NILAI EKSPETASI ATOM DEUTERIUM $({}_{1}^{2}H)$ DENGAN PENDEKATAN PERSAMAAN SCHRODINGER

SKRIPSI

Oleh

Nasrul Naimah
NIM 150210102017

PROGRAM STUDI PENDIDIKAN FISIKA
JURUSAN PENDIDIKAN MIPA
FAKULTAS KEGURUAN DAN ILMU PENDIDIKAN
UNIVERSITAS JEMBER
2019

NILAI EKSPETASI ATOM DEUTERIUM $({}_{1}^{2}H)$ DENGAN PENDEKATAN PERSAMAAN SCHRODINGER

SKRIPSI

diajukan guna melengkapi tugas akhir dan memenuhi salah satu syarat untuk menyelesaikan Program Studi Pendidikan Fisika (S1) dan mencapai gelar Sarjana Pendidikan

Oleh

Nasrul Naimah
NIM 150210102017

PROGRAM STUDI PENDIDIKAN FISIKA
JURUSAN PENDIDIKAN MIPA
FAKULTAS KEGURUAN DAN ILMU PENDIDIKAN
UNIVERSITAS JEMBER
2019

PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan untuk:

1. Ibunda Miatin dan Ayahanda Sardi tercinta;
2. Guru-guruku sejak Taman Kanak-Kanak sampai Perguruan Tinggi;
3. Almamater Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Jember.

MOTTO

Matematika adalah sebuah bahasa.

(Josiah Willard Gibbs, 1839 - 1903)[1]

[1] 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 : Nasrul Naimah

NIM : 150210102017

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi yang berjudul “Nilai Ekspetasi Atom Deuterium(^2_1H) dengan Pendekatan Persamaan Schrodinger ” adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali kutipan yang sudah saya sebutkan sumbernya, belum pernah diajukan pada institusi manapun, dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya, tanpa ada tekanan dan paksaan dari pihak manapun serta bersedia mendapat sanksi akademik jika ternyata di kemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember, 01 April 2019

Yang menyatakan,

Nasrul Naimah

150210102017

SKRIPSI

NILAI EKSPETASI ATOM DEUTERIUM $({}_{1}^{2}H)$ DENGAN PENDEKATAN PERSAMAAN SCHRODINGER

Oleh

Nasrul Naimah
NIM 150210102017

Pembimbing

Dosen Pembimbing Utama : Dr. Sri Handono Budi P., M.Si

Dosen Pembimbing Anggota : Drs. Bambang Supriadi, M.Sc

PENGESAHAN

Skripsi berjudul "Nilai Ekspetasi Atom Deuterium $\left({}_{1}^{2}H\right)$ dengan Pendekatan Persamaan Schrodinger" telah diuji dan disahkan pada:

hari, tanggal : 01 April 2019

tempat : Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Jember

Tim penguji

Ketua,	Sekretaris,
Drs. Sri Handono Budi P., M.Si NIP. 195803181985031004	Drs. Bambang Supriadi, M,Sc NIP. 196807101993021001
Anggota I,	Anggota II,
Dr. Yushardi S.Si, M.Si NIP. 196504201995121001	Drs. Alex Harijanto, M.Si NIP. 196411171991031001

Mengesahkan
Dekan Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan
Universitas Jember

Prof. Drs. Dafik, M.Sc., Ph.D
NIP. 19680802 199303 1004

RINGKASAN

Nilai Ekspetasi Atom Deuterium (^2_1H) dengan Pendekatan Persamaan Schrodinger; Nasrul Naimah, 150210102017; 2019: 46 halaman; Program Studi Pendidikan Fisika Jurusan Pendidikan MIPA Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Jember.

Jenis penelitian ini ialah penelitian pengembangan non eksperimen pada bidang fisika teori yang berupa pengembangan teori Mekanika Kuantum. Teori fisika yang dikembangkan yakni penentuan nilai ekspetasi dan energi atom berelektron tunggal dengan pendekatan teori oerturbasi. Tujuan dari penelitian ini adalah menentukan nilai ekspetasi atom Deuetrium dengan menggunakan pendekatan persamaan Schrodinger.

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah study literature, langkah pertama yang dilakukan dalam penelitian ini adalah menetukan fungsi gelombang atom Deuterium untuk bilangan kuantum n $\leq$ 3 dengan menggunakan pendekatan persamaan Schrodinger. Persamaan Schrodinger adalah persamaan diferensial parsial orde dua yang berguna untuk menganalisis perilaku dualism gelombang partikel. persamaan Schrodinger dibentuk berdasarkan hukum kekekalan energi serta azas terhadap hipotesis de Broglie. Metode yang digunakan untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger yaitu metode pemisahan variable dan akan diperoleh solusi analitik kompleks berupa fungsi gelombang yang meliputi fungsi gelombang Radial R_{nl} (r) serta fungsi harmonik bola $Y_{l\,m_l}(\theta,\varphi)$ yang merupakan gabungan dari fungsi gelombang Polar Θ_{lm} (θ) dan fungsi gelombang Azimuth Φ_m (φ). Persamaan Schrodinger yang digunakan ialah persamaan Schrodinger bebas waktu untuk partikel tunggal pada koordinat bola (r,θ,φ).

Pada penelitian ini digunakan tiga jenis bahan validasi, yaitu simulasi fungsi gelombang dan rapat probabilitas atom Hidrogen untuk $n \leq 3$, simulasi fungsi harmonik bola, dan perhitungan matematis koreksi order-1 atom Hidrogen akibat gangguan medan elektrostatis. Fungsi gelombang radial atom Hidrogen serta fungsi harmonik bola disimulasikan dengan menggunakan softare aplikasi Scilab 6.0.0.

Hasil penyelesaian persamaan Schrodinger pada atom Deuterium diperoleh persamaan jari-jari Bohr atom Deuterium yaitu $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$. Dengan mensubstitusikan ketetapan-ketetapan dari literature maka diperoleh jari-jari Bohr atom Deuterium $a_0 = 5{,}2932183426555585x10^{-11}m$. Bila bibandingkan dengan jari-jari Bohr atom hidrogen yaitu $a_0 = 5{,}29177663248x10^{-11}m$ maka jari-jari Bohr atom Deuterium lebih besar daripada jari-jari Bohr atom Hidrogen. Hal ini dikarenakan massa tereduksi sistem elektron-deutron lebih kecil bila dibandingkan dengan massa tereduksi sistem elektron-proton. Sehingga mengakibatkan perbedaan antara atom Deuterium dengan atom Hidrogen yang terletak pada ukuran jari-jari atom Bohrnya. Bentuk fungsai gelombang atom Deuterium mirip dengan fungsi gelombang atom Hidrogen yang terdapat pada buku teks namun terdapat perbedaan pada nilai simpangan gelombangnya dalam skala amstrong.

Berdasarkan perhitungan nilai ekspetasi posisi elektron dalam atom Deuterium pada *keadaan n = 1* dan *n = 2* diketahui bahwa bilangan kuantum utama *n* ,bilangan kuantum azimuth *l*, bilangan kuantum polar *m* menunjukkan bahwa semakain besar maka akan berakibat pada semakin kecilnya nilai ekspetasi fungsi gelombang. Hal ini berarti elektron sudah mulai sulit untuk ditemukan lagi pada bilangan kuantum yang semakin besar

PRAKATA

Puji syukur kehadirat Allah SWT. atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul "Nilai Ekspetasi dan Energi Atom Deuterium $({}_{1}^{2}H)$ dengan Pendekatan Perturbasi". Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan Strata satu (S1) pada Program Studi Pendidikan Fisika, Jurusan Pendidikan MIPA, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Jember.

Penyusunan skripsi ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis menyampaikan terima kasih kepada:

1. Dr. Dwi Wahyuni, M.Kes., selaku Ketua Jurusan Pendidikan MIPA yang telah memfasilitasi dalam pengajuan ujian skripsi;
2. Drs. Bambang Supriadi, M.Sc., selaku Ketua Program Studi Pendidikan Fisika yang telah memfasilitasi dalam pengajuan judul skripsi;
3. Drs. Sri Handono Budi P., M.Si., selaku Dosen Pembimbing utama, Drs. Bambang Supriadi, M.Sc, selaku Dosen Pembimbing anggota yang telah meluangkan waktu, pikiran dan perhatiannya dalam penulisan skripsi ini;
4. Dr. Yushardi S.Si, M.Si, selaku Dosen Penguji utama dan Drs. Alex Harijanto, M.Si., selaku Dosen Penguji anggota yang telah meluangkan waktu, pikiran dan perhatiannya dalam penulisan skripsi ini;
5. Semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu persatu.

Penulis juga menerima segala kritik dan saran dari semua pihak demi kesempurnaan skripsi ini. Akhir kata, penulis berharap semoga skripsi ini dapat bermanfaat. Aamiin.

Jember, 01 April 2019

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 parikel dan gelombang merupakan pokok bahasan yang terpisah satu sama lain. Kegagalan awal pada teori klasik yakni dalam menjelaskan spektrum radiasi termal dari suatu benda suhu yang sangat tinggi yang biasa dusebut radiasi benda hitam. Selain itu, teori gelombang pada fisika klasik gagal menjelaskan adanya peristiwa pemancaran elektron dari permukaan logam yang disinari cahaya *(efek fotolistrik)* dan juga hamburan cahaya oleh elektron-elektron *(efek compton).*

Permasalahaan diatas hanya dapat diselesaikan dengan beranggapan bahwa partikel dan gelombang memiliki sifat dualisme yang saling berkaitan satu sama lain. Menurut hipotesis Louis de Brodlie suatu partikel bergerak memiliki momentum p dapat berperilaku sebagai gelombang dengan ciri adanya panjang gelombang $\lambda = \frac{h}{p}$ yang dikenal dengan panjang gelombang de Broglie dari suatu partikel. Berdasarkan hal ini lah munculnya teori baru dalam fisika yang disebut dengan mekanika kuantum.

Keterkaitan dualisme antara gelombang dan partikel dapat dijelakan secara matematis dengan menggunakan differensial parsial orde dua yang dikenal sebagai persamaan Schrodinger. Berdasarkan hukum kekekalan energi dan azas terhadap hipotesis dari de Broglie dapat membentuk suatu persamaan Schrodinger, sehingga dapat diperoleh suatu solusi analitik kompleks yang berupa fungsi gelombang. Berdasarkan fungsi gelombangnya dapat diketahui sebagai karakter dari partikelnya yakni: momentum sudut, harga ekspektasi, probabilitas, maupun nilai rata-rata yang dimiliki oleh partikel dalam pengaruh suatu potensial tertentu, dan bagaimana perilaku dari partikel tersebut. Fungsi gelombang yang didapatkan harus ternormalisasi, secara fisis dapat diartikan sebagai peluang untuk menemukan partikel disuatu tempat disuatu waktu harus bersifat tertentu, selain itu fungsi gelombang juga harus memiliki nilai tunggal dan berhingga, yang berarti tidak akan mungkin ditemukan satu partikelpun yang identik dalam waktu yang bersamaan dalam dua tempat yang berbeda.

Melihat dari sudut pandang karakteristik umum dari fungsi gelombang, persamaan Schrodinger dibedakan menjadi dua jenis yaitu, persamaan Scrhodinger tak bergantung waktu atau dalam keadaan dimana fungsi gelombangnya tidak memiliki suku waktu(t) biasa disebut dalam keadaan tunak Bila dilihat dari sudut pandang arti fisisnya fungsi gelombang tersebut dipengaruhi atau dibentuk oleh suatu potensial yang hanya bergantung pada posisi(r) serta tidak mengalami perubahan pada setiap waktunya, kasus seperti ini biasanya berlaku untuk kasus potensial yang sederhana non relativistik. Selain itu terdapat fungsi gelombang Schrodinger yang bergantung waktu, dimana persamaan ini menghasilkan fungsi gelombang yang mengandung suku waktu (t). bila dilihat dari sudut pandang arti fisisnya fungsi gelombang dipengaruhi atau dibentuk dari suatu potensial dimana bentuknya bias berubah-ubah disetiap waktunya. Kasus ini dapat ditemukan pada kasus yang lebih rumit seperti halnya pada model atom kuantum Sommerfeld dimana dijelaskan bahwa lintasan suatu elektron tidak berbentuk lingakaran namun berbentuk elips serta bentuknya dapat berubah-ubah pada setiap waktunya (Liboff,1980:243).

Deuterium dimanfaatkan untuk bahan pembuatan air berat. Dalam reaksi fisi uranium, air berat digunakan sebagai moderator neutron. Fungsi moderator adalah untuk memperlambat neutron dengan cara menyerap energi dan menumbuk neutron tanpa kencenderungan menyerap partikelnya (Beiser, 1990:496). Atom Deuterium memiliki jumlah proton yaitu 1 yang termasuk kedalam kelompok atom hidrogenik. Atom hidrogenik hanya memiliki satu proton dimana terdapat satu nukleus dengan satu elektron yang mengelilinginya. Terdapat beberapa kelompok atom yang termasuk kedalam golongan atom hidrogenik, antara lain ion Helium (He^{+}) dimana atom helium merupakan atom yang kehilangan satu dari dua elektronnya (Z = 2), ion Lithium (Li^{2+}) merupakan atom yang kehilangan dua dari tiga elektronnya (Z = 3), serta atom Hidrogen (Z = 1) beserta isotopnya yaitu, Deuterium (A = 2 dan Z = 1), dan Tritium (A = 3 dan Z= 1). Kelompok-kelompok partikel yang berelektron tunggal seperti H, He^{+}, Li^{2+} memiliki sifat serta karakteristik yang hampir sama baik dilihat secara fisis maupun matematisnya. Interpretasi secara matematis yang berkaitan dengan atom Hidrogenik dapat dijelaskan dengan melalui persamaan differensial orde dua yaitu persamaan Schrodinger (Finn dan Alonso, 1968:111).

Menurut *Beiser* (1990:496) sejumlah manfaat Deuterium yaitu “Untuk bahan pembuatan air berat. Pada reaksi fisi uranium, air berat ini digunakan sebagai moderator neutron. Fungsi dari moderator ialah untuk memperlambat neutron, caranya ialah dengan menyerap energi dan menumbuk neutron tanpa kecenderungan menyerap partikelnya...” Menurut *Sukarsono et al* (2008) “Proses pengayaan air berat bisa dilakukan dengan menggunakan metode destilasi, elektrolisa, dan penukaran isotop…” Menurut *Holmid* (2013) “Deuterium juga bermanfaat pada proses induksi-laser yang digunakan untuk mengamati partikel dengan energi >10 MeV.”

Dalam penelitian sebelumnya menganai atom hidrogen telah dilakukan beberapa penelitian antara lain: Rif’ati (2004) menyimpulkan fungsi gelombang atom hidrogen merupakan kuantitas kompleks yang terdiri atas bagian radial dan sebagai anguler serta distribusi rapat probabilitas menggambarkan penyebaran kedudukan elektron dalam atom; Yusron *et al* (2007) menyimpulkan probabilitas untuk menentukan elektron di ruang antar proton pada molekul H_2^+ bergantung pada jarak antar proton dan fungsi gelombang yang membentuk ikatan kovalen pada molekul H_2^+ adalah fungsi gelombang simetri; Lavenda *et al* (Tanpa Tahun) menyimpulkan solusi persamaan Schrödinger pada dua atom hidrogen yang saling bertumbukan menghasilkan deuterium; Supriyadi *et al* (2006) menyimpulkan solusi numerik persamaan Schrödinger atom hidrogen dengan metode elemen hingga memberi hasil yang cukup akurat bila dibandingkan dengan solusi analitik; Ganesan dan Balaji (2008) menyatakan untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger pada atom elektron tunggal atau atom mirip hidrogen adalah dengan mengubah koordinat kartesius menjadi koordinat polar dan membutuhkan pemahaman tentang polynomial legendre dan lagurre.

Mengingat begitu pentingnya Deuterium sebagai salah satu sumber sekunder bagi makhluk hidup, sehingga diperlukan penelitian lebih lanjut mengenai fungsi gelombang, nilai ekspetasi atom Deuterium dengan judul Nilai Ekspetasi Atom Deuterium dengan Pendekatan Persamaan Schrodinger. Keterbaruan dari penelitian ini terletak pada atomnya yaitu Deuterium dimana pada penelitian sebelumnya menggunakan atom Hidrogen, serta nilai ekspetasi hingga $\langle r^2 \rangle$.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas maka dapat dirumuskan menjadi permasalahan sebagai berikut:

a. Bagaimana bentuk fungsi gelombang keadaan dasar (1s) atom Deuterium dengan pendekatan persamaan Schrodinger?
b. Bagaimana nilai ekspetasi elektron dari atom Deuterium pada keadaan $n=1$ dan $n=2$?

1.3 Batasan Masalah

Agar penelitian lebih terfokuskan dan dapat menjawab dari 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. Fungsi gelombang yang digunakan untuk membuat grafik yaitu berupa fungsi gelobang radial.
c. Fungsi gelombang Deuterium memenuhi syarat normalisasi.
d. Fungsi gelombang yang diperoleh mengabaikan efek spin.

1.4 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini sebagai berikut :

a. Menentukan fungsi gelombang keadaan dasar (1s) atom Deuterium dengan pendekatan persamaan Schrodinger
b. Menentukan nilai ekspetasi elektron dari atom Deuterium pada keadaan $n=1$ dan $n=2$

1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat yang dapat diperoleh dari penelitian ini adalah :

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 pendekatan Schrodinger 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

Einstein pernah mengemukakan idenya yaitu misalkan terdapat suatu partikel yang memiliki foton dengan energi hf (panjang gelombang λ dan frekuensi f) mempunyai momentum linier p yang arahnya searah dengan arah pergerakannya. Besarnya p tersebut dapat dinyatakan sebagai berikut:

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

A.H. Compton pada tahun 1923 membenarkan adanya ide ini melalui eksperimen hamburan sinar-X dan elektron. Maka perilaku dari foton yang mempunyai momentum linier $\frac{h}{f}$ dengan energi hf dapat diketahui. de Broglie pada tahun 1923 telah mempostulatkan jika partikel bergerak dapat mempunyai panjang gelombang dan momentum dimana hal ini biasa disebut panjang gelombang de Broglie yang mana keduanya saling berhubungan sesuai dengan persamaan (2.1)(Krane, 1982:126).

Namun hanya partikel yang berukuran atom atau inti atomlah yang dapat diamati panjang gelombang de Broglie. Dari persamaan (2.1) didapatkan besarnya panjang gelombang de Broglie yaitu :

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

Dimana h adalah konstanta planck yang nilainya 6,63 x 10^{-34} Js

Untuk panjang gelombang de Broglie dapat ditulis :

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

Pada perambatannya gelombang memindahkan sejumlah energi dari suatu subsistem ke subsistem lainnya. Suatu gelombang yang merambat dalam arah tertentu misalnya 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 suatu fungsi gelombang yaitu:

$$\Psi(x,t) = A\sin(\omega t - kx) + B\cos(\omega t - kx) \quad \text{.....(2.2)}$$

Fungsi gelombang Ψ merupakan kuantitas kompleks yang memberikan karakteristik gelombang de Broglie. Harga fungsi Ψ tidak memiliki arti fisis secara langsung namun dapat menyajikan informasi fisis jika partikel tersebut memiliki gerak yang tak terbatas. Kuadrat harga mutlak dari fungsi gelombang $|\Psi|^2$ bisa dikatakan sebagai kerapatan peluang *P(r)* menyatakan kemungkinan dari suatu partakel misalnya elektron ditemukan pada posisi tertentu dalam sebuah atom (Beiser, 1990:91).

2.2 Persamaan Schrodinger

Persamaan Schrodinger adalah persamaan differensial parsial orde dua. Dimana persamaan Schrodinger digunakan untuk memberikan informasi tentang sifat gelombang dari suatu partikel. Bila dilihat dari karakteristik fungsi gelombangnya persamaan Schrodinger dibedakan menjadi dua jenis yaitu persamaan Scrodinger tak bergantung waktu dan persamaan Schrodinger bergantung waktu. Untuk memecahkan masalah berkaitan dengan atom hidrogenik digunakan persamaan Schrodinger tak bergantung waktu.

2.2.1 Persamaan Schrodinger Tak Bergantung Waktu (Keadaan Tunak)

Persamaan Schrodinger dapat dipecahkan apabila memenuhi 3 syarat sebagai berikut:

a. Memenuhi hukum Kekekalan Energi

Hukum kekekalan energy menyatakan bahwa jumlah total dari energi ialah energy kinetic dan energy potensial dari suatu partikel selalu memiliki sifat kekal. Persamaan hukum kekekalan enrgi dari suatu partikel dapat ditulisakan sebagai berikut ;

$$K + V = E$$

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

Pada ruas kiri terdapat suku pertama yang menyatakan energi kinetik untuk suku kedua menyatakan energi potensial. Pada ruas kanan adalah suatu tetapan dimana tetapan ini menyatakan energi total. Secara umum energi potensial merupakan energi yang dimiliki suatu benda yang dikarenakan oleh kedudukannya. Pada sistem atom, energi potensial muncul akibat adanya gaya elektrostatis coulomb antara inti atom dengan elektron (Ashby, 1970:166)

b. Linier serta bernilai tunggal

Persamaan Schrodinger memiliki syarat, dalam pengertian matematis syarat ini haruslah "berperilaku baik". Solusi persamaan Schrodinger haruslah memberikan informasi perihal probabilitas untuk menemukan partikelnya. Meskipun dapat pula probabilitas berubah secara kontinu, partikelnya menghilang secara tiba-tiba dari suatu titik dan muncul kembali di titik berikutnya. Akan tetapi tidak diperbolehkan ada dua probabilitas untuk menemukan partikel di satu titik yang sama atau bisa disebut sebagai fungsinya harus bernilai tunggal. Indikator dari sifat gelombang yang berkelakuan baik dan linier adalah fungsi gelombangnya harus memiliki sifat superposisi gelombang (Krane.1992:172).

c. Taat azas terhadap hipotesa de Broglie

Bentuk dari persamaan diferensial apapun haruslah taat azas hipotesa de Broglie. Solusi secara matematis bagi sebuah partikel dengan momentum p harus berbentuk sebuah fungsi gelombang dengan panjang gelombang λ yang sama dengan $\frac{h}{p}$. Sesuai dengan persamaan (2.1) dan (2.3) dimana diketahui bahwa $p = \hbar k$ sehingga energi kinetik dari gelombang de Broglie untuk partikel bebas dirumuskan sebagai barikut ini:

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

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

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

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

Berdasarkan persamaan (2.4) didapatkan :

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

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) adalah persamaan Schrodinger dalam keadaan tunak satu dimensi atau biasa disebut persamaan Schrodinger tak bergantung waktu. Dalam bentuk tiga dimensi persamaan (2.6) didapatkan :

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

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

Untuk secara umum persamaan Schrodinger keadaan tunak dapat dituliskan :

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

Dimana ∇^2 adalah operator Laplace yang bergantung waktu pada koordinat yang digunakan dalam memecahkan persamaan Schrodinger.

2.2.2 Persamaan Schrodinger pada Hidrogenik (Atom Berelektron Tunggal)

Persamaan Schrodinger pada atom yang berelektron tunggal bisa diselesaikan dengan mengasumsikan bahwa atom mempunyai simetri bola, sehingga persamaan Schrodinger haruslah disajikan salam koordinat bola (tiga dimensi). Maka operator Laplace ∇^2 dapat dituliskan sebagai berikut:

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

Dengan mekalukan substitusi persamaan diatas kedalam persamaan (2.7) didapatkan persamaan Schrodinger dalam keadaan tunak tiga dimensi sebagai berikut:

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

$$(E - V)\,\Psi_{(r,\theta,\varphi)} = 0$$

Pada sistem dua partikel dengan gaya sentral persamaan diatas dapat dituliskan sebagai berikut :

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

Dimana r_c adalah posisi pusat massa yang dituliskan sebagai berikut :

$$r_c=\frac{r_1m_1+r_2m_2}{m_1+m_2}$$
$$\mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}\text{ (Gasiorowicz, 1996:169) ....}(2.9)$$

Dimana μ merupakan massa tereduksi.

Potensial untuk atom Hodrogen dengan Z=1 adalah fungsi dari jarak terhadap titik asal yang diberikan, secara matematis dapat dituliskan :

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

Pada persamaan (2.8) dapat dipecahkan dengan menggunakan metode pemisahan variable sebagai berikut:

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

Ataupun dapat dituliskan sebagai berikut :

$$\Psi_{(}r,\theta,\varphi_{)}\;=R\Theta\Phi\text{ ....}(2.11)$$

Dengan substitusi persamaan (2.10) dan (2.11) kedalam persamaan (2.8) selanjutkan dikalikan dengan $\frac{2\mu r_c{}^2}{\hbar^2}$maka didapatkan :

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

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

$$\frac{1}{R}\frac{d}{dr_c}\left(r_c{}^2\frac{\partial R}{\partial r_c}\right)+\frac{1}{\Theta sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(sin\theta\frac{\partial\Theta}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Phi sin^2\theta}\frac{d^2\Phi}{d\varphi^2}+$$

$$\frac{2\mu r_c{}^2}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_c}\right)=0 \quad \text{...}(2.12)$$

Dari persamaan (2.12) dapat dilihat bahwa pada suku pertama dan suku keempat hanya bergantung pada jari-jari r_c, untuk suku kedua bergantung pada sudut θ, dan untuk suku ketiga bergantung pada φ. penjumlahan antar suku-suku yang hanya bergantung pada jari-jari r_c dan sudut θ serta φ akan selalu bernilai tetap untuk sembarang nilai r, θ, φ (Purwanto, 2006:155).

Apabila masing-masing suku sama dengan konstan yang berharga $\pm l(l+1)$, maka suku yang hanya bergantung jari-jari akan menjadi :

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

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

Untuk suku yang mengantung θ dan φ akan menjadi :

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

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

Untuk penyederhanaannya digunakan konstanta $-m^2$ dan m^2 maka akan diperoleh persamaan diferensial biasa yakni :

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

Melalui pemisahan variable persamaan (2.14) bisa dijabarkan sebagai berikut :

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

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

Untuk memperoleh fungsi gelombang azimuth, fungsi gelombang polar, dan fungsi gelombang radial dapat melalui penjabaran dari persamaan (2.13), (2.15), dan (2.16).

2.3 Solusi Persamaan Schrodinger Atom Berelektron Tunggal

Solusi persamaan Schrodinger adalah solusi gabungan dari solusi azimuth, solusi radial, dan solusi polar yang didapatkan melalui metode pemisahan variable. Solusi dari gabungan ketiganya secara matematis dituliskan dalam persamaan (2.11). solusi azimuth, radial dan polar secara lengkap akan dituliskan sebagai berikut:

2.3.1 Solusi Azimuth

Persamaan azimuth pada (2.15) menggambarkan gerak rotasi dari elektron pada sekitar sumbu z dengan batasan rotasi antara 0 sampai 2π. Pemilihan konstantan negatif $-m^2$ supaya memberikan solusi berupa fungsi sinusoidal dan periodik. Apabila digunakan konstanta positif m^2 akan diperoleh solusi berupa fungsi eksponensial.

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

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

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

Persamaan differensial diatas memiliki solusi:

$$\Phi \ = \Phi_0\, e^{\pm im\varphi} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(2.17)$$

Mengingat mempunyai sutau hubungan yakni :

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

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

Pada setiap bilngan bulat dipenuhi $m = 0, \pm 1, \pm 2, ...$ (Griffits, 1995:125).

Dengan menggunakan syarat Normalisasi, maka persamaan (2.17) akan memberikan nilai konstanta Normalisasi:

$$\Phi_0 = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}$$

Dengan demikian, persamaan (2.17) sebagai solusi Azimuth dapat dituliskan menjadi:

$$\Phi = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\, e^{\pm im\varphi} \quad \text{……………………………………………………..…..….(2.18)}$$

Dimana *m* adalah bilangan bulat magnetik.

2.3.2 Solusi Radial

Berdasarkan Persamaan Radial (2.13) didapatkan energi Eigen E. untuk keadaan terkat dimana keadaan dengan energi negatif E = - $|E|$, pada persamaan (2.13) dapat diselesaikan dengan menggunakan permisalan

$$\rho \;=\left[\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}} r_c \quad \text{………………………………………………………….…………(2.19)}$$

$$d\rho \;=\left[\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}} dr_c \quad \text{…..…………………………………………………….……...(2.20)}$$

Substitusikan persamaan (2.19) dan (2.20) kedalam persamaan (2.13) :

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

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

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

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

$$\frac{1}{\rho^{\,2}}\frac{d}{d\rho}\left[\rho^{\,2}\frac{dR}{d\rho}\right]+\left[\frac{E}{4|E|}+\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{\rho}\,\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[\frac{8\mu|E|}{\hbar^2}\right]^{-\frac{1}{2}}-\frac{l(l+1)}{\rho^{\,2}}\right]R \quad =0\text{...(2.21)}$$

Untuk persoalan energi ikat dimana E = $-|E|$ didapatkan :

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

Sebagai penyederhanaan digunakan permisalan sebagai berikut :

$$\beta=\left[\frac{e^2}{2\pi\epsilon_0\hbar}\right]\left[\frac{\mu}{8|E|}\right]^{\frac{1}{2}}\frac{1}{\rho^{\,2}}\frac{d}{d\rho}\left[\rho^{\,2}\frac{dR}{d\rho}\right]+\left[-\frac{1}{4}+\frac{\beta}{\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^{\,2}}\right]R=0 \quad \text{…………...…..(2.22)}$$

Untuk menemukan solusi dari persamaan (2.22) akan diselidiki terlebih dahulu perilaku persamaan tersebut pada dua daerah ekstrim yakni daerah pada pusat koordinat dan daerah jauh sekali. Untuk daerah yang jauh sekali dari pusat koordinat dimana $\omega \to \infty$ didapatkan :

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

Dengan solusi

$$\mathrm{R} \approx e^{-\frac{\rho}{2}} \quad \text{...(2.23)}$$

Untuk daerah pada pusat koordinat atau pada titik pusat didapatkan:

$$\mathrm{R} \quad = \frac{\mathrm{R}(\rho\,)}{\rho}$$

Dengan R(ρ) dimisalkan dengan U maka,

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

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

Dengan substitusi R = $\frac{U}{\omega}$ maka persamaan (2.22) dapat dituliskan kembali menjadi :

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

$$\frac{d^2U}{d\rho^{\,2}} - \frac{l(l+1)}{\rho^{\,2}}U + \left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4}\right)U \;= 0 \quad \text{.....................................(2.24)}$$

Untuk limit $\rho \to \infty$ nilai $\left(\frac{\lambda}{\rho} - \frac{1}{4}\right)U$ bisa 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 dapat dituliskan sebagai berikut :

$$\mathrm{U} \quad = \rho^{\,l+1}$$

Maka didapatkan :

$$R \quad = \frac{U}{\rho} = \frac{\rho^{\,l+1}}{\rho} = \rho^{\,l} \quad \text{...(2.25)}$$

Dengan menggabungkan persamaan (2.23) dengan (2.25) akan didapatkan bahwa solusi umum merupakan perkalian antara persamaan (2.23), (2.25), dan konstanta *Laguerre* L yang bergantung pada fungsi ρ dapat dituliskan L(ρ):

$$\mathrm{R}(\rho\,) = \rho^{\,l}\,e^{-\frac{\rho}{2}}\,\mathrm{L}(\omega) \quad \text{...(2.26)}$$

Persamaan (2.26) dapat dijabarkan dengan menggunakan *polynomial Laguerre* dari persamaan (2.24) yakni :

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

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

Untuk suku pertama di dapatkan :

$$\frac{d^2U}{d\rho^{\,2}} = L(\rho)\left[l(l+1)\rho^{\,(l-1)}e^{-\frac{\rho}{2}} - (l+1)\rho^{\,l}e^{-\frac{\rho}{2}} + \frac{1}{4}\,\rho\, e^{-\frac{\rho}{2}}\right] + \frac{\partial L(\rho)}{\partial\rho}\left[2(l+1)\rho^{\,l}e^{-\frac{\rho}{2}} - \rho^{\,(l+1)}e^{-\frac{\rho}{2}}\right] + \frac{\partial^2 L(\rho)}{\partial\rho^{\,2}}\left[\rho^{\,(l+1)}e^{-\frac{\rho}{2}}\right] \quad \text{......(2.27)}$$

Persamaan (2.22) dapat dituliskan kembali dalam bentuk :

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

…………………………………………………………………………………………… (2.28)

Dimana :

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

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

Sebagai bentuk penyederhanaan kalikan semua suku dari persamaan (2.28) dengan $\rho^{\,-l}e^{\frac{\rho}{2}}$ sehingga didapatkan :

$$\rho\,\frac{\partial^2 L(\rho)}{\partial\rho^{\,2}} + \frac{\partial L(\rho)}{\partial\rho}\,[2(l+1) - \rho\,] + L(\rho)\,[\beta - (l+1)] = 0 \quad \text{.................(2.29)}$$

Solusi deret dari persamaan (2.29) diatas adalah :

$$L = \rho^{\,s}\sum_{s=0}^{\sim} a_s\,\rho^{\,s} \quad \text{..(2.30)}$$

Akan didapatkan rumus Rekursi sebagai berikut :

$$a_{s+1} = \frac{s+l+1-\lambda}{(s+1)(s+2l+2)}\,a_s \quad \text{..(2.31)}$$

Deret akan menjadi berhingga apabila β merupakan bilangan bulat. Misalnya $\beta = n$, akan tetapi a_{s+1} akan bernilai nol jika $s = n - l - 1$. Maka $L(\rho)$ merupakan suatu deret polynomial. Untuk $\beta = n$, berdasarkan persamaan (2.29) akan menjadi :

$$\rho \frac{\partial^2 L(\rho)}{\partial \rho^2} + \frac{\partial L(\rho)}{\partial \rho}[2(l+1) - \rho] + L(\rho)[n-(l+1)] = 0 \quad \text{……….….(2.32)}$$

Persamaan (2.32) adalah persamaan diferensial *Laguerre Terasosiasi* yang memiliki bentuk umum sebagai berikut :

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

Untuk solusinya biasa disebut dengan *polinom Laguerre Terasosiasi* L_q^p yang didapatkan dari rumus *Rodrigues* sebagai berikut :

$$L_q^p = L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = (-1)^{2l+1}\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}e^{\frac{2Zr}{na_0}}\frac{d^{n+l}}{d\left(\frac{2Zr}{n\,a_0}\right)^{n+l}}\left(e^{-\frac{2Zr}{n\,a_0}}.\left(\frac{2Zr}{n\,a_0}\right)^{n-l-1}\right) \quad \text{…..(2.33)}$$

Solusi umum dari persamaan Radial didapatkan :

$$R_{nl}(r) = \left[\left(\frac{2Z}{n\,a_0}\right)^3\frac{(n-l-1)!}{2n\,[(n+l)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\frac{2Zr}{n\,a_0}\right]^l e^{-\frac{Zr}{n\,a_0}}L_{n+l}^{2l+1}(\rho) \quad \text{(Singh, 2009:237) …(2.34)}$$

2.3.3 Solusi Polar

Pada persamaan Polar (2.16) biasa dikenal dengan persamaan diferensial *Legendre Terasosiasi*. Solusi dari persamaan tersebut dapat diperoleh dengan menggunakan metode *Frobenius* dan diberikan oleh deret berhingga yang dikenal sebagai *polinom Legendre* terasosiasi. Apabila konstanta yang dipilih pada bersamaan (2.16) bukan $\pm l(l+1)$ maka akan didapatkan solusi deret tak hingga.

Solusi dari persamaan (2.16) dapat dituliskan sebgai berikut :

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

$$\Theta(\theta) = \Theta_{lm}(\theta) = N_{lm}P_l^m(\cos\theta) \quad \text{……………………...…………………(2.35)}$$

Dimana adalah N_{lm} konstanta normalisai sehingga:

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

Dengan menggunakan sifat ortogonalitas didapatkan :

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

Sehingga diperoleh nilai konstanta normalisasi :

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

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

$$N_{lm} \;=\; \sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \;\ldots\ldots\ldots\ldots(2.36)$$

Substitusi persamaan (2.36) kedalam persamaan (2.35) sehingga didapatkan :

$$\Theta_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\, P_l^m(\cos\theta)\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(2.37)$$

Bentuk eksplisit dari polinom P_l^m $(\cos\theta)$ didapatkan melalui rumus Rodrigues seperti berikut ini :

$$P_l^m(\cos\theta) = \frac{1}{2^l l!}(1)(1-\cos^2\theta)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{l+|m|}}{d\cos^{l+|m|}\theta}(\cos^2\theta-1)^l \;\ldots\ldots\ldots\ldots(2.38)$$

Berdasarkan rumusan diatas persamaan (2.37) sebagai solusi umum persamaan polar dapat dituliskan menjadi :

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

……………………………………………………………………………(2.39)

2.4 Bilangan Kuantum

Berdasarkan teori Bohr, orbit dari elektron tersebut berbentuk lingkaran dengan jari-jari tertentu. Orbital merupakan daerah 3 dimensi dengan peluang terbesar menemukan elektron. Setiap orbital mempunyai ukuran, bentuk, dan orientasi tertentu dalam ruang yang dinyatakan dengan bilangan kuantum.

2.4.1 Bilangan Kuantum Utama (n)

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

Dengan beranggapan bahwa elektron terikat sebagai atom, maka nilai eigen E harus memiliki harga negatif (E = $-|E|$).

Dimana pada ulasan sebelumnya telah diketahui bahwa $\omega = \frac{r_c}{\hbar}\sqrt{8\,\mu\,|E|} = \frac{\mu\, e^2 r_c}{2n\pi\epsilon_0\hbar^2}$ maka akan didapatkan 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 dari elektron. Nilai dari bilangan Azimuth adalah bilangan cacah yakni *l = 0* sampai *l = n-1*. Bilangan kuantum Azimuth juga menyatakan kecepatan sudut dari elektron. Besar dari momentum sudut elketron dapat dituliskan sebagai berikut :

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 maka disebut juga dengan bilangan kuatum orientasi orbital. Untuk setiap harga dari *l*, akan memiliki harga *m* sebanyak *2l+1*. Rentang nilai *m* = - *l* sampai *m* = +*l* termasuk nol (-*l, …,0, …+l*).

2.5 Normalisasi dan Probabilitas Fungsi Partikel

Untuk membuktikan bahwa partikel benar-benar berada dalam ruangan maka diperlukan normalisasi terhadap fungsi gelombang Ψ, yaitu

$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dV = 1$ (Beiser, 1990:169)……………………………………………(2.42)

Persamaan diatas memiliki arti fisis bahwa peluang keboleh jadian P untuk menentukan partikel adalah kedudukan partikel adalah 1.

Untuk $\Psi_{(r,\theta,\varphi)} = R_{(r)}\Theta_{(\theta)}\Phi_{(\varphi)}$ maka akan didapatkan persamaan probabilitas sebagai berikut:

$P = \int_{-\infty}^{\infty} r^2 R^2 dr$……………………………………………………………(2.44)

Apabila persamaan diatas sama dengan nol maka artinya partikel tidak dapat ditemukan dalam ruangan tersebut. Persamaan (2.44) memiliki arti fisis bahwa nilai probabilitas dan nilai ekspetasi tidak bergantung pada fungsi sudut (fungsi Azimuth dan fungsi Polar) tetapi hanya fungsi Radial.

2.6 Fungsi Gelombang Partikel

Persamaan Schrodinger telah dipecahkan untuk sebuah partikel dalam suatu situasi fisis, fungsi gelombang Ψ yang dihasilkan mengandung semua informasi partikel itu yang diizinkan oleh prinsip ketidakpastian. Informasi mengenai kedudukan sebuah elektron dapat dicari dari harga ekspetasi dengan menggunakan fungsi gelombang Ψ dengan menganggap bahwa elektron berada sepanjang sumbu x maka harga ekspetasi kedudukan elektron adalah

$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x|\Psi|^2 dx$ (Beiser, 1990:175)

$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx$

$\langle r \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* r \Psi dr$ ……………………………………………………………(2.45)

Fungsi gelombang partikel menggambarkan bahwa kedudukan elektron atau partikel dalam suatu atom bisa memiliki berbagai keadaan, maka nilai rata-rata sutu fungsi dapat ditentukan dengan nilai ekspetasi.

2.7 Atom Deuterium

Menurut *Krane* (1992:419) "Deuterium adalah isotope stabil dengan kelimpahan alami di bumi kira-kira satu dari 6.500 atom Hidrogen. Maka dari itu Deuterium merupakan 0,015% dari semua hidrogen yang terbentuk secara alami…" Deuterium biasa disebut juga hidrogen berat, dimana deuterium ini merupakan salah satu dari tiga bentuk isotop hidrogen yakni terdiri dari protium, deuterium, dan tritium. Deuteron merupakan inti dari deuterium, dimana pada deuteron hanya mengandung satu proton dan satu neutron. Dalam penelitian *Lavenda et al* (tanpa tahun) menyatakan Deutron terbentuk dari reaksi fusi antara inti dua atom hidrogen (penggabungan inti dua atom hidrogen). Reaksi fusi atom hidrogen ini melepaskan energi yang sangat besar melebihi ledakan dinamit sebanyak ± 50.000.000 unit atau setara dengan ± 500 bom atom (inti uranium).

Deuterium dimanfaatkan untuk bahan pembat air berat. Dalam reaksi fisi uranium, air berat digunakan sebagai moderator neutron. Fungsi moderator adalah untuk memperlambat neutron dengan cara menyerap energi dan menumbuk neutron tanpa kecenderungan menyerap partikel (Beiser, 1990:496). Dalam pembangkit listrik tenaga nuklir dengan reaktor tipe CANDU menggunakan uranium sebagai bahan bakar dan air berat sebagai moderator neutron. Dalam reaktor tipe CANDU, air berat dimasukkan dalam pipa kalandria yang terbuat dari bahan yang tidak menyerap neutron.

Untuk mendapat air berat (D_2O) dilakukan permisahan dari air biasa (H_2O). Proses pengayaan air berat dapat dilakukan dengan metode destilasi, elektrolisa, pemisahan isotope dengan laser dan pertukaran isotope. Prinsip metode destilasi didasarkan pada perbedaan titik didih dari komponen senyawa penyusun air alam. Pemisahan dengan metode elektrolisis dilakukan berdasarkan perbedaan mobilitas ion H^+ dan ion D^+ dalam sel elektrolisis. Sedagkan pemisahan dengan pertukaran isotope dibedakan menjadi monotermal dan bitermal. Proses monotermal hanya melibatkan satu senyawa, sedangkan proses bitermal lebih komplek dengan menggunakan H_2S (Sukarsono *et al*, 2008).

Sifat fisik senyawa-senyawa deuterium dapat berbeda dari senyawa-senyawa hidrogen yang analog dengannya, sebagai contoh D_2O lebih kental daripada H_2O. secara kimia, kelakuan deuterium sama dengan hidrogen biasa, tetapi ada perbedaan dalam energi ikat. Ikatan yang melibatkan deuterium dan tritium sedikit lebih kuat daripada ikatan serupa pada hidrogen ringan. Dengan spektroskopi inframerah dapat membedakan senyawa yang bersifat deuterium, karena perbedaan frekuensi serapan inframerah dapat terlihat dalam vibrasi sebuah ikatan kimia yang mengandung deuterium (Britannica.2014.Heavyhydrogen.ww.britannica.com).

Menurut *Bogdan Povh* et al (2008:234) *"The deuteron is simplest of all the nucleon bound states, the atomic nuclei. It is therefor particularly suitable for studying the nucleon-nucleon interaction. Experiments have yielded the following data about the deuteron ground state :*

Binding energy	$B = 2.225$ *MeV*
Spin and parity	$J^p = +1$
Isospin	$I = 0$
Magnetic moment	$\mu = 0{,}857\ \mu N$ *..."*

The proton-neutron system is mostly made up of an l=0 state. If it ere a pure l=0 state then the wave function would be sperycally symmetric, the quadrupole moment would vanish and the magnetic dipole moment would be just the sum of the proton and neutronmagnetic moment (supposing that the nucleonic magnetic moments are not altered by the binding interaction). This prediction for the deuteron magnetic moment.

$$\mu_p + \mu_n = 2.792\ \mu N - 1.913\ \mu N = 0.879\ \mu N$$

Differs slightly from the measured value of 0.857 μN. Both the magnetic dipole moment and the electric quadrupole moment can be explained by the admixture of a state with the same J^p *quantum numbers".*

Berdasarkan cuplikan diatas bahwa deuteron merupakan inti atom yang sederhana serta dodok untuk mempelajari interaksi antar inti. Data eksperimen menunjukkann bahwa deuteron memiliki Energi ikat= 2,225 MeV, Spin= +1, Isospin l=0, Momen magnetik= 0,857 µN, dan momen quadrupol elektron= 0.282 e.fm^2 , system proton-neutron terbentuk pada keadaan l=0. Pada kedaan l=0 fungsi yang terbentuk adalah simetri bola, momen quadrupole akan hilang, momen dipol magnetik akan menjadi jumlah dari momen magnetik proton dan neutron (dengan anggapan bahwa momen magnet inti tidak diubah oleh interaksi ikatan). Hasil prediksi momen magnetik deuteron 0,8979 µN sangat berbeda dari nilai yang sebenarnya yaitu 0,857 µN. momen dipole magnetik dan momen quadrupol elektrik dapat diperoleh dengan pencampuran dari kondisi dengan bilangan kuantum J^p yang sama. Karena deuteron memiliki spin +1 (triplet), sehingga merupakan sebuah partikel boson.

Berdasarkan kesamaan massa dan sifat nuklir dari proton dan neutron, keduanya dapat dipandang sebagai dua jenis objek dari sebuah nukleon yang memiliki hubungan simetri. Hubungan simetri antara proton dan neutron dikenal sebagai isospin dan dinotasikan sebagai I. proton dan neutronmembentuk isospin dublet, dengan neutron sebagai spin turun dan proton sebagai spin naik.

2.9 Scilab

Scilab adalah salah satu perangkat lunak yang lisensinya bebas biaya. Perangkat lunak ini hampir menyerupai Matlab, yang digunakan sebagai sebuah program interaktif untuk komputasi numerik dan visualisasi data. Program tersebut pada awalnya dikembangkan untuk menyelesaikan permasalahan sistem aljabar linear simultan secara numerik, yang kemudian digunakan untuk menyelesaikan masalah numerik lain yang lebih kompleks. Dasar dari penyelesaian sistem persamaan aljabar linier simultan adalah matriks. Oleh karena itu, untuk perangkat lunak ini, pengembangan dari variabelnya dilakukan melalui pendekatan matriks. Scilab dikembangkan oleh INRIA dan ENPC dari Perancis, dan selanjutnya dikelola oleh konsorsium Scilab, untuk mengunduhnya pada http://www.scilab.org (Sasongko.2010:1).

BAB 3. METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini merupakan penelitian non eksperimen. Penelitian ini akan dilaksanakan pada semester 7 bulan Desember sampai bulan Februari 2019 di Laboratorium Fisika Lanjut program Studi Pendidikan Fisika, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Jember.

3.2 Definisi Operasional

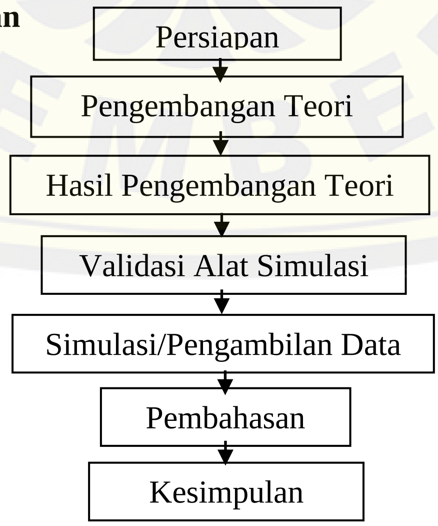
3.2.1 Pendekatan Persamaan Schrodinger

Pendekatan persamaan Schrodinger adalah suatu pendekatan yang berupa persamaan matematis orde dua, dimana persamaan ini menunjukkan hubungan antara massa suatu partikel, energy potensial, energi kinetik serta fungsi dari gelombang partikel yang berada dalam koordinat tiga dimensi.

3.2.2 Nilai Ekspetasi

Jika sutau fungsi gelombang telah didapatkan maka semua informasi tentang partikel tersebut yang diizinkan oleh prinsip ketidakpastian, dapat diperoleh. Informasi yang dapat diperoleh yakni berupa nilai ekspetasi dari kuantitas yang hendak diukur, misalnya dimana partikel ini “sering” berada

3.3 Langkah Penelitian



Gambar 3.1 Bagan langkah – langkah penelitian

Berdasarkan gambar 3.1 dapat dijelaskan sebagai berikut :

a. Persiapan

Pada tahap ini mempersiapkan bahan – bahan yang akan dijadikan informasi yaitu dengan cara mengumpulkan buku – buku tentang fisika matematika, fisika modern, fisika atom,dan fisika kuantum, jurnal, serta berbagai sumber berskala nasional maupun internasional yang relevan atau terkait dengan fungsi gelombang serta nilai ekspetasi atom Deuterium dengan menggunakan pendekatan persamaan Schrodinger.

b. Pengembangan Teori

Pada tahap ini peneliti mengembangkan teori yang sudah ada di berbagai buku literatur berkenaan dengan aplikasi persamaan Schrodinger pada atom berelektron tunggal dengan melibatkan teori gangguan. Teori yang dikembangkan merupakan pengkajian fungsi gelombang serta nilai ekspetasi untuk atom Deuterium. Langkah pertama yang akan dilakukan adalah menentukan fungsi gelombang Deuterium untuk n ≤ 3. Kemudian menentukan fungsi gelombang pada masing – masing orbital 1s, 2s, $2p_z$, $2p_y$, $2p_x$, 3s, $3p_z$, $3p_y$, $3p_x$, $3d_{zz}$, $3d_{zx}$, $3d_{yz}$, $3d_{x^2-y^2}$, $3d_{xy}$. Selanjutnya menentukan nilai ekspetasi elektron.

c. Hasil Pengembangan Teori

Dari pengembangan teori yang telah dilakukan, didapatkan persamaan matematis fungsi gelombang serta nilai ekspetasi elekton.

d. Validasi

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

e. Simulasi

Tahap simulasi merupakan tahap perhitungan numerik untuk menentukan fungsi gelombang serta nilai ekspetasi elektron Deuterium dengan menggunakan software Scilab 6.0.0. Output yang dihasilkan berupa grafik simulasi fungsi gelombang Deuterium hingga n ≤ 3, grafik rapat probabilitasnya, nilai rapat probabilitas menggunakan metode *simpson's rule*, serta nilai energi terkoreksi akibat pengaruh berbagai intensitas medan listrik.

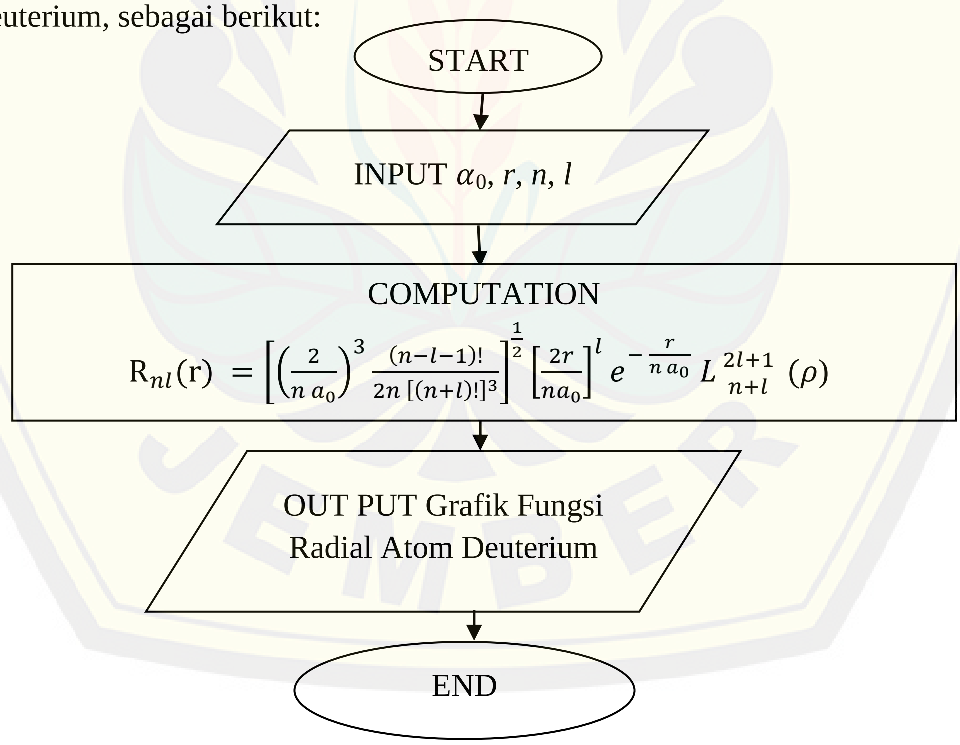
f. Pembahasan

Hasil dari simulasi dan perhitungan akan dibahas lebih mendalam secara fisis disertai dengan diskusi teori terkait fungsi gelombang, nilai probabilitas fungsi gelombang radial serta nilai ekspetasi atom Deuterium.

g. Kesimpulan

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

Pada penelitian ini menggunakan simulasi numerik dengan bantuan aplikasi Scilab 6.0.0, secara umum flowchart untuk menentukan grafik fungsi radial atom Deuterium, sebagai berikut:



Gambar 3.2 Flowchart Grafik Fungsi Radial Atom Deuterium

3.4 Teori Hasil Pengembangan

Teori yang digunakan dalam penelitian ini adalah :

a. Fungsi Gelombang

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

1. Fungsi Gelombang Radial

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

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

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

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

3. Fungsi Gelombang Azimuth

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

4. Fungsi Gelombang Gabungan

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

5. Nilai Ekspetasi Elektron

$\langle r\rangle=\int_0^{a_0}\Psi^*\,r\,\Psi dr$

$\langle r^2\rangle=\int_0^{a_0}\Psi^*\,r^2\,\Psi dr$

3.5 Data Simulasi

Berikut merupakan tabel data simulasi yang digunakan untuk menentukan fungsi gelombang $\Psi_{(r,\theta,\varphi)}$:

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

<table>
<tr><th colspan="3">Bilangan Kuantum</th><th rowspan="2">Orbital</th><th rowspan="2">R_{nl} (r)</th><th rowspan="2">$Y_{l\,m_l}(\theta,\varphi)$</th><th rowspan="2">$\Psi_{n\,l\,m_l}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)\,Y_{l\,m_l}(\theta,\varphi)$</th></tr>
<tr><th>N</th><th>l</th><th>M</th></tr>
<tr><td>1</td><td>0</td><td>0</td><td>s</td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="4">2</td><td>0</td><td>0</td><td>s</td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="3">1</td><td>0</td><td>p_z</td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="2">± 1</td><td>p_x</td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>p_y</td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="9">3</td><td>0</td><td>0</td><td>s</td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="3">1</td><td>0</td><td>p_z</td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="2">± 1</td><td>p_x</td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>p_y</td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="5">2</td><td>0</td><td>d_{zz}</td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="2">± 1</td><td>d_{zx}</td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>d_{yz}</td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="2">± 2</td><td>$d_{x^2-y^2}$</td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>d_{xy}</td><td></td><td></td><td></td></tr>
</table>

Tabel 3.2 Contoh data nilai ekspetasi elektron dari atom deuterium

<table>
<tr><th colspan="2">Bilangan Kuantum</th><th rowspan="2">Fungsi Gelombang</th><th colspan="2">Nilai</th></tr>
<tr><th>n</th><th>l</th><th>$\langle r \rangle$</th><th>$\langle r^2 \rangle$</th></tr>
<tr><td></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="4"></td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="3"></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td></td><td></td><td></td></tr>
</table>

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. Fungsi gelombang atom hidrogen tersebut kemudian disimulasikan dengan menggunakan software Scilab 6.0.

3.7.1 Validasai Fungsi Gelombang Radial Atom Hidrogen

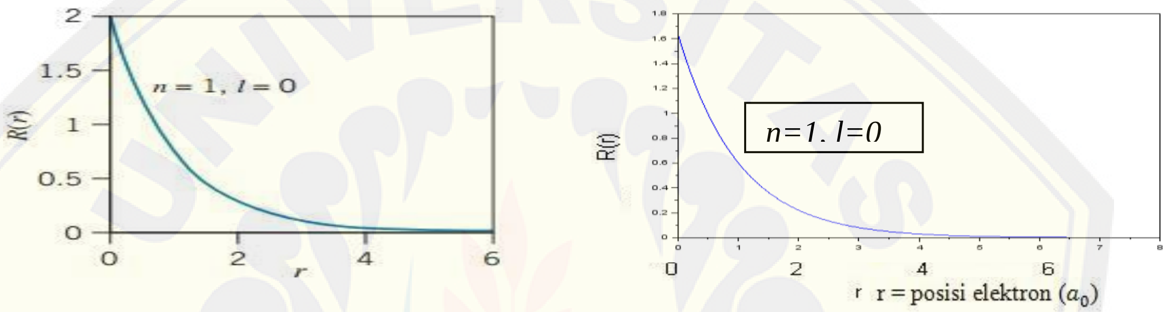
Berikut ini merupakan tabel fungsi gelombang Atom Hidrogen $n \leq 3$.

Tabel 3.5 Fungsi gelombang $\Psi_{(R,\Theta,\Phi)}$ atom Hidrogen

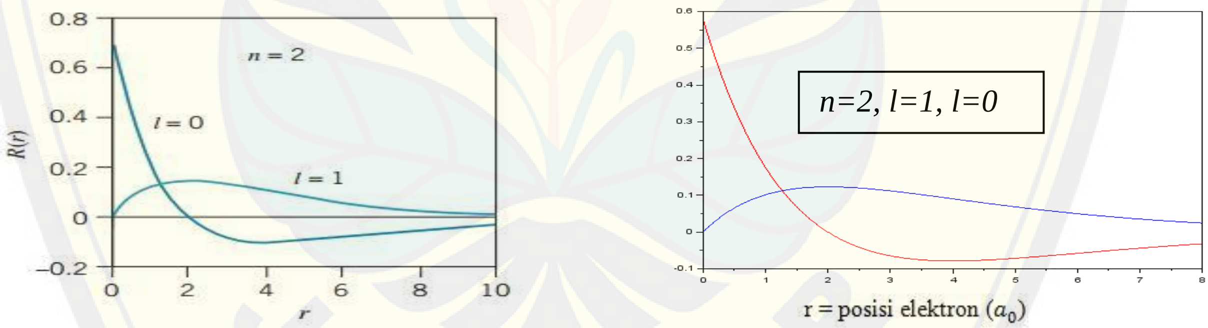
n	l	m	$R_{nl}(r)$	$\Theta_{lm}(\theta)$	$\Phi_m(\varphi)$
1	0	0	$2a_0^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	0	0	$\frac{a_0^{-\frac{3}{2}}}{2}\left(2-\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
	1	0	$\frac{2a_0^{-\frac{3}{2}}}{\sqrt{3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
		± 1	$\frac{2a_0^{-\frac{3}{2}}}{\sqrt{3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\mp\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\varphi}$
3	0	0	$2(3a_0)^{-\frac{3}{2}}\left(2-\frac{2r}{3a_0}+\frac{2r^2}{27a_0^2}\right) e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
	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	$\frac{4}{27\sqrt{10}}(3a_0)^{-\frac{3}{2}}\frac{r^2}{{a_0}^2}e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\sqrt{\frac{5}{8}}(3cos^2\theta - 1)$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
		±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	$\frac{4}{27\sqrt{10}}(3a_0)^{-\frac{3}{2}}\frac{r^2}{{a_0}^2}e^{-\frac{r}{3a_0}}$	$\frac{\sqrt{15}}{4}sin^2\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm 2i\varphi}$

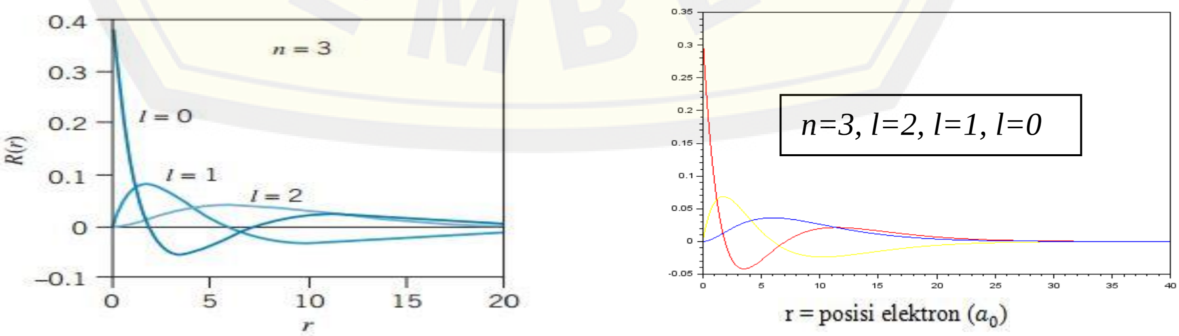
Berikut ini merupakan perbandingan grafik fungsi radial untuk atom hidrogen dari hasil Scilab 6.0.0 terhadap buku teks (Krane, 1992:206) :



Gambar 3.2 Perbandingan grafik fungsi gelombang radial atom Hidrogen *n=1* dari buku teks (kiri) dan simulasi Scilab 6.0.0 (kanan)

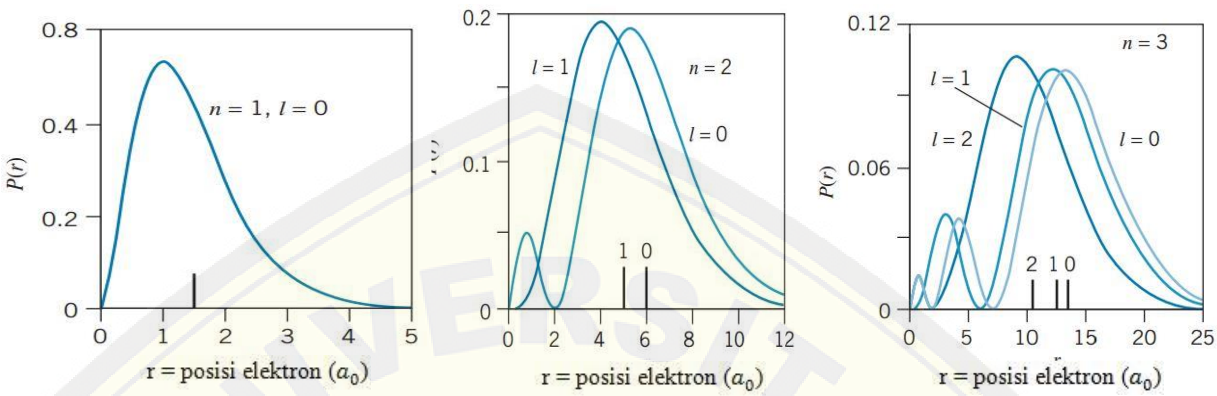


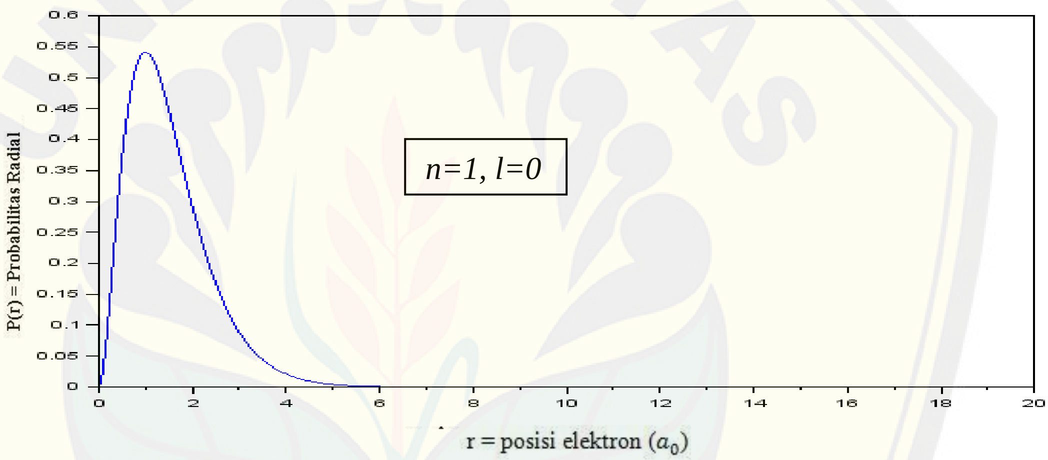
Gambar 3.3 Perbandingan grafik fungsi gelombang radial atom Hidrogen *n=2* dari buku teks (kiri) dan simulasi Scilab 6.0.0 (kanan)



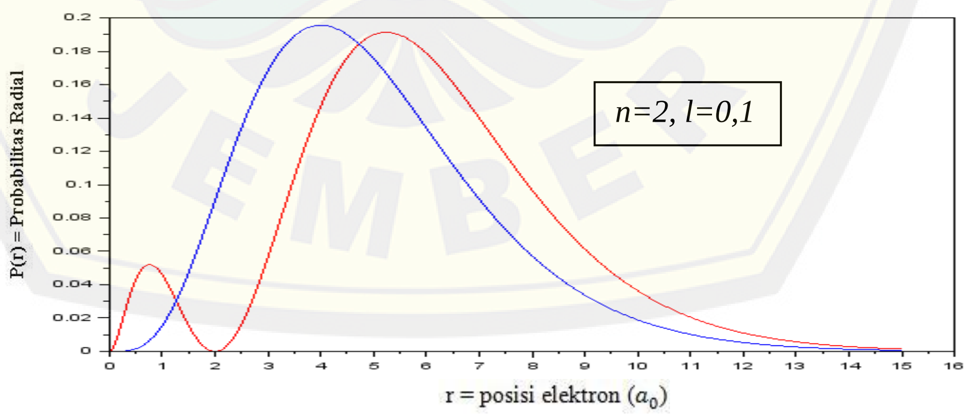
Gambar 3.4 Perbandingan grafik fungsi gelombang radial atom Hidrogen *n=3* dari buku teks (kiri) dan simulasi Scilab 6.0.0 (kanan)

Berikut ini merupakan perbandingan grafik rapat probabilitas radial untuk atom hidrogen dari hasil Scilab 6.0.0 terhadap buku teks (Krane, 1992:206) :

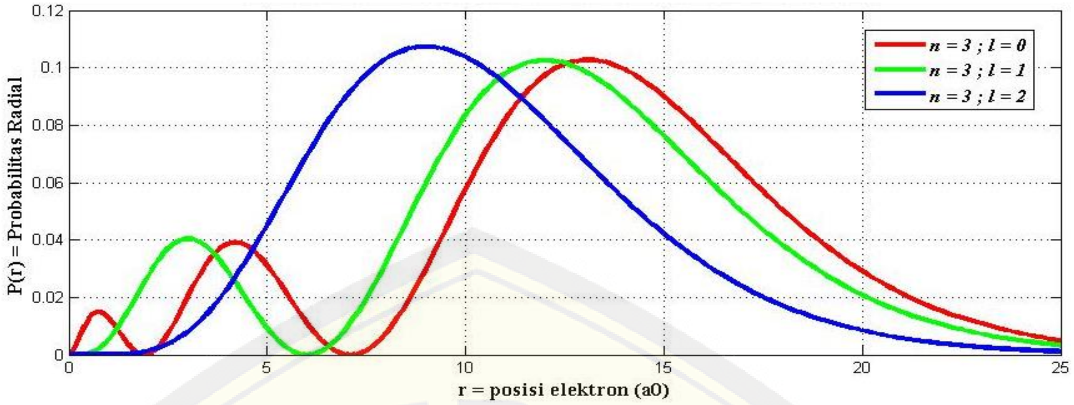




Gambar 3.5 Grafik rapat probabilitas Radial atom Hidrogen *n=1, l=0*



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*

BAB 5. PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan data hasil penelitian dapat disimpulkan :

1. Fungsi gelombang atom Deuterium merupakan kuantitas kompleks yang terdiri dari fungsi gelombang azimuth yang bergantung pada bilangan kuantum magnetik, fungsi gelombang polar yang bergantung pada bilangan kuantum azimuth dan bilangan kuantum magnetik dan juga fungsi gelombang radial yang bergantung pada bilangan kuantum utama dan bilangan kuantum azimuth. Pada grafik radial dapat disimpulkan bahwa bilangan kuantum n akan terbentuk n buah grafik fungsi radial yang merupakan kombinasi dari fungsi eksponensial dan fungsi polinomial berorde n-1. Dengan hubungan simpangan berbanding terbalik dengan eksponensial posisi elektron dan berbanding lurus dengan fungsi polinomial.
2. Berdasarkan tabel 4.4 menunjukka bahwa nilai ekspetasi akan semakin kecil apabila bilangan kuantum semakin besar hal ini menunjukkan bahwa apabila nilai kuantum utama *n* semakin besar maka elektron akan semakin jarang ditemui.

5.2 Saran

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

a. Dalam pembelajaran fisika di SMA terkhusus pada mata pelajaran fisika modern sebaiknya siswa juga diarahkan untuk mengetahui serta menjelaskan aplikasi dan manfaat dari materi yang dipelajari dalam kehidupan sehari-hari. Sebagai contoh, prinsip *solar cell*, penggunaan reaktor nuklir sebagai energi terbarukan,,gejala fotolistrik, aplikasi Gelombang elektromagnetik, dan lain lain.

b. Dalam pembelajaran fisika di Universitas terutama pada mata kuliah Mekanika kuantum sebaiknya mahasiswa diajarkan untuk membuat grafik simulasi komputasibukan hanya diajarkan mengenai pembuktian secara matematis sebagai contoh grafik fungsi gelombang, rapat probabilitas, dan lain lain. Hal ini dimaksudkan agar mahasiswa dapat menjelaskan makna dari persamaan – persamaan matematika yang telah dibuat dan juga mampu menerapkannya dalam kehidupan nyata guna menunjang perkembangan IPTEKS.

c. Sebagai variasi agar efek spin tidak diabaikan
d. Sebagai pengembangan teori dapat dikaji perilaku partikel yang memiliki elektron banyak (lebih dari satu elektron) dengan berbagai metode atau pendekatan mekanika kuantum sebagai contoh metode variasi *Ritz*, atau WKB (metode kuantisasi energi semiklasik).

DAFTAR PUSTAKA

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.

Ganesan, L.R., & Balaji, M. 2008. *Schrödinger Equation for the Hydrogen AtomA Simplified Treatment*. Journal of Chemistry. 5(3):659-662.

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

Holmlid, L. 2013. *Direct observation of particles with energy >10 MeV/u from laser-induced processes with energy gain in ultra-danse deuterium*. Laser and Particle Beams. 10(31):715-722.

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

Lavenda, S., Fuad, Y., & Abadi. Tanpa tahun. "*Persamaan Schrodinger pada Dua Atom Hidrogen dengan Gaya Tarik Mutual.*" Tidak diterbitkan. Surabaya: Matematika, Universitas Negeri Surabaya.

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

Purwanto, Agus. 2006. *Fisika Kuantum*. Yogyakarta: Gava Media

Sasongko, SB. 2010. *Metode Numerik dengan Scilab*. Yogyakarta: C.V Andi offset

Sukarsono, Dahroni, I., Herhady, D. 2008. Studi Status Pengayaan D2O. Jurnal Ganendra. 11(1):23-35.

Supriyadi, Arkundato, A., Rofi'i, I. 2006. "*Solusi Numerik Persamaan Scrhodinger Atom Hidrogen dengan Metode Elemen Hingga (Finite Element Methods)".* Tidak diterbitkan. Makalah. Jember: FMIPA Universitas Jember.

Yusron, M., Firdausi, K.S., Sumariyah. 2007. *Review Probabilitas Menemukan Elektron dengan Fungsi Gelombang Simetri dan Antisimetri pada Molekul* H_2^+ . Jurnal Fisika. 10(1):7-12.

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 :

$$\vec{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_1 q_2}{r^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

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

$$\vec{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{q_1 q_2}{r^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r}$$

dari persamaan diatas diperoleh hubungan :

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

Energi kinetik elektron :

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

Energi potensial elektron :

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

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

Energi total elektron dapat dituliskan :

$$E = K + U$$

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

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 :

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

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 atom Deuterium dengan Z = 1, diperoleh jari – jari Bohr :

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

dengan μ merupakan massa tereduksi yang diperoleh sebagai berikut :

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

$$\mu = \frac{(1{,}6726x10^{-27}+1{,}6749x10^{-27})(9{,}1095\,x\,10^{-31})}{(1{,}6726x10^{-27}+1{,}6749x10^{-27})+(9{,}1095\,x\,10^{-31})} = 3{,}34748x10^{-31}\text{kg}$$

Diperoleh jari-jari untuk atom deuterium

$$a_0 = 0{,}530625\,nm = 0{,}53062510^{-10} \text{ m}$$

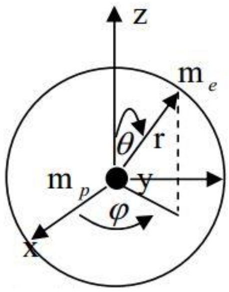
Untuk menentukan energi total elektron subtitusikan persamaan (14) ke dalam persamaan (8) sehingga diperoleh persamaan baru bagi energi sebagai berikut :

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

Persamaan energi diatas digunakan untuk menentukan energi tanpa gangguan atom Deuterium 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 $\beta = (l)\ (l+1)$

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 :

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

$$\Theta(w)=c_0+c_1w+c_2w^2+c_3w^3+\cdots$$

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 :

$$\Theta(w)=(w\pm1)^s\sum_{n=0}^{\sim}c_n(w\pm1)^n$$

$$\Theta(w)=(w\pm1)^s[c_0+c_1(w\pm1)+c_2(w\pm1)^2+c_3(w\pm1)^3+\cdots]$$

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

$$\beta\Theta_{(w)} \quad =\lambda(c_0+c_1w+c_2w^2+c_3w^3+\cdots c_nw^n)$$

$$-2w\frac{d\Theta}{dw}=-2w(c_1+2c_2w+3c_3w^2+4c_4w^3+\cdots nc_nw^{n-1})$$

$$(1-w^2)\frac{d^2\Theta}{dw^2}=(1-w^2)(2c_2+6c_3w+12c_4w^2+20c_5w^3+\cdots n(n-1)c_nw^{n-2})$$

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

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, $\quad c_4 = \frac{-\beta+6}{12}\,c_2$

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

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 :

$$\Theta(w) = (c_0 + c_2w^2 + c_4w^4 + \cdots\ c_{2n}w^{2n}) +$$
$$(c_1w + c_3w^3 + c_5w^5 \ldots\ c_{2n-1}w^{2n-1})$$

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, …*

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.*

Solusi Persamaan Legendre melalui fungsi pembangkit Rodrigues

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 :

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

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 :

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

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

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

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 :

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

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

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

diperoleh :

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

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

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

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

Suku ketiga

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

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 :

Turunan pertama

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

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

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

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

Turunan kedua

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

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 :

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

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

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

batas integrasi dapat diubah menjadi :

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

dapat dituliskan kembali :

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

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

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

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

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

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

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

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 :

$$\left(\Theta_{lm(\theta)}, \Theta_{l'm'(\theta)}\right) = N_{lm} * N_{l'm'} \int_{0}^{\pi} P_{l\,(\cos\theta)}^{m} \; P_{l'\,(\cos\theta)}^{m'} \sin\theta \; d\theta = 1$$

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

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

Solusi umum persamaan Polar dapat dituliskan :

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

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

LAMPIRAN G. PENJABARAN PERSAMAAN AZIMUTH

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

a. Jika digunakan konstanta m^2

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

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

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

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

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 $-\,m^2$

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

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

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

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

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 ATOM DEUTERIUM (^{2}H)

a. Fungsi Gelombang Azimuth (($\Phi_m(\emptyset)$) Atom Deuterium

1. Untuk ***m = 0***

$$\Phi_0(\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\, e^{-i0\varphi} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}$$

2. Untuk ***m*** **=** $\pm$***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*** **=** $\pm$***2***

$$\Phi_{\pm 2}(\varphi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\, e^{-i\pm 2\varphi} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\, e^{\pm 2i\varphi}$$

b. Fungsi Gelombang Polar ($\Theta_{lm}(\theta)$) Atom Deuterium

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

Dengan $\mathrm{P}_l^m \cos(\theta) = \frac{1}{l!\,2^l}(1-\cos^2\theta)^{\frac{m}{2}} \frac{d^{(l+m)}}{d\cos^{(l+m)}\theta}(\cos^2\theta - 1)^l$

1. Untuk ***l = 0*** dan ***m = 0***

- $\mathrm{P}_0^0 \cos(\theta) = \frac{1}{0!\,2^0}(1-\cos^2\theta)^{\frac{0}{2}} \frac{d^{(0+0)}}{d\cos^{(0+0)}\theta}(\cos^2\theta - 1)^0 = 1$

Sehingga diperoleh fungsi polar sebagai berikut:

$$\Theta_{00}(\theta) = \sqrt{\frac{(20+1)(0-0)!}{2(0+0)!}}\, \mathrm{P}_0^0 \cos(\theta)$$

$$\Theta_{00}(\theta) = \sqrt{\frac{(1)(0)!}{2(0)!}}\, 1$$

$$\Theta_{00}(\theta) = \sqrt{\frac{1}{2}}$$

2. Untuk ***l = 1*** dan ***m = 0***

- $\mathrm{P}_1^0 \cos(\theta) = \frac{1}{1!\,2^1}(1-\cos^2\theta)^{\frac{0}{2}} \frac{d^{(0+0)}}{d\cos^{(0+0)}\theta}(\cos^2\theta - 1)^1$

$$\mathrm{P}_1^0 \cos(\theta) = \frac{1}{2} \frac{d^{(1+0)}}{d\cos^{(1+0)}\theta}(\cos^2\theta - 1)^1$$

$$\mathrm{P}_1^0 \cos(\theta) = \frac{1}{2}\; 2\cos\theta$$

$$\mathrm{P}_1^0 \, cos(\theta) = cos\,\theta$$

Sehingga diperoleh fungsi polar sebagai berikut:

$$\Theta_{10}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.1+1)(1-0)!}{2(1+0)!}}\,\mathrm{P}_1^0 \, cos(\theta)$$

$$\Theta_{10}(\theta) = \sqrt{\frac{(3)(1)!}{2(1)!}}\,\mathrm{P}_1^0 \, cos(\theta)$$

$$\Theta_{10}(\theta) = \sqrt{\frac{3}{2}}\,cos(\theta)$$

3. Untuk ***l* = *1*** dan ***m* = *1***

- $$\mathrm{P}_1^1 \, cos(\theta) = \frac{1}{1!\,2^1}(1-\ cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\frac{d^{(1+1)}}{dcos^{(1+1)}\theta}(cos^2\theta-1)^1$$

$$\mathrm{P}_1^1 \, cos(\theta) = \frac{1}{2}(1-\ cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\frac{d^{(2)}}{dcos^{(2)}\theta}(cos^2\theta-1)$$

$$\mathrm{P}_1^1 \, cos(\theta) = \frac{1}{2}(1-\ cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\frac{d}{dcos\theta}\frac{d}{dcos\theta}(cos^2\theta-1)$$

$$\mathrm{P}_1^1 \, cos(\theta) = \frac{1}{2}\sqrt{1-\ cos^2\theta}\ \frac{d}{dcos\theta}(2cos\theta)$$

$$\mathrm{P}_1^1 \, cos(\theta) = \frac{1}{2}\sqrt{1-\ cos^2\theta}\ \ (2)$$

$$\mathrm{P}_1^1 \, cos(\theta) = \sqrt{1-\ cos^2\theta}$$

$$\mathrm{P}_1^1 \, cos(\theta) = \sqrt{\ sin^2\theta}$$

$$\mathrm{P}_1^1 \, cos(\theta) = \sin\theta$$

Sehingga diperoleh fungsi polar sebagai berikut:

$$\Theta_{11}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.1+1)(1-1)!}{2(1+1)!}}\,\mathrm{P}_1^1 \, cos(\theta)$$

$$\Theta_{11}(\theta) = \sqrt{\frac{(3)(0)!}{2(2)!}}\,\sin\theta$$

$$\Theta_{11}(\theta) = \sqrt{\frac{(3)(1)}{2(2.1)}}\,\sin\theta$$

$$\Theta_{11}(\theta) = \sqrt{\frac{3}{4}}\,\sin\theta$$

$$\Theta_{11}(\theta) = \frac{1}{2}\sqrt{3}\,\sin\theta$$

4. Untuk ***l* = *1*** dan ***m* = *-1***

- $P_1^{-1}\,cos(\theta) = \frac{1}{1!\,2^1}(1 - cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}\frac{d^{(1-1)}}{dcos^{(1-1)}\theta}(cos^2\theta - 1)$

  $P_1^{-1}\,cos(\theta) = \frac{1}{2}(1 - cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}.1.\,(cos^2\theta - 1)$

  $P_1^{-1}\,cos(\theta) = -\frac{1}{2}\sqrt{1 - cos^2\theta}$

  $P_1^{-1}\,cos(\theta) = -\frac{1}{2}\sqrt{sin^2\theta}$

  $P_1^{-1}\,cos(\theta) = -\frac{1}{2}\sin\theta$

Sehingga diperoleh fungsi polar sebagai berikut:

$$\Theta_{1-1}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.1+1)(1-(-1))!}{2(1+(-1))!}}\,P_1^{-1}\,cos(\theta)$$

$$\Theta_{1-1}(\theta) = \sqrt{\frac{(3)(2)!}{2(0)!}} - \frac{1}{2}\sin\theta$$

$$\Theta_{1-1}(\theta) = \sqrt{\frac{(3)(2.1)}{2}} - \frac{1}{2}\sin\theta$$

$$\Theta_{1-1}(\theta) = \sqrt{\frac{6}{2}} - \frac{1}{2}\sin\theta$$

$$\Theta_{1-1}(\theta) = -\frac{1}{2}\sqrt{3}\sin\theta$$

5. Untuk ***l* = 2** dan ***m* = 0**

- $P_2^{0}\,cos(\theta) = \frac{1}{2!\,2^2}(1 - cos^2\theta)^{\frac{0}{2}}\frac{d^{(2+0)}}{dcos^{(2+0)}\theta}(cos^2\theta - 1)^2$

  $P_2^{0}\,cos(\theta) = \frac{1}{2.1.4}(1 - cos^2\theta)^{0}\frac{d^{(2)}}{dcos^{(2)}\theta}(cos^2\theta - 1)^2$

  $P_2^{0}\,cos(\theta) = \frac{1}{8}\,1\,\frac{d}{dcos\,\theta}\frac{d}{dcos\,\theta}(cos^2\theta - 1)^2$

  $P_2^{0}\,cos(\theta) = \frac{1}{8}\frac{d}{dcos\,\theta}\;2(2cos\theta)(cos^2\theta - 1)$

  $P_2^{0}\,cos(\theta) = \frac{1}{8}\frac{d}{dcos\,\theta}\;(4\,cos\theta)(cos^2\theta - 1)$

  $P_2^{0}\,cos(\theta) = \frac{1}{2}\frac{d}{dcos\,\theta}\;(\,cos\theta(cos^2\theta - 1))$

  $P_2^{0}\,cos(\theta) = \frac{1}{2}\frac{d}{dcos\,\theta}\;(cos^2\theta - cos\theta)$

  $P_2^{0}\,cos(\theta) = \frac{1}{2}\;(3cos^2\theta - 1)$

Sehingga diperoleh fungsi polar sebagai berikut:

$$\Theta_{20}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.2+1)(2-0)!}{2(2+0)!}}\,P_2^{0}\,cos(\theta)$$

$$\Theta_{20}(\theta) = \sqrt{\frac{(5)(2.1)}{2(2.1)}}\frac{1}{2}\ (3cos^2\theta - 1)$$

$$\Theta_{20}(\theta) = \sqrt{\frac{10}{4}}\frac{1}{2}\ (3cos^2\theta - 1)$$

$$\Theta_{20}(\theta) = \sqrt{\frac{10}{4.4}}\ \ (3cos^2\theta - 1)$$

$$\Theta_{20}(\theta) = \sqrt{\frac{10}{16}}\ \ (3cos^2\theta - 1)$$

$$\Theta_{20}(\theta) = \frac{\sqrt{10}}{4}(3cos^2\theta - 1)$$

6. Untuk ***l* = 2** dan ***m* = -1**

- $P_2^{-1}\ cos(\theta) = \frac{1}{2!\,2^2}(1 -\ cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}\frac{d^{(2-1)}}{dcos^{(2-1)}\theta}(cos^2\theta - 1)^2$

$$P_2^{-1}\ cos(\theta) = \frac{1}{8}(1 -\ cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}\frac{d}{dcos\ \theta}(cos^2\theta - 1)^2$$

$$P_2^{-1}\ cos(\theta) = \frac{1}{8}(1 -\ cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}2.2\cos\theta\ \ (cos^2\theta - 1)$$

$$P_2^{-1}\ cos(\theta) = \frac{1}{2}(1 -\ cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}\cos\theta\ \ (cos^2\theta - 1)$$

$$P_2^{-1}\ cos(\theta) = -\frac{1}{2}(1 -\ cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}\cos\theta\ \ (1 - cos^2\theta)$$

$$P_2^{-1}\ cos(\theta) = -\frac{1}{2}sin\theta\ cos\theta$$

Sehingga diperoleh fungsi polar sebagai berikut:

$$\Theta_{2-1}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.2+1)(2-(-1))!}{2(2+(-1))!}}\,P_2^{-1}\ cos(\theta)$$

$$\Theta_{2-1}(\theta) = \sqrt{\frac{(5)(3)!}{2(1)!}}\ -\frac{1}{2}sin\theta\ cos\theta$$

$$\Theta_{2-1}(\theta) = \sqrt{\frac{(5)(3.2.1)}{2(1)}}\ -\frac{1}{2}sin\theta\ cos\theta$$

$$\Theta_{2-1}(\theta) = -\sqrt{\frac{30}{2}}\frac{1}{2}sin\theta\ cos\theta$$

$$\Theta_{2-1}(\theta) = -\frac{\sqrt{15}}{2}sin\theta\ cos\theta$$

7. Untuk ***l* = 2** dan ***m* = 1**

- $P_2^{1}\ cos(\theta) = \frac{1}{2!\,2^2}(1 -\ cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\frac{d^{(2+1)}}{dcos^{(2+1)}\theta}(cos^2\theta - 1)^2$

$$P_2^{1}\ cos(\theta) = \frac{1}{8}(1 -\ cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\frac{d^3}{dcos^3\theta}(cos^2\theta - 1)^2$$

$$\mathrm{P}_{2}^{1}\, cos(\theta) = \frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}} \frac{d^2}{dcos^2\theta} 4\cos\theta\,(cos^2\theta - 1)$$

$$\mathrm{P}_{2}^{1}\, cos(\theta) = \frac{1}{2}(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}} \frac{d^2}{dcos^2\theta} \cos\theta\,(cos^2\theta - 1)$$

$$\mathrm{P}_{2}^{1}\, cos(\theta) = \frac{1}{2}(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}} \frac{d^2}{dcos^2\theta} \cos\theta\,(cos^2\theta - 1)$$

$$\mathrm{P}_{2}^{1}\, cos(\theta) = \frac{1}{2}(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}} \frac{d^2}{dcos^2\theta} (cos^3\theta - \cos\theta)$$

$$\mathrm{P}_{2}^{1}\, cos(\theta) = \frac{1}{2}(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}} \frac{d}{dcos\theta} (3cos^2\theta - 1)$$

$$\mathrm{P}_{2}^{1}\, cos(\theta) = \frac{1}{2}(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}} (6\, cos\theta)$$

$$\mathrm{P}_{2}^{1}\, cos(\theta) = 3\,(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}} (\, cos\theta)$$

$$\mathrm{P}_{2}^{1}\, cos(\theta) = 3\,(\sin\theta\cos\theta)$$

Sehingga diperoleh fungsi polar sebagai berikut:

$$\Theta_{21}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.2+1)(2-1)!}{2(2+1)!}}\, \mathrm{P}_{2}^{1}\, cos(\theta)$$

$$\Theta_{21}(\theta) = \sqrt{\frac{5}{2(3.2.1)!}}\, 3\,(\sin\theta\cos\theta)$$

$$\Theta_{21}(\theta) = \sqrt{\frac{5.9}{12}}\, (\sin\theta\cos\theta)$$

$$\Theta_{21}(\theta) = \sqrt{\frac{45}{12}}\, (\sin\theta\cos\theta)$$

$$\Theta_{21}(\theta) = \sqrt{\frac{15}{4}}\, (\sin\theta\cos\theta)$$

$$\Theta_{21}(\theta) = \frac{\sqrt{15}}{2}\, (\sin\theta\cos\theta)$$

8. Untuk $\boldsymbol{l = 2}$ dan $\boldsymbol{m = -2}$

- $$\mathrm{P}_{2}^{-2}\, cos(\theta) = \frac{1}{2!\,2^2}(1 - cos^2\theta)^{-\frac{2}{2}} \frac{d^{(2-2)}}{dcos^{(2-2)}\theta} (cos^2\theta - 1)^2$$

$$\mathrm{P}_{2}^{-2}\, cos(\theta) = \frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)^{-1}\, 1\,(cos^2\theta - 1)^2$$

$$\mathrm{P}_{2}^{-2}\, cos(\theta) = \frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)^{-1}\ (1)^2$$

$$\mathrm{P}_{2}^{-2}\, cos(\theta) = -\frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)$$

$$\mathrm{P}_{2}^{-2}\, cos(\theta) = -\frac{1}{8}(\, sin^2\theta)$$

Sehingga diperoleh fungsi polar sebagai berikut:

$$\Theta_{2-2}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.2+1)(2+2)!}{2(2-2)!}}\, \mathrm{P}_{2}^{-2}\, cos(\theta)$$

$$\Theta_{2-2}(\theta) = \sqrt{\frac{(5)(4.3.2.1)}{2}} - \frac{1}{8}\,(sin^2\theta)$$

$$\Theta_{2-2}(\theta) = \sqrt{\frac{(5)(4.3.2.1)}{2}} - \frac{1}{8}\,(sin^2\theta)$$

$$\Theta_{2-2}(\theta) = -\sqrt{\frac{120}{128}}\,(sin^2\theta)$$

$$\Theta_{2-2}(\theta) = -\sqrt{\frac{15}{16}}\,(sin^2\theta)$$

$$\Theta_{2-2}(\theta) = -\frac{\sqrt{15}}{4}\,(sin^2\theta)$$

9. Untuk ***l* = 2** dan ***m* = 2**

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

$$\mathrm{P}_{2}^{2}\, cos(\theta) = \frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)\frac{d^4}{dcos^4\theta}(cos^2\theta - 1)^2$$

$$\mathrm{P}_{2}^{2}\, cos(\theta) = \frac{1}{2}(1 - cos^2\theta)\frac{d^3}{dcos^3\theta}(\cos\theta\,(cos^2\theta - 1))$$

$$\mathrm{P}_{2}^{2}\, cos(\theta) = \frac{1}{2}(1 - cos^2\theta)\frac{d^2}{dcos^2\theta}(3cos^2\theta)$$

$$\mathrm{P}_{2}^{2}\, cos(\theta) = \frac{1}{2}(1 - cos^2\theta)\frac{d}{dcos\,\theta}(6\cos\theta)$$

$$\mathrm{P}_{2}^{2}\, cos(\theta) = \frac{1}{2}(1 - cos^2\theta)\ (6)$$

$$\mathrm{P}_{2}^{2}\, cos(\theta) = 3(sin^2\theta)$$

Sehingga diperoleh fungsi polar sebagai berikut:

$$\Theta_{22}(\theta) = \sqrt{\frac{(2.2+1)(2-2)!}{2(2+2)!}}\, \mathrm{P}_{2}^{2}\, cos(\theta)$$

$$\Theta_{22}(\theta) = \sqrt{\frac{5}{2(4.3.2.1)}}\, 3(sin^2\theta)$$

$$\Theta_{22}(\theta) = \sqrt{\frac{5}{48}}\, 3(sin^2\theta)$$

$$\Theta_{22}(\theta) = \sqrt{\frac{5.9}{48}}\,(sin^2\theta)$$

$$\Theta_{22}(\theta) = \sqrt{\frac{45}{48}}\,(sin^2\theta)$$

$$\Theta_{22}(\theta) = \sqrt{\frac{15}{16}}\,(\,sin^2\theta)$$

$$\Theta_{22}(\theta) = \frac{\sqrt{15}}{4}\,(\,sin^2\theta)$$

c. Fungsi Gelombang Radial R_{nl} (r) Atom Deuterium

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

dengan Rumus Rodrigues :

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

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

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

dengan Rumus Rodrigues :

$$L_1^1\,(\rho) = (-1)^1 \frac{(1+0)!}{(1-0-1)!} e^{\frac{2r}{a_0}} \frac{d^{1+0}}{d\left(\frac{2r}{a_0}\right)^{1+0}} \left(e^{-\frac{2r}{a_0}}.\left(\frac{2r}{a_0}\right)^{1-0-1}\right)$$

$$L_1^1\,(\rho) = \frac{-1\,(1)}{(1)} e^{\frac{2r}{a_0}} \frac{d}{d\left(\frac{2r}{a_0}\right)^1} \left(e^{-\frac{2r}{a_0}}\right)$$

$$L_1^1\,(\rho) = -e^{\frac{2r}{a_0}} - \left(e^{-\frac{2r}{a_0}}\right)$$

$$L_1^1\,(\rho) = \left(e^{\frac{2r}{a_0}-\frac{2r}{a_0}}\right)$$

$$L_1^1\,(\rho) = 1$$

Maka diperoleh rumusan fungsi gelombang radial Atom Deuterium untuk *n=1 l=0* :

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

$$R_{10} = \left[\left(\frac{8}{{a_0}^3}\right)\frac{1}{2}\right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}}$$

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

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

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

dengan Rumus Rodrigues :

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

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

Dengan menggunakan turuan parsial dua kali, diperoleh :

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

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

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

dapat dituliskan kembali menjadi :

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

Maka diperoleh rumusan fungsi gelombang radial Atom Deuterum untuk *n=2 l=0:*

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

$$R_{20} = \left[\left(\frac{1}{a_{0^3}}\right)\frac{1}{32}\right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{r}{2a_0}}\, 2\left[2 - \left(\frac{r}{a_0}\right)\right]$$

$$R_{20} = (a_{0^3})^{-3/2}\sqrt{\frac{1}{32}}\, e^{-\frac{r}{2a_0}}\, 2\left[2 - \left(\frac{r}{a_0}\right)\right]$$

$$R_{20} = (a_{0^3})^{-3/2}\sqrt{\frac{4}{32}}\, e^{-\frac{r}{2a_0}}\left[2 - \left(\frac{r}{a_0}\right)\right]$$

$$R_{20} = (a_{0^3})^{-3/2}\frac{1}{2\sqrt{2}}\, e^{-\frac{r}{2a_0}}\left[2 - \left(\frac{r}{a_0}\right)\right]$$

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

$$R_{21}(r) = \left[\left(\frac{2}{2a_0}\right)^3 \frac{(2-1-1)!}{2.2\,[(2+1)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{2r}{2a_0}\right]^1 e^{-\frac{r}{2a_0}} L_3^3\,(\rho)$$

Dengan Rumus Rodrigues :

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

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

Maka diperoleh fungsi gelombang radial Atom Deuterium untuk *n=2 l=1* :

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

$$R_{21} = \left[\left(\frac{1}{a_0}\right)^3\frac{36}{864}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\frac{r}{a_0}\right]^1 e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

$$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}}\left[\frac{r}{a_0}\right]a_{0^{-3/2}}\ e^{-\frac{r}{2a_0}}$$

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

$$R_{30}\,(r) = \left[\left(\frac{2}{3a_0}\right)^3\frac{(3-0-1)!}{2.3\,[(3+0)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\frac{2r}{3a_0}\right]^0 e^{-\frac{r}{3a_0}}\,L_3^1\ (\rho)$$

Dengan Rumus Rodrigues :

$$L_3^1\,(\rho) = (-1)^{2.0\,+\,1}\,\frac{(3+0)!}{(3-0-1)!}\,e^{\frac{2r}{3a_0}}\,\frac{d^{3+0}}{d\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^{3+0}}\left(e^{-\frac{2r}{3a_0}}.\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^{3-0-1}\right)$$

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

Dengan menggunakan turuan parsial tiga kali, diperoleh :

Misalkan, $x = e^{-\frac{2r}{3a_0}}.\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2$

$$x' = \frac{d}{d\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^1}\left(e^{-\frac{2r}{3a_0}}.\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2\right) = -\,e^{-\frac{2r}{3a_0}}\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2 + 2\left(\frac{2r}{3a_0}\right)e^{-\frac{2r}{3a_0}}$$

$$x'' = \frac{d^2}{d\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2}\left(e^{-\frac{2r}{3a_0}}.\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2\right) = \left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2 e^{-\frac{2r}{3a_0}} - 4\left(\frac{2r}{3a_0}\right)e^{-\frac{2r}{3a_0}} + 2e^{-\frac{2r}{3a_0}}$$

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

dapat dituliskan kembali menjadi :

$$L_3^1\ (\rho) = (-1)(3)\,e^{\frac{2r}{3a_0}}\left[6\left(\frac{2r}{3a_0}\right)e^{-\frac{2r}{3a_0}} - 6\,e^{-\frac{2r}{3a_0}} - \left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2 e^{-\frac{2r}{3a_0}}\right]$$

L_3^1 (ρ) = - 3 $\left[6\left(\frac{2r}{3a_0}\right) - 6 - \left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2\right]$

Maka diperoleh fungsi gelombang radial Atom Deuterium untuk *n=3 l=0* :

$$R_{30} = \left[\left(\frac{2}{3a_0}\right)^3 \frac{(3-0-1)!}{2.3\ [(3+0)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{2r}{3a_0}\right]^0 e^{-\frac{r}{3a_0}}(-3) \left[6\left(\frac{2r}{3a_0}\right) - 6 - \left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2\right]$$

$$R_{30} = \left[\left(\frac{8}{27a_{0^3}}\right)\frac{2}{1298}\right]^{\frac{1}{2}} 1\ e^{-\frac{r}{3a_0}}(-3) \left[6\left(\frac{2r}{3a_0}\right) - 6 - \left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2\right]$$

$$R_{30} = \left[\left(\frac{8}{27a_{0^3}}\right)\frac{2}{6^4}\right]^{\frac{1}{2}} 1\ e^{-\frac{r}{3a_0}}(-3) \left[6\left(\frac{2r}{3a_0}\right) - 6 - \left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2\right]$$

$$R_{30} = \frac{2}{81\sqrt{3}} a_{0^{-\frac{3}{2}}}\left(27 - \frac{18r}{a_0} + \frac{2r^2}{a0^2}\right)e^{-\frac{r}{3a_0}}$$

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

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

Dengan Rumus Rodrigues :

$$L_{3+1}^{2.1+1}\ (\rho) = (-1)^{2.1+1}\ \frac{(3+1)!}{(3-1-1)!} e^{\frac{2r}{3a_0}} \frac{d^{3+1}}{d\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^{3+1}}\left(e^{-\frac{2r}{3a_0}}.\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^{3-1-1}\right)$$

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

Dengan menggunakan turuan parsial empat kali, diperoleh :

Misalkan, $x = e^{-\frac{2r}{3a_0}}.\left(\frac{2r}{3a_0}\right)$

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

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

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

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

$$y'''' = \frac{d^4}{d\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^4}\left(e^{-\frac{2r}{3a_0}}.\left(\frac{2r}{3a_0}\right)\right) = e^{-\frac{2r}{3a_0}}.\left(\frac{2r}{3a_0}\right) - 4.e^{-\frac{2r}{3a_0}}$$

dapat dituliskan kembali menjadi :

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

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

Maka diperoleh fungsi gelombang radial Atom Deuterium untuk *n=3 l=1* :

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

$$R_{31} = \sqrt{\frac{8}{27(a_0)^3}\frac{1}{6(24)^3}}\left[\frac{2r}{3a_0}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}(24)\left[4 - \left(\frac{2r}{3a_0}\right)\right]$$

$$R_{31} = \frac{1}{(9a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{\sqrt{6}} e^{-\frac{r}{3a_0}}\left[4\left(\frac{2r}{3a_0}\right) - \left(\frac{4r^2}{9a_0{}^2}\right)\right]$$

$$R_{31} = \frac{4}{(81a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{\sqrt{6}} e^{-\frac{r}{3a_0}}\left[\left(6 - \frac{r}{a_0}\right)\frac{r}{a_0}\right]$$

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

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

Dengan Rumus Rodrigues :

$$L_5^5\ (\rho) = (-1)^{2.2+1}\frac{(3+2)!}{(3-2-1)!} e^{\frac{2r}{3a_0}}\frac{d^{3+2}}{d\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^{3+2}}\left(e^{-\frac{2r}{3a_0}}.\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^{3-2-1}\right)$$

$$L_5^5\ (\rho) = (-1)\frac{120}{1} e^{\frac{2r}{3a_0}}\frac{d^5}{d\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^5}\left(e^{-\frac{2r}{3a_0}}.\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^0\right)$$

$$L_5^5\ (\rho) = (-120)\, e^{\frac{2r}{3a_0}}\left(-e^{-\frac{2r}{3a_0}}\right) = 120$$

Maka diperoleh fungsi gelombang radial Atom Deuterium untuk *n=3 l=2* :

$$R_{32} = \left[\left(\frac{2}{3a_0}\right)^3 \frac{(3-2-1)!}{2.3\,[(3+2)!]^3}\right]^{\frac{1}{2}}\left[\frac{2r}{3a_0}\right]^2 e^{-\frac{r}{3a_0}}(120)$$

$$R_{32} = \frac{4}{81(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{1}{\sqrt{30}}\frac{r^2}{a_0{}^2} e^{-\frac{r}{3a_0}}$$

LAMPIRAN J. 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,

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

Pembuktian Fungsi Harmonik Bola Atom berelektron tunggal hingga n ≤ 3 :

1. Untuk ***l = 0 m = 0***

$$Y_{00}(\theta,\varphi) = (-1)^{(0)}\sqrt{\frac{2.0+1}{4\pi}\frac{(0-0)!}{(0+0)!}}P_0^0(\cos\theta)\, e^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}P_0^0(\cos\theta)$$

$$\mathrm{P}_0^0 \cos(\theta) = \frac{1}{0!\,2^0}(1-\cos^2\theta)^{\frac{0}{2}}\frac{d^{(0+0)}}{d\cos^{(0+0)}\theta}(\cos^2\theta-1)^0 = 1$$

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,

$$\mathrm{P}_2^1 \cos{(\theta)} = \frac{1}{2!\,2^2}(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\frac{d^{(2+1)}}{dcos^{(2+1)}\theta}(cos^2\theta - 1)^2$$

$$\mathrm{P}_2^1 \cos{(\theta)} = \frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\frac{d}{dcos\theta}\frac{d^2}{dcos^2\theta}(cos^2\theta - 1)^2$$

$$\mathrm{P}_2^1 \cos{(\theta)} = \frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\frac{d}{dcos\theta}4(3cos^2\theta - 1)$$

$$\mathrm{P}_2^1 \cos{(\theta)} = \frac{1}{2}(1 - cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\,6\cos\theta = 3\,sin\theta\,cos\theta$$

Dengan demikian, fungsi 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,

$$\mathrm{P}_2^{-1} \cos{(\theta)} = \frac{1}{2!\,2^2}(1 - cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}\frac{d^{(2-1)}}{dcos^{(2-1)}\theta}(cos^2\theta - 1)^2$$

$$\mathrm{P}_2^{-1} \cos{(\theta)} = \frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}\frac{d}{dcos\theta}(cos^2\theta - 1)^2$$

$$\mathrm{P}_2^{-1} \cos{(\theta)} = \frac{1}{8}(1 - cos^2\theta)^{-\frac{1}{2}}\,4\,cos\theta\,(cos^2\theta - 1)$$

$$\mathrm{P}_2^{-1} \cos{(\theta)} = -\frac{1}{2}\,sin\theta\,cos\theta$$

Dengan demikian, fungsi 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,

$$\mathrm{P}_2^2\cos(\theta) = \frac{1}{2!\,2^2}(1-\cos^2\theta)^{\frac{2}{2}}\frac{d^{(2+2)}}{d\cos^{(2+2)}\theta}(\cos^2\theta-1)^2$$

$$\mathrm{P}_2^2\cos(\theta) = \frac{1}{8}(1-\cos^2\theta)^1\frac{d}{d\cos\theta}\frac{d^3}{d\cos^3\theta}(\cos^2\theta-1)^2$$

$$\mathrm{P}_2^2\cos(\theta) = \frac{1}{8}(1-\cos^2\theta)^1\frac{d}{d\cos\theta}\,24\cos\theta$$

$$\mathrm{P}_2^2\cos(\theta) = 3\,(1-\cos^2\theta)^1 = 3\sin^2\theta$$

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,

$$\mathrm{P}_2^{-2}\cos(\theta) = \frac{1}{2!\,2^2}(1-\cos^2\theta)^{\frac{-2}{2}}\frac{d^{(2-2)}}{d\cos^{(2-2)}\theta}(\cos^2\theta-1)^2$$

$$\mathrm{P}_2^{-2}\cos(\theta) = \frac{1}{8}(1-\cos^2\theta)^{-1}(\cos^2\theta-1)^2 = \frac{1}{8}(\cos^2\theta-1)^1$$

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) $\sin\theta\,e^{\pm i\varphi}Y_{lm_l} = \mp\frac{1}{\sqrt{2l+1}}\left[\sqrt{\frac{(l\mp m_l)(l\mp m_l-1)}{2l-1}}\,Y_{l-1,\ m_l\pm1} - \sqrt{\frac{(l\mp m_l+2)(l\mp m_l+1)}{2l+3}}\,Y_{l+1,\ m_l\pm1}\right]$

- ***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)

$$\Psi_{1s} = \Psi_{100} = 2\left[\frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}\, e^{-\frac{r}{a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right]$$

$$\Psi_{1s} = \Psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}\, e^{-\frac{r}{a_0}}$$

2. Untuk keadaan eksitasi pertama orbital 2s

$$\Psi_{2s} = \Psi_{200} = \left[\frac{1}{2\sqrt{2}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\left[e^{-\frac{r}{2a_0}}\right]\left[2 - \left(\frac{r}{a_0}\right)\right]\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right]$$

$$\Psi_{2s} = \Psi_{200} = \frac{1}{(4a_0)^{\frac{3}{2}}}\left[e^{-\frac{r}{2a_0}}\right]\left[2 - \left(\frac{r}{a_0}\right)\right]\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

3. Untuk keadaan eksitasi pertama orbital 2p$_z$

$$\Psi_{2pz} = \Psi_{210} = \left[\frac{1}{\sqrt{6}}\frac{1}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}\right]\left[\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$

$$\Psi_{2pz} = \Psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos\theta$$

4. Untuk keadaan eksitasi pertama orbital 2p$_y$

$$\Psi_{2py} = (\mathrm{R}_{21}) \frac{i}{\sqrt{2}} (\mathrm{Y}_{11} - \mathrm{Y}_{1-1})$$

$$\Psi_{2py} = \left[\frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}\right] \frac{i}{\sqrt{2}}$$

$$\left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) - \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{2py} = \left[\frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}\right] \frac{i}{\sqrt{2}}$$

$$\left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

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,

$$\Psi_{2py} = \left[\frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] \left[\frac{i}{2}\right] \left[-e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right] \boldsymbol{x} \frac{\boldsymbol{i}}{\boldsymbol{i}}$$

$$\Psi_{2py} = \left[\frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] \left[\frac{1}{2i}\right] \left[e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}\right]$$

$$\Psi_{2py} = \left[\frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] [\sin\varphi]$$

$$\Psi_{2py} = \frac{1}{4\sqrt{6\pi}} \frac{\sqrt{3}}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin\theta \sin\varphi$$

5. Untuk keadaan eksitasi pertama orbital 2p$_x$

$$\Psi_{2px} = (\mathrm{R}_{21}) \frac{-1}{\sqrt{2}} (\mathrm{Y}_{11} + \mathrm{Y}_{1-1})$$

$$\Psi_{2px} = \left[\frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}\right] \frac{-1}{\sqrt{2}} \left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) + \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

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

$$\left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) - \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

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

$$\left[\left(\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

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,

$$\Psi_{2px} = \left[\frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin \theta\right] \left[\frac{1}{2}\right] \left[e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right]$$

$$\Psi_{2px} = \left[\frac{1}{2\sqrt{6}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin \theta\right] [\cos \varphi]$$

$$\Psi_{2px} = \frac{\sqrt{3}}{4\sqrt{6\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin\theta \cos\varphi$$

6. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital 3s

$$\Psi_{3s} = \Psi_{300} = \left[\frac{2}{(81a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{\sqrt{3}} \left[e^{-\frac{r}{3a_0}}\right] \left[\frac{2r^2}{a_0{}^2} - \left(\frac{18r}{a_0}\right) + 27\right]\right] \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\right] \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right]$$

$$\Psi_{3s} = \Psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \frac{1}{a_0{}^{\frac{3}{2}}} \left[\frac{2r^2}{a_0{}^2} - \left(\frac{18r}{a_0}\right) + 27\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}$$

7. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital 3p$_z$

$$\Psi_{3pz} = \Psi_{310} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{4}{81\sqrt{6}} \left[\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}\right] \left[\sqrt{\frac{3}{2}} \cos \theta\right] \left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$

$$\Psi_{3pz} = \Psi_{310} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{2}}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left[\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}} \cos \theta$$

8. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital 3p$_y$

$$\Psi_{3py} = (\mathrm{R}_{31}) \frac{i}{\sqrt{2}} (\mathrm{Y}_{11} - \mathrm{Y}_{1-1})$$

$$\Psi_{3py} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{4}{81\sqrt{6}} \left[\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}\right] \frac{i}{\sqrt{2}} \left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) - \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3py} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{4}{81\sqrt{6}} \left[\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}\right] \frac{i}{\sqrt{2}}$$

$$\left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \sin \theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

dengan menggunakan aturan eksponensial dimana :

$cos\ \theta = \frac{1}{2}\left(e^{i\theta} + e^{-i\theta}\right)$ $sin\ \theta = \frac{1}{2i}\left(e^{i\theta} - e^{-i\theta}\right)$

dengan identitas imajiner *i.i* = - *1* diperoleh,

$$\Psi_{3py} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{4}{81\sqrt{6}} \left[\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] \left[\frac{i}{2}\right] \left[-e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right] \boldsymbol{x} \frac{\boldsymbol{i}}{\boldsymbol{i}}$$

$$\Psi_{3py} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{4}{81\sqrt{6}} \left[\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] \left[\frac{1}{2i}\right] \left[e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}\right]$$

$$\Psi_{3py} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{4}{81\sqrt{6}} \left[\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] [\sin\varphi]$$

$$\Psi_{3py} = \frac{2}{81\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left[\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}\ sin\theta\ sin\varphi$$

9. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital $3p_x$

$$\Psi_{3px} = (\mathrm{R}_{31}) \frac{-1}{\sqrt{2}} (\mathrm{Y}_{11} + \mathrm{Y}_{1-1})$$

$$\Psi_{3px} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{4}{81\sqrt{6}} \left[\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}\right] \frac{-1}{\sqrt{2}} \left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) + \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3px} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{4}{81\sqrt{6}} \left[\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}\right] \frac{-1}{\sqrt{2}}$$

$$\left[\left(-\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) - \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3px} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{4}{81\sqrt{6}} \left[\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}\right] \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\varphi}\right) + \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\varphi}\right)\right]$$

dengan menggunakan aturan eksponensial dimana :

$cos\ \theta = \frac{1}{2}\left(e^{i\theta} + e^{-i\theta}\right)$ $sin\ \theta = \frac{1}{2i}\left(e^{i\theta} - e^{-i\theta}\right)$

$$\Psi_{3px} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{4}{81\sqrt{6}} \left[\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] \left[\frac{1}{2}\right] \left[e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}\right]$$

$$\Psi_{3px} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{4}{81\sqrt{6}} \left[\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}\right] \left[\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sin\theta\right] [\cos\varphi]$$

$$\Psi_{3px} = \frac{2}{81\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \left[\frac{6r}{a_0} - \frac{r^2}{a_0{}^2}\right] e^{-\frac{r}{3a_0}}\ sin\theta\ cos\varphi$$

10. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital $3d_{zz}$

$$\Psi_{3\mathbf{d}_{zz}} = \Psi_{320} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} \frac{4}{81\sqrt{30}} \frac{r^2}{a_0{}^2}\ e^{-\frac{r}{3a_0}}\right] \left[\sqrt{\frac{5}{8}}\ (3cos^2\theta - 1)\right] \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right]$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{zz}}} = \Psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}}\,\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{a_0{}^2}\;e^{-\frac{r}{3a_0}}\,(3cos^2\theta - 1)$$

11. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital 3d$_{zx}$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{zx}}} = (\mathrm{R}_{32})\frac{-1}{\sqrt{2}}\,(Y_{21} + Y_{2-1})$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{zx}}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{81\sqrt{30}}\,\frac{r^2}{a_0{}^2}\;e^{-\frac{r}{3a_0}}\right]\frac{-1}{\sqrt{2}}\left[\left(-\sqrt{\frac{15}{4}}\;\sin\theta\cos\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\;e^{i\varphi}\right)\right.$$

$$\left.+\left(-\sqrt{\frac{15}{4}}\;\sin\theta\cos\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\;e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{zx}}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{81\sqrt{30}}\,\frac{r^2}{a_0{}^2}\;e^{-\frac{r}{3a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right]\left[\sqrt{\frac{15}{4}}\;\sin\theta\cos\theta\right]\left[\frac{1}{2}\;(e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})\right]$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{zx}}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{81\sqrt{30}}\,\frac{r^2}{a_0{}^2}\;e^{-\frac{r}{3a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right]\left[\sqrt{\frac{15}{4}}\;\sin\theta\cos\theta\right]\cos\varphi$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{zx}}} = \frac{2\sqrt{3}}{81\sqrt{6\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-\frac{r}{3a_0}}\;\sin\theta\cos\theta\cos\varphi$$

12. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital 3d$_{yz}$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{yz}}} = (\mathrm{R}_{32})\frac{i}{\sqrt{2}}\,(Y_{21} - Y_{2-1})$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{yz}}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{81\sqrt{30}}\,\frac{r^2}{a_0{}^2}\;e^{-\frac{r}{3a_0}}\right]\frac{i}{\sqrt{2}}\left[\left(-\sqrt{\frac{15}{4}}\;\sin\theta\cos\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\;e^{i\varphi}\right)\right.$$

$$\left.-\left(-\sqrt{\frac{15}{4}}\;\sin\theta\cos\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\;e^{-i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{yz}}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{81\sqrt{30}}\,\frac{r^2}{a_0{}^2}\;e^{-\frac{r}{3a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right]\left[\sqrt{\frac{15}{4}}\;\sin\theta\cos\theta\right]\left[\frac{i}{2}\;(-e^{i\varphi} + e^{-i\varphi})\right]\boldsymbol{x}\,\frac{\boldsymbol{i}}{\boldsymbol{i}}$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{yz}}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{81\sqrt{30}}\,\frac{r^2}{a_0{}^2}\;e^{-\frac{r}{3a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right]\left[\sqrt{\frac{15}{4}}\;\sin\theta\cos\theta\right]\left[\frac{1}{2i}\;(e^{i\varphi} - e^{-i\varphi})\right]$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{yz}}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\,\frac{4}{81\sqrt{30}}\,\frac{r^2}{a_0{}^2}\;e^{-\frac{r}{3a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\right]\left[\sqrt{\frac{15}{4}}\;\sin\theta\cos\theta\right]\sin\varphi$$

$$\Psi_{3\mathbf{d_{yz}}} = \frac{2\sqrt{3}}{81\sqrt{6\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{a_0{}^2}e^{-\frac{r}{3a_0}}\;\sin\theta\cos\theta\sin\varphi$$

13. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital $3d_{x^2-y^2}$

$$\Psi_{3d_{x^2-y^2}} = (R_{32})\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{22} + Y_{2-2})$$

$$\Psi_{3d_{x^2-y^2}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{4}{81\sqrt{30}}\frac{r^2}{a_0{}^2}\, e^{-\frac{r}{3a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\right]$$

$$\left[\left(\frac{\sqrt{15}}{4}\,sin^2\,\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{2i\varphi}\right)\left(\frac{\sqrt{15}}{4}\,sin^2\,\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{-2i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3d_{x^2-y^2}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{4}{81\sqrt{30}}\frac{r^2}{a_0{}^2}\, e^{-\frac{r}{3a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{15}}{4}\,sin^2\,\theta\right]\left[\frac{1}{2}\left(e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}\right)\right]$$

dengan, $\frac{1}{2}\left(e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi}\right) = cos^2\varphi$ sehingga diperoleh :

$$\Psi_{3d_{x^2-y^2}} = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{a_0{}^2}\,e^{-\frac{r}{3a_0}}\,sin^2\,\theta\,cos^2\varphi$$

14. Untuk keadaan eksitasi kedua orbital $3d_{xy}$

$$\Psi_{3d_{xy}} = (R_{32})\frac{-i}{\sqrt{2}}(Y_{22} - Y_{2-2})$$

$$\Psi_{3d_{xy}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{4}{81\sqrt{30}}\frac{r^2}{a_0{}^2}\, e^{-\frac{r}{3a_0}}\right]\left[\frac{-i}{\sqrt{2}}\right]$$

$$\left[\left(\frac{\sqrt{15}}{4}\,sin^2\,\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{2i\varphi}\right)\left(\frac{\sqrt{15}}{4}\,sin^2\,\theta\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{-2i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3d_{xy}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{4}{81\sqrt{30}}\frac{r^2}{a_0{}^2}\, e^{-\frac{r}{3a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{15}}{4}\,sin^2\,\theta\right]\left[\frac{-i}{2}\left(e^{2i\varphi} - e^{-2i\varphi}\right)\right] x\,\frac{i}{i}$$

$$\Psi_{3d_{xy}} = \left[\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{4}{81\sqrt{30}}\frac{r^2}{a_0{}^2}\, e^{-\frac{r}{3a_0}}\right]\left[\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{\sqrt{15}}{4}\,sin^2\,\theta\right]\left[\frac{1}{2i}\left(e^{2i\varphi} - e^{-2i\varphi}\right)\right]$$

$$\Psi_{3d_{xy}} = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}}\frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}}\frac{r^2}{a_0{}^2}\,e^{-\frac{r}{3a_0}}\,sin^2\,\theta\,sin^2\varphi$$

LAMPIRAN K. NILAI EKSPETASI POSISI ELEKTRON DALAM ATOM DEUTERIUM

1. Ekspetasi Posisi Elektron dalam Atom Deuterium untuk ***n=1***

- $\langle r \rangle = \int_0^{a_0} \Psi^* \, r \, \Psi dr$

  $\langle r \rangle = \int_0^{a_0} \frac{2e^{\frac{r}{a_0}}}{a_0{}^{3/2}} \, r \, \frac{2e^{-\frac{r}{a_0}}}{a_0{}^{3/2}} dr$

  $\langle r \rangle = \frac{4}{a_0{}^3} \int_0^{a_0} r \, e^{\frac{2r}{a_0}} \, e^{-\frac{2r}{a_0}} dr$

  $\langle r \rangle = \frac{4}{a_0{}^3} \left(\frac{r^2}{2}\right]_0^{a_0}$

  $\langle r \rangle = \frac{2}{a_0}$

- $\langle r^2 \rangle = \int_0^{a_0} \Psi^* \, r^2 \, \Psi dr$

  $\langle r^2 \rangle = \int_0^{a_0} \frac{2e^{\frac{r}{a_0}}}{a_0{}^{3/2}} \, r^2 \, \frac{2e^{-\frac{r}{a_0}}}{a_0{}^{3/2}} dr$

  $\langle r^2 \rangle = \frac{4}{a_0{}^3} \int_0^{a_0} r^2 \, e^{\frac{2r}{a_0}} \, e^{-\frac{2r}{a_0}} dr$

  $\langle r^2 \rangle = \frac{4}{a_0{}^3} \left(\frac{r^3}{3}\right]_0^{a_0}$

  $\langle r^2 \rangle = \frac{4}{3}$

2. Ekspetasi Posisi Elektron dalam Atom Deuterium ***n=2, l=0***

- $\langle r \rangle = \int_0^{a_0} \Psi^* \, r \, \Psi dr$

  $\langle r \rangle = \int_0^{a_0} \frac{\left(2-\frac{r}{a_0}\right)}{2\sqrt{2}a_0{}^{3/2}} e^{\frac{r}{2a_0}} \, r \, \frac{\left(2-\frac{r}{a_0}\right)}{2\sqrt{2}a_0{}^{3/2}} e^{-\frac{r}{2a_0}} \, dr$

  $\langle r \rangle = \frac{1}{8a_0{}^3} \int_0^{a_0} r \left(4 - 4\frac{r}{a_0} + \frac{r^2}{a_0{}^2}\right) e^{\frac{r}{2a_0}} \, e^{-\frac{r}{2a_0}} dr$

  $\langle r \rangle = \frac{1}{8a_0{}^3} \left(2r^2 - \frac{4r^3}{3a_0} + \frac{r^4}{4a_0{}^2}\right]_0^{a_0}$

  $\langle r \rangle = \frac{1}{8a_0{}^3} \left\{2a_0{}^2 - \frac{4a_0{}^2}{3} + \frac{a_0{}^2}{4}\right\}$

  $\langle r \rangle = \frac{11}{96a_0}$

- $\langle r^2 \rangle = \int_0^{a_0} \Psi^* \, r^2 \, \Psi dr$

  $\langle r^2 \rangle = \int_0^{a_0} \frac{\left(2-\frac{r}{a_0}\right)}{2\sqrt{2}a_0{}^{3/2}} e^{\frac{r}{2a_0}} \, r^2 \, \frac{\left(2-\frac{r}{a_0}\right)}{2\sqrt{2}a_0{}^{3/2}} e^{-\frac{r}{2a_0}} \, dr$

$$\langle r^2\rangle = \frac{1}{8{a_0}^3}\int_0^{a_0} r^2\left(4-4\frac{r}{a_0}+\frac{r^2}{{a_0}^2}\right)e^{\frac{r}{2a_0}}\,e^{-\frac{r}{2a_0}}dr$$

$$\langle r^2\rangle = \frac{1}{8{a_0}^3}\left(\frac{4}{3}r^3-\frac{4r^4}{4a_0}+\frac{r^5}{5{a_0}^2}\right]_0^{a_0}$$

$$\langle r^2\rangle = \frac{1}{8{a_0}^3}\left\{\frac{4}{3}{a_0}^3-{a_0}^3+\frac{{a_0}^3}{5}\right\}$$

$$\langle r^2\rangle = \frac{1}{15}$$

3. Ekspetasi Posisi Elektron dalam Atom Deuterium ***n=2, l=1***

- $\langle r\rangle = \int_0^{a_0}\Psi^*\,r\,\Psi dr$

$$\langle r\rangle = \int_0^{a_0}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{6}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{\frac{r}{2a_0}}\,r\,\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{6}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}dr$$

$$\langle r\rangle = \frac{1}{24{a_0}^5}\int_0^{a_0} r^3\,e^{\frac{r}{2a_0}}\,e^{-\frac{r}{2a_0}}\,dr$$

$$\langle r\rangle = \frac{1}{24{a_0}^5}\left(\frac{1}{4}r^4\right]_0^{a_0}$$

$$\langle r\rangle = \frac{1}{24{a_0}^5}\left\{\frac{{a_0}^4}{4}\right\}$$

$$\langle r\rangle = \frac{1}{15a_0}$$

- $\langle r^2\rangle = \int_0^{a_0}\Psi^*\,r^2\,\Psi dr$

$$\langle r^2\rangle = \int_0^{a_0}\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{6}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{\frac{r}{2a_0}}\,r^2\,\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{6}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-\frac{r}{2a_0}}dr$$

$$\langle r^2\rangle = \frac{1}{24{a_0}^5}\int_0^{a_0} r^4\,e^{\frac{r}{2a_0}}\,e^{-\frac{r}{2a_0}}\,dr$$

$$\langle r^2\rangle = \frac{1}{24{a_0}^5}\left(\frac{1}{5}r^5\right]_0^{a_0}$$

$$\langle r^2\rangle = \frac{1}{24{a_0}^5}\left\{\frac{{a_0}^5}{5}\right\}$$

$$\langle r^2\rangle = \frac{1}{120}$$

LAMPIRAN M. PERINTAH SIMULASI SCILAB 6.0.0

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)
Figure saved.
```

2. Untuk bilangan kuantum ***n=2, l=0,1***

```
--> clear all
--> 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)
Figure saved.
```

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)
 Figure saved.
```

Langkah II : membuat plot grafik rapat Probabilitas Radial

1. Untuk bilangan kuantum ***n=1, l=0***

```
--> clear all
--> 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)
  Figure saved.
```

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)
 Figure saved.
```

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)
 Figure saved.
```