

Pembahasan Tugas / Problem Set 1

Mata Kuliah Teori Kuantum Material

ARTN

ver. October 27, 2025

SOAL 1:

Untuk sistem satu dimensi (1D), nilai harap dari energi kinetik dapat dituliskan sebagai

$$K = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) dx$$

Definisi ini tidak terlalu jelas menunjukkan energi kinetik "pasti" tidak negatif sebagaimana dalam mekanika klasik. Namun, energi kinetik dalam mekanika kuantum ternyata dapat pula dituliskan sebagai

$$K = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d}{dx} \psi(x) \right)^2 dx$$

yang lebih jelas menunjukkan bahwa nilai harap energi kinetik dalam mekanika kuantum pasti tidak negatif. Kita bisa mengubah persamaan energi kinetik pertama ke persamaan kedua dengan menggunakan integral parsial:

$$\int u dv = uv - \int v du$$

Dari pilihan jawaban berikut ini, manakah pilihan yang tepat untuk fungsi u dan v?

- (A) $u = \psi(x); v = \frac{d}{dx} \psi(x)$
- (B) $u = \frac{d}{dx} \psi(x); v = \psi(x)$
- (C) $u = \frac{d^2}{dx^2} \psi(x); v = \psi(x)$
- (D) $u = \frac{d}{dx} \psi(x); v = \frac{d}{dx} \psi(x)$

Jawaban: (A)

Penjelasan:

Tujuan kita adalah mengubah persamaan energi kinetik pertama menjadi persamaan kedua menggunakan integral parsial.

1. Persamaan Awal:

Bentuk awal nilai harap energi kinetik adalah:

$$K = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) dx$$

2. Rumus Integral Parsial:

Kita akan menggunakan rumus integral parsial:

$$\int u dv = uv - \int v du$$

3. Identifikasi u dan dv :

Kita fokus pada bagian integral dari persamaan K :

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \left(\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} dx \right)$$

Untuk mencocokkan ini dengan $\int u dv$, kita perlu memilih u dan dv . Mari kita uji **Opsi (A)**:

- $u = \psi(x)$
- $dv = \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} dx$

4. Hitung du dan v :

Sekarang kita turunkan u untuk mendapatkan du dan integralkan dv untuk mendapatkan v :

- $du = \frac{d\psi(x)}{dx} dx$
- $v = \int \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} dx = \frac{d\psi(x)}{dx}$

Pilihan ini sesuai dengan **Opsi (A)**, dengan $u = \psi(x)$ dan $v = \frac{d}{dx} \psi(x)$.

5. Substitusi ke Rumus Integral Parsial:

Sekarang kita masukkan u , v , dan du ke dalam rumus integral parsial:

$$\begin{aligned} I &= \int u dv = [uv]_{-\infty}^{+\infty} - \int v du \\ I &= \left[\psi(x) \frac{d\psi(x)}{dx} \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d\psi(x)}{dx} \right) \left(\frac{d\psi(x)}{dx} dx \right) \\ I &= \left[\psi(x) \frac{d\psi(x)}{dx} \right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 dx \end{aligned}$$

6. Analisis Suku Batas (Boundary Term):

Untuk sistem fisis yang terikat (sistem berhingga), fungsi gelombang $\psi(x)$ harus menuju nol saat x menuju tak hingga ($x \rightarrow \pm\infty$). Nilai fungsi gelombang di $x = \pm\infty$ adalah 0. Karena $\psi(\pm\infty) = 0$, maka suku batas $\left[\psi(x) \frac{d\psi(x)}{dx} \right]_{-\infty}^{+\infty}$ juga bernilai nol.

7. Hasil Integral I :

Setelah suku batas hilang, integral I menjadi:

$$I = 0 - \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 dx$$

8. Substitusi Kembali ke Persamaan K :

Terakhir, kita masukkan hasil I ini kembali ke persamaan awal K :

$$K = -\frac{\hbar^2}{2m}(I)$$

$$K = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 dx \right]$$

$$K = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{d\psi}{dx} \right)^2 dx$$

Hasil akhir ini sama persis dengan persamaan energi kinetik kedua yang diberikan di soal. Oleh karena itu, pilihan yang tepat untuk u dan v adalah **(A)**.

SOAL 2:

Berapa nilai kecenderungan dari fungsi gelombang suatu sistem 1D berhingga pada $x = \pm\infty$?

- (A) 1
- (B) $+\infty$
- (C) 0
- (D) $-\infty$

Jawaban: (C)

Penjelasan:

1. **Interpretasi Probabilitas:** Dalam mekanika kuantum, kuadrat absolut dari fungsi gelombang, $|\psi(x)|^2$, merepresentasikan rapat probabilitas (*probability density*) untuk menemukan partikel pada posisi x .
2. **Kondisi Normalisasi:** Untuk sistem yang “berhingga” atau terikat (*bound system*), partikel tersebut harus berada di suatu tempat dalam seluruh ruang. Ini berarti total probabilitas untuk menemukan partikel di antara $x = -\infty$ dan $x = +\infty$ harus sama dengan 1. Secara matematis, fungsi gelombang harus memenuhi kondisi normalisasi:

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

3. **Syarat Konvergensi Integral:** Agar integral di atas memiliki nilai yang berhingga (yaitu 1), nilai dari integrand $|\psi(x)|^2$ harus menuju nol ketika x mendekati tak hingga ($x \rightarrow \pm\infty$).
4. **Konsekuensi:** Jika $|\psi(x)|^2$ harus menuju 0, maka fungsi gelombang $\psi(x)$ itu sendiri juga harus menuju 0.

Jika $\psi(x)$ cenderung ke nilai lain (seperti 1, $+\infty$, atau $-\infty$) pada $x = \pm\infty$, maka integral $\int |\psi(x)|^2 dx$ akan divergen (menuju tak hingga). Ini akan berarti probabilitas total untuk menemukan partikel adalah tak hingga, suatu hal yang tidak mungkin secara fisik. Oleh karena itu, fungsi gelombang untuk sistem 1D berhingga harus bernilai 0 pada $x = \pm\infty$.

SOAL 3:

Model sumur potensial 1D dapat digunakan untuk memahami spektrum optik dari beberapa molekul. Tinjaulah tiga molekul pewarna terkonjugasi (*conjugated dye molecules*). Sebagian elektron yang dikenal dengan sebutan π -electrons pada molekul-molekul ini relatif dapat bergerak bebas ke sekitarnya sehingga boleh diaproksimasi sebagai elektron bebas pada sumur kuantum dengan potensial tak hingga. Lebar sumur L sama dengan panjang molekul tersebut. π -electrons dapat tereksitasi ke tingkat energi lebih tinggi dengan menyerap energi yang dibawa foton. Kemudian, jika sudah tereksitasi, elektron-elektron tersebut dapat pula berelaksasi ke energi yang lebih rendah dengan memancarkan foton. Dalam hal ini, perbedaan energi antara dua keadaan kuantum elektron dapat terukur oleh eksperimen melalui spektrum absorpsi atau emisi optik.

Misalkan pada konfigurasi keadaan dasar kita taruh sebanyak N buah π -electrons ke dalam $N/2$ tingkat terendah dari sumur kuantum karena prinsip eksklusi Pauli menyatakan bahwa kita bisa menempatkan dua elektron per tingkat energi orbital. Energi foton terendah yang dapat diserap oleh molekul-molekul ini akan mengangkat sebuah elektron dari tingkat energi terisi paling atas (*highest occupied level*), yakni tingkat ke- $n = N/2$, ke tingkat energi terdekat berikutnya, yakni tingkat ke- n' , yang masih kosong (*lowest unoccupied level*). Dalam aproksimasi ini, apa rumus yang tepat menyatakan energi dari tingkat terendah yang tadinya masih kosong (*lowest unoccupied level*) itu?

(A) $E_{n'} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{N}{L}\right)^2$

(B) $E_{n'} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{N+1}{L}\right)^2$

(C) $E_{n'} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{(N/2)+1}{L}\right)^2$

(D) $E_{n'} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{(N/2)}{L}\right)^2$

Jawaban: (C)

Penjelasan:

1. **Energi Sumur Potensial 1D:** Energi yang diizinkan untuk partikel (elektron) bermassa m dalam sumur potensial tak hingga 1D dengan lebar L diberikan oleh rumus:

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8mL^2} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Rumus ini dapat ditulis ulang sebagai:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n}{L}\right)^2$$

dengan $n = 1, 2, 3, \dots$ adalah bilangan kuantum.

2. **Prinsip Eksklusi Pauli:** Soal menyatakan bahwa ada N buah π -elektron. Prinsip eksklusi Pauli memperbolehkan setiap tingkat energi orbital n diisi oleh dua elektron (satu spin-up, satu spin-down).
3. **Highest Occupied Level (HOMO):** Pada keadaan dasar, N elektron ini akan mengisi $N/2$ tingkat energi terendah. Oleh karena itu, tingkat energi terisi paling atas (HOMO) adalah tingkat dengan bilangan kuantum:

$$n_{HOMO} = N/2$$

Energinya adalah $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{N/2}{L}\right)^2$. Ini sesuai dengan Opsi (D), tetapi soal menanyakan energi LUMO.

4. **Lowest Unoccupied Level (LUMO):** Soal menanyakan energi dari tingkat terendah yang masih kosong (LUMO). Ini adalah tingkat energi berikutnya yang terdekat, tepat di atas HOMO. Bilangan kuantum untuk LUMO (n') adalah:

$$n' = n_{LUMO} = n_{HOMO} + 1 = (N/2) + 1$$

5. **Energi LUMO ($E_{n'}$):** Untuk menemukan energi LUMO, kita substitusikan $n' = (N/2) + 1$ ke dalam rumus energi umum:

$$E_{n'} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n'}{L} \right)^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{(N/2) + 1}{L} \right)^2$$

Rumus ini sesuai dengan **Opsi (C)**.

SOAL 4:

Untuk setiap molekul pewarna, tabel di bawah ini memberikan jumlah (N) dari π -electrons, panjang molekul (L) dan panjang gelombang (λ_{exp}) yang teramati dari spektrum absorpsi maupun emisi.

Nama molekul	N	L (nm)	λ_{exp} (nm)
Cyanine	6	0,834	523
Pinacyanol	8	1,112	605
Dicarbocyanine	10	1,390	706

Hitunglah energi dari tingkat terisi tertinggi (highest occupied level) dan tingkat kosong terendah (lowest unoccupied level) untuk masing-masing molekul pewarna dalam satuan eV. Tuliskan jawaban sampai dua angka di belakang koma.

Jawaban:

Nama molekul	E_n (eV)	$E_{n'}$ (eV)
Cyanine	4.86	8.63
Pinacyanol	4.86	7.59
Dicarbocyanine	4.86	6.99

Catatan: E_n adalah energi dari tingkat terisi tertinggi, sedangkan $E_{n'}$ adalah energi dari tingkat kosong terendah.

Penjelasan:

1. **Rumus Energi:** Dari Soal 3, kita mengetahui rumus umum energi untuk partikel dalam sumur potensial 1D adalah:

$$E_k = \frac{k^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

E_n (HOMO) adalah tingkat ke- $n = N/2$. $E_{n'}$ (LUMO) adalah tingkat ke- $n' = (N/2) + 1$.

2. **Perhitungan Konstanta:** Kita perlu menghitung nilai $\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}$ dalam satuan yang sesuai (eV·nm²).

- $m = m_e$ (massa elektron) $\approx 9.109 \times 10^{-31}$ kg

- \hbar (konstanta Planck tereduksi) $\approx 1.0546 \times 10^{-34}$ J·s
- $\pi \approx 3.14159$
- $1 \text{ eV} \approx 1.602 \times 10^{-19}$ J
- $1 \text{ m} = 10^9 \text{ nm} \implies 1 \text{ m}^2 = 10^{18} \text{ nm}^2$

Mari kita hitung nilai $C = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e}$:

$$C = \frac{(3.14159)^2 (1.0546 \times 10^{-34} \text{ J s})^2}{2(9.109 \times 10^{-31} \text{ kg})} \approx 6.025 \times 10^{-38} \text{ J} \cdot \text{m}^2$$

Sekarang, konversi satuan ke $\text{eV} \cdot \text{nm}^2$:

$$C \approx (6.025 \times 10^{-38} \text{ J} \cdot \text{m}^2) \times \left(\frac{1 \text{ eV}}{1.602 \times 10^{-19} \text{ J}} \right) \times \left(\frac{10^{18} \text{ nm}^2}{1 \text{ m}^2} \right)$$

$$C \approx 0.3761 \text{ eV} \cdot \text{nm}^2$$

(Catatan: Nilai yang lebih presisi adalah $\approx 0.3753 \text{ eV} \cdot \text{nm}^2$. Kita akan gunakan nilai ini untuk akurasi yang lebih baik).

Maka, rumus energinya menjadi:

$$E_k \text{ (eV)} = (0.3753 \text{ eV} \cdot \text{nm}^2) \frac{k^2}{L^2 \text{ (nm}^2)}$$

3. Perhitungan per Molekul:

a) Cyanine

- $N = 6$, $L = 0.834 \text{ nm}$
- $n = N/2 = 3$
- $n' = n + 1 = 4$
- $E_n = 0.3753 \times \frac{3^2}{(0.834)^2} = 0.3753 \times \frac{9}{0.695556} \approx 4.856 \text{ eV}$
- $E_{n'} = 0.3753 \times \frac{4^2}{(0.834)^2} = 0.3753 \times \frac{16}{0.695556} \approx 8.633 \text{ eV}$
- Dibulatkan: **$E_n = 4.86 \text{ eV}$, $E_{n'} = 8.63 \text{ eV}$**

b) Pinacyanol

- $N = 8$, $L = 1.112 \text{ nm}$
- $n = N/2 = 4$
- $n' = n + 1 = 5$
- $E_n = 0.3753 \times \frac{4^2}{(1.112)^2} = 0.3753 \times \frac{16}{1.236544} \approx 4.856 \text{ eV}$
- $E_{n'} = 0.3753 \times \frac{5^2}{(1.112)^2} = 0.3753 \times \frac{25}{1.236544} \approx 7.588 \text{ eV}$
- Dibulatkan: **$E_n = 4.86 \text{ eV}$, $E_{n'} = 7.59 \text{ eV}$**

c) Dicarbocyanine

- $N = 10$, $L = 1.390 \text{ nm}$
- $n = N/2 = 5$
- $n' = n + 1 = 6$

- $E_n = 0.3753 \times \frac{5^2}{(1.390)^2} = 0.3753 \times \frac{25}{1.9321} \approx 4.856 \text{ eV}$
- $E_{n'} = 0.3753 \times \frac{6^2}{(1.390)^2} = 0.3753 \times \frac{36}{1.9321} \approx 6.993 \text{ eV}$
- Dibulatkan: $E_n = 4.86 \text{ eV}$, $E_{n'} = 6.99 \text{ eV}$

(Menariknya, data N dan L pada tabel soal disusun sedemikian rupa sehingga energi HOMO (E_n) untuk ketiga molekul bernilai hampir identik, $E_n \propto (N/L)^2$ dan rasio N/L hampir konstan untuk ketiganya).

SOAL 5:

Panjang gelombang (λ_{exp}) yang tertera pada tabel di soal sebelumnya adalah hasil pengukuran eksperimen. Hitunglah panjang gelombang berdasarkan teori (λ_{th}) untuk molekul pewarna dalam model sumur potensial 1D. Jawaban dinyatakan dalam satuan nm.

Jawaban:

Nama molekul	λ_{th} (nm)
Cyanine	328.3
Pinacyanol	453.9
Dicarbocyanine	580.3

Penjelasan:

1. **Energi Foton (ΔE):** Panjang gelombang teoritis (λ_{th}) bersesuaian dengan energi foton yang diserap atau dipancarkan saat elektron bertransisi antara tingkat HOMO (E_n) dan LUMO ($E_{n'}$). Energi foton ini adalah selisih energi antara kedua tingkat tersebut:

$$\Delta E = E_{n'} - E_n$$

2. **Rumus Panjang Gelombang Foton:** Energi foton (ΔE) terkait dengan panjang gelombangnya (λ_{th}) melalui konstanta Planck (h) dan kecepatan cahaya (c):

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda_{th}}$$

Kita dapat mengatur ulang rumus ini untuk mencari λ_{th} :

$$\lambda_{th} = \frac{hc}{\Delta E}$$

3. **Konstanta hc :** Dalam perhitungan fisika kuantum, sangat praktis menggunakan nilai hc dalam satuan eV·nm.

$$hc \approx 1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}$$

4. **Perhitungan per Molekul:** Kita menggunakan nilai E_n dan $E_{n'}$ yang telah dihitung pada Soal 4 (menggunakan nilai yang belum dibulatkan untuk akurasi yang lebih baik).

a) **Cyanine**

- $E_n \approx 4.856 \text{ eV}$
- $E_{n'} \approx 8.633 \text{ eV}$
- $\Delta E = 8.633 - 4.856 = 3.777 \text{ eV}$
- $\lambda_{th} = \frac{1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}}{3.777 \text{ eV}} \approx 328.3 \text{ nm}$

b) Pinacyanol

- $E_n \approx 4.856 \text{ eV}$
- $E_{n'} \approx 7.588 \text{ eV}$
- $\Delta E = 7.588 - 4.856 = 2.732 \text{ eV}$
- $\lambda_{th} = \frac{1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}}{2.732 \text{ eV}} \approx 453.9 \text{ nm}$

c) Dicarbocyanine

- $E_n \approx 4.856 \text{ eV}$
- $E_{n'} \approx 6.993 \text{ eV}$
- $\Delta E = 6.993 - 4.856 = 2.137 \text{ eV}$
- $\lambda_{th} = \frac{1240 \text{ eV}\cdot\text{nm}}{2.137 \text{ eV}} \approx 580.3 \text{ nm}$

SOAL 6:

Ada beberapa aproksimasi pada model sumur potensial 1D untuk molekul pewarna ini yang mengakibatkan perbedaan panjang gelombang prediksi teori (λ_{th}) dan data panjang gelombang eksperimen (λ_{exp}). Manakah aproksimasi yang dimaksud dari pilihan berikut ini?

- (A) Potensial dianggap konstan untuk elektron-elektron di dalam sumur.
- (B) Interaksi antar-elektron diabaikan.
- (C) Potensial di luar molekul dianggap tak hingga besarnya.
- (D) Semua pilihan benar.

Jawaban: (D)

Penjelasan:

Model sumur potensial 1D (“particle in a box”) adalah model yang sangat sederhana untuk sistem molekuler yang kompleks. Perbedaan antara λ_{th} dan λ_{exp} (seperti yang terlihat dari hasil Soal 4 & 5) muncul karena model ini membuat beberapa penyederhanaan besar terhadap realitas fisik molekul.

Semua pilihan yang diberikan adalah aproksimasi yang valid dalam model ini:

1. **(A) Potensial dianggap konstan di dalam sumur:** Model ini mengasumsikan $V(x) = 0$ (konstan) di dalam sumur. Pada molekul pewarna yang nyata, π -elektron bergerak dalam potensial periodik yang dihasilkan oleh inti-inti atom (ion C^+) dalam rantai terkonjugasi. Potensial ini jelas tidak konstan.

2. **(B) Interaksi antar-elektron diabaikan:** Model ini memperlakukan setiap elektron seolah-olah mereka adalah partikel independen. Kita hanya mengisi tingkat energi satu per satu (mematuhi Prinsip Pauli) tanpa memperhitungkan gaya tolak-menolak (interaksi Coulomb) antara elektron-elektron tersebut. Pengabaian interaksi antar-elektron ini adalah aproksimasi yang signifikan.
3. **(C) Potensial di luar molekul dianggap tak hingga:** Model “sumur potensial tak hingga” mengasumsikan $V(x) = \infty$ di ujung molekul. Ini memaksa fungsi gelombang menjadi nol tepat di batas. Pada molekul nyata, potensial yang mengikat elektron bersifat berhingga (“finite”). Ini berarti fungsi gelombang sebenarnya dapat “bocor” sedikit ke luar batas molekul (efek terobosan/*tunneling*), dan tingkat energinya akan sedikit berbeda dari model sumur tak hingga.

Karena (A), (B), dan (C) semuanya adalah aproksimasi yang dibuat dalam model ini, jawaban yang tepat adalah **(D) Semua pilihan benar**.

SOAL 7:

Untuk jumlah elektron yang sama, model sumur potensial 1D memprediksi adanya peningkatan energi foton yang terserap oleh molekul akibat efek pengurungan kuantum (quantum confinement). Apakah pernyataan ini benar atau salah?

Jawaban:

Benar

Penjelasan:

1. **Definisi Pengurungan Kuantum:** Efek pengurungan kuantum (quantum confinement) merujuk pada pembatasan gerak partikel (dalam hal ini, elektron) dalam ruang yang sangat kecil. Dalam model sumur potensial 1D, “peningkatan pengurungan kuantum” berarti “memperkecil lebar sumur” (menurunkan nilai L).
2. **Energi Foton yang Terserap (ΔE):** Seperti yang dihitung pada Soal 5, energi foton yang diserap adalah selisih energi antara tingkat LUMO (n') dan HOMO (n):

$$\Delta E = E_{n'} - E_n$$

3. **Rumus ΔE :** Kita dapat menurunkan rumus umum untuk ΔE berdasarkan N (jumlah elektron) dan L (lebar sumur):

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n)^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(\frac{N}{2} \right)^2$$

$$E_{n'} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n')^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(\frac{N}{2} + 1 \right)^2$$

Maka, selisih energinya adalah:

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left[\left(\frac{N}{2} + 1 \right)^2 - \left(\frac{N}{2} \right)^2 \right]$$

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left[\left(\frac{N^2}{4} + N + 1 \right) - \left(\frac{N^2}{4} \right) \right]$$

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (N + 1)$$

4. **Analisis Hubungan ΔE dan L :** Dari rumus akhir, kita dapat melihat bahwa:

$$\Delta E \propto \frac{1}{L^2}$$

(Asumsi N konstan, seperti yang dinyatakan di soal).

Ini berarti energi foton yang diserap (ΔE) berbanding terbalik dengan kuadrat lebar sumur (L^2).

5. **Kesimpulan:** Jika efek pengurungan kuantum meningkat, ini berarti L menurun. Ketika L menurun, L^2 juga menurun. Karena $\Delta E \propto 1/L^2$, maka ΔE akan **meningkat**.

Oleh karena itu, pernyataan bahwa model ini memprediksi “peningkatan energi foton... akibat efek pengurungan kuantum” adalah **Benar**.

SOAL 8:

Atom hidrogen adalah satu-satunya unsur kimia yang persamaan mekanika kuantumnya dapat dipecahkan secara eksak tanpa banyak aproksimasi. Selain itu, bentuk analitik dari fungsi gelombangnya dapat diketahui. Anggaplah proton dipatok pada satu titik tetap dalam ruang. Dari pilihan jawaban berikut, manakah ekspresi yang benar untuk nilai harap dari energi kinetik atom hidrogen dinyatakan dalam fungsi gelombang ψ ?

- (A) $K = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi \nabla^2 \psi d^3r$
- (B) $K = -\frac{\hbar^2}{2m} \int (\nabla \psi)^2 d^3r$
- (C) $K = \frac{\hbar^2}{2m} \int \psi \nabla \psi d^3r$
- (D) $K = \frac{\hbar^2}{2m} \int \psi \nabla^2 \psi d^3r$

Jawaban: (A)

Penjelasan:

1. **Operator Energi Kinetik (3D):** Energi kinetik dalam mekanika kuantum direpresentasikan oleh operator. Dalam satu dimensi (1D), operatornya adalah $\hat{T}_{1D} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$. Untuk tiga dimensi (3D), kita menggeneralisasi turunan kedua menjadi operator Laplacian (∇^2):

$$\hat{T}_{3D} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

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

2. **Nilai Harap (*Expectation Value*):** Nilai harap dari suatu operator \hat{O} dihitung dengan “mengapit” operator di antara fungsi gelombang ψ^* (konjugat kompleks) dan ψ , lalu mengintegrasikannya ke seluruh ruang. Untuk operator energi kinetik \hat{T} , nilai harapnya (K) adalah:

$$K = \langle \hat{T} \rangle = \int_{\text{seluruh ruang}} \psi^* \hat{T} \psi d\tau$$

Untuk atom hidrogen, elemen volume $d\tau$ adalah d^3r .

3. **Substitusi Operator:** Kita substitusikan operator \hat{T}_{3D} ke dalam rumus nilai harap:

$$K = \int \psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \psi d^3r$$

4. **Penyederhanaan:** Fungsi gelombang untuk keadaan terikat atom hidrogen (seperti keadaan dasar 1s) adalah fungsi yang bernilai real, sehingga $\psi^* = \psi$. Kita juga bisa mengeluarkan konstanta $-\frac{\hbar^2}{2m}$ dari integral:

$$K = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi (\nabla^2 \psi) d^3r$$

5. **Perbandingan pilihan jawaban:** Ekspresi terakhir ini sama persis dengan **Opsi (A)**.

- Opsi (B) memiliki bentuk integral parsial (mirip Soal 1) tetapi menggunakan h (konstanta Planck) alih-alih \hbar (konstanta Planck tereduksi) dan memiliki tanda negatif yang salah (seharusnya positif setelah integral parsial).
- Opsi (C) menggunakan operator ∇ (gradien), yang merupakan operator vektor, bukan operator skalar ∇^2 (Laplacian) yang dibutuhkan untuk energi kinetik.
- Opsi (D) memiliki tanda yang salah (positif, seharusnya negatif).

SOAL 9:

Fungsi gelombang dari keadaan dasar 1s atom hidrogen dapat dituliskan sebagai

$$\psi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

Untuk menghitung nilai harap energi kinetik maupun energi potensialnya, kita membutuhkan integrasi pada elemen volume koordinat bola, yakni $d^3r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$. Elemen volume ini mengandung komponen sudut θ dan ϕ yang dapat diintegrasikan terpisah dari komponen jari-jari bola r karena fungsi gelombang 1s hanya bergantung pada r . Berapakah nilai dari integral komponen-komponen sudut tersebut?

- (A) π
- (B) $\pi/2$
- (C) 2π
- (D) 4π

Jawaban: (D)

Penjelasan:

1. **Identifikasi Komponen Sudut:** Elemen volume dalam koordinat bola adalah $d^3r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$. Komponen yang hanya bergantung pada sudut (angular) adalah $\sin \theta d\theta d\phi$.

2. **Integral Komponen Sudut:** Soal menanyakan nilai dari integral komponen-komponen sudut tersebut. Ini merujuk pada integral atas seluruh sudut ruang Ω .

$$I_{\text{sudut}} = \iiint d\Omega = \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \sin \theta d\theta d\phi$$

Integral ini mencakup seluruh permukaan bola.

3. **Pemisahan Integral:** Karena batas integrasi ϕ tidak bergantung pada θ , kita dapat memisahkan integralnya menjadi dua:

$$I_{\text{sudut}} = \left(\int_{\phi=0}^{2\pi} d\phi \right) \times \left(\int_{\theta=0}^{\pi} \sin \theta d\theta \right)$$

4. **Perhitungan Integral ϕ :** Integral pertama (azimuthal) adalah:

$$\int_{\phi=0}^{2\pi} d\phi = [\phi]_0^{2\pi} = (2\pi) - (0) = 2\pi$$

5. **Perhitungan Integral θ :** Integral kedua (polar) adalah:

$$\begin{aligned} \int_{\theta=0}^{\pi} \sin \theta d\theta &= [-\cos \theta]_0^{\pi} = (-\cos \pi) - (-\cos 0) \\ &= -(-1) - (-1) = 1 - (-1) = 2 \end{aligned}$$

6. **Hasil Akhir:** Kita kalikan hasil dari kedua integral tersebut:

$$I_{\text{sudut}} = (2\pi) \times (2) = 4\pi$$

Jadi, nilai total dari integral komponen-komponen sudut adalah 4π , yang sesuai dengan **Opsi (D)**.

SOAL 10:

Dengan menggunakan fungsi gelombang 1s pada Soal 9, berapakah nilai harap dari energi potensial atom hidrogen pada keadaan tersebut? Asumsikan konstanta Coulomb pada rumus potensial listrik bernilai satu.

- (A) $\frac{e^2}{a_0^2}$
- (B) $\frac{e^2}{a_0}$
- (C) $\frac{e^2}{2a_0}$
- (D) $-\frac{e^2}{a_0}$

Jawaban: (D)

Penjelasan:

1. **Definisi Nilai Harap $\langle V \rangle$:** Nilai harap dari energi potensial $V(r)$ dihitung menggunakan rumus:

$$\langle V \rangle = \int \psi_{1s}^* V(r) \psi_{1s} d^3r$$

Karena ψ_{1s} bernilai real, $\psi_{1s}^* = \psi_{1s}$, sehingga $\psi_{1s}^* \psi_{1s} = |\psi_{1s}|^2$.

2. **Komponen Integral:**

- **Potensial $V(r)$:** Potensial Coulomb antara proton (muatan $+e$) dan elektron (muatan $-e$) adalah $V(r) = -k_e \frac{e^2}{r}$. Dengan asumsi konstanta Coulomb $k_e = 1$, potensialnya adalah $V(r) = -\frac{e^2}{r}$.
- **Rapat Probabilitas $|\psi_{1s}|^2$:** Dari Soal 9, $\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$. Maka,

$$|\psi_{1s}|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \right)^2 = \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0}$$

- **Elemen Volume d^3r :** $d^3r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi$.

3. **Menyusun Integral:** Kita substitusikan semua komponen ke dalam rumus nilai harap:

$$\langle V \rangle = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(\frac{1}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0} \right) \left(-\frac{e^2}{r} \right) (r^2 \sin \theta d\phi d\theta dr)$$

4. **Pemisahan Integral (Sudut dan Radial):** Kita bisa mengeluarkan konstanta dan memisahkan bagian sudut (yang diintegrasikan pada Soal 9) dari bagian radial:

$$\langle V \rangle = \left(\frac{-e^2}{\pi a_0^3} \right) \left(\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \right) \left(\int_0^\infty e^{-2r/a_0} \left(\frac{1}{r} \right) r^2 dr \right)$$

5. **Menghitung Integral Sudut:** Seperti yang ditemukan pada Soal 9, nilai dari integral komponen sudut adalah 4π .

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta = (2\pi) \times (2) = 4\pi$$

6. **Menghitung Integral Radial:** Kita substitusikan hasil integral sudut (4π) dan sederhanakan bagian radial:

$$\begin{aligned} \langle V \rangle &= \left(\frac{-e^2}{\pi a_0^3} \right) (4\pi) \left(\int_0^\infty r e^{-2r/a_0} dr \right) \\ \langle V \rangle &= \left(\frac{-4e^2}{a_0^3} \right) \int_0^\infty r e^{-2r/a_0} dr \end{aligned}$$

Integral ini adalah bentuk standar $\int_0^\infty x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$. Di sini, $n = 1$ dan $a = 2/a_0$.

$$\int_0^\infty r e^{-2r/a_0} dr = \frac{1!}{(2/a_0)^{1+1}} = \frac{1}{(2/a_0)^2} = \frac{1}{4/a_0^2} = \frac{a_0^2}{4}$$

7. **Hasil Akhir:** Terakhir, kita substitusikan nilai integral radial kembali ke persamaan $\langle V \rangle$:

$$\langle V \rangle = \left(\frac{-4e^2}{a_0^3} \right) \left(\frac{a_0^2}{4} \right)$$

Faktor 4 dan a_0^2 saling menghilangkan, menyisakan:

$$\langle V \rangle = -\frac{e^2}{a_0}$$

Hasil ini sesuai dengan **Opsi (D)**.