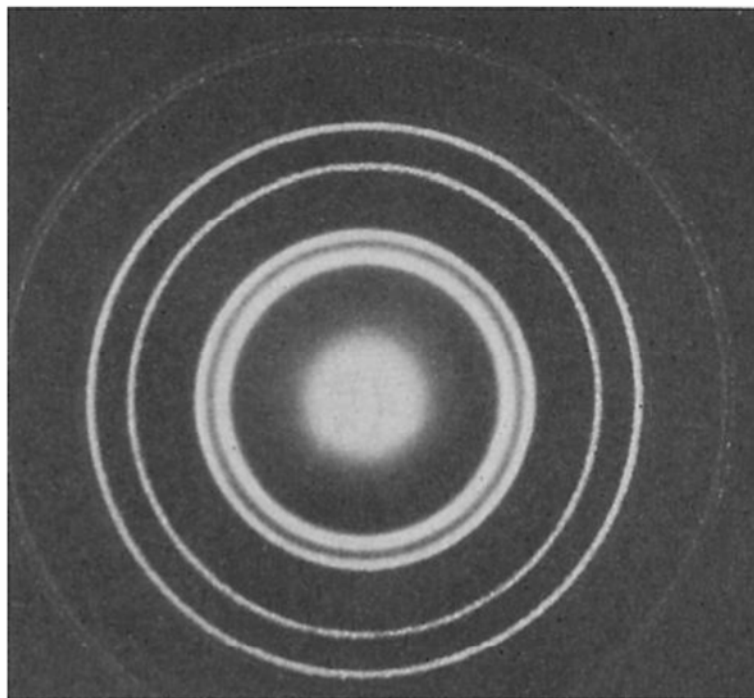


ditunjukkan oleh C. J. Davisson dan L. H. Germer pada tahun 1925 dan juga oleh G. P. Thompson pada tahun 1927. Bentuk dari difraksi elektron ditunjukkan pada gambar 1.12. Distribusi spasial yang tidak homogen yang dibentuk oleh interferensi gelombang elektron sangat berhubungan erat dengan pembentukan dan penghancuran ikatan kimia.



Gambar 1.12 Pola difraksi elektron dari polikristalin emas.

1.7 Persamaan gelombang

Pada tahun 1926, persamaan dasar yang secara inklusif menyatakan sifat partikel dan gelombang diusulkan dalam kerangka mekanika gelombang oleh Schrödinger dan mekanika matriks oleh Heisenberg. Meskipun bentuk matematika yang diusulkan oleh mereka berbeda, teori ini dibuktikan memiliki kesamaan dalam pengertian fisika yang sangat penting oleh E. Schrödinger. Dalam buku ini, persamaan fundamental untuk mekanika kuantum akan diperlakukan berdasarkan mekanika gelombang.

Sebagaimana telah kita pelajari pada bagian 1.3, contoh untuk sebuah gelombang yang memiliki frekuensi ν dan panjang gelombang λ direpresentasikan oleh

$$\Psi(x, t) = Ae^{2\pi i(\frac{x}{\lambda} - \nu t)}$$

Dengan menggunakan sebuah rumus untuk proses diferensiasi fungsi ekponesial ($de^{ax} / dx = ae^{ax}$), turunan terhadap waktu t atau posisi x akan menghasilkan persamaan berikut, masing-masing yaitu:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i(2\pi\nu)\Psi$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = i(\frac{2\pi}{\lambda})\Psi$$

Harus diperhatikan bahwa simbol diferensiasi parsial ∂ digunakan untuk menggantikan d ketika jumlah variabelnya lebih dari satu. Dengan menggunakan persamaan yang menghubungkan sifat partikel dan gelombang, $E = h\nu$ dan $p = h/\lambda$, kita akan mendapatkan persamaan diferensial simultan sebagai berikut yang tidak mengandung ν dan λ secara eksplisit.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi \tag{1.28}$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p\Psi \tag{1.29}$$

Di sini, \hbar adalah sebuah konstanta yang dinyatakan sebagai $(h/2\pi)$. Persamaan (1.28) dan (1.29) menghubungkan besaran partikel E dan p dengan fungsi gelombang Ψ . Marilah kita mempelajari sifat matematika dari persamaan-persamaan ini sebelum mengaplikasikannya pada beberapa sistem. Persamaan (1.28) menunjukkan bahwa operasi dari $i\hbar\partial/\partial t$ pada Ψ dari sisi sebelah kiri adalah ekivalen dengan sebuah perkalian sederhana dari Ψ dengan energi E . Persamaan (1.29) menunjukkan bahwa operasi dari $-i\hbar\partial/\partial x$ pada Ψ dari sisi sebelah kiri adalah sama dengan perkalian sederhana Ψ dengan momentum p . Operasi matematika, seperti $i\hbar\partial/\partial t$ dan $-i\hbar\partial/\partial x$ disebut sebagai operator. Operator-operator ini masing-masing berkaitan dengan energi E dan momentum p .

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \leftrightarrow E$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \leftrightarrow p$$

Untuk mengaplikasikan persamaan-persamaan simultan ini pada suatu masalah tertentu, adalah penting untuk mengetahui terlebih dahulu relasi antara E dan p. Dalam mekanika klasik sebelum lahirnya mekanika kuantum, sebuah hubungan penting antara E dan p diketahui dalam fungsi Hamilton yang merepresentasikan energi dari sistem sebagai sebuah fungsi dari momentum, p, posisi, x dan waktu, t.

$$E = H(p, x, t) \quad (1.30)$$

Dengan bantuan fungsi Hamilton H, persamaan (1.28) dan (1.29) dapat digabungkan ke dalam satu persamaan. Agar hal ini dapat dilakukan, marilah kita menurunkan sebuah fungsi Hamilton untuk sebuah sistem di mana sebuah partikel dengan masa bergerak dengan energi kinetik $\frac{1}{2}mv^2$ dalam energi potensial U. Dapat dicatat bahwa momentum dari partikel ini $p = mv$, sehingga diperoleh

$$H = \frac{1}{2}mv^2 + U = \frac{1}{2}m\left(\frac{p}{m}\right)^2 + U = \frac{p^2}{2m} + U \quad (1.31)$$

Substitusi dari persamaan ini pada sisi kanan pada persamaan (1.28) dengan menggunakan (1.30) akan menghasilkan persamaan berikut.

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \left(\frac{p^2}{2m} + U \right) \Psi = \frac{p}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi + U \Psi \\ &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 \Psi + U \Psi \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U \right) \Psi \end{aligned} \quad (1.32)$$

Sebagaimana dapat dilihat pada contoh ini, persamaan (1.28) dan (1.29) dapat disatukan menjadi sebuah persamaan yang mana energi E pada suku suku di sebelah kanan pada persamaan (1.28) digantikan dengan fungsi Hamilton yang berkaitan H dan momentum p harus digantikan dengan operator momentum \hat{p} .

$$\hat{H} = H(\hat{p}, x, t) \quad (1.33)$$

Secara umum, menggantikan momentum p dalam ekspresi fungsi Hamilton dengan operator \hat{p} pada persamaan (1.33) kita akan memperoleh fungsi Hamilton mekanika kuantum \hat{H} .

$$\hat{H} = H(\hat{p}, x, t) \quad (1.34)$$

\hat{H} disebut sebagai operator Hamilton atau Hamiltonian dengan menggunakan operator ini dua persamaan yaitu (1.28) dan (1.29) digabungkan menjadi satu persamaan yaitu

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi \quad (1.35)$$

Persamaan ini adalah persamaan yang paling mendasar pada mekanika kuantum dan disebut sebagai persamaan Schrödinger yang merupakan nama dari penemunya. Fungsi gelombang, Ψ dalam persamaan ini menyatakan keadaan di mana terdapat sistem materi. Arti fisis yang penting dari Ψ akan didiskusikan kemudian pada bagian yang lain.

Meskipun persamaan (1.35) dapat diturunkan dari persamaan gelombang yang sederhana, akan tetapi persamaan ini diketahui dapat diterapkan pada masalah-masalah yang umum. Perluasan dari Hamiltonian dan fungsi gelombang dalam persamaan (1.35) akan dipelajari kemudian. Prosedur untuk memecahkan persamaan gelombang dan arti dari solusi juga akan dipelajari pada bagian setelah ini.

1.8 Fungsi gelombang dan probabilitas menemukan partikel

Pada efek fotolistrik, intensitas cahaya (kuadrat dari amplitude gelombang elektromagnetik) yang semakin meningkat akan semakin meningkatkan jumlah foton secara linier. Dinyatakan kemudian bahwa jumlah foton adalah sebanding dengan kuadrat dari amplitude. Pada tahun 1926, Born memperluas ide ini dengan mengusulkan bahwa kuadrat dari nilai absolut dari fungsi gelombang Ψ adalah sebanding dengan probabilitas untuk mendapatkan partikel tersebut. Nilai absolut harus digunakan untuk persamaan gelombang karena gelombang dapat berupa sebuah fungsi kompleks dan bukan hanya sebuah fungsi yang riil. Kuadrat dari nilai absolut sebuah fungsi gelombang kompleks Ψ diperoleh dengan persamaan berikut.

$$|\Psi|^2 = \Psi \cdot \Psi^* \quad (1.36)$$

Dengan Ψ^* sebagai konjugat kompleks dari Ψ dan ini diberikan melalui penggantian yang sederhana dari setiap unit imajiner i yang terdapat pada ekspresi matematik Ψ dengan $-i$.

$$\Psi^* = \Psi(i \rightarrow -i) \quad (1.37)$$

Probabilitas untuk menemukan sebuah partikel yang bergerak sepanjang sumbu x pada suatu daerah tertentu antara x dan $x + dx$ dinyatakan sebagai $|\Psi(x, t)|^2 dx$ dengan menggunakan fungsi gelombang $\Psi(x, t)$. Karena probabilitas untuk menemukan partikel pada daerah antara $x = -\infty$ hingga $x = +\infty$ adalah sama dengan 1, maka integral berikut harus sama dengan 1.

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (1.38)$$

Ini disebut sebagai kondisi renormalisasi dari sebuah fungsi gelombang. Jika kondisi ini dipenuhi, maka fungsi gelombang tersebut dikatakan ternormalisasi.

Ketika sebuah fungsi gelombang merupakan solusi dari persamaan (1.35), setiap perkalian dari fungsi gelombang tersebut dengan konstanta yang sembarang juga akan menghasilkan fungsi gelombang yang menjadi solusi dari persamaan (1.35). Solusi-solusi dari persamaan gelombang karenanya dikatakan bersifat sembarang terhadap konstanta. Kondisi renormalisasi menghilangkan sifat kesembarangan dari fungsi gelombang kecuali terhadap tandanya. Dalam kasus fungsi gelombang kompleks, makna ganda terhadap faktor fasa dengan $e^{i\theta}$ tidak akan berubah. Akan tetapi, faktor fasa tidak akan merubah kuadrat dari nilai absolut dan arti fisis dari persamaan gelombang tidak relevan dengan faktor fasa. Dengan demikian. Kita boleh memilih nilai secara sembarang nilai θ dari faktor fasa, sebagai contoh θ dapat dipilih sama dengan 0.

Karena turunan pertama dari fungsi gelombang ini berhubungan dengan energi E dan momentum p menurut persamaan (1.28)–(1.29), fungsi gelombang yang menyatakan sebuah keadaan dengan energi yang finit dan momentum yang harus bersifat kontinyu terhadap waktu dan posisi. Ini adalah sifat yang penting dari fungsi gelombang yang dapat diterima dan tidak dapat diabaikan ketika kita memerlukan untuk mendapatkan sebuah fungsi gelombang dengan memecahkan persamaan gelombang.

Sebelum mengakhiri bagian ini, adalah penting untuk mencatat bahwa pentingnya persamaan gelombang pada mekanika kuantum.

- (1) Keadaan dari sebuah sistem dinyatakan dengan fungsi gelombang.
- (2) Probabilitas sebuah partikel akan ditemukan pada sebuah posisi adalah sebanding dengan kuadrat dari nilai absolut persamaan gelombang.
- (3) Fungsi gelombang akan memiliki perubahan terhadap waktu mengikuti persamaan.

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

1.9 Keadaan stasioner dan persamaan nilai eigen

Jika energi E bebas terhadap waktu t , probabilitas untuk menemukan sebuah partikel juga akan bebas terhadap waktu t . Keadaan yang bebas terhadap waktu disebut sebagai keadaan stasioner. Ketika energi E adalah konstan, tidak bergantung dengan waktu, maka persamaan (1.28) akan mudah untuk diintegrasikan terhadap waktu untuk menghasilkan persamaan berikut

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) \quad (1.39)$$

Simbol $\psi(x)$ adalah konstanta integrasi yang muncul dari integrasi terhadap waktu t dan dengan demikian $\psi(x)$ akan bebas terhadap waktu meskipun ia akan bergantung pada posisi x . Meskipun fungsi gelombang untuk keadaan stasioner $\Psi(x, t)$ dalam persamaan (1.39) berosilasi sebagai sebuah fungsi terhadap t , kuadrat dari nilai absolut dari $\Psi(x, t)$, yang merupakan produk dari $\Psi(x, t) \cdot \Psi^*(x, t)$ akan tetap konstan.

$$|\Psi(x, t)|^2 = \psi(x) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) \cdot \psi^*(x) \exp\left(i \frac{Et}{\hbar}\right)$$

$$= \psi(x) \cdot \psi^*(x) = |\psi(x)|^2 \quad (1.40)$$

Karenanya, probabilitas untuk menemukan sebuah partikel dalam keadaan stasioner adalah bebas terhadap waktu t dan menghasilkan perhitungan yang sama bahkan jika fungsi $\psi(x)$ yang bebas terhadap waktu itu digunakan untuk menggantikan $\Psi(x, t)$. Dengan demikian $\psi(x)$ disebut sebagai fungsi gelombang dari keadaan stasioner. Dengan memasukkan $\Psi(x, t)$ pada persamaan (1.39) ke dalam persamaan gelombang (1.35) dan kemudian melakukan pengaturan pada perumusan tersebut kita akan mendapatkan

$$(\hat{H}\psi - E\psi) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) = 0$$

Sehingga persamaan berikut merupakan fungsi gelombang dari keadaan stasioner $\psi(x)$ dan dinyatakan dengan

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (1.41)$$

Persamaan ini disebut sebagai persamaan Schrödinger untuk keadaan stasioner atau persamaan Schrödinger bebas waktu.

Contoh 1.10 Tuliskan persamaan Schrödinger bebas waktu untuk sebuah osilator harmonik satu dimensi yang mengandung sebuah partikel dengan masa m dan bergerak sepanjang sumbu- x di bawah pengaruh gaya potensial $U(x) = \frac{1}{2} kx^2$ ($k > 0$).

(Jawaban) Persamaan Schrödinger bebas waktu dinyatakan sebagai $\hat{H}\psi = E\psi$. Dalam kasus ini gerak partikel dibatasi hanya pada sumbu- x , sehingga fungsi gelombang adalah sebuah fungsi terhadap x dan direpresentasikan sebagai $\psi = \psi(x)$. Hamiltonian \hat{H} yang ada pada sistem ini ada pada sistem ini diperoleh dari fungsi Hamilton H yang terdiri dari penjumlahan atas energi kinetik dan energi potensial. Untuk sistem ini, momentum p dari partikel akan menjadi energi kinetik $p^2/2m$ dan energi potensialnya adalah $\frac{1}{2} kx^2$ dan kita akan mendapatkan

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$$

Dengan demikian Hamiltonian \hat{H} dapat diturunkan dengan mudah hanya dengan mengganti momentum p dengan operator $\hat{p} = -i\hbar\partial/\partial x$ dalam ekspresi terhadap H . Penggantian ini harus dilakukan dua kali untuk $p^2/2m$ dan kita akan mendapatkan

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Energi potensial $\frac{1}{2}kx^2$ dapat digunakan langsung karena tidak mengandung momentum p . Karenanya

Hamiltonian \hat{H} dapat dinyatakan sebagai berikut

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2$$

Dengan memasukkan Hamiltonian \hat{H} ini ke dalam $\hat{H}\psi = E\psi$, persamaan Schrödinger bebas waktu untuk osilator harmonik satu dimensi dinyatakan sebagai berikut

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2 \right) \psi(x) = E\psi(x)$$

Catatan $F(x) = -dU(x)/dx = -kx$ ($k > 0$) merepresentasikan gaya yang bekerja pada partikel. Sebuah partikel dalam osilator harmonik akan menerima gaya kembali (gaya balik) yang sebanding dengan jarak dari titik setimbangnya dan berosilasi di sekitar titik seimbangnya. Pergeseran sebuah benda elastis seperti pegas adalah sebanding dengan gaya yang bekerja padanya. Hal ini dikenal sebagai hukum Hooke.

\hat{p} dan \hat{H} adalah operator yang masing-masing berhubungan dengan momentum dan energi. Sebuah operator \hat{F} yang berhubungan dengan sebuah satuan sembarang yang dapat diamati $F(p,x)$ dapat dimasukkan sebagai $F(\hat{p},x)$ dengan memasukkan persamaan (1.33) ($\hat{p} = -\hbar\partial/\partial x$ pada posisi p) ke dalam $F(p,x)$. Operator \hat{x} berhubungan dengan sebuah koordinat kartesian x dan dinyatakan secara sederhana dengan $\hat{x} = x$, karena tidak ada faktor momentum p dalam x .

Secara umum, pilihan yang tepat dari sebuah fungsi ϕ akan menghasilkan $\hat{F}\phi$ yang berbanding dengan ϕ dan sama terhadap suatu konstanta yang dikalikan dengan ϕ .

$$\hat{F}\phi = f\phi \quad (1.42)$$

Perkalian konstanta f adalah nilai eigen dari operator \hat{F} dan fungsi ϕ adalah nilai eigen dari operator \hat{F} yang berkorespondensi dengan nilai eigen f . Ketika beberapa fungsi eigen (contoh ϕ_1 dan ϕ_2) berkaitan dengan nilai eigen f yang sama saling bebas linier satu dengan lainnya (contoh ϕ_1 tidak proporsional dengan ϕ_2) nilai eigen f dikatakan sebagai generate. Jumlah dari fungsi eigen yang saling bebas berkaitan dengan nilai eigen yang sama disebut sebagai tingkat degenerasi. Persamaan (1.42) termasuk di dalamnya sebuah himpunan yang terdiri dari fungsi eigen ϕ dan nilai eigen f untuk operator \hat{F} disebut sebagai persamaan nilai eigen dari \hat{F} . Persamaan gelombang (1.41) untuk keadaan stasioner (persamaan schrödinger bebas waktu) adalah persamaan nilai eigen dari operator Hamiltonian \hat{H} yang berhubungan dengan energi. Persamaan (1.41) memberikan himpunan fungsi eigen ϕ dan nilai eigen E untuk energi yang mungkin terjadi.

Dalam keadaan stasioner, energi E dan probabilitas untuk menemukan partikel adalah bebas terhadap waktu t . Akan tetapi, kita tidak harus memikirkan bahwa partikel tersebut diam pada suatu posisi tertentu. Bahkan dalam keadaan stasioner, gerak sebuah partikel harus diperhitungkan sebagai osilasi dari faktor fasa pada persamaan (1.39) yang memenuhi persamaan gelombang bebas waktu pada persamaan (1.35).

1.10 Sebuah partikel dalam kotak satu dimensi

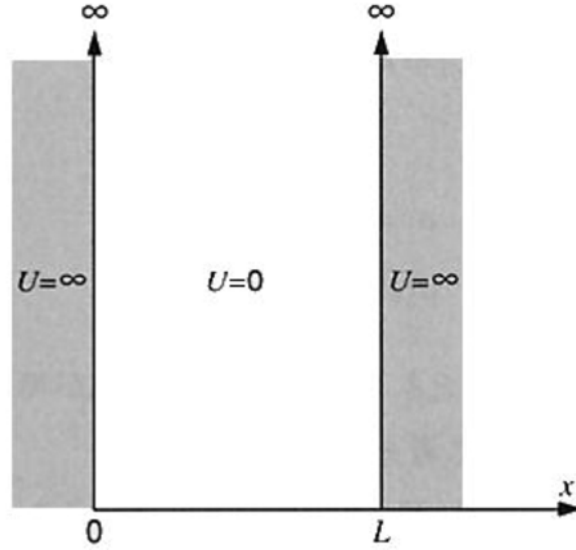
Jalan terbaik untuk memahami prosedur untuk menyelesaikan persamaan gelombang dan pentingnya solusi adalah dengan mempelajari beberapa contoh. Marilah kita menyelesaikan persamaan Shrödinger bebas waktu $\hat{H}\psi = E\psi$ untuk sebuah partikel dengan masa m yang terkurung pada daerah ($0 < x < L$) pada sumbu- x (kotak satu dimensi). Hamiltonian untuk sistem ini dituliskan sebagai berikut

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

$U(x)$ adalah energi potensial dari sistem yang dipelajari. Pembatasan terhadap gerakan partikel dilakukan pada $U(x)$ dengan ketentuan sebagai berikut (Gambar 1.13)

$$\begin{aligned} \text{Di dalam kotak } (0 < x < L) \quad & U(x) = 0 \\ \text{Di luar kotak } (x \leq 0 \text{ atau } x \geq L) \quad & U(x) = +\infty \end{aligned} \quad (1.43)$$

Perlakuan ini secara alami akan menuju pada ketidakmungkinan untuk menemukan partikel di luar kotak. Jika $\psi(x) \neq 0$ pada $U(x) = +\infty$, maka kedua sisi pada persamaan $\hat{H}\psi = E\psi$ akan divergen.



Gambar 1.13 Energi potensial $U(x)$ untuk sebuah partikel dalam sebuah kotak satu dimensi

Karena $U(x) = 0$ di dalam kotak, persamaan gelombang $\hat{H}\psi = E\psi$ akan menjadi bentuk yang sangat sederhana yaitu

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\kappa^2\psi \quad (1.44)$$

di mana

$$\kappa = \left(\frac{8\pi^2 m E}{h^2} \right)^{1/2} \quad (1.45)$$

Solusi umum dari persamaan (1.44) telah diketahui dengan baik dan dituliskan sebagai berikut

$$\psi(x) = a \cdot e^{i\kappa x} + b \cdot e^{-i\kappa x} \quad (1.46)$$

Substitusi dari ekspresi ini pada sisi kiri persamaan (1.44) akan menghasilkan suku di sisi kanan.

Agar dapat mengambil makna atau interpretasi fisis dari $\psi(x)$ dalam persamaan (1.46) dalam konteks teori kuantum, kita harus memperhatikan sifat kontinyu dari fungsi gelombang. Dalam kasus ini, $\psi(x)$ harus kontinyu pada kedua sisi kotak ($x = 0$ dan $x = L$). Dengan demikian, kondisi berikut harus diperlukan.

Pada perbatasan kotak ($x = 0$), $\psi(0) = a + b = 0$,

dan pada perbatasan yang lain ($x = L$), $\psi(L) = a \cdot e^{i\kappa L} + b \cdot e^{-i\kappa L} = 0$.

Karenanya kita akan memperoleh

$$a = -b \quad (1.47)$$

$$a(e^{i\kappa L} - e^{-i\kappa L}) = 0 \quad (1.48)$$

Karena nilai yang mungkin untuk nilai eigen energi E tidak muncul, kita harus melakukan klasifikasi atas kasus-kasus yang mungkin sebagai berikut.

1) ($E < 0$)

Dari persamaan (1.45) κ adalah murni bilangan imajiner, dan karenanya suku dalam tanda kurung pada sisi kiri persamaan (1.48) tidak dapat sama dengan nol. Ini akan mengakibatkan $a + b = 0$ dan kemudian $\psi(x) = ae^{i\kappa x} + be^{-i\kappa x} = 0$ untuk seluruh nilai x ($0 < x < L$). Jelas, ini tidak konsisten dengan dengan asumsi kita tentang partikel dalam kotak.

2) ($E = 0$)

Dari persamaan (1.45) $\kappa = 0$ dan $\psi(x) = a + b = 0$ untuk seluruh x ($0 < x < L$). Ini juga tidak sesuai dengan asumsi dari partikel dalam kotak.

3) ($E > 0$)

Dalam kasus ini $\kappa > 0$ dan karenanya suku dalam kurung pada sisi kiri di persamaan (1.48) dapat menjadi sama dengan 0. Kondisi ini dapat dinyatakan sebagai

$$e^{i\kappa L} = e^{-i\kappa L} \text{ atau } e^{2i\kappa L} = 1 \quad (1.49)$$

Perlu dicatat bahwa $e^{2i\kappa L} = 1$ adalah untuk κ yang merupakan bilangan bulat sembarang. Dengan demikian nilai-nilai untuk κ ($\kappa > 0$) yang mungkin harus memenuhi kondisi berikut

$$\kappa L = n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.50)$$

Dengan memasukkan nilai κ ke dalam persamaan (1.45), kita akan mendapatkan nilai-nilai yang mungkin untuk energi E dengan nilai integer n .

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad (1.51)$$

Ini adalah formula untuk tingkat-tingkat energi dari sebuah partikel yang berada dalam sebuah kotak satu dimensi. Untuk energi yang bernilai lain selain yang diberikan pada persamaan (1.51), tidak ada solusinya. Munculnya tingkat-tingkat energi yang bersifat diskrit adalah sebuah konsekuensi dari kuantisasi energi. Tingkat energi yang terkuantisasi diklasifikasikan dengan bilangan bulat positif n . Bilangan-bilangan ini merepresentasikan keadaan terkuantisasi dan disebut sebagai bilangan kuantum.

Fungsi gelombang yang berkorespondensi dengan tingkat-tingkat energi E_n , dapat ditentukan melalui persamaan (1.46), (1.47) dan (1.50).

$$\text{Di luar kotak } (x < 0 \text{ atau } x > L) \quad \psi(x) = 0$$

$$\text{Di dalam kotak } (0 < x < L) \quad \psi_n(x) = a(e^{i\kappa x} - e^{-i\kappa x}) = 2ai \sin \kappa x = c \sin(n\pi x / L)$$

Di sini, rumus $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ digunakan dan $2ai$ ditulis sebagai c . Nilai dari c ditentukan melalui persyaratan normalisasi.

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

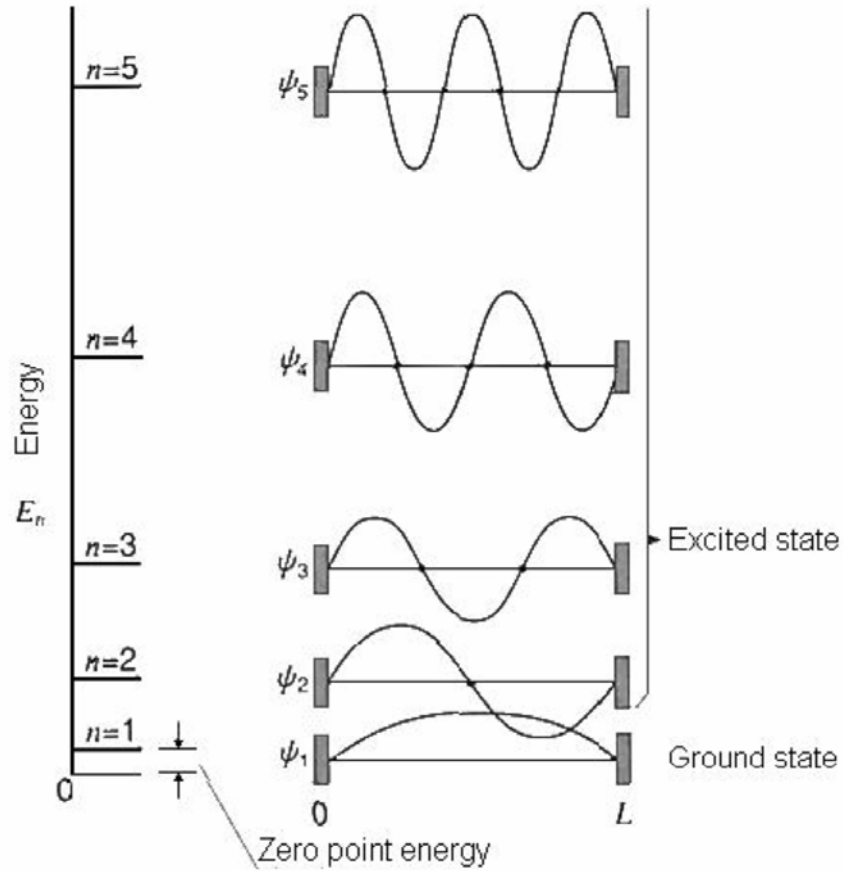
Nilai dari integral terakhir adalah $L/2$ dan $c^2 \cdot (L/2) = 1$. Dengan demikian maka $c = \sqrt{2/L}$, dan kita memperoleh solusi di dalam kotak sebagai berikut.

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.52)$$

Tingkat energi E_n dan fungsi gelombang $\psi_n(x)$ untuk sebuah partikel dalam sebuah kotak satu dimensi dengan panjang L ditunjukkan pada Gambar 1.14.

Tingkat energi terendah dengan bilangan kuantum $n = 1$ adalah keadaan dasar dari sebuah partikel dalam kotak. Probabilitas untuk menemukan partikel yang terbesar adalah pada posisi ditengah kotak dan kemudian menurun jika bergeser kearah sisi-sisi kotak. Dalam dunia makroskopik, kita dapat meletakkan sebuah partikel di mana saja di dalam sebuah kotak. Akan tetapi di dalam dunia kuantum, hanya probabilitas saja yang dapat ditentukan. Hal sangat aneh adalah energi tingkat dasar $E_1 = h^2 / 8mL^2 > 0$ adalah lebih besar dari energi potensial yang ada dalam kotak tersebut $U = 0$. Dalam sebuah sistem makroskopik, keadaan energi minimum dari sebuah partikel adalah keadaan di mana tidak ada gerak dan energi akan sama dengan energi potensial minimum U_{\min} (dalam kasus ini $U_{\min} = 0$). Fakta yang menyatakan bahwa $E_1 - U_{\min} > 0$ menunjukkan bahwa sebuah partikel dapat bergerak dengan energi sebesar $E_1 - U_{\min}$, bahkan pada temperatur abosolut nol di mana tidak ada energi yang dapat dipindahkan dari sistem lagi. Karenanya energi sebesar $E_1 - U_{\min}$ disebut sebagai energi titik-nol (*zero-point energy*) dan gerakan pada keadaan dasar disebut sebagai gerakan titik-nol (*zero-point motion*). Dalam dunia makroskopik, masa dari materi m , dan panjang dari kotak L adalah sangat besar dan karenanya energi sebesar $E_1 = h^2 / 8mL^2$ dapat dikatakan sangat kecil. Ini akan menyebabkan bahwa energi titik-nol dan gerakan titik-nol dalam dunia makroskopik dapat diabaikan. Nilai diskrit yang definit hanya diperbolehkan untuk keadaan tereksitasi dari sebuah partikel dalam kotak dan hal ini sangat berlawanan dengan dunia makroskopik di mana semua nilai energi diperbolehkan. Tingkat energi untuk sebuah sistem makroskopik dapat ditinjau sebagai hal yang kontinyu disebabkan oleh nilai m dan L yang sangat besar. Sebagaimana dapat dilihat pada fungsi gelombang pada gambar 1.14, terdapat beberapa posisi di mana tidak ada probabilitas untuk menemukan partikel dalam keadaan tereksitasi, meskipun partikel tersebut bergerak dalam kotak. Posisi geometris di mana $\psi = 0$ disebut sebagai sebuah noda. Jumlah dari noda-noda dalam kotak adalah $n-1$, yang akan meningkat dengan meningkatnya bilangan kuantum n . Gelombang dengan noda yang banyak secara umum memiliki energi yang lebih besar. Sifat

ini perlu dicatat dan diingat dan ini akan sangat berguna untuk memahami sifat dari gelombang elektron yang bergerak dalam materi.



Gambar 1.14 Tingkat-tingkat energi $E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$ dan fungsi gelombang $\psi_n(x)$ untuk partikel dalam sebuah kotak satu dimensi.

Contoh 1.11. Tunjukkan hubungan beriku akan terjadi di antara fungsi gelombang $\psi_n(x)$ dan $\psi_m(x)$ untuk sebuah partikel dalam sebuah kotak satu dimensi.

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

δ_{nm} adalah Kronecker delta di mana akan sama dengan 1 jika $n = m$ dan 0 jika $n \neq m$.

(Jawaban) Fungsi gelombang dengan bilangan kuantum n dalam sebuah kotak ($0 < x < L$) dengan panjang L diberikan oleh persamaan

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

Untuk posisi di luar kotak $\psi_n(x) = 0$. Marilah kita menyebutkan integral yang menjadi masalah sebagai I_{nm} .

$$I_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(x)^* \psi_m(x) dx = \int_0^L \left(\frac{2}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) dx$$

Rumus penjumlahan sudut untuk fungsi trigonometri

$$\cos(A \pm B) = \cos A \cos B \mp \sin A \sin B$$

akan menghasilkan

$$\sin A \sin B = \frac{1}{2}(\cos(A - B) - \cos(A + B))$$

Dengan demikian

$$I_{nm} = I(-) - I(+)$$

Di sini

$$I(\pm) = \left(\frac{1}{L}\right) \int_0^L \cos\left(\frac{(n \pm m)\pi x}{L}\right) dx$$

Dengan menuliskan $\theta = \pi x / L$ dan dengan menggunakan $d\theta = (\pi / L) dx$, kita akan memperoleh

$$I(\pm) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos\{(n \pm m)\theta\} d\theta$$

Ketika $(n \pm m)$ tidak sama dengan 0,

$$I(\pm) = \left[\frac{1}{\pi} \left\{ \frac{1}{n \pm m} \right\} \sin(n \pm m)\theta \right]_0^\pi = 0$$

Ketika $n = m$ ($n - m = 0$),

$$I(-) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\theta = \frac{\pi}{\pi} = 1$$

Karenanya,

(1) Untuk $n = m$, $I_{nm} = 1 - 0 = 1$ dan

(2) Untuk $n \neq m$, $I_{nm} = 0 - 0 = 0$, dengan menggunakan delta Kronecker, kita akan memperoleh $I_{nm} = \delta_{nm}$.

Integral dari contoh ini dengan $n = m$ adalah kondisi normalisasi, dengan diberikan bahwa fungsi gelombangnya telah dinormalisasi terlebih dahulu. Untuk $n \neq m$, integralnya akan sama dengan 0, di mana dua fungsi gelombangnya dikatakan saling ortogonal dan memenuhi sifat ortogonalitas. Sifat ortogonalitas berlaku secara umum antara sembarang fungsi gelombang yang berkorespondensi dengan nilai eigen yang berbeda. Ketika fungsi-fungsi ternormalisasi dan saling ortogonal, maka himpunan fungsi-fungsi tersebut dikatakan ortonormal dan mengikuti sifat ortonormalisasi.

1.11 Perluasan persamaan gelombang

Sekarang, marilah kita memperluas persamaan gelombang yang sederhana dalam ruang satu dimensi ke dalam kasus-kasus yang umum.

(a) Perluasan pada ruang tiga dimensi

Perluasan dari satu dimensi menjadi tiga dimensi memerlukan 3 koordinat x , y dan z dalam tempat di mana sebelumnya hanya terdapat satu variabel x . Ini menjadi fungsi gelombang yang

dinyatakan sebagai $\Psi(x, y, z, t)$ dari fungsi gelombang yang dinyatakan dengan $\Psi(x, t)$. Karenanya kecepatan v dan momentum p dinyatakan sebagai vektor-vektor dengan 3 komponen, masing-masing adalah (v_x, v_y, v_z) dan (p_x, p_y, p_z) . Rumus pengganti yang berkaitan dengan persamaan (1.33) diperluas menjadi sebagai berikut.

$$\begin{aligned}\hat{p}_x &= -\hbar \frac{\partial}{\partial x} \\ \hat{p}_y &= -\hbar \frac{\partial}{\partial y} \\ \hat{p}_z &= -\hbar \frac{\partial}{\partial z}\end{aligned}\tag{1.53}$$

Untuk sebuah partikel dengan masa m dalam ruang 3 dimensi, energi kinetik yang diperlukan untuk menghasilkan operator Hamiltonian diekspresikan sebagai berikut.

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$$

Dengan, Δ adalah sebuah operator yang disebut sebagai Laplacian. Ekspresinya dalam satu dimensi adalah

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

dan untuk 3 dimensi

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

Dengan simbol Laplacian Δ , Hamiltonian untuk sebuah partikel dengan masa m tanpa memperhatikan dimensi dalam ekspresi yang sama dapat ditulis sebagai berikut

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U\tag{1.54}$$

Perlu dicatat bahwa energi potensial U untuk satu dimensi atau tiga dimensi masing-masing adalah $U(x)$ atau $U(x, y, z)$.

Laplacian Δ dapat diganti dengan ∇^2 atau $\nabla \cdot \nabla$, di mana ∇ adalah sebuah simbol matematika yang disebut sebagai nabla dan diberikan oleh rumusan berikut.

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

Sehingga, Laplacian Δ akan sama dengan sebuah produk dalam (*inner product*) atau sebuah produk skalar.

$$\Delta = \nabla \cdot \nabla \quad (1.55)$$

Meskipun kedua ekspresi ini dapat digunakan, pada buku ini Δ akan digunakan.

(b) Perluasan untuk sistem N buah partikel

Fungsi gelombang dari sebuah sistem dengan N buah partikel adalah sebuah fungsi yang terdiri dari $3N$ buah koordinat ruang $(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N)$ serta waktu t dan ini mengandung informasi tentang probabilitas untuk menemukan partikel. Adalah lebih mudah untuk menggunakan simbol q sebagai ganti dari $3N$ buah variabel. Fungsi gelombang $\Psi(q, t)$ untuk sistem dengan N buah partikel memenuhi persamaan gelombang yang sama sebagaimana dengan fungsi gelombang untuk satu partikel.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi \quad (1.56)$$

Keadaan yang mungkin yang terjadi pada dunia riil hanya terbatas pada Ψ yang memenuhi persamaan ini dan disebut sebagai sebuah keadaan eigen. Probabilitas untuk menemukan setiap partikel dalam suatu volume $dx_i dy_i dz_i$ yang berkorespondensi dengan suatu daerah tertentu pada $x_i \sim x_i + dx_i$, $y_i \sim y_i + dy_i$, $z_i \sim z_i + dz_i$ diberikan untuk keadaan eigen Ψ adalah

$$|\Psi(q, t)|^2 dq \quad (1.57)$$

Integrasi dari persamaan (1.57) pada seluruh daerah pada ruang berdimensi $3N$ haruslah sama dengan 1, karena ini adalah penjumlahan total dari probabilitas (kondisi normalisasi)

$$\int |\Psi(q, t)|^2 dq = 1 \quad (1.58)$$

Di sini,

$$dq = dx_1 dy_1 dz_1 \dots dx_N dy_N dz_N \quad (1.59)$$

Merepresentasikan suatu elemen volume yang memiliki dimensi $3N$ dan berkorespondensi dengan integrasi harus diambil untuk seluruh variabel sebanyak $3N$ dan seluruh ruang. Integral dalam persamaan (1.58) secara sederhana diekspresikan dengan \int tunggal dan tidak dengan $3N \int$, dan ini berhubungan dengan penyingkatan elemen volume dq . Daerah integrasi untuk setiap variabel x_i , y_i dan z_i adalah dari $-\infty$ hingga ∞ .

\hat{H} dalam persamaan (1.56) adalah operator Hamiltonian untuk sebuah sistem N buah partikel, di mana dapat dengan mudah dibangun dari ekspresi energi klasik dari fungsi Hamilton $H(p, q, t)$ dengan menggunakan rumus penggantian sebagai berikut untuk \hat{p} pada besaran momentum p .

$$\hat{p} = -\hbar \frac{\partial}{\partial q} \quad (1.60)$$

Dengan demikian,

$$\hat{H} = H(\hat{p}, q, t) \quad (1.61)$$

Untuk keadaan stasioner di mana $H(p, q, t) = E$ (sebuah konstanta pada setiap waktu t),

$$\Psi(q, t) = \psi(q) \exp\left(-i \frac{Et}{\hbar}\right) \quad (1.62)$$

$$|\Psi(q, t)|^2 = |\psi(q)|^2 \quad (1.63)$$

Fungsi gelombang untuk sebuah keadaan stasioner $\psi(q)$ memenuhi

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (1.64)$$

Kondisi normalisasi untuk $\psi(q)$ adalah

$$\int |\psi(q)|^2 dq = 1 \quad (1.65)$$

1.12 Gerak pada sistem dengan dua partikel

Partikel banyak perlu dipertimbangkan secara umum untuk penerapan fungsi gelombang pada masalah-masalah kimia. Dalam usaha untuk melihat secara umum aplikasi pada sistem molekul, marilah kita untuk pertama kalinya mempelajari sistem dengan 2 partikel. Masalah dalam sistem 2 partikel dapat direduksi menjadi masalah satu partikel, ketika gerak relatif dan gerak titik pusat gravitasinya terpisah.

(a) Pemisahan gerak relatif dari gerak translasi.

Marilah kita mengandaikan bahwa energi untuk dua partikel E dinyatakan sebagai penjumlahan energi kinetik E_1 dan E_2 untuk partikel dan U untuk energi potensial,

$$E = E_1 + E_2 + U \quad (1.60)$$

di mana

$$E_1 = \frac{1}{2} m_1 V_1^2$$

$$E_2 = \frac{1}{2} m_2 V_2^2$$

dan m_i , V_i adalah masa dan kecepatan dari masing-masing partikel ke- i ($i = 1$ atau 2). Koordinat untuk pusat gravitasi (X, Y, Z) berhubungan dengan koordinat dari masing-masing partikel (x_i, y_i, z_i).

$$\begin{aligned} X &= \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} \\ Y &= \frac{m_1 y_1 + m_2 y_2}{m_1 + m_2} \\ Z &= \frac{m_1 z_1 + m_2 z_2}{m_1 + m_2} \end{aligned} \quad (1.67)$$

Karena kecepatan partikel \mathbf{V}_i adalah sebuah vektor yang terdiri dari turunan terhadap waktu dari koordianat kartesian untuk partikel, kecepatan untuk pusat gravitasi \mathbf{V}_G dinyatakan dengan kecepatan masing-masing partikel sebagai berikut.

$$\mathbf{V}_G = \frac{m_1 \mathbf{V}_1 + m_2 \mathbf{V}_2}{m_1 + m_2}$$

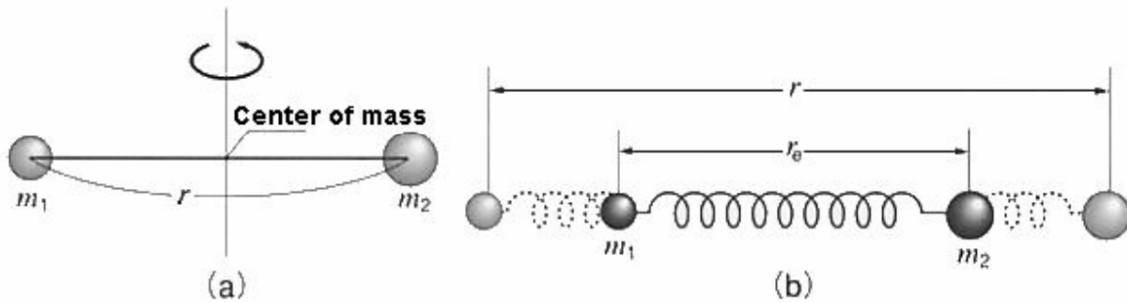
Koordinat relatif dapat diperkenalkan sebagai posisi dari partikel kedua terhadap partikel pertama

$$\begin{aligned} x &= x_2 - x_1 \\ y &= y_2 - y_1 \\ z &= z_2 - z_1 \end{aligned} \quad (1.68)$$

Kecapatan relatif \mathbf{V} , yang didefinisikan sebagai turunan terhadap waktu dari posisi relatif, diberikan oleh

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_2 - \mathbf{V}_1 \quad (1.69)$$

Gerak dari pusat gravitasi yang bebas terhadap gerak relatif antara partikel berhubungan dengan gerak paralel yang menjaga geometri relatif antara partikel dan disebut sebagai gerak translasi atau translasi.



Gambar 1.15 Gerak relatif dari sistem dengan 2 partikel (a) Gerak rotasi dengan r tetap (b) gerak vibrasi.

Energi dari sistem dengan 2 partikel dapat dinyatakan sebagai penjumlahan dari energi untuk gerak relatif dan translasi.

$$E = \frac{1}{2}(m_1 + m_2)\mathbf{V}_G^2 + \frac{1}{2}\mu\mathbf{V}^2 + U \quad (1.70)$$

Suku pertama menyatakan energi kinetik dari translasi dan suku kedua menyatakan energi kinetik dari gerak relatif di mana μ adalah masa tereduksi yang didefinisikan dalam rumus berikut.

$$\mu = \frac{1}{1/m_1 + 1/m_2} \quad (1.71)$$

Karena kita dapat memilih sebuah sistem koordinat sembarang, gerak dari sistem dengan 2 partikel terhadap koordinat yang tetap pada pusat gravitasi dapat dengan sederhana dinyatakan sebagai

$$E = \frac{1}{2} \mu \mathbf{V}^2 + U \quad (1.72)$$

Di mana $\mathbf{V} = \dot{\mathbf{r}}$. Ini adalah energi dari partikel dengan masa μ dan dengan kecepatan \mathbf{V} bergerak dalam energi potensial U . Karenanya, gerak dari sistem dengan 2 partikel dapat direduksi menjadi sistem satu partikel dengan masa tereduksi μ . Dengan demikian, Hamiltonian dari gerak relatif pada sistem ini dapat dinyatakan dengan sebuah Laplacian berikut

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + U \quad (1.73)$$

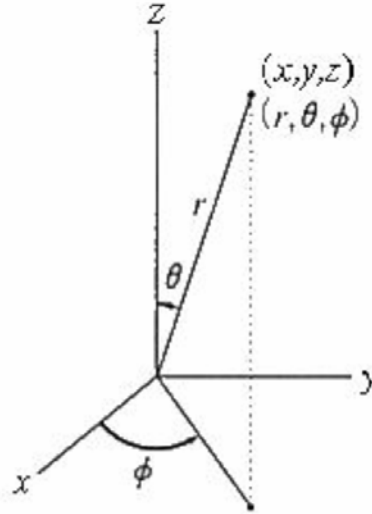
(b) Pemisahan rotasi dan vibrasi

Gerak relatif dari sistem dengan 2 partikel dapat dibagi menjadi rotasi dan vibrasi. Gerak rotasi dapat dibayangkan sebagai rotasi dari sebuah *dumbbell*. Sebuah prototipe dari gerakan vibrasi adalah vibrasi dari 2 buah bola yang dihubungkan dengan sebuah pegas sebagaimana ditunjukkan dalam gambar 1.15. Sudut-sudut adalah variabel yang cocok untuk gerak rotasi. Marilah kita mentransformasi koordinat kartesian ke dalam koordinat polar dengan menggunakan (r, θ, ϕ) dalam 3 dimensi sebagaimana ditunjukkan dalam gambar 1.16.

$$\begin{aligned} x &= r \sin \theta \cos \phi \\ y &= r \sin \theta \sin \phi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (1.74)$$

r adalah jarak dari titik asal koordinat dan disebut sebagai jarak radial. θ adalah sudut inklinasi dari sumbu-z dan disebut sebagai sudut polar. ϕ adalah sudut yang mengelilingi sumbu-z dan disebut sebagai

sudut azimut. Arientasi spasial dinyatakan dengan dua sudut yaitu θ dan ϕ . Dalam sistem koordinat polar, variasi pada sudut (θ dan ϕ) dan jarak (r) masing-masing menyatakan gerak rotasi dan gerak vibrasi. Dalam koordinat kartesian, rotasi dan vibrasi tidak dapat saling dipisahkan.



Gambar 1.16 Koordinat polar

(c) Persamaan gelombang dalam koordinat polar

Laplacian untuk gerak relatif dari sistem 2 partikel diberikan oleh

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \Lambda \quad (1.75)$$

Λ adalah sebuah operator untuk sudut dan disebut sebagai Legendrian

$$\Lambda = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (1.76)$$

Dengan menggunakan kedua persamaan ini, Hamiltonian untuk gerak relatif dapat ditulis sebagai

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \Lambda \right) + U \quad (1.77)$$

Hamiltonian ini dapat diterapkan pada masalah yang penting dalam kimia. Marilah kita melihat beberapa contoh dari persamaan gelombang, nilai eigen energinya dan fungsi gelombang.

(1) Masa tereduksi dan tingkat energi dari atom hidrogen

Contoh yang umum adalah pada atom hidrogen, yang merupakan sistem dengan 2 partikel yaitu sebuah proton dan sebuah elektron. Persamaan (1.71) akan memberikan masa tereduksi dari sistem ini dengan masa dari proton adalah M dan masa dari elektron adalah m sebagai berikut.

$$\mu = \frac{1}{1/M + 1/m} \quad (1.78)$$

Karena m/M adalah sebesar $1/1836$, maka $1/M$ adalah sangat kecil dibandingkan dengan $1/m$ dalam penyebut pada persamaan (1.78). Dengan pendekatan ini, $\mu = m$ dan karenanya Hamiltonian pada persamaan (1.72) dengan jelas sama dengan gerakan elektron pada sebuah atom hidrogen dengan inti yang tetap (model Bohr). Secara kaku, masa tereduksi μ haruslah digunakan tanpa menggunakan m dalam pendekatan $M \rightarrow \infty$. Hal yang lebih sesuai dengan spektra yang diamati akan diperoleh oleh model Bohr jika kita menggunakan μ dari pada menggunakan m .

Ketika persamaan (1.77) digunakan, nilai eigen energi yang memenuhi $\hat{H}\psi = E\psi$ menjadi sama dengan model Bohr yang menggunakan masa μ sebagai ganti dari m dan diberikan oleh persamaan berikut.

$$E_N = -\frac{W_H}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.79)$$

$$W_H = \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0 h^2} \quad (1.80)$$

W_H adalah energi ionisasi dari sebuah atom hidrogen. Konstanta Rydberg R yang presisi dengan menggunakan masa tereduksi dinyatakan sebagai berikut.

$$R = \frac{W_H}{hc} = \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0 h^3 c} \quad (1.81)$$

Persamaan ini untuk model Bohr akan tereduksi menjadi persamaan (1.24) ketika kita menggunakan $\mu = m$ dalam pendekatan $M \rightarrow \infty$. Sebagai catatan atas alasan ini, konstanta Rydberg dalam kasus $M \rightarrow \infty$ sering ditulis sebagai R_∞ .

(2) Rotasi molekul sebuah molekul diatomik

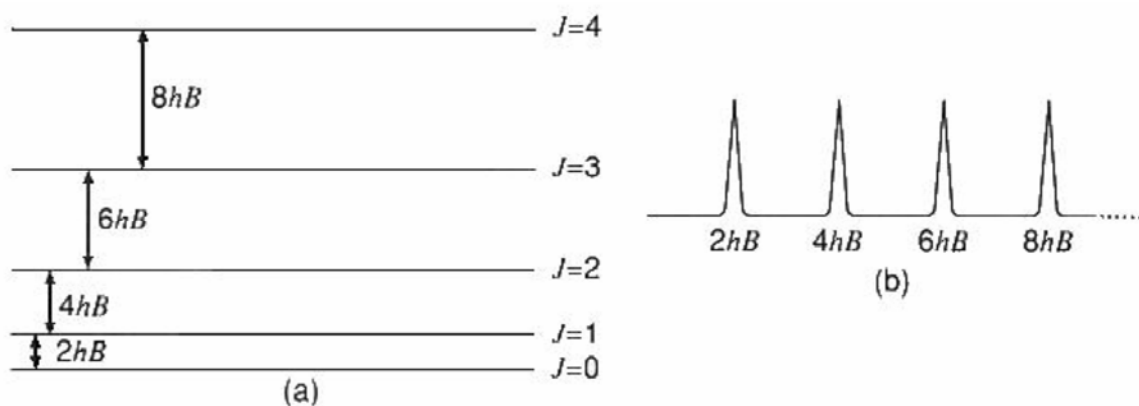
Hamiltonian pada persamaan (1.77) dapat diterapkan pada rotasi molekul dari sebuah molekul diatomik di mana gerak rotasi terjadi di sekitar sebuah sumbu yang mengenai pusat gravitasinya. Panjang r dari atom-atom yang terikat disebut sebagai panjang ikatan dapat dibuat tetap pada titik kesetimbangannya dan kita dapat mengabaikan gaya-gaya luar. Maka kemudian, Hamiltonian untuk gerak rotasi sebuah diatomik molekul dapat dinyatakan sebagai

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I} \Lambda^2 \quad (1.82)$$

I adalah momen inersia dan diberikan oleh

$$I = \mu r^2 \quad (1.83)$$

Masa tereduksi pada kasus ini adalah sama dengan pada persamaan (1.71) yaitu untuk masa dua partikel, m_1 dan m_2 . Persamaan (1.82) dapat diterapkan pada sebuah gerak melingkar dari sebuah partikel dengan masa μ , yang dilekatkan pada satu sisi sebuah tongkat yang kaku dengan panjang r , dan dengan posisi tetap pada sisi lainnya yang menjadi titik awal koordinat. Gerak melingkar partikel ini dibatasi pada permukaan sebuah bola. Sistem rotasi jenis ini disebut sebagai rotor yang kaku (*rigid*). Keadaan stasioner dari sebuah rotor yang kaku atau rotasi molekular dinyatakan dengan fungsi gelombang dari dua buah sudut θ dan ϕ .



Gambar 1.17 Tingkat-tingkat energi rotasi (a) dan spektrum rotasi, (b) Konstanta rotasi, $H = \frac{h}{8\pi^2 \mu r^2}$. Aturan seleksi untuk transisi rotasi adalah $\Delta J = \pm 1$.

Dengan memecahkan persamaan $\hat{H}\psi = E\psi$ dengan persamaan (1.82), tingkat energi dapat diperoleh sebagai berikut (gambar 1.17).

$$E_J = \frac{h^2}{2I} J(J+1) \quad J = (0,1,2,3,\dots) \quad (1.84)$$

Di sini J adalah bilangan kuantum rotasi. Rumusan untuk tingkat-tingkat energi rotasi dapat diterapkan pada rotasi molekular dari molekul diatomik. Foton yang berkaitan dengan perbedaan energi antara tingkat energi ke- J dan ke- $J+1$ yang dinyatakan dengan ΔE dapat diserap dan dipancarkan untuk mendapatkan spektra rotasi molekul.

$$\Delta E = E_{J+1} - E_J = (J+1) \frac{h^2}{I} = 2(J+1)hB \quad (1.85)$$

Transisi yang terjadi di antara tingkat-tingkat rotasi disebut sebagai transisi rotasi. B dalam persamaan (1.85) disebut sebagai konstanta rotasi yang didefinisikan sebagai berikut

$$B = \frac{h}{8\pi^2 \mu r^2} \quad (1.86)$$

Berkaitan dengan meningkatnya $J = 0, 1, 2, 3, \dots$, energi yang berkaitan dengan rotasi dan translasi dinyatakan sebagai ΔE dalam persamaan (1.85) meningkat dengan sebuah konstanta jarak yaitu (\hbar^2 / I) . Dalam banyak kasus, spektra rotasi dari molekul muncul pada daerah gelombang mikro dan infra merah. Ketika momen inersia I diperoleh dari spektra yang diamati, panjang ikatan r dapat ditentukan dengan persamaan (1.83) dengan mengetahui nilai dari masa tereduksinya. Meski analisa dapat menjadi sangat rumit, struktur geometri dari molekul yang beratom banyak dapat juga ditentukan dari spektra rotasinya. Gelombang elektromagnetik dari media antar bintang dalam ruang angkasa mengandung gelombang elektromagnetik yang dipancarkan sebagai spektra rotasi molekul. Probabilitas dari rotasi dan translasi bergantung pada polarisasi listrik dari molekul. Rotasi dan translasi tidak dapat terjadi pada molekul nitrogen dan hidrogen, karena molekul-molekul ini tidak memiliki polarisasi listrik.

(3) Vibrasi molekul dari sebuah molekul diatomik

Hamiltonian pada persamaan (1,77) dapat juga diterapkan pada vibrasi molekul dari sebuah molekul diatomik yang merupakan gerak melentur dari panjang ikatan r berada di sekitar jarak kesetimbangannya r_e . Dengan menetapkan sudut rotasi θ dan ϕ , Hamiltonian untuk gerak vibrasi dari sebuah molekul diatomik dinyatakan sebagai berikut.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + U(r) \quad (1.87)$$

Karena fungsi gelombang $\psi(r)$ adalah sebuah fungsi dari r yang memenuhi persamaan $\hat{H}\psi = E\psi$, kita dapat menulis $\psi(r)$ dengan menggunakan sebuah fungsi $\phi(r)$ sebagai berikut.

$$\psi(r) = \frac{\phi(r)}{r} \quad (1.88)$$

Kemudian kita akan mendapatkan dari persamaan (1.87) persamaan berikut.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{\partial^2}{\partial r^2} + U \right) \phi(r) = E\phi(r) \quad (1.89)$$

Untuk gerak vibrasi yang mengikuti hukum Hooke, energi potensial U adalah sebanding dengan kuadrat dari perpindahan Q dari posisi setimbangnya (Gambar 1.18) dan ini diberikan oleh

$$U = \frac{1}{2}kQ^2 \quad (1.90)$$

Di sini k adalah sebuah konstanta yang berkaitan dengan kekuatan pegas dan disebut sebagai konstanta gaya. Perpindahan Q dinyatakan sebagai perbedaan antara panjang ikatan r dan nilai kesetimbangannya r_e .

$$Q = r - r_e \quad (1.91)$$

Dengan menggunakan perpindahan Q sebagai variabel, fungsi gelombang untuk gerak vibrasi dari sebuah molekul diatomik diekspresikan sebagai berikut

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{\partial^2}{\partial Q^2} + \frac{1}{2}kQ^2 \right) \phi(Q) = E\phi(Q) \quad (1.92)$$

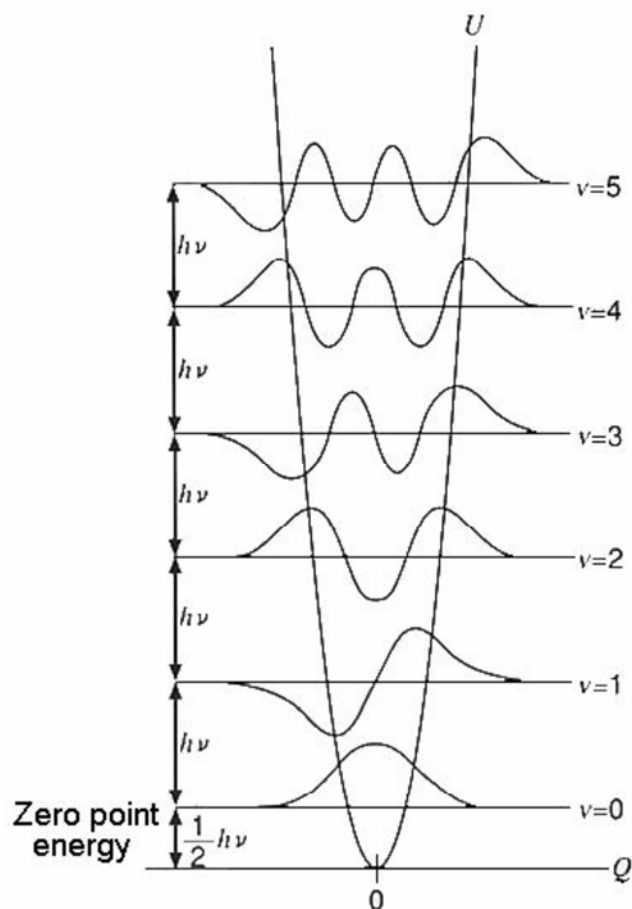
Dengan memecahkan persamaan ini, tingkat energi untuk osilator harmonik satu dimensi diberikan oleh persamaan berikut (Gambar 1.18)

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2} \right) h\nu \quad (v = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (1.93)$$

Di sini v adalah bilangan kuantum vibrasi dan ν adalah frekuensi fundamental dari gerak vibrasi dan diberikan oleh rumusan berikut.

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (1.94)$$

Frekuensi ini adalah sama dengan frekuensi fundamental dari sebuah osilator harmonik satu dimensi dengan konstanta gaya k dan masa tereduksi μ . untuk sebuah osilator harmonik satu dimensi.



Gambar1.18 Energi potensial $U = \frac{1}{2}kQ^2$ serta tingkat energi dan fungsi gelombang

Dalam kasus osilator harmonik klasik, energi pegas yang bervibrasi akan berubah secara kontinyu. Sementara untuk sebuah osilator dalam teori kuantum, hanya nilai-nilai energi yang terkuantisasi saja dalam persamaan (1.93) yang diijinkan. Tingkat energi sebuah osilator harmonik terpisah dengan jarak yang sama dan perbedaan energi $h\nu$ disebut sebagai energi kuantum dari vibrasi. Energi dari keadaan dasarnya adalah $E_0 = \frac{1}{2}h\nu$ dan energi ini adalah satu setengah dari energi kuantum dari vibrasi dan disebut sebagai energi vibrasi titik nol. Gerak vibrasi dalam keadaan dasarnya disebut dengan osilasi titik nol.

Sebagaimana dapat dilihat pada persamaan (1.94), vibrasi dari molekul berosilasi perlahan untuk sistem yang masif dan cepat untuk sistem yang terikat dengan kuat. Foton dari perbedaan energi antara

tingkat energi ke- $(\nu+1)$ dan ke ν yang dinyatakan dengan ΔE dalam persamaan (1.95) dapat diserap atau dipancarkan untuk menghasilkan spektra vibrasi molekular.

$$\Delta E = E_{\nu+1} - E_{\nu} = h \nu \quad (1.95)$$

Spektra vibrasi dari molekul biasanya terdapat pada daerah infra merah. Vibrasi molekul yang berkaitan dengan perubahan dari polarisasi listrik akan cenderung untuk memiliki transisi vibrasi dengan peluang yang lebih besar. Vibrasi tanpa perubahan dalam polarisasi listrik tidak akan menunjukkan transisi-transisi vibrasi.

Meskipun detil dari fungsi gelombang untuk osilator harmonik tidak dijelaskan di sini, karakteristik umum mereka dapat dilihat pada gambar 1.18. Jumlah dari titik nodal pada fungsi gelombang dari osilator harmonik akan meningkat dengan meningkatnya bilangan kuantum, satu demi satu sama dengan yang terjadi pada titik nodal pada sebuah partikel dalam kotak satu dimensi.

1.13 Momentum sudut

Momentum sudut adalah sebuah besaran fisika yang penting, khususnya untuk masalah-masalah pada tingkat energi dan spektra atom dan molekul. Dalam bagian ini, momentum sudut akan didefinisikan dan sifat-sifatnya akan dijelaskan.

Momentum sudut dari sebuah partikel didefinisikan sebagai sebuah produk luar (produk vektor) $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$ dari posisi vektor \mathbf{r} yang menyatakan posisi (x, y, z) dan momentum $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$.

$$\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (1.96)$$

Persamaan ini dapat ditulis ulang dengan komponen-komponen berikut.

$$\begin{aligned} l_x &= y p_z - z p_y \\ l_y &= x p_z - z p_x \\ l_z &= x p_y - y p_x \end{aligned} \quad (1.97)$$

Momentum sudut yang diperkenalkan di sini disebut sebagai momentum sudut orbital karena ini berkaitan dengan gerak orbital klasik dari partikel.

Contoh 1.12 Dapatkan momentum sudut orbital \mathbf{l} dari sebuah partikel dengan masa m yang melingkar pada bidang x-y dengan kecepatan yang konstan v dan pada radius r . Kemudian tulis lagi kondisi Bohr untuk kuantisasi pada persamaan (1.21) untuk batasan dari besaran momentum sudut $|\mathbf{l}|$.

(Jawaban) Karena $z = 0$, $p_z = 0$ untuk gerak melingkar di sekitar titik pusat O dalam bidang x-y sebagaimana ditunjukkan dalam gambar, maka komponen x dan y dari momentum sudut \mathbf{l} , keduanya akan menghilang.

$$l_x = yp_z - zp_y = y \cdot 0 - 0 \cdot p_y = 0$$

$$l_y = zp_x - xp_z = 0 \cdot p_x - x \cdot 0 = 0$$

Dengan mengambil sudut θ dan arah dari kecepatan v sebagaimana dalam gambar, kita akan mendapatkan persamaan-persamaan berikut.

$$x = r \cos \theta$$

$$y = r \sin \theta$$

$$p_x = mv_x = -mv \sin \theta$$

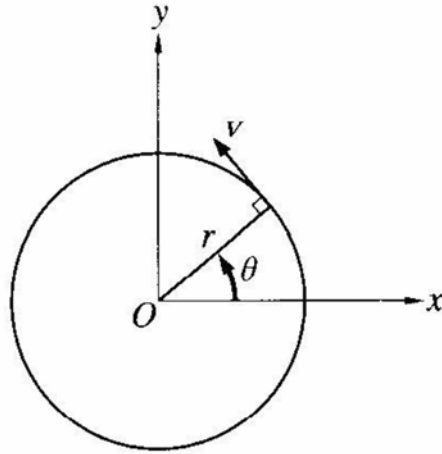
$$p_y = mv_y = mv \cos \theta$$

Komponen z dari momentum sudut l menjadi

$$l_z = xp_y - yp_x = mvr \cdot \cos^2 \theta + mvr \cdot \sin^2 \theta = mvr$$

Dengan demikian, tiga komponen dari momentum sudut orbital \mathbf{l} diekspresikan dengan

$$\mathbf{l} = (0, 0, mvr)$$



Berdasarkan persamaan (1.21) kondisi Bohr untuk kuantisasi adalah

$$(mv)(2\pi r) = nh \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

Dengan catatan bahwa $|\mathbf{l}| = mvr$ dalam persamaan di atas maka kita mendapatkan

$$|\mathbf{l}| = n\hbar$$

Dengan demikian, kondisi Bohr untuk kuantisasi menunjukkan bahwa besaran momentum sudut orbital dari gerak melingkar dikuantisasi menjadi perkalian bilangan bulat dengan \hbar .

Operator $\hat{\mathbf{l}} = (\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z)$ berhubungan dengan \mathbf{l} yang dapat diperoleh dengan menggunakan persamaan (1.53) yang digunakan juga untuk menurunkan operator Hamiltonian dengan menggunakan koordinat polar (r, θ, ϕ) kita akan mendapatkan persamaan berikut.

$$\begin{aligned} \hat{l}_x &= -i\hbar \left(-\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\ \hat{l}_y &= -i\hbar \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \\ \hat{l}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \end{aligned} \quad (1.98)$$

Persamaan-persamaan ini akan menuju pada sebuah ekspresi yang sangat berguna untuk momentum sudut kuadrat $\mathbf{I}^2 = I_x^2 + I_y^2 + I_z^2$. Sehingga $\hat{\mathbf{I}}^2$ akan sebanding dengan operator Legendre Λ .

$$\hat{\mathbf{I}}^2 = -\hbar^2 \cdot \Lambda \quad (1.99)$$

Sifat karakteristik dari operator Λ telah dipelajari dengan baik dalam kaitannya dengan harmonik sudut $Y_{l,m}$. Beberapa contoh untuk $Y_{l,m}$ ditunjukkan dalam tabel 1.3. Hubungan berikut ini adalah sangat penting.

$$\Lambda Y_{l,m} = -l(l+1)Y_{l,m} \quad (1.100)$$

atau

$$\hat{\mathbf{I}}^2 Y_{l,m} = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m} \quad (1.101)$$

Ini adalah persamaan eigen untuk $\hat{\mathbf{I}}^2$; $Y_{l,m}$ adalah fungsi eigen dan $l(l+1)\hbar^2$ adalah nilai eigen. l adalah bilangan kuantum yang menentukan besarnya momentum sudut orbital. Ini adalah bilangan kuantum untuk kuadrat dari \mathbf{I} dan dibatasi pada nilai $l = 0, 1, 2, 3, \dots$.

Hubungan berikut untuk komponen z dari momentum sudut \hat{I}_z dan dapat dikonfirmasi pada tabel 1.3.

$$\hat{I}_z Y_{l,m} = m\hbar Y_{l,m} \quad (1.102)$$

Ini adalah persamaan eigen untuk \hat{I}_z ; $Y_{l,m}$ adalah fungsi eigen dan $m\hbar$ adalah nilai eigen. m adalah bilangan kuantum untuk komponen z dari momentum sudut orbital dan memiliki $2l+1$ nilai yang mungkin yang berkaitan dengan bilangan kuantum l dalam daerah dari $-l$ hingga $+l$. Sebagai contoh untuk $l = 1$, maka nilai yang mungkin adalah $m = -1, 0, 1$. Karakteristik yang seperti itu untuk l dan m adalah berkaitan dengan perilaku elektron dalam atom. Sebuah hubungan yang sama dan juga penting dalam menjelaskan keadaan rotasional dari molekul. Sebagaimana telah dipelajari dalam kasus rotor yang kaku dari sebuah molekul diatomik, operator Hamiltonian adalah sebanding dengan operator Legendre Λ dalam persamaan (1.100), fungsi gelombang untuk rotasi molekul akan menjadi fungsi harmonik sferikal $Y_{l,m}$.

Tabel 1.3. Harmonik sperikal $Y_{l,m}(\theta, \phi)$

$Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	$Y_{2,\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm i2\phi}$
$Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$	$Y_{3,0} = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
$Y_{1,\pm 1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi}$	$Y_{3,\pm 1} = \sqrt{\frac{21}{64\pi}} (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \theta e^{\pm i\phi}$
$Y_{2,0} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$Y_{3,\pm 2} = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \cos \theta \sin^2 \theta e^{\pm i2\phi}$
$Y_{2,\pm 1} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi}$	$Y_{3,\pm 3} = \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{\pm i3\phi}$

1.14 Nilai terukur dan nilai ekpektasi

Nilai-nilai eigen (nilai eigen energi) yang memenuhi persamaan gelombang untuk keadaan stasioner adalah energi dari sistem yang dimungkinkan untuk dimiliki oleh sistem dan dinamakan tingkat energi. Karenanya, nilai energi yang terukur untuk keadaan stasioner harus sesuai dengan nilai eigen energi. Dengan kata lain setiap nilai yang berbeda dari nilai eigen energi tidak dapat diukur secara prinsip, kecuali untuk perbedaan yang disebabkan oleh kesalahan eksperimental. Bagaimana dengan nilai eigen dari momentum dan nilai eigen dari momentum sudut? Ini telah dikonfirmasi dengan eksperimen bahwa nilai yang mungkin yang akan diukur sebagai sebuah kuantitas fisika haruslah sebuah nilai eigen dari operator yang dapat diamati.

Jika sebuah sistem berada dalam keadaan stasioner, energinya harus merupakan sebuah nilai yang tertentu, kapanpun dia diamati. Ini dikarenakan fungsi gelombang yang merepresentasikan sebuah keadaan dari sistem adalah sebuah fungsi eigen tertentu yang berkaitan dengan nilai eigen tersebut.

Momentum atau momentum sudut tidak selalu tertentu dan nilai yang terukur dapat saja berbeda. Ini berkaitan dengan sifat dari fungsi gelombang yang tidak harus sama (atau proporsional) dengan fungsi eigen tertentu dari momentum atau momentum sudut.

Penyelidikan secara teori kuantum terhadap ketidakpastian dalam kuantitas yang terukur akan memberikan aturan-aturan sebagai berikut.

- (1) Fungsi gelombang $\Psi(q, t)$ dapat diekspresikan dalam bentuk berikut ini yang merupakan kombinasi linier dari $\{\phi_i\}$ yang merupakan fungsi eigen dari suatu kuantitas fisik F .

$$\Psi(q, t) = \sum_i c_i(t) \phi_i(q) \quad (1.103)$$

Di sini, persamaan eigen untuk F diberikan dengan

$$\hat{F} \phi_i(q) = f_i \phi_i(q) \quad (1.104)$$

- (2) Nilai yang terukur dari sebuah kuantitas fisik F haruslah berkesesuaian dengan satu nilai eigen untuk operatornya \hat{F} . Probabilitas $P(f_i)$ untuk menemukan nilai eigen ke- i , f_i diberikan oleh kuadrat dari koefisien ke- i , c_i dalam ekspansi yang ditulis di atas dalam bentuk fungsi eigen yang ternormalisasi $\{\phi_i\}$.

$$P(f_i) = a |c_i|^2 \quad (1.105)$$

Karena probabilitas total haruslah sama dengan suatu satuan

$$\sum_i P(f_i) = 1 \quad (1.106)$$

Kemudian konstanta a pada persamaan (1.105) harus dinormalisasi dengan cara sebagai berikut.

$$a = \frac{1}{\sum_i |c_i|^2} \quad (1.107)$$

Dari kedua aturan di atas, rata-rata dari nilai terukur $\langle f \rangle$ diharapkan diberikan oleh rumusan berikut ini.

$$\langle f \rangle = \sum_i f_i P(f_i) \quad (1.108)$$

Nilai pada sisi sebelah kanan pada persamaan ini ditentukan oleh besaran dari koefisien ekspansi $\{c_i\}$ yang merepresentasikan jumlah dari masing-masing komponen yang termasuk dalam Ψ . Jika seluruh $c_i (i \neq 1)$ kecuali untuk $c_i (i = 1)$ adalah 0, kemudian $\langle f \rangle = f_i$. Dalam kasus ini, Ψ adalah keadaan asli dari $\Psi = c_1 \phi_1$, yang terdiri dari hanya fungsi eigen yang pertama dan $P(f_1) = 1$ untuk $i = 1$ sementara $P(f_i) = 0$ untuk $i \neq 1$. Ketika suatu nilai eigen f_i yang berasal dari seluruh nilai eigen $\{f_i\}$ dari \hat{F} adalah selalu diamati, keadaan Ψ adalah keadaan eigen dari suatu besaran fisis F dan kuantitas fisis ini selalu memiliki suatu nilai f . Di lain pihak untuk kasus-kasus yang lebih umum dari keadaan yang tercampur yang mana Ψ mengandung beberapa komponen dari himpunan $\{c_i\}$, nilai yang terukur akan terdistribusi pada nilai eigen yang berbeda daripada memiliki nilai tetap pada suatu nilai tertentu.

Rata-rata dari nilai yang dapat terukur $\langle f \rangle$ dapat langsung dihitung dengan nilai ekspektasi dari mekanika kuantum $\langle F \rangle$ dan didefinisikan oleh rumus berikut.

$$\langle F \rangle = \frac{\int \Psi^* \hat{F} \Psi dq}{\int \Psi^* \Psi dq} \quad (1.109)$$

Proses integrasi harus dilakukan untuk seluruh variabel yang disimbolkan dengan q pada seluruh daerah dari variabel Ψ . Ketika Ψ telah dinormalisasi, penyebut menjadi satu dan dengan demikian hal ini dapat diabaikan.

1.15 Hubungan komutasi dan prinsip ketidakpastian

Apakah sebuah pasangan dari kuantitas fisis F dan G memiliki suatu nilai yang dapat diukur secara simultan atau tidak ditentukan dengan sifat-sifat yang berkaitan dengan operator \hat{F} dan \hat{G} . Secara umum, jika terdapat sebuah himpunan dari fungsi eigen yang umum $\{\phi_i\}$, maka hubungan berikut ini akan berlaku.

$$\hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F} \quad (1.110)$$

Kebalikannya juga, jika hubungan ini berlaku maka terdapat sebuah himpunan dari fungsi eigen yang umum $\{\phi_i\}$. Hubungan di atas menunjukkan bahwa operator \hat{F} dan \hat{G} berkomutasi dan susunan dari kedua operator tersebut dapat saling dipertukarkan.

Marilah kita meninjau sebuah kasus yang khusus di mana sebuah operator \hat{F} komut dengan operator Hamiltonian \hat{H} . Dalam kasus ini terdapat sebuah fungsi Ψ yang secara simultan adalah sebuah fungsi eigen dari \hat{F} dan \hat{H} dan kemudian pasangan dari persamaan $\hat{F}\Psi = f\Psi$ dan $\hat{H}\Psi = E\Psi$ adalah saling kompatibel untuk fungsi yg sama Ψ . Dalam kasus khusus yang demikian fungsi gelombang Ψ dari fungsi eigen \hat{H} dengan nilai eigen E adalah juga fungsi eigen dari \hat{F} dengan nilai eigen f . Kuantitas fisik F dapat memiliki suatu nilai hanya jika operator yang berkaitan \hat{F} komut dengan \hat{H} . Jika \hat{F} dan \hat{H} tidak saling komut, F tidak dapat memiliki suatu nilai tertentu dan sebuah nilai yang terukur f akan diamati pada probabilitas sebesar $P(f_i)$ berdasarkan aturan yang telah disampaikan di atas.

Contoh 1.13 Konfirmasikan bahwa operator koordinat nilai positif \hat{x} dan operator dari komponen-x dari momentum linier \hat{p}_x tidak saling komut.

(Jawaban) Karena $\hat{x} = x$ dan $\hat{p}_x = -\hbar \partial / \partial x$, kita akan mendapatkan persamaan berikut untuk sebuah fungsi sembarang $\phi(x)$.

$$\begin{aligned} \hat{x}\hat{p}_x\phi &= x\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right)\phi = -i\hbar x \frac{\partial \phi}{\partial x} \\ \hat{p}_x\hat{x}\phi &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\phi) = -i\hbar \phi - i\hbar x \frac{\partial \phi}{\partial x} \end{aligned}$$

Ini akan menjadi

$$(\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x})\phi = i\hbar \phi$$

Dengan mengingat bahwa ϕ adalah fungsi dari x ,

$$\hat{x}\hat{p}_x - \hat{p}_x\hat{x} = i\hbar$$

Karena suku di sebelah kanan tidak sama dengan 0, kita dapat menyimpulkan bahwa \hat{x} dan \hat{p} tidak saling berkomutasi.

Sama dengan contoh di atas, \hat{y} dan \hat{p}_y dan juga \hat{z} dan \hat{p}_z adalah saling tidak berkomutasi. Karenanya koordinat posisi dan momentum linier tidak dapat memiliki suatu nilai tertentu pada saat yang bersamaan. Ketidakpastian dari nilai yang terukur dipelajari oleh W. K. Heisenberg. Dia menemukan hubungan berikut pada tahun 1927

$$\Delta q \Delta p \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (1.111)$$

Di sini, Δq dan Δp menyatakan ketidakpastian untuk posisi q dan berkaitan dengan momentum p . Karena hubungan ini, jika kita ingin memastikan posisi, nilai terukur untuk momentum menjadi tidak pasti dengan nilai-nilai yang terdistribusi. Sebaliknya, jika kita ingin memastikan momentum maka nilai terukur dari posisi menjadi tidak pasti. Sebuah hubungan yang sama juga ditemukan untuk ketidakpastian energi ΔE dan interval waktu Δt yang diperlukan untuk pengukuran.

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{1}{2} \hbar \quad (1.112)$$

Ini berarti bahwa kita memerlukan waktu yang tak berhingga untuk menentukan energi secara tepat. Ketika interval dari waktu sangat singkat, energi menjadi tidak tentu dari suatu nilai yang ingin ditentukan. Kedua ketidaksamaan di atas disebut sebagai prinsip ketidakpastian.

Latihan

- (1.1) Berkaitan dengan sebuah tumbukan dari sebuah atom yang tereksitasi dengan permukaan sebuah elektroda dalam vakum, sebuah elektron dapat dipancarkan sebagai elektron kedua dari permukaan dan elektron-elektron yang demikian itu dapat ditangkap oleh sebuah plat logam. Dengan menggunakan sebuah peralatan dengan sebuah pengukur arus, arus listrik yang mengalir melalui rangkaian yang menghubungkan elektroda dengan plat logam diukur sebesar 160 pA (1 C adalah

- muatan listrik yang dibawa oleh arus 1 A selama 1 detik). Hitunglah jumlah atom yang tereksitasi setiap detik, jika diketahui bahwa satu atom yang tereksitasi akan menghasilkan satu elektron kedua.
- (1.2) Kecepatan sebuah molekul nitrogen yang bergerak dalam atmosfer pada temperatur ruang adalah sebesar 500 ms^{-1} . Hitunglah energi kinetik dari sebuah molekul nitrogen yang memiliki kecepatan ini dalam J atau eV.
- (1.3) Sebuah kelompok cahaya infra merah dengan panjang gelombang 3.3, 6.2, 7.7, dan $11.3 \mu\text{m}$ dipancarkan oleh materi antar bintang. Ini telah menjadi pertanyaan yang lama untuk mengetahui materi apa yang memancarkan cahaya infra merah ini. Telah diketahui dengan baik bahwa spektra infra merah dari molekul hidrokarbon dalam keadaan tidak saturasi memiliki garis spektra pada 3000 cm^{-1} untuk moda perenggangan CH, 1600 cm^{-1} dan 1300 cm^{-1} untuk moda perenggangan CC dan 1140 cm^{-1} dan 890 cm^{-1} untuk mode pergerakan sudut dari CCH. Manakah dari moda-moda ini yang berkaitan dengan panjang gelombang infra merah yang tidak teridentifikasi yang berasal dari materi antar bintang.
- (1.4) Perkirakan temperatur permukaan dari sebuah bintang yang memancarkan radiasi termal dengan panjang gelombang maksimum 500 nm. Jawablah pertanyaan ini dengan melihat pada contoh 1.5.
- (1.5) Sebuah foton dipancarkan dari sebuah atom hidrogen dalam keadaan tereksitasi yang memiliki bilangan kuantum $n = 2$ bertabrakkan dengan atom hidrogen lain yang berada dalam keadaan $n = 2$ dan sebuah fotoelektron dipancarkan. Hitunglah energi kinetik dari fotoelektron itu.
- (1.6) Sebuah pancaran elektron yang dihasilkan oleh percepatan elektron dengan beda potensial sebesar 600 V diarahkan pada permukaan sebuah kristal Ni. Refleksi orde ke-2 diamati pada sudut sebesar 34.5° . Hitunglah interval bidang kisi yang saling berdampingan pada kristal.
- (1.7) Tuliskan persamaan gelombang untuk keadaan stasioner dari sebuah partikel dengan masa m yang bergerak di bawah energi potensial $U(r) = \frac{1}{2}kr^2$ ($k > 0$) bergantung hanya pada jarak r . Indikasikan kebergantungan pada koordinat tiga dimensi (x, y, z) secara eksplisit.
- (1.8) Fungsi berikut ψ_1 dan ψ_2 adalah fungsi gelombang untuk keadaan stasioner dari osilator harmonik satu dimensi. A, B dan a ($a > 0$) adalah konstanta.

$$\psi_1(x) = Ae^{-ax^2}$$

$$\psi_2(x) = Bxe^{-ax^2}$$

Berkaitan dengan fungsi-fungsi di atas jawablah pertanyaan berikut (1) dan (2)

(1) Normalisasikan ψ_1 dan ψ_2 . Gunakan rumus $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$, tentukan konstanta A dan B sedemikian hingga memenuhi kondisi ternormalisasi.

(2) Substitusikan ψ_1 dan ψ_2 ke dalam persamaan gelombang untuk keadaan stasioner dari sebuah partikel yang berosilasi yang memiliki masa m dan konstanta gaya k. Dapatkan nilai eigen untuk ψ_1 dan ψ_2 dengan mentransformasikan persamaan yang telah dimasukkan menjadi sebuah bentuk yang sebanding dengan masing-masing fungsi gelombangnya.

(1.9) Dapatkan nilai ekspektasi dari koordinat posisi untuk sebuah partikel dalam sebuah kotak satu dimensi dengan panjang L.

(1.10) Tunjukkan bahwa fungsi harmonik sferikal $Y_{1,1}$, $Y_{1,0}$ dan $Y_{1,-1}$ adalah fungsi eigen dari operator untuk kuadrat dari momentum sudut orbital. Konfirmasikan bahwa nilai eigen untuk ketiga fungsi ini adalah sama. Buktikan bahwa setiap kombinasi linier dari ketiga fungsi ini juga sebuah fungsi eigen dari operator untuk kuadrat dari momentum sudut orbital dan bahwa nilai eigennya juga sesuai dengan nilai eigen dari ketiga fungsi ini.