SOLUSI ANALITIK PERSAMAAN SCHRÖDINGER ATOM HIDROGENIK DALAM RUANG MOMENTUM

SKRIPSI

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

Oleh:

INNA MUSTAFIDAH
NIM. 021810201074

JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER
2007

SOLUSI ANALITIK PERSAMAAN SCHRÖDINGER ATOM HIDROGENIK DALAM RUANG MOMENTUM

SKRIPSI

Oleh:

INNA MUSTAFIDAH
NIM. 021810201074

JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER
2007

PERSEMBAHAN

Dengan segenap hormat, puja dan puji syukur kehadirat Allah S.W.T yang dengan pertolongannya dan ridlo'Nya penulisan skripsi ini dapat diselesaikan dengan baik. Skripsi ini penulis persembahkan untuk :

1. Ayahanda, Qomari dan Ibunda, Supartini yang kusayangi dan kubanggakan. Terima kasih atas segala do'a, kasih saying, motivasi dan bimbingan yang tidak pernah lelah diberikan;
2. Suamiku, Fahmi Amin yang selalu memberikan dorongan materiil ataupun spirituil, serta do'a yang tidak pernah putus;
3. Anakku tercinta, Hilyatul Aulia engkaulah sumber keceriaan dan semangatku.
4. Adikku dan saudara-saudaraku yang selalu memberikan semangat padaku untuk jangan pernah menyerah dan putus asa;
5. Guru-guruku dan Dosen-dosenku yang telah memberikan ilmu dan membimbing dengan penuh kesabaran;
6. Teman-temanku angkatan 2002, Nurul Q, Tauriza, Mashun, Faridah, Ridlo yang selalu memberikan semangat kepada penulis. Serta teman-temanku seperjuangan di IONS;
7. Almamater Fakultas MIPA Universitas Jember yang kubanggakan.

MOTTO

"Aku tidak selalu mendapatkan apa yang kusukai, meskipun demikian aku selalu mensyukuri apapun yang aku dapatkan".
(Anonim)

"Allah akan meninggikan orang-orang yang beriman di antara kamu dan orang-orang yang diberi ilmu pengetahuan beberapa derajat".
(Terjemahan Surat Al-Mujadalah Ayat 11)

"Hidup yang dijalani meskipun ada kesalahan bukan hanya lebih terhormat, tapi juga lebih berguna dibanding hidup tanpa melakukan apapun".
(Anonim)

PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Inna Mustafidah

NIM : 021810201074

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya tulis ilmiah yang berjudul "Solusi Analitik Persamaan Schrödinger Atom Hidrogenik dalam Ruang Momentum" adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali jika disebutkan sumbernya dan belum pernah diajukan pada institusi manapun, serta bukan karya jiplakan. Saya bertanggungjawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

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

Jember, Juni 2007

yang menyatakan,

Inna Mustafidah
NIM. 021810201074

PENGESAHAN

Skripsi ini telah diterima oleh Fakultas Matematika Dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember pada :

Hari : SELASA

Tanggal : 10 JUL 2007

Tempat : Fakultas Matematika Dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember

Tim Penguji

DPU/Ketua

(Artoto Arkundato, S. Si, M. Si)
NIP. 132 236 059

DPA/Sekretaris

(Sutisna, S. Pd, M. Si)
NIP. 132 257 929

Penguji I

(Agung Tjahjo Nugroho, S. Si, MPhill)
NIP. 132 085 972

Penguji II

(Nurul Priyantari, S. Si, M. Si)
NIP. 132 162 506

Mengesahkan,
Dekan FMIPA UNEJ

(Ir. Sumadi, M. Si)
NIP. 130 368 784

KATA PENGANTAR

Segala puji syukur penulis panjatkan kehadirat Allah S.W.T yang telah melimpahkan taufik, rahmat dan hidayah-Nya sehingga penyusunan skripsi ini dapat selesai. Adapun judul dari skripsi ini "Solusi Analitik Persamaan Schrödinger Atom Hidrogenik dalam Ruang Momentum".

Skripsi ini tergolong ke dalam bidang fisika teoritik, dan disusun sebagai syarat untuk menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) pada Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jember.

Dengan adanya bimbingan dan bantuan yang begitu besarnya kepada penulis, maka tidaklah berlebihan apabila penulis menyampaikan ucapan terima kasih dan penghargaan setinggi-tingginya kepada :

1. Bapak Artoto Arkundato, S.Si, M.Si., sebagai Dosen Pembimbing Utama (DPU) dan Bapak Sutisna, S.Pd, M.Si., selaku Dosen Pembimbing Anggota (DPA) yang dengan penuh kesabaran telah membimbing dan memberi masukan kepada penulis mulai dari penentuan topik sampai selesai skripsi ini;
2. Bapak Agung T.Nugroho, S.Si, MPhil, dan Ibu Nurul Priyantari, M.Si., selaku dosen penguji yang telah memberikan saran-saran perbaikan pada penulis.

Penulis menyadari akan keterbatasan pengetahuan yang dimiliki. Oleh sebab itu andaikata terdapat kekurangan dalam skripsi ini mohon dimaklumi. Di samping itu, untuk tujuan perbaikan dan kesempurnaan skripsi ini, saran dan kritik akan penulis terima dengan tangan terbuka.

Akhirnya penulis berharap semoga penelitian ini dapat mmberikan kontribusi terhadap kemajuan ilmu pengetahuan khususnya di bidang fisika teoritik.

Jember, Juni 2007

RINGKASAN

Solusi Analitik Persamaan Schrödinger Atom Hidrogenik dalam Ruang Momentum; Inna Mustafidah, 021810201074; 2007: 79 halaman; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Untuk menelaah suatu fenomena fisis mikroskopis maka kita dapat menjelaskan mekanika sistem partikel dengan menuliskan persamaan Schrödinger yang tepat untuk sistem tersebut kemudian mencari solusinya. Dalam hal ini ada dua representasi persamaan yang dapat digunakan yaitu representasi dalam ruang posisi dan ruang momentum.

Pada penelitian ini akan dihitung solusi persamaan Schrödinger dalam ruang momentum untuk atom hidrogenik, yang termasuk sistem kuantum sederhana.

Penelitian yang dilakukan adalah penelitian dalam bidang fisika teoritik. Penelitian dilakukan dengan cara studi literatur. Penelitian ini dilakukan mulai bulan April sampai Juni 2007. Analisa data dilakukan dengan cara melakukan verifikasi (membandingkan) solusi persamaan Schrödinger atom hidrogenik dalam ruang momentum dengan solusi persamaan Schrödinger ruang posisi yang sudah diketahui lebih dulu solusinya.

Adapun langkah-langkah penelitian adalah sebagai berikut :

(1) mereview hasil-hasil analitik dari persamaan Schrödinger atom hidrogenik dalam ruang posisi.

(2) menghitung solusi persamaan Schrödinger atom hidrogenik dalam ruang momentum dengan cara mendefinisikan persamaan Schrödinger dalam ruang momentum kemudian menyelesaikan persamaan tersebut sehingga diperoleh fungsi gelombang yang kemudian digunakan untuk menghitung harga harap observabel (energi) sistem.

(3) verifikasi hasil, dengan membandingkan nilai harga harap obsevabel (energi) yang diperoleh dari solusi ruang momentum dengan harga harap observabel (energi) ruang posisi apakah sama atau tidak.

Data yang diperoleh dari penelitian ini adalah harga harap observabel (energi) yang diperoleh dari solusi ruang momentum.

Hasil yang diperoleh dari penelitian ini adalah mendapatkan fungsi gelombang ruang momentum yaitu $F_{nl}(p)=\left[\frac{2}{\pi}\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}\right]^{1/2} n^2 2^{2l+2} l! \frac{n^l p^l}{(n^2p^2+1)^{l+2}} C_{n-l-1}^{l+1}\left(\frac{n^2p^2-1}{n^2p^2+1}\right)$ dan harga harap observabel (energi) dalam ruang momentum sebesar $\frac{-Z^2 13{,}6}{n^2}$ eV. Selanjutnya melakukan verifikasi dengan hasil ruang posisi, dimana dalam ruang posisi diketahui fungsi gelombangnya $R_{nl}(\rho)=Ce^{\frac{-\rho}{2}}\rho^l\left(G_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right)$ dan harga harap observable (energi) sebesar $-\frac{Z^2 13{,}6}{n^2}$ eV. Dari kedua solusi ini menunjukkan bahwa harga harap observabel (energi) yang merupakan energi total sistem yang dihitung adalah sama yaitu $-\frac{Z^2 13{,}6}{n^2}$ eV.

Kesimpulan yang diperoleh dari penelitian ini adalah bahwa persamaan Schrödinger atom hidrogenik dapat dikerjakan dengan menggunakan dua representasi persamaan baik dalam ruang posisi dan juga ruang momentum.

Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jember.

DAFTAR ISI

Halaman

DAFTAR TABEL

Halaman

DAFTAR GAMBAR

Halaman

DAFTAR LAMPIRAN

Halaman

BAB I. PENDAHULUAN

I.1 Latar Belakang

Telaah baku untuk fenomena fisis alam mikroskopis seperti atom, inti, partikel, subpartikel, dan sebagainya, biasanya menggunakan prinsip-prinsip mekanika kuantum dan dimulai dengan menuliskan persamaan Schrödinger yang tepat untuk sistem tersebut, lalu mencari solusinya untuk syarat batas yang diberikan. Penyelesaian persamaan adalah berupa fungsi gelombang, yang secara kuantum dipostulatkan mengandung informasi tentang apapun dari sistem tersebut melalui perhitungan harga harap sistem.

Persamaan Schrödinger secara umum dapat dinyatakan dengan :

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\bar{r},t)\right]\psi(\bar{r},t)=\mathrm{E}\psi(\bar{r},t). \qquad (1.1)$$

Dalam hal ini $\hat{p}$ adalah operator momentum, m adalah masa sistem, $V(\bar{r},t)$ adalah potensial sistem, E adalah energi total sistem dan $\psi(\bar{r},t)$ adalah fungsi gelombang. Jika potensial hanya merupakan fungsi jarak maka persamaan Schrodinger bebas waktu dapat dinyatakan dengan :

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\bar{r})\right]\psi(\bar{r})=\mathrm{E}\psi(\bar{r}) \qquad (1.2)$$

Persamaan (1.2) merupakan persamaan nilai eigen berbentuk :

$$\hat{H}\psi = E\psi . \qquad (1.3)$$

Dengan E adalah energi total sistem, dan operator yang muncul dalam tanda kurung siku ruas kiri persamaan (1.2) adalah Hamiltonian $\hat{H}$ yang merupakan operator energi total sistem. Bentuk Hamiltonian ini ditentukan berdasarkan sifat-sifat sistem dimaksud, yang untuk kasus nonrelativistik gerak partikel bermassa m dalam medan potensial V merupakan penjumlahan dari operator energi kinetik dan energi potensial partikel yaitu : (Krane, 1992)

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \tag{1.4}$$

dengan $\hat{T} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m}$ dan $\hat{V} = \hat{V}(\bar{r})$.

Operator momentum linier dalam mekanika kuantum adalah $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ sehingga Hamiltonian dapat dituliskan sebagai : (Griffiths, 1994 : 121)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + \hat{V}(\bar{r}). \tag{1.5}$$

Persamaan (1.5) disebut operator Hamiltonian sistem dalam ruang koordinat koordinat $\bar{r}$.

Fungsi gelombang dalam ruang posisi dituliskan dengan $\psi(\bar{r})$. Dari fungsi gelombang $\psi(\bar{r})$ dapat dihitung harga harap observable (besaran fisis dalam mekanika klasik) dari sistem tersebut. Sebagai contoh harga harap posisi partikel dihitung dengan :

$$\langle x \rangle = \int \psi *(x)\hat{x}\psi(x)dx \tag{1.6}$$

Dalam ruang momentum Hamiltonian sistem dapat dinyatakan sebagai berikut :

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \hat{V}(\bar{p}). \tag{1.7}$$

Solusi persamaan Schrödinger dengan menggunakan Hamiltonian (1.7) disebut solusi ruang momentum. Fungsi gelombang dalam ruang momentum dinyatakan dengan $\psi(\bar{p})$. Representasi persamaan Schrödinger dalam ruang posisi atau ruang momentum sebenarnya merupakan cara yang berbeda untuk menelaah problem yang sama dengan hasil sama. Dengan kata lain bahasa yang digunakan berbeda namun untuk menunjukkan sesuatu yang sama. Dalam hal ini ada problem-problem tertentu yang lebih mudah dikerjakan dengan menggunakan representasi ruang posisi, dan ada juga yang lebih mudah jika menggunakan representasi ruang momentum. Dengan menggunakan definisi operator $\hat{r} = \frac{\hbar}{i}\nabla_p = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dp_r}$ maka bahasan persamaan Schrödinger ruang momentum dengan Hamiltonian persamaan (1.7) dalam dimensi satu adalah : (Fromhold, 1992)

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V\left(-\frac{\hbar}{i}\nabla_{p_r}\right)\right]\psi(p_r) = \mathrm{E}\psi(p_r). \qquad (1.8)$$

Kajian teoritik solusi dalam ruang momentum sistem kuantum sudah pernah dilakukan sebelumnya untuk kasus osilator harmonik dan tak harmonik (Yuriati, 2005). Untuk solusi ruang posisi, kajian atom hidrogenik umumnya banyak diberikan dalam buku-buku mekanika kuantum, misalnya dalam buku "A Brief Theory of Quantum Mechanics" yang ditulis oleh Fromhold yang juga diacu dalam penelitian ini. Sedangkan solusi dalam ruang momentum pernah dilakukan oleh J.D Hey. Dalam tulisan J.D Hey tersebut telaah teoritik yang dilakukan tidak diberikan secara lengkap. Oleh karena itu telaah teoritik ini akan berusaha menyelesaikan persamaan Schrödinger dalam ruang momentum untuk problem atom hidrogenik secara lengkap dan berurutan. Hasil-hasil solusi persamaan Schrödinger dalam ruang posisi akan digunakan sebagai pembanding dari penyelesaian persamaan Schrödinger ruang momentum. Sementara itu penggunaan fungsi gelombang ruang momentum banyak digunakan dalam kajian hamburan kuantum, sehingga topik ini dirasa sangat tepat untuk diangkat sebagai topik penelitian.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarakan latar belakang masalah di atas, permasalahan yang dimunculkan dalam telaah atau studi teoritik kali ini adalah apakah persamaan Schrödinger atom hidrogenik dapat dikerjakan dalam ruang momentum.

1.3 Batasan Masalah

Masalah dalam penelitian ini dibatasi untuk mencari solusi persamaan Schrödinger dalam ruang momentum untuk atom hidrogenik. Telaah juga dibatasi untuk kasus nonrelativistik.

1.4 Tujuan Penelitian

Tujuan yang ingin dicapai dalam penelitian teoritik ini adalah menghitung solusi persamaan Schrödinger dalam ruang momentum untuk atom hidrogenik.

1.5 Manfaat

Riset teoritik yang dilakukan dalam penelitian ini termasuk dalam lingkup fisika kuantum. Dari penelitian ini diharapkan :

1. Peneliti mampu menelaah problem kuantum dengan mencari solusi persamaan Schrödinger dalam ruang momentum.
2. Meningkatkan daya nalar peneliti berbasis konsep-konsep dasar fisika.
3. Memperkaya karya ilmiah di bidang fisika teoritik di Indonesia.

BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Gerak Partikel Dalam Medan Sentral

Atom hidrogenik adalah atom yang sederhana dan solusinya dapat mudah diperoleh dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger secara analitik. Persamaan Schrödinger ruang posisi persamaan (1.2) dalam koordinat kartesian dapat dituliskan dengan :

$$\frac{-\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+V(x,y,z)=E\psi\,. \tag{2.1}$$

Dimana ψ adalah fungsi dari x, y dan z. Untuk atom hidrogenik maka dapat dievaluasi energi potensial yang berperan adalah potensial Coulomb yang berbentuk :

$$\mathrm{V}=-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\text{, dengan } \bar{r}=\sqrt{x^2+y^2+z^2}\,.\quad \text{(M.K.S)} \tag{2.2}$$

Sehingga untuk atom hidrogenik berlaku persamaan Schrödinger ruang posisi :

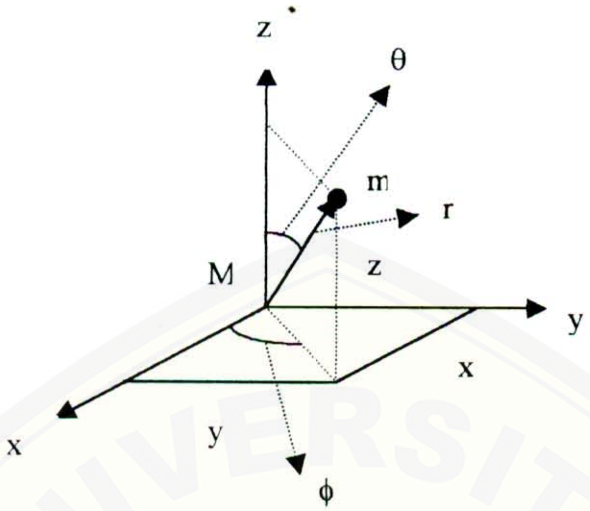
$$\left(\frac{-\hbar^2}{2\mu}\nabla^2-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi(r)=\mathrm{E}\psi(r), \tag{2.3}$$

dengan hamiltonian $\hat{H}=\frac{-\hbar^2}{2\mu}\nabla^2-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$.

Sistem atom adalah sistem dengan simetri bola oleh karena itu akan sangat tepat jika kita bekerja pada koordinat bola $(\bar{r},\theta,\phi)$, seperti pada gambar di bawah.

$x=r\cos\cos\phi$,

$y=r\sin\theta\sin\phi$, dan $z=r\cos\theta$



Gambar 2.1 Sistem Koordinat Bola. Proton berada pada titik asal dan elektron pada r dalam arah yang ditentukan oleh sudut polar θ dan sudut azimut ϕ.

Penurunan persamaan Schrödinger dalam koordinat bola adalah sebagai berikut. Dengan meninjau gerak elektron dalam atom yang mempunyai momentum sudut :

$$\hat{L} = \hat{r} x \hat{p}. \tag{2.4}$$

Kuadrat momentum sudut adalah : (Framhold, 1992 :176)

$$\hat{L}^2 = \hat{L}.\hat{L} = (\hat{r}x\hat{p}).(\hat{r}x\hat{p}) = r^2 \hat{p}^2 - (\hat{r}.\hat{p})^2 + 2i\hbar\hat{r}.\hat{p}, \tag{2.5}$$

sehingga, $$\frac{\hat{p}^2}{2\mu} = \frac{1}{2\mu r^2}\left[\hat{L}^2 - (\hat{r}.\hat{p})^2 - 2i\hbar\hat{r}.\hat{p}\right]. \tag{2.6}$$

Operator posisi $\hat{r}$ dan momentum $\hat{p}$ dapat dituliskan dengan :

$$\hat{r} = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k}, \tag{2.7}$$

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\left(\hat{i}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{j}\frac{\partial}{\partial y} + \hat{k}\frac{\partial}{\partial z}\right), \tag{2.8}$$

sehingga :

$$\hat{r}.\hat{p} = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k}.\frac{\hbar}{i}\left(\hat{i}\frac{\partial}{\partial x} + \hat{j}\frac{\partial}{\partial y} + \hat{k}\frac{\partial}{\partial z}\right) = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial x} + y\frac{\partial}{\partial y} + z\frac{\partial}{\partial z}\right). \tag{2.9}$$

Melakukan transformasi koordinat dari kartesian ke koordinat bola sebagai berikut :

Dalam koordinat bola diketahui : $x = r\sin\theta\cos\phi$, $y = r\sin\theta\sin\phi$ dan $z = r\cos\theta$. Meninjau dalil rantai diferensial berikut : (Fromhold, 1992)

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial \phi}\frac{\partial \phi}{\partial z}. \tag{2.10}$$

Dengan $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ maka didapatkan :

$$\frac{\partial r}{\partial z} = \frac{z}{r}. \tag{2.11}$$

dan dengan $\cos\theta = \frac{z}{r}$, maka :

$$\frac{\partial \theta}{\partial z} = -\frac{\sin\theta}{r}. \tag{2.12}$$

Sementara $\frac{\partial \phi}{\partial z} = 0$, maka didapatkan :

$$\frac{\partial}{\partial z} = \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta}. \tag{2.13}$$

Dengan cara yang sama akan diperoleh :

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \theta}\frac{\partial \theta}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \phi}\frac{\partial \phi}{\partial y} = \frac{y}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\sin\phi\cos\theta}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}. \tag{2.14}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} = \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r}\frac{\sin\phi}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \phi}. \tag{2.15}$$

Mensubtitusikan hasil-hasil di atas maka diperoleh :

$$\hat{r}.\hat{p} = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r}. \tag{2.16}$$

Oleh karena itu persamaan (2.6) dengan menggunakan persamaan (2.16) menjadi :

$$\frac{\hat{p}^2}{2\mu} = \left[\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right]. \tag{2.17}$$

Kuadrat momentum sudut dalam persamaan (2.17) dapat dirumuskan :

$$\hat{L} = \hat{L}_x\hat{i} + \hat{L}_y\hat{j} + \hat{L}_z\hat{k} \text{ atau} \tag{2.18}$$

$$\hat{L}^2 = \hat{L}^2_x + \hat{L}^2_y + \hat{L}^2_z. \tag{2.19}$$

Transformasi dari klasik ke kuantum seperti pada tabel 2.1.

Tabel 2.1 Transformasi dari klasik ke kuantum.

Klasik	Kuantum
$\overline{L} = \overline{L}_x\hat{i} + \overline{L}_y\hat{j} + \overline{L}_z\hat{k}$	$\hat{L}\left(r, P_r = -i\hbar\frac{\partial}{\partial r}\right)$
$L_x = yP_z - zP_y$	$\hat{L}_x = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)$
$L_y = zP_x - xP_z$	$\hat{L}_y = -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)$
$L_z = xP_y - yP_x$	$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$

Sumber: Matthews (1982)

Dengan mengubah momentum sudut $\hat{L}(x,y,z)$ menjadi $\hat{L}(r,\theta,\phi)$. Mensubtitusikan persamaan (2.14), (2.15), nilai x dan y untuk mencari $\hat{L}_x$ sehingga diperoleh :

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{i}\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cos\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right). \tag{2.20}$$

Demikian juga dengan $\hat{L}_y$ dan $\hat{L}_z$, sehingga :

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right). \tag{2.21}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}. \tag{2.22}$$

Kuadrat komponen-komponen momentum sudut dapat kita hitung :

$$\hat{L}^2{}_x = -\hbar^2\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{2.23}$$

$$=-\hbar^2\left\{\sin^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\sin\phi\cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta\partial\phi}-\frac{\sin\phi\cos\phi}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}+\cot\theta\cos^2\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right.$$

$$\left.+\cot\theta\cos\phi\sin\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta}+\cot^2\theta\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}-\cot^2\theta\cos\phi\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}$$

$$\hat{L}^2{}_y=\frac{\hbar}{i}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}-\sin\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}-\sin\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{2.24}$$

$$=-\hbar^2\left\{\cos^2\phi\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}-\cos\phi\cot\theta\sin\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta}+\cot\theta\sin^2\phi\frac{\partial}{\partial\theta}\right.$$

$$\left.-\cot\theta\sin\phi\cos\phi\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\theta}+\frac{\cos\phi\sin\phi}{\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}+\cot^2\theta\sin^2\theta\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}+\cot^2\theta\cos\phi\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right\}.$$

$$\hat{L}^2{}_z=\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{2.25}$$

Subtitusi persamaan (2.23–2.25) ke persamaan (2.19) diperoleh :

$$\hat{L}^2=-\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right). \tag{2.26}$$

Hasil dari $\hat{L}^2$ di atas dimasukkkan ke persamaan (2.17) sehingga didapatkan :

$$\frac{\hat{p}^2}{2\mu}=\left[\frac{\hat{L}^2}{2\mu r^2}-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)\right]$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\frac{1}{r^2}\cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right)$$

$$=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]. \tag{2.27}$$

Mensubstitusikan persamaan (2.27) ke persamaan (1.2) sehingga diperoleh :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right.$$

$$\left.+V(r)\right]\psi(r,\theta,\phi)=E_n\psi(r,\theta,\phi) \tag{2.28}$$

Persamaan ini dapat dipecahkan dengan metode separasi variabel yaitu dengan mengasumsikan bahwa bentuk solusi fungsi gelombangnya adalah perkalian dari fungsi sudut dan fungsi ruang :

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)Y(\theta,\phi) \tag{2.29}$$

Lebih lanjut dapat dilakukan separasi lagi solusinya adalah:

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi) \tag{2.30}$$

Persamaan di atas dapat dituliskan dalam bentuk ringkas :

$$\Psi = R\Theta\Phi \tag{2.31}$$

Mendeferensialkan persamaan (2.30) masing-masing terhadap (r,θ,ϕ) maka akan didapatkan :

$$\frac{\partial\psi}{\partial r} = \Theta\Phi\frac{\partial R}{\partial r} = \Theta\Phi R' \tag{2.32}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial\theta} = R\Phi\frac{\partial\Theta}{\partial\theta} = R\Phi\Theta' \tag{2.33}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} = R\Theta\frac{\partial^2\Phi}{\partial\phi^2} = R\Theta\Phi'' \tag{2.34}$$

Jika diketahui bahwa $V(r) = \frac{-Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ (Hänsch, 1979), mensubtitusikan persamaan (2.32- 2.34) ke dalam persamaan (2.28) maka akan diperoleh :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2R'\Theta\Phi\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta)R\Phi\Theta'+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}R\Theta\Phi''\right]\right.$$

$$\left.-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}R\Theta\Phi\right] = E_n R\Theta\Phi \tag{2.35}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{1}{r^2}\left(2rR'\Theta\Phi + r^2R''\Theta\Phi\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\left((\cos\theta)R\Theta\Phi'+(\sin\theta)R\Phi\Theta''\right)\right.\right.$$

$$+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}R\Theta\Phi''\Bigg]-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}R\Theta\Phi\Bigg]=E_n R\Theta\Phi\ . \qquad (2.36)$$

Mengalikan persamaan (2.36) dengan $\left(\frac{r^2}{R\Theta\Phi}\right)$ sehingga menjadi :

$$-\left(2r\frac{R'}{R}+r^2\frac{R''}{R}\right)-\left(\left(\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\right)\frac{\Theta'}{\Theta}+\frac{\Theta''}{\Theta}+\frac{\Phi''}{\Phi\sin^2\theta}\right)=\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\mathrm{E}r^2+\frac{Ze^2r}{4\pi\varepsilon_0}\right). \qquad (2.37)$$

$$-\left(2r\frac{R'}{R}+r^2\frac{R''}{R}\right)-\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\mathrm{E}r^2+\frac{Z^2r}{4\pi\varepsilon_0}\right)-\left(\frac{\Theta''}{\Theta}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\Theta'}{\Theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\Phi''}{\Phi}\right)=0\ . \quad (2.38)$$

Solusi dari persamaan (2.38) dapat terpenuhi jika fungsi sudut adalah sebuah konstanta, misalnya dengan memberi $-l(l+1)$: (Griffiths, 1994)

$$\frac{\Theta''}{\Theta}+\frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\Theta'}{\Theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\Phi''}{\Phi}=-l(l+1)\,. \qquad (2.39)$$

Persamaan di atas dikenal sebagai persamaan polinomial Legendre. Dikalikan dengan $(\sin^2\theta)$ didapatkan :

$$\sin^2\theta\frac{\Theta''}{\Theta}+\cos\theta\sin\theta\frac{\Theta'}{\Theta}+l(l+1)\sin^2\theta+\frac{\Phi''}{\Phi}=0\,.$$

$$\frac{\Phi''}{\Phi}=-\left(\ \sin^2\theta\frac{\Theta''}{\Theta}+\cos\theta\sin\theta\frac{\Theta'}{\Theta}+l(l+1)\sin^2\theta\ \right). \qquad (2.40)$$

Kedua ruas adalah fungsi dengan variabel yang berbeda oleh karena itu dapat dinyatakan sebagai konstanta :

$$\frac{\Phi''}{\Phi}=-m^2\,. \qquad (2.41)$$

Hasil integrasi persamaan (2.41) adalah :

$$\Phi=Ce^{im\phi}\ , \qquad (2.42)$$

dengan C merupakan tetapan integrasi. Fungsi gelombang Φ merupakan salah satu komponen dari fungsi gelombang lengkap Ψ yang harus berharga tunggal pada setiap titik di dalam ruang. Untuk mencari nilai C kita gunakan syarat normalisasi yakni:

$$\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\phi = 1, \tag{2.43}$$

didapatkan :

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}. \tag{2.44}$$

sehingga:

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}. \tag{2.45}$$

Besarnya $\Phi(\phi)$ haruslah fungsi bernilai tunggal yang oleh sifat simetri rotasi maka memerlukan $\phi = \phi + 2\pi$. Sehingga memerlukan nilai m adalah bilangan bulat. Bilangan m ini selanjutnya disebut bilangan kuantum magnetik. Operator persamaan (2.25) jika dikenakan pada fungsi gelombang persamaan (2.45) hasilnya adalah :

$$\hat{L}_z^2 \Phi = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \Phi = m^2 \hbar^2 \Phi. \tag{2.46}$$

sehingga nilai $\hat{L}_z^2$ adalah $m^2\hbar^2$ dengan $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$

Untuk menentukan $\Theta(\theta)$ kita masukkan persamaan (2.45) ke persamaan (2.39) dan dikalikan dengan Θ menghasilkan :

$$\Theta'' + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\Theta' + \left[l(l+1) - \frac{m}{\sin^2\theta} \right] \Theta = 0. \tag{2.47}$$

Persamaan differensial di atas berbentuk persamaan differensial Legendre, yang mempunyai solusi: (Griffiths, 1994 : 126)

$$\Theta(\theta) = C P_l^m (\cos\theta). \tag{2.48}$$

Untuk mencari nilai tetapan C kita gunakan syarat normalisasi sehingga didapatkan :

$$C = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}}, \tag{2.49}$$

(Matthew, 1982)

fungsi gelombang $\Theta(\theta)$ menjadi :

$$\Theta(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta), \tag{2.50}$$

dengan $P_l^m(\cos\theta) = \left(1-\cos^2\theta\right)^{\left|\frac{m}{2}\right|} \frac{d^{|m|}}{d(\cos\theta)^{|m|}} \frac{1}{2^l l!} \frac{\partial^l}{\partial(\cos\theta)^l} \left(\cos^2\theta - 1\right)^l$. (2.51)

Penyelesaian $P_l^m(\cos\theta)$ disebut fungsi polinomial Legendre. Untuk m yakni bilangan kuantum magnetik yang nilainya $m = 0, \pm1, \pm2, ...$, sedangkan untuk l adalah bilangan kuantum orbital yang nilainya $l = 0, 1, 2, ..., (n-1)$. Daftar nilai fungsi polinomial Legendre dapat dilihat pada lampiran B1.

Dengan demikian dapat dihitung fungsi gelombang sudut adalah :

$$Y = \Theta(\theta)\Phi(\phi) \ . \tag{2.52}$$

$$Y_l^m = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right]^{\frac{1}{2}} e^{im^2\phi} P_l^m(\cos\theta). \tag{2.53}$$

Tabel 2.2 Fungsi gelombang untuk θ dan ϕ

No.	l	m	Y_l^m	State
1.	0	0	$Y_0^0(\theta,\phi) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}$	s
2.	1	0	$Y_1^0(\theta,\phi) = \sqrt{3/4\pi}\cos\theta$	p_z
3.	1	1	$Y_1^1(\theta,\phi) = -\left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \sin\theta \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2}}$	p_x

Sumber: Matthew (1982)

2.2 Fungsi Gelombang Radial

Untuk menentukan solusi gelombang radial dalam persamaan (2.38) mensubtitusikan $-l(l+1)$ sehingga menjadi :

$$\left(-\left(r^2\frac{R''}{R}+2r\frac{R'}{R}\right)\right)-\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{Ze^2r}{4\pi\varepsilon_0}+Er^2\right)+l(l+1)=0\,. \tag{2.54}$$

Bila persamaan di atas dikalikan dengan $\frac{R}{r^2}$:

$$\left(-\left(R''+\frac{2R'}{r}\right)\right)-\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+\mathrm{E}\right)R+l(l+1)\frac{R}{r^2}=0 \tag{2.55}$$

$$\left[-\frac{2}{r}\frac{d}{dr}-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R-\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+\mathrm{E}\right)R=0$$

$$\left(\frac{2}{r}\frac{d}{dr}+\frac{d^2}{dr^2}\right)R+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+\mathrm{E}-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]R=0\,. \tag{2.56}$$

Didefinisikan :

$$r\equiv\frac{\rho}{\alpha},\alpha=\sqrt{\frac{-8\mu E}{\hbar^2}},\frac{d\rho}{dr}=\alpha\,, \tag{2.57}$$

maka persamaan (2.56) menjadi :

$$\left(\frac{2\alpha}{\rho}\frac{d}{dr}+\frac{d^2}{dr^2}\right)R+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[\frac{Ze^2\alpha}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\rho}+E-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu}\frac{\alpha^2}{\rho^2}\right]R=0\,. \tag{2.58}$$

$$\frac{2\alpha^2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\frac{d^2R}{d\rho^2}\alpha^2-\frac{l(l+1)\alpha^2}{\rho^2}R+\left(\frac{2\mu Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\frac{\alpha}{\rho}+\frac{2\mu}{\hbar^2}E\right)R=0\,.\ \text{dikalikan}\ \frac{1}{\alpha^2}:$$

$$\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}+\frac{d^2R}{d\rho^2}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}R+\left(\frac{2\mu Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2\alpha}\frac{1}{\rho}-\frac{1}{4}\right)R=0\,. \tag{2.59}$$

Didefinisikan bahwa :

$$k=\frac{2\mu Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2\alpha}=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\sqrt{-\frac{\mu}{2E}}, \tag{2.60}$$

Sehingga :

$$\frac{d^2R}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}R+\left(\frac{k}{\rho}-\frac{1}{4}\right)R=0\,. \tag{2.61}$$

Persamaan (2.61) adalah persamaan diferensial yang cukup sulit, melakukan penyederhanaan dengan memisalkan untuk ρ yang sangat besar $(\rho \to \infty)$, sehingga suku dengan variable ρ akan mendekati nol dan dapat diabaikan sehingga diperoleh persamaan :

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} - \frac{1}{4}R = 0. \quad (2.62)$$

Solusi persamaan di atas adalah :

$$R \cong Ce^{-\rho/2} + De^{\rho/2}. \quad (2.63)$$

Diasumsikan probabilitas partikel di $(\rho \to \infty)$ adalah nol yang memerlukan D=0. Oleh karena itu persamaan (2.63) menjadi $R(\rho) \cong Ce^{-\rho/2}$, dan dengan memberikan fungsi tambahan $H(\rho)$ maka dapat dinyatakan :

$$R(\rho) = Ce^{-\rho/2}H(\rho). \quad (2.64)$$

Subtitusi persamaan (2.64) ke (2.59) akan memberikan hasil :

$$\frac{2}{\rho}\left(-\frac{1}{2}e^{-\rho/2}\mathrm{H} + e^{-\rho/2}\mathrm{H}'\right) + \frac{d}{d\rho}\left(-\frac{1}{2}e^{-\rho/2}\mathrm{H} + e^{-\rho/2}\mathrm{H}'\right) + \left[-\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \left(\frac{k}{\rho} - \frac{1}{4}\right)\right]\mathrm{H}e^{-\rho/2} = 0 \quad (2.65)$$

$$\left(-\frac{1}{\rho}e^{-\rho/2}\mathrm{H} + \frac{2}{\rho}e^{-\rho/2}\mathrm{H}'\right) + \left(\frac{1}{4}e^{-\rho/2}\mathrm{H} - \frac{1}{2}e^{-\rho/2}\mathrm{H}' - \frac{1}{2}e^{-\rho/2}\mathrm{H}' + e^{-\rho/2}\mathrm{H}''\right) + \left[-\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \left(\frac{k}{\rho} - \frac{1}{4}\right)\right]\mathrm{H}e^{-\rho/2} = 0 \quad (2.66)$$

$$\left(-\frac{1}{\rho}\mathrm{H} + \frac{2}{\rho}\mathrm{H}'\right) + \left(\frac{1}{4}\mathrm{H} - \frac{1}{2}\mathrm{H}' - \frac{1}{2}\mathrm{H}' + \mathrm{H}''\right) + \left[-\frac{l(l+1)}{\rho^2} + \left(\frac{k}{\rho} - \frac{1}{4}\right)\right]\mathrm{H} = 0$$

$$\frac{d^2\mathrm{H}}{d\rho^2} - \left(1 - \frac{2}{\rho}\right)\frac{d\mathrm{H}}{d\rho} + \left[\frac{k-1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\mathrm{H} = 0. \quad (2.67)$$

Solusi persamaan ini adalah : (Griffith, 1994)

$$\mathrm{H}(\rho) = \rho^l G(\rho). \tag{2.68}$$

Jika persamaan di atas diturunkan maka :

$$\begin{aligned} \frac{d\mathrm{H}}{d\rho} &= l\rho^{l-1}G + \rho^l \frac{dG}{d\rho} \\ \frac{d^2\mathrm{H}}{d\rho^2} &= l(l-1)\rho^{l-2}G + l\rho^{l-1}\frac{dG}{d\rho} + l\rho^{l-1}\frac{dG}{d\rho} + \rho^l \frac{d^2G}{d\rho^2} \\ &= l(l-1)\rho^{l-2}G + 2l\rho^{l-1}\frac{dG}{d\rho} + \rho^l \frac{d^2G}{d\rho} \end{aligned} \tag{2.69}$$

$$\begin{aligned} \left(1-\frac{2}{\rho}\right)\frac{d\mathrm{H}}{d\rho} &= -l\rho^{l-1}G - \rho^l\frac{dG}{d\rho} + 2l\rho^{l-2}G + 2\rho^{l-1}\frac{dG}{d\rho} \\ \left[\frac{k-1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\mathrm{H} &= (k-1)\rho^{l-1}G - l(l+1)\rho^{l-2}G \end{aligned} \tag{2.70}$$

Memasukkan persamaan (2.69), (2.70) ke persamaan (2.67) didapatkan :

$$\rho^l \frac{d^2G}{d\rho^2} + \left(2l\rho^{l-1} - \rho^l + 2\rho^{l-1}\right)\frac{dG}{d\rho} +$$

$$\left[l(l-1)\rho^{l-2} - l\rho^{l-1} + 2l\rho^{l-2} + (k-1)\rho^{l-1} - l(l+1)\rho^{l-2}\right]G = 0$$

$$\rho G''(\rho) + (2l+2-\rho)G'(\rho) - (l+1-k)G = 0. \tag{2.71}$$

Melakukan pendekatan dengan solusi berupa deret :

$$G(\rho) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \rho^n. \tag{2.72}$$

Turunan pertama dan kedua persamaan di atas adalah :

$$G'(\rho) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n n\rho^{n-1} \text{ dan } G''(\rho) = \sum_{n=2}^{\infty} c_n n(n-1)\rho^{n(n-2)}. \tag{2.73}$$

Sehingga : $\rho G''(\rho) = \sum_{n=2}^{\infty} c_n n(n-1)\rho^{n(n-2)} = \sum_{n=1}^{\infty} c_{n+1}(n+1)n\rho^n$ (2.74)

$$(2l+2)G'(\rho) = (2l+2)\sum_{n-1}^{\infty} c_{n+1}(n+1)\rho^n. \tag{2.75}$$

Subtitusikan persamaan (2.73-2.75), sehingga didapatkan :

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left\{c_{n+1}(n+1)n+(n+1)(2l+2)\right\}c_{n+1}-nc_n-(l+1-k)c_n\}\rho^n=0. \qquad (2.76)$$

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left\{(n+1)(2l+2+n)\right\}c_{n+1}-(l+1+n-k)c_n\}\rho^n=0. \qquad (2.77)$$

Dari persamaan di atas akan memberikan hubungan rekursi :

$$c_{n+1}=\frac{(n+l+1)-k}{(n+1)(n+2l+2)}c_k. \qquad (2.78)$$

Untuk mengakhiri series dimisalkan $k=n_r+l+1$ dengan n_r yang bulat. Dengan menganggap $k\approx n$, jika $k=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\sqrt{-\frac{\mu}{2E}}$ maka dapat didefinisikan :

$$E_n=\frac{-\mu Z^2e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2n^2}\ (\mathrm{eV}) \qquad (2.79)$$

Pada persamaan (2.79) energi hanya bergantung pada bilangan kuantum n (bilangan kuantum utama) tidak pada l dan m. Dimana n harus merupakan bilangan bulat positif, demikian juga l. Energi yang diperoleh bernilai negatif yang berarti bahwa elektron diikat oleh potensial Coloumb dalam atom. Jika dimasukan nilai yang diketahui :

$m_e\equiv$ masa elektron $=9{,}11x10^{-31}\,kg$,

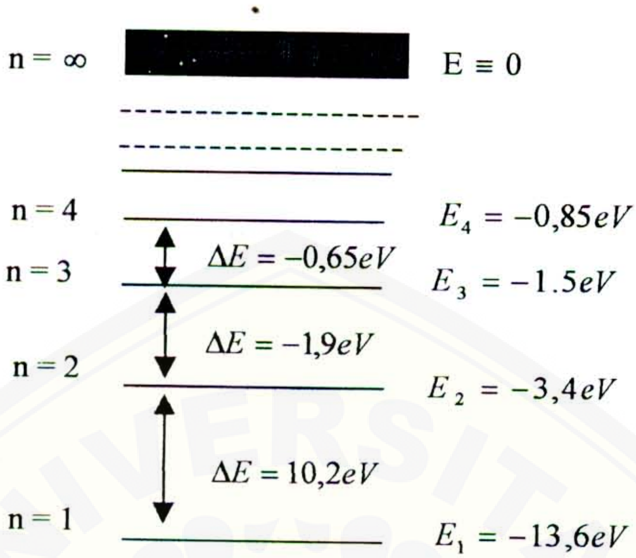
$\hbar=\frac{h}{2\pi}=1.05\times10^{-34}\,Js$, $\varepsilon_0=8.85\times10^{-12}\,Fm^{-1}$, $\pi=3.14$, $1Joule=\frac{1}{1.6.10^{-19}}eV$

e $\equiv$ muatan listrik $=1{,}6x10^{-19}\,C$

Maka energinya:

$$E_n=-\frac{Z^2 13{,}6}{n^2}\,\mathrm{eV} \qquad (2.80)$$

Dari sini dapat dikatakan bahwa energi atom hidrogenik terkuantisasi yang artinya hanya energi-energi tertentu saja yang diperkenankan, menurut bilangan kuantum utama n = 1, 2, 3, ... ∞ serta selisih antar tingkat energi yang tidak sama.



Gambar 2.2 Beberapa tingkat energi terendah atom hidrogen (Z=1).

Kembali pada persamaan (2.67) yang mana solusi persamaan tersebut adalah :

$$H(\rho) = \rho^l G(\rho). \tag{2.81}$$

Dengan $G = G_{n-l-1}^{2l+1}$, merupakan polinomial Laguere. Subtitusi persamaan (2.68) ke persamaan (2.64), maka diperoleh :

$$R_{nl}(\rho) = Ce^{\frac{-\rho}{2}} \rho^l \left(G_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right). \tag{2.82}$$

Tetapan C dapat dicari dengan syarat normalisasi fungsi gelombang :

$$\int_0^\infty R^* R dr = 1. \tag{2.83}$$

Dengan : $\begin{array}{l} \rho = \alpha r \\ d\rho = \alpha dr \end{array}$ $\quad \rho = \dfrac{2Zr}{a_0 n} \quad \alpha = \dfrac{2Z}{a_0 n}$,

maka akan diperoleh:

$$\frac{1}{\alpha^3} C^2 \int_0^\infty \rho^{2l} e^{-\rho} \left(G_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right)^2 \rho^2 d\rho = 1. \tag{2.84}$$

Sebagai Catatan bahwa : (Boas, 1996)

$$\int_0^\infty \rho^{2l} e^{-\rho} \left(G_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right)^2 \rho^2 d\rho = \frac{2n(n+l)!}{(n-l-1)!} . \tag{2.85}$$

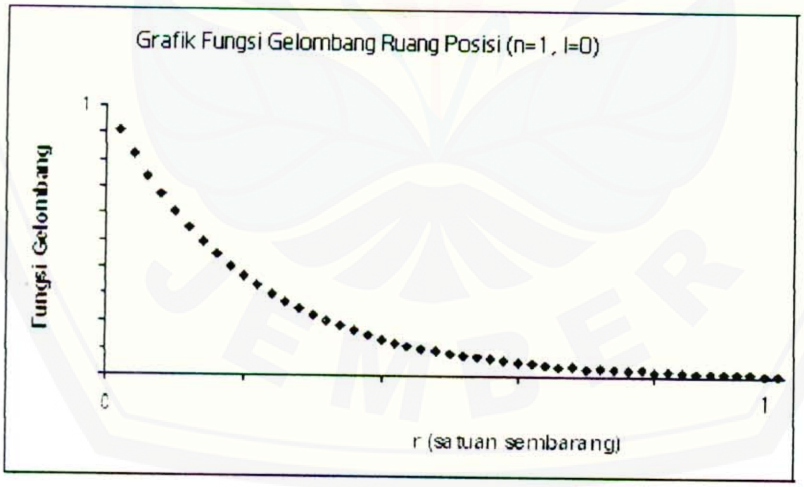
diperoleh nilai konstanta C adalah :

$$C = \left[\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!} \left(\frac{2Z}{a_0 n} \right)^3 \right]^{\frac{1}{2}} . \tag{2.86}$$

Sehingga fungsi gelombang radialnya adalah : (Griffiths, 1994)

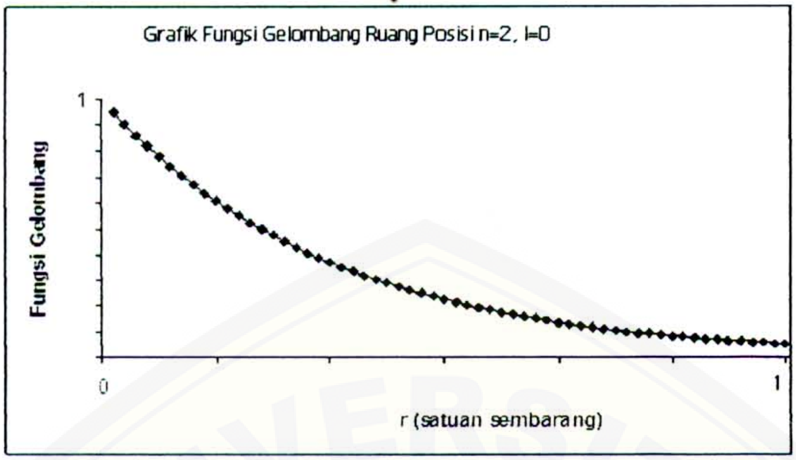
$$R_{nl} = \left[\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!} \left(\frac{2Z}{a_0 n} \right)^3 \right]^{\frac{1}{2}} \rho^l e^{\frac{-\rho}{2}} \left(G_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right). \tag{2.87}$$

Untuk n = 1, dan l = 0 : $R_{10} = \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} 2e^{\left(\frac{-Zr}{a_0}\right)}$.



Gambar 2.3 Plot grafik fungsi gelombang ruang posisi n=1, l=0.

Untuk n = 2, dan l = 0 : $R_{20} = \left[\frac{1}{8} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^3 \right]^{\frac{1}{2}} \left(2 - \frac{Zr}{a_0} \right) e^{\left(\frac{-Zr}{2a_0}\right)}$



Gambar 2.4 Plot grafik fungsi gelombang ruang posisi n=2, l=0.

Komponen fungsi gelombang $\psi(r,\theta,\phi)$ dapat ditulis sebagai hasil kali tiga buah fungsi satu variabel :

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi)=R_{n,l}(r)\Theta_{l,m}(\theta)\Phi_{m}(\phi). \tag{2.88}$$

Berikut beberapa fungsi gelombang atom hidrogen (Z=1) untuk beberapa nilai bilangan kuantum,

Tabel 2.3. Beberapa fungsi gelombang atom hidrogen

n	l	M	$\Phi(\phi)$	$\Theta(\theta)$	$R(r)$	$\psi(r,\theta,\phi)$
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{2}{a_0^{3/2}}e^{-r/a_0}$	$\frac{1}{\sqrt{\pi}a_{a0}^{3/2}}e^{-r/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2}a_0^{3/2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}a_0^{3/2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$	$\frac{\sqrt{6}}{2}\cos\theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{4\sqrt{2\pi}a_0^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}\cos\theta$
2	1	±1	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$	$\frac{1}{2\sqrt{6}a_0^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{8\sqrt{\pi}a_0^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}\sin\theta e^{\pm i\phi}$

Sumber : Krane (1992)

Indeks (n,l,m) yang berbeda memberikan komponen fungsi gelombang yang berbeda. Dari fungsi gelombang tersebut maka dapat digunakan untuk menemukan besarnya rapat probabilitas menemukan elektron yang dinyatakan sebagai kuadrat fungsi gelombang. Besarnya $|\psi(r,\theta,\phi)|^2$ memberikan rapat probabilitas (probabilitas persatuan volume) untuk menemukan elektron pada kedudukan (r,θ,ϕ). Untuk menghitung probabilitas persatuan volume tadi menggunakan elemen volume dV yang terletak pada (r,θ,ϕ)(Krane, 1992). Dalam koordinat bola elemen volume ini adalah :

$$dV = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi . \tag{2.89}$$

Sehingga probabilitas untuk elemen dV adalaah :

$$\mathrm{P} = |\psi_{n,l,m}(r,\theta,\phi)|^2 dV = |R_{n,l}(r)|^2 |\Theta_{l,m}(\theta)|^2 |\Phi_m(\phi)|^2 r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi . \tag{2.90}$$

Dengan menggunakan pernyataan probabilitas ini. Maka dapat dihitung probabilitas total untuk menemukan elektron diseluruh ruang :

$$P_{total} = \int_0^\infty |R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr \int_0^\pi |\Theta_{l,m}(\theta)|^2 \sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} |\Phi_m(\phi)|^2 d\phi . \tag{2.91}$$

Integral θ dan integral ϕ jika dihitung bernilai satu. Jadi probabilitas total adalah :

$$P_{total} = \int_0^\infty R^2{}_{nl} r^2 dr . \tag{2.92}$$

Harga harap observabel r^k untuk atom hidrogenik selanjutnya dapat dihitung :

$$\langle r^k \rangle = \int_0^\infty \psi^* r^k \psi dV \tag{2.93}$$

$$\langle r^k \rangle = \int R_{nl}{}^2 r^{k+2} dr . \tag{2.94}$$

Dari harga harap ini akan dapat diketahui pola distribusi elektron.

Sebagai contoh dapat dihitung untuk k = 1 :

$$P_{total} = \int_0^\infty R * rRr^2 dr$$

$$= \int_0^\infty R * R\left(\frac{\rho}{\alpha}\right)^3 \frac{1}{\alpha} d\rho$$

$$=\frac{1}{\alpha^4}\int_0^\infty \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}}\left(\frac{2z}{a_0 n}\right)^{\frac{3}{2}}\rho^l e^{\frac{-\rho}{2}} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\rho^3 \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}}\left(\frac{2z}{a_0 n}\right)^{\frac{3}{2}}\rho^l e^{\frac{-\rho}{2}} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)d\rho$$

$$=\frac{1}{\alpha^4}\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}\left(\frac{2z}{a_0 n}\right)^3\int_0^\infty \rho^{2l} e^{-\rho}\left(L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)\right)^2\rho^3 d\rho$$

$$=\frac{1}{\alpha^4}\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}\left(\frac{2z}{a_0 n}\right)^3\frac{2n(n+l)!}{(n-l-1)!}(2l+3)$$

$$=\left(\frac{a_0 n}{2z}\right)^4\left(\frac{2z}{a_0 n}\right)^3(2l+3). \qquad (2.95)$$

memasukkan nilai l = n – 1 sehingga :

$$P_{total}=\left(\frac{a_0 n}{2z}\right)(2n+1). \qquad (2.96)$$

Persamaan (2.96) merupakan harga harap untuk k=1, jika n = 1, l=0 maka didapatkan harga harap sebesar $\frac{3a_o}{2}$, yang berarti probabilitas untuk menemukan elektron pada daerah antar inti dan sepanjang r sebesar $\frac{3a_o}{2}$. Dapat kita tuliskan disini harga harap untuk beberapa fungsi r yang lain : (Hänsch *et al*, 1979)

$$\langle r\rangle=\frac{a_0}{2Z}\left[3n^2-l(l+1)\right]. \qquad (2.97)$$

$$\langle r^2\rangle=\frac{a_0^2 n^2}{2Z^2}\left[5n^2+1-3l(l+1)\right]. \qquad (2.98)$$

$$\langle r^3\rangle=\frac{a_0^3 n^2}{8Z^3}\left[35n^2(n^2-1)-30n^2(l+2)(l-1)+3(l+2)(l+1)l(l-1)\right]. \qquad (2.99)$$

$$\langle r^{-1}\rangle=\frac{Z}{a_0 n^2}. \qquad (2.100)$$

BAB 3. METODE PENELITIAN

3.1 Desain Penelitian

Jenis penelitian ini termasuk dalam fisika teoritik. Penelitian dilakukan dengan cara studi literatur.

3.1.2 Waktu Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan mulai bulan April 2007 dan selesai pada bulan Juni 2007.

3.2 Definisi Operasional

3.2.1 Persamaan Schrödinger

Persamaan Schrödinger adalah persamaan dasar dalam dalam mekanika kuantum yang menjelaskan mekanika atau gerak dari objek mikro.

3.2.2 Atom Hidrogenik

Atom hidrogenik adalah atom dengan satu elektron.

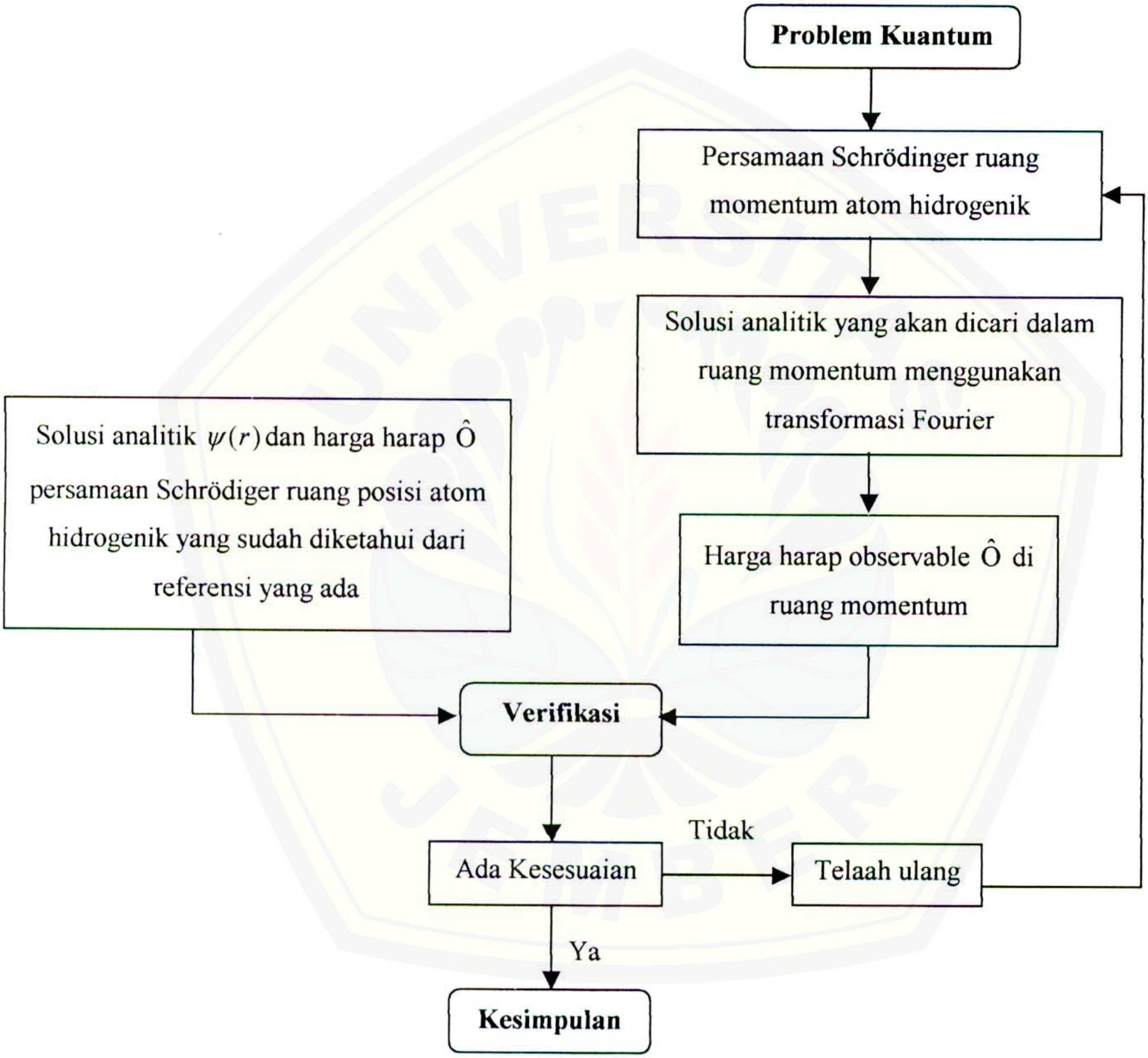
3.2.3 Fungsi Gelombang Radial

Fungsi gelombang radial adalah fungsi gelombang yang berubah ke arah radial saja, hanya merupakan fungsi dari jarak.

3.2.4 Mekanika Kuantum

Mekanika kuantum adalah sistem mekanika yang dikembangkan dari teori kuantum dan digunakan untuk menjelaskan sifat-sifat obyek mikro misalkan atom dan molekul. Dengan menggunakan kuantum energi sebagai titik awal, mekanika kuantum menggabungkan prinsip ketidakpastian Heisenberg dan panjang gelombang de Broglie sehingga menjadi dualisme partikel gelombang yang merupakan dasar persamaan Schrödinger.

3.3 Langkah-Langkah Penelitian



Gambar 3.1 Desain Penelitian

Dari desain penelitian dapat dijelaskan mengenai langkah-langkah penelitian sebagai berikut : yang pertama solusi persamaan Schrödinger atom hidrogenik dalam ruang posisi yang sudah diketahui. Akan diperoleh fungsi gelombang dan dapat dihitung energi total sistem.

Yang kedua adalah mencari solusi persamaan Schrödinger atom hidrogenik dalam ruang momentum dengan cara studi literatur. Yang dilakukan adalah mendefinisikan persamaan Schrödinger dalam ruang momentum kemudian menyelesaikan persamaan tersebut sehingga diperoleh fungsi gelombang dalam ruang momentum. Dari fungsi gelombang tersebut kita dapat menghitung harga harap energi.

Langkah selanjutnya adalah verifikasi hasil ruang momentum dicocokkan dengan hasil ruang posisi untuk diambil kesimpulan. Yang diverifikasi adalah harga harap energi.

3.4 Data Penelitian

Data dari penelitian ini adalah harga harap energi yang diperoleh dari solusi ruang momentum.

3.5 Analisa Data

Analisa data dilakukan dengan cara melakukan verifikasi solusi persamaan Schrödinger atom hidrogenik dalam ruang momentum dengan solusi persamaan Schrödinger ruang posisi, dimana persamaan Schrödinger dalam ruang posisi digunakan sebagai pembanding dari hasil penyelesaian ruang momentum dengan kita tinjau harga harap energi apakah sama atau tidak. Apabila sama maka solusi persamaan Schrödinger atom hidrogenik dapat dikerjakan dalam ruang momentum apabila tidak, maka kita tinjau lagi perumusan awal persamaan Schrödinger ruang momentum.

DAFTAR PUSTAKA

Arfken, G.B. & Weber, H.J. 1966, 1987. *Mathematical Method for Physicist.* Fifth Edition. New York : Harcourt Academic Press.

Boas, L. M. 1996. *Mathematical Method in The Physical Sciences.* New York : York : John Wiley & Sons.

Bransden, B.H. & Joachain, J.C. 1983. *Physics of Atoms and Molecules.* New York : John Wiley & Sons.

Byron, F.W. & Fuller, R.W. 1970. *Mathematical of Classical and Quantum Mechanics Physics*, Vol. 2. Canada : Addison-Wesley.

Davalos, A.L. & Zanette, D. 1999. *Fundamental of Electromagnetics.* Berlin : Springer Verlog.

Fromhold, T. A., dkk. 1992. *A Brief Theory of Quantum Mechanics.* California: ACADEMIC PRESS.

Greiner, W. 1994. *An Introduction Quantum Mechanics.* Berlin : Springer Verlog.

Griffiths, J. D. 1994. *Introduction to Quantum Mechanics.* New Jersey : Prentice-Hall.

Hänsch, T. W., Schawlow, A. L. dan Series, G. W. 1979. *The Spectrum of Atomic Hydrogen.* Sci. Amer.

Hey, J.D. 1992. *On The Momentum Representation of Hydrogenic Wave Function : Some Properties and Aplication.* Am. J. Phys.**61** [Januari 1993]. Jerman.

Krane, K. 1992. *Fisika Modern.* Jakarta : UI-PRESS.

Matthew. 1982. *Introduction to Quantum Mechanics.* New Delhi : TATA McGRAW-HILL Publishing Co.

Podolsky & Pauling. 1929. *The Momentum Distribution in Hydrogen-Like Atom.* Phys. Rev. **34** [1 Juli 1929]. Berkeley.

Silaban, P. & Wospakrik, H. 1984. *Transformasi Laplace*. Jakarta : Penerbit Erlangga.

Suhartono. 2004. *Perhitungan Numeris Berbasisi Delphi untuk Tampang Lintang Hamburan Elastik Kuantum Elektron-Argon dengan Metode Analisis Gelombang Parsial*. Jember.

Thankappan, V.K. 1985. *Quantum Mechanics*. New Delhi : Wiley Estern.

Yanez, R.J., Assche, W.V., Ferez, G.R., Dehesa, J.S. 2000. Functionals of Gegenbauer Polynomial and D-dimensional Hydrogenic Momentum Expectation Value. http://jmp.aip.org/jmp/copyright.jsp. [22 Mei 2000].

Ziock, K. 1969. *Basic Quantum Mechanics*. New York : John Wiley & Sons.

Internet :

http:/mathworld.wolfram.com/LegendreFunctionoftheSecondKind.html

http:/mathworld.wolfram.com/GammaFunction.html

http://en.wikipedia.org/wiki/kernel_(mathematis).html

LAMPIRAN A

A.1 FORMULASI MEKANIKA KUANTUM

Formulasi mekanika kuantum yang dapat juga disebut mekanika gelombang, secara umum fungsi gelombangnya bergantung pada koordinat x, y, z dan waktu t yaitu $\psi = \psi(x,y,z,t)$. Khusus untuk satu dimensi fungsi gelombang ini hanya bergantung pada x dan t yaitu $\psi = \psi(x,t)$. Fungsi gelombang $\psi(x,t)$ dan kompleks konjugetnya $\psi^*(x,t)$ adalah titik focus dari mekanika kuantum, karena $\psi^*(x,t)\psi(x,t)dx$ menyatakan probabilitas menemukan partikel yang berada dalam interval x dan x+dx, suatu hal yang bermakna fisis dan riil. Hasil $\psi^*(x,t)\psi(x,t)$ itu merupakan jendela dari mekanika kuantum yang abstrak ke dunia yang nyata.

Selanjutnya variable fisis yang didapat dari fisika klasik dalam mekanika kuantum diwakili oleh sebuah operator yang bekerja pada suatu fungsi gelombang. Dalam mekanika kuantum, variable dinamika merupakan operator yang bekerja pada fungsi gelombang. Sebagai contoh $\frac{d}{dx}$ merupakan operator differensial dan $\frac{d}{dx}\psi(x,t)$ menyatakan operator differensial yang bekerja atau beroperasi pada fungsi gelombang $\psi(x,t)$. Bentuk operasi yang sama akan digunakan pada persamaan gelombang mekanika kuantum yaitu persamaan Schrödinger, dimana operator energi $\hat{H}$ bekerja pada $\psi(\bar{r},t)$.

Selanjutnya mekanika kuantum bekerja berdasarkan suatu formulasi yang dituangkan dalam bentuk postulat-postulat. Postulat mekanika kuantum dalam hal ini tidak dapat dibuktikan kebenarannya meskipun sejauh ini cukup baik untuk menelaah alam mikro. Postulat adalah hipotesis yang jika tidak melanggar hasil-hasil experiment yang sudah diperoleh. Berikut adalah postulat-postulat mekanika kuantum yang memberi landasan dimana mekanika kuantum bekerja.

Postulat 1

Fungsi gelombang $\psi(x,y,z,t)$ menggambarkan evolusi ruang waktu pertikel kuantum $\psi(x,y,z,t)$ mengandung semua informasi yang ingin diketahui dari sistem. Fungsi gelombang $\psi(x,t)$ mengungkapkan gerak partikel dalam satu dimensi.

Postulat 2

Hasil $\psi^*(x,t)\psi(x,t)$ adalah fungsi rapat probabilitas menemukan partikel. Dalam mekanika kuantum, $\psi^*(x,t)\psi(x,t)dx$ adalah probabilitas untuk menemukan partikel dalam ruang, yang memenuhi syarat normalisasi.

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\psi(x,t)dx = 1. \qquad \text{(A.1)}$$

Jika fungsi gelombang $\psi(x,t)$ memenuhi persamaan (2.1) maka $\psi(x,t)$ disebut fungsi gelombang ternormalisasi.

Postulat 3

Fungsi gelombang $\psi(x,t)$ dan turunannya $\frac{d}{dx}\psi(x,t)$ harus kontinu dalam daerah isotropik, yaitu :

$$\lim_{x\to x_o}\psi(x,t) = \psi(x_o,t). \qquad \text{(A.2)}$$

$$\lim_{x\to x_o}\frac{d}{dx}\psi(x,t) = \frac{d}{dx}\psi(x,t)\,\Big|_{x=x_o}. \qquad \text{(A.3)}$$

Dengan kata lain $\psi(x,t)$ adalah kontinu dan merupakan fungsi terdeferensial kontinu

Postulat 4

Operator dalam mekanika kuantum digunakan untuk mengganti variable dinamika milik mekanika klasik. Operator ini akan beroperasi pada suatu fungsi gelombang $\psi(x,t)$. Dalam mekanika klasik, variable seperti posisi, momentum atau energi dinamakan variable dinamik. Tabel A.1 menyatakan variable dinamik dan ekivalesinya dengan operator pada mekanika kuantum .

Tabel A.1 Variabel dinamik dan operator mekanika kuantum

Variable dinamik pada mekanika klasik	Operator dalam mekanika kuantum
x	$\hat{x} = x$
f(x)	$\hat{f}(x)$
P_x	$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$
f(p)	$\hat{f}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)$
E_{totsl}	$\hat{E} = \frac{-\hbar}{i}\frac{d}{dt}$

Energi total dalam mekanika klasik adalah :

$$\frac{p^2}{2m} + V_{(x)} = E_{total}. \tag{A.4}$$

Kita subtitusikan $\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ dan $\hat{E} = \frac{-\hbar}{i}\frac{d}{dt}$, dan dioperasikan pada $\psi(x,t)$ sehingga akan menghasilkan persamaan gelombang Schrodinger mekanika kuantum :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x,t) + V\psi(x,t) = \frac{-\hbar}{i}\frac{d}{dt}\psi(x,t). \tag{A.5}$$

Persamaan Schrodinger ini adalah persamaan differensial yang akan di gunakan utnuk menelaah alam mikroskopik, untuk satu dimensi.

<u>Postulat 5</u>

Harga harap variable dinamik yang dalam mekanika kuantum diwakili operator ξ dinyatakan dengan rumus :

$$<\xi>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)\xi\psi(x,t)dx. \tag{A.6}$$

Dimana ξ adalah operator dari variable dinamika ξ. Harga harap dari variable ini seperti nilai rata-rata dalam pengukuran klasik. Lima postulat di atas adalah ringkasan dari prinsip-prinsip mekanika kuantum. Sebagai contoh, harga harap pengukuran posisi x dalam mekanika kuantum dituliskan dengan :

$$<x>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x,t)x\psi(x,t)dx. \tag{A.7}$$

Selanjutnya berkaitan dengan harga harap maka ada simpangan terhadap harga harap yang untuk posisi dirumuskan sebagai berikut :

$$\sigma=\left(<x^2>-<x>^2\right)^{1/2}. \tag{A.8}$$

Harga harap dari momentum partikel dapat diperoleh dari :

$$<p>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\left[\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right]\psi(x)dx, \tag{A.9}$$

dengan simpangan pengukuran momentum adalah :

$$\Delta p=\left(<p^2>-<p>^2\right)^{1/2}. \tag{A.10}$$

Dengan cara yang sama, harga dari energi kinetik, energi potensial dan energi total dapat dihitung jika $\psi(x)$ dan $V(x)$ diketahui. Harga harap itu dinyatakan sebagai berikut :

$$<E_{kin}>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*{}_{(x)}\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi_{(x)}dx. \tag{A.11}$$

Energi potensial :

$$<U>=\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*{}_{(x)}V\psi_{(x)}dx. \tag{A.12}$$

(Schubert, 2003)

LAMPIRAN B

B.1 FUNGSI POLINOM LEGENDRE

Fungsi generasi dari polinomial Legendre adalah :

$$g(t,x) = (1-2xt+t^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)t^n, |t| \leq 1. \qquad \text{(B.1)}$$

Aplikasi dalam fisika persamaan di atas sering muncul dalam bentuk vektor.

$$\frac{1}{|r_1 - r_2|} = \frac{1}{r_>}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{r_<}{r_>}\right)^n P_n(\cos\theta), \qquad \text{(B.2)}$$

Menggunakan teorema binomial, dapat mengubah fungsi generasi menjadi :

$$(1-2xt+t^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)^2}(2xt-t^2)^n$$

$$= 1 + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}(2xt-t^2)^n. \qquad \text{(B.3)}$$

Untuk polinomial Legendre jenis pertama menyatakan P_0, P_1 dan P_2, dibutuhkan koefisien dari t^0, t^1, dan t^2. Pangkat dari t muncul hanya dalam bentuk $n = 0,1,$ dan 2, dan dapat dilakukan pendekatan, yang pertama tiga hubungan dari deret infinite :

$$\frac{0!}{2^0(0!)^2}(2xt-t^2)^0 + \frac{2!}{2^2(1!)^2}(2xt-t^2)^1 + \frac{4!}{2^4(2!)^2}(2xt-t^2)^2$$

$$= 1t^0 + xt^1 + \left(\frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}\right)t^2 + 0(t^3). \qquad \text{(B.4)}$$

Dari persamaan (B.1) diperoleh :

$P_0 = 1, \qquad P_1(x) = x, \qquad P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2},$

Dalam koordinat polar bola persamaan Legendre adalah :

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dv}{d\theta}\right) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]v = 0. \qquad \text{(B.5)}$$

Dengan $x = \cos\theta$ maka :

$$(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2}v(x) - 2x\frac{d}{dx}v(x) + \left[n(n+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right]v(x) = 0. \qquad \text{(B.6)}$$

$$v \equiv P_n{}^m(x) = (1-x^2)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_n(x). \qquad \text{(B.7)}$$

dengan $P_n(x) = \frac{1}{2^l l!}\left(\frac{d}{dx}\right)^l (x^2-1)^l.$ (B.8)

Jika $x = \cos\theta$,

$$P_l^m(\cos\theta) = \left(1-\cos^2\theta\right)^{\left|\frac{m}{2}\right|}\frac{d^{|m|}}{d(\cos\theta)^{|m|}}\frac{1}{2^l l!}\frac{\partial^l}{\partial(\cos\theta)^l}\left(\cos^2\theta - 1\right)^l. \qquad \text{(B.9)}$$

n = 1, 2, 3, …., l = 0, 1, 2, … (n-1), $|m| \le l$

(Arfken & Weber, 1966;1987)

LAMPIRAN C

C.1 Daftar nilai fungsi polinomial Legendre

Tabel. C.1 Daftar nilai fungsi polinomial Legendre pada persamaan (2.51)

l	$P_l^m(\cos\theta)$
0	$P_0^0(\cos\theta) = 1$
1	$P_1^0(\cos\theta) = \cos\theta$ $P_1^1(\cos\theta) = \sin\theta$
2	$P_2^0(\cos\theta) = \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)$ $P_2^1(\cos\theta) = 3\sin\theta\cos\theta$ $P_2^2(\cos\theta) = 3\sin^2\theta$
3	$P_3^0(\cos\theta) = \frac{1}{2}\cos\theta(5\cos^2\theta - 3)$ $P_3^1(\cos\theta) = \frac{3}{2}\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)$ $P_3^2(\cos\theta) = 15\sin^2\theta\cos\theta$ $P_3^3(\cos\theta) = 15\sin^3\theta$
4	$P_4^0(\cos\theta) = \frac{1}{8}(35\cos^4\theta - 30\cos^2\theta + 3)$ $P_4^1(\cos\theta) = \frac{5}{2}\sin\theta(7\cos^3\theta - 3\cos\theta)$ $P_4^2(\cos\theta) = \frac{15}{2}\sin^2\theta(7\cos^2\theta - 1)$ $P_4^3(\cos\theta) = 105\sin^3\theta\cos\theta$ $P_4^4(\cos\theta) = 105\sin^4\theta$

(Griffiths, 1994)

LAMPIRAN D

D.1 TETAPAN NORMALISASI DARI PERSAMAAN (2.43)

$$\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\phi = \int_0^{2\pi} \left(Ce^{-im\phi}\right)\left(Ce^{im\phi}\right) d\phi = 1$$

$$C^2(2\pi) = 1$$

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

D.2 TETAPAN NORMALISASI DARI PERSAMAAN (2.49)

$$C = \int_0^{2\pi} \Phi^*(\phi)\Phi(\phi) d\phi$$

$$\int_0^{2\pi} \left(CP_l^m(\cos\theta)\right)\left(CP_l^m(\cos\theta)\right) d\theta = 1$$

$$C^2 \int_0^{2\pi} \left(P_l^m(\cos\theta)\right) d\theta = 1$$

$$C^2 = \frac{(-1)^{2m}}{\left(\frac{2\pi}{2l+1}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\right)}$$

$$C = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2\pi}\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}$$

(Matthew, 1982)

LAMPIRAN E

E.1 FUNGSI POLINOM LAGUERE

Persamaan diferensial Laguere :

$$xy'' + (1-x)y' + ny = 0 \qquad \text{(E.1)}$$

Mencoba mempresentasikan y, atau y_n karena y akan tergantung pada n, dengan bentuk integral :

$$y_n(x) = \frac{1}{2\pi i}\oint \frac{e^{-xz/(1-z)}}{(1-z)z^{n+1}}dz, \qquad \text{(E.2)}$$

Dengan menurunkan eksponensial persamaan (E.2) :

$$y'_n(x) = -\frac{1}{2\pi i}\oint \frac{e^{-xz/(1-z)}}{(1-z)^2 z^n}dz,$$

$$y''_n(x) = \frac{1}{2\pi i}\oint \frac{e^{-xz/(1-z)}}{(1-z)^3 z^{n-1}}dz.$$

Subtitusi kedalam bagian kiri persamaan (E.1) akan diperoleh :

$$\frac{1}{2\pi i}\oint \left[\frac{x}{(1-z)^3 z^{n-1}} - \frac{1-x}{(1-z)^2 z^n} + \frac{n}{(1-z)z^{n+1}}\right] e^{-xz/(1-z)}dz.$$

Yang sama dengan :

$$\frac{1}{2\pi i}\oint \frac{d}{dz}\left[\frac{e^{-xz/(1-z)}}{(1-z)z^n}\right]dz.$$

Jika mengintegralkan semua diferensial sepanjang garis yang dipilih maka nilai terakhir sama dengan nilai awal, integralnya akan habis, ini menyatakan bahwa $y_n(x)$ adalah solusi dari polinomial Laguere.

Didefinisikan polinomial Laguere yaitu :

$$L_n(x) = \frac{1}{2\pi i}\oint \frac{d}{dz}\left[\frac{e^{-xz/(1-z)}}{(1-z)z^{n+1}}\right]dz$$

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n}\left(x^n e^{-x}\right) \qquad \text{(E.2)}$$

Ini seharusnya apa yang dapat dihasilkan dari deret :

$$g(x,z) = \frac{e^{-xz/(1-z)}}{(1-z)} = \sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) z^n, |z| < 1.$$

Jika dikalikan dengan z^{-n-1} dan mengintegralkan sepanjang titik asal. Dengan transformasi :

$$\frac{xz}{(1-z)} = s - x \text{ atau } z = \frac{s-x}{s},$$

$$L_n(x) = \frac{e^x}{2\pi i} \oint \frac{s^n e^{-s}}{(s-x)^{n+1}} ds .$$

Akan memberikan rumus Rodrigue's untuk polinomial Laguere. Dari tinjauan ini untuk $L_n(x)$ dinyatakan dalam bentuk deret :

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

$$= \sum_{m=0}^{n} \frac{(-1)^m n! x^m}{(n-m)! m! m!} = \sum_{s=0}^{n} \frac{(-1)^{n-s} n! x^{n-s}}{(n-s)!(n-s)! s!}.$$

n = 1, 2, 3, ...

Tabel. E.1 Polinomial Laguere

$L_o(x) = 1$

$L_1(x) = -x + 1$

$L_2(x) = x^2 - 4x + 2$

$L_3(x) = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6$

$L_4(x) = x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24$

$\ldots$dst

(Arfken & Weber, 1987;1966)

LAMPIRAN F

F.1 EKSPANSI GELOMBANG BIDANG

Gelombang bidang $(i\overline{p}.\overline{r})$ dapat direpresentasikan sebagai kombinasi gelombang-gelombang bola :

$$\exp(i\overline{q}.\overline{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+l} a_{lm}(\overline{q})\psi(\overline{r})$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+1} a_{lm}(\overline{q})R_l(\overline{q},\overline{r})Y_{lm}(\theta,\phi)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{+1} a_{lm}(\overline{q})j_l(pr)Y_{lm}(\theta,\phi). \qquad \text{(F.1)}$$

Koefisien a_{lm} dipilih pada sumbu z sepanjang k, maka $(\overline{q}.\overline{r}) = qr\cos\theta = qz$.

Jelas bahwa dari ruas kiri bebas dari sudut azimut Φ. Oleh karena itu ruas kanan perlu dimodifikasi.

$$Y_{l0}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}}P_l(\cos\theta) \equiv Y_{l0} \rightarrow m = 0, \qquad \text{(F.2)}$$

dimana $P_l(x)$ adalah Polinomial Legendre orde ke-l. Persamaan (F.1) dapat disederhanakan

$$\exp(i\rho x) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l j_l(\rho)P_l(x),$$

dengan $c_l = \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}}a_{l0}; \rho = qr; x = \cos\theta$. (F.3)

Menurunkan persamaan (F.3) terhadap ρ akan diperoleh koefisien c_l :

$$ix\exp(i\rho x) = \frac{d}{d\rho}\left[\sum_{l=0}^{\infty} c_l j_l(\rho)P_l(x)\right]$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} c_l \frac{d(j_l(\rho))}{d\rho}P_l(x). \qquad \text{(F.4)}$$

Dari hubungan matematis untuk fungsi Bessel bola diperoleh :

$$lj_l(\rho)-(l+1)j_{l+1}(\rho)=(2l+1)\frac{dj_l(\rho)}{d\rho}$$

atau $$\frac{dj_l(\rho)}{d\rho}=\frac{lj_l(\rho)-(l+1)j_{l+1}(\rho)}{(2l+1)}. \qquad \text{(F.5)}$$

Dengan mensubtitusikan persamaan (F.5) ke persamaan (F.4) didapatkan :

$$ix\exp(i\rho x)=\sum_{l=0}^{\infty}c_l\left[\frac{lj_{l-1}(\rho)-j_{l+1}(\rho)}{(2l+1)}\right]P_l(x)$$

$$=\sum_{l=0}^{\infty}c_l\left[\frac{l}{2l+1}\right]j_{l-1}(\rho)P_l(x)-\sum_{l=0}^{\infty}c_l\left[\frac{l+1}{2l+1}\right]j_{l+1}(\rho)P_l(x). \qquad \text{(F.6)}$$

Persamaan (F.4) kemudian dapat diekspansi dalam hubungan fungsi polinomial Legendre.

$$ix\exp(i\rho x)=ix\left[\sum_{l=0}^{\infty}c_lj_l(\rho)P_l(x)\right]$$

$$=i\sum_{l=0}^{\infty}c_lj_l(\rho)[xP_l(x)]$$

$$=i\sum_{l=0}^{\infty}c_lj_l(\rho)\left[\frac{l+1}{2l+1}P_{l+1}(x)+\frac{l}{2l+1}P_{l-1}(x)\right]$$

$$=i\sum_{l=0}^{\infty}c_l\left(\frac{l+1}{2l+1}\right)j_l(\rho)P_{l+1}(x)+i\sum_{l=0}^{\infty}c_l\left(\frac{l}{2l+1}\right)j_l(\rho)P_{l-1}(x). \qquad \text{(F.7)}$$

Persamaan (F.6) dan persamaan (F.7) lalu disamakan yaitu :

$$\sum_{l=0}^{\infty}c_l\left[\frac{l}{2l+1}\right]j_{l-1}(\rho)P_l(x)-\sum_{l=0}^{\infty}c_l\left[\frac{l+1}{2l+1}\right]j_{l+1}(\rho)P_l(x)=$$

$$\left[i\sum_{l=0}^{\infty}c_l(\frac{l+1}{2l+1})j_l(\rho)P_{l+1}(x)+i\sum_{l=0}^{\infty}c_l(\frac{l}{2l+1})j_l(\rho)P_{l-1}(x)\right] \qquad \text{(F.8)}$$

$$\sum_{l=0}^{\infty}c_l\left[\frac{l}{2l+1}\right]j_{l-1}(\rho)P_l(x)-\sum_{l=0}^{\infty}c\left[\frac{l+1}{2l+1}\right]j_{l+1}(\rho)P_l(x)=$$

$$\left[i\sum_{l=0}^{\infty}c_{l-1}(\frac{l}{2l-1})j_{l-1}(\rho)P_l(x)-i\sum_{l=0}^{\infty}c_{l+1}(\frac{l+1}{2l+3})j_{l+1}(\rho)P_l(x)\right] \quad (F.9)$$

$$\sum_{l=0}^{\infty}c_l(\frac{l}{2l+1})j_{l-1}(\rho)-\sum_{l=0}^{\infty}c_l\left[\frac{l+1}{2l+1}\right]j_{l+1}=$$

$$\left[i\sum_{l=0}^{\infty}c_{l-1}(\frac{l}{2l-1})j_{l-1}(\rho)-i\sum_{l=0}^{\infty}c_{l+1}(\frac{l+1}{2l+3})j_{l+1}(\rho)\right]. \quad (F.10)$$

Apabila suku pertama ruas kiri dan suku pertama ruas kanan persamaan (F.10) disamakan maka akan diperoleh hubungan rekursif sebagai berikut :

$$\sum_{l=0}^{\infty}c_l\left[\frac{l}{2l+1}\right]j_{l-1}(\rho)=\sum_{l=0}^{\infty}c_{l-1}(\frac{l}{2l-1})j_{l-1}(\rho)$$

$$c_l(\frac{l}{2l+1})=ic_{l-1}(\frac{l}{2l+1}) \quad (F.11)$$

$$c_l=i\left(\frac{2l+1}{2l-1}\right)c_{l-1}, \qquad l\geq 1.$$

Setelah diuji dengan jalan memasukkan nilai 1, hubungan rekursif di atas dapat dituliskan ulang sebagai :

$$c_l=i^l\,2l+1c_0. \quad (F.12)$$

Koefisien c_0 dapat ditentukan dengan menggunakan persamaan (F.3), yaitu :

$$\exp(i\rho x)=\sum_{l=0}^{\infty}c_lj_l(\rho)P_l(x)\rightarrow\rho=0$$

$$\exp(0)=\sum_{l=0}^{\infty}c_lj_l(0)P_l(x)$$

$$1=c_0j_0(0)P_0(x)\rightarrow l=0;j_0(0)=\delta_{00}=1;P_0(x)=1$$

$$1=c_0. \quad (F.13)$$

Jadi persamaan (F.12) boleh dituliskan lagi menjadi :

$$c_l=i^l\,2l+1.$$

Hasil ini lalu disubtitusikan kembali ke persamaan (F.3) :

$$\exp(i\rho x) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l j_l(\rho) P_l(x)$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(\rho) P_l(x). \qquad \text{(F.14)}$$

$$\int_{-1}^{+1} P_l(x) P_l(x) dx = \frac{2}{2l+1}$$

Persamaan (F.14) ini dikenal sebagai *formula/ rumus Bauer*
(Suhartono, 2004 : 52)

LAMPIRAN G

G.1 FUNGSI DELTA DIRAC

Fungsi delta dirac $\delta(x)$ diperkenalkan oleh P.A.M. Dirac dalam memberlakukan vektor eigen menjadi nilai eigen yang kontinu dari operator linier (Misalnya, fungsi eigen momentum $u_{\bar{p}}(\bar{r}) = C\exp(i\bar{p}.\bar{r})$). Dalam kasus spektrum diskrit, sifat orthonormal dari vektor eigen $(u_{\bar{p}}(x))$ ditunjukkan oleh hubungan :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_{\bar{p}}{}^*(x) \phi_{\bar{p}'}(x) dx = \delta_{\bar{p},\bar{p}'}. \qquad \text{(G.1)}$$

Dimana $\delta_{\bar{p},\bar{p}'}$ adalah fungsi delta Knocker, didefinisikan oleh :

$$\delta_{\bar{p},\bar{p}} = 1, \text{ untuk } \bar{p} = \bar{p}' \qquad \text{(G.2)}$$

$$= 0, \text{ untuk } \bar{p} \neq \bar{p}'.$$

Ketika spektrum adalah kontinu ($\bar{p}$ adalah variabel kontinu), normalisasi dari vektor eigen ditunjukkan persamaan (G.1) dengan fungsi delta Knocker diubah menjadi fungsi delta dirac :

$$u_{\bar{p}}{}^*(x) u_{\bar{p}'}(x) dx = \delta(\bar{p} - \bar{p}'). \qquad \text{(G.3)}$$

Sama dengan (G.2), $\delta(\bar{p} - \bar{p}')$ dapat didefinisikan :

$$\delta(\bar{p} - \bar{p}') = 0 \text{ untuk } \bar{p} \neq \bar{p}'. \qquad \text{(G.4a)}$$

Bagaimanapun, menjadi fungsi kontinu dari $(\bar{p}-\bar{p}')$, maka $\delta(\bar{p}-\bar{p}')$ tidak dapat didefinisikan sama untuk $\bar{p}=\bar{p}'$. Dalam kasus spektrum diskrit fungsi gelombang $\phi(x)$ dalam bentuk $u_{\bar{p}}$ oleh :

$$\phi(x)=\sum_{\bar{p}'} f_{\bar{p}} u_{\bar{p}}(x). \qquad \text{(G.5a)}$$

Menggunakan persamaan (G.1), dihasilkan :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_{\bar{p}'}*(x)\phi(x)dx=\sum_{\bar{p}} f_{\bar{p}} \int_{-\infty}^{+\infty} u_{\bar{p}'}*(x)u_{\bar{p}}(x)dx=\sum_{\bar{p}} f_{\bar{p}}\delta_{\bar{p}\bar{p}'}=f_{\bar{p}'}. \qquad \text{(G.3a)}$$

Hubungan yang sesuai menurut (G.5a), ketika spektrum kontinu adalah :

$$\phi(x)=\int_{-\infty}^{+\infty} f(\bar{p})u_{\bar{p}}(x)d\bar{p}. \qquad \text{(G.5b)}$$

dimana $f(\bar{p})$ adalah fungsi kontinu untuk $\bar{p}$, mengalikan kedua sisi pada persamaan (G.5b) dengan $u_{\bar{p}'}*(x)$ dan mengintegralkan sepanjang x, digunakan perumusan pada persamaan (G.3) sehingga :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_{\bar{p}'}*(x)\phi(x)dx=\int_{-\infty}^{+\infty} f(\bar{p})\delta(\bar{p}-\bar{p}')d\bar{p}. \qquad \text{(G.6b)}$$

Dengan melihat persamaan (G.3a), maka :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\bar{p})\delta(\bar{p}-\bar{p}')d\bar{p}=f(\bar{p}'). \qquad \text{(G.4b)}$$

Persamaan di atas dalam penjumlahan untuk menyatakan secara tidak langsung persamaan (G.4a), di definisikan $\delta(\bar{p}-\bar{p}')$ untuk $\bar{p}=\bar{p}'$ adalah sama. Oleh karena itu persamaan (G.4b) dapat didefinisikan menjadi fungsi delta dirac. Subtitusi $f(\bar{p})=$ c (konstanta) pada persamaan (G.4b) didapatkan.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\bar{p}-\bar{p}')d\bar{p}=1. \qquad \text{(G.4c)}$$

(Thankapan, 1985 : 489)

LAMPIRAN H

H.1 Polinomial Gegenbauer

Polinomial Gegenbauer $\{C_n^{\lambda}(x); n = 0,1,...\}$ bentuk sistem orthogonal polinomial dengan fungsi :

$$\omega_{\lambda}(x) = (1 - x^2)^{\lambda - ½}.$$

interval $[-1,+1]$. Polinomial Gegenbauer C_k^{ν}(x) adalah solusi dari persamaan diferensial Gegenbauer untuk bilangan bulat n. Polinomial Gegenbauer merupakan generalisasi dari polinomial Legendre, bila kita gunakan hubungan dengan polinomial Gegenbauer yaitu :

$$(-1)^{\nu} \frac{(1-t^2)^{-½} \nu! 2^{\nu}}{(2\nu)!} P_k^{\nu}(x) = C_{k-\nu}^{\nu+½}(x)$$

dan sebanding dengan polinomial *ultraspherical* $P_k^{(\nu)}(x)$. Polinomial ini biasanya muncul untuk menggambarkan bermacam-macam gagasan matematika (misalnya fungsi Legendre, bola dan harmonik hiperspherikal) dan fenomena fisika. Polinomial Gegenbauer termasuk didalam fungsi gelombang dari sistem dalam pusat potensial dalam ruang posisi dan momentum, dan dalam bagian radial dari fungsi gelombang dari sistem hidrogenik dalam ruang momentum.

I. Fungsi Umum Gegenbauer

Teorema 1 : Fungsi Gegenbauer

$$F_n^{\lambda}(f) = \int_{-1}^{+1} (1 - x^2)^{\lambda - ½} \left[C_n^{\lambda}(x)\right]^2 f(x) dx, \qquad \text{(H.1)}$$

memenuhi hubungan rekursi :

$$\left(\frac{n}{2\lambda}\right)^2 F_n^{\lambda}(f) - \left(\frac{n + 2\lambda - 1}{2\lambda}\right)^2 F_{n-1}^{\lambda}(f) = F_{n-2}^{\lambda+1}(f) - F_{n-1}^{\lambda+1}(f). \qquad \text{(H.2)}$$

Pembuktian : Hubungan rekursi polinomial Gegenbauer adalah :

$$\left(\frac{n}{2\lambda}\right)^2 \left[C_n^{\lambda}(x)\right]^2 = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\lambda+k}{\lambda}\left[C_n^{\lambda}(x)\right]^2 - (1-x^2)\left[C_{n-1}^{\lambda+1}(x)\right]^2 \qquad \text{(H.3)}$$

Mengalikan kedua sisi dengan $(1-x^2)^{\lambda-1/2} f(x)$ dan di integrasikan, menghasilkan :

$$\left(\frac{n}{2\lambda}\right)^2 F_n^{\lambda}(f) = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\lambda+k}{\lambda} F_n^{\lambda}(f) - F_{n-1}^{\lambda+1}(f), \qquad \text{(H.4)}$$

Yang memberikan rekursi dalam n dan λ untuk $F_n^{\lambda}(f)$. Persaman (H.4) untuk n sedangkan untuk $n-1$:

$$\left(\frac{n}{2\lambda}\right)^2 F_n^{\lambda}(f) - \left(\frac{n-1}{2\lambda}\right)^2 F_{n-1}^{\lambda}(f) = \frac{n-1+\lambda}{\lambda} F_{n-1}^{\lambda}(f) + F_{n-2}^{\lambda+1}(f) - F_{n-1}^{\lambda+1}(f),$$

$$\left(\frac{n}{2\lambda}\right)^2 F_n^{\lambda}(f) - \left(\frac{n+2\lambda-1}{2\lambda}\right)^2 F_{n-1}^{\lambda}(f) = F_{n-2}^{\lambda+1}(f) - F_{n-1}^{\lambda+1}(f), \qquad \text{(H.5)}$$

II. Beberapa Fungsi Gegenbauer

Teorema 2 : Fungsi Gegenbauer $F_n^{\lambda}(\alpha,\beta) = F_n^{\lambda}(1-x)^{\alpha}(1-x)^{\beta}$ didefinisikan :

$$F_n^{\lambda}(\alpha,\beta) = \int_{-1}^{1} (1-x^2)^{\lambda-1/2}\left[C_n^{\lambda}(x)\right]^2 (1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}\, dx \qquad \text{(H.6)}$$

Mempunyai nilai, yaitu :

$$F_n^{\lambda}(\alpha,\beta) = \frac{\sqrt{\pi}\,\Gamma(\lambda+\alpha+\tfrac{1}{2})\Gamma(\lambda+\beta+\tfrac{1}{2})}{\Gamma(\lambda+\frac{\alpha+\beta+1}{2})\Gamma\left(\lambda+\frac{\alpha+\beta}{2}+1\right)}\left(\frac{(2\lambda)_n}{n!}\right)^2$$

$$\mathrm{x}\;{}_5F_4\left[\begin{matrix} -n, \lambda, n+2\lambda, \lambda+\alpha+\frac{1}{2}, \lambda+\beta+\frac{1}{2} \\ 2\lambda, \lambda+\frac{1}{2}, \lambda+1, \lambda+\frac{\alpha+\beta+1}{2}, \lambda+\frac{\alpha+\beta}{2} \end{matrix} ;1\right] \qquad \text{(H.7)}$$

Pembuktian : Polinomial Gegenbauer mempunyai representasi hipergeometrik

$$C_n^{\lambda}(x) = \frac{(2\lambda)_n}{n!}\,{}_2F_1\left(\begin{matrix} -n, n+2\lambda \\ \lambda+\frac{1}{2} \end{matrix} ;1-x/2\right) \tag{H.8}$$

Jika digunakan formula transformasi kuadratik akan memberikan :

$$C_n^{\lambda}(x) = \frac{(2\lambda)_n}{n!}\,{}_2F_1\left(\begin{matrix} -n, n/2+2 \\ \lambda+\frac{1}{2} \end{matrix} ;1-x^2\right) \tag{H.9}$$

Untuk n yang tetap akan mengakhiri deret hipergeometrik, tetapi untuk n tak tetap tidak mengakhiri deret. Untuk mengakhiri deret menggunakan formula Clausen diperoleh :

$$\left[C_n^{\lambda}(x)\right]^2 = \left(\frac{(2\lambda)_n}{n!}\right)^2 {}_2F_1\left(\begin{matrix} -n, n+2\lambda, \lambda \\ 2\lambda, \lambda+\frac{1}{2} \end{matrix} ;1-x^2\right) \tag{H.10}$$

Menggunakan persamaan di atas pada persamaan (H.6) memberikan :

$$F_n^{\lambda}(\alpha,\beta) = \left(\frac{(2\lambda)_n}{n!}\right)^2 \sum_{k=0}^{n} \frac{(-n)_k (n+2\lambda)_k (\lambda)_k}{(2\lambda)_k (\lambda+1/2)_k\, k!} \int_{-1}^{1} (1-x)^{\lambda-1/2+k+\alpha} (1+x)^{\lambda-1/2+k+\beta}\, dx \tag{H.11}$$

Integral terakhir dapat dievaluasi dalam bentuk fungsi gamma :

$$\int_{-1}^{1} (1-x)^{\lambda-1/2+k+\alpha} (1+x)^{\lambda-1/2+k+\beta}\, dx = 2^{2\lambda+2k+\alpha+\beta}\, \frac{\Gamma(\lambda+k+\alpha+1/2)\Gamma(\lambda+k+\beta+1/2)}{\Gamma(2\lambda+2k+\alpha+\beta+1)}$$

$$= \sqrt{\pi}\, \frac{\Gamma(\lambda+k+\alpha+1/2)\Gamma(\lambda+k+\beta+1/2)}{\Gamma(\lambda+k+\frac{\alpha+\beta+1}{2})\Gamma(\lambda+k+\frac{\alpha+\beta}{2}+1)}, \tag{H.12}$$

dimana untuk persamaan terakhir mengikuti dari formula yang sama dari fungsi gamma, oleh karena itu :

$$F_n^{\lambda}(\alpha,\beta)=\frac{\sqrt{\pi}\,\Gamma(\lambda+\alpha+\tfrac{1}{2})\Gamma(\lambda+\beta+\tfrac{1}{2})}{\Gamma(\lambda+\frac{\alpha+\beta+1}{2})\Gamma(\lambda+\frac{\alpha+\beta}{2}+1)}\left(\frac{(2\lambda)_n}{n!}\right)$$

$$\text{x}\sum_{k=0}^{n}\frac{(-n)_k(n+2\lambda)_k(\lambda)_k(\lambda+\alpha+\tfrac{1}{2})_k(\lambda+\beta+\tfrac{1}{2})_k}{(2\lambda)(\lambda+\tfrac{1}{2})(\lambda+\frac{\alpha+\beta+1}{2})(\lambda+\frac{\alpha+\beta}{2}+1)_k\,k!} \quad \text{(H.13)}$$

Persamaan diatas sama seperti persamaan (H.7). Jika $\alpha=\beta$ fungsi hipergeometrik menjadi lebih sederhana :

$$F_n^{\lambda}(\alpha,\alpha)=\frac{\sqrt{\pi}\,\Gamma(\lambda+\alpha+\tfrac{1}{2})}{\Gamma\lambda+\alpha+1)}\left(\frac{(2\lambda)_n}{n!}\right)^2 {}_4F_3\left(\begin{matrix}-n,n+2\lambda,\lambda,\lambda+\alpha+\tfrac{1}{2}\\ \\ 2\lambda,\lambda+\tfrac{1}{2},\lambda+\alpha+1\end{matrix};1\right) \quad \text{(H.14)}$$

Penyederhanaan yang lain ketika salah satu parameter nol,

$$F_n^{\lambda}(0,\beta)=\frac{\sqrt{\pi}\,\Gamma(\lambda+\tfrac{1}{2})\Gamma(\lambda+\beta+\tfrac{1}{2})}{\Gamma(\lambda+\frac{\beta+1}{2})\Gamma(\lambda+\frac{\beta}{2}+1)}\left(\frac{(2\lambda)_n}{n!}\right)^2 {}_4F_3\left(\begin{matrix}-n,n+2\lambda,\lambda,\lambda+\beta+\tfrac{1}{2}\\ \\ 2\lambda,\lambda+\frac{\beta+1}{2},\lambda+\frac{\beta}{2}+1\end{matrix};1\right) \quad \text{(H.15)}$$

juga untuk $\beta=1-\alpha$ diperoleh :

$$F_n^{\lambda}(\alpha,1-\alpha)=\frac{\sqrt{\pi}\,\Gamma(\lambda+\alpha+\tfrac{1}{2})\Gamma(\lambda-\alpha+\tfrac{3}{2})}{\Gamma(\lambda+1)\Gamma(\lambda+\frac{3}{2})}\left(\frac{(2\lambda)_n}{n!}\right)^2$$

$$\text{x}\,{}_5F_4\left(\begin{matrix}-n,n+2\lambda,\lambda,\lambda+\alpha+\tfrac{1}{2},\lambda-\alpha+\tfrac{3}{2}\\ \\ 2\lambda,\lambda+\frac{1}{2},\lambda+1,\lambda+\frac{3}{2}\end{matrix};1\right) \quad \text{(H.16)}$$

Fungsi generasi Polinomial Gegenbauer adalah :

$$(1-2xs+s^2)^{-v}=\sum_{k=0}^{v}C_k^{\,v}(x)S^k,|S|<1. \quad \text{(K.17)}$$

dengan $C_k^{\nu}(x) = \dfrac{2^n \Gamma(k+n)}{\Gamma(k)n!} x^n + \textit{lower order terms}$

Beberapa fungsi $C_k^{\nu}(x)$ adalah :

$$C_0^{\nu}(x) = \frac{2^0 \Gamma(\nu+0)}{\Gamma(\nu)0!} x^0 = 1.$$

$$C_1^{\nu}(x) = \frac{2^1 \Gamma(\nu+1)}{\Gamma(\nu)1!} x^1 = 2\nu x.$$

$$C_2^{\nu}(x) = \frac{2^2 \Gamma(\nu+2)}{\Gamma(\nu)2!} x^2 = 2\nu(\nu+1)x^2 - \nu.$$

(Yanez *et al*, 2000)

H.2 Fungsi Legendre Jenis Kedua Persamaan (4.40)

Fungsi legendre jenis kedua adalah solusi kedua $Q_l(x)$ dari persamaan diferensial Legendre. Fungsi Legendre jenis kedua ini sama mempunyai hubungan rekursi seperti polinomial Legendre. Fungsi Legendre jenis kedua dalam matematika disebut Legendre $Q[l,x]$.

$$Q_l(z) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{+1} \frac{1}{z-x} P_l(x)dx.$$

Beberapa fungsi $Q_l(z)$ yang pertama adalah :

$$Q_0(z) = \frac{1}{2}\ln\left(\frac{z+1}{z-1}\right).$$

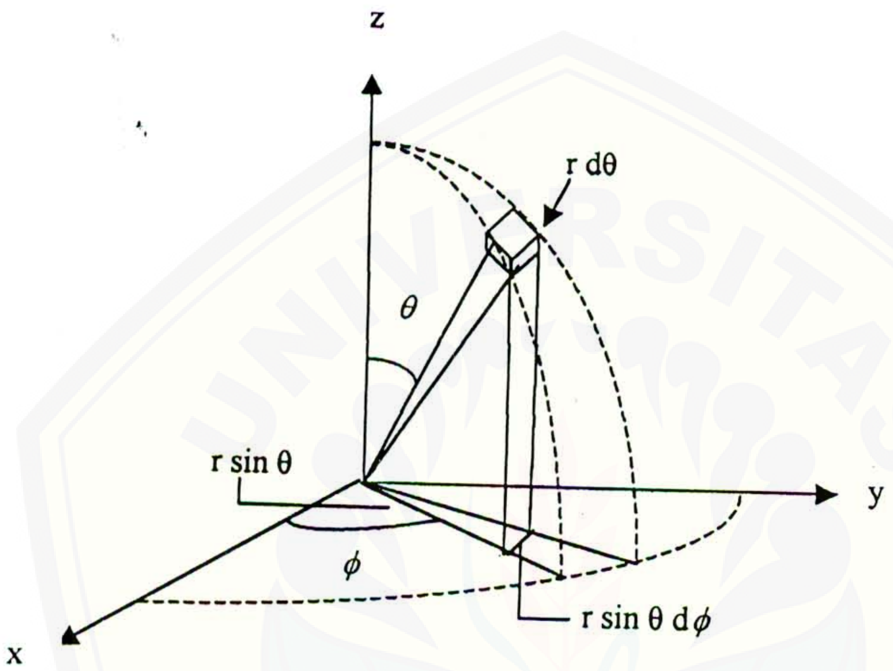
$$Q_1(z) = \frac{z}{2}\ln\left(\frac{z+1}{z-1}\right) - 1.$$

$$Q_2(z) = \frac{1}{4}(3z^2-1)\ln\left(\frac{z+1}{z-1}\right) - \frac{3z}{2}, etc.$$

http:/mathworld.wolfram.com/LegendreFunctionoftheSecondKind.htm.

LAMPIRAN I

I.1 Gambar Sistem Koordinat Bola



Gambar I.1 Sistem Koordinat Bola.

$$x = r\sin\theta\cos\phi \quad \text{(I.1)}$$

$$y = r\sin\theta\sin\phi \quad \text{(I.2)}$$

$$z = r\cos\theta \quad \text{(I.4)}$$

$$dv = \sin\theta\, r\, dr\, d\theta\, d\phi \quad \text{(I.3)}$$

(Krane, 1992)

LAMPIRAN J

J.1 Transformasi Fourier

Menurut teorema Fourier, dapat dinyatakan deret Fourier :

$$\psi(x) = \sum_{-\infty}^{+\infty} a_n \exp(inkx)\text{, dimana :} \tag{J.1}$$

$$a_n = \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} \psi(x)\exp(-inkx)dx\text{, dan} \tag{J.2}$$

$$k = \frac{2\pi}{L}. \tag{J.3}$$

Jika fungsi $\psi(x)$ tidak periodik (ketika periode $L = \infty$), deret Fourier persamaan (J.1) dari $\psi(x)$ sesuai diubah dalam bentuk persamaan (J.2) dan (J.3) menjadi tidak berarti ketika $L = \infty$.

Subtitusi persamaan (J.2) ke persamaan (J.1) diperoleh :

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} \psi(x')\exp[ink(x - x')]dx'. \tag{J.4}$$

Menggunakan hubungan persamaan (J.3) untuk maka :

$$\psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{L/2} \psi(x')\exp\left[\frac{2\pi in}{L}(x - x')dx'\right]. \tag{J.5}$$

Dengan $L = \infty$ dan menulis $\frac{1}{L} = \Delta s$, persamaan di atas menjadi :

$$\psi(x) = \sum_{-\infty}^{+\infty} \Delta s \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x')\exp(i2\pi n\Delta s(x - x'))dx', \tag{J.6}$$

$$\sum_{n=-\infty}^{+\infty} f(n\Delta s)\Delta s \approx \int_{-\infty}^{+\infty} f(s)ds, \Delta s \to 0. \tag{J.7}$$

demikian juga,

$$\sum_{-\infty}^{+\infty} \Delta s \exp(i2\pi n \Delta s(x-x')) \approx \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i2\pi s(x-x'))ds \tag{J.8}$$

Subtitusi persamaan (J.8) dalam persamaan (J.6) menghasilkan :

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty}\left\{\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x')\exp(-i2\pi s x')dx'\right\}\exp(i2\pi s x)ds \tag{J.9}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\phi(k)\exp(ikx)dk\,, \tag{J.10}$$

Dalam tiga dimensi menjadi :

$$\psi(r) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^3 \int_{-\infty}^{+\infty}\phi(k)\exp(ik.r)dk. \tag{J.11}$$

Dengan transformasi Fourier diperoleh :

$$\phi(k) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^3 \int_{-\infty}^{+\infty}\psi(r)\exp(-ik.r)dr. \tag{J.12}$$

Dengan $\phi(k)$ adalah fungsi gelombang dalam ruang momentum. Jika k adalah αk, konstanta $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ menjadi $\frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}}$. Sifat tertentu dari ϕ dapat diperoleh dari fungsi delta Dirac dalam tiga dimensi, yaitu :

$$\delta(\overline{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int \exp(i\overline{q}.r)dr\,, \text{ dengan } q = (\overline{p}' - \overline{p})$$

$$(2\pi)^3\delta(q) = \int \exp(iq.r)dr \tag{J.13}$$

(Thankappan, 1985 : 486)

LAMPIRAN K

Lampiran K.1 Mengubah operator integral ke operator diferensial persamaan (4.14)
Persamaan Schrödinger dalam ruang momentum :

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \mathrm{E}\right]\phi(\bar{p}) = -\int dp'\widetilde{V}(\bar{p}-\bar{p}')\phi(\bar{p}'). \qquad \text{(K.1)}$$

dengan $\widetilde{V}(\bar{p}-\bar{p}') = (2\pi)^{-3}\int drV(\bar{r})\exp\{i(\bar{p}'-\bar{p})\}\bar{r}$ (K.2)

bentuk potensialnya adalah operator integral, dapat diubah menggunakan operator diferensial.

Menggunakan relasi operator yang sudah umum dalam mekanika kuantum bahwa $\hat{r} = i\hbar\nabla_p$ dan $\bar{p} = i\hbar\nabla_r$ sehingga suku potensial dapat dituliskan :

$$V(\bar{r}) = V(\bar{r} = i\hbar\nabla) = V(i\hbar\nabla_p). \qquad \text{(K.3)}$$

Subtitusi persamaan di atas ke persamaan (K.2) dan dengan definisi integral fungsi Dirac maka :

$$\widetilde{V}(\bar{p}-\bar{p}') = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int drV(\bar{r})\exp\{i(\bar{p}'-\bar{p})\} \qquad \text{(K.4)}$$

$$= V(i\hbar\nabla_p\delta(\bar{p}-\bar{p}')). \qquad \text{(K.5)}$$

Subtitusi persamaan ini ke persamaan (K.1) diperoleh :

$$\mathrm{E}\phi(\bar{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2\mu}\phi(\bar{p}) + \frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\int dp'V(i\hbar\nabla_p)\delta(\bar{p}-\bar{p}')\phi(\bar{p}'). \qquad \text{(K.6)}$$

Menurut definisi fungsi Dirac berlaku :

$$\int dp\delta(\bar{p}-\bar{p}') = 1,$$

Sehingga persamaan (K.5) menjadi :

$$\mathrm{E}\phi(\bar{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2\mu}\phi(\bar{p}) + V(i\hbar\nabla_p)\phi(\bar{p}'). \qquad \text{(K.7)}$$

atau $\mathrm{E}\phi(\bar{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2\mu}\phi(\bar{p}) + V(i\nabla_p)\phi(\bar{p}')$, untuk $\hbar = 1$. (K.8)

Persamaan di atas adalah persamaan Schrödinger ruang momentum bentuk diferensial. Persamaan ini sebenarnya tidak lain adalah persamaan (1.8) yang kita ungkapkan sebelumnya. (Bransden & Joachain, 1983)

LAMPIRAN L

L.1 Ekspansi gelombang bidang polinomial Legendre

Hasil dari persamaan (4.20) pada pembahasan dapat dihitung juga dengan menggunakan ekspansi gelombang bidang polinomial Legendre yaitu dengan definisi:

$$\exp(i\overline{q}.\overline{r}) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(qr)P_l(\cos\theta). \tag{L.1}$$

Diperkenalkan potensial berbentuk :

$$\widetilde{V}(\overline{p}-\overline{p}') = (2\pi)^{-3}\int d\overline{r}V(\overline{r})\exp\{i(\overline{p}'-\overline{p})\}\overline{r} \tag{L.2}$$

Subtitusikan persamaan (L.1) ke persamaan (L.2) menjadi :

$$\widetilde{V}(\overline{p}-\overline{p}') = (2\pi)^{-2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l \int_0^{\infty} drr^2 j_l(qr)V(r)\int_0^{\pi} d\theta \sin\theta P_l(\cos\theta). \tag{L.3}$$

Jika integral berikut adalah : (Suhartono, 2004 : 50)

$$\int_0^{\pi} d\theta \sin\theta P_l(\cos\theta)P_{l'}(\cos\theta) = \frac{2}{2l+1}\delta_{ll'}. \tag{L.4}$$

untuk $P_0 = 1$, dari persamaan (L.3) bahwa semua suku-suku penjumlahan pada ruas kanan akan lenyap kecuali untuk $l = 1$. Sehingga $\widetilde{V}$ tersederhanakan menjadi :

$$\widetilde{V}(|\overline{p}-\overline{p}'|) = (2\pi)^{-2}\int_0^{\infty} drr^2 j_0(qr)V(r). \tag{L.5}$$

Persamaan di atas sama seperti persamaan (4.26) dengan $j_0(qr) = \dfrac{\sin(qr)}{qr}$.

(Bransden & Joachain, 1983)

LAMPIRAN M

M.1 Fungsi Gamma

Jika $p > 0$, didefinisikan fungsi gamma :

$$\Gamma(p) = \int_0^\infty x^{p-1} \exp(-x)dx, \tag{M.1}$$

Bentuk dari persamaan (M.1) yaitu :

$$\Gamma(p) = \int_0^\infty x^{p-1} \exp(-x)dx = (p-1)!, \tag{M.2}$$

$$\Gamma(p+1) = \int_0^\infty x^{p} \exp(-x)dx = p!. \tag{M.3}$$

$\Gamma(1) = 0! = 1$, $\Gamma(2) = 1! = 1$, $\Gamma(3) = 2! = 2.1 = 2$, $\Gamma(4) = 3! = 3.2 = 6$.

dengan mengubah p menjadi p+1 maka dapat dituliskan :

$$\Gamma(p+1) = \int_0^\infty x^{p} \exp(-x)dx = p!, p > -1. \tag{M.4}$$

$$\Gamma(p+1) = p!. \tag{M.5}$$

Jika mengintegralkan persamaan (M.3), dengan $x^p = u$, $e^{-x}dx = dv$, diperoleh :

$$\Gamma(p+1) = -x^p e^{-x} \Big|_0^\infty - \int_0^\infty (-e^{-x}) p x^{p-1} dx$$

$$= p\int_0^\infty x^{p-1} e^{-x} dx = p\Gamma(p). \tag{M.6}$$

$$\Gamma(p+1) = p\Gamma(p). \tag{M.7}$$

(Boas, 1996)

LAMPIRAN N

N.1 Transformasi Fourier langsung fungsi gelombang atom hidrogenik.

Transformasi dari $\psi\ (\vec{p}) \leftrightarrow \psi\ (\vec{r})$:

$$\begin{aligned}\psi(\vec{p}) &= \hbar^{-3/2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}\,\psi(\vec{r})\,d^3\vec{r}\ ,\\ &= \hbar^{-3/2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\frac{\vec{p}}{\hbar}\cdot\vec{r}}\,\psi(\vec{r})\,d^3\vec{r}\ ,\end{aligned} \tag{N.1}$$

dengan

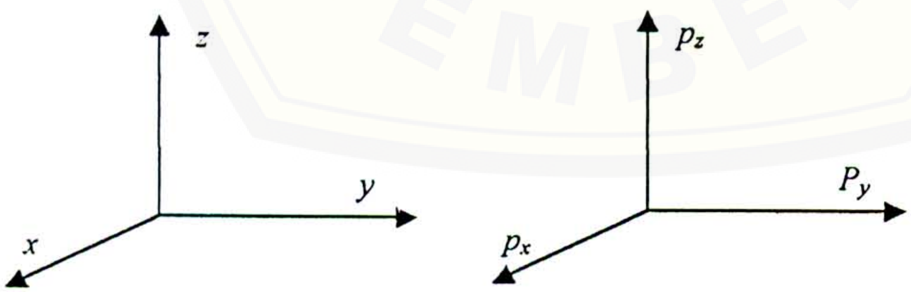
$$\vec{p} = \hbar\,\vec{k} \quad ; \quad e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{i\frac{\vec{p}}{\hbar}\cdot\vec{r}},$$

atau

$$\psi(p_x, p_y, p_z) = \hbar^{-3/2}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)}\,\psi\,(x,y,z)\,dx\,dy\,dz\ . \tag{N.2}$$

Untuk transformasi dari ruang koordinat ke ruang momentum dalam sistem koordinat bola, maka dapat diambil:

$$\begin{pmatrix} x = r\ \sin\theta\cos\phi \\ y = r\ \sin\theta\ \sin\phi \\ z = r\ \cos\theta \end{pmatrix} \longleftrightarrow \begin{pmatrix} p_x = p\ \sin\Theta\ \cos\ \Phi \\ p_y = p\ \sin\Theta\ \sin\Phi \\ p_z = p\ \cos\Theta \end{pmatrix}. \tag{N.3}$$



Jadi, untuk eigen fungsi ruang momentum dalam koordinat bola dapat dituliskan:

$$\psi_{nlm}(p,\Theta,\Phi)=\hbar^{-3/2}\iiint e^{-\frac{i}{\hbar}(\sin\theta\sin\Theta\cos(\Phi-\phi)+\cos\theta\cos\Theta)rp} \times\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)\,r^2\sin\theta\,dr\,d\theta\,d\phi\ , \tag{N.4}$$

dengan:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)=\left\{\frac{1}{(2\pi)^{1/2}}\,e^{\pm i m\phi}\right\}\left\{\left(\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}\right)^{1/2}P_l^m(\cos\theta)\right\} \left\{\frac{(2\gamma)^{l+1}}{(n+l)!}\left(\frac{\gamma(n-l-1)!}{n(n+l)!}\right)^{1/2} e^{-\gamma r}r^l L_{n-l}^{2l+1}(2\gamma r)\right\}. \tag{N.5}$$

dengan,

$$\gamma=\frac{4\pi^2\mu e^2 Z}{n\hbar^2}=\frac{Z}{n a_o}. \tag{N.6}$$

Jika:

$$I_1=\int_o^{2\pi} e^{\pm i m\phi+ib\cos(\Phi-\phi)}d\phi\ ;\ \text{dengan}\ \ b=-\left(\frac{2\pi}{h}\right)r\,p\sin\theta\,\sin\Theta, \tag{N.7}$$

$$I_2=\int_o^{\pi} e^{ic\cos\theta\cos\Theta}I_1\,P_l^m(\cos\theta)\sin\theta\,d\theta;\ \text{dengan}\ \ c=-\left(\frac{2\pi}{h}\right)r\,p, \tag{N.8}$$

maka:

$$\psi_{nlm}(p,\Theta,\Phi)=-\frac{\hbar^{-3/2}}{(2\pi)^{1/2}}\left(\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}\right)^{1/2}\frac{(2\gamma)^{l+1}}{(n+l)!} \left(\frac{\gamma(n-l-1)!}{n(n+l)!}\right)^{1/2}\int_0^{\infty}I_2\ e^{-\gamma r}r^{l+2}L_{n+l}^{2l+1}(2\gamma r)\,dr\ . \tag{N.9}$$

Nilai integral pertama dan kedua diketahui (dapat dihitung). Jika $\omega=\phi-\Phi$, maka I_1 menjadi integral *Sommerfeld* dan memberikan fungsi Bessel orde ± m ($J_{\pm m}$):

$$I_1=e^{\pm i m\Phi}\int_0^{2\pi}e^{\pm i m\omega+ib\cos\omega}d\omega=2\pi\ i^{\pm m}\ J_{\pm m}(b)e^{\pm i m\Phi}. \tag{N.10}$$

Dengan relasi $J_{-m}(b)=i^{2m}J_m(b)$ maka I_1 menjadi:

$$I_1 = 2\pi\, i^m J_m(b) e^{\pm im\Phi}. \tag{N.11}$$

diperlukan relasi antara fungsi Legendre "associated" dengan fungsi Gegenbauer C_k^ν yang dapat didefinisikan dengan fungsi pembangkit:

$$Q_\nu \equiv \left(1 - 2ut + u^2\right)^{-\nu} \equiv \sum_{k=0}^{\infty} C_k^\nu(t) u^k . \tag{N.12}$$

Jika $\nu = \frac{1}{2}$, maka fungsi ini akan kembali menjadi polinomial Legendre. Dengan mengambil $\nu = \frac{1}{2}$ dan mendeferensialkan m kali terhadap t maka didapatkan:

$$P_l^m(t) = 1\cdot 3\cdot 5......(2m-1)\left(1-t^2\right)^{m/2} C_{l-m}^{m+1/2}(t). \tag{N.13}$$

Menurut Gegenbauer (1877) maka:

$$\begin{aligned}&\int_0^\pi e^{iz\cos\theta\cos\psi} J_{\nu-1/2}(z\sin\theta\sin\psi)\, C_r^{\,p}(\cos\theta)\sin^{\nu+1/2}\theta\; d\theta \\ &= \left(\frac{2\pi}{z}\right)^{1/2} i^r \sin^{\nu-1/2}\psi\;\, C_r^\nu(\cos\psi)\, J_{\nu+r}(z).\end{aligned} \tag{N.14}$$

Jika $\nu = m + 1/2$, $z = c$, $x = \Theta$, $r = l - m$ maka dengan bantuan persamaan (N.13):

$$\begin{aligned}&\int_0^\pi e^{ic\cos\theta\cos\Theta} J_m(c\,\sin\theta\sin\,\Theta)\, P_l^m(\cos\theta)\sin\,\theta\;\, d\theta \\ &= \left(\frac{2\pi}{c}\right)^{1/2} i^{l-m}\, P_l^m(\cos\,\theta)\, J_{l+1/2}(c).\end{aligned} \tag{N.15}$$

Substitusi nilai-nilai pada I_1 menurut persamaan (N.11) maka tampak I_2 , kecuali untuk faktor tetapan, sama dengan integral ini, sehingga boleh menuliskan:

$$\begin{aligned}I_{2Q} &= 2\pi i^l\, e^{\pm im\Phi} P_l^m(\cos\,\Theta)\left(\frac{2\pi}{c}\right)^{1/2} J_{l+1/2}(c) \\ &= -2\pi(-i)^l\, e^{\pm im\Phi} P_l^m(\cos\,\Theta)\left(\frac{h}{p}\right)^{1/2} r^{-1/2} J_{l+1/2}\left(\frac{2\pi r p}{h}\right).\end{aligned} \tag{N.16}$$

Membandingkan persamaan (N.9) dengan (N.16) kita lihat $\psi_{nlm}(p,\Theta,\Phi)$ mengandung integral:

$$\int_0^\infty e^{-\gamma r}\, r^{l+3/2}\, J_{l+1/2}\left(\frac{2\pi r\, p}{h}\right) L_{n+l}^{2l+1}(2\gamma r)\, dr\,. \tag{N.17}$$

Dengan substitusi $\xi = 2\gamma r$ dan $\zeta = \dfrac{2\pi\, p}{\gamma h}$ maka integral menjadi

$$(2\gamma)^{-(l+5/2)} \int_0^\infty e^{-\xi/2}\, \zeta^{\, l+3/2}\, J_{l+1/2}\left(\tfrac{1}{2}\zeta\xi\right) L_{n+1}^{2l+1}(\xi)\, d\xi\,. \tag{N.18}$$

Misalkan bagian integral dipisahkan dan didefinisikan:

$$I_{nl}(\zeta) = \int_0^\infty e^{-\xi/2}\, \zeta^{\, l+3/2}\, J_{l+1/2}\left(\tfrac{1}{2}\zeta\xi\right) L_{n+l}^{2l+1}(\xi)\, d\xi\,. \tag{N.19}$$

Untuk mengevaluasi integral ini perlu dipertimbangkan fungsi U yang didefinisikan oleh odentitas berikut:

$$U \equiv U_l(\zeta, u) = \sum_{n=l+1}^{\infty} \frac{I_{nl}(\zeta)}{(n+l)!}\, u^{n-l-1}\,. \tag{N.20}$$

Melakukan evaluasi fungsi ini dengan menggunkan fungsi generasi untuk polinomial Laguere gabungan yaitu :

$$\sum_{\beta=0}^{\infty} \frac{L^{\alpha}{}_{\alpha+\beta}(\xi)}{(\alpha+\beta)!} u^{\beta} = (-)^{\alpha}\, \frac{\exp(-\xi u/(1-u))}{(1-u)^{\alpha+1}}\,, \tag{N.21}$$

dan menghasilkan $I_{nl}(\xi)$ sebagai koefisien dari ekspansi dari $U_l(\xi, u)$ deret pangkat dalam u.

$$U = \int_0^\infty \exp(-\xi/2)\xi^{l+3/2} J_{l+1/2}(\frac{1}{2}\zeta\xi) \sum_{n=l+1}^{\infty} \frac{L_{n+l}{}^{2l+1}(\xi)}{(n+l)!} u^{n-l-1} d\xi$$

$$= \int_0^\infty \exp(-\xi/2)\xi^{l+3/2} J_{l+1/2}(\frac{1}{2}\zeta\xi) \frac{(-)^{2l+1}\exp(-\xi u/(1-u))}{(1-u)^{2l+2}} d\xi$$

$$U = (1-u)^{-2l-2} \int_0^\infty \exp(-\xi(1+u)/2(1-u)) J_{l+1/2}(\frac{1}{2}\zeta\xi)\xi^{l+3/2} d\xi\,. \tag{N.22}$$

Sekarang integral terakhir adalah kasus khusus dari integral umum yang mana telah dievaluasi oleh Hankel dan Gegenbauer, yang menghasilkan :

$$\int_0^\infty \exp(-a\xi) J_\nu(z\xi)\xi^{\mu-1} d\xi = \frac{(z/2a)^\nu \Gamma(\mu+\nu)}{a^\mu \Gamma(\nu+1)} F\left(\frac{\mu+\nu}{2}, \frac{\mu+\nu+1}{2}; \nu+1; \frac{-z^2}{a^2}\right). \quad (N.23)$$

Dengan mengambil $z = \frac{1}{2}\zeta, \nu = l + \frac{1}{2}, \mu = l + 5/2$ dan $a = (1+u)/2(1-u)$ dari sini akan diperoleh :

$$U = \frac{4\zeta^{l+1/2}(2l+2)!}{\Gamma(l+3/2)} \frac{(1-u)}{(1+u)^{2l+3}} F\left(l+3/2, l+2, l+\frac{3}{2}; -\frac{\zeta^2(1-u)^2}{(1+u)^2}\right). \quad (N.24)$$

Jika :

$$\left\{1 + \frac{\zeta^2(1-u)^2}{(1+u)^2}\right\}^{-l-2}. \quad (N.25)$$

Sehingga U dapat dinyatakan dalam bentuk :

$$U = A\frac{1-u^2}{(1-2xu+u^2)^{l+2}}. \quad (N.26)$$

Yang mana :

$$A = \frac{4(2l+2)!\zeta^{l+1/2}}{\Gamma(l+3/2)(\zeta^2+1)^{l+2}} \text{ dan } x = \frac{\zeta^2-1}{\zeta^2+1}. \quad (N.27)$$

Kembali ke persamaan (N.12) mengoperasikan kedua sisi dengan $u^{-\nu+1}(\partial/\partial u)u^\nu$ menghasilkan :

$$\frac{\nu(1-u^2)}{(1-2ut+u^2)^{\nu+1}} \equiv \sum_{k=0}^{\infty}(\nu+k)C_k^{\nu}(t)u^k. \quad (N.28)$$

Dengan mengambil $\nu = l+1$ dan t=x, maka dapat menuliskan persamaan (N.26) menjadi :

$$I_{nl}(\zeta) = \frac{An(n+l)!}{l+1} C_{n-l-1}{}^{l+1}\left(\frac{\zeta^2 - 1}{\zeta^2 + 1}\right). \qquad \text{(N.30)}$$

Ini adalah fungsi eigen momentum yang ditemukan dengan bentuk :

$$\mathrm{T}(P,\Theta,\Phi) = \left\{\frac{1}{(2\pi)^{1/2}}\exp(\pm im\Phi)\right\}\left\{\left(\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)}\right)^{1/2} P_l{}^m(\cos\Theta)\right\}$$

$$\left\{-\frac{(-i)^l \pi 2^{2l+4} l!}{(\gamma h)^{3/2}}\left(\frac{n(n-l-1)!}{(n+l)!}\right)^{1/2} \frac{\zeta^l}{(\zeta^2+1)^{l+2}} C_{n-l-1}{}^{l+1}\left(\frac{\zeta^2-1}{\zeta^2+1}\right)\right\}. \qquad \text{(N.31)}$$

Dimana $\zeta = {}^{2\pi P}\!/_{\gamma h} = {}^{nP}\!/_{Zp_0}. = {}^{P}\!/_{p_n}$, p_0 sama dengan ${}^{2\pi\mu e^2}\!/_{h}$, adalah momentum dari elektron dalam orbit edar Bohr dengan n=1 dan Z=1, apabila dihubungkan dengan atom hidrogenik dalam keadaan normal dan $p_n = {}^{Zp_0}\!/_{n}$ adalam momentum dari elektron dalam orbit edar Bohr yang dibedakan dengan bilangan kuantum utama n dan muatan inti Ze. Faktor $-(-i)^l$ dalam T diabaikan.

Kemungkinan elektron mempunyai momentum terletak diantara P dan $P + dP$ dapat dituliskan menjadi $\Xi_{nl}(P)dP$, yang mana $\Xi_{nl}(P)$ adalah distribusi fungsi momentum diperoleh dari :

$$\Xi_{nl}(P) = \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} \left|T_{nlm}(P,\Theta,\Phi)\right|^2 P^2 \sin\Theta d\Theta d\Phi. \qquad \text{(N.32)}$$

Menyelesaikan integral diatas akan menghasilkan :

$$\Xi_{nl}(P) = \frac{a_0}{Zh}\frac{2^{4l+6} n^2 (l!)^2 (n-l-1)!}{(n+l)}\frac{\zeta^{2l+2}}{(\zeta^2+1)^{2l+4}}\left[C_{n-l-1}{}^{l+1}\left(\frac{\zeta^2-1}{\zeta^2+1}\right)\right]^2. \qquad \text{(N.33)}$$

(Podolsky & Pauling, Phys. Rev., Vol 34, 1929)

Departemen Pendidikan Nasional RI
Universitas Jember
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

SURAT KETERANGAN SELESAI PERBAIKAN SKRIPSI

Kami selaku Tim Penguji Tugas Akhir/Skripsi dari mahasiswa yang tersebut dibawah ini:

Nama	: Inna Mustafidah
NIM	: 021810201074
Jurusan/PS	: Fisika
Semester	: X (Sepuluh)
Judul Tugas Akhir	: "Solusi Analitik Persamaan Schrödinger Atom Hidrogenik dalam Ruang Momentum"

Menerangkan dengan sebenarnya bahwa mahasiswa yang bersangkutan betul-betul telah melaksanakan perbaikan Tugas Akhir/Skripsi sebelum batas waktu yang telah ditetapkan. Demikian surat keterangan dibuat untuk diketahui dan dipergunakan sebagaimana mestinya.

Mengetahui,
Tim Penguji Skripsi

Jember, 03 Juli 2007
Ketua

(Artoto Arkundato, S. Si, M. Si)
NIP. 132 236 059

Jember, 03 Juli 2007
Sekretaris

(Sutisna, S. Pd, M. Si)
NIP. 132 257 929

Jember, 03 Juli 2007
Dosen Penguji I

(Agung Tjahjo Nugroho, S. Si, MPhill)
NIP. 132 085 972

Jember, 03 Juli 2007
Dosen Penguji II

(Nurul Priyantari, S. Si, M. Si)
NIP. 132 162 506