KOREKSI ORDER-2 FUNGSI GELOMBANG DAN ENERGI ION LITHIUM DENGAN PENDEKATAN TEORI GANGGUAN

SKRIPSI

Oleh
Mirda Prisma Wijayanto
NIM 120210102032

PROGRAM STUDI PENDIDIKAN FISIKA
JURUSAN PENDIDIKAN MIPA
FAKULTAS KEGURUAN DAN ILMU PENDIDIKAN
UNIVERSITAS JEMBER
2016

KOREKSI ORDER-2 FUNGSI GELOMBANG DAN ENERGI ION LITHIUM DENGAN PENDEKATAN TEORI GANGGUAN

SKRIPSI

Diajukan guna melengkapi tugas akhir dan memenuhi salah satu syarat untuk menyelesaikan program studi pendidikan fisika (S1)
dan mencapai gelar sarjana pendidikan

Oleh
Mirda Prisma Wijayanto
NIM 120210102032

PROGRAM STUDI PENDIDIKAN FISIKA
JURUSAN PENDIDIKAN MIPA
FAKULTAS KEGURUAN DAN ILMU PENDIDIKAN
UNIVERSITAS JEMBER
2016

PERSEMBAHAN

Puji syukur kepada Tuhan Yang Maha Esa yang telah melimpahkan kasih sayang dan rahmat-Nya sehingga penulisan Skripsi ini dapat saya selesaikan. Skripsi ini saya persembahkan untuk :

1. Mama Musta'adah, Papa Samirun, serta adik-adikku Mirda Andreyanto Wijaya dan Mirda Shelvia Maharani.
2. Guru-guruku sejak sekolah dasar sampai dengan perguruan tinggi.
3. Keluarga besar program studi pendidikan fisika Universitas Jember.

MOTTO

Matematika adalah sebuah bahasa.

(Josiah Willard Gibbs, 1839 - 1903)*

* Hastings, S. Charles. 1906. *Biographycal Memories Josiah Willard Gibbs*. City of Washington : The National Academy of Science.

PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Mirda Prisma Wijayanto

NIM : 120210102032

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya yang berjudul Koreksi Order-2 Fungsi Gelombang dan Energi ion Lithium dengan pendekatan Teori Gangguan adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali kutipan yang sudah saya sebutkan sumbernya, belum diajukan di institusi manapun, dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya, tanpa adanya tekanan atau paksaan dari pihak manapun serta bersedia mendapat saksi akademik jika dikemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember,

Yang menyatakan,

Mirda Prisma Wijayanto

120210102032

SKRIPSI

KOREKSI ORDER-2 FUNGSI GELOMBANG DAN ENERGI ION LITHIUM DENGAN PENDEKATAN TEORI GANGGUAN

Diajukan guna dipertahankan di depan tim penguji guna menyelesaikan pendidikan program sarjana strata satu studi pendidikan fisika jurusan pendidikan matematika dan ilmu pengetahuan alam fakultas keguruan dan ilmu pendidikan

Oleh
Mirda Prisma Wijayanto
NIM 120210102032

Pembimbing :
Dosen Pembimbing I : Drs. Bambang Supriadi, M.Sc.
Dosen Pembimbing II : Rif'ati Dina Handayani, S.Pd, M.Si.

PENGESAHAN

Skripsi berjudul "Koreksi Order-2 Fungsi Gelombang dan Energi ion Lithium dengan pendekatan Teori Gangguan" telah diuji dan disahkan pada :

Hari, tanggal : Kamis, 14 April 2016

Tempat : Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Jember

Tim Penguji :

Ketua,

Drs. Bambang Supriadi, M.Sc.
NIP 196807101993021001

Sekretaris,

Rif'ati Dina Handayani, S.Pd, M.Si.
NIP 198102052006042001

Anggota I,

Drs. Trapsilo Prihandono, M.Si.
NIP 196204011987021001

Anggota II,

Drs. Albertus Djoko Lesmono, M.Si.
NIP 196412301993021001

Mengesahkan
Dekan,

Prof. Dr. Sunardi, M.Pd.
NIP 195405011983031005

RINGKASAN

Koreksi Order-2 Fungsi Gelombang dan Energi ion Lithium dengan pendekatan teori Gangguan; Mirda Prisma Wijayanto, 120210102032; 2016; 55 halaman; Program Studi pendidikan Fisika, Jurusan Pendidikan Matematika dan Ilmu Alam, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Jember.

Jenis penelitian ini adalah penelitian pengembangan non eksperimen pada bidang fisika teori berupa pengembangan teori Mekanika Kuantum. Teori fisika yang dikembangkan adalah penentuan fungsi gelombang dan energi atom berelektron tunggal dengan pendekatan teori gangguan. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan rumusan fungsi gelombang serta nilai energi dari ion Lithium akibat gangguan medan elektrostatis dengan pendekatan teori Gangguan hingga koreksi order-2.

Metode yang digunakan dalam penelitian ini yaitu *Study literatue*. Langkah pertama dalam penelitian ini yaitu menentukan fungsi gelombang ion Litium untuk bilangan kuantum $n \leq 3$ dengan menggunakan pendekatan persamaan Schrodinger. Persamaan Schrodinger merupakan persamaan diferensial parsial orde dua yang digunakan untuk menganalisis perilaku dualisme gelombang partikel. Persamaan Schrodinger dibentuk dengan menggunakan hukum kekekalan energi serta taat azas terhadap hipotesis de Broglie. Persamaan Schrodinger diselesaikan dengan menggunakan metode pemisahan variabel sehingga diperoleh solusi analitik kompleks berupa fungsi gelombang meliputi fungsi gelombang Radial $R_{nl}\ (r)$ serta fungsi harmonik bola $Y_{l\,m_l}(\theta,\varphi)$ yang merupakan gabungan dari fungsi gelombang Polar $\Theta_{lm}\ (\theta)$ dan fungsi gelombang Azimuth $\Phi_m\ (\varphi)$. Persamaan Schrodinger yang digunakan adalah persamaan Schrodinger bebas waktu untuk partikel tunggal pada koordinat bola (r,θ,φ).

Dalam penelitian ini digunakan tiga jenis bahan validasi, diantaranya simulasi fungsi gelombang dan rapat probabilitas radial atom Hidrogen untuk $n \leq 3$, simulasi fungsi harmonik bola, serta perhitungan matematis koreksi order-1 atom Hidrogen akibat gangguan medan elektrostatis. Fungsi gelombang atom

radial atom Hidrogen dan fungsi harmonik bola disimulasikan dengan menggunakan software aplikasi Matlab2012.

Dalam penelitian ini digunakan gangguan dari medan elektrostatis. Hamiltonian pengganggu diberikan oleh persamaan, $\hat{G} = e\vec{r}.\vec{E} = |e||\vec{E}||\vec{r}|\cos\theta$ dengan θ adalah sudut yang dibentuk antara medan listrik $\vec{E}$ dengan sumbu-*z* positif. Gangguan bersifat non degenerasi tak bergantung waktu. Dapat diartikan bahwa satu level energi hanya boleh ditempati oleh satu *states* bilangan kuantum. Tidak diperkenankan terdapat dua bilangan kuantum berbeda menempati satu level energi yang sama. Suku pengganggu yaitu medan elektrostatis tak bergantung waktu artinya memiliki nilai yang tetap tidak berubah – ubah setiap waktu. Koreksi pertama dilakukan terhadap fungsi gelombang dan diperoleh rumusan fungsi gelombang terkoreksi order-2 sebagai berikut :

$$\Psi_1 = \Psi_1{}^{(0)} + \Phi_1{}^{(1)} + \Phi_1{}^{(2)}$$

$$\Psi_1 = \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}\, e^{-\frac{3r}{a_0}} - 6{,}5758\ x\ 10^{-4}E\left[\frac{3r}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\ e^{-\frac{3r}{2a_0}}\cos\theta\right] +$$
$$\left\{0{,}9497x10^{-27}E^2\left(\frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{r}{a_0}}\right)\right\}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2r^2}{3a_0{}^2} - \frac{2r}{a_0} + 1\right) +$$
$$\frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\ \frac{r(2a_0 - r)}{2a_0{}^2}\left(\cos\theta + \sin\theta(\sin\varphi + \cos\varphi)\right) + \frac{1}{3\sqrt{2\pi}}\ \frac{r^2}{a_0{}^2}(3\cos^2\theta - 1) +$$
$$\frac{2\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\frac{r^2}{a_0{}^2}\sin\theta\cos\theta(\sin\varphi + \cos\varphi) + \frac{\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\ \frac{r^2}{a_0{}^2}\ \sin^2\theta$$

Dari persamaan lengkap koreksi order-2 dapat diketahui bahwa adanya gangguan medan elektrostatis mengakibatkan elektron mengalami eksitasi menuju tingkat bilangan kuantum yang lebih tinggi. Selanjutnya dilakukan koreksi terhadap energi dari ion Lithium akibat gangguan medan elektrostatis. Pada koreksi order-1 diperoleh bahwa energi ion Lithium $\epsilon_1{}^{(1)} = 0$. Berdasarkan data hasil penelitian diketahui bahwa nilai koreksi energi mengalami penuruan dari antara koreksi order-1 terhadap koreksi order-2 yaitu $\epsilon_1{}^{(1)} = 0$ menjadi $\epsilon_1{}^{(2)} = -7{,}35\ x\ 10^{-45}\ E^2$.

PRAKATA

Puji syukur kepada Tuhan Yang Maha Esa atas limpahan karunia dan hidayah-Nya sehingga penulisan skripsi dengan judul "Koreksi Order-2 Fungsi Gelombang dan Energi ion Lithium dengan pendekatan Teori Gangguan" dapat terselesaikan. Skripsi ini disusun dan diajukan untuk memenuhi salah satu syarat penyelesaian pendidikan strata satu (S1) di program pendidikan fisika jurusan pendidikan matematika dan ilmu alam fakultas keguruan dan ilmu pendidikan Universitas Jember.

Penyusunan skripsi dapat terselesaikan dengan baik berkat dukungan, bimbingan, dan bantuan dari berbagai pihak, oleh karena itu pada kesempatan ini penulis menyampaikan ucapan terima kasih kepada beberapa pihak yang disebutkan berikut ini.

1) Dekan FKIP Universitas Jember yang telah memberikan kesempatan penulis untuk melakukan penelitian.
2) Ketua Jurusan Pendidikan MIPA yang telah memberikan kesempatan untuk menyelesaikan skripsi ini.
3) Dosen pembimbing I dan Dosen pembimbing II yang telah membimbing penulis dalam menyelesaikan skripsi.
4) Dosen Penguji I dan Dosen penguji II yang telah meluangkan waktu untuk memberi masukan demi perbaikan skripsi ini.
5) Mama, Papa, adik-adik beserta seluruh keluarga yang telah memberi dukungan dan motivasi dalam bentuk apapun.
6) Aji Saputra, Riska Ulfia, Handoko, Wawan Hermanto, serta seluruh keluarga pendidikan Fisika FKIP Universitas Jember.
7) Ibu Dr.Sudarti, M.Kes., keluarga LBB Galileo, serta seluruh siswa.

Kritik dan saran sangat penulis harapkan demi kebaikan dan kesempurnaan skripsi ini, semoga bisa bermanfaat bagi kita semua.

Jember,

Penulis

DAFTAR ISI

Halaman

DAFTAR TABEL

Halaman

DAFTAR GAMBAR

Halaman

DAFTAR LAMPIRAN

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Pada akhir abad kesembilan belas banyak fenomena fisika yang tidak dapat dijelaskan oleh teori fisika klasik. Teori klasik terbentuk dari pengamatan – pengamatan yang bersifat makroskopik dengan mengasumsikan bahwa partikel dan gelombang merupakan pokok bahasan yang terpisah satu sama lain. Kegagalan awal teori klasik yaitu dalam menjelaskan spektrum radiasi termal dari suatu benda pada suhu yang sangat tinggi. Peristiwa ini biasa dikenal sebagai radiasi benda hitam. Selain itu teori gelombang klasik juga gagal menjelaskan peristiwa pemancaran elektron dari permukan logam yang disinari cahaya (*efek fotolistrik*) dan hamburan cahaya oleh elektron – elektron (*efek compton*).

Pada dasarnya permasalahan tersebut hanya dapat diselesaikan dengan menganggap bahwa partikel dan gelombang memiliki sifat dualisme yang saling berkaitan satu sama lain. Pada tahun 1924 Louis de Broglie mengajukan sebuah hipotesis bahwa suatu partikel bergerak yang memiliki momentum p dapat berperilaku sebagai gelombang. Hal ini dicirikan dengan adanya panjang gelombang $\lambda = \frac{h}{p}$ yang dikenal sebagai panjang gelombang de Broglie dari suatu partikel. Hal inilah yang menjadi awal munculnya teori baru dalam fisika yaitu mekanika kuantum.

Secara matematis, keterkaitan antara dualisme gelombang dan partikel dapat dijelaskan dengan menggunakan suatu persamaan diferensial parsial orde dua yang dikenal sebagai persamaan Schrodinger. Persamaan Schrodinger dibentuk dengan menggunakan hukum kekekalan energi serta taat azas terhadap hipotesis de Broglie sehingga diperoleh suatu solusi analitik kompleks berupa fungsi gelombang. Fungsi gelombang yang diperoleh harus bersifat linier, bernilai tunggal, dan berhingga. Melalui fungsi gelombang dapat diketahui bagaimana perilaku dan karakteristik partikel yang meliputi probabilitas, momentum sudut, harga ekspektasi posisi, maupun energi rata – rata yang dimiliki partikel dalam pengaruh suatu potensial tertentu. Fungsi gelombang yang diperoleh harus ternormalisasi dimana secara fisis dapat diartikan bahwa peluang untuk menemukan partikel di suatu tempat pada suatu waktu harus bersifat tertentu. Selain itu fungsi gelombang juga harus bernilai tunggal dan berhingga yang berarti bahwa tidak mungkin ditemukan satu partikel identik dalam waktu yang bersamaan di dua tempat berbeda.

Berdasarkan karakteristik umum dari fungsi gelombangnya, persamaan Schrodinger dapat dikelompokkan menjadi dua jenis. Bentuk yang paling sederhana adalah persamaan Schrodinger tak bergantung waktu atau dalam keadaan tunak dimana fungsi gelombang yang dihasilkan tidak memiliki suku waktu *(t)*. Secara fisis dapat diartikan bahwa fungsi gelombang tersebut dibentuk atau dipengaruhi oleh suatu potensial yang hanya bergantung posisi *(r)* dan tidak berubah setiap waktu biasanya berlaku untuk kasus potensial sederhana yang non relativistik. Persamaan Schrodinger bergantung waktu menghasilkan fungsi gelombang yang mengandung suku waktu *(t)*. Secara fisis berarti bahwa fungsi gelombang dibentuk atau dipengaruhi oleh suatu potensial yang bentuknya dapat berubah – ubah setiap waktu. Permasalahan ini dapat ditemui pada kasus yang lebih rumit seperti pada model atom kuantum *Sommerfeld* yang menjelaskan bahwa lintasan elektron tidak berbentuk lingkaran melainkan berbentuk elips dan bentuknya dapat berubah - ubah setiap waktu (Liboff, 1980:243).

Dalam aplikasinya atom Lithium maupun ion Lithium banyak digunakan sebagai baterai untuk berbagai peralatan elektronika. Atom Lithium digunakan sebagai bahan pembuatan baterai yang tidak dapat diisi ulang, sedangkan ion Lithium digunakan sebagai bahan dalam pembuatan baterai isi ulang. Atom Lithium maupun ion Lithium memiliki jumlah proton yang sama yaitu 3. Perbedaannya hanyalah pada jumlah elektron. Atom Lithium yang disimbolkan ${}_{3}^{7}Li$ memiliki 3 elektron. Ion Lithium meliputi Li^{+} yang memiliki 2 elektron serta Li^{2+} yang memiliki 1 elektron yang termasuk dalam kelompok atom hidrogenik. Atom hidrogenik memiliki satu proton di dalam nukleus dengan satu elektron yang mengelilinginya. Kelompok partikel yang termasuk atom hidrogenik diantaranya adalah atom hidrogen (Z = 1) dan isotopnya, deuterium (A = 2, Z = 1), tritium (A = 3, Z = 1), ion Helium (He^{+}) yaitu atom Helium yang kehilangan satu dari dua elektronnya (Z = 2), serta ion Lithium (Li^{2+}) yaitu atom Lithium yang kehilangan dua dari tiga elektronnya (Z = 3). Kelompok partikel berelektron tunggal baik H, He^{+}, Li^{2+} dan lain sebagainya memiliki sifat dan karakteristik yang hampir sama baik secara fisis maupun matematis. Interpretasi secara matematis berkaitan dengan atom hidrogenik dapat dijelaskan melalui persamaan diferensial parsial orde dua yaitu persamaan Schrodinger (Alonso dan Finn, 1968:111).

Dalam penelitian ini dibatasi pada penggunaan persamaan Schrodinger tak bergantung waktu dimana perilaku gerak elektron didasarkan pada model atom Bohr. Salah satu kelemahan dari model atom Bohr yaitu tidak dapat menjelaskan perilaku atom berelektron banyak (lebih dari satu elektron) seperti atom Li maupun ion Li^{+}. Oleh karena itu dalam penelitian ini digunakan ion Lithium yaitu Li^{2+} sebagai fokus penelitian dengan pertimbangan bahwa Li^{2+} merupakan atom berelektron tunggal.

Prinsip kerja penggunaan ion Lithium Li^{2+} dalam baterai mengacu pada konsep eksitasi elektron. Dalam penggunaannya, elektron akan menyerap energi dari kapasitor yang disimpan dalam bentuk medan lsitrik. Akibatnya elektron akan mengalami eksitasi dari dari tingkat energi rendah misalnya $n=1$ menuju kulit lain dengan tingkat energi yang lebih tinggi $n>1$. Setelah mencapai kulit terluar elektron kemudian akan terlepas dan menjadi elektron bebas. Adanya elektron bebas ini akan menghasilkan arus listrik yang digunakan prosesor untuk mengoperasikan piranti elektronik.

Untuk mempelajari perilaku eksitasi elektron tersebut dapat digunakan suatu pendekatan matematis yaitu teori gangguan. Berdasarkan suku gangguannya, teori gangguan dapat dikelompokkan menjadi gangguan stasioner (tak bergantung waktu) dan gangguan bergantung waktu. Berdasarkan pengaruh bilangan kuantum terhadap koreksi energi teori gangguan dapat dibedakan untuk kasus non degenerasi dan gangguan berdegenerasi. Dalam penelitian ini akan dikaji pengaruh medan elektrostatis terhadap fungsi gelombang pada keadaan dasar (1s) hingga koreksi order-2. Kajian dilakukan terhadap fungsi gelombang tingkat dasar dikarenakan pada keadaan dasar *n=1 l*=0 hanya terdapat satu *states* elektron yang akan menghasilkan nilai satu level energi. Keadaan yang demikian disebut sebagai keadaan *non degenerasi* yang akan menjadi fokus masalah dalam penelitian ini. Apabila digunakan kajian terhadap keadaan yang lebih tinggi misalnya *n*=2 akan terdapat dua kombinasi bilangan kuantum yang menghasilkan nilai level energi yang sama yaitu *n=2 l*=0 dan *n=2 l=1*. Keadaan yang demikian disebut sebagai keadaan *degenerasi*. Tingkat ketelitian perhitungan pada teori gangguan ditentukan oleh order koreksi. Semakin tinggi order koreksi menandakan penelitian semakin akurat dan teliti.

Beberapa penelitian sebelumnya mengenai atom hidrogenik serta teori gangguan antara lain : Wenfang Xie (2009) dalam penelitiannya tentang *Effects of an Electric Field on the Confined Hydrogen Atom in a Parabolic Potential Well* menjelaskan bahwa energi ikat atom hidrogen akan menurun seiring meningkatnya intensitas medan listrik. Berdasarkan data hasil penelitian diperoleh bahwa pada koreksi order pertama terlihat adanya pemisahan energi pada keadaan dasar yaitu *n=1* menjadi dua level energi. M. Abdel (2015) dalam penelitiannya tentang *Finite Size Uehling Corrections in Energy Levels of Hydrogen and Muonic Hydrogen Atom*, menjelaskan bahwa koreksi energi dari muon hidrogenik menghasilkan nilai yang lebih tinggi bila dibandingkan dengan atom Hidrogen. Nilai – nilai koreksi energi akan menurun seiring meningkatnya harga bilangan kuantum utama *n.* Montgomerry Jr. (2001) dalam penelitiannya *Variational Perturbation Theory of the Confined Hydrogen Atom* menjelaskan bahwa koreksi energi order pertama menunjukkan nilai yang cukup besar untuk jari – jari ikat r_0. Akan tetapi nilai koreksi order kedua dan seterusnya menunjukkan nilai yang terus menurun.

Kenyataan bahwa ion Lithium memiliki manfaat yang cukup besar terutama sebagai bahan dasar pembuatan sumber daya sekunder dari berbagai komponen elektronika, sehingga perlu dilakukan penelitian lebih lanjut mengenai fungsi gelombang dan energi ion Lithium dengan judul Koreksi Order-2 Fungsi Gelombang dan Energi Ion Lithium dengan Pendekatan Teori Gangguan.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas maka dapat dirumuskan beberapa permasalahan, antara lain :

a. Bagaimana bentuk fungsi gelombang keadaan dasar (1s) terkoreksi order-2 ion Lithium (Li^{2+}) dalam medan elektrostatis dengan pendekatan teori gangguan?
b. Berapakah nilai energi terkoreksi order-2 ion Lithium (Li^{2+}) untuk keadaan dasar (1s) dalam medan elektrostatis dengan pendekatan teori gangguan?

1.3 Batasan Masalah

Agar penelitian lebih terfokus dan dapat menjawab permasalahan yang ada, maka penulis membatasi masalah sebagai berikut :

a. Persamaan Schrodinger yang digunakan adalah persamaan Schrodinger tak bergantung waktu (pada keadaan tunak) dalam koordinat bola dengan asumsi proton dan neutron dianggap diam.
b. Teori Gangguan yang digunakan adalah teori Gangguan untuk sistem tak berdegenerasi ($E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$) dalam keadaan tunak (tak bergantung waktu).
c. Fungsi gelombang ion Lithium (Li^{2+}) memenuhi syarat normalisasi.
d. Fungsi gelombang dan energi yang dikoreksi hanya dibatasi untuk keadaan dasar (1s) dengan koreksi order-2 akibat gangguan dari medan elektrostatis (potensial *Coulomb*).
e. Fungsi gelombang yang diperoleh mengabaikan efek spin.

1.4 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini adalah sebagai berikut :

a. Menentukan fungsi gelombang keadaan dasar (1s) terkoreksi order-2 ion Lithium (Li^{2+}) dalam medan elektrostatis dengan pendekatan teori gangguan.
b. Menentukan nilai energi terkoreksi order-2 ion Lithium (Li^{2+}) untuk keadaan dasar (1s) dalam medan elektrostatis dengan pendekatan teori gangguan.

1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat yang dapat diperoleh dari penelitian ini adalah sebagai berikut :

a. Bagi peneliti, dapat menambah wawasan, pengetahuan, dan pengalaman tentang fisika kuantum khususnya aplikasi persamaan Schrodinger untuk mengkaji atom hidrogenik dengan melibatkan teori gangguan.
b. Bagi pembaca, dapat dijadikan sebagai salah satu acuan dalam mempelajari fisika kuantum khususnya dalam pokok bahasan atom hidrogenik dan teori gangguan baik dalam pembelajaran di perkuliahan maupun penelitian lebih lanjut dengan tema serupa.
c. Bagi lembaga, dapat memberikan sumbangan penelitian dan bahan referensi tambahan dalam pembelajaran di perkuliahan fisika kuantum dengan pokok bahasan atom hidrogenik atau atom dengan elektron tunggal.

BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Dualisme Gelombang Partikel

Berdasarkan ide yang dikemukakan oleh Einstein, suatu partikel misalnya foton dengan energi hf (frekuensi f dan panjang gelombang λ) memiliki momentum linear p yang searah dengan arah pergerakannya. Besarnya p dapat dinyatakan sebagai berikut :

$p = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}$ (Krane, 1982:102)...(2.1)

Pada tahun 1923, A. H. Compton membenarkan ide ini dengan menggunakan eksperimen hamburan sinar-X dan elektron. Sehingga perilaku sebuah foton yang memiliki momentum linier sebesar h/λ dan energi hf dapat diketahui. Pada tahun 1923, de Broglie mempostulatkan bahwa sebuah partikel bergerak dapat memiliki momentum dan panjang gelombang yang disebut panjang gelombang de Broglie dimana keduanya saling berhubungan satu sama lain sesuai dengan persaman (2.1) (Krane, 1982:126).

Panjang gelombang de Broglie hanya dapat diamati untuk partikel – partikel yang berukuran atom atau inti atom. Berdasarkan persamaan (2.1) dapat diperoleh besarnya panjang gelombang de Broglie yaitu :

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

dengan h merupakan konstanta planck yang besarnya 6,63 x 10^{-34} Js. Sedangkan kecepatan gelombang de Broglie dapat dituliskan :

$v = \lambda f$ (Beiser, 1990:91).

Dalam perambatannya gelombang memindahkan sejumlah energi dari suatu subsistem ke subsistem lainnya. Suatu gelombang yang merambat dalam arah tertentu misalnya diambil arah sumbu-x dalam suatu waktu memenuhi persamaan gelombang :

$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0$ (Pain, 2005:112).

Solusi dari persamaan diatas berupa fungsi gelombang yang dapat dituliskan :

$\Psi(x,t) = A\sin(\omega t - kx) + B\cos(\omega t - kx)$ ………………………..(2.2)

Fungsi gelombang Ψ adalah kuantitas kompleks yang memberikan karakteristik gelombang de Broglie. Harga fungsi gelombang Ψ tidak mempunyai arti fisis secara langsung akan tetapi dapat menyajikan informasi fisis bahwa partikel tersebut mempunyai gerakan yang tak terbatas. Kuadrat harga mutlak dari fungsi gelombang $|\Psi|^2$ disebut dengan kerapatan peluang *P(r)* menyatakan kemungkinan suatu partikel misalnya elektron ditemukan pada posisi tertentu dalam sebuah atom (Beiser, 1990:91).

2.2 Persamaan Schrodinger

Persamaan Schrodinger merupakan persamaan diferensial parsial orde dua yang digunakan untuk memberikan informasi tentang sifat gelombang dari suatu partikel. Berdasarkan karakteristik fungsi gelombangnya persamaan Schrodinger dibagi menjadi dua yaitu persamaan Schrodinger bergantung waktu dan persamaan Schrodinger tak bergantung waktu. Persamaan Schrodinger yang digunakan untuk memecahkan masalah berkaitan dengan atom hidrogenik adalah persamaan Schrodinger tak bergantung waktu.

2.2.1 Persamaan Schrodinger Tak Bergantung Waktu (Keadaan Tunak)

Pemecahan persamaan Schrodinger harus memenuhi 3 syarat sebagai berikut :

a. Memenuhi hukum Kekekalan Energi

Hukum kekekalan energi menyatakan bahwa jumlah total energi yaitu energi kinetik dan potensial dari suatu partikel selalu bersifat kekal. Persamaan hukum kekekalan energi dari suatu partikel dapat dituliskan sebagai berikut :

$K + V = E$

$\frac{p^2}{2m} + V(x) = E$……………………………………………………….(2.3)

Pada ruas kiri, suku pertama menyatakan energi kinetik sedangkan suku kedua menyatakan energi potensial. Energi potensial secara umum didefinisikan sebagai energi yang dimiliki benda karena kedudukannya. Dalam sistem atom, energi potensial timbul akibat adanya gaya elektrostatis coulomb antara elektron dengan inti atom. Ruas kanan merupakan suatu tetapan yang menyatakan energi total (Ashby, 1970:166).

b. Linier dan bernilai tunggal

Dalam pengertian matematis persamaan Schrodinger haruslah “berperilaku baik”. Pemecahan persamaan Schrodinger harus memberikan informasi tentang probabilitas untuk menemukan partikelnya. Walaupun dapat pula probabilitas berubah secara kontinu dan partikelnya menghilang secara tiba – tiba dari suatu titik dan muncul kembali pada titik berikutnya, namun fungsinya haruslah bernilai tunggal artinya tidak boleh ada dua probabilitas untuk menemukan partikel di satu titik yang sama. Indikator dari sifat gelombang yang linier dan berkelakuan baik yaitu fungsi gelombangnya harus memiliki sifat superposisi gelombang (Krane, 1992:172).

c. Taat azas terhadap hipotesa de Broglie

Bentuk persamaan diferensial apapun harus taat azas dengan hipotesa de Broglie. Pemecahan secara matematis bagi sebuah partikel dengan momentum p harus berbentuk sebuah fungsi gelombang dengan panjang gelombang λ yang sama dengan h/p. sesuai persamaan (2.1) dan persamaan (2.3) dimana $p=\hbar k$ maka energi kinetik dari gelombang de Broglie partikel bebas dapat dirumuskan sebagai berikut :

$$K = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(2.4)$$

Persamaan Schrodinger dapat dibentuk dengan mengambil turunan kedua dari fungsi (2.2) terhadap x, sebagai berikut :

$$\frac{d^2\Psi(x,t)}{dx^2} = -k^2\,[A\sin(\omega t - kx) + B\cos(\omega t - kx)]$$

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -k^2\;\Psi(x,t) \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(2.5)$$

Dari persamaan (2.4) dapat diperoleh :

$$k^2 = \frac{2\,m\,(E - V_{(x)})}{\hbar^2}$$

Untuk kasus potensial tak bergantung waktu diperoleh $(x, t = 0) = \Psi(x)$:

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} = -\left[\frac{2\,m\,(E-V_{(x)})}{\hbar^2}\right]\Psi(x)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + (E-V_{(x)})\,\Psi(x) = 0 \quad \text{.......................................(2.6)}$$

Persamaan (2.6) merupakan persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu atau biasa dikenal dengan persamaan Schrodinger dalam keadaan tunak satu dimensi. Dalam bentuk tiga dimensi, persamaan (2.7) dapat dituliskan menjadi :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2\Psi_{(x,y,z)}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi_{(x,y,z)}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi_{(x,y,z)}}{\partial z^2}\right] + (E-V_{(x,y,z)})\,\Psi_{(x,y,z)} = 0$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right]\Psi_{(x,y,z)} + \left(E-V_{(x,y,z)}\right)\Psi_{(x,y,z)} = 0$$

Secara umum persamaan Schrodinger keadaan tunak dapat dituliskan :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_{(x,y,z)} + (E-V_{(x,y,z)})\,\Psi_{(x,y,z)} = 0 \quad \text{...............................(2.7)}$$

Dengan ∇^2 merupakan operator Laplace yang bergantung pada koordinat yang digunakan untuk memecahkan persamaan Schrodinger.

2.2.2 Persamaan Schrodinger pada Atom Berelektron Tunggal (Hidrogenik)

Persamaan Schrodinger untuk atom berelektron tunggal dapat diselesaikan dengan memandang bahwa atom memiliki simetri bola, sehingga persamaan Schrodinger harus disajikan dalam koordinat bola (tiga dimensi). Dengan demikian, operator Laplace ∇^2 dapat dituliskan :

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

dengan melakukan subtitusi persamaan diatas kedalam persamaan (2.7), maka diperoleh persamaan Schrodinger dalam keadaan tunak tiga dimensi yaitu :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}\Psi_{(r,\theta,\varphi)} + (E-V)\,\Psi_{(r,\theta,\varphi)} = 0$$

untuk sistem dua partikel dengan gaya sentral, maka persamaan diatas dapat dituliskan sebagai :

$$\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r_c{}^2}\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r_c{}^2\frac{\partial}{\partial r_c}\right) + \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}\Psi_{(r,\theta,\varphi)} + (E-V)\,\Psi_{(r,\theta,\varphi)} = 0 \text{(2.8)}$$

dengan r_c merupakan posisi pusat massa sistem yang dinyatakan sebagai :

$$r_c = \frac{r_1 m_1 + r_2 m_2}{m_1 + m_2}$$

$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ (Gasiorowicz, 1996:169) ……………………………….(2.9)[1]

dengan μ disebut dengan massa tereduksi.

Potensial untuk atom Hidrogen dengan Z=1 merupakan fungsi dari jarak terhadap titik asal yang diberikan :

$V(r) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}$ (Ashby, 1970:222)……………………………………..(2.10)

Untuk memcahkan persamaan (2.8) dapat digunakan metode pemisahan variabel sebagai berikut :

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

Atau dapat pula dinyatakan sebagai berikut :

$\Psi(r, \theta, \varphi) = R\Theta\Phi$ ……………………………………………………..(2.11)

Dengan subtitusi persamaan (2.10) dan (2.11) ke dalam persamaan (2.8) kemudian dikalikan dengan $\frac{2\mu r_c^2}{\hbar^2}$ maka dapat diperoleh :

$$\frac{d}{dr_c}\left(r_c^2 \frac{\partial R}{\partial r_c}\right)\Theta\Phi + \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)R\Phi + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}R\Theta + \frac{2\mu r_c^2}{\hbar^2}(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c})\,R\Theta\Phi = 0$$

Untuk penyederhanaan, tiap suku dibagi dengan $R\Theta\Phi$ dari persamaan (2.11), maka diperoleh :

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr_c}\left(r_c^2\frac{\partial R}{\partial r_c}\right) + \frac{1}{\Theta sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\Phi sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + \frac{2\mu r_c^2}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right) = 0 \quad (2.12)$$ [2]

Berdasarkan persamaan (2.12) terlihat bahwa suku pertama dan keempat hanya bergantung pada jari – jari r_c, suku kedua bergantung pada sudut θ dan suku ketiga bergantung pada φ. Penjumlahan suku – suku yang hanya bergantung pada jari – jari dan sudut θ maupun φ akan selalu bernilai tetap untuk sembarang nilai r, θ, φ (Purwanto, 2006:155).

Jika masing – masing suku sama dengan konstanta yang berharga $\pm l(l + 1)$, maka suku yang hanya bergantung jari – jari akan menjadi :

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr_c}\left(r_c^2\frac{\partial R}{\partial r_c}\right) + \frac{2\mu r_c^2}{\hbar^2}(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}) = l(l+1)$$

$\frac{d}{dr_c}\left(r_c^2\frac{\partial R}{\partial r_c}\right) + \frac{2\mu r_c^2}{\hbar^2}(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c})R = l(l+1)R$ ……………………….(2.13)[3]

---

[1] Pembuktian persamaan (2.9) terlampir pada lampiran B
[2] Pembuktian persamaan (2.12) terlampir pada lampiran C

sedangkan suku yang mengandung θ dan φ akan menjadi :

$$\frac{1}{\Theta sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Phi sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -l(l+1)$$

$$\frac{sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+l(l+1)sin^2\theta = 0$$

Sebagai penyederhanaan digunakan konstanta $-m^2$ dan m^2 sehingga diperoleh persamaan diferensial biasa :

$$\frac{sin\theta}{\Theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Phi}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+l(l+1)sin^2\theta = -m^2 + m^2 \quad \text{.....................(2.14)}$$

Melalui pemisahan variabel persamaan (2.14) dapat dijabarkan sebagai berikut :

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+m^2\,\Phi = 0 \quad \text{...(2.15)}$$

$$\frac{1}{sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+l(l+1)\Theta-\frac{m^2\Theta}{sin^2\theta} = 0 \quad \text{..................................(2.16)}$$

Persamaan (2.13), (2.15), dan (2.16) selanjutnya akan dijabarkan untuk memperoleh fungsi gelombang radial, fungsi gelombang polar, dan fungsi gelombang azimuth.

2.3 Solusi Persamaan Schrodinger pada Atom Berelektron Tunggal

Solusi persamaan Schrodinger merupakan solusi gabungan dari solusi radial, solusi polar, dan solusi azimuth yang diperoleh melalui metode pemisahan variabel. Solusi gabungan ketiganya secara matematis diungkapkan dalam persamaan (2.11). Solusi radial, polar, dan azimuth secara lengkap akan diungkapkan sebagai berikut :

2.3.1 Solusi Radial

Melalui Persamaan Radial (2.13) dapat diperoleh energi Eigen E. Untuk keadaan terikat yaitu keadaan dengan energi negatif E = - $|E|$, persamaan (2.13) dapat diselesaikan dengan menggunakan permisalan :

$$\rho = \left[\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}} r_c \quad \text{..(2.17)}$$

$$d\rho = \left[\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}} dr_c \quad \text{...(2.18)}$$

---

[3] Pembuktian persamaan (2.13) terlampir pada lampiran D

Subtitusikan persamaan (2.17) dan (2.18) ke persamaan (2.13) diperoleh :

$$\frac{d}{dr_c}\left(r_c^{\,2}\,\frac{\partial R}{\partial r_c}\right)+\frac{2\mu r_c^{\,2}}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right)R-l(l+1)R=0$$

$$\frac{1}{r_c^{\,2}}\frac{d}{dr_c}\left(r_c^{\,2}\,\frac{\partial R}{\partial r_c}\right)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r_c^{\,2}}\right)R=0$$

$$\frac{d}{\left[\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\right]^{-1}\rho^2 d\rho}\left[\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right]+\frac{2\mu}{\hbar^2}R\left[E+\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\left[\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\right]^{-\frac{1}{2}}\rho}-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{\left[\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\right]^{-1}\rho^2}\right]=0$$

Persamaan diatas dikalikan dengan $\left[\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\right]^{-1}$ sehingga dapat diperoleh :

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left[\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right]+\left[\frac{E}{4|E|}+\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\rho}\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\right]^{-\frac{1}{2}}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0 \quad \text{................(2.19)}$$

Untuk kasus energi terikat dimana E = $-|E|$ diperoleh :

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left[\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right]+\left[-\frac{1}{4}+\frac{e^2}{2\pi\epsilon_0}\frac{1}{\rho}\frac{\mu}{\hbar}\left[8\mu|E|\right]^{-\frac{1}{2}}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0$$

Sebagai penyederhanaan digunakan permisalan berikut :

$$\beta=\left[\frac{e^2}{2\pi\epsilon_0\hbar}\right]\left[\frac{\mu}{8|E|}\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left[\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right]+\left[-\frac{1}{4}+\frac{\beta}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R=0 \quad \text{....................................(2.20)}$$

Untuk menentukan solusi persamaan (2.20) akan diselediki terlebih dahulu perilaku persamaan tersebut pada dua daerah ekstrim yaitu daerah jauh sekali dan daerah pada pusat koordinat. Untuk daerah yang jauh sekali dari pusat koordinat dimana $\rho \to \infty$ diperoleh :

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}-\frac{1}{4}R=0$$

dengan solusi :

$$R \approx e^{-\frac{\rho}{2}} \quad \text{..(2.21)}$$

Untuk daerah di pusat koordinat atau pada titik asal diperoleh :

$$R=\frac{R(\rho)}{\rho}$$

$$R(\rho)=U$$

$$\frac{dR}{d\rho}=\frac{d}{d\rho}\left(\frac{U}{\rho}\right)=\frac{1}{\rho}\frac{dU}{d\rho}-\frac{1}{\rho^2}U$$

$$\frac{d}{d\rho}\left[\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right]=\frac{d}{d\rho}\left[\rho^2\left(\frac{1}{\rho}\frac{dU}{d\rho}-\frac{1}{\rho^2}U\right)\right]=\rho\frac{d^2U}{d\rho^2}$$

Dengan subtitusi R = $\frac{U}{\rho}$ maka persamaan (2.20) dapat dituliskan kembali menjadi :

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left[\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right]+\left[-\frac{1}{4}+\frac{\lambda}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R = 0$$

$$\frac{d^2U}{d\rho^2}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}U+\left(\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}\right)U = 0 \quad \text{...(2.22)}$$

Untuk limit $\rho \to \infty$ nilai $\left(\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}\right)U$ dapat diabaikan sehingga :

$$\lim_{\rho\to\infty}\frac{d^2U}{d\rho^2}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}+\left(\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}\right)U = \frac{d^2U}{d\rho^2}-\frac{l(l+1)}{\rho^2} = 0$$

Solusi dari persamaan diferensial orde dua diatas adalah :

$$U = \rho^{l+1}$$

Sehingga diperoleh :

$$R = \frac{U}{\rho} = \frac{\rho^{l+1}}{\rho} = \rho^l \quad \text{...(2.23)}$$

Dengan menggabungkan persamaan (2.21) dengan (2.23) akan diperoleh bahwa solusi umum merupakan perkalian antara persamaan (2.21) , (2.23), dan konstanta *Laguerre* L yang bergantung pada fungsi ρ dapat dituliskan L(ρ) :

$$R(\rho) = \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} L(\rho) \quad \text{...(2.24)}$$

Persamaan (2.24) dapat dijabarkan dengan menggunakan polynomial Laguerre dari persamaan (2.22) sebagai berikut :

$$\frac{d^2U}{d\rho^2}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}U+\left(\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}\right)U = 0$$

Keterangan : U = $\rho^{l+1} e^{-\frac{\rho}{2}}$ L(ρ)

Untuk suku pertama diperoleh :

$$\frac{d^2U}{d\rho^2} = L(\rho)\left[l(l+1)\rho^{(l-1)}e^{-\frac{\rho}{2}}-(l+1)\rho^l e^{-\frac{\rho}{2}}+\frac{1}{4}\rho^{(l+1)}e^{-\frac{\rho}{2}}\right]+$$

$$\frac{\partial L(\rho)}{\partial\rho}\left[2(l+1)\rho^l e^{-\frac{\rho}{2}}-\rho^{(l+1)}e^{-\frac{\rho}{2}}\right]+\frac{\partial^2 L(\rho)}{\partial\rho^2}\left[\rho^{(l+1)}e^{-\frac{\rho}{2}}\right] \quad \text{...........(2.25)}$$

Persamaan (2.20) dapat dituliskan kembali dalam bentuk :

$$L(\rho)\left[l(l+1)\rho^{(l-1)}e^{-\frac{\rho}{2}}-(l+1)\rho^l e^{-\frac{\rho}{2}}+\frac{1}{4}\rho^{(l+1)}e^{-\frac{\rho}{2}}\right]+\frac{\partial L(\rho)}{\partial\rho}\left[2(l+1)\rho^l e^{-\frac{\rho}{2}}-\rho^{(l+1)}e^{-\frac{\rho}{2}}\right]+\frac{\partial^2 L(\rho)}{\partial\rho^2}\left[\rho^{(l+1)}e^{-\frac{\rho}{2}}\right]-\frac{l(l+1)}{\rho^2}U+\left(\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}\right)U = 0 \quad (2.26)$$

Keterangan :

$$\frac{l(l+1)}{\rho^2}U = \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4}\right)U$$

$$\frac{l(l+1)}{\rho} + \frac{\rho}{4} = \beta = konstanta$$

Sebagai bentuk penyederhanaan kalikan semua suku dari persamaan (2.26) dengan $\rho^{-l}e^{\frac{\rho}{2}}$ sehingga dapat dituliskan kembali menjadi :

$$\rho\frac{\partial^2 L(\rho)}{\partial\rho^2} + \frac{\partial L(\rho)}{\partial\rho}\,[2(l+1) - \rho] + L(\rho)\,[\beta - (l+1)] = 0 \quad \text{.............(2.27)}$$

Solusi deret dari persamaan (2.27) diatas adalah :

$$\text{L} = \rho^s \sum_{s=0}^{\sim} a_s\,\rho^s \quad \text{...(2.28)}$$

Akan menghasilkan Rumus Rekursi :

$$a_{s+1} = \frac{s+l+1-\lambda}{(s+1)(s+2l+2)}\,a_s \quad \text{...(2.29)}$$

Deret akan menjadi berhingga jika β adalah bilangan bulat misalnya $\beta = n$, namun deret a_{s+1} akan menjadi nol jika $s = n - l - 1$. Sehingga $L(\rho)$ sesungguhya merupakan suatu deret polinomial. Untuk $\beta = n$, maka persamaan (2.27) akan menjadi :

$$\rho\frac{\partial^2 L(\rho)}{\partial\rho^2} + \frac{\partial L(\rho)}{\partial\rho}\,[2(l+1) - \rho] + L(\rho)\,[n - (l+1)] = 0 \quad \text{..............(2.30)}$$

Persamaan (2.30) merupakan persamaan diferensial *Laguerre Terasosiasi* yang mempunyai bentuk umum :

$$\rho\frac{\partial^2 L(\rho)}{\partial\rho^2} + [p+1-\rho]\frac{\partial L_q^p}{\partial\rho} + [q-p]\,L_q^p = 0$$

Solusinya disebut polinom Laguerre Terasosiasi L_q^p yang dapat diperoleh dari rumus Rodrigues berikut ini :

$$L_q^p = L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = (-1)^{2l+1}\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}e^{\frac{2Zr}{na_0}}\frac{d^{n+l}}{d\left(\frac{2Zr}{n\,a_0}\right)^{n+l}}\left(e^{-\frac{2Zr}{n\,a_0}}.\left(\frac{2Zr}{n\,a_0}\right)^{n-l-1}\right) \quad (2.31)$$

Solusi umum persamaan Radial diberikan :

$$\text{R}_{nl}(\text{r}) = \left[\left(\frac{2Z}{n\,a_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n\,[(n+l)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\frac{2Zr}{n\,a_0}\right]^l e^{-\frac{Zr}{n\,a_0}}L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad \text{(Singh, 2009:237)(2.32)}$$

2.3.2 Solusi Polar

Persamaan Polar (2.16) juga dikenal sebagai persamaan diferensial Legendre Terasosiasi. Solusi dari persamaan tersebut diperoleh menggunakan metode Frobenius dan diberikan oleh deret berhingga yang dikenal sebagai polinom Legendre terasosiasi. Bila konstanta yang dipilih pada persamaan (2.16) bukan $\pm l(l+1)$ maka akan diperoleh solusi berupa deret tak hingga.

Solusi dari persamaan (2.16) dapat dituliskan :

$$\frac{1}{sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\theta}{\partial\theta}\right)+l(l+1)\theta-\frac{m^2\theta}{sin^2\theta}=0$$

$$\Theta(\theta) = \Theta_{lm}(\theta) = N_{lm}\,P_l^m(cos\,\theta)\;\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(2.33)$$ [4]

Dengan N_{lm} merupakan konstanta normalisasi :

$$(\Theta_{lm}, \Theta_{l'm'}) = N_{lm}{*}\,N_{l'm'}\int_0^\pi P_l^m(cos\,\theta)\,P_{l'}^{m'}(cos\,\theta)sin\theta\;d\theta = \delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

Dengan menggunakan sifat ortogonalitas diperoleh :

$$\int_0^\pi P_l^m(cos\,\theta)\,P_{l'}^{m'}(cos\,\theta)sin\theta\;d\theta = \frac{2}{2l+1}\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}\delta_{ll'}\delta_{mm'}$$

Maka diperoleh nilai konstanta Normalisasi sebagai berikut :

$$N_{lm}{*}\,N_{l'm'}\int_0^\pi P_l^m(cos\,\theta)\,P_{l'}^{m'}(cos\,\theta)sin\theta\;d\theta = 1$$

$$(N_{lm})^2\left[\frac{2}{2l+1}\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}\right]=1$$

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\;\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(2.34)$$ [5]

Subtitusi persamaan (2.34) ke dalam persamaan (2.33) sehingga diperoleh:

$$\Theta_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\,P_l^m(cos\,\theta)\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(2.35)$$

Bentuk eksplisit dari polinom $P_l^m\ (cos\,\theta)$ dapat diperoleh melalui Rumus Rodrigues berikut :

$$P_l^m(cos\,\theta) = \frac{1}{2^l l!}(1)(1-cos^2\theta)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{l+|m|}}{dcos^{l+|m|}\theta}(cos^2\theta-1)^l\;\ldots\ldots(2.36)$$

Dengan demikian persamaan (2.35) sebagai solusi umum persamaan Polar dapat dituliskan menjadi :

$$\Theta_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\left[\frac{1}{2^l l!}(1)(1-cos^2\theta)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{l+|m|}}{dcos^{l+|m|}\theta}(cos^2\theta-1)^l\right]\quad(2.37)$$

---

[4] Pembuktian persamaan (2.33) terlampir pada lampiran E

[5] Pembuktian persamaan (2.34) terlampir pada lampiran F

2.3.3 Solusi Azimuth

Persamaan Azimuth (2.15) menggambarkan gerak rotasi elektron disekitar sumbu z dengan batas rotasi antara 0 sampai 2π. Konstanta negatif $-m^2$ dipilih agar memberikan solusi berupa fungsi sinusoidal dan periodik. Jika digunakan konstanta positif m^2 maka akan diperoleh solusi berupa fungsi eksponensial.

Solusi dari persamaan (2.15) yang merupakan persamaan diferensial biasa dapat dicari dengan menggunakan permisalan $\frac{d}{d\varphi} = D$ sebagai berikut :

$$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m^2\,\Phi = 0$$

$$D^2\Phi + m^2\,\Phi = 0$$

$$\mathrm{D} = \pm\, im$$

Kedua ruas dikalikan dengan Φ maka diperoleh :

$$\frac{d\Phi}{\Phi} = \pm\, imd\varphi$$

Dengan mengintegralkan kedua ruas didapatkan solusi sebagai berikut :

$$\Phi = \Phi_0\, e^{\pm im\varphi} \quad \text{...(2.38)}$$

Dimana dimiliki suatu hubungan yaitu :

$$\Phi\,(\varphi + 2\pi) = \Phi(\varphi)$$

$$e^{-im(\varphi+2\pi)} = e^{-im(\varphi)} = e^{-im(2\pi)} = 1$$

untuk setiap bilangan bulat dipenuhi $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$ (Griffits, 1995:125).

Digunakan permisalan bahwa $\Phi_0 = A$ untuk menyatakan amplitudo gelombang, yang besarnya dapat ditentukan dengan menggunakan syarat Normalisai sebagai berikut :

$$A = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}$$

Dengan demikian, persamaan (2.38) sebagai solusi Azimuth dapat ditulisakan kembali menjadi :

$$\Phi = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\, e^{\pm im\varphi} \quad \text{...(2.39)}$$ [6]

dengan m merupakan bilangan bulat magnetik.

---

[6] Pembuktian persamaan (2.39) terlampir pada lampiran G

2.4 Bilangan Kuantum

Menurut teori Bohr, orbit elektron berbentuk lingkaran dengan jari – jari tertentu. Orbital adalah daerah 3 dimensi dengan peluang terbesar menemukan elektron. Setiap orital mempunyai ukuran, bentuk, orientasi tertentu dalam ruangan yang dinyatakan dengan bilangan kuantum.

2.4.1 Bilangan Kuantum Utama (n)

Bilangan kuantum utama (n) menyatakan ukuran dan tingkat energi orbital. Nilai bilangan kuantum utama berupa bilangan bulat positif dan tidak nol *n = 1,2,3* dan seterusnya. Semakin besar nilai *n*, semakin besar ukuran orbital dan semakin tinggi tingkat energinya. Kelompok orbital dengan harga *n* yang sama, akan membentuk kulit atom.

Dengan menganggap bahwa elektron terikat sebagai atom, maka nilai eigen E harus berharga negatif (E = $-|E|$). Dan sebelumnya telah memiliki harga $\rho = \frac{r_c}{\hbar}\sqrt{8\,\mu\,|E|} = \frac{\mu\, e^2 r_c}{2n\pi\epsilon_0\hbar^2}$ maka diperoleh persamaan energi sebagai berikut :

$$E = -\frac{\mu e^4}{32\pi^2{\epsilon_0}^2\,\hbar^2}\left(\frac{1}{n^2}\right) \quad \text{………………………………………………}(2.40)$$

2.4.2 Bilangan Kuantum Azimuth *(l)*

Bilangan kuantum Azimuth menyatakan bentuk lintasan atau orbital elektron. Nilai bilangan kuantum Azimuth merupakan bilangan cacah yaitu *l = 0* sampai *l = n-1*. Bilangan kuantum Azimuth ini menyatakan kecepatan sudut dari elektron. Besar momentum sudut elektron dituliskan :

L = $\sqrt{l(l+1)}\hbar$ (Krane, 2011:201)…………………………………...(2.41)

Tabel 2.1 Notasi simbol keadaan atomik bilangan kuantum *n* dan *l*

Kulit Elektron	Bilangan kuantum utama *(n)*	Bilangan kuantum Azimuth *(l)*					
		0 s	1 p	2 d	3 f	4 g	5 h
K	1	1s					
L	2	2s	2p				

M	3	3s	3p	3d		
N	4	4s	4p	4d	4f	
O	5	5s	5p	5d	5f	5g

(Ohno, 2004:84).

2.4.3 Bilangan Kuantum Magnetik *(m_l)*

Bilangan kuantum magnetik menyatakan orientasi ruang orbital sehingga disebut juga bilangan kuantum orientasi orbital. Untuk setiap harga *l*, akan mempunyai harga *m* sebanyak *2l + 1*. Rentang nilai *m* = - *l* hingga *m* = +*l* termasuk nol (*-l, …,0, …+l).*

2.5 Teori Gangguan

Jika sebuah persamaan sangat sulit untuk dipecahkan secara langsung, solusi sebenarnya dapat dicari melalui solusi aproksimasi dari sebuah persamaan yang disederhanakan dengan kondisi bahwa solusi aproksimasi itu diketahui atau dapat dengan mudah diperoleh. Cara yang demikian itu, berdasarkan teori gangguan, sering digunakan untuk perhitungan-perhitungan dalam teori kuantum. Teori gangguan diterapkan pada banyak masalah untuk memperkirakan perubahan tingkat energi dan fungsi gelombang yang berhubungan dengan tambahan variasi yang disebabkan oleh interaksi antar partikel dan juga medan listrik atau magnet (Ohno, 2004:131).

2.5.1 Teori Gangguan untuk Sistem tak Berdegenerasi dalam keadaan Tunak

Sekarang akan disinggung teori gangguan tak bergantung waktu untuk sistem tak berdegenarasi yang menjadi fokus masalah dalam penelitian ini. Untuk kasus ini diasumsikan bahwa Hamiltonian pengganggu sangat kecil bila dibandingkan dengan Hamiltonian awal yaitu Hamiltonian sebelum ada gangguan. Pada awalnya sistem memiliki Hamiltonian $\hat{H}^{(0)}$ dengan fungsi – fungsi eigen ortonormal $\{\Psi_n{}^{(0)}\}$ yang telah diketahui :

$$\hat{H}^{(0)}\Psi_n{}^{(0)} = E_n{}^{(0)}\Psi_n{}^{(0)} \quad \text{…………………………………………….(2.42)}$$

$$\int \Psi_n{}^{(0)*}\,\Psi_m{}^{(0)} dV = \delta_{mn} \quad \text{……………………………………………(2.43)}$$

dimana jika $E_n{}^{(0)} \neq E_m{}^{(0)}$ sistem dikatakan tidak berdegenerasi. Pada kasus ini fungsi eigen dan energi eigen dari Hamiltonian total tidak jauh berbeda dengan fungsi eigen dan energi eigen dari Hamiltonian awal. Misalkan Hamiltonian sistem mendapat tambahan misalnya $\widehat{G} \ll \widehat{H}$ dapat dituliskan menjadi :

$$\widehat{H} = \widehat{H}^{(0)} + \gamma\widehat{G} \quad \text{...(2.44)}$$

Misalkan fungsi – fungsi eigen dari Hamiltonian total H adalah $\{\Psi_n\}$, dituliskan :

$$\widehat{H}\Psi_n = \left(\widehat{H}^{(0)} + \gamma\widehat{G}\right)\Psi_n = E_n\Psi_n$$

Karena gangguan cukup kecil, maka gangguan itu hanya akan menimbulkan sedikit perubahan dari $\Psi_n{}^{(0)}$ menjadi Ψ_n sedangkan $E_n{}^{(0)}$ menjadi E_n. Untuk memperoleh koreksi dapat dilakukan dengan ekspansi :

$$\Psi_n = \Psi_n{}^{(0)} + \sum_{m=1}\gamma^m\Phi_n{}^{(m)} \quad \text{..(2.45)}$$

$$E_n = E_n{}^{(0)} + \sum_{m=1}\gamma^m\epsilon_n{}^{(m)} \quad \text{..(2.46)}$$

(m) menyatakan order koreksi atau tingkat ketelitian.

Setiap $\Phi^{(m)}$ dan $\epsilon^{(m)}$ tidak bergantung pada γ dan setiap $\Phi^{(m)}$ dipilih orthogonal terhadap $\Psi_n{}^{(0)}$. Subtitusi persamaan (2.45) dan (2.46) ke persamaan energi, diperoleh :

$$\widehat{H}^{(0)}\left[\Psi_n{}^{(0)} + \sum_{m=1}\gamma^m\Phi_n{}^{(m)}\right] + \gamma\widehat{G}\left[\Psi_n{}^{(0)} + \sum_{m=1}\gamma^m\Phi_n{}^{(m)}\right] =$$

$$\left[E_n{}^{(0)} + \sum_{m=1}\gamma^m\epsilon_n{}^{(m)}\right]\left[\Psi_n{}^{(0)} + \sum_{m=1}\gamma^m\Phi_n{}^{(m)}\right] \text{ (Griffits, 1995:222)}$$

$$\text{...(2.47)}$$

Ekspansi dari persamaan diatas akan menghasilkan :

$$\widehat{H}^{(0)}\Psi_n{}^{(0)} + \widehat{H}^{(0)}\left[\gamma^1\Phi_n{}^{(1)} + \gamma^2\Phi_n{}^{(2)} + \gamma^3\Phi_n{}^{(3)}\right] + \gamma\widehat{G}\,\Psi_n{}^{(0)} +$$

$$\gamma\widehat{G}\left[\gamma^1\Phi_n{}^{(1)} + \gamma^2\Phi_n{}^{(2)} + \gamma^3\Phi_n{}^{(3)}\right] = E_n{}^{(0)}\Psi_n{}^{(0)} + E_n{}^{(0)}\left[\gamma^1\Phi_n{}^{(1)} +\right.$$

$$\left.\gamma^2\Phi_n{}^{(2)} + \gamma^3\Phi_n{}^{(3)}\right] + \Psi_n{}^{(0)}\left[\gamma^1\epsilon_n{}^{(1)} + \gamma^2\epsilon_n{}^{(2)} + \gamma^3\epsilon_n{}^{(3)}\right] +$$

$$\left[\gamma^1\epsilon_n{}^{(1)} + \gamma^2\epsilon_n{}^{(2)} + \gamma^3\epsilon_n{}^{(3)}\right]\left[\gamma^1\Phi_n{}^{(1)} + \gamma^2\Phi_n{}^{(2)} + \gamma^3\Phi_n{}^{(3)}\right]$$

Dengan menyamakan kedua ruas diperoleh beberapa persamaan koreksi energi :

$$\left(\widehat{H}^{(0)} - E_n{}^{(0)}\right)\Psi_n{}^{(0)} = 0$$

$$\left(\widehat{H}^{(0)} - E_n{}^{(0)}\right)\Phi_n{}^{(1)} = -\widehat{G}\,\Psi_n{}^{(0)} + \epsilon_n{}^{(1)}\Psi_n{}^{(0)}$$

$(\hat{H}^{(0)} - E_n{}^{(0)})\Phi_n{}^{(2)} = -\hat{G}\,\Phi_n{}^{(1)} + \epsilon_n{}^{(2)}\Psi_n{}^{(0)} + \epsilon_n{}^{(1)}\Phi_n{}^{(1)}$

$(\hat{H}^{(0)} - E_n{}^{(0)})\Phi_n{}^{(3)} = -\hat{G}\,\Phi_n{}^{(2)} + \epsilon_n{}^{(3)}\Psi_n{}^{(0)} + \epsilon_n{}^{(2)}\Phi_n{}^{(1)} + \epsilon_n{}^{(2)}\Phi_n{}^{(2)}$(2.48)

Keempat persamaan diatas menyatakan persamaan umum fungsi gelombang dan energi koreksi untuk beberapa order. Dari persamaan kedua dapat dijabarkan untuk memperoleh persamaan energi terkoreksi order-1 sebagai berikut:

$\int \Psi_n{}^{(0)*}\,[\hat{H}^{(0)} - E_n{}^{(0)}]\,\Phi_n{}^{(1)} dV$=- $\int \Psi_n{}^{(0)*}\,\hat{G}\Psi_n{}^{(0)}\,dV + \epsilon_n{}^{(1)}\int \Psi_n{}^{(0)*}\,\Psi_n{}^{(0)}\,dV$

$\int[\hat{H}^{(0)} - E_n{}^{(0)}]\Psi_n{}^{(0)*}\,\Phi_n{}^{(1)}\,dV$ = - $\hat{G}_{nn} + \epsilon_n{}^{(1)}$

$\epsilon_n{}^{(1)} = \hat{G}_{nn} = \int \Psi_n{}^{(0)}\,\hat{G}\Psi_n{}^{(0)}\,dV$ (Purwanto, 2006:234)...................(2.49)

Persamaan (2.49) diatas merupakan persamaan koreksi order-1 bagi $\epsilon_n{}^{(0)}$.

Dapat dimisalkan untuk, $\Phi_n{}^{(1)} = \sum_{m\neq n} C_{nm}\,\Psi_m{}^{(0)}$ diperoleh :

$\sum_{m\neq n} C_{nm}\,[\hat{H}^{(0)} - E_n{}^{(0)}]\Psi_m{}^{(0)}$ = -$\hat{G}\Psi_n{}^{(0)} + \epsilon_n{}^{(1)}\Psi_n{}^{(0)}$

Untuk $\hat{H}^{(0)} = E_m{}^{(0)}$

$\sum_{m\neq n} C_{nm}\,[E_m{}^{(0)} - E_n{}^{(0)}]\Psi_m{}^{(0)}$ = - $\hat{G}\Psi_n{}^{(0)} + \epsilon_n{}^{(1)}\Psi_n{}^{(0)}$

Dapat diekspansikan menjadi :

$\sum_{m\neq n} C_{nm}\,[E_m{}^{(0)} - E_n{}^{(0)}]\int \Psi_k{}^{(0)*}\,\Psi_m{}^{(0)}\,dV$=-$\int \Psi_k{}^{(0)*}$

$\hat{G}\Psi_n{}^{(0)}\,dV + \epsilon_n{}^{(1)}\int \Psi_k{}^{(0)*}\,\Psi_n{}^{(0)}\,dV$

$\sum_{m\neq n} C_{nm}\,[E_m{}^{(0)} - E_n{}^{(0)}]\delta_{km} = -\hat{G}_{kn} + \epsilon_n{}^{(1)}\delta_{kn}$

Untuk $E_m{}^{(0)} = E_k{}^{(0)}$ maka dapat dituliskan kembali menjadi :

$C_{nm}[E_m{}^{(0)} - E_n{}^{(0)}] = -\hat{G}_{kn}$

$C_{nm}[E_k{}^{(0)} - E_n{}^{(0)}] = -\hat{G}_{kn}$

$C_{nm} = \frac{-\hat{G}_{kn}}{E_k{}^{(0)} - E_n{}^{(0)}} = \frac{\hat{G}_{kn}}{E_n{}^{(0)} - E_k{}^{(0)}}$

Fungsi gelombang terkoreksi order-1 dapat dituliskan menjadi :

$\Phi_n{}^{(1)} = \sum_{m\neq n}\frac{\hat{G}_{kn}}{E_n{}^{(0)} - E_k{}^{(0)}}\Psi_k{}^{(0)}$ ....(2.50)

Persamaan (2.50) diatas merupakan persamaan koreksi energi order-1 bagi $\Psi_n{}^{(0)}$.

Selanjutnya akan dicari persamaan umum energi dan fungsi gelombang untuk koreksi order-2. Tinjau kembali persamaan (2.48) yang dapat pula dijabarkan sebagai berikut :

$$\int [\hat{H}^{(0)} - E_n{}^{(0)}]\Psi_n{}^{(0)*} \ \Phi_n{}^{(2)} dV = -\sum_{m\neq n} C_{nm} \int \Psi_n{}^{(0)*} \hat{G}\, \Psi_m{}^{(0)} dV \ +$$
$$\epsilon_n{}^{(2)} + \epsilon_n{}^{(1)} \sum_{m\neq n} C_{nm} \int \Psi_n{}^{(0)*}\, \Psi_m{}^{(0)}\, dV$$

Dengan menggunakan aturan delta kronecker persamaan diatas dapat dituliskan menjadi :

$$0 = -\sum_{m\neq n} C_{nm}\, \hat{G}_{nm} + \epsilon_n{}^{(2)} + 0$$
$$\epsilon_n{}^{(2)} = \sum_{m\neq n} C_{nm}\, \hat{G}_{nm}$$

Keterangan :

$$C_{nm} = \frac{-\hat{G}_{kn}}{E_k{}^{(0)} - E_n{}^{(0)}} = \frac{\hat{G}_{kn}}{E_n{}^{(0)} - E_k{}^{(0)}} = \frac{\hat{G}_{mn}}{E_n{}^{(0)} - E_m{}^{(0)}}$$

Maka diperoleh persamaan koreksi energi order-2 bagi $\epsilon_n{}^{(0)}$ sebagai berikut :

$$\boldsymbol{\epsilon_n{}^{(2)} = \sum_{m\neq n} \left[\frac{\hat{G}_{mn}}{E_n{}^{(0)} - E_m{}^{(0)}}\right] \hat{G}_{nm}} \quad \text{...(2.51)}$$

Dapat dimisalkan $\Phi_n{}^{(2)} = \sum_{m\neq n} a_{nm}\, \Psi_m{}^{(0)}$, diperoleh :

$$\sum_{m\neq n} a_{nm} \left(\hat{H}^{(0)} - E_n{}^{(0)}\right) \Psi_m{}^{(0)} = -\hat{G}\, \Phi_n{}^{(1)} + \epsilon_n{}^{(2)} \Psi_n{}^{(0)} + \epsilon_n{}^{(1)} \Phi_n{}^{(1)}$$
$$\sum_{m\neq n} a_{nm} \int \Psi_l{}^{(0)*} \left(\hat{H}^{(0)} - E_n{}^{(0)}\right) \Psi_m{}^{(0)}\, d\tau = -\int \Psi_l{}^{(0)*} \ \hat{G}\, \Phi_n{}^{(1)} d\tau \ +$$
$$\epsilon_n{}^{(2)} \int \Psi_l{}^{(0)*}\ \Psi_n{}^{(0)} d\tau + \epsilon_n{}^{(1)} \int \Psi_l{}^{(0)*}\ \Phi_n{}^{(1)}\ d\tau$$

Dengan menggunakan aturan Delta Kronecker dapat disederhanakan menjadi :

$$a_{nl}\left(E_l{}^{(0)} - E_n{}^{(0)}\right) = -\sum_{m\neq n} C_{nm}\, \hat{G}_{lm} + \epsilon_n{}^{(1)} C_{nl}$$
$$a_{nl} = \sum_{m\neq n} \frac{\hat{G}_{mn}\, \hat{G}_{lm}}{\left(E_n{}^{(0)} - E_m{}^{(0)}\right)\left(E_n{}^{(0)} - E_l{}^{(0)}\right)} - \frac{\hat{G}_{nn}\, \hat{G}_{ln}}{\left(E_n{}^{(0)} - E_l{}^{(0)}\right)^2}$$

Untuk *m*=*l* dapat diperoleh fungsi gelombang order-2 sebagai berikut :

$$\Phi_n{}^{(2)} = \sum_{l\neq n} a_{nl}\, \Psi_l{}^{(0)}$$
$$\Phi_n{}^{(2)} = \sum_{l\neq n} \left[\sum_{m\neq n} \frac{\hat{G}_{mn}\, \hat{G}_{lm}}{\left(E_n{}^{(0)} - E_m{}^{(0)}\right)\left(E_n{}^{(0)} - E_l{}^{(0)}\right)} - \frac{\hat{G}_{nn}\, \hat{G}_{ln}}{\left(E_n{}^{(0)} - E_l{}^{(0)}\right)^2}\right] \Psi_l{}^{(0)} \quad (2.52)$$

Persamaan (2.52) merupakan persamaan koreksi order-2 untuk $\Psi_n{}^{(0)}$

2.5.2 Teori Gangguan untuk Sistem Berdegenerasi dalam keadaan Tunak

Sekarang ditinjau sebuah sistem dengan degenerasi lipat-*f* dalam energi E^0. Keadaan – keadaan terdegenerasi diberi nomor dari 1 hingga *f* dan energi – energi dari keadaan terdegenerasi ini ditulis dengan $E^0{}_1 = E^0{}_2 = E^0{}_3 = \ldots E^0{}_f$. Untuk setiap keadaan yang lain, sebuah nomor *n* yang lebih besar dari *f* digunakan. Untuk tingkat – tingkat energi $n > f$, $\{E_{n,}\Psi_n\}$ diperoleh dengan menggunakan metoda yang telah dipelajari sebelumnya. Tingkat – tingkat energi dari 1 hingga *f* harus diperlakukan secara berbeda, dengan mencatat bahwa $E_n \rightarrow E_n{}^0$ dan $\Psi_n \rightarrow \sum_{i=1}^{f} c_{in}\Psi_i{}^0$, berkaitan dengan $\lambda \rightarrow 0$ (Ohno, 2004:135).

Untuk teori Gangguan pada sistem berdegenerasi, juga digunakan Hamiltonian sebagi berikut :

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \gamma\hat{G}$$

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}'$$

Dimana $\hat{H}'$ juga sangat kecil bila dibandingkan dengan $\hat{H}^{(0)}$. Hal ini mirip untuk kasus non degenerasi akan tetapi $\hat{H}^{(0)}$ memiliki fungsi eigen yang terdegerasi. Misalkan keadaan dasar dari $\hat{H}^{(0)}$ adalah terdiri dari *q* buah (lipat) degenerasi. Tujuan utama dari teori perturbasi degenerasi adalah untuk menghitung tingkat – tingkat energi baru yang dihasilkan akibat adanya degenerasi. Kasus degenerasi terjadi apabila terdapat beberapa kombinasi dari beberapa bilangan kuantum berbeda yang memiliki energi yang sama. Misalkan seperti pada kasus Non degenerasi, diekspansikan orde pertama fungsi gelombang $\hat{H}'$ dalam bentuk eigen $\hat{H}^{(0)}$ sebagai berikut :

$$|\varphi_n{}^{(i)}\rangle = \sum_i c_{ni}\,|\varphi_i{}^{(0)}\rangle$$

Dimana koefisien – koefisien c_{ni} ditentukan oleh :

$$c_{ni} = \frac{H_{in}}{E_n{}^0 - E_i{}^0}$$

Jika $E_i{}^{(0)}$ adalah *q* buah degenerasi, berarti :

$$E_1{}^{(0)} = E_2{}^{(0)} = E_3{}^{(0)} = E_4{}^{(0)} = \cdots E_q{}^{(0)}$$

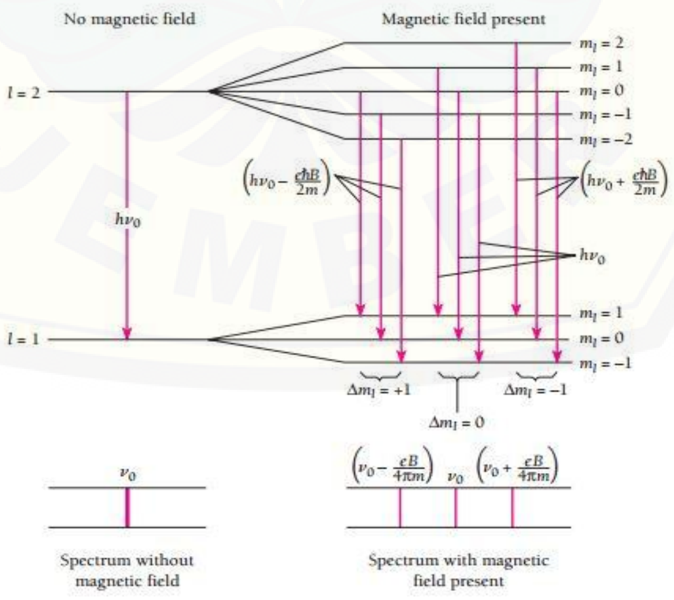
Dan nilai c_{ni} adalah tak berhingga untuk nilai n, i $\leq q$. Keadaan ini dapat diperbaiki dengan cara membuat himpunan fungsi basis yang baru dari himpunan

$\{\varphi_n{}^{(0)}\}$ yang mendiagonalisasi sub-matrik H'_{in}. Dengan elemen – elemen diluar bernilai nol, akan diperoleh koefisien – koefisien (c_{ni}) yang berkaitan dengan elemen – elemen tersebut adalah juga bernilai nol, dan dapat diselesaikan seperti dalam kasus non-degenerasi.

2.6 Perubahan Keadaan oleh Gangguan

2.6.1 Efek Zeeman

Ketika sebuah atom hidrogen ditempatkan dalam medan magnet luar yang seragam maka akan terjadi pergeseran terhadap level – level energinya. Peristiwa ini dikenal sebagai *Efek Zeeman*. Dalam penelitian ini pengaruh *spin intrinsik* dari elektron dapat diabaikan. Efek Zeeman tanpa memperhitungkan pengaruh spin intrinsik elektron disebut *Normal Zeeman Effect.* Sedangkan efek Zeeman dengan memperhitungkan pengaruh spin intrinsik elektron disebut *Anomalous Zeeman Effect.* Gambar berikut menunjukkan peristiwa *Normal Zeeman Effect* pada atom Hidrogen. Pada gambar sebelah kiri ditunjukkan bahwa ketika $\vec{B} = 0$ level energi akan terdegenerasi menurut bilangan kuantum *l* dan *m.* Sedangkan pada gambar kanan ditunjukkan bahwa ketika $\vec{B} \neq 0$ energi terdegerasi dimana harga bilangan kuantum *l* berubah sedangkan harga bilangan kuantum *m* tetap.



Gambar 2.1 *Normal Zeeman Effect* pada atom Hidrogen (Beiser, 2003:225)

2.6.2 Efek Stark

Jika sebuah atom yang berelektron satu ditempatkan di dalam sebuah medan listrik sebesar ± 100.000 volt/cm maka dapat diamati terjadinya pemisahan dari energi eigen. Gejala ini untuk pertama kali diamati oleh Stark pada tahun 1913 dan sering disebut efek Stark. Stark mengamati pemisahan dari deret Balmer dalam sebuah medan listrik sebesar 100.000 volt/cm. Hamiltonian dari atom berelektron satu yang terletak didalam sebuah medan listrik yang tetap dan homogen E dan sejajar sumbu z adalah :

$$H = H_0 + H'$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} - eEz\, cos\theta$$

dimana, θ adalah sudut antara medan listrik E dengan sumbu- z positif. Fungsi eigen dari Hamiltonian tak terganggu (H_0) adalah degenerasi sebanyak n^2 lipat (Liboff, 1980:568).

2.6.3 Probabilitas Transisi dan Aturan Seleksi Spektral

Suatu medan listrik yang berosilasi, jika berinteraksi dengan elektron akan menggeser posisi elektron dari posisi stasionernya. Pergerseran itu akan menimbulkan suatu momen dipol. Selanjutnya dipol itu berinteraksi dengan medan dan menimbulkan Hamiltonian. Misalnya,

medan listrik : $\vec{E} = E_o \cos \omega t$

dipol listrik : $\vec{\mu} = e.\vec{r}$

interaksi dipol dalam medan menimbulkan Hamiltonian :

$$\widehat{H_o} = \vec{\mu}.\vec{E} = \text{e } E_o r \cos \omega t$$

Interaksi itu menimbulkan translasi elektron (berpindah keadaan) dari keadaan awal Ψ_m ke keadaan akhir Ψ_n. Probabilitas transisi dapat diungkapkan sebagai berikut :

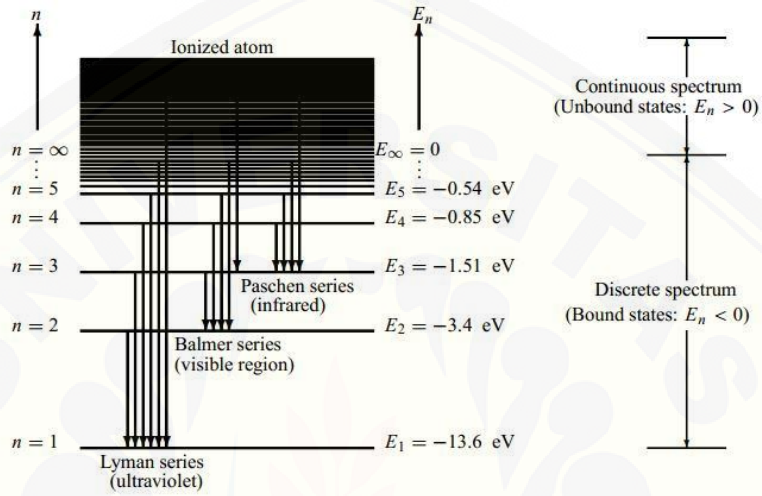
$$P_{mn} = \left| e \int \Psi_m{}^*(r)\left[\vec{E_o}.\vec{r}\right]\Psi_n(r)dV \right|^2$$

$$P_{mn} = \left| e \int \Psi_m{}^*(r)\left[E_{ox}\, x + E_{oy}\, y + E_{oz}\, z\right]\Psi_n(r)dV \right|^2$$

$$P_{mn} = \sum_\alpha E_{o\alpha}{}^2 \left|M_{mn}{}^{(\alpha)}\right|^2 \text{ dengan } \alpha = x, y, z$$

dimana : $M_{mn}{}^{(x)} = e\int \Psi_m{}^*(r)x\,\Psi_n(r)dV$

disebut sebagai komponen-*x* dari momen transisi. Transisi dari suatu keadaan Ψ_m ke keadaan akhir Ψ_n disebut terlarang jika $M_{mn} = 0,$ akan tetapi sebaliknya transisi akan diperbolehkan jika $M_{mn} \neq 0$. Transisi dari keadaan dasar $\Psi_1$ke keadaan yang lebih tinggi dilukiskan :



Gambar 2.2 Level – level transisi energi atom Hidrogen (Zettili, 2009:33)

2.7 Ion Lithium

Ion Lithium (Li^{2+}) terbentuk akibat logam Lithium kehilangan dua dari tiga elektron valensinya. Lithium merupakan logam yang memiliki potensial oksidasi paling tinggi diantara unsur alkali lainnya. Selain itu Lithium juga sangat mudah bereaksi dengan air membentuk Lithium hidroksida dan gas hidrogen.

Unsur Lithium memiliki ciri-ciri sebagai berikut :

a. Massa atom 6,941 sma, nomor atom 3, jari-jari atom 1,55 Å
b. Mempunyai struktur Kristal bcc dengan volume atom 13,10 cm3/mol
c. Titik didih 1615 K dan titik lebur 453,7 K
d. Massa jenis 0,53 gram/cm3, kapasitas panas 3,582 J/gK
e. Konduktivitas listrik $11{,}7\times10^{6}$ ohm/cm^{-1} dan konduktivitas kalor 84,7 W/m K

Dalam kehidupan sehari – hari, Lithium banyak digunakan sebagai baterai untuk berbagai peralatan elektronika. Baterai ion Lithium dapat diklasifikasikan menjadi dua jenis yaitu baterai sel primer (*unrechargeable*) dan baterai sel sekunder (*rechargeable*). Prinsip kerja dari kedua jenis baterai akan diuraikan sebagai berikut :

1. Baterai Sel Primer (*unrechargeable*)

   Baterai ini tidak dapat diisi ulang. Jenis baterai ini menggunakan logam Lithium sebagai anoda dan MnO_2 sebagai katoda, dengan garam Lithium seperti $LiClO_4$ sebagai elektrolit dalam pelarut bebas air. Baterai sel primer bekerja dengan menggunakan prinsip sel *volta* dimana pada sel primer energi akibat reaksi kimia diubah menjadi energi listrik.

2. Baterai Sel Sekunder (*rechargeable*)

   Baterai jenis ini merupakan jenis baterai isi ulang dimana ion Lithium bergerak antara anoda dan katoda pada sel sekunder, reaksi kimia antara anoda dan katode bersifat tidak spontan. Reaksi hanya dapat berlangsung apabila terdapat aliran listrik melalui proses elektrolisis. Pada sel sekunder yang berperan sebagai anoda bukan logam Lithium seperti pada sel primer melainkan ion Lithium. Prinsip kerja penggunaan ion Lithium Li^{2+} dalam baterai mengacu pada konsep eksitasi elektron. Dalam penggunaannya, elektron akan menyerap energi dari kapasitor yang disimpan dalam bentuk medan lsitrik. Akibatnya elektron akan mengalami eksitasi dari dari tingkat energi rendah misalnya $n=1$ menuju kulit lain dengan tingkat energi yang lebih tinggi $n>1$. Setelah mencapai kulit terluar elektron kemudian akan terlepas dan menjadi elektron bebas. Adanya elektron bebas ini akan menghasilkan arus listrik yang digunakan prosesor untuk mengoperasikan piranti elektronik.

   Dalam penelitian ini akan dikaji pengaruh medan elektrostatis terhadap perilaku elektron ion Lithium Li^{2+}. Secara matematis peristiwa tersebut dapat dianalisis menggunakan teori Gangguan. Teori Gangguan yang digunakan bersifat *Non Degenerasi* dan tidak bergantung waktu. Kajian dilakukan untuk menentukan pengaruh medan elektrostatis terhadap fungsi gelombang dan energi ion Lithium pada keadaan dasar hingga koreksi order-2.

BAB 3. METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini akan dilakukan pada Semester 8 bulan Februari sampai bulan Maret 2016 di Laboratorium Fisika Lanjut, Program Studi Pendidikan Fisika, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Jember.

3.2 Definisi Operasional

3.2.1 Fungsi Gelombang ion Lithium (Li^{2+}) dalam Medan Elektrostatis

Fungsi gelombang ion Lithium (Li^{2+}) merupakan solusi dari persamaan Schrodinger berupa persamaan diferensial parsial orde dua untuk atom berelektron tunggal, dengan menggunakan transformasi koordinat bola (R,Θ,φ). Fungsi gelombang ion Lithium dalam medan elektrostatis merupakan fungsi gelombang terkoreksi akibat adanya gangguan berupa medan elektrostatis $\vec{E}$ yang ditimbulkan oleh interaksi antar elektron.

3.2.2 Energi Gelombang ion Lithium (Li^{2+}) dalam Medan Elektrostatis

Energi gelombang ion Lithium (Li^{2+}) dalam medan elektrostatis merupakan energi terkoreksi akibat adanya gangguan berupa medan elektrostatis $\vec{E}$ yang ditimbulkan oleh interaksi antar elektron.

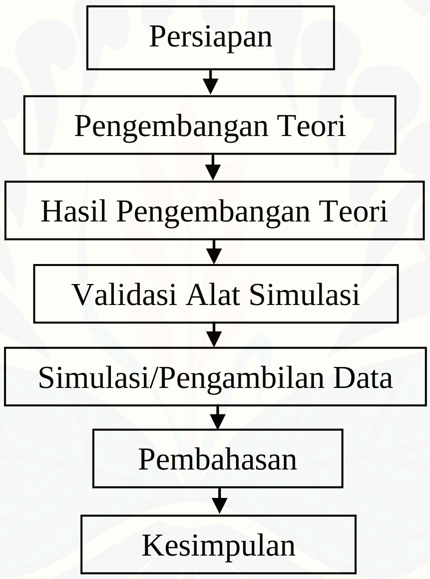
3.2.3 Pendekatan Persamaan Schrodinger

Pendekatan persamaan Schrodinger merupakan suatu pendekatan yang berupa persamaan matematis orde dua yang menunjukkan hubungan atara massa partikel, energi kinetik, energi potensial, serta fungsi gelombang partikel yang berada dalam koordinat 3 dimensi.

3.2.4 Teori Gangguan Non Degenerasi Tak Bergantung Waktu

Teori gangguan merupakan suatu pendekatan yang digunakan untuk menganalisa secara matematis tingkat pengaruh gangguan baik berupa interaksi antar partikel, interaksi dengan medan listrik, maupun dengan medan magnet terhadap pergerakan elektron. Dalam penelitian ini digunakan gangguan dari medan elektrostatis. Gangguan bersifat non degerasi tak bergantung waktu. Dapat diartikan bahwa satu level energi hanya boleh ditempati oleh satu states bilangan kuantum. Tidak diperkenankan terdapat dua bilangan kuantum berbeda menempati satu level energi yang sama. Suku pengganggu yaitu medan elektrostatis tak bergantung waktu artinya memiliki nilai yang tetap tidak berubah – ubah setiap waktu.

3.3 Langkah Penelitian



Gambar 3.1 Bagan langkah – langkah penelitian

Berdasarkan gambar 3.1 dapat dijelaskan sebagai berikut :

a. Persiapan

Tahap ini adalah mempersiapkan bahan – bahan yang akan dijadikan informasi dengan cara mengumpulkan buku – buku tentang fisika modern, fisika kuantum, fisika matematika, fisika atom, jurnal, serta berbagai sumber berskala nasional maupun internasional yang relevan atau terkait dengan fungsi gelombang dan energi terkoreksi order-2 ion Lithium dengan menggunakan pendekatan persamaan Schrodinger dan teori gangguan.

b. Pengembangan Teori

Pada tahap ini peneliti mengembangkan teori yang sudah ada di berbagai buku literatur mengenai aplikasi persamaan Schrodinger pada atom berelektron tunggal dengan melibatkan teori gangguan. Teori yang dikembangkan adalah pengkajian fungsi gelombang dan energi hingga koreksi order–2 untuk ion Lithium akibat pengaruh dari medan elektrostatis. Langkah pertama yang dilakukan adalah menentukan fungsi gelombang ion Lithium untuk n $\leq$ 3. Kemudian menentukan fungsi gelombang pada masing – masing orbital 1s, 2s, $2p_z$, $2p_y$, $2p_x$, 3s, $3p_z$, $3p_y$, $3p_x$, $3d_{zz}$, $3d_{zx}$, $3d_{yz}$, $3d_{x^2-y^2}$, $3d_{xy}$. Langkah terakhir yaitu menentukan fungsi gelombang dan energi terkoreksi hingga order-2 dengan menggunakan pendekatan teori gangguan.

c. Hasil Pengembangan Teori

Dari pengembangan teori yang telah dilakukan, dapat diperoleh persamaan matematis fungsi gelombang dan energi terkoreksi hingga order-2 akibat gangguan medan elektrostatis.

d. Validasi

Pada tahap ini peneliti membuat simulasi grafik fungsi gelombang serta grafik rapat probabilitas radial atom hidrogen yang diperoleh dari hasil pengembangan sebagai bahan validasi. Grafik tersebut kemudian dicocokkan dengan grafik fungsi gelombang dan rapat probabilitas atom hidrogen yang diperoleh dari berbagai buku literatur dan penelitian sebelumnya yang terkait.

e. Simulasi

Tahap simulasi adalah tahap perhitungan numerik untuk menentukan fungsi gelombang ion Lithium dengan menggunakan software Matlab2012. Output yang dihasilkan yaitu berupa grafik simulasi fungsi gelombang ion Lithium hingga n $\leq$ 3, grafik rapat probabilitasnya, nilai rapat probabilitas menggunakan metode *simpson's rule*, serta nilai energi terkoreksi akibat pengaruh berbagai intensitas medan listrik.

f. Pembahasan

Hasil dari simulasi dan perhitungan akan dibahas lebih rinci secara fisis disertai dengan diskusi teori terkait fungsi gelombang, nilai probabilitas fungsi gelombang radial, energi, serta pengaruh medan elektrostatis terhadap fungsi gelombang serta energi ion Lithium hingga koreksi order-2.

g. Kesimpulan

Hasil dari pembahasan kemudian disimpulkan untuk menjawab rumusan permasalahan dalam penelitian.

3.4 Teori Hasil Pengembangan

Teori yang digunakan dalam penelitian ini adalah :

a. Fungsi Gelombang

1. Fungsi Gelombang Radial

$$R_{nl}(r) = \left[\left(\frac{2Z}{n\,a_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\,[(n+l)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{2Zr}{na_0}\right]^l e^{-\frac{Zr}{n\,a_0}} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

dengan rumus Rodrigues :

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = (-1)^{2l+1} \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!} e^{\frac{2Zr}{na_0}} \frac{d^{n+l}}{d\left(\frac{2Zr}{n\,a_0}\right)^{n+l}} \left(e^{-\frac{2Zr}{na_0}} . \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{n-l-1}\right)$$

2. Fungsi Gelombang Polar

$$\Theta_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}}\, P_l^m \cos(\theta)$$

dimana, $P_l^m \cos(\theta) = \frac{1}{l!\,2^l}(1 - \cos^2\theta)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{(l+m)}}{d\cos^{(l+m)}\theta}(\cos^2\theta - 1)^l$

3. Fungsi Gelombang Azimuth

$$\Phi_m(\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\, e^{-im\varphi}$$

4. Fungsi Gelombang Gabungan

$$\Psi_{(r,\theta,\varphi)} = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

b. Hamiltonian Pengganggu

$$\hat{G} = e\vec{r}.\vec{E} = |e||\vec{E}||\vec{r}|\cos\theta$$

dengan θ adalah sudut yang dibentuk antara medan listrik $\vec{E}$ dengan sumbu-z positif.

c. Koreksi gangguan untuk fungsi gelombang

1. Koreksi Order-1

$$\Phi_n^{(1)} = \sum_{k \neq n} \left[\frac{G_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}\right] \Psi_k^{(0)}$$

2. Koreksi Order-2

$$\Phi_n^{(2)} = \sum_{l \neq n} \left[\left\{\sum_{m \neq n} \left[\frac{G_{kn} G_{lm}}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)\left(E_n^{(0)} - E_l^{(0)}\right)}\right] - \left[\frac{G_{nm} G_{ln}}{\left(E_n^{(0)} - E_l^{(0)}\right)^2}\right]\right\}\right] \Psi_k^{(0)}$$

3. Fungsi Gelombang Terkoreksi

$$\Psi_n = \Psi_n^{(0)} + \Phi_n^{(1)} + \Phi_n^{(2)}$$

d. Koreksi gangguan untuk Energi

1. Koreksi Order-1

$$\varepsilon_n^{(1)} = G_{nn} = \int \Psi_n^{(0)}\, \hat{G}\, \Psi_n^{(0)}\, dV$$

2. Koreksi Order-2

$$\varepsilon_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \left[\frac{G_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\right] G_{nm}$$

3. Energi Gelombang Terkoreksi

$$\varepsilon_n = E_n^{(0)} + \varepsilon_n^{(1)} + \varepsilon_n^{(2)}$$

3.5 Data Simulasi

Berikut merupakan tabel data simulasi untuk menentukan fungsi gelombang $\Psi_{(r,\theta,\varphi)}$ serta koreksi order-2 terhadap fungsi gelombang dan energi :

Tabel 3.1 Contoh data simulasi fungsi gelombang $\Psi_{(r,\theta,\varphi)}$

Bilangan Kuantum			Orbital	R_{nl} (r)	$Y_{l\, m_l}(\theta,\varphi)$	$\Psi_{n\, l\, m_l}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\, Y_{l\, m_l}(\theta,\varphi)$
n	*l*	*m*				
1	0	0	s			
2	0	0	s			
	1	0	p_z			
		±1	p_x			
			p_y			

3	0	0	s			
	1	0	p_z			
		± 1	p_x			
			p_y			
	2	0	d_{zz}			
		± 1	d_{zx}			
			d_{yz}			
		± 2	$d_{x^2-y^2}$			
			d_{xy}			

Tabel 3.2 Contoh Data Simulasi Koreksi Order-2 Fungsi Gelombang $\Psi_{(r,\theta,\varphi)}$

Fungsi Gelombang		
awal	Ψ_{1s}	
Koreksi Fungsi Gelombang	Order-1 $\Phi_1^{(1)}$	
	Order-2 $\Phi_1^{(2)}$	
	koreksi lengkap $\Psi_1^{(0)} + \Phi_1^{(1)} + \Phi_1^{(2)}$	

Tabel 3.3 Contoh data simulasi koreksi order-2 energi ion Lithium

Energi ion Lithium (Joule)		Koreksi Energi (Joule)		
		Order-1 $\epsilon_1^{(1)}$	Order-2 $\epsilon_1^{(2)}$	koreksi lengkap $\epsilon_1 = \epsilon_1^{(0)} + \epsilon_1^{(1)} + \epsilon_1^{(2)}$
$\epsilon_1^{(0)}$				
$\epsilon_2^{(0)}$				

3.6 Validasi Penelitian

Dalam penelitian ini digunakan tiga jenis bahan validasi, diantaranya simulasi fungsi gelombang dan rapat probabilitas radial atom Hidrogen untuk $n \leq 3$, simulasi fungsi harmonik bola, serta perhitungan matematis koreksi order-1 Atom Hidrogen akibat gangguan medan elektrostatis. Pemilihan fungsi gelombang atom Hidrogen sebagai bahan validasi dikarenakan baik atom hidrogen maupun ion Lithium (Li^{2+}) merupakan kelompok partikel yang memiliki satu elektron terluar, sehingga masih memiliki sifat yang mirip baik secara fisis maupun matematis. Fungsi gelombang atom hidrogen tersebut kemudian disimulasikan dengan menggunakan software Matlab2012.

3.6.1 Validasai Fungsi Gelombang Radial Atom Hidrogen

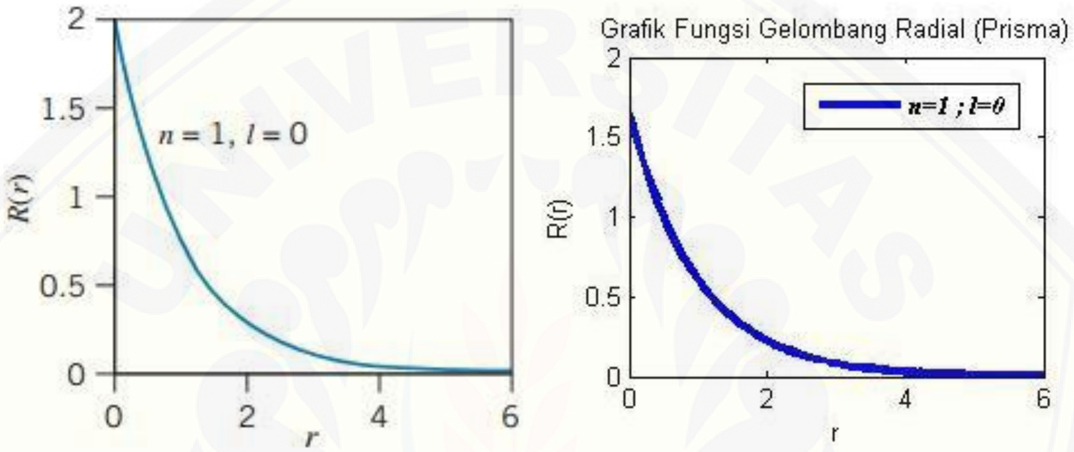
Berikut ini merupakan tabel fungsi gelombang Atom Hidrogen $n \leq 3$.

Tabel 3.4 Fungsi gelombang $\Psi_{(R,\Theta,\Phi)}$ atom Hidrogen

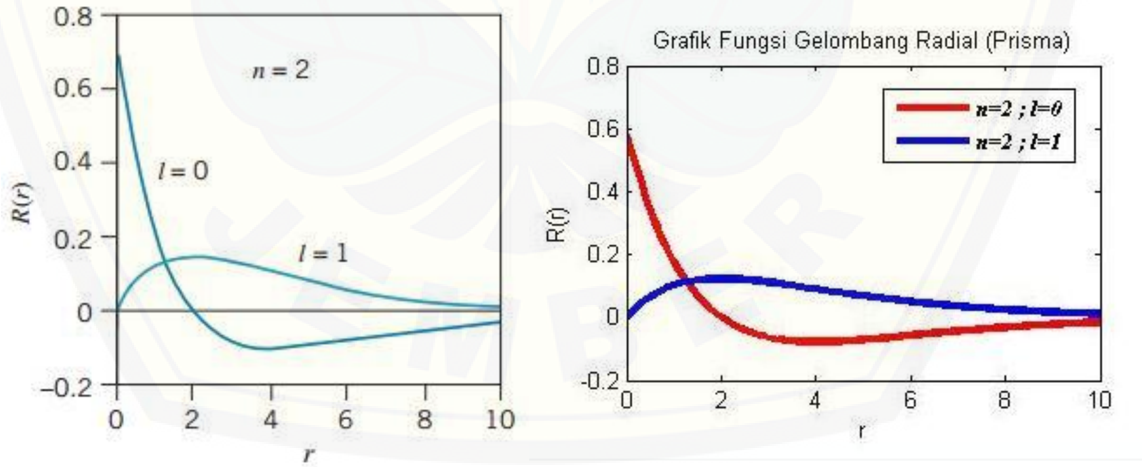
n	l	m	R_{nl} (r)	$\Theta_{lm}(\theta)$	$\Phi_m(\varphi)$
1	0	0	$\frac{2}{a_0^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	0	0	$\frac{1}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
	1	0	$\frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
		±1	$\frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\mp\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$\frac{2}{(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\left(1-\frac{2r}{3a_0}+\frac{2r^2}{27a_0^2}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
	1	0	$\frac{8}{9\sqrt{2}(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{r}{a_0}-\frac{r^2}{6a_0^2}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
		±1	$\frac{8}{9\sqrt{2}(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{r}{a_0}-\frac{r^2}{6a_0^2}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\mp\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\varphi}$
	2	0	$\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{a_0^2} e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\sqrt{\frac{5}{8}}\,(3\cos^2\theta-1)$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

		± 1	$\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\mp\sqrt{\frac{15}{4}}\sin\theta\cos\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm i\varphi}$
		± 2	$\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\frac{\sqrt{15}}{4}\ sin^2\ \theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm 2i\varphi}$

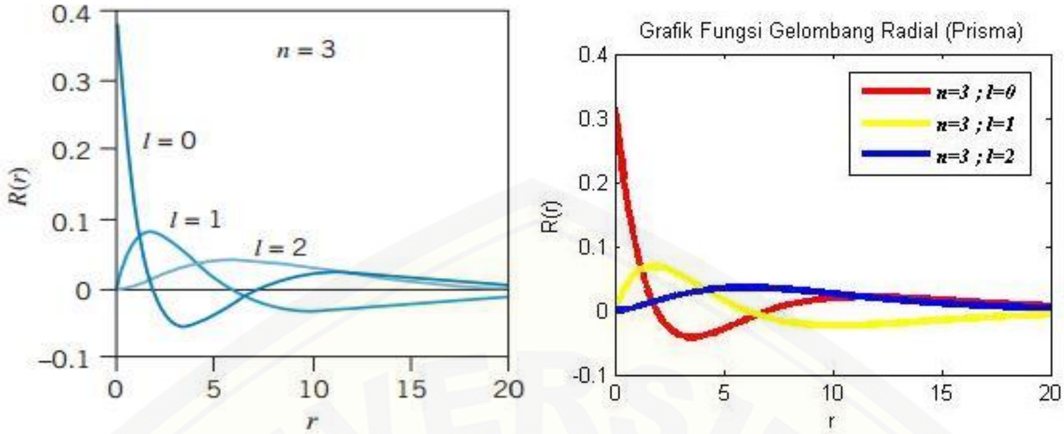
Berikut ini merupakan perbandingan grafik fungsi radial untuk atom hidrogen dari hasil Matlab2012 terhadap buku teks (Krane, 1992:206) :



Gambar 3.2 Perbandingan grafik fungsi gelombang radial atom Hidrogen *n=1* dari buku teks (kiri) dan simulasi Matlab2012 (kanan)

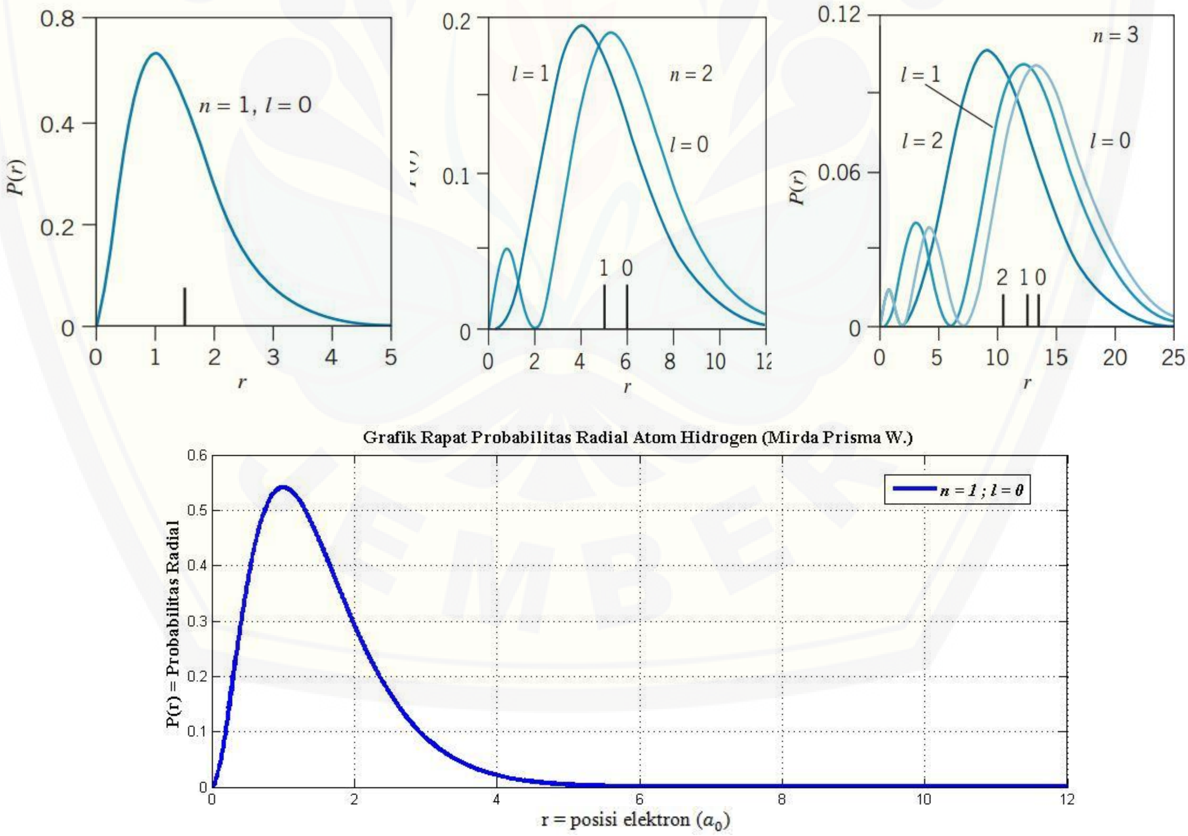


Gambar 3.3 Perbandingan grafik fungsi gelombang radial atom Hidrogen *n=2* dari buku teks (kiri) dan simulasi Matlab2012 (kanan)

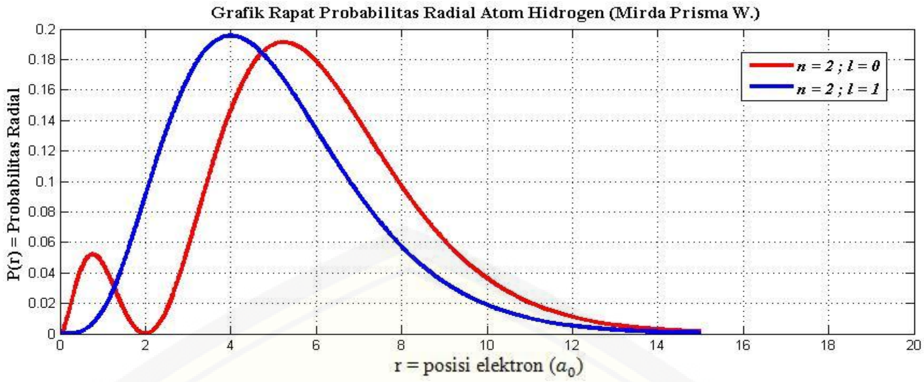


Gambar 3.4 Perbandingan grafik fungsi gelombang radial atom Hidrogen *n=3* dari buku teks (kiri) dan simulasi Matlab2012 (kanan)

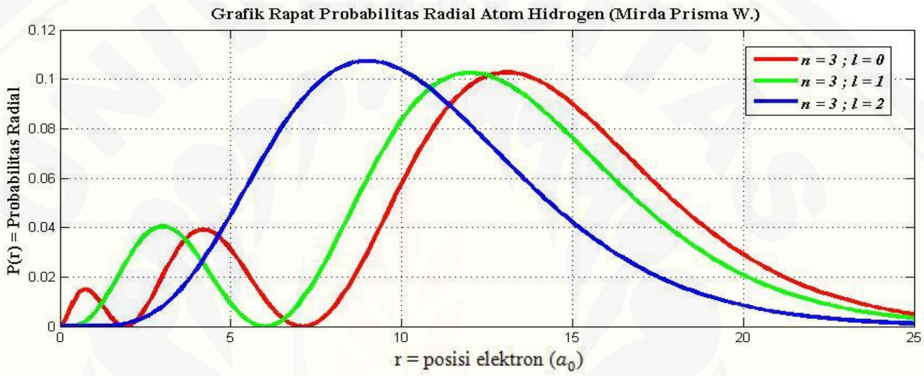
Berikut ini merupakan perbandingan grafik rapat probabilitas radial untuk atom hidrogen dari hasil Matlab2012 terhadap buku teks (Krane, 1992:206) :



Gambar 3.5 Grafik rapat probabilitas Radial atom Hidrogen *n=1, l=0*



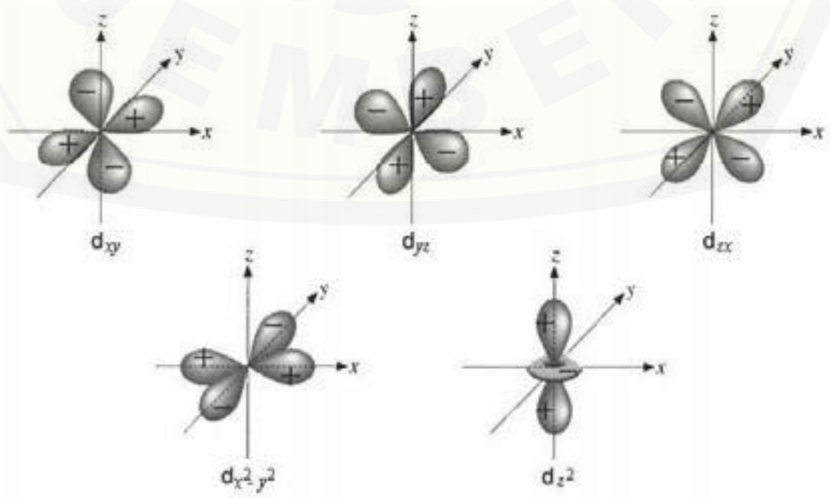
Gambar 3.6 Grafik rapat probabilitas radial atom Hidrogen *n=2, l=0,1*

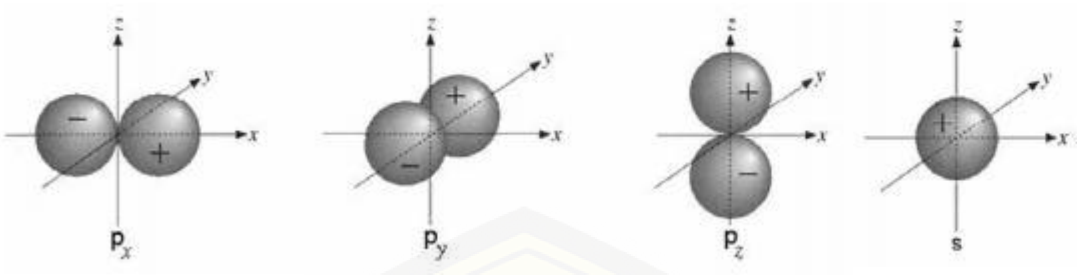


Gambar 3.7 Grafik rapat probabilitas radial atom Hidrogen *n=3, l=0,1,2*

3.6.2 Validasai Fungsi Harmonik Bola

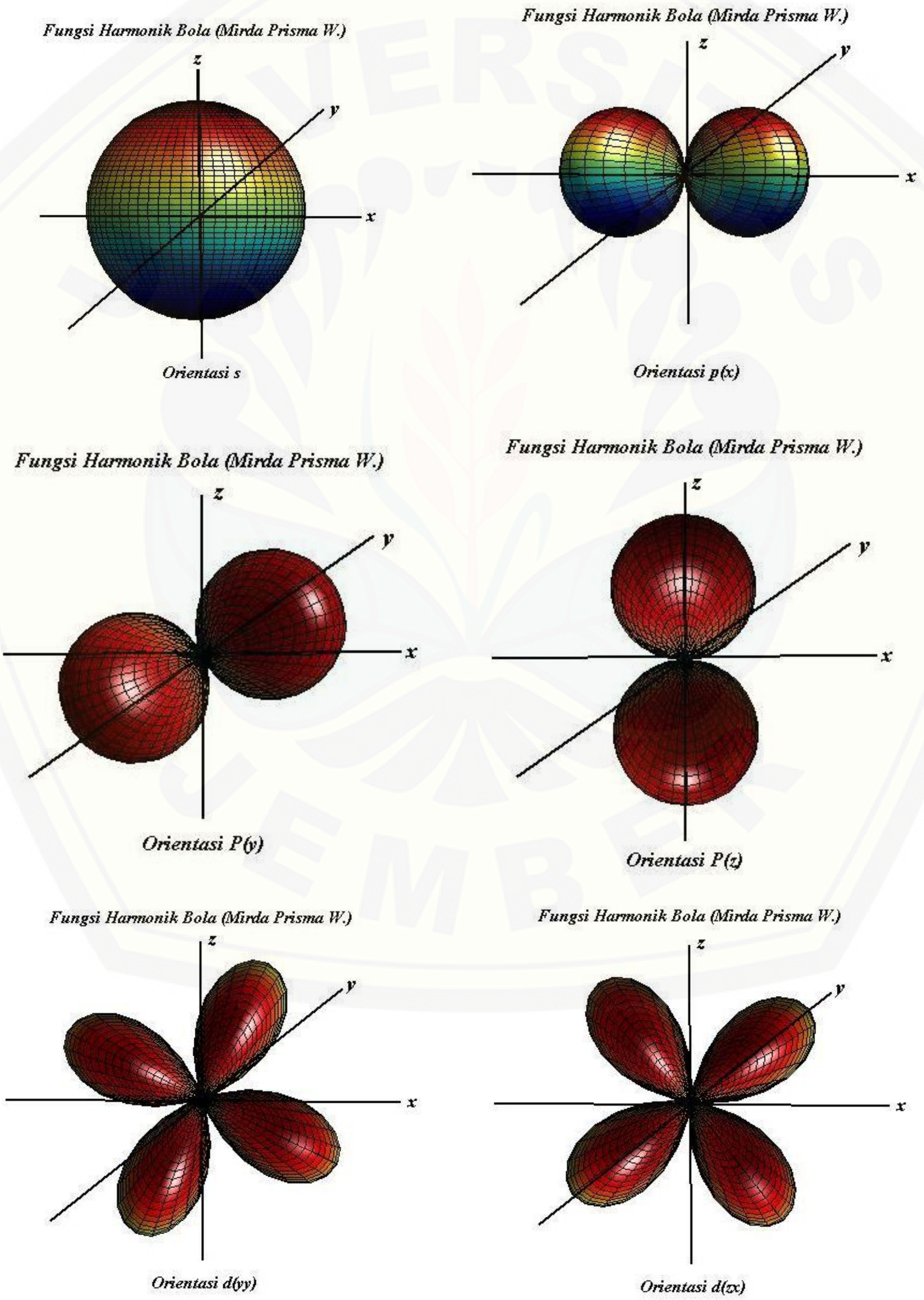
Berikut ini adalah perbandingan grafik rapat probabilitas anguler (Fungsi Harmonik Bola) untuk atom hidrogen dari hasil Matlab2012 terhadap grafik berdasarkan buku teks.



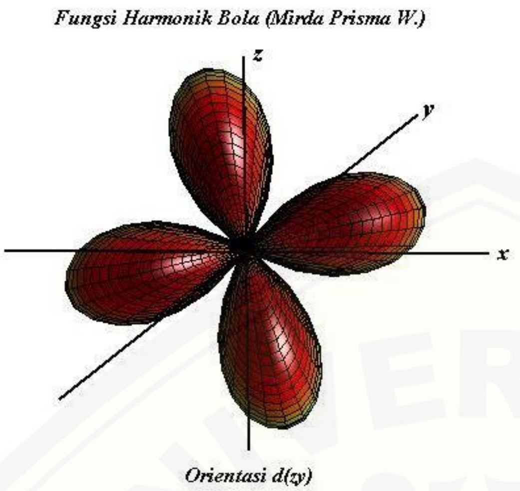


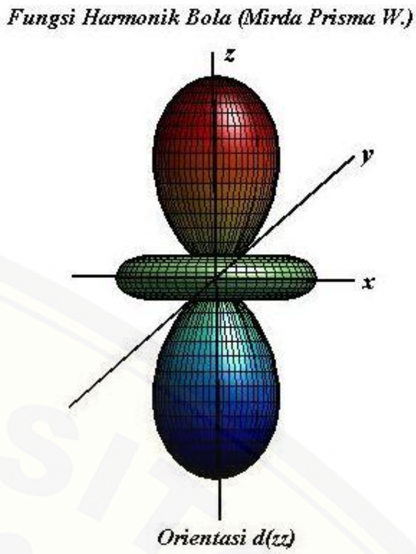
p x
p y
p z
s

(Ohno, 2004:87)



Fungsi Harmonik Bola (Mirda Prisma W.)
Orientasi s
Fungsi Harmonik Bola (Mirda Prisma W.)
Orientasi p(x)
Fungsi Harmonik Bola (Mirda Prisma W.)
Orientasi P(y)
Fungsi Harmonik Bola (Mirda Prisma W.)
Orientasi P(z)
Fungsi Harmonik Bola (Mirda Prisma W.)
Orientasi d(yy)
Fungsi Harmonik Bola (Mirda Prisma W.)
Orientasi d(zx)





Gambar 3.8 Grafik fungsi harmonik bola orbital s, p_x, p_y, p_z, d_{zz}, d_{zx}, d_{yz}, d_{xy}

3.6.3 Validasai Koreksi Order-1 Atom Hidrogen

Berikut ini adalah perhitungan secara matematis koreksi order-1 Energi Atom Hidrogen akibat gangguan medan elektrostatis :

$$\epsilon_1{}^{(1)} = \hat{G}_{11} = \int \Psi_1{}^{(0)}\ \hat{G}\Psi_1{}^{(0)}\, dV$$

$$\epsilon_1{}^{(1)} = \hat{G}_{11} = eE \int \Psi_{1s}{}^{(0)}\ r\cos\theta\ \Psi_{1s}{}^{(0)}\, dV$$

$$\epsilon_1{}^{(1)} = \hat{G}_{11} = eE \int \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\ e^{-\frac{r}{a_0}}\right] r\cos\theta \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\ e^{-\frac{r}{a_0}}\right] dV$$

$$\epsilon_1{}^{(1)} = \hat{G}_{11} = eE \left(\frac{1}{\pi}\right)\left(\frac{1}{a_0{}^3}\right) \int_0^{a_o} e^{-\frac{r}{a_0}}\, e^{-\frac{r}{a_0}}\, r\cos\theta\ r^2 dr \int_0^{\pi} \sin\theta\ d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$\epsilon_1{}^{(1)} = \hat{G}_{11} = eE \left(\frac{1}{\pi}\right)\left(\frac{1}{a_0{}^3}\right) \int_0^{a_o} r^3 e^{-\frac{2r}{a_0}}\, dr \int_0^{\pi} \sin\theta\cos\theta\ d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$\epsilon_1{}^{(1)} = \hat{G}_{11} = eE \left(\frac{1}{\pi}\right)\left(\frac{1}{a_0{}^3}\right) \int_0^{a_o} r^3 e^{-\frac{2r}{a_0}}\, dr \int_0^{\pi} \frac{1}{2}\sin 2\theta\ d\theta\ (2\pi)$$

dimana,

$$\int_0^{\pi} \frac{1}{2}\sin 2\theta\ d\theta = \frac{1}{2}\int_0^{\pi} \sin 2\theta\ d\theta = -\frac{1}{4}\left[\cos 2\pi - \cos 0\right] = 0$$

$\epsilon_1{}^{(1)} = \hat{G}_{11} = 0$ (Purwanto, 2006:247).

BAB 5. PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Dalam penelitian ini telah dikaji pengaruh gangguan medan elektrostatis terhadap fungsi gelombang dan tingkat energi dari ion Lithium. Metode yang digunakan yaitu kajian teoritis dengan menggunakan pendekatan teori Gangguan hingga koreksi order-2. Berdasarkan data hasil penelitian dapat disimpulkan :

a. Koreksi order-2 terhadap fungsi gelombang ion Lithium dirumuskan :

$$\Psi_1 = \Psi_1{}^{(0)} + \Phi_1{}^{(1)} + \Phi_1{}^{(2)}$$

$$\Psi_1 = \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{3r}{a_0}} - 6{,}5758\, x\, 10^{-4} E \left[\frac{3r}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{3r}{2a_0}} \cos\theta \right] +$$
$$\left\{ 0{,}9497 x 10^{-27} E^2 \left(\frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{a_0}} \right) \right\} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2r^2}{3a_0{}^2} - \frac{2r}{a_0} + 1 \right) + \frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}} \frac{r(2a_0 - r)}{2a_0{}^2} \Big(\cos\theta +$$
$$\sin\theta (\sin\varphi + \cos\varphi) \Big) + \frac{1}{3\sqrt{2\pi}} \frac{r^2}{a_0{}^2} (3\cos^2\theta - 1) + \frac{2\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}} \frac{r^2}{a_0{}^2} \sin\theta \cos\theta (\sin\varphi +$$
$$\cos\varphi) + \frac{\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}} \frac{r^2}{a_0{}^2} \sin^2\theta$$

b. Koreksi order-2 terhadap energi dasar ion Lithium (dalam *Joule*) dirumuskan :

$$\epsilon_1 = \epsilon_1{}^{(0)} + \epsilon_1{}^{(1)} + \epsilon_1{}^{(2)}$$

$$\epsilon_1 = -195{,}84\, x\, 10^{-19} - 7{,}35\, x\, 10^{-45}\, E^2$$

5.2 Saran

Guna pengembangan dan penyempurnaan teori, penulis memberikan beberapa saran, diantaranya :

a. Dalam pembelajaran fisika SMA pada mata pelajaran fisika modern sebaiknya peserta didik juga diarahkan untuk menjelaskan manfaat dan aplikasi dari materi yang dipelajari dalam kehidupan nyata. Misalnya penggunaan reaktor nuklir sebagai energi terbarukan, prinsip kerja *solar cell*, aplikasi Gelombang elektromagnetik, gejala fotolistrik, dan lain sebagainya.

b. Dalam pembelajaran fisika pada mata kuliah Mekanika kuantum sebaiknya mahasiswa tidak hanya diajarkan pembuktian secara matematis melainkan juga diajarkan untuk membuat grafik simulasi komputasi misalnya fungsi gelombang, rapat probabilitas, dan lain sebagainya. Hal tersebut bertujuan agar mahasiswa mampu menjelaskan makna dari persamaan – persamaan matematika yang telah dibuat serta mampu menerapkannya dalam kehidupan sehari – hari guna menunjang perkembangan IPTEKS.
c. Dalam pembelajaran pada mata kuliah fisika matematika sebaiknya mahasiswa diberikan peta konsep terkait tujuan instruksional dari pembelajaran serta aplikasi dari materi yang telah dipelajari. Dengan demikian mahasiswa mampu dengan baik dan benar dalam menggunakan kemampuan matematika misalnya penggunaan integral, diferensial, trigonometri, persamaan diferensial, dan lain sebagainya dalam pembelajaran fisika baik di tingkat SMA maupun pembelajaran fisika tingkat lanjut seperti pada mata kuliah Mekanika kuantum, Elektrodinamika, Mekanika statistik, serta fisika inti.
d. Sebagai variasi dapat dikaji pengaruh gangguan berupa medan magnet sehingga efek spin tidak lagi dibaikan.
e. Sebagai pengembagan teori dapat dikaji perilaku partikel berelektron banyak (lebih dari satu elektron) dengan menggunakan beberapa metode atau pendekatan mekanika kuantum seperti metode variasi *Ritz*, serta metode kuantisasi energi semiklasik (WKB).

DAFTAR PUSTAKA

Abdel, M. M. 2015. *Finite Size Uehling Corrections in Energy Levels of Hydrogen and Muonic Hydrogen Atom.* IOSR Journal of Applied Physics (IOSR-JAP). e-ISSN: 2278-4861. Volume 7, Issue 5 Ver.I (Sep-Oct 2015), PP 60-66.

Alonso dan Finn. 1968. *Quantum and Statistical Physics.* United States :Addison Wisley Publishing Company,inc.

Ashby, Neil. 1970. *Principles of Modern Physics.* San Fransisco : Holden – Day, inc.

Beiser, A. 2003. *Concepts of Modern Physics 6th edition.* New York : McGraw-Hill.

Boas, Mary.L. 2006. *Mathematical Methods in the Physical Sciences Third Edition*. United States of America : John Wiley & Sons, Inc.

Ganesan, L.R. and Balaji, M. 2008. *Schrodinger Equation for the Hydrogen Atom-A Simplified Treatment.* ISSN: 0973-4945 e Journal of Chemistry Vol.5, No.3 PP 659-662, July 2008.

Gasiorowicz, S. 2003. *Quantum Physics Third Edition.* United States of America : John Wiley and Sons.

Griffits, D.J. 1995. *Introduction to Quantum Mechanics*. United States of America : Prentice Hall,inc.

Hassani, Hossein. 2011. *Singular Spectrum Analysis based on the Perturbation Theory*. Nonlinear Analysis : Real World Applications 12 (2011) 2752 – 2766.

Kalhous, Milos. 2004. *New Version of the Reyleigh – Schrodinger Perturbation Theory : Examples.* International Journal of Quantum Chemistry. Vol.99 : 325 – 335 (2004).

Krane, K. S. 1992. *Fisika Modern*. Jakarta: Universitas Indonesia Press.

Liboff, R. Richard. 1980. *Introductory Quantum Mechanics.* United States of America : Addison Wesley – Publishing Company.

Merzbacher. 1970. *Quantum Mechanics 2nd edition*. New York : Wiley.

Messiah. 1966. *Quantum Mechanics*. New York : Wiley.

Montgomery, H.E.Jr. 2001. *Variational Perturbation Theory of the Confined Hydrogen Atom.* International Journal of Molecular Sciences. ISSN: 1442-0067, Vol.1 .

Ohno, Koichi. 2004. *Quantum Chemistry*. Tokyo : Iwanami Shoten Publishers.

Pauling and E. B. Wilson. 1935. *Introduction to Quantum Mechanics.* New York : McGraw – Hill company inc.

Rebolini, Elisa. 2015. *Excited States from Range – Separated Density – Functional Perturbation Theory*. Molecular Physics 2015 : http://dx.doi.org/10.1080/00268976.2015.101.1248.

Sanubary, Iklas. 2012. *Penentuan Energi Osilator Kuantum Anharmonik Menggunakan Teori Gangguan.* ISSN : 2301 – 4970. Vol.II (2) : 1 – 5.

Schiff. 1968. *Quantum Mechanics*. New York : McGraw – Hill.

Singh, R.B. 2009. *Introduction to Modern Physics Volume I.* New Delhi : New Age International Publishers.

Teschl, Gerald. 2009. *Mathematical Methods in Quantum Mechanics wuth Applications to Schrodinger Operators.* United States of America : American Mathematical Society.

Tomanaga. 1966. *Quantum Mechanics*. Amsterdam : North Holland.

Wigayati, Etty M. 2007. *Pembuatan Senyawa LiMnO untuk Elektroda Baterai pada Lithium*. ISSN : 1411 – 1098. Akreditasi LIPI Nomor : 536/D/2007. Edisi Khusus Desember 2008 : 201 – 204.

Xie, Wenfang. 2009. *Effects of an Electric Field on the Confined Hydrogen Atom in a Parabolic Potential Well.* Physics Letter A 373 (2009) 2251-2254. doi:10.1016/j.physleta.2009.04.058.

Yusron. 2007. *Review Probabilitas Menemukan Elektron dengan Fungsi Gelombang Simetri dan Anti Simetri pada Molekul* H^{2+}. ISSN : 1410 – 9662. Vol.10 (1) : 7-12.

Zettili, Nouredine. 2001. *Quantum Mechanics Concepts and Applications.* England : John Wiley & Sons Ltd.

MATRIK PENELITIAN

JUDUL	RUMUSAN MASALAH	VARIABEL PENELITIAN	INDIKATOR	METODOLOGI	SUMBER DATA
Koreksi Order-2 Fungsi Gelombang dan Energi ion Lithium dengan Pendekatan Teori Gangguan	a. Bagaimana bentuk fungsi gelombang keadaan dasar (1s) terkoreksi order-2 ion Lithium (Li^{2+}) dalam Medan Elektrostatis dengan pendekatan teori gangguan? b. Berapakah nilai energi terkoreksi order-2 ion Lithium (Li^{2+}) untuk keadaan dasar (1s) dalam Medan Elektrostatis dengan pendekatan teori gangguan?	*a. Variabel Bebas :* Kuat Medan Listrik *(E)* *b. Variabel Kontrol:* Ion Lithium (Li^{2+}) *c. Variabel Terikat :* • Fungsi gelombang keadaan dasar terkoreksi order-2 dalam Medan Elektrostatis. • Energi keadaan dasar terkoreksi order-2 dalam Medan Elektrostatis.	• Fungsi Gelombang ion Lithium (Li^{2+}) untuk bilangan kuantum $n \leq 3$. • Fungsi gelombang keadaan dasar terkoreksi order-2 dalam Medan Elektrostatis. • Energi keadaan dasar terkoreksi order-2 dalam Medan Elektrostatis.	a. Jenis Penelitian : Kajian Teoritis *(Study Literature)* b. Tempat Penelitian : Lab.Fisika Lanjut Ged.III FKIP Unej c. Langkah Penelitian: • Menentukan Fungsi Gelombang ion Lithium (Li^{2+}) $n \leq 3$. • Membuat Simulasi Fungsi Gelombang Radial menggunakan Matlab2012. • Menentukan Fungsi Gelombang dan Energi Koreksi order-2.	*Buku – Buku Referensi :* a. Krane, K. S. 1992. *Fisika Modern*. Jakarta: Universitas Indonesia Press. b. Griffits, D.J. 1995. *Introduction to Quantum Mechanics*. United States of America : Prentice Hall,inc. c. Ohno, Koichi. 2004. *Quantum Chemistry*. Tokyo : Iwanami Shoten Publishers.

LAMPIRAN A. PERHITUNGAN JARI – JARI ATOM BOHR

Model atom atom Bohr dapat digunakan untuk menjelaskan perilaku elektron bermassa *m* yang terus bergerak mengitari inti yang berjarak *r* dengan kecepatan *v*. Gaya tarik coulomb yang ditimbulkan sebanding dengan gaya sentripetal yang dihasilkan oleh elektron, dan dapat dituliskan sebagai berikut :

$$\vec{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_1q_2}{r^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

Untuk atom atau ion dengan nomor atom (Z) lebih dari 1 maka dapat dituliskan persamaan diatas dalam bentuk :

$$\vec{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_1q_2}{r^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

dari persamaan diatas diperoleh hubungan :

$$mv^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Energi kinetik elektron :

$$\mathrm{K} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

Energi potensial elektron :

$$\mathrm{U} = \int_\infty^r \vec{F}\,dr = \int_\infty^r \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2}\,dr$$

$$\mathrm{U} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

Energi total elektron dapat dituliskan :

$$\mathrm{E} = \mathrm{K} + \mathrm{U}$$

$$\mathrm{E} = \frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r} + \left(-\frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\right) = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r}$$

Vektor posisi $\vec{\boldsymbol{r}}$ yang menyatakan jarak relatif elektron terhadap inti atom selalu tegak lurus dengan vektor momentum linier $\vec{\boldsymbol{p}}$ sehingga menghasilkan suatu momentum sudut *L*. Berdasarkan model atom Bohr momentum sudut atau momentum anguler dari elektron selalu merupakan kelipatan bilangan bulat dari $\hbar$. Secara matematis dituliskan :

$$L = \vec{\boldsymbol{r}}\ x\ \vec{\boldsymbol{p}} = mvr = n\hbar$$

Sehingga dapat diperoleh hubungan

$$v = \frac{n\hbar}{mr}$$

Subtitusikan persamaan diatas ke persamaan gaya tarik Coulomb sehinga diperoleh :

$$m\left(\frac{n\hbar}{mr}\right)^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$\frac{n^2\hbar^2}{mr^2} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2\hbar^2}{m\,Ze^2} = a_0 n^2$$

dengan a_0 merupakan jari – jari Bohr yang secara matematis dapat dituliskan,

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m\,Ze^2} = \frac{0{,}0529\,nm}{Z}$$

Untuk Hidrogen dengan Z = 1, diperoleh jari – jari Bohr :

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m\,Ze^2} = \frac{0{,}0529\,nm}{Z} = \frac{0{,}0529\,nm}{1} = 0{,}0529 \text{ nm} = 0{,}529 \times 10^{-10} \text{ m}$$

dengan m merupakan massa elektron $m_{elektron} = 9{,}1095\,x\,10^{-31}$ kg

Untuk ion Lithium dengan Z = 3, diperoleh jari – jari Bohr :

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu\,Ze^2} = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{3\mu e^2}$$

dengan μ merupakan massa tereduksi yang diperoleh sebagai berikut :

$$\mu = \frac{(m_{inti})(m_{elektron})}{m_{inti} + m_{elektron}} = \frac{(m_{proton} + m_{neutron})(m_{elektron})}{(m_{proton} + m_{neutron}) + m_{elektron}}$$

$$\mu = \frac{(1{,}6726x10^{-27}+1{,}6749x10^{-27})(9{,}1095\,x\,10^{-31})}{(1{,}6726x10^{-27}+1{,}6749x10^{-27})+(9{,}1095\,x\,10^{-31})} = 9{,}1070x10^{-31}\text{kg}$$

Diperoleh jari – jari untuk ion Lithium :

$$a_0 = 0{,}01763 \text{ nm} = 0{,}1763 \text{ x } 10^{-10} \text{ m}$$

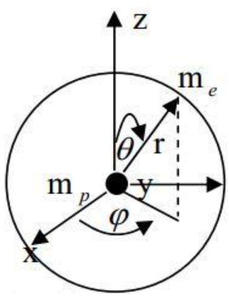
Untuk menentukan energi total elektron subtitusikan persamaan (14) ke dalam persamaan (8) sehingga diperoleh persamaan baru bagi energi sebagai berikut :

$$E = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0}\frac{(m\,Ze^2)Ze^2}{(4\pi\epsilon_0 n^2\hbar^2)} = -\frac{Z^2}{n^2}(13{,}6\,eV)$$

Persamaan energi diatas digunakan untuk menentukan energi tanpa gangguan ion Lithium dengan mengasumsikan bahwa $m_{elektron} \approx \mu$ (massa tereduksi).

LAMPIRAN B. MASSA TEREDUKSI ATOM HIDROGEN

Tinjau suatu sistem yang terdiri dari dua benda brmassa m_1 dan m_2 yang berada di r_1 dan r_2 dari titik asal O. Untuk atom Hidrogen dapat dimisalkan m_1 dan m_2 masing – masing adalah masa inti atom dan massa elektron. Komponen gaya – gaya yang bekerja pada partikel tersebut diantaranya adalah :



Gb B.1 posisi relatif elektron terhadap inti atom

F_1^e = gaya luar yang bekerja pada partikel m_1

F_2^e = gaya luar yang bekerja pada partikel m_2

F_{12}^i = gaya internal yang bekerja pada benda m_1 karena pengaruh dari m_2

F_{21}^i= gaya internal yang bekerja pada benda m_2 karena pengaruh dari m_1

Menurut hukum III Newton gaya aksi reaksi didefinisikan sebagai berikut :

$$F = F_{12}^i = - F_{21}^i$$

Gaya luar total yang bekerja pada sistem adalah :

$$F' = F_1^e + F_2^e$$

Menurut hukum II Newton, gerak dua benda dalam kerangka laboratorium :

$$m_1\ddot{r}_1 = F_1^e + F_{12}^i \qquad m_2\ddot{r}_2 = F_2^e + F_{21}^i$$

Untuk menentukan massa tereduksi, persamaan pertama dikalikan dengan m_2 dan persamaan kedua dikalikan dengan m_1. Kemudian dilakukan eliminasi sehingga diperoleh :

$$m_1m_2(\ddot{r}_1 - \ddot{r}_2) = m_2F_1^e - m_1F_2^e + m_2F_{12}^i - m_1F_{21}^i$$

$$m_1m_2(\ddot{r}_1 - \ddot{r}_2) = m_1m_2\left[\frac{F_1^e}{m_1} - \frac{F_2^e}{m_2}\right] + (m_1 + m_2)F$$

Jika tidak ada gaya luar $F_1^e = F_2^e = 0$ maka diperoleh :

$$m_1m_2(\ddot{r}_1 - \ddot{r}_2) = 0 + (m_1 + m_2)F$$

$$F = \frac{m_1m_2}{(m_1 + m_2)}(\ddot{r}_1 - \ddot{r}_2)$$

Dengan, $\mu = \frac{m_1m_2}{m_1 + m_2}$ disebut sebagai massa tereduksi.

LAMPIRAN C. PENJABARAN PERSAMAAN SCHRODINGER ATOM HIDROGEN

Persamaan Schrodinger untuk Atom hidrogen dapat dituliskan :

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_{(x,y,z)} + (E - V_{(x,y,z)})\,\Psi_{(x,y,z)} = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi_{(x,y,z)} + V_{(x,y,z)}\Psi_{(x,y,z)} = E\,\Psi_{(x,y,z)}$$

keterangan :

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}$$

Dapat dituliskan secara lengkap menjadi :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}\right\} + \left\{\frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right\}\Psi = E\,\Psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}\right\} + \left\{\frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right\}\Psi = E\,\Psi$$

Untuk mendapatkan solusi persamaan diatas digunakan metode pemisahan variabel :

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi_{(}r,\theta,\varphi_{)} = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}\right\} + \left\{\frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right\}\Psi - E\,\Psi = 0$$

$$\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\varphi^2}\right\} + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left\{E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right\}\Psi = 0$$

$$\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}R\Theta\Phi\right) + \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}R\Theta\Phi\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}R\Theta\Phi\right\} + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left\{E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right\}R\Theta\Phi = 0$$

$$\left\{\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\Theta\Phi\right) + \frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta R\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\Phi\right) + \frac{R\Theta}{sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}\right\} + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left\{E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right\}R\Theta\Phi = 0$$

Sebagai penyederhanaan bagi tiap suku dengan $R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ diperoleh :

$$\left\{\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{1}{\Theta sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\Phi sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}\right\} + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left\{E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right\} = 0$$

LAMPIRAN D. PEMBUKTIAN NILAI KONSTANTA $\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{l})\,(\boldsymbol{l}+\boldsymbol{1})$

Dari persamaan (2.12) dapat dilihat bahwa suku pertama dan keempat hanya bergantung jari – jari r, sedangkan suku kedua dan ketiga bergantung sudut θ dan Φ. Sebagai penyederhanaan digunakan suatu konstanta $C = \beta - \beta = 0$.

$$\left\{\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{1}{\Theta sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\Phi sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2}\right\} + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left\{E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right\} = \beta - \beta$$

Persamaan diatas dapat dikelompokkan menjadi dua persamaan diferensial orde dua :

Persamaan pertama

$$\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left\{E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right\} = \beta$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left\{E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right\}R = \beta R$$

Persamaan kedua

$$\frac{1}{\Theta sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\Phi sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = -\beta$$

$$\frac{sin\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} + \beta\, sin^2\theta = 0$$

Persamaan diatas dapat dijabarkan dengan subtitusi konstanta $C = -m^2 + m^2 = 0$

$$\frac{sin\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} + \beta\, sin^2\theta = -m^2 + m^2$$

Dengan memisahkan tiap suku dapat diperoleh persamaan diferensial baru :

Suku pertama :

$$\frac{sin\theta}{\Theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \beta\, sin^2\theta = m^2$$

Suku kedua :

$$\frac{1}{\Phi}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} = -m^2$$

Dengan demikian diperoleh 3 persamaan utama yang akan dijabarkan untuk memperoleh solusi persamaan Schrodinger sebagai fungsi r, θ, φ sebagai berikut :

$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R}{\partial r}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left\{E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right\}R = \beta R$ .... Persamaan Radial (r)

$\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right) + \beta\Theta - \frac{m^2\Theta}{sin^2\theta} = 0$ .... Persamaan Polar (θ)

$\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} + m^2\Phi = 0$ .... Persamaan Azimuth (φ)

Persamaan diferensial dengan konstanta β dan m^2 atau persamaan Polar dikenal sebagai persamaan diferensial legendre terasosiasi. Solusi dari persamaan ini dapat diperoleh dengan menggunakan metodefrobenius yang dinyatakan dalam bentuk deret pangkat tinggi berhingga yang dikenal sebagai polinom legendre terasosiasi. Sebagai bentuk penyederhanaan persamaan diferensial legendre terasosiasi diubah menjadi persamaan legendre dengan menganggap *m=0* yaitu :

$$\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\beta\Theta = 0$$

Persamaan diatas dapat diselesaikan dengan menggunakan subtitusi variabel. Dimisalkan :

$$w = \cos\theta \qquad \frac{dw}{d\theta} = -\sin\theta$$

$$\sin\theta = \sqrt{1-w^2} \qquad \frac{d}{d\theta} = \frac{d}{dw}\frac{dw}{d\theta} = -\sin\theta\ \frac{d}{dw}$$

Subtitusikan ke dalam persamaan polar diatas sehingga diperoleh :

$$\frac{1}{sin\theta}\left\{-\sin\theta\frac{d}{dw}\left[\sin\theta\left(-\sin\theta\ \frac{d}{dw}\right)\Theta\right]\right\}+\beta\Theta = 0$$

$$-\frac{d}{dw}\left(-sin^2\theta\frac{d\Theta}{dw}\right)+\beta\Theta = 0$$

$$\frac{d}{dw}\left(\left(\sqrt{1-w^2}\right)^2\frac{d\Theta}{dw}\right)+\beta\Theta = 0$$

$$\frac{d(1-w^2)}{dw}\frac{d\Theta}{dw}+\ (1-w^2)\frac{d}{dw}\frac{d\Theta}{dw}+\beta\Theta = 0$$

$$-2w\frac{d\Theta}{dw}+(1-w^2)\frac{d^2\Theta}{dw^2}+\beta\Theta = 0$$

Persamaan diatas merupakan bentuk umum dari persamaan diferensial orde dua fungsi legendre. Persamaan diferensial fungsi Legendre dapat diselesaikan menggunakan polinom Legendre Terasosiasi (penyelesaian bentuk deret). Bentuk umum persamaan diferensial orde duanya :

$$\frac{\partial^2 Q}{\partial q^2}+A(q)\frac{\partial Q}{\partial q}+B(q)Q = 0$$

Apabila $q = q_0$ menyebabkan *A(q)* dan *B(q)* bernilai tertentu, maka titik $q = q_0$ disebut sebagai titik *ordinary*. Penyelesaian persamaan diferensial dengan menggunakan Polynom (deret pangkat tertinggi) yang dapat dituliskan :

$$Q(q) = \sum_{n=0}^{n} c_n(q-q_0)^n$$

Apabila $q = q_0$ menyebabkan *A(q)* dan *B(q)* bernilai tak hingga, maka titik $q = q_0$ disebut sebagai titik *regular singuler*. Penyelesaiannya dapat dituliskan :

$$Q(q) = (q-q_0)^s\sum_{n=0}^{n} c_n(q-q_0)^n$$

Persamaan diferensial fungi legendre dapat dituliskan kembali menjadi :

$$(1-w^2)\frac{d^2\Theta}{dw^2} - 2w\frac{d\Theta}{dw} + \beta\Theta = 0$$

$$\frac{d^2\Theta}{dw^2} - \frac{2w}{(1+w)(1-w)}\frac{d\Theta}{dw} + \frac{\beta}{(1+w)(1-w)}\Theta = 0$$

untuk *w = 0*

$$A\,(w) = \frac{2w}{(1+w)(1-w)} = \frac{2(0)}{(1+0)(1-0)} = 0 \quad B\,(w) = \frac{\beta}{(1+w)(1-w)} = \frac{\beta}{(1+0)(1-0)} = \beta$$

maka untuk *w = 0* yang merupakan titik *ordinary*, bentuk umum penyelesaian persamaan diferensial fungsi Legendre adalah :

$$\Theta(w) = \sum_{n=0}^{n} c_n(w-0)^n$$

$$\Theta(w) = c_0 + c_1 w + c_2 w^2 + c_3 w^3 + \cdots$$

untuk *w = ±1*

$$A\,(w) = \frac{2w}{(1+w)(1-w)} = \sim \qquad B\,(w) = \frac{\lambda}{(1+w)(1-w)} = \sim$$

maka untuk *w = ±1* yang merupakan titik *regular singular*, bentuk umum penyelesaian persamaan diferensial fungsi Legendre adalah :

$$\Theta(w) = (w \pm 1)^s \sum_{n=0}^{\sim} c_n (w \pm 1)^n$$

$$\Theta(w) = (w \pm 1)^s[c_0 + c_1(w \pm 1) + c_2(w \pm 1)^2 + c_3(w \pm 1)^3 + \cdots]$$

Sebagai bentuk penyederhanaan digunakan bentuk penyelesaian dari titik *ordinary* dengan mengambil *w = 0*. Persamaan diferensial fungsi Legendre menjadi :

$$\beta\Theta_{(w)} \quad = \lambda(c_0 + c_1 w + c_2 w^2 + c_3 w^3 + \cdots c_n w^n)$$

$$-2w\frac{d\Theta}{dw} = -2w(c_1 + 2c_2 w + 3c_3 w^2 + 4c_4 w^3 + \cdots nc_n w^{n-1})$$

$$(1-w^2)\frac{d^2\Theta}{dw^2} = (1-w^2)(2c_2 + 6c_3 w + 12c_4 w^2 + 20c_5 w^3 + \cdots n(n-1)c_n w^{n-2})$$

$$0 = \beta c_0 + 2c_2 + (\beta c_1 - 2c_1 + 6c_3)w + (\beta c_2 - 4c_2 - 2c_2 + 12c_4)w^2 + (\lambda c_3 - 6c_3 - 6c_3 - 20c_5)w^3$$

Persamaan diatas merupakan persamaan Polynomial atau identitas, maka masing – masing koefisien dari semua pangkat *w* harus sama dengan nol. Hubungan antara koefisien – koefisien dapat dituliskan sebagai berikut :

$w^0\ (\beta c_0 + 2c_2) = 0$ diperoleh, $c_2 = -\frac{\beta}{2}c_0$

$w^1\ (\beta c_1 - 2c_1 + 6c_3) = 0$ diperoleh, $c_3 = \frac{-\beta+2}{6}c_1$

$w^2\,(\beta c_2 - 6c_2 + 12c_4) = 0$ diperoleh, $c_4 = \frac{-\beta+6}{12}\, c_2$

$w^3\,(\beta c_3 - 12c_3 + 20c_5) = 0$ diperoleh, $c_5 = \frac{-\beta+12}{20}\, c_3$

diperoleh hubungan antar koefisien : $c_n = \frac{-\beta+(n-1)(n-2)}{n(n-1)}\, c_{n-2}$

Solusi $\Theta_{(w)}$ dapat dipecah menjadi dua bagian yaitu solusi genap dan ganjil :

$$\Theta(w) = (c_0 + c_2 w^2 + c_4 w^4 + \cdots\ c_{2n} w^{2n}) +$$
$$(c_1 w + c_3 w^3 + c_5 w^5 \ldots\ c_{2n-1} w^{2n-1})$$

Deret diatas baik genap atau ganjil akan terputus apabila pangkat tertinggi dari deret ditentukan. Misalnya pangkat tertinggi adalah *n* maka nilai koefisien c_{n+2} dan seterusnya akan bernilai nol karena tidak diperbolehkan variabelnya mempunyai pangkat yang lebih besar dari *n*. Berdasarkan uraian deret diatas diperoleh bahwa pangkat tertinggi adalah *n+2*, maka bentuk hubungan antar koefisien dituliskan :

$$c_{(n+2)} = \frac{-\beta+[(n+2)-1][(n+2)-2]}{(n+2)[(n+2)-1]}\, c_{(n+2)-2}$$

$$0 = \frac{-\beta+(n+1)(n)}{(n+2)(n+1)}\, c_n$$

diperoleh :

$$0 = -\beta + (n+1)(n)$$

$$\beta = (n+1)(n)$$

dengan $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$

atau dapat pula dituliska untuk $n = l$, dengan l disebut sebagai bilangan kuantum orbital : $\beta = (l+1)(l)$

Subtitusi nilai β kedalam persamaan Radial atom Hidrogenik diperoleh :

$$\frac{d}{dr_c}\left(r_c{}^2\,\frac{\partial R}{\partial r_c}\right) + \frac{2\mu r_c{}^2}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right)R = l(l+1)R$$

LAMPIRAN E. PENJABARAN PERSAMAAN POLAR

Persamaan *Polar* dapat dituliskan kembali secara lengkap menjadi :

$$\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+l(l+1)\Theta-\frac{m^2\Theta}{sin^2\theta}=0$$

Persamaan *Polar* merupakan persamaan diferensial *Legendre* yang dapat diselesaikan menggunakan banyak cara, beberapa diantaranya yaitu menggunakan polynomial *Legendre* (solusi bentuk deret) serta menggunakan Rumus *Rodrigues.*

<u>Solusi Persamaan Legendre melalui fungsi pembangkit Rodrigues</u>

Penyelesaian persamaan diferensial Legendre menggunakan rumus Rodrigues yaitu melalui fungsi pembangkit sebagai berikut :

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}}=\sum_{n=0}^{\sim}Pn(x)t^n \qquad |t|<1$$

Koefisien pada ruas kiri dapat dijabarkan :

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}}=(1-2xt+t^2)^{-\frac{1}{2}}=[1-(2xt-t^2)]^{-\frac{1}{2}}$$

Dapat dijabarkan menggunakan deret binomial $(1-x)^p$ sebagai berikut :

$$[1-(2xt-t^2)]^{-\frac{1}{2}}=1+\left(-\frac{1}{2}\right)[-(2xt-t^2)]+$$

$$\frac{\left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{3}{2}\right)}{2!}[-(2xt-t^2)]^2+\frac{\left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{3}{2}\right)\left(-\frac{5}{2}\right)}{3!}[-(2xt-t^2)]^3+\cdots+$$

$$\frac{\left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{3}{2}\right)\left(-\frac{5}{2}\right)\left(-\frac{7}{2}\right)}{n!}[-(2xt-t^2)]^n$$

Bentuk koefisien suku terakhir dapat disederhanakan menjadi :

$$\frac{\left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{3}{2}\right)\left(-\frac{5}{2}\right)\left(-\frac{7}{2}\right)}{n!}=\frac{(-1)(-3)(-5)(-7)\ldots[-(2n-1)]}{n!\,2^n}=\frac{(-1)^n(1)(3)(5)(7)\ldots[(2n-1)]}{n!\,2^n}$$

Penyebut dan pembilang persamaan diatas dikalikan dengan $(2)(4)(6)(8)2n$:

$$\frac{(-1)^n(1)(3)(5)(7)\ldots[(2n-1)]}{n!\,2^n}\,\frac{(2)(4)(6)(8)2n}{(2)(4)(6)(8)2n}=\frac{(-1)^n(2n)!}{n!\,2^n n!\,2^n}$$

Subtitusikan ke persamaan deret binomial sehingga diperoleh persamaan :

$$[1-(2xt-t^2)]^{-\frac{1}{2}}=\sum_{n=0}^{\sim}\frac{(-1)^n(2n)!}{n!\,2^n n!\,2^n}\,[-(2xt-t^2)]^n$$

$$[1-(2xt-t^2)]^{-\frac{1}{2}}=\sum_{n=0}^{\sim}\frac{(-1)^n(2n)!}{n!\,2^n n!\,2^n}\,(-1)^n(2xt-t^2)^n$$

$$[1-(2xt-t^2)]^{-\frac{1}{2}}=\sum_{n=0}^{\sim}\frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}\,(2xt-t^2)^n$$

Ekspansi secara binomial dari fungsi $(2xt-t^2)^n$ akan menghasilkan :

$$(2xt - t^2)^n = t^n(2x - t)^n = t^n\left[(2x)^n - n(2x)^{n-1}(-t) + \frac{n(n-1)}{2!}(2x)^{n-2}(-t)^2 + \cdots + \frac{n(n-1)(n-2)\ldots(n-(k-1))}{k!}(2x)^{n-k}(t)^k(-1)^k\right]$$

Bentuk koefisien suku terakhir dapat disederhanakan menjadi :

$$\frac{n(n-1)(n-2)\ldots(n-(k-1))}{k!}\,\frac{(n-k)(n-(k+1))\ldots(3)(2)(1)}{(n-k)(n-(k+1))\ldots(3)(2)(1)} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$$

diperoleh :

$$(2xt - t^2)^n = t^n \sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{k!(n-k)!}(2x)^{n-k}(t)^k(-1)^k$$

Fungsi pembangkit dapat dituliskan kembali dalam bentuk :

$$[1 - (2xt - t^2)]^{-\frac{1}{2}} = \sum_{n=0}^{\sim} \frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}\left[\sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{k!(n-k)!}(2x)^{n-k}(t)^{n+k}(-1)^k\right]$$

$$[1 - (2xt - t^2)]^{-\frac{1}{2}} = \sum_{n=0}^{\sim}\sum_{k=0}^{n} \frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)}\,\frac{1}{k!\,(n-k)!}(2x)^{n-k}(t)^{n+k}(-1)^k$$

Digunakan pendekatan bahwa nilai $(t)^{n+k} \approx (t)^n$ sehingga diperoleh $n+k \rightarrow n$ atau dapat pula dituliskan $n \rightarrow (n-k)$. Subtitusi nilai $n \rightarrow (n-k)$ ke dalam fungsi pembangkit sehingga diperoleh :

$$[1 - (2xt - t^2)]^{-\frac{1}{2}} = \sum_{n=0}^{\sim}\sum_{k=0}^{n} \frac{[2(n-k)]!}{2^{2(n-k)}(n-k)!}\,\frac{1}{k!\,[(n-k)-k]!}(2x)^{(n-k)-k}(t)^{(n-k)+k}(-1)^k$$

$$= \sum_{n=0}^{\sim}\sum_{k=0}^{n} \frac{[2(n-k)]!}{2^{2(n-k)}(n-k)!}\,\frac{1}{k!\,(n-2k)!}(2x)^{(n-2k)}(t)^{n}(-1)^k$$

Dari rumus awal fungsi pembangkit diperoleh :

$$\frac{1}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}} = \sum_{n=0}^{\sim} Pn(x)t^n$$

$$\sum_{n=0}^{\sim}\sum_{k=0}^{n} \frac{[2(n-k)]!}{2^{2(n-k)}(n-k)!}\,\frac{1}{k!\,(n-2k)!}(2x)^{(n-2k)}(t)^{n}(-1)^k = \sum_{n=0}^{\sim} Pn(x)t^n$$

Eliminasi ruas kiri dan kanan menghasilkan :

$$Pn(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{[2(n-k)]!}{2^{2(n-k)}(n-k)!}\,\frac{1}{k!\,(n-2k)!}(2x)^{(n-2k)}(-1)^k$$

$$Pn(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{[2(n-k)]!}{2^{2n}2^{-2k}(n-k)!}\,\frac{1}{k!\,(n-2k)!}2^n2^{-2k}(x)^{(n-2k)}(-1)^k$$

$$Pn(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{[2(n-k)]!}{2^n(n-k)!} \frac{1}{k!\,(n-2k)!} (x)^{(n-2k)} (-1)^k$$

Agar diperoleh deret pangkat tertinggi fungsi Legendre parameter *k* diubah menjadi *r* sehingga diperoleh rumus Rodrigues sebagai berikut :

$$Pn(x) = \sum_{r=0}^{n} \frac{[2(n-r)]!}{2^n(n-r)!} \frac{1}{r!\,(n-2r)!} (x)^{(n-2r)} (-1)^r$$

Untuk merubah bentuk deret menjadi bentuk persamaan diferensial, maka untuk setiap *n* bilangan bulat berlaku :

$$\frac{d^n}{dx^n} x^{2n-2r} = (2n-2r)(2n-2r-1)(2n-2r-2)\ldots\big(2n-2r-(n-1)\big)x^{n-2r}$$

$$\frac{d^n}{dx^n} x^{2n-2r} = \frac{[2(n-r)]!}{(n-2r)!} x^{n-2r}$$

Subtitusikan ke rumus Rodrigues diperoleh :

$$Pn(x) = \sum_{r=0}^{n} \frac{[2(n-r)]!}{(n-2r)!} \frac{1}{2^n(n-r)!\,r!} (x)^{(n-2r)} (-1)^r$$

$$Pn(x) = \frac{1}{2^n(n-r)!\,r!} (-1)^r \sum_{r=0}^{n} \frac{d^n}{dx^n} x^{2n-2r} \frac{n!}{n!}$$

$$Pn(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \sum_{r=0}^{n} \frac{n!}{r!\,(n-r)!} x^{2(n-r)} (-1)^r$$

Sebagai penyederhanaan digunakan ekspansi deret binomial $(x^2-1)^n$ berikut :

$$(x^2-1)^n = x^{2n} + n(x^2)^{n-1}(-1) + \frac{n(n-1)}{2!}(x^2)^{n-2}(-1)^2 + \ldots \frac{n(n-1)(n-2)\ldots(n-k+1)}{k!}(x^2)^{n-k}(-1)^k$$

Bentuk koefisien suku terakhir dapat disederhanakan menjadi :

$$\frac{n(n-1)(n-2)\ldots\big(n-(k-1)\big)}{k!} \frac{(n-k)\big(n-(k+1)\big)\ldots(3)(2)(1)}{(n-k)\big(n-(k+1)\big)\ldots(3)(2)(1)} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$$

diperoleh :

$$(x^2-1)^n = \sum_{k=0}^{n} \frac{n!}{k!\,(n-k)!} (x^2)^{n-k} (-1)^k$$

untuk *k* = *r*, diperoleh :

$$(x^2-1)^n=\sum_{r=0}^{n}\frac{n!}{r!\,(n-r)!}(x^2)^{n-r}(-1)^r$$

Dengan demikian diperoleh bentuk rumus Rodrigues yang lebih sederhana yaitu :

$$Pn(x)=\frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$$

<u>Solusi Persamaan Legendre dengan menggunakan Polinomial</u>

Persamaan Polar dapat dituliskan kembali menjadi :

$$\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+l(l+1)\Theta-\frac{m^2\Theta}{sin^2\theta}=0$$

$$(1-w^2)\frac{d^2\Theta}{dw^2}-2w\frac{d\Theta}{dw}+l(l+1)\Theta-\frac{m^2\Theta}{sin^2\theta}=0$$

Melalui pendekatan bahwa *m = 0* diperoleh :

$$(1-w^2)\frac{d^2\Theta}{dw^2}-2w\frac{d\Theta}{dw}+l(l+1)\Theta=0$$

Persamaan diferensial Legendre dapat diubah menjadi persamaan Legendre terasosiasi dengan cara mendiferensialkan persamaan tersebut sebanyak *m* kali terhadap *w*. Dengan menggunakan rumus *Leibnit'z* yaitu :

$$\frac{d^n}{dx^n}[A(x)B(x)]=\sum_{s=0}^{n}\binom{n}{s}\frac{d^{n-x}}{dx^{n-x}}A(x)\frac{d^x}{dx^n}B(x)\binom{n}{s}=\frac{n!}{(n-s)!\,s!}$$

Persamaan diferensialnya dapat dituliskan :

$$\frac{d^m}{dx^m}\left[(1-w^2)\frac{d^2\Theta}{dw^2}-2w\frac{d\Theta}{dw}+\ l(l+1)\Theta\right]=0$$

dapat dijabarkan kembali menjadi :

$$\frac{d^m}{dx^m}(1-w^2)\frac{d^2}{dw^2}\Theta_{l(w)}^n-\frac{d^m}{dx^m}2w\frac{d}{dw}\Theta_{l(w)}^n+\ \frac{d^m}{dx^m}l(l+1)\Theta_{l(w)}^n=0$$

Sebagai penyederhanaan digunakan pemisahan variabel untuk menyelesaikan persamaan diatas. Misalkan :

$$U=\frac{d^m}{dw^m}\Theta_{l(w)}^n$$

<u>Suku pertama</u>

$$\frac{d^m}{dx^m}(1-w^2)\frac{d^2\Theta_{l(w)}^n}{dw^2}=\frac{d^2}{dw^2}\left[\frac{d^m}{dx^m}\Theta_{l(w)}^n(1-w^2)\right]=\cdots$$

Diferensiasi sebanyak *m* kali terhadap *w* akan diperoleh :

$$\frac{d^m}{dx^m}\left[(1-w^2)\frac{d^2\Theta}{dw^2}-2w\frac{d\Theta}{dw}+\ l(l+1)\Theta\right]=0$$

dengan, $A(w)=\Theta_{l(w)}^n$

$B(w) = 1 - w^2$

dengan menggunakan notasi *Leibnit'z* dapat diperoleh :

$$\frac{d^m}{dw^m}\left[\left(\Theta_{l(w)}^n\right)(1-w^2)\right] = \frac{m!}{0!m!}(1-w^2)\frac{d^m}{dw^m}\Theta_{l(w)}^n$$

$$+\frac{m!}{1!(m-1)!}\frac{d}{dw}(1-w^2)\frac{d^{m-1}}{dw^{m-1}}\Theta_{l(w)}^n+\frac{m!}{2!(m-2)!}\frac{d^2}{dw^2}(1-w^2)\frac{d^{m-2}}{dw^{m-2}}\Theta_{l(w)}^n$$

$$\frac{d^m}{dw^m}\left[\left(\Theta_{l(w)}^n\right)(1-w^2)\right] = (1-w^2)\frac{d^m}{dw^m}\Theta_{l(w)}^n + m(-2w)\frac{d^{m-1}}{dw^{m-1}}\Theta_{l(w)}^n+$$
$$\frac{m(m-1)}{2}(-2)\frac{d^{m-2}}{dw^{m-2}}\Theta_{l(w)}^n$$

$$\frac{d^m}{dw^m}\left[\left(\Theta_{l(w)}^n\right)(1-w^2)\right] = (1-w^2)\frac{d^m}{dw^m}\Theta_{l(w)}^n - 2mw\frac{d^{m-1}}{dw^{m-1}}\Theta_{l(w)}^n -$$
$$m(m-1)\frac{d^{m-2}}{dw^{m-2}}\Theta_{l(w)}^n$$

dengan demikian dapat dituliskan kembali dalam bentuk :

$$\frac{d^2}{dw^2}\left[\frac{d^m}{dx^m}\Theta_{l(w)}^n(1-w^2)\right] =$$
$$\frac{d^2}{dw^2}\left[(1-w^2)\frac{d^m}{dw^m}\Theta_{l(w)}^n - 2mw\frac{d^{m-1}}{dw^{m-1}}\Theta_{l(w)}^n - m(m-1)\frac{d^{m-2}}{dw^{m-2}}\Theta_{l(w)}^n\right]$$

$$\frac{d^2}{dw^2}\left[\frac{d^m}{dx^m}\Theta_{l(w)}^n(1-w^2)\right] =$$
$$\frac{d^2}{dw^2}(1-w^2)\frac{d^m}{dw^m}\Theta_{l(w)}^n - 2mw\frac{d^{m+1}}{dw^{m+1}}\Theta_{l(w)}^n - m(m-1)\frac{d^m}{dw^m}\Theta_{l(w)}^n$$

$$\frac{d^2}{dw^2}\left[\frac{d^m}{dx^m}\Theta_{l(w)}^n(1-w^2)\right] = (1-w^2)U'' - 2mwU' - m(m-1)U$$

<u>Suku kedua</u>

$$\frac{d^m}{dx^m}(-2w)\frac{d}{dw}\Theta_{l(w)}^n = (-2w)\frac{d}{dw}\frac{d^m}{dx^m}\Theta_{l(w)}^n = \cdots$$

Tinjau kembali persamaan pada notasi *Leibnit'z* :

$$\frac{d^m}{dw^m}\left[\left(\Theta_{l(w)}^n\right)(1-w^2)\right] = (1-w^2)\frac{d^m}{dw^m}\Theta_{l(w)}^n - 2mw\frac{d^{m-1}}{dw^{m-1}}\Theta_{l(w)}^n - m(m-1)\frac{d^{m-2}}{dw^{m-2}}\Theta_{l(w)}^n$$

Apabila kedua ruas masing – masing diturunkan terhadap *w* dapat dituliskan :

$$\frac{d}{dw}\left\{\frac{d^m}{dw^m}\left[\left(\Theta_{l(w)}^n\right)(1-w^2)\right]\right\}=\frac{d}{dw}\left\{(1-w^2)\frac{d^m}{dw^m}\Theta_{l(w)}^n - 2mw\frac{d^{m-1}}{dw^{m-1}}\Theta_{l(w)}^n -\right.$$
$$\left.m(m-1)\frac{d^{m-2}}{dw^{m-2}}\Theta_{l(w)}^n\right\}$$

$$\frac{d^m}{dw^m}\left[\left(\Theta_{l(w)}^n\right)(-2w)\right] = (-2w)\frac{d^m}{dw^m}\Theta_{l(w)}^n - 2m\frac{d^{m-1}}{dw^{m-1}}\Theta_{l(w)}^n - \frac{d}{dw}m(m-1)\frac{d^{m-2}}{dw^{m-2}}\Theta_{l(w)}^n$$

$$\frac{d^m}{dw^m}\left[\left(\Theta_{l(w)}^n\right)(-2w)\right] = (-2w)\frac{d^m}{dw^m}\Theta_{l(w)}^n - 2m\frac{d^{m-1}}{dw^{m-1}}\Theta_{l(w)}^n$$

diperoleh :

$$\frac{d}{dw}\frac{d^m}{dw^m}\left[\left(\Theta_{l(w)}^n\right)(-2w)\right] = \frac{d}{dw}\left[(-2w)\frac{d^m}{dw^m}\Theta_{l(w)}^n - 2m\frac{d^{m-1}}{dw^{m-1}}\Theta_{l(w)}^n\right]$$

$$\frac{d}{dw}\frac{d^m}{dw^m}\left[\left(\Theta_{l(w)}^n\right)(-2w)\right] = (-2w)\frac{d}{dw}\frac{d^m}{dw^m}\Theta_{l(w)}^n - 2m\frac{d}{dw}\frac{d^{m-1}}{dw^{m-1}}\Theta_{l(w)}^n$$

$$\frac{d}{dw}\frac{d^m}{dw^m}\left[\left(\Theta_{l(w)}^n\right)(-2w)\right] = (-2w)\frac{d}{dw}\frac{d^m}{dw^m}\Theta_{l(w)}^n - 0$$

$$\frac{d}{dw}\frac{d^m}{dw^m}\left[\left(\Theta_{l(w)}^n\right)(-2w)\right] = (-2w)U'$$

<u>Suku ketiga</u>

$$\frac{d^m}{dx^m}l(l+1)\Theta_{l(w)}^n = l(l+1)\frac{d^m}{dx^m}\Theta_{l(w)}^n = l(l+1)U$$

Gabungan dari suku pertama, kedua, dan ketiga dihasilkan :

$$\frac{d^m}{dx^m}(1-w^2)\frac{d^2}{dw^2}\Theta_{l(w)}^n - \frac{d^m}{dx^m}2w\frac{d}{dw}\Theta_{l(w)}^n + \frac{d^m}{dx^m}l(l+1)\Theta_{l(w)}^n = 0$$

$$(1-w^2)U'' - 2mwU' - m(m-1)U + (-2w)U' + l(l+1)U = 0$$

$$(1-w^2)U'' - 2w(m+1)U' - m(m-1)U + l(l+1)U = 0$$

$$(1-w^2)U'' - 2w(m+1)U' + (-m^2 - m + l^2 + l)U = 0$$

$$(1-w^2)U'' - 2w(m+1)U' + (l-m)(l+m+1)U = 0$$

Persamaan diatas bukan merupakan persamaan *self adjoint*. Untuk merubahnya menjadi persamaan *self adjoint* digunakan suatu permisalan :

$$v_{(w)} = u_{(w)}\,(1-w^2)^{\frac{m}{2}} \qquad\qquad u_{(w)} = v_{(w)}\,(1-w^2)^{-\frac{m}{2}}$$

Sebagai penyederhanaan untuk selanjutnya dapat dituliskan $u_{(w)} = u$ dan $v_{(w)} = v$. Nilai turunan pertama dan turunan kedua bagi $u_{(w)}$dapat dijabarkan sebagai berikut :

<u>Turunan pertama</u>

$$u' = \frac{d}{dw}\left[v(1-w^2)^{-\frac{m}{2}}\right]$$

$$u' = (1-w^2)^{-\frac{m}{2}}\frac{d}{dw}v + v\frac{d}{dw}(1-w^2)^{-\frac{m}{2}}$$

$$u' = v'(1-w^2)^{-\frac{m}{2}} + mw(1-w^2)^{-\frac{m}{2}-1}\,v$$

$$u' = \left[v' + \frac{mwv}{(1-w^2)}\right](1-w^2)^{-\frac{m}{2}}$$

<u>Turunan kedua</u>

$$u'' = \frac{d}{dw}\left\{\left[v' + \frac{mwv}{(1-w^2)}\right](1-w^2)^{-\frac{m}{2}}\right\}$$

Untuk menyelesaikan persamaan diatas diuraikan suku pertama dan suku kedua :

Suku pertama

$$\frac{d}{dw}\left[v'(1-w^2)^{-\frac{m}{2}}\right] = (1-w^2)^{-\frac{m}{2}}\frac{d}{dw}v' + v'\frac{d}{dw}(1-w^2)^{-\frac{m}{2}}$$

$$\frac{d}{dw}\left[v'(1-w^2)^{-\frac{m}{2}}\right] = v''(1-w^2)^{-\frac{m}{2}} + \frac{mwv'}{(1-w^2)}(1-w^2)^{-\frac{m}{2}}$$

Suku kedua

$$\frac{d}{dw}\left[\frac{mwv}{(1-w^2)}(1-w^2)^{-\frac{m}{2}}\right] = \cdots$$

misalkan,

$$A = \frac{mwv}{(1-w^2)} \qquad B = (1-w^2)^{-\frac{m}{2}}$$

$$A' = \frac{wv}{(1-w^2)}\frac{dm}{dw} + \frac{mw}{(1-w^2)}\frac{dv}{dw} + \frac{mv}{(1-w^2)}\frac{dw}{dw} \qquad B' = \frac{d}{dw}(1-w^2)^{-\frac{m}{2}}$$

$$A' = \frac{wv}{(1-w^2)}\frac{dm}{dw} + \frac{mw}{(1-w^2)}\frac{dv}{dw} + mv\frac{d}{dw}\frac{w}{(1-w^2)} \qquad B' = \left(-\frac{m}{2}\right)(1-w^2)^{-\frac{m}{2}-1}(-2w)$$

$$A' = 0 + \frac{mwv'}{(1-w^2)} + mv\left[\frac{(1-w^2)+2w^2}{(1-w^2)^2}\right] \qquad B' = (1-w^2)^{-\frac{m}{2}-1}(mw)$$

$$A' = \frac{mwv'}{(1-w^2)} + \frac{mv}{(1-w^2)} + \frac{2mw^2v}{(1-w^2)^2} \qquad B' = \frac{(mw)}{(1-w^2)}(1-w^2)^{-\frac{m}{2}}$$

diperoleh :

$$\frac{d}{dw}\left[\frac{mwv}{(1-w^2)}(1-w^2)^{-\frac{m}{2}}\right] = A'B + B'A$$

$$= \left[\frac{mwv'}{(1-w^2)} + \frac{mv}{(1-w^2)} + \frac{2mw^2v}{(1-w^2)^2}\right](1-w^2)^{-\frac{m}{2}} +$$

$$\left[\frac{(mw)}{(1-w^2)}(1-w^2)^{-\frac{m}{2}}\right]\frac{mwv}{(1-w^2)}$$

$$= \left[\frac{mwv'}{(1-w^2)} + \frac{mv}{(1-w^2)} + \frac{2mw^2v}{(1-w^2)^2} + \frac{m^2w^2v}{(1-w^2)^2}\right](1-w^2)^{-\frac{m}{2}}$$

Gabungkan nilai diferensial suku pertama dan suku kedua sehingga diperoleh :

$$u'' = \left[v'' + \frac{mwv'}{(1-w^2)} + \frac{mwv'}{(1-w^2)} + \frac{mv}{(1-w^2)} + \frac{2mw^2v}{(1-w^2)^2} + \frac{m^2w^2v}{(1-w^2)^2}\right](1-w^2)^{-\frac{m}{2}}$$

$$u = \left[v'' + \frac{2mwv'}{(1-w^2)} + \frac{mv}{(1-w^2)} + \frac{2mw^2v}{(1-w^2)^2} + \frac{m^2w^2v}{(1-w^2)^2}\right](1-w^2)^{-\frac{m}{2}}$$

diperoleh :

$$u = v\,(1-w^2)^{-\frac{m}{2}}$$

$$u = \left[v' + \frac{mwv}{(1-w^2)}\right](1-w^2)^{-\frac{m}{2}}$$

$$u = \left[v'' + \frac{2mwv'}{(1-w^2)} + \frac{mv}{(1-w^2)} + \frac{2mw^2v}{(1-w^2)^2} + \frac{m^2w^2v}{(1-w^2)^2}\right](1-w^2)^{-\frac{m}{2}}$$

Subtitusikan nilai u, u', u'' kedalam persamaan self adjoint sehingga diperoleh :

$$(1-w^2)U'' - 2w(m+1)U' + (l-m)(l+m+1)U = 0$$

Agar menjadi persamaan *Self Adjoint* dapat diubah $U = u$; $U' = u'$; $U'' = u''$

$$(1-w^2)u'' - 2w(m+1)u' + (l-m)(l+m+1)u = 0$$

$$(1-w^2)\left[v'' + \frac{2mwv'}{(1-w^2)} + \frac{mv}{(1-w^2)} + \frac{2mw^2v}{(1-w^2)^2} + \frac{m^2w^2v}{(1-w^2)^2}\right](1-w^2)^{-\frac{m}{2}} - 2w(m+1)\left[v' + \frac{mwv}{(1-w^2)}\right](1-w^2)^{-\frac{m}{2}} + (l-m)(l+m+1)v\,(1-w^2)^{-\frac{m}{2}} = 0$$

Dapat disederhanakan menjadi :

$$(1-w^2)\left[v'' + \frac{2mwv'}{(1-w^2)} + \frac{mv}{(1-w^2)} + \frac{2mw^2v}{(1-w^2)^2} + \frac{m^2w^2v}{(1-w^2)^2}\right] - 2w(m+1)\left[v' + \frac{mwv}{(1-w^2)}\right] + (l-m)(l+m+1)v = 0$$

$$v''(1-w^2) + 2mwv' + mv + \frac{2mw^2v}{(1-w^2)} + \frac{m^2w^2v}{(1-w^2)} - 2mwv' - \frac{2m^2w^2v}{(1-w^2)} - 2wv' - \frac{2mw^2v}{(1-w^2)} + (l-m)(l+m+1)v = 0$$

$$v''(1-w^2) + mv - \frac{m^2w^2v}{(1-w^2)} - 2wv' + (l-m)(l+m+1)v = 0$$

$$v''(1-w^2) + mv - \frac{m^2w^2v}{(1-w^2)} - 2wv' + (l^2+l-m^2)v - mv = 0$$

$$v''(1-w^2) - 2wv' + \left[l(l+1) - m^2 - \frac{m^2w^2}{(1-w^2)}\right]v = 0$$

$$v''(1-w^2) - 2wv' + \left[l(l+1) - \frac{m^2(1-w^2) - m^2w^2}{(1-w^2)}\right]v = 0$$

$$v''(1-w^2) - 2wv' + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{(1-w^2)}\right]v = 0$$

dengan solusi :

$$v_{(w)} = u_{(w)}\,(1-w^2)^{\frac{m}{2}}$$

dengan,

$$u_{(w)} = u = U = \frac{d^m}{dw^m}\Theta^n_{l(w)}$$

dari rumus Rodrigues yang telah diturunkan pada persamaan sebelumnya diperoleh :

$$\Theta^n_{l(w)} = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dw^l}\,(w^2-1)^l$$

Sehingga solusi dari persamaan *self adjoint* diatas dapat ditulis

$$v_{(w)} = \frac{d^m}{dw^m}\frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{dw^l}\,(w^2-1)^l\ \ (1-w^2)^{\frac{m}{2}}$$

$$v_{(w)} = \ (1-w^2)^{\frac{m}{2}}\,\frac{1}{2^l l!}\frac{d^{l+m}}{dw^{l+m}}\,(w^2-1)^l$$

Persamaan diatas merupakan persamaan yang identik dengan persamaan Polar yang merupakan diferensial orde dua fungsi *Legendre* terasosiasi :

$$(1-w^2)\frac{d^2\Theta}{dw^2} - 2w\frac{d\Theta}{dw} + l(l+1)\Theta - \frac{m^2\Theta}{sin^2\theta} = 0$$

$$(1-w^2)\Theta'' - 2w\Theta' + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{sin^2\theta}\right]\Theta = 0$$

$$(1-w^2)\Theta'' - 2w\Theta' + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{sin^2\theta}\right]\Theta = 0$$

$$(1-w^2)\Theta'' - 2w\Theta' + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{(1-cos^2\theta)}\right]\Theta = 0$$

diperoleh $w = cos^2\theta$ maka solusi persamaan Polar diberikan :

$$\Theta_{(cos^2\theta)} = \ (1-cos^2\theta)^{\frac{m}{2}}\,\frac{1}{2^l l!}\frac{d^{l+m}}{dcos^{l+m}\theta}\,(cos^2\theta-1)^l$$

$$\Theta^{\ m}_{\ l\ (cos\theta)} = \ (1-cos^2\theta)^{\frac{m}{2}}\,\frac{1}{2^l l!}\frac{d^{l+m}}{dcos^{l+m}\theta}\,(cos^2\theta-1)^l$$

LAMPIRAN F. NORMALISASI PERSAMAAN POLAR

Fungsi gelombang Polar harus berkelakuan baik. Secara fisis dapat diartikan fungsi gelombangnya harus memiliki probabilitas yang berhingga, bernilai tunggal, dan linier. Oleh karena itu fungsi gelombang harus memenuhi syarat normalisasi. Dapat dituliskan :

$$\Theta_{(\theta)} = \Theta_{lm(\theta)} = N_{lm}\Theta\,{}^{m}_{l\,(cos\theta)} = N_{lm}P\,{}^{m}_{l\,(cos\theta)}$$

$$\Theta_{(\theta)} = N_{lm}\left[\,(1-cos^2\theta)^{\frac{m}{2}}\,\frac{1}{2^l l!}\frac{d^{l+m}}{dcos^{l+m}\theta}\,(cos^2\theta-1)^l\right]$$

dengan N_{lm} merupakan konstanta Normalisasi yang diperoleh dengan menggunakan syarat Ortogonalitas. Untuk menentukan konstanta Normalisasi dapat dijabarkan sebagai berikut :

$$\left(\Theta_{lm(\theta)},\Theta_{l'm'(\theta)}\right) = N_{lm} * N_{l'm'}\int_0^{\pi} P\,{}^{m}_{l\,(cos\theta)}\;P\,{}^{m'}_{l'\,(cos\theta)}\,sin\,\theta\,d\theta = \delta_{ll'}\delta_{mm'} = 1$$

Syarat ortogonalitas :

Jika $l \neq l'$ diperoleh $\delta_{ll'}$ = 0

Jika $l = l'$ diperoleh $\delta_{ll'}$ = 1

Pembuktian syarat ortogonalitas dapat dijabarkan sebagai berikut :

<u>Untuk l ≠ l′</u>

Dapat diperoleh pendekatan yang cukup baik dengan asumsi bahwa l lebih besar dari l' atau $l > l'$. Dengan menggunakan integral parsial diperoleh :

$$\int_{-1}^{1} P_{l(x)}P_{l'(x)} = \frac{1}{2^l l!}\frac{1}{2^l l'!}\int_{-1}^{1}\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l}(x^2-1)^l\right]\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'}(x^2-1)^{l'}\right]dx$$

$$(2^l l!)(2^l l'!)\int_{-1}^{1} P_{l(x)}P_{l'(x)} = \int_{-1}^{1}\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l}(x^2-1)^l\right]\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'}(x^2-1)^{l'}\right]dx$$

$$(2^l l!)(2^l l'!)\int_{-1}^{1} P_{l(x)}P_{l'(x)} = \left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l-1}(x^2-1)^l\right]\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'}(x^2-1)^{l'}\right]\Big|_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1}\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l-1}(x^2-1)^l\right]\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'+1}(x^2-1)^{l'}\right]dx$$

Suku pertama ruas kanan

Pada suku pertama ruas kanan diperoleh bahwa $\left(\frac{d}{dx}\right)^{l+l'}(x^2-1)^{l'}=0$ karena $(x^2-1)^{l'}$ merupakan suatu bentuk polynomial yang memiliki pangkat tertinggi $2l'$ sehingga semua koefisien deret dengan pangkat lebih besar dari $2l'$ akan bernilai *nol*. Jika $l>l'$ maka $l+l'>2l'$. Dapat dijabarkan sebagai berikut :

$$\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l-n}(x^2-1)^{l}\right]\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'+n-1}(x^2-1)^{l'}\right]\Big|_{-1}^{1}=\cdots \qquad n = 1,2,3,\ \ldots\ l$$

Deret pangkat dapat diuraikan :

$(x^2-1)^l=(x^2-1)(x^2-1)(x^2-1)\ldots(x^2-1)$ sebanyak *l* kali.

Turunan ke-0, 1, 2, 3, … hingga *l-1* akan menyisakan paling sedikit 1 faktor dari (x^2-1).

Turunan ke nol : $\frac{d^0}{dx^0}(x^2-1)^l=(x^2-1)^l$

Turunan pertama : $\frac{d}{dx}(x^2-1)^l=2lx(x^2-1)^{l-1}$

Turunan kedua : $\frac{d^2}{dx^2}(x^2-1)^l=2l(x^2-1)^{l-1}+2l(l-1)2x^2(x^2-1)^{l-2}$

Dengan memasukkan batas integrasi dari -1 hingga 1 diperoleh :

$$\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l-n}(x^2-1)^{l}\right]\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'+n-1}(x^2-1)^{l'}\right]\Big|_{-1}^{1}=0 \qquad n = 1,2,3,\ \ldots\ l$$

Suku kedua ruas kanan

Persamaan pada ruas kanan dapat dijabarkan sebagai berikut :

$$\int_{-1}^{1}\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l-1}(x^2-1)^{l}\right]\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'+1}(x^2-1)^{l'}\right]dx=\cdots$$

Diperoleh nilai diferensial dari $\left(\frac{d}{dx}\right)^{l+l'}(x^2-1)^{l'}=0$. $(x^2-1)^{l'}$ merupakan polynomial dengan pangkat tertinggi $2l'$ dan semua koefisien dengan pangkat diatas dari $2l'$ bernilai *nol*. Jika $l\neq l'$ maka $l+l'>2l'$, sehingga diperoleh :

$$\int_{-1}^{1}\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l}(x^2-1)^{l}\right]\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'}(x^2-1)^{l'}\right]dx=0$$

Berdasarkan penjabaran diatas diperoleh suku pertama dan suku kedua pada ruas kanan persamaan Normalisasi bernilai *nol*. Dengan demikian diperoleh :

$$\int_{-1}^{1} P_{l(x)} P_{l'(x)} = 0$$

Untuk l = l'

Persamaan Normalisasi dapat dituliskan kembali menjadi :

$$\int_{-1}^{1} P_{l(x)} P_{l'(x)} = \frac{1}{2^l l!} \frac{1}{2^l l'!} \int_{-1}^{1} \left[\left(\frac{d}{dx}\right)^l (x^2-1)^l \right] \left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'} (x^2-1)^{l'} \right] dx$$

$$(2^l l!)(2^l l'!) \int_{-1}^{1} P_{l(x)} P_{l'(x)} = \left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l-1} (x^2-1)^l \right] \left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'} (x^2 - 1)^{l'} \right] \Big|_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1} \left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l-1} (x^2-1)^l \right] \left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'+1} (x^2-1)^{l'} \right] dx$$

Suku pertama ruas kanan merupakan suatu keadaan terikat (*bound states*) sama seperti kasus untuk $l \neq l'$ dimana $\left(\frac{d}{dx}\right)^{l-1} (x^2-1)^l = 0$. Untuk suku kedua ruas kanan, nilai integral tidak sama dengan nol. Nilai integral dapat dijabarkan :

$$-\int_{-1}^{1} \left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l-1} (x^2-1)^l \right] \left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'+1} (x^2-1)^{l'} \right] dx = \cdots$$

Untuk nilai $l = l'$ diperoleh :

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^{l-1} \left(\frac{d}{dx}\right)^{l'+1} = \left(\frac{d}{dx}\right)^{2l}$$

Persamaan Normalisasi dapat disederhanakan menjadi :

$$(2^l l!)(2^l l'!) \int_{-1}^{1} \left[P_{l(x)}\right]^2 dx = (-1)^l \int_{-1}^{1} (x^2-1)^l \left(\frac{d}{dx}\right)^{2l} (x^2-1)^l dx$$

Dengan menggunakan aturan *Leibnit'z* diperoleh :

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^{2l} (x^2-1)^l = \left(\frac{d}{dx}\right)^{2l} (x)^{2l} = 2l\,!$$

$$(2^l l!)(2^l l'!) \int_{-1}^{1} \left[P_{l(x)}\right]^2 dx = 2l\,!\,(-1)^l \int_{-1}^{1} (x^2-1)^l dx$$

Untuk menyelesaikan bentuk integral pada ruas kanan dapat digunakan permisalan :

$$x = \cos\theta \qquad\qquad \sin\theta = \sqrt{(1-x^2)}$$

$$dx = -\sin\theta \, d\theta \qquad \sin^2\theta = (1 - x^2)$$

$$(-1)^l (x^2 - 1)^l = (1)^l (1 - x^2)^l$$

batas integrasi dapat diubah menjadi :

$x =$	-1	0	1	dst
$\theta =$	π	$\frac{\pi}{2}$	0	dst

dapat dituliskan kembali :

$$(2^l l!)(2^l l'!) \int_{-1}^{1} \left[P_{l(x)}\right]^2 dx = 2l\,!\,(1)^l \int_{-1}^{1} (1 - x^2)^l dx$$

$$= 2l\,!\,(1)^l \int_{\pi}^{0} (\sin\theta)^{2l} (-\sin\theta)\, d\theta$$

$$= (2)2l\,! \int_{\frac{\pi}{2}}^{0} (\sin\theta)^{2l} (-\sin\theta)\, d\theta$$

$$= (2)2l\,! \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} (\sin\theta)^{2l+1}\, d\theta$$

$$= (2)2l\,! \left[\frac{(2)(4)\dots(2l)}{(1)(3)(5)\dots(2l+1)}\right] \left[\frac{(2)(4)\dots(2l)}{(2)(4)\dots(2l)}\right]$$

$$= (2)2l\,! \left[\frac{(2l)^2}{(2l+1)!}\right]$$

$$\int_{-1}^{1} \left[P_{l(x)}\right]^2 dx = \frac{2}{2l+1}$$

Dengan cara yang sama diperoleh persamaan lengkap Normalisasi persamaan Polar :

$$\int_0^{\pi} P^{\,m}_{\;l\,(\cos\theta)}\, P^{\,m\prime}_{\;l\prime\,(\cos\theta)} \sin\theta\, d\theta = \frac{1}{2^l l!} \frac{1}{2^{l'} l'!} \int_0^{\pi} \left[(1 - \cos^2\theta)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{l+m}}{d\cos^{l+m}\theta} (\cos^2\theta - 1)^l \right] \left[(1 - \cos^2\theta)^{\frac{m'}{2}} \frac{d^{l'+m'}}{d\cos^{l'+m'}\theta} (\cos^2\theta - 1)^{l'} \right] \sin\theta\, d\theta$$

Dengan menggunakan subtitusi variabel dapat diperoleh :

$$2^l l!\,2^{l'} l'!\int_0^{\pi} P_{l\,(cos\theta)}^{\,m}\, P_{l'\,(cos\theta)}^{\,m'}\, sin\,\theta\, d\theta = \int_1^{-1}\left[(1-x^2)^{\frac{m}{2}}\left(\frac{d}{dx}\right)^{l+m}(x^2-1)^l\right]\left[(1-x^2)^{\frac{m'}{2}}\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'+m'}(x^2-1)^{l'}\right](-1)dx$$

$$2^l l!\,2^{l'} l'!\int_1^{-1} P_{l\,(x)}^{\,m}\, P_{l'\,(x)}^{\,m'}\,(-1)dx = \int_1^{-1}\left[(-1)^{\frac{m}{2}}(x^2-1)^{\frac{m}{2}}\left(\frac{d}{dx}\right)^{l+m}(x^2-1)^l\right]\left[(-1)^{\frac{m'}{2}}(x^2-1)^{\frac{m'}{2}}\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'+m'}(x^2-)^{l'}\right](-1)dx$$

$$2^l l!\,2^{l'} l'!\int_1^{-1} P_{l\,(x)}^{\,m}\, P_{l'\,(x)}^{\,m'}\,dx = (-1)^{\frac{m}{2}+\frac{m'}{2}}\int_1^{-1}\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l}(x^2-1)^l\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'}(x^2-1)^{l'}\right]\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{m}(x^2-1)^{\frac{m}{2}}\left(\frac{d}{dx}\right)^{m'}(x^2-1)^{\frac{m'}{2}}\right]dx$$

Syarat ortogonalitas :

Jika $l \neq l'$ diperoleh $\delta_{ll'}$ = 0 ; Jika $m \neq m'$ diperoleh $\delta_{mm'}$ = 0

Jika $l = l'$ diperoleh $\delta_{ll'}$ = 1 ; Jika $m = m'$ diperoleh $\delta_{mm'}$ = 1

Untuk $m \neq m'$ dengan pendekatan bahwa m lebih besar dari m' atau $m > m'$ akan diperoleh suatu deret seperti pada persamaan ortogonalitas sebelumnya. Terdapat suatu deret yang memiliki pangkat tertinggi $2l'$ sehingga semua koefisien deret dengan pangkat lebih besar dari $2l'$ akan bernilai *nol*. Jika $l > l'$ maka l+$l' > 2l'$. Dengan demikian akan diperoleh bahwa untuk $m \neq m'$ akan diperoleh :

$$\int_1^{-1} P_{l\,(x)}^{\,m}\, P_{l'\,(x)}^{\,m'}\,dx = 0$$

Akan tetapi jika nilai $m = m'$ persamaan ortogonalitas tidak bernilai *nol* melainkan bernilai tertentu. Dapat dijabarkan sebagai berikut :

$$\int_1^{-1} P_{l\,(x)}^{\,m}\, P_{l'\,(x)}^{\,m'}\,dx = \frac{1}{2^l l!}\frac{1}{2^{l'} l'!}(-1)^{\frac{m}{2}+\frac{m'}{2}}\int_1^{-1}\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l}(x^2-1)^l\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'}(x^2-1)^{l'}\right]\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{m}(x^2-1)^{\frac{m}{2}}\left(\frac{d}{dx}\right)^{m'}(x^2-1)^{\frac{m'}{2}}\right]dx$$

Untuk nilai,

$$\frac{1}{2^l l!}\frac{1}{2^{l'} l'!}\int_1^{-1}\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{l}(x^2-1)^l\left(\frac{d}{dx}\right)^{l'}(x^2-1)^{l'}\right]dx = \frac{2}{2l+1}$$

Normalisasi persamaan Polar dapat dituliskan kembali menjadi bentuk yang lebih sederhana :

$$\int_1^{-1} P_{l\,(x)}^{m} P_{l'\,(x)}^{m'}\, dx = \left[\frac{2}{2l+1}\right](-1)^{\frac{m}{2}+\frac{m'}{2}} \int_1^{-1}\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^m (x^2-1)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dx}\right)^{m'} (x^2-1)^{\frac{m'}{2}}\right] dx$$

Untuk $m = m'$ diperoleh :

$$\int_1^{-1} \left[P_{l\,(x)}^{m}\right]^2 dx = \left[\frac{2}{2l+1}\right](-1)^m \int_1^{-1} \left[\left(\frac{d}{dx}\right)^{2m} (x^2-1)^m\right] dx$$

dapat dilakukan ekspansi deret pangkat sebagai berikut :

$$(x^2-1)^m = x^{2m} + m(x^2)^{m-1}(-1) + \frac{m(m-1)}{2!}(x^2)^{m-2}(-1)^2 + \ldots \frac{m(m-1)(m-2)\ldots(m-n+1)}{n!}(x^2)^{m-n}(-1)^n$$

Koefisien suku terakhirnya dapat disedernahanakan :

$$\frac{m(m-1)(m-2)\ldots(m-n+1)}{n!}\frac{(m-n)(m-n-1)\ldots 2.1}{(m-n)(m-n-1)\ldots 2.1} = \frac{m!}{n!(m-n)!}$$

Jika $n = l$ dengan l merupakan bilangan kuantum orbital, maka dapat dituliskan :

$$(x^2-1)^m = x^{2m} + m(x^2)^{m-1}(-1) + \frac{m(m-1)}{2!}(x^2)^{m-2}(-1)^2 + \cdots + \frac{m!}{l!(m-l)!}$$

Untuk mengubah bentuk deret menjadi bentuk persamaan diferensial, maka untuk setiap n bilangan bulat berlaku aturan notasi *Leibnit'z* sebagai berikut :

$$\frac{d^n}{dx^n}[A(x)B(x)] = \sum_{s=0}^{n}\binom{n}{s}\frac{d^{n-x}}{dx^{n-x}}A(x)\frac{d^x}{dx^n}B(x)\binom{n}{s} = \frac{n!}{(n-s)!\,s!}$$

diperoleh :

$$\int_1^{-1} P_{l\,(x)}^{m} P_{l'\,(x)}^{m'}\, dx = \frac{1}{2^l l!}\frac{1}{2^{l'} l'!}(-1)^{\frac{m}{2}+\frac{m'}{2}} \int_1^{-1}\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^l (x^2-1)^l \left(\frac{d}{dx}\right)^{l'} (x^2-1)^{l'}\right]\left[\left(\frac{d}{dx}\right)^m (x^2-1)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dx}\right)^{m'} (x^2-1)^{\frac{m'}{2}}\right] dx$$

$$\int_1^{-1} P_{l\,(x)}^{m}\, P_{l'\,(x)}^{m'}\, dx = \left[\frac{2}{2l+1}\right](-1)^m\left[\frac{(l+m)!\,l!}{m!}\right]\frac{m!}{l!\,(m-l)!}$$

$$\int_1^{-1} P_{l\,(x)}^{m}\, P_{l'\,(x)}^{m'}\, dx = \left[\frac{2}{2l+1}\right]\left[\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\right]$$

Melalui penurunan persamaan – persamaan diatas diperoleh konstanta Normalisasi :

$$\left(\Theta_{lm(\theta)}, \Theta_{l\prime m\prime(\theta)}\right) = N_{lm} * N_{l\prime m\prime} \int_0^{\pi} P_{\ \ l\ (cos\theta)}^{\ m} \ P_{\ \ l'\ (cos\theta)}^{\ m'} \ sin\,\theta\ d\theta = 1$$

$$\left(\Theta_{lm(\theta)}, \Theta_{l\prime m\prime(\theta)}\right) = [N_{lm}]^2 \left[\frac{2}{2l+1}\right]\left[\frac{(l+m)!}{(l-m)!}\right] = 1$$

$$N_{lm} = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}}$$

Solusi umum persamaan Polar dapat dituliskan :

$$\Theta_{(\theta)} = N_{lm}\left[(1-cos^2\theta)^{\frac{m}{2}} \frac{1}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dcos^{l+m}\theta}\ (cos^2\theta - 1)^l\right]$$

$$\Theta_{(\theta)} = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}}\left[(1-cos^2\theta)^{\frac{m}{2}} \frac{1}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dcos^{l+m}\theta}\ (cos^2\theta - 1)^l\right]$$

LAMPIRAN G. PENJABARAN PERSAMAAN AZIMUTH

Berikut adalah penjabaran untuk memperoleh solusi persamaan *azimuth* (2.39) :

a. Jika digunakan konstanta m^2

$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = m^2\,\Phi$ $\qquad$ $\frac{d^2}{d\varphi^2} = m^2$

digunakan permisalan $\frac{d}{d\varphi} = D$

$D^2 = m^2$ $\qquad$ $D = \frac{d}{d\varphi} = m$

$\frac{d\Phi}{d\varphi} = m\Phi$ $\qquad$ $\frac{d\Phi}{\Phi} = m d\varphi$

dengan mengintegralkan kedua ruas didapatkan solusi sebagai berikut :

$\int_{\Phi_0}^{\Phi} \frac{d\Phi}{\Phi} = m \int_0^{\varphi} d\varphi \rightarrow \ln \frac{\Phi}{\Phi_0} = m\, d\varphi$

$\Phi = \Phi_0\, e^{\pm m\varphi}$.

Jika digunakan konstanta m^2 yang memiliki solusi $\Phi = \Phi_0\, e^{\pm m\varphi}$, untuk nilai $\varphi = \frac{\pi}{2}$ dan m = 0,1,2,3, …. (bilangan bulat positif) diperoleh :

$\Phi\,(\varphi) = \Phi_0\, e^{\pm m\left(\frac{\pi}{2}\right)} = \Phi_0\, e^{\left(\frac{\pi}{2}\right)}$

$\Phi\,(\varphi + 2\pi) = \Phi_0\, e^{\pm m\left(\frac{\pi}{2} + 2\pi\right)} = \Phi_0\, e^{\left(\frac{\pi}{2} + 2\pi\right)}$

sehingga didapatkan suatu hubungan, $\Phi\,(\varphi) \neq \Phi\,(\varphi + 2\pi)$. Secara fisis hal tersebut dapat diartikan bahwa untuk suatu satu posisi yang sama misalnya $\varphi = \frac{\pi}{2}$ akan diperoleh suatu nilai yang berbeda.

b. Jika digunakan konstanta $-\,m^2$

$\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = -\,m^2\,\Phi$ $\qquad$ $\frac{d^2}{d\varphi^2} = -\,m^2$

Digunakan permisalan $\frac{d}{d\varphi} = D$

$D^2 = -m^2$ $\qquad$ $D = \frac{d}{d\varphi} = \pm\, im$

$\frac{d\Phi}{d\varphi} = \pm\, im\Phi$ $\qquad$ $\frac{d\Phi}{\Phi} = \pm\, imd\varphi$

Dengan mengintegralkan kedua ruas didapatkan solusi sebagai berikut :

$\int_{\Phi_0}^{\Phi} \frac{d\Phi}{\Phi} = \pm\, im \int_0^{\varphi} d\varphi \rightarrow \ln \frac{\Phi}{\Phi_0} = \pm\, imd\varphi$

$\Phi = \Phi_0\, e^{\pm im\varphi}$

Fungsi tersebut dapat dituliskan dalam bentuk :

$\Phi = \Phi_0\, e^{im\varphi} \pm \Phi_0\, e^{-im\varphi}$

Dipilih (–) sehingga dihasilkan solusi dengan grafik berbentuk sinusoidal.

$\Phi = \Phi_0\, e^{im\varphi}$ - $\Phi_0\, e^{-im\varphi}$ $x\, \frac{2i}{2i} = \Phi_0\,(2i)\left(\frac{e^{im\varphi} - e^{-im\varphi}}{2i}\right)$

$\Phi = A \sin\,(m\varphi)$

dengan $A = \Phi_0\,(2i)$ merupakan konstanta yang menunjukkan amplitudo gelombang. Apabila digunakan konstanta $-\,m^2$ dengan solusi

$\Phi = A \sin\,(m\varphi)$ diperoleh :

$\Phi\,(\varphi) = A \sin m\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1$

$\Phi\,(\varphi + 2\pi) = A \sin m\left(\frac{\pi}{2} + 2\pi\right) = 1$

Sehingga didapatkan suatu hubungan, $\Phi\,(\varphi) = \Phi\,(\varphi + 2\pi)$.

Persamaan azimuth dapat dituliskan kembali sebagai berikut :

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + m^2 \Phi = 0$$

dengan solusi :

$$\Phi = \Phi_0\, e^{\pm im\varphi}$$

Φ_0 merupakan suatu konstanta yang menyatakan amplitudo gelombang. Nilai amplitudo gelombang $\Phi_0 = A$ dapat ditentukan dengan menggunakan syarat Normalisai berikut :

$$\int_{-\pi}^{\pi} \Phi_m{}^*\,(\varphi)\Phi_m\,(\varphi)\,d\varphi = 1 \;\rightarrow\; \int_{-\pi}^{\pi} A^2 e^{im\varphi}\;\; e^{-im\varphi} d\varphi = 1$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} A^2\;\, d\varphi = 1 \qquad A^2[\pi - (-\pi)] = 1$$

$$A^2[2\pi] = 1 \qquad A = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}$$

solusi Azimutal secara lengkap dapat ditulisakan kembali menjadi :

$\Phi = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\, e^{\pm im\varphi}$ dengan m merupakan bilangan bulat magnetik.

LAMPIRAN H. FUNGSI GELOMBANG ION LITHIUM (Li^{2+})

1. Fungsi Gelombang Radial

$$R_{nl}(r) = \left[\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\,[(n+l)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{2Zr}{na_0}\right]^l e^{-\frac{Zr}{na_0}} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

dengan Rumus Rodrigues :

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = (-1)^{2l+1} \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!} e^{\frac{2Zr}{na_0}} \frac{d^{n+l}}{d\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{n+l}} \left(e^{-\frac{2Zr}{na_0}} . \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{n-l-1}\right)$$

Untuk ion Lithium (Li^{2+}) nomor atom $Z = 3$, maka persamaan diatas dituliskan :

$$R_{nl}(r) = 3\sqrt{3}\left[\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n\,[(n+l)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{6r}{na_0}\right]^l e^{-\frac{3r}{na_0}} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = (-1)^{2l+1} \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!} e^{\frac{6r}{na_0}} \frac{d^{n+l}}{d\left(\frac{6r}{na_0}\right)^{n+l}} \left(e^{-\frac{6r}{na_0}} . \left(\frac{6r}{na_0}\right)^{n-l-1}\right)$$

a. Untuk ***n=1, l=0***

$$R_{10}(r) = 3\sqrt{3}\left[\left(\frac{2}{a_0}\right)^3 \frac{(1-0-1)!}{2[(1+0)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{6r}{a_0}\right]^0 e^{-\frac{3r}{a_0}} L_1^1(\rho)$$

dengan Rumus Rodrigues :

$$L_1^1(\rho) = (-1)^1 \frac{(1+0)!}{(1-0-1)!} e^{\frac{6r}{a_0}} \frac{d}{d\left(\frac{6r}{na_0}\right)^1} \left(e^{-\frac{6r}{a_0}} . \left(\frac{6r}{a_0}\right)^{1-0-1}\right)$$

$$L_1^1(\rho) = (-1)(e^{\frac{6r}{a_0}})(e^{-\frac{6r}{a_0}}) = 1$$

Maka diperoleh rumusan fungsi gelombang radial ion Lithium untuk $n=1$ $l=0$:

$$R_{10} = 3\sqrt{3}\left[\left(\frac{2}{a_0}\right)^3 \frac{1}{2}\right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{3r}{a_0}}(1)$$

$$R_{10} = 3\sqrt{3}\,\frac{2}{a_0^{\frac{3}{2}}}\, e^{-\frac{3r}{a_0}}$$

b. Untuk ***n=2, l=0***

$$R_{20}(r) = 3\sqrt{3}\left[\left(\frac{2}{2\,a_0}\right)^3 \frac{(2-0-1)!}{2.2\,[(2+0)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{6r}{2\,a_0}\right]^0 e^{-\frac{3r}{2\,a_0}} L_2^1(\rho)$$

dengan Rumus Rodrigues :

$$L_2^1\ (\rho) = (-1)^{1}\ \frac{(2+0)!}{(2-0-1)!} e^{\frac{6r}{2a_0}} \frac{d^2}{d\left(\frac{6r}{2\,a_0}\right)^2}\left(e^{-\frac{6r}{2a_0}}.\left(\frac{6r}{2a_0}\right)^{2-0-1}\right)$$

$$L_2^1\ (\rho) = (-1)\frac{2}{1} e^{\frac{3r}{a_0}} \frac{d^2}{d\left(\frac{3r}{a_0}\right)^2}\left(e^{-\frac{3r}{a_0}}.\left(\frac{3r}{a_0}\right)\right)$$

Dengan menggunakan turuan parsial dua kali, diperoleh :

Misalkan, $y = e^{-\frac{3r}{a_0}}.\left(\frac{3r}{a_0}\right)$

$$y' = \frac{d}{d\left(\frac{3r}{a_0}\right)^1}\left(e^{-\frac{3r}{a_0}}.\left(\frac{3r}{a_0}\right)\right) = e^{-\frac{3r}{a_0}} - e^{-\frac{3r}{a_0}}.\left(\frac{3r}{a_0}\right)$$

$$y'' = \frac{d^2}{d\left(\frac{3r}{a_0}\right)^2}\left(e^{-\frac{3r}{a_0}}.\left(\frac{3r}{a_0}\right)\right) = e^{-\frac{3r}{a_0}}.\left(\frac{3r}{a_0}\right) - e^{-\frac{3r}{a_0}} - e^{-\frac{3r}{a_0}} = e^{-\frac{3r}{a_0}}.\left(\frac{3r}{a_0}\right) - 2.e^{-\frac{3r}{a_0}}$$

dapat dituliskan kembali menjadi :

$$L_2^1\ (\rho) = (-2)\, e^{\frac{3r}{a_0}}\left[e^{-\frac{3r}{a_0}}.\left(\frac{3r}{a_0}\right) - 2.e^{-\frac{3r}{a_0}}\right] = 2\left[2 - \left(\frac{3r}{a_0}\right)\right]$$

Maka diperoleh rumusan fungsi gelombang radial ion Lithium untuk *n=2 l=0* :

$$R_{20} = 3\sqrt{3}\,\frac{1}{2}\left[\left(\frac{1}{2a_0}\right)^3\right]^{\frac{1}{2}}\left[e^{-\frac{3r}{2\,a_0}}\right] 2\left[2 - \left(\frac{3r}{a_0}\right)\right]$$

$$R_{20} = \frac{3\sqrt{3}}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}}\left[e^{-\frac{3r}{2\,a_0}}\right]\left[2 - \left(\frac{3r}{a_0}\right)\right]$$

c. Untuk ***n=2, l=1***

$$R_{21}\,(r) = 3\sqrt{3}\left[\left(\frac{2}{2\,a_0}\right)^3 \frac{(2-1-1)!}{2.2\,[(2+1)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\frac{6r}{2\,a_0}\right]^1 e^{-\frac{3r}{2a_0}} L_{2+1}^{2+1}\ (\rho)$$

Dengan Rumus Rodrigues :

$$L_3^3\ (\rho) = (-1)^{2+1}\frac{(2+1)!}{(2-1-1)!} e^{\frac{6r}{2a_0}} \frac{d^{2+1}}{d\left(\frac{6r}{2a_0}\right)^{2+1}}\left(e^{-\frac{6r}{2a_0}}.\left(\frac{6r}{2a_0}\right)^{2-1-1}\right)$$

$$L_3^3\ (\rho) = (-1)^3\frac{(3)!}{(0)!} e^{\frac{3r}{a_0}} \frac{d^3}{d\left(\frac{6r}{2a_0}\right)^3}\left(e^{-\frac{3r}{a_0}}.\left(\frac{3r}{a_0}\right)^0\right) = -6\left(e^{\frac{3r}{a_0}}\right)\left(-e^{\frac{3r}{a_0}}\right) = 6$$

Maka diperoleh fungsi gelombang radial ion Lithium untuk *n=2 l=1* :

$$R_{21} = 3\sqrt{3}\left[\left(\frac{1}{a_0}\right)^3 \frac{1}{2.2\,[(3)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\frac{6r}{2a_0}\right]^1 e^{-\frac{3r}{2a_0}}\,(6) = \frac{3}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}}$$

d. Untuk ***n=3 l=0***

$$R_{30}(r) = 3\sqrt{3}\left[\left(\frac{2}{3a_0}\right)^3 \frac{(3-0-1)!}{2.3\,[(3+0)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{6r}{3a_0}\right]^l e^{-\frac{3r}{3a_0}} L^{2.0+1}_{3+0}\ (\rho)$$

Dengan Rumus Rodrigues :

$$L^{2.0+1}_{3+0}\ (\rho) = (-1)^{2.0+1} \frac{(3+0)!}{(3-0-1)!} e^{\frac{6r}{3a_0}} \frac{d^{3+0}}{d\left(\frac{6r}{3a_0}\right)^{3+0}} \left(e^{-\frac{6r}{3a_0}}.\left(\frac{6r}{3a_0}\right)^{3-0-1}\right)$$

$$L^1_3\ (\rho) = (-1)\frac{(3)!}{(2)!} e^{\frac{2r}{a_0}} \frac{d^3}{d\left(\frac{2r}{a_0}\right)^3}\left(e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right)^2\right)$$

Dengan menggunakan turuan parsial tiga kali, diperoleh :

Misalkan, $y = e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right)^2$

$$y' = \frac{d}{d\left(\frac{2r}{a_0}\right)^1}\left(e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right)^2\right) = -\,e^{-\frac{2r}{a_0}}\left(\frac{2r}{a_0}\right)^2 + 2\left(\frac{2r}{a_0}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

$$y'' = \frac{d^2}{d\left(\frac{2r}{a_0}\right)^2}\left(e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right)^2\right) = \left(\frac{2r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} - 4\left(\frac{2r}{a_0}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}} + 2e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

$$y''' = \frac{d^3}{d\left(\frac{3r}{a_0}\right)^3}\left(e^{-\frac{3r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right)^2\right) = 6\left(\frac{2r}{a_0}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}} - 6\,e^{-\frac{2r}{a_0}} - \left(\frac{2r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

dapat dituliskan kembali menjadi :

$$L^1_3\ (\rho) = (-1)(3)\,e^{\frac{2r}{a_0}}\left[6\left(\frac{2r}{a_0}\right)e^{-\frac{2r}{a_0}} - 6\,e^{-\frac{2r}{a_0}} - \left(\frac{2r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{2r}{a_0}}\right]$$

$$L^1_3\ (\rho) = -\,3\left[6\left(\frac{2r}{a_0}\right) - 6 - \left(\frac{2r}{a_0}\right)^2\right]$$

Maka diperoleh fungsi gelombang radial ion Lithium untuk *n=3 l=0* :

$$R_{30} = 3\sqrt{3}\left[\left(\frac{2}{3a_0}\right)^3 \frac{2}{6\,.\,216}\right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}(-3)\left[6\left(\frac{2r}{a_0}\right) - 6 - \left(\frac{2r}{a_0}\right)^2\right]$$

$$R_{30} = 3\sqrt{3}\left[\left(\frac{1}{3a_0}\right)^3 \frac{1}{81}\right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}(-3)\left[6\left(\frac{2r}{a_0}\right) - 6 - \left(\frac{2r}{a_0}\right)^2\right]$$

$$R_{30} = \frac{3\sqrt{3}}{(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{9}\left[e^{-\frac{r}{a_0}}\right](3)\left[\left(\frac{2r}{a_0}\right)^2 - 6\left(\frac{2r}{a_0}\right) + 6\right]$$

$$R_{30} = \frac{3\sqrt{3}}{(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{3}\left[e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\left(\frac{2r}{a_0}\right)^2 - 6\left(\frac{2r}{a_0}\right) + 6\right]$$

$$R_{30} = \frac{3\sqrt{3}\,.\,2}{(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\left[e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\frac{1}{6}\left(\frac{2r}{a_0}\right)^2 - \left(\frac{2r}{a_0}\right) + 1\right]$$

$$R_{30} = \frac{2}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\left[e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\frac{2r^2}{3{a_0}^2} - \left(\frac{2r}{a_0}\right) + 1\right]$$

e. Untuk ***n=3 l=1***

$$R_{31}\,(r) = 3\sqrt{3}\left[\left(\frac{2}{3a_0}\right)^3 \frac{(3-1-1)!}{2.3\,[(3+1)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\frac{6r}{3a_0}\right]^1 e^{-\frac{3r}{3a_0}}\, L_{3+1}^{2.1+1}\;(\rho)$$

Dengan Rumus Rodrigues :

$$L_{3+1}^{2.1+1}\;(\rho) = (-1)^{2.1\,+\,1}\,\frac{(3+1)!}{(3-1-1)!}\,e^{\frac{6r}{3a_0}}\,\frac{d^{3+1}}{d\left(\frac{6r}{3a_0}\right)^{3+1}}\left(e^{-\frac{6r}{3a_0}}.\left(\frac{6r}{3a_0}\right)^{3-1-1}\right)$$

$$L_4^3\;(\rho) = (-1)\,\frac{4!}{1!}\,e^{\frac{2r}{a_0}}\,\frac{d^4}{d\left(\frac{2r}{a_0}\right)^4}\left(e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right)^1\right)$$

Dengan menggunakan turuan parsial empat kali, diperoleh :

Misalkan, $y = e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right)$

$$y' = \frac{d}{d\left(\frac{2r}{a_0}\right)^1}\left(e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right)\right) = e^{-\frac{2r}{a_0}} - e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right)$$

$$y'' = \frac{d^2}{d\left(\frac{2r}{a_0}\right)^2}\left(e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right)\right) = e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right) - e^{-\frac{2r}{a_0}} - e^{-\frac{2r}{a_0}} = e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right) - 2.\,e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

$$y''' = \frac{d^3}{d\left(\frac{2r}{a_0}\right)^3}\left(e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right)\right) = -e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right) + 3.\,e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

$$y'''' = \frac{d^4}{d\left(\frac{2r}{a_0}\right)^4}\left(e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right)\right) = e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right) - 4.\,e^{-\frac{2r}{a_0}}$$

dapat dituliskan kembali menjadi :

$$L_4^3\;(\rho) = (-24)\,e^{\frac{2r}{a_0}}\left[e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right) - 4.\,e^{-\frac{2r}{a_0}}\right]$$

$$L_4^3\;(\rho) = (-24)\left[\left(\frac{2r}{a_0}\right) - 4\right]$$

Maka diperoleh fungsi gelombang radial ion Lithium untuk *n=3 l=1* :

$$R_{31} = 3\sqrt{3}\left[\frac{8}{(3a_0)^3}\,\frac{1}{2.3\,[24]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\frac{2r}{a_0}\right]^1 e^{-\frac{r}{a_0}}\,(-24)\left[\left(\frac{2r}{a_0}\right) - 4\right]$$

$$R_{31} = \frac{3\sqrt{3}}{(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{\sqrt{6.3.24.24}}\left[\frac{2r}{a_0}\right]e^{-\frac{r}{a_0}}(24)\left[4-\left(\frac{2r}{a_0}\right)\right] = \frac{3\sqrt{3}}{(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{3\sqrt{2}}\left[\frac{2r}{a_0}\right]e^{-\frac{r}{a_0}}\left[4-\left(\frac{2r}{a_0}\right)\right]$$

$$R_{31} = \frac{3\sqrt{3}}{(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{3\sqrt{2}}e^{-\frac{r}{a_0}}\left[4\left(\frac{2r}{a_0}\right)-\left(\frac{2r}{a_0}\right)^2\right] = \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{8}{3\sqrt{2}}\left[\frac{r}{a_0}-\frac{r^2}{2a_0{}^2}\right]e^{-\frac{r}{a_0}}$$

f. Untuk ***n*=3 *l*=2**

$$R_{32}(r) = 3\sqrt{3}\left[\left(\frac{2}{3a_0}\right)^3\frac{(3-2-1)!}{2.3\,[(3+2)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\frac{6r}{3\,a_0}\right]^2 e^{-\frac{3r}{3a_0}}L_{3+2}^{2.2+1}\ (\rho)$$

$$R_{32}(r) = 3\sqrt{3}\left[\frac{8}{(3a_0)^3}\frac{1}{6\,[120]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\frac{2r}{a_0}\right]^2 e^{-\frac{r}{a_0}}L_5^5\ (\rho)$$

Dengan Rumus Rodrigues :

$$L_5^5\ (\rho) = (-1)^{2.2+1}\frac{(3+2)!}{(3-2-1)!}e^{\frac{6r}{3\,a_0}}\frac{d^{3+2}}{d\left(\frac{6r}{3a_0}\right)^{3+2}}\left(e^{-\frac{6r}{3a_0}}.\left(\frac{6r}{3a_0}\right)^{3-2-1}\right)$$

$$L_5^5\ (\rho) = (-1)\frac{120}{1}e^{\frac{2r}{a_0}}\frac{d^5}{d\left(\frac{2r}{a_0}\right)^5}\left(e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{6r}{3a_0}\right)^0\right)$$

$$L_5^5\ (\rho) = (-120)\,e^{\frac{2r}{a_0}}\left(-e^{-\frac{2r}{a_0}}\right) = 120$$

Maka diperoleh fungsi gelombang radial ion Lithium untuk *n=3 l=2* :

$$R_{32} = 3\sqrt{3}\left[\frac{8}{(3a_0)^3}\frac{1}{6\,[120]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\frac{2r}{a_0}\right]^2 e^{-\frac{r}{a_0}}(120) = \frac{3\sqrt{3}}{(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{1}{120}\right)\frac{1}{3\sqrt{10}}(120)\frac{4r^2}{a_0{}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}$$

$$R_{32} = \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{4}{3\sqrt{10}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}$$

2. Fungsi Gelombang Polar

$$\Theta_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}}\,P_l^m\cos(\theta)$$

dimana,

$$P_l^m\cos(\theta) = \frac{1}{l!\,2^l}(1-\cos^2\theta)^{\frac{m}{2}}\frac{d^{(l+m)}}{d\cos^{(l+m)}\theta}(\cos^2\theta-1)^l$$

1. Untuk ***l* = 0 *m* = 0**

$$\Theta_{00}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.0+1)(0-0)!}{2(0+0)!}}\,P_0^0\cos(\theta) = \sqrt{\frac{1}{2}}\,P_0^0\cos(\theta)$$

dimana, $P_0^0\cos(\theta) = \frac{1}{0!\,2^0}(1-\cos^2\theta)^{\frac{0}{2}}\frac{d^{(0+0)}}{d\cos^{(0+0)}\theta}(\cos^2\theta-1)^0 = 1$

Diperoleh :

$\Theta_{00}(\theta) = \sqrt{\frac{1}{2}}$

2. Untuk ***l = 1 m = 0***

$\Theta_{10}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.1+1)(1-0)!}{2(1+0)!}}\, P_1^0 \cos(\theta) = \sqrt{\frac{3}{2}}\, P_1^0 \cos(\theta)$

dimana,

$P_1^0 \cos(\theta) = \frac{1}{2}\,(1 - cos^2\theta)^{\frac{0}{2}}\, \frac{d^{(1+0)}}{dcos^{(1+0)}\theta}\,(cos^2\theta - 1)^1$

$P_1^0 \cos(\theta) = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{d}{d\cos\theta}\, cos^2\theta\right) - \left(\frac{d}{d\cos\theta}\, 1\right)\right] = \frac{1}{2}\,(2\cos\theta) = \cos\theta$

diperoleh :

$\Theta_{10}(\theta) = \sqrt{\frac{3}{2}}\, \cos\theta$

3. Untuk ***n = 2 l = 1 m = ± 1***

a. Untuk m = +1

$\Theta_{1+1}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.1+1)(1-1)!}{2(1+1)!}}\, P_1^1 \cos(\theta)$

$\Theta_{1+1}(\theta) = \sqrt{\frac{3}{2.2}}\, P_1^1 \cos(\theta) = \frac{\sqrt{3}}{2}\, P_1^1 \cos(\theta)$

dimana,

$P_1^1 \cos(\theta) = \frac{1}{1!\,2^1}\,(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\, \frac{d^{(1+1)}}{dcos^{(1+1)}\theta}\,(cos^2\theta - 1)^1$

$P_1^1 \cos(\theta) = \frac{1}{2}\,(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\, \frac{d^2}{dcos^2\theta}\,(cos^2\theta - 1)$

$P_1^1 \cos(\theta) = \frac{1}{2}\,(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\, \frac{d}{dcos\theta}\,\frac{d}{dcos\theta}\,(cos^2\theta - 1)$

$P_1^1 \cos(\theta) = \frac{1}{2}\,(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\, \frac{d}{dcos\theta}\,(2\,cos\theta)$

$P_1^1 \cos(\theta) = \frac{1}{2}\,(sin^2\theta)^{\frac{1}{2}}\,(2) = sin\,\theta$

Dengan demikian, fungsi gelombang polar dapat dituliskan kembali menjadi :

$\Theta_{1+1}(\theta) = \sqrt{\frac{3}{2.2}}\, P_1^1 \cos(\theta) = \frac{\sqrt{3}}{2}\, sin\,\theta$

b. Untuk m = -1

$\Theta_{1\text{-}1}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.1+1)(1+1)!}{2(1-1)!}}\, \mathrm{P}_1^{-1} \cos(\theta)$

$\Theta_{1\text{-}1}(\theta) = \sqrt{\frac{3.2}{2}}\, \mathrm{P}_1^{1} \cos(\theta) = \sqrt{3}\, \mathrm{P}_1^{-1} \cos(\theta)$

dimana,

$\mathrm{P}_1^{-1} \cos(\theta) = \frac{1}{1!\,2^1}(1 - \ cos^2\theta)^{\frac{-1}{2}} \frac{d^{(1-1)}}{dcos^{(1-1)}\theta}(cos^2\theta - 1)^1$

$\mathrm{P}_1^{-1} \cos(\theta) = \frac{1}{2}(1 - \ cos^2\theta)^{\frac{-1}{2}}(cos^2\theta - 1)^1$

$\mathrm{P}_1^{-1} \cos(\theta) = \frac{1}{2}(1 - \ cos^2\theta)^{\frac{-1}{2}}[-(1 - cos^2\theta)]$

$\mathrm{P}_1^{-1} \cos(\theta) = -\frac{1}{2}(1 - \ cos^2\theta)^{\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2}(sin^2\theta)^{\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2} sin\theta$

Dengan demikian, fungsi gelombang polar dapat dituliskan kembali menjadi :

$\Theta_{1\text{-}1}(\theta) = -\frac{\sqrt{3}}{2} sin\,\theta$

4. Untuk ***l* = 2 *m* = 0**

$\Theta_{20}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.2+1)(2-0)!}{2(2+0)!}}\, \mathrm{P}_2^{0} \cos(\theta) = \sqrt{\frac{(5)(2)}{2(2)}}\, \mathrm{P}_2^{0} \cos(\theta) = \sqrt{\frac{5}{2}}\, \mathrm{P}_2^{0} \cos(\theta)$

dimana,

$\mathrm{P}_2^{0} \cos(\theta) = \frac{1}{2!\,2^2}(1 - \ cos^2\theta)^{\frac{0}{2}} \frac{d^{(2+0)}}{dcos^{(2+0)}\theta}(cos^2\theta - 1)^2$

$\mathrm{P}_2^{0} \cos(\theta) = \frac{1}{8} \frac{d^{(2)}}{dcos^{(2)}\theta}(cos^2\theta - 1)^2 = \frac{1}{8} \frac{d}{dcos\theta} \frac{d}{dcos\theta}(cos^2\theta - 1)^2$

$\mathrm{P}_2^{0} \cos(\theta) = \frac{1}{8} \frac{d}{dcos\theta} 4 \cos\theta\,(cos^2\theta - 1) = \frac{1}{2}(3cos^2\theta - 1)$

Dengan demikian, fungsi gelombang polar dapat dituliskan kembali menjadi :

$\Theta_{20}(\theta) = \sqrt{\frac{5}{2}}\left[\frac{1}{2}(3cos^2\theta - 1)\right] = \sqrt{\frac{5}{8}}(3cos^2\theta - 1)$

5. Untuk ***l* = 2 *m* = ± 1**

a. Untuk m = +1

$\Theta_{21}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.2+1)(2-1)!}{2(2+1)!}}\, \mathrm{P}_2^{1} \cos(\theta) = \sqrt{\frac{5}{2(3)!}}\, \mathrm{P}_2^{1} \cos(\theta)$

dimana,

$\mathrm{P}_2^{1} \cos(\theta) = \frac{1}{2!\,2^2}(1 - \ cos^2\theta)^{\frac{1}{2}} \frac{d^{(2+1)}}{dcos^{(2+1)}\theta}(cos^2\theta - 1)^2$

$\mathrm{P}_2^1 \cos(\theta) = \frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{dcos\theta} \frac{d^2}{dcos^2\theta}(cos^2\theta - 1)^2$

$\mathrm{P}_2^1 \cos(\theta) = \frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{dcos\theta} 4(3cos^2\theta - 1)$

$\mathrm{P}_2^1 \cos(\theta) = \frac{1}{2}(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}} 6\cos\theta = 3\, sin\theta\, cos\theta$

Dengan demikian, fungsi gelombang polar dapat dituliskan kembali menjadi :

$\Theta_{21}(\theta) = \sqrt{\frac{5}{2(3)!}}\, 3\, sin\theta\, cos\theta = \sqrt{\frac{15}{4}}\, sin\theta\, cos\theta$

b. Untuk m = -1

$\Theta_{2\text{-}1}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.2+1)(2+1)!}{2(2-1)!}}\, \mathrm{P}_2^{-1} \cos(\theta) = \sqrt{\frac{5(3)!}{2}}\, \mathrm{P}_2^{-1} \cos(\theta)$

dimana,

$\mathrm{P}_2^{-1} \cos(\theta) = \frac{1}{2!\, 2^2}(1 - cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}} \frac{d^{(2-1)}}{dcos^{(2-1)}\theta}(cos^2\theta - 1)^2$

$\mathrm{P}_2^{-1} \cos(\theta) = \frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}} \frac{d}{dcos\theta}(cos^2\theta - 1)^2$

$\mathrm{P}_2^{-1} \cos(\theta) = \frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}\, 4\, cos\theta\, (cos^2\theta - 1)$

$\mathrm{P}_2^{-1} \cos(\theta) = -\frac{1}{2}\, sin\theta\, cos\theta$

Dengan demikian, fungsi gelombang polar dapat dituliskan kembali menjadi :

$\Theta_{2\text{-}1}(\theta) = \sqrt{\frac{5(3)!}{2}}\left(-\frac{1}{2}\, sin\theta\, cos\theta\right) = -\sqrt{\frac{15}{4}}\, sin\theta\, cos\theta$

6. Untuk ***l*=2 *m*=±2**

a. Untuk m = +2

$\Theta_{22}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.2+1)(2-2)!}{2(2+2)!}}\, \mathrm{P}_2^2 \cos(\theta) = \sqrt{\frac{5}{2(4)!}}\, \mathrm{P}_2^2 \cos(\theta)$

dimana,

$\mathrm{P}_2^2 \cos(\theta) = \frac{1}{2!\, 2^2}(1 - cos^2\theta)^{\frac{2}{2}} \frac{d^{(2+2)}}{dcos^{(2+2)}\theta}(cos^2\theta - 1)^2$

$\mathrm{P}_2^2 \cos(\theta) = \frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)^1 \frac{d}{dcos\theta} \frac{d^3}{dcos^3\theta}(cos^2\theta - 1)^2 = \frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)^1 \frac{d}{dcos\theta}\, 24\cos\theta$

$\mathrm{P}_2^2 \cos(\theta) = 3\,(1 - cos^2\theta)^1 = 3\, sin^2\theta$

Dengan demikian, fungsi gelombang polar dapat dituliskan kembali menjadi :

$\Theta_{22}(\theta) = \sqrt{\frac{5}{2(4)!}}\, 3\, sin^2\theta = \frac{\sqrt{15}}{4}\, sin^2\theta$

b. Untuk m = -2

$\Theta_{2\text{-}2}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.2+1)(2+2)!}{2(2-2)!}}\, P_2^{-2} \cos(\theta) = \sqrt{\frac{5(4)!}{2}}\, P_2^{-2} \cos(\theta)$

dimana,

$P_2^{-2} \cos(\theta) = \frac{1}{2!\,2^2}(1 - \cos^2\theta)^{\frac{-2}{2}} \frac{d^{(2-2)}}{d\cos^{(2-2)}\theta}(\cos^2\theta - 1)^2$

$P_2^{-2} \cos(\theta) = \frac{1}{8}(1 - \cos^2\theta)^{-1}(\cos^2\theta - 1)^2 = \frac{1}{8}(\cos^2\theta - 1)^1$

Dengan demikian, fungsi gelombang polar dapat dituliskan kembali menjadi :

$\Theta_{2\text{-}2}(\theta) = \sqrt{\frac{5(4)!}{2}}\frac{1}{8}(\cos^2\theta - 1) = -\frac{\sqrt{15}}{4}\sin^2\theta$

3. <u>Fungsi Gelombang Azimuth</u>

1. Untuk ***m = 0***

$\Phi_0(\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\, e^{-i0\varphi} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}$

2. Untuk ***m = ±1***

$\Phi_{\pm 1}(\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\, e^{-i\pm 1\varphi} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\, e^{\pm i\varphi}$

3. Untuk ***m = ±2***

$\Phi_{\pm 2}(\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\, e^{-i\pm 2\varphi} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\, e^{\pm 2i\varphi}$

LAMPIRAN I. FUNGSI HARMONIK BOLA

Fungsi harmonik bola merupakan gabungan dari fungsi gelombang polar dan fungsi gelombang azimuth. Secara matematis dapat dituliskan :

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \Theta_{lm}\,(\theta)\Phi(\varphi) = N_{(\theta,\varphi)}P_l^m(cos\,\theta)\,e^{im\varphi}$$

Untuk menentukan konstanta Normalisasi $N_{(\theta,\varphi)}$ digunakan syarat Normalisasi sebagai berikut :

$$\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{\varphi=0}^{2\pi}|Y_{lm}(\theta,\varphi)|^2 sin\theta\,d\theta\,d\varphi = 1$$

diperoleh konstanta Normalisasi :

$$N_{(\theta,\varphi)} = (-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$$

$$N_{(\theta,\varphi)} = (-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}$$

Fungsi Harmonik Bola dapat dituliskan kembali menjadi :

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^m(cos\,\theta)\,e^{im\varphi}$$

dimana,

$$\mathrm{P}_l^m\cos\,(\theta) = \frac{1}{l!\,2^l}\,(1-\ cos^2\theta)^{\frac{m}{2}}\,\frac{d^{(l+m)}}{dcos^{(l+m)}\theta}\,(cos^2\theta-1)^l$$

Pembuktian Fungsi Harmonik Bola Atom berelektron tunggal hingga n ≤ 3 :

1. Untuk ***l* = *0 m* = *0***

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = (-1)^{(0)}\sqrt{\frac{2.0+1}{4\pi}\frac{(0-0)!}{(0+0)!}}P_0^0(cos\,\theta)\,e^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}P_0^0(cos\,\theta)$$

$$\mathrm{P}_0^0\cos\,(\theta) = \frac{1}{0!\,2^0}\,(1-\ cos^2\theta)^{\frac{0}{2}}\,\frac{d^{(0+0)}}{dcos^{(0+0)}\theta}\,(cos^2\theta-1)^0 = 1$$

diperoleh :

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

2. Untuk ***l* = *1 m* = *0***

$$Y_{10}(\theta,\varphi) = (-1)^{(0)/2}\sqrt{\frac{(2.1+1)(1-0)!}{4\pi\ (1+0)!}}\ \mathrm{P}_1^0 \cos(\theta)\ e^0$$

$$Y_{10}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\ \mathrm{P}_1^0 \cos(\theta)$$

dimana,

$$\mathrm{P}_1^0 \cos(\theta) = \frac{1}{2}\,(1 - cos^2\theta)^{\frac{0}{2}}\ \frac{d^{(1+0)}}{dcos^{(1+0)}\theta}\,(cos^2\theta - 1)^1$$

$$\mathrm{P}_1^0 \cos(\theta) = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{d}{d\cos\theta}\ cos^2\theta\right) - \left(\frac{d}{d\cos\theta}\ 1\right)\right] = \frac{1}{2}\ (2\cos\theta) = \cos\theta$$

diperoleh :

$$Y_{10}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

3. Untuk ***l* = *1 m* = $\pm$ *1***

a. Untuk m = +1

$$Y_{11}(\theta,\varphi) = (-1)^{(1+1)/2}\sqrt{\frac{(2.1+1)(1-1)!}{4\pi(1+1)!}}\ \mathrm{P}_1^1 \cos(\theta)\ e^{i\varphi}$$

$$Y_{11}(\theta,\varphi) = (-1)^1\sqrt{\frac{3}{4\pi(2)!}}\ \mathrm{P}_1^1 \cos(\theta)\ e^{i\varphi}$$

$$Y_{11}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\ \mathrm{P}_1^1 \cos(\theta)\ e^{i\varphi}$$

dimana,

$$\mathrm{P}_1^1 \cos(\theta) = \frac{1}{1!\ 2^1}\,(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\ \frac{d^{(1+1)}}{dcos^{(1+1)}\theta}\,(cos^2\theta - 1)^1$$

$$\mathrm{P}_1^1 \cos(\theta) = \frac{1}{2}\,(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\ \frac{d^2}{dcos^2\theta}\,(cos^2\theta - 1)$$

$$\mathrm{P}_1^1 \cos(\theta) = \frac{1}{2}\,(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\ \frac{d}{dcos\theta}\,(2\,cos\theta)$$

$$\mathrm{P}_1^1 \cos(\theta) = \frac{1}{2}\,(sin^2\theta)^{\frac{1}{2}}\,(2) = sin\,\theta$$

Dengan demikian, fungsi Harmonik Bola dapat dituliskan kembali menjadi :

$$Y_{11}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\ sin\,\theta\, e^{i\varphi}$$

b. Untuk m = -1

$$Y_{1-1}(\theta,\varphi) = (-1)^{(-2)/2}\sqrt{\frac{(2.1+1)(1+1)!}{4\pi(1-1)!}}\ \mathrm{P}_1^{-1} \cos(\theta)\ e^{-i\varphi}$$

$$Y_{1-1}(\theta,\varphi) = (-1)^{(-1)}\sqrt{\frac{(3)(2)!}{4\pi}}\,\mathrm{P}_{1}^{-1}\cos(\theta)\,e^{-i\varphi}$$

dimana,

$$\mathrm{P}_{1}^{-1}\cos(\theta) = \frac{1}{1!\,2^{1}}(1-\ cos^2\theta)^{\frac{-1}{2}}\frac{d^{(1-1)}}{dcos^{(1-1)}\theta}(cos^2\theta-1)^{1}$$

$$\mathrm{P}_{1}^{-1}\cos(\theta) = \frac{1}{2}(1-\ cos^2\theta)^{\frac{-1}{2}}(cos^2\theta-1)^{1}$$

$$\mathrm{P}_{1}^{-1}\cos(\theta) = \frac{1}{2}(1-\ cos^2\theta)^{\frac{-1}{2}}[-(1-cos^2\theta)]$$

$$\mathrm{P}_{1}^{-1}\cos(\theta) = -\frac{1}{2}(1-\ cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}$$

$$\mathrm{P}_{1}^{-1}\cos(\theta) = -\frac{1}{2}(sin^2\theta)^{\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2}\,sin\theta$$

Dengan demikian, fungsi Harmonik Bola dapat dituliskan kembali menjadi :

$$Y_{1-1}(\theta,\varphi) = (-1)\sqrt{\frac{(3)(2)!}{4\pi}}\left(-\frac{1}{2}\,sin\theta\right)e^{-i\varphi}$$

$$Y_{1-1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,sin\,\theta\,e^{-i\varphi}$$

4. Untuk ***l* = 2 *m* = 0**

$$Y_{20}(\theta,\varphi) = (-1)^{(0)/2}\sqrt{\frac{(2.2+1)(2-0)!}{4\pi(2+0)!}}\,\mathrm{P}_{2}^{0}\cos(\theta)\,e^{0}$$

$$Y_{20}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\,\mathrm{P}_{2}^{0}\cos(\theta)\,e^{0}$$

dimana,

$$\mathrm{P}_{2}^{0}\cos(\theta) = \frac{1}{2!\,2^{2}}(1-\ cos^2\theta)^{\frac{0}{2}}\frac{d^{(2+0)}}{dcos^{(2+0)}\theta}(cos^2\theta-1)^{2}$$

$$\mathrm{P}_{2}^{0}\cos(\theta) = \frac{1}{8}\frac{d^{(2)}}{dcos^{(2)}\theta}(cos^2\theta-1)^{2}$$

$$\mathrm{P}_{2}^{0}\cos(\theta) = \frac{1}{8}\frac{d}{dcos\theta}\frac{d}{dcos\theta}(cos^2\theta-1)^{2}$$

$$\mathrm{P}_{2}^{0}\cos(\theta) = \frac{1}{8}\frac{d}{dcos\theta}4\cos\theta\,(cos^2\theta-1) = \frac{1}{2}(3cos^2\theta-1)$$

Dengan demikian, fungsi Harmonik Bola dapat dituliskan kembali menjadi :

$$Y_{20}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\frac{1}{2}(3cos^2\theta-1) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3cos^2\theta-1)$$

5. Untuk ***l* = 2 *m* = ± 1**

a. Untuk m = +1

$$Y_{21}(\theta,\varphi) = (-1)^{(2)/2}\sqrt{\frac{(2.2+1)(2-1)!}{4\pi(2+1)!}}\,\mathrm{P}_2^1\cos(\theta)\,e^{i\varphi}$$

$$Y_{21}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{(5)(1)!}{4\pi(3)!}}\,\mathrm{P}_2^1\cos(\theta)\,e^{i\varphi}$$

dimana,

$$\mathrm{P}_2^1\cos(\theta) = \frac{1}{2!\,2^2}(1-\cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\frac{d^{(2+1)}}{d\cos^{(2+1)}\theta}(\cos^2\theta-1)^2$$

$$\mathrm{P}_2^1\cos(\theta) = \frac{1}{8}(1-\cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\frac{d}{d\cos\theta}\frac{d^2}{d\cos^2\theta}(\cos^2\theta-1)^2$$

$$\mathrm{P}_2^1\cos(\theta) = \frac{1}{8}(1-\cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\frac{d}{d\cos\theta}4(3\cos^2\theta-1)$$

$$\mathrm{P}_2^1\cos(\theta) = \frac{1}{2}(1-\cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\,6\cos\theta = 3\sin\theta\cos\theta$$

Dengan demikian, fungsi Harmonik Bola dapat dituliskan kembali menjadi :

$$Y_{21}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{(5)(1)!}{4\pi(3)!}}\,3\sin\theta\cos\theta\,e^{i\varphi}$$

$$Y_{21}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\,e^{i\varphi}$$

b. Untuk m = -1

$$Y_{2-1}(\theta,\varphi) = (-1)^{(-2)/2}\sqrt{\frac{(2.2+1)(2+1)!}{4\pi(2-1)!}}\,\mathrm{P}_2^{-1}\cos(\theta)\,e^{-i\varphi}$$

$$Y_{2-1}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{(5)(3)!}{4\pi(1)!}}\,\mathrm{P}_2^{-1}\cos(\theta)\,e^{-i\varphi}$$

dimana,

$$\mathrm{P}_2^{-1}\cos(\theta) = \frac{1}{2!\,2^2}(1-\cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}\frac{d^{(2-1)}}{d\cos^{(2-1)}\theta}(\cos^2\theta-1)^2$$

$$\mathrm{P}_2^{-1}\cos(\theta) = \frac{1}{8}(1-\cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}\frac{d}{d\cos\theta}(\cos^2\theta-1)^2$$

$$\mathrm{P}_2^{-1}\cos(\theta) = \frac{1}{8}(1-\cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}\,4\cos\theta\,(\cos^2\theta-1)$$

$$\mathrm{P}_2^{-1}\cos(\theta) = -\frac{1}{2}\sin\theta\cos\theta$$

Dengan demikian, fungsi Harmonik Bola dapat dituliskan kembali menjadi :

$$Y_{2-1}(\theta,\varphi) = -\sqrt{\frac{(5)(3)!}{4\pi(1)!}}\left(-\frac{1}{2}\sin\theta\cos\theta\right)e^{-i\varphi} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\,e^{-i\varphi}$$

6. Untuk ***l=2 m=±2***

a. Untuk m = +2

$$Y_{22}(\theta,\varphi) = (-1)^{(2+2)/2}\sqrt{\frac{(2.2+1)(2-2)!}{4\pi(2+2)!}}\,\mathrm{P}_2^2 \cos(\theta)\, e^{2i\varphi}$$

$$Y_{22}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi(4)!}}\,\mathrm{P}_2^2 \cos(\theta)\, e^{2i\varphi}$$

dimana,

$$\mathrm{P}_2^2 \cos(\theta) = \frac{1}{2!\,2^2}(1-\ cos^2\theta)^{\frac{2}{2}}\frac{d^{(2+2)}}{dcos^{(2+2)}\theta}(cos^2\theta-1)^2$$

$$\mathrm{P}_2^2 \cos(\theta) = \frac{1}{8}(1-\ cos^2\theta)^1\frac{d}{dcos\theta}\frac{d^3}{dcos^3\theta}(cos^2\theta-1)^2$$

$$\mathrm{P}_2^2 \cos(\theta) = \frac{1}{8}(1-\ cos^2\theta)^1\frac{d}{dcos\theta}\ 24\cos\theta$$

$$\mathrm{P}_2^2 \cos(\theta) = 3\,(1-\ cos^2\theta)^1 = 3\, sin^2\theta$$

Dengan demikian, fungsi Harmonik Bola dapat dituliskan kembali menjadi :

$$Y_{22}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5}{4\pi(4)!}}\,3\, sin^2\theta\, e^{2i\varphi} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\, sin^2\theta\, e^{2i\varphi}$$

b. Untuk m = -2

$$Y_{2-2}(\theta,\varphi) = (-1)^{(-4)/2}\sqrt{\frac{(2.2+1)(2+2)!}{4\pi(2-2)!}}\,\mathrm{P}_2^2 \cos(\theta)\, e^{-2i\varphi}$$

$$Y_{2-2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5(4)!}{4\pi}}\,\mathrm{P}_2^{-2} \cos(\theta)\, e^{-2i\varphi}$$

dimana,

$$\mathrm{P}_2^{-2} \cos(\theta) = \frac{1}{2!\,2^2}(1-\ cos^2\theta)^{\frac{-2}{2}}\frac{d^{(2-2)}}{dcos^{(2-2)}\theta}(cos^2\theta-1)^2$$

$$\mathrm{P}_2^{-2} \cos(\theta) = \frac{1}{8}(1-\ cos^2\theta)^{-1}(cos^2\theta-1)^2 \ = \frac{1}{8}(cos^2\theta-1)^1$$

Dengan demikian, fungsi Harmonik Bola dapat dituliskan kembali menjadi :

$$Y_{2-2}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{5(4)!}{4\pi}}\,\frac{1}{8}(cos^2\theta-1)\, e^{-2i\varphi} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\, sin^2\theta\, e^{-2i\varphi}$$

- ***Beberapa sifat penting dari fungsi Harmonik Bola :***

1) $\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\left(Y_{lm_l}\right)^*\left(Y_{lm_l}\right) sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \delta_{ll'}\delta_{ml\,ml'}$

2) $cos\,\theta\left(Y_{lm_l}\right) = \frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left[\sqrt{\frac{l^2-m_l{}^2}{2l-1}}\,Y_{l-1,\ m_l} + \sqrt{\frac{(l+1)^2-m_l{}^2}{2l+3}}\,Y_{l+1,\ m_l}\right]$

3) $sin\,\theta\, e^{\pm i\varphi}Y_{lm_l} = \mp\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left[\sqrt{\frac{(l\mp m_l)(l\mp m_l-1)}{2l-1}}\,Y_{l-1,\ m_l\pm 1} - \sqrt{\frac{(l\mp m_l+2)(l\mp m_l+1)}{2l+3}}\,Y_{l+1,\ m_l\pm 1}\right]$

- ***Orbital – orbital elektron dari fungsi Y_{lm_l}***

Bilangan kuantum azimuth (l)	Orbital Elektron	Fungsi Gelombang Anguler (Y_{lm_l})
0	s	$Y_{00}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$
1	p_z	$Y_{10}(\theta) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$
	p_x	$\frac{-1}{\sqrt{2}}(Y_{11} + Y_{1-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} sin\theta\ cos\varphi$
	p_y	$\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{11} - Y_{1-1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} sin\theta\ sin\varphi$
2	d_{zz}	$Y_{20}(\theta) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3cos^2\theta - 1)$
	d_{xz}	$\frac{-1}{\sqrt{2}}(Y_{21} + Y_{2-1}) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} sin\theta\ cos\theta\ cos\varphi$
	d_{yz}	$\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{21} - Y_{2-1}) = \sqrt{\frac{15}{4\pi}} sin\theta\ cos\theta\ sin\varphi$
	d_{xy}	$\frac{-i}{\sqrt{2}}(Y_{22} - Y_{2-2}) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} sin^2\theta\ sin^2\varphi$
	$d_{x^2-y^2}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{22} + Y_{2-2}) = \sqrt{\frac{15}{16\pi}} sin^2\theta\ cos^2\varphi$

Sumber : Koichi Ohno (2004:86)

Berdasarkan nilai Fungsi Harmonik Bola diatas, dapat ditentukan Fungsi Gelombang lengkap berdasarkan letak orbitalnya yaitu sebagai berikut :

1. Untuk keadaan dasar (1s)

$$\Psi_{1s} = \Psi_{100} = 3\sqrt{3}\left[\frac{2}{a_0^{\frac{3}{2}}}\ e^{-\frac{3r}{a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right]$$

$$\Psi_{1s} = \Psi_{100} = \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}\ e^{-\frac{3r}{a_0}}$$

2. Untuk keadaan eksitasi pertama orbital 2s

$$\Psi_{2s} = \Psi_{200} = 3\sqrt{3}\left[\frac{1}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}}\left[e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right]\left[2 - \left(\frac{3r}{a_0}\right)\right]\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right]$$

$$\Psi_{2s} = \Psi_{200} = \frac{3\sqrt{3}}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}}\left[e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right]\left[2 - \left(\frac{3r}{a_0}\right)\right]\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

$$\Psi_{2s} = \Psi_{200} = \frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\left[2 - \left(\frac{3r}{a_0}\right)\right]\left[e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right]$$

3. Untuk keadaan eksitasi pertama orbital $2p_z$

$$\Psi_{2pz} = \Psi_{210} = \left[\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{3}} \frac{1}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right]\left[\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta\right]$$

$$\Psi_{2pz} = \Psi_{210} = \frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}} \cos\theta$$

4. Untuk keadaan eksitasi pertama orbital $2p_y$

$$\Psi_{2py} = (\mathrm{R}_{21}) \frac{i}{\sqrt{2}} (\mathrm{Y}_{11} - \mathrm{Y}_{1-1})$$

$$\Psi_{2py} = \left[\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{3}} \frac{1}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right] \frac{i}{\sqrt{2}}$$

$$\left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) - \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{2py} = \left[\frac{3}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right] \frac{i}{\sqrt{2}} \left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

dengan menggunakan aturan eksponensial dimana :

$$\cos\theta = \frac{1}{2}\left(e^{i\theta} + e^{-i\theta}\right) \qquad \sin\theta = \frac{1}{2i}\left(e^{i\theta} - e^{-i\theta}\right)$$

dengan identitas imajiner *i.i = - 1*

diperoleh,

$$\Psi_{2py} = \left[\frac{3}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] \left[\frac{i}{2}\right] \left[-e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right] \boldsymbol{x} \frac{i}{i}$$

$$\Psi_{2py} = \left[\frac{3}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] \left[\frac{1}{2i}\right] \left[e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}\right]$$

$$\Psi_{2py} = \left[\frac{3}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] [\sin\varphi]$$

$$\Psi_{2py} = \frac{3}{4\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{3}}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}} \sin\theta \sin\varphi$$

5. Untuk keadaan eksitasi pertama orbital $2p_x$

$$\Psi_{2px} = (\mathrm{R}_{21}) \frac{-1}{\sqrt{2}} (\mathrm{Y}_{11} + \mathrm{Y}_{1-1})$$

$$\Psi_{2px} = \left[\frac{3}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right] \frac{-1}{\sqrt{2}} \left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) + \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{2px} = \left[\frac{3}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right] \frac{-1}{\sqrt{2}} \left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) - \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{2px} = \left[\frac{3}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{3r}{a_0}\right)e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right]\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\varphi}\right)+\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i\varphi}\right)\right]$$

dengan menggunakan aturan eksponensial dimana :

$$cos\ \theta = \frac{1}{2}\left(e^{i\theta}+e^{-i\theta}\right) \qquad sin\ \theta = \frac{1}{2i}\left(e^{i\theta}-e^{-i\theta}\right)$$

diperoleh,

$$\Psi_{2px} = \left[\frac{3}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{3r}{a_0}\right)e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right]\left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sin\theta\right]\left[\frac{1}{2}\right]\left[e^{i\varphi}+e^{-i\varphi}\right]$$

$$\Psi_{2px} = \left[\frac{3}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{3r}{a_0}\right)e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right]\left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sin\theta\right][\cos\varphi]$$

$$\Psi_{2px} = \frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{3r}{a_0}\right)e^{-\frac{3r}{2a_0}}\ sin\theta\ cos\varphi$$

6. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital 3s

$$\Psi_{3s} = \Psi_{300} = 3\sqrt{3}\left[\frac{2}{(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\left[e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\frac{2r^2}{3a_0{}^2}-\left(\frac{2r}{a_0}\right)+1\right]\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right]$$

$$\Psi_{3s} = \Psi_{300} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\left[\frac{2r^2}{3a_0{}^2}-\left(\frac{2r}{a_0}\right)+1\right]e^{-\frac{r}{a_0}}$$

7. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital 3p$_z$

$$\Psi_{3pz} = \Psi_{310} = 3\sqrt{3}\left[\frac{1}{(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{8}{3\sqrt{2}}\left[\frac{r}{a_0}-\frac{r^2}{2a_0{}^2}\right]e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\right]$$

$$\Psi_{3pz} = \Psi_{310} = \frac{4}{3\sqrt{2\pi}}\frac{\sqrt{3}}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\left[\frac{r}{a_0}-\frac{r^2}{2a_0{}^2}\right]e^{-\frac{r}{a_0}}\cos\theta$$

8. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital 3p$_y$

$$\Psi_{3py} = (\mathrm{R}_{31})\frac{i}{\sqrt{2}}(\mathrm{Y}_{11}-\mathrm{Y}_{1-1})$$

$$\Psi_{3py} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{8}{3\sqrt{2}}\left[\frac{r}{a_0}-\frac{r^2}{2a_0{}^2}\right]e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\frac{i}{\sqrt{2}}\left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\varphi}\right)-\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3py} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{8}{3\sqrt{2}}\left[\frac{r}{a_0}-\frac{r^2}{2a_0{}^2}\right]e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\frac{i}{\sqrt{2}}$$

$$\left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\varphi}\right)+\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i\varphi}\right)\right]$$

dengan menggunakan aturan eksponensial dimana :

$$cos\ \theta = \frac{1}{2}\left(e^{i\theta}+e^{-i\theta}\right) \qquad sin\ \theta = \frac{1}{2i}\left(e^{i\theta}-e^{-i\theta}\right)$$

dengan identitas imajiner $i.i = -1$ diperoleh,

$$\Psi_{3py} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{8}{3\sqrt{2}} \left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] \left[\frac{i}{2}\right] \left[-e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right] \boldsymbol{x}\, \frac{\boldsymbol{i}}{\boldsymbol{i}}$$

$$\Psi_{3py} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{8}{3\sqrt{2}} \left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] \left[\frac{1}{2i}\right] \left[e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}\right]$$

$$\Psi_{3py} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{8}{3\sqrt{2}} \left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] [\sin\varphi]$$

$$\Psi_{3py} = \frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{a_0}}\, sin\theta\, sin\varphi$$

9. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital 3p$_{x}$

$$\Psi_{3px} = (\mathrm{R}_{31}) \frac{-1}{\sqrt{2}} (\mathrm{Y}_{11} + \mathrm{Y}_{1-1})$$

$$\Psi_{3px} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{8}{3\sqrt{2}} \left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{a_0}}\right] \frac{-1}{\sqrt{2}} \left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) + \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3px} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{8}{3\sqrt{2}} \left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{a_0}}\right] \frac{-1}{\sqrt{2}}$$

$$\left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) - \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3px} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{8}{3\sqrt{2}} \left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{a_0}}\right] \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

dengan menggunakan aturan eksponensial dimana :

$cos\ \theta = \frac{1}{2}\left(e^{i\theta} + e^{-i\theta}\right)$ $\qquad$ $sin\ \theta = \frac{1}{2i}\left(e^{i\theta} - e^{-i\theta}\right)$

$$\Psi_{3px} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{8}{3\sqrt{2}} \left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] \left[\frac{1}{2}\right] \left[e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right]$$

$$\Psi_{3px} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{8}{3\sqrt{2}} \left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] [\cos\varphi]$$

$$\Psi_{3px} = \frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{a_0}}\, sin\theta\, cos\varphi$$

10. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital 3d$_{zz}$

$$\Psi_{3\mathbf{d}_{zz}} = \Psi_{320} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{4}{3\sqrt{10}} \frac{r^2}{a_0{}^2}\, e^{-\frac{r}{a_0}}\right] \left[\sqrt{\frac{5}{8}}\, (3cos^2\theta - 1)\right] \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right]$$

$$\Psi_{3\mathbf{d}_{zz}} = \Psi_{320} = \frac{\sqrt{3}}{3\sqrt{6\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{r^2}{a_0{}^2}\, e^{-\frac{r}{a_0}}\, (3cos^2\theta - 1)$$

11. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital 3d$_{zx}$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{zx}}} = (\mathrm{R}_{32})\frac{-1}{\sqrt{2}}\,(Y_{21} + Y_{2-1})$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{zx}}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{3\sqrt{10}}\,\frac{r^2}{{a_0}^2}\,e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\frac{-1}{\sqrt{2}}\left[\left(-\sqrt{\frac{15}{4}}\,\sin\theta\cos\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{i\varphi}\right)\right.$$
$$\left.+\left(-\sqrt{\frac{15}{4}}\,\sin\theta\cos\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{zx}}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{3\sqrt{10}}\,\frac{r^2}{{a_0}^2}\,e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right]\left[\sqrt{\frac{15}{4}}\,\sin\theta\cos\theta\right]\left[\frac{1}{2}\,\left(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{zx}}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{3\sqrt{10}}\,\frac{r^2}{{a_0}^2}\,e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right]\left[\sqrt{\frac{15}{4}}\,\sin\theta\cos\theta\right]\cos\varphi$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{zx}}} = \frac{2\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{{a_0}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\,\sin\theta\cos\theta\cos\varphi$$

12. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital 3d$_{yz}$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{yz}}} = (\mathrm{R}_{32})\frac{i}{\sqrt{2}}\,(Y_{21} - Y_{2-1})$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{yz}}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{3\sqrt{10}}\,\frac{r^2}{{a_0}^2}\,e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\frac{i}{\sqrt{2}}\left[\left(-\sqrt{\frac{15}{4}}\,\sin\theta\cos\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{i\varphi}\right)\right.$$
$$\left.-\left(-\sqrt{\frac{15}{4}}\,\sin\theta\cos\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{yz}}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{3\sqrt{10}}\,\frac{r^2}{{a_0}^2}\,e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right]\left[\sqrt{\frac{15}{4}}\,\sin\theta\cos\theta\right]\left[\frac{i}{2}\,\left(-e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right)\right]\boldsymbol{x}\,\frac{\boldsymbol{i}}{\boldsymbol{i}}$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{yz}}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{3\sqrt{10}}\,\frac{r^2}{{a_0}^2}\,e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right]\left[\sqrt{\frac{15}{4}}\,\sin\theta\cos\theta\right]\left[\frac{1}{2i}\,\left(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{yz}}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{3\sqrt{10}}\,\frac{r^2}{{a_0}^2}\,e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right]\left[\sqrt{\frac{15}{4}}\,\sin\theta\cos\theta\right]\sin\varphi$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{yz}}} = \frac{2\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{{a_0}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\,\sin\theta\cos\theta\sin\varphi$$

3. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital $3d_{x^2-y^2}$

$$\Psi_{3d_{x^2-y^2}} = (R_{32})\frac{1}{\sqrt{2}}\,(Y_{22} + Y_{2-2})$$

$$\Psi_{3d_{x^2-y^2}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{3\sqrt{10}}\,\frac{r^2}{a_0{}^2}\,e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\right]$$

$$\left[\left(\frac{\sqrt{15}}{4}\,sin^2\,\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{2i\varphi}\right)\left(\frac{\sqrt{15}}{4}\,sin^2\,\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{-2i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3d_{x^2-y^2}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{3\sqrt{10}}\,\frac{r^2}{a_0{}^2}\,e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{15}}{4}\,sin^2\,\theta\right]\left[\frac{1}{2}\left(e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}\right)\right]$$

dengan, $\frac{1}{2}\left(e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}\right) = cos^2\varphi$ sehingga diperoleh :

$$\Psi_{3d_{x^2-y^2}} = \frac{\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{r^2}{a_0{}^2}\,e^{-\frac{r}{a_0}}\,sin^2\,\theta\,cos^2\varphi$$

14. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital $3d_{xy}$

$$\Psi_{3d_{xy}} = (R_{32})\frac{-i}{\sqrt{2}}\,(Y_{22} - Y_{2-2})$$

$$\Psi_{3d_{xy}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{3\sqrt{10}}\,\frac{r^2}{a_0{}^2}\,e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\frac{-i}{\sqrt{2}}\right]$$

$$\left[\left(\frac{\sqrt{15}}{4}\,sin^2\,\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{2i\varphi}\right)\left(\frac{\sqrt{15}}{4}\,sin^2\,\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{-2i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3d_{xy}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{3\sqrt{10}}\,\frac{r^2}{a_0{}^2}\,e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{15}}{4}\,sin^2\,\theta\right]\left[\frac{-i}{2}\left(e^{2i\varphi} - e^{-2i\varphi}\right)\right]\,\boldsymbol{x}\,\frac{\boldsymbol{i}}{\boldsymbol{i}}$$

$$\Psi_{3d_{xy}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{3\sqrt{10}}\,\frac{r^2}{a_0{}^2}\,e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\,\frac{\sqrt{15}}{4}\,sin^2\,\theta\right]\left[\frac{1}{2i}\left(e^{2i\varphi} - e^{-2i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3d_{xy}} = \frac{\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{r^2}{a_0{}^2}\,e^{-\frac{r}{a_0}}\,sin^2\,\theta\,sin^2\varphi$$

LAMPIRAN J. KOREKSI ORDER-2 FUNGSI GELOMBANG

- **Koreksi Order-1 bagi $\boldsymbol{\Psi_{1s}}^{(0)}$**

$$\Phi_1^{(1)} = \sum \frac{\hat{G}_{21}}{\epsilon_1^{(0)} - \epsilon_2^{(0)}} \Psi_2^{(0)}$$

$$\Phi_1^{(1)} = \left[\frac{eE}{\epsilon_1^{(0)} - \epsilon_2^{(0)}}\right] \left(\int_0^{a_0} \Psi_{2s}^{(0)}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}^{(0)}\, dV\right) \Psi_{2s}^{(0)} +$$

$$\left(\int_0^{a_0} \Psi_{2px}^{(0)}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}^{(0)}\, dV\right) \Psi_{2px}^{(0)} + \left(\int_0^{a_0} \Psi_{2py}^{(0)}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}^{(0)}\, dV\right) \Psi_{2py}^{(0)} +$$

$$\left(\int_0^{a_0} \Psi_{2pz}^{(0)}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}^{(0)}\, dV\right) \Psi_{2pz}^{(0)}$$

dengan menggunakan metode separasi variabel dapat kita peroleh :

- $\int_0^{a_0} \Psi_{2s}^{(0)}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}^{(0)}\, dV = 0$
- $\int_0^{a_0} \Psi_{2px}^{(0)}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}^{(0)}\, dV = 0$
- $\int_0^{a_0} \Psi_{2py}^{(0)}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}^{(0)}\, dV = 0$
- $\int_0^{a_0} \Psi_{2pz}^{(0)}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}^{(0)}\, dV = \frac{a_0}{\sqrt{2}}[0{,}1647]$

Maka dapat kita peroleh fungsi gelombang lengkap terkoreksi order-1 yaitu :

$$\Phi_1^{(1)} = \frac{eE}{\epsilon_1^{(0)} - \epsilon_2^{(0)}} \left[\left(\int_0^{a_0} \Psi_{2pz}^{(0)}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}^{(0)}\, dV\right) \Psi_{2pz}^{(0)}\right]$$

$$\Phi_1^{(1)} = \frac{eE}{\epsilon_1^{(0)} - \epsilon_2^{(0)}} \left[\frac{a_0}{\sqrt{2}}[0{,}1647] \frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}} \cos\theta\right]$$

$$\Phi_1^{(1)} = \frac{0{,}1647\, eE}{\epsilon_1^{(0)} - \epsilon_2^{(0)}} \left[\frac{3\sqrt{3}}{8\sqrt{\pi}} \frac{3r}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{3r}{2a_0}} \cos\theta\right]$$

Keterangan :

$e = 1{,}6\ x\ 10^{-19} C$

$\epsilon_1^{(0)} = -\frac{(3)^2}{(1)^2}(13{,}6\ eV) = -122{,}4\ eV = -195.84\ x\ 10^{-19}\ Joule$

$\epsilon_2^{(0)} = -\frac{(3)^2}{(2)^2}(13{,}6\ eV) = -30{,}6\ eV = -48{,}96\ x\ 10^{-19}\ Joule$

$\epsilon_1{}^{(0)} - \epsilon_2{}^{(0)} = -91{,}8\ eV = -91{,}8\ x\ 1{,}6\ x\ 10^{-19} = -146{,}88\ x\ 10^{-19}$ Joule

Dengan demikian koreksi Order-1 fungsi gelombang ion Lithium dituliskan :

$$\Phi_1{}^{(1)} = \frac{0{,}1647(1{,}6\ x\ 10^{-19})}{-146{,}88\ x\ 10^{-19}} \frac{3\sqrt{3}}{8\sqrt{\pi}} E \left[\frac{3r}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\ e^{-\frac{3r}{2a_0}} \cos\theta \right]$$

$$\Phi_1{}^{(1)} = -6{,}5758\ x\ 10^{-4} E \left[\frac{3r}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\ e^{-\frac{3r}{2a_0}} \cos\theta \right]$$

- **Koreksi Order-2 bagi $\boldsymbol{\Psi_{1s}{}^{(0)}}$**

$$\Phi_n{}^{(2)} = \sum_{l\neq n} \left[\sum_{m\neq n} \frac{\hat{G}_{mn}\,\hat{G}_{lm}}{\left(E_n{}^{(0)} - E_m{}^{(0)}\right)\left(E_n{}^{(0)} - E_l{}^{(0)}\right)} - \frac{\hat{G}_{nn}\,\hat{G}_{ln}}{\left(E_n{}^{(0)} - E_l{}^{(0)}\right)^2} \right] \Psi_l{}^{(0)}$$

$$\Phi_n{}^{(2)} = \sum_{l\neq n} \left[\sum_{m\neq n} \frac{\hat{G}_{mn}\,\hat{G}_{lm}}{\left(E_n{}^{(0)} - E_m{}^{(0)}\right)\left(E_n{}^{(0)} - E_l{}^{(0)}\right)} \Psi_l{}^{(0)} \right] - \sum_{l\neq n} \left[\frac{\hat{G}_{nn}\,\hat{G}_{ln}}{\left(E_n{}^{(0)} - E_l{}^{(0)}\right)^2} \right] \Psi_l{}^{(0)}$$

Keterangan :

$\hat{G}_{mn} = \int \Psi_m{}^{(0)}\,\hat{G}\,\Psi_n{}^{(0)}\,dV$

$\hat{G}_{lm} = \int \Psi_l{}^{(0)}\,\hat{G}\,\Psi_m{}^{(0)}\,dV$

$\hat{G}_{nn} = \int \Psi_n{}^{(0)}\,\hat{G}\,\Psi_n{}^{(0)}\,dV$

$\hat{G}_{ln} = \int \Psi_l{}^{(0)}\,\hat{G}\,\Psi_n{}^{(0)}\,dV$

dengan,

$\Psi_n{}^{(0)} = \Psi_1{}^{(0)} = \Psi_{1s}$

$\Psi_m{}^{(0)} = \Psi_2{}^{(0)} = \Psi_{2s,}\ \Psi_{2px}, \Psi_{2py}, \Psi_{2pz}$

$\Psi_l{}^{(0)} = \Psi_3{}^{(0)} = \Psi_{3s,}\ \Psi_{3px}, \Psi_{3py}, \Psi_{3pz}, \Psi_{3dzz}, \Psi_{3dxz}, \Psi_{3dyz}, \Psi_{3dxy}, \Psi_{3d_{x^2-y^2}}$

Suku pertama untuk fungsi gelombang dapat dituliskan kembali menjadi :

$$\sum_{m\neq n} \hat{G}_{mn}\,\hat{G}_{lm}\,\Psi_l{}^{(0)} = \sum_{m\neq n} \int \Psi_m{}^{(0)}\,\hat{G}\;\Psi_n{}^{(0)}\,dV \int \Psi_l{}^{(0)}\,\hat{G}\,\Psi_m{}^{(0)}\,dV \Psi_l{}^{(0)}$$

$$= \sum_{m\neq n} \int \Psi_m{}^{(0)}\,\hat{G}\;\Psi_m{}^{(0)}\,dV \int \Psi_l{}^{(0)}\,\hat{G}\,\Psi_n{}^{(0)}\,dV \Psi_l{}^{(0)}$$

Dengan menggunakan metode pemisahan variabel, diperoleh :

Untuk integral suku pertama :

$$\int \Psi_m{}^{(0)}\,\hat{G}\;\Psi_m{}^{(0)}\,dV = eE \int \Psi_{2s}\,r\,cos\theta\,\Psi_{2s} dV + \int \Psi_{2px} r\,cos\theta\;\Psi_{2px} dV + \int \Psi_{2py} r\,cos\theta\;\Psi_{2py} dV + \int \Psi_{2pz} r\,cos\theta\;\Psi_{2pz} dV$$

Pemisahan variabel masing – masing suku menghasilkan :

- $\int_0^{a_0} {\Psi_{2s}}^{(0)}\ r\ cos\theta\ {\Psi_{2s}}^{(0)}\ dV$

$$= \int_0^{a_0} \left\{\frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left[2 - \left(\frac{3r}{a_0}\right)\right] \left[e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right]\right\} r\ cos\theta$$

$$\left\{\frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left[2 - \left(\frac{3r}{a_0}\right)\right] \left[e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right]\right\} r^2 dr \int_0^{\pi} sin\theta\ d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \frac{27}{(4\sqrt{2\pi})^2} \frac{1}{(a_0)^3} \int_0^{a_0} \left\{\left[2 - \left(\frac{3r}{a_0}\right)\right]^2\ e^{-\frac{3r}{2\,a_0}} e^{-\frac{3r}{2\,a_0}}\right\} r^3 dr \int_0^{\pi} sin\theta\ cos\theta\ d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

dimana,

$$\int_0^{\pi} sin\theta\ cos\theta\ d\theta = \frac{1}{2}\int_0^{\pi} sin2\theta\ d\theta = -\frac{1}{4}[\cos 2\pi - \cos 0] = 0$$

maka diperoleh :

$$\int_0^{a_0} {\Psi_{2s}}^{(0)}\ r\ cos\theta\ {\Psi_{2s}}^{(0)}\ dV = 0$$

- $\int_0^{a_0} {\Psi_{2px}}^{(0)}\ r\ cos\theta\ {\Psi_{2px}}^{(0)}\ dV$

$$= \int_0^{a_0} \left\{\frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}}\ \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}}\ sin\theta\ cos\varphi\right\} r\ cos\theta$$

$$\left\{\frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}}\ \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}}\ sin\theta\ cos\varphi\right\} r^2 dr \int_0^{\pi} sin\theta\ d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \frac{27}{(4\sqrt{2\pi})^2} \frac{1}{(a_0)^3} \int_0^{a_0} \left\{\left(\frac{3r}{a_0}\right)^2\ e^{-\frac{3r}{2a_0}}\ e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right\} r^3 dr \int_0^{\pi} sin\theta^2 cos\theta d\theta \int_0^{2\pi} cos\varphi\ d\varphi$$

dimana,

$$\int_0^{2\pi} cos\varphi\ d\varphi = \sin(2\pi) - \sin(0) = 0$$

maka diperoleh :

$$\int_0^{a_0} {\Psi_{2px}}^{(0)}\ r\ cos\theta\ {\Psi_{2px}}^{(0)}\ dV = 0$$

- $\int_0^{a_0} \Psi_{2py}{}^{(0)}\ r\ cos\theta\ \Psi_{2py}{}^{(0)}\ dV$

$$= \int_0^{a_0} \left\{ \frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}} sin\theta\ sin\varphi \right\} r\ cos\theta$$

$$\left\{ \frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}} sin\theta\ sin\varphi \right\} r^2 dr \int_0^{\pi} sin\theta\ d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \frac{27}{\left(4\sqrt{2\pi}\right)^2} \frac{1}{(a_0)^3} \int_0^{a_0} \left\{ \left(\frac{3r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{3r}{2a_0}} e^{-\frac{3r}{2a_0}} \right\} r^3 dr \int_0^{\pi} sin^2\theta cos\theta d\theta \int_0^{2\pi} sin\ \varphi\ d\varphi$$

dimana,

$$\int_0^{2\pi} sin\varphi\ d\varphi = \cos(2\pi) - \cos(0) = 0$$

maka diperoleh :

$$\int_0^{a_0} \Psi_{2py}{}^{(0)}\ r\ cos\theta\ \Psi_{2py}{}^{(0)}\ dV = 0$$

- $\int_0^{a_0} \Psi_{2pz}{}^{(0)}\ r\ cos\theta\ \Psi_{2pz}{}^{(0)}\ dV$

$$= \int_0^{a_0} \left\{ \frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}} \cos\theta \right\} r\ cos\theta$$

$$\left\{ \frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}} \cos\theta \right\} r^2 dr \int_0^{\pi} sin\theta\ d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \frac{27}{\left(4\sqrt{2\pi}\right)^2} \frac{1}{(a_0)^3} \int_0^{a_0} \left\{ \left(\frac{3r}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{3r}{2a_0}} e^{-\frac{3r}{2a_0}} \right\} r^3 dr \int_0^{\pi} cos^2\theta\ sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \frac{9}{32} \frac{27}{\pi} \frac{1}{(a_0)^5} \int_0^{a_0} \left\{ e^{-\frac{3r}{2a_0}} e^{-\frac{3r}{2a_0}} \right\} r^5 dr \int_0^{\pi} cos^2\theta\ sin\theta d\theta (2\pi)$$

$$= \frac{9}{16} \frac{27}{(a_0)^5} \int_0^{a_0} \left\{ e^{-\frac{3r}{a_0}} \right\} r^5 dr \int_0^{\pi} cos^2\theta\ sin\theta d\theta$$

dengan menggunakan pemisahan variabel, integral tiap suku dapat diselesaikan :

untuk suku integral pertama,

$$\int_0^{a_0} \left\{ e^{-\frac{3r}{a_0}} \right\} r^5 dr = \left[-r^5\left(\frac{a_0}{3}\right) - 5r^4\left(\frac{{a_0}^2}{9}\right) - 20r^3\left(\frac{{a_0}^3}{27}\right) - 60r^2\left(\frac{{a_0}^4}{81}\right) - 120r\left(\frac{{a_0}^5}{243}\right) - 120\left(\frac{{a_0}^6}{729}\right)\right] e^{-\frac{3r}{a0}}\Big|_0^{a_0}$$

$$= \left[-\frac{{a_0}^6}{3} - \frac{5{a_0}^6}{9} - \frac{20{a_0}^6}{27} - \frac{60{a_0}^6}{81} - \frac{120{a_0}^6}{243} - \frac{120{a_0}^6}{729}\right] e^{-3} + \frac{120{a_0}^6}{729}$$

$$= \left[-\frac{2208}{729} e^{-3} + 0{,}1646091\right] {a_0}^6$$

$$= 0{,}0138136987\ {a_0}^6$$

untuk suku integral kedua,

$$\int_0^{\pi} cos^2\theta\ sin\theta d\theta$$

dimisalkan : $-\frac{d}{d\theta} cos\theta = sin\theta$

$$-d\ cos\theta = sin\theta\ d\theta$$

diperoleh,

$$-\int_0^{\pi} cos^2\theta\ \ d\ cos\theta = -\frac{1}{3}[(cos\ \pi)^3 - (cos\ 0)^3] = \frac{2}{3}$$

Sehingga fungsi gelombangnya dapat dituliskan :

$$\int_0^{a_0} {\Psi_{2pz}}^{(0)}\ r\ cos\theta\ {\Psi_{2pz}}^{(0)}\ dV = \frac{9}{16} \frac{27}{(a_0)^5} \frac{2}{3} 0{,}0138136987\ {a_0}^6$$

$$\int_0^{a_0} {\Psi_{2pz}}^{(0)}\ r\ cos\theta\ {\Psi_{2pz}}^{(0)}\ dV = \frac{81}{8} 0{,}0138136987\ a_0$$

$$\int_0^{a_0} {\Psi_{2pz}}^{(0)}\ r\ cos\theta\ {\Psi_{2pz}}^{(0)}\ dV = 0{,}1398627\ a_0$$

Dengan demikian dapat kita peroleh bahwa integral suku pertama menghasilkan :

$$\int {\Psi_m}^{(0)}\ \hat{G}\ {\Psi_m}^{(0)}\ dV = (eE)\int \Psi_{2s}\, r\ cos\theta\ \Psi_{2s} dV + \int \Psi_{2px} r\ cos\theta\ \ \Psi_{2px} dV + \int \Psi_{2py} r\ cos\theta\ \ \Psi_{2py} dV + \int \Psi_{2pz} r\ cos\theta\ \ \Psi_{2pz} dV$$

$$\int {\Psi_m}^{(0)}\ \hat{G}\ {\Psi_m}^{(0)}\ dV = \ eE[0{,}1398627\ a_0]$$

Untuk integral suku kedua :

$$\int \Psi_l{}^{(0)}\,\hat{G}\;\Psi_n{}^{(0)}\,dV = (eE)\int \Psi_{3s}\,r\,cos\theta\,\Psi_{1s}dV\; + \int \Psi_{3px}r\,cos\theta\;\Psi_{1s}dV +$$

$$\int \Psi_{3py}r\,cos\theta\;\Psi_{1s}dV + \int \Psi_{3pz}r\,cos\theta\;\Psi_{1s}dV + \int \Psi_{3dzz}\,r\,cos\theta\,\Psi_{1s}dV +$$

$$\int \Psi_{3dxz}\,r\,cos\theta\,\Psi_{1s}dV + \int \Psi_{3dyz}\,r\,cos\theta\,\Psi_{1s}dV + \int \Psi_{3dxy}\,r\,cos\theta\,\Psi_{1s} +$$

$$\int \Psi_{3d_{x^2-y^2}}\,r\,cos\theta\,\Psi_{1s}dV$$

Pemisahan variabel masing – masing suku menghasilkan :

- $\int_0^{a_0}\Psi_{3s}\,r\,cos\theta\,\Psi_{1s}{}^{(0)}\,dV =$

  $$\int_0^{a_0}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{3\sqrt{3\pi}}\frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\left[\frac{2r^2}{3a_0{}^2}-\left(\frac{2r}{a_0}\right)+1\right]e^{-\frac{r}{a_0}}\right\}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\,e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\}r^3dr\int_0^{\pi}sin\theta cos\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi$$

  dimana,

  $$\int_0^{\pi}sin\theta\,cos\theta\,d\theta = \frac{1}{2}\int_0^{\pi}sin2\theta\,d\theta = -\frac{1}{4}\left[\cos 2\pi - \cos 0\right] = 0$$

  maka diperoleh :

  $$\int_0^{a_0}\Psi_{3s}\,r\,cos\theta\,\Psi_{1s}{}^{(0)}\,dV = 0$$

- $\int_0^{a_0}\Psi_{3px}\,r\,cos\theta\,\Psi_{1s}{}^{(0)}\,dV{=}\int_0^{a_0}\left\{\frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\left[\frac{r}{a_0}-\frac{r^2}{2a_0{}^2}\right]e^{-\frac{r}{a_0}}\,sin\theta\,cos\varphi\right\}$

  $$\left\{\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\,e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\}r^3dr\int_0^{\pi}sin\theta cos\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi$$

  dimana,

  $$\int_0^{2\pi}cos\varphi\,d\varphi = \sin(2\pi)-\sin(0) = 0$$

  maka diperoleh :

  $$\int_0^{a_0}\Psi_{3px}\,r\,cos\theta\,\Psi_{1s}{}^{(0)}\,dV = 0$$

- $\int_0^{a_0} \Psi_{3py}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}{}^{(0)}\, dV = \int_0^{a_0} \left\{ \frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}} \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} \left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2a_0^2} \right] e^{-\frac{r}{a_0}} sin\theta\, sin\varphi \right\} \left\{ \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{3r}{a_0}} \right\} r^3 dr \int_0^{\pi} sin\theta cos\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$

dimana,

$$\int_0^{2\pi} sin\varphi\, d\varphi = \cos(2\pi) - \cos(0) = 0$$

maka diperoleh :

$$\int_0^{a_0} \Psi_{3py}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}{}^{(0)}\, dV = 0$$

- $\int_0^{a_0} \Psi_{3pz}{}^{(0)}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}{}^{(0)}\, dV$

$$= \int_0^{a_0} \left\{ \frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2a_0^2} \right] e^{-\frac{r}{a_0}} \cos\theta \right\} \left\{ \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{3r}{a_0}} \right\} r^3 dr \int_0^{\pi} sin\theta cos\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \frac{12}{\pi\sqrt{2}} \frac{1}{(a_0)^3} \int_0^{a_0} \left\{ \left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2a_0^2} \right] e^{-\frac{r}{a_0}} e^{-\frac{3r}{a_0}} \right\} r^3 dr \int_0^{\pi} cos^2\theta\, sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \frac{12}{\pi\sqrt{2}} \frac{1}{(a_0)^3} \left[\int_0^{a_0} \left\{ \frac{r}{a_0} e^{-\frac{4r}{a_0}} \right\} r^3 dr - \int_0^{a_0} \left\{ \frac{r^2}{2a_0^2} e^{-\frac{4r}{a_0}} \right\} r^3 dr \right] \int_0^{\pi} cos^2\theta\, sin\theta d\theta (2\pi)$$

$$= \frac{12}{\pi\sqrt{2}} \frac{1}{(a_0)^3} \left[\int_0^{a_0} \left\{ \frac{1}{a_0} e^{-\frac{4r}{a_0}} \right\} r^4 dr - \int_0^{a_0} \left\{ \frac{1}{2a_0^2} e^{-\frac{4r}{a_0}} \right\} r^5 dr \right] \int_0^{\pi} cos^2\theta\, sin\theta d\theta (2\pi)$$

dengan menggunakan pemisahan variabel, integral tiap suku dapat diselesaikan :

untuk suku integral pertama,

$$\int_0^{a_0} \left\{ \frac{1}{a_0} e^{-\frac{4r}{a_0}} \right\} r^4 dr = \frac{1}{a_0} \left[-r^4 \left(\frac{a_0}{4} \right) - 4r^3 \left(\frac{a_0^2}{16} \right) - 12r^2 \left(\frac{a_0^3}{64} \right) - 24r \left(\frac{a_0^4}{256} \right) - 24 \left(\frac{a_0^6}{1024} \right) \right] e^{-\frac{4r}{a_0}} \Big|_0^{a_0}$$

$$= \left[-\frac{a_0^4}{4} - \frac{a_0^4}{4} - \frac{3a_0^4}{16} - \frac{3a_0^4}{32} - \frac{3a_0^4}{128} \right] e^{-4} + \frac{3a_0^4}{128}$$

$$= [-(0{,}171875)e^{-4} + 0{,}0234375] a_0^4$$

$$= 0{,}0202894996\, a_0^4$$

$\int_0^{a_0}\left\{\frac{1}{2{a_0}^2}e^{-\frac{4r}{a_0}}\right\}r^5dr = \frac{1}{2{a_0}^2}\left[-r^5\left(\frac{a_0}{4}\right)-5r^4\left(\frac{{a_0}^2}{16}\right)-20r^3\left(\frac{{a_0}^3}{64}\right)-\right.$

$\left.60r^2\left(\frac{{a_0}^4}{256}\right)-120r\left(\frac{{a_0}^5}{1024}\right)-120\left(\frac{{a_0}^6}{4096}\right)\right]e^{-\frac{4r}{a_0}}\Big|_0^{a_0}$

$= \left[-\frac{{a_0}^4}{8}-\frac{5{a_0}^4}{32}-\frac{20{a_0}^4}{128}-\frac{60{a_0}^4}{256}-\frac{120{a_0}^4}{2048}-\frac{120{a_0}^4}{8192}\right]e^{-4}+$
$\frac{120{a_0}^4}{8192}$

$= [-(0{,}7451171875)e^{-4}+0{,}0146484375]{a_0}^4$

$= 0{,}00100114\ {a_0}^4$

untuk suku integral kedua,

$$\int_0^{\pi} cos^2\theta\ sin\theta d\theta$$

dimisalkan : $-\frac{d}{d\theta}cos\theta = sin\theta$

$-d\ cos\theta = sin\theta\ d\theta$

diperoleh,

$-\int_0^{\pi} cos^2\theta\ \ d\ cos\theta = -\frac{1}{3}[(cos\ \pi)^3-(cos\ 0)^3] = \frac{2}{3}$

Sehingga fungsi gelombangnya dapat dituliskan :

$\int_0^{a_0}{\Psi_{3pz}}^{(0)}\ r\ cos\theta\ {\Psi_{1s}}^{(0)}\ dV = \frac{16}{\sqrt{2}}\frac{1}{(a_0)^3}[0{,}0202894996\ {a_0}^4-0{,}00100114\ {a_0}^4]$

$\int_0^{a_0}{\Psi_{3pz}}^{(0)}\ r\ cos\theta\ {\Psi_{1s}}^{(0)}\ dV=\frac{16}{\sqrt{2}}\frac{1}{(a_0)^3}[0{,}0192883596\ {a_0}^4]$

$\int_0^{a_0}{\Psi_{3pz}}^{(0)}\ r\ cos\theta\ {\Psi_{1s}}^{(0)}\ dV = 0{,}2182228776\ a_0$

- $\int_0^{a_0}\Psi_{3dzz}\,r\ cos\theta\ {\Psi_{1s}}^{(0)}\ dV = \int_0^{a_0}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{9\sqrt{6\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{{a_0}^2}\ e^{-\frac{r}{a_0}}(3cos^2\theta-1)\right\}$

$\left\{\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{{a_0}^{\frac{3}{2}}}\ e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\}r^3dr\int_0^{\pi}sin\theta cos\theta\ d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi$

$$= \int_0^{a_0}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{9\sqrt{6\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{{a_0}^2}\ e^{-\frac{r}{a_0}}\right\}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{{a_0}^{\frac{3}{2}}}\ e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\}r^3dr$$

$\int_0^{\pi}(3cos^2\theta-1)sin\theta cos\theta\ d\theta\int_0^{2\pi}d\varphi$

$$= \int_0^{a_0}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{9\sqrt{6\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{{a_0}^2}\ e^{-\frac{r}{a_0}}\right\}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{{a_0}^{\frac{3}{2}}}\ e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\}r^3dr$$

$$\left[\int_0^{\pi} 3cos^3\theta \; sin\theta \; d\theta - \int_0^{\pi} sin\theta cos\theta \; d\theta\right] \int_0^{2\pi} d\varphi$$

Integral untuk suku yang mengandung θ dapat diselesaikan dengan menggunakan permisalan bahwa :

$\frac{d}{d\theta} sin\;\theta \; = cos\;\theta$ $\qquad$ $d\;sin\;\theta = \; cos\;\theta\; d\theta$

$\frac{d}{d\theta} cos\;\theta = -sin\;\theta$ $\qquad$ $d\;cos\;\theta = \; -sin\;\theta\; d\theta$

Sehingga diperoleh :

- $\int_0^{\pi} 3cos^3\theta\; sin\theta\; d\theta = -\int_0^{\pi} 3cos^3\theta\;(d\;cos\theta) = \frac{-3}{4}\; cos^4\theta\Big|_0^{\pi}$

  $\int_0^{\pi} 3cos^3\theta\; sin\theta\; d\theta = -\frac{3}{4}[(\cos\pi)^4 -](\cos 0)^4 = 0$

- $\int_0^{\pi} sin\theta\; cos\theta\; d\theta = \frac{1}{2}\int_0^{\pi} sin2\theta\; d\theta = -\frac{1}{4}[\cos 2\pi - \cos 0] = 0$

maka diperoleh :

$$\int_0^{a_0} \Psi_{3dzz}\, r\; cos\theta\; \Psi_{1s}{}^{(0)}\; dV = 0$$

➢ $\int_0^{a_0} \Psi_{3dxz}\, r\; cos\theta\; \Psi_{1s}{}^{(0)}\; dV$

$$= \int_0^{a_0}\left\{\frac{2}{9\sqrt{2\pi}}\frac{3\sqrt{3}}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\sin\theta\cos\theta\cos\varphi\right\}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\; e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\} r^3 dr \int_0^{\pi} sin\theta cos\theta\; d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \int_0^{a_0}\left\{\frac{2}{9\sqrt{2\pi}}\frac{3\sqrt{3}}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\sin\theta\cos\theta\right\}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\; e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\} r^3 dr \int_0^{\pi} sin^2\theta cos^2\theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos\varphi\; d\varphi$$

dimana,

$$\int_0^{2\pi} cos\varphi\; d\varphi = \sin(2\pi) - \sin(0) = 0$$

maka diperoleh :

$$\int_0^{a_0} \Psi_{3dxz}{}^{(0)}\; r\; cos\theta\; \Psi_{1s}{}^{(0)}\; dV = 0$$

➢ $\int_0^{a_0} \Psi_{3dyz}\, r\; cos\theta\; \Psi_{1s}{}^{(0)}\; dV$

$$= \int_0^{a_0}\left\{\frac{2}{9\sqrt{2\pi}}\frac{3\sqrt{3}}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\sin\theta\cos\theta\sin\varphi\right\}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\; e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\} r^3 dr \int_0^{\pi} sin\theta cos\theta\; d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \int_0^{a_0}\left\{\frac{2}{9\sqrt{2\pi}}\frac{3\sqrt{3}}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\sin\theta\cos\theta\right\}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\; e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\} r^3 dr \int_0^{\pi} sin^2\theta cos^2\theta d\theta \int_0^{2\pi} \sin\varphi\; d\varphi$$

dimana,

$$\int_0^{2\pi} sin\varphi\, d\varphi = \cos(2\pi) - \cos(0) = 0$$

maka diperoleh :

$$\int_0^{a_0} \Psi_{3dyz}{}^{(0)}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}{}^{(0)}\, dV = 0$$

- $\int_0^{a_0} \Psi_{3dxy}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}{}^{(0)}\, dV =$

$$\int_0^{a_0} \left\{\frac{3\sqrt{3}}{9\sqrt{2\pi}}\, \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{r^2}{a_0{}^2} e^{-\frac{r}{a_0}} sin^2\theta\, sin^2\varphi\right\}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\, e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\} r^3 dr$$

- $\int_0^{\pi} sin\theta cos\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi =$

$$\int_0^{a_0} \left\{\frac{3\sqrt{3}}{9\sqrt{2\pi}}\, \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{r^2}{a_0{}^2} e^{-\frac{r}{a_0}}\right\}\left\{\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{3\sqrt{3}}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\, e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\} r^3 dr \int_0^{\pi} sin^3\theta\, cos\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} sin^2\varphi d\varphi$$

dimana,

$$\int_0^{\pi} sin^3\theta\, cos\theta\, d\theta = \int_0^{\pi} sin^3\theta\, (d\, sin\theta)$$

$$\int_0^{\pi} sin^3\theta\, cos\theta\, d\theta = \frac{1}{4}\, sin^4\theta\Big|_0^{\pi} = \frac{1}{4}[(\sin\pi)^4 - (\sin 0)^4] = 0$$

Maka diperoleh :

$$\int_0^{a_0} \Psi_{3dxy}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}{}^{(0)}\, dV = 0$$

- $\int_0^{a_0} \Psi_{3d_{x^2-y^2}}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}{}^{(0)}\, dV = \int_0^{a_0} \left\{\frac{3\sqrt{3}}{9\sqrt{2\pi}}\, \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{r^2}{a_0{}^2} e^{-\frac{r}{a_0}} sin^2\theta\, cos^2\varphi\right\}$

$$\left\{\frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{3\sqrt{3}}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\, e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\} r^3 dr \int_0^{\pi} sin\theta cos\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \int_0^{a_0} \left\{\frac{3\sqrt{3}}{9\sqrt{2\pi}}\, \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{r^2}{a_0{}^2} e^{-\frac{r}{a_0}}\right\}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\, e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\} r^3 dr$$

$$\int_0^{\pi} sin^3\theta\, cos\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} cos^2\varphi\, d\varphi$$

dimana,

$$\int_0^{\pi} sin^3\theta\, cos\theta\, d\theta = \int_0^{\pi} sin^3\theta\, (d\, sin\theta)$$

$\int_0^{\pi} sin^3\theta\, cos\theta\, d\theta = \frac{1}{4}\, sin^4\theta\Big|_0^{\pi} = \frac{1}{4}[(\sin\,\pi)^4 - (\sin\,0)^4] = 0$

Maka diperoleh :

$$\int_0^{a_0} \Psi_{3d_{x^2-y^2}}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}{}^{(0)}\, dV = 0$$

Dengan demikian integral suku kedua bagi fungsi gelombang dapat dituliskan kembali menjadi :

$$\int \Psi_l{}^{(0)}\, \hat{G}\, \Psi_n{}^{(0)}\, dV = eE\, \int_0^{a_0} \Psi_{3pz}{}^{(0)}\, r\, cos\theta\, \Psi_{1s}{}^{(0)}\, dV$$

$$\int \Psi_l{}^{(0)}\, \hat{G}\, \Psi_n{}^{(0)}\, dV = eE\, [0{,}2182228776\, a_0\,]$$

Bentuk lengkap suku pertama dapat dituliskan sebagai berikut :

$$\sum\nolimits_{m\neq n} \hat{G}_{mn}\, \hat{G}_{lm}\, \Psi_l{}^{(0)} = \int \Psi_m{}^{(0)}\, \hat{G}\, \Psi_m{}^{(0)}\, dV\Psi_l{}^{(0)}\, \int \Psi_l{}^{(0)}\, \hat{G}\, \Psi_n{}^{(0)}\, dV\Psi_l{}^{(0)}$$

$$\sum_{m\neq n} \hat{G}_{mn}\, \hat{G}_{lm}\, \Psi_l{}^{(0)} = [eE\,(0{,}1398627\, a_0)][eE\,(0{,}2182228776\, a_0)]\Psi_l{}^{(0)}$$

$$\sum_{m\neq n} \hat{G}_{mn}\, \hat{G}_{lm}\, \Psi_l{}^{(0)} = [e^2E^2{a_0}^2\,(0{,}0305212409)] \sum_{m\neq n} \Psi_l{}^{(0)}$$

$$\sum_{m\neq n} \hat{G}_{mn}\, \hat{G}_{lm}\, \Psi_l{}^{(0)} = [e^2E^2{a_0}^2\,(0{,}0305212409)]\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{{a_0}^{\frac{3}{2}}}\left[\frac{2r^2}{3{a_0}^2} - \left(\frac{2r}{a_0}\right) + 1\right]e^{-\frac{r}{a_0}} + \frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2{a_0}^2}\right]e^{-\frac{r}{a_0}}\cos\theta + \frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2{a_0}^2}\right]e^{-\frac{r}{a_0}}\, sin\theta\, cos\varphi + \frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{2{a_0}^2}\right]e^{-\frac{r}{a_0}}\, sin\theta\, sin\varphi + \frac{1}{3\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{{a_0}^2}\, e^{-\frac{r}{a_0}}\,(3cos^2\theta - 1) + \frac{2\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{{a_0}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\sin\theta\cos\theta\cos\varphi + \frac{2\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{{a_0}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\sin\theta\cos\theta\sin\varphi + \frac{\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{{a_0}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\, sin^2\,\theta\, cos^2\varphi + \frac{\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{{a_0}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\, sin^2\,\theta\, sin^2\varphi$$

Tiap suku pada persamaan diatas dapat dijabarkan sebagai berikut :

$$\sum_{m\neq n} \hat{G}_{mn}\, \hat{G}_{lm}\, \Psi_l{}^{(0)} = \left[e^2E^2{a_0}^2\,(0{,}0305212409)\right]$$

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{{a_0}^{\frac{3}{2}}}\frac{2r^2}{3{a_0}^2}e^{-\frac{r}{a_0}} - \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{{a_0}^{\frac{3}{2}}}\frac{2r}{a_0}e^{-\frac{r}{a_0}} + \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{{a_0}^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{r}{a_0}} + \frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r}{a_0}\, e^{-\frac{r}{a_0}}\cos\theta - \frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{2{a_0}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\cos\theta + \frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{a_0}}\sin\theta cos\varphi - \frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{2{a_0}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\sin\theta\, cos\varphi +$$

$\frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\ \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r}{a_0}\ e^{-\frac{r}{a_0}}\sin\theta\ sin\varphi - \frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\ \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{2{a_0}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\sin\theta\ sin\varphi + \frac{1}{3\sqrt{2\pi}}\ \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{{a_0}^2}\ e^{-\frac{r}{a_0}}3cos^2\theta -$

$\frac{1}{3\sqrt{2\pi}}\ \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{{a_0}^2}\ e^{-\frac{r}{a_0}} + \frac{2\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{{a_0}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\sin\theta\cos\theta(sin\varphi +\ cos\varphi) +$

$\frac{\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\ \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{{a_0}^2}e^{-\frac{r}{a_0}}\ sin^2\theta(sin^2\varphi + cos^2\varphi)$

Dapat disederhanakan menjadi :

$\sum_{m\neq n}\hat{G}_{mn}\ \hat{G}_{lm}\,\Psi_l{}^{(0)} = \left[e^2E^2{a_0}^2\ (0{,}0305212409)\right]\left[\frac{1}{{a_0}^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{r}{a_0}}\right]$

$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2r^2}{3{a_0}^2} - \frac{2r}{a_0} + 1\right) + \frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\ \frac{r(2a_0 - r)}{2{a_0}^2}\left(cos\,\theta + sin\,\theta(sin\varphi +\ cos\varphi)\right) +$

$\frac{1}{3\sqrt{2\pi}}\ \frac{r^2}{{a_0}^2}(3cos^2\theta - 1) + \frac{2\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\frac{r^2}{{a_0}^2}\sin\theta\cos\theta(sin\varphi +\ cos\varphi) +$

$\frac{\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\ \frac{r^2}{{a_0}^2}\ sin^2\theta(sin^2\varphi + cos^2\varphi)$

Dengan demikian, koreksi order-2 untuk fungsi gelombang ion Lithium dapat dituliskan kembali menjadi :

$$\Phi_n{}^{(2)} = \sum_{l\neq n}\left[\sum_{m\neq n}\frac{\hat{G}_{mn}\ \hat{G}_{lm}}{(E_n{}^{(0)} -\ E_m{}^{(0)})(E_n{}^{(0)} -\ E_l{}^{(0)})}\Psi_l{}^{(0)}\right]$$
$$-\sum_{l\neq n}\left[\frac{\hat{G}_{nn}\ \hat{G}_{ln}}{\left(E_n{}^{(0)} -\ E_l{}^{(0)}\right)^2}\right]\Psi_l{}^{(0)}$$

Keterangan :

- $e = 1{,}6x10^{-19}C$
- $a_0 = 0{,}1763 \text{ x } 10^{-10}$ m
- $E_n{}^{(0)} = \epsilon_1{}^{(0)} = -\frac{(3)^2}{(1)^2}(13{,}6\ eV) = -122{,}4\ eV = -195{,}84x10^{-19}$ J
- $E_m{}^{(0)} = \epsilon_2{}^{(0)} = -\frac{(3)^2}{(2)^2}(13{,}6\ eV) = -30{,}6\ eV = -48{,}96x10^{-19}$ J
- $E_l{}^{(0)} = \epsilon_3{}^{(0)} = -\frac{(3)^2}{(3)^2}(13{,}6\ eV) = -13{,}6\ eV = -21{,}76\ x10^{-19}$ J
- $\sum_{m\neq n}\hat{G}_{nn}\ \hat{G}_{ln}\,\Psi_l{}^{(0)} = \sum_{m\neq n}\int\Psi_n{}^{(0)}\ \hat{G}\ \ \Psi_n{}^{(0)}\,dV\int\Psi_l{}^{(0)}\ \hat{G}\ \Psi_n{}^{(0)}\,dV\Psi_l{}^{(0)}$

  $\hat{G}_{nn} = \hat{G}_{11} = \int\Psi_1{}^{(0)}\ \hat{G}\Psi_1{}^{(0)}\,dV = 0$

  $$\sum_{m\neq n}\hat{G}_{nn}\ \hat{G}_{ln}\,\Psi_l{}^{(0)} = 0$$

Koreksi order-2 fungsi gelombang dapat dituliskan kembali menjadi :

$$\Phi_1{}^{(2)} = \left\{0{,}9497x10^{-27}E^2\left(\frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{r}{a_0}}\right)\right\}$$

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2r^2}{3a_0{}^2}-\frac{2r}{a_0}+1\right)+\frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\frac{r(2a_0-r)}{2a_0{}^2}\big(\cos\theta+\sin\theta(\sin\varphi+\cos\varphi)\big)+$$

$$\frac{1}{3\sqrt{2\pi}}\frac{r^2}{a_0{}^2}(3\cos^2\theta-1)+\frac{2\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\frac{r^2}{a_0{}^2}\sin\theta\cos\theta(\sin\varphi+\cos\varphi)+\frac{\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\frac{r^2}{a_0{}^2}\sin^2\theta$$

<u>Fungsi gelombang lengkap ion Lithium hingga koreksi Order – 2</u>

Secara lengkap fungsi gelombang ion Lithium (Li^{2+}) keadaan dasar (1s) $\Psi_1{}^{(0)}$ akibat gangguan medan Elektrostatis *E* hingga koreksi order-2 dituliskan :

$$\Psi_1 = \Psi_1{}^{(0)} + \Phi_1{}^{(1)} + \Phi_1{}^{(2)}$$

$$\Psi_1 = \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{3r}{a_0}} - 6{,}5758\ x\ 10^{-4}E\left[\frac{3r}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{3r}{2a_0}}\cos\theta\right]+$$

$$\left\{0{,}9497x10^{-27}E^2\left(\frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}e^{-\frac{r}{a_0}}\right)\right\}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2r^2}{3a_0{}^2}-\frac{2r}{a_0}+1\right)+\frac{4\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\frac{r(2a_0-r)}{2a_0{}^2}\big(\cos\theta+$$

$$\sin\theta(\sin\varphi+\cos\varphi)\big)+\frac{1}{3\sqrt{2\pi}}\frac{r^2}{a_0{}^2}(3\cos^2\theta-1)+\frac{2\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\frac{r^2}{a_0{}^2}\sin\theta\cos\theta(\sin\varphi+\cos\varphi)+$$

$$\frac{\sqrt{3}}{3\sqrt{2\pi}}\frac{r^2}{a_0{}^2}\sin^2\theta$$

LAMPIRAN K. KOREKSI ORDER-2 ENERGI ION LITHIUM

- **Koreksi Order-1 bagi $E_1^{(0)}$**

$\epsilon_1^{(1)} = \hat{G}_{11} = \int \Psi_1^{(0)}\ \hat{G}\Psi_1^{(0)}\ dV$

$\epsilon_1^{(1)} = \hat{G}_{11} = eE \int \Psi_{1s}^{(0)}\ r\ cos\theta\ \Psi_{1s}^{(0)}\ dV$

$\epsilon_1^{(1)} = \hat{G}_{11} = eE \int \left[\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}\ e^{-\frac{3r}{a_0}}\right] r\ cos\theta\ \left[\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}\ e^{-\frac{3r}{a_0}}\right] dV$

$\epsilon_1^{(1)} = \hat{G}_{11} = eE\ \left(\frac{27}{\pi}\right)\left(\frac{1}{a_0^3}\right) \int_0^{a_o} e^{-\frac{3r}{a_0}}\, e^{-\frac{3r}{a_0}}\ r\ cos\theta r^2 dr \int_0^{\pi} sin\theta\ d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$

$\epsilon_1^{(1)} = \hat{G}_{11} = eE\ \left(\frac{27}{\pi}\right)\left(\frac{1}{a_0^3}\right) \int_0^{a_o} r^3 e^{-\frac{6r}{a_0}}\, dr \int_0^{\pi} sin\theta\ cos\theta\ d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$

$$\epsilon_1^{(1)} = \hat{G}_{11} = \frac{27eE}{\pi a_0^3}\left[\left(-r^3 \frac{a_0}{6} e^{-\frac{6r}{a_0}}\right) - \left(3r^2 \frac{a_0^2}{36} e^{-\frac{6r}{a_0}}\right) - \left(6r \frac{a_0^3}{216} e^{-\frac{6r}{a_0}}\right) - \left(6 \frac{a_0^4}{1296} e^{-\frac{6r}{a_0}}\right) \Big|_0^{a_0}\right] \int_0^{\pi} \frac{1}{2} sin2\theta\ d\theta\ (2\pi)$$

dimana,

$\int_0^{\pi} \frac{1}{2} sin2\theta\ d\theta = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} sin2\theta\ d\theta = -\frac{1}{4}\left[\cos 2\pi - \cos 0\right] = 0$

maka diperoleh :

$\epsilon_1^{(1)} = \hat{G}_{11} = 0$

- **Koreksi Order-2 bagi $E_1^{(0)}$**

$\epsilon_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \left[\frac{\hat{G}_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}\right] \hat{G}_{nm}$

$\epsilon_1^{(2)} = \sum \frac{(\hat{G}_{21})^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}}$

$\epsilon_1^{(2)} =$

$\frac{e^2E^2}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \left[\left(\int_0^{a_0} \Psi_{2s}^{(0)}\ r\ cos\theta\ \Psi_{1s}^{(0)}\ dV\right)^2 + \left(\int_0^{a_0} \Psi_{2px}^{(0)}\ r\ cos\theta\ \Psi_{1s}^{(0)}\ dV\right)^2 + \left(\int_0^{a_0} \Psi_{2py}^{(0)}\ r\ cos\theta\ \Psi_{1s}^{(0)}\ dV\right)^2 + \left(\int_0^{a_0} \Psi_{2pz}^{(0)}\ r\ cos\theta\ \Psi_{1s}^{(0)}\ dV\right)^2 \right]$

Dengan menggunakan metode pemisahan variabel seperti kasus diatas diperoleh :

- $\int_0^{a_0} \Psi_{2s}^{(0)}\ r\ cos\theta\ \Psi_{1s}^{(0)}\ dV = 0$

Pembuktian :

➢ $\int_0^{a_0} \Psi_{2s}^{(0)}\ r\ cos\theta\ \Psi_{1s}^{(0)}\ dV$

$$=\int_0^{a_0}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\left[2-\left(\frac{3r}{a_0}\right)\right]\left[e^{-\frac{3r}{2a_0}}\right]\right\} r\,cos\theta$$

$$\left\{\frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\,e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\} r^2dr\int_0^{\pi} sin\theta\, d\theta\int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$=\frac{27}{4\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{(a_0)^3}\int_0^{a_0}\left\{\left[2-\left(\frac{3r}{a_0}\right)\right]\ e^{-\frac{3r}{2a_0}}e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\}r^3dr\int_0^{\pi} sin\theta\, cos\theta\, d\theta\int_0^{2\pi} d\varphi$$

dimana,

$$\int_0^{\pi} sin\theta\, cos\theta\, d\theta=\frac{1}{2}\int_0^{\pi} sin2\theta\, d\theta=-\frac{1}{4}\left[\cos 2\pi-\cos 0\right]=0$$

maka diperoleh :

$$\int_0^{a_0}\Psi_{2s}{}^{(0)}\ r\,cos\theta\,\Psi_{1s}{}^{(0)}\,dV=0$$

- $\int_0^{a_0}\Psi_{2px}{}^{(0)}\ r\,cos\theta\,\Psi_{1s}{}^{(0)}\,dV=0$

Pembuktian :

- $\int_0^{a_0}\Psi_{2px}{}^{(0)}\ r\,cos\theta\,\Psi_{1s}{}^{(0)}\,dV$

$$=\int_0^{a_0}\left\{\frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{3r}{a_0}\right)e^{-\frac{3r}{2a_0}}\,sin\theta\, cos\varphi\right\} r\,cos\theta$$

$$\left\{\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{3\sqrt{3}}{a_0{}^{\frac{3}{2}}}\,e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\} r^2dr\int_0^{\pi} sin\theta\, d\theta\int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$=\frac{27}{4\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{(a_0)^3}\int_0^{a_0}\left\{\left(\frac{3r}{a_0}\right)e^{-\frac{3r}{2a_0}}\,e^{-\frac{3r}{a_0}}\right\}r^3dr\int_0^{\pi} sin\theta^2 cos\theta d\theta\int_0^{2\pi} cos\varphi\, d\varphi$$

$$\int_0^{2\pi} cos\varphi\, d\varphi=\sin(2\pi)-\sin(0)=0$$

maka diperoleh :

$$\int_0^{a_0}\Psi_{2px}{}^{(0)}\ r\,cos\theta\,\Psi_{1s}{}^{(0)}\,dV=0$$

- $\int_0^{a_0}\Psi_{2py}{}^{(0)}\ r\,cos\theta\,\Psi_{1s}{}^{(0)}\,dV=0$

Pembuktian :

➢ $\int_0^{a_0} \Psi_{2py}{}^{(0)}\ r\ cos\theta\ \Psi_{1s}{}^{(0)}\ dV$

$$= \int_0^{a_0} \left\{ \frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}} sin\theta\ sin\varphi \right\} r\ cos\theta$$

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{3\sqrt{3}}{a_0{}^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{3r}{a_0}} \right\} r^2 dr \int_0^{\pi} sin\theta\ d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \frac{27}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(a_0)^3} \int_0^{a_0} \left\{ \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}} e^{-\frac{3r}{a_0}} \right\} r^3 dr \int_0^{\pi} sin^2\theta cos\theta d\theta \int_0^{2\pi} sin\ \varphi\ d\varphi$$

dimana,

$$\int_0^{2\pi} sin\varphi\ d\varphi = \cos(2\pi) - \cos(0) = 0$$

maka diperoleh :

$$\int_0^{a_0} \Psi_{2py}{}^{(0)}\ r\ cos\theta\ \Psi_{1s}{}^{(0)}\ dV = 0$$

- $\int_0^{a_0} \Psi_{2pz}{}^{(0)}\ r\ cos\theta\ \Psi_{1s}{}^{(0)}\ dV = \frac{0{,}1647\ a_0}{\sqrt{2}}$

Pembuktian :

➢ $\int_0^{a_0} \Psi_{2pz}{}^{(0)}\ r\ cos\theta\ \Psi_{1s}{}^{(0)}\ dV$

$$= \int_0^{a_0} \left\{ \frac{3\sqrt{3}}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}} \cos\theta \right\} r\ cos\theta$$

$$\left\{ \frac{3\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{3r}{a_0}} \right\} r^2 dr \int_0^{\pi} sin\theta\ d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \frac{27}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(a_0)^3} \int_0^{a_0} \left\{ \left(\frac{3r}{a_0}\right) e^{-\frac{3r}{2a_0}} e^{-\frac{3r}{a_0}} \right\} r^3 dr \int_0^{\pi} cos^2\theta\ sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$

$$= \frac{81}{4\sqrt{2}} \frac{1}{\pi} \frac{1}{(a_0)^4} \int_0^{a_0} \left\{ e^{-\frac{3r}{2a_0}} e^{-\frac{3r}{a_0}} \right\} r^4 dr \int_0^{\pi} cos^2\theta\ sin\theta d\theta (2\pi)$$

$$= \frac{81}{2\sqrt{2}} \frac{1}{(a_0)^4} \int_0^{a_0} \left\{ e^{-\frac{9r}{2a_0}} \right\} r^4 dr \int_0^{\pi} cos^2\theta \ sin\theta d\theta$$

dengan menggunakan pemisahan variabel, integral tiap suku dapat diselesaikan :

untuk suku integral pertama,

$$\int_0^{a_0} \left\{ e^{-\frac{9r}{2a_0}} \right\} r^4 dr = \left[-r^4 \left(\frac{2a_0}{9}\right) - 4r^3 \left(\frac{4{a_0}^2}{81}\right) - 12r^2 \left(\frac{8{a_0}^3}{729}\right) - 24r \left(\frac{16{a_0}^4}{6561}\right) - 24 \left(\frac{32{a_0}^5}{59049}\right) \right] e^{-\frac{9r}{2a_0}} \Big|_0^{a_0}$$

$$= \left[-\frac{2{a_0}^5}{9} - \frac{16{a_0}^5}{81} - \frac{96{a_0}^5}{729} - \frac{384{a_0}^5}{6561} - \frac{768{a_0}^5}{59049} \right] e^{-\frac{9r}{2a_0}} + \frac{768{a_0}^5}{59049}$$

$$= \left[-\frac{36786}{59049} e^{-\frac{9}{2}} + \frac{768}{59049} \right] {a_0}^5$$

untuk suku integral kedua,

$$\int_0^{\pi} cos^2\theta \ sin\theta d\theta$$

dimisalkan : $-\frac{d}{d\theta} cos\theta = sin\theta$

$$-d \ cos\theta = sin\theta \ d\theta$$

diperoleh,

$$- \int_0^{\pi} cos^2\theta \ \ d \ cos\theta = \ -\frac{1}{3}[(cos \ \pi)^3 - (cos \ 0)^3] = \frac{2}{3}$$

Sehingga fungsi gelombangnya dapat dituliskan :

$$\int_0^{a_0} {\Psi_{2pz}}^{(0)} \ r \ cos\theta \ {\Psi_{1s}}^{(0)} \ dV = \frac{2}{3} \frac{3}{2\sqrt{2}} \frac{27}{(a_0)^4} \left[-\frac{36786}{59049} e^{-\frac{9}{2}} + \frac{768}{59049} \right] {a_0}^5$$

$$\int_0^{a_0} {\Psi_{2pz}}^{(0)} \ r \ cos\theta \ {\Psi_{1s}}^{(0)} \ dV = \frac{27a_0}{\sqrt{2}} \left[-\frac{36786}{59049} e^{-\frac{9}{2}} + \frac{768}{59049} \right]$$

$$\int_0^{a_0} {\Psi_{2pz}}^{(0)} \ r \ cos\theta \ {\Psi_{1s}}^{(0)} \ dV = \frac{27a_0}{\sqrt{2}} [(-0{,}6229741)(0{,}0111089965) + 0{,}0130061]$$

$$\int_0^{a_0} {\Psi_{2pz}}^{(0)} \ r \ cos\theta \ {\Psi_{1s}}^{(0)} \ dV = \frac{27a_0}{\sqrt{2}} [0{,}0061]$$

Persamaan koreksi energi order-2 dapat dituliskan kembali menjadi :

$${\epsilon_1}^{(2)} = \frac{e^2E^2}{{\epsilon_1}^{(0)} - {\epsilon_2}^{(0)}} \left[\left(\int_0^{a_0} {\Psi_{2pz}}^{(0)} \ r \ cos\theta \ {\Psi_{1s}}^{(0)} \ dV \right)^2 \right] = \frac{e^2E^2}{{\epsilon_1}^{(0)} - {\epsilon_2}^{(0)}} \left(\frac{0{,}1647 \ a_0}{\sqrt{2}} \right)^2$$

<u>Persamaan Lengkap Koreksi Order – 2 Energi ion Lithium</u>

Dengan demikian dapat kita peroleh energi ion Lithium (Li^{2+}) untuk keadaan dasar (1s) ϵ_1 akibat gangguan medan elektrostatis E terkoreksi hingga order-2 yaitu :

$$\epsilon_1 = \epsilon_1{}^{(0)} + \epsilon_1{}^{(1)} + \epsilon_1{}^{(2)}$$

Keterangan :

- $\epsilon_1{}^{(0)}$ merupakan energi ion Lithium pada keadaan dasar *n = 1.*

  $\epsilon_1{}^{(0)} = -\frac{(3)^2}{(1)^2}(13{,}6\ eV) = -122{,}4\ eV = 195{,}84\ x\ 10^{-19}\ Joule$

- $\epsilon_2{}^{(0)}$ merupakan energi ion Lithium pada keadaan eksitasi pertama *n = 2.*

  $\epsilon_2{}^{(0)} = -\frac{(3)^2}{(2)^2}(13{,}6\ eV) = -30{,}6\ eV = -\ 48{,}96\ x\ 10^{-19}\ Joule$

- $\epsilon_1{}^{(1)} = 0$
- $\epsilon_1{}^{(2)} = \frac{e^2E^2}{\epsilon_1{}^{(0)} - \epsilon_2{}^{(0)}}\left(\frac{0{,}1647\ a_0}{\sqrt{2}}\right)^2$

diperoleh :

$$\epsilon_1{}^{(2)} = \frac{2{,}56\ x\ 10^{-38}E^2}{-91{,}8\ eV}(0.02053198 \text{ x } 10^{-10})^2$$

$$\epsilon_1{}^{(2)} = -7{,}3475\ x\ 10^{-45}\ E^2$$

Persamaan lengkap energi ion Lithium untuk keadaan dasar (1s) hingga koreksi order-2 yaitu :

$$\epsilon_1 = -195{,}84\ x\ 10^{-19} + 0 + (-7{,}3475\ x\ 10^{-45}\ E^2)\ Joule$$

$$\epsilon_1 = -195{,}84\ x\ 10^{-19} - 7{,}3475\ x\ 10^{-45}\ E^2\ \ Joule$$

LAMPIRAN L. PERINTAH SIMULASI MATLAB2012

Langkah I : membuat simulasi Fungsi Gelombang Radial Atom Hidrogen n ≤ 3

1. Untuk bilangan kuantum ***n=1, l=0***

```
>>a0=5.3;
>>n=0:0.1:8;
>>r=n.*a0;
>>pr=r./a0;
>>R10=2.*((1./a0)^1.5).*exp(-r./a0).*10;
>>plot(pr,R10)
```

2. Untuk bilangan kuantum ***n=2, l=0,1***

```
>>a0=5.3;
>>n=0:0.1:8;
>>r=n.*a0;
>>pr=r./a0;
>>R20=(1./(2*(sqrt(2)))).*((1./a0).^1.5).*(2-(r/a0)).*exp(-r/(2*a0)).*10;
>>R21=(1./(2*(sqrt(6)))).*((1./a0).^1.5).*(r./a0).*exp(-r/(2.*a0)).*10;
>>plot(pr,R20,'r',pr,R21)
```

3. Untuk bilangan kuantum ***n=3, l=0,1,2***

```
>>clear all
>>a0=5.3;
>>n=0:0.1:40;
>>r=n.*a0;
>>pr=r./a0;
>>R30=(2./(81.*(sqrt(3)))).*((1./a0).^1.5).*(27-
   (18.*(r./a0))+(2.*(r.^2)./(a0.^2))).*exp(-r./(3.*a0)).*10;
>>R31=(4./(81.*(sqrt(6)))).*((1./a0).^1.5).*(r./a0).*(6-(r./a0)).*exp(-
   r./(3.*a0)).*10;
>>R32=(4./(81.*(sqrt(30)))).*((1./a0).^1.5).*((r.^2)/(a0.^2)).*exp(-
   r/(3.*a0)).*10;
>>plot(pr,R30,'r',pr,R31,'y',pr,R32)
```

Langkah II : membuat plot grafik rapat Probabilitas Radial

1. Untuk bilangan kuantum ***n=1, l=0***

```
>>a0=0.529e-10;
>>n=0:0.01:20;
>>r=n.*a0;
>>pr=r./a0;
>>R10=2.*((1./a0)^1.5).*exp(-r./a0);
>>P10=((R10).^2).*(r.^2);
>>sum(P10);
>>p=P10./sum(P10);
>>p0=(P10./sum(P10)).*100;
>>plot(pr,p0)
```

2. Untuk bilangan kuantum ***n=2, l=0,1***

```
>>clear all
>>a0=0.529e-10;
>>n=0:0.01:15;
>>r=n.*a0;
>>pr=r./a0;
>>R20=(1./(2*sqrt(2))).*((1./a0).^1.5).*(2-(r/a0)).*exp(-r/(2*a0));
>>R21=(1./(2*(sqrt(6)))).*((1./a0).^1.5).*(r./a0).*exp(-r/(2.*a0));
>>P20=(abs(R20).^2).*(r.^2);
>>P21=(abs(R21).^2).*(r.^2);
>>sum(P20);
>>sum(P21);
>>p=P20./sum(P20);
>>p=P21./sum(P21);
>>p020=(P20./sum(P20)).*100;
>>p021=(P21./sum(P21)).*100;
>>plot(pr,p020,'r',pr,p021)
```

3. Untuk bilangan kuantum ***n=3, l=0,1,2***

```
>>clear all
>>a0=0.529e-10;
>>n=0:0.1:25;
>>r=n.*a0;
>>pr=r./a0;
>>R30=(2./(81.*(sqrt(3)))).*((1./a0).^1.5).*(27-
   (18.*(r./a0))+(2.*(r.^2)./(a0.^2))).*exp(-r./(3.*a0));
>>R31=(4./(81.*(sqrt(6)))).*((1./a0).^1.5).*(r./a0).*(6-(r./a0)).*exp(-
   r./(3.*a0));
>>R32=(4./(81.*(sqrt(30)))).*((1./a0).^1.5).*((r.^2)/(a0.^2)).*exp(-r/(3.*a0));
>>P30=(abs(R30).^2).*(r.^2);
>>P31=(abs(R31).^2).*(r.^2);
>>P32=(abs(R32).^2).*(r.^2);
>>sum(P30);
>>sum(P31);
>>sum(P32);
>>p=P30./sum(P30);
>>p=P31./sum(P31);
>>p=P32./sum(P32);
>>p030=P30./sum(P30).*10;
>>p031=P31./sum(P31).*10;
>>p032=P32./sum(P32).*10;
>>plot(pr,p030,'r',pr,p031,'g',pr,p032)
```

Langkah III : membuat plot grafik Fungsi Harmonik Bola

Sebagai contoh diambil grafik Fungsi Harmonik Bola untuk l = 2 dan m = 0, dengan amplitudo A=2 dan jari – jari Bohr yaitu 0.529e-10 m.

```
% Define constants.
degree = 2;
order = 0;
 % Create the grid
delta = pi/40;
theta = 0 : delta : pi; % altitude
phi = 0 : 2*delta : 2*pi; % azimuth
[phi,theta] = meshgrid(phi,theta);
 % Calculate the harmonic
Yml =legendre(degree,cos(theta(:,1)));
Yml = Yml(order+1,:)';
yy = Yml;
for kk = 2: size(theta,1)
```

```
    yy = [yy Yml];
end;
yy = yy.*cos(order*phi);
 order = max(max(abs(yy)));
rho = 0.529e-10 + 2*yy/order;
 % Apply spherical coordinate equations
r = rho.*sin(theta);
x = r.*cos(phi);    % spherical coordinate equations
y = r.*sin(phi);
z = rho.*cos(theta);
 % Plot the surface
clf
surf(x,y,z)
light
lighting phong
axis tight equal off
view(50,40)
camzoom(1)
```

Langkah IV : membuat simulasi Fungsi Gelombang Radial ion Lithium n ≤ 3

1. Untuk bilangan kuantum ***n=1, l=0***

```
>>clear all
>>a0= 1.763;
>>n=0:0.01:8;
>>r=n.*a0;
>>pr=r./a0;
>>R10=6*(sqrt(3)).*((1./a0)^1.5).*exp(-3.*r./a0).*10;
>>plot(pr,R10)
```

2. Untuk bilangan kuantum ***n=2, l=0,1***

```
>>a0=1.763; n=0:0.01:8; r=n.*a0; pr=r./a0;
>>R20=3*(sqrt(3)).*(1./(2*(sqrt(2)))).*((1./a0).^1.5).*(2-(3.*r./a0)).*exp(-
    3.*r./(2.*a0)).*10;
>>R21=3*(sqrt(3)).*(1./(2*(sqrt(6)))).*((1./a0).^1.5).*(3.*r./a0).*exp(-
    3.*r./(2.*a0)).*10;
>>plot(pr,R20,'r',pr,R21)
```

3. Untuk bilangan kuantum ***n=3, l=0,1,2***

```
>>a0=1.763; n=0:0.01:8; r=n.*a0; pr=r./a0;
>>R30=3*(sqrt(3)).*(2./(3.*(sqrt(3)))).*((1./a0).^1.5).*(1-
   (2.*(r./a0))+(2.*(r.^2)./(3.*(a0.^2)))).*exp(-r./a0).*10;
>>R31=3*(sqrt(3)).*(8./(9.*(sqrt(6)))).*((1./a0).^1.5).*(r./a0).*(1-
   (r./(2.*a0))).*exp(-r./a0).*10;
>>R32=3*(sqrt(3)).*(4./(9.*(sqrt(30)))).*((1./a0).^1.5).*((r.^2)/(a0.^2)).*exp(-
   r./a0).*10;
>>plot(pr,R30,'r',pr,R31,'g',pr,R32)
```

Langkah V : membuat plot grafik rapat Probabilitas ion Lithium

```
>>a0= 1.73; n=0:0.1:10; r=n.*a0; pr=r./a0;
>>R10=3*(sqrt(3)).*2.*((1./a0)^1.5).*exp(-3.*r./a0);
>>R20=3*(sqrt(3)).*(1./(2*(sqrt(2)))).*((1./a0).^1.5).*(2-(3.*r./a0)).*exp(-
   3.*r./(2.*a0));
>>R21=3*(sqrt(3)).*(1./(2*(sqrt(6)))).*((1./a0).^1.5).*(3.*r./a0).*exp(-
   3.*r./(2.*a0));
>>R30=3*(sqrt(3)).*(2./(3.*(sqrt(3)))).*((1./a0).^1.5).*(1-
   (2.*(r./a0))+(2.*(r.^2)./(3.*(a0.^2)))).*exp(-r./a0);
>>R31=3*(sqrt(3)).*(8./(9.*(sqrt(6)))).*((1./a0).^1.5).*(r./a0).*(1-
   (r./(2.*a0))).*exp(-r./a0);
>>R32=3*(sqrt(3)).*(4./(9.*(sqrt(30)))).*((1./a0).^1.5).*((r.^2)/(a0.^2)).*exp(-
   r./a0);
>>P10=((R10).^2).*(r.^2);
>>P20=((R20).^2).*(r.^2);
>>P21=((R21).^2).*(r.^2);
>>P30=((R30).^2).*(r.^2);
>>P31=((R31).^2).*(r.^2);
>>P32=((R32).^2).*(r.^2);
>>sum(P10); sum(P20); sum(P21); sum(P30); sum(P31); sum(P32);
>>p=P10./sum(P10).*10;
>>p=P20./sum(P20).*10;
>>p=P21./sum(P21).*10;
>>p=P30./sum(P30).*10;
>>p=P31./sum(P31).*10; p=P32./sum(P32).*10;
>>p010=P10.*10; p020=P20.*10; p021=P21.*10; p030=P30.*10; p031=P31.*10;
   p032=P32.*10;
>>plot(pr,p010,'r',pr,p020,'g',pr,p021,'g',pr,p030,'b',pr,p031,'b',pr,p032,'b')
```