn} = \langle m|\hat{A}|n\rangle$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas,

normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Setiap pernyataan diuji satu per satu: pernyataan yang mengikuti definisi dan domain operator dinyatakan benar, sedangkan yang melanggar syarat batas, normalisasi, komutasi, atau spektrum nilai eigen dinyatakan salah. Alasan fisiknya harus dicantumkan, bukan hanya label benar/salah.

BAB 8 — METODE VARIASI

Soal

Bagian	8.1	8.2	8.3	8.4	8.5	8.6	Umum
Soal	8.1–8.16	8.17–8.18	8.19–8.22	8.23–8.28	8.29–8.40	8.41–8.56	8.57–8.66

8.1 Perhitungan pada atom Li dengan tiga fungsi variasi yang berperilaku baik memberikan nilai integral variasional berikut: -203,2 eV, -192,0 eV, dan -201,2 eV. Karena itu, energi keadaan dasar sejati atom Li harus lebih kecil atau sama dengan, atau lebih besar atau sama dengan, nilai berapa eV? Pilih salah satu tanda ketaksamaan yang benar dan gantilah tanda tanya dengan sebuah angka.

8.2 (a) Tinjau sistem satu partikel satu dimensi dengan energi potensial $V = V_0$ untuk $1/4\ l \le x \le 3/4\ l$, $V = 0$ untuk $0 \le x \le 1/4\ l$ dan $3/4\ l \le x \le l$, serta $V = \infty$ di tempat lain. Gambarkan V terhadap x. Gunakan fungsi variasi coba $f_1 = (2/l)^{1/2} \sin(\pi x/l)$ untuk $0 \le x \le l$ guna memperkirakan energi keadaan dasar untuk $V_0 = \hbar^2/(ml^2)$, lalu bandingkan dengan energi keadaan dasar sejati $E = 5{,}750345\ \hbar^2/(ml^2)$. Untuk menghemat waktu dalam mengevaluasi integral, perhatikan bahwa $\langle f_1|H|f_1\rangle = \langle f_1|T|f_1\rangle + \langle f_1|V|f_1\rangle$, dan jelaskan mengapa $\langle f_1|T|f_1\rangle$ sama dengan energi keadaan dasar partikel dalam kotak, $h^2/(8ml^2)$. (b) Untuk sistem ini, gunakan fungsi variasi $f_2 = x(l - x)$. Untuk menghemat waktu, perhatikan bahwa $\langle f_2|T|f_2\rangle$ diberikan oleh Pers. (8.12). Mengapa demikian?

8.3 Verifikasilah hasil untuk $\langle f|H|f\rangle$ pada contoh terakhir dalam Bagian 8.1.

8.4 Jika fungsi variasi ternormalisasi $f = (3/l^3)^{1/2} x$ untuk $0 \le x \le l$ diterapkan pada masalah partikel dalam kotak satu dimensi, diperoleh bahwa integral variasional sama dengan nol, yaitu lebih kecil daripada energi keadaan dasar sejati. Apa yang salah?

8.5 Untuk partikel dalam kotak tiga dimensi dengan sisi a, b, dan c, tuliskan fungsi variasi yang merupakan perluasan tiga dimensi dari fungsi $f = x(l - x)$ yang digunakan pada Bagian 8.1 untuk partikel dalam kotak satu dimensi. Gunakan integral pada Pers. (8.12) dan (8.13) untuk mengevaluasi integral variasional kasus tiga dimensi. Tentukan galat persen pada energi keadaan dasar.

8.6 (a) Sebuah partikel dalam kotak bola berjari-jari b memiliki $V = 0$ untuk $0 \le r \le b$ dan $V = \infty$ untuk $r > b$. Gunakan fungsi coba $f = b - r$ untuk $0 \le r \le b$ dan $f = 0$ untuk $r > b$ untuk memperkirakan energi keadaan dasar dan

bandingkan dengan nilai sejati $h^2/(8mb^2)$ (Soal 6.2). (b) Rancang fungsi variasi sederhana lain yang memenuhi syarat batas masalah ini dan hitung galat persen energi keadaan dasar yang diberikan oleh fungsi tersebut.

8.7 Penerapan fungsi variasi f = e^(-cx²), dengan c sebagai parameter variasi, pada suatu masalah dengan V = a f(x), di mana a adalah konstanta positif dan f(x) fungsi tertentu dari x, menghasilkan integral variasional $W = c\hbar^2/(2m) + 15a/(64c^3)$. Tentukan nilai minimum W, dalam a dan konstanta fisika, untuk fungsi variasi ini.

8.8 Tinjau partikel yang bergerak satu dimensi dengan $V(x) = \infty$ untuk $x < 0$ dan $V(x) = bx$ untuk $x \geq 0$, dengan b konstanta positif. Jika b = mg, ini adalah partikel yang memantul pada permukaan tak tertembus dalam medan gravitasi. (a) Apa yang harus berlaku bagi ψ pada x = 0? (b) Terapkan fungsi variasi f = x e^(-cx) untuk $x \geq 0$ dan f = 0 untuk $x < 0$. Tentukan nilai optimum parameter variasi c dan bandingkan hasil energinya dengan nilai energi keadaan dasar akurat $1{,}855757081(\hbar^{2/3}\, b^{2/3}/m^{1/3})$. Lihat juga Soal 4.34. Secara mengagumkan, keadaan terkuantisasi neutron dalam medan gravitasi Bumi telah diamati; lihat rujukan pada arxiv.org/abs/hep-ph/0602093.

8.9 Tinjau fungsi variasi $f_1 = af + bg$ dan $f_2 = f + cg$, dengan f dan g pada f_1 adalah fungsi yang sama seperti f dan g pada f_2, sedangkan a, b, dan c adalah parameter yang nilainya dipilih untuk meminimumkan integral variasional W. Jelaskan mengapa f_1 dan f_2 memberikan hasil W yang sama ketika diterapkan pada masalah yang sama.

8.10 Terapkan fungsi variasi f = e^(-cr) pada atom hidrogen. Pilih parameter real c untuk meminimumkan integral variasional, lalu hitung galat persen energi keadaan dasarnya.

8.11 Osilator kuartik satu dimensi memiliki $V = cx^4$, dengan c sebuah konstanta. Rancang fungsi variasi yang mengandung parameter untuk masalah ini, tentukan nilai optimum parameter tersebut untuk meminimumkan integral variasional, dan perkirakan energi keadaan dasar dalam c. Bandingkan dengan energi keadaan dasar metode Numerov yang diperoleh pada Soal 4.32.

8.12 Untuk partikel dalam kotak panjang l, gunakan fungsi variasi $f = x^k(l - x)^k$ untuk $0 \leq x \leq l$. Diperlukan integral $\int_0^l x^s(l - x)^t\, dx = l^{(s+t+1)}\, \Gamma(s+1)\Gamma(t+1)/\Gamma(s+t+2)$, dengan fungsi gamma memenuhi $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$. Definisi $\Gamma(z)$ tidak perlu diperhatikan karena fungsi gamma akhirnya saling menghilangkan. (a) Tunjukkan bahwa integral variasional sama dengan $(\hbar^2/ml^2)(4k^2 + k)/(2k - 1)$. (b) Tentukan nilai optimum k dan hitung galat persen energi keadaan dasar untuk k tersebut.

8.13 Tinjau sistem satu partikel satu dimensi dengan $V = 0$ untuk $0 \le x \le l$ dan $V = V_0$ di tempat lain (Gambar 2.5). (a) Gunakan fungsi variasi $f = \sin[\pi(x+c)/(l+2c)]$ untuk $-c \le x \le l+c$ dan $f = 0$ di tempat lain, dengan c parameter variasi positif. Gambarkan f dan V pada grafik yang sama. Pilih c untuk meminimumkan integral variasional W dan tentukan ekspresi W. Petunjuk: gunakan substitusi sederhana agar integral berbentuk seperti integral pada Lampiran. (b) Tentukan W untuk $V_0 = 20\hbar^2/(ml^2)$ dan bandingkan dengan energi keadaan dasar sejati $2{,}814\hbar^2/(ml^2)$ (Soal 4.31c).

8.14 Buktikan bahwa untuk sistem dengan keadaan dasar tak terdegenerasi, $\int f^*Hf\, d\tau > E_1$ jika f adalah fungsi ternormalisasi, berperilaku baik, dan tidak sama dengan fungsi gelombang keadaan dasar sejati. Petunjuk: misalkan b konstanta positif sehingga $E_1 + b < E_2$. Ubah Pers. (8.4) menjadi ketaksamaan dengan mengganti semua E_k kecuali E_1 dengan $E_1 + b$. Notasi E_1, E_2, dan seterusnya sama seperti pada Bagian 8.2.

8.15 Sebuah makalah tahun 1971 menerapkan fungsi variasi ternormalisasi $N \exp(-br^2/a_0^2 - cr/a_0)$ pada atom hidrogen dan menyatakan bahwa minimisasi integral variasional terhadap parameter b dan c memberikan energi 0,7% di atas energi keadaan dasar sejati untuk massa inti tak hingga. Tanpa melakukan perhitungan apa pun, nyatakan mengapa hasil ini pasti keliru.

8.16 (a) Gunakan fungsi segitiga (7.35) sebagai fungsi variasi untuk keadaan dasar partikel dalam kotak. Perhatikan bahwa f''(x) tak hingga pada $x = l/2$ karena diskontinuitas f'(x) di titik tersebut. Karena itu, dalam mengevaluasi $\int f^*Hf\, dx$ muncul kesulitan pada integral ff''. Salah satu cara mengatasinya adalah lebih dahulu menunjukkan bahwa untuk setiap fungsi yang memenuhi syarat batas berlaku

$$\int_0^l \varphi\varphi''\, dx = -\int_0^l (\varphi')^2 dx = -\int_0^{l/2} (\varphi')^2 dx - \int_{l/2}^l (\varphi')^2 dx \tag{8.96}$$

Buktikan Pers. (8.96), lalu hitung galat persen energi keadaan dasar dengan fungsi segitiga ini. Tidak ada parameter dalam fungsi coba ini. Jika ingin mencoba cara alternatif, gunakan fakta bahwa f'(x) melibatkan fungsi tangga Heaviside sehingga f''(x) melibatkan delta Dirac; gunakan sifat delta Dirac untuk mengevaluasi $\int_0^l ff''\, dx$ dan tentukan galat persen. (b) Fungsi variasi f pada contoh pertama Bagian 8.1 memiliki diskontinuitas pada f' di $x = 0$ dan $x = l$, sehingga secara ketat salah satu prosedur pada bagian (a) seharusnya dipakai untuk mengevaluasi $\langle f|H|f\rangle$. Lakukan hal itu dan tunjukkan bahwa nilai $\langle f|H|f\rangle$ yang sama diperoleh.

8.17 (a) Untuk keadaan dasar atom hidrogen, gunakan fungsi coba Gaussian $f = \exp(-cr^2/a_0^2)$. Tentukan nilai optimum c dan galat persen energinya. Fungsi variasi Gaussian banyak digunakan dalam mekanika kuantum molekul; lihat Bagian 15.4. (b) Kalikan fungsi pada bagian (a) dengan harmonik

bola Y_2^0, lalu minimumkan integral variasional. Ini memberikan batas atas bagi energi keadaan atom hidrogen yang mana?

8.18 Untuk sistem pada Soal 8.2, jelaskan mengapa fungsi variasi $f = (2/l)^{1/2} \sin(2\pi x/l)$ memberikan batas atas bagi energi E_2 dari keadaan tereksitasi pertama. Petunjuk: dengan titik asal di pusat kotak, V adalah fungsi genap. Gunakan f ini untuk mengevaluasi integral variasi bagi $V_0 = \hbar^2/(ml^2)$ dan bandingkan dengan nilai sejati $E_2 = 20{,}23604\hbar^2/(ml^2)$.

8.19 Evaluasilah determinan-determinan berikut:

(a)

$$\begin{vmatrix} 3 & 1 & i \\ -2 & 4 & 0 \\ 5 & 7 & 1/2 \end{vmatrix}$$

(b)

$$\begin{vmatrix} 2 & 5 & 1 & 3 \\ 8 & 0 & 4 & -1 \\ 6 & 6 & 6 & 1 \\ 5 & -2 & -2 & 2 \end{vmatrix}$$

8.20 (a) Buktikan bahwa nilai determinan yang semua elemennya di bawah diagonal utama bernilai nol sama dengan hasil kali elemen-elemen diagonalnya. Determinan semacam itu disebut segitiga atas. (b) Berapa banyak suku dalam ekspansi determinan orde n?

8.21 Verifikasilah persamaan determinan blok diagonal (8.34).

8.22 (a) Tinjau suatu permutasi dari bilangan bulat 1, 2, 3, ..., n. Permutasi disebut genap jika diperlukan jumlah pertukaran pasangan bilangan yang genap untuk mengembalikannya ke urutan alami 1, 2, 3, ..., n. Permutasi disebut ganjil jika diperlukan jumlah pertukaran pasangan yang ganjil. Misalnya, permutasi 3124 adalah genap karena dua pertukaran mengembalikannya ke urutan alami: 3124 -> 1324 -> 1234. Tuliskan dan klasifikasikan semua permutasi 123 sebagai genap atau ganjil. (b) Verifikasilah bahwa definisi determinan orde tiga pada Pers. (8.24) ekuivalen dengan penjumlahan bertanda atas semua permutasi ijk dari 123, yaitu suku-suku $a_{1i}a_{2j}a_{3k}$ diberi tanda plus atau minus bergantung pada apakah permutasinya genap atau ganjil. (c) Bagaimana determinan orde n didefinisikan dengan jenis definisi seperti ini?

8.23 Gunakan eliminasi Gaussian dengan koefisien terpisah untuk menyelesaikan sistem persamaan berikut:

$$2x_1 - x_2 + 4x_3 + 2x_4 = 16$$
$$3x_1 - x_3 + 4x_4 = -5$$
$$2x_1 + x_2 + x_3 - 2x_4 = 8$$
$$-4x_1 + 6x_2 + 2x_3 + x_4 = 3$$

8.24 Ketika eliminasi Gaussian diprogram pada komputer atau dilakukan dengan kalkulator elektronik, pertukaran persamaan sebaiknya digunakan untuk menghindari pembagian oleh koefisien yang nilai mutlaknya jauh lebih kecil daripada koefisien lain dalam persamaan. Jelaskan mengapa pembagian oleh koefisien yang sangat kecil dapat menghasilkan galat besar pada hasil.

8.25 Eliminasi Gaussian dapat digunakan untuk mengevaluasi determinan secara efisien sebagai berikut. Bagi setiap elemen baris pertama determinan (8.20) dengan a_{11} dan letakkan faktor a_{11} di depan determinan. Kemudian kurangkan kelipatan yang sesuai dari elemen baris pertama pada baris kedua, ketiga, ..., ke-n agar a_{21}, a_{31}, ..., a_{n1} menjadi nol. Selanjutnya bagi elemen baris kedua dengan nilai a_{22} saat itu dan letakkan faktor a_{22} di depan determinan, dan seterusnya. Akhirnya diperoleh determinan yang semua elemennya di bawah diagonal utama nol. Dari Soal 8.20, determinan ini sama dengan hasil kali elemen diagonalnya. Gunakan prosedur ini untuk mengevaluasi determinan pada Soal 8.19b.

8.26 Selesaikan setiap sistem persamaan serentak berikut, dengan $i = \sqrt{(-1)}$.

(a)

$$8x - 15y = 0$$
$$-3x + 4y = 0$$

(b)

$$-4x + 3iy = 0$$
$$5ix + (15/4)y = 0$$

8.27 Selesaikan setiap sistem persamaan serentak berikut dengan eliminasi Gauss–Jordan menggunakan koefisien terpisah atau dengan metode lain.

(a)

$$x + 2y + 3z = 0$$
$$3x + y + 2z = 0$$
$$2x + 3y + z = 0$$

(b)

$$x + 2y + 3z = 0$$
$$x - y + z = 0$$
$$7x - y + 11z = 0$$

8.28 Tulislah program komputer yang menggunakan eliminasi Gaussian untuk menyelesaikan sistem n persamaan linear simultan tak homogen dengan n peubah, dengan $n \leq 10$. Ujilah program tersebut pada beberapa contoh.

8.29 Tinjau fungsi variasi linear $f = \Sigma_i c_i f_i$. Nyatakan benar atau salah untuk setiap pernyataan berikut tentang fungsi basis f_i: (a) setiap f_i harus ternormalisasi; (b) setiap f_i harus berperilaku baik; (c) himpunan $\{f_i\}$ harus saling ortogonal; (d) setiap f_i harus merupakan fungsi eigen operator Hamiltonian sistem.

8.30 Ketika fungsi variasi $f = c_1 f_1 + c_2 f_2$ diterapkan pada suatu masalah mekanika kuantum, diperoleh $\langle f_1|H|f_1\rangle = 4a$, $\langle f_1|H|f_2\rangle = a$, $\langle f_2|H|f_2\rangle = 6a$, $\langle f_1|f_1\rangle = 2b$, $\langle f_2|f_2\rangle = 3b$, dan $\langle f_1|f_2\rangle = b$, dengan a dan b konstanta positif yang diketahui. Gunakan f untuk menentukan, dalam a dan b, batas atas bagi dua energi terendah, dan untuk setiap W tentukan c_1 dan c_2 bagi f ternormalisasi.

8.31 Selesaikan persamaan sekuler orde dua (8.56) untuk kasus khusus $H_{11} = H_{22}$ dan $S_{11} = S_{22}$. Ingat bahwa f_1 dan f_2 adalah fungsi real. Kemudian tentukan c_1/c_2 untuk masing-masing akar W_1 dan W_2.

8.32 Untuk sistem pada Soal 8.2 dengan $V_0 = \hbar^2/(ml^2)$, yaitu partikel dalam kotak dengan tonjolan persegi panjang di tengah, tinjau fungsi variasi linear $f = c_1 f_1 + c_2 f_2 = c_1(2/l)^{1/2} \sin(\pi x/l) + c_2(2/l)^{1/2} \sin(3\pi x/l)$ untuk $0 \leq x \leq l$. (a) Jelaskan mengapa fungsi variasi ini memberi batas atas bagi energi E_1 dan E_3. (b) Jelaskan mengapa f_1 dan f_2 ortonormal. (c) Perhatikan bahwa $\langle f_i|H|f_j\rangle = \langle f_i|T|f_j\rangle + \langle f_i|V|f_j\rangle$. Jelaskan mengapa $Tf_j = e_j f_j$ untuk $0 \leq x \leq l$, dan berikan nilai eigen T, yaitu e_1 dan e_2. Tunjukkan bahwa $\langle f_i|T|f_j\rangle = \delta_{ij} e_j$. (d) Dengan bantuan hasil (b) dan (c), susun dan selesaikan persamaan sekuler. Kemudian tentukan fungsi variasi f_1 dan f_2 yang bersesuaian dengan W_1 dan W_2. Bandingkan W_1 dan W_2 dengan energi sejati $E_1 = 5{,}750345\hbar^2/(ml^2)$ dan $E_3 = 44{,}808373\hbar^2/(ml^2)$. Bandingkan W_1 dengan $W = 5{,}753112\hbar^2/(ml^2)$ yang diperoleh pada Soal 8.2 dengan $f = f_1$. (e) Jika ingin memperbaiki hasil (d) dengan fungsi variasi linear tiga suku, pilihan logis apa untuk f_1, f_2, dan f_3?

8.33 Terapkan fungsi variasi linear $f = c_1 x^2(l - x) + c_2 x(l - x)^2$, $0 \leq x \leq l$, pada partikel dalam kotak satu dimensi. Lihat Soal 8.31. Hitung galat persen untuk energi n = 1 dan n = 2. Sketsalah $x^2(l - x)$, $x(l - x)^2$, dan dua fungsi gelombang aproksimasi yang diperoleh. Untuk membantu sketsa, tentukan simpul serta maksimum dan minimum setiap fungsi.

8.34 Tunjukkan bahwa jika perubahan variabel x' = x - l/2, yang bersesuaian dengan memindahkan titik asal ke pusat kotak, diterapkan pada fungsi-fungsi (8.62), maka f_1 dan f_2 adalah fungsi genap terhadap x', sedangkan f_3 dan f_4 adalah fungsi ganjil.

8.35 Verifikasilah nilai H_{12}, H_{22}, S_{12}, dan S_{22} yang diberikan pada contoh dalam Bagian 8.5.

8.36 Turunkan akar-akar (8.72) dari persamaan sekuler fungsi ganjil pada contoh Bagian 8.5.

8.37 Gunakan lembar kerja atau program seperti Mathcad untuk memplot deviasi persen fungsi variasi (8.74) dari fungsi gelombang keadaan dasar sejati terhadap x/l.

8.38 Turunkan fungsi f_2 dan f_3 dalam Pers. (8.75) pada contoh Bagian 8.5.

8.39 Misalkan fungsi variasi pada (8.40) bersifat kompleks. Maka $c_j = a_j + ib_j$, dengan a_j dan b_j bilangan real. Ada 2n parameter yang divariasikan, yaitu semua a_j dan b_j. (a) Gunakan aturan rantai untuk menunjukkan bahwa syarat minimisasi $\partial W/\partial a_i = 0$ dan $\partial W/\partial b_i = 0$ ekuivalen dengan syarat $\partial W/\partial c_i = 0$ dan $\partial W/\partial c_i^* = 0$. (b) Tunjukkan bahwa minimisasi W menghasilkan Pers. (8.53) dan konjugat kompleksnya, yang dapat diabaikan. Karena itu Pers. (8.53) dan (8.58) berlaku untuk fungsi variasi kompleks.

8.40 Kita ingin membuktikan bahwa fungsi gelombang aproksimasi yang diperoleh dalam metode variasi linear bersifat ortogonal dan energi aproksimasi yang diperoleh merupakan batas atas bagi energi n keadaan terendah. Misalkan fungsi aproksimasi f_a memiliki nilai W_a untuk integral variasional dan koefisien c_k^(a) pada (8.40). Pers. (8.53) dapat ditulis ulang sebagai

$$\Sigma_k[\{\langle f_i|\hat{H}|f_k\rangle - \langle f_i|f_k\rangle W_a\}c_k^{(a)}] = 0, \quad i = 1, \ldots, n \tag{8.97}$$

(a) Tunjukkan bahwa $\langle f_i|H - W_a|f_a\rangle = 0$ dengan menunjukkan bahwa integral ini sama dengan ruas kiri persamaan tersebut. (b) Gunakan hasil (a) untuk menunjukkan $\langle f_\beta|H - W_a|f_a\rangle = 0$ dan $\langle f_a|H - W_\beta|f_\beta\rangle^* = 0$ untuk semua a dan b. (c) Samakan dua integral pada (b), gunakan sifat Hermitian H, dan tunjukkan bahwa $\langle f_\beta|f_a\rangle(W_\beta - W_a) = 0$. Simpulkan bahwa untuk $W_a \neq W_\beta$, f_a dan f_β ortogonal; untuk $W_a = W_\beta$, kombinasi linear ortogonal dapat dibentuk. (d) Misalkan f_1, f_2, ..., f_n adalah fungsi aproksimasi ternormalisasi yang disusun menurut kenaikan nilai integral variasional. Tinjau $g = \Sigma_{a=1}^{m} b_a f_a$, dengan $m \leq n$, dan pilih b_a agar $\langle g|\psi_1\rangle = 0$, $\langle g|\psi_2\rangle = 0$, ..., $\langle g|\psi_{m-1}\rangle = 0$ serta g ternormalisasi. Di sini ψ_1, ψ_2, ... adalah fungsi gelombang sejati energi terendah. (e) Gunakan hasil (b) dan (c) untuk menunjukkan $\langle f_a|H|f_\beta\rangle = 0$ untuk $a \neq b$. (f) Gunakan hasil (e) untuk menunjukkan

$\langle g|H|g\rangle = \Sigma_{a=1}^{m} |b_a|^2 W_a$. Jelaskan mengapa $\langle g|H|g\rangle \geq E_m$. (g) Gunakan ortonormalitas f untuk menunjukkan $\Sigma_{a=1}^{m} |b_a|^2 = 1$. (h) Gunakan hasil (f) dan (g) untuk menunjukkan $\langle g|H|g\rangle \leq W_m$. (i) Gabungkan (h) dan (d) untuk memperoleh hasil yang diinginkan: $W_m \geq E_m$ untuk m = 1, 2, ..., n.

8.41 Tentukan A*, A^T, dan A† untuk matriks A berikut:

$$A = \begin{bmatrix} 7 & 3 & 0 \\ 2-i & 2i & i \\ 1+i & 4 & 2 \end{bmatrix}$$

8.42 (a) Matriks manakah yang real? (b) Matriks manakah yang simetris? (c) Matriks manakah yang Hermitian?

$$B = \begin{bmatrix} i & 2+i \\ 2-i & 3 \end{bmatrix} \qquad C = \begin{bmatrix} i & 2+i \\ 2+i & -1 \end{bmatrix}$$

$$D = \begin{bmatrix} 3 & 2-i \\ 2+i & -1 \end{bmatrix} \qquad F = \begin{bmatrix} 5 & 3 \\ 3 & -1 \end{bmatrix}$$

8.43 Verifikasilah persamaan ortonormalitas (8.93) untuk vektor-vektor kolom dari matriks uniter.

8.44 Jika fungsi v dan w ternormalisasi dan ortogonal, serta v dan w diekspansikan dalam himpunan lengkap ortonormal $\{f_i\}$ sebagai $v = \Sigma_i v_i f_i$ dan $w = \Sigma_i w_i f_i$, dengan koefisien ekspansi v_i dan w_i berupa konstanta, tunjukkan bahwa vektor kolom v dan w yang terdiri atas koefisien v_1, v_2, ... dan w_1, w_2, ... ternormalisasi dan ortogonal sebagaimana didefinisikan oleh (8.83) dan (8.84).

8.45 Tanpa menggunakan komputer, tentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi dari setiap matriks berikut. Mulailah dengan menyelesaikan persamaan karakteristik. Periksa bahwa jumlah nilai eigen sama dengan trace matriks.

$$A = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \qquad B = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 9 & 2 \end{bmatrix} \qquad C = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}$$

8.46 Jika A adalah matriks diagonal persegi orde tiga dengan elemen diagonal tak sama a_{11}, a_{22}, dan a_{33}, tentukan vektor-vektor eigen ternormalisasi A.

8.47 (a) Tanpa menggunakan komputer, tentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi dari matriks A = [[2, 2], [2, -1]]. (b) Apakah A real dan simetris? Apakah A Hermitian? (c) Apakah matriks vektor eigen C ortogonal? Apakah C uniter? (d) Tuliskan C^{-1} tanpa melakukan perhitungan. (e) Verifikasilah bahwa $C^{-1}AC$ sama dengan matriks diagonal nilai eigen. (f) Verifikasilah Pers. (8.80) untuk setiap vektor eigen.

A = [2 2]
[2 −1]

8.48 Untuk A = [[2, -2i], [2i, 2]], tentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi, lalu jawablah pertanyaan pada Soal 8.47(b)-(e).

A = [2 −2i]
[2i 2]

8.49 Tentukan vektor eigen c^(2) untuk nilai eigen λ_2 pada contoh dalam Bagian 8.6.

8.50 Tentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi dari matriks A = [[-1, 0, -2], [0, 5, 0], [-2, 4, 2]]. Anda dapat menghindari penyelesaian persamaan kubik jika mengembangkan determinan karakteristik dengan cara paling sederhana dan tidak mengalikan penuh polinom karakteristiknya.

A = [−1 0 −2]
[0 5 0]
[−2 4 2]

8.51 Cara efisien untuk menghitung invers matriks persegi A orde n adalah sebagai berikut. (a) Letakkan matriks satuan orde n, I, di sebelah kanan matriks A untuk membentuk susunan n baris dan 2n kolom, ditulis (A|I). (b) Lakukan eliminasi Gauss-Jordan pada baris-baris (A|I) untuk mereduksi bagian A menjadi matriks satuan. Pada akhir proses, susunan berbentuk (I|B). Matriks B adalah A^{-1}. Jika A^{-1} tidak ada, bagian A tidak mungkin direduksi menjadi I. Gunakan prosedur ini untuk menentukan invers matriks pada Soal 8.50.

8.52 Gunakan sistem aljabar komputer untuk menentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi dari matriks persegi B orde enam dengan elemen $b_{jk} = (j^2 + k^2)/(j + k)$.

8.53 Excel dapat menentukan nilai eigen dan vektor eigen matriks real simetris sebagai berikut. Jika nilai eigen matriks real simetris H orde n disusun menaik $\lambda_1 \le \lambda_2 \le ... \le \lambda_n$, perluasan teorema Rayleigh-Ritz menyatakan $\lambda_1 = \min(x^T Hx/x^T x)$, dengan x vektor kolom tak nol orde n yang elemennya divariasikan untuk meminimumkan kuantitas tersebut; $\lambda_2 = \min(y^T Hy/y^T y)$ jika $y^T c_1 = 0$, dengan c_1 vektor eigen untuk λ_1; $\lambda_3 = \min(z^T Hz/z^T z)$ jika $z^T c_1 = 0$ dan $z^T c_2 = 0$; dan seterusnya. Gunakan teorema ini agar Excel menemukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi matriks pada Soal 8.47. Petunjuk: beri nama pada berbagai matriks di Excel; untuk mengalikan A dan B, pilih rentang sel ukuran sesuai, ketik =MMULT(A,B), lalu tekan Control, Shift, dan Enter bersamaan; transpose

C diperoleh dengan =TRANSPOSE(C). Untuk λ_1, mulai dengan tebakan x dan gunakan Solver untuk memvariasikan x agar $x^T Hx$ minimum dengan kendala $x^T x = 1$. Setelah nilai eigen dan vektor eigen pertama diperoleh, tambahkan kendala ortogonalitas yang relevan ke Solver dan temukan nilai serta vektor eigen berikutnya.

8.54 Untuk matriks orde 20 yang nilai eigennya 1, 2, 3, ..., 20, persamaan karakteristik dapat ditulis $\Pi_{m=1}^{20}(\lambda - m) = 0$, dengan notasi hasil kali $\Pi_{k=1}^{n} b_k = b_1 b_2 ... b_n$. Gunakan lembar kerja atau sistem aljabar komputer untuk menggrafikkan polinom karakteristik untuk λ dalam rentang 0,9 sampai 20,1. Pilih skala sumbu vertikal agar titik potong kurva dengan sumbu horizontal tampak jelas. Kemudian tambahkan kuantitas $1\times10^{-8}\ \lambda^{19}$ pada polinom karakteristik, grafikkan polinom yang telah diubah, dan perhatikan apa yang terjadi pada akar-akar polinom karakteristik. Jika Anda melihat kurang dari 20 akar pada polinom yang diubah, jelaskan di mana akar-akar yang hilang. Dalam polinom karakteristik asli, koefisien λ^{19} adalah jumlah bilangan bulat 1 sampai 20, yaitu 210; perubahan yang dibuat kurang dari satu bagian dalam 10^{10} pada koefisien λ^{19}, tetapi menyebabkan perubahan besar pada nilai eigen.

8.55 Jika $B = M^{-1}AM$, buktikan bahwa matriks persegi A dan B memiliki nilai eigen yang sama. Nyatakan pula vektor eigen B dalam vektor eigen A. Petunjuk: mulai dari persamaan nilai eigen A, gantikan A dengan ekspresinya dalam B, lalu kalikan persamaan yang diperoleh dengan M^{-1} dari kiri untuk mendapatkan persamaan nilai eigen B.

8.56 Jika $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$ adalah nilai eigen A, tentukan nilai eigen dan vektor eigen A^2.

8.57 Soal ini membahas penyelesaian matriks metode variasi linear ketika fungsi basis tidak ortogonal. (a) Jika $\{f_i\}$ dalam $f = \Sigma_{i=1}^{n} c_i f_i$ bukan himpunan ortonormal, ambil kombinasi linear fungsi $\{f_i\}$ untuk memperoleh himpunan baru $\{g_m\}$ yang ortonormal, dengan $g_m = \Sigma_k a_{km} f_k$ dan $\langle g_j | g_m \rangle = \delta_{jm}$. Substitusikan ekspansi g ke dalam $\langle g_j | g_m \rangle = \delta_{jm}$ dan tunjukkan bahwa persamaan tersebut ekuivalen dengan persamaan matriks $A\dagger SA = I$, dengan I matriks satuan, S matriks overlap berunsur S_{jk}, dan A matriks koefisien a_{km}. (b) Verifikasilah bahwa himpunan persamaan (8.53) dapat ditulis $Hc = WSc$, dengan c vektor kolom koefisien $c_1, c_2, ..., c_n$. Dengan indeks i untuk melabeli nilai dan vektor eigen, tulis Hc^(i) = W_iSc^(i), i = 1, 2, ..., n, dan verifikasilah HC = SCW. (c) Karena $AA^{-1} = I$, tulis HC = SCW sebagai $HAA^{-1}C = SAA^{-1}CW$. Kalikan persamaan ini dengan $A\dagger$ dari kiri. Gunakan hasil (a) untuk menunjukkan diperoleh H' C' = C'W, dengan $C' = A^{-1}C$ dan $H' = A\dagger HA$. Bandingkan dengan (8.87) untuk melihat bahwa H'C' = C'W adalah persamaan nilai eigen bagi matriks H'.

Prosedur matriksnya: hitung H dan S dalam basis nonortogonal; temukan A yang mengubah $\{f_i\}$ menjadi $\{g_i\}$ ortonormal; hitung H' = A†HA; cari nilai eigen W_i dan vektor eigen C' matriks H'; gunakan C = AC' untuk memperoleh koefisien. Nilai W_i dan koefisien ini adalah estimasi energi dan koefisien fungsi variasi yang diinginkan.

8.58 Prosedur ortogonalisasi simetris atau Löwdin sering digunakan untuk mengortogonalkan himpunan basis. Diberikan basis nonortogonal $\{f_i\}$, bentuk fungsi $\{g_m\}$ sebagai kombinasi linear $g_m = \Sigma_k a_{km} f_k$. Agar $\{g_m\}$ ortogonal, matriks A harus memenuhi A†SA = I, dengan S matriks overlap. Jika matriks B memenuhi $B^2 = S$, maka B disebut akar kuadrat S dan ditulis $S^{1/2}$; inversnya ditulis $S^{-1/2}$. (a) Karena S Hermitian, S dapat didiagonalkan oleh matriks uniter U dari vektor eigen ortonormalnya sehingga U†SU = s, dengan s matriks diagonal nilai eigen S. Tunjukkan bahwa S = UsU†. (b) Misalkan s dan $s^{-1/2}$ adalah matriks diagonal yang elemennya s_i dan $1/\sqrt{s_i}$. Tunjukkan bahwa $M = Us^{1/2}U†$ memenuhi M^2 = UsU† = S sehingga $M = S^{1/2}$. (c) Tunjukkan bahwa $N = Us^{-1/2}U†$ memenuhi MN = I, sehingga $N = S^{-1/2}$ dan $S^{-1/2} = Us^{-1/2}U†$. (d) Dalam ortogonalisasi simetris, $A = S^{-1/2} = Us^{-1/2}U†$. Untuk menunjukkan pilihan ini memenuhi A†SA = I, buktikan dahulu (BC)† = C†B† dengan membandingkan elemen (i,j), lalu perluas menjadi (BDE)† = E†D†B†. Selanjutnya tunjukkan $A† = Us^{-1/2}U†$ dan akhirnya A†SA = I. Jadi, untuk memakai ortogonalisasi simetris, tentukan nilai eigen dan vektor eigen ortonormal S, bentuk $s^{-1/2}$, bentuk U, hitung $A = Us^{-1/2}U†$, dan ambil fungsi ortonormal $g_m = \Sigma_k a_{km} f_k$.

8.59 Misalkan $\hat{A}g_n = a_n g_n$. Fungsi eigen g_n diekspansikan dalam himpunan lengkap ortonormal $\{f_i\}$ sebagai $g_n = \Sigma_k c_k\text{^}(n) f_k$. Substitusikan ekspansi ini ke dalam $\hat{A}g_n = a_n g_n$, kalikan dengan f_i*, integrasikan pada seluruh ruang, dan tunjukkan bahwa diperoleh $\Sigma_k(A_{ik} - a_n\delta_{ik})c_k\text{^}(n) = 0$ untuk i = 1, 2, 3, ..., dengan $A_{ik} = \langle f_i|\hat{A}|f_k\rangle$. Himpunan persamaan ini berbentuk sama dengan (8.53) untuk $S_{ik} = \delta_{ik}$. Jadi, sebagaimana nilai W dan koefisien c_k dalam (8.53) dengan $S_{ik} = \delta_{ik}$ dapat ditemukan dari nilai dan vektor eigen matriks H, nilai eigen a_n operator $\hat{A}$ dan koefisien ekspansi $c_k\text{^}(n)$ fungsi eigen g_n dapat ditemukan dari nilai dan vektor eigen matriks A.

8.60 Tinjau potensial sumur ganda dengan $V = \infty$ untuk $x < 0$, $V = 0$ untuk $0 \le x \le l/4$, $V = V_0$ untuk $l/4 < x < 3l/4$, $V = 0$ untuk $3l/4 \le x \le l$, dan $V = \infty$ untuk $x > l$. Gunakan Mathcad atau program aljabar komputer lain untuk menerapkan metode variasi linear dengan mengambil m fungsi gelombang partikel-dalam-kotak terendah sebagai fungsi basis. Gunakan variabel tak berdimensi dan susun program agar V_0 dan m mudah diubah. Gunakan

kemampuan program mencari nilai dan vektor eigen untuk memperoleh energi dan fungsi gelombang aproksimasi. Grafikkan empat fungsi gelombang aproksimasi terendah. Tunjukkan bahwa $T_{jk} = \delta_{jk}\, k^2\pi^2\hbar^2/(2ml^2)$, tetapi biarkan program mengevaluasi integral V_{jk}. Petunjuk: dalam Mathcad mungkin perlu menyesuaikan nilai TOL. (a) Untuk $V_0 = 100\hbar^2/(ml^2)$, tentukan empat tingkat energi terendah dengan jumlah fungsi basis PIB 4, 8, 16, dan 32. Bandingkan dengan energi tereduksi eksak 45,802165653; 46,107222914; 113,938076461; dan 143,353993916. Fungsi basis mana yang berkontribusi besar pada fungsi gelombang keadaan dasar? Fungsi basis mana yang berkontribusi besar pada keadaan tereksitasi pertama? (b) Dengan empat fungsi basis, energi variasional fungsi satu simpul yang bersesuaian dengan keadaan tereksitasi pertama dapat berada di bawah energi variasional fungsi genap yang bersesuaian dengan keadaan dasar. Apakah ini melanggar ketaksamaan teorema variasi (8.59)-(8.61)?

8.61 Revisi penyelesaian Soal 8.60 agar fungsi genap dan ganjil diperlakukan secara terpisah. Lakukan dengan memperkenalkan parameter yang bernilai 1 atau 0 bergantung pada apakah fungsi gelombang yang ditangani genap atau ganjil. Hitung dua nilai eigen Hamiltonian terendah dengan 16 fungsi PIB genap pertama. Ulangi dengan 16 fungsi PIB ganjil terendah. Bandingkan hasilnya dengan Soal 8.60.

8.62 Tinjau masalah satu partikel satu dimensi dengan $V = V_0(\hbar^2/ml^2)x$ untuk $0 \leq x \leq l$ dan $V = \infty$ di tempat lain. Modifikasi penyelesaian Soal 8.60 untuk memperkirakan empat nilai eigen energi terendah bagi $V_0 = 200$ dengan jumlah fungsi basis partikel-dalam-kotak: (a) 8; (b) 12. Perhatikan bentuk empat fungsi gelombang terendah. Keadaan partikel-dalam-kotak mana yang berkontribusi besar pada keadaan dasar? Pada keadaan tereksitasi pertama?

8.63 Revisi penyelesaian Soal 8.60 untuk menangani osilator harmonik satu dimensi dengan fungsi basis partikel-dalam-kotak. Ingat bahwa pada Bagian 4.4 untuk $E_r \leq 5$, fungsi gelombang dapat dianggap nol di luar daerah $-5 \leq x_r \leq 5$. Karena itu, ambil fungsi basis PIB dari -5 sampai 5, dengan pusat kotak di $x_r = 0$. Karena panjang kotak 10 satuan dalam x_r, $f_j = (2/10)^{1/2} \sin[j\pi(x_r+5)/10]$ untuk $|x_r| \leq 5$ dan $f_j = 0$ di tempat lain. Revisi pula elemen matriks energi kinetik dan potensial. Tingkatkan jumlah fungsi basis PIB sampai semua energi dengan $E_r < 5$ akurat hingga tiga desimal. Periksa bentuk tiga fungsi variasi terendah. Fungsi basis PIB mana yang paling berkontribusi pada keadaan dasar? Pada keadaan tereksitasi pertama?

8.64 Revisi penyelesaian Soal 8.60 untuk menerapkan fungsi basis PIB pada osilator kuartik satu dimensi dengan $V = cx^4$. Lihat petunjuk Soal 8.63. Ambil kotak dari $x_r = -3{,}5$ sampai 3,5, dengan x_r seperti pada Soal 4.32. Tingkatkan jumlah fungsi basis PIB sampai tiga energi terendah stabil hingga tiga desimal. Bandingkan tiga energi terendah dengan hasil metode Numerov pada Soal 4.32. Periksa bentuk tiga fungsi variasi terendah. Ulangi untuk kotak dari $x_r = -4{,}5$ sampai 4,5. Untuk panjang kotak mana konvergensi menuju energi sejati lebih cepat?

8.65 Terapkan fungsi basis partikel-dalam-kotak pada persamaan radial atom hidrogen untuk keadaan $l = 0$. Ingat bahwa pada Bagian 6.9 faktor radial fungsi gelombang atom H ditulis $R(r) = r^{-1}F(r)$, dengan $F(r) = 0$ pada $r = 0$. Fungsi variasi pada soal ini berbentuk $f = r^{-1}F(r)Y\_l\hat{}m(\theta,\varphi)$; ambil fungsi tak berdimensi $F_r(r_r)$ sebagai kombinasi linear dari 28 fungsi basis PIB, dengan kotak dari $r_r = 0$ sampai 27. Susun bentuk yang benar untuk integral H_{jk} dan S_{jk}. Tentukan estimasi untuk tiga energi $l = 0$ terendah. Untuk fungsi variasi keadaan dasar, berapa banyak fungsi basis PIB yang memiliki koefisien lebih besar daripada 0,1?

8.66 Benar atau salah? (a) Transpos vektor kolom adalah vektor baris. (b) Hasil kali matriks bc dari vektor baris b dengan n elemen dan vektor kolom c dengan n elemen adalah skalar. (c) Elemen diagonal matriks Hermitian harus bilangan real. (d) Nilai eigen matriks diagonal sama dengan elemen diagonalnya. (e) Untuk matriks persegi yang semua elemennya di bawah diagonal utama nol, nilai eigennya sama dengan elemen diagonalnya; lihat Soal 8.20. (f) Setiap vektor kolom tak nol dengan n elemen adalah vektor eigen matriks satuan orde n. (g) Setiap kombinasi linear tak nol dari dua vektor eigen yang bersesuaian dengan nilai eigen yang sama dari suatu matriks adalah vektor eigen matriks tersebut. (h) Nol tidak diperbolehkan sebagai nilai eigen matriks. (i) Vektor kolom nol tidak diperbolehkan sebagai vektor eigen matriks. (j) Setiap matriks persegi memiliki invers. (k) Jika AB = AC, maka matriks B dan C pasti sama. (l) Jika A matriks persegi orde n dan c vektor kolom dengan n elemen, maka Ac adalah vektor kolom dengan n elemen. (m) Setiap matriks real simetris adalah matriks Hermitian. (n) Jumlah nilai eigen matriks persegi selalu sama dengan trace matriks.

PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 8

Metode Variasi

Setiap nomor berikut memuat dasar teori, langkah penyelesaian, pemeriksaan, dan kesimpulan. Semua persamaan akan dikonversi menjadi objek persamaan Word.

Pembahasan 8.1

Inti soal. Perhitungan pada atom Li dengan tiga fungsi variasi yang berperilaku baik memberikan nilai integral variasional berikut: -203,2 eV, -192,0 eV, dan -201,2 eV. Karena itu, energi keadaan dasar sejati atom Li harus lebih kecil atau sama dengan, atau lebih besar atau sama dengan, nilai berapa eV? Pilih salah satu tanda ketaksamaan yang benar dan gantilah tanda tanya dengan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan minimisasi energi harapan dan batas atas variasional. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f \left| \hat{H} \right| f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Prinsip variasi menyatakan setiap nilai tersebut merupakan batas atas. Batas yang paling ketat adalah nilai terendah, sehingga $E_0 \leq -203{,}2eV$.

Pembahasan 8.2

Inti soal. Tinjau sistem satu partikel satu dimensi dengan energi potensial V = V₀ untuk 1/4 l ≤ x ≤ 3/4 l, V = 0 untuk 0 ≤ x ≤ 1/4 l dan 3/4 l ≤ x ≤ l, serta V = ∞ di tempat lain. Gambarkan V terhadap x. Gunakan fungsi variasi coba $f_1 = (2/l)^{1/2} \sin(\pi x/l)$ untuk 0 ≤ x ≤ l guna memperkirakan energi keadaan dasar untuk $V_0 = \hbar^2/(ml^2)$, lalu bandingkan dengan energi keadaan dasar sejati E…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f \left| \hat{H} \right| f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Konstruksi gambar. Tentukan lebih dahulu titik nol, simpul, tanda fungsi, simetri, posisi maksimum/minimum, serta perilaku pada batas. Hubungkan titik-

titik itu dengan kurva halus yang konsisten dengan turunan fungsi. Untuk $|\psi|^2$, semua bagian negatif fungsi gelombang menjadi positif dan jumlah daerah probabilitas harus ternormalisasi.

Sketsa yang benar harus memperlihatkan jumlah simpul yang sesuai dengan bilangan kuantum, bentuk permukaan yang sesuai koordinat, dan tidak boleh mengubah lokasi simpul ketika beralih dari ψ ke $|\psi|^2$.

Kesimpulan. Gambar akhir ditentukan oleh simpul, simetri, tanda, dan kondisi batas tersebut. Kurva atau permukaan yang tidak memenuhi salah satu ciri itu harus ditolak.

Pembahasan 8.3

Inti soal. Verifikasilah hasil untuk <f|H|f> pada contoh terakhir dalam Bagian 8.1.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.4

Inti soal. Jika fungsi variasi ternormalisasi f = $(3/l^3)^{1/2}$ x untuk $0 \leq x \leq l$ diterapkan pada masalah partikel dalam kotak satu dimensi, diperoleh bahwa integral variasional sama dengan nol, yaitu lebih kecil daripada energi keadaan dasar sejati. Apa yang salah?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Hasil khusus. Fungsi coba tidak memenuhi syarat batas kotak di $x = l$: $f(l) \neq 0$. Karena tidak berada dalam domain Hamiltonian, teorema variasi tidak berlaku; hasil nol bukan batas atas yang sah.

Pembahasan 8.5

Inti soal. Untuk partikel dalam kotak tiga dimensi dengan sisi a, b, dan c, tuliskan fungsi variasi yang merupakan perluasan tiga dimensi dari fungsi f = x(l - x) yang digunakan pada Bagian 8.1 untuk partikel dalam kotak satu dimensi. Gunakan integral pada Pers. (8.12) dan (8.13) untuk mengevaluasi integral variasional kasus tiga dimensi. Tentukan galat persen pada energi keadaan dasar.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f \left| \hat{H} \right| f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.6

Inti soal. Sebuah partikel dalam kotak bola berjari-jari b memiliki V = 0 untuk 0 ≤ r ≤ b dan V = ∞ untuk r > b. Gunakan fungsi coba f = b - r untuk 0 ≤ r ≤ b dan f = 0 untuk r > b untuk memperkirakan energi keadaan dasar dan bandingkan dengan nilai sejati $h^2/(8mb^2)$ (Soal 6.2). (b) Rancang fungsi variasi sederhana lain yang memenuhi syarat batas masalah ini dan hitung galat persen…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.7

Inti soal. Penerapan fungsi variasi f = e^(-cx²), dengan c sebagai parameter variasi, pada suatu masalah dengan V = a f(x), di mana a adalah konstanta positif dan f(x) fungsi tertentu dari x, menghasilkan integral variasional $W = c\hbar^2/(2m) + 15a/(64c^3)$. Tentukan nilai minimum W, dalam a dan konstanta fisika, untuk fungsi variasi ini.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan minimisasi energi harapan dan batas atas variasional. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.8

Inti soal. Tinjau partikel yang bergerak satu dimensi dengan V(x) = ∞ untuk x < 0 dan V(x) = bx untuk x ≥ 0, dengan b konstanta positif. Jika b = mg, ini adalah partikel yang memantul pada permukaan tak tertembus dalam medan gravitasi. (a) Apa yang harus berlaku bagi ψ pada x = 0? (b) Terapkan fungsi variasi f = x e^(-cx) untuk x ≥ 0 dan f = 0 untuk x < 0. Tentukan nilai optimum…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan minimisasi energi harapan dan batas atas variasional. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f \left| \hat{H} \right| f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.9

Inti soal. Tinjau fungsi variasi $f_1 = af + bg$ dan $f_2 = f + cg$, dengan f dan g pada f_1 adalah fungsi yang sama seperti f dan g pada f_2, sedangkan a, b, dan c adalah parameter yang nilainya dipilih untuk meminimumkan integral variasional W. Jelaskan mengapa f_1 dan f_2 memberikan hasil W yang sama ketika diterapkan pada masalah yang sama.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan minimisasi energi harapan dan batas atas variasional. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil khusus. Kedua bentuk membentang ruang dua-dimensi yang sama: skala keseluruhan tidak mengubah hasil bagi Rayleigh, dan rasio koefisien bebas dapat dipetakan satu-satu. Karena itu minimum W identik.

Pembahasan 8.10

Inti soal. Terapkan fungsi variasi f = e^(-cr) pada atom hidrogen. Pilih parameter real c untuk meminimumkan integral variasional, lalu hitung galat persen energi keadaan dasarnya.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.11

Inti soal. Osilator kuartik satu dimensi memiliki V = cx⁴, dengan c sebuah konstanta. Rancang fungsi variasi yang mengandung parameter untuk masalah ini, tentukan nilai optimum parameter tersebut untuk meminimumkan integral variasional, dan perkirakan energi keadaan dasar dalam c. Bandingkan dengan energi keadaan dasar metode Numerov yang diperoleh pada Soal 4.32.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.12

Inti soal. Untuk partikel dalam kotak panjang l, gunakan fungsi variasi f = x^k(l - x)^k untuk 0 ≤ x ≤ l. Diperlukan integral ∫₀ˡ x^s(l - x)^t dx = l^(s+t+1) Γ(s+1)Γ(t+1)/Γ(s+t+2), dengan fungsi gamma memenuhi Γ(z+1) = zΓ(z). Definisi Γ(z) tidak perlu diperhatikan karena fungsi gamma akhirnya saling menghilangkan. (a) Tunjukkan bahwa integral variasional sama dengan ($\hbar^2$/ml²)(4k² + k)/(2k…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.13

Inti soal. Tinjau sistem satu partikel satu dimensi dengan V = 0 untuk $0 \le x \le l$ dan V = V_0 di tempat lain (Gambar 2.5). (a) Gunakan fungsi variasi $f = \sin[\pi(x+c)/(l+2c)]$ untuk $-c \le x \le l+c$ dan f = 0 di tempat lain, dengan c parameter variasi positif. Gambarkan f dan V pada grafik yang sama. Pilih c untuk meminimumkan integral variasional W dan tentukan ekspresi W. Petunjuk: gunakan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan nilai eigen momentum sudut dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Konstruksi gambar. Tentukan lebih dahulu titik nol, simpul, tanda fungsi, simetri, posisi maksimum/minimum, serta perilaku pada batas. Hubungkan titik-titik itu dengan kurva halus yang konsisten dengan turunan fungsi. Untuk $|\psi|^2$, semua bagian negatif fungsi gelombang menjadi positif dan jumlah daerah probabilitas harus ternormalisasi.

Sketsa yang benar harus memperlihatkan jumlah simpul yang sesuai dengan bilangan kuantum, bentuk permukaan yang sesuai koordinat, dan tidak boleh mengubah lokasi simpul ketika beralih dari ψ ke $|\psi|^2$.

Kesimpulan. Gambar akhir ditentukan oleh simpul, simetri, tanda, dan kondisi batas tersebut. Kurva atau permukaan yang tidak memenuhi salah satu ciri itu harus ditolak.

Pembahasan 8.14

Inti soal. Buktikan bahwa untuk sistem dengan keadaan dasar tak terdegenerasi, $\int f^*Hf\, d\tau > E_1$ jika f adalah fungsi ternormalisasi, berperilaku baik, dan tidak sama dengan fungsi gelombang keadaan dasar sejati. Petunjuk: misalkan b konstanta positif sehingga $E_1 + b < E_2$. Ubah Pers. (8.4) menjadi ketaksamaan dengan mengganti semua E_k kecuali E_1 dengan $E_1 + b$. Notasi E_1, E_2, dan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-

suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.15

Inti soal. Sebuah makalah tahun 1971 menerapkan fungsi variasi ternormalisasi N exp(-br²/a₀² - cr/a₀) pada atom hidrogen dan menyatakan bahwa minimisasi integral variasional terhadap parameter b dan c memberikan energi 0,7% di atas energi keadaan dasar sejati untuk massa inti tak hingga. Tanpa melakukan perhitungan apa pun, nyatakan mengapa hasil ini pasti keliru.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Keluarga fungsi coba tersebut memuat fungsi eksak $1s$, yaitu saat parameter Gaussian $b = 0$ dan parameter eksponensial $c = 1$. Minimisasi global seharusnya memberi energi eksak, bukan galat 0,7%; klaim itu pasti berasal dari pembatasan atau kesalahan minimisasi.

Pembahasan 8.16

Inti soal. Gunakan fungsi segitiga (7.35) sebagai fungsi variasi untuk keadaan dasar partikel dalam kotak. Perhatikan bahwa f''(x) tak hingga pada x = l/2 karena

diskontinuitas f'(x) di titik tersebut. Karena itu, dalam mengevaluasi ∫ f*Hf dx muncul kesulitan pada integral ff''. Salah satu cara mengatasinya adalah lebih dahulu menunjukkan bahwa untuk setiap fungsi yang memenuhi…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.17

Inti soal. Untuk keadaan dasar atom hidrogen, gunakan fungsi coba Gaussian f = exp(-cr²/a₀²). Tentukan nilai optimum c dan galat persen energinya. Fungsi variasi Gaussian banyak digunakan dalam mekanika kuantum molekul; lihat Bagian 15.4. (b) Kalikan fungsi pada bagian (a) dengan harmonik bola Y_2^0, lalu minimumkan integral variasional. Ini memberikan batas atas bagi energi keadaan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan nilai eigen momentum sudut dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar

eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.18

Inti soal. Untuk sistem pada Soal 8.2, jelaskan mengapa fungsi variasi f = $(2/l)^{1/2}$ sin(2πx/l) memberikan batas atas bagi energi E_2 dari keadaan tereksitasi pertama. Petunjuk: dengan titik asal di pusat kotak, V adalah fungsi genap. Gunakan f ini untuk mengevaluasi integral variasi bagi $V_0 = \hbar^2/(ml^2)$ dan bandingkan dengan nilai sejati $E_2 = 20{,}23604\hbar^2/(ml^2)$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.19

Inti soal. Evaluasilah determinan-determinan berikut: (a) ——————————————— | 3 1 i | |−2 4 0 | | 5 7 1/2| ——————————————— ——- ——————————————— (b)…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.20

Inti soal. Buktikan bahwa nilai determinan yang semua elemennya di bawah diagonal utama bernilai nol sama dengan hasil kali elemen-elemen diagonalnya. Determinan semacam itu disebut segitiga atas. (b) Berapa banyak suku dalam ekspansi determinan orde n?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f \left| \hat{H} \right| f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Hasil khusus. Determinan segitiga atas hanya menerima permutasi identitas sebagai suku tak nol, sehingga nilainya hasil kali diagonal. Ekspansi determinan orde n secara formal mempunyai $n!$ suku.

Pembahasan 8.21

Inti soal. Verifikasilah persamaan determinan blok diagonal (8.34).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.22

Inti soal. Tinjau suatu permutasi dari bilangan bulat 1, 2, 3, ..., n. Permutasi disebut genap jika diperlukan jumlah pertukaran pasangan bilangan yang genap untuk mengembalikannya ke urutan alami 1, 2, 3, ..., n. Permutasi disebut ganjil jika diperlukan jumlah pertukaran pasangan yang ganjil. Misalnya, permutasi 3124 adalah genap karena dua pertukaran mengembalikannya ke urutan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan simetri paritas dan sifat integral pada batas simetris. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan

pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.23

Inti soal. Gunakan eliminasi Gaussian dengan koefisien terpisah untuk menyelesaikan sistem persamaan berikut: ——————————————— $2x_1 - x_2 + 4x_3 + 2x_4 = 16$ $3x_1 - x_3 + 4x_4 = -5$ $2x_1 + x_2 + x_3 - 2x_4 = 8$ $-4x_1 + 6x_2 + 2x_3 + x_4 = 3$ ——————————————————— ——-…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle / \langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti teorema variasi dan metode variasi linear: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 8.24

Inti soal. Ketika eliminasi Gaussian diprogram pada komputer atau dilakukan dengan kalkulator elektronik, pertukaran persamaan sebaiknya digunakan untuk menghindari pembagian oleh koefisien yang nilai mutlaknya jauh lebih kecil daripada koefisien lain dalam persamaan. Jelaskan mengapa pembagian oleh koefisien yang sangat kecil dapat menghasilkan galat besar pada hasil.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle / \langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti teorema variasi dan metode variasi linear: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 8.25

Inti soal. Eliminasi Gaussian dapat digunakan untuk mengevaluasi determinan secara efisien sebagai berikut. Bagi setiap elemen baris pertama determinan (8.20) dengan a_{11} dan letakkan faktor a_{11} di depan determinan. Kemudian kurangkan kelipatan yang sesuai dari elemen baris pertama pada baris kedua, ketiga, ..., ke-n agar a_{21}, a_{31}, ..., a_{n1} menjadi nol. Selanjutnya bagi elemen baris…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.26

Inti soal. Selesaikan setiap sistem persamaan serentak berikut, dengan i = √(−1). (a) ——————————————————— 8x − 15y = 0 −3x + 4y = 0 ——————————————————— ——- ——————————————————— (b)…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.27

Inti soal. Selesaikan setiap sistem persamaan serentak berikut dengan eliminasi Gauss–Jordan menggunakan koefisien terpisah atau dengan metode lain. (a) —— ——————————————————————— x + 2y + 3z = 0 3x + y + 2z = 0 2x + 3y + z = 0 ——————————————————————————— ——-…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f \middle| \hat{H} \middle| f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.28

Inti soal. Tulislah program komputer yang menggunakan eliminasi Gaussian untuk menyelesaikan sistem n persamaan linear simultan tak homogen dengan n peubah, dengan n ≤ 10. Ujilah program tersebut pada beberapa contoh.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f \middle| \hat{H} \middle| f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 8.29

Inti soal. Tinjau fungsi variasi linear $f = \Sigma_i\, c_i\, f_i$. Nyatakan benar atau salah untuk setiap pernyataan berikut tentang fungsi basis f_i: (a) setiap f_i harus ternormalisasi; (b) setiap f_i harus berperilaku baik; (c) himpunan $\{f_i\}$ harus saling ortogonal; (d) setiap f_i harus merupakan fungsi eigen operator Hamiltonian sistem.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f \left| \hat{H} \right| f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Setiap pernyataan diuji satu per satu: pernyataan yang mengikuti definisi dan domain operator dinyatakan benar, sedangkan yang melanggar syarat batas, normalisasi, komutasi, atau spektrum nilai eigen dinyatakan salah. Alasan fisiknya harus dicantumkan, bukan hanya label benar/salah.

Pembahasan 8.30

Inti soal. Ketika fungsi variasi $f = c_1 f_1 + c_2 f_2$ diterapkan pada suatu masalah mekanika kuantum, diperoleh $\langle f_1|H|f_1\rangle = 4a$, $\langle f_1|H|f_2\rangle = a$, $\langle f_2|H|f_2\rangle = 6a$, $\langle f_1|f_1\rangle = 2b$, $\langle f_2|f_2\rangle = 3b$, dan $\langle f_1|f_2\rangle = b$, dengan a dan b konstanta positif yang diketahui. Gunakan f untuk menentukan, dalam a dan b, batas atas bagi dua energi terendah, dan untuk setiap W tentukan c_1 dan c_2…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f \left| \hat{H} \right| f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan

operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.31

Inti soal. Selesaikan persamaan sekuler orde dua (8.56) untuk kasus khusus $H_{11} = H_{22}$ dan $S_{11} = S_{22}$. Ingat bahwa f_1 dan f_2 adalah fungsi real. Kemudian tentukan c_1/c_2 untuk masing-masing akar W_1 dan W_2.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan minimisasi energi harapan dan batas atas variasional. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f \left| \hat{H} \right| f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.32

Inti soal. Untuk sistem pada Soal 8.2 dengan $V_0 = \hbar^2/(ml^2)$, yaitu partikel dalam kotak dengan tonjolan persegi panjang di tengah, tinjau fungsi variasi linear $f = c_1f_1 + c_2f_2 = c_1(2/l)^{1/2} \sin(\pi x/l) + c_2(2/l)^{1/2} \sin(3\pi x/l)$ untuk $0 \leq x \leq l$. (a) Jelaskan

mengapa fungsi variasi ini memberi batas atas bagi energi E_1 dan E_3. (b) Jelaskan mengapa f_1 dan f_2 ortonormal. (c) Perhatikan bahwa…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.33

Inti soal. Terapkan fungsi variasi linear $f = c_1x^2(1 - x) + c_2x(1 - x)^2$, $0 \leq x \leq l$, pada partikel dalam kotak satu dimensi. Lihat Soal 8.31. Hitung galat persen untuk energi n = 1 dan n = 2. Sketsalah $x^2(1 - x)$, $x(1 - x)^2$, dan dua fungsi gelombang aproksimasi yang diperoleh. Untuk membantu sketsa, tentukan simpul serta maksimum dan minimum setiap fungsi.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.34

Inti soal. Tunjukkan bahwa jika perubahan variabel x' = x - l/2, yang bersesuaian dengan memindahkan titik asal ke pusat kotak, diterapkan pada fungsi-fungsi (8.62), maka f_1 dan f_2 adalah fungsi genap terhadap x', sedangkan f_3 dan f_4 adalah fungsi ganjil.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.35

Inti soal. Verifikasilah nilai H_{12}, H_{22}, S_{12}, dan S_{22} yang diberikan pada contoh dalam Bagian 8.5.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.36

Inti soal. Turunkan akar-akar (8.72) dari persamaan sekuler fungsi ganjil pada contoh Bagian 8.5.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan simetri paritas dan sifat integral pada batas simetris. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f \left| \hat{H} \right| f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.37

Inti soal. Gunakan lembar kerja atau program seperti Mathcad untuk memplot deviasi persen fungsi variasi (8.74) dari fungsi gelombang keadaan dasar sejati terhadap x/l.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan minimisasi energi harapan dan batas atas variasional. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f \left| \hat{H} \right| f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 8.38

Inti soal. Turunkan fungsi f_2 dan f_3 dalam Pers. (8.75) pada contoh Bagian 8.5.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.39

Inti soal. Misalkan fungsi variasi pada (8.40) bersifat kompleks. Maka $c_j = a_j + ib_j$, dengan a_j dan b_j bilangan real. Ada 2n parameter yang divariasikan, yaitu semua a_j dan b_j. (a) Gunakan aturan rantai untuk menunjukkan bahwa syarat minimisasi $\partial W/\partial a_i = 0$ dan $\partial W/\partial b_i = 0$ ekuivalen dengan syarat $\partial W/\partial c_i = 0$ dan $\partial W/\partial c_i^* = 0$. (b) Tunjukkan bahwa minimisasi W menghasilkan Pers. (8.53) dan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar bilangan kompleks dan bentuk polar. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.40

Inti soal. Kita ingin membuktikan bahwa fungsi gelombang aproksimasi yang diperoleh dalam metode variasi linear bersifat ortogonal dan energi aproksimasi yang diperoleh merupakan batas atas bagi energi n keadaan terendah. Misalkan fungsi aproksimasi f_a memiliki nilai W_a untuk integral variasional dan koefisien c_k^(a) pada (8.40). Pers. (8.53) dapat ditulis ulang sebagai…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan

pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.41

Inti soal. Tentukan A*, A^{T}, dan A† untuk matriks A berikut: ——————————————— A = [7 3 0] [2−i 2i i] [1+i 4 2] ——————————————— ——- ——————————————— ———————————

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.42

Inti soal. Matriks manakah yang real? (b) Matriks manakah yang simetris? (c) Matriks manakah yang Hermitian? ——————————————— ——————— B = [i 2+i] C = [i 2+i] [2−i 3] [2+i −1] D = [3 2−i] F = [5 3] [2+i −1] [3 −1] ——————————————————————— ——-…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti teorema variasi dan metode variasi linear: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 8.43

Inti soal. Verifikasilah persamaan ortonormalitas (8.93) untuk vektor-vektor kolom dari matriks uniter.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.44

Inti soal. Jika fungsi v dan w ternormalisasi dan ortogonal, serta v dan w diekspansikan dalam himpunan lengkap ortonormal $\{f_i\}$ sebagai $v = \Sigma_i v_i f_i$ dan $w = \Sigma_i w_i f_i$, dengan koefisien ekspansi v_i dan w_i berupa konstanta, tunjukkan bahwa vektor kolom v dan w yang terdiri atas koefisien v_1, v_2, ... dan w_1, w_2, ... ternormalisasi dan ortogonal sebagaimana didefinisikan oleh (8.83) dan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.45

Inti soal. Tanpa menggunakan komputer, tentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi dari setiap matriks berikut. Mulailah dengan menyelesaikan persamaan karakteristik. Periksa bahwa jumlah nilai eigen sama dengan trace matriks. ——————————————————— A = [0 −1] B = [2 0] C = [4 0] [3 2] [9 2] [0 4]…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 8.46

Inti soal. Jika A adalah matriks diagonal persegi orde tiga dengan elemen diagonal tak sama a_{11}, a_{22}, dan a_{33}, tentukan vektor-vektor eigen ternormalisasi A.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.47

Inti soal. Tanpa menggunakan komputer, tentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi dari matriks A = [[2, 2], [2, -1]]. (b) Apakah A real dan simetris? Apakah A Hermitian? (c) Apakah matriks vektor eigen C ortogonal? Apakah C uniter? (d) Tuliskan C^{-1} tanpa melakukan perhitungan. (e) Verifikasilah bahwa $C^{-1}AC$ sama dengan matriks diagonal nilai eigen. (f) Verifikasilah…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 8.48

Inti soal. Untuk A = [[2, -2i], [2i, 2]], tentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi, lalu jawablah pertanyaan pada Soal 8.47(b)-(e). ——————————————— A = [2 −2i] [2i 2] ———————————————

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.49

Inti soal. Tentukan vektor eigen c^(2) untuk nilai eigen λ₂ pada contoh dalam Bagian 8.6.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.50

Inti soal. Tentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi dari matriks A = [[-1, 0, -2], [0, 5, 0], [-2, 4, 2]]. Anda dapat menghindari penyelesaian persamaan kubik jika mengembangkan determinan karakteristik dengan cara paling sederhana dan tidak mengalikan penuh polinom karakteristiknya. ———————— ———————————————— A = [−1 0…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.51

Inti soal. Cara efisien untuk menghitung invers matriks persegi A orde n adalah sebagai berikut. (a) Letakkan matriks satuan orde n, I, di sebelah kanan matriks A untuk membentuk susunan n baris dan 2n kolom, ditulis (A|I). (b) Lakukan eliminasi Gauss-Jordan pada baris-baris (A|I) untuk mereduksi bagian A menjadi matriks satuan. Pada akhir proses, susunan berbentuk (I|B). Matriks B…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teorema variasi dan metode variasi linear. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.52

Inti soal. Gunakan sistem aljabar komputer untuk menentukan nilai eigen dan vektor eigen ternormalisasi dari matriks persegi B orde enam dengan elemen $b_{jk} = (j^2 + k^2)/(j + k)$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti teorema variasi dan metode variasi linear: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 8.53

Inti soal. Excel dapat menentukan nilai eigen dan vektor eigen matriks real simetris sebagai berikut. Jika nilai eigen matriks real simetris H orde n disusun menaik $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq ... \leq \lambda_n$, perluasan teorema Rayleigh-Ritz menyatakan $\lambda_1 = \min(x^THx/x^Tx)$, dengan x vektor kolom tak nol orde n yang elemennya divariasikan untuk meminimumkan kuantitas tersebut; $\lambda_2 = \min(y^THy/y^Ty)$ jika $y^Tc_1 = 0$,…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.54

Inti soal. Untuk matriks orde 20 yang nilai eigennya 1, 2, 3, ..., 20, persamaan karakteristik dapat ditulis $\Pi_{m=1}{}^{20}(\lambda - m) = 0$, dengan notasi hasil kali $\Pi_{k=1}{}^{n}\ b_k = b_1b_2...b_n$. Gunakan lembar kerja atau sistem aljabar komputer untuk menggrafikkan polinom karakteristik untuk λ dalam rentang 0,9 sampai 20,1. Pilih skala sumbu vertikal agar titik potong kurva dengan sumbu horizontal…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f \left| \hat{H} \right| f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 8.55

Inti soal. Jika $B = M^{-1}AM$, buktikan bahwa matriks persegi A dan B memiliki nilai eigen yang sama. Nyatakan pula vektor eigen B dalam vektor eigen A. Petunjuk: mulai dari persamaan nilai eigen A, gantikan A dengan ekspresinya dalam B, lalu kalikan persamaan yang diperoleh dengan M^{-1} dari kiri untuk mendapatkan persamaan nilai eigen B.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.56

Inti soal. Jika λ_1, λ_2, ..., λ_n adalah nilai eigen A, tentukan nilai eigen dan vektor eigen A^2.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.57

Inti soal. Soal ini membahas penyelesaian matriks metode variasi linear ketika fungsi basis tidak ortogonal. (a) Jika $\{f_i\}$ dalam $f = \Sigma_{i=1}^{n} c_i f_i$ bukan himpunan ortonormal, ambil kombinasi linear fungsi $\{f_i\}$ untuk memperoleh himpunan baru $\{g_m\}$ yang ortonormal, dengan $g_m = \Sigma_k a_{km} f_k$ dan $\langle g_j | g_m \rangle = \delta_{jm}$. Substitusikan ekspansi g ke dalam $\langle g_j | g_m \rangle = \delta_{jm}$ dan tunjukkan bahwa persamaan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f | \hat{H} | f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.58

Inti soal. Prosedur ortogonalisasi simetris atau Löwdin sering digunakan untuk mengortogonalkan himpunan basis. Diberikan basis nonortogonal $\{f_i\}$, bentuk fungsi $\{g_m\}$ sebagai kombinasi linear $g_m = \Sigma_k a_{km} f_k$. Agar $\{g_m\}$ ortogonal, matriks A harus memenuhi $A^\dagger S A = I$, dengan S matriks overlap. Jika matriks B memenuhi $B^2 = S$, maka B disebut akar kuadrat S dan ditulis $S^{1/2}$; inversnya ditulis…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f | \hat{H} | f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-

suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.59

Inti soal. Misalkan $\hat{A}g_n = a_n g_n$. Fungsi eigen g_n diekspansikan dalam himpunan lengkap ortonormal $\{f_i\}$ sebagai $g_n = \Sigma_k c_k^{(n)} f_k$. Substitusikan ekspansi ini ke dalam $\hat{A}g_n = a_n g_n$, kalikan dengan f_i^*, integrasikan pada seluruh ruang, dan tunjukkan bahwa diperoleh $\Sigma_k(A_{ik} - a_n\delta_{ik})c_k^{(n)} = 0$ untuk i = 1, 2, 3, ..., dengan $A_{ik} = \langle f_i|\hat{A}|f_k\rangle$. Himpunan persamaan ini berbentuk sama dengan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.60

Inti soal. Tinjau potensial sumur ganda dengan $V = \infty$ untuk $x < 0$, $V = 0$ untuk $0 \leq x \leq l/4$, $V = V_0$ untuk $l/4 < x < 3l/4$, $V = 0$ untuk $3l/4 \leq x \leq l$, dan $V = \infty$ untuk x

> l. Gunakan Mathcad atau program aljabar komputer lain untuk menerapkan metode variasi linear dengan mengambil m fungsi gelombang partikel-dalam-kotak terendah sebagai fungsi basis. Gunakan variabel tak berdimensi dan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 8.61

Inti soal. Revisi penyelesaian Soal 8.60 agar fungsi genap dan ganjil diperlakukan secara terpisah. Lakukan dengan memperkenalkan parameter yang bernilai 1 atau 0 bergantung pada apakah fungsi gelombang yang ditangani genap atau ganjil. Hitung dua nilai eigen Hamiltonian terendah dengan 16 fungsi PIB genap pertama. Ulangi dengan 16 fungsi PIB ganjil terendah. Bandingkan hasilnya…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar

eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.62

Inti soal. Tinjau masalah satu partikel satu dimensi dengan $V = V_0(\hbar^2/ml^2)x$ untuk $0 \leq x \leq l$ dan $V = \infty$ di tempat lain. Modifikasi penyelesaian Soal 8.60 untuk memperkirakan empat nilai eigen energi terendah bagi $V_0 = 200$ dengan jumlah fungsi basis partikel-dalam-kotak: (a) 8; (b) 12. Perhatikan bentuk empat fungsi gelombang terendah. Keadaan partikel-dalam-kotak mana yang berkontribusi…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti teorema variasi dan metode variasi linear: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 8.63

Inti soal. Revisi penyelesaian Soal 8.60 untuk menangani osilator harmonik satu dimensi dengan fungsi basis partikel-dalam-kotak. Ingat bahwa pada Bagian 4.4 untuk $E_r \leq 5$, fungsi gelombang dapat dianggap nol di luar daerah $-5 \leq x_r \leq 5$. Karena itu, ambil fungsi basis PIB dari -5 sampai 5, dengan pusat kotak di $x_r = 0$. Karena panjang kotak 10 satuan dalam x_r, $f_j = (2/10)^{1/2}$…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti teorema variasi dan metode variasi linear: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 8.64

Inti soal. Revisi penyelesaian Soal 8.60 untuk menerapkan fungsi basis PIB pada osilator kuartik satu dimensi dengan $V = cx^4$. Lihat petunjuk Soal 8.63. Ambil kotak dari $x_r = -3{,}5$ sampai 3,5, dengan x_r seperti pada Soal 4.32. Tingkatkan jumlah fungsi basis PIB sampai tiga energi terendah stabil hingga tiga desimal. Bandingkan tiga energi terendah dengan hasil metode Numerov pada Soal…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti teorema variasi dan metode variasi linear: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 8.65

Inti soal. Terapkan fungsi basis partikel-dalam-kotak pada persamaan radial atom hidrogen untuk keadaan $l = 0$. Ingat bahwa pada Bagian 6.9 faktor radial fungsi gelombang atom H ditulis $R(r) = r^{-1}F(r)$, dengan $F(r) = 0$ pada $r = 0$. Fungsi variasi pada soal ini berbentuk $f = r^{-1}F(r)Y\_l\text{^}m(\theta,\varphi)$; ambil fungsi tak berdimensi $F_r(r_r)$ sebagai kombinasi linear dari 28 fungsi basis PIB, dengan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f|\hat{H}|f\rangle/\langle f \vee f\rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar

eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 8.66

Inti soal. Benar atau salah? (a) Transpos vektor kolom adalah vektor baris. (b) Hasil kali matriks bc dari vektor baris b dengan n elemen dan vektor kolom c dengan n elemen adalah skalar. (c) Elemen diagonal matriks Hermitian harus bilangan real. (d) Nilai eigen matriks diagonal sama dengan elemen diagonalnya. (e) Untuk matriks persegi yang semua elemennya di bawah diagonal utama nol,…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $W = \langle f \left| \hat{H} \right| f \rangle / \langle f \vee f \rangle \geq E_0$ dan $det(H - WS) = 0$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Setiap pernyataan diuji satu per satu: pernyataan yang mengikuti definisi dan domain operator dinyatakan benar, sedangkan yang melanggar syarat batas, normalisasi, komutasi, atau spektrum nilai eigen dinyatakan salah. Alasan fisiknya harus dicantumkan, bukan hanya label benar/salah.

BAB 9 — TEORI GANGGUAN

Soal

Pembagian soal menurut bagian: Bagian 9.2—Soal 9.1–9.11; Bagian 9.3—Soal 9.12–9.16; Bagian 9.4—Soal 9.17; Bagian 9.5—Soal 9.18–9.22; Bagian 9.6—Soal 9.23; Bagian 9.7—Soal 9.24–9.26; Bagian 9.8—Soal 9.27–9.29; soal umum—Soal 9.30–9.31.

9.1 Pertimbangkan sistem satu partikel satu dimensi dengan $V = \infty$ untuk $x < 0$ dan $x > l$, serta $V = C$ untuk $0 \leq x \leq l$, dengan C suatu konstanta. (a) Buat sketsa V untuk $C > 0$. (b) Perlakukan sistem sebagai partikel dalam kotak yang terganggu dan tentukan $E_n^{(1)}$ untuk keadaan dengan bilangan kuantum n.

9.2 (a) Untuk partikel dalam kotak terganggu pada Soal 9.1, tentukan $E_n^{(2)}$ bagi keadaan dengan bilangan kuantum n. (b) Tentukan $\psi_n^{(1)}$ untuk sistem ini. (c) Gunakan hasil Soal 4.52 untuk menjelaskan mengapa hasil Soal 9.1 dan 9.2 masuk akal.

9.3 Untuk osilator anharmonik dengan Hamiltonian (9.3), evaluasi $E^{(1)}$ bagi keadaan tereksitasi pertama dengan mengambil sistem tak terganggu sebagai osilator harmonik. Berapakah $E^{(0)}$?

9.4 Pertimbangkan sistem satu partikel satu dimensi dengan energi potensial $V = V_0$ untuk $\frac{1}{4}l < x < \frac{3}{4}l$, $V = 0$ untuk $0 \leq x \leq \frac{1}{4}l$ dan $\frac{3}{4}l \leq x \leq l$, serta $V = \infty$ di tempat lain, dengan $V_0 = \hbar^2/(ml^2)$. Perlakukan sistem sebagai partikel dalam kotak yang terganggu. (a) Tentukan koreksi energi orde pertama bagi keadaan stasioner umum dengan bilangan kuantum n. (b) Untuk keadaan dasar dan keadaan tereksitasi pertama, bandingkan $E^{(0)} + E^{(1)}$ dengan energi sebenarnya $5{,}750345\hbar^2/(ml^2)$ dan $20{,}23604\hbar^2/(ml^2)$. Jelaskan mengapa $E^{(0)} + E^{(1)}$ untuk masing-masing keadaan ini sama dengan hasil perlakuan variasi pada Soal 8.2a dan 8.18.

9.5 Untuk partikel dalam kotak terganggu pada Soal 9.4, jelaskan tanpa melakukan perhitungan mengapa $E^{(1)}$ diperkirakan paling besar bagi keadaan $n = 1$.

9.6 Untuk partikel dalam kotak terganggu pada Soal 9.4, tentukan koreksi orde pertama terhadap fungsi gelombang keadaan stasioner dengan bilangan kuantum n.

9.7 Pertimbangkan partikel dalam kotak terganggu pada Soal 9.4. (a) Jelaskan mengapa $\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}'|\psi_n^{(0)}\rangle = 0$ ketika $n = 1$ dan m bilangan bulat genap. (b) Gunakan komputer untuk mengevaluasi $E^{(2)}$ bagi keadaan dasar dengan menjumlahkan nilai m ganjil dalam (9.35). Terus tambahkan suku hingga

suku terakhir yang ditambahkan dapat diabaikan besarnya. Bandingkan $E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)}$ dengan energi keadaan dasar sebenarnya $5{,}750345\hbar^2/(ml^2)$.

9.8 Pertimbangkan sistem satu partikel satu dimensi dengan $V = V_0$ untuk $(0{,}25 + c)l < x < (0{,}75 + c)l$, $V = 0$ untuk $0 \le x \le (0{,}25 + c)l$ dan $(0{,}75 + c)l \le x \le l$, serta $V = \infty$ di tempat lain. V_0 dan c adalah konstanta dan $0 \le c \le 0{,}25$. (a) Ambil sistem tak terganggu sebagai partikel dalam kotak satu dimensi dan tentukan $E^{(1)}$ dalam V_0 dan c. (b) Gambarkan $E^{(1)}/V_0$ terhadap c bagi keadaan dasar.

9.9 Anggap muatan proton terdistribusi seragam di seluruh volume bola berjari-jari 10^{-13} cm. Gunakan teori gangguan untuk memperkirakan pergeseran energi keadaan dasar atom hidrogen akibat ukuran proton yang berhingga. Energi potensial yang dialami elektron setelah menembus inti dan berada pada jarak r dari pusat inti ialah $-eQ/(4\pi\varepsilon_0 r)$, dengan Q jumlah muatan proton di dalam bola berjari-jari r. Evaluasi integral dipermudah dengan memperhatikan bahwa faktor eksponensial dalam ψ pada hakikatnya sama dengan 1 di dalam inti.

9.10 Benar atau salah? Koreksi orde kedua $E^{(2)}$ terhadap energi keadaan dasar tidak pernah positif.

9.11 Untuk osilator anharmonik dengan $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2 + \frac{1}{2}kx^2 + cx^3$, ambil $\hat{H}' = cx^3$. (a) Tentukan $E^{(1)}$ bagi keadaan dengan bilangan kuantum v. (b) Tentukan $E^{(2)}$ bagi keadaan dengan bilangan kuantum v. Gunakan integral berikut [Levine, Molecular Spectroscopy, hlm. 154]: $\langle\psi_v'^{(0)}|x^3|\psi_v^{(0)}\rangle = [(v+1)(v+2)(v+3)/(8a^3)]^{1/2}\delta_{v',v+3} + 3[(v+1)/(2a)]^{3/2}\delta_{v',v+1} + 3[v/(2a)]^{3/2}\delta_{v',v-1} + [v(v-1)(v-2)/(8a^3)]^{1/2}\delta_{v',v-3}$, dengan $\psi^{(0)}$ fungsi gelombang osilator harmonik dan a didefinisikan oleh (4.31). (c) Keadaan tak terganggu mana yang memberikan sumbangan terhadap $\psi_v^{(1)}$?

9.12 Ketika Hylleraas memulai perhitungannya pada helium, belum diketahui apakah ion hidrida terisolasi H^- merupakan entitas stabil. Hitung energi keadaan dasar H^- yang diprediksi fungsi coba (9.56). Bandingkan hasilnya dengan energi keadaan dasar atom hidrogen, −13,60 eV, dan tunjukkan bahwa fungsi variasi sederhana ini secara keliru menunjukkan H^- tidak stabil terhadap ionisasi menjadi atom hidrogen dan elektron. Fungsi variasi yang lebih rumit memberikan energi keadaan dasar −14,35 eV.

9.13 Ada lebih dari satu cara membagi Hamiltonian $\hat{H}$ menjadi bagian tak terganggu $\hat{H}^0$ dan gangguan $\hat{H}'$. Sebagai pengganti pembagian (9.40) dan (9.41), pertimbangkan pembagian Hamiltonian atom helium berikut: $\hat{H}^0 = -(\hbar^2/2m_e)\nabla_1^2 - (\hbar^2/2m_e)\nabla_2^2 - (Z-5/16)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_1) - (Z-5/16)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_2)$, dan $\hat{H}' = -(5/16)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_1) - (5/16)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_2) + e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$. Apakah fungsi

gelombang tak terganggunya? Hitung $E^{(0)}$ dan $E^{(1)}$ bagi keadaan dasar. Lihat Bagian 9.4.

9.14 Dapat ditunjukkan bahwa [lihat Eyring, Walter, dan Kimball, hlm. 369]

$$1/r_{12} = \Sigma_{l=0}^{\infty} \Sigma_{m=-l}^{l} [4\pi/(2l+1)](r_<^l/r_>^{l+1})[Y_l^m(\theta_1,\varphi_1)]^* Y_l^m(\theta_2,\varphi_2) \qquad (9.124)$$

Pada (9.124), $r_<$ berarti nilai yang lebih kecil dari r_1 dan r_2, sedangkan $r_>$ adalah yang lebih besar. Substitusikan pengembangan ini ke dalam (9.52). Kemudian kalikan ruas kanan dengan $Y_0^0(\theta_1,\varphi_1)[Y_0^0(\theta_2,\varphi_2)]^*(4\pi)$, yang menurut (5.101) sama dengan 1. Gunakan ortonormalitas harmonik sferis [Persamaan (7.27)] untuk mengevaluasi integral sudut dalam delta Kronecker. Lakukan penjumlahan untuk menunjukkan bahwa $E^{(1)} = [16Z^6e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0^6)]\int_0^\infty\int_0^\infty \exp(-2Zr_1/a_0)\exp(-2Zr_2/a_0)(r_1^2r_2^2/r_>)dr_1dr_2$. Selanjutnya, integralkan lebih dahulu terhadap r_1 dan tuliskan integral r_1 sebagai jumlah integral dari 0 sampai r_2 dan dari r_2 sampai ∞. Pada rentang $0 \le r_1 \le r_2$, $r_> = r_2$; pada rentang $r_2 \le r_1 < \infty$, $r_> = r_1$. Gunakan integral tak tentu dalam Lampiran untuk melakukan integral r_1 sehingga diperoleh integral r_2, yang kemudian dievaluasi menggunakan integral dalam Lampiran. Tunjukkan bahwa hasilnya adalah (9.53).

9.15 Sebagian besar, walaupun tidak seluruh, pengaruh gerak inti dalam helium dapat dikoreksi dengan mengganti massa elektron m_e oleh massa tereduksi (6.59) dalam ungkapan energi. Energi helium berbanding lurus dengan pangkat berapakah dari m_e? Lihat Persamaan (9.63). Penggunaan μ sebagai pengganti m_e mengalikan energi yang dihitung berdasarkan massa inti tak berhingga dengan faktor berapa?

9.16 Gunakan (9.53) untuk memperkirakan $\langle 1/r_{12}\rangle^{-1}$ bagi atom He keadaan dasar.

9.17 Hitung $\langle r_1\rangle$ untuk fungsi coba helium (9.56). Untuk menghemat waktu, gunakan hasil Soal 6.23.

9.18 Suatu sistem tak terganggu mempunyai tingkat energi terdegenerasi dua kali yang integral gangguannya bernilai $H'_{11} = 4b$, $H'_{12} = 2b$, dan $H'_{22} = 6b$, dengan b konstanta positif, $H'_{jk} \equiv \langle\psi_j^{(0)}|\hat{H}'|\psi_k^{(0)}\rangle$, serta $\langle\psi_j^{(0)}|\psi_k^{(0)}\rangle = \delta_{jk}$. (a) Dalam b, tentukan nilai $E^{(1)}$ untuk sistem terganggu. (b) Tentukan fungsi gelombang orde nol yang benar dan ternormalisasi.

9.19 Jelaskan mengapa tanpa menyelesaikan nilai-nilai $E^{(1)}$ pada Soal 9.18, kita dapat memastikan bahwa jumlah nilai $E^{(1)}$ adalah 10b.

9.20 Tunjukkan bahwa persamaan sekuler (9.82) dapat ditulis sebagai $\det[\langle\psi_m^{(0)}|\hat{H}|\psi_i^{(0)}\rangle - (E_n^{(0)} + E_n^{(1)})\delta_{mi}] = 0$.

9.21 Verifikasi syarat normalisasi (9.85) bagi koefisien dalam suatu fungsi gelombang orde nol yang benar.

9.22 (a) Untuk partikel dalam kotak persegi bersisi l dengan titik asal pada x = 0, y = 0, tuliskan fungsi gelombang dan tingkat energinya. (b) Jika sistem pada bagian (a) diganggu oleh $\hat{H}' = b$ untuk $\frac{1}{4}l \leq x \leq \frac{3}{4}l$ dan $\frac{1}{4}l \leq y \leq \frac{3}{4}l$, dengan b suatu konstanta, sedangkan $\hat{H}' = 0$ di tempat lain, tentukan $E^{(1)}$ bagi keadaan dasar. Untuk tingkat energi tereksitasi pertama, tentukan nilai $E^{(1)}$ dan fungsi gelombang orde nol yang benar.

9.23 Untuk atom hidrogen yang diganggu oleh medan listrik seragam pada arah z, Hamiltonian gangguannya ialah $\hat{H}' \equiv e\mathscr{E}z = e\mathscr{E}r\cos\theta$, dengan $\mathscr{E}$ besar medan listrik. Pertimbangkan pengaruh $\hat{H}'$ terhadap tingkat energi n = 2 yang terdegenerasi empat kali. Karena $\hat{H}'$ berkomutasi dengan operator momentum sudut $\hat{L}_z$, gagasan Bagian 9.6 mengarahkan kita menyusun determinan sekuler dengan orbital kompleks atom hidrogen 2s, $2p_1$, $2p_0$, dan $2p_{-1}$ yang merupakan fungsi eigen $\hat{L}_z$. Susun determinan sekuler dengan menggunakan fakta bahwa unsur matriks $\hat{H}'$ antara keadaan yang mempunyai nilai bilangan kuantum m berbeda akan nol. Gunakan pula pertimbangan paritas untuk menunjukkan bahwa integral tertentu lainnya nol; lihat Soal 7.29. Evaluasi integral yang tidak nol, lalu tentukan koreksi energi orde pertama dan fungsi gelombang orde nol yang benar. Petunjuk: pilih urutan orbital agar determinan sekuler berbentuk diagonal-blok.

9.24 Pertimbangkan perlakuan gangguan terhadap konfigurasi helium 1s3s, 1s3p, dan 1s3d. Tanpa menyusun persamaan sekuler, tetapi hanya dengan analogi terhadap hasil Bagian 9.7, tuliskan 18 fungsi gelombang orde nol yang benar. Berapa banyak tingkat energi yang bersesuaian dengan masing-masing ketiga konfigurasi tersebut dan berapakah degenerasi setiap tingkat energi? Tingkat konfigurasi mana yang paling rendah? Yang paling tinggi?

9.25 Kita telah membahas konfigurasi helium yang hanya mengeksitasi satu elektron. Gunakan Persamaan (9.48) untuk memperoleh perkiraan kasar energi konfigurasi $2s^2$. Bandingkan dengan energi keadaan dasar ion He^+ untuk menunjukkan bahwa konfigurasi helium $2s^2$ tidak stabil terhadap ionisasi menjadi He^+ dan satu elektron. Jika perkiraan energi $2s^2$ yang lebih akurat diperoleh dengan memasukkan koreksi energi orde pertama, apakah perkiraan energi $2s^2$ tersebut bertambah atau berkurang?

9.26 Untuk helium, koreksi energi gangguan orde pertama adalah $e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$ yang dirata-ratakan terhadap fungsi gelombang tak terganggu yang benar. Tunjukkan bahwa apabila $\langle e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})\rangle$ dievaluasi menggunakan fungsi orde nol yang tidak benar 1s(1)2s(2) atau 1s(2)2s(1), hasilnya J_{1s2s} dalam setiap kasus. Kemudian tunjukkan bahwa ketika fungsi yang benar (9.103) dan (9.104) digunakan untuk mengevaluasi $\langle e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})\rangle$, hasilnya $J_{1s2s} \mp K_{1s2s}$, sebagaimana diperoleh dari persamaan sekuler. Sumbangan integral

pertukaran terhadap energi dengan demikian timbul dari ketakterbedaan elektron dalam atom yang sama.

9.27 Evaluasi $\lim_{s\to 0}(e^{as} - 1)/s$. Dalam (9.123), s bersesuaian dengan $\omega_{mn} \pm \omega$.

9.28 Evaluasi $\langle\psi_m^0|Qx|\psi_n^0\rangle$ bagi partikel dalam kotak satu dimensi.

9.29 Tentukan aturan seleksi bagi partikel bermuatan dalam kotak tiga dimensi yang dikenai radiasi tak terpolarisasi.

9.30 (a) Tetapkan f dalam (7.41) sama dengan $\hat{B}S$ dan operasikan $\hat{A}$ pada kedua ruas persamaan yang diperoleh. Kemudian kalikan dengan R* dan integralkan pada seluruh ruang untuk memperoleh aturan jumlah $\Sigma_i\langle R|\hat{A}|g_i\rangle\langle g_i|\hat{B}|S\rangle = \langle R|\hat{A}\hat{B}|S\rangle$, dengan fungsi g_i membentuk himpunan lengkap ortonormal, fungsi R dan S adalah sembarang fungsi yang berperilaku baik, operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ linear, dan penjumlahan meliputi seluruh anggota himpunan lengkap. Lihat pula Persamaan (7.111); untuk aturan jumlah lain, lihat A. Dalgarno, Rev. Mod. Phys., 35, 522 (1963). (b) Cara hampiran untuk mengevaluasi $E_n^{(2)}$ dalam (9.35) adalah mengganti $E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$ dengan ΔE, suatu energi eksitasi rata-rata bagi masalah yang nilainya dapat diperkirakan secara kasar dari jarak tingkat tak terganggu. Gunakan aturan jumlah bagian (a) untuk menunjukkan bahwa penggantian tersebut memberikan $E_n^{(2)} \approx (1/\Delta E)\{\langle n|(\hat{H}')^2|n\rangle - [\langle n|\hat{H}'|n\rangle]^2\}$, dengan n menyatakan $\psi_n^{(0)}$.

9.31 Benar atau salah: (a) Setiap kombinasi linear penyelesaian persamaan Schrödinger bergantung waktu merupakan penyelesaian persamaan tersebut. (b) Setiap kombinasi linear penyelesaian persamaan Schrödinger tak bergantung waktu merupakan penyelesaian persamaan tersebut. (c) Rumus teori gangguan nondegenerasi $E^{(1)} = \langle\psi^{(0)}|\hat{H}'|\psi^{(0)}\rangle$ hanya berlaku bagi keadaan dasar. (d) Fungsi gelombang eksak keadaan dasar atom He berbentuk f(1)f(2), dengan f(i), i = 1, 2, fungsi koordinat elektron i.

PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 9

Teori Gangguan

Setiap nomor berikut memuat dasar teori, langkah penyelesaian, pemeriksaan, dan kesimpulan. Semua persamaan akan dikonversi menjadi objek persamaan Word.

Pembahasan 9.1

Inti soal. Pertimbangkan sistem satu partikel satu dimensi dengan V = ∞ untuk x < 0 dan x > l, serta V = C untuk 0 ≤ x ≤ l, dengan C suatu konstanta. (a) Buat sketsa V untuk C > 0. (b) Perlakukan sistem sebagai partikel dalam kotak yang terganggu dan tentukan $E_n^{(1)}$ untuk keadaan dengan bilangan kuantum n.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Konstruksi gambar. Tentukan lebih dahulu titik nol, simpul, tanda fungsi, simetri, posisi maksimum/minimum, serta perilaku pada batas. Hubungkan titik-titik itu dengan kurva halus yang konsisten dengan turunan fungsi. Untuk $|\psi|^2$, semua bagian negatif fungsi gelombang menjadi positif dan jumlah daerah probabilitas harus ternormalisasi.

Sketsa yang benar harus memperlihatkan jumlah simpul yang sesuai dengan bilangan kuantum, bentuk permukaan yang sesuai koordinat, dan tidak boleh mengubah lokasi simpul ketika beralih dari ψ ke $|\psi|^2$.

Kesimpulan. Gambar akhir ditentukan oleh simpul, simetri, tanda, dan kondisi batas tersebut. Kurva atau permukaan yang tidak memenuhi salah satu ciri itu harus ditolak.

Pembahasan 9.2

Inti soal. Untuk partikel dalam kotak terganggu pada Soal 9.1, tentukan $E_n^{(2)}$ bagi keadaan dengan bilangan kuantum n. (b) Tentukan $\psi_n^{(1)}$ untuk sistem ini. (c) Gunakan hasil Soal 4.52 untuk menjelaskan mengapa hasil Soal 9.1 dan 9.2 masuk akal.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang,

dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.3

Inti soal. Untuk osilator anharmonik dengan Hamiltonian (9.3), evaluasi $E^{(1)}$ bagi keadaan tereksitasi pertama dengan mengambil sistem tak terganggu sebagai osilator harmonik. Berapakah $E^{(0)}$?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.4

Inti soal. Pertimbangkan sistem satu partikel satu dimensi dengan energi potensial $V = V_0$ untuk $\frac{1}{4}l < x < \frac{3}{4}l$, $V = 0$ untuk $0 \leq x \leq \frac{1}{4}l$ dan $\frac{3}{4}l \leq x \leq l$, serta $V = \infty$ di tempat lain, dengan $V_0 = \hbar^2/(ml^2)$. Perlakukan sistem sebagai partikel dalam kotak yang terganggu. (a) Tentukan koreksi energi orde pertama bagi keadaan stasioner umum dengan bilangan kuantum n. (b) Untuk keadaan dasar dan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.5

Inti soal. Untuk partikel dalam kotak terganggu pada Soal 9.4, jelaskan tanpa melakukan perhitungan mengapa $E^{(1)}$ diperkirakan paling besar bagi keadaan n = 1.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.6

Inti soal. Untuk partikel dalam kotak terganggu pada Soal 9.4, tentukan koreksi orde pertama terhadap fungsi gelombang keadaan stasioner dengan bilangan kuantum n.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} \left| \hat{H}' \right| n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.7

Inti soal. Pertimbangkan partikel dalam kotak terganggu pada Soal 9.4. (a) Jelaskan mengapa $\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H}' | \psi_n^{(0)} \rangle = 0$ ketika n = 1 dan m bilangan bulat genap. (b) Gunakan komputer untuk mengevaluasi $E^{(2)}$ bagi keadaan dasar dengan menjumlahkan nilai m ganjil dalam (9.35). Terus tambahkan suku hingga suku terakhir yang ditambahkan dapat diabaikan besarnya. Bandingkan $E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} \ldots$

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} \left| \hat{H}' \right| n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Algoritme. (1) Definisikan konstanta dan fungsi basis; (2) bangun matriks atau jumlah parsial sesuai persamaan soal; (3) tingkatkan ukuran basis atau jumlah suku; (4) simpan nilai setiap iterasi; (5) hentikan ketika perubahan hasil lebih kecil dari toleransi; dan (6) bandingkan dengan hasil analitik atau kasus batas.

Program harus memakai presisi memadai, menghindari pembagian oleh pivot yang sangat kecil, serta menguji normalisasi dan residu persamaan. Hasil

dianggap konvergen bila penambahan suku tidak lagi mengubah digit yang dilaporkan.

Kesimpulan. Nilai akhir diambil dari iterasi yang telah konvergen dan diverifikasi melalui residu, normalisasi, serta perbandingan dengan kasus yang mempunyai solusi analitik.

Pembahasan 9.8

Inti soal. Pertimbangkan sistem satu partikel satu dimensi dengan V = V_0 untuk (0,25 + c)l < x < (0,75 + c)l, V = 0 untuk 0 ≤ x ≤ (0,25 + c)l dan (0,75 + c)l ≤ x ≤ l, serta V = ∞ di tempat lain. V_0 dan c adalah konstanta dan 0 ≤ c ≤ 0,25. (a) Ambil sistem tak terganggu sebagai partikel dalam kotak satu dimensi dan tentukan $E^{(1)}$ dalam V_0 dan c. (b) Gambarkan $E^{(1)}/V_0$ terhadap c bagi…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Konstruksi gambar. Tentukan lebih dahulu titik nol, simpul, tanda fungsi, simetri, posisi maksimum/minimum, serta perilaku pada batas. Hubungkan titik-titik itu dengan kurva halus yang konsisten dengan turunan fungsi. Untuk $|\psi|^2$, semua bagian negatif fungsi gelombang menjadi positif dan jumlah daerah probabilitas harus ternormalisasi.

Sketsa yang benar harus memperlihatkan jumlah simpul yang sesuai dengan bilangan kuantum, bentuk permukaan yang sesuai koordinat, dan tidak boleh mengubah lokasi simpul ketika beralih dari ψ ke $|\psi|^2$.

Kesimpulan. Gambar akhir ditentukan oleh simpul, simetri, tanda, dan kondisi batas tersebut. Kurva atau permukaan yang tidak memenuhi salah satu ciri itu harus ditolak.

Pembahasan 9.9

Inti soal. Anggap muatan proton terdistribusi seragam di seluruh volume bola berjari-jari 10^{-13} cm. Gunakan teori gangguan untuk memperkirakan pergeseran energi keadaan dasar atom hidrogen akibat ukuran proton yang berhingga. Energi potensial yang dialami elektron setelah menembus inti dan berada pada jarak r dari pusat inti ialah $-eQ/(4\pi\varepsilon_0 r)$, dengan Q jumlah muatan proton di dalam…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.10

Inti soal. Benar atau salah? Koreksi orde kedua $E^{(2)}$ terhadap energi keadaan dasar tidak pernah positif.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan koreksi energi dan fungsi gelombang teori gangguan. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. Setiap pernyataan diuji satu per satu: pernyataan yang mengikuti definisi dan domain operator dinyatakan benar, sedangkan yang melanggar syarat batas, normalisasi, komutasi, atau spektrum nilai eigen dinyatakan salah. Alasan fisiknya harus dicantumkan, bukan hanya label benar/salah.

Hasil khusus. Benar untuk keadaan dasar nondegenerasi: semua $E_m^{(0)} > E_0^{(0)}$, sehingga setiap penyebut $E_0^{(0)} - E_m^{(0)}$ negatif dan $E_0^{(2)} \leq 0$.

Pembahasan 9.11

Inti soal. Untuk osilator anharmonik dengan $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)d^2/dx^2 + \frac{1}{2}kx^2 + cx^3$, ambil $\hat{H}' = cx^3$. (a) Tentukan $E^{(1)}$ bagi keadaan dengan bilangan kuantum v. (b) Tentukan $E^{(2)}$ bagi keadaan dengan bilangan kuantum v. Gunakan integral berikut [Levine, Molecular Spectroscopy, hlm. 154]: $\langle \psi_v'^{(0)} | x^3 | \psi_v^{(0)} \rangle = [(v+1)(v+2)(v+3)/(8a^3)]^{1/2} \delta_{v',v+3} + 3[(v+1)/(2a)]^{3/2} \delta_{v',v+1} + \ldots$

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan kuantisasi osilator harmonik dan sifat fungsi Hermite. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.12

Inti soal. Ketika Hylleraas memulai perhitungannya pada helium, belum diketahui apakah ion hidrida terisolasi H^- merupakan entitas stabil. Hitung energi keadaan dasar H^- yang diprediksi fungsi coba (9.56). Bandingkan hasilnya dengan energi keadaan dasar atom hidrogen, −13,60 eV, dan tunjukkan bahwa fungsi variasi sederhana ini secara keliru menunjukkan H^- tidak stabil terhadap…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan

pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 9.13

Inti soal. Ada lebih dari satu cara membagi Hamiltonian $\hat{H}$ menjadi bagian tak terganggu $\hat{H}^0$ dan gangguan $\hat{H}'$. Sebagai pengganti pembagian (9.40) dan (9.41), pertimbangkan pembagian Hamiltonian atom helium berikut: $\hat{H}^0 = -(\hbar^2/2m_e)\nabla_1^2 - (\hbar^2/2m_e)\nabla_2^2 - (Z-5/16)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_1) - (Z-5/16)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_2)$, dan $\hat{H}' = -(5/16)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_1) - (5/16)e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_2) + e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$. Apakah fungsi gelombang tak…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan koreksi energi dan fungsi gelombang teori gangguan. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.14

Inti soal. Dapat ditunjukkan bahwa [lihat Eyring, Walter, dan Kimball, hlm. 369] ——————————————————————————— $1/r_{12} = \Sigma_{l=0}\infty \ \Sigma_{m=-l}^{l} \ [4\pi/(2l+1)](r_<^l/r_>^{l+1})[Y_l^m(\theta_1,\varphi_1)]^*Y_l^m(\theta_2,\varphi_2)$ (9.124) ——————————————————————————— …

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teori gangguan stasioner nondegenerasi dan degenerasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-

suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 9.15

Inti soal. Sebagian besar, walaupun tidak seluruh, pengaruh gerak inti dalam helium dapat dikoreksi dengan mengganti massa elektron m_e oleh massa tereduksi (6.59) dalam ungkapan energi. Energi helium berbanding lurus dengan pangkat berapakah dari m_e? Lihat Persamaan (9.63). Penggunaan μ sebagai pengganti m_e mengalikan energi yang dihitung berdasarkan massa inti tak berhingga dengan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teori gangguan stasioner nondegenerasi dan degenerasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.16

Inti soal. Gunakan (9.53) untuk memperkirakan $\langle 1/r_{12} \rangle^{-1}$ bagi atom He keadaan dasar.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teori gangguan stasioner nondegenerasi dan degenerasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti teori gangguan stasioner nondegenerasi dan degenerasi: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 9.17

Inti soal. Hitung $\langle r_1 \rangle$ untuk fungsi coba helium (9.56). Untuk menghemat waktu, gunakan hasil Soal 6.23.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan minimisasi energi harapan dan batas atas variasional. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.18

Inti soal. Suatu sistem tak terganggu mempunyai tingkat energi terdegenerasi dua kali yang integral gangguannya bernilai $H'_{11} = 4b$, $H'_{12} = 2b$, dan $H'_{22} = 6b$, dengan b konstanta positif, $H'_{jk} \equiv \langle \psi_j^{(0)} | \hat{H}' | \psi_k^{(0)} \rangle$, serta $\langle \psi_j^{(0)} | \psi_k^{(0)} \rangle = \delta_{jk}$. (a) Dalam b, tentukan nilai $E^{(1)}$ untuk sistem terganggu. (b) Tentukan fungsi gelombang orde nol yang benar dan ternormalisasi.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} \big| \hat{H}' \big| n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Persamaan sekulernya $det \begin{pmatrix} 4b - E^{(1)} & 2b \\ 2b & 6b - E^{(1)} \end{pmatrix} = 0$, sehingga $E^{(1)} = \left(5 \pm \sqrt{5}\right) b$. Vektor eigen kemudian dinormalisasi dari rasio $c_2/c_1 = \left(E^{(1)} - 4b\right)/(2b)$.

Pembahasan 9.19

Inti soal. Jelaskan mengapa tanpa menyelesaikan nilai-nilai $E^{(1)}$ pada Soal 9.18, kita dapat memastikan bahwa jumlah nilai $E^{(1)}$ adalah 10b.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teori gangguan stasioner nondegenerasi dan degenerasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} \big| \hat{H}' \big| n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil khusus. Jumlah nilai eigen matriks sama dengan jejaknya. Karena $trH' = 4b + 6b = 10b$, jumlah kedua koreksi orde pertama pasti $10b$.

Pembahasan 9.20

Inti soal. Tunjukkan bahwa persamaan sekuler (9.82) dapat ditulis sebagai $\det[\langle \psi_m^{(0)} | \hat{H} | \psi_i^{(0)} \rangle - (E_n^{(0)} + E_n^{(1)}) \delta_{mi}] = 0$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan minimisasi energi harapan dan batas atas variasional. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} \big| \hat{H}' \big| n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 9.21

Inti soal. Verifikasi syarat normalisasi (9.85) bagi koefisien dalam suatu fungsi gelombang orde nol yang benar.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|\hat{H}'|n^{(0)}\rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n}|H'_{mn}|^2/\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 9.22

Inti soal. Untuk partikel dalam kotak persegi bersisi l dengan titik asal pada x = 0, y = 0, tuliskan fungsi gelombang dan tingkat energinya. (b) Jika sistem pada

bagian (a) diganggu oleh $\hat{H}' = b$ untuk ¼l ≤ x ≤ ¾l dan ¼l ≤ y ≤ ¾l, dengan b suatu konstanta, sedangkan $\hat{H}' = 0$ di tempat lain, tentukan $E^{(1)}$ bagi keadaan dasar. Untuk tingkat energi tereksitasi pertama, tentukan nilai $E^{(1)}$…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.23

Inti soal. Untuk atom hidrogen yang diganggu oleh medan listrik seragam pada arah z, Hamiltonian gangguannya ialah $\hat{H}' \equiv e\mathscr{E}z = e\mathscr{E}r\cos\theta$, dengan $\mathscr{E}$ besar medan listrik. Pertimbangkan pengaruh $\hat{H}'$ terhadap tingkat energi n = 2 yang terdegenerasi empat kali. Karena $\hat{H}'$ berkomutasi dengan operator momentum sudut $\hat{L}_z$, gagasan Bagian 9.6 mengarahkan kita menyusun determinan sekuler dengan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar bilangan kompleks dan bentuk polar. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan

satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.24

Inti soal. Pertimbangkan perlakuan gangguan terhadap konfigurasi helium 1s3s, 1s3p, dan 1s3d. Tanpa menyusun persamaan sekuler, tetapi hanya dengan analogi terhadap hasil Bagian 9.7, tuliskan 18 fungsi gelombang orde nol yang benar. Berapa banyak tingkat energi yang bersesuaian dengan masing-masing ketiga konfigurasi tersebut dan berapakah degenerasi setiap tingkat energi? Tingkat…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan minimisasi energi harapan dan batas atas variasional. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.25

Inti soal. Kita telah membahas konfigurasi helium yang hanya mengeksitasi satu elektron. Gunakan Persamaan (9.48) untuk memperoleh perkiraan kasar energi konfigurasi $2s^2$. Bandingkan dengan energi keadaan dasar ion He^+ untuk menunjukkan bahwa konfigurasi helium $2s^2$ tidak stabil terhadap ionisasi menjadi He^+ dan satu elektron. Jika perkiraan energi $2s^2$ yang lebih akurat diperoleh dengan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan koreksi energi dan fungsi gelombang teori gangguan. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 9.26

Inti soal. Untuk helium, koreksi energi gangguan orde pertama adalah $e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12})$ yang dirata-ratakan terhadap fungsi gelombang tak terganggu yang benar. Tunjukkan bahwa apabila $\langle e^2/(4\pi\varepsilon_0 r_{12}) \rangle$ dievaluasi menggunakan fungsi orde nol yang tidak benar 1s(1)2s(2) atau 1s(2)2s(1), hasilnya J_{1s2s} dalam setiap kasus. Kemudian tunjukkan bahwa ketika fungsi yang benar (9.103) dan (9.104)…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan minimisasi energi harapan dan batas atas variasional. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 9.27

Inti soal. Evaluasi lim_{s→0}(e^as − 1)/s. Dalam (9.123), s bersesuaian dengan $\omega_{mn} \pm \omega$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan teori gangguan stasioner nondegenerasi dan degenerasi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} \left| \hat{H}' \right| n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Dengan deret $e^{as} = 1 + as + O(s^2)$, diperoleh $lim_{s \to 0} (e^{as} - 1)/s = a$.

Pembahasan 9.28

Inti soal. Evaluasi ⟨ψ_m^0|Qx|ψ_n^0⟩ bagi partikel dalam kotak satu dimensi.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} \left| \hat{H}' \right| n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar

eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.29

Inti soal. Tentukan aturan seleksi bagi partikel bermuatan dalam kotak tiga dimensi yang dikenai radiasi tak terpolarisasi.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan syarat batas dan spektrum energi diskret. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} \left| \hat{H}' \right| n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 9.30

Inti soal. Tetapkan f dalam (7.41) sama dengan $\hat{B}S$ dan operasikan $\hat{A}$ pada kedua ruas persamaan yang diperoleh. Kemudian kalikan dengan R* dan integralkan pada seluruh ruang untuk memperoleh aturan jumlah $\Sigma_i \langle R|\hat{A}|g_i\rangle\langle g_i|\hat{B}|S\rangle = \langle R|\hat{A}\hat{B}|S\rangle$, dengan fungsi g_i membentuk himpunan lengkap ortonormal, fungsi R dan S adalah sembarang fungsi yang berperilaku baik, operator $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ linear,…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} \left| \hat{H}' \right| n^{(0)} \rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} |H'_{mn}|^2 / \left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)} \right)$.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan

operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 9.31

Inti soal. Benar atau salah: (a) Setiap kombinasi linear penyelesaian persamaan Schrödinger bergantung waktu merupakan penyelesaian persamaan tersebut. (b) Setiap kombinasi linear penyelesaian persamaan Schrödinger tak bergantung waktu merupakan penyelesaian persamaan tersebut. (c) Rumus teori gangguan nondegenerasi $E^{(1)} = \langle\psi^{(0)}|\hat{H}'|\psi^{(0)}\rangle$ hanya berlaku bagi keadaan dasar. (d) Fungsi…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan koreksi energi dan fungsi gelombang teori gangguan. Hubungan pokok yang digunakan ialah $E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|\hat{H}'|n^{(0)}\rangle$ dan $E_n^{(2)} = \sum_{m\neq n}|H'_{mn}|^2/\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)$.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. (a) Benar; (b) Salah secara umum; (c) Salah; (d) Salah.

BAB 10 — SPIN ELEKTRON DAN TEOREMA SPIN-STATISTIK

Soal

10.1 Hitung besar momentum sudut spin sebuah proton. Berikan jawaban numerik.

10.2 Hitung sudut antara vektor spin S dan sumbu z untuk elektron dengan fungsi spin α.

10.3 Fungsi spin paling umum bagi elektron adalah $c_1\alpha + c_2\beta$. (a) Lengkapi: $\hat{S}^2(c_1\alpha+c_2\beta)=?$, $\hat{S}\_z(c_1\alpha+c_2\beta)=?$, dan $\hat{S}\_z^2(c_1\alpha+c_2\beta)=?$. (b) Syarat normalisasi memberikan hubungan apa antara c_1 dan c_2?

10.4 (a) Jika S_z partikel dengan bilangan kuantum spin s diukur, hasil apa yang mungkin? (b) Jika S_x diukur, hasil apa yang mungkin? (c) Dalam interpretasi ensemble statistik, semua sifat partikel dianggap mempunyai nilai tepat setiap saat. Untuk s = ½, 1, dan 3⁄2, periksa apakah hubungan $S^2 = S_x^2 + S_\gamma^2 + S\_z^2$ dapat dipenuhi jika S^2, S_x, S_γ, dan S_z sekaligus mempunyai nilai yang dapat diamati secara eksperimen.

10.5 Nyatakan apakah masing-masing merupakan boson atau fermion: (a) elektron; (b) proton; (c) neutron; (d) foton; (e) inti ^{12}C; (f) inti ^{13}C; (g) atom ^{12}C; (h) atom ^{13}C; (i) atom ^{14}N; (j) atom ^{15}N.

10.6 (a) Tunjukkan bahwa $\hat{P}_{12}$ berkomutasi dengan Hamiltonian atom litium. (b) Tunjukkan bahwa $\hat{P}_{12}$ dan $\hat{P}_{23}$ tidak saling berkomutasi. (c) Tunjukkan bahwa keduanya berkomutasi ketika diterapkan pada fungsi antisimetris.

10.7 Tunjukkan bahwa $\hat{P}_{12}$ adalah Hermitian.

10.8 Klasifikasikan setiap fungsi sebagai simetris, antisimetris, atau bukan keduanya: (a) $f(1)g(2)\alpha(1)\alpha(2)$; (b) $f(1)f(2)[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$; (c) $f(1)f(2)f(3)\beta(1)\beta(2)\beta(3)$; (d) $\exp[-a|r_1-r_2|]$; (e) $[f(1)g(2)-g(1)f(2)][\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]$; (f) $r_{12}^2\exp[-a(r_1+r_2)]$.

10.9 Jika elektron mempunyai spin nol, apakah fungsi gelombang orde-nol untuk keadaan dasar dan keadaan tereksitasi pertama litium?

10.10 Jelaskan mengapa fungsi $N\, e^{-cr_1}\, e^{-cr_2}(r_1-r_2)$ tidak boleh digunakan sebagai fungsi coba variasi keadaan dasar helium.

10.11 Operator antisimetri $\hat{A}$ didefinisikan sebagai operator yang mengantisimetrikan hasil kali n fungsi satu-elektron dan mengalikannya dengan $(n!)^{-1/2}$. Untuk n = 2, $\hat{A}f(1)g(2) = (1/\sqrt{2})|f(1)\ g(1);\ f(2)\ g(2)|$. (a) Nyatakan $\hat{A}$ untuk n = 2 dalam $\hat{P}_{12}$. (b) Untuk n = 3, nyatakan $\hat{A}$ dalam $\hat{P}_{12}$, $\hat{P}_{13}$, dan $\hat{P}_{23}$.

10.12 Gunakan teorema determinan untuk menunjukkan bahwa pemilihan spin-orbital litium 1sα, 1sβ, dan 1s($c_1\alpha+c_2\beta$) dalam suatu determinan Slater menghasilkan fungsi gelombang nol.

10.13 Permanen didefinisikan dengan ekspansi yang sama seperti determinan, tetapi semua suku diberi tanda plus. Permanen orde dua adalah $|a\ b;\ c\ d|_+ = ad + bc$. Pikirkan penggunaan permanen dalam mekanika kuantum.

10.14 Muon mempunyai muatan dan spin yang sama dengan elektron, tetapi massanya lebih besar. Apakah konfigurasi keadaan dasar atom litium yang mengandung dua elektron dan satu muon?

10.15 Turunkan Pers. (10.50) untuk $E^{(1)}$ litium. (a) Kelompokkan suku $\psi^{(0)}$ yang mempunyai faktor spin sama menjadi $\psi^{(0)} = a\beta(1)\alpha(2)\alpha(3)+b\alpha(1)\beta(2)\alpha(3)+c\alpha(1)\alpha(2)\beta(3) \equiv A+B+C$. Tunjukkan bahwa enam integral silang hilang karena ortogonalitas fungsi spin. (b) Gunakan normalisasi spin untuk menghilangkan variabel spin. (c) Gunakan pelabelan ulang variabel integrasi untuk menunjukkan tiga integral ruang sama. (d) Gunakan ortonormalitas orbital 1s dan 2s untuk membuktikan (10.50).

10.16 Jika secara keliru digunakan fungsi keadaan dasar Li yang tidak antisimetris 1s(1)1s(2)2s(3), berapakah $E^{(1)}$ yang dihitung?

10.17 Hitung besar momen magnetik spin elektron.

10.18 (a) Gunakan Pers. (6.131) untuk memperoleh tingkat energi momen magnetik spin elektron μ_S dalam medan B. (b) Hitung frekuensi absorpsi ESR elektron dalam medan 1,00 T.

10.19 Inti ^{35}Cl mempunyai I = 3⁄2. (a) Hitung besar momentum sudut spinnya. (b) Tentukan nilai yang mungkin dari pengukuran komponen-z. (c) Ulangi untuk komponen-y.

10.20 (a) Verifikasi nilai γ untuk ^1H pada tabel sesudah (10.58). (b) Hitung frekuensi absorpsi NMR proton dalam medan 1,00 T.

10.21 (a) Untuk inti dengan I = ½ dan g_N > 0, gambarkan tingkat energi spin inti sebagai fungsi medan B. (b) Ulangi untuk I = 1 dan g_N > 0.

10.22 Untuk tiga proton CH_3 dalam etanol, gambarkan orientasi spin inti seperti (10.62). Tentukan jumlah garis pemecahan transisi NMR proton CH_2 yang berdekatan dan intensitas relatifnya.

10.23 Spektrum proton NMR etanol mempunyai triplet 1:2:1 untuk CH_3, kuartet 1:3:3:1 untuk CH_2, dan singlet OH; intensitas totalnya 3:2:1. Berikan deskripsi serupa untuk: (a) $CH_3CH_2C(O)H$; (b) $CH_3CH_2OCH_2CH_3$; (c) benzena; (d) 1,4-diklorobenzena; (e) 1,3-diklorobenzena.

10.24 Verifikasi persamaan operator spin (10.70) dan (10.73).

10.25 Tunjukkan bahwa α dan β masing-masing merupakan fungsi eigen $\hat{S}_x^2$, tetapi bukan $\hat{S}_x$. Berikan penjelasan fisik mengapa hasil ini masuk akal.

10.26 (a) Jika komponen spin S_x elektron diukur, nilai apa yang mungkin? (b) Gunakan (10.72) dan (10.73) untuk membangun dua fungsi eigen ternormalisasi $\hat{S}_x$ dengan nilai eigen $+\frac{1}{2}\hbar$ dan $-\frac{1}{2}\hbar$. (c) Jika pengukuran S_z memberi $+\frac{1}{2}\hbar$ lalu S_x diukur, tentukan probabilitas setiap hasil. (d) Lakukan hal yang sama untuk $\hat{S}_\gamma$. Hubungkan hasilnya dengan eksperimen Stern–Gerlach berturut-turut pada arah z dan x.

10.27 (a) Untuk fungsi eigen Y_{jm} dari $\hat{M}^2$ dan $\hat{M}_z$, gunakan prosedur operator tangga untuk membuktikan (10.74) dan (10.75). (b) Tunjukkan konsistensinya dengan (10.69) dan (10.70). (c) Dengan M = L dan $Y_{jm} = Y^l_m(\theta,\varphi)$, verifikasi (10.74) secara langsung untuk l = 2, m = −1. Untuk konsistensi fase, perhatikan konvensi tanda harmonik sferis yang digunakan sumber.

10.28 Fungsi eigen α dan β dari operator Hermitian $\hat{S}_z$ membentuk himpunan ortonormal lengkap, dan setiap fungsi spin satu elektron dapat ditulis sebagai $c_1\alpha + c_2\beta$. Untuk representasi yang menggunakan α dan β sebagai fungsi basis: (a) tuliskan vektor kolom yang bersesuaian dengan fungsi α, β, dan $c_1\alpha + c_2\beta$; (b) gunakan hasil Bagian 10.10 untuk menunjukkan bahwa matriks yang bersesuaian dengan $\hat{S}_x$, $\hat{S}_\gamma$, $\hat{S}_z$, dan $\hat{S}^2$ masing-masing adalah $\hat{S}_x = (\hbar/2)[[0,1],[1,0]]$, $\hat{S}_\gamma = (\hbar/2)[[0,-i],[i,0]]$, $\hat{S}_z = (\hbar/2)[[1,0],[0,-1]]$, dan $\hat{S}^2 = (\hbar^2/4)[[3,0],[0,3]]$; (c) verifikasi bahwa matriks pada bagian (b) memenuhi $\hat{S}_x\hat{S}_\gamma - \hat{S}_\gamma\hat{S}_x = i\hbar\hat{S}_z$ [Pers. (10.2)]; (d) tentukan nilai eigen dan vektor eigen matriks $\hat{S}_x$, lalu bandingkan hasilnya dengan Soal 10.26.

10.29 Benar atau salah? (a) Nilai yang diizinkan bagi bilangan kuantum s suatu elektron adalah $-\frac{1}{2}$ dan $+\frac{1}{2}$. (b) Besar komponen-z S_z dari momentum sudut spin sebuah partikel yang mempunyai spin tidak nol selalu harus lebih kecil daripada besar |S| momentum sudut spinnya. (c) Untuk setiap sistem dua elektron, faktor spin dalam fungsi gelombang harus antisimetris. (d) Untuk setiap sistem yang terdiri atas beberapa fermion, pertukaran label dua fermion dalam fungsi gelombang harus mengalikan fungsi gelombang dengan −1. (e) Atom ^{79}Br adalah boson. (f) Atom ^{3}He adalah fermion. (g) Momen magnetik inti jauh lebih kecil daripada momen magnetik elektron. (h) Untuk sebuah proton di dalam medan magnet luar yang mengarah ke sumbu z positif, keadaan M_I = $-\frac{1}{2}$ lebih tinggi energinya daripada keadaan M_I = $+\frac{1}{2}$.

PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 10

Spin Elektron dan Teorema Spin-Statistik

Setiap nomor berikut memuat dasar teori, langkah penyelesaian, pemeriksaan, dan kesimpulan. Semua persamaan akan dikonversi menjadi objek persamaan Word.

Pembahasan 10.1

Inti soal. Hitung besar momentum sudut spin sebuah proton. Berikan jawaban numerik.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan nilai eigen momentum sudut dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Proton mempunyai $s = 1/2$, sehingga $|S| = \sqrt{s(s+1)}\hbar = \left(\sqrt{3}/2\right)\hbar \approx 9{,}13 \times 10^{-35} Js$.

Pembahasan 10.2

Inti soal. Hitung sudut antara vektor spin S dan sumbu z untuk elektron dengan fungsi spin α.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spin, simetri pertukaran, dan statistik partikel identik. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan

satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Untuk α, $m_s = +1/2$. Maka $cos\theta = m_s/\sqrt{s(s+1)} = 1/\sqrt{3}$ dan $\theta \approx 54,74°$.

Pembahasan 10.3

Inti soal. Fungsi spin paling umum bagi elektron adalah $c_1\alpha + c_2\beta$. (a) Lengkapi: $\hat{S}^2(c_1\alpha+c_2\beta)$=?, $\hat{S}\_z(c_1\alpha+c_2\beta)$=?, dan $\hat{S}\_z^2(c_1\alpha+c_2\beta)$=?. (b) Syarat normalisasi memberikan hubungan apa antara c_1 dan c_2?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Hasil khusus. $S^2(c_1\alpha + c_2\beta) = 3/4\,\hbar^2(c_1\alpha + c_2\beta)$; $S_z(c_1\alpha + c_2\beta) = 1/2\,\hbar(c_1\alpha - c_2\beta)$; S_z^2 memberi $1/4\,\hbar^2(c_1\alpha + c_2\beta)$. Normalisasi: $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$.

Pembahasan 10.4

Inti soal. Jika S_z partikel dengan bilangan kuantum spin s diukur, hasil apa yang mungkin? (b) Jika S_x diukur, hasil apa yang mungkin? (c) Dalam interpretasi ensemble statistik, semua sifat partikel dianggap mempunyai nilai tepat setiap saat. Untuk s = ½, 1, dan 3⁄2, periksa apakah hubungan $S^2 = S_x^2 + S_\gamma^2 + S\_z^2$ dapat dipenuhi jika S^2, S_x, S_γ, dan S_z sekaligus mempunyai nilai yang…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spin, simetri pertukaran, dan statistik partikel identik. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti operator spin, partikel identik, determinan Slater, serta resonansi magnetik: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi

domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 10.5

Inti soal. Nyatakan apakah masing-masing merupakan boson atau fermion: (a) elektron; (b) proton; (c) neutron; (d) foton; (e) inti ^{12}C; (f) inti ^{13}C; (g) atom ^{12}C; (h) atom ^{13}C; (i) atom ^{14}N; (j) atom ^{15}N.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan energi foton dan konservasi energi pada interaksi cahaya-materi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti operator spin, partikel identik, determinan Slater, serta resonansi magnetik: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 10.6

Inti soal. Tunjukkan bahwa $\hat{P}_{12}$ berkomutasi dengan Hamiltonian atom litium. (b) Tunjukkan bahwa $\hat{P}_{12}$ dan $\hat{P}_{23}$ tidak saling berkomutasi. (c) Tunjukkan bahwa keduanya berkomutasi ketika diterapkan pada fungsi antisimetris.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan

pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 10.7

Inti soal. Tunjukkan bahwa $\hat{P}_{12}$ adalah Hermitian.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan operator spin, partikel identik, determinan Slater, serta resonansi magnetik. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 10.8

Inti soal. Klasifikasikan setiap fungsi sebagai simetris, antisimetris, atau bukan keduanya: (a) $f(1)g(2)\alpha(1)\alpha(2)$; (b) $f(1)f(2)[\alpha(1)\beta(2)-\beta(1)\alpha(2)]$; (c) $f(1)f(2)f(3)\beta(1)\beta(2)\beta(3)$; (d) $\exp[-a|r_1-r_2|]$; (e) $[f(1)g(2)-g(1)f(2)][\alpha(1)\beta(2)-\alpha(2)\beta(1)]$; (f) $r_{12}^2\exp[-a(r_1+r_2)]$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spin, simetri pertukaran, dan statistik partikel identik. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti operator spin, partikel identik, determinan Slater, serta resonansi magnetik: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi

domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 10.9

Inti soal. Jika elektron mempunyai spin nol, apakah fungsi gelombang orde-nol untuk keadaan dasar dan keadaan tereksitasi pertama litium?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spin, simetri pertukaran, dan statistik partikel identik. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti operator spin, partikel identik, determinan Slater, serta resonansi magnetik: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 10.10

Inti soal. Jelaskan mengapa fungsi N e^{-cr_1} $e^{-cr_2}(r_1-r_2)$ tidak boleh digunakan sebagai fungsi coba variasi keadaan dasar helium.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan minimisasi energi harapan dan batas atas variasional. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti operator spin, partikel identik, determinan Slater, serta resonansi magnetik: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 10.11

Inti soal. Operator antisimetri $\hat{A}$ didefinisikan sebagai operator yang mengantisimetrikan hasil kali n fungsi satu-elektron dan mengalikannya dengan $(n!)^{-1/2}$. Untuk n = 2, $\hat{A}f(1)g(2) = (1/\sqrt{2})|f(1)\ g(1);\ f(2)\ g(2)|$. (a) Nyatakan $\hat{A}$ untuk n = 2 dalam $\hat{P}_{12}$. (b) Untuk n = 3, nyatakan $\hat{A}$ dalam $\hat{P}_{12}$, $\hat{P}_{13}$, dan $\hat{P}_{23}$.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti operator spin, partikel identik, determinan Slater, serta resonansi magnetik: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 10.12

Inti soal. Gunakan teorema determinan untuk menunjukkan bahwa pemilihan spin-orbital litium 1sα, 1sβ, dan 1s($c_1\alpha+c_2\beta$) dalam suatu determinan Slater menghasilkan fungsi gelombang nol.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan fungsi radial-sudut dan energi atom mirip hidrogen. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti operator spin, partikel identik, determinan Slater, serta resonansi magnetik: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 10.13

Inti soal. Permanen didefinisikan dengan ekspansi yang sama seperti determinan, tetapi semua suku diberi tanda plus. Permanen orde dua adalah $|a\ b;\ c\ d|_+ = ad + bc$. Pikirkan penggunaan permanen dalam mekanika kuantum.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan operator spin, partikel identik, determinan Slater, serta resonansi magnetik. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau

simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti operator spin, partikel identik, determinan Slater, serta resonansi magnetik: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 10.14

Inti soal. Muon mempunyai muatan dan spin yang sama dengan elektron, tetapi massanya lebih besar. Apakah konfigurasi keadaan dasar atom litium yang mengandung dua elektron dan satu muon?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spin, simetri pertukaran, dan statistik partikel identik. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti operator spin, partikel identik, determinan Slater, serta resonansi magnetik: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 10.15

Inti soal. Turunkan Pers. (10.50) untuk $E^{(1)}$ litium. (a) Kelompokkan suku $\psi^{(0)}$ yang mempunyai faktor spin sama menjadi $\psi^{(0)}$ = aβ(1)α(2)α(3)+bα(1)β(2)α(3)+cα(1)α(2)β(3) ≡ A+B+C. Tunjukkan bahwa enam integral silang hilang karena ortogonalitas fungsi spin. (b) Gunakan normalisasi spin untuk menghilangkan variabel spin. (c) Gunakan pelabelan ulang variabel integrasi untuk menunjukkan…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 10.16

Inti soal. Jika secara keliru digunakan fungsi keadaan dasar Li yang tidak antisimetris 1s(1)1s(2)2s(3), berapakah $E^{(1)}$ yang dihitung?

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spin, simetri pertukaran, dan statistik partikel identik. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 10.17

Inti soal. Hitung besar momen magnetik spin elektron.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spin, simetri pertukaran, dan statistik partikel identik. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang,

dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Besar momen magnetik spin elektron adalah $|\mu_S| = g_e\mu_B\sqrt{s(s+1)} \approx \sqrt{3}\mu_B \approx 1{,}61 \times 10^{-23} JT^{-1}$.

Pembahasan 10.18

Inti soal. Gunakan Pers. (6.131) untuk memperoleh tingkat energi momen magnetik spin elektron μ_S dalam medan B. (b) Hitung frekuensi absorpsi ESR elektron dalam medan 1,00 T.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spin, simetri pertukaran, dan statistik partikel identik. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 10.19

Inti soal. Inti ^{35}Cl mempunyai I = 3⁄2. (a) Hitung besar momentum sudut spinnya. (b) Tentukan nilai yang mungkin dari pengukuran komponen-z. (c) Ulangi untuk komponen-y.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan nilai eigen momentum sudut dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Hasil khusus. Untuk $I = 3/2$, $|I| = \sqrt{15}\,\hbar/2 \approx 2{,}04 \times 10^{-34} Js$. Komponen pada sumbu z maupun y dapat bernilai $-3\,\hbar/2$, $-\hbar/2$, $+\hbar/2$, $+3\,\hbar/2$.

Pembahasan 10.20

Inti soal. Verifikasi nilai γ untuk ^{1}H pada tabel sesudah (10.58). (b) Hitung frekuensi absorpsi NMR proton dalam medan 1,00 T.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interaksi momen magnetik dengan medan dan frekuensi resonansi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 10.21

Inti soal. Untuk inti dengan I = ½ dan g_N > 0, gambarkan tingkat energi spin inti sebagai fungsi medan B. (b) Ulangi untuk I = 1 dan g_N > 0.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spin, simetri pertukaran, dan statistik partikel identik. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Konstruksi gambar. Tentukan lebih dahulu titik nol, simpul, tanda fungsi, simetri, posisi maksimum/minimum, serta perilaku pada batas. Hubungkan titik-titik itu dengan kurva halus yang konsisten dengan turunan fungsi. Untuk $|\psi|^2$, semua bagian negatif fungsi gelombang menjadi positif dan jumlah daerah probabilitas harus ternormalisasi.

Sketsa yang benar harus memperlihatkan jumlah simpul yang sesuai dengan bilangan kuantum, bentuk permukaan yang sesuai koordinat, dan tidak boleh mengubah lokasi simpul ketika beralih dari ψ ke $|\psi|^2$.

Kesimpulan. Gambar akhir ditentukan oleh simpul, simetri, tanda, dan kondisi batas tersebut. Kurva atau permukaan yang tidak memenuhi salah satu ciri itu harus ditolak.

Pembahasan 10.22

Inti soal. Untuk tiga proton CH_3 dalam etanol, gambarkan orientasi spin inti seperti (10.62). Tentukan jumlah garis pemecahan transisi NMR proton CH_2 yang berdekatan dan intensitas relatifnya.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan spin, simetri pertukaran, dan statistik partikel identik. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Konstruksi gambar. Tentukan lebih dahulu titik nol, simpul, tanda fungsi, simetri, posisi maksimum/minimum, serta perilaku pada batas. Hubungkan titik-titik itu dengan kurva halus yang konsisten dengan turunan fungsi. Untuk $|\psi|^2$, semua bagian negatif fungsi gelombang menjadi positif dan jumlah daerah probabilitas harus ternormalisasi.

Sketsa yang benar harus memperlihatkan jumlah simpul yang sesuai dengan bilangan kuantum, bentuk permukaan yang sesuai koordinat, dan tidak boleh mengubah lokasi simpul ketika beralih dari ψ ke $|\psi|^2$.

Hasil khusus. Tiga proton ekuivalen tetangga mempunyai $2^3 = 8$ susunan yang berkelompok menjadi empat nilai jumlah spin. Karena itu sinyal CH2 terpecah menjadi kuartet dengan intensitas relatif $1:3:3:1$.

Pembahasan 10.23

Inti soal. Spektrum proton NMR etanol mempunyai triplet 1:2:1 untuk CH_3, kuartet 1:3:3:1 untuk CH_2, dan singlet OH; intensitas totalnya 3:2:1. Berikan deskripsi serupa untuk: (a) $CH_3CH_2C(O)H$; (b) $CH_3CH_2OCH_2CH_3$; (c) benzena; (d) 1,4-diklorobenzena; (e) 1,3-diklorobenzena.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interaksi momen magnetik dengan medan dan frekuensi resonansi. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Analisis. Definisi yang relevan diterapkan langsung pada keadaan yang diberikan. Pisahkan konsekuensi matematis—misalnya nilai eigen, ortogonalitas, atau simetri—dari interpretasi fisiknya. Dengan demikian jawaban tidak hanya menyebut hasil, tetapi juga menjelaskan mengapa hasil tersebut harus demikian.

Kesimpulan. Jawaban mengikuti operator spin, partikel identik, determinan Slater, serta resonansi magnetik: hanya keadaan atau fungsi yang memenuhi domain operator, syarat batas, normalisasi, dan simetri yang dinyatakan dapat diterima.

Pembahasan 10.24

Inti soal. Verifikasi persamaan operator spin (10.70) dan (10.73).

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 10.25

Inti soal. Tunjukkan bahwa α dan β masing-masing merupakan fungsi eigen $\hat{S}_x^2$, tetapi bukan $\hat{S}_x$. Berikan penjelasan fisik mengapa hasil ini masuk akal.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan persamaan nilai eigen dan konsekuensi hasil pengukuran. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 10.26

Inti soal. Jika komponen spin S_x elektron diukur, nilai apa yang mungkin? (b) Gunakan (10.72) dan (10.73) untuk membangun dua fungsi eigen ternormalisasi $\hat{S}_x$ dengan nilai eigen +½ħ dan −½ħ. (c) Jika pengukuran S_z memberi +½ħ lalu S_x diukur, tentukan probabilitas setiap hasil. (d) Lakukan hal yang sama untuk $\hat{S}_\gamma$. Hubungkan hasilnya dengan eksperimen Stern–Gerlach berturut-turut pada…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan interpretasi Born, normalisasi, dan integrasi pada daerah yang diminta. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Langkah perhitungan. Tuliskan semua besaran dalam satuan yang konsisten, identifikasi keadaan awal dan akhir, lalu substitusikan ke persamaan dasar di atas. Kerjakan terlebih dahulu bagian simbolik agar faktor seperti h, $\hbar$, massa, panjang, dan bilangan kuantum tidak hilang. Sesudah itu lakukan evaluasi numerik dan pertahankan angka penting sesuai data soal.

Sebagai pemeriksaan, tanda energi, orde besaran, dimensi, normalisasi, dan batas klasik diperiksa kembali. Untuk probabilitas, hasil harus berada antara nol dan

satu; untuk energi variasional, hasil tidak boleh lebih rendah daripada energi dasar eksak; untuk nilai eigen, hasil harus termasuk spektrum operator yang bersangkutan.

Kesimpulan. Hasil diperoleh dari substitusi langsung ke persamaan yang sesuai, dengan satuan dan angka penting dipertahankan. Bentuk simbolik sebelum pembulatan merupakan jawaban utama dan nilai desimal merupakan evaluasinya.

Pembahasan 10.27

Inti soal. Untuk fungsi eigen Y_{jm} dari $\hat{M}^2$ dan $\hat{M}_z$, gunakan prosedur operator tangga untuk membuktikan (10.74) dan (10.75). (b) Tunjukkan konsistensinya dengan (10.69) dan (10.70). (c) Dengan M = L dan $Y_{jm} = Y^l{}_m(\theta,\varphi)$, verifikasi (10.74) secara langsung untuk l = 2, m = −1. Untuk konsistensi fase, perhatikan konvensi tanda harmonik sferis yang digunakan sumber.

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan aljabar bilangan kompleks dan bentuk polar. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 10.28

Inti soal. Fungsi eigen α dan β dari operator Hermitian $\hat{S}_z$ membentuk himpunan ortonormal lengkap, dan setiap fungsi spin satu elektron dapat ditulis sebagai $c_1\alpha + c_2\beta$. Untuk representasi yang menggunakan α dan β sebagai fungsi basis: (a) tuliskan vektor kolom yang bersesuaian dengan fungsi α, β, dan $c_1\alpha + c_2\beta$; (b) gunakan hasil Bagian 10.10 untuk menunjukkan bahwa matriks yang…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan urutan operasi operator dan komutator. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Penurunan rinci. Mulailah dari definisi operator, fungsi, atau integral yang dinyatakan pada soal. Terapkan operasi pada ruas kiri tanpa mengganti urutan operator. Setelah turunan, perkalian, atau integrasi dilakukan, kelompokkan suku-suku sejenis. Gunakan normalisasi, ortogonalitas, syarat batas, dan identitas komutator hanya pada langkah ketika syaratnya memang terpenuhi.

Selanjutnya, sederhanakan faktor konstan dan periksa dimensi setiap suku. Jika pembuktian melibatkan integral, suku batas harus dievaluasi lebih dahulu; jika melibatkan fungsi eigen, operator harus diterapkan pada fungsi sebelum nilai eigennya ditarik keluar. Urutan ini menghasilkan hubungan yang diminta dalam soal tanpa asumsi tambahan.

Kesimpulan. Setelah definisi disubstitusikan dan suku-suku disederhanakan dengan syarat yang sah, ruas kiri menjadi ruas kanan yang diminta; hubungan pada soal terbukti. Pemeriksaan dimensi dan kasus batas memberikan hasil yang konsisten.

Pembahasan 10.29

Inti soal. Benar atau salah? (a) Nilai yang diizinkan bagi bilangan kuantum s suatu elektron adalah −½ dan +½. (b) Besar komponen-z S_z dari momentum sudut spin sebuah partikel yang mempunyai spin tidak nol selalu harus lebih kecil daripada besar |S| momentum sudut spinnya. (c) Untuk setiap sistem dua elektron, faktor spin dalam fungsi gelombang harus antisimetris. (d) Untuk setiap…

Dasar teori. Soal ini diselesaikan dengan nilai eigen momentum sudut dan harmonik bola. Hubungan pokok yang digunakan ialah $S^2 = s(s+1)\hbar^2$, $S_z = m_s\hbar$, $\mu = g(q/2\,m)S$, dan fungsi total fermion harus antisimetris.

Pemeriksaan tiap pernyataan. Setiap butir dibandingkan dengan definisi formalnya. Pernyataan tidak boleh dinilai hanya dari intuisi klasik: syarat batas, normalisasi, degenerasi, komutasi, dan sifat fungsi eigen harus diperiksa secara eksplisit. (a) Salah; (b) Benar; (c) Salah; (d) Benar; (e) Benar; (f) Benar; (g) Benar; (h) Benar untuk g_N positif.

BAB 11 — ATOM BERELEKTRON BANYAK

Soal

Seluruh soal Bab 11 berikut dipertahankan sesuai urutan sumber. Pembahasan lengkap ditempatkan setelah daftar soal.

Bagian	11.1	11.2	11.3	11.4	11.5	11.6
Soal	11.1–11.4	11.5–11.6	11.7	11.8–11.12	11.13–11.32	11.33–11.35

Bagian	11.7	11.8	Umum
Soal	11.36	11.37–11.39	11.40–11.42

11.1 Berapa banyak elektron yang dapat ditempatkan dalam masing-masing bagian berikut: (a) kulit dengan bilangan kuantum utama n; (b) subkulit dengan bilangan kuantum n dan l; (c) orbital; (d) spin-orbital?

11.2 Tanpa melihat teks, tuliskan operator Hamiltonian atom litium tanpa menggunakan simbol penjumlahan. Anggap inti mempunyai massa tak berhingga dan abaikan interaksi spin–orbit.

11.3 Jika $R(r_1)$ adalah faktor radial dalam fungsi τ_1 pada persamaan diferensial Hartree (11.9), tuliskan persamaan diferensial yang dipenuhi oleh R.

11.4 STO manakah yang mempunyai bentuk sama dengan orbital atom menyerupai hidrogen?

11.5 Taksir energi orbital 1s nonrelativistik dalam Ar. Periksa hasilnya dengan Gambar 11.2.

11.6 Pada nomor atom berapakah persilangan kedua energi orbital 3d dan 4s terjadi dalam Gambar 11.2? Perhitungkan skala logaritmik. (Data spektrum atom menunjukkan bahwa persilangan sebenarnya terjadi antara 20 dan 21.)

11.7 (a) Gunakan rumus Clementi–Corongiu untuk menaksir energi korelasi atom He keadaan dasar dan bandingkan hasilnya dengan nilai sebenarnya. (b) Gunakan rumus Clementi–Corongiu untuk menaksir energi korelasi atom N keadaan dasar. Temukan energi keadaan dasar atom N dengan menggunakan data pada rujukan daring dalam Bagian 10.5 untuk menjumlahkan seluruh energi ionisasi N. Kira-kira berapa persen energi sejati yang berupa energi korelasi dalam N?

11.8 Berikan kemungkinan nilai bilangan kuantum momentum sudut total J yang dihasilkan dari penjumlahan momentum sudut dengan bilangan kuantum: (a) 3/2 dan 4; (b) 2, 3, dan 1/2.

11.9 Benar atau salah? Kaidah penjumlahan momentum sudut (11.39) menunjukkan bahwa jumlah nilai J yang diperoleh dengan menjumlahkan j_1 dan j_2

selalu $2j_< + 1$, dengan $j_<$ sebagai nilai yang lebih kecil di antara j_1 dan j_2, atau j_1 jika $j_1 = j_2$.

11.10 Verifikasi relasi komutasi momentum sudut (11.32).

11.11 Buktikan bahwa $m_1 + m_2 = M_J$ [Pers. (11.34)] dengan langkah berikut: terapkan $\hat{M}_z = \hat{M}_{1z} + \hat{M}_{2z}$ pada (11.33), substitusikan (11.33) ke dalam persamaan yang dihasilkan, gabungkan suku-suku, kemudian gunakan kebebasan linear fungsi-fungsi yang terlibat untuk menurunkan (11.34).

11.12 Tunjukkan bahwa $[\hat{M}^2, \hat{M}_{1z}] = 2i\hbar(\hat{M}_{1x}\hat{M}_{2y} - \hat{M}_{1y}\hat{M}_{2x})$, dengan $M = M_1 + M_2$.

11.13 Benar atau salah? Jawablah tanpa melihat tabel Bab 11. (a) Term yang timbul dari konfigurasi $1s^22s^22p3p$ sama dengan term yang timbul dari $1s^22s^22p^2$. (b) Term yang timbul dari konfigurasi $3d^3$ sama dengan term yang timbul dari konfigurasi $3d^7$.

11.14 Verifikasi term-term dalam Tabel 11.2b.

11.15 Tentukan term yang timbul dari setiap konfigurasi elektron berikut: (a) $1s^22s^22p^63s^23p5g$; (b) $1s^22s^22p3p3d$; (c) $1s^22s^22p^44d$. Tabel 11.2a dapat digunakan untuk bagian (c).

11.16 Manakah konfigurasi elektron berikut yang memberikan fungsi konfigurasi pada perhitungan CI keadaan dasar He? (a) 1s2s; (b) 1s2p; (c) $2s^2$; (d) 2s2p; (e) $2p^2$; (f) $3d^2$.

11.17 Verifikasi persamaan fungsi eigen spin (11.52) sampai (11.54), (11.56), dan tiga persamaan setelah (11.56).

11.18 (a) Hitung sudut dalam Gambar 11.3 antara sumbu z dan S bagi fungsi spin $\alpha(1)\alpha(2)$. (b) Hitung sudut antara S_1 dan S_2 bagi setiap fungsi (11.57) sampai (11.60). [Petunjuk: gunakan $S\cdot S = (S_1 + S_2)\cdot(S_1 + S_2)$.] (c) Jika vektor A mempunyai komponen (A_x, A_γ, A_z), apakah komponen proyeksi A pada bidang xy? Gunakan jawaban pertanyaan ini untuk menemukan sudut antara proyeksi S_1 dan S_2 pada bidang xy bagi fungsi $\alpha(1)\alpha(2)$.

11.19 (a) Jika $\hat{S}^2 = (\hat{S}_1 + \hat{S}_2 + \ldots)\cdot(\hat{S}_1 + \hat{S}_2 + \ldots)$, tunjukkan bahwa $[\hat{S}^2, \hat{P}_{ik}] = 0$, dengan $\hat{P}_{ik}$ sebagai operator pertukaran. (b) Tunjukkan bahwa $[\hat{L}^2, \hat{P}_{ik}] = 0$, dengan L sebagai momentum sudut orbital elektronik total.

11.20 Di antara atom-atom dengan $Z \leq 10$, manakah yang mempunyai keadaan dasar berparitas ganjil?

11.21 Berikan jumlah keadaan yang termasuk dalam setiap term berikut: (a) ^4F; (b) ^1S; (c) ^3P; (d) ^2D.

11.22 Berapa banyak keadaan yang termasuk dalam setiap konfigurasi karbon berikut: (a) $1s^2 2s^2 2p^2$; (b) $1s^2 2s^2 2p3p$?

11.23 Berikan kemungkinan multipisitas spin term yang timbul dari setiap konfigurasi elektron berikut: (a) f; (b) f^2; (c) f^3; (d) f^7; (e) f^{12}; (f) f^{13}.

11.24 Berikan tingkat yang timbul dari setiap term berikut dan degenerasi setiap tingkat: (a) ^1S; (b) ^2S; (c) ^3F; (d) ^4D.

11.25 Bagi suatu keadaan yang termasuk tingkat $^3D_3$, berikan besar: (a) momentum sudut orbital elektronik total; (b) momentum sudut spin elektronik total; (c) momentum sudut elektronik total.

11.26 Berikan simbol tingkat dasar setiap atom dengan $Z \leq 10$.

11.27 Berikan simbol tingkat dasar setiap atom dengan $21 \leq Z \leq 30$. Atom manakah yang mempunyai tingkat dasar paling terdegenerasi?

11.28 (a) Gunakan diagram seperti (11.48) untuk menunjukkan bahwa term terendah dari konfigurasi satu subkulit setengah penuh mempunyai L = 0. (b) Berapa banyak tingkat yang timbul dari term dengan L = 0? Jelaskan mengapa tidak diperlukan kaidah untuk menemukan tingkat terendah dari term terendah suatu konfigurasi subkulit setengah penuh.

11.29 Verifikasi bahwa jika E = 1 eV, maka E/hc = 8065,54 cm^{-1}.

11.30 Gunakan tabel tingkat energi atom Moore—Bagian 11.5—untuk menemukan sedikitnya tiga konfigurasi elektron atom karbon netral yang tidak diramalkan dengan benar oleh kaidah Hund mengenai term terendahnya.

11.31 Kaidah seleksi transisi spektral atom ketika kopling Russell–Saunders berlaku adalah (Bethe dan Jackiw, Bab 11): $\Delta L = 0, \pm 1$; $\Delta S = 0$; $\Delta J = 0, \pm 1$—tetapi J = 0 ke J = 0 terlarang; $\Delta(\Sigma_i l_i) = \pm 1$, yang berarti perubahan konfigurasi harus mengubah jumlah nilai l elektron sebesar ±1. Untuk sebagian besar garis spektrum atom, hanya satu elektron yang berpindah subkulit; dalam kasus ini kaidah $\Delta(\Sigma_i l_i) = \pm 1$ menjadi $\Delta l = \pm 1$ bagi elektron yang melakukan transisi.

Bagi atom karbon, tingkat-tingkat yang timbul dari konfigurasi $1s^2 2s^2 2p^2$ adalah

Tingkat	$^3P_0$	$^3P_1$	$^3P_2$	$^1D_2$	$^1S_0$
$(E/hc)/cm^{-1}$	0	16,4	43,4	10192,6	21648,0

sedangkan tingkat energi konfigurasi $1s^2 2s 2p^3$ adalah

Tingkat	$^5S_2$	$^3D_3$	$^3D_1$	$^3D_2$	$^3P_1$	$^3P_2$	$^3P_0$
$(E/hc)/cm^{-1}$	33735,2	64086,9	64089,8	64090,9	75254,0	75255,3	75256,1
Tingkat		$^1D_2$		$^3S_1$		$^1P_1$	
$(E/hc)/cm^{-1}$		97878		105798,7		119878	

Gunakan kaidah seleksi di atas untuk menemukan bilangan gelombang semua transisi yang diperbolehkan antara pasangan dari kelima belas tingkat tersebut.

11.32 Buka NIST Atomic Spectra Database, pilih “Levels”, masukkan C I pada “Spectrum”, kemudian pilih “Retrieve Data” untuk memperoleh tingkat energi konfigurasi $2s^2 2p3s$ atom C. Selanjutnya gunakan kaidah seleksi pada Soal 11.31 untuk menentukan bilangan gelombang dan panjang gelombang semua transisi yang diperbolehkan antara tingkat $2s^2 2p3s$ dan tingkat $2s^2 2p^2$ yang diberikan dalam Soal 11.31. Periksa panjang gelombang Anda dengan memilih “Lines”, bukan “Levels”.

11.33 Gunakan Pers. (11.66) untuk menghitung pemisahan antara tingkat $^2P_{3/2}$ dan $^2P_{1/2}$ dari konfigurasi 2p atom hidrogen. Karena terdapat efek relativistik lain, hasilnya tidak akan sesuai secara akurat dengan eksperimen.

11.34 Apakah Gambar 11.6 memuat pelanggaran terhadap kaidah dalam Bagian 11.6 untuk menentukan apakah suatu multiplet regular atau terbalik?

11.35 Gambarkan diagram yang serupa dengan Gambar 11.6 bagi konfigurasi karbon $1s^2 2s^2 2p^2$. Term ^1S merupakan term tertinggi.

11.36 Gunakan Pers. (11.74) untuk menghitung pemisahan energi antara keadaan $M_J = 1/2$ dan $M_J = -1/2$ dari tingkat 2p $^2P_{1/2}$ atom hidrogen jika medan magnet 0,200 T diterapkan.

11.37 (a) Turunkan Pers. (11.78). (b) Turunkan Pers. (11.79).

11.38 Bagi konfigurasi subkulit tertutup: (a) tunjukkan bahwa penjumlahan ganda dalam (11.80) sama dengan

$$\sum_{j>i} \sum_{i=1}^{n'/2} (4J_{ij} - 2K_{ij}) + \sum_{i=1}^{n'/2} J_{ii}$$

dengan integral Coulomb dan pertukaran didefinisikan menggunakan n/2 orbital ruang φ_i yang berbeda; (b) gunakan (11.84) dan hasil bagian (a) untuk menurunkan (11.83).

11.39 Gunakan kaidah Condon–Slater untuk membuktikan ortonormalitas dua determinan Slater berelektron n yang dibentuk dari spin-orbital ortonormal.

11.40 Jelaskan mengapa salah jika energi keadaan dasar eksperimen litium dihitung sebagai $-(E_{2s} + 2E_{1s})$, dengan E_{2s} sebagai energi eksperimen yang diperlukan untuk melepaskan elektron 2s dari litium dan E_{1s} sebagai energi eksperimen yang diperlukan untuk melepaskan sebuah elektron 1s dari litium.

11.41 Momen magnet total μ suatu atom mengandung sumbangan momen magnet μ_L, μ_S, dan μ_I yang berkaitan dengan momentum sudut orbital elektronik total L, momentum sudut spin elektronik total S, dan momentum sudut spin inti I. (a) Untuk atom dengan L, S, dan I semuanya tidak nol, manakah dari ketiga sumbangan pada μ tersebut yang jauh paling kecil? (b) Untuk keadaan elektronik

dasar ^{87}Rb—yang digunakan dalam eksperimen kondensasi Bose–Einstein pada Bagian 10.5—manakah dari ketiga sumbangan tersebut yang bernilai nol?

11.42 Benar atau salah? (a) Multipisitas spin setiap term atom dengan jumlah elektron ganjil harus berupa bilangan genap. (b) Multipisitas spin setiap term atom dengan jumlah elektron genap harus berupa bilangan ganjil. (c) Multipisitas spin suatu term selalu sama dengan jumlah tingkat term tersebut. (d) Dalam metode SCF Hartree, energi atom sama dengan jumlah energi orbital elektron. (e) Metode Hartree–Fock mampu memberikan energi nonrelativistik eksak atom berelektron banyak.

PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 11

Atom Berelektron Banyak

Setiap pembahasan memuat prinsip yang digunakan, langkah penurunan atau perhitungan, pemeriksaan hasil, dan kesimpulan.

Pembahasan 11.1 — Kapasitas kulit, subkulit, orbital, dan spin-orbital

Inti soal. Menentukan jumlah maksimum elektron pada empat tingkat pengelompokan keadaan satu-elektron.

Dasar teori. Untuk suatu kulit dengan bilangan kuantum utama n, nilai l yang diizinkan adalah 0, 1, …, n − 1. Untuk setiap l terdapat 2l + 1 orbital ruang, dan setiap orbital ruang menampung dua elektron dengan m_s = +1/2 dan −1/2.

$$Jumlahorbitalpadakulitn = \Sigma_{l=0}{}^{n-1}(2l+1) = n^2$$

$$Jumlahelektronmaksimumpadakulitn = 2n^2$$

Pada subkulit (n,l) terdapat 2l + 1 nilai m_l. Setelah faktor spin dua dimasukkan, kapasitasnya 2(2l + 1). Satu orbital ditentukan oleh n, l, dan m_l, sehingga tersedia dua spin-orbital. Sebaliknya, satu spin-orbital sudah menetapkan m_s dan hanya dapat ditempati satu elektron menurut asas Pauli.

Bagian	Jumlah keadaan ruang/spin	Elektron maksimum
Kulit n	n^2 orbital ruang	$2n^2$
Subkulit n,l	2l + 1 orbital ruang	2(2l + 1)
Satu orbital	2 spin-orbital	2
Satu spin-orbital	1 keadaan	1

Kesimpulan. (a) $2n^2$; (b) 2(2l + 1); (c) 2; dan (d) 1 elektron.

Pembahasan 11.2 — Hamiltonian atom litium

Inti soal. Menuliskan Hamiltonian nonrelativistik tiga elektron secara eksplisit, tanpa simbol penjumlahan.

Dengan inti bermassa tak berhingga, energi kinetik inti tidak ada. Hamiltonian terdiri atas tiga suku energi kinetik elektron, tiga tarikan elektron–inti dengan Z = 3, dan tiga tolakan pasangan elektron: (1,2), (1,3), dan (2,3).

$$\hat{H} = -(\hbar^2/2\,m_e)(\nabla_1{}^2 + \nabla_2{}^2 + \nabla_3{}^2) - (3e^2/4\,\pi\varepsilon_0)(1/r_1 + 1/r_2 + 1/r_3) + (e^2/4\,\pi\varepsilon_0)(1/r_{12} + 1/r_{13} + 1/r_{23})$$

Pemeriksaan. Untuk tiga elektron terdapat C(3,2) = 3 pasangan tolakan, sehingga tidak ada pasangan yang terlewat atau dihitung dua kali. Semua suku berdimensi energi.

Kesimpulan. Persamaan di atas adalah Hamiltonian litium yang diminta ketika gerak inti dan interaksi spin–orbit diabaikan.

Pembahasan 11.3 — Persamaan radial Hartree

Inti soal. Menurunkan persamaan diferensial untuk faktor radial $R(r_1)$ pada potensial efektif pusat $V_1(r_1)$.

Tuliskan orbital sebagai $\tau_1(r,\theta,\varphi) = R(r)Y\_l\hat{}m(\theta,\varphi)$. Laplasian dalam koordinat sferis yang bekerja pada hasil kali ini memisahkan bagian radial dan sudut; harmonik sferis memenuhi $\hat{L}^2 Y\_l\hat{}m = l(l+1)\hbar^2 Y\_l\hat{}m$.

$$\{-(\hbar^2/2\,m_e)[d^2/dr^2 + (2/r)\,d/dr - l(l+1)/r^2] + V_1(r)\}R(r) = \varepsilon_1 R(r)$$

Bentuk yang sering lebih nyaman diperoleh dengan $u(r) = rR(r)$. Setelah substitusi, turunan pertama hilang:

$$[-(\hbar^2/2\,m_e)d^2/dr^2 + \hbar^2 l(l+1)/(2m_e r^2) + V_1(r)]u(r) = \varepsilon_1 u(r)$$

Syarat batas fisiknya adalah $u(0) = 0$ dan $u(r) \to 0$ ketika $r \to \infty$ untuk orbital terikat.

Kesimpulan. R(r) memenuhi persamaan radial medan-pusat di atas; bentuk u = rR ekuivalen dan lazim dipakai dalam integrasi numerik.

Pembahasan 11.4 — STO yang sama bentuknya dengan orbital hidrogenik

Inti soal. Mengidentifikasi orbital tipe Slater yang tidak memerlukan polinom radial tambahan.

STO mempunyai faktor radial umum $r\hat{}(n-1)e\hat{}(-\zeta r)$. Orbital hidrogenik mempunyai faktor eksponensial dikalikan polinom Laguerre. Bila jumlah simpul radial $n - l - 1 = 0$, polinom tersebut mereduksi menjadi konstanta dan pangkat radialnya tepat $r\hat{}l$.

$$n - l - 1 = 0 \Leftrightarrow n = l + 1$$

Karena itu, STO dengan $n = l + 1$ mempunyai bentuk yang sama dengan orbital hidrogenik tanpa simpul radial, setelah eksponen dipilih $\zeta = Z/(na_0)$. Contohnya 1s, 2p, 3d, 4f, 5g, dan seterusnya.

Kesimpulan. STO 1s, 2p, 3d, 4f, …, yaitu semua STO dengan $n = l + 1$, berbentuk sama dengan orbital hidrogenik yang bersesuaian.

Pembahasan 11.5 — Taksiran energi orbital 1s argon

Inti soal. Menaksir orde energi orbital inti 1s pada Ar dan membandingkannya dengan grafik berskala logaritmik.

Taksiran pertama dapat diperoleh dari model menyerupai hidrogen dengan muatan inti efektif Z_eff. Untuk elektron 1s, pemerisaian terutama berasal dari elektron 1s lainnya. Aturan Slater memberi Z_eff ≈ Z − 0,30 = 17,70 untuk Ar (Z = 18).

$$\varepsilon_1 s \approx -13{,}6057eV \times Z_{eff^2}/n^2 = -13{,}6057(17{,}70)^2 eV$$

$$\varepsilon_1 s \approx -4{,}26 \times 10^3 eV$$

Nilai ini sengaja hanya taksiran satu-elektron. Relaksasi orbital, penetrasi, dan perlakuan Hartree–Fock menurunkan besar ikatan dibandingkan model Slater sederhana. Dari Gambar 11.2, posisi kurva 1s pada Z = 18 berada pada orde beberapa 10^3 eV, sekitar 3×10^3–4×10^3 eV dalam besar absolut. Jadi taksiran dan grafik konsisten pada skala logaritmik.

Pemeriksaan orde besaran. Energi 1s harus jauh lebih besar daripada energi valensi 3p (puluhan eV), tetapi masih jauh di bawah taksiran tanpa pemerisaian $-13{,}6Z^2 \approx -4{,}41$ keV hanya sedikit; karena pemerisaian 1s kecil, nilai beberapa keV memang wajar.

Kesimpulan. Energi orbital 1s Ar diperkirakan berorde −(3–4) keV; model Z_eff Slater memberi sekitar −4,26 keV, sesuai orde pada Gambar 11.2.

Pembahasan 11.6 — Persilangan kedua 3d dan 4s

Inti soal. Membaca titik persilangan kedua pada grafik energi orbital dengan memperhatikan sumbu logaritmik.

Pada atom ringan, 4s turun lebih cepat dan menjadi lebih rendah daripada 3d sebelum pengisian deret transisi. Ketika Z bertambah, orbital 3d kemudian turun lebih kuat karena penetrasi dan pemerisaian yang berbeda. Persilangan kedua adalah titik saat 3d kembali lebih rendah daripada 4s.

Pembacaan Gambar 11.2 harus dilakukan menurut jarak logaritmik, bukan interpolasi linear biasa. Titik tersebut berada sangat dekat Z = 20. Data spektrum yang diberikan dalam soal menempatkan persilangan nyata di antara Ca (Z = 20) dan Sc (Z = 21).

Kesimpulan. Dari grafik, persilangan kedua terjadi sekitar Z ≈ 20; secara eksperimen letaknya antara Z = 20 dan Z = 21.

Pembahasan 11.7 — Rumus korelasi Clementi–Corongiu

Inti soal. Menggunakan E_kor ≈ −0,0170 n^1,31 hartree untuk He dan N, lalu membandingkan besarnya dengan energi total N.

Rumus empiris yang diberikan dalam bab adalah

$$E_{kor} \approx -0{,}0170n^{1{,}31}[e^2/(4\pi\varepsilon_0 a_0)] = -0{,}0170n^{1{,}31}E_h$$

(a) Helium mempunyai n = 2 elektron. Dengan E_h = 27,2114 eV:

$$E_{kor}(He) \approx -0{,}0170(2^{1{,}31})(27{,}2114eV) = -1{,}15eV$$

Nilai korelasi nonrelativistik He yang sebenarnya sekitar −1,14 eV. Selisih rumus empiris hanya sekitar 0,01 eV, sehingga sangat baik untuk He.

(b) Nitrogen mempunyai n = 7 elektron:

$$E_{kor}(N) \approx -0{,}0170(7^{1{,}31})(27{,}2114eV) = -5{,}92eV$$

Energi total eksperimen relatif terhadap inti telanjang diperoleh dari negatif jumlah ketujuh energi ionisasi berturut-turut. Dengan data ionisasi N, jumlahnya sekitar 1,486 × 10^3 eV, sehingga E(N) ≈ −1486 eV. Persentase korelasi dihitung terhadap besar energi total:

$$persentase \approx (5{,}92/1486) \times 100\% = 0{,}40\%$$

Walaupun persentasenya kecil terhadap energi total, energi korelasi beberapa eV dapat sangat menentukan perbedaan energi kimia, spektrum, dan afinitas elektron.

Kesimpulan. Rumus memberi E_kor(He) ≈ −1,15 eV dan E_kor(N) ≈ −5,92 eV; untuk N, besarnya sekitar 0,40% dari energi total atom.

Pembahasan 11.8 — Penjumlahan momentum sudut

Inti soal. Menentukan semua J dari kaidah $|j_1-j_2| \le J \le j_1+j_2$ dalam langkah satu.

(a) Untuk $j_1 = 3/2$ dan $j_2 = 4$:

$$J = 11/2\,, 9/2\,, 7/2\,, 5/2$$

(b) Tiga momentum sudut dijumlahkan bertahap. Mula-mula 2 dan 3 memberi j_{12} = 5, 4, 3, 2, 1. Setiap j_{12} kemudian digabung dengan 1/2, sehingga $J = j_{12} \pm 1/2$.

j_{12}	J yang diperoleh
5	11/2, 9/2
4	9/2, 7/2
3	7/2, 5/2
2	5/2, 3/2
1	3/2, 1/2

Nilai J berbeda yang muncul ialah 1/2, 3/2, 5/2, 7/2, 9/2, dan 11/2. Nilai di bagian tengah dapat muncul melalui lebih dari satu jalur kopling, sehingga label perantara j_{12} diperlukan untuk membedakan keadaan.

Kesimpulan. (a) J = 11/2, 9/2, 7/2, 5/2. (b) J berbeda = 1/2 sampai 11/2 dalam langkah satu, dengan beberapa kemunculan ganda menurut j_{12}.

Pembahasan 11.9 — Jumlah nilai J

Inti soal. Menguji pernyataan bahwa jumlah nilai J selalu 2j_< + 1.

Misalkan j_> ≥ j_<. Deret J dimulai dari j_> + j_< dan berakhir pada j_> − j_<, turun dengan langkah satu. Banyak suku deret aritmetika ini adalah

$$N_J = [(j \quad + j \quad) - (j \quad - j \quad)]/1 + 1 = 2j \quad + 1$$

Jika $j_1 = j_2$, j_< dapat dipilih sebagai j_1 atau j_2 dan hasil tetap sama.

Kesimpulan. Pernyataan benar.

Pembahasan 11.10 — Relasi komutasi momentum sudut gabungan

Inti soal. Memverifikasi bahwa komponen momentum sudut total $M = M_1 + M_2$ memenuhi aljabar momentum sudut.

Komponen dari elektron atau subsistem berbeda bekerja pada variabel berbeda, sehingga $[\hat{M}_1\alpha, \hat{M}_2\beta] = 0$. Gunakan $\hat{M}\_x = \hat{M}_1x + \hat{M}_2x$ dan $\hat{M}\_y = \hat{M}_1y + \hat{M}_2y$:

$$\left[M_x, M_y\right] = [M_1x, M_1y] + [M_2x, M_2y]$$

$$\left[M_x, M_y\right] = i\hbar M_1z + i\hbar M_2z = i\hbar M_z$$

Dengan permutasi siklik diperoleh $[\hat{M}\_y, \hat{M}\_z] = i\hbar\hat{M}\_x$ dan $[\hat{M}\_z, \hat{M}\_x] = i\hbar\hat{M}\_y$. Selanjutnya, karena $\hat{M}^2$ adalah operator Casimir dari aljabar ini,

$$[M^2, M_x] = \left[M^2, M_y\right] = [M^2, M_z] = 0$$

Bukti langsung, misalnya untuk z, diperoleh dengan mengembangkan $[M\_x^2 + M\_y^2 + M\_z^2, M\_z]$; dua suku pertama saling meniadakan dan suku terakhir nol.

Kesimpulan. Jumlah dua momentum sudut juga merupakan momentum sudut yang sah dan memenuhi relasi komutasi (11.32).

Pembahasan 11.11 — Bukti $m_1 + m_2 = M\_J$

Inti soal. Menurunkan syarat proyeksi dari ekspansi keadaan momentum sudut terkopel dalam basis tak terkopel.

Tuliskan keadaan terkopel sebagai

$$JM_J\rangle = \Sigma_{\mathrm{m1},\,\mathrm{m2}} C_{\mathrm{m1m2}} \vee j_1 m_1\rangle \vee j_2 m_2\rangle$$

Terapkan $\hat{M}\_z = \hat{M}_1z + \hat{M}_2z$ pada kedua ruas. Ruas kiri memberi $M\_J\hbar|JM\_J\rangle$. Pada setiap hasil kali basis di ruas kanan, $\hat{M}_1z$ dan $\hat{M}_2z$ masing-masing memberi $m_1\hbar$ dan $m_2\hbar$:

$$M_{J\hbar}\Sigma C_{\mathrm{m1m2}} \vee j_1 m_1; j_2 m_2\rangle = \Sigma(m_1 + m_2)\hbar C_{\mathrm{m1m2}} \vee j_1 m_1; j_2 m_2\rangle$$

Pindahkan semua ke satu ruas. Karena fungsi hasil kali yang berbeda bebas linear, koefisien setiap fungsi harus nol:

$$\left[M_J - (m_1 + m_2)\right] C_{\mathrm{m1m2}} = 0$$

Untuk koefisien Clebsch–Gordan yang tidak nol, faktor dalam kurung harus nol.

Kesimpulan. Setiap komponen basis yang berkontribusi memenuhi $m_1 + m_2 = M\_J$.

Pembahasan 11.12 — Komutator $[M^2, M_1z]$

Inti soal. Mengembangkan M^2 untuk dua momentum sudut dan menghitung komutator dengan M_1z.

$$M^2 = M_1{}^2 + M_2{}^2 + 2(M_1xM_2x + M_1yM_2y + M_1zM_2z)$$

$\hat{M}_1{}^2$ komutatif dengan semua komponen $\hat{M}_1$, $\hat{M}_2{}^2$ bekerja pada ruang lain, dan semua $\hat{M}_2\alpha$ komutatif dengan $\hat{M}_1z$. Karena itu hanya dua suku silang pertama yang berkontribusi:

$$[M^2, M_1z] = 2([M_1x, M_1z]M_2x + [M_1y, M_1z]M_2y)$$

Gunakan $[M\_x, M\_z] = -i\hbar M\_y$ dan $[M\_y, M\_z] = i\hbar M\_x$:

$$[M^2, M_1z] = 2i\hbar(M_1xM_2y - M_1yM_2x)$$

Kesimpulan. Hubungan yang diminta terbukti; secara fisik, proyeksi subsistem pertama bukan bilangan kuantum baik setelah kopling, walaupun proyeksi total tetap baik.

Pembahasan 11.13 — Perbandingan term konfigurasi

Inti soal. Menilai dua pernyataan tentang term yang timbul dari konfigurasi elektron.

(a) Salah. Pada 2p3p, kedua elektron berada dalam subkulit berbeda sehingga tak ekuivalen. Kopling $l_1 = l_2 = 1$ memberi L = 0,1,2 dan S = 0,1; semua kombinasi ^1S, ^3S, ^1P, ^3P, ^1D, dan ^3D diizinkan. Pada $2p^2$, elektron ekuivalen dibatasi asas Pauli dan hanya ^1S, ^1D, serta ^3P yang tersisa.

(b) Benar. Subkulit d menampung 10 elektron. Konfigurasi d^7 mempunyai tiga lubang dan termnya sama dengan d^3 melalui kesetaraan partikel–lubang; hanya urutan tingkat J dalam term dapat berbalik karena d^3 kurang dari setengah penuh sedangkan d^7 lebih dari setengah penuh.

Kesimpulan. (a) Salah; (b) benar.

Pembahasan 11.14 — Verifikasi term Tabel 11.2b

Inti soal. Menggunakan penjumlahan L dan S untuk dua elektron tak ekuivalen.

Untuk dua elektron tak ekuivalen, tidak ada penghapusan term oleh asas Pauli selain antisimetri total yang dapat dibangun dari kombinasi ruang–spin. Nilai L adalah $|l_1 - l_2|$ sampai $l_1 + l_2$, sedangkan S = 0 atau 1.

Konfigurasi aktif	Nilai L	Term singlet dan triplet

Konfigurasi aktif	Nilai L	Term singlet dan triplet
s s (tak ekuivalen)	0	^{1}S, ^{3}S
s p	1	^{1}P, ^{3}P
s d	2	^{1}D, ^{3}D
p p (tak ekuivalen)	0, 1, 2	^{1}S, ^{3}S, ^{1}P, ^{3}P, ^{1}D, ^{3}D
p d	1, 2, 3	^{1}P, ^{3}P, ^{1}D, ^{3}D, ^{1}F, ^{3}F
d d (tak ekuivalen)	0,1,2,3,4	^{1}S/^{3}S, ^{1}P/^{3}P, ^{1}D/^{3}D, ^{1}F/^{3}F, ^{1}G/^{3}G

Pemeriksaan degenerasi dapat dilakukan dengan menjumlahkan (2L+1)(2S+1). Hasilnya harus sama dengan jumlah hasil kali spin-orbital kedua subkulit setelah konfigurasi dibedakan.

Kesimpulan. Term Tabel 11.2b mengikuti langsung dari semua L yang diizinkan dan S = 0,1 untuk pasangan elektron tak ekuivalen.

Pembahasan 11.15 — Term tiga konfigurasi

Inti soal. Menentukan term dengan mengabaikan subkulit tertutup dan menggabungkan momentum sudut elektron aktif.

(a) Konfigurasi aktif 3p5g mempunyai l_p = 1 dan l_g = 4. Maka L = 3,4,5 (F,G,H) dan S = 0,1:

$$3p5g \rightarrow {}^1F, {}^3F, {}^1G, {}^3G, {}^1H, {}^3H$$

(b) Untuk 2p3p3d, pertama gabungkan dua elektron p tak ekuivalen: L_pp = 0,1,2 dan S_pp = 0,1. Tambahkan l_d = 2 dan s = 1/2. Penghitungan multiplicity-resolved memberi:

Multipisitas	Term dan banyak kemunculan
Kuartet (S=3/2)	^{4}S; ^{4}P (2); ^{4}D (3); ^{4}F (2); ^{4}G
Doublet (S=1/2)	^{2}S (2); ^{2}P (4); ^{2}D (6); ^{2}F (4); ^{2}G (2)

Pemeriksaan mikrostatus: jumlah degenerasi seluruh term adalah 360, sama dengan 6 × 6 × 10 spin-orbital untuk satu elektron pada masing-masing subkulit p, p, dan d.

(c) Subkulit $2p^4$ mempunyai term induk ^{3}P, ^{1}D, dan ^{1}S. Masing-masing digabung dengan elektron d (l=2,s=1/2). Hasilnya:

Term induk p^4	Term total
^{3}P	^{4}P, ^{4}D, ^{4}F; ^{2}P, ^{2}D, ^{2}F
^{1}D	^{2}S, ^{2}P, ^{2}D, ^{2}F, ^{2}G
^{1}S	^{2}D

Setelah term yang sama dari induk berbeda dipertahankan sebagai term berbeda, ringkasannya ialah ^{4}P, ^{4}D, ^{4}F; ^{2}S; ^{2}P dua kali; ^{2}D tiga kali; ^{2}F dua kali; dan ^{2}G.

Kesimpulan. Daftar term lengkap diberikan di atas, termasuk multiplicity term berulang yang berasal dari jalur kopling berbeda.

Pembahasan 11.16 — Konfigurasi dalam CI keadaan dasar He

Inti soal. Memilih konfigurasi yang dapat bercampur dengan keadaan dasar He ^{1}S berparitas genap.

Hamiltonian atom tanpa medan luar mempertahankan L, S, M_L, M_S, dan paritas. Fungsi konfigurasi yang bercampur dengan $1s^2$ ^{1}S harus juga mempunyai term ^{1}S dan paritas genap.

Pilihan	Analisis	Masuk CI ^{1}S?
1s2s	Dapat membentuk ^{1}S; paritas genap	Ya
1s2p	L=1 sehingga P; paritas ganjil	Tidak
$2s^2$	^{1}S genap	Ya
2s2p	P ganjil	Tidak
$2p^2$	Memiliki ^{1}S genap	Ya
$3d^2$	Memiliki ^{1}S genap	Ya

Kesimpulan. Pilihan yang dapat memberikan fungsi konfigurasi CI keadaan dasar He adalah (a), (c), (e), dan (f).

Pembahasan 11.17 — Fungsi eigen spin dua elektron

Inti soal. Memverifikasi nilai eigen S^2 dan S_z untuk fungsi triplet dan singlet dua elektron.

Gunakan $\hat{S}_z = \hat{S}_{1z}+\hat{S}_{2z}$, $\hat{S}^2 = \hat{S}_1^2+\hat{S}_2^2+2\hat{S}_1\cdot\hat{S}_2$, serta operator tangga. Fungsi-fungsi terkopel adalah

$$|1,1\rangle = \alpha(1)\alpha(2)$$

$$|1,0\rangle = [\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)]/\sqrt{2}$$

$$|1,-1\rangle = \beta(1)\beta(2)$$

$$|0,0\rangle = [\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]/\sqrt{2}$$

Penerapan $\hat{S}_z$ memberi berturut-turut $+\hbar$, 0, $-\hbar$, dan 0. Fungsi αα adalah keadaan bobot tertinggi S=1; aplikasi $\hat{S}_-$ menghasilkan kombinasi simetris M_S=0 dan kemudian ββ, sehingga ketiganya mempunyai $S(S+1)\hbar^2 = 2\hbar^2$. Kombinasi

antisimetri ortogonal terhadap triplet dan dimusnahkan $\hat{S}_{\pm}$, sehingga S=0 dan nilai eigen $\hat{S}^2 = 0$.

Fungsi	S	M_S	S^2 eigen	S_z eigen
αα	1	+1	$2\hbar^2$	$+\hbar$
(αβ+βα)/√2	1	0	$2\hbar^2$	0
ββ	1	−1	$2\hbar^2$	$-\hbar$
(αβ−βα)/√2	0	0	0	0

Kesimpulan. Persamaan (11.52)–(11.60) benar: tiga fungsi simetris adalah triplet dan fungsi antisimetri adalah singlet.

Pembahasan 11.18 — Geometri vektor spin

Inti soal. Menghitung sudut antara spin total dan sumbu z, antara S_1 dan S_2, serta antara proyeksi keduanya.

(a) Untuk αα, S=1 dan M_S=1. Besar S adalah $\sqrt{[S(S+1)]}\hbar = \sqrt{2}\hbar$, sedangkan proyeksinya $S_z=\hbar$. Maka

$$cos\theta = S_z/ \quad S \vee 1/\sqrt{2} \rightarrow \theta = 45°$$

(b) Dari $S^2 = S_1^2+S_2^2+2S_1\cdot S_2$, dengan $S_1^2=S_2^2=3\hbar^2/4$:

$$S_1 \cdot S_2 = ½[S(S+1) - 3/2]\hbar^2$$

Untuk triplet S=1, $S_1\cdot S_2=\hbar^2/4$. Karena $|S_1||S_2|=3\hbar^2/4$, cosγ=1/3 dan γ=70,53°. Untuk singlet S=0, cosγ=−1 dan γ=180°. Ini berlaku untuk seluruh tiga fungsi triplet (11.57)–(11.59), sedangkan (11.60) adalah singlet.

(c) Besar proyeksi A pada bidang xy adalah $\sqrt{(A_x^2+A_y^2)}$. Pada αα, masing-masing spin mempunyai $S_z=\hbar/2$ dan $|S_i|=\sqrt{3}\hbar/2$, sehingga besar proyeksi transversal tiap spin adalah $\hbar/\sqrt{2}$. Dot product total $\hbar^2/4$ dapat ditulis sebagai $S_{1z}S_{2z} + S_{1\perp}\cdot S_{2\perp}$. Karena $S_{1z}S_{2z}=\hbar^2/4$, dot product proyeksi transversal nol; sudutnya 90°.

Kesimpulan. (a) 45°; (b) 70,53° untuk triplet dan 180° untuk singlet; (c) proyeksi A adalah $\sqrt{(A_x^2+A_y^2)}$, dan proyeksi S_1 serta S_2 pada bidang xy saling tegak lurus untuk αα.

Pembahasan 11.19 — Komutasi dengan operator pertukaran

Inti soal. Membuktikan bahwa S^2 dan L^2 invariant terhadap pertukaran label elektron.

Operator $\hat{P}_{ik}$ hanya menukar seluruh koordinat dan spin elektron i dan k. Di bawah pertukaran, jumlah spin total berubah bentuk sebagai

$$P_{ik}(S_1 + S_2 +\cdots +S_i +\cdots +S_k +\cdots)P_{ik}^{-1} = S_1 + S_2 +\cdots +S_k +\cdots +S_i +\cdots= S$$

Jadi $\hat{P}_{ik}\hat{S}\hat{P}_{ik}^{-1}=\hat{S}$, dan setelah dikuadratkan $\hat{P}_{ik}\hat{S}^2\hat{P}_{ik}^{-1}=\hat{S}^2$. Mengalikan dengan $\hat{P}_{ik}$ di kanan memberi $\hat{S}^2\hat{P}_{ik}=\hat{P}_{ik}\hat{S}^2$, atau $[\hat{S}^2,\hat{P}_{ik}]=0$.

Argumen yang identik berlaku untuk $\hat{L} = \Sigma\_j \hat{L}\_j$ karena pertukaran hanya memermutasi suku-suku jumlah. Oleh karena itu $[\hat{L}^2,\hat{P}_{ik}]=0$.

Kesimpulan. Kedua komutator nol. Pertukaran elektron tidak mengubah besar momentum sudut spin total maupun orbital total.

Pembahasan 11.20 — Paritas keadaan dasar $Z \leq 10$

Inti soal. Menentukan atom yang jumlah Σl elektron terbukanya ganjil.

Paritas konfigurasi adalah (−1)^{Σ_i l_i}. Subkulit s memberi l=0 dan tidak mengubah paritas; setiap elektron p memberi faktor −1. Untuk unsur H sampai Ne, cukup menghitung banyak elektron 2p pada konfigurasi dasar.

Atom	Konfigurasi aktif	n(2p)	Paritas
H	$1s^1$	0	genap
He	$1s^2$	0	genap
Li	$2s^1$	0	genap
Be	$2s^2$	0	genap
B	$2p^1$	1	ganjil
C	$2p^2$	2	genap
N	$2p^3$	3	ganjil
O	$2p^4$	4	genap
F	$2p^5$	5	ganjil
Ne	$2p^6$	6	genap

Kesimpulan. Atom berparitas dasar ganjil adalah B, N, dan F.

Pembahasan 11.21 — Jumlah keadaan dalam term

Inti soal. Menggunakan degenerasi term (2S+1)(2L+1).

Term	S	L	Jumlah keadaan
^4F	3/2	3	4×7 = 28
^1S	0	0	1×1 = 1
^3P	1	1	3×3 = 9
^2D	1/2	2	2×5 = 10

Jumlah ini juga sama dengan jumlah degenerasi semua tingkat J dalam term, yaitu Σ_J(2J+1).

Kesimpulan. (a) 28; (b) 1; (c) 9; (d) 10 keadaan.

Pembahasan 11.22 — Jumlah mikrostatus konfigurasi karbon

Inti soal. Menghitung banyak determinan yang dapat dibentuk dari spin-orbital subkulit aktif.

(a) Subkulit 2p memiliki enam spin-orbital. Menempatkan dua elektron memberi

$$C(6,2) = 15$$

Hasil ini juga sama dengan degenerasi term p^2: ^3P (9) + ^1D (5) + ^1S (1) = 15.

(b) Pada 2p3p, satu elektron dipilih dari enam spin-orbital 2p dan satu dari enam spin-orbital 3p. Karena subkulitnya berbeda, tidak ada pembagian 2!:

$$6 \times 6 = 36$$

Pemeriksaan term: $^1S(1)+^3S(3)+^1P(3)+^3P(9)+^1D(5)+^3D(15)=36$.

Kesimpulan. (a) 15 keadaan; (b) 36 keadaan.

Pembahasan 11.23 — Multipisitas spin konfigurasi f^N

Inti soal. Menentukan semua S yang dapat dibentuk dan menggunakan kesetaraan elektron–lubang.

Setiap elektron mempunyai s=1/2. Untuk N elektron, S berubah dalam langkah satu dari nilai maksimum yang diizinkan sampai nilai minimum 0 (N genap) atau 1/2 (N ganjil), tetapi asas Pauli membatasi S_max subkulit f pada 7/2 karena hanya tujuh orbital m_l.

Konfigurasi	S yang mungkin	Multipisitas 2S+1
f^1	1/2	2
f^2	0, 1	1, 3
f^3	1/2, 3/2	2, 4
f^7	1/2, 3/2, 5/2, 7/2	2, 4, 6, 8
f^{12} ≡ dua lubang	0, 1	1, 3
f^{13} ≡ satu lubang	1/2	2

Kesimpulan. (a) doublet; (b) singlet dan triplet; (c) doublet dan kuartet; (d) doublet, kuartet, sekstet, dan oktet; (e) singlet dan triplet; (f) doublet.

Pembahasan 11.24 — Tingkat dan degenerasinya

Inti soal. Menentukan J = L+S, …, |L−S| dan degenerasi 2J+1.

Term	Tingkat J	Degenerasi masing-masing
^1S	$^1S_0$	1
^2S	$^2S_{1/2}$	2

Term	Tingkat J	Degenerasi masing-masing
^3F	$^3F_2$, $^3F_3$, $^3F_4$	5, 7, 9
^4D	$^4D_{1/2}$, $^4D_{3/2}$, $^4D_{5/2}$, $^4D_{7/2}$	2, 4, 6, 8

Jumlah degenerasi setiap baris sama dengan (2S+1)(2L+1), sehingga menjadi pemeriksaan internal.

Kesimpulan. Tingkat dan degenerasi tercantum pada tabel.

Pembahasan 11.25 — Besar L, S, dan J pada $^3D_3$

Inti soal. Menerjemahkan simbol term $^3D_3$ menjadi L=2, S=1, J=3.

$$L \vee \sqrt{[L(L+1)]}\hbar = \sqrt{6}\hbar$$

$$S \vee \sqrt{[S(S+1)]}\hbar = \sqrt{2}\hbar$$

$$J \vee \sqrt{[J(J+1)]}\hbar = \sqrt{12}\hbar = 2\sqrt{3}\hbar$$

Kesimpulan. (a) $\sqrt{6}\hbar$; (b) $\sqrt{2}\hbar$; (c) $2\sqrt{3}\hbar$.

Pembahasan 11.26 — Simbol tingkat dasar H sampai Ne

Inti soal. Menerapkan kaidah Hund dan urutan multiplet untuk atom $Z \leq 10$.

Z	Atom	Konfigurasi valensi	Tingkat dasar
1	H	$1s^1$	$^2S_{1/2}$
2	He	$1s^2$	$^1S_0$
3	Li	$2s^1$	$^2S_{1/2}$
4	Be	$2s^2$	$^1S_0$
5	B	$2p^1$	$^2P^\circ_{1/2}$
6	C	$2p^2$	$^3P_0$
7	N	$2p^3$	$^4S^\circ_{3/2}$
8	O	$2p^4$	$^3P_2$
9	F	$2p^5$	$^2P^\circ_{3/2}$
10	Ne	$2p^6$	$^1S_0$

Superskrip ° menandai paritas ganjil. Untuk p^1 dan p^2 yang kurang dari setengah penuh, J terendah berada paling rendah; untuk p^4 dan p^5 yang lebih dari setengah penuh, J tertinggi berada paling rendah.

Kesimpulan. Simbol tingkat dasar diberikan pada tabel dan konsisten dengan ketiga kaidah Hund.

Pembahasan 11.27 — Tingkat dasar Sc sampai Zn

Inti soal. Menetapkan simbol tingkat dasar deret 3d dan menentukan degenerasi terbesar.

Z	Atom	Konfigurasi valensi ideal	Tingkat dasar	2J+1
21	Sc	$3d^1 4s^2$	$^2D_{3/2}$	4
22	Ti	$3d^2 4s^2$	$^3F_2$	5
23	V	$3d^3 4s^2$	$^4F_{3/2}$	4
24	Cr	$3d^5 4s^1$	$^7S_3$	7
25	Mn	$3d^5 4s^2$	$^6S_{5/2}$	6
26	Fe	$3d^6 4s^2$	$^5D_4$	9
27	Co	$3d^7 4s^2$	$^4F_{9/2}$	10
28	Ni	$3d^8 4s^2$	$^3F_4$	9
29	Cu	$3d^{10} 4s^1$	$^2S_{1/2}$	2
30	Zn	$3d^{10} 4s^2$	$^1S_0$	1

Degenerasi tingkat adalah 2J+1. Nilai terbesar pada tabel adalah 10 untuk Co, tingkat $^4F_{9/2}$.

Kesimpulan. Tingkat dasar Sc–Zn tercantum di tabel; Co mempunyai tingkat dasar paling terdegenerasi.

Pembahasan 11.28 — Subkulit setengah penuh

Inti soal. Menunjukkan L=0 untuk term terendah dan menjelaskan jumlah tingkatnya.

(a) Pada subkulit setengah penuh, kaidah Hund pertama menempatkan satu elektron dengan spin sejajar pada setiap orbital m_l = −l, …, +l. Jumlah proyeksi orbital maksimum yang kompatibel dengan S maksimum adalah

$$M_L = (-l) + (-l+1) + \cdots + 0 + \cdots + (l-1) + l = 0$$

Karena mikrostatus dengan S maksimum hanya mempunyai M_L=0, term yang bersesuaian harus L=0, yaitu term S.

(b) Untuk L=0, kaidah penjumlahan memberi J=|L−S|=S dan hanya satu nilai J. Karena tidak ada beberapa tingkat J untuk diurutkan, kaidah “regular atau terbalik” tidak diperlukan.

Kesimpulan. Term terendah subkulit setengah penuh mempunyai L=0 dan hanya satu tingkat, J=S.

Pembahasan 11.29 — Konversi 1 eV ke cm^{-1}

Inti soal. Menghitung bilangan gelombang E/(hc) dengan konstanta SI.

$$E = 1eV = 1{,}602176634 \times 10^{-19}J$$

$$hc = (6{,}62607015 \times 10^{-34}Js)(2{,}99792458 \times 10^{8}ms^{-1})$$

$$E/(hc) = 8{,}06554394 \times 10^{5}m^{-1} = 8065{,}54394cm^{-1}$$

Konversi m^{-1} ke cm^{-1} dilakukan dengan membagi 100 karena 1 m^{-1} = 0,01 cm^{-1}.

Kesimpulan. 1 eV bersesuaian dengan 8065,54 cm^{-1}.

Pembahasan 11.30 — Pengecualian kaidah Hund pada C I

Inti soal. Mencari konfigurasi karbon netral yang term terendah teramatinya tidak sama dengan prediksi sederhana “S maksimum, lalu L maksimum”.

Untuk dua elektron tak ekuivalen p–p, kaidah Hund sederhana memprediksi ^{3}D sebagai term terendah. Untuk p–d, kaidah yang sama memprediksi ^{3}F. Data tingkat C I menunjukkan bahwa interaksi konfigurasi dan perbedaan energi radial dapat membalik urutan tersebut.

Konfigurasi C I	Prediksi Hund sederhana	Term terendah teramati	Energi term terendah (cm^{-1})	Mengapa merupakan pengecualian
$2s^2 2p3p$	^{3}D	^{1}P	68 856,35	Singlet ^{1}P berada di bawah ^{3}D (69 689,49).
$2s^2 2p3d$	^{3}F	^{1}D°	77 679,83	^{1}D° berada di bawah ^{3}F° (78 199,09).
$2s^2 2p4d$	^{3}F	^{3}D°	83 820,16	^{3}D° berada di bawah anggota ^{3}F° sekitar 83 849 cm^{-1}.
$2s^2 2p5d$	^{3}F	^{3}P°/^{3}D° campuran	≈86 322–86 363	Tingkat dominan ^{3}P°/^{3}D° mendahului ^{3}F°.

Data tersebut berasal dari tabel tingkat C I NIST ASD. Kaidah Hund paling andal untuk term dari satu konfigurasi dengan orbital radial sebanding; pada konfigurasi tereksitasi, pemisahan radial dan pencampuran konfigurasi dapat sebanding atau lebih besar daripada stabilisasi pertukaran.

Kesimpulan. Sedikitnya tiga contoh yang jelas ialah $2s^2 2p3p$, $2s^2 2p3d$, dan $2s^2 2p4d$; $2s^2 2p5d$ memberi contoh tambahan.

Pembahasan 11.31 — Semua transisi yang diperbolehkan antara $2s^2 2p^2$ dan $2s2p^3$

Inti soal. Menerapkan $\Delta S=0$, $\Delta L=0,\pm1$, $\Delta J=0,\pm1$ (bukan $0\leftrightarrow0$), serta perubahan paritas/$\Delta\Sigma l=\pm1$.

Konfigurasi $2s^2 2p^2$ berparitas genap, sedangkan $2s2p^3$ berparitas ganjil, sehingga syarat perubahan paritas dipenuhi. Term ^5S tidak dapat terhubung karena $\Delta S \neq 0$. Untuk setiap pasangan term yang lolos, diperiksa pula ΔJ.

Tingkat bawah $2s^2 2p^2$	Tingkat atas $2s2p^3$	Bilangan gelombang / cm^{-1}
$^3P_0$	$^3D_1$	64 089,8
$^3P_0$	$^3P_1$	75 254,0
$^3P_0$	$^3S_1$	105 798,7
$^3P_1$	$^3D_1$	64 073,4
$^3P_1$	$^3D_2$	64 074,5
$^3P_1$	$^3P_0$	75 239,7
$^3P_1$	$^3P_1$	75 237,6
$^3P_1$	$^3P_2$	75 238,9
$^3P_1$	$^3S_1$	105 782,3
$^3P_2$	$^3D_1$	64 046,4
$^3P_2$	$^3D_2$	64 047,5
$^3P_2$	$^3D_3$	64 043,5
$^3P_2$	$^3P_1$	75 210,6
$^3P_2$	$^3P_2$	75 211,9
$^3P_2$	$^3S_1$	105 755,3
$^1D_2$	$^1D_2$	87 685,4
$^1D_2$	$^1P_1$	109 685,4
$^1S_0$	$^1P_1$	98 230,0

Contoh perhitungan: untuk $^3P_1 \rightarrow {}^3D_2$, $\tilde{\nu} = 64090{,}9 - 16{,}4 = 64074{,}5\ cm^{-1}$. Semua baris lain diperoleh dengan pengurangan energi tingkat atas dan bawah yang sama.

Pemeriksaan jumlah: ada 15 garis triplet dan 3 garis singlet, sehingga total 18 transisi dipol-listrik yang diizinkan dalam hampiran kopling L–S.

Kesimpulan. Bilangan gelombang seluruh 18 transisi yang diperbolehkan tercantum pada tabel.

Pembahasan 11.32 — Transisi C I $2s^2 2p3s \rightarrow 2s^2 2p^2$

Inti soal. Menggunakan tingkat energi NIST C I dan kaidah seleksi Soal 11.31 untuk menghitung delapan garis yang diizinkan.

Tingkat NIST yang digunakan (cm^{-1}) adalah $2s^2 2p3s$ $^3P^\circ_0 = 60333{,}4476$; $^3P^\circ_1 = 60352{,}6584$; $^3P^\circ_2 = 60393{,}1693$; dan $^1P^\circ_1 = 61981{,}83211$. Energi tingkat bawah

digunakan dengan nilai NIST: $^3P_0=0$; $^3P_1=16{,}416713$; $^3P_2=43{,}4134567$; $^1D_2=10192{,}657$; $^1S_0=21648{,}030$.

Tingkat atas	Tingkat bawah	$\tilde{\nu}$ / cm^{-1}	λ_vakum / nm
$^3P^\circ_1$	$^3P_0$	60 352,6584	165,6928
$^3P^\circ_0$	$^3P_1$	60 317,0309	165,7907
$^3P^\circ_1$	$^3P_1$	60 336,2417	165,7379
$^3P^\circ_2$	$^3P_1$	60 376,7526	165,6267
$^3P^\circ_1$	$^3P_2$	60 309,2449	165,8121
$^3P^\circ_2$	$^3P_2$	60 349,7558	165,7008
$^1P^\circ_1$	$^1D_2$	51 789,1751	193,0905
$^1P^\circ_1$	$^1S_0$	40 333,8021	247,9310

$$\lambda(nm) = 10^7/\tilde{\nu}\,(cm^{-1})$$

Tidak ada garis $^3P^\circ_0 \rightarrow {}^3P_0$ karena transisi J=0→0 terlarang. Garis singlet tetap memenuhi ΔS=0: $^1P^\circ_1 \rightarrow {}^1D_2$ dan $^1P^\circ_1 \rightarrow {}^1S_0$.

Kesimpulan. Terdapat enam garis triplet dan dua garis singlet. Bilangan gelombang dan panjang gelombang vakumnya diberikan pada tabel.

Pembahasan 11.33 — Pemisahan spin–orbit 2p hidrogen

Inti soal. Menggunakan Pers. (11.66) untuk selisih energi $^2P_{3/2}$ dan $^2P_{1/2}$.

Untuk elektron 2p, L=1 dan S=1/2. Pers. (11.66) memberi $E_{SO}(J) = \tfrac{1}{2}\langle\xi(r)\rangle\hbar^2[J(J+1)-L(L+1)-S(S+1)]$. Selisih faktor kurung antara J=3/2 dan J=1/2 adalah 3.

$$\Delta E = E(^2P_{3/2}) - E(^2P_{1/2}) = (3/2)\langle\xi(r)\rangle\hbar^2$$

Untuk potensial Coulomb, $\xi(r)=e^2/[8\pi\varepsilon_0 m_e^2 c^2 r^3]$. Nilai harapan hidrogenik 2p adalah $\langle r^{-3}\rangle = 1/(24a_0^3)$. Substitusi dan penggunaan $\alpha = e^2/(4\pi\varepsilon_0\hbar c)$ memberikan

$$\Delta E = \alpha^4 m_e c^2/32 = 4{,}53\times10^{-5}\,eV$$

$$\Delta E/(hc) \approx 0{,}365\,cm^{-1}$$

Model ini mengisolasi interaksi spin–orbit. Koreksi massa relativistik, Darwin (untuk keadaan yang relevan), recoil, dan efek elektrodinamika kuantum diperlukan untuk perbandingan presisi.

Kesimpulan. Pemisahan spin–orbit 2p diperkirakan $4{,}53\times10^{-5}$ eV atau sekitar 0,365 cm^{-1}.

Pembahasan 11.34 — Multiplet pada Gambar 11.6

Inti soal. Memeriksa urutan tingkat term 1s2p ^3P helium terhadap kaidah regular/terbalik.

Konfigurasi 1s2p mempunyai satu elektron p pada subkulit yang kurang dari setengah penuh. Kaidah Bagian 11.6 memprediksi multiplet regular: tingkat J terendah harus paling rendah.

Pada Gambar 11.6, urutannya adalah $^3P_0$ paling rendah, lalu $^3P_1$, dan $^3P_2$ paling tinggi. Ini tepat urutan regular. Term ^1P hanya mempunyai J=1 sehingga tidak mempunyai urutan multiplet untuk diuji.

Kesimpulan. Tidak ada pelanggaran; Gambar 11.6 mengikuti kaidah multiplet regular.

Pembahasan 11.35 — Diagram pemecahan konfigurasi C $2p^2$

Inti soal. Menyusun urutan konfigurasi → term → tingkat → keadaan untuk karbon $1s^2 2s^2 2p^2$.

Tolakan antarelektron memecah konfigurasi menjadi term ^3P, ^1D, dan ^1S. Kaidah Hund memberi ^3P paling rendah, kemudian ^1D, sedangkan soal menetapkan ^1S tertinggi. Interaksi spin–orbit memecah ^3P menjadi J=0,1,2. Karena p^2 kurang dari setengah penuh, urutannya regular.

Tahap	Susunan energi dari rendah ke tinggi
Konfigurasi	$1s^2 2s^2 2p^2$
Term	$^3P < {}^1D < {}^1S$
Tingkat	$^3P_0 < {}^3P_1 < {}^3P_2 < {}^1D_2 < {}^1S_0$
Keadaan M_J	$^3P_0$: 1; $^3P_1$: 3; $^3P_2$: 5; $^1D_2$: 5; $^1S_0$: 1

Energi eksperimen relatif dasar yang dapat dicantumkan pada diagram adalah 0; 16,4; 43,4; 10192,6; dan 21648,0 cm^{-1}. Dalam medan magnet, setiap tingkat J terpecah menjadi 2J+1 garis M_J.

Kesimpulan. Diagram lengkap harus menampilkan $^3P_0$ sebagai tingkat dasar, $^3P_1$ dan $^3P_2$ sedikit di atasnya, lalu $^1D_2$ dan $^1S_0$.

Pembahasan 11.36 — Pemisahan Zeeman $^2P_{1/2}$ hidrogen

Inti soal. Menghitung selisih energi keadaan M_J=+1/2 dan −1/2 pada B=0,200 T.

Untuk L=1, S=1/2, J=1/2, faktor Landé adalah

$$g = 1 + [J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)]/[2J(J+1)] = 2/3$$

Pers. (11.74) memberi E_B=μ_BgBM_J. Selisih antara M_J=+1/2 dan −1/2 mempunyai ΔM_J=1:

$$\Delta E = \mu_B g B = (9{,}2740101 \times 10^{-24} JT^{-1})(2/3)(0{,}200T)$$

$$\Delta E = 1{,}2365 \times 10^{-24} J = 7{,}72 \times 10^{-6} eV = 0{,}0623 cm^{-1}$$

Kesimpulan. Pemisahan energinya 1,24×10⁻²⁴ J, setara 7,72 μeV atau 0,0623 cm⁻¹.

Pembahasan 11.37 — Penurunan Pers. (11.78) dan (11.79)

Inti soal. Menurunkan elemen matriks operator satu-elektron dan dua-elektron untuk satu determinan Slater.

(a) Operator Σ_if̂_i simetris terhadap pertukaran elektron. Ekspansi D*D menghasilkan n!² pasangan permutasi. Ortonormalitas spin-orbital membuat semua integral nol kecuali ketika seluruh orbital "penonton" cocok. Untuk setiap orbital u_i terdapat (n−1)! kontribusi identik; faktor normalisasi 1/n! menyisakan satu kontribusi per orbital:

$$\langle D \vee \Sigma_i f_i \vee D \rangle = \Sigma_i \langle u_i \vee f \vee u_i \rangle = \Sigma_i \langle v_i \vee f \vee v_i \rangle$$

Fungsi spin hilang karena ⟨s_i|s_i⟩=1. Inilah Pers. (11.78).

(b) Untuk setiap pasangan i<j, dua jenis kontraksi bertahan. Kontraksi langsung mempertahankan u_i pada elektron 1 dan u_j pada elektron 2; kontraksi pertukaran menukar keduanya dan membawa tanda minus karena paritas permutasi ganjil:

$$\langle ij \vee \hat{g} \vee ij \rangle - \langle ij \vee \hat{g} \vee ji \rangle$$

Ketika ĝ tidak bergantung spin, bagian spin integral pertukaran adalah ⟨s_i|s_j⟩⟨s_j|s_i⟩ = δ_(m_si,m_sj). Bagian langsung selalu mempunyai faktor spin satu. Maka

$$\langle D \vee \Sigma_i \Sigma_j > {}_i \hat{g}_{ij} \vee D \rangle = \Sigma_i \Sigma_j > {}_i \{ \langle v_i v_j \vee \hat{g} \vee v_i v_j \rangle - \delta_(m_{si}, m_{sj}) \langle v_i v_j \vee \hat{g} \vee v_j v_i \rangle \}$$

Ini Pers. (11.79). Integral pertukaran hanya muncul untuk dua spin-orbital dengan spin yang sama.

Kesimpulan. Pers. (11.78) berasal dari kontraksi diagonal satu-elektron; Pers. (11.79) terdiri atas integral langsung dikurangi integral pertukaran yang dibatasi oleh delta spin.

Pembahasan 11.38 — Energi konfigurasi subkulit tertutup

Inti soal. Mengelompokkan penjumlahan spin-orbital menjadi orbital ruang berpasangan dan menurunkan Pers. (11.83).

Pada konfigurasi tertutup, setiap orbital ruang φ_i ditempati α dan β. Ambil dua orbital ruang berbeda i dan j. Terdapat empat pasangan elektron lintas orbital: iα–jα, iα–jβ, iβ–jα, iβ–jβ. Keempatnya memberi Coulomb J_ij, tetapi hanya pasangan spin sama (αα dan ββ) memberi pertukaran K_ij. Jadi kontribusinya 4J_ij−2K_ij.

Dalam orbital ruang yang sama i, hanya ada pasangan iα–iβ. Kontribusinya J_ii; tidak ada pertukaran karena spinnya berbeda. Dengan menghitung setiap pasangan orbital ruang berbeda sekali:

$$\Sigma_{\{spin-orbital, j>i\}}\left[J_{\mathrm{ij}}-\delta_{spin K_{\mathrm{ij}}}\right]=\Sigma_{\{j>i\}}^{\{n/2\}}(4J_{\mathrm{ij}}-2K_{\mathrm{ij}})+\Sigma_{\mathrm{i}}^{\{n/2\}}J_{\mathrm{ii}}$$

Untuk menulisnya sebagai penjumlahan ganda penuh, gunakan J_ij=J_ji, K_ij=K_ji, dan J_ii=K_ii:

$$\Sigma_{\mathrm{i}}\Sigma_{\mathrm{j}}(2J_{\mathrm{ij}}-K_{\mathrm{ij}})=\Sigma_{\{j>i\}}(4J_{\mathrm{ij}}-2K_{\mathrm{ij}})+\Sigma_{\mathrm{i}}(2J_{\mathrm{ii}}-K_{\mathrm{ii}})$$

$$\Sigma_{\{j>i\}}(4J_{\mathrm{ij}}-2K_{\mathrm{ij}})+\Sigma_{\mathrm{i}}J_{\mathrm{ii}}$$

Suku satu-elektron muncul dua kali untuk setiap φ_i karena ditempati dua spin. Dengan menambahkan keduanya diperoleh

$$E=2\Sigma_{\mathrm{i}}^{\{n/2\}}\langle\varphi_{\mathrm{i}}\vee f\vee\varphi_{\mathrm{i}}\rangle+\Sigma_{\mathrm{i}}^{\{n/2\}}\Sigma_{\mathrm{j}}^{\{n/2\}}(2J_{\mathrm{ij}}-K_{\mathrm{ij}})$$

Kesimpulan. Bagian (a) dan (b) terbukti, dan persamaan terakhir adalah Pers. (11.83).

Pembahasan 11.39 — Ortonormalitas determinan Slater

Inti soal. Membuktikan overlap dua determinan yang tersusun dari spin-orbital ortonormal.

Overlap dua determinan Slater dapat ditulis sebagai determinan matriks overlap orbital:

$$\langle D'\vee D\rangle=detS, S_{\mathrm{ij}}=\langle u'_{\mathrm{i}}\vee u_{\mathrm{j}}\rangle$$

Jika D′=D dengan urutan kolom sama, S adalah matriks identitas dan detS=1. Jika kedua determinan dibangun dari himpunan spin-orbital ortonormal yang berbeda sedikitnya satu orbital, setelah kolom yang sama disejajarkan akan ada satu baris/kolom yang seluruh overlapnya nol terhadap orbital yang tidak cocok; detS=0.

Jika dua determinan hanya berbeda urutan kolom, penataan kanonik harus digunakan. Permutasi kolom mengubah tanda determinan, bukan keadaan fisiknya; dengan konvensi urutan yang sama, norma tetap satu dan determinan berbeda ortogonal.

Kesimpulan. Determinan Slater yang dibangun dari spin-orbital ortonormal membentuk himpunan ortonormal: ⟨D_I|D_J⟩=δ_IJ.

Pembahasan 11.40 — Mengapa −(E₂s+2E₁s) salah untuk Li

Inti soal. Membedakan energi ionisasi berurutan, energi orbital, dan energi total atom.

E_2s yang diukur untuk Li netral adalah beda energi antara $Li(1s^2 2s)$ dan $Li^+(1s^2)$. E_1s yang diukur dengan mengeluarkan elektron inti dari Li netral menghasilkan keadaan ion berlubang inti, bukan energi untuk dua proses identik yang dapat dikalikan dua.

Setelah satu elektron dilepaskan, muatan ion dan orbital yang tersisa berubah serta berelaksasi. Karena itu energi untuk melepaskan elektron 1s pertama tidak sama dengan energi untuk melepaskan elektron 1s kedua. Tolakan antarelektron juga menyebabkan energi total bukan jumlah sederhana tiga "energi pengikatan orbital" eksperimen dari atom netral.

Energi total atom relatif terhadap inti telanjang dan tiga elektron bebas adalah negatif jumlah energi ionisasi berurutan dari keadaan dasar:

$$E_{total}(Li) = -[I_1(Li) + I_2(Li^+) + I_3(Li^{2+})]$$

Kesimpulan. Energi total harus dibangun dari energi ionisasi berurutan sistem yang berbeda muatan; ekspresi $-(E_2s+2E_1s)$ menghitung proses yang tidak konsisten dan mengabaikan relaksasi serta interaksi elektron.

Pembahasan 11.41 — Sumbangan momen magnet atom

Inti soal. Membandingkan skala momen magnet elektronik dan inti serta menerapkannya pada keadaan dasar ^{87}Rb.

(a) Momen orbital dan spin elektron berskala magneton Bohr $\mu_B=e\hbar/(2m_e)$, sedangkan momen inti berskala magneton inti $\mu_N=e\hbar/(2m_p)$. Karena $m_p/m_e\approx1836$, $\mu_N\approx\mu_B/1836$. Maka, untuk bilangan kuantum sebanding, sumbangan μ_I jauh paling kecil.

(b) Keadaan dasar Rb adalah $[Kr]5s^1\ {}^2S_{1/2}$. Huruf S berarti L=0, sehingga momen orbital elektronik $\mu_L=0$. Elektron 5s tetap mempunyai S=1/2 sehingga $\mu_S\neq0$. Isotop ^{87}Rb mempunyai spin inti I=3/2, sehingga μ_I juga tidak nol, walaupun jauh lebih kecil.

Kesimpulan. (a) μ_I paling kecil; (b) pada keadaan dasar ^{87}Rb, $\mu_L=0$, sedangkan μ_S dan μ_I tidak nol.

Pembahasan 11.42 — Benar atau salah

Inti soal. Menilai lima pernyataan tentang multipisitas, jumlah tingkat, energi Hartree, dan batas Hartree–Fock.

Butir	Jawaban	Alasan
(a)	Benar	Jumlah elektron ganjil menghasilkan S setengah-bulat; 2S+1 menjadi bilangan genap.

Butir	Jawaban	Alasan
(b)	Benar	Jumlah elektron genap menghasilkan S bulat; 2S+1 menjadi bilangan ganjil.
(c)	Salah	Jumlah tingkat term adalah 2min(L,S)+1, bukan selalu 2S+1; misalnya ^{4}S hanya mempunyai satu tingkat J=3/2.
(d)	Salah	Σ ε_i menghitung setiap tolakan antarelektron dua kali. Energi Hartree harus mengurangi satu kali jumlah integral Coulomb pasangan.
(e)	Salah	Satu determinan Hartree–Fock tidak memuat korelasi elektron dinamis. Energinya merupakan batas variasional di atas energi nonrelativistik eksak.

Kesimpulan. (a) benar; (b) benar; (c) salah; (d) salah; (e) salah.

BAB 12 — SIMETRI MOLEKUL

Soal

Seluruh soal Bab 12 berikut dipertahankan sesuai urutan sumber. Pembahasan lengkap ditempatkan setelah daftar soal.

Bagian	12.1	12.2	Umum
Nomor soal	12.1-12.15	12.16-12.34	12.35

12.1 Benar atau salah? (a) Operasi simetri selalu komutatif. (b) Operasi simetri tidak pernah komutatif. (c) Hasil kali dua operasi simetri suatu molekul harus merupakan operasi simetri bagi molekul tersebut.

12.2 Tuliskan semua unsur simetri dari setiap molekul berikut: (a) H_2S; (b) NH_3; (c) CHF_3; (d) HOCl; (e) 1,3,5-triklorobenzena; (f) CH_2F_2; (g) CHFClBr.

12.3 Daftarkan semua operasi simetri dari setiap molekul pada Soal 12.2.

12.4 Perhatikan ion $PtCl_4^{2-}$ berbentuk segiempat-planar. Misalkan dua atom Cl yang cis satu sama lain dipertukarkan. Apakah pertukaran ini memenuhi definisi operasi simetri pada Bagian 12.1? Jika ya, nyatakan pertukaran tersebut sebagai suatu kombinasi dari empat jenis operasi simetri yang dibahas.

12.5 Operasi simetri apakah yang setara dengan setiap hasil kali operasi berikut? (a) $\hat{\sigma}^4$; (b) $\hat{\sigma}^7$; (c) $\hat{C}_4^2$; (d) $\hat{C}_4^6$; (e) $\hat{S}_4^2$; (f) $\hat{S}_6^3$; (g) $\hat{C}_{12}^3$; (h) $\hat{\imath}^3$.

12.6 Gunakan Gambar 12.7 untuk menyatakan operasi simetri pada SF_6 yang setara dengan setiap hasil kali berikut: (a) $\hat{C}_2(x)\hat{C}_4(z)$; (b) $\hat{C}_4(z)\hat{C}_2(x)$.

12.7 Untuk SF_6, pasangan operasi berikut manakah yang komutatif? (a) $\hat{C}_4(z)$, $\hat{\sigma}(xy)$; (b) $\hat{C}_4(z)$, $\hat{\sigma}(yz)$; (c) $\hat{C}_2(z)$, $\hat{C}_2(x)$; (d) $\hat{\sigma}(xy)$, $\hat{\sigma}(yz)$; (e) $\hat{\imath}$, $\hat{\sigma}(xy)$.

12.8 Informasi apakah yang diberikan simetri mengenai momen dipol setiap molekul pada Soal 12.2?

12.9 (a) Apakah H_2O_2 pada Gambar 12.12 mempunyai sumbu S_n? (b) Apakah molekul tersebut aktif optik? Jelaskan.

12.10 Untuk setiap operasi simetri berikut, tentukan matriks representatifnya dalam basis x, y, z: (a) $\hat{E}$; (b) $\hat{\sigma}(xy)$; (c) $\hat{\sigma}(yz)$; (d) $\hat{C}_2(x)$; (e) $\hat{S}_4(z)$; (f) $\hat{C}_3(z)$.

12.11 (a) Gunakan SF_6 pada Gambar 12.7 untuk memverifikasi bahwa $\hat{C}_2(x)\hat{\sigma}(xy) = \hat{\sigma}(xz)$. (b) Tuliskan matriks representatif dalam basis x, y, z bagi ketiga operasi pada bagian (a). Verifikasikan bahwa matriks-matriks tersebut dikalikan dengan cara yang sama seperti operasi simetrinya.

12.12 (a) Apakah nilai eigen operator $\hat{O}\_C_4$? (b) Apakah operator ini Hermitian?

12.13 Kerjakan hal yang sama seperti pada Soal 12.12 untuk operator $\hat{O}\_C_2$.

12.14 Orbital hidrogenik 2p_z diubah menjadi fungsi apa oleh (a) $\hat{O}\_C_4(z)$; (b) $\hat{O}\_C_4(y)$?

12.15 Sumbu rotasi-inversi, bukan sumbu rotasi-pencerminan, lazim digunakan untuk mengklasifikasikan simetri kristal. Setiap sumbu S_n ekuivalen dengan sumbu rotasi-inversi, dilambangkan $\bar{p}$, yang ordenya p dapat berbeda dari n. Operasi rotasi-inversi terdiri atas rotasi sebesar $2\pi/p$ radian yang diikuti inversi. Tunjukkan bahwa $\hat{S}_n(z) = \hat{i}[\hat{C}_n(z)\hat{C}_2(z)]$. Dengan demikian diperoleh korespondensi S_n: 1, 2, 3, 4 dan $\bar{p}$: $\bar{2}$, $\bar{1}$, $\bar{6}$, $\bar{4}$. Berikan tiga pasangan entri berikutnya dalam tabel tersebut.

12.16 Nyatakan apakah setiap himpunan berikut merupakan grup. (a) Semua bilangan real dengan aturan pembentukan "hasil kali" dua unsur berupa penjumlahan. (b) Semua bilangan bulat positif dengan aturan pembentukan hasil kali dua unsur berupa perkalian. (c) Semua bilangan real kecuali nol dengan aturan pembentukan hasil kali berupa perkalian.

12.17 Apakah himpunan semua matriks persegi berorde empat membentuk grup jika aturan pembentukan "hasil kali" dua unsur adalah penjumlahan matriks?

12.18 Apakah himpunan akar-akar pangkat n dari satu [Persamaan (1.36)] dengan aturan penggabungan berupa perkalian biasa membentuk grup? Berikan alasan.

12.19 Tentukan kelompok titik setiap molekul berikut: (a) CH_4; (b) CH_3F; (c) CH_2F_2; (d) CHF_3; (e) SF_6; (f) SF_5Br; (g) trans-SF_4Br_2; (h) CDH_3.

12.20 Tentukan kelompok titik: (a) $CH_2{=}CH_2$; (b) $CH_2{=}CHF$; (c) $CH_2{=}CF_2$; (d) cis-CHF=CHF; (e) trans-CHF=CHF.

12.21 Tentukan kelompok titik: (a) benzena; (b) fluorobenzena; (c) o-difluorobenzena; (d) m-difluorobenzena; (e) p-difluorobenzena; (f) 1,3,5-trifluorobenzena; (g) 1,4-difluoro-2,5-dibromobenzena; (h) naftalena; (i) 2-kloronaftalena.

12.22 Tentukan kelompok titik: (a) HCN; (b) H_2S; (c) CO_2; (d) CO; (e) C_2H_2; (f) CH_3OH; (g) ND_3; (h) OCS; (i) P_4; (j) PCl_3; (k) PCl_5; (l) $B_{12}Cl_{12}^{2-}$; (m) UF_6; (n) Ar.

12.23 Tentukan kelompok titik: (a) FeF_6^{3-}; (b) IF_5; (c) $CH_2{=}C{=}CH_2$; (d) C_8H_8, kubana; (e) $C_6H_6Cr(CO)_3$; (f) B_2H_6; (g) XeF_4; (h) F_2O; (i) spiropentana.

12.24 Tentukan orde setiap grup berikut: (a) C_{3v}; (b) C_s; (c) $C_{\infty v}$; (d) D_{3h}.

12.25 Hasil kali dua anggota grup harus merupakan anggota grup tersebut. (a) Daftarkan anggota—operasi simetri—grup C_{2v} dengan menggunakan sumbu x, y, dan z untuk menentukan sumbu atau bidang acuan setiap operasi. (b) Untuk setiap hasil kali dua anggota yang mungkin, nyatakan operasi simetri yang setara dengannya. Perhatikan bahwa operasi simetri tidak harus komutatif. (c) Tabel perkalian grup menampilkan seluruh hasil kali dua anggota grup yang mungkin.

Tuliskan tabel perkalian C_{2v} dengan setiap anggota ditampilkan di bagian atas dan di sebelah kiri tabel; setiap entri adalah hasil kali anggota di sebelah kiri baris dan anggota di bagian atas kolom entri tersebut.

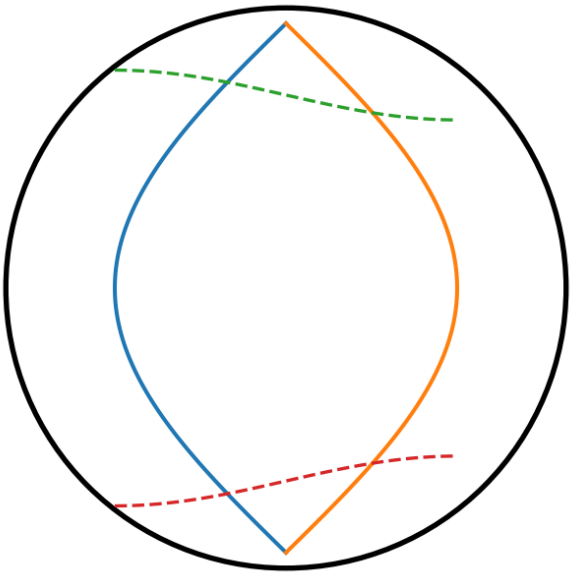
12.26 Nyatakan apakah setiap grup berikut Abelian: (a) C_3; (b) C_{3v}.

12.27 Struktur ferosena, $C_5H_5FeC_5H_5$, terdiri atas atom besi yang berada tepat di antara dua pentagon beraturan sejajar. Pada konformasi bertumpuk, titik-titik sudut kedua pentagon sejajar; pada konformasi berselang-seling, satu pentagon diputar sebesar $2\pi/10$ radian terhadap pentagon lainnya. Hasil difraksi elektron menunjukkan bahwa konformasi kesetimbangan fase gas adalah konformasi bertumpuk, dengan penghalang rotasi internal cincin yang cukup rendah [S. Coriani dkk., ChemPhysChem, 7, 245 (2006)]. Tentukan kelompok titik: (a) ferosena bertumpuk; (b) ferosena berselang-seling.

12.28 Apakah kelompok titik ion kompleks tris(etilendiamina)kobalt(III)? Setiap gugus $NH_2CH_2CH_2NH_2$ menempati dua posisi yang berdekatan pada bola koordinasi oktahedral.

12.29 Perhatikan molekul D_{nh} dengan sumbu z berimpit dengan sumbu C_n dan sumbu x berimpit dengan salah satu sumbu C_2. Tunjukkan bahwa hasil kali $\hat{\sigma}(xy)\hat{C}_2(x)$ memindahkan titik yang semula berada pada (x, y, z) ke (x, −y, z). Karena itu, $\hat{\sigma}(xy)\hat{C}_2(x) = \hat{\sigma}(xz)$. Karena $\hat{C}_2(x)$ dan $\hat{\sigma}(xy)$ merupakan operasi simetri, hasil kalinya harus merupakan operasi simetri. Jadi, bidang xz adalah bidang simetri. Argumen yang sama berlaku bagi setiap sumbu C_2, sehingga molekul mempunyai n bidang σ_v.

12.30 Tentukan kelompok titik: (a) piramida beralas persegi; (b) kerucut lingkaran tegak; (c) lamina persegi; (d) lamina persegi yang sisi atas dan bawahnya dicat dengan warna berbeda; (e) silinder lingkaran tegak; (f) silinder lingkaran tegak yang kedua ujungnya dicat dengan warna berbeda; (g) silinder lingkaran tegak dengan satu garis yang dicat sejajar sumbu; (h) keping salju; (i) donat atau torus; (j) bola bisbol, Gambar 12.17; (k) orbital 2p_z; (l) manusia, dengan mengabaikan organ internal dan sedikit asimetri eksternal kiri-kanan.



Gambar 12.17. Bola bisbol. Bagian jahitan yang digambar putus-putus dan utuh berada pada belahan yang berbeda.

12.31 (a) Padatan Platonik apakah yang dual terhadap tetrahedron beraturan? (b) Berapa banyak titik sudut yang dimiliki dodekahedron pentagonal?

12.32 (a) Untuk nilai n berapakah keberadaan sumbu S_n mengimplikasikan adanya bidang simetri? (b) Untuk nilai n berapakah keberadaan sumbu S_n mengimplikasikan adanya pusat simetri? (c) Kelompok D_nd mempunyai sumbu S_{2n}. Untuk nilai n berapakah kelompok tersebut mempunyai pusat simetri?

12.33 Untuk kelompok titik manakah suatu molekul dapat mempunyai momen dipol?

12.34 Untuk kelompok titik manakah suatu molekul dapat aktif optik?

12.35 Dua orang memainkan permainan berikut. Secara bergiliran, masing-masing meletakkan satu koin pada permukaan papan catur besar. Koin dapat diletakkan di mana saja pada papan selama tidak bertumpang-tindih dengan koin yang telah ditempatkan. Satu koin boleh menutupi lebih dari satu petak. Setelah diletakkan, koin tidak boleh dipindahkan. Ketika salah seorang pemain tidak menemukan ruang untuk meletakkan koin lain pada papan, ia kalah. Dengan permainan terbaik, apakah pemain yang meletakkan koin pertama atau lawannya yang menang? Berikan strategi kemenangan.

PEMBAHASAN LENGKAP SEMUA SOAL BAB 12

Simetri Molekul

Pembahasan menggunakan definisi operasi simetri sebagai transformasi ruang yang mempertahankan jarak, algoritma penentuan kelompok titik, representasi matriks, dan sifat grup.

Pembahasan 12.1 — Komutativitas operasi simetri

Inti soal. Menilai tiga pernyataan umum tentang hasil kali operasi simetri.

Butir	Jawaban	Alasan
(a)	Salah	Dalam grup non-Abelian, urutan operasi penting; contohnya rotasi $C_4(z)$ dan $C_2(x)$ pada SF_6.
(b)	Salah	Sebagian pasangan memang komutatif; identitas dan inversi komutatif dengan semua operasi, dan semua operasi grup Abelian saling komutatif.
(c)	Benar	Sifat tertutup grup menyatakan hasil kali dua operasi simetri molekul harus kembali menjadi operasi simetri molekul.

Kesimpulan. (a) salah; (b) salah; (c) benar.

Pembahasan 12.2 — Unsur simetri tujuh molekul

Inti soal. Mengidentifikasi sumbu rotasi, bidang cermin, pusat inversi, dan sumbu rotasi-pencerminan dari geometri kesetimbangan.

Molekul	Geometri/kelompok titik	Unsur simetri nontrivial
H_2S	bengkok, C_2v	satu sumbu C_2; dua bidang σ_v
NH_3	piramida trigonal, C_3v	satu sumbu C_3; tiga bidang σ_v
CHF_3	tetrahedral tersubstitusi, C_3v	satu sumbu C_3 melalui C–H; tiga bidang σ_v
HOCl	bengkok planar, C_s	satu bidang σ (bidang molekul)
1,3,5-triklorobenzena	planar, D_3h	C_3; tiga C_2 tegak lurus C_3; σ_h; tiga σ_v; sumbu S_3
CH_2F_2	tetrahedral tersubstitusi, C_2v	satu C_2; dua σ_v
CHFClBr	tetrahedral semua substituen berbeda, C_1	tidak ada unsur nontrivial; hanya identitas

Identitas E selalu ada, tetapi bukan unsur geometris terpisah. Pada D_3h, sumbu S_3 berimpit secara geometris dengan sumbu C_3, tetapi menunjukkan jenis operasi yang berbeda.

Kesimpulan. Unsur simetri masing-masing molekul tercantum pada tabel.

Pembahasan 12.3 — Semua operasi simetri molekul Soal 12.2

Inti soal. Mengubah setiap unsur simetri menjadi daftar lengkap operasi, termasuk pangkat rotasi dan identitas.

Molekul	Operasi simetri lengkap
H_2S	E, C_2, σ_v, σ_v′
NH_3	E, C_3, C_3^2, 3σ_v
CHF_3	E, C_3, C_3^2, 3σ_v
HOCl	E, σ
1,3,5-triklorobenzena	E, $2C_3$, $3C_2$, σ_h, $2S_3$, 3σ_v
CH_2F_2	E, C_2, σ_v, σ_v′
CHFClBr	E

Notasi $2C_3$ berarti dua operasi, yaitu C_3 dan C_3^2; 3σ_v berarti tiga bidang yang masing-masing memberikan satu operasi pencerminan.

Kesimpulan. Daftar operasi lengkap sesuai orde grup: 4, 6, 6, 2, 12, 4, dan 1.

Pembahasan 12.4 — Pertukaran dua Cl cis pada $PtCl_4^{2-}$

Inti soal. Menguji apakah pertukaran hanya satu pasangan cis dapat direalisasikan sebagai transformasi kaku ruang tiga dimensi.

Operasi simetri harus mempertahankan jarak antara setiap pasangan titik. Misalkan sudut-sudut bujur sangkar diberi 1,2,3,4 dan hanya 1 serta 2 yang dipertukarkan, sedangkan 3 dan 4 tetap. Sebelum pertukaran, 1 dan 3 berseberangan; sesudahnya, citra 1 berada di posisi 2 yang berjarak sisi terhadap 3. Jarak pasangan berubah dari diagonal menjadi sisi.

Karena pemetaan tersebut tidak isometrik, tidak ada rotasi, pencerminan, inversi, rotasi-pencerminan, atau kombinasi operasi ruang yang hanya menukar satu pasangan cis sambil mempertahankan dua Cl lain. Pencerminan diagonal memang menukar sepasang cis, tetapi sekaligus menukar pasangan cis yang lain; itu bukan pertukaran tunggal yang dinyatakan soal.

Kesimpulan. Tidak. Pertukaran hanya dua Cl cis bukan operasi simetri, sehingga tidak dapat dinyatakan sebagai kombinasi empat jenis operasi simetri.

Pembahasan 12.5 — Pangkat operasi simetri

Inti soal. Mereduksi setiap pangkat dengan orde operasi dan identitas S_n=C_nσ_h.

Hasil kali	Reduksi	Operasi setara
$\hat{\sigma}^4$	$(\hat{\sigma}^2)^2=E^2$	E
$\hat{\sigma}^7$	$(\hat{\sigma}^2)^3\hat{\sigma}$	$\hat{\sigma}$
$\hat{C}_4^2$	rotasi 180°	$\hat{C}_2$
$\hat{C}_4^6$	$\hat{C}_4^4\hat{C}_4^2$	$\hat{C}_2$
$\hat{S}_4^2$	$\hat{C}_4^2\sigma\_h^2$	$\hat{C}_2$
$\hat{S}_6^3$	$\hat{C}_6^3\sigma\_h^3=\hat{C}_2\sigma\_h$	$\hat{\imath} = \hat{S}_2$
$\hat{C}_{12}^3$	rotasi 3×30°=90°	$\hat{C}_4$
$\hat{\imath}^3$	$\hat{\imath}^2\hat{\imath}$	$\hat{\imath}$

Kesimpulan. (a) E; (b) $\hat{\sigma}$; (c) $\hat{C}_2$; (d) $\hat{C}_2$; (e) $\hat{C}_2$; (f) $\hat{\imath}$; (g) $\hat{C}_4$; (h) $\hat{\imath}$.

Pembahasan 12.6 — Urutan rotasi pada SF_6

Inti soal. Menerapkan operator paling kanan terlebih dahulu dan mengidentifikasi sumbu C_2 hasilnya.

Gunakan transformasi aktif $C_4(z):(x,y,z)\to(-y,x,z)$ dan $C_2(x):(x,y,z)\to(x,-y,-z)$.

(a) Untuk $C_2(x)C_4(z)$, $C_4(z)$ dilakukan dahulu:

$$(x,y,z)\to(-y,x,z)\to(-y,-x,-z)$$

Matriks ini adalah rotasi C_2 terhadap sumbu di bidang xy sepanjang x−y (arah [1,−1,0]).

(b) Untuk $C_4(z)C_2(x)$:

$$(x,y,z)\to(x,-y,-z)\to(y,x,-z)$$

Ini adalah C_2 terhadap sumbu diagonal sepanjang x+y (arah [1,1,0]). Perbedaan sumbu menunjukkan kedua faktor tidak komutatif.

Kesimpulan. (a) C_2 pada diagonal x=−y; (b) C_2 pada diagonal x=y.

Pembahasan 12.7 — Pasangan operasi yang komutatif pada SF_6

Inti soal. Membandingkan hasil AB dan BA untuk lima pasangan operasi.

Pasangan	Komutatif?	Alasan ringkas
$C_4(z)$, $\sigma(xy)$	Ya	Rotasi hanya mengubah x,y; σ(xy) hanya mengubah tanda z.
$C_4(z)$, $\sigma(yz)$	Tidak	Pencerminan memilih arah x sehingga urutan dengan rotasi 90° menghasilkan pemetaan berbeda.

Pasangan	Komutatif?	Alasan ringkas
$C_2(z)$, $C_2(x)$	Ya	Matriks diagonal; keduanya menghasilkan $C_2(y)$ dalam kedua urutan.
$\sigma(xy)$, $\sigma(yz)$	Ya	Keduanya matriks diagonal; hasilnya $C_2(y)$.
i, $\sigma(xy)$	Ya	Inversi $-I$ komutatif dengan setiap transformasi linear.

Kesimpulan. Semua pasangan komutatif kecuali (b).

Pembahasan 12.8 — Simetri dan momen dipol

Inti soal. Menentukan apakah vektor dipol dapat tetap invariant terhadap seluruh operasi kelompok titik.

Komponen momen dipol yang mungkin tidak nol harus terletak sepanjang arah yang tidak berubah oleh semua operasi. Sumbu C_n dengan n>1 memaksa komponen tegak lurus sumbu menjadi nol; bidang cermin memaksa komponen normal bidang menjadi nol.

Molekul	Kelompok titik	Prediksi simetri untuk μ
H_2S	C_{2v}	dapat tidak nol hanya sepanjang sumbu C_2; molekul polar
NH_3	C_{3v}	sepanjang C_3; polar
CHF_3	C_{3v}	sepanjang C_3; polar
HOCl	C_s	harus berada dalam bidang molekul; umumnya polar
1,3,5-triklorobenzena	D_{3h}	semua komponen dipaksa nol; nonpolar
CH_2F_2	C_{2v}	sepanjang C_2; polar
CHFClBr	C_1	simetri tidak melarang komponen mana pun; umumnya polar

Kesimpulan. Hanya 1,3,5-triklorobenzena yang dipaksa mempunyai μ=0 oleh simetri; molekul lain dapat mempunyai momen dipol dengan arah yang tercantum.

Pembahasan 12.9 — Sumbu S_n dan aktivitas optik H_2O_2

Inti soal. Menganalisis konformasi nonplanar H_2O_2 pada Gambar 12.12.

Konformasi gauche H_2O_2 mempunyai satu sumbu C_2 yang melalui titik tengah ikatan O–O, tetapi tidak mempunyai bidang cermin, pusat inversi, atau sumbu rotasi-pencerminan S_n. S_1 ekuivalen dengan σ dan S_2 ekuivalen dengan i;

keduanya jelas tidak ada. Operasi S_n orde lebih tinggi juga tidak sesuai dengan geometri dua H dan dua O tersebut.

Molekul yang hanya mempunyai rotasi sejati dan tidak mempunyai σ, i, atau S_n adalah kiral. Dua konformasi dengan sudut dihedral berlawanan merupakan pasangan enansiomer dan dapat saling berkonversi melalui rotasi internal.

Kesimpulan. (a) Tidak mempunyai sumbu S_n. (b) Konformasi beku tersebut aktif optik karena termasuk C_2, kelompok titik kiral.

Pembahasan 12.10 — Matriks representatif dalam basis x,y,z

Inti soal. Menuliskan pemetaan koordinat untuk setiap operasi dan menyusunnya sebagai matriks 3×3.

Operasi	Pemetaan (x,y,z)	Matriks baris demi baris
E	(x,y,z)	[[1,0,0],[0,1,0],[0,0,1]]
σ(xy)	(x,y,−z)	[[1,0,0],[0,1,0],[0,0,−1]]
σ(yz)	(−x,y,z)	[[−1,0,0],[0,1,0],[0,0,1]]
C_2(x)	(x,−y,−z)	[[1,0,0],[0,−1,0],[0,0,−1]]
S_4(z)	(−y,x,−z)	[[0,−1,0],[1,0,0],[0,0,−1]]
C_3(z)	(−x/2−√3y/2, √3x/2−y/2, z)	[[−1/2,−√3/2,0],[√3/2,−1/2,0],[0,0,1]]

Konvensi yang dipakai adalah rotasi positif berlawanan arah jarum jam ketika dilihat sepanjang sumbu positif menuju titik asal.

Kesimpulan. Keenam matriks tercantum pada tabel dan semuanya ortogonal dengan determinan +1 untuk rotasi sejati dan −1 untuk operasi tak sejati.

Pembahasan 12.11 — Verifikasi $C_2(x)\sigma(xy)=\sigma(xz)$

Inti soal. Menerapkan dua transformasi koordinat dan mengalikan matriksnya.

Operator kanan dilakukan lebih dahulu. Pencerminan σ(xy) memberi (x,y,z)→(x,y,−z). Rotasi C_2(x) kemudian memberi (x,y,−z)→(x,−y,z), tepat pemetaan σ(xz).

$$C_2(x) = diag(1,-1,-1), \sigma(xy) = diag(1,1,-1)$$

$$C_2(x)\sigma(xy) = diag(1,-1,1) = \sigma(xz)$$

Pada SF_6, pemetaan ini mempertahankan posisi himpunan enam F sehingga ketiganya memang operasi simetri.

Kesimpulan. Pemetaan koordinat dan perkalian matriks sama-sama memberi $C_2(x)\sigma(xy)=\sigma(xz)$.

Pembahasan 12.12 — Nilai eigen dan Hermitisitas C_4

Inti soal. Menggunakan sifat $C_4^4=E$ dan hubungan adjoint operator simetri unitary.

Jika $\hat{C}_4\psi=\lambda\psi$, maka penerapan pangkat keempat memberi $\lambda^4\psi=\psi$. Karena $\psi\neq0$, $\lambda^4=1$, sehingga

$$\lambda \in \{1, -1, i, -i\}$$

Operator rotasi mempertahankan norma, jadi unitary dan $\hat{C}_4\dagger=\hat{C}_4^{-1}=\hat{C}_4^3$. Operator Hermitian harus sama dengan adjoint-nya dan hanya mempunyai nilai eigen real. Karena $\hat{C}_4^3\neq\hat{C}_4$ serta ada eigenvalue $\pm i$, $\hat{C}_4$ secara umum bukan Hermitian.

Kesimpulan. (a) 1, −1, i, −i; (b) $\hat{C}_4$ bukan operator Hermitian, meskipun unitary.

Pembahasan 12.13 — Nilai eigen dan Hermitisitas C_2

Inti soal. Mengulangi analisis untuk operasi berorde dua.

Dari $\hat{C}_2^2=E$ diperoleh $\lambda^2=1$, sehingga $\lambda=+1$ atau -1. Selain unitary, $\hat{C}_2^{-1}=\hat{C}_2$; maka $\hat{C}_2\dagger=\hat{C}_2$ dan operator ini Hermitian.

Kesimpulan. Nilai eigennya ±1 dan $\hat{C}_2$ adalah Hermitian sekaligus unitary.

Pembahasan 12.14 — Transformasi orbital 2p_z

Inti soal. Memperlakukan orbital p sebagai komponen vektor sepanjang sumbunya.

(a) Rotasi C_4 terhadap z tidak mengubah koordinat z. Orbital 2p_z, yang berbanding lurus dengan z kali fungsi radial, tetap 2p_z.

(b) Rotasi positif 90° terhadap y membawa sumbu z ke sumbu x menurut konvensi rotasi aktif yang digunakan. Karena itu lobus dan bidang nodal p_z dipindahkan menjadi p_x.

$$\hat{O}_{C_4}(z)2p_z = 2p_z, \hat{O}_{C_4}(y)2p_z = 2p_x$$

Jika konvensi arah rotasi berlawanan dipilih, hasil kedua berbeda tanda, $-2p_x$; tanda global tidak mengubah kerapatan orbital tetapi penting sebagai fase fungsi basis.

Kesimpulan. (a) 2p_z; (b) 2p_x untuk konvensi rotasi positif bab ini.

Pembahasan 12.15 — Korespondensi S_n dan sumbu rotasi-inversi

Inti soal. Menunjukkan hubungan operator dan meneruskan tabel $n\leftrightarrow\bar{p}$.

Karena inversi dapat ditulis sebagai $i=C_2(z)\sigma_h$ dan semua operasi pada sumbu yang sama komutatif, $\sigma_h=iC_2(z)$. Maka

$$S_n(z) = C_n(z)\sigma_h = i[C_n(z)C_2(z)]$$

Kombinasi rotasi C_nC_2 adalah rotasi sebesar $2\pi/n+\pi$. Setelah sudut direduksi modulo 2π dan dipilih orde rotasi-inversi konvensional, pola korespondensinya adalah: n ganjil → p=2n; n≡2 (mod 4) → p=n/2; n kelipatan 4 → p=n.

n	S_n ekuivalen dengan
1	2-bar
2	1-bar
3	6-bar
4	4-bar
5	10-bar
6	3-bar
7	14-bar

Kesimpulan. Tiga pasangan berikutnya adalah S_5↔10-bar, S_6↔3-bar, dan S_7↔14-bar.

Pembahasan 12.16 — Uji aksioma grup pada himpunan bilangan

Inti soal. Memeriksa ketertutupan, asosiativitas, identitas, dan invers untuk setiap himpunan/operasi.

Himpunan dan operasi	Grup?	Penjelasan
Semua real, operasi “hasil kali” = penjumlahan	Ya	Tertutup dan asosiatif; identitas 0; invers a adalah −a.
Bulat positif, operasi = perkalian	Tidak	Identitas 1 ada, tetapi bilangan seperti 2 tidak mempunyai invers 1/2 di dalam himpunan.
Real tak nol, operasi = perkalian	Ya	Tertutup, asosiatif, identitas 1, dan invers a^{-1} tetap real tak nol.

Kesimpulan. (a) grup Abelian; (b) bukan grup; (c) grup Abelian.

Pembahasan 12.17 — Matriks 4×4 di bawah penjumlahan

Inti soal. Menguji semua matriks persegi berorde empat dengan operasi penjumlahan.

Jumlah dua matriks 4×4 tetap matriks 4×4; penjumlahan matriks asosiatif; matriks nol adalah identitas; dan invers aditif A adalah −A, yang juga 4×4. Penjumlahan juga komutatif.

Kesimpulan. Ya, semua matriks 4×4 membentuk grup Abelian di bawah penjumlahan.

Pembahasan 12.18 — Akar pangkat n dari satu sebagai grup

Inti soal. Memeriksa himpunan U_n={e^{2πik/n}} di bawah perkalian kompleks.

Perkalian dua unsur memberi e^{2πi(k+l)/n}, yang sama dengan salah satu unsur setelah indeks direduksi modulo n. Perkalian kompleks asosiatif; identitas adalah k=0, yaitu 1; dan invers unsur k adalah unsur n−k.

$$\omega \quad = \omega^{(k+l) mod n}, (\omega^k)^{-1} = \omega^{n-k}$$

Kesimpulan. Ya. Himpunan tersebut adalah grup siklik Abelian berorde n, dibangkitkan oleh ω=e^{2πi/n}.

Pembahasan 12.19 — Kelompok titik molekul turunan tetrahedral dan oktahedral

Inti soal. Mengikuti algoritma: cari kelompok khusus, sumbu utama, sumbu C_2 tegak lurus, lalu bidang/inversi.

Molekul	Kelompok titik	Unsur penentu
CH_4	T_d	tetrahedron sempurna: $4C_3$, $3C_2$, S_4, σ_d
CH_3F	C_3v	C_3 sepanjang C–F dan 3σ_v
CH_2F_2	C_2v	C_2 dan 2σ_v
CHF_3	C_3v	C_3 sepanjang C–H dan 3σ_v
SF_6	O_h	oktahedron dengan i
SF_5Br	C_4v	sumbu C_4 melalui Br–S–F aksial; 4σ_v
trans-SF_4Br_2	D_4h	Br trans pada sumbu utama, C_4, $4C_2$, i, σ_h
CDH_3	C_3v	isotop D membedakan satu posisi; C_3 melalui C–D

Kesimpulan. Kelompok titik berturut-turut: T_d, C_3v, C_2v, C_3v, O_h, C_4v, D_4h, dan C_3v.

Pembahasan 12.20 — Kelompok titik etilena tersubstitusi

Inti soal. Memanfaatkan planarity ikatan rangkap dan pola substituen.

Molekul	Kelompok titik	Alasan utama
$CH_2=CH_2$	D_2h	tiga C_2, pusat inversi, dan bidang molekul
$CH_2=CHF$	C_s	hanya bidang molekul yang tersisa
$CH_2=CF_2$	C_2v	C_2 dalam bidang tegak lurus C=C dan dua bidang

Molekul	Kelompok titik	Alasan utama
		cermin
cis-CHF=CHF	C_{2v}	C_2 dalam bidang dan dua σ_v; tidak ada i
trans-CHF=CHF	C_{2h}	C_2 tegak lurus bidang, i, dan σ_h

Kesimpulan. (a) D_{2h}; (b) C_s; (c) C_{2v}; (d) C_{2v}; (e) C_{2h}.

Pembahasan 12.21 — Kelompok titik benzena dan turunannya

Inti soal. Menentukan unsur yang dipertahankan oleh pola substitusi pada cincin planar.

Senyawa	Kelompok titik
benzena	D_{6h}
fluorobenzena	C_{2v}
o-difluorobenzena	C_{2v}
m-difluorobenzena	C_{2v}
p-difluorobenzena	D_{2h}
1,3,5-trifluorobenzena	D_{3h}
1,4-difluoro-2,5-dibromobenzena	C_{2h}
naftalena	D_{2h}
2-kloronaftalena	C_s

Semua struktur dianggap planar. Pada senyawa monosubstitusi dan 2-kloronaftalena, operasi yang menukar atom tidak identik dihilangkan. Pola 1,4-F dan 2,5-Br mempertahankan C_2 tegak lurus cincin, inversi, dan bidang cincin, tetapi tidak semua sumbu D_{2h}.

Kesimpulan. Kelompok titik sembilan senyawa tercantum pada tabel.

Pembahasan 12.22 — Kelompok titik berbagai molekul

Inti soal. Mengklasifikasikan molekul linear, poliatomik berhingga, polihedron, dan atom tunggal.

Spesies	Kelompok titik
HCN	$C_{\infty v}$
H_2S	C_{2v}
CO_2	$D_{\infty h}$
CO	$C_{\infty v}$
C_2H_2	$D_{\infty h}$

Spesies	Kelompok titik
CH_3OH	C_s
ND_3	C_3v
OCS	$C\infty v$
P_4	T_d
PCl_3	C_3v
PCl_5	D_3h
$B_{12}Cl_{12}^{2-}$	I_h
UF_6	O_h
Ar	K_h

K_h adalah kelompok simetri bola lengkap untuk atom tunggal. CH_3OH pada satu geometri kesetimbangan mempunyai bidang cermin yang memuat C–O–H dan satu ikatan C–H.

Kesimpulan. Kelompok titik berturut-turut diberikan pada tabel.

Pembahasan 12.23 — Kelompok titik kompleks dan molekul khusus

Inti soal. Mengidentifikasi geometri koordinasi dan kerangka molekul ideal.

Spesies	Kelompok titik	Geometri penentu
FeF_6^{3-}	O_h	oktahedral
IF_5	C_4v	piramida segiempat
$CH_2{=}C{=}CH_2$ (allena)	D_2d	dua gugus CH_2 saling tegak lurus
kubana C_8H_8	O_h	kerangka kubus
$C_6H_6Cr(CO)_3$	C_3v	piano-stool dengan tiga CO
B_2H_6	D_2h	diborana ideal
XeF_4	D_4h	segiempat planar
F_2O	C_2v	bengkok
spiropentana	D_2d	dua cincin tegak lurus pada atom spiro

Kesimpulan. (a) O_h; (b) C_4v; (c) D_2d; (d) O_h; (e) C_3v; (f) D_2h; (g) D_4h; (h) C_2v; (i) D_2d.

Pembahasan 12.24 — Orde grup

Inti soal. Menghitung jumlah operasi berbeda dalam setiap kelompok titik.

Grup	Operasi	Orde

Grup	Operasi	Orde
C_3v	E, $2C_3$, $3\sigma_v$	6
C_s	E, σ	2
$C\infty v$	tak berhingga banyak rotasi dan bidang	∞
D_3h	$E,2C_3,3C_2,\sigma_h,2S_3,3\sigma_v$	12

Kesimpulan. (a) 6; (b) 2; (c) tak berhingga; (d) 12.

Pembahasan 12.25 — Tabel perkalian C_2v

Inti soal. Mendaftarkan anggota dan menghitung semua hasil kali dengan z sebagai sumbu C_2.

(a) Anggota C_2v adalah E, $C_2(z)$, $\sigma_v(xz)$, dan $\sigma_v'(yz)$. Masing-masing berorde dua.

(b) Perkalian dua operasi berbeda nonidentitas menghasilkan operasi nonidentitas ketiga. Contohnya $C_2(z)\sigma(xz)=\sigma(yz)$, karena $(x,y,z)\to(x,-y,z)$ lalu $\to(-x,-y,z)$. Semua matriksnya diagonal sehingga operasi saling komutatif.

×	E	$C_2(z)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$
E	E	$C_2(z)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$
$C_2(z)$	$C_2(z)$	E	$\sigma(yz)$	$\sigma(xz)$
$\sigma(xz)$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$	E	$C_2(z)$
$\sigma(yz)$	$\sigma(yz)$	$\sigma(xz)$	$C_2(z)$	E

Kesimpulan. Tabel di atas adalah tabel perkalian lengkap C_2v; tabel simetris terhadap diagonal, sehingga C_2v Abelian.

Pembahasan 12.26 — Apakah C_3 dan C_3v Abelian?

Inti soal. Menguji komutativitas seluruh pasangan operasi.

(a) $C_3=\{E,C_3,C_3^2\}$ adalah grup siklik. Semua unsur merupakan pangkat generator yang sama, sehingga $C_3\text{^}aC_3\text{^}b=C_3\text{^}\{a+b\}=C_3\text{^}bC_3\text{^}a$. Jadi Abelian.

(b) C_3v tidak Abelian. Untuk suatu bidang σ_v, berlaku $\sigma_vC_3=C_3^{-1}\sigma_v$, bukan $C_3\sigma_v$. Secara geometris, mencerminkan lalu memutar membawa bidang cermin ke bidang yang berbeda dibanding urutan sebaliknya.

Kesimpulan. (a) C_3 Abelian; (b) C_3v non-Abelian.

Pembahasan 12.27 — Kelompok titik ferosena

Inti soal. Membedakan konformasi cincin Cp bertumpuk dan berselang-seling.

(a) Pada konformasi bertumpuk, dua pentagon sejajar dan tepat berimpit secara azimut. Ada sumbu C_5, lima C_2 tegak lurus, bidang σ_h di tengah Fe, dan lima σ_v. Kelompoknya D_5h.

(b) Pada konformasi berselang-seling, cincin bawah diputar 36°. Bidang σ_h dan σ_v hilang, tetapi terdapat pusat inversi, lima C_2, dan sumbu S_{10}. Kelompoknya D_5d.

Kesimpulan. (a) D_5h; (b) D_5d.

Pembahasan 12.28 — Kelompok titik $[Co(en)_3]^{3+}$

Inti soal. Menganalisis kompleks oktahedral dengan tiga ligan bidentat yang membentuk heliks Δ atau Λ.

Tiga chelate identik menghasilkan satu sumbu C_3 melalui pasangan muka oktahedron dan tiga sumbu C_2 tegak lurus C_3. Namun lilitan ligan menghilangkan bidang cermin, pusat inversi, dan semua S_n. Struktur Δ dan Λ adalah enansiomer.

Kesimpulan. Kelompok titiknya D_3, suatu kelompok kiral.

Pembahasan 12.29 — Bidang σ_v pada D_nh

Inti soal. Membuktikan pemetaan koordinat dan menggeneralisasikannya ke n sumbu C_2.

Lakukan $C_2(x)$ terlebih dahulu: $(x,y,z)\to(x,-y,-z)$. Kemudian σ(xy) mengubah tanda z: $(x,-y,-z)\to(x,-y,z)$. Pemetaan total mempertahankan x dan z serta membalik y, yaitu pencerminan pada bidang xz.

$$\hat{\sigma}(xy)\hat{C}_2(x)\colon (x,y,z)\to(x,-y,z)=\hat{\sigma}(xz)$$

Karena $C_2(x)$ dan σ_h=σ(xy) adalah anggota D_nh, sifat tertutup menuntut produknya juga anggota grup. Setiap dari n sumbu C_2 yang tegak lurus sumbu utama menghasilkan satu bidang vertikal melalui sumbu tersebut dan sumbu z.

Kesimpulan. Molekul D_nh mempunyai n bidang σ_v yang diperoleh sebagai $\sigma_h C_2'$.

Pembahasan 12.30 — Kelompok titik benda makroskopik dan orbital

Inti soal. Menentukan simetri ideal dengan memperlakukan warna/garis sebagai bagian benda yang harus dipertahankan.

Benda	Kelompok titik	Catatan
piramida beralas persegi	C_4v	C_4 dan empat bidang vertikal
kerucut lingkaran tegak	$C\infty v$	$C\infty$ dan tak berhingga σ_v

Benda	Kelompok titik	Catatan
lamina persegi, kedua sisi identik	D_4h	C_4, C_2 tegak lurus, σ_h, i
lamina persegi, sisi atas/bawah beda warna	C_4v	operasi yang menukar dua sisi hilang
silinder lingkaran tegak	$D\infty h$	$C\infty$, $C_2\perp$, i, σ_h
silinder, ujung beda warna	$C\infty v$	operasi yang menukar ujung hilang
silinder dengan satu garis aksial	C_s	hanya bidang melalui sumbu dan garis
keping salju ideal	D_6h	heksagonal planar dengan σ_h
torus ideal	$D\infty h$	simetri aksial dan inversi
bola bisbol ideal pada Gambar 12.17	D_2	tiga sumbu C_2; jahitan menghilangkan cermin dan inversi
orbital $2p_z$ bertanda fase	$C\infty v$	rotasi sekitar z dan σ_v; σ_h/i menukar tanda lobus
manusia ideal eksternal	C_s	satu bidang sagital kiri–kanan

Untuk orbital $2p_z$, hasil $C\infty v$ berlaku ketika tanda fase lobus dianggap bagian objek. Kerapatan $|2p_z|^2$ mempunyai simetri lebih tinggi $D\infty h$ karena tanda hilang setelah dikuadratkan.

Kesimpulan. Kelompok titik kedua belas objek tercantum pada tabel.

Pembahasan 12.31 — Dual padatan Platonik

Inti soal. Menggunakan pertukaran muka dan titik sudut pada operasi dualisasi.

(a) Tetrahedron memiliki 4 muka dan 4 titik sudut; menempatkan titik pada pusat setiap muka lalu menghubungkannya menghasilkan tetrahedron lain. Jadi tetrahedron bersifat self-dual.

(b) Dodekahedron pentagonal mempunyai 12 muka. Dualnya adalah ikosahedron yang mempunyai 12 titik sudut; sebaliknya, jumlah muka ikosahedron 20 menjadi jumlah titik sudut dodekahedron.

Kesimpulan. (a) Tetrahedron beraturan; (b) dodekahedron mempunyai 20 titik sudut.

Pembahasan 12.32 — Implikasi sumbu S_n

Inti soal. Menganalisis pangkat $S_n=C_n\sigma_h$ untuk menghasilkan σ atau i.

(a) Jika n ganjil, S_n^n=C_n^nσ_h^n=Eσ_h=σ_h. Jadi keberadaan S_n dengan n ganjil mengimplikasikan bidang cermin tegak lurus sumbu.

(b) Untuk n genap, ambil pangkat n/2. Diperoleh S_n^{n/2}=C_2σ_h^{n/2}. Hasil menjadi C_2σ_h=i bila n/2 ganjil, yaitu n=4k+2. Bila n kelipatan empat, σ_h^{n/2}=E dan hasilnya hanya C_2.

(c) D_nd mempunyai S_{2n}. Pusat inversi ada bila 2n=4k+2, sehingga n=2k+1, yaitu n ganjil.

Kesimpulan. (a) n ganjil; (b) n≡2 mod 4; (c) D_nd mempunyai pusat simetri untuk n ganjil.

Pembahasan 12.33 — Kelompok titik polar

Inti soal. Mencari kelompok yang mengizinkan satu vektor polar tetap invariant.

Momen dipol permanen membutuhkan arah unik yang tidak dibalik oleh operasi grup. Kelompok yang mengizinkannya adalah kelompok tanpa simetri C_n, yaitu C_1; kelompok dengan satu bidang, C_s; kelompok rotasi murni C_n; dan kelompok C_nv, termasuk C∞v. Pada C_n dan C_nv, dipol hanya dapat sejajar sumbu utama.

Kelompok C_nh, S_2n, D_n, D_nh, D_nd, T, T_d, T_h, O, O_h, I, dan I_h mengandung operasi yang membalik atau merotasi setiap vektor sehingga tidak ada komponen invariant.

Kesimpulan. Molekul dapat polar hanya dalam C_1, C_s, C_n, dan C_nv, termasuk C∞v.

Pembahasan 12.34 — Kelompok titik yang aktif optik

Inti soal. Menentukan kelompok kiral, yaitu kelompok yang tidak mengandung operasi tak sejati.

Suatu objek kiral tidak boleh mempunyai bidang cermin σ, pusat inversi i, atau sumbu S_n. Kelompok titik yang hanya tersusun dari rotasi sejati adalah

$$C_1, C_n, D_n, T, O, dan I$$

Keberadaan satu saja S_n—termasuk S_1=σ dan S_2=i—menghasilkan kesetaraan dengan bayangan cermin dan meniadakan aktivitas optik intrinsik.

Kesimpulan. Kelompok titik yang dapat aktif optik adalah C_1, C_n, D_n, T, O, dan I.

Pembahasan 12.35 — Strategi menang permainan koin

Inti soal. Menentukan pemain pemenang dengan strategi simetri pusat.

Pemain pertama menaruh koin pertama tepat berpusat pada pusat papan. Setelah itu, setiap kali lawan menaruh koin pada suatu posisi, pemain pertama menaruh koin kongruen pada posisi hasil rotasi 180° terhadap pusat papan.

Strategi ini selalu sah. Jika koin lawan tidak tumpang-tindih dengan koin pusat atau koin sebelumnya, citra rotasi 180° juga tidak tumpang-tindih: seandainya citranya bertumpang-tindih dengan koin lama, rotasi balik akan menunjukkan koin lawan bertumpang-tindih dengan pasangan simetris koin lama, bertentangan dengan langkah yang sah. Citra suatu langkah lawan tidak dapat berimpit dengan dirinya sendiri karena daerah pusat sudah ditempati koin pertama.

Dengan demikian, setelah setiap pasangan langkah lawan–pemain pertama, susunan kembali simetris. Jika suatu saat tidak ada ruang bagi pemain pertama, maka sebelum itu juga tidak mungkin ada ruang bagi lawan; jadi yang kehabisan langkah terlebih dahulu adalah pemain kedua.

Kesimpulan. Pemain pertama menang: letakkan koin pertama di pusat dan selalu balas dengan posisi yang diputar 180° terhadap pusat papan.

+ HCl
computation
computing
- KASMUI -
Dosen Kimia, Komputasi, IT, AI UNNES
https://hisabmu.com/
https://kasmui.cloud/
Ketua PCM Gunungpati 2
Anggota Majelis Tabligh PDM Kota Semarang & PWM Jawa Tengah
Tim Pengembang Software KHGT MTT PP Muhammadiyah
Praktisi Ilmu Falak

KASMUI