

Pembahasan Kuis Mata Kuliah Teori Kuantum Material

ARTN

ver. October 27, 2025

SOAL 1:

Pernyataan manakah yang benar di bawah ini?

- (A) Gradien yang besar untuk fungsi gelombang memberikan energi kinetik yang besar.
- (B) Fungsi gelombang elektron mengandung informasi posisi serta momentum elektron.
- (C) Semua (A+B) benar.

Solusi:

Jawaban: (C). Energi kinetik dalam representasi posisi memiliki operator $\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$. Nilai harapannya dapat ditulis $\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int |\nabla\psi(\mathbf{r})|^2 d^3r$, sehingga gradien besar menaikkan energi kinetik. Fungsi gelombang ψ memuat informasi posisi melalui $|\psi(\mathbf{r})|^2$ dan informasi momentum melalui transformasi Fourier $\phi(\mathbf{p})$ dengan $|\phi(\mathbf{p})|^2$ sebagai distribusi momentum. Prinsip ketidakpastian melarang kedua nilai eksak secara simultan, tetapi informasi masing-masingnya tetap termuat dalam fungsi gelombang.

SOAL 2:

Manakah formula yang merepresentasikan operator Hamiltonian atom hidrogen dalam pendekatan Born–Oppenheimer?

- (A) $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla - \frac{e^2}{r}$
- (B) $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{2e^2}{r}$
- (C) $\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{2e^2}{r}$
- (D) $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}$

Solusi:

Jawaban: (D). Dalam sistem satuan gaussian yang menyerap faktor $1/(4\pi\epsilon_0)$, kita bisa tuliskan $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}$. Opsi (A) salah karena memakai ∇ bukan ∇^2 ; (B) salah karena faktor 2 pada potensial; (C) salah pada tanda energi kinetik.

SOAL 3:

Manakah pernyataan berikut yang benar tentang sumur potensial tak hingga? (pilih jawaban terbaik)

- (A) Energi keadaan dasar tidak bernilai nol sebagai akibat prinsip ketidakpastian.
- (B) Energi keadaan dasar berkurang dengan bertambahnya panjang sumur.
- (C) Probabilitas menemukan elektron di luar sumur adalah nol.
- (D) Semua di atas sudah benar.

Solusi:

Jawaban: (D). Untuk sumur 1D lebar L , $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$ sehingga $E_1 \propto 1/L^2$ dan tidak nol. Karena $V = \infty$ di luar, $\psi = 0$ di luar, maka probabilitas di luar nol.

SOAL 4:

Bagaimana hubungan antara jumlah simpul (nodes) fungsi gelombang hidrogen dengan bilangan kuantum utama n ?

- (A) Tidak terkait.
- (B) Sama dengan n .
- (C) Sama dengan $n - 1$.
- (D) Lainnya.

Solusi:

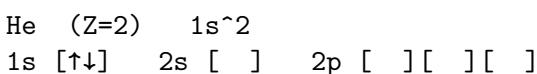
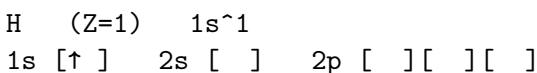
Jawaban: (C). Jumlah simpul total = $(n - \ell - 1) + \ell = n - 1$.

SOAL 5:

Dengan aturan Hund, buatlah diagram pengisian elektron per orbital (1s, 2s, 2p) untuk H sampai Ne.

Solusi:

Konfigurasi dan diagram (tiga orbital 2p ditulis $[p_x][p_y][p_z]$):



1s [↑↓] 2s [↑] 2p [] [] []

Be (Z=4) 1s² 2s²
1s [↑↓] 2s [↑↓] 2p [] [] []

B (Z=5) 1s² 2s² 2p¹
1s [↑↓] 2s [↑↓] 2p [↑] [] []

C (Z=6) 1s² 2s² 2p²
1s [↑↓] 2s [↑↓] 2p [↑][↑][]

N (Z=7) 1s² 2s² 2p³
1s [↑↓] 2s [↑↓] 2p [↑][↑][↑]

O (Z=8) 1s² 2s² 2p⁴
1s [↑↓] 2s [↑↓] 2p [↑↓][↑][↑]

F (Z=9) 1s² 2s² 2p⁵
1s [↑↓] 2s [↑↓] 2p [↑↓][↑↓][↑]

Ne (Z=10) 1s² 2s² 2p⁶
1s [↑↓] 2s [↑↓] 2p [↑↓][↑↓][↑↓]

SOAL 6:

Manakah pernyataan berikut ini yang benar?

- (A) Energi kinetik dari keadaan ikatan lebih rendah dari anti-ikatan.
- (B) Energi potensial dari keadaan ikatan lebih rendah dari anti-ikatan.
- (C) Ikatan kovalen terbentuk karena elektron di tengah ikatan menarik dua inti bersamaan.
- (D) Semua di atas benar.

Solusi:

Jawaban: (D). Rapat elektron antar-inti atom yang tinggi membuat ψ lebih *smooth* sehingga $\langle T \rangle$ lebih rendah, dan membuat $\langle V \rangle$ lebih negatif; elektron terdelokalisasi menarik kedua inti.

SOAL 7:

Manakah fungsi gelombang yang asimetris dari pilihan berikut ini?

- (A) $|\psi\rangle = |\psi_L\rangle$
- (B) $|\psi\rangle = |\psi_R\rangle$
- (C) $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_L\rangle + |\psi_R\rangle)$

$$(D) |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\psi_L\rangle - |\psi_R\rangle)$$

Solusi:

Jawaban: (D). Kombinasi minus berubah tanda di bawah pertukaran $L \leftrightarrow R$ dan merupakan state antisimetri.

SOAL 8:

Asumsikan $t < 0$ dan energi on-site nol. Dengan teori LCAO satu-orbital per Li, tentukan konfigurasi paling stabil Li_3 antara rantai linear dan segitiga, serta energi totalnya.

Solusi:

Jawaban: Segitiga dengan energi total $3t$. Linear (tetangga terdekat) memiliki spektrum $\{-\sqrt{2}t, 0, \sqrt{2}t\}$ dan 3 elektron memberi $E_{\text{lin}} = 2\sqrt{2}t$. Segitiga memiliki spektrum $\{2t, -t, -t\}$ sehingga pengisian memberi $E_{\Delta} = 3t$. Untuk $t < 0$, $3t < 2\sqrt{2}t$; segitiga paling stabil.

SOAL 9:

Manakah pernyataan berikut ini yang benar?

- (A) Basis tight-binding kristal dapat dibentuk dari kombinasi linear orbital atom pada N sel satuan dengan faktor fase periodik.
- (B) Deret sumur potensial tak hingga dapat membentuk celah energi antar pita.
- (C) Ukuran matriks Hamiltonian tereduksi secara signifikan dengan bekerja per- \mathbf{k} pada sel satuan.
- (D) Semua pernyataan di atas benar.

Solusi:

Jawaban: (D). Teorema Bloch memblok-diagonalkan Hamiltonian per- \mathbf{k} dan model periodik tertentu akan dapat menunjukkan pita dan celah.

SOAL 10:

Diberikan $\mathbf{a}_1 = a(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})$ dan $\mathbf{a}_2 = a(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2})$. Manakah vektor kisi resiprok graphene $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$?

Solusi:

Jawaban: (A). Detailnya:

- Diberikan $\mathbf{a}_1 = a(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2})$ dan $\mathbf{a}_2 = a(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2})$. Cari \mathbf{b}_j yang memenuhi $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$.

- Ambil $\mathbf{b}_1 = (x, y)$.

$$a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}x + \frac{1}{2}y \right) = 2\pi, \quad a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y \right) = 0$$

- Dari selisih persamaan diperoleh $y = 2\pi/a$. Substitusi memberi $x = 2\pi/(\sqrt{3}a)$.

$$\mathbf{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a} \right) = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

- Untuk $\mathbf{b}_2 = (x, y)$

$$a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}x + \frac{1}{2}y \right) = 0, \quad a \left(\frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y \right) = 2\pi$$

- Hasilnya $x = 2\pi/(\sqrt{3}a)$, $y = -2\pi/a$.

$$\mathbf{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a} \right) = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

SOAL 11:

Diketahui dispersi pita:

$$E_{\mathbf{k}}^{\pm} = \pm \sqrt{(\Delta/2)^2 + |H_{AB}|^2}, \quad |H_{AB}|^2 = 4t^2 (\cos k_x a + \cos k_y a)^2,$$

dengan $-\frac{\pi}{2a} \leq k_x, k_y \leq \frac{\pi}{2a}$. Berapakah nilai celah energi (band gap) dari sistem tersebut?

- (A) $|\Delta|/2$
- (B) $|\Delta|$
- (C) $2|\Delta|$
- (D) $4|\Delta|$

Solusi:

Jawaban: (B) $|\Delta|$. Detailnya:

$$E_g = \min_{\mathbf{k}} [E_+(\mathbf{k}) - E_-(\mathbf{k})] = 2 \min_{\mathbf{k}} \sqrt{(\Delta/2)^2 + |H_{AB}|^2}.$$

Minimum terjadi saat $|H_{AB}| = 0$, yaitu $\cos k_x a + \cos k_y a = 0$ (ada solusi di BZ). Maka

$$E_g = 2\sqrt{(\Delta/2)^2} = |\Delta|.$$

SOAL 12:

Apa tipe celah energi dari material kristal silikon dengan struktur *diamond*?

Solusi:

Jawabannya jelas *indirect gap*.

SOAL 13:

Manakah dari suku energi berikut ini yang tidak tercakup dalam pemecahan persamaan Schrödinger dalam aproksimasi Born–Oppenheimer?

- (A) Energi kinetik elektron
- (B) Interaksi elektron dan ion
- (C) Interaksi elektron–elektron
- (D) Energi kinetik ion

Solusi:

Jawaban: (D) Energi kinetik ion. Penjelasan singkat: Dalam aproksimasi Born–Oppenheimer, ion alias inti atom dianggap tetap (karena masif) saat menyelesaikan persamaan Schrödinger *elektronik*. Hamiltonian elektronik mencakup:

- energi kinetik elektron, $-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2$,
- interaksi elektron–inti, dan
- interaksi elektron–elektron.

Energi kinetik inti/ion tidak disertakan pada tahap ini dan baru dipertimbangkan pada analisis vibrasi–rotasi nuklir; energi tolak inti–inti ditambahkan sebagai konstanta setelah solusi elektronik.

SOAL 14:

Manakah dari pilihan berikut yang merupakan fungsi gelombang yang benar untuk sistem dua elektron?

- (A) $\psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(r_1)\phi_2(r_2) + \phi_2(r_1)\phi_1(r_2)]$
- (B) $\psi(r_1, r_2) = \phi_1(r_1)\phi_2(r_2)$
- (C) $\psi(r_1, r_2) = \phi_2(r_1)\phi_1(r_2)$
- (D) $\psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_1(r_1)\phi_2(r_2) - \phi_2(r_1)\phi_1(r_2)]$

Solusi:

Jawaban: (D). Penjelasan singkat: Elektron adalah fermion sehingga fungsi gelombang total harus antisimetris terhadap pertukaran $1 \leftrightarrow 2$. Bentuk (D) bersifat antisimetris (determinan Slater dua orbital). Opsi (A) simetris, sedangkan (B) dan (C) hanya untuk boson.

SOAL 15:

Manakah pernyataan berikut ini yang benar?

- (A) Pendekatan LDA untuk interaksi pertukaran-korelasi kerap memberikan *band gap* lebih besar dari seharusnya
- (B) Pendekatan GGA untuk interaksi pertukaran-korelasi kerap memberikan *band gap* lebih kecil dari seharusnya
- (C) Pseudopotential diciptakan sebagai pengganti potensial singular yang merepresentasikan interaksi elektron-ion yang sulit dipecahkan secara numerik
- (D) Semua di atas benar

Solusi:

Jawaban: (D). Penjelasan singkat:

- LDA terkenal overestimate gap, sementara GGA underestimate gap. Jadi (A) dan (B) benar.
- Pseudopotential menggantikan interaksi inti-elektron yang sangat singular di dekat inti agar perhitungan numerik lebih stabil dan efisien. Jadi (C) benar.