Pembahasan Tugas / Problem Set 2
Mata Kuliah Teori Kuantum Material

ARTN

ver. October 27, 2025

Soal 1: Atom Hidrogen

(a) Menurunkan solusi lengkap persamaan Schrödinger

Tinjau Hamiltonian non-relativistik untuk satu elektron bermuatan $-e$ yang berinteraksi dengan sebuah proton bermuatan $+e$. Dengan memisahkan gerak pusat massa, dinamika internal dideskripsikan oleh massa tereduksi

$$\mu = \frac{m_\mathrm{e} m_\mathrm{p}}{m_\mathrm{e} + m_\mathrm{p}},$$

dan potensial Coulomb $V(r) = -\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{1}{r}$. Persamaan Schrödinger stasioner (dalam koordinat bola) adalah

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}\right]\psi(\mathbf{r}) = E\,\psi(\mathbf{r}), \qquad \nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2}. \tag{1}$$

Ambil pemisahan variabel $\psi(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$. Operator sudut menghasilkan

$$\hat{L}^2 Y_l^m = \hbar^2 l(l+1)Y_l^m,$$

sehingga persamaan radial menjadi

$$\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}r^2} + \left[\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}\right) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r) = 0, \qquad u(r) \equiv r\,R_{nl}(r). \tag{2}$$

Definisikan jari-jari Bohr dengan massa tereduksi

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2},$$

dan gunakan ansatz $u(\rho) = \rho^{l+1}e^{-\rho/2}v(\rho)$ dengan $\rho = \dfrac{2r}{na_0}$. Substitusi ke (2) menghasilkan persamaan polinomial Laguerre terkait,

$$\rho\,v'' + \big(2l+2-\rho\big)v' + \big(n-l-1\big)v = 0,$$

yang solusinya terbatasi dan ternormalkan bila $n \in \mathbb{N}$ dan

$$v(\rho) \propto L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho).$$

Energi diskretnya:

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\,\frac{1}{n^2} \equiv -\frac{R_\infty}{n^2}\,\frac{\mu}{m_\mathrm{e}}, \qquad n = 1,2,3,\ldots \tag{3}$$

dengan $R_\infty \simeq 13.6057\,\mathrm{eV}$ konstanta Rydberg (untuk massa m_e). Fungsi gelombang ternormalisasi adalah:

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)\, Y_l^m(\theta,\phi), \tag{4}$$

$$R_{nl}(r) = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{a_0^3\,(n+l)!}}\, \exp\!\left(-\frac{r}{na_0}\right)\left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\!\left(\frac{2r}{na_0}\right). \tag{5}$$

Himpunan Y_l^m adalah harmonik sferis ortonormal pada S^2.

(b) Rumus eksplisit untuk $1s$, $2s$, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$

Untuk $Z = 1$,

$$Y_0^0(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \tag{6}$$

$$Y_1^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \tag{7}$$

$$\text{Basis real:}\quad Y_{1x} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\cos\phi,\quad Y_{1y} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\sin\theta\sin\phi,\quad Y_{1z} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta. \tag{8}$$

Dari (5) diperoleh fungsi radial spesial:

$$R_{10}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}}e^{-r/a_0},\quad R_{20}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2}\,a_0^{3/2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/(2a_0)},\quad R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}\,a_0^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/(2a_0)}.$$

Maka fungsi gelombang (dalam representasi posisi) yang ternormalisasi:

$$\psi_{1s}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}\,a_0^{3/2}}\,e^{-r/a_0}, \tag{9}$$

$$\psi_{2s}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}\,a_0^{3/2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/(2a_0)}, \tag{10}$$

$$\psi_{2p_z}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}\,a_0^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/(2a_0)}\cos\theta, \tag{11}$$

$$\psi_{2p_x}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}\,a_0^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/(2a_0)}\sin\theta\cos\phi, \tag{12}$$

$$\psi_{2p_y}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}\,a_0^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/(2a_0)}\sin\theta\sin\phi. \tag{13}$$

Densitas probabilitas adalah $\rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$.

(c) Visualisasi orbitals dengan Python/Matplotlib

Kode berikut membuat potongan 2D pada bidang $z = 0$ untuk $\rho(\mathbf{r}) = |\psi|^2$ dari $1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
# Satuan: a0 = 1, skala dimensi bisa dikembalikan dengan a0 sebenarnya.
a0 = 1.0

def psi_1s(r):
    return (1/np.sqrt(np.pi)) * np.exp(-r/a0)
```

```python
def psi_2s(r):
    return (1/(4*np.sqrt(2*np.pi))) * (2 - r/a0) * np.exp(-r/(2*a0))

def psi_2p_common(r, ang):
    # faktor radial bersama untuk semua 2p
    return (1/(4*np.sqrt(2*np.pi))) * (r/a0) * np.exp(-r/(2*a0)) * ang

def density_1s(x, y, z):
    r = np.sqrt(x**2 + y**2 + z**2)
    psi = psi_1s(r)
    return np.abs(psi)**2

def density_2s(x, y, z):
    r = np.sqrt(x**2 + y**2 + z**2)
    psi = psi_2s(r)
    return np.abs(psi)**2

def density_2p_x(x, y, z):
    r = np.sqrt(x**2 + y**2 + z**2) + 1e-12
    sin_th = np.sqrt(x**2 + y**2) / r
    cos_phi = np.where(sin_th>0, x/np.sqrt(x**2 + y**2), 0.0)
    psi = psi_2p_common(r, sin_th * cos_phi)
    return np.abs(psi)**2

def density_2p_y(x, y, z):
    r = np.sqrt(x**2 + y**2 + z**2) + 1e-12
    sin_th = np.sqrt(x**2 + y**2) / r
    sin_phi = np.where(sin_th>0, y/np.sqrt(x**2 + y**2), 0.0)
    psi = psi_2p_common(r, sin_th * sin_phi)
    return np.abs(psi)**2

def density_2p_z(x, y, z):
    r = np.sqrt(x**2 + y**2 + z**2) + 1e-12
    cos_th = z / r
    psi = psi_2p_common(r, cos_th)
    return np.abs(psi)**2

# Grid potongan z=0
N = 501
L = 10.0  # dalam satuan a0
x = np.linspace(-L, L, N)
y = np.linspace(-L, L, N)
X, Y = np.meshgrid(x, y)
Z = np.zeros_like(X)

maps = [
    ("1s", density_1s),
    ("2s", density_2s),
    ("2p_x", density_2p_x),
    ("2p_y", density_2p_y),
    ("2p_z", density_2p_z),
]

for name, dens_fn in maps:
    D = dens_fn(X, Y, Z)
    plt.figure(figsize=(5,4))
    plt.imshow(D, extent=[-L, L, -L, L], origin="lower")
```

```
    plt.xlabel("x / a0")
    plt.ylabel("y / a0")
    plt.title(f"|psi|^2 slice at z=0 : {name}")
    plt.colorbar(label="probability density (arb. unit)")
    plt.tight_layout()
plt.show()
```

Catatan. Plot di atas menampilkan potongan 2D. Untuk isosurface 3D, gunakan pustaka seperti `plotly` atau `mayavi`; atau buat kontur 3D dengan *marching cubes*.

Soal 2: Rantai 1D dua subkisi A–B dengan model tight-binding tetangga-terdekat

Model

Satu sel satuan memuat dua orbital terlokalisasi $|A_n\rangle$ dan $|B_n\rangle$ di sel ke-n. Energi on-site diatur sama dan diambil nol sebagai referensi, $H_{AA} = H_{BB} = 0$. Hopping intra-sel $A_n \leftrightarrow B_n$ bernilai t_1. Hopping antar-sel $A_{n+1} \leftrightarrow B_n$ bernilai t_2. Konstanta kisi $a = a_1 + a_2$.

(a) Hubungan dispersi $E(k)$

Dalam basis sel $\{|A_n\rangle, |B_n\rangle\}$, Hamiltonian tight-binding tetangga-terdekat adalah

$$\hat{H} = \sum_n \Big[t_1 |A_n\rangle\langle B_n| + t_2 |A_{n+1}\rangle\langle B_n| + \text{h.c.} \Big], \tag{14}$$

dengan h.c. menyatakan *hermitian conjugate*. Notasi semacam ini dapat dibaca pada paper yang mencakup bahasan second quantization di repositori kelas.

Ambil ansatz Bloch

$$|\psi_k\rangle = \sum_n e^{ikR_n} \big(u_A |A_n\rangle + u_B |B_n\rangle \big), \quad R_n = na.$$

Substitusi (14) menghasilkan permasalahan nilai eigen

$$H(k)\,\boldsymbol{u} = E(k)\,\boldsymbol{u}, \qquad \boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix}, \qquad H(k) = \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-ika} \\ t_1 + t_2 e^{ika} & 0 \end{pmatrix}. \tag{15}$$

Solusi energi diperoleh dari $\det[H(k) - E\mathbb{I}] = 0$:

$$E_\pm(k) = \pm \left| t_1 + t_2 e^{ika} \right| = \pm\sqrt{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos(ka)}. \tag{16}$$

Dua pita simetris terhadap nol. Celah energi pada tepi zona Brillouin $k = \pm\pi/a$ adalah

$$\Delta = 2|t_1 - t_2|. \tag{17}$$

Catatan penting: jarak internal a_1 dan a_2 tidak memengaruhi energi pita untuk model tetangga-terdekat ini. Energi hanya bergantung pada a melalui faktor fase $e^{\pm ika}$.

(b) Kasus $t_1 = t_2 = t$ dan sketsa

Untuk $t_1 = t_2 = t$, persamaan (23) dapat disederhanakan menjadi

$$\frac{E_\pm(k)}{t} = \pm\sqrt{2 + 2\cos(ka)} = \pm 2 \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right|. \tag{18}$$

Pita menyentuh di tepi zona $k = \pm\pi/a$ karena $\Delta = 0$. Jika asumsikan kontinuitas pada perbatasan zona Brillouin, persamaan ini sering ditulis $E_\pm(k) = \pm 2t\cos(ka/2)$ dengan pemahaman bahwa tanda mutlak hanya memengaruhi pilihan fase vektor eigen.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Parameter
t1 = 1.0
t2 = 1.0
a  = 1.0

# Kisi k pada BZ [-pi/a, pi/a]
k = np.linspace(-np.pi/a, np.pi/a, 1201)

# Dispersi umum
Eplus  =  np.sqrt(t1**2 + t2**2 + 2*t1*t2*np.cos(k*a))
Eminus = -np.sqrt(t1**2 + t2**2 + 2*t1*t2*np.cos(k*a))

# Sumbu terukur: ka/pi pada horizontal, E/t pada vertikal
x = k*a/np.pi
y_plus  = Eplus/ max(t1, t2)  # di sini sama dengan t
y_minus = Eminus/ max(t1, t2)

plt.figure(figsize=(6,4))
plt.plot(x, y_plus,  label="Pita atas")
plt.plot(x, y_minus, label="Pita bawah")
plt.xlabel(r"$ka/\pi$")
plt.ylabel(r"$E/t$")
plt.title("Dispersi untuk t1 = t2 = t")
plt.legend()
plt.grid(True, linestyle=":", linewidth=0.8)
plt.tight_layout()
plt.show()
```

Uji konsistensi. Nilai ekstrem terjadi di $k = 0$ dengan $E_\pm(0) = \pm(t_1 + t_2)$ dan di $k = \pm\pi/a$ dengan $E_\pm(\pm\pi/a) = \pm|t_1 - t_2|$, konsisten dengan celah $\Delta = 2|t_1 - t_2|$.

Soal 3: Model *tight-binding* non-ortogonal untuk trans-polyacetylene

Model

Rantai 1D dengan dua situs per sel, A dan B, berjarak terdekat $a/2$. Energi on-site untuk orbital p_z pada A dan B sama, ε_{2p}. Hopping tetangga-terdekat A$\leftrightarrow$B bernilai t baik intra-sel maupun antar-sel. Karena basis tidak ortogonal, *overlap* tetangga-terdekat bernilai s untuk pasangan A–B yang sama. Konstanta kisi a sehingga vektor Brillouin $k \in [-\pi/a, \pi/a]$.

(a) Hubungan dispersi $E(k)$

Dalam basis Bloch $\{|A_k\rangle, |B_k\rangle\}$, masalah eigen menjadi *generalized*:

$$H(k)\,\boldsymbol{u} = E(k)\,S(k)\,\boldsymbol{u}, \qquad \boldsymbol{u} = \begin{pmatrix} u_A \\ u_B \end{pmatrix}. \tag{19}$$

Untuk tetangga-terdekat,

$$H(k) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{2p} & t\big(1+e^{-ika}\big) \\ t\big(1+e^{ika}\big) & \varepsilon_{2p} \end{pmatrix}, \qquad S(k) = \begin{pmatrix} 1 & s\big(1+e^{-ika}\big) \\ s\big(1+e^{ika}\big) & 1 \end{pmatrix}. \tag{20}$$

Cari E dari $\det\big[H(k) - E\,S(k)\big] = 0$. Gunakan identitas $\big|1+e^{ika}\big|^2 = 4\cos^2\big(\frac{ka}{2}\big)$ dan tulis $C \equiv \cos\big(\frac{ka}{2}\big)$. Determinannya dapat disederhanakan menjadi

$$\big(\varepsilon_{2p} - E\big)^2 - 4C^2\big(t - Es\big)^2 = 0. \tag{21}$$

Cari solusinya dan susun ulang,

$$\varepsilon_{2p} - E = \pm 2C\,(t - Es) \quad \Longrightarrow \quad E_\pm(k) = \frac{\varepsilon_{2p} \pm 2t\,C}{1 \pm 2s\,C}, \qquad C = \cos\left(\frac{ka}{2}\right). \tag{22}$$

Dua pita simetris hanya jika $\varepsilon_{2p} = 0$ dan $s = 0$. Batas-batas penting:

$$k = 0: \quad E_\pm(0) = \frac{\varepsilon_{2p} \pm 2t}{1 \pm 2s}, \qquad k = \pm\frac{\pi}{a}: \quad C = 0 \Rightarrow E_\pm = \varepsilon_{2p} \text{ (terdegenerasi di tepi BZ).}$$

Saat $s \to 0$ hasilnya tereduksi ke model ortogonal $E_\pm = \varepsilon_{2p} \pm 2t\cos(ka/2)$.

(b) Sketsa untuk $\varepsilon_{2p} = 0$, $t = -0.1\,\mathrm{eV}$, $s = 0.2$

Dengan pers. (23) dan parameter di atas,

$$E_\pm(k) = \frac{\pm 2t\,\cos(ka/2)}{1 \pm 0.4\,\cos(ka/2)}.$$

Celah pita di $k = 0$ bernilai

$$\Delta = E_+(0) - E_-(0) = \frac{2t}{1+0.4} - \frac{-2t}{1-0.4} = 2|t|\left(\frac{1}{1-0.4} + \frac{1}{1+0.4}\right) \approx 2\times 0.1\times\left(\frac{1}{0.6} + \frac{1}{1.4}\right)\ \mathrm{eV},$$

yang dapat dievaluasi numerik saat plotting.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Parameter
eps = 0.0        # e2p dalam eV
t   = -0.1       # eV
s   = 0.2
a   = 1.0        # boleh diset 1 tanpa kehilangan sifat umum

# Kisi k pada BZ
k = np.linspace(-np.pi/a, np.pi/a, 2001)
C = np.cos(0.5*k*a)

E_plus  = (eps + 2*t*C) / (1 + 2*s*C)
E_minus = (eps - 2*t*C) / (1 - 2*s*C)

x = k*a/np.pi    # sumbu horizontal: ka/pi

plt.figure(figsize=(6,4))
plt.plot(x, E_plus,  label="Pita atas  $E_+(k)$")
plt.plot(x, E_minus, label="Pita bawah $E_-(k)$")
```

```
plt.xlabel(r"$ka/\pi$")
plt.ylabel(r"$E$␣(eV)")
plt.title(r"Dispersi␣trans-polyacetylene␣($\varepsilon_{2p}=0,\␣t=-0.1\␣
   \mathrm{eV},\␣s=0.2$)")
plt.grid(True, linestyle=":", linewidth=0.8)
plt.legend()
plt.tight_layout()
plt.show()
```

Catatan. Penyimpangan dari ortogonalitas ($s \neq 0$) memodifikasi dispersi melalui faktor normalisasi pada penyebut di pers. (23). Asalkan $|2sC| < 1$ untuk semua k dengan $s = 0.2$, penyebut tidak pernah nol sehingga tidak muncul singularitas pita.

Soal 4: Rantai kisi persegi 2D dengan tetangga terdekat dan kedua

Model

Dalam soal diberikan kisi 2D persegi sederhana, satu orbital per sel satuan, konstanta kisi a dan vektor kisi $\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$, $\mathbf{a}_2 = a(0, 1)$. Hopping tetangga terdekat / nearest-neighbors (NN) sebesar t berarah pada empat vektor

$$\boldsymbol{\delta}_{\mathrm{NN}} \in \{\pm a\,\hat{x},\ \pm a\,\hat{y}\},$$

dan hopping tetangga terdekat kedua / next-nearest-neighbors (NNN) sebesar t' berarah pada empat vektor lainnya

$$\boldsymbol{\delta}_{\mathrm{NNN}} \in \{\pm a(\hat{x} + \hat{y}),\ \pm a(\hat{x} - \hat{y})\}.$$

Ambil energi on-site sebagai nol (referensi). Dengan satu orbital per sel, persamaan Bloch

$$E(\mathbf{k})\,\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\boldsymbol{\delta}} t(\boldsymbol{\delta})\, e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

memberi dispersi sebagai jumlah faktor struktur.

(a) Dispersi $E(\mathbf{k})$ sebagai fungsi k_x, k_y

Kontribusi NN:

$$\sum_{\boldsymbol{\delta}_{\mathrm{NN}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}} = e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a} = 2\cos(k_x a) + 2\cos(k_y a).$$

Kontribusi NNN:

$$\begin{aligned}\sum_{\boldsymbol{\delta}_{\mathrm{NNN}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}} &= e^{ia(k_x+k_y)} + e^{-ia(k_x+k_y)} + e^{ia(k_x-k_y)} + e^{-ia(k_x-k_y)} \\ &= 2\cos\big[a(k_x + k_y)\big] + 2\cos\big[a(k_x - k_y)\big] \\ &= 4\cos(k_x a)\cos(k_y a).\end{aligned}$$

Maka hubungan dispersi

$$\boxed{E(\mathbf{k}) = 2t\,[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4t'\,\cos(k_x a)\cos(k_y a)}. \tag{23}$$

Catatan: tanda numerik t dan t' mengikuti konvensi yang dipilih. Jika $t < 0$ maka titik Γ menjadi minimum pita.

Titik-titik khusus.

$$\begin{aligned}
&\Gamma(0,0): && E = 4t + 4t',\\
&X(\pi/a, 0) \text{ atau } (0, \pi/a): && E = -4t' + 0,\\
&M(\pi/a, \pi/a): && E = -4t + 4t'.
\end{aligned}$$

Lebar pita adalah $E_{\max} - E_{\min}$ dengan nilai ekstrem yang bergantung pada tanda t, t'.

(b) Kasus $t' = t/4$ dan plot permukaan energi

Dengan $t' = \frac{t}{4}$, persamaan (23) menjadi

$$\frac{E(\mathbf{k})}{t} = 2\big[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)\big] + \cos(k_x a)\cos(k_y a).$$

Plot terhadap sumbu tak berdimensi $k_x a/\pi$ dan $k_y a/\pi$ dapat dibuat dengan kode berikut.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

# Parameter
t  = 1.0
tp = t/4.0
a  = 1.0

# Kisi k pada BZ: [-pi/a, pi/a]
N = 301
kx = np.linspace(-np.pi/a, np.pi/a, N)
ky = np.linspace(-np.pi/a, np.pi/a, N)
KX, KY = np.meshgrid(kx, ky)

E = 2*t*(np.cos(KX*a) + np.cos(KY*a)) + 4*tp*np.cos(KX*a)*np.cos(KY*a)

# Sumbu terukur
X = KX*a/np.pi
Y = KY*a/np.pi
Z = E/t  # energi dalam satuan t

# Permukaan energi
fig = plt.figure(figsize=(7,5))
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
ax.plot_surface(X, Y, Z, rstride=2, cstride=2, linewidth=0, antialiased=
    True)
ax.set_xlabel(r"$k_x␣a/\pi$")
ax.set_ylabel(r"$k_y␣a/\pi$")
ax.set_zlabel(r"$E/t$")
ax.set_title("Dispersi␣pada␣kisi␣persegi:␣NN␣t␣dan␣NNN␣t'␣=␣t/4")
plt.tight_layout()
plt.show()

# Alternatif: peta kontur (irisan energi)
plt.figure(figsize=(6,5))
cs = plt.contourf(X, Y, Z, levels=40)
plt.xlabel(r"$k_x␣a/\pi$")
plt.ylabel(r"$k_y␣a/\pi$")
plt.title("Kontur␣energi␣(E/t)")
plt.colorbar(cs, label="E/t")
plt.tight_layout()
plt.show()
```