

PENDALAMAN MATERI FISIKA: MEKANIKA KUANTUM

R. Yosi A., M.Si
(Jurdik Fisika UNY)

I. MENGAPA MEKANIKA KUANTUM?

Pada akhir abad ke 19 dan awal abad ke 20, semakin jelas bahwa fisika (konsep-konsep fisika) memerlukan revisi atau penyempurnaan. Hal ini disebabkan semakin banyaknya hasil-hasil eksperimen dan gejala-gejala fisika yang teramati yang tidak bisa dijelaskan dengan konsep-konsep fisika yang telah dikuasai pada saat itu (fisika klasik), sekalipun dengan pendekatan.

Masalah-masalah yang dimaksud di atas muncul terutama pada obyek-obyek fisis yang berukuran "kecil" (mikroskopik, atomistik), seperti partikel-partikel elementer dan atom serta interaksinya dengan radiasi atau medan elektromagnetik. "Perbedaan-perbedaan" dalam eksperimen fisika mula-mula dapat diatasi dengan postulat-postulat dan hipotesis-hipotesis. Namun karena jumlahnya semakin banyak dan persoalannya dipandang mendasar, menuntut dan mendorong fisikawan untuk melakukan penyempurnaan, dan bila perlu perubahan pada formulasi dan konsep-konsep fisika. Hasilnya adalah konsep yang dinamakan "Mekanika Kuantum".

Pada bab ini akan disajikan beberapa fenomena eksperimental yang melatarbelakangi lahirnya mekanika kuantum, diawali dengan ringkasan konsep-konsep fisika klasik. Pada bab-bab berikutnya disajikan konsep-konsep dasar mekanika kuantum dan implementasinya pada masalah-masalah sederhana.

I.1 Konsep-Konsep Fisika Klasik

Konsep-konsep fisika klasik tercakup dalam dua kelompok besar, yakni Mekanika Newtonian (klasik, non-kuantum) dan Elektromagnetika klasik. Mekanika newtonian membahas partikel-partikel yang dianggap bergerak di bawah pengaruh gaya-gaya, yang mengikuti hukum gerak (Hukum Newton)

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} \quad (\text{I-1})$$

dengan \vec{F} adalah resultan gaya yang bekerja pada partikel; $\vec{p} = m\vec{v}$ adalah momentum garis partikel dengan massa m dan kecepatan \vec{v} dan t menyatakan waktu.

Elektromagnetika klasik membicarakan medan listrik $\vec{E}(\vec{r})$ dan medan magnet $\vec{B}(\vec{r})$ dan sumber-sumbernya, yaitu muatan listrik q dan arus listrik I . Hukum-hukum elektromagnetika klasik diformulasikan sebagai persamaan-persamaan Maxwell,

$$\nabla \times \vec{E} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (\text{I-2a})$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon} \quad (\text{I-2b})$$

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{\vec{j}}{\epsilon c^2} \quad (\text{I-2c})$$

dan

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{I-2d})$$

dengan c adalah kelajuan cahaya, ρ adalah rapat muatan ruang, ϵ adalah permitivitas ruang hampa, dan \vec{j} adalah rapat arus. Untuk ruang bebas, persamaan (I-2b) dan (I-2c) menjadi

$$\nabla \cdot \vec{E} = 0 \quad \text{dan} \quad \nabla \times \vec{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (\text{I-3})$$

Persamaan-persamaan Maxwell dalam ruang bebas memberikan persamaan medan listrik dan medan magnet yang terpisah sebagai

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad \text{dan} \quad \nabla^2 \vec{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} = 0. \quad (\text{I-4})$$

adalah persamaan gelombang elektromagnet dalam ruang bebas. Penyelesaian persamaan gelombang (I-4) berbentuk

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \text{Re} \left[\vec{E}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \right] \quad (\text{I-5a})$$

dan

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \text{Re} \left[\vec{B}_0 e^{-i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \right], \quad (\text{I-5b})$$

dengan ω adalah frekuensi sudut gelombang, dan \vec{k} adalah vektor gelombang pada arah rambat gelombang, yang besarnya adalah $k = \omega / c$.

Dalam fisika klasik, fenomena alam dapat dispektrumkan dengan Mekanika Newton yang menguasai partikel, dan elektromagnetika yang menguasai medan elektromagnetik atau radiasi. Kedua komponen fisika klasik tersebut dapat dipandang sebagai terpisah satu dengan yang lain, tetapi terkait melalui persamaan Lorentz

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (\text{I-6})$$

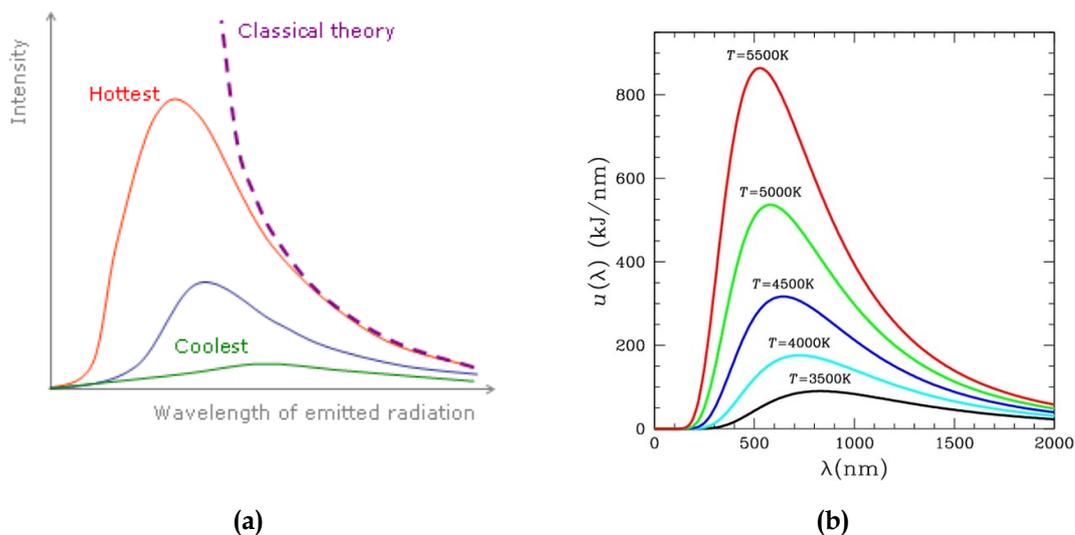
yang menyatakan gaya yang dialami oleh partikel bermuatan listrik q bergerak dengan kecepatan \vec{v} dalam medan elektromagnet $\vec{E} \cdot \vec{B}$.

I.2 Radiasi Benda Hitam

Suatu permukaan benda pada suhu $T > 0\text{K}$ selalu memancarkan radiasi, biasa disebut radiasi termal. Intensitas oleh Stefan dan Boltzmann sebagai

$$I_T = e\sigma T^4, \quad (\text{I-7})$$

dengan e adalah konstanta emisivitas permukaan ($0 \leq e \leq 1$) dan σ disebut konstanta Stefan-Boltzmann ($\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{Jm}^{-2}\text{s}^{-1}\text{K}^{-4}$). Benda hitam sempurna adalah benda dengan permukaan yang mempunyai $e = 1$.



Gambar I.1: Spektrum Radiasi Termal

Radiasi termal mempunyai spektrum malar atau kontinu (Gambar I.1). Untuk suhu yang lebih tinggi, selain intensitas radiasi bertambah (sesuai dengan pers. I-7), juga intensitas maksimum terjadi pada panjang gelombang yang lebih pendek. Pergeseran puncak spektrum tersebut dijelaskan oleh Wien secara empiris, menurut persamaan

$$\lambda_{\text{maks}} T = C_W, \quad (\text{I-8})$$

dengan $C_W = 2,9 \times 10^{-3} \text{ mK}$, dikenal sebagai konstanta Wien, λ_{maks} adalah panjang gelombang radiasi pada intensitas maksimum. Persamaan (I-8) dikenal sebagai persamaan atau hukum **Pergeseran Wien**.

Usaha untuk menerangkan kenyataan di atas dengan fisika klasik telah dilakukan, tetapi tidak berhasil. Rayleigh dan Jeans memperoleh persamaan

$$I_T(\lambda) = \frac{2\pi ckT}{\lambda^4} \quad (\text{I-9a})$$

atau

$$I_T(\nu) = \frac{2\pi kT}{c^2} \nu^2 \quad (\text{I-9b})$$

dengan ν adalah frekuensi radiasi. Hasil perhitungan Rayleigh-Jeans tersebut selain tidak sesuai dengan spektrum radiasi yang teramati, juga tidak sesuai dengan hukum Stefan-Boltzmann, karena memberikan $I_T = 0$.

Pada tahun 1900, Max Planck mengusulkan sebuah gagasan (postulat) yang kemudian dikenal sebagai Teori Kuantum Planck. Teori ini menyatakan bahwa osilator-osilator berfrekuensi ν sebagai sumber radiasi, hanya bisa melepaskan tenaganya dalam kuantum (paket-paket) tenaga sebesar $E = nh\nu$. Ini berarti bahwa osilator berfrekuensi ν mempunyai tenaga yang bersifat diskret (merupakan kelipatan dari $h\nu$), yakni

$$E_n = nh\nu, \quad (\text{I-10})$$

dengan $h = 6,626 \times 10^{-34} \text{ J.s}$, disebut tetapan Planck, dan n adalah bilangan bulat ($n = 1, 2, 3, \dots$). Menggunakan teorinya tersebut, Planck kemudian menurunkan persamaan spektrum radiasi termal, dan memperoleh hasil sebagai

$$I_T(\lambda) = \frac{2\pi c^2 h}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1} \quad (\text{I-11a})$$

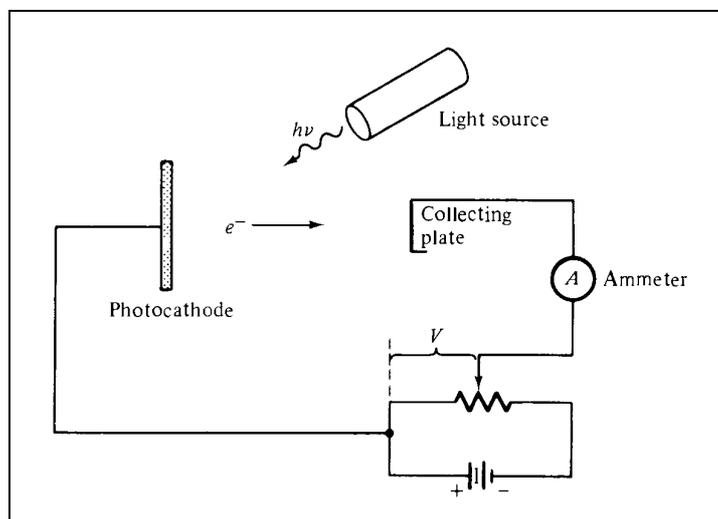
atau

$$I_T(\nu) = \frac{2\pi h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}. \quad (\text{I-11b})$$

Spektrum radiasi termal Planck tepat sesuai dengan hasil eksperimen, bahwa mampu menjelaskan hukum-hukum empiris Stefan-Boltzmann dan Pergeseran Wien.

I-3 Efek Fotolistrik

Hasil-hasil eksperimen menunjukkan, bahwa suatu jenis logam tertentu bila disinari (dikenai radiasi) dengan frekuensi yang lebih besar dari harga tertentu akan melepaskan elektron, walaupun intensitas radiasinya sangat kecil. Sebaliknya, berapapun besar intensitas radiasi yang dikenakan pada suatu jenis logam, jika frekuensinya lebih kecil dari harga tertentu maka tidak akan dapat melepaskan elektron dari logam tersebut. Peristiwa pelepasan elektron dari logam oleh radiasi tersebut disebut **efek fotolistrik**, diamati pertama kali oleh Heinrich Hertz (1887). Elektron yang terlepas dari logam disebut **foto-elektron**.



Gambar I-2: Susunan Alat Eksperimen Efek Fotolistrik

Jika intensitas radiasi yang menimbulkan efek fotolistrik dinaikkan, maka akan memperbanyak foto-elektron yang dihasilkan, ditandai oleh bertambahnya arus foto-elektron I_{fe} . Perangkat untuk mengamati terjadinya efek fotolistrik seperti

ditunjukkan pada Gambar I-2. Arus foto-elektron dapat diiadakan dengan cara memberi tegangan pada kolektor negatif terhadap emiter. Beda tegangan emiter - kolektor pada saat arus foto-elektron tepat mencapai nol, disebut tegangan penghenti (**stopping voltage**), V_s . Gambar I-3a menggambarkan I_{fe} sebagai fungsi tegangan kolektor - emiter (V_{ke}) untuk tiga macam intensitas radiasi (I_r). Semakin besar frekuensi radiasi yang menimbulkan efek fotolistrik, semakin besar tegangan penghenti yang diperlukan untuk meniadakan arus foto-elektron. Gambar I-3b menggambarkan hubungan antara V_s dan ν hasil eksperimen. Untuk berbagai logam, grafik V_s versus ν mempunyai kemiringan yang sama, tetapi dengan frekuensi ambang (ν_0) yang berbeda.

Efek fotolistrik tidak dapat dipahami dengan fisika klasik, yang mana intensitas radiasi sebanding dengan enegi gelombang (kuadrat amplitudo). Pada tahun 1905, Einstein menerangkan efek fotolistrik dengan teori kuantum cahaya:

1. Cahaya / radiasi terdiri dari atas kuantum / paket-paket energi sebesar

$$E_r = h\nu \quad (I.12)$$

yang bergerak dengan kelajuan cahaya c .

2. Intensitas cahaya ditentukan oleh cacah kuantum tenaga per satuan waktu per satuan luas penampang berkas cahaya tersebut.

Dengan adanya teori kuantum cahaya Einstein, berartihahaya memperlihatkan sifat dualisme, yaitu sebagai gelombang dan sebagai partikel. Partikel cahaya atau radiasi disebut **foton**. Dengan teori kuantum cahaya, Einstein menerangkan efek fotolistrik sebagai berikut:

Elektron-elektron bebas dalam logam terikat oleh logam untuk meninggalkannya. Untuk melepaskan elektron dari logam diperlukan tenaga dalam jumlah tertentu. Besarnya tenaga untuk melepaskan elektron dari logam, yang sama dengan tenaa ikat logam pada elektron-elektronnya, disebut **fungsi kerja (work function)** logam yang bersangkutan (ϕ). Setiap jenis logam mempunyai fungsi kerja tertentu, yang merupakan karakter masing-masing jenis logam.

Tenaga foton sebesar $h\nu$ yang datang pada permukaan logam diserahkan seluruhnya kepada satu elektron dalam logam. Jika $h\nu > \phi$, maka elektron yang

menerima tenaga tersebut dapat lepas dari logam, dengan sisa tenaga yang diterimanya digunakan untuk bergerak, memenuhi persamaan

$$h\nu = \phi + K_{fe} \quad (\text{I-13})$$

dengan K_{fe} adalah tenaga kinetik foto-elektron. Dari persamaan (I-13), mudah dimengerti adanya frekuensi ambang suatu logam, yaitu sebesar

$$\nu_0 = \frac{\phi}{h}. \quad (\text{I-14})$$

Jadi, jika suatu radiasi yang dikenakan pada suatu logam frekuensinya $\nu > \nu_0$ baru bisa menimbulkan efek fotolistrik, dan jika intensitas radiasi naik, maka cacah foto-elektron bertambah karena cacah foton bertambah.

I.3 Efek Compton

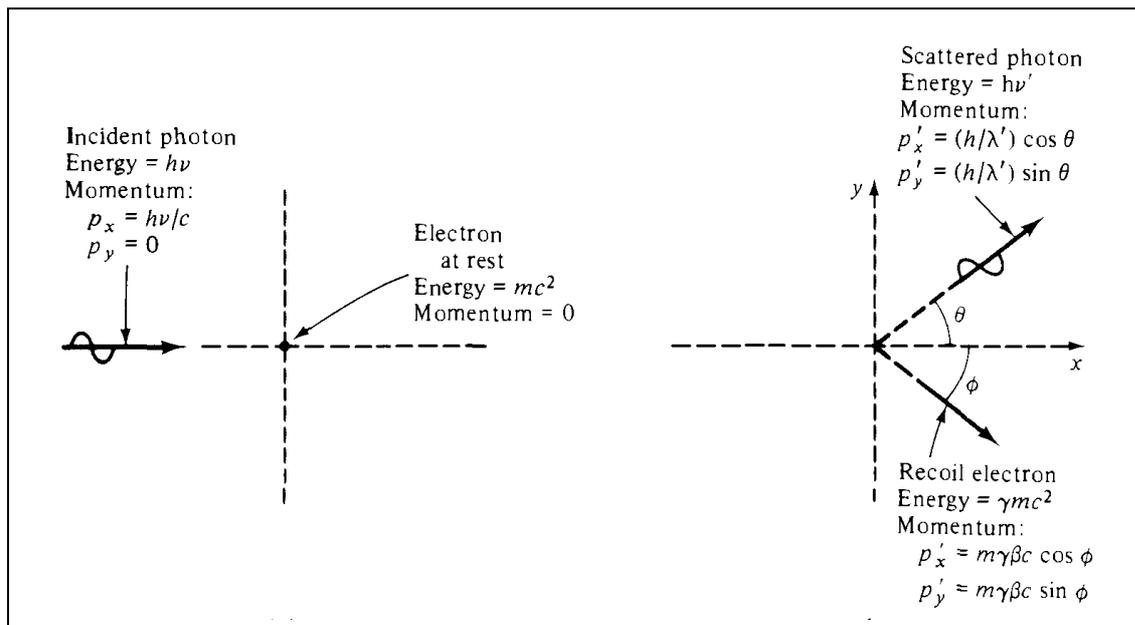
Foton sebagai partikel mempunyai tenaga sebesar $E_r = h\nu$. Berdasarkan kesetaraan massa-energi Einstein, foton mempunyai massa sebesar

$$m_f = \frac{h\nu}{c^2} \quad (\text{I-15})$$

dan mempunyai momentum linear sebesar

$$p_f = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}. \quad (\text{I-16})$$

Seberkas radiasi yang dikenakan pada lempeng (plat tipis) logam akan mengalami hamburan. Intensitas radiasi terhambur tergantung pada sudut hamburannya. Gambar I-4 menunjukkan susunan peralatan dan hasil pengamatan hamburan radiasi. Gejala tersebut tidak dapat dijelaskan dengan memandang radiasi sebagai gelombang klasik.



(a) Sebelum Hamburan

(b) Setelah Hamburan

Gambar I-5: Hamburan Compton

Pada tahun 1923, Compton mempelajari hamburan radiasi tersebut di atas, dan menerangkan sebagai berikut. Radiasi yang dikenakan pada lempeng logam berinteraksi dengan elektron bebas dalam logam (tidak selalu menimbulkan efek fotolistrik walaupun tenaganya cukup). Interaksi antara radiasi dengan elektron bebas dalam logam berperilaku seperti tumbukan elastis antara dua partikel. Mekanisme hamburan radiasi (kemudian disebut **hamburan Compton** atau **efek Compton**) tersebut di atas dapat dijelaskan dengan memberlakukan hukum-hukum kekekalan tenaga dan momentum linear secara relativistik. Pemberlakuan kedua hukum kekekalan tersebut menghasilkan persamaan-persamaan

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) \quad (I.17)$$

$$K'_e = h\nu \frac{2\alpha \cos^2 \phi}{(1 - \alpha)^2 - \alpha^2 \cos^2 \phi} \quad (I.18)$$

dan

$$\cot(\theta/2) = (1 - \alpha) \tan \phi \quad (I.19)$$

dengan λ = panjang gelombang radiasi sebelum terhambur, λ' = panjang gelombang radiasi terhambur, ν = frekuensi radiasi sebelum terhambur, θ = sudut hamburan radiasi, ϕ = sudut pental elektron penghambur, K'_e = tenaga kinetik

elektron terpentil, m_e = massa elektron, dan $\alpha = h\nu/m_e c^2$. Hamburan Compton dapat digambarkan seperti ditunjukkan pada gambar I-5.

I.4 Gelombang Materi, Hipotesis de Broglie

Pada bagian depan telah dibicarakan tentang gejala yang memperlihatkan sifat partikel dari radiasi atau gelombang elektromagnetik. Diilhami oleh sifat dualisme radiasi, de Broglie pada tahun 1924 mengusulkan hipotesisnya, bahwa partikel yang bergerak juga memperlihatkan sifatnya sebagai gelombang. Rumusan panjang gelombang partikel berdasar hipotesis de Broglie identik dengan persamaan (I-16), yakni

$$\lambda = \frac{h}{mv} \quad (\text{I.20})$$

dengan m dan v berturut-turut menyatakan massa dan kecepatan partikel. Hipotesis de Broglie tersebut kemudian dapat dibuktikan oleh Davisson dan Germer pada tahun 1927 dengan difraksi elektron. Seberkas elektron yang telah dipercepat dengan tegangan V dikenakan pada kristal. Elektron-elektron terhambur dideteksi terhadap variasi sudut hamburan, ternyata hasilnya memperlihatkan adanya pola difraksi seperti halnya cahaya atau sinar X. Hasil eksperimen Davisson dan Germer dengan kristal nikel dan tegangan pemercepat elektron sebesar 54 V seperti ditunjukkan oleh Gambar I-6. Panjang gelombang elektron yang telah dipercepat dengan tegangan V menurut hipotesis de Broglie adalah

$$\lambda_e = \frac{h}{(2meV)^{1/2}} \quad (\text{I.21})$$

dengan m = massa elektron, dan e = muatan elementer ($1,6 \times 10^{-19} \text{C}$). Hasil eksperimen difraksi elektron sangat sesuai dengan perhitungan de Broglie. Sebagai contoh numerik, untuk $V = 54 \text{ V}$, panjang gelombang elektron sebesar $1,66 \text{ \AA}$, dan untuk $V = 100 \text{ V}$, $\lambda_e = 1,22 \text{ \AA}$, terletak pada daerah panjang gelombang sinar X. Karena panjang gelombang elektron yang begitu kecil, maka untuk bisa mengalami difraksi diperlukan kristal sebagai kisi, difraksinya mengikuti aturan difraksi atau pantulan Bragg seperti halnya pada sinar X.

I.5 Atom Hidrogen Model Bohr

Spektrum emisi berbagai unsur yang bersifat diskret dan merupakan karakter dari masing-masing unsur telah lama teramati (jauh sebelum abad 20). Keberaturan spektrum emisi atom, sebagai pembawa informasi mengenai struktur atom yang bersangkutan, pertama kali ditemukan oleh Balmer (1885) pada atom hidrogen di daerah cahaya. Balmer merumuskan spektrum emisi atom hidrogen dalam panjang gelombangnya sebagai

$$\lambda_n = k \frac{n^2 - 4}{n^2}, \quad (\text{I.22})$$

yang kemudian dikenal sebagai persamaan deret Balmer, dengan $n = 3, 4, 5, \dots$, dan $k = 3616 \text{ \AA}$ disebut tetapan Balmer.

Sifat diskret serta keberaturan spektrum emisi atom yang paling sederhana sekalipun (deret Balmer) tidak dapat diterangkan dengan fisika klasik, bahkan nampak adanya "penyimpangan". Pada tahun 1913, dengan postulatnya Niles Bohr berhasil menerangkan fakta spektroskopik tersebut, walaupun mungkin hanya secara kebetulan, karena pemikiran Bohr tersebut tidak bersesuaian dengan spektrum yang lebih halus maupun dengan spektrum unsur-unsur yang lebih kompleks. Namun begitu, pemikiran Bohr yang antara lain menyatakan bahwa momentum sudut elektron dalam atom hidrogen terkuantisasi menurut persamaan

$$l_n = nh \quad (\text{I.23})$$

dan memberikan tenaga elektron atom hidrogen (aras tenaga atom hidrogen) terkuantisasi menurut persamaan

$$E_n = - \frac{k^2 e^4 m_e}{2\hbar^2 n^2} \quad (\text{I.24})$$

dengan $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, dan $k =$ tetapan Coulomb, telah memberikan andil yang besar dalam perkembangan konsep-konsep fisika yang baru ke arah mekanika kuantum. Persamaan (I-23) setara dengan syarat stasioner gelombang elektron atom hidrogen dalam lintasannya. Gambar I.7 menggambarkan aras-aras tenaga elektron atom hidrogen (tenaga atom) tersebut pada persamaan (I-24). Dengan adanya aras-aras

tenaga atom tersebut, atom dapat pindah dari satu aras ke yang lebih rendah dengan memancarkan tenaganya dalam bentuk radiasi, yang memenuhi persamaan

$$E_r = E_1 - E_2 = \frac{hc}{\lambda} \quad (I.25)$$

Dari berbagai transisi menghasilkan spektrum emisi yang sangat sesuai dengan rumusan Balmer.

I.8 Prinsip Ketakpastian Heisenberg

Telah disebutkan pada bagian-bagian terdahulu akan adanya sifat dual dari radiasi maupun partikel materi. Tetapi tidak mungkin memberlakukan kedua deskripsi tersebut baik pada radiasi maupun pada partikel materi secara bersamaan (simultan). Diberikan contoh pada radiasi, bila radiasi dipandang sebagai partikel, dan secara ekstrim dapat menemukan posisi pada suatu saat secara tepat ($\Delta x \cdot \Delta t \rightarrow 0$), maka ketakpastian atribut gelombang radiasi menjadi tak berhingga ($\Delta \lambda \cdot \Delta \nu \rightarrow \infty$). Ketakpastian pengukuran besaran fisika menjadi sangat penting dalam persoalan ini. Pada tahun 1927 Werner Heisenberg mengusulkan adanya **prinsip ketakpastian (uncertainly principle)** pada obyek-obyek kuantum sebagai hubungan

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar \quad (I.26)$$

dan

$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar . \quad (I.27)$$

Secara kuantitatif, keberlakuan ketakpastian Heisenberg telah ditunjukkan pada berbagai peristiwa, seperti pada difraksi dan mikroskop. Adanya prinsip ketakpastian ini juga menyarankan diberlakukannya konsep **probabilitas (kebolehjadian)** pada sistem kuantum, yang digambarkan dengan suatu fungsi gelombang.

II. POSTULAT-POSTULAT MEKANIKA KUANTUM: Fungsi Gelombang, Operator Observabel

Pengukuran besaran fisis (observabel) dalam mekanika klasik dapat dilakukan dengan cara dan hasil yang pasti dan tanpa mengganggu sistem yang diukur observabelnya, serta dapat dilakukan pengukuran besaran observabel secara serentak (pada saat yang sama). Menurut mekanika kuantum, pengukuran suatu observabel akan mempengaruhi dan mengubah keadaan sistem: pengukuran beberapa besaran (misalnya posisi dan kecepatan atau momentum) tidak dapat dilakukan secara serentak dengan hasil ukur yang pasti / eksak (ketakpastiannya terbatas oleh prinsip ketidakpastian Heisenberg). Gangguan terhadap sistem saat pengukuran sangat terasa / penting pada obyek-obyek mikroskopik (partikel-partikel elementer, atomistik), sehingga pada sistem-sistem seperti itu mutlak diberlakukan mekanika kuantum dalam pembicaraan yang lebih tepat.

Mekanika kuantum merupakan teori kebolehjadian yang bersifat abstrak, seperti konsep panjang gelombang, rapat kebolehjadian, operator, dan lain-lain. Mekanika kuantum disusun di atas postulat-postulat. Ada dua pendekatan formulasi mekanika kuantum, yakni dengan **Mekanika Gelombang** yang dikembangkan oleh Schrödinger, dan **Mekanika Matriks** yang dikembangkan oleh Heisenberg. Dalam modul ini disajikan dengan menggunakan pendekatan mekanika gelombang, yang lebih terasa logis dan menggunakan dasar-dasar metode matematika yang familiar. Untuk mengawali pembicaraan mekanika kuantum, disajikan postulat-postulat dasar mekanika kuantum:

Postulat I: Setiap sistem fisis dinyatakan dengan fungsi gelombang atau fungsi keadaan, $\psi(\vec{r}, t)$, yang secara implisit memuat informasi lengkap mengenai observabel-observabel yang dapat diketahui pada sistem tersebut.

Fungsi Gelombang

Fungsi gelombang suatu sistem, $\psi(\vec{r}, t)$, merupakan fungsi kebolehjadian menemukan sistem di posisi \vec{r} pada saat t , yang secara langsung memberikan rapat kebolehjadian, $\rho(\vec{r}, t)$, sebagai:

$$\rho(\vec{r}, t) \equiv \psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2, \quad (\text{II.1})$$

dengan tanda * menyatakan konjugat kompleks fungsi yang disertainya. Kebolehjadian menemukan sistem di posisi \vec{r} dalam elemen volume $d\tau$ pada saat t adalah

$$\rho(\vec{r}, t)d\tau = \psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t)d\tau. \quad (\text{II.2})$$

Pengertian ini analog dengan massa dalam elemen volume sebagai hasil kali antara rapat massa dengan elemen volume tersebut,

$$dm = \rho_m dV.$$

Kebolehjadian dalam mekanika kuantum ini memenuhi hukum kontinuitas

$$\nabla \cdot \vec{S} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (\text{II.3})$$

sebagaimana dalam arus muatan (arus listrik)

$$\nabla \cdot \vec{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

Vektor \vec{S} pada persamaan (II-3) menyatakan rapat arus partikel, biasa disebut sebagai rapat arus kebolehjadian, yang menggunakan persamaan Schrödinger (dibahas pada bab III) dapat diturunkan sebagai

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2im} [\psi^*(\vec{r}, t)\nabla\psi(\vec{r}, t) - \nabla\psi^*(\vec{r}, t)\psi(\vec{r}, t)] \quad (\text{II.4})$$

dengan i adalah bilangan imajiner, dan m adalah massa sistem.

Sebagaimana disebutkan pada postulat 1 di muka, fungsi gelombang $\psi(\vec{r}, t)$ memuat informasi mengenai semua observabel pada sistem. Ini berarti observabel-observabel pada sistem tersebut dapat diturunkan dari fungsi gelombangnya. Sebelum membicarakan hal ini, akan dibicarakan terlebih dahulu postulat 2 yang berkenaan dengan operator observabel.

Postulat II: Setiap observabel dinyatakan atau diwakili oleh suatu operator linear hermitan.

Operator

Operator adalah suatu instruksi matematis yang bila dikenakan atau dioperasikan pada suatu fungsi maka akan mengubah fungsi tersebut menjadi fungsi lain. Untuk operator \hat{O} dapat ditulis sebagai

$$\hat{O}\psi(\vec{r}, t) = \psi'(\vec{r}, t). \quad (\text{II.5})$$

[Tanda aksen ' bukan berarti diferensial atau turunan, tapi hanya untuk membedakan dengan fungsi asalnya].

Contoh:

$$\begin{aligned} \hat{O} \equiv \frac{\partial}{\partial t} &\rightarrow \hat{O}\psi(\vec{r}, t) = \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \\ \hat{O} \equiv \frac{d}{dx} x &\rightarrow \hat{O}\psi(\vec{x}, t) = \frac{d}{dx}[x\psi(\vec{x}, t)] \\ &= \frac{dx}{dx}\psi(\vec{x}, t) + x \frac{d\psi(\vec{x}, t)}{dx} \\ &= \psi(\vec{x}, t) + x \frac{d\psi(\vec{x}, t)}{dx} \\ &= \left(1 + x \frac{d}{dx}\right)\psi(\vec{x}, t) \end{aligned}$$

Di sini diperoleh persamaan operator

$$\frac{d}{dx} x \equiv 1 + x \frac{d}{dx}. \quad (\text{II.6})$$

Operator dalam mekanika kuantum sebagai representasi suatu observabel bersifat linear, yakni memenuhi hubungan-hubungan

$$\hat{O}(c\psi) = c\hat{O}\psi ; c = \text{konstanta} \quad (\text{II.7a})$$

$$\hat{O}(\psi + \varphi) = \hat{O}\psi + \hat{O}\varphi \quad (\text{II.7b})$$

dan

$$(\hat{O}_1 + \hat{O}_2)\psi = \hat{O}_1\psi + \hat{O}_2\psi. \quad (\text{II.7c})$$

Swafungsi dan Swanilai

Fungsi hasil operasi suatu operator bisa merupakan kelipatan konstan dari fungsi asalnya, yakni

$$\hat{O}\psi(\vec{r}, t) = \lambda \psi(\vec{r}, t), \quad (\text{II.8})$$

dalam hal ini $\psi(\vec{r}, t)$ disebut **swafungsi** (eigen-function, fungsi diri), dan λ disebut **swanilai** (eigen-value, nilai diri) operator \hat{O} .

Contoh

$$\hat{O} \equiv \frac{d}{dx}, \psi(x) = a \exp(bx), a \text{ dan } b \text{ konstanta}$$

$$\begin{aligned} \hat{O}\psi(x) &= ba \exp(bx) \\ &= b\psi(x). \end{aligned}$$

Di sini, b adalah swanilai operator d/dx yang berhubungan dengan swafungsi $a \exp(bx)$. Secara umum b bisa bernilai real maupun imajiner atau kompleks. Bila \hat{O} suatu operator mekanika kuantum (observabel), maka λ pasti real. Persamaan (II-8) disebut **persamaan swafungsi** operator \hat{O} . Suatu operator dapat mempunyai beberapa swafungsi (set eigen-function) dengan swanilainya masing-masing

$$\hat{O}\Phi_n(\vec{r}, t) = \lambda_n \Phi_n(\vec{r}, t). \quad (\text{II.9})$$

Operator Hermitan

Untuk setiap operator linear \hat{A} , terdapat operator \hat{B} demikian sehingga berlaku hubungan

$$\int f^*(\vec{r}, t) \hat{A}g(\vec{r}, t) d\tau = \int (\hat{B}f(\vec{r}, t))^* g(\vec{r}, t) d\tau \quad (\text{II.10})$$

dengan $f(\vec{r}, t)$ dan $g(\vec{r}, t)$ adalah fungsi-fungsi sebarang, dan integral $d\tau$ meliputi seluruh ruang. Pada persamaan (II-10), \hat{B} disebut **\hat{B} konjugat hermitan** operator \hat{A} . Apabila $\hat{A} = \hat{B}$, maka dikatakan \hat{A} bersifat **hermitan**. Jadi sifat hermitan operator \hat{A} dinyatakan dengan

hubungan

$$\int f^*(\vec{r}, t) \hat{A}g(\vec{r}, t) d\tau = \int (\hat{A}f(\vec{r}, t))^* g(\vec{r}, t) d\tau \quad (\text{II.11})$$

Operator hermitan mempunyai perangkat swafungsi yang ortogonal, yaitu memenuhi syarat

$$\int \Phi_n^*(\vec{r}, t) \Phi_m(\vec{r}, t) d\tau = \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{jika } m = n \\ 0 & \text{jika } m \neq n \end{cases} \quad (\text{II.12})$$

δ_{mn} adalah delta kronecker. Perangkat fungsi Orthogonal dapat dinormalisir (menjadi perangkat fungsi ortonormal), yaitu

$$(\text{II.13})$$

yang memenuhi hubungan ortonormalisasinya.

Perangkat fungsi-fungsi ortonormal dapat dijadikan sebagai basis ruang fungsi atau ruang Hilbert, sehingga fungsi gelombang sebarang $\Phi(\vec{r}, t)$ dapat diuraikan atas komponen-komponen pada fungsi basis tersebut,

$$\Phi(\vec{r}, t) = \sum b_n u_n(\vec{r}, t) \quad (\text{II.14})$$

dengan

$$b_n = \int u_n^*(\vec{r}, t) \Phi(\vec{r}, t) d\tau \quad (\text{II.15})$$

adalah nilai komponen $\Phi(\vec{r}, t)$ pada basis $u_n(\vec{r}, t)$. Sebagai basis ruang Hilbert, perangkat fungsi-fungsi ortonormal juga bersifat bebas linear, yang secara singkat dikatakan bersifat lengkap.

Semua operator observabel bersifat hermitan, mempunyai perangkat swafungsi yang ortonormal (dapat dijadikan basis ruang Hilbert) dan dengan swanilai real. Beberapa operator observabel diberikan pada Tabel II.1

No	Observabel	Operator
1.	Posisi: \vec{r}, x	$\hat{r}, \hat{x} = \vec{r}, x$
2.	Momentum linear: \vec{p}, p_x	$\hat{p} = -i\hbar\nabla, p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$
3.	Momentum sudut: $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$	$\hat{L} = -i\hbar \vec{r} \times \nabla$
	L_x	$\hat{L}_x = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right)$

$$L_z = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$4. \text{ Tenaga kinetik: } K = \frac{p^2}{2m} \quad \hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$$

$$5. \text{ Tenaga total: } E \quad \hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

Komutator

Operasi perkalian antara dua operator sering dilakukan (seperti halnya perkalian antara dua observabel). Pengoperasian perkalian operator pada suatu fungsi dilakukan berturut-turut dari yang paling depan (paling dekat dengan fungsi yang dikenai). Perkalian antara dua operator mekanika kuantum yang sering muncul, karena sifat kedua operator tersebut adalah komutator. Komutator antara dua operator \hat{A} dan \hat{B} didefinisikan sebagai

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (\text{II.16})$$

Dari defenisi di atas maka dapat diturunkan identitas-identitas berikut:

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (\text{II.17a})$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] \equiv [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (\text{II.17b})$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] \equiv [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} + \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] \quad (\text{II.17c})$$

$$[\hat{A}, [\hat{B}, \hat{C}]] + [\hat{B}, [\hat{C}, \hat{A}]] + [\hat{C}, [\hat{A}, \hat{B}]] \equiv 0. \quad (\text{II.17d})$$

Apabila $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, maka dikatakan bahwa \hat{A} dan \hat{B} bersifat komut. Nilai observabelnya dapat diukur secara serentak dan pasti serta mempunyai swafungsi simultan (klasik). Sedangkan apabila $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, dikatakan \hat{A} dan \hat{B} tidak komut, dan pengukuran observabelnya tidak bisa dilakukan secara serentak dan pasti (terikat pada prinsip ketakpastian Heisenberg, $\Delta A \cdot \Delta B \geq \hbar/2$).

Dikaitkan dengan sifat hermitannya, dapat dibuktikan bahwa komutator dari dua operator hermitan bersifat **anti-hermitan**, yakni memenuhi hubungan

$$\int \psi^*(\vec{r}, t) [\hat{A}, \hat{B}] \phi(\vec{r}, t) d\tau = - \int ([\hat{A}, \hat{B}] \psi(\vec{r}, t))^* \phi(\vec{r}, t) d\tau. \quad (\text{II.18})$$

Notasi Dirac

Untuk menuliskan suatu fungsi (vektor dalam ruang Hilbert), operasi integral dan sebagainya dapat digunakan notasi tertentu yang disebut **notasi Dirac**. Berikut beberapa contoh penulisan notasi Dirac:

Fungsi $g \rightarrow |g\rangle$; disebut vektor ket.

Fungsi $f^* \rightarrow \langle f|$; disebut vektor bra.

$$\hat{A}g \rightarrow \hat{A}|g\rangle$$

$$\int f^* \hat{A}g d\tau \rightarrow \langle f|\hat{A}g\rangle = \langle f|\hat{A}|g\rangle$$

$$\int u_n u_m d\tau = \delta_{nm} \rightarrow \langle u_n|u_m\rangle = \delta_{nm}$$

$$b_i = \int u_i \psi d\tau \rightarrow b_i = \langle u_i|\psi\rangle$$

Syarat hermitan operator \hat{A} ditulis sebagai

$$\langle f|\hat{A}|g\rangle = \langle \hat{A}f|g\rangle.$$

Postulat III: Pengukuran observabel A pada sistem dengan fungsi gelombang $|\psi(\vec{r}, t)\rangle = a_n |u_n(\vec{r}, t)\rangle$ yang merupakan swafungsi ternormalisir operator \hat{A} dengan swanilai a_n ,

$$\hat{A}|u_n(\vec{r}, t)\rangle = a_n |u_n(\vec{r}, t)\rangle,$$

akan menghasilkan nilai ukur yang pasti a_n , dan tanpa mengubah keadaan atau fungsi gelombangnya.

Apabila $|\psi(\vec{r}, t)\rangle$ bukan swafungsi operator \hat{A} , maka swafungsi tersebut dapat diuraikan atas basis yang merupakan swafungsi operator \hat{A} ,

$$|\psi(\vec{R}, t)\rangle = \sum_i b_i |u_i(\vec{r}, t)\rangle \quad (\text{II.19})$$

sehingga kebolehjadian bahwa pengukuran observabel A memperoleh hasil ukur a_n adalah

$$\begin{aligned}
 P(a_n) &= \left| \langle u_n(\vec{r}, t) | \psi(\vec{R}, t) \rangle \right|^2 \\
 &= \left| \langle u_n(\vec{r}, t) | \sum_i b_i u_i(\vec{r}, t) \rangle \right|^2 \\
 &= b_n^2
 \end{aligned}
 \tag{II.20}$$

Pada pengukuran observabel q secara klasik yang dilakukan n kali diperoleh kebolehjadian memperoleh suatu harga q_k adalah

$$P_k = \frac{n_k}{n}, \tag{II.21}$$

dan nilai rata-rata pengukurannya adalah

$$\bar{q} = \sum P_k q_k. \tag{II.22}$$

Konsep matematis nilai rata-rata ini juga berlaku pada mekanika kuantum yang dinyatakan oleh postulat 4 berikut.

Postulat IV: Nilai rata-rata pengukuran suatu observabel A yang sepadan dengan operator \hat{A} pada suatu sistem yang dinyatakan oleh fungsi gelombang $|\psi(\vec{r}, t)\rangle$, diberikan oleh nilai harap $\langle a \rangle$ sebagai

$$\begin{aligned}
 \langle a \rangle &= \langle \psi(\vec{r}, t) | \hat{A} | \psi(\vec{r}, t) \rangle \\
 &= \sum |b_i|^2 a_i
 \end{aligned}$$

Dengan postulat nilai harap (*expectation value*) tersebut, ketidakpastian pengukuran didefinisikan sebagai

$$\begin{aligned}
 (\Delta a)^2 &= (a - \langle a \rangle)^2 \\
 &= \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2
 \end{aligned}
 \tag{II.23}$$

yang ekuivalen dengan deviasi standar dalam statistik. Selanjutnya, prinsip ketidakpastian untuk dua observabel saling berkonjugat kanonik (operatornya tak saling komut) \hat{A} dan \hat{B} diperoleh

$$(\Delta a)(\Delta b) \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (\text{II.24})$$

Dalam bab ini baru disebutkan bahwa keadaan suatu sistem dinyatakan dengan suatu fungsi gelombang, dan suatu observabel dinyatakan dengan suatu operator. Di sini belum dibicarakan bentuk fungsi gelombang itu serta bagaimana memperolehnya, begitu juga pemberlakuan operator-operator observabel pada suatu sistem. Hal-hal yang disebutkan terakhir ini akan dibahas pada bab-bab selanjutnya.

III. PERSAMAAN SCHRÖDINGER

Pada kasus-kasus sederhana dan tinjauan yang kurang mendalam, postulat de Broglie telah dapat menjelaskan sifat gelombang partikel mikroskopik yang sesuai dengan eksperimen, seperti difraksi elektron dan atom hidrogen Bohr. Namun hipotesa tersebut belum dapat menerangkan secara detail, seperti mengenai bagaimana sifat perambatan gelombang tersebut dan bagaimana proses perubahan observabel gelombang apabila partikel mengenai perubahan keadaan.

Di samping keterbatasan "kemampuan" hipotesa de Broglie tersebut di atas, bisa diajukan pertanyaan, bagaimana bentuk persamaan dan fungsi gelombang partikel (sistem kuantum)? Kita ingat, bahwa persamaan gelombang tali (gelombang mekanis) dapat diturunkan dari hukum Newton dan persamaan gelombang elektromagnetik dapat diturunkan dari persamaan-persamaan Maxwell. Namun kita tidak bisa berharap bahwa persamaan gelombang partikel (kuantum) dapat diturunkan dari persamaan-persamaan atau hukum-hukum fisika klasik.

Untuk persoalan ini, Schrödinger telah berhasil mengembangkan teori mekanika kuantum, dengan apa yang biasa disebut **mekanika gelombang**. Dalam berbagai literatur diberikan beberapa cara untuk menurunkan persamaan gelombang kuantum yang lazim disebut **persamaan Schrödinger**. Di sini diberikan langsung bentuk persamaan Schrödinger, yakni dari persamaan operator Schrödinger Hamiltonan klasik

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V} = \hat{E} \quad (\text{III.1})$$

dikenakan pada fungsi gelombang sistem (yang belum diketahui bentuknya), memberikan

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t). \quad (\text{III.2})$$

Catatan: Tenaga potensial V , secara umum sebagai fungsi posisi dan waktu, $V = V(\vec{r}, t)$, namun dalam banyak kasus, khususnya yang dibahas dalam makalah ini hanya fungsi posisi saja, $V = V(\vec{r})$.

Persamaan (III-2) adalah persamaan Schrödinger gayut waktu, yakni untuk sistem yang tenaganya sebagai fungsi waktu secara eksplisit. Untuk sistem dengan tenaga konstan, persamaan Schrödingernya dapat dituliskan sebagai

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t)+V(\vec{r})\psi(\vec{r},t)=-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t)=E\psi(\vec{r},t), \quad (\text{III.3})$$

$\psi(\vec{r},t)$ pada persamaan (III-3) dapat difaktorkan atas dua fungsi variabel tunggal, masing-masing fungsi \vec{r} dan fungsi t , yakni

$$\psi(\vec{r},t)\equiv R(\vec{r})\theta(t). \quad (\text{III.4})$$

Dengan pemisahan variabel ini persamaan (III-3) memberikan dua persamaan diferensial,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\theta(t)=E\theta(t) \quad (\text{III.5})$$

dengan penyelesaian

$$\theta(t)=\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right), \quad (\text{III.6})$$

dan

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2R(\vec{r})+V(\vec{r})R(\vec{r})=ER(\vec{r}) \quad (\text{III.7})$$

dengan penyelesaian $R(r)$ yang tergantung pada bentuk $V(\vec{r})$. Dengan demikian, diperoleh penyelesaian persamaan Schrödinger sebagai fungsi gelombang sistem yang berbentuk

$$\Psi(\vec{r},t)=R(\vec{r})\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right). \quad (\text{III.8})$$

Persaman (III-7) disebut persamaan Schrödinger tak gayut waktu, dan sistem tersebut dikatakan stasioner, karena fungsi gelombangnya (III-8) memberikan rapat kebolehjadian $|\Psi(\vec{r},t)|^2$ yang konstan terhadap waktu. Dengan mekanika Schrödinger ini, suatu sistem dapat dicari fungsi gelombangnya sebagai penyelesaian dari persamaan Schrödinger yang merupakan persamaan diferensial.