SOLUSI LENGKAP FUNGSI GELOMBANG ATOM HIDROGEN (H_1^1) PADA BILANGAN KUANTUM UTAMA (n) 4

SKRIPSI

Oleh:

Melvin Maulana
NIM. 150210102088

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

SOLUSI LENGKAP FUNGSI GELOMBANG ATOM HIDROGEN (H_1^1) PADA BILANGAN KUANTUM UTAMA (n) 4

SKRIPSI

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

Oleh:

Melvin Maulana
NIM. 150210102088

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

PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan untuk:

1. Kedua Orangtuaku Bapak Abdul Rochim dan Ibu Sri Ngatumi serta adikku Muhammad Sahrul yang senantiasa memberikan motivasi, dukungan dan doa dalam setiap langkahku.
2. Guru-guruku sejak TK hingga perguruan tinggi yang telah banyak berjasa.
3. Keluarga besar Program Studi Pendidikan Fisika.
4. Almamater Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Jember.

MOTO

1. Bacalah dengan menyebut nama Tuhanmu yang menciptakan, 2. Dia telah menciptakan manusia dengan segumpal darah. 3. Bacalah, dan Tuhanmulah Yang Maha-mulia. 4. Yang mengajar manusia dengan pena. 5. Dia mengajarkan manusia apa yang tidak diketahuinya.[1]

[1] Departemen Agama Republik Indonesia. 2010. *Al-Quran dan Terjemahannya*. Bandung: JABAL.

PERNYATAAN

Saya yang bertandatangan dibawah ini:

Nama : Melvin Maulana

NIM : 150210102088

Menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi berjudul "Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen (H_1^1) pada Bilangan Kuantum Utama (n) 4" adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali kutipan yang sudah saya sebutkan sumbernya, belum pernah diajukan pada instansi manapun dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenar-benarnya, tanpa ada tekanan dan paksaan dari pihak manapun serta bersedia mendapat sanksi akademik jika ternyata dikemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember, 4 April 2019

Yang menyatakan,

Melvin Maulana

NIM. 150210102088

SKRIPSI

SOLUSI LENGKAP FUNGSI GELOMBANG ATOM HIDROGEN (H_1^1) PADA BILANGAN KUANTUM UTAMA (n) 4

Oleh:
Melvin Maulana
NIM. 150210102088

Pembimbing

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

Dosen Pembimbing Anggota : Drs. Alex Harijanto, M.Si

PENGESAHAN

Skripsi berjudul "Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen (H_1^1) pada Bilangan Kuantum Utama (n) 4" telah diuji dan disahkan pada:

Hari, tanggal :

Tempat : Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan

Tim Penguji:

Ketua,	Sekretaris,
Drs. Bambang Supriadi, M.Sc	**Drs. Alex Harijanto, M.Si**
NIP.19680710 199302 1 001	NIP.19641117 199103 1 001
Anggota I	Anggota II
Drs. Trapsilo Prihandono, M.Si	**Dr. Yushardi, S.Si., M.Si**
NIP.19620401 198702 1 001	NIP.19650420 199512 1 001

Mengesahkan
Dekan Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan
Universitas Jember,

Prof. Drs. Dafik, M.Sc., Ph.D
NIP.19680802 199303 1 004

RINGKASAN

Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen (H_1^1) pada Bilangan Kuantum Utama (n) 4; Melvin Maulana, 150210102088; 2019; 47 halaman; Program Studi Pendidikan Fisika, Jurusan Pendidikan Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Jember.

Atom Hidrogen disimbolkan (H_1^1) merupakan atom yang paling ringan dan sederhana karena memiliki sebuah elektron serta sebuah proton sebagai intinya. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen. Jenis Penelitian ini merupakan penelitian pengembangan non eksperimen pada teori mekanika kuantum yang dikerjakan secara analitik. Teori yang dikembangkan adalah solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen sampai pada keadaan tereksitasi ketiga yaitu pada nilai bilangan kuantum utama (n) 4. Pendekatan yang digunakan dalam penelitian ini adalah pendekatan persamaan Schrodinger keadaan tunak menggunakan koordinat bola. Sedangkan untuk metodenya digunakan metode separasi variabel dan normalisasi fungsi gelombang.

Persamaan schrodinger merupakan persamaan differensial parsial orde dua dan memiliki solusi berupa fungsi Schrodinger yang dapat memberikan informasi mengenai perilaku gelombang dari suatu partikel seperti elektron didalam atom hidrogen. Koordinat bola (r, θ, ϕ) digunakan dalam menyelesaikan persamaan schrodinger untuk atom hidrogen karena atom secara umum dianggap simetri dengan bola. Kemudian dengan metode separasi variabel akan diperoleh solusi analitik berupa fungsi gelombang meliputi fungsi gelombang Radial $R_{nl}(r)$ serta fungsi gelombang Angular $Y_{lm}(\theta, \phi)$ yang merupakan gabungan dari fungsi gelombang Polar $\Theta_{lm}(\theta)$ dan fungsi gelombang Azimut $\Phi_m(\phi)$. Solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen disimbolkan $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ merupakan gabungan dari fungsi gelombang Radial $R_{nl}(r)$ dengan fungsi gelombang Angular $Y_{lm}(\theta, \phi)$.

Langkah pertama yang dilakukan sebelum menentukan hasil pengembangan adalah menentukan solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen pada bilangan kuantum utama $(n) = 1,2,3$ terlebih dahulu sebagai validasi. Adapun validasi yang digunakan dalam penelitian ini antara lain adalah fungsi gelombang radial dan fungsi gelombang angular yang merupakan gabungan dari fungsi gelombang polar dengan fungsi gelombang azimut, kemudian dilanjutkan validasi simulasi berupa grafik dua dimensi untuk fungsi gelombang dan rapat probabilitas radial serta simulasi berupa grafik tiga dimensi untuk rapat probabilitas fungsi gelombang angular. Setelah semuanya sesuai, kemudian dilanjutkan untuk menentukan solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen pada bilangan kuantum utama lebih tinggi yaitu (n) 4 yang dikerjakan secara analitik. Kemudian disimulasikan dengan grafik dua dimensi untuk fungsi gelombang dan rapat probabilitas radial serta grafik tiga dimensi untuk fungsi gelombang angularnya menggunakan software aplikasi Matlab2015.

Berdasarkan hasil pengembangan dari penelitian didapatkan solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen pada bilangan kuantum utama $(n) = 4$ memiliki 16 fungsi gelombang berbeda yang terdiri dari 4 fungsi gelombang radial dan 16 fungsi gelombang angular. Grafik dua dimensi rapat probabilitas radial dibuat untuk merepresentasikan peluang terbesar menemukan elektron mengorbit pada jarak (r) tertentu pada inti (proton), sedangkan grafik tiga dimensi rapat probabilitas angular dibuat untuk merepresentasikan peluang terbesar menemukan elektron dalam bentuk orbital ketika mengorbit pada inti (proton) didalam atom hidrogen.

PRAKATA

Puji syukur kehadirat Allah Swt. atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul "Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen (H_1^1) pada Bilangan Kuantum Utama (n) 4". 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 ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis menyatakan terima kasih kepada:

1. Prof. Drs. Dafik, M.Sc., Ph.D., selaku Dekan Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Jember yang telah memberikan fasilitas sehingga skripsi ini dapat selesai;
2. Dr. Dwi Wahyuni, M.Kes., selaku ketua jurusan Pendidikan MIPA yang telah memberikan fasilitas sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini;
3. Drs. Albertus Djoko Lesmono, M.Si., selaku Dosen Pembimbing Akademik yang telah banyak berjasa dalam kelancaran penyusunan skripsi ini;
4. Drs. Bambang Supriadi, M.Sc., selaku Dosen Pembimbing Utama yang telah membimbing penulis dalam segala aspek sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini;
5. Drs. Alex Harijanto, M.Si., selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah membimbing penulis dalam segala aspek sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini;
6. Drs. Trapsilo Prihandono, M.Si., selaku Dosen Penguji Utama yang telah meluangkan waktu untuk memberikan saran dan kritik yang membangun demi kesempurnaan skripsi ini;
7. Dr. Yushardi, S.Si., M.Si., selaku Dosen Penguji Anggota yang telah membimbing, memberikan saran dan kritik yang membangun demi kesempurnaan skripsi ini;
8. Vikar, Ilul, Jepri, Erwin, Halim, Nandi, Anjas dan Fahim selaku teman-teman sekontrakan di Jember yang selalu mendukung dalam penyelesaian skripsi ini;

Huda, Rico, Fitroh, Aida, Vela, Tutut dan Lutfiyah selaku team research quantum yang telah memberikan banyak motivasi dalam penyelesaian skripsi ini;

9. Serta pihak-pihak lain yang tidak dapat disebutkan satu-persatu yang telah memberikan kontribusi dan bantuannya demi kelancaran pengerjaan skripsi ini.

Kritik dan saran sangat penulis harapkan demi kebaikan dan kesempurnaan skripsi ini, semoga skripsi ini dapat memberikan manfaat.

Jember, 4 April 2019

Penulis

DAFTAR ISI

Halaman

HALAMAN SKRIPSI i

HALAMAN PERSEMBAHAN ii

HALAMAN MOTO iii

HALAMAN PERNYATAAN iii

HALAMAN PEMBIMBING v

HALAMAN PENGESAHAN vi

RINGKASAN vii

PRAKATA ix

DAFTAR ISI xii

DAFTAR TABEL xiii

DAFTAR GAMBAR xiv

DAFTAR LAMPIRAN xiv

BAB 1. PENDAHULUAN 1

1.1 Latar Belakang 1

1.2 Rumusan Masalah 3

1.3 Tujuan 3

1.4 Batasan Masalah 4

1.5 Manfaat Penelitian 4

BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA 5

2.1 Dualisme Gelombang Partikel 5

2.2 Persamaan Schrodinger 7

2.2.1 Persamaan Schrodinger Bergantung Waktu 7

2.2.2 Persamaan Schrodinger Tidak Bergantung Waktu 9

2.2.3 Persamaan Schrodinger dalam Koordinat Bola 10

2.3 Persamaan Schrodinger untuk Atom Hidrogen 11

2.3.2 Bagian Radial 12

2.3.3 Bagian Angular 19

2.3.4 Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen 22

2.4 Bilangan Kuantum 23

BAB 3. METODE PENELITIAN 25

3.1 Jenis, Waktu dan Tempat Penelitian 25
3.2 Definisi Operasional 25
3.2.1 Fungsi Gelombang Atom Hidrogen 25
3.2.2 Bilangan Kuantum 26
3.3 Langkah Penelitian 26
3.4 Teori Hasil Pengembangan 28
3.4.1 Solusi Persamaan Radial (Fungsi Gelombang Radial) 28
3.4.2 Solusi Persamaan Angular (Fungsi Gelombang Angular) 28
3.4.3 Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen 28
3.5 Data Simulasi 29
3.6 Pembanding Hasil Simulasi Penelitian 30
3.6.1 Fungsi Gelombang Atom Hidrogen untuk $n = 1,2,3$ 30
3.6.2 Bentuk Fungsi Gelombang Atom Hidrogen untuk $n = 1,2,3$ 32
BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN 37
4.1 Hasil Penelitian 37
4.1.1 Waktu dan Tempat Penelitian 37
4.1.2 Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen untuk $n = 4$ .. 37
4.1.3 Bentuk Fungsi Gelombang Atom Hidrogen untuk $n = 4$ 40
4.1 Pembahasan 41
BAB 5 PENUTUP 47
5.1 Kesimpulan 47
5.2 Saran 47
DARTAR PUSTAKA 48
LAMPIRAN 50

DAFTAR TABEL

Halaman

Tabel 3.1 Data Simulasi Menentukan Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen 29

Tabel 3.2 Validasi Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen $n = 1,2,3$ 31

Tabel 4.1 Hasil Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen $n = 4$ 38

Tabel 4.a Polinomial Laguerre Terasosiasi untuk Fungsi Gelombang Radial $n = 1,2,3$ 94

Tabel 5.a Polinomial Laguerre Terasosiasi untuk Fungsi Gelombang Radial $n = 4$ 107

Tabel 7.a Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen $n = 1,2,3$ 122

DAFTAR GAMBAR

Halaman

Gambar 2.1 Koordinat Bola: jari-jari r, sudut polar θ, dan sudut azimut ϕ 10

Gambar 3.1 Bagan Langkah-Langkah Penelitian 26

Gambar 3.2 Validasi Grafik Hasil Fungsi Gelombang Radial Atom Hidrogen $n = 1,2,3$ 33

Gambar 3.3 Validasi Grafik Rapat Probabilitas Radial Atom Hidrogen $n = 1,2,3$ 34

Gambar 3.4 Validasi Grafik Rapat Probabilitas Angular Atom Hidrogen $n = 1,2$ 35

Gambar 4.1 Hasil Grafik Fungsi Gelombang Radial Atom Hidrogen $n = 4$ 40

Gambar 4.2 Hasil Grafik Rapat Probabilitas Radial Atom Hidrogen $n = 4$ 40

Gambar 4.3 Hasil Grafik Rapat Probabilitas Angular Atom Hidrogen $n = 4$ 41

Gambar 3.a Posisi Relatif Elektron terhadap Proton....................................... 63

Gambar 7.a Grafik Fungsi Gelombang Radial Atom Hidrogen $n = 1,2,3$ 123

Gambar 7.b Grafik Rapat Probabilitas Radial Atom Hidrogen $n = 1,2,3$ 123

Gambar 7.c Grafik Rapat Probabilitas Angular Atom Hidrogen $n = 2$ 123

Gambar 8.a Flowchart untuk Program Menampilkan Grafik Fungsi Radial..... 124

Gambar 8.b Flowchart untuk Program Menampilkan Grafik Probabilitas Radial 125

Gambar 8.c Flowchart untuk Program Menampilkan Grafik Probabilitas Angular 127

DAFTAR LAMPIRAN

Halaman

Lampiran 1. Matriks Penelitian 50

Lampiran 2. Penjabaran Persamaan Schodinger Bergantung Waktu dan Persamaan Schrodinger Tidak Bergantung Waktu 52

Lampiran 3. Penjabaran Persamaan Schrodinger dalam Koordinat Bola 55

Lampiran 4. Penjabaran Persamaan Schrodinger untuk Atom Hidrogen 62

Lampiran 5. Perhitungan Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen untuk $n = 1,2,3$ 92

Lampiran 6. Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen $n = 4$ 105

Lampiran 7. Simulasi Fungsi Gelombang Atom Hidrogen untuk $n = 1,2,3$ 122

Lampiran 8. Flowchart pada program matlab2015 124

Lampiran 9. M-file untuk Membuat Simulasi Grafik pada Matlab2015 128

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Perkembangan fisika umumnya dicirikan dengan hasil dari sebuah eksperimen. Namun, terkadang juga ditandai dengan munculnya sebuah teori berasal dari berbagai gagasan mendalam yang dapat menyebabkan perubahan dalam cara kita memandang alam semesta. Teori fisika klasik mengasumsikan bahwa keadaan gelombang dan partikel seperti elektron tidak dapat saling dikaitkan. Pada akhir abad ke-19 beberapa fenomena fisis seperti radiasi benda hitam, efek fotolistrik dan efek Compton tidak dapat dijelaskan oleh teori fisika klasik, sehingga pada masa itu dikatakan bahwa fisika klasik mengalami krisis.

Pada tahun 1924 dengan mempertimbangkan sifat simetri dari alam, de Broglie mengajukan hipotesa bahwa jika gelombang dapat bersifat partikel maka partikel seharusnya juga bersifat sebagai gelombang. Bagi setiap partikel bermassa m dan bergerak dengan laju v dapat berperilaku sebagai gelombang dengan panjang gelombang de Broglie $\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p}$ (Purwanto, 2016:20). Hipotesa de Broglie tentang dualisme gelombang partikel menjadi dasar munculnya teori baru dalam fisika yaitu mekanika kuantum.

Keterkaitan antara gelombang dan partikel dalam mekanika kuantum dapat dijelaskan dengan persamaan Schrodinger. Persamaan Schrodinger merupakan suatu persamaan differensial parsial orde dua. Persamaan ini terbentuk dengan menggunakan hukum kekekalan energi dan taat azas terhadap hipotesa de Broglie. Persamaan Schrodinger berdasarkan karakteristiknya dibagi menjadi persamaan Schrodinger bergantung waktu dan persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu. Pada persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu hanya dipengaruhi oleh potensial (V) dan posisi (r) (Supriadi, *et al.*, 2018:1). Persamaan Schrodinger sangat bermanfaat dalam menyelesaikan permasalahan pada sistem mikroskopis seperti atom. Solusi dari persamaan Schrodinger disebut fungsi Schrodinger yang memiliki sifat linear, bernilai tunggal dan berhingga. Fungsi

Schrodinger ini dapat memberikan informasi tentang perilaku gelombang dari suatu partikel seperti elektron didalam atom hidrogen.

Atom hidrogen (H_1^1) merupakan atom yang paling ringan dan sederhana karena terdiri dari satu proton sebagai inti atom dan satu elektron, dimana elektron mengorbit pada inti (proton). Seringkali atom dianggap simetri dengan bola, sehingga persamaan Schrodinger untuk atom hidrogen menggunakan koordinat ruang berupa bola yang berorientasi pada sumbu (r, θ, ϕ). Koordinat bola yang berorientasi pada sumbu (r, θ, ϕ) akan mengantarkan fungsi gelombang Schrodinger untuk atom hidrogen mengandung tiga bilangan kuantum (n, l, m). Nilai-nilai bilangan kuantum orbital (l) dan magnetik (m) dibatasi oleh nilai bilangan kuantum utama (n) yang menyatakan tingkat energi tertentu ditempati elektron didalam atom hidrogen, sehingga berguna untuk menamai tiap keadaan fungsi gelombang Schrodinger atom hidrogen yang merepresentasikan perilaku elektron didalam atom hidrogen. Elektron didalam atom hidrogen dapat bertransisi dari tingkat energi satu ke tingkat energi lain yang lebih tinggi yang disebut keadaan eksitasi dan ditandai dengan bertambahnya nilai bilangan kuantum utama (n). Kehadiran atom yang memiliki tingkat eksitasi baik satu maupun lebih inilah yang mendorong timbulnya laser, dimana umur tingkat eksitasinya sekitar $10^{-3}\ s$ sampai $10^{-8}\ s$ (Beiser, 2003:146).

Penelitian sebelumnya mengenai fungsi gelombang atom hidrogen pada bilangan kuantum utama (n) telah dilakukan oleh beberapa peneliti antara lain: Ganesan dan Balaji (2008), dalam penelitiannya tentang *Schrodinger Equation for the Hydrogen atom – A Simplified Treatment* mengatakan bahwa untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger pada atom hidrogen adalah dengan mengubah koordinat kartesius menjadi koordinat polar dan membutuhkan pemahaman tentang polinomial Legendre dan Laguerre. Hermanto (2016), dalam penelitiannya tentang Fungsi Gelombang Atom Deuterium dengan Pendekatan Persamaan Schrodinger mengatakan bahwa penyelesaian persamaan Schrodinger pada atom berelektron tunggal dapat dipisah menjadi persamaan yang bergantung jari-jari (r) dan persamaan yang bergantung sudut (θ, ϕ) dengan metode separasi variabel. Idris-Bey dan Al-Hashimi (2018) dalam penelitiannya tentang *Modelling* *of The Wave Function and of the Energy States of Hydrogen Stored in a Spherical Cavity* mengatakan bahwa fungsi gelombang atom hidrogen merupakan kuantitas kompleks terdiri dari bagian radial dan bagian angular. Prastowo, *et al.* (2018), dalam penelitiannya tentang *The Stark Effect on the Spectrum Energy of Tritium in First Excited State with Relativistic Condition* mengatakan bahwa atom tritium dapat diaplikasikan sebagai bahan untuk pembuatan baterai nuklir, sedangkan perhitungan fungsi gelombang dan tingkat energi dari atom tritium mirip dengan perhitungan fungsi gelombang dan tingkat energi dari atom hidrogen karena atom tritium merupakan keluarga dari atom hidrogen. Penelitian-penelitian diatas membahas fungsi gelombang atom hidrogen sampai pada bilangan kuantum utama $(n) \leq 3$. Beberapa buku referensi yang digunakan pada mata kuliah mekanika kuantum juga kebanyakan membahas fungsi gelombang atom hidrogen sampai pada bilangan kuantum utama $(n) \leq 3$.

Berdasarkan beberapa uraian tersebut, peneliti tertarik untuk melakukan penelitian mengenai fungsi gelombang atom hidrogen pada bilangan kuantum utama (n) 4. Oleh sebab itu, peneliti melakukan penelitian yang berjudul **"SOLUSI LENGKAP FUNGSI GELOMBANG ATOM HIDROGEN (H_1^1) PADA BILANGAN KUANTUM UTAMA (n) 4"**.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan penjabaran dari latar belakang, maka dapat dirumuskan permasalahan yaitu bagaimanakah fungsi gelombang atom hidrogen pada bilangan kuantum utama (n) 4?

1.3 Tujuan

Adapan tujuan dari penelitian ini adalah mengkaji fungsi gelombang atom hidrogen pada bilangan kuantum utama (n) 4.

1.4 Batasan Masalah

Adapun Batasan-batasan dalam penelitian ini adalah sebagai berikut:

a. Persamaan Schrodinger yang digunakan adalah persamaan Schrodinger tak bergantung waktu dalam kerangka nonrelativistik.
b. Persamaan Schrodinger tak bergantung waktu dalam kerangka nonrelativistik yang digunakan untuk menentukan solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen dinyatakan dalam koordinat bola dengan asumsi proton dianggap diam.
c. Fungsi gelombang atom hidrogen memenuhi syarat normalisasi.
d. Fungsi gelombang atom hidrogen yang diperoleh mengabaikan efek spin.
e. Simulasi menggunakan grafik dua dimensi untuk fungsi gelombang radial dan rapat probabilitas radial, serta grafik tiga dimensi untuk rapat probabilitas angular.

1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat yang dapat diperoleh dari penelitian ini adalah sebagai berikut:

a. Bagi peneliti, dapat menambah wawasan, pengetahuan, dan pengalaman tentang fungsi gelombang atom hidrogen pada bilangan kuantum utama (n) 4.
b. Bagi pembaca, dapat dijadikan referensi pada mata kuliah mekanika kuantum dan fisika atom.
c. Bagi lembaga, dapat memberikan sumbangan penelitian dan bahan referensi tambahan.
d. Bagi guru fisika SMA, dapat dijadikan referensi tambahan pada bab fisika atom mengenai teori atom Bohr.

BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Dualisme Gelombang Partikel

Dalam teori Planck, sebuah atom yang bergetar dapat menyerap atau memancarkan energi kembali dalam bentuk buntelan-buntelan energi (disebut kuanta). Energi E setiap kuanta ditentukan oleh frekuensi f menurut persamaan

$$E = nhf \tag{2.1}$$

dimana n menyatakan jumlah kuanta ($n = 1,2,3,...$) dan h merupakan tetapan Planck yang besarnya $6{,}626 \times 10^{-34}$ Js. Einstein pada tahun 1905 mengemukakan ide yang didasarkan pada teori Planck, bahwa suatu partikel misalnya foton dengan energi hf memiliki momentum linear p yang searah dengan arah pergerakannya. Besarnya p dapat dituliskan

$$p = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda} \tag{2.2}$$

dari persamaan (2.2) didapat hubungan antara momentum linear p dengan panjang gelombang λ.

Pada tahun 1924, de Broglie mempostulatkan bahwa bagi semua partikel yang bergerak dengan momentum p akan terkait suatu gelombang dengan panjang gelombang λ yang disebut panjang gelombang de Broglie dimana keduanya saling berhubungan satu sama lain. Berdasarkan persamaan (2.2) panjang gelombang de Broglie dapat dituliskan

$$\lambda = \frac{h}{p} \tag{2.3}$$

(Krane, 2012:103)

dengan h merupakan tetapan Planck. Panjang gelombang de Broglie hanya dapat diamati untuk partikel-partikel yang berukuran atom atau inti atom. Sedangkan kecepatan gelombang de Broglie dapat dituliskan,

$$v = \lambda f \tag{2.4}$$

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

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} \tag{2.5}$$

apabila dimisalkan sebuah partikel bebas yang merambat dalam arah sumbu-x maka solusi dari persamaan diatas berupa fungsi gelombang yang dapat dituliskan

$$\psi(x,t) = Ae^{-i\omega(t-x/v)} \tag{2.6}$$

Sebuah partikel bebas yang tidak dipengaruhi oleh gaya luar, maka akan memiliki frekuensi yang tetap dan bilangan gelombang yang besar dan arahnya tetap.

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \text{ dan } k = \frac{p}{\hbar} \tag{2.7}$$

sedangkan hubungan energi total gelombang yang dimiliki partikel dengan momentum dapat dituliskan

$$E = pv \tag{2.8}$$

dengan mensubtitusikan $\omega = \frac{E}{\hbar}$ dan persamaan (2.8) ke persamaan (2.6) maka didapatkan

$$\begin{aligned}\psi(x,t) &= Ae^{-i\omega(t-x/v)}\\ &= Ae^{-i\frac{E}{\hbar}(t-x/v)}\\ \psi(x,t) &= Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} \end{aligned} \tag{2.9}$$

(Beiser, 2003:166).

Fungsi gelombang ψ adalah kuantitas kompleks yang memberi karakteristik gelombang de Broglie. Harga fungsi gelombang ψ tidak mempunyai arti fisis secara langsung akan tetapi dapat memberikan informasi fisis bahwa partikel tersebut memiliki gerakan yang tak terbatas. Kuadrat harga mutlak dari fungsi gelombang $|\psi|^2$ disebut dengan kerapatan probabilitas $P(r)$ yang menyatakan kemungkinan suatu partikel misalnya elektron ditemukan pada posisi tertentu dalam sebuah atom.

2.2 Persamaan Schrodinger

Persamaan Schrodinger merupakan persamaan differensial parsial orde dua yang digunakan untuk memberikan informasi tentang perilaku gelombang dari partikel. Persamaan ini dikembangkan oleh Erwin Schrodinger pada tahun 1926 yang merupakan seorang ilmuwan fisika berkebangsaan Austria. Berdasarkan karakteristik fungsi gelombangnya persamaan Schrodinger dibagi menjadi dua yaitu persamaan Schrodinger bergantung waktu dan persamaan Schrodinger tak bergantung waktu.

2.2.1 Persamaan Schrodinger Bergantung Waktu

Persamaan Schrodinger didapatkan dengan mematuhi beberapa kriteria:

a. Memenuhi hukum kekekalan energi

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

$$K + V = E$$

$$\frac{p^2}{2m} + V = E \tag{2.10}$$

Suku pertama ruas kiri menyatakan energi kinetik, suku kedua menyatakan energi potensial, dan ruas kanan menyatakan energi total.

b. Linear, bernilai tunggal dan berhingga

Pemecahan persamaan Schrodinger harus memberikan informasi tentang probabilitas untuk menemukan partikelnya. Walaupun dapat pula probabilitas berubah secara kontinu dan partikelnya menghilang secara tiba-tiba dari suatu titik dan muncul kembali pada titik berikutnya, namun fungsi gelombangnya haruslah bernilai tunggal dan berhingga artinya tidak boleh ada dua probabilitas untuk menemukan partikel di satu titik yang sama. Indikator dari sifat gelombang yang linear yaitu fungsi gelombangnya harus memiliki sifat superposisi gelombang (Krane, 2012:141).

c. Taat azas terhadap hipotesa de Broglie

Persamaan itu bagaimanapun bentuknya, haruslah konsisten dengan hipotesa de Broglie. Untuk menyelesaikan persamaan matematis bagi sebuah partikel dengan momentum p, maka pemecahannya harus berbentuk fungsi gelombang dengan panjang gelombang λ. Sesuai dengan persamaan (2.7) dan persamaan (2.10) maka energi kinetik dari gelombang de Broglie partikel bebas dapat dituliskan

$$K = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{2.11}$$

Persamaan Schrodinger dapat dibentuk dengan mengambil turunan kedua dari fungsi (2.9) terhadap x, didapatkan

$$\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\,\psi(x,t)$$

$$p^2\,\psi(x,t) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} \tag{2.12}$$

dengan mensubstitusikan persamaan (2.7) ke dalam persamaan (2.12), maka didapatkan

$$\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} = -k^2\,\psi(x,t) \tag{2.13}$$

persamaan Schrodinger bergantung waktu dapat diperoleh dengan mengambil turunan pertama persamaan (2.9) terhadap variabel t, sebagai berikut

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\,\psi(x,t)$$

$$E\psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \tag{2.14}$$

pada persamaan (2.10) ruas kanan dan ruas kiri masing-masing dikalikan dengan fungsi $\psi(x,t)$, kemudian substitusi persamaan (2.12) dan persamaan (2.14) didapatkan

$$\frac{p^2 \psi(x,t)}{2m} + V\psi(x,t) = E\psi(x,t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V\psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} \tag{2.15}$$

persamaan (2.15) merupakan persamaan Schrodinger bergantung waktu dalam satu dimensi. Pada kasus tiga dimensi, maka persamaan (2.15) dapat dituliskan

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}\right) + V\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \tag{2.16}$$

(Beiser, 2003:168).

2.2.2 Persamaan Schrodinger Tidak Bergantung Waktu

Energi potensial pada persamaan Schrodinger dalam banyak situasi tidak bergantung pada waktu, melainkan bergantung pada posisi elektron didalam atom. Sehingga perhatian kita tertuju pada keberadaan elektron dalam selang waktu yang cukup panjang dan bukan tertuju pada keberadaan elektron dari waktu ke waktu. Persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu dalam satu dimensi diperoleh dengan menghilangkan fungsi gelombang yang bergantung waktu $\psi(x,t)$ pada persamaan (2.15) dan menggantinya dengan fungsi gelombang tidak bergantung waktu $\psi(x)$, yaitu dengan cara memisalkan $\psi(x) = Ae^{\frac{ipx}{\hbar}}$ pada persamaan (2.9) dan mensubstitusikannya kedalam persamaan (2.15) sesuai langkah-langkah sebagai berikut

$$\psi(x,t) \; = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} = Ae^{\frac{ipx}{\hbar}}e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \tag{2.17}$$

$$\psi(x,t) = \psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \tag{2.18}$$

substitusi persamaan (2.18) ke persamaan (2.15) didapatkan

$$-\frac{\hbar^2}{2m}e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V\psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = i\hbar\psi(x)\left(\frac{\partial}{\partial t}e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\right)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}\right]e^{-\frac{iEt}{\hbar}} + V\psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = E\psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \tag{2.19}$$

kemudian ruas kiri dan kanan masing-masing suku pada persamaan (2.19) dibagi dengan $e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$ maka didapatkan

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V\psi(x) = E\psi(x) \tag{2.20}$$

(Liboff, 2003:187)

persamaan (2.20) merupakan persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu dalam satu dimensi. Pada kasus tiga dimensi, persamaan (2.20) dapat dituliskan

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi_{(x,y,z)} + V\psi_{(x,y,z)} = E\psi_{(x,y,z)} \tag{2.21}$$

Secara umum persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu dapat dituliskan

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi = E\psi \tag{2.22}$$

(Gasiorowics, 1996:169)

atau

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + [E - V(r)]\psi = 0 \tag{2.23}$$

dimana ∇^2 merupakan Laplacian yang bergantung pada koordinat yang digunakan untuk memecahkan persamaan Schrodinger.

2.2.3 Persamaan Schrodinger dalam Koordinat Bola

Laplacian ∇^2 dalam koordinat bola diberikan oleh

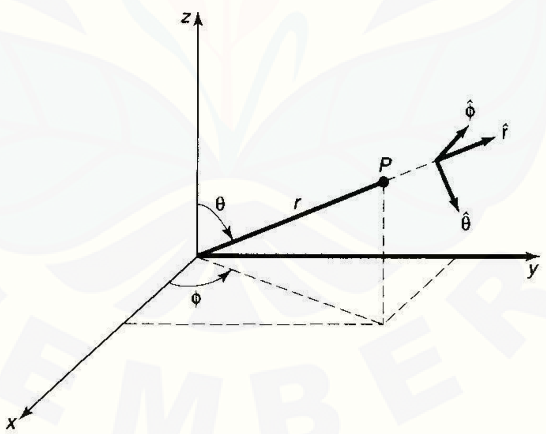
$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{2.24}$$

(Sugiono, 2016:404)

substitusi persamaan (2.24) ke persamaan (2.23) didapatkan

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\psi_{(r,\theta,\phi)} +$$
$$[E - V(r)]\psi_{(r,\theta,\phi)} = 0 \tag{2.25}$$

dimana fungsi gelombang $\psi_{(r,\theta,\phi)}$ dideskripsikan sebagai fungsi yang bergantung pada jari-jari r dan fungsi yang bergantung pada sudut polar θ dan sudut azimut ϕ.



Gambar 2.1 Koordinat Bola: jari-jari $\boldsymbol{r}$, sudut polar $\boldsymbol{\theta}$, dan sudut azimut $\boldsymbol{\phi}$

Sehingga untuk menyelesaikan persamaan (2.25) menggunakan metode separasi variabel

$$\psi_{(r,\theta,\phi)} = R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi) \tag{2.26}$$

substitusi persamaan (2.26) kedalam persamaan (2.25) didapatkan

$$\frac{1}{r^2}\left[\mathrm{Y}(\theta,\phi)\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\frac{R(r)}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial \mathrm{Y}(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+\frac{R(r)}{sin^2\theta}\frac{\partial^2\mathrm{Y}(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right]+$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(r)]R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)=0 \qquad (2.27)$$

kemudian tiap suku pada persamaan (2.27) dikalikan dengan r^2 dan dibagi dengan $R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi)$ didapatkan

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\frac{1}{\mathrm{Y}(\theta,\phi)\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial \mathrm{Y}(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\mathrm{Y}(\theta,\phi)\,sin^2\theta}\frac{\partial^2\mathrm{Y}(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}+$$

$$\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=0 \qquad (2.28)$$

(Griffith, 2005:134)

atau dapat dituliskan

$$\left[\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]\right]+\left[\frac{1}{\mathrm{Y}(\theta,\phi)\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial \mathrm{Y}(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+\right.$$

$$\left.\frac{1}{\mathrm{Y}(\theta,\phi)\,sin^2\theta}\frac{\partial^2\mathrm{Y}(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right]=0 \qquad (2.29)$$

persamaan (2.29) terbagi atas dua suku, dimana suku yang pertama hanya bergantung pada arah radial $R(r)$ dan suku kedua hanya bergantung pada arah angular $Y(\theta,\phi)$. Sehingga penjumlahan dari masing-masing suku akan selalu tetap (sama dengan konstanta). Apabila dipilih konstanta pemisah berharga $l(l+1)$, maka persamaan (2.29) dapat dipisah menjadi bagian radial yaitu suku yang hanya bergantung jari-jari r berikut

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=l(l+1) \qquad (2.30)$$

dan bagian angular yaitu suku yang bergantung sudut θ dan sudut ϕ berikut

$$\frac{1}{\mathrm{Y}(\theta,\phi)\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial \mathrm{Y}(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\mathrm{Y}(\theta,\phi)\,sin^2\theta}\frac{\partial^2\mathrm{Y}(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}=-l(l+1) \qquad (2.31)$$

2.3 Persamaan Schrodinger untuk Atom Hidrogen

Atom hidrogen merupakan atom yang paling sederhana karena hanya memiliki sebuah proton sebagai inti dan sebuah elektron. Elektron berputar disekeliling inti (proton) yang memiliki massa jauh lebih besar dari pada massa elektron ($m_p \gg m_e$) akibatnya inti (proton) relatif diam tidak bergerak. Sehingga massa tereduksi dari sistem dua partikel antara elektron bermassa m_e berputar disekeliling inti (proton) bermassa m_p yang lebih berat, dinyatakan oleh

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_p}$$

$$\mu = m_e \tag{2.32}$$

Dimana dapat diperoleh bahwa massa tereduksi μ nilainya adalah sama dengan massa dari elektron m_e.

Persamaan Schrodinger untuk atom hidrogen pada lintasan bola dalam sistem dua partikel dapat dituliskan

$$\left(\frac{p^2}{2\mu} + V(r)\right)\psi = E\psi \tag{2.33}$$

dengan $V(r)$ merupakan energi potensial untuk gaya interaksi antara inti (proton) dan elektron yang dapat dituliskan

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r} \tag{2.34}$$

Seringkali atom dianggap simetri dengan bola, sehingga persamaan Schrodinger yang digunakan untuk atom hidrogen menggunakan koordinat bola. Oleh karena itu, persamaan Schrodinger untuk atom hidrogen dapat dipisah menjadi bagian radial dan bagian angular sama seperti persamaan Schrodinger dalam koordinat bola.

2.3.2 Bagian Radial

Pertama akan dijabarkan terlebih dahulu pada bagian radial yang merupakan persamaan gelombang yang merambat secara radial atau menyebar dari pusat atom hidrogen menuju ke segala arah dan bergantung pada jarak r dari pusat atom hidrogen. Langkah yang perlu dilakukan untuk menjabarkan bagian radial adalah menata ulang persamaan (2.30) menjadi

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}[E - V(r)]R(r) = l(l+1)R(r) \tag{2.35}$$

dengan mendefinisikan $U(r) = rR(r)$ maka didapatkan

$$\frac{\partial U(r)}{\partial r} = R(r) + r\frac{\partial R(r)}{\partial r} \tag{2.36}$$

tiap suku pada persamaan (2.36) dikalikan r maka didapatkan

$$r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} = r \frac{\partial U(r)}{\partial r} - U(r) \quad (2.37)$$

dan diperoleh

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) = r \frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} \quad (2.38)$$

sehingga persamaan (2.35) sebagai persamaan radial dapat dituliskan kembali dalam bentuk

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} + \left(V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right) U(r) = EU(r) \quad (2.39)$$

(Purwanto, 2016:136)

Persamaan radial atom hidrogen diperoleh dengan mensubstitusi persamaan (2.34) ke dalam persamaan (2.39) dan menggunakan massa tereduksi μ akan didapatkan

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} + \left[\left(-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right) + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\right] U(r) = EU(r)$$

$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu e^2}{4\pi\varepsilon_0 \hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] U(r) = 0 \quad (2.40)$$

selanjutnya digunakan sedikit manipulasi dengan memanfaatkan bentuk asimtotik dari solusi. Untuk r yang sangat kecil ($r \to 0$), maka persamaan (2.40) dapat dituliskan

$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} U(r) = 0 \quad (2.41)$$

persamaan (2.41) diselesaikan dengan menggunakan metode Frobenius dalam bentuk deret

$$U(r) = r^s \sum_{k=0}^{\infty} C_k r^k \quad (2.42)$$

dimana

$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} = \frac{\partial^2}{\partial r^2}[C_0 r^s + C_1 r^{s+1} + C_2 r^{s+2} + \cdots] \quad (2.43)$$

$$\frac{l(l+1)}{r^2} U(r) = \frac{l(l+1)}{r^2}[C_0 r^s + C_1 r^{s+1} + C_2 r^{s+2} + \cdots] \quad (2.44)$$

kemudian substitusi persamaan (2.43) dan (2.44) ke persamaan (2.41) akan didapatkan

$$C_0[s(s-1) - l(l+1)]r^{s-2} + C_1[s(s+1) - l(l+1)]r^{s-1} + C_2[(s+1)(s+2) - l(l+1)]r^s + \cdots = 0 \quad (2.45)$$

dengan mengenolkan koefisien dari suku dengan variabel r pangkat terendah yaitu r^{s-2} maka

$$s(s-1)-l(l+1)=0$$

$$[s+l][s-(l+1)]=0 \tag{2.46}$$

sehingga diperoleh solusi $s=-l$ atau $s=l+1$. Oleh sebab itu didapatkan

$$U(r)=Ar^{l+1}+Br^{-l} \tag{2.47}$$

akan tetapi untuk nilai r yang sangat kecil $(r\to 0)$ maka nilai r^{-l} akan menjadi tak berhingga, sehingga $B=0$ agar $U(r)$ berhingga. Oleh karena itu solusi dari persamaan (2.41) adalah

$$U(r)\sim r^{l+1} \tag{2.48}$$

sekarang untuk r yang sangat besar $(r\to\infty)$, maka persamaan (2.40) dapat dituliskan

$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2}+\frac{2\mu E}{\hbar^2}U(r)=0 \tag{2.49}$$

karena elektron dalam keadaan terikat dengan inti atom, maka energi yang dimiliki oleh elektron akan berharga negatif. Apabila dimisalkan $\sqrt{\frac{2\mu(-E)}{\hbar^2}}=\mathrm{q}$, maka solusi dari persamaan (2.49) didapatkan

$$U(r)=Ce^{\mathrm{qr}}+De^{-\mathrm{qr}} \tag{2.50}$$

akan tetapi untuk nilai r yang sangat kecil $(r\to\infty)$ maka nilai e^{qr} akan menjadi tak berhingga, sehingga $C=0$ agar $U(r)$ berhingga. Oleh karena itu solusi dari persamaan (2.50) adalah

$$U(r)\sim e^{-\mathrm{qr}} \tag{2.51}$$

langkah selanjutnya adalah menghilangkan perilaku asimtotik dengan memperkenalkan fungsi baru yang bergantung r yaitu $K(r)$. Sehingga penyelesaian untuk $U(r)$ dari persamaan (2.51) adalah

$$U(r)=r^{l+1}\,K(r)\,e^{-\mathrm{qr}} \tag{2.52}$$

dimana

$$\frac{\partial U(r)}{\partial r}=(l+1)r^{l}e^{-\mathrm{qr}}K(r)+r^{l+1}e^{-\mathrm{qr}}\frac{\partial K(r)}{\partial r}-\mathrm{q}r^{l+1}e^{-\mathrm{qr}}K(r) \tag{2.53}$$

$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2}=[r^{l+1}e^{-\mathrm{qr}}]\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2}+[2(l+1)r^{l}e^{-\mathrm{qr}}-2\mathrm{q}r^{l+1}e^{-\mathrm{qr}}]\frac{\partial K(r)}{\partial r}+$$
$$[-2\mathrm{q}(\mathrm{l}+1)r^{l}e^{-\mathrm{qr}}+l(l+1)r^{l-1}+\mathrm{q}^2r^{l+1}e^{-\mathrm{qr}}]K(r) \tag{2.54}$$

substitusi persamaan (2.52) dan persamaan (2.54) ke persamaan (2.40), sehingga diperoleh

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2} + 2\left[\frac{(l+1)}{r} - \mathrm{q}\right]\frac{\partial K(r)}{\partial r} + 2\left[\frac{-\mathrm{q}(\mathrm{l}+1)+(\mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2)}{r}\right]K(r) = 0 \qquad (2.55)$$

solusi $K(r)$ pada persamaan (2.55) dapat diasumsikan sebagai deret pangkat dalam (r) yang dapat dituliskan

$$K(r) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k r^k \qquad (2.56)$$

dimana

$$\frac{\partial K(r)}{\partial r} = \sum_{k=0}^{\infty} k b_k r^{k-1} \qquad (2.57)$$

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2} = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) b_k r^{k-2} \qquad (2.58)$$

kemudian substitusi persamaan (2.56), (2.57) dan (2.58) ke persamaan (2.55) akan diperoleh

$$\sum_{k=0}^{\infty}\{k(k+2l+1)b_k r^{k-2} + 2[-\mathrm{q}(k+\mathrm{l}+1) + \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2]b_k r^{k-1}\} = 0 \qquad (2.59)$$

dengan mengubah k ke $k-1$ pada penyebut suku pertama, maka persamaan (2.59) akan menjadi

$$(k+1)(k+2l+2)b_{k+1}r^{k-1} + 2[-\mathrm{q}(k+\mathrm{l}+1) + \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2]b_k r^{k-1} = 0$$

$$b_{k+1} = \frac{2[\mathrm{q}(k+\mathrm{l}+1)+\mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2]}{(k+1)(k+2l+2)} b_k \qquad (2.60)$$

persamaan (2.60) merupakan rumus rekursi yang digunakan digunakan untuk menentukan nilai koefisien, dan karena itu fungsi $K(r)$: kita mulai dengan b_0 dan dari persamaan (2.60) didapatkan b_1, dengan menggunakan hasil ini kembali, akan diperoleh b_2, demikian seterusnya. Sekarang kita tentukan bentuk koefisiennya untuk nilai k yang besar. Rumus rekursi daerah ini adalah

$$b_{k+1} = \frac{2\mathrm{q}}{k} b_k \qquad (2.61)$$

dimana

$$b_k = \frac{(2\mathrm{q})^k}{k!} b_0 \qquad (2.62)$$

substitusi persamaan (2.62) ke persamaan (2.56) sehingga diperoleh

$$K(r) = b_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\mathrm{q}\mathrm{r})^k}{k!} \quad \Longrightarrow K(r) \sim e^{2\mathrm{qr}} \qquad (2.63)$$

oleh karena itu persamaan (2.52) sebagai solusi radial menjadi

$$U(r) = r^{l+1}\, e^{2\mathrm{qr}}\, e^{-\mathrm{qr}} = r^{l+1} e^{\mathrm{qr}} \tag{2.64}$$

persamaan (2.64) ini akan menjadi tak berhingga pada nilai q yang sangat besar ($q \rightarrow \infty$) sama halnya dengan perilaku amsitotik pada persamaan (2.50). Agar tidak muncul bentuk asimtotik kembali, maka cara untuk mengatasi ini adalah deret pada persamaan (2.56) haruslah berhenti pada sebuah pangkat tertentu Z. Oleh sebab itu fungsi $K(r)$ akan menjadi polinomial berorde Z sebagai berikut

$$K(r) = \sum_{k=0}^{Z} b_k r^k \tag{2.65}$$

sehingga semua koefisien $b_{Z+1}, b_{Z+2}, b_{Z+3}, \dots$ akan lenyap. Ketika $b_{Z+1} = 0$, rumus rekursi (2.60) menjadi

$$\mathrm{q}(Z + \mathrm{l} + 1) + \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2 = 0 \tag{2.66}$$

dengan mengenalkan notasi baru

$$n = Z + \mathrm{l} + 1 \tag{2.67}$$

dimana n kita kenal sebagai bilangan kuantum utama dan dengan mengganti nilai $\mathrm{q} = \sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$ pada persamaan (2.66), akan kita dapatkan energi sebagai berikut

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \text{ dimana } n = 1,2,3, \dots \tag{2.68}$$

apabila dimisalkan $\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$ sebagai a_0, akan kita peroleh energi dalam bentuk

$$E_n = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\frac{1}{n^2 a_0} \tag{2.69}$$

hasil ini ternyata identik dengan teori Bohr tentang atom hidrogen yang terkenal ketika kita ambil nilai $n = 1$ atau pada keadaan dasar, dimana disini dinyatakan bahwa jarak elektron mengorbit inti (proton) diukur dari pusat atom dinyatakan menurut persamaan

$$r_n = n^2 a_0 \tag{2.70}$$

dimana r_n menyatakan jarak elektron mengorbit inti (proton) untuk tiap n yang ditentukan, sedangkan a_0 menyatakan jarak orbit terdekat elektron pada inti (proton) ketika mengorbit. Kemudian dengan mengotak-atik persamaan a_0 akan diperoleh

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \quad => \quad \frac{\mu}{\hbar^2} = \frac{4\pi\varepsilon_0}{a_0 e^2} \tag{2.71}$$

substitusi persamaan (2.71) kedalam persamaan q, akan kita dapatkan q dalam bentuk a_0 sebagai berikut

$$q = \sqrt{-2\frac{\mu}{\hbar^2}E_n} = \sqrt{-2\left(\frac{4\pi\varepsilon_0}{a_0 e^2}\right)\left(-\frac{e^2}{2(4\pi\varepsilon_0)a_0}\frac{1}{n^2}\right)} = \frac{1}{na_0} \tag{2.72}$$

Ketika nilai dari Z pada persamaan (2.67) adalah $Z = 0,1,2,3$, dan seterusnya, maka akan mensyaratkan nilai dari n adalah harus sama atau lebih besar dari $l + 1$. Sehingga akan didapatkan nilai yang diizinkan dari bilangan kuantum azimut l memiliki nilai hanya antara nol sampai $n - 1$ yaitu $(l = 0,1,2,\dots,n-1)$, agar harga n dapat dipenuhi sebagai bilangan kuantum utama yang berharga $(n = 1,2,3,\dots)$.

Fungsi radial atom hidrogen dapat diperoleh dengan mensubstitusi persamaan (2.65) kedalam persamaan (2.52) dan merujuk kembali pada pendefinisian $U(r) = rR(r)$ serta $q = \frac{1}{na_0}$, dapat dituliskan sebagai berikut

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r}U_{nl}(r) = N_{nl}\, e^{-\frac{r}{na_0}}\, r^l \sum_{k=0}^{Z} b_k r^k \tag{2.73}$$

dimana N_{nl} merupakan konstanta normalisasi. Sedangkan polinomial $r^l \sum_{k=0}^{Z} b_k r^k$ dikenal sebagai polinomial Laguerre terasosiasi $L_k^Z(r)$ yang merupakan solusi dari persamaan (2.55) dan didapatkan dengan mempelajari persamaan differensial Laguerre yang telah ada sebelum kelahiran mekanika kuantum. Polinomial Laguerre terasosiasi merupakan turunan ke Z dari Polinomial Laguerre L_k(r), diberikan oleh

$$L_k^Z(r) = \frac{d^Z}{dr^Z}L_k(r) \tag{2.74}$$

dimana

$$L_k(r) = e^r \frac{d^k}{dr^k}\left(r^k e^{-r}\right) \tag{2.75}$$

masing-masing dari $L_k(r)$ dan $L_k^Z(r)$ merupakan solusi umum dari persamaan differensial berikut

$$r\frac{d^2L_k(r)}{dr^2} + (1-r)\frac{dL_k(r)}{dr} + kL_k(r) = 0 \tag{2.76}$$

$$r\frac{d^2L_k^Z(r)}{dr^2} + (Z+1-r)\frac{dL_k^Z(r)}{dr} + (k-Z)L_k^Z(r) = 0 \tag{2.77}$$

bentuk dari persamaan (2.77) identik dengan persamaan radial atom hidrogen pada persamaan (2.55) dengan menggunakan sebuah variabel pengganti

$$f = 2\mathrm{qr} = 2\sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}\, r \tag{2.78}$$

dan menggunakan $a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{\mu e^2}$ serta $\mathrm{q} = \frac{1}{na_0}$, kita dapat menjabarkan persamaan (2.55) menjadi persamaan sebagai berikut

$$f\frac{d^2L(f)}{df^2} + [(2l+1)+1-f]\frac{dL(f)}{df} + [(n+l)-(2l+1)]L(f) = 0 \tag{2.79}$$

Sekarang kita mengetahui bahwa persamaan (2.77) dan persamaan (2.79) adalah identik dengan asumsi bahwa $K(r) = L(f)$. Oleh karena itu, kita dapat mengambil keputusan bahwa solusi dari persamaan (2.79) merupakan polinomial Laguerre terasosiasi yang diberikan oleh $L_{n+1}^{2l+1}(2\mathrm{qr})$. Sehingga fungsi gelombang radial atom hidrogen pada persamaan (2.73) dapat kita tuliskan kembali sebagai berikut

$$R_{nl}(r) = N_{nl}\, e^{-\frac{\mathrm{r}}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n+1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \tag{2.80}$$

dimana N_{nl} merupakan sebuah konstanta normalisasi yang dapat dicari nilainya dengan syarat normalisasi fungsi radial

$$\int_0^\infty [R_{nl}(r)]^* [R_{nl}(r)]\, r^2 dr = 1 \tag{2.81}$$

dan menggunakan kondisi normalisasi dari polinomial Laguerre terasosiasi berikut

$$\int_0^\infty e^{-w}\, w^{2l} [L_{n+1}^{2l+1}(w)]^2 w^2 dw = \frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} \tag{2.82}$$

maka didapatkan nilai normalisasi N_{nl} sebagai

$$N_{nl} = -\left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \tag{2.83}$$

Sehingga persamaan (2.80) sebagai solusi persamaan radial dapat dituliskan

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-r/na_0} \left[-L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)\right] \tag{2.84}$$

(Zettili, 2009:359)

2.3.3 Bagian Angular

Bagian angular merupakan persamaan gelombang yang merambat secara angular atau berotasi berdasarkan sudut polar (θ) dan sudut azimut (ϕ). Persamaan angular pada atom hidrogen sama dengan persamaan angular pada koordinat bola karena pada persamaan angular merupakan persamaan yang telah tetap dalam arti tidak mengandung fungsi atau operator yang belum diketahui seperti $V(r)$ pada persamaan radial. Langkah yang dilakukan untuk menjabarkan persamaan polar adalah dengan melakukan pemisahan variabel lebih lanjut pada persamaan (2.31), yaitu sebagai berikut

$$Y_{(\theta,\phi)} = \Theta(\theta)\Phi(\phi) \tag{2.85}$$

substitusi persamaan (2.85) kedalam persamaan (2.31) maka didapatkan

$$\frac{1}{\Theta(\theta)\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\Phi(\phi)\,sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2} = -l(l+1) \tag{2.86}$$

setelah persamaan (2.86) dikalikan dengan $sin^2\theta$, didapatkan

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

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right) + l(l+1)sin^2\theta = -\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2} \tag{2.87}$$

sama seperti persamaan (2.29) persamaan (2.87) bernilai benar jika kedua ruas sama dengan konstanta tertentu, misalkan dipilih m^2 agar solusi yang diberikan mempunyai makna fisis. Sehingga persamaan (2.87) dapat dipisahkan menjadi suku yang hanya bergantung pada sudut polar θ yaitu

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right) + l(l+1)sin^2\theta = m^2 \tag{2.88}$$

dan suku yang hanya bergantung pada sudut azimut ϕ yaitu

$$\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2} = -m^2 \tag{2.89}$$

a. Solusi persamaan polar

Selanjutnya akan kita selesaikan suku bergantung pada sudut polar θ pada persamaan (2.88) yang disebut sebagai persamaan polar. Persamaan polar menggambarkan gerak rotasi berdasarkan sudut θ yang memotong bidang xy. Menyelesaikan persamaan polar secara langsung memang sangat sulit, oleh karena itu untuk mempermudah digunakan fungsi khusus yaitu polinomial Legendre terasosiasi $P_l^m(v)$ yang diberikan oleh

$$P_l^m(v) = (1-v^2)^{\frac{|m|}{2}} \left(\frac{d}{dv}\right)^{|m|} P_l(v) \tag{2.90}$$

(Boas, 2006:583)

dimana $P_l(v)$ pada persamaan (2.90) merupakan polinomial Legendre yang didefinisikan oleh formula Rodrigues berikut

$$P_l(v) = \frac{1}{2^l l!}\left(\frac{d}{dv}\right)^l (v^2-1)^l \tag{2.91}$$

(Ayres and Ault, 1999:224)

dimana masing-masing polinomial $P_l(v)$ dan $P_l^m(v)$ merupakan solusi umum dari persamaan differensial Legendre berikut

$$(1-v^2)\frac{d^2P_l(v)}{dv^2} - 2v\frac{dP_l(v)}{dv} + l(l+1)P_l(v) = 0 \tag{2.92}$$

$$(1-v^2)\frac{d^2P_l^m(v)}{dv^2} - 2v\frac{dP_l^m(v)}{dv} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{(1-v^2)}\right]P_l^m(v) = 0 \tag{2.93}$$

Langkah yang harus dilakukan adalah pada persamaan (2.88) dikalikan dengan $\frac{\Theta(\theta)}{sin^2\theta}$, maka didapatkan

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Theta(\theta)}{\partial\theta}\right) + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{sin^2\theta}\right)\Theta(\theta) = 0 \tag{2.94}$$

selanjutnya, dengan menggunakan pengganti variabel $\cos\theta = v$ akan didapatkan

$$(1-v^2)\frac{\partial^2\Theta}{\partial v^2} - 2v\frac{\partial\Theta}{\partial v} + \left(l(l+1) - \frac{m^2}{(1-v^2)}\right)\Theta = 0 \tag{2.95}$$

dengan asumsi bahwa $\Theta = P_l^m(v)$, maka akan didapatkan bahwa persamaan (2.95) identik dengan persamaan differensial Legendre terasosiasi pada persamaan (2.93), sehingga kita dapat mengambil keputusan bahwa solusi dari persamaan (2.194) adalah sebagai berikut

$$\Theta(\theta) \sim P_l^m(\cos\theta)$$

$$\Theta_{lm}(\theta) = C_{lm}P_l^m(\cos\theta) \tag{2.96}$$

dimana $P_l^m(\cos\theta)$ merupakan polinomial Legendre terasosiasi yang bergantung variabel $\cos\theta$, sedangkan C_{lm} merupakan suatu konstanta normalisasi yang nilainya dapat dicari menggunakan syarat normalisasi fungsi gelombang $\Theta_{lm}(\theta)$ diberikan oleh

$$\int_0^{\pi}[\Theta_{lm}(\theta)]^*[\Theta_{lm}(\theta)]\sin\theta\, d\theta = 1 \tag{2.97}$$

dan menggunakan normalisasi polinomial Legendre terasosiasi berikut

$$\int_0^{\pi}\ [P_l^m(\cos\theta)]^2\sin\theta\, d\theta = \left(\frac{2}{2l+1}\right)\left(\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}\right)$$

maka diperoleh konstanta normalisasi C_{lm} sebagai berikut

$$C_{lm} = (-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \tag{2.98}$$

sehingga persamaan (2.96) sebagai solusi persamaan polar dapat dituliskan

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^m(\cos\theta) \tag{2.99}$$

b. Solusi persamaan azimut

Suku yang hanya bergantung pada sudut azimut ϕ pada persamaan (2.89) disebut sebagai persamaan azimut. Persamaan azimut menggambarkan gerak rotasi disekitar sumbu-z dengan sudut rotasi bernilai nol sampai 2π. Tetapan negatif $-m^2$ dipilih agar memberikan solusi berupa fungsi sinusoidal dan periodik. Sedangkan jika dipilih tetapan positif m^2 maka akan memberikan solusi berupa fungsi eksponensial. Persamaan azimut akan kita selesaikan terlebih dahulu karena lebih mudah untuk diselesaikan. Langkah yang perlu dilakukan adalah menuliskan kembali persamaan (2.89) dalam bentuk

$$\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2} + m^2\Phi(\phi) = 0 \tag{2.100}$$

solusi penyelesaian dari persamaan (2.100) dapat dituliskan

$$\Phi(\phi) \sim e^{\pm im\phi} \tag{2.101}$$

merujuk pada gambar 2.1 dapat dijelaskan saat (ϕ) berada di 2π maka (ϕ) akan kembali pada posisi awal $(\phi = 0)$. Sehingga dimiliki suatu hubungan,

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi)$$

$$e^{\pm im(\phi+2\pi)} = e^{\pm im\phi}$$

$$e^{\pm im(2\pi)} = 1 \tag{2.102}$$

dapat dikatakan setiap bilangan bulat m dapat berharga $(m = 0, \pm1, \pm2, \ldots)$. Sehingga solusi pada persamaan (2.101) dipilih nilai m yang berharga positif saja dan dapat dituliskan kembali dalam bentuk

$$\Phi_m(\phi) = A_m e^{im\phi} \tag{2.103}$$

konstanta A_m pada persamaan (2.103) disebut konstanta normalisasi atau jika dalam gelombang disebut amplitudo gelombang. Nilai konstanta A_m dapat ditentukan dari syarat normalisasi fungsi gelombang $\Phi_m(\phi)$ yaitu probabilitas fungsi gelombang azimut harus berharga satu, dituliskan

$$\int_0^{2\pi}[\Phi_m(\phi)]^* [\Phi_m(\phi)]d\phi = 1 \quad (2.104)$$

akan didapatkan

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

sehingga persamaan (2.93) sebagai solusi persamaan azimut dapat dituliskan

$$\Phi_m(\phi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{im\phi} \quad (2.105)$$

(Skobelev, 2018:183)

bilangan bulat m disebut sebagai bilangan kuantum magnetik.

c. Fungsi gelombang angular

Bagian angular memiliki solusi yang disebut sebagai fungsi gelombang angular. fungsi gelombang angular merupakan gabungan dari fungsi gelombang polar pada persamaan (2.99) dan fungsi gelombang azimut pada persamaan (2.105), sehingga solusi persamaan angular dapat dituliskan sebagai berikut

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi)$$

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}e^{im\phi}\, P_l^m(\cos\theta) \quad (2.106)$$

(Supriadi, 2018:2).

2.3.4 Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen

Solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen merupakan solusi gabungan dari fungsi gelombang radial pada persamaan (2.84) dan fungsi gelombang angular pada persamaan (2.106) yang dapat dituliskan

$$\psi_{nlm}\,(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

$$= \left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2}(-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\left(\frac{2r}{na_0}\right)^l$$

$$\left[-L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)\right] P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\phi}\, e^{-r/na_0} \quad (2.107)$$

(Idris-Bey and Al-Hashimi, 2018:157).

2.4 Bilangan Kuantum

Orbital adalah daerah 3 dimensi dengan peluang terbesar menemukan elektron didalam daerah ruang seperti atom. Dimana setiap orbital mempunyai ukuran, bentuk, dan orientasi tertentu didalam ruang yang dinyatakan dengan bilangan kuantum. Penjabaran sebelumnya mengenai solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen megantarkan kita pada nilai-nilai yang dizinkan dari bilangan kuantum utama n, bilangan kuantum azimut l, dan bilangan kuantum magnetik m. Ketiga bilangan kuantum (n, l, m) berguna dalam menamai setiap keadaan fungsi gelombang atom hidrogen. Berikut merupakan definisi dari ketiga bilangan kuantum tersebut

a. Bilangan Kuantum Utama

   Bilangan kuantum utama n menyatakan ukuran dan tingkat energi orbital yang ditempati elektron mengorbit inti (proton) didalam atom hidrogen. Nilai bilangan kuantum utama berupa bilangan bulat positif dan tidak nol $n = 1,2,3$ dan seterusnya.

b. Bilangan Kuantum Azimut

   Bilangan kuantum Azimut l menyatakan bentuk orbital dari elektron mengorbit inti (proton) didalam atom hidrogen. Nilai bilangan kuantum orbital merupakan bilangan cacah yaitu $l = 0,1,2,3, \ldots (n-1)$. Oleh karena bilangan kuantum orbital terbatas pada harga $l = 0,1,2,3, \ldots (n-1)$, maka elektron hanya dapat memiliki momentum sudut $\boldsymbol{L}$ tertentu sesuai dengan persamaan $\boldsymbol{L} = \sqrt{l(l+1)}\,\hbar$ yang mengakibatkan terkuantisasi atau kekalnya momentum sudut.

c. Bilangan Kuantum Magnetik

   Bilangan kuantum magnetik m menyatakan orientasi ruang orbital atau arah dari momentum sudut elektron $\boldsymbol{L}$ yang terkuantisasi. Untuk setiap harga l, maka rentang nilai m yang memenuhi adalah $m = -l$ hingga $+l$ termasuk nol $(m = -l, \ldots, 0, \ldots, +l)$. Sehingga setiap harga l yang diberikan, akan terdapat nilai m sebanyak $(2l + 1)$ yang mungkin dengan masing-masing nilai bersesuaian dengan orientasi yang berbeda ralatif terhadap sumbu z.

BAB 3. METODE PENELITIAN

3.1 Jenis, Waktu dan Tempat Penelitian

Jenis penelitian ini adalah non eksperimen. Penelitian ini akan dilakukan pada bulan November hingga bulan Desember tahun 2018. Tempat penelitian ialah Laboratorium Fisika Lanjut, Program Studi Pendidikan Fisika, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Jember.

3.2 Definisi Operasional

Agar tidak terjadi kesalahan dalam mengartikan istilah-istilah dalam penelitian ini, maka perlu diberikan definisi operasional mengenai variabel penelitian. Adapun variabel-variabel yang akan diteliti dalam penelitian ini adalah sebagai berikut:

3.2.1 Fungsi Gelombang Atom Hidrogen

Fungsi gelombang atom hidrogen adalah fungsi gelombang 3 dimensi yang merupakan gabungan dari solusi radial yang berupa fungsi gelombang radial dan solusi angular yang berupa fungsi gelombang angular:

a. Solusi radial $R_{nl}(r)$ bergantung pada jari-jari (r) dan mengandung bilangan kuantum utama (n) dan bilangan kuantum azimut (l).
b. Solusi angular $Y_{lm}(\theta,\phi)$ bergantung pada sudut azimut (ϕ) yang mengandung bilangan kuantum magnetik (m) dan sudut polar (θ) yang mengandung bilangan kuantum azimut (l) dan bilangan kuantum magnetik (m). Sehingga solusi angular mengandung bilangan kuantum azimut (l) dan bilangan kuantum magnetik (m).
c. Gabungan solusi radial $R_{nl}(r)$ dan solusi angular $Y_{lm}(\theta,\phi)$ merupakan solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen $(\psi_{nlm}(r,\theta,\phi))$ yang mengandung bilangan kuantum utama (n), bilangan kuantum azimut (l) dan bilangan kuantum magnetik (m).

3.2.2 Bilangan Kuantum

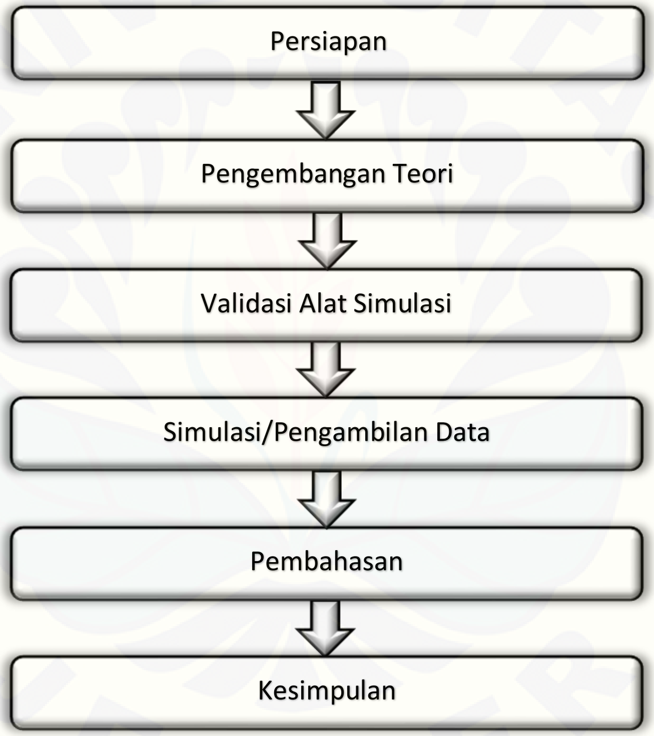
Pada solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen terdiri dari 3 bilangan kuantum yaitu sebagai berikut:

a. Bilangan kuantum utama ($n = 4$)

b. Bilangan kuantum azimut ($l = 0,1,2, \ldots n - 1$)

c. Bilangan kuantum magnetik ($m = -l, \ldots, 0, \ldots, +l$)

3.3 Langkah Penelitian



Gambar 3.1 Bagan Langkah-Langkah Penelitian

Berdasarkan gambar dapat dijelaskan sebagai berikut:

a. Persiapan

Tahap ini adalah mempersiapkan bahan-bahan yang dijadikan informasi dengan cara mengumpulkan buku-buku tentang fisika modern, fisika kuantum, fisika matematika, fisika atom, jurnal, dan berbagai sumber berskala nasional maupun internasional yang relevan atau terkait dengan solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen dengan menggunakan pendekatan persamaan Schrodinger.

b. Pengembangan Teori

Pada tahap ini peneliti mengembangkan teori yang sudah ada di buku literatur mengenai aplikasi persamaan Schrodinger pada atom hidrogen. Persamaan Schrodinger untuk atom hidrogen menggunakan persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu dalam koordinat bola. Penyelesaian persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu dalam koordinat bola menggunakan metode separasi variabel, sehingga dapat dipisahkan kedalam tiga persamaan yaitu persamaan yang hanya bergantung jari-jari (r) dan persamaan yang bergantung sudut (θ, ϕ). Persamaan yang bergantung (r) disebut persamaan radial dan solusinya adalah berupa fungsi gelombang radial $R_{nl}(r)$; persamaan yang bergantung sudut (θ, ϕ) disebut persamaan angular dan solusinya disebut fungsi gelombang angular $Y_{lm}(\theta, \phi)$ yang merupakan gabungan dari fungsi gelombang polar $\Theta_{lm}(\theta)$ dan fungsi gelombang azimut $\Phi_m(\phi)$. Sedangkan gabungan dari fungsi gelombang radial dan fungsi gelombang angular tersebut merupakan solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen ternormalisasi $(\psi_{nlm}(r, \theta, \phi))$. Fungsi gelombang $(\psi_{nlm}(r, \theta, \phi))$ bergantung pada tiga bilangan kuantum n, l dan m. bilangan kuantum l dan m bergantung pada bilangan kuantum utama n. Teori yang dikembangkan adalah solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen pada bilangan kuantum utama (n) 4.

c. Validasi Alat Simulasi

Pada tahap ini dilakukan validasi terhadap hasil solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen pada bilangan kuantum utama $n = 1,2,3$. Hasilnya dicocokkan dengan buku-buku ataupun penelitian sebelumnya yang terkait.

d. Simulasi/Pengambilan Data

Tahap ini adalah perhitungan secara analitik untuk menentukan hasil dari solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen pada bilangan kuantum utama (n) 4.

e. Pembahasan

Selanjutnya dari hasil perhitungan analitik akan dijelaskan secara rinci mengenai solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen pada bilangan kuantum utama (n) 4.

f. Kesimpulan

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

3.4 Teori Hasil Pengembangan

Teori yang digunakan dalam penelitian ini adalah:

3.4.1 Solusi Persamaan Radial (Fungsi Gelombang Radial)

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

(Zettili, 2009:359)

dimana $\mathrm{L}_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right)$ merupakan polinomial Laguerre terasosiasi.

3.4.2 Solusi Persamaan Angular (Fungsi Gelombang Angular)

a. Solusi Persamaan Polar (Fungsi Gelombang Polar)

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

dimana $P_l^m(\cos\theta)$ merupakan polinomial Legendre terasosiasi.

b. Solusi Persamaan Azimut (Fungsi Gelombang Azimut)

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

(Skobelev, 2018:183)

c. Solusi Persamaan Angular (Fungsi Gelombang Angular)

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi)$$

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\, e^{im\phi}\, P_l^m(\cos\theta)$$

(Supriadi, 2018:2).

3.4.3 Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

$$= \left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2} (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{l}$$

$$\left[-L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)\right] P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\phi} e^{-r/na_0}$$

(Idris-Bey and Al-Hashimi, 2018:157).

3.5 Data Simulasi

Data simulasi untuk menentukan solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen $\psi_{nlm}\,(r, \theta, \phi)$ adalah sebagai berikut:

Tabel 3.1 Data Simulasi Menentukan Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen

<table>
<tr><th rowspan="2">n</th><th rowspan="2">l</th><th rowspan="2">m</th><th rowspan="2">$R_{nl}(r)$</th><th colspan="2">$Y_{lm}(\theta, \phi)$</th><th rowspan="2">$\psi_{nlm}\,(r, \theta, \phi)$</th></tr>
<tr><th>$\Theta_{lm}(\theta)$</th><th>$\Phi_m(\phi)$</th></tr>
<tr><td rowspan="16">4</td><td>0</td><td>0</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="3">1</td><td>-1</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>0</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>1</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="5">2</td><td>-2</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>-1</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>0</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>1</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>2</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td rowspan="7">3</td><td>-3</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>-2</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>-1</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>0</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>1</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>2</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
<tr><td>3</td><td></td><td></td><td></td><td></td></tr>
</table>

3.6 Pembanding Hasil Simulasi Penelitian

Peneletian ini menggunakan beberapa pembanding hasil simulasi atau pengembangan teori diantaranya adalah fungsi gelombang atom hidrogen untuk $n = 1,2,3$ dan bentuk fungsi gelombang atom hidrogen untuk $n = 1,2,3$ dalam bentuk grafik 2 dimensi pada fungsi gelombang radial dan 3 dimensi pada fungsi gelombang angular yang dapat dilihat pada lampiran 7 (halaman 122-123).

3.6.1 Fungsi Gelombang Atom Hidrogen untuk $n = 1,2,3$

Tabel berikut ini merupakan hasil penelitian berupa solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen untuk $n = 1,2,3$ yang penulis tulis ulang berserta solusi lengkapnya dan sudah sesuai dengan buku literatur (Krane, 2012:205) dapat dilihat pada lampiran 7 (halaman 122) digunakan sebagai validasi.

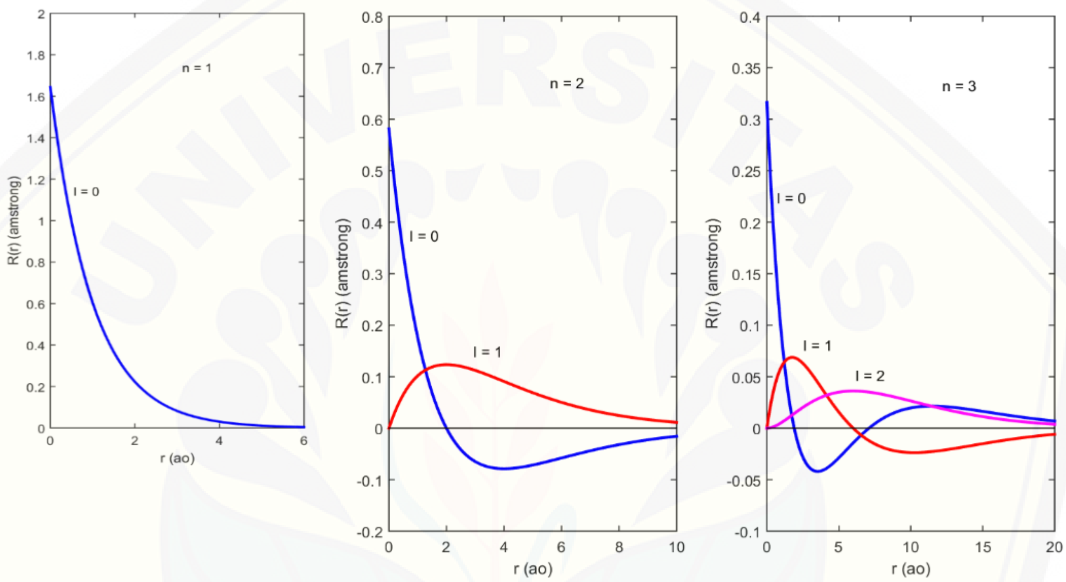
Tabel 3.2 Validasi Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen $\boldsymbol{n = 1, 2, 3}$

n	l	m	$R_{nl}(r)$	$Y_{lm}(\theta,\phi)$		$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi)$
				$\Theta_{lm}(\theta)$	$\Phi_m(\phi)$	
1	0	0	$\frac{2}{{a_0}^{3/2}} e^{-r/a_0}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{\pi}(a_0)^{3/2}} e^{-r/a_0}$
2	0	0	$\frac{1}{(2a_0)^{3/2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}(2a_0)^{3/2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$
	1	-1	$\frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$	$\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-i\phi}$	$\frac{1}{2\sqrt{2\pi}(2a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)\sin\theta\, e^{-i\phi}\, e^{-r/2a_0}$
		0		$\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta$	$\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}(2a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)\cos\theta\, e^{-r/2a_0}$
		1		$-\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$	$\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{i\phi}$	$\frac{1}{2\sqrt{2\pi}(2a_0)^{3/2}}\left(-\frac{r}{a_0}\right)\sin\theta\, e^{i\phi}\, e^{-r/2a_0}$
3	0	0	$\frac{2}{(3a_0)^{3/2}}\left(1-\frac{2r}{3a_0}+\frac{2r^2}{27{a_0}^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$	$\frac{1}{\sqrt{\pi}(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\left(1-\frac{2r}{3a_0}+\frac{2r^2}{27{a_0}^2}\right) e^{-r/3a_0}$
	1	-1	$\frac{8}{9\sqrt{2}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}+\frac{r^2}{6{a_0}^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$	$\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-i\phi}$	$\frac{2\sqrt{3}}{9\sqrt{\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}+\frac{r^2}{6{a_0}^2}\right)\sin\theta\, e^{-i\phi}\, e^{-r/3a_0}$
		0		$\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta$	$\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$	$\frac{4\sqrt{3}}{9\sqrt{2\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}+\frac{r^2}{6{a_0}^2}\right) e^{-r/3a_0}$
		1		$-\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta$	$\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{i\phi}$	$\frac{2\sqrt{3}}{9\sqrt{\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(-\frac{r}{a_0}-\frac{r^2}{6{a_0}^2}\right)\sin\theta\, e^{i\phi}\, e^{-r/3a_0}$
	2	-2	$\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{{a_0}^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$\frac{\sqrt{15}}{4}\sin^2\theta$	$\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-2i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{54\sqrt{\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{{a_0}^2}\right)\sin^2\theta\, e^{-2i\phi}\, e^{-r/3a_0}$
		-1		$\sqrt{\frac{15}{4}}\sin\theta\cos\theta$	$\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{27\sqrt{\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{{a_0}^2}\right)\sin\theta\cos\theta\, e^{-i\phi}\, e^{-r/3a_0}$

		0		$\sqrt{\frac{5}{8}}(3cos^2\theta - 1)$	$\sqrt{\frac{1}{2\pi}}$	$\frac{1}{27\sqrt{2\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{a_0{}^2}\right)(3cos^2\theta - 1)\ e^{-r/3a_0}$
		1		$-\sqrt{\frac{15}{4}}\sin\theta\cos\theta$	$\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{27\sqrt{\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(-\frac{r^2}{a_0{}^2}\right)\sin\theta\cos\theta\ e^{i\phi}e^{-r/3a_0}$
		2		$\frac{\sqrt{15}}{4}sin^2\theta$	$\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{2i\phi}$	$\frac{\sqrt{3}}{54\sqrt{\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{a_0{}^2}\right)sin^2\theta\ e^{2i\phi}e^{-r/3a_0}$

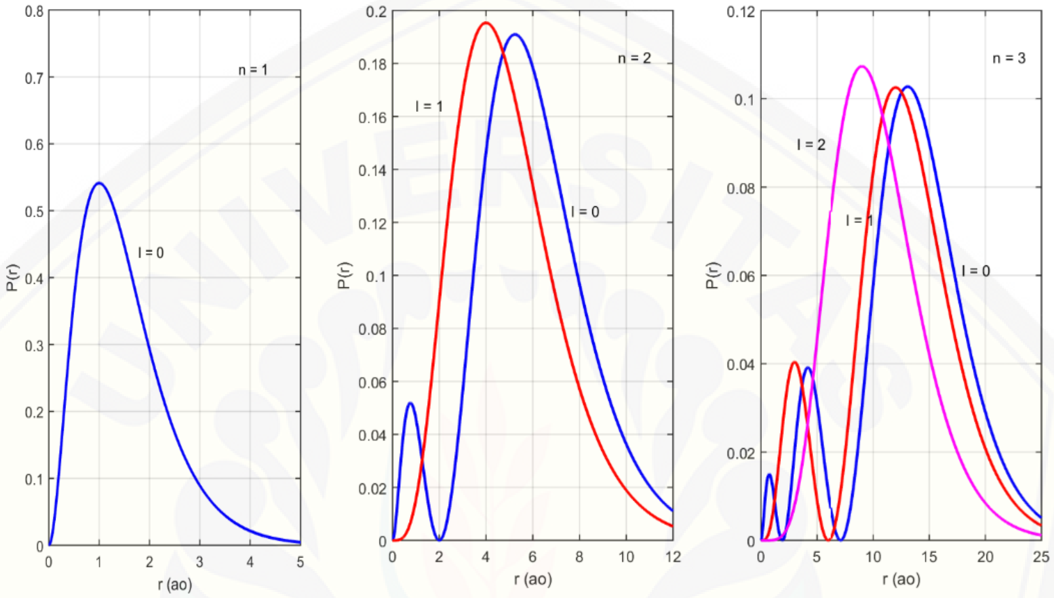
3.6.2 Bentuk Fungsi Gelombang Atom Hidrogen untuk $n = 1,2,3$

Berikut ini merupakan validasi simulasi dari penelitian berupa grafik dari probabilitas fungsi gelombang radial dan angular atom hidrogen pada bilangan kuantum utama $n = 1,2,3$ yang penulis tulis dan sudah sesuai dengan buku literatur yaitu (Krane, 2012: 206-210) yang dapat dilihat dilampiran 7 (halaman 123).



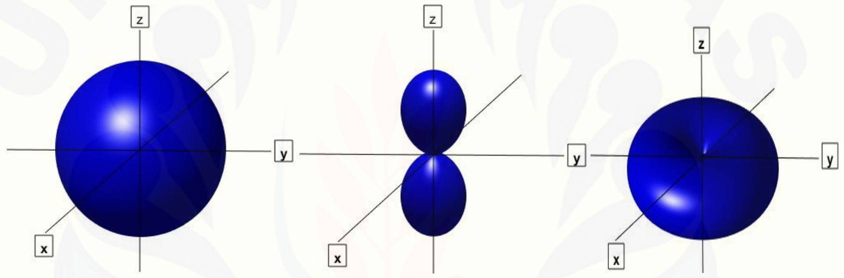
Gambar 3.2 Validasi Grafik Hasil Fungsi Gelombang Radial Atom Hidrogen $\boldsymbol{n = 1, 2, 3}$

Gambar 3.2 merupakan grafik hasil fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk $(n = 1,2,3)$ yang digunakan sebagai validasi simulasi grafik fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk $(n = 1,2,3)$ pada rujukan yang digunakan. Berdasarkan grafik tersebut dapat dijelaskan bahwa pada sumbu ordinat menyatakan posisi elektron (r) diukur dari inti (proton) didalam atom hidrogen dalam satuan (a_0), sedangkan pada sumbu absis adalah menyatakan simpangan $R(r)$ dalam satuan amstrong (Å). Masing-masing keadaan $(n = 1,2,3)$ memiliki jumlah dan bentuk gelombang yang berbeda. Hal ini disebabkan karena kebergantungan pada nilai (l) yang diizinkan. Berdasarkan grafik juga dapat dilihat bahwa amplitudo dari tiap-tiap gelombang pada masing-masing keadaan $(n = 1,2,3)$ adalah semakin menurun ketika nilai (l) semakin bertambah. Grafik tiap-tiap fungsi gelombang radial yang terbentuk pada masing-masing keadaan $(n = 1,2,3)$ menunjukkan bahwa simpangannya menurun secara eksponesial, hal ini dikarenakan fungsi gelombang radial untuk tiap keadaan $(n = 1,2,3)$ berbanding terbalik dengan fungsi eksponensialnya.



Gambar 3.3 Validasi Grafik Rapat Probabilitas Radial Atom Hidrogen $\boldsymbol{n = 1, 2, 3}$

Gambar 3.3 merupakan grafik rapat probabilitas fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk $(n = 1,2,3)$ yang digunakan sebagai validasi simulasi grafik rapat probabilitas fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk $(n = 1,2,3)$ pada rujukan yang digunakan. Berdasarkan grafik tersebut dapat dijelaskan bahwa pada sumbu ordinat menyatakan posisi elektron (r) diukur dari inti (proton) didalam atom hidrogen dalam satuan (a_0), sedangkan pada sumbu absis adalah menyatakan simpangan $P(r)$. Probabilitas fungsi gelombang radial $P(r)$ dinyatakan sebagai kuadrat nilai mutlak dari fungsi gelombang radial $|R(r)|^2$ yang merepresentasikan kemungkinan suatu elektron ditemukan pada posisi (r) tertentu didalam atom hidrogen. Hal ini dapat dilihat pada grafik masing-masing keadaan $(n = 1,2,3)$, yang mana bahwa nilai simpangannya tidak ada yang bernilai negatif. Jika ditinjau pada tiap-tiap keadaan $(n = 1,2,3)$ diperoleh untuk $(n = 1)$ hanya terdapat sebuah titik puncak yang menandakan bahwa elektron kemungkinan terbesar dapat ditemukan yaitu berada di (a_0); untuk $(n = 2)$ diperoleh dua jenis grafik karena terdapat dua nilai bilangan kuantum azimut yaitu $(l = 0)$ dan $(l = 1)$ yang masing-masing menghasilkan dua buah titik puncak maksimum dan sebuah titik puncak maksimum, sedangkan kemungkinan terbesar elektron ditemukan adalah pada titik puncak maksimum yang berada di $(4a_0)$; dan untuk $(n = 3)$ diperoleh tiga jenis grafik karena terdapat tiga nilai bilangan kuantum azimut yaitu $(l = 0)$, $(l = 1)$ dan $(l = 2)$ yang masing-masing menghasilkan tiga buah titik puncak maksimum, dua buah titik puncak maksimum dan sebuah titik puncak maksimum, sedangkan kemungkinan terbesar elektron ditemukan adalah pada titik puncak maksimum yang berada di $(9a_0)$.



$l = 0, m = 0$ $\quad$ $l = 1, m = 0$ $\quad$ $l = 1, m = \pm 1$

Gambar 3.4 Validasi Grafik Rapat Probabilitas Angular Atom Hidrogen $\boldsymbol{n = 1, 2}$

Gambar 3.4 merupakan grafik rapat probabilitas fungsi gelombang angular atom hidrogen untuk $(n = 2)$ yang digunakan sebagai validasi simulasi grafik rapat probabilitas fungsi gelombang angular atom hidrogen untuk $(n = 2)$ pada rujukan yang digunakan. Rapat probabilitas fungsi gelombang angular sendiri melukiskan kebergantungan pada sudut yang bergantung pada nilai l dan m. Kita tahu bahwa jika dipilih nilai $(n = 2)$ akan didapatkan pasangan nilai l dan m adalah $(l = 0, m = 0)$, $(l = 1, m = 0)$ dan $(l = 1, m = \pm 1)$. Grafik untuk $(l = 0, m = 0)$ sepenuhnya berbentuk bulat menyerupai bola yang merepresentasikan elektron berpeluang terbesar ditemukan pada sepanjang sumbu z dan memotong bidang xy. Sedangkan untuk nilai $(l = 1)$ memiliki dua bentuk grafik yang berbeda: untuk $(l = 1, m = 0)$ merepresentasikan bahwa elektron berpeluang besar ditemukan sepanjang sumbu z positif dan z negatif, sedangkan untuk $(l = 1, m = \pm 1)$ merepresentasikan bahwa elektron berpeluang besar ditemukan dalam bidang xy.

BAB 5 PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil pengembangan dari penelitian dapat diambil kesimpulan bahwa solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen pada bilangan kuantum utama $(n) = 4$ memiliki 16 fungsi gelombang berbeda yang terdiri dari 4 fungsi gelombang radial dan 16 fungsi gelombang angular. Berdasarkan grafik dua dimensi diperoleh bahwa seiring dengan meningkatnya nilai bilangan kuantum utama (n) maka jarak dari nilai titik puncak (r_{max}) akan semakin meningkat akan tetapi nilai probabilitas untuk menemukan elektron akan semakin mengecil yang ditandai dengan menurunnya nilai dari simpangan probabilitas untuk tiap (r_{max}) pada masing-masing keadaan $n = 1,2,3$ dan 4, sedangkan untuk mengetahui bentuk orbital dari elektron mengorbit pada inti (proton) didalam atom hidrogen dapat dinyatakan dari fungsi gelombang angularnya yang dinyatakan dalam bentuk grafik tiga dimensi.

5.2 Saran

Dalam penelitian ini, pengembangan teori yang dikaji hanya sampai solusi lengkap fungsi gelombangnya saja. Saran yang bisa diberikan untuk penelitian selanjutnya adalah menentukan nilai probabilitas, nilai ekspektasi, atau sampai pada spektrum energinya. Kondisi atom hidrogen dalam penelitian ini juga dalam kerangka nonrelativistik dan tidak memperhatikan spin kopling. Saran kedua yang bisa diberikan adalah mungkin untuk penelitian selanjutnya menggunakan kondisi *real Atom hydrogen* serta ditambahkan pendekatan teori gangguan (*perturbasi theory*) pada keadaan dasar ataupun tereksitasi.

DARTAR PUSTAKA

Ayres, F. and Ault, J. C. 1999. *Persamaan Differensial*. Edisi Kelima. Alih bahasa oleh Lily Ratna. Jakarta: Erlangga.

Beiser, A. 2003. *Concepts of Modern Physics.* Sixth Edition. United States of America: Tata McGraw-Hill Companies, Inc.

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

Ganesan, L. R. and Balaji, M. 2008. Schrodinger Equation for the Hydrogen Atom – A Simplified Treatment. *E-Journal of Chemistry*. 5(3): 659-662.

Gasiorowics, S. 1996. *Quantum Physics Second Edition*. United States of America: John wiley & Sons, Inc.

Griffith, D. J. 2005. *Introduction to Quantum Mechanics*. New York: Prentice Hall, Inc.

Hermanto, W. 2016. *Fungsi Gelombang Atom Deuterium dengan Pendekatan Persamaan Schrodinger*. Tidak diterbitkan. Skripsi. Jember: FKIP Universitas Jember.

Idris-Bey, K. and Al-Hashimi M. H. 2018. Modelling of The Wave Function and of the Energy States of Hydrogen Stored in a Spherical Cavity. *Advances in Science, Technology and Engineering Systems Journal*. 3(2): 157-163.

Krane, K. 2012. *Modern Physics Third Edition*. United States of America: John Wiley & Sons, Inc

Liboff, L. R. 2003. *Introductory Quantum Mechanics Fourth Edition*. United State of America: Addison-Wesley.

Ohno, K. 2004. *Quantum Chemistry*. Tokyo: Iwanami Publishing Company.

Prastowo, S. H. B., B. Supriadi, S. Bahri, and Z. R. Ridlo. 2018. The Stark Effect on the Spectrum Energy of Tritium in First Excited State with Relativistic Condition. *Journal of Physics: Conference Series*. 1008 012013: 1-8.

Purwanto, A. 2016. *Fisika Kuantum Edisi 2 Revisi*. Yogyakarta: Gava Media.

Skobelev, V. V. 2018. Two-Dimentional Hydrogen-like Atom: Photon Emission and Relativistic Energy Corrections. *Journal of Experimental and theoretical Physics*. 153(2): 183-193.

Sugiono, V. 2016. *Mekanika Kuantum*. Yogyakarta: CAPS (Center for Acedemic Publishing Service).

Supriadi, B., S. H. B. Prastowo, S. Bahri, Z. R. Ridlo, and T. Prihandono. 2018. The Stark Effect on the Wave Function of Tritium in Relativistic Condition. *Journal of Physics: Conference Series*. 997 012045: 1-7.

Zettili, N. 2009. *Quantum Mechanics Concepts and Aplications Second Edition*. Jacksonville, USA: John Wiley and Sons, Ltd.

LAMPIRAN

Lampiran 1. Matriks Penelitian

MATRIKS PENELITIAN

NAMA : MELVIN MAULANA

NIM : 150210102088

RG : THEORITICAL PHYSICS LEARNING

JUDUL	TUJUAN PENELITIAN	VARIABEL	DATA DAN TEKNIK PENGAMBILAN DATA	METODE PENELITIAN
SOLUSI LENGKAP FUNGSI GELOMBANG ATOM HIDROGEN (H_1^1) PADA BILANGAN KUANTUM UTAMA (n) 4	a. Untuk mengkaji fungsi gelombang atom hidrogen pada bilangan kuantum utama (n) 4	a. Variabel Bebas: Bilangan kuantum utama (n) 4 b. Variabel Kontrol: Atom hidrogen c. Variabel Terikat: Fungsi gelombang atom hidrogen	a. Mencari solusi angular b. Mencari solusi radial	a. Jenis Penelitian: Jenis penelitian ini adalah penelitian non eksperimen (Pengembangan teori fisika)

Menyetujui,
Dosen Pembimbing Utama

Drs. Bambang Supriyadi, M.Sc
NIP.19680710 199302 1 001

Menyetujui,
Dosen Pembimbing Anggota

Drs. Alex Harijanto, M.Si
NIP.19641117 199103 1 001

Lampiran 2. Penjabaran Persamaan Schodinger Bergantung Waktu dan Persamaan Schrodinger Tidak Bergantung Waktu

Fungsi gelombang ψ untuk partikel yang bergerak bebas pada arah sumbu x positif memenuhi persamaan berikut

$$\psi = Ae^{-i\theta}$$

$$\psi = Ae^{-i(\omega t - kx)}$$

Karena $k = \frac{2\pi}{\lambda}; \omega = 2\pi f; v = \lambda f$, maka diperoleh

$$\psi = Ae^{-i(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda}x)}$$

$$\psi = Ae^{-i(\omega t - \frac{2\pi}{v/f}x)}$$

$$\psi = Ae^{-i(\omega t - \frac{2\pi f}{v}x)}$$

$$\psi = Ae^{-i(\omega t - \frac{\omega}{v}x)}$$

$$\psi = Ae^{-i\omega(t - \frac{x}{v})}$$

$$\psi(x,t) = Ae^{-i\omega(t - \frac{x}{v})}$$

Mengingat bahwa $E = hf; \lambda = \frac{h}{p}; h = 2\pi\hbar$, maka fungsi gelombang ψ dapat dituliskan dalam bentuk

$$\psi = Ae^{-i(\omega t - \frac{2\pi}{\lambda}x)}$$

$$\psi = Ae^{-i(2\pi f t - \frac{2\pi}{h/p}x)}$$

$$\psi = Ae^{-i2\pi(ft - \frac{p}{h}x)}$$

$$\psi = Ae^{-i2\pi(\frac{Et}{h} - \frac{px}{h})}$$

$$\psi = Ae^{-i\frac{2\pi}{h}(Et - px)}$$

$$\psi = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

$$\psi(x,t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}$$

Turunan kedua dari fungsi gelombang ψ diatas terhadap x adalah

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{ip}{\hbar}Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}\right)$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = \frac{i^2p^2}{\hbar^2}Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2}\psi \qquad => \qquad p^2\psi = -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}$$

Sedangkan turunan pertama dari fungsi gelombang ψ terhadap t adalah

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)}$$

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\psi \qquad => \qquad E\psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

Merujuk pada hukum kekekalan energi,

$$K + V = E$$

$$\frac{1}{2}mv^2 + V = E$$

$$\frac{(mv)^2}{2m} + V = E$$

$$\frac{p^2}{2m} + V = E$$

Kalikan kedua sisi dengan fungsi gelombang ψ, didapatkan

$$\frac{p^2\psi}{2m} + V\psi = E\psi$$

Kemudian substitusikan $p^2\psi$ dan $E\psi$, maka didapatkan persamaan Schrodinger bergantung waktu dalam satu dimensi sebagai berikut

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi = -\frac{i\hbar}{i^2}\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V\psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

Untuk kasus tiga dimensi persamaan Schrodinger bergantung waktu diatas dapat dituliskan

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + V\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

Selanjutnya apabila dimisalkan $\psi(x) = Ae^{\frac{ipx}{\hbar}}$, maka fungsi gelombang ψ dalam bentuk E dan p diawal akan menjadi

$$\psi(x,t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et-px)} = Ae^{\frac{ipx}{\hbar}}e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = \psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

Substitusi ke persamaan Schrodinger bergantung waktu dalam satu dimensi akan didapatkan

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}}{\partial x^2} + V\psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = i\hbar\frac{\partial\psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}}}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V\psi(x)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = i\hbar\psi(x)\left(\frac{\partial}{\partial t}e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\right)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2}\right]e^{-\frac{iEt}{\hbar}} + V\psi(x)\,e^{-\frac{iEt}{\hbar}} = E\psi(x)\,e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V\psi(x) = E\psi(x)$$

Persamaan ini merupakan persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu dalam satu dimensi. Untuk kasus tiga dimensi persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu dapat dituliskan

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi_{(x,y,z)} + V\psi_{(x,y,z)} = E\psi_{(x,y,z)}$$

Sedangkan secara umum persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu dalam kasus tiga dimensi dapat dituliskan

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right)\psi = E\psi$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + [E - V(r)]\psi = 0$$

dimana ∇^2 merupakan Laplacian yang bergantung pada koordinat yang digunakan untuk memecahkan persamaan Schrodinger.

Lampiran 3. Penjabaran Persamaan Schrodinger dalam Koordinat Bola

Operator Laplace dalam koordinat bola,

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

Substitusi ke persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu dalam kasus tiga dimensi,

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

Metode separasi variabel,

$$\psi_{(r,\theta,\phi)} = R(r)Y(\theta,\phi)$$

Substitusi ke persamaan sebelumnya,

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]R(r)Y(\theta,\phi) + [E - V(r)]R(r)Y(\theta,\phi) = 0$$

$$\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]R(r)Y(\theta,\phi) + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)]R(r)Y(\theta,\phi) = 0$$

$$\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)Y(\theta,\phi)}{\partial r}\right) + \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial R(r)Y(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{sin^2\theta}\frac{\partial^2 R(r)Y(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right] + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)]R(r)Y(\theta,\phi) = 0$$

$$\frac{1}{r^2}\left[\mathrm{Y}(\theta,\phi)\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{R(r)}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial \mathrm{Y}(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right) + \frac{R(r)}{sin^2\theta}\frac{\partial^2 \mathrm{Y}(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right] + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)]R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi) = 0$$

Selanjutnya tiap suku dikalikan dengan $\frac{r^2}{R(r)Y(\theta,\phi)}$ sebagai berikut,

$$\frac{r^2}{R(r)Y(\theta,\phi)}\frac{1}{r^2}\left[\mathrm{Y}(\theta,\phi)\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{R(r)}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial \mathrm{Y}(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right) + \frac{R(r)}{sin^2\theta}\frac{\partial^2 \mathrm{Y}(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right] + \frac{r^2}{R(r)Y(\theta,\phi)}\frac{2m}{\hbar^2}[E - V(r)]R(r)\mathrm{Y}(\theta,\phi) = 0$$

$$\frac{1}{R(r)Y(\theta,\phi)}\left[\mathrm{Y}(\theta,\phi)\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{R(r)}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial \mathrm{Y}(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right) + \frac{R(r)}{sin^2\theta}\frac{\partial^2 \mathrm{Y}(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right] + \frac{2mr^2}{\hbar^2}[E - V(r)] = 0$$

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\frac{1}{\Upsilon(\theta,\phi)\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Upsilon(\theta,\phi)\,sin^2\theta}\frac{\partial^2\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}+$$
$$\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=0$$

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]+\frac{1}{\Upsilon(\theta,\phi)\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+$$
$$\frac{1}{\Upsilon(\theta,\phi)\,sin^2\theta}\frac{\partial^2\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}=0$$

$$\left[\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]\right]+$$
$$\left[\frac{1}{\Upsilon(\theta,\phi)\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Upsilon(\theta,\phi)\,sin^2\theta}\frac{\partial^2\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right]=0$$

Sebagai penyederhanaan digunakan suatu konstanta pemisah $C=\beta-\beta=0$,

$$\left[\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]\right]+$$
$$\left[\frac{1}{\Upsilon(\theta,\phi)\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Upsilon(\theta,\phi)\,sin^2\theta}\frac{\partial^2\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right]=\beta-\beta$$

Persamaan diatas dapat dipisah menjadi persamaan radial yang hanya bergantung (r) yaitu,

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]=\beta$$

Dan persamaan angular yang bergantung sudut (θ) dan sudut (ϕ) yaitu,

$$\frac{1}{\Upsilon(\theta,\phi)\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Upsilon(\theta,\phi)\,sin^2\theta}\frac{\partial^2\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}=-\beta$$

$$\frac{\sin\theta}{\Upsilon(\theta,\phi)}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Upsilon(\theta,\phi)}\frac{\partial^2\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}=-\beta\,sin^2\theta$$

Menggunakan pemisahan variabel,

$$Y_{(\theta,\phi)}=\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

Maka,

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

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

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

Sama seperti sebelumnya digunakan konstanta pemisah $C=m^2-m^2=0$,

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

Sehingga diperoleh persamaan differensial baru antara lain persamaan polar yang bergantung pada sudut (θ) yaitu

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

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

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

Dan persamaan azimut yang bergantung sudut (ϕ) yaitu

$$\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2}=-m^2$$

$$\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2}+m^2=0$$

$$\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2}+m^2\,\Phi(\phi)=0$$

Persamaan differensial dengan konstanta β dan m^2 atau persamaan polar dikenal sebagai persamaan differensial Legendre terasosiasi. Solusi dari persamaan ini dapat diperoleh dengan menggunakan metode frobenius yang dinyatakan dalam bentuk deret pangkat tinggi berhingga yang dikenal sebagai polinomial Legendre terasosiasi. Sebagai bentuk penyederhanaan, persamaan differensial Legendre terasosiasi dirubah menjadi persamaan Legendre dengan menganggap $m=0$,

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

Dimisalkan,

$$v=\cos\theta \qquad \frac{dv}{d\theta}=-\sin\theta$$

$$\sin\theta=\sqrt{1-v^2} \qquad \frac{d}{d\theta}=\frac{d}{dv}\frac{dv}{d\theta}=-\sin\theta\,\frac{d}{dv}$$

Substitusi kedalam persamaan differensial Legendre,

$$\frac{1}{\sin\theta}\left(-\sin\theta\,\frac{d}{dv}\right)\left(\sin\theta\left(-\sin\theta\,\frac{d}{dv}\right)\Theta\right)+\beta\,\Theta=0$$

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

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

$$\frac{d}{dv}\left((1-v^2)\frac{d\Theta}{dv}\right)+\beta\,\Theta=0$$

$$(1-v^2)\frac{d^2\Theta}{dv^2}+\frac{d(1-v^2)}{dv}\frac{d\Theta}{dv}+\beta\,\Theta=0$$

$$(1-v^2)\frac{d^2\Theta}{dv^2} - 2v\frac{d\Theta}{dv} + \beta\,\Theta = 0$$

Persamaan differensial Legendre dapat diselesaikan menggunakan polinomial atau dalam bentuk deret.

Bentuk umum persamaan differensial orde duanya,

$$\frac{\partial^2 F}{\partial f^2} + A(f)\frac{\partial F}{\partial f} + B(f)F = 0$$

Apabila $f = f_0$ menyebabkan $A(f)$ dan $B(f)$ bernilai tertentu, maka titik $f = f_0$ disebut sebagai titik ordinary. Penyelesaian persamaan differensial dengan menggunakan polinomial (deret pangkat tertinggi) dapat dituliskan,

$$F(f) = \sum_{n=0}^{n} c_n\,(f - f_0)^n$$

Apabila $f = f_0$ menyebabkan $A(f)$ dan $B(f)$ bernilai tak hingga, maka titik $f = f_0$ disebut sebagai titik regular singular. Penyelesaiannya dapat dituliskan,

$$F(f) = (f - f_0)^s \sum_{n=0}^{n} c_n\,(f - f_0)^n$$

Persamaan differensial Legendre dapat ditulis kembali menjadi,

$$\frac{(1-v^2)}{(1-v^2)}\frac{d^2\Theta}{dv^2} - \frac{2v}{(1-v^2)}\frac{d\Theta}{dv} + \frac{\beta}{(1-v^2)}\,\Theta = 0$$

$$\frac{d^2\Theta}{dv^2} - \frac{2v}{(1+v)(1-v)}\frac{d\Theta}{dv} + \frac{\beta}{(1+v)(1-v)}\,\Theta = 0$$

Untuk $v = 0$

$$A(v) = -\frac{2v}{(1+v)(1-v)} = -\frac{2(0)}{(1+0)(1-0)} = 0$$

$$B(v) = \frac{\beta}{(1+v)(1-v)} = \frac{\beta}{(1+0)(1-0)} = \beta$$

Maka untuk $v = 0$ merupakan titik ordinary, bentuk umum penyelesaian persamaan differensial Legendrenya adalah

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

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

Untuk $v = \pm 1$

$$A(v) = -\frac{2v}{(1+v)(1-v)} = \infty$$

$$B(v) = \frac{\beta}{(1+v)(1-v)} = \infty$$

Maka untuk $v = \pm 1$ merupakan titik regular singular, bentuk umum penyelesaian persamaan differensial Legendrenya adalah

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

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

Kita gunakan bentuk penyelesaian dari titik ordinary dengan mengambil $v = 0$ sebagai bentuk penyederhanaan,

$$\Theta(v) = (c_0 + c_1 v + c_2 v^2 + c_3 v^3 + \cdots + c_n v^n)$$

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

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

Sehingga persamaan differensial Legendre menjadi,

$$\begin{array}{ll} (1 - v^2)\frac{d^2\Theta(v)}{dv^2} & = (1 - v^2)(2c_2 + 6c_3 v + 12c_4 v^2 + 20c_5 v^3) \\ -2v\frac{d\Theta(v)}{dv} & = -2v(c_1 + 2c_2 v + 3c_3 v^2 + 4c_4 v^3) \\ \beta\,\Theta(v) & = \beta(c_0 + c_1 v + c_2 v^2 + c_3 v^3) \\ \hline 0 & = \beta c_0 + 2c_2 + (\beta c_1 - 2c_1 + 6c_3)v + (\beta c_2 - 4c_2 - 2c_2 + \\ & \quad 12c_4)v^2 + (\beta c_3 - 6c_3 - 6c_3 + 20c_5)v^3 \end{array} \; +$$

Persamaan diatas merupakan persamaan polinomial atau identitas, maka masing-masing koefisien dari semua pangkat v harus sama dengan nol. Hubungan antara koefisien-koefisiennya dapat dituliskan,

$$(\beta c_0 + 2c_2)v^0 = 0 \qquad \text{diperoleh} \qquad c_2 = -\frac{\beta}{2} c_0$$

$$(\beta c_1 - 2c_1 + 6c_3)v^1 = 0 \qquad \text{diperoleh} \qquad c_3 = -\frac{\beta+2}{6} c_1$$

$$(\beta c_2 - 4c_2 - 2c_2 + 12c_4)v^2 = 0 \qquad \text{diperoleh} \qquad c_4 = -\frac{\beta+6}{12} c_2$$

$$(\beta c_3 - 6c_3 - 6c_3 + 20c_5)v^3 = 0 \qquad \text{diperoleh} \qquad c_5 = -\frac{\beta+12}{20} c_3$$

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

Solusi $\Theta(v)$ dapat dipecah menjadi dua bagian yaitu solusi genap dan solusi ganjil sebagai berikut,

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

Deret genap atau ganjil diatas akan terputus apabila pangkat tertinggi dari deret ditentukan (misalnya dipilih n), maka nilai koefisien c_{n+2} dan seterusnya akan bernilai nol karena tidak diperbolehkan variabelnya mempunyai pangkat yang lebih besar dari n. Sehingga diperoleh bentuk hubungan antar koefisien berikut,

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

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

Akan didapatkan

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

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

Dimana n merupakan bilangan cacah yang bernilai $n = 0,1,2,3, \ldots$

Apabila variabel n diganti dengan l (dimana l disebut sebagai bilangan kuantum orbital) maka didapatkan,

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

$$\beta = l(l+1) \text{ , dimana } \; l = 0,1,2,3, \ldots$$

Sehingga diperoleh bahwa persamaan Schrodinger dalam koordinat bola dapat dipisah menjadi,

1. Persamaan Radial

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}[E - V(r)] = \beta$$

$$\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}[E - V(r)] = l(l+1)$$

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2}[E - V(r)]R(r) = l(l+1)R(r)$$

Dengan mendefinisikan variabel baru berikut,

$$U(r) = rR(r)$$

Diperoleh,

$$\frac{dU(r)}{dr} = R(r)\frac{dr}{dr} + r\frac{dR(r)}{dr}$$

$$\frac{dU(r)}{dr} = R(r) + r\frac{dR(r)}{dr}$$

Tiap suku kalikan dengan r didapatkan,

$$r\frac{dU(r)}{dr} = rR(r) + r^2\frac{dR(r)}{dr}$$

$$r^2\frac{dR(r)}{dr} = r\frac{dU(r)}{dr} - rR(r)$$

$$r^2\frac{dR(r)}{dr} = r\frac{dU(r)}{dr} - U(r)$$

Kedua ruas diturunkan terhadap r,

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

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)=\frac{d}{dr}\left(r\frac{dU(r)}{dr}\right)-\frac{dU(r)}{dr}$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)=r\frac{d^2U(r)}{dr^2}+\frac{dU(r)}{dr}\frac{dr}{dr}-\frac{dU(r)}{dr}$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)=r\frac{d^2U(r)}{dr^2}+\frac{dU(r)}{dr}-\frac{dU(r)}{dr}$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right)=r\frac{d^2U(r)}{dr^2}$$

Sehingga persamaan radial dapat ditulis kembali dalam bentuk,

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]R(r)=l(l+1)R(r)$$

$$r\frac{d^2U(r)}{dr^2}+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]\frac{U(r)}{r}=l(l+1)\frac{U(r)}{r}$$

$$r^2\frac{d^2U(r)}{dr^2}+\frac{2mr^2}{\hbar^2}[E-V(r)]\,U(r)=l(l+1)\,U(r)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2U(r)}{dr^2}+[E-V(r)]\,U(r)=\frac{\hbar^2}{2mr^2}l(l+1)\,U(r)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2U(r)}{dr^2}+\ EU(r)-V(r)U(r)=\frac{\hbar^2}{2mr^2}l(l+1)\,U(r)$$

$$EU(r)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2U(r)}{dr^2}+V(r)U(r)\frac{\hbar^2}{2mr^2}l(l+1)\,U(r)$$

$$EU(r)=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2U(r)}{dr^2}+\left(V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right)U(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2U(r)}{dr^2}+\left(V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right)U(r)=EU(r)$$

2. Persamaan Polar

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

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

3. Persamaan Azimut

$$\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2}=-m^2$$

Lampiran 4. Penjabaran Persamaan Schrodinger untuk Atom Hidrogen

Karena atom dianggap simetri dengan bola, maka penjabaran persamaan Schrodinger untuk atom hidrogen mirip dengan penjabaran persamaan Schrodinger dalam koordinat bola. pembedanya adalah untuk atom hidrogen menggunakan massa tereduksi μ dan energi potensialnya diganti dengan energi potensial Coulumb $V(r) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}$.

Jari-jari orbit elektron pada atom hidrogen

Jari-jari orbit elektron pada atom hidrogen dapat diketahui dari hubungan antara gaya eletrostatis antara elektron dan proton dengan gaya sentripetal elektron yang dapat dituliskan,

$$F_c = F_s$$

$$-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = -\frac{mv^2}{r}$$

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = \frac{(mv)^2}{m}$$

$$\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = (mv)^2$$

Mengingat nilai dari kuantitasi momentum angular adalah $L = n\hbar = mvr_n$, maka diperoleh

$$n\hbar = mvr_n$$

$$mv = \frac{n\hbar}{r}$$

$$(mv)^2 = \frac{n^2\hbar^2}{r^2}$$

Selanjutnya substitusi ke persamaan sebelumnya, didapatkan

$$\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = \frac{n^2\hbar^2}{r^2}$$

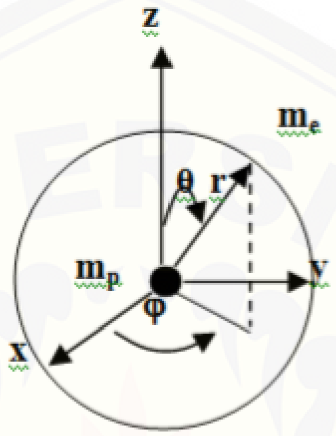
$$\frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0} = \frac{n^2\hbar^2}{r}$$

$$r = \frac{4\pi\varepsilon_0 n^2\hbar^2}{me^2}$$

$$r = n^2\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}$$

Massa tereduksi atom hidrogen

Sekarang tinjau suatu sistem yang terdiri dari dua buah benda bermassa m_1 dan m_2 yang berada di r_1 dan r_2 dari pusat O. Untuk atom hidrogen dapat dimisalkan m_1 dan m_2 masing-masing adalah massa proton m_p dan massa elektron m_e tampak seperti gambar berikut



Gambar 3.a Posisi Relatif Elektron terhadap Proton

Komponen gaya-gaya yang bekerja pada kedua partikel tersebut adalah sebagai berikut,

F_1^p = gaya luar yang bekerja pada proton

F_2^e = gaya luar yang bekerja pada elektron

F_{12}^{pe} = gaya internal yang bekerja pada proton karena pengaruh elektron

F_{21}^{ep} = gaya internal yang bekerja pada elektron karena pengaruh proton

Menurut hukum III Newton, gaya aksi dan reaksi yang bekerja adalah

$$F = F_{12}^{pe} = -F_{21}^{ep}$$

Sedangkan gaya luar yang bekerja pada sistem adalah sebagai berikut,

$$F' = F_1^p - F_2^e$$

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

$$m_1\ddot{r}_1 = F_1^p + F_{12}^{pe} \qquad \text{dan} \qquad m_2\ddot{r}_2 = F_2^e + F_{21}^{ep}$$

Kemudian persamaan pertama dikalikan dengan m_2 dan persamaan kedua dikalikan dengan m_1 untuk menentukan massa tereduksi, sehingga dapat dilakukan eliminasi berikut

$$m_1 m_2 \ddot{r}_1 = m_2 F_1^p + m_2 F_{12}^{pe}$$

$$\underline{m_1 m_2 \ddot{r}_2 = m_1 F_2^e + m_1 F_{21}^{ep}} \; -$$

$$m_1 m_2 (\ddot{r}_1 - \ddot{r}_2) = m_2 F_1^p - m_1 F_2^e + m_2 F_{12}^{pe} - m_1 F_{21}^{ep}$$

Apabila tidak ada gaya luar yang bekerja pada sistem, maka $F_1^p = F_2^e = 0$. Sehingga persamaan diatas menjadi

$$m_1 m_2 (\ddot{r}_1 - \ddot{r}_2) = m_2 F_{12}^{pe} - m_1 F_{21}^{ep}$$

$$m_1 m_2 (\ddot{r}_1 - \ddot{r}_2) = m_2 F_{12}^{pe} + m_1 F_{12}^{ep}$$

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

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

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

Dimana $\frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)}$ disebut sebagai massa tereduksi μ. Sehingga untuk atom hidrogen, massa tereduksi dari proton dan elektron dapat dituliskan

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{(m_1 + m_2)}$$

$$\mu = \frac{m_p m_e}{(m_p + m_e)}$$

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$

Karena massa proton jauh lebih besar dibandingkan massa elektron $(m_p \gg m_e)$ maka pada penelitian ini proton dianggap relatif diam. Sehingga massa tereduksinya menjadi

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p}$$

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_p}$$

$$\mu = m_e$$

Kembali mengacu pada penjabaran persamaan Schrodinger dalam koordinat bola sebelumnya, persamaan Schrodinger untuk atom hidrogen dapat dituliskan

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

$$\left[\left(-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right) - E\right]\psi_{(r,\theta,\phi)} = 0$$

Menggunakan metode separasi variabel,

$$\psi_{(r,\theta,\phi)} = R(r)Y(\theta,\phi)$$

Didapatkan,

$$\left[\frac{1}{R(r)}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R(r)}{\partial r}\right)+\frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left[E+\left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right)\right]\right]+$$

$$\left[\frac{1}{\Upsilon(\theta,\phi)\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\Upsilon(\theta,\phi)\,sin^2\theta}\frac{\partial^2\Upsilon(\theta,\phi)}{\partial\phi^2}\right]=0$$

Oleh karena itu, persamaan Schrodinger untuk atom hidrogen dapat dipisah menjadi bagian radial dan bagian angular sebagai berikut:

Bagian Radial

Merujuk kembali pada persamaan radial yang telah dijabarkan pada persamaan Schrodinger dalam koordinat bola,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2U(r)}{dr^2}+\left(V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right)U(r)=EU(r)$$

Kemudian mengganti dengan massa tereduksi dan energi potensial Coulumb akan diperoleh,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2U(r)}{dr^2}+\left(V(r)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right)U(r)=EU(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2U(r)}{dr^2}+\left[\left(-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right)+\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right]U(r)=EU(r)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2U(r)}{\partial r^2}+\left[\left(-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right)+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]U(r)=EU(r)$$

$$\frac{\partial^2U(r)}{\partial r^2}+-\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[\left(-\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{r}\right)+\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]U(r)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}EU(r)$$

$$\frac{\partial^2U(r)}{\partial r^2}+\left[\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]U(r)=0$$

Kelakuan asimtotik dari solusi, pertama untuk r yang sangat kecil ($r\to 0$) maka persamaan diatas menjadi

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}U(r)=0$$

Penyelesaiannya menggunakan metode Frobeneus dalam bentuk deret,

$$U(r)=r^s\sum_{k=0}^{\infty}C_k r^k$$

Turunan pertamanya

$$\frac{dU(r)}{dr}=\frac{d}{dr}\left[C_0r^s+C_1r^{s+1}+C_2r^{s+2}+\cdots\right]$$

$$\frac{dU(r)}{dr} = C_0 s r^{s-1} + C_1(s+1)r^s + C_2(s+2)r^{s+1} + \cdots$$

Turunan keduanya

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} = \frac{d}{dr}\frac{dU(r)}{dr}$$

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} = \frac{d}{dr}[C_0 s r^{s-1} + C_1(s+1)r^s + C_2(s+2)r^{s+1} + \cdots]$$

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} = C_0 s(s-1)r^{s-2} + C_1 s(s+1)r^{s-1} + C_2(s+1)(s+2)r^s + \cdots$$

Sedangkan,

$$-\frac{l(l+1)}{r^2}U(r) = -\frac{l(l+1)}{r^2}[C_0 r^s + C_1 r^{s+1} + C_2 r^{s+2} + \cdots]$$

$$-\frac{l(l+1)}{r^2}U(r) = -[C_0\, l(l+1)\, r^{s-2} + C_1\, l(l+1)\, r^{s-1} + C_2\, l(l+1)\, r^s + \cdots]$$

Penjumlahan dari keduanya akan menjadi,

$$\frac{d^2U(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}U(r) = 0$$

$$C_0 s(s-1)r^{s-2} + C_1 s(s+1)r^{s-1} + C_2(s+1)(s+2)r^s + \cdots -$$

$$[C_0\, l(l+1)\, r^{s-2} + C_1\, l(l+1)\, r^{s-1} + C_2\, l(l+1)\, r^s + \cdots] = 0$$

$$C_0[s(s-1) - l(l+1)]r^{s-2} + C_1[s(s+1) - l(l+1)]r^{s-1} + C_2[(s+$$

$$1)(s+2) - \ l(l+1)]r^s + \cdots = 0$$

Mengenolkan koefisien dari suku dengan variabel r terendah yaitu r^{s-2},

$$C_0[s(s-1) - l(l+1)] = 0$$

$$[s(s-1) - l(l+1)] = 0$$

$$s^2 - s - l(l+1) = 0$$

$$(s+l)(s-(l+1)) = 0$$

$$s = -l \qquad \text{atau} \qquad s = (l+1)$$

Sehingga,

$$U(r) = r^s \sum_{k=0}^{\infty} C_k r^k$$

$$U(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l}$$

untuk $(r \to 0)$ maka r^{-l} akan menjadi tak berhingga, sehingga $B = 0$ agar $U(r)$ berhingga. Oleh karena itu solusinya dapat dituliskan

$$U(r) = Ar^{l+1} \qquad \text{atau} \qquad U(r) \sim r^{l+1}$$

Kedua adalah untuk r yang sangat besar $(r \to \infty)$, persamaan radial menjadi

$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} U(r) = 0$$

Karena elektron dalam keadaan terikat dengan inti atom, maka energi yang dimiliki oleh elektron akan berharga negatif dan energi eigen dapat ditulis $E = -|E|$.

Dengan menggunakan pemisalan,

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} = D^2 \quad \text{dan} \quad \frac{2\mu(-E)}{\hbar^2} = q^2$$

$$\frac{\partial}{\partial r} = D \qquad \sqrt{\frac{2\mu(-E)}{\hbar^2}} = \mathrm{q}$$

Didapatkan,

$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} + \frac{2\mu E}{\hbar^2} U(r) = 0$$

$$D^2 U(r) - q^2 U(r) = 0$$

$$D^2 - q^2 = 0$$

$$(D - q)(D + q) = 0$$

$$D = \pm q$$

$$\frac{\partial U(r)}{\partial r} = \pm q U(r)$$

$$\frac{1}{U(r)} dU(r) = \pm q\, dr$$

$$\int \frac{1}{U(r)} \partial U(r) = \int \pm q\, \partial r$$

$$\ln U(r) = \pm\, qr$$

$$U(r) = e^{\pm qr}$$

Atau dapat dituliskan,

$$U(r) = Ce^{\mathrm{qr}} + De^{-\mathrm{qr}}$$

untuk $(r \to \infty)$ maka e^{qr} akan menjadi tak berhingga, sehingga $C = 0$ agar $U(r)$ berhingga. Oleh karena itu solusinya dapat dituliskan

$$U(r) = De^{-\mathrm{qr}} \qquad \text{atau} \qquad U(r) \sim e^{-\mathrm{qr}}$$

Menghilangkan perilaku asimtotik dengan mengkombinasi masing-masing solusi $U(r)$ dan memperkenalkan fungsi baru $K(r)$ dihasilkan solusi sebagai berikut,

$$U(r) = r^{l+1}\, K(r)\, e^{-\mathrm{qr}}$$

Dimana untuk turunan pertamanya

$$\frac{\partial U(r)}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial r}[r^{l+1}\,K(r)\,e^{-\mathrm{qr}}]$$
$$\frac{\partial U(r)}{\partial r} = K(r)\,e^{-\mathrm{qr}}\frac{\partial}{\partial r}r^{l+1} + r^{l+1}\,e^{-\mathrm{qr}}\frac{\partial}{\partial r}K(r) + r^{l+1}\,K(r)\frac{\partial}{\partial r}e^{-\mathrm{qr}}$$
$$\frac{\partial U(r)}{\partial r} = K(r)\,e^{-\mathrm{qr}}(l+1)r^{l} + r^{l+1}\,e^{-\mathrm{qr}}\frac{\partial K(r)}{\partial r} - r^{l+1}\,K(r)\mathrm{q}e^{-\mathrm{qr}}$$
$$\frac{\partial U(r)}{\partial r} = (l+1)r^{l}e^{-\mathrm{qr}}K(r) + r^{l+1}e^{-\mathrm{qr}}\frac{\partial K(r)}{\partial r} - \mathrm{q}r^{l+1}e^{-\mathrm{qr}}K(r)$$

Turunan keduanya

$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} = \frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial U(r)}{\partial r}$$
$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} = \frac{\partial}{\partial r}\left[(l+1)r^{l}e^{-\mathrm{qr}}K(r) + r^{l+1}e^{-\mathrm{qr}}\frac{\partial K(r)}{\partial r} - \mathrm{q}r^{l+1}e^{-\mathrm{qr}}K(r)\right]$$
$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} = (l+1)\left[e^{-\mathrm{qr}}K(r)\frac{\partial}{\partial r}r^{l} + r^{l}K(r)\frac{\partial}{\partial r}e^{-\mathrm{qr}} + r^{l}e^{-\mathrm{qr}}\frac{\partial}{\partial r}K(r)\right] +$$
$$\left[e^{-\mathrm{qr}}\frac{\partial K(r)}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r}r^{l+1} + r^{l+1}\frac{\partial K(r)}{\partial r}\frac{\partial}{\partial r}e^{-\mathrm{qr}} + r^{l+1}e^{-\mathrm{qr}}\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2}\right] -$$
$$\mathrm{q}\left[e^{-\mathrm{qr}}K(r)\frac{\partial}{\partial r}r^{l+1} + r^{l+1}K(r)\frac{\partial}{\partial r}e^{-\mathrm{qr}} + r^{l+1}e^{-\mathrm{qr}}\frac{\partial}{\partial r}K(r)\right]$$
$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} = (l+1)\left[e^{-\mathrm{qr}}K(r)(l\,r^{l-1}) - r^{l}K(r)qe^{-\mathrm{qr}} + r^{l}e^{-\mathrm{qr}}\frac{\partial K(r)}{\partial r}\right] +$$
$$\left[e^{-\mathrm{qr}}\frac{\partial K(r)}{\partial r}(l+1)r^{l} - r^{l+1}\frac{\partial K(r)}{\partial r}qe^{-\mathrm{qr}} + r^{l+1}e^{-\mathrm{qr}}\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2}\right] -$$
$$\mathrm{q}\left[e^{-\mathrm{qr}}K(r)(l+1)r^{l} - r^{l+1}K(r)qe^{-\mathrm{qr}} + r^{l+1}e^{-\mathrm{qr}}\frac{\partial K(r)}{\partial r}\right]$$
$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} =$$
$$l(l+1)e^{-\mathrm{qr}}r^{l-1}K(r) - (l+1)e^{-\mathrm{qr}}qr^{l}K(r) + (l+1)e^{-\mathrm{qr}}r^{l}\frac{\partial K(r)}{\partial r} +$$
$$(l+1)e^{-\mathrm{qr}}r^{l}\frac{\partial K(r)}{\partial r} - e^{-\mathrm{qr}}qr^{l+1}\frac{\partial K(r)}{\partial r} + e^{-\mathrm{qr}}r^{l+1}\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2} -$$
$$(l+1)e^{-\mathrm{qr}}\mathrm{q}r^{l}K(r) + e^{-\mathrm{qr}}q^2r^{l+1}K(r) - e^{-\mathrm{qr}}qr^{l+1}\frac{\partial K(r)}{\partial r}$$
$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} = e^{-\mathrm{qr}}r^{l+1}\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2} + [2(l+1)e^{-\mathrm{qr}}r^{l} - 2e^{-\mathrm{qr}}qr^{l+1}]\frac{\partial K(r)}{\partial r} +$$
$$[l(l+1)e^{-\mathrm{qr}}r^{l-1} - 2(l+1)e^{-\mathrm{qr}}\mathrm{q}r^{l} + e^{-\mathrm{qr}}q^2r^{l+1}]K(r)$$

Substitusi ke persamaan radial,

$$\frac{\partial^2 U(r)}{\partial r^2} + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} + \frac{2\mu e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]U(r) = 0$$

$$\left[e^{-\mathrm{qr}}r^{l+1}\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2}+[2(l+1)e^{-\mathrm{qr}}r^{l}-2e^{-\mathrm{qr}}qr^{l+1}]\frac{\partial K(r)}{\partial r}+[l(l+1)e^{-\mathrm{qr}}r^{l-1}-2(l+1)e^{-\mathrm{qr}}\mathrm{q}r^{l}+e^{-\mathrm{qr}}q^2r^{l+1}]K(r)\right]+\left[\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]r^{l+1}\,K(r)\,e^{-\mathrm{qr}}=0$$

Tiap suku dibagi dengan $e^{-\mathrm{qr}}r^{l+1}$ diperoleh,

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2}+[2(l+1)r^{-1}-2q]\frac{\partial K(r)}{\partial r}+[l(l+1)r^{-2}-2(l+1)qr^{-1}+q^2]K(r)+\left[\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]K(r)=0$$

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2}+[2(l+1)r^{-1}-2q]\frac{\partial K(r)}{\partial r}+\left[\frac{l(l+1)}{r^2}-2(l+1)qr^{-1}+q^2+\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 r}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]K(r)=0$$

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2}+[2(l+1)r^{-1}-2q]\frac{\partial K(r)}{\partial r}+\left[-2(l+1)qr^{-1}+q^2+\frac{2\mu E}{\hbar^2}+\frac{2\mu e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 r}\right]K(r)=0$$

Mengganti nilai E dari pemisalan $\frac{2\mu(-E)}{\hbar^2}=q^2\;=>E=-\frac{\hbar^2q^2}{2\mu}$ didapatkan,

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2}+[2(l+1)r^{-1}-2q]\frac{\partial K(r)}{\partial r}+\left[-2(l+1)qr^{-1}+q^2-\frac{2\mu}{\hbar^2}\frac{\hbar^2q^2}{2\mu}+\frac{2\mu e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 r}\right]K(r)=0$$

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2}+2\left[\frac{(l+1)}{r}-q\right]\frac{\partial K(r)}{\partial r}+\left[-2\frac{(l+1)q}{r}+q^2-q^2+\frac{2\mu e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 r}\right]K(r)=0$$

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2}+2\left[\frac{(l+1)}{r}-q\right]\frac{\partial K(r)}{\partial r}+2\left[-\frac{(l+1)q}{r}+\frac{\mu e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 r}\right]K(r)=0$$

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2}+2\left[\frac{(l+1)}{r}-q\right]\frac{\partial K(r)}{\partial r}+2\left[\frac{-(\mathrm{l}+1)\mathrm{q}+(\mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2)}{r}\right]K(r)=0$$

Asumsikan $K(r)$ sebagai deret pangkat,

$$K(r)=\sum_{k=0}^{\infty}b_k r^k$$

Turunan pertamanya

$$\frac{\partial K(r)}{\partial r}=\sum_{k=0}^{\infty}kb_k r^{k-1}$$

Turunan keduanya

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2}=\frac{\partial}{\partial r}\frac{\partial K(r)}{\partial r}$$

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2}=\frac{\partial}{\partial r}\left[\sum_{k=0}^{\infty}kb_k r^{k-1}\right]$$

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2} = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) b_k r^{k-2}$$

Substitusi ke persamaan sebelumnya akan diperoleh,

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2} + 2\left[\frac{(l+1)}{r} - q\right]\frac{\partial K(r)}{\partial r} + 2\left[\frac{-(\mathrm{l}+1)\mathrm{q} + (\mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2)}{r}\right] K(r) = 0$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) b_k r^{k-2} + 2\left[\frac{(l+1)}{r} - q\right]\sum_{k=0}^{\infty} k b_k r^{k-1} +$$

$$2\left[\frac{-(\mathrm{l}+1)\mathrm{q} + (\mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2)}{r}\right]\sum_{k=0}^{\infty} b_k r^k = 0$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) b_k r^{k-2} + 2(l+1)\sum_{k=0}^{\infty} k b_k r^{k-2} - 2q\sum_{k=0}^{\infty} k b_k r^{k-1} +$$

$$2[-(\mathrm{l}+1)\mathrm{q} + (\mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2)]\sum_{k=0}^{\infty} b_k r^{k-1} = 0$$

$$\sum_{k=0}^{\infty}[k(k-1) b_k r^{k-2} + 2(l+1) k b_k r^{k-2} - 2qk b_k r^{k-1} + 2[-(\mathrm{l}+1)\mathrm{q} +$$

$$(\mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2)] b_k r^{k-1}] = 0$$

$$\sum_{k=0}^{\infty}[(k(k-1) + 2(l+1)k) b_k r^{k-2} +$$

$$2[-qk - (\mathrm{l}+1)\mathrm{q} + (\mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2)] b_k r^{k-1}] = 0$$

$$\sum_{k=0}^{\infty}[k(k+2l+1) b_k r^{k-2} + 2[-q(\mathrm{k}+\mathrm{l}+1) + \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2] b_k r^{k-1}] = 0$$

Mengubah k ke $(k+1)$ pada penyebut suku pertama akan diperoleh,

$$\sum_{k=0}^{\infty}[k(k+2l+1) b_k r^{k-2} + 2[-q(\mathrm{k}+\mathrm{l}+1) + \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2] b_k r^{k-1}] = 0$$

$$k(k+2l+1) b_k r^{k-2} + 2[-q(\mathrm{k}+\mathrm{l}+1) + \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2] b_k r^{k-1} = 0$$

$$(k+1)(k+1+2l+1) b_{(k+1)} r^{k+1-2} +$$

$$2[-q(\mathrm{k}+\mathrm{l}+1) + \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2] b_k r^{k-1} = 0$$

$$(k+1)(k+2l+2) b_{k+1} r^{k-1} + 2[-\mathrm{q}(k+\mathrm{l}+1) + \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2] b_k r^{k-1} = 0$$

$$(k+1)(k+2l+2) b_{k+1} r^{k-1} = 2[\mathrm{q}(k+\mathrm{l}+1) - \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2] b_k r^{k-1}$$

$$(k+1)(k+2l+2) b_{k+1} = 2[\mathrm{q}(k+\mathrm{l}+1) - \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2] b_k$$

Didapatkan rumus rekursi,

$$b_{k+1} = \frac{2[\mathrm{q}(k+\mathrm{l}+1) - \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2]}{(k+1)(k+2l+2)} b_k$$

Untuk nilai $k \to \infty$,

$$b_{k+1} = \frac{2qk}{(k)(k)} b_k$$

$$b_{k+1} = \frac{2q}{k} b_k$$

Dimana,

$$b_k = \frac{(2\mathrm{q})^k}{k!} b_0$$

Substitusikan ke deret pangkat $K(r)$ didapatkan,

$$K(r) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k r^k$$

$$K(r) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\mathrm{q})^k}{k!} b_0 r^k$$

$$K(r) = b_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\mathrm{q})^k}{k!} r^k$$

$$K(r) = b_0 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\mathrm{qr})^k}{k!}$$

Hasil ini merupakan hasil dari sebuah deret eksponensial $e^{2\mathrm{qr}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\mathrm{qr})^k}{k!}$, sehingga dapat dituliskan bahwa

$$K(r) = b_0 e^{2\mathrm{qr}} \quad \text{atau} \quad K(r) \sim e^{2\mathrm{qr}}$$

Oleh karena itu solusi $U(r)$ menjadi,

$$U(r) = r^{l+1} K(r) e^{-\mathrm{qr}}$$

$$U(r) = r^{l+1}\, e^{2\mathrm{qr}}\, e^{-\mathrm{qr}}$$

$$U(r) = r^{l+1} e^{\mathrm{qr}}$$

Tetapi untuk $(\mathrm{q} \to \infty)$ maka $U(r)$ akan menjadi tak berhingga sehingga tidak memiliki makna fisis. Untuk memperoleh solusi yang memiliki makna fisis adalah deret pangkat $K(r)$ harus berhenti pada sebuah pangkat tertentu misal Z. Oleh sebab itu fungsi $K(r)$ menjadi sebuah polinomial berorde Z sebagai berikut,

$$K(r) = \sum_{k=0}^{\infty} b_k r^k \quad \Longrightarrow \quad K(r) = \sum_{k=0}^{Z} b_k r^k$$

Hal ini mengakibatkan semua koefisien $b_{Z+1}, b_{Z+2}, b_{Z+3}, \ldots$ akan lenyap. Ketika $b_{Z+1} = 0$, rumus rekursi menjadi

$$b_{Z+1} = \frac{2[\mathrm{q}(Z+\mathrm{l}+1) - \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2]}{(Z+1)(Z+2l+2)} b_Z$$

$$0 = \frac{2[\mathrm{q}(Z+\mathrm{l}+1) - \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2]}{(Z+1)(Z+2l+2)} b_k$$

$$0 = 2[\mathrm{q}(Z+\mathrm{l}+1) - \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2]$$

$$\mathrm{q}(Z+\mathrm{l}+1) - \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2 = 0$$

Sejak $\mathrm{q} = \sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$ dan dengan mengenalkan notasi baru berikut,

$$n = Z + \mathrm{l} + 1$$

Dimana n kita kenal sebagai bilangan kuantum utama. Kita dapat memperoleh persamaan energi sebagai berikut,

$$\text{q}n - \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2 = 0$$

$$\text{q}n = \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2$$

$$\sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}\,n = \mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2$$

$$-\frac{2\mu E}{\hbar^2}n^2 = \mu^2 e^4/(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^4$$

$$En^2 = -\mu e^4/2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2$$

$$E = -\frac{\mu e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

$$E_n = -\frac{\mu}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\frac{1}{n^2}, \qquad \text{untuk } n = 1,2,3,\ldots$$

Dimana,

$$m_e = 9{,}109390 \times 10^{-31}kg$$

$$m_p = 1{,}672623 \times 10^{-27}kg$$

$$\mu = m_e = 9{,}109390 \times 10^{-31}kg$$

$$h = 6{,}626 \times 10^{-34}Js$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = \frac{6{,}626\times10^{-34}Js}{2(22/7)} = 1{,}054136 \times 10^{-34}Js$$

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} = 2{,}307113707464 \times 10^{-28}Jm$$

$$E_1 = -\frac{\mu}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 = -\frac{9{,}109390\times10^{-31}kg}{2(1{,}054136\times10^{-34}Js)^2}(2{,}307113707464 \times 10^{-28}Jm)^2$$

$$E_1 = -\frac{9{,}109390\times10^{-31}kg}{2{,}22240541\times10^{-68}J^2s^2}(5{,}32277366 \times 10^{-56}J^2m^2)$$

$$E_1 = -21{,}81745101 \times 10^{-19}kgm^2/s^2$$

$$E_1 = -21{,}81745101 \times 10^{-19}J$$

$$E_1 = -13{,}6\ eV$$

Hasil ini merupakan formula Bohr yang terkenal. Sedangkan (dalam teori atom hidrogen dari Bohr) jari-jari Bohr diberikan oleh

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

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

$$a_0 = \frac{1}{2{,}307113707464\times10^{-28}Jm}\frac{(1{,}054136\times10^{-34}Js)^2}{(9{,}109390\times10^{-31}kg)} = \frac{1{,}11120271\times10^{-68}J^2s^2}{21{,}01639854\times10^{-59}Jm\ kg}$$

$$a_0 = 0{,}0529 \times 10^{-9}m$$

$$a_0 = 0{,}529 \times 10^{-10} m$$

$$a_0 = 0{,}529\ \text{Å}$$

Dan persamaan energinya dapat dituliskan kembali dalam bentuk a_0 adalah

$$E_n = -\frac{\mu}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{1}{n^2}$$

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

$$E_n = -\frac{e^2}{2(4\pi\varepsilon_0)}\frac{\mu e^2}{(4\pi\varepsilon_0)\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

$$E_n = -\frac{e^2}{2(4\pi\varepsilon_0)a_0}\frac{1}{n^2}$$

Dari persamaan jari-jari Bohr didapatkan,

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

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

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

Perhatikan bahwa kita dapat menuliskan q dalam bentuk a_0 sebagai berikut,

$$\mathrm{q} = \sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$$

$$\mathrm{q} = \sqrt{-2\frac{\mu}{\hbar^2}E_n}$$

$$\mathrm{q} = \sqrt{-2\left[\frac{4\pi\varepsilon_0}{e^2 a_0}\right]\left[-\frac{e^2}{2(4\pi\varepsilon_0)a_0}\frac{1}{n^2}\right]}$$

$$\mathrm{q} = \sqrt{\frac{1}{n^2 {a_0}^2}}$$

$$\mathrm{q} = \frac{1}{n a_0}$$

Merujuk kembali pada pendefinisian variabel $U(r)$,

$$U(r) = rR(r)$$

$$R(r) = \frac{1}{r}U(r)$$

Kemudian substitusi solusi $U(r)$ berikut,

$$U(r) = r^{l+1}\,K(r)\,e^{-\mathrm{qr}}$$

Dimana,

$$K(r) = \sum_{k=0}^{Z} b_k r^k$$

Didapatkan fungsi radial atom hidrogen,

$$R(r) = \frac{1}{r} U(r)$$

$$R(r) = N_{nl} \frac{1}{r} r^{l+1}\, K(r)\, e^{-\mathrm{qr}}$$

$$R(r) = N_{nl} r^l\, e^{-\mathrm{qr}} \sum_{k=0}^{Z} b_k r^k$$

$$R(r) = N_{nl} r^l\, e^{-\frac{r}{na_0}} \sum_{k=0}^{Z} b_k r^k$$

$$R(r) = N_{nl}\, e^{-\frac{r}{na_0}}\, r^l \sum_{k=0}^{Z} b_k r^k$$

Dimana N_{nl} disebut sebagai konstanta normalisasi fungsi radial, sedangkan $r^l \sum_{k=0}^{Z} b_k r^k$ merupakan polinomial berderajat $Z + l$ atau $n - 1$ sejak dikenalkan notasi $n = Z + \mathrm{l} + 1$ dan polinomial ini berkaitan dengan penyelesaian solusi dari persamaan differensial Laguerre. Persamaan differensial Laguerre merupakan persamaan differensial yang telah lama ada dan sudah dipelajari oleh matematikawan sebelum kelahiran mekanika kuantum di fisika. Bentuk dari persamaan differensial Laguerre adalah

$$r \frac{d^2 L_k(r)}{dr^2} + (1 - r) \frac{dL_k(r)}{dr} + k L_k(r) = 0$$

Solusinya disebut polinomial Laguerre $L_k(r)$,

$$L_k(r) = e^r \frac{d^k}{dr^k} (r^k e^{-r})$$

Didalam mempelajari persamaan differensial Laguerre, kita juga akan dikaitkan dengan persamaan differensial Laguerre sekawan atau dikenal dengan persamaan differensial Laguerre terasosiasi. Bentuk dari persamaan differensial Laguerre terasosiasi adalah

$$r \frac{d^2 L_k^Z(r)}{dr^2} + (Z + 1 - r) \frac{dL_k^Z(r)}{dr} + (k - Z) L_k^Z(r) = 0$$

Dan solusinya disebut polinomial Laguerre terasosiasi $L_k^Z(r)$ yang merupakan turunan ke Z dari Polinomial Laguerre L_k(r),

$$L_k^Z(r) = \frac{d^Z}{dr^Z} L_k(r)$$

Selanjutnya kita akan mengecek pada persamaan sebelumnya yang menghasilkan solusi berupa polinomial $r^l \sum_{k=0}^{Z} b_k r^k$ yang berkaitan dengan penyelesaian solusi dari persamaan differensial Laguerre diatas. Persamaan tersebut sebagai berikut

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2} + 2\left[\frac{(l+1)}{r} - q\right]\frac{\partial K(r)}{\partial r} + 2\left[\frac{-(\mathrm{l}+1)\mathrm{q}+(\mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2)}{r}\right]K(r) = 0$$

Dengan menggunakan variabel pengganti,

$$f = 2\mathrm{qr}$$

$$f = 2\sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}}\ r$$

Serta dengan menggunakan jari-jari Bohr,

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

Dapat dijabarkan,

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2} + 2\left[\frac{(l+1)}{r} - q\right]\frac{\partial K(r)}{\partial r} + 2\left[\frac{-(\mathrm{l}+1)\mathrm{q}+(\mu e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar^2)}{r}\right]K(r) = 0$$

$$\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2} + 2\left[\frac{(l+1)}{r} - q\right]\frac{\partial K(r)}{\partial r} + 2\left[\frac{-(\mathrm{l}+1)\mathrm{q}+(1/a_0)}{r}\right]K(r) = 0$$

$$(2\mathrm{qr})\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2} + (2\mathrm{qr})2\left[\frac{(l+1)}{r} - q\right]\frac{\partial K(r)}{\partial r} + (2\mathrm{qr})2\left[\frac{-(\mathrm{l}+1)\mathrm{q}+(1/a_0)}{r}\right]K(r) = 0$$

$$(2\mathrm{qr})\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2} + [4q(l+1) - 4q^2 r]\frac{\partial K(r)}{\partial r} + \left[-4q^2(\mathrm{l}+1) + \frac{4\mathrm{q}}{a_0}\right]K(r) = 0$$

$$(2qr)\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2} + [(2q)2(l+1) - (2q)(2qr)]\frac{\partial K(r)}{\partial r} + \left[-(4q)q(\mathrm{l}+1) + \right.$$

$$\left.(4q)\frac{1}{a_0}\right]K(r) = 0$$

$$f\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2} + 2q[2(l+1) - f]\frac{\partial K(r)}{\partial r} + 4q\left[-q(\mathrm{l}+1) + \frac{1}{a_0}\right]K(r) = 0$$

$$\frac{f}{(2q)^2}\frac{\partial^2 K(r)}{\partial r^2} + \frac{2q}{(2q)^2}[2(l+1) - f]\frac{\partial K(r)}{\partial r} + \frac{4q}{(2q)^2}\left[-q(\mathrm{l}+1) + \frac{1}{a_0}\right]K(r) = 0$$

$$f\frac{\partial^2 K(r)}{\partial f^2} + [2(l+1) - f]\frac{\partial K(r)}{\partial f} + \frac{1}{q}\left[-q(\mathrm{l}+1) + \frac{1}{a_0}\right]K(r) = 0$$

$$f\frac{\partial^2 K(r)}{\partial f^2} + [2(l+1) - f]\frac{\partial K(r)}{\partial f} + \left[-(\mathrm{l}+1) + \frac{1}{qa_0}\right]K(r) = 0$$

$$f\frac{\partial^2 K(r)}{\partial f^2} + [2(l+1) - f]\frac{\partial K(r)}{\partial f} + \left[-(\mathrm{l}+1) + \frac{1}{(1/na_0)a_0}\right]K(r) = 0$$

$$f\frac{\partial^2 K(r)}{\partial f^2} + [2(l+1) - f]\frac{\partial K(r)}{\partial f} + [-(\mathrm{l}+1) + n]K(r) = 0$$

$$f\frac{\partial^2 K(r)}{\partial f^2} + [(2l+1) + 1 - f]\frac{\partial K(r)}{\partial f} + [(n+l) - (2l+1)]K(r) = 0$$

Hasil ini identik dengan persamaan differensial Legendre terasosiasi, dengan mengasumsikan $K(r) = L(f)$ didapatkan

$$f\frac{\partial^2 L(f)}{\partial f^2} + [(2l+1) + 1 - f]\frac{\partial L(f)}{\partial f} + [(n+l) - (2l+1)]L(f) = 0$$

Dengan melihat pada persamaan differensial Legendre terasosiasi berikut,

$$r\frac{d^2L_k^Z(r)}{dr^2} + (Z+1-r)\frac{dL_k^Z(r)}{dr} + (k-Z)L_k^Z(r) = 0$$

Dapat diambil keputusan bahwa,

$$Z = 2l + 1$$

$$k = n + l$$

$$K(r) = \sum_{k=0}^{Z} b_k r^k = L(f) = L_k^Z(f) = L_{n+1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$$

Sehingga fungsi gelombang radial atom hidrogen dapat dituliskan,

$$R(r) = N_{nl}\, e^{-\frac{r}{na_0}}\, r^l \sum_{k=0}^{Z} b_k r^k$$

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

Syarat normalisasi fungsi gelombang radial,

$$\int_0^\infty [R_{nl}(r)]^*[R_{nl}(r)]\, r^2 dr = 1$$

$$\int_0^\infty \left[N_{nl}\, e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n+1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)\right]^* \left[N_{nl}\, e^{-\frac{r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n+1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)\right] \left(\frac{2}{na_0}\right)^{-3} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^2$$

$$d\left(\frac{2r}{na_0}\right) = 1$$

$$N_{nl}{}^2 \left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \int_0^\infty e^{-\frac{2r}{na_0}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{2l} \left[L_{n+1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)\right]^2 \left(\frac{2r}{na_0}\right)^2 d\left(\frac{2r}{na_0}\right) = 1$$

Selanjunya dapat menggunakan kondisi normalisasi dari polinomial Laguerre terasosiasi berikut,

$$\int_0^\infty e^{-w}\, w^{2l} [L_{n+1}^{2l+1}(w)]^2 w^2 dw = \frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!}$$

dengan memisalkan $\frac{2r}{na_0} = w$

$$N_{nl}{}^2 \left(\frac{2}{na_0}\right)^{-3} \int_0^\infty e^{-w}\, w^{2l} [L_{n+1}^{2l+1}(w)]^2 w^2 dw = 1$$

$$-N_{nl}{}^2 \left(\frac{2}{na_0}\right)^{-3} \frac{2n[(n+l)!]^3}{(n-l-1)!} = 1$$

$$N_{nl}{}^2 = -\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}$$

$$N_{nl} = -\left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}$$

Sehingga solusi persamaan radial atom hidrogen ternormalisasi (disebut fungsi gelombang atom hidrogen ternormalisasi) dapat dituliskan,

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

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

Bagian Angular

Persamaan angular pada atom hidrogen sama dengan persamaan angular pada koordinat bola karena pada persamaan angular merupakan persamaan yang telah tetap dalam arti tidak mengandung fungsi atau operator yang belum diketahui seperti $V(r)$ pada persamaan radial. Sehingga penyelesaiannya sama dengan persamaan angular dalam koordinat bola. Persamaan angular merupakan persamaan gelombang yang merambat secara angular atau berotasi berdasarkan sudut polar (θ) dan sudut azimut (ϕ) dengan menggunakan separasi variabel berikut

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi)$$

Oleh karena itu persamaan angular terpisah menjadi persamaan polar yaitu persamaan yang hanya bergantung pada sudut polar (θ),

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

Dan persamaan azimut yaitu persamaan yang hanya bergantung pada sudut azimut (ϕ) berikut,

$$\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2} = -m^2$$

Solusi dari masing-masing persamaan polar dan persamaan azimut dapat dijabarkan sebagai berikut:

Persamaan Polar

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

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

Solusi persamaan polar

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

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

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

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

Dengan menggunakan variabel pengganti,

$$\cos\theta=v \qquad \frac{\partial v}{\partial\theta}=-\sin\theta$$

$$\sin\theta=\sqrt{1-v^2} \qquad \frac{\partial}{\partial\theta}=\frac{\partial}{\partial v}\frac{\partial v}{\partial\theta}=-\sin\theta\frac{\partial}{\partial v}$$

Substitusi ke persamaan sebelumnya,

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

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

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

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

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

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

Persamaan polar diatas ternyata identik dengan persamaan Legendre terasosiasi berikut,

$$(1-v^2)\frac{d^2P_l^m(v)}{dv^2}-2v\frac{dP_l^m(v)}{dv}+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{(1-v^2)}\right]P_l^m(v)=0$$

Sedangkan langkah yang dilakukan untuk menyelesaikan persamaan diatas adalah terlebih dahulu mengubahnya kedalam persamaan Legendre dengan melalui pendekatan bahwa $m=0$

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

$$(1-v^2)\frac{\partial^2\Theta}{\partial v^2}-2v\frac{\partial\Theta}{\partial v}+l(l+1)\,\Theta=0$$

Atau bisa dituliskan

$$(1-v^2)\frac{d^2P_l(v)}{dv^2}-2v\frac{dP_l(v)}{dv}+l(l+1)P_l(v)=0$$

Untuk menentukan $P_l(v)$ dari persamaan diatas menggunakan formula Rodrigues yaitu melalui fungsi pembangkit persamaan differensial Legendre berikut

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xs+s^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)s^n \qquad |s| < 1$$

$$(1-2xs+s^2)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)s^n \qquad |s| < 1$$

$$(1-(2xs-s^2))^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x)s^n \qquad |s| < 1$$

Ruas kiri dapat dijabarkan menggunakan deret binomial $(1-x)^p$ sebagai berikut,

$$(1-(2xs-s^2))^{-1/2} = 1 + \left(-\tfrac{1}{2}\right)(-(2xs-s^2)) + \frac{\left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{3}{2}\right)}{2!}(-(2xs-s^2))^2 + \frac{\left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{3}{2}\right)\left(-\frac{5}{2}\right)}{3!}(-(2xs-s^2))^3 + \cdots + \frac{\left(-\frac{1}{2}\right)\left(-\frac{3}{2}\right)\left(-\frac{5}{2}\right)\left(-\frac{7}{2}\right)\ldots\left(-\frac{(2n-1)}{2}\right)}{n!}(-(2xs-s^2))^n$$

Bentuk koefisisen suku terakhir dapat disederhanakan menjadi,

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

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

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

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

$$= (-1)^n \frac{(2n)!}{n!\,2^n\,2^n\,n!}$$

$$= (-1)^n \frac{(2n)!}{(n!)^2\,2^{2n}}$$

Kemudian substitusi ke persamaan deret binomial,

$$(1-(2xs-s^2))^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n \frac{(2n)!}{(n!)^2\,2^{2n}}(-(2xs-s^2))^n$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n \frac{(2n)!}{(n!)^2\,2^{2n}}(-1)^n\,(2xs-s^2)^n$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^{2n} \frac{(2n)!}{(n!)^2\,2^{2n}}\,(2xs-s^2)^n$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n)!}{(n!)^2\,2^{2n}}(2xs-s^2)^n$$

Ekspansikan secara binomial fungsi $(2xs-s^2)^n$ akan didapatkan,

$$(2xs - s^2)^n = s^n(2x - s)^n =$$

$$s^n\left((2x)^2 - n(2x)^{n-1}(-s) + \frac{n(n-1)}{2!}(2x)^{n-2}(-s)^2 + \cdots + \frac{n(n-1)(n-2)\ldots(n-(k-1))}{k!}(2x)^{n-k}(s)^k(-1)^k\right)$$

Bentuk koefisien suku terakhir dapat disederhanakan menjadi,

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

Didapatkan,

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

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

Fungsi pembangkit dapat dituliskan kembali dalam bentuk,

$$(1 - (2xs - s^2))^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n)!}{(n!)^2\, 2^{2n}}(2xs - s^2)^n$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n)!}{(n!)^2\, 2^{2n}}\left(\sum_{k=0}^{n}\frac{n!}{k!(n-k)!}(2x)^{n-k}(s)^{n+k}(-1)^k\right)$$

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

Selanjutnya digunakan pendekatan bahwa nilai $(s)^{n+k} \to (s)^n$ sehingga diperoleh $n + k \to n$ atau dapat juga dituliskan $n \to (n - k)$ dan substitusikan kedalam fungsi pembangkit,

$$(1 - (2xs - s^2))^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{n}\frac{(2n)!}{2^{2n}(n!)}\frac{1}{k!(n-k)!}(2x)^{n-k}(s)^{n+k}(-1)^k$$

$$(1 - (2xs - s^2))^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{n}\frac{(2(n-k))!}{2^{2(n-k)}(n-k)!}\frac{1}{k!((n-k)-k)!}(2x)^{(n-k)-k}(s)^{(n-k)+k}(-1)^k$$

$$(1 - (2xs - s^2))^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{n}\frac{(2(n-k))!}{2^{2(n-k)}(n-k)!}\frac{1}{k!(n-2k)!}(2x)^{(n-2k)}(s)^{n}(-1)^k$$

Substitusikan kembali pada persamaan awal fungsi pembangkit,

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xs+s^2}} = \sum_{n=0}^{\infty}P_n(x)s^n$$

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

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

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

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

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

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

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

Agar diperoleh deret pangkat tertinggi fungsi Legendre, maka parameter k dirubah menjadi r sehingga akan didapatkan formula Rodrigues sebagai berikut

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

Jika ingin merubah bentuk deret menjadi bentuk persamaan differensial, maka untuk setiap n bilangan bulat berlaku

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

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

Substitusi kedalam formula Rodrigues,

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

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

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

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

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

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

Kemudian dilakukan penyederhanaan dengan menggunakan ekspansi deret binomial $(x^2-1)^n$ berikut,

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

Bentuk koefisien suku terakhir dapat disederhanakan menjadi,

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

Didapatkan,

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

Sama seperti sebelumnya, dengan mengubah parameter k menjadi r akan diperoleh

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

Sehingga didapatkan bentuk formula Rodrigues yang lebih sederhana adalah

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

Dimana n merupakan bilangan cacah yang bernilai $n=0,1,2,3,\dots$

Sama seperti sebelumnya, apabila variabel n diganti dengan l (dimana l disebut sebagai bilangan kuantum orbital) maka didapatkan,

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

Atau

$$P_l(v)=\frac{1}{2^l(l!)}\frac{d^l}{dv^l}(v^2-1)^l,\qquad \text{dimana } l=0,1,2,3,\dots$$

Formula Rodrigues diatas berguna untuk menyelesaikan persamaan differensial Legendre terasosiasi berikut

$$(1-v^2)\frac{d^2P_l^m(v)}{dv^2}-2v\frac{dP_l^m(v)}{dv}+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{(1-v^2)}\right]P_l^m(v)=0$$

Langkah yang dilakukan adalah melalui pendekatan bahwa $m=0$ didapatkan,

$$(1-v^2)\frac{d^2P_l(v)}{dv^2}-2v\frac{dP_l(v)}{dv}+l(l+1)P_l(v)=0$$

Kemudian dengan mendifferensialkan persamaan diatas sebanyak m kali terhadap v akan diperoleh,

$$\frac{d^m}{dv^m}\left[(1-v^2)\frac{d^2P_l(v)}{dv^2}-2v\frac{dP_l(v)}{dv}+l(l+1)P_l(v)\right]=0$$

$$\frac{d^m}{dv^m}(1-v^2)\frac{d^2P_l(v)}{dv^2}-\frac{d^m}{dv^m}2v\frac{dP_l(v)}{dv}+\frac{d^m}{dv^m}l(l+1)P_l(v)=0$$

Untuk menyelesaikan persamaan diatas menggunakan rumus *Leibnit'z* berikut,

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

Dan sebagai penyederhanaan digunakan pemisalan berikut,

$$U = \frac{d^m}{dv^m} P_l(v)$$

Untuk suku pertama

$$\frac{d^m}{dv^m}(1-v^2)\frac{d^2 P_l(v)}{dv^2} = \frac{d^2}{dv^2}\left[\frac{d^m}{dv^m} P_l(v)\,(1-v^2)\right] = \cdots$$

Dimana,

$$A(v) = P_l(v)$$

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

Dengan menggunakan notasi *Leibnit'z* akan diperoleh,

$$\frac{d^m}{dv^m}[P_l(v)\,(1-v^2)] = \frac{m!}{(m-0)!0!}(1-v^2)\frac{d^{m-0}}{dv^{m-0}} P_l(v) + \frac{m!}{(m-1)!1!}\frac{d}{dv}(1-v^2)\frac{d^{m-1}}{dv^{m-1}} P_l(v) + \frac{m!}{(m-2)!2!}\frac{d^2}{dv^2}(1-v^2)\frac{d^{m-2}}{dv^{m-2}} P_l(v)$$

$$\frac{d^m}{dv^m}[P_l(v)\,(1-v^2)] = (1-v^2)\frac{d^m}{dv^m} P_l(v) + m(-2v)\frac{d^{m-1}}{dv^{m-1}} P_l(v) + \frac{m(m-1)}{2}(-2)\frac{d^{m-2}}{dv^{m-2}} P_l(v)$$

$$\frac{d^m}{dv^m}[P_l(v)\,(1-v^2)] = (1-v^2)\frac{d^m}{dv^m} P_l(v) - 2mv\frac{d^{m-1}}{dv^{m-1}} P_l(v) - m(m-1)\frac{d^{m-2}}{dv^{m-2}} P_l(v)$$

Maka dapat dituliskan kembali,

$$\frac{d^2}{dv^2}\left[\frac{d^m}{dv^m} P_l(v)\,(1-v^2)\right] = \frac{d^2}{dv^2}\left[(1-v^2)\frac{d^m}{dv^m} P_l(v) - 2mv\frac{d^{m-1}}{dv^{m-1}} P_l(v) - m(m-1)\frac{d^{m-2}}{dv^{m-2}} P_l(v)\right]$$

$$\frac{d^2}{dv^2}\left[\frac{d^m}{dv^m} P_l(v)\,(1-v^2)\right] = (1-v^2)\frac{d^{m+2}}{dv^{m+2}} P_l(v) - 2mv\frac{d^{m+1}}{dv^{m+1}} P_l(v) - m(m-1)\frac{d^m}{dv^m} P_l(v)$$

$$\frac{d^2}{dv^2}\left[\frac{d^m}{dv^m} P_l(v)\,(1-v^2)\right] = (1-v^2)\,U'' - 2mv\,U' - m(m-1)\,U$$

Untuk suku kedua

$$\frac{d^m}{dv^m}(-2v)\frac{dP_l(v)}{dv} = (-2v)\frac{d^{m+1}}{dv^{m+1}} P_l(v) = (-2v)\,U'$$

Untuk suku ketiga

$$\frac{d^m}{dv^m} l(l+1)P_l(v) = l(l+1)\frac{d^m}{dv^m} P_l(v) = l(l+1)\,U$$

Sehingga gabungan dari suku pertama, suku kedua dan suku ketiga akan dihasilkan

$$\frac{d^m}{dv^m}(1-v^2)\frac{d^2P_l(v)}{dv^2} - \frac{d^m}{dv^m}2v\frac{dP_l(v)}{dv} + \frac{d^m}{dv^m}l(l+1)\,P_l(v) = 0$$

$$(1-v^2)U'' - 2mv\,U' - m(m-1)\,U + (-2v)U' + l(l+1)\,U = 0$$

$$(1-v^2)\,U'' - 2v(m+1)\,U' + \big(-m(m-1) + l(l+1)\big)\,U = 0$$

$$(1-v^2)\,U'' - 2v(m+1)\,U' + (l-m)(l+m+1)\,U = 0$$

Persamaan diatas bukan merupakan persamaan *self adjoint*, sedangkan untuk merubahnya menjadi persamaan *self adjoint* digunakan suatu pemisalan berikut

$$w(v) = u(v)(1-v^2)^{m/2} \qquad\qquad u(v) = w(v)(1-v^2)^{-m/2}$$

Sebagai penyederhanaan dapat dituliskan $w(v) = w$ dan $u(v) = u$. Nilai differensial pertama dan differensial kedua bagi $u(v)$ dapat dijabarkan sebagai berikut,

Untuk differensial pertama

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

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

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

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

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

Untuk differensial kedua

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

$$u'' = \frac{d}{dv}\left[w'\,(1-v^2)^{-m/2} + \frac{(mvw)}{(1-v^2)}(1-v^2)^{-\,m/2}\right]$$

$$u'' = \frac{d}{dv}\left[w'\,(1-v^2)^{-m/2}\right] + \frac{d}{dv}\left[\frac{(mvw)}{(1-v^2)}(1-v^2)^{-\,m/2}\right]$$

Persamaan diatas dapat diselesaikan dengan menguraikan suku pertama dan suku kedua sebagai berikut,

Suku pertama

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

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

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

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

Suku kedua

$$\frac{d}{dv}\left[\frac{(mvw)}{(1-v^2)}(1-v^2)^{-\,m/2}\right] = \cdots$$

Digunakan pemisalan,

$$E = \frac{(mvw)}{(1-v^2)} \qquad F = (1-v^2)^{-\,m/2}$$

$$E' = \frac{d}{dv}\frac{(mvw)}{(1-v^2)} \qquad F' = \frac{d}{dv}(1-v^2)^{-\,m/2}$$

$$E' = \frac{(vw)}{(1-v^2)}\frac{dm}{dv} + \frac{(mw)}{(1-v^2)}\frac{dv}{dv} + \frac{(mv)}{(1-v^2)}\frac{dw}{dv} \qquad F' = (mv)(1-v^2)^{-\frac{m}{2}-1}$$

$$E' = \frac{(vw)}{(1-v^2)}\frac{dm}{dv} + (mw)\frac{d}{dv}\frac{v}{(1-v^2)} + \frac{(mv)}{(1-v^2)}\frac{dw}{dv} \qquad F' = \frac{(mv)}{(1-v^2)}(1-v^2)^{-m/2}$$

$$E' = 0 + (mw)\left(\frac{(1-v^2)+2v^2}{(1-v^2)^2}\right) + \frac{(mvw')}{(1-v^2)}$$

$$E' = \frac{(mw)}{(1-v^2)} + \frac{2mv^2w}{(1-v^2)^2} + \frac{(mvw')}{(1-v^2)}$$

$$E' = \frac{(mw)}{(1-v^2)} + \frac{(mvw')}{(1-v^2)} + \frac{2mv^2w}{(1-v^2)^2}$$

Maka didapatkan,

$$\frac{d}{dv}\left[\frac{(mvw)}{(1-v^2)}(1-v^2)^{-\,m/2}\right] = E'F + F'E$$

$$\frac{d}{dv}\left[\frac{(mvw)}{(1-v^2)}(1-v^2)^{-\,m/2}\right] = \left[\frac{(mw)}{(1-v^2)} + \frac{(mvw')}{(1-v^2)} + \frac{2mv^2w}{(1-v^2)^2}\right](1-v^2)^{-\,m/2} + \left[\frac{(mv)}{(1-v^2)}(1-v^2)^{-m/2}\right]\frac{(mvw)}{(1-v^2)}$$

$$\frac{d}{dv}\left[\frac{(mvw)}{(1-v^2)}(1-v^2)^{-\,m/2}\right] = \left[\frac{(mw)}{(1-v^2)} + \frac{(mvw')}{(1-v^2)} + \frac{(2mv^2w)}{(1-v^2)^2} + \frac{(m^2v^2w)}{(1-v^2)^2}\right](1-v^2)^{-\,m/2}$$

Kemudian dengan menggabungkan nilai differensial suku pertama dan suku kedua akan didapatkan,

$$u'' = \frac{d}{dv}\left[w'\,(1-v^2)^{-m/2}\right] + \frac{d}{dv}\left[\frac{(mvw)}{(1-v^2)}(1-v^2)^{-\,m/2}\right]$$

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

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

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

Dapat dituliskan kembali,

$$u = w(1-v^2)^{-m/2}$$

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

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

Selanjutnya substitusi kedalam persamaan *self adjoint*,

$$(1-v^2)\,U'' - 2v(m+1)\,U' + (l-m)(l+m+1)\,U = 0$$

Dengan menganggap bahwa $u = U, u' = U', u'' = U''$ akan diperoleh

$$(1-v^2)\,U'' - 2v(m+1)\,U' + (l-m)(l+m+1)\,U = 0$$

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

Dapat disederhanakan menjadi,

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

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

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

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

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

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

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

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

Dimana solusinya adalah

$$w(v) = u(v)(1-v^2)^{m/2}$$

Dengan,

$$u(v) = u = U = \frac{d^m}{dv^m} P_l(v)$$

Sehingga solusi dari persamaan *self adjoint* diatas dapat dituliskan kembali dalam bentuk

$$w(v) = \left(\frac{d^m}{dv^m} P_l(v)\right)(1-v^2)^{m/2}$$

$$w(v) = (1-v^2)^{m/2} \frac{d^m}{dv^m} P_l(v)$$

Persamaan *self adjoint*,

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

Dengan solusi,

$$w(v) = (1-v^2)^{m/2} \frac{d^m}{dv^m} P_l(v)$$

Identik dengan persamaan differensial Legendre terasosiasi,

$$(1-v^2)\frac{d^2P_l^m(v)}{dv^2} - 2v\frac{dP_l^m(v)}{dv} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{(1-v^2)}\right] P_l^m(v) = 0$$

Maka dapat diambil keputusan bahwa solusi dari persamaan differensial Legendre terasosiasi (disebut polinomial Legendre terasosiasi) adalah,

$$P_l^m(v) = w(v) = (1-v^2)^{m/2} \frac{d^m}{dv^m} P_l(v)$$

Dimana dari formula Rodigues telah didapatkan (disebut polinomial Legendre),

$$P_l(v) = \frac{1}{2^l(l!)} \frac{d^l}{dv^l}(v^2-1)^l$$

Sehingga dengan mengingat kembali bahwa persamaan polar ternyata identik dengan persamaan Legendre terasosiasi jika menggunakan pengganti variabel $\cos\theta = v$, maka dapat disimpulkan bahwa solusi dari persamaan polar dapat dituliskan

$$\Theta(\theta) \sim P_l^m(\cos\theta)$$

$$\Theta_{lm}(\theta) = C_{lm}\, P_l^m(\cos\theta)$$

Dimana,

$$P_l^m(\cos\theta) = (1 - cos^2\theta)^{m/2} \frac{d^m}{d(\cos\theta)^m} P_l(\cos\theta)$$

Sedangkan,

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

Syarat normalisasi fungsi gelombang polar,

$$\int_0^\pi [\Theta_{lm}(\theta)]^* [\Theta_{lm}(\theta)] \sin\theta\, d\theta = 1$$

$$\int_0^\pi [C_{lm}\, P_l^m(\cos\theta)]^* [C_{lm}\, P_l^m(\cos\theta)] \sin\theta\, d\theta = 1$$

$$\int_0^\pi {C_{lm}}^2\, [\, P_l^m(\cos\theta)]^2 \sin\theta\, d\theta = 1$$

$${C_{lm}}^2 \int_0^\pi\, [\, P_l^m(\cos\theta)]^2 \sin\theta\, d\theta = 1$$

Dengan menggunakan normalisasi dari polinomial Legendre terasosiasi berikut,

$$\int_0^\pi\, [\, P_l^m(\cos\theta)]^2 \sin\theta\, d\theta = \left(\frac{2}{2l+1}\right)\left(\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}\right)$$

$$(-1)^{m+|m|} \int_0^\pi\, [\, P_l^m(\cos\theta)]^2 \sin\theta\, d\theta = \left(\frac{2}{2l+1}\right)\left(\frac{(l+|m|)!}{(l-|m|)!}\right)$$

Didapatkan konstanta normalisasi,

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

$${C_{lm}}^2 \;= (-1)^{m+|m|} \frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}$$

$$C_{lm} \;= (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}$$

Sehingga solusi persamaan polar yang ternormalisasi (disebut fungsi gelombang polar ternormalisasi) dapat dituliskan,

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

Solusi persamaan polar (disebut fungsi gelombang polar)

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

Solusi persamaan azimut (disebut fungsi gelombang azimut)

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

Sehingga solusi dari persamaan angular (disebut fungsi gelombang angular) sebagai gabungan dari fungsi gelombang polar dan fungsi gelombang azimut dapat dituliskan,

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi)$$

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(\cos\theta) \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{im\phi}$$

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} e^{im\phi}\ P_l^m(\cos\theta)$$

Persamaan Azimut

$$\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2} = -m^2$$

Solusi persamaan azimut

$$\frac{\partial^2\Phi(\phi)}{\partial\phi^2} + m^2\Phi(\phi) = 0$$

Misalkan: $\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} = D^2$ dan $\frac{\partial}{\partial\phi} = D$

Maka,

$$D^2\Phi(\phi) + m^2\Phi(\phi) = 0$$

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

$$D = \frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$$

$$D = \frac{0\pm\sqrt{0-(4)(1)(m^2)}}{(2)(1)}$$

$$D = \frac{\pm\sqrt{-4m^2}}{2}$$

$$D = \frac{\pm 2m\sqrt{-1}}{2}$$

$$D = \pm im$$

$$\frac{\partial}{\partial\phi} = \pm im$$

$$\frac{\partial}{\partial\phi}\Phi(\phi) = \pm im\Phi(\phi)$$

$$\int \frac{\partial}{\partial\phi}\Phi(\phi) = \int \pm im\Phi(\phi)$$

$$\int \frac{1}{\Phi(\phi)} \partial\Phi(\phi) = \int \pm im \, \partial\phi$$

$$\ln \Phi(\phi) = \pm im\phi$$

$$\Phi(\phi) \sim e^{\pm im\phi}$$

Dimiliki suatu hubungan,

$$\Phi(\phi + 2\pi) = \Phi(\phi)$$

$$e^{\pm im(\phi+2\pi)} = e^{\pm im\phi}$$

$$e^{\pm im\phi} e^{\pm im2\pi} = e^{\pm im\phi}$$

$$e^{\pm im2\pi} = 1$$

$$e^{\pm im2\pi} = e^0$$

Sehingga nilai m adalah bilangan bulat yang dapat berharga $(m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$. Oleh karena itu dipilih yang berharga positif saja,

$$\Phi(\phi) \sim e^{im\phi}$$

$$\Phi_m(\phi) = A_m e^{im\phi}$$

Syarat normalisasi fungsi gelombang azimut,

$$\int_0^{2\pi} [\Phi_m(\phi)]^* \, [\Phi_m(\phi)] d\phi = 1$$

$$\int_0^{2\pi} \left[A_m e^{-im\phi}\right]^* \left[A_m e^{im\phi}\right] d\phi = 1$$

$${A_m}^2 \int_0^{2\pi} e^{-im\phi+im\phi} \, d\phi = 1$$

$${A_m}^2 \int_0^{2\pi} e^0 \, d\phi = 1$$

$${A_m}^2 \int_0^{2\pi} d\phi = 1$$

$${A_m}^2 (2\pi - 0) = 1$$

$${A_m}^2 (2\pi) = 1$$

$${A_m}^2 = \frac{1}{2\pi}$$

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

Sehingga solusi persamaan azimut ternormalisasi (disebut fungsi gelombang azimut ternormalisasi) dapat dituliskan,

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

Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen

Solusi lengkap fungsi gelombang atom hidrogen merupakan solusi gabungan dari fungsi gelombang radial dan fungsi gelombang angular yang dapat dituliskan

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

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

$$(-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\, e^{im\phi}\, P_l^m(\cos\theta)$$

$$= -\left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2}(-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}\left(\frac{2r}{na_0}\right)^{l}$$

$$L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\phi} e^{-r/na_0}$$

Lampiran 5. Perhitungan Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen untuk $\boldsymbol{n = 1, 2, 3}$

A. Fungsi Gelombang Radial Atom Hidrogen untuk $\boldsymbol{n = 1, 2, 3}$

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

Fungsi gelombang radial atom hidrogen mengandung bilangan kuantum utama (n) dan bilangan kuantum orbital (l). Dimana untuk bilangan kuantum utama (n) yang diizinkan adalah $n = 1,2,3$, dan seterusnya, sedangkan untuk bilangan kuantum orbital (l) yang diizinkan adalah $l = 0,1,2,3, \ldots (n-1)$. Mengingat yang akan dicari adalah untuk $n = 1,2,3$, maka fungsi gelombang radial yang akan memenuhi adalah $R_{10}(r), R_{20}(r), R_{21}(r), R_{30}(r), R_{31}(r)$ dan $R_{32}(r)$.

Fungsi gelombang radial atom hidrogen juga menggunakan polinomial Laguerre terasosiasi yang didalamnya mengandung polinomial Laguerre. Berikut ini merupakan perhitungan beberapa polinomial Laguerre dan polinomial Laguerre terasosiasi yang dapat dijabarkan sebagai berikut.

Polinomial Laguerre

$$L_k(r) = e^r \frac{d^k}{dr^k}(r^k e^{-r})$$

Untuk $L_1(r)$

$$L_1(r) = e^r \frac{d^1}{dr^1}(r^1 e^{-r})$$

$$L_1(r) = e^r[r(-e^{-r}) + (e^{-r})1]$$

$$L_1(r) = -r + 1$$

Untuk $L_2(r)$

$$L_2(r) = e^r \frac{d^2}{dr^2}(r^2 e^{-r})$$

$$L_2(r) = e^r[r^2(e^{-r}) + (-e^{-r})(2r) + (e^{-r})(2) + (2r)(-e^{-r})]$$

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

Untuk $L_3(r)$

$$L_3(r) = e^r \frac{d^3}{dr^3}(r^3 e^{-r})$$

$$L_3(r) = e^r[r^3(-e^{-r}) + (e^{-r})(3r^2) + (-e^{-r})(6r) + (3r^2)(e^{-r}) + (e^{-r})(6) + (6r)(-e^{-r}) + (3r^2)(e^{-r}) + (-e^{-r})(6r)]$$

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

Untuk $L_4(r)$

$$L_4(r) = e^r \frac{d^4}{dr^4}(r^4 e^{-r})$$

$$L_4(r) = e^r[r^4(e^{-r}) + (-e^{-r})(4r^3) + (e^{-r})(12r^2) + (4r^3)(-e^{-r}) + (-e^{-r})(24r) + (12r^2)(e^{-r}) + (4r^3)(-e^{-r}) + (e^{-r})(12r^2) + (e^{-r})(24) + (24r)(-e^{-r}) + (12r^2)(e^{-r}) + (e^{-r})(24r) + (4r^3)(-e^{-r}) + (e^{-r})(12r^2) + (-e^{-r})(24r) + (12r^2)(e^{-r})]$$

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

Untuk $L_5(r)$

$$L_5(r) = e^r \frac{d^5}{dr^5}(r^5 e^{-r})$$

$$L_5(r) = e^r[(e^{-r})(5r^4 - 80r^3 + 360r^2 - 480r + 120) + (r^5 - 20r^4 + 120r^3 - 240r^2 + 120r)(-e^{-r})]$$

$$L_5(r) = -r^5 + 25r^4 - 200r^3 + 600r^2 - 600r + 120$$

Polinomial Laguerre Terasosiasi

$$L_k^Z(r) = \frac{d^Z}{dr^Z} L_k(r)$$

Untuk $L_1^1(r)$

$$L_1^1(r) = \frac{d^1}{dr^1} L_1(r)$$

$$L_1^1(r) = \frac{d^1}{dr^1}[-r + 1]$$

$$L_1^1(r) = -1$$

Untuk $L_2^1(r)$

$$L_2^1(r) = \frac{d^1}{dr^1} L_2(r)$$

$$L_2^1(r) = \frac{d^1}{dr^1}[r^2 - 4r + 2]$$

$$L_2^1(r) = 2r - 4$$

Untuk $L_3^1(r)$

$$L_3^1(r) = \frac{d^1}{dr^1} L_3(r)$$

$$L_3^1(r) = \frac{d^1}{dr^1} [-r^3 + 9r^2 - 18r + 6]$$

$$L_3^1(r) = -3r^2 + 18r - 18$$

Untuk $L_3^3(r)$

$$L_3^3(r) = \frac{d^3}{dr^3} L_3(r)$$

$$L_3^3(r) = \frac{d^3}{dr^3} [-r^3 + 9r^2 - 18r + 6]$$

$$L_3^3(r) = -6$$

Untuk $L_4^3(r)$

$$L_4^3(r) = \frac{d^3}{dr^3} L_4(r)$$

$$L_4^3(r) = \frac{d^3}{dr^3} [r^4 - 16r^3 + 72r^2 - 96r + 24]$$

$$L_4^3(r) = 24r - 96$$

Untuk $L_5^5(r)$

$$L_5^5(r) = \frac{d^5}{dr^5} L_5(r)$$

$$L_5^5(r) = \frac{d^5}{dr^5} [-r^5 + 25r^4 - 200r^3 + 600r^2 - 600r + 120]$$

$$L_5^5(r) = -120$$

Sehingga diperoleh,

Tabel 4.a Polinomial Laguerre Terasosiasi untuk Fungsi Gelombang Radial $\boldsymbol{n = 1, 2, 3}$

$L_k^Z(r)$	$L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$
$L_1^1(r) = -1$	$L_1^1\left(\frac{2r}{na_0}\right) = -1$
$L_2^1(r) = 2r - 4$	$L_2^1\left(\frac{2r}{na_0}\right) = 2\left(\frac{2r}{na_0}\right) - 4$
$L_3^1(r) = -3r^2 + 18r - 18$	$L_3^1\left(\frac{2r}{na_0}\right) = -3\left(\frac{2r}{na_0}\right)^2 + 18\left(\frac{2r}{na_0}\right) - 18$
$L_3^3(r) = -6$	$L_3^3\left(\frac{2r}{na_0}\right) = -6$
$L_4^3(r) = 24r - 96$	$L_4^3\left(\frac{2r}{na_0}\right) = 24\left(\frac{2r}{na_0}\right) - 96$
$L_5^5(r) = -120$	$L_5^5\left(\frac{2r}{na_0}\right) = -120$

❖ **Perhitungan Fungsi Gelombang Radial Atom Hidrogen untuk $n = 1, 2, 3$**

Untuk keadaan dasar ($n = 1$ dan $l = 0$)

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

$$R_{10}(r) = -\left(\frac{2}{a_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{1}{2}}e^{-r/a_0} L_1^1\left(\frac{2r}{a_0}\right)$$

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

$$R_{10}(r) = \frac{2}{(a_0)^{3/2}} e^{-r/a_0}$$ => digunakan untuk validasi

Untuk keadaan tereksitasi pertama ($n = 2$ dan $l = 0$)

$$R_{20}(r) = -\left(\frac{2}{2a_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{(2-0-1)!}{4[(2+0)!]^3}}\left(\frac{2r}{2a_0}\right)^0 e^{-r/2a_0} L_{2+0}^{0+1}\left(\frac{2r}{2a_0}\right)$$

$$R_{20}(r) = -\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{1}{4[2]^3}}\, e^{-r/2a_0} L_2^1\left(\frac{r}{a_0}\right)$$

$$R_{20}(r) = -\frac{1}{(a_0)^{3/2}}\frac{1}{(2)(2)^{3/2}}e^{-r/2a_0}\left[2\left(\frac{r}{a_0}\right)-4\right]$$

$$R_{20}(r) = \frac{1}{(2a_0)^{3/2}}\left[2-\left(\frac{r}{a_0}\right)\right]e^{-r/2a_0}$$ => digunakan untuk validasi

Untuk keadaan tereksitasi pertama ($n = 2$ dan $l = 1$)

$$R_{21}(r) = -\left(\frac{2}{2a_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{(2-1-1)!}{4[(2+1)!]^3}}\left(\frac{2r}{2a_0}\right)^1 e^{-r/2a_0} L_{2+1}^{2+1}\left(\frac{2r}{2a_0}\right)$$

$$R_{21}(r) = -\left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{1}{4[6]^3}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0} L_3^3\left(\frac{r}{a_0}\right)$$

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

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}\,(2a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$$ => digunakan untuk validasi

Untuk keadaan tereksitasi kedua ($n = 3$ dan $l = 0$)

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

$$R_{30}(r) = -\left(\frac{2}{3a_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{2}{6[6]^3}}e^{-r/3a_0} L_3^1\left(\frac{2r}{3a_0}\right)$$

$$R_{30}(r) = -\left(\frac{2}{3a_0}\right)^{3/2}\frac{1}{(6)}\sqrt{\frac{1}{3[6]}}e^{-r/3a_0}\left[-3\left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2+18\left(\frac{2r}{3a_0}\right)-18\right]$$

$$R_{30}(r) = \frac{2}{(3a_0)^{3/2}}\left[1 - \left(\frac{2r}{3a_0}\right) + \left(\frac{2r^2}{27{a_0}^2}\right)\right] e^{-r/3a_0}$$ => digunakan untuk validasi

Untuk keadaan tereksitasi kedua ($n = 3$ dan $l = 1$)

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

$$R_{31}(r) = -\left(\frac{2}{3a_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{1}{6[24]^3}} \left(\frac{2r}{3a_0}\right) e^{-r/3a_0} L_4^3\left(\frac{2r}{3a_0}\right)$$

$$R_{31}(r) = -\left(\frac{2}{3a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{(24)} \sqrt{\frac{1}{6[24]}} \left(\frac{2r}{3a_0}\right) e^{-r/3a_0} \left[24\left(\frac{2r}{3a_0}\right) - 96\right]$$

$$R_{31}(r) = \frac{8}{9\sqrt{2}\,(3a_0)^{3/2}}\left[\left(\frac{r}{a_0}\right) - \left(\frac{r^2}{6{a_0}^2}\right)\right] e^{-r/3a_0}$$ => digunakan untuk validasi

Untuk keadaan tereksitasi kedua ($n = 3$ dan $l = 1$)

$$R_{32}(r) = -\left(\frac{2}{3a_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(3-2-1)!}{6[(3+2)!]^3}} \left(\frac{2r}{3a_0}\right)^2 e^{-r/3a_0} L_{3+2}^{4+1}\left(\frac{2r}{3a_0}\right)$$

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

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

$$R_{32}(r) = \frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{{a_0}^2}\right) e^{-r/3a_0}$$ => digunakan untuk validasi

B. Fungsi Gelombang Angular Atom Hidrogen untuk $n = 1, 2, 3$

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi)$$

Fungsi gelombang angular terdiri dari gabungan fungsi gelombang polar dan fungsi gelombang azimut yang masing-masing diberikan oleh

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^m(\cos\theta) \quad \text{dan} \quad \Phi_m(\phi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{im\phi}$$

Fungsi gelombang angular atom hidrogen mengandung bilangan kuantum orbital (n) dan bilangan kuantum azimut (m). Dimana untuk bilangan kuantum orbital (l) yang diizinkan adalah $l = 0,1,2,3, \dots (n-1)$, sedangkan untuk bilangan kuantum azimut (l) yang diizinkan adalah $m = -l, \dots, 0, \dots, +l$. Mengingat yang akan dicari adalah untuk $n = 1,2,3$, maka fungsi gelombang angular yang akan memenuhi adalah $Y_{00}(\theta, \phi); Y_{1(-1)}(\theta, \phi); Y_{10}(\theta, \phi); Y_{11}(\theta, \phi);$

$Y_{2(-2)}(\theta,\phi)$; $Y_{2(-1)}(\theta,\phi)$; $Y_{20}(\theta,\phi)$; $Y_{21}(\theta,\phi)$ dan $Y_{22}(\theta,\phi)$.

Fungsi gelombang angular atom hidrogen juga menggunakan polinomial Legendre terasosiasi yang didalamnya mengandung polinomial Legendre. Berikut ini merupakan perhitungan beberapa polinomial Legendre dan polinomial Legendre terasosiasi yang dapat dijabarkan sebagai berikut.

Polinomial Legendre

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

Untuk $P_0(\cos\theta)$

$$P_0(\cos\theta) = \frac{1}{2^0(0!)}\frac{d^0}{d(\cos\theta)^0}(cos^2\theta - 1)^0$$

$$P_0(\cos\theta) = 1$$

Untuk $P_1(\cos\theta)$

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

$$P_l(\cos\theta) = \frac{1}{2}(2\cos\theta)$$

$$P_1(\cos\theta) = \cos\theta$$

Untuk $P_2(\cos\theta)$

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

$$P_2(\cos\theta) = \frac{1}{8}\frac{d}{d(\cos\theta)}\left[\frac{d}{d(\cos\theta)}(cos^2\theta - 1)^2\right]$$

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

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

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

Polinomial Legendre Terasosiasi

$$P_l^{|m|}(\cos\theta) = (1 - cos^2\theta)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{d(\cos\theta)^{|m|}}P_l(\cos\theta)$$

Dimana,

$$P_l^{|m|}(\cos\theta) = P_l^{|-m|}(\cos\theta)$$

Untuk $P_0^0(\cos\theta)$

$$P_0^0(\cos\theta) = (1 - cos^2\theta)^{0/2} \frac{d^0}{d(\cos\theta)^0} P_0(v)$$

$$P_0^0(\cos\theta) = 1$$

Untuk $P_1^0(\cos\theta)$

$$P_1^0(\cos\theta) = (1 - cos^2\theta)^{0/2} \frac{d^0}{d(\cos\theta)^0} P_1(\cos\theta)$$

$$P_1^0(\cos\theta) = \cos\theta$$

Untuk $P_2^0(\cos\theta)$

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

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

Untuk $P_1^1(\cos\theta)$

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

$$P_1^1(\cos\theta) = (sin^2\theta)^{1/2} \frac{d^1}{d(\cos\theta)^1} (\cos\theta)$$

$$P_1^1(\cos\theta) = \sin\theta$$

Untuk $P_2^1(\cos\theta)$

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

$$P_2^1(\cos\theta) = (sin^2\theta)^{1/2} \frac{d^1}{d(\cos\theta)^1} \left[\frac{1}{2}(3\, cos^2\theta - 1)\right]$$

$$P_2^1(\cos\theta) = \sin\theta \left[\frac{1}{2}(6\cos\theta)\right]$$

$$P_2^1(\cos\theta) = 3\sin\theta\cos\theta$$

Untuk $P_2^2(\cos\theta)$

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

$$P_2^2(\cos\theta) = sin^2\theta \frac{d}{d(\cos\theta)} \left[\frac{d}{d(\cos\theta)} \left(\frac{1}{2}(3\, cos^2\theta - 1)\right)\right]$$

$$P_2^2(\cos\theta) = sin^2\theta \frac{d}{d(\cos\theta)} [3\cos\theta]$$

$$P_2^2(\cos\theta) = 3\, sin^2\theta$$

❖ **Perhitungan Fungsi Gelombang Angular Atom Hidrogen pada $n = 1, 2, 3$**

Untuk $Y_{00}(\theta, \phi)$

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \Theta_{00}(\theta)\Phi_0(\phi)$$

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \left[(-1)^{(0+|0|)/2}\sqrt{\frac{0+1}{2}\frac{(0-|0|)!}{(0+|0|)!}}P_0^0(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^0\right]$$

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \left[\sqrt{\frac{1}{2}}\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$ => digunakan untuk validasi

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

Untuk $Y_{1(-1)}(\theta, \phi)$

$$Y_{1(-1)}(\theta, \phi) = \Theta_{1(-1)}(\theta)\Phi_{(-1)}(\phi)$$

$$Y_{1(-1)}(\theta, \phi) = \left[(-1)^{(-1+|-1|)/2}\sqrt{\frac{2+1}{2}\frac{(1-|-1|)!}{(1+|-1|)!}}P_1^{|-1|}(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i(-1)\phi}\right]$$

$$Y_{1(-1)}(\theta, \phi) = \left[(-1)^0\sqrt{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}P_1^1(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-i\phi}\right]$$

$$Y_{1(-1)}(\theta, \phi) = \left[\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-i\phi}\right]$$ => digunakan untuk validasi

$$Y_{1(-1)}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{-i\phi}$$

Untuk $Y_{10}(\theta, \phi)$

$$Y_{10}(\theta, \phi) = \Theta_{10}(\theta)\Phi_0(\phi)$$

$$Y_{10}(\theta, \phi) = \left[(-1)^{(0+|0|)/2}\sqrt{\frac{2+1}{2}\frac{(1-|0|)!}{(1+|0|)!}}P_1^0(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^0\right]$$

$$Y_{10}(\theta, \phi) = \left[(-1)^0\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$

$$Y_{10}(\theta, \phi) = \left[\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$ => digunakan untuk validasi

$$Y_{10}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

Untuk $Y_{11}(\theta, \phi)$

$$Y_{11}(\theta, \phi) = \Theta_{11}(\theta)\Phi_1(\phi)$$

$$Y_1(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(1+|1|)/2}\sqrt{\frac{2+1}{2}\frac{(1-|1|)!}{(1+|1|)!}}P_1^1(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i(1)\phi}\right]$$

$$Y_{11}(\theta,\phi) = \left[(-1)^1\sqrt{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}\sin\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$

$$Y_1(\theta,\phi) = \left[-\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$ => digunakan untuk validasi

$$Y_{11}(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\ \sin\theta\ e^{i\phi}$$

Untuk $Y_{2(-2)}(\theta,\phi)$

$$Y_{2(-2)}(\theta,\phi) = \Theta_{2(-2)}(\theta)\Phi_{(-2)}(\phi)$$

$$Y_{2(-2)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(-2+|-2|)/2}\sqrt{\frac{4+1}{2}\frac{(2-|-2|)!}{(2+|-2|)!}}P_2^{|-2|}(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i(-2)\phi}\right]$$

$$Y_{2(-2)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^2\sqrt{\frac{5}{2}\frac{1}{(24)}}P_2^2(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-2i\phi}\right]$$

$$Y_{2(-2)}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{5}{48}}(3)sin^2\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-2i\phi}\right]$$

$$Y_{2(-2)}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{45}{48}}sin^2\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-2i\phi}\right]$$

$$Y_{2(-2)}(\theta,\phi) = \left[\frac{\sqrt{15}}{4}sin^2\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-2i\phi}\right]$$ => digunakan untuk validasi

$$Y_{2(-2)}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\ sin^2\theta\ e^{-2i\phi}$$

Untuk $Y_{2(-1)}(\theta,\phi)$

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \Theta_{2(-1)}(\theta)\Phi_{(-1)}(\phi)$$

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(-1+|-1|)/2}\sqrt{\frac{4+1}{2}\frac{(2-|-1|)!}{(2+|-1|)!}}P_2^{|-1|}(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i(-1)\phi}\right]$$

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^0\sqrt{\frac{5}{2}\frac{1}{(6)}}P_2^1(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-i\phi}\right]$$

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{5}{12}}\ (3)\sin\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-i\phi}\right]$$

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{45}{12}}\sin\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-i\phi}\right]$$

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{15}{4}}\sin\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-i\phi}\right]$$ => digunakan untuk validasi

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\ \sin\theta\cos\theta\ \ e^{-i\phi}$$

Untuk $Y_{20}(\theta,\phi)$

$$Y_{20}(\theta,\phi) = \Theta_{20}(\theta)\Phi_0(\phi)$$

$$Y_{20}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(0+|0|)/2}\sqrt{\frac{4+1}{2}\frac{(2-|0|)!}{(2+|0|)!}}P_2^0(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^0\right]$$

$$Y_{20}(\theta,\phi) = \left[(-1)^0\sqrt{\frac{5}{2}}P_2^0(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$

$$Y_{20}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{5}{2}}\ \left(\frac{1}{2}\right)(3\ cos^2\theta - 1)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$

$$Y_{20}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{5}{8}}(3\ cos^2\theta - 1)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$ => digunakan untuk validasi

$$Y_{20}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\ cos^2\theta - 1)$$

Untuk $Y_{21}(\theta,\phi)$

$$Y_{21}(\theta,\phi) = \Theta_{21}(\theta)\Phi_1(\phi)$$

$$Y_{21}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(1+|1|)/2}\sqrt{\frac{4+1}{2}\frac{(2-|1|)!}{(2+|1|)!}}P_2^1(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i(1)\phi}\right]$$

$$Y_{21}(\theta,\phi) = \left[(-1)^1\sqrt{\frac{5}{2}\frac{1}{(6)}}(3)\sin\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$

$$Y_{21}(\theta,\phi) = \left[-\sqrt{\frac{5}{12}}\ (3)\sin\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$

$$Y_{21}(\theta,\phi) = \left[-\sqrt{\frac{45}{12}}\sin\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$

$$Y_{21}(\theta,\phi) = \left[-\sqrt{\frac{15}{4}}\sin\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$ => digunakan untuk validasi

$$Y_{21}(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\ \sin\theta\cos\theta\ \ e^{i\phi}$$

Untuk $Y_{22}(\theta,\phi)$

$$Y_{22}(\theta,\phi) = \Theta_{22}(\theta)\Phi_2(\phi)$$

$$Y_{22}(\theta,\phi)=\left[(-1)^{(2+|2|)/2}\sqrt{\frac{4+1}{2}\frac{(2-|2|)!}{(2+|2|)!}}P_2^2(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i(2)\phi}\right]$$

$$Y_{22}(\theta,\phi)=\left[(-1)^2\sqrt{\frac{5}{2}\frac{1}{(24)}}(3)sin^2\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{2i\phi}\right]$$

$$Y_{22}(\theta,\phi)=\left[\sqrt{\frac{5}{48}}(3)sin^2\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{2i\phi}\right]$$

$$Y_{22}(\theta,\phi)=\left[\sqrt{\frac{45}{48}}sin^2\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{2i\phi}\right]$$

$$Y_{22}(\theta,\phi)=\left[\frac{\sqrt{15}}{4}sin^2\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{2i\phi}\right]$$ => digunakan untuk validasi

$$Y_{22}(\theta,\phi)=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\ sin^2\theta\ e^{2i\phi}$$

C. Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen untuk $n = 1, 2, 3$

$$\psi_{nlm}\,(r,\theta,\phi)=R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

Untuk keadaan ($n = 1, l = 0$ dan $m = 0$)

$$\psi_{100}\,(r,\theta,\phi)=R_{10}(r)Y_{00}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{100}\,(r,\theta,\phi)=\left[\frac{2}{(a_0)^{3/2}}\ e^{-r/a_0}\right]\left[\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\right]$$

$$\psi_{100}\,(r,\theta,\phi)=\frac{1}{\sqrt{\pi}(a_0)^{3/2}}\ e^{-r/a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 2, l = 0$ dan $m = 0$)

$$\psi_{200}\,(r,\theta,\phi)=R_{20}(r)Y_{00}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{200}\,(r,\theta,\phi)=\left[\frac{1}{(2a_0)^{3/2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}\right]\left[\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\right]$$

$$\psi_{200}\,(r,\theta,\phi)=\frac{1}{2\sqrt{\pi}(2a_0)^{3/2}}\left(2-\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 2, l = 1$ dan $m = -1$)

$$\psi_{21(-1)}\,(r,\theta,\phi)=R_{21}(r)Y_{1(-1)}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{21(-1)}\,(r,\theta,\phi)=\left[\frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}\right]\left[\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\ \sin\theta\ e^{-i\phi}\right]$$

$$\psi_{21(-1)}\,(r,\theta,\phi)=\frac{1}{2\sqrt{2\pi}(2a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)\sin\theta\ e^{-i\phi}e^{-r/2a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 2, l = 1$ dan $m = 0$)

$$\psi_{210}(r,\theta,\phi) = R_{21}(r)Y_{10}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{210}(r,\theta,\phi) = \left[\frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}\right]\left[\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\right]$$

$$\psi_{210}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}(2a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)\cos\theta\, e^{-r/2a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 2, l = 1$ dan $m = 1$)

$$\psi_{211}(r,\theta,\phi) = R_{21}(r)Y_{11}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{211}(r,\theta,\phi) = \left[\frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)e^{-r/2a_0}\right]\left[-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\phi}\right]$$

$$\psi_{211}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}(2a_0)^{3/2}}\left(-\frac{r}{a_0}\right)\sin\theta\, e^{i\phi}e^{-r/2a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 3, l = 0$ dan $m = 0$)

$$\psi_{300}(r,\theta,\phi) = R_{30}(r)Y_{00}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{300}(r,\theta,\phi) = \left[\frac{2}{(3a_0)^{3/2}}\left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right)e^{-r/3a_0}\right]\left[\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\right]$$

$$\psi_{300}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}(3a_0)^{\frac{3}{2}}}\left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right)e^{-r/3a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 3, l = 1$ dan $m = -1$)

$$\psi_{31(-1)}(r,\theta,\phi) = R_{31}(r)Y_{1(-1)}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{31(-1)}(r,\theta,\phi) = \left[\frac{8}{9\sqrt{2}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0} + \frac{r^2}{6a_0^2}\right)e^{-r/3a_0}\right]\left[\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{-i\phi}\right]$$

$$\psi_{31(-1)}(r,\theta,\phi) = \frac{2\sqrt{3}}{9\sqrt{\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0} + \frac{r^2}{6a_0^2}\right)\sin\theta\, e^{-i\phi}e^{-r/3a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 3, l = 1$ dan $m = 0$)

$$\psi_{310}(r,\theta,\phi) = R_{31}(r)Y_{10}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{310}(r,\theta,\phi) = \left[\frac{8}{9\sqrt{2}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0} + \frac{r^2}{6a_0^2}\right)e^{-r/3a_0}\right]\left[\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\right]$$

$$\psi_{310}(r,\theta,\phi) = \frac{4\sqrt{3}}{9\sqrt{2\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0} + \frac{r^2}{6a_0^2}\right)e^{-r/3a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 3, l = 1$ dan $m = 1$)

$$\psi_{311}(r,\theta,\phi) = R_{31}(r)Y_{11}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{311}(r,\theta,\phi) = \left[\frac{8}{9\sqrt{2}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0} + \frac{r^2}{6a_0^2}\right)e^{-r/3a_0}\right]\left[-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\phi}\right]$$

$$\psi_{311}\,(r,\theta,\phi) = \frac{2\sqrt{3}}{9\sqrt{\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(-\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{6{a_0}^2}\right)\sin\theta\, e^{i\phi} e^{-r/3a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 3, l = 2$ dan $m = -2$)

$$\psi_{32(-2)}\,(r,\theta,\phi) = R_{32}(r)Y_{2(-2)}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{32(-2)}\,(r,\theta,\phi) = \left[\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{{a_0}^2}\right)e^{-r/3a_0}\right]\left[\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\ sin^2\theta\ e^{-2i\phi}\right]$$

$$\psi_{32(-2)}\,(r,\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{54\sqrt{\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{{a_0}^2}\right)sin^2\theta e^{-2i\phi} e^{-r/3a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 3, l = 2$ dan $m = -1$)

$$\psi_{32(-1)}\,(r,\theta,\phi) = R_{32}(r)Y_{2(-1)}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{32(-1)}\,(r,\theta,\phi) = \left[\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{{a_0}^2}\right)e^{-r/3a_0}\right]\left[\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\ \sin\theta\cos\theta\ \ e^{-i\phi}\right]$$

$$\psi_{32(-1)}\,(r,\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{27\sqrt{\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{{a_0}^2}\right)\sin\theta\cos\theta\, e^{-i\phi} e^{-r/3a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 3, l = 2$ dan $m = 0$)

$$\psi_{320}\,(r,\theta,\phi) = R_{32}(r)Y_{20}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{320}\,(r,\theta,\phi) = \left[\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{{a_0}^2}\right)e^{-r/3a_0}\right]\left[\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\ cos^2\theta - 1)\right]$$

$$\psi_{320}\,(r,\theta,\phi) = \frac{1}{27\sqrt{2\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{{a_0}^2}\right)(3cos^2\theta - 1)\ e^{-r/3a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 3, l = 2$ dan $m = 1$)

$$\psi_{321}\,(r,\theta,\phi) = R_{32}(r)Y_{21}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{321}\,(r,\theta,\phi) = \left[\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{{a_0}^2}\right)e^{-r/3a_0}\right]\left[-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\ \sin\theta\cos\theta\ \ e^{i\phi}\right]$$

$$\psi_{321}\,(r,\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{27\sqrt{\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(-\frac{r^2}{{a_0}^2}\right)\sin\theta\cos\theta\, e^{i\phi} e^{-r/3a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 3, l = 2$ dan $m = 2$)

$$\psi_{322}\,(r,\theta,\phi) = R_{32}(r)Y_{22}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{322}\,(r,\theta,\phi) = \left[\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{{a_0}^2}\right)e^{-r/3a_0}\right]\left[\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\ sin^2\theta\ e^{2i\phi}\right]$$

$$\psi_{322}\,(r,\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{54\sqrt{\pi}(3a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^2}{{a_0}^2}\right)sin^2\theta e^{2i\phi} e^{-r/3a_0}$$

Lampiran 6. Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen $\boldsymbol{n = 4}$

A. Fungsi Gelombang Radial Atom Hidrogen untuk $\boldsymbol{n = 4}$

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

Sama seperti sebelumnya, akan tetapi sekarang yang akan dicari adalah untuk $(n) = 4$. Sehingga fungsi gelombang radial yang akan memenuhi adalah $R_{40}(r), R_{41}(r), R_{42}(r), R_{43}(r)$.

Polinomial Laguerre

$$L_k(r) = e^r \frac{d^k}{dr^k}(r^k e^{-r})$$

Untuk $L_4(r)$

$$L_4(r) = e^r \frac{d^4}{dr^4}(r^4 e^{-r})$$

$$L_4(r) = e^r[(e^{-r})(r^4) - 16(e^{-r})(r^3) + 72(e^{-r})(r^2) - 96(e^{-r})(r) + 24(e^{-r})]$$

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

Untuk $L_5(r)$

$$L_5(r) = e^r \frac{d^5}{dr^5}(r^5 e^{-r})$$

$$L_5(r) = e^r[-(e^{-r})(r^5) + 25(e^{-r})(r^4) - 200(e^{-r})(r^3) + 600(e^{-r})(r^2) - 600(e^{-r})(r) + 120(e^{-r})]$$

$$L_5(r) = -(r^5) + 25(r^4) - 200(r^3) + 600(r^2) - 600(r) + 120$$

Untuk $L_6(r)$

$$L_6(r) = e^r \frac{d^6}{dr^6}(r^6 e^{-r})$$

$$L_6(r) = e^r[(e^{-r})(r^6) - 36(e^{-r})(r^5) + 450(e^{-r})(r^4) - 2400(e^{-r})(r^3) + 5400(e^{-r})(r^2) - 4320(e^{-r})(r) + 720(e^{-r})]$$

$L_6(r) = (r^6) - 36(r^5) + 450(r^4) - 2400(r^3) + 5400(r^2) - 4320(r) + 720$

Untuk $L_7(r)$

$L_7(r) = e^r \frac{d^7}{dr^7}(r^7 e^{-r})$

$L_7(r) = e^r[-(e^{-r})(r^7) + 49(e^{-r})(r^6) - 882(e^{-r})(r^5) + 7350(e^{-r})(r^4) - 29400(e^{-r})(r^3) + 52920(e^{-r})(r^2) - 35280(e^{-r})(r) + 5040(e^{-r})]$

$L_7(r) = -(r^7) + 49(r^6) - 882(r^5) + 7350(r^4) - 29400(r^3) + 52920(r^2) - 35280(r) + 5040$

Polinomial Laguerre Terasosiasi

$$L_k^Z(r) = \frac{d^Z}{dr^Z} L_k(r)$$

Untuk $L_4^1(r)$

$L_4^1(r) = \frac{d}{dr} L_4(r)$

$L_4^1(r) = \frac{d}{dr}[(r^4) - 16(r^3) + 72(r^2) - 96(r) + 24]$

$L_4^1(r) = 4(r^3) - 48(r^2) + 144(r) - 96$

Untuk $L_5^3(r)$

$L_5^3(r) = \frac{d^3}{dr^3} L_5(r)$

$L_5^3(r) = \frac{d^3}{dr^3}[-(r^5) + 25(r^4) - 200(r^3) + 600(r^2) - 600(r) + 120]$

$L_5^3(r) = -60(r^2) + 600(r) - 1200$

Untuk $L_6^5(r)$

$L_6^5(r) = \frac{d^5}{dr^5} L_6(r)$

$$L_6^5(r) = \frac{d^5}{dr^5}[(r^6) - 36(r^5) + 450(r^4) - 2400(r^3) + 5400(r^2) - 4320(r) + 720]$$

$$L_6^5(r) = 720(r) - 4320$$

Untuk $L_7^7(r)$

$$L_7^7(r) = \frac{d^7}{dr^7} L_7(r)$$

$$L_7^7(r) = \frac{d^7}{dr^7}[-(r^7) + 49(r^6) - 882(r^5) + 7350(r^4) - 29400(r^3) + 52920(r^2) - 35280(r) + 5040]$$

$$L_7^7(r) = -5040$$

Sedangkan yang digunakan untuk menentukan fungsi gelombang radial atom hidrogen adalah polinomial Laguerre dalam bentuk $L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$.

Tabel 5.a Polinomial Laguerre Terasosiasi untuk Fungsi Gelombang Radial $\boldsymbol{n = 4}$

$L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$
$L_4^1\left(\frac{2r}{na_0}\right) = 4\left(\frac{2r}{na_0}\right)^3 - 48\left(\frac{2r}{na_0}\right)^2 + 144\left(\frac{2r}{na_0}\right) - 96$
$L_5^3\left(\frac{2r}{na_0}\right) = -60\left(\frac{2r}{na_0}\right)^2 + 600\left(\frac{2r}{na_0}\right) - 1200$
$L_6^5\left(\frac{2r}{na_0}\right) = 720\left(\frac{2r}{na_0}\right) - 4320$
$L_7^7\left(\frac{2r}{na_0}\right) = -5040$

❖ **Perhitungan Fungsi Gelombang Radial Atom Hidrogen untuk $\boldsymbol{n = 4}$**

Untuk keadaan ($n = 4$ dan $l = 0$)

$$R_{40}(r) = -\left(\frac{2}{4a_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(4-0-1)!}{8[(4+0)!]^3}} \left(\frac{2r}{4a_0}\right)^0 e^{-r/4a_0} L_4^1\left(\frac{2r}{4a_0}\right)$$

$$R_{40}(r) = -\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(3)!}{8[4!]^3}} e^{-r/4a_0} \left[4\left(\frac{r}{2a_0}\right)^3 - 48\left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 + 144\left(\frac{r}{2a_0}\right) - 96\right]$$

$$R_{40}(r) = \frac{1}{4(a_0)^{3/2}} \left[1 - \left(\frac{3r}{4a_0}\right) + \left(\frac{r^2}{8a_0{}^2}\right) - \left(\frac{r^3}{192a_0{}^3}\right)\right] e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 4$ dan $l = 1$)

$$R_{41}(r) = -\left(\frac{2}{4a_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{(4-1-1)!}{8[(4+1)!]^3}}\left(\frac{2r}{4a_0}\right)^1 e^{-r/4a_0}\, L_5^3\left(\frac{2r}{4a_0}\right)$$

$$R_{41}(r) = -\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{2}{8[5!]^3}}\left(\frac{r}{2a_0}\right)^1 e^{-r/4a_0}\left[-60\left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 + 600\left(\frac{r}{2a_0}\right) - 1200\right]$$

$$R_{41}(r) = \frac{5}{16\sqrt{15}(a_0)^{3/2}}\left[\left(\frac{r}{a_0}\right) - \left(\frac{r^2}{4{a_0}^2}\right) + \left(\frac{r^3}{80{a_0}^3}\right)\right] e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 4$ dan $l = 2$)

$$R_{42}(r) = -\left(\frac{2}{4a_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{(4-2-1)!}{8[(4+2)!]^3}}\left(\frac{2r}{4a_0}\right)^2 e^{-r/4a_0}\, L_6^5\left(\frac{2r}{4a_0}\right)$$

$$R_{42}(r) = -\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{1}{8[6!]^3}}\left(\frac{r}{2a_0}\right)^2 e^{-r/4a_0}\left[720\left(\frac{r}{2a_0}\right) - 4320\right]$$

$$R_{42}(r) = \frac{1}{192\sqrt{5}(a_0)^{3/2}}\left[\left(\frac{3r^2}{{a_0}^2}\right) - \left(\frac{r^3}{4{a_0}^3}\right)\right] e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 4$ dan $l = 3$)

$$R_{43}(r) = -\left(\frac{2}{4a_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{(4-3-1)!}{8[(4+3)!]^3}}\left(\frac{2r}{4a_0}\right)^3 e^{-r/4a_0}\, L_7^7\left(\frac{2r}{4a_0}\right)$$

$$R_{43}(r) = -\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\sqrt{\frac{1}{8[7!]^3}}\left(\frac{r}{2a_0}\right)^3 e^{-r/4a_0}\,[-5040]$$

$$R_{43}(r) = \frac{1}{768\sqrt{35}(a_0)^{3/2}}\left(\frac{r^3}{{a_0}^3}\right) e^{-r/4a_0}$$

B. Fungsi Gelombang Angular Atom Hidrogen untuk $n = 4$

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\phi)$$

Fungsi gelombang angular terdiri dari gabungan fungsi gelombang polar dan fungsi gelombang azimut yang masing-masing diberikan oleh

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^{(m+|m|)/2}\sqrt{\frac{2l+1}{2}\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}}P_l^m(\cos\theta) \quad \text{dan} \quad \Phi_m(\phi) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{im\phi}$$

Fungsi gelombang angular atom hidrogen mengandung bilangan kuantum orbital (n) dan bilangan kuantum azimut (m). Dimana untuk bilangan kuantum orbital (l) yang diizinkan adalah $l = 0,1,2,3, \ldots (n-1)$, sedangkan untuk bilangan kuantum azimut (l) yang diizinkan adalah $m = -l, \ldots, 0, \ldots, +l$. Mengingat yang akan dicari adalah untuk (n) 4, maka fungsi gelombang angular yang akan memenuhi adalah $Y_{00}(\theta,\phi); Y_{1(-1)}(\theta,\phi); Y_{10}(\theta,\phi); Y_{11}(\theta,\phi);$

$Y_{2(-2)}(\theta,\phi); Y_{2(-1)}(\theta,\phi); Y_{20}(\theta,\phi); Y_{21}(\theta,\phi); Y_{22}(\theta,\phi); Y_{3(-3)}(\theta,\phi); Y_{3(-2)}(\theta,\phi);$ $Y_{3(-1)}(\theta,\phi); Y_{30}(\theta,\phi); Y_{31}(\theta,\phi); Y_{32}(\theta,\phi); Y_{33}(\theta,\phi)$.

Fungsi gelombang angular atom hidrogen juga menggunakan polinomial Legendre terasosiasi yang didalamnya mengandung polinomial Legendre. Berikut ini merupakan perhitungan beberapa polinomial Legendre dan polinomial Legendre terasosiasi yang dapat dijabarkan sebagai berikut

Polinomial Legendre

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

Untuk $P_0(\cos\theta)$

$$P_0(\cos\theta) = \frac{1}{2^0(0!)}\frac{d^0}{d(\cos\theta)^0}(cos^2\theta - 1)^0$$

$$P_0(\cos\theta) = 1$$

Untuk $P_1(\cos\theta)$

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

$$P_l(\cos\theta) = \frac{1}{2}(2\cos\theta)$$

$$P_1(\cos\theta) = \cos\theta$$

Untuk $P_2(\cos\theta)$

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

$$P_2(\cos\theta) = \frac{1}{8}\frac{d}{d(\cos\theta)}\left[\frac{d}{d(\cos\theta)}(cos^2\theta - 1)^2\right]$$

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

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

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

Untuk $P_3(\cos\theta)$

$$P_3(\cos\theta) = \frac{1}{2^3(3!)}\frac{d^3}{d(cos^3\theta)}(cos^2\theta - 1)^3$$

$$P_3(\cos\theta) = \frac{1}{8(6)}\frac{d^2}{d(cos^2\theta)}\left[\frac{d}{d(\cos\theta)}(cos^2\theta - 1)^3\right]$$

$$P_3(\cos\theta) = \frac{1}{48}\frac{d^2}{d(cos^2\theta)}[3(cos^2\theta - 1)^2(2\cos\theta)]$$

$$P_3(\cos\theta) = \frac{1}{48}\frac{d}{d(\cos\theta)}\left[\frac{d}{d(\cos\theta)}6\cos\theta(cos^2\theta - 1)^2\right]$$

$$P_3(\cos\theta) = \frac{1}{8}\frac{d}{d(\cos\theta)}\left[\cos\theta\left(2(cos^2\theta - 1)(2\cos\theta)\right) + (cos^2\theta - 1)^2\right]$$

$$P_3(\cos\theta) = \frac{1}{8}\frac{d}{d(\cos\theta)}[4(cos^4\theta - cos^2\theta) + (cos^2\theta - 1)^2]$$

$$P_3(\cos\theta) = \frac{1}{8}\left[4(4cos^3\theta - 2\cos\theta) + \left(2(cos^2\theta - 1)(2\cos\theta)\right)\right]$$

$$P_3(\cos\theta) = \frac{1}{2}[(4cos^3\theta - 2\cos\theta) + (cos^3\theta - \cos\theta)]$$

$$P_3(\cos\theta) = \frac{1}{2}(5\,cos^3\theta - 3\cos\theta)$$

Polinomial Legendre Terasosiasi

$$P_l^{|m|}(\cos\theta) = (1 - cos^2\theta)^{|m|/2}\frac{d^{|m|}}{d(\cos\theta)^{|m|}}P_l(\cos\theta)$$

Dimana,

$$P_l^{|m|}(\cos\theta) = P_l^{|-m|}(\cos\theta)$$

Untuk $P_0^0(\cos\theta)$

$$P_0^0(\cos\theta) = (1 - cos^2\theta)^{0/2}\frac{d^0}{d(\cos\theta)^0}P_0(v)$$

$$P_0^0(\cos\theta) = 1$$

Untuk $P_1^0(\cos\theta)$

$$P_1^0(\cos\theta) = (1 - cos^2\theta)^{0/2}\frac{d^0}{d(\cos\theta)^0}P_1(\cos\theta)$$

$$P_1^0(\cos\theta) = \cos\theta$$

Untuk $P_2^0(\cos\theta)$

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

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

Untuk $P_3^0(\cos\theta)$

$$P_3^0(\cos\theta) = (1 - cos^2\theta)^{0/3}\frac{d^0}{d(\cos\theta)^0}P_3(\cos\theta)$$

$$P_3^0(\cos\theta) = \frac{1}{2}(5\,cos^3\theta - 3\cos\theta)$$

Untuk $P_1^1(\cos\theta)$

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

$$P_1^1(\cos\theta) = (sin^2\theta)^{1/2}\frac{d^1}{d(\cos\theta)^1}(\cos\theta)$$

$$P_1^1(\cos\theta) = \sin\theta$$

Untuk $P_2^1(\cos\theta)$

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

$$P_2^1(\cos\theta) = (sin^2\theta)^{1/2}\frac{d^1}{d(\cos\theta)^1}\left[\frac{1}{2}(3\,cos^2\theta-1)\right]$$

$$P_2^1(\cos\theta) = \sin\theta\left[\frac{1}{2}(6\cos\theta)\right]$$

$$P_2^1(\cos\theta) = 3\sin\theta\cos\theta$$

Untuk $P_3^1(\cos\theta)$

$$P_3^1(\cos\theta) = (1-cos^2\theta)^{1/2}\frac{d^1}{d(\cos\theta)^1}P_3(\cos\theta)$$

$$P_3^1(\cos\theta) = (sin^2\theta)^{1/2}\frac{d^1}{d(\cos\theta)^1}\left[\frac{1}{2}(5\,cos^3\theta-3\cos\theta)\right]$$

$$P_3^1(\cos\theta) = \sin\theta\left[\frac{1}{2}(15\,cos^2\theta-3)\right]$$

$$P_3^1(\cos\theta) = \frac{3}{2}\sin\theta\,(5\,cos^2\theta-1)$$

Untuk $P_2^2(\cos\theta)$

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

$$P_2^2(\cos\theta) = sin^2\theta\frac{d}{d(\cos\theta)}\left[\frac{d}{d(\cos\theta)}\left(\frac{1}{2}(3\,cos^2\theta-1)\right)\right]$$

$$P_2^2(\cos\theta) = sin^2\theta\frac{d}{d(\cos\theta)}[3\cos\theta]$$

$$P_2^2(\cos\theta) = 3\,sin^2\theta$$

Untuk $P_3^2(\cos\theta)$

$$P_3^2(\cos\theta) = (1-cos^2\theta)^{2/2}\frac{d^2}{d(\cos\theta)^2}P_3(\cos\theta)$$

$$P_3^2(\cos\theta) = sin^2\theta\frac{d}{d(\cos\theta)}\left[\frac{d}{d(\cos\theta)}\left(\frac{1}{2}(5\,cos^3\theta-3\cos\theta)\right)\right]$$

$$P_3^2(\cos\theta) = \frac{1}{2}sin^2\theta\frac{d}{d(\cos\theta)}[15\,cos^2\theta-3]$$

$$P_3^2(\cos\theta) = \frac{1}{2}sin^2\theta[30\cos\theta]$$

$$P_3^2(\cos\theta) = 15\, sin^2\theta \cos\theta$$

Untuk $P_3^3(\cos\theta)$

$$P_3^3(\cos\theta) = (1 - cos^2\theta)^{3/2} \frac{d^3}{d(\cos\theta)^3} P_3(\cos\theta)$$

$$P_3^3(\cos\theta) = (sin^2\theta)^{3/2} \frac{d^2}{d(\cos\theta)^2}\left[\frac{d}{d(\cos\theta)}\left(\frac{1}{2}(5\, cos^3\theta - 3\cos\theta)\right)\right]$$

$$P_3^3(\cos\theta) = \frac{1}{2} sin^3\theta \frac{d^2}{d(\cos\theta)^2}[15\, cos^2\theta - 3]$$

$$P_3^3(\cos\theta) = \frac{3}{2} sin^3\theta \frac{d}{d(\cos\theta)}\left[\frac{d}{d(\cos\theta)}(5\, cos^2\theta - 1)\right]$$

$$P_3^3(\cos\theta) = \frac{3}{2} sin^3\theta \frac{d}{d(\cos\theta)}[10\cos\theta]$$

$$P_3^3(\cos\theta) = 15\, sin^3\theta$$

❖ **Perhitungan Fungsi Gelombang Angular Atom Hidrogen untuk $n = 4$**

Untuk $Y_{00}(\theta,\phi)$

$$Y_{00}(\theta,\phi) = \Theta_{00}(\theta)\Phi_0(\phi)$$

$$Y_{00}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(0+|0|)/2}\sqrt{\frac{0+1}{2}\frac{(0-|0|)!}{(0+|0|)!}} P_0^0(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^0\right]$$

$$Y_{00}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{1}{2}}\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$ => digunakan untuk validasi

$$Y_{00}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$$

$$Y_{00}(\theta,\phi) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$

Untuk $Y_{1(-1)}(\theta,\phi)$

$$Y_{1(-1)}(\theta,\phi) = \Theta_{1(-1)}(\theta)\Phi_{(-1)}(\phi)$$

$$Y_{1(-1)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(-1+|-1|)/2}\sqrt{\frac{2+1}{2}\frac{(1-|-1|)!}{(1+|-1|)!}} P_1^{|-1|}(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{i(-1)\phi}\right]$$

$$Y_{1(-1)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^0\sqrt{\frac{3}{2}\frac{1}{2}} P_1^1(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-i\phi}\right]$$

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

$$Y_{1(-1)}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{-i\phi}$$

$$Y_{1(-1)}(\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2\pi}}\,\sin\theta\, e^{-i\phi}$$

Untuk $Y_{10}(\theta,\phi)$

$$Y_{10}(\theta,\phi) = \Theta_{10}(\theta)\Phi_0(\phi)$$

$$Y_{10}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(0+|0|)/2}\sqrt{\frac{2+1}{2}\frac{(1-|0|)!}{(1+|0|)!}}P_1^0(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^0\right]$$

$$Y_{10}(\theta,\phi) = \left[(-1)^0\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$

$$Y_{10}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{3}{2}}\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$

$$Y_{10}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta$$

$$Y_{10}(\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\cos\theta$$

Untuk $Y_{11}(\theta,\phi)$

$$Y_{11}(\theta,\phi) = \Theta_{11}(\theta)\Phi_1(\phi)$$

$$Y_1(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(1+|1|)/2}\sqrt{\frac{2+1}{2}\frac{(1-|1|)!}{(1+|1|)!}}P_1^1(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i(1)\phi}\right]$$

$$Y_{11}(\theta,\phi) = \left[(-1)^1\sqrt{\frac{3}{2}\frac{1}{2}}\sin\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$

$$Y_1(\theta,\phi) = \left[-\frac{\sqrt{3}}{2}\sin\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$

$$Y_{11}(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\sin\theta\, e^{i\phi}$$

$$Y_{11}(\theta,\phi) = -\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2\pi}}\,\sin\theta\, e^{i\phi}$$

Untuk $Y_{2(-2)}(\theta,\phi)$

$$Y_{2(-2)}(\theta,\phi) = \Theta_{2(-2)}(\theta)\Phi_{(-2)}(\phi)$$

$$Y_{2(-2)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(-2+|-2|)/2}\sqrt{\frac{4+1}{2}\frac{(2-|-2|)!}{(2+|-2|)!}}P_2^{|-2|}(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i(-2)\phi}\right]$$

$$Y_{2(-2)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^2\sqrt{\frac{5}{2}\frac{1}{(24)}}P_2^2(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-2i\phi}\right]$$

$$Y_{2(-2)}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{5}{48}}(3)sin^2\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-2i\phi}\right]$$

$$Y_{2(-2)}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{45}{48}} sin^2\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-2i\phi}\right]$$

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

$$Y_{2(-2)}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\ sin^2\theta\ e^{-2i\phi}$$

$$Y_{2(-2)}(\theta,\phi) = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2\pi}}\ sin^2\theta\ e^{-2i\phi}$$

Untuk $Y_{2(-1)}(\theta,\phi)$

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \Theta_{2(-1)}(\theta)\Phi_{(-1)}(\phi)$$

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(-1+|-1|)/2}\sqrt{\frac{4+1}{2}\frac{(2-|-1|)!}{(2+|-1|)!}} P_2^{|-1|}(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{i(-1)\phi}\right]$$

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^0\sqrt{\frac{5}{2}\frac{1}{(6)}} P_2^1(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-i\phi}\right]$$

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{5}{12}}\ (3)\sin\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-i\phi}\right]$$

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{45}{12}}\sin\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-i\phi}\right]$$

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

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \left[\frac{\sqrt{15}}{2}\sin\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-i\phi}\right]$$

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\ \sin\theta\cos\theta\ \ e^{-i\phi}$$

$$Y_{2(-1)}(\theta,\phi) = \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}}\ \sin\theta\cos\theta\ \ e^{-i\phi}$$

Untuk $Y_{20}(\theta,\phi)$

$$Y_{20}(\theta,\phi) = \Theta_{20}(\theta)\Phi_0(\phi)$$

$$Y_{20}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(0+|0|)/2}\sqrt{\frac{4+1}{2}\frac{(2-|0|)!}{(2+|0|)!}} P_2^0(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^0\right]$$

$$Y_{20}(\theta,\phi) = \left[(-1)^0\sqrt{\frac{5}{2}} P_2^0(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$

$$Y_{20}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{5}{2}}\ \left(\frac{1}{2}\right)(3\ cos^2\theta - 1)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$

$$Y_{20}(\theta,\phi) = \left[\frac{\sqrt{5}}{2\sqrt{2}}(3\ cos^2\theta - 1)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$

$$Y_{20}(\theta,\phi) = \frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{\pi}}(3\ cos^2\theta - 1)$$

Untuk $Y_{21}(\theta,\phi)$

$$Y_{21}(\theta,\phi) = \Theta_{21}(\theta)\Phi_1(\phi)$$

$$Y_{21}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(1+|1|)/2}\sqrt{\frac{4+1}{2}\frac{(2-|1|)!}{(2+|1|)!}}P_2^1(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i(1)\phi}\right]$$

$$Y_{21}(\theta,\phi) = \left[(-1)^1\sqrt{\frac{5}{2}\frac{1}{(6)}}(3)\sin\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$

$$Y_{21}(\theta,\phi) = \left[-\sqrt{\frac{5}{12}}\ (3)\sin\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$

$$Y_{21}(\theta,\phi) = \left[-\sqrt{\frac{45}{12}}\sin\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$

$$Y_{21}(\theta,\phi) = \left[-\frac{\sqrt{15}}{2}\sin\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$

$$Y_{21}(\theta,\phi) = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\ \sin\theta\cos\theta\ \ e^{i\phi}$$

$$Y_{21}(\theta,\phi) = -\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}}\ \sin\theta\cos\theta\ \ e^{i\phi}$$

Untuk $Y_{22}(\theta,\phi)$

$$Y_{22}(\theta,\phi) = \Theta_{22}(\theta)\Phi_2(\phi)$$

$$Y_{22}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(2+|2|)/2}\sqrt{\frac{4+1}{2}\frac{(2-|2|)!}{(2+|2|)!}}P_2^2(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i(2)\phi}\right]$$

$$Y_{22}(\theta,\phi) = \left[(-1)^2\sqrt{\frac{5}{2}\frac{1}{(24)}}(3)sin^2\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{2i\phi}\right]$$

$$Y_{22}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{5}{48}}(3)sin^2\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{2i\phi}\right]$$

$$Y_{22}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{45}{48}}sin^2\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{2i\phi}\right]$$

$$Y_{22}(\theta,\phi) = \left[\frac{\sqrt{15}}{4} sin^2\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{2i\phi}\right]$$

$$Y_{22}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\ sin^2\theta\ e^{2i\phi}$$

$$Y_{22}(\theta,\phi) = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2\pi}}\ sin^2\theta\ e^{2i\phi}$$

Untuk $Y_{3(-3)}(\theta,\phi)$

$$Y_{3(-3)}(\theta,\phi) = \Theta_{3(-3)}(\theta)\Phi_{(-3)}(\phi)$$

$$Y_{3(-3)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(-3+|-3|)/2}\sqrt{\frac{6+1}{2}\frac{(3-|-3|)!}{(3+|-3|)!}} P_3^{|-3|}(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{i(-3)\phi}\right]$$

$$Y_{3(-3)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^0\sqrt{\frac{7}{2}\frac{1}{(720)}} P_3^3(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-3i\phi}\right]$$

$$Y_{3(-3)}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{7}{1440}}(15)\ sin^3\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-3i\phi}\right]$$

$$Y_{3(-3)}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{35}{32}} sin^3\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-3i\phi}\right]$$

$$Y_{3(-3)}(\theta,\phi) = \frac{\sqrt{35}}{8\sqrt{\pi}}\ sin^3\theta\ e^{-3i\phi}$$

Untuk $Y_{3(-2)}(\theta,\phi)$

$$Y_{3(-2)}(\theta,\phi) = \Theta_{3(-2)}(\theta)\Phi_{(-2)}(\phi)$$

$$Y_{3(-2)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(-2+|-2|)/2}\sqrt{\frac{6+1}{2}\frac{(3-|-2|)!}{(3+|-2|)!}} P_3^{|-2|}(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{i(-2)\phi}\right]$$

$$Y_{3(-2)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^0\sqrt{\frac{7}{2}\frac{1}{(120)}} P_3^2(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-2i\phi}\right]$$

$$Y_{3(-2)}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{7}{240}}(15)\ sin^2\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-2i\phi}\right]$$

$$Y_{3(-2)}(\theta,\phi) = \left[\frac{\sqrt{105}}{4} sin^2\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-2i\phi}\right]$$

$$Y_{3(-2)}(\theta,\phi) = \frac{\sqrt{105}}{4\sqrt{2\pi}}\ sin^2\theta\cos\theta\ e^{-2i\phi}$$

Untuk $Y_{3(-1)}(\theta,\phi)$

$$Y_{3(-1)}(\theta,\phi) = \Theta_{3(-1)}(\theta)\Phi_{(-1)}(\phi)$$

$$Y_{3(-1)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(-1+|-1|)/2}\sqrt{\frac{6+1}{2}\frac{(3-|-1|)!}{(3+|-1|)!}}P_3^{|-1|}(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i(-1)\phi}\right]$$

$$Y_{3(-1)}(\theta,\phi) = \left[(-1)^0\sqrt{\frac{7}{2}\frac{2}{(24)}}P_3^1(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-i\phi}\right]$$

$$Y_{3(-1)}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{7}{24}}\left(\frac{3}{2}\right)\sin\theta\,(5\,cos^2\theta-1)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-i\phi}\right]$$

$$Y_{3(-1)}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{21}{32}}\sin\theta\,(5cos^2\theta-1)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{-i\phi}\right]$$

$$Y_{3(-1)}(\theta,\phi) = \frac{\sqrt{21}}{8\sqrt{\pi}}\sin\theta\,(5\,cos^2\theta-1)\,e^{-i\phi}$$

Untuk $Y_{30}(\theta,\phi)$

$$Y_{30}(\theta,\phi) = \Theta_{30}(\theta)\Phi_0(\phi)$$

$$Y_{30}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(0+|0|)/2}\sqrt{\frac{6+1}{2}\frac{(3-|0|)!}{(3+|0|)!}}P_3^0(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^0\right]$$

$$Y_{30}(\theta,\phi) = \left[(-1)^0\sqrt{\frac{7}{2}}\left(\frac{1}{2}\right)(5\,cos^3\theta-3\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$

$$Y_{30}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{7}{8}}(5cos^3\theta-3\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}\right]$$

$$Y_{30}(\theta,\phi) = \frac{\sqrt{7}}{4\sqrt{\pi}}(5\,cos^3\theta-3\cos\theta)$$

Untuk $Y_{31}(\theta,\phi)$

$$Y_{31}(\theta,\phi) = \Theta_{31}(\theta)\Phi_1(\phi)$$

$$Y_{31}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(1+|1|)/2}\sqrt{\frac{6+1}{2}\frac{(3-|1|)!}{(3+|1|)!}}P_3^1(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i(1)\phi}\right]$$

$$Y_{31}(\theta,\phi) = \left[(-1)^1\sqrt{\frac{7}{2}\frac{2}{(24)}}\left(\frac{3}{2}\right)\sin\theta\,(5\,cos^2\theta-1)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$

$$Y_{31}(\theta,\phi) = \left[-\sqrt{\frac{7}{24}}\left(\frac{3}{2}\right)\sin\theta\,(5\,cos^2\theta-1)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$

$$Y_{31}(\theta,\phi) = \left[-\sqrt{\frac{21}{32}}\sin\theta\,(5cos^2\theta-1)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i\phi}\right]$$

$$Y_{31}(\theta,\phi) = -\frac{\sqrt{21}}{8\sqrt{\pi}}\sin\theta\,(5\,cos^2\theta-1)\,e^{i\phi}$$

Untuk $Y_{32}(\theta,\phi)$

$$Y_{32}(\theta,\phi) = \Theta_{32}(\theta)\Phi_2(\phi)$$

$$Y_{32}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(2+|2|)/2}\sqrt{\frac{6+1}{2}\frac{(3-|2|)!}{(3+|2|)!}}P_3^2(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i(2)\phi}\right]$$

$$Y_{32}(\theta,\phi) = \left[(-1)^2\sqrt{\frac{7}{2}\frac{1}{(120)}}(15)\ sin^2\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{2i\phi}\right]$$

$$Y_{32}(\theta,\phi) = \left[\sqrt{\frac{7}{240}}(15)\ sin^2\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{2i\phi}\right]$$

$$Y_{32}(\theta,\phi) = \left[\frac{\sqrt{105}}{4}sin^2\theta\cos\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{2i\phi}\right]$$

$$Y_{32}(\theta,\phi) = \frac{\sqrt{105}}{4\sqrt{2\pi}}\ sin^2\theta\cos\theta\ e^{2i\phi}$$

Untuk $Y_{33}(\theta,\phi)$

$$Y_{33}(\theta,\phi) = \Theta_{33}(\theta)\Phi_3(\phi)$$

$$Y_{33}(\theta,\phi) = \left[(-1)^{(3+|3|)/2}\sqrt{\frac{6+1}{2}\frac{(3-|3|)!}{(3+|3|)!}}P_3^3(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{i(3)\phi}\right]$$

$$Y_{33}(\theta,\phi) = \left[(-1)^3\sqrt{\frac{7}{2}\frac{1}{(720)}}P_3^3(\cos\theta)\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{3i\phi}\right]$$

$$Y_{33}(\theta,\phi) = \left[-\sqrt{\frac{7}{1440}}(15)\ sin^3\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{3i\phi}\right]$$

$$Y_{33}(\theta,\phi) = \left[-\sqrt{\frac{35}{32}}sin^3\theta\right]\left[\sqrt{\frac{1}{2\pi}}e^{3i\phi}\right]$$

$$Y_{33}(\theta,\phi) = -\frac{\sqrt{35}}{8\sqrt{\pi}}\ sin^3\theta\ e^{3i\phi}$$

C. **Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen untuk $n = 4$**

$$\psi_{nlm}\,(r,\theta,\phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

Untuk keadaan ($n = 4, l = 0$ dan $m = 0$)

$$\psi_{400}\,(r,\theta,\phi) = R_{40}(r)Y_{00}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{400}\,(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{1}{4(a_0)^{3/2}}\left[1-\frac{3r}{4a_0}+\frac{r^2}{8{a_0}^2}-\frac{r^3}{192{a_0}^3}\right]\ e^{-r/4a_0}\right\}\left\{\frac{1}{2\sqrt{\pi}}\right\}$$

$$\psi_{400}\,(r,\theta,\phi) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}(a_0)^{3/2}}\left[1-\frac{3r}{4a_0}+\frac{r^2}{8{a_0}^2}-\frac{r^3}{192{a_0}^3}\right]\ e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan ($n = 4, l = 1$ dan $m = -1$)

$$\psi_{41(-1)}\,(r,\theta,\phi) = R_{41}(r)Y_{1(-1)}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{41(-1)}(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{5}{16\sqrt{15}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{4a_0^2} + \frac{r^3}{80a_0^3}\right] e^{-r/4a_0}\right\}\left\{\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2\pi}}\sin\theta\, e^{-i\phi}\right\}$$

$$\psi_{41(-1)}(r,\theta,\phi) = \frac{5}{32\sqrt{10\pi}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{4a_0^2} + \frac{r^3}{80a_0^3}\right]\sin\theta\, e^{-i\phi}\, e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan $(n = 4, l = 1$ dan $m = 0)$

$$\psi_{410}(r,\theta,\phi) = R_{41}(r)Y_{10}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{410}(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{5}{16\sqrt{15}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{4a_0^2} + \frac{r^3}{80a_0^3}\right] e^{-r/4a_0}\right\}\left\{\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\cos\theta\right\}$$

$$\psi_{410}(r,\theta,\phi) = \frac{5}{32\sqrt{5\pi}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{4a_0^2} + \frac{r^3}{80a_0^3}\right]\cos\theta\, e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan $(n = 4, l = 1$ dan $m = 1)$

$$\psi_{411}(r,\theta,\phi) = R_{41}(r)Y_{11}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{411}(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{5}{16\sqrt{15}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{4a_0^2} + \frac{r^3}{80a_0^3}\right] e^{-r/4a_0}\right\}\left\{-\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{2\pi}}\sin\theta\, e^{i\phi}\right\}$$

$$\psi_{411}(r,\theta,\phi) = \frac{5}{32\sqrt{10\pi}(a_0)^{3/2}}\left[-\frac{r}{a_0} + \frac{r^2}{4a_0^2} - \frac{r^3}{80a_0^3}\right]\sin\theta\, e^{i\phi}\, e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan $(n = 4, l = 2$ dan $m = -2)$

$$\psi_{42(-2)}(r,\theta,\phi) = R_{42}(r)Y_{2(-2)}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{42(-2)}(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{1}{192\sqrt{5}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{3r^2}{a_0^2} - \frac{r^3}{4a_0^3}\right] e^{-r/4a_0}\right\}\left\{\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2\pi}}\, sin^2\theta\, e^{-2i\phi}\right\}$$

$$\psi_{42(-2)}(r,\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{768\sqrt{2\pi}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{3r^2}{a_0^2} - \frac{r^3}{4a_0^3}\right] sin^2\theta\, e^{-2i\phi}\, e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan $(n = 4, l = 2$ dan $m = -1)$

$$\psi_{42(-1)}(r,\theta,\phi) = R_{42}(r)Y_{2(-1)}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{42(-1)}(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{1}{192\sqrt{5}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{3r^2}{a_0^2} - \frac{r^3}{4a_0^3}\right] e^{-r/4a_0}\right\}\left\{\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}}\sin\theta\cos\theta\ \ e^{-i\phi}\right\}$$

$$\psi_{42(-1)}(r,\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{384\sqrt{2\pi}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{3r^2}{a_0^2} - \frac{r^3}{4a_0^3}\right]\sin\theta\cos\theta\, e^{-i\phi}e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan $(n = 4, l = 2$ dan $m = 0)$

$$\psi_{420}(r,\theta,\phi) = R_{42}(r)Y_{20}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{420}(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{1}{192\sqrt{5}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{3r^2}{a_0^2} - \frac{r^3}{4a_0^3}\right] e^{-r/4a_0}\right\}\left\{\frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{\pi}}(3\, cos^2\theta - 1)\right\}$$

$$\psi_{420}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{768\sqrt{\pi}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{3r^2}{a_0^2} - \frac{r^3}{4a_0^3}\right](3cos^2\theta - 1)\, e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan $(n = 4, l = 2$ dan $m = 1)$

$$\psi_{421}\,(r,\theta,\phi) = R_{42}(r)Y_{21}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{421}\,(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{1}{192\sqrt{5}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{3r^2}{a_0{}^2} - \frac{r^3}{4a_0{}^3}\right]\,e^{-r/4a_0}\right\}\left\{-\frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{2\pi}}\,\sin\theta\cos\theta\;\,e^{i\phi}\right\}$$

$$\psi_{421}\,(r,\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{384\sqrt{2\pi}(a_0)^{3/2}}\left[-\frac{3r^2}{a_0{}^2} + \frac{r^3}{4a_0{}^3}\right]\sin\theta\cos\theta\,e^{i\phi}e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan $(n = 4, l = 2$ dan $m = 2)$

$$\psi_{422}\,(r,\theta,\phi) = R_{42}(r)Y_{22}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{422}\,(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{1}{192\sqrt{5}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{3r^2}{a_0{}^2} - \frac{r^3}{4a_0{}^3}\right]\,e^{-r/4a_0}\right\}\left\{\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{2\pi}}\;sin^2\theta\;e^{2i\phi}\right\}$$

$$\psi_{422}\,(r,\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{768\sqrt{2\pi}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{3r^2}{a_0{}^2} - \frac{r^3}{4a_0{}^3}\right]sin^2\theta\;e^{2i\phi}\;\,e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan $(n = 4, l = 3$ dan $m = -3)$

$$\psi_{43(-3)}\,(r,\theta,\phi) = R_{43}(r)Y_{3(-3)}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{43(-3)}\,(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{1}{768\sqrt{35}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r^3}{a_0{}^3}\right]e^{-r/4a_0}\right\}\left\{\frac{\sqrt{35}}{8\sqrt{\pi}}\;sin^3\theta\;e^{-3i\phi}\right\}$$

$$\psi_{43(-3)}\,(r,\theta,\phi) = \frac{1}{6044\sqrt{\pi}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r^3}{a_0{}^3}\right]sin^3\theta\;e^{-3i\phi}\;\,e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan $(n = 4, l = 3$ dan $m = -2)$

$$\psi_{43(-2)}\,(r,\theta,\phi) = R_{43}(r)Y_{3(-2)}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{43(-2)}\,(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{1}{768\sqrt{35}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r^3}{a_0{}^3}\right]e^{-r/4a_0}\right\}\left\{\frac{\sqrt{105}}{4\sqrt{2\pi}}\;sin^2\theta\cos\theta\;e^{-2i\phi}\right\}$$

$$\psi_{43(-2)}\,(r,\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{3072\sqrt{2\pi}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r^3}{a_0{}^3}\right]sin^2\theta\cos\theta\;e^{-2i\phi}e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan $(n = 4, l = 3$ dan $m = -1)$

$$\psi_{43(-1)}\,(r,\theta,\phi) = R_{43}(r)Y_{3(-1)}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{43(-1)}\,(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{1}{768\sqrt{35}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r^3}{a_0{}^3}\right]e^{-r/4a_0}\right\}\left\{\frac{\sqrt{21}}{8\sqrt{\pi}}\sin\theta\;(5\;cos^2\theta - 1)\;e^{-i\phi}\right\}$$

$$\psi_{43(-1)}\,(r,\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{6044\sqrt{5\pi}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r^3}{a_0{}^3}\right]\sin\theta\;(5cos^2\theta - 1)\;e^{-i\phi}e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan $(n = 4, l = 3$ dan $m = 0)$

$$\psi_{430}\,(r,\theta,\phi) = R_{43}(r)Y_{30}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{430}\,(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{1}{768\sqrt{35}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r^3}{a_0{}^3}\right]e^{-r/4a_0}\right\}\left\{\frac{\sqrt{7}}{4\sqrt{\pi}}(5\;cos^3\theta - 3\cos\theta)\right\}$$

$$\psi_{430}\,(r,\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{3072\sqrt{5\pi}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r^3}{a_0{}^3}\right](5cos^3\theta - 3\cos\theta)e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan $(n = 4, l = 3 \text{ dan } m = 1)$

$$\psi_{431}\,(r,\theta,\phi) = R_{43}(r)Y_{31}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{431}\,(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{1}{768\sqrt{35}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r^3}{a_0{}^3}\right]e^{-r/4a_0}\right\}\left\{-\frac{\sqrt{21}}{8\sqrt{\pi}}\sin\theta\,(5\,cos^2\theta - 1)\,e^{i\phi}\right\}$$

$$\psi_{431}\,(r,\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{6044\sqrt{5\pi}(a_0)^{3/2}}\left[-\frac{r^3}{a_0{}^3}\right]\sin\theta\,(5cos^2\theta - 1)e^{i\phi}e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan $(n = 4, l = 3 \text{ dan } m = 2)$

$$\psi_{432}\,(r,\theta,\phi) = R_{43}(r)Y_{32}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{432}\,(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{1}{768\sqrt{35}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r^3}{a_0{}^3}\right]e^{-r/4a_0}\right\}\left\{\frac{\sqrt{105}}{4\sqrt{2\pi}}\,sin^2\theta\cos\theta\,e^{2i\phi}\right\}$$

$$\psi_{432}\,(r,\theta,\phi) = \frac{\sqrt{3}}{3072\sqrt{2\pi}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r^3}{a_0{}^3}\right]sin^2\theta\cos\theta\,e^{2i\phi}e^{-r/4a_0}$$

Untuk keadaan $(n = 4, l = 3 \text{ dan } m = 3)$

$$\psi_{433}\,(r,\theta,\phi) = R_{43}(r)Y_{33}(\theta,\phi)$$

$$\psi_{433}\,(r,\theta,\phi) = \left\{\frac{1}{768\sqrt{35}(a_0)^{3/2}}\left[\frac{r^3}{a_0{}^3}\right]e^{-r/4a_0}\right\}\left\{-\frac{\sqrt{35}}{8\sqrt{\pi}}\,sin^3\theta\,e^{3i\phi}\right\}$$

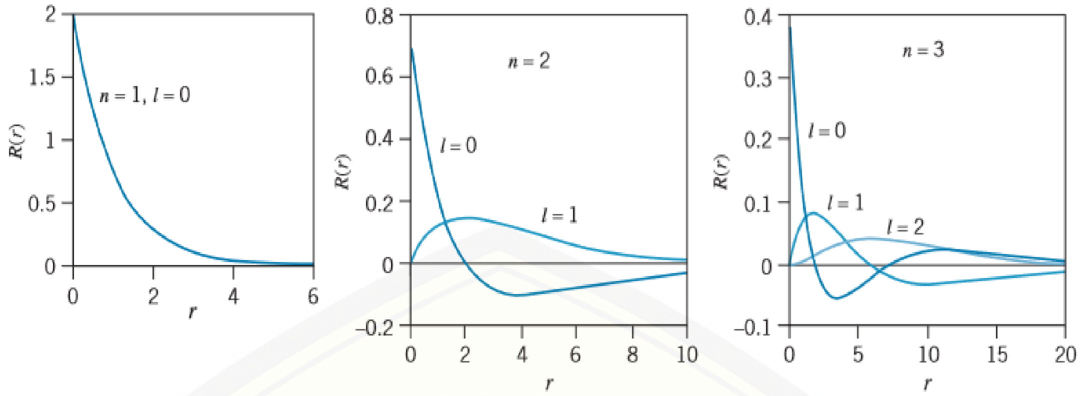
$$\psi_{433}\,(r,\theta,\phi) = \frac{1}{6044\sqrt{\pi}(a_0)^{3/2}}\left[-\frac{r^3}{a_0{}^3}\right]sin^3\theta\,e^{3i\phi}\,e^{-r/4a_0}$$

Lampiran 7. Simulasi Fungsi Gelombang Atom Hidrogen untuk $\boldsymbol{n = 1, 2, 3}$

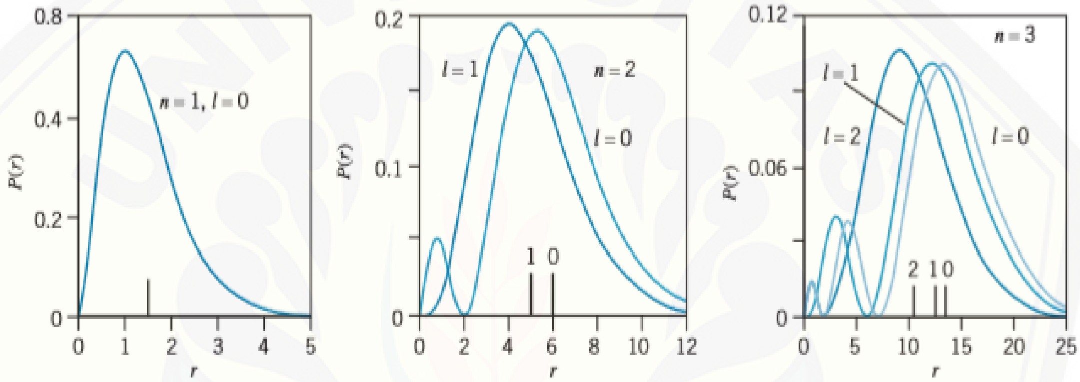
Berikut ini merupakan pembanding simulasi dari buku literatur (Krane, 2012:205-210) yang digunakan dalam penelitian.

Tabel 7.a Solusi Lengkap Fungsi Gelombang Atom Hidrogen $\boldsymbol{n = 1, 2, 3}$

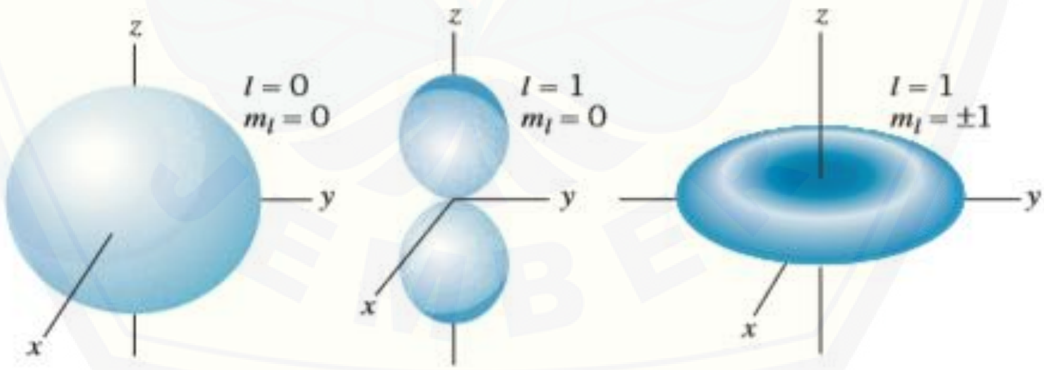
n	l	m_l	$R(r)$	$\Theta(\theta)$	$\Phi(\phi)$
1	0	0	$\frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	0	0	$\frac{1}{(2a_0)^{3/2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$	$\sqrt{\frac{3}{2}} \cos\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	1	±1	$\frac{1}{\sqrt{3}(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$	$\mp\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$
3	0	0	$\frac{2}{(3a_0)^{3/2}} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
3	1	0	$\frac{8}{9\sqrt{2}(3a_0)^{3/2}} \left(\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{6a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$\sqrt{\frac{3}{2}} \cos\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
3	1	±1	$\frac{8}{9\sqrt{2}(3a_0)^{3/2}} \left(\frac{r}{a_0} - \frac{r^2}{6a_0^2}\right) e^{-r/3a_0}$	$\mp\frac{\sqrt{3}}{2} \sin\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$
3	2	0	$\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\sqrt{\frac{5}{8}}(3\cos^2\theta - 1)$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
3	2	±1	$\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\mp\sqrt{\frac{15}{4}} \sin\theta\cos\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\phi}$
3	2	±2	$\frac{4}{27\sqrt{10}(3a_0)^{3/2}} \frac{r^2}{a_0^2} e^{-r/3a_0}$	$\frac{\sqrt{15}}{4} \sin^2\theta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm 2i\phi}$



Gambar 7.a Grafik Fungsi Gelombang Radial Atom Hidrogen $\boldsymbol{n} = \mathbf{1}, \mathbf{2}, \mathbf{3}$

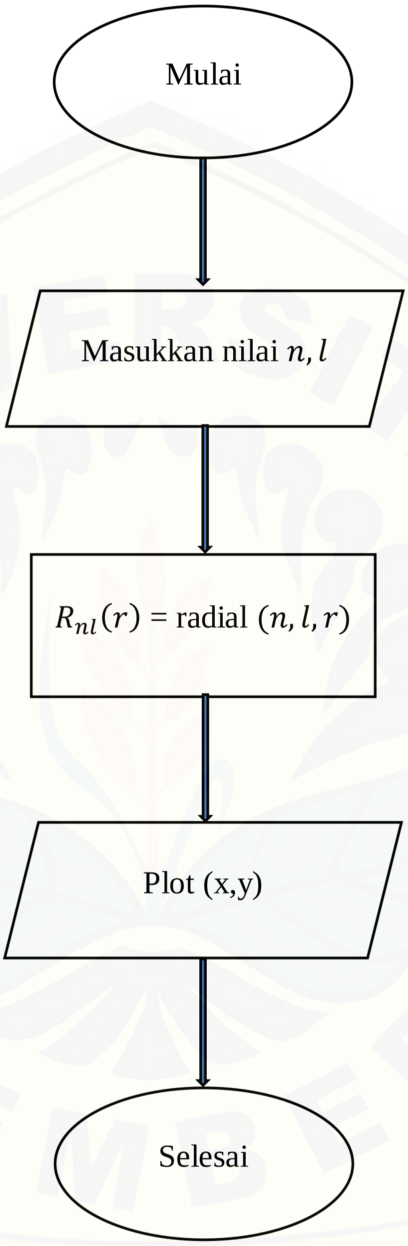


Gambar 7.b Grafik Rapat Probabilitas Radial Atom Hidrogen $\boldsymbol{n} = \mathbf{1}, \mathbf{2}, \mathbf{3}$

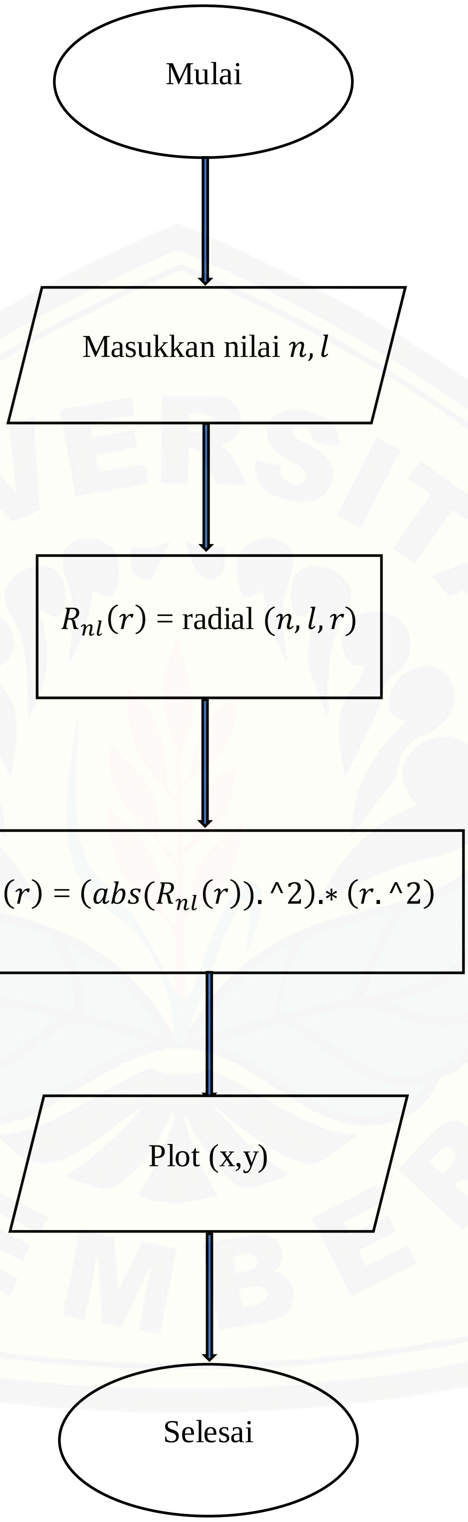


Gambar 7.c Grafik Rapat Probabilitas Angular Atom Hidrogen $\boldsymbol{n} = \mathbf{2}$

Lampiran 8. Flowchart pada program matlab2015



Gambar 8.a Flowchart untuk Program Menampilkan Grafik Fungsi Radial



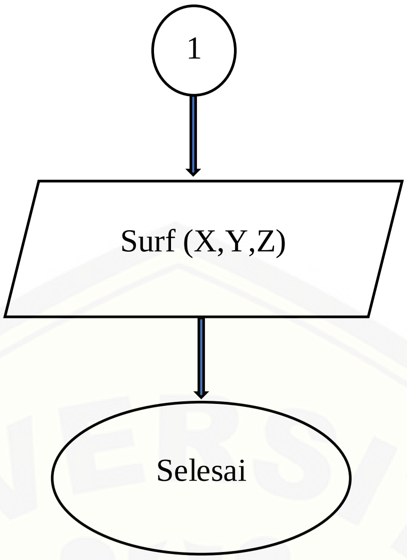
Gambar 8.b Flowchart untuk Program Menampilkan Grafik Probabilitas Radial

Mulai

Masukkan nilai l, m

```
theta = linspace(0,2*pi,401); phi = linspace(0,2*pi,401);
[theta,phi] = meshgrid(theta,phi);
f1 = factorial(l-m); f2 = factorial(l+m); a = (2*l+1)*f1/(4*pi*f2);
pp = legendre(l,cos(theta);
if (1 == 0)
   rho = a.*pp;
else
   plm = pp(abs(m)+1,:); kk = 1;
   for k1 = 1:401
      for k2 = 1:401
      rho(k2,k1) = a*plm(kk)^2;
      kk = kk+1;
      end
   end
end
X=cos(phi).*sin(theta).*rho; Y=sin(phi).*sin(theta).*rho;
Z=cos(theta).*rho;
```

1



Gambar 8.c Flowchart untuk Program Menampilkan Grafik Probabilitas Angular

Lampiran 9. M-file untuk Membuat Simulasi Grafik pada Matlab2015

Langkah I: Membuat simulasi grafik 2D fungsi gelombang dan rapat probabilitas radial atom hidrogen sebagai validasi.

❖ Fungsi gelombang radial

Sebagai contoh diambil grafik fungsi gelombang radial untuk $n = 1; l = 0$.

```
n=0:0.1:6;
r=n*a0;
er=r/a0;
R10=((2/(a0^1.5))*(exp(-r/a0)))*10;
plot(er,R10,'b-');
xlabel('r (ao)');ylabel('R(r) (amstrong)')
```

❖ Rapat probabilitas radial

Sebagai contoh diambil grafik rapat probabilitas radial untuk $n = 1; l = 0$.

```
n=0:0.01:20;
r=n*a0;
er=r/a0;
R10=(2/(a0^1.5))*(exp(-r/a0));
P10=((R10).^2).*(r.^2);
sum(P10);
fit=P10/sum(P10);
vin=(fit).*100;
plot(er,vin,'b-')
xlabel('r');ylabel('P(r)')
```

Langkah II: Membuat simulasi grafik 2D fungsi gelombang dan rapat probabilitas radial atom hidrogen untuk $n = 4$

❖ Fungsi gelombang radial untuk bilangan kuantum $n = 4;\ l = 0,1,2,3$

```
n=0:0.1:30;
r=n*a0;
er=r/a0;
```

```
R40=((1/4).*((1)/((a0).^(1.5))).*(1-((3.*r)/(4.*a0))+((r.^2)/((8).*(a0).^2))-
    ((r.^3)/((192).*(a0).^3))).*(exp(-r/(4.*a0)))).*10;
R41=((5/(16.*sqrt(15))).*((1)/((a0).^(1.5))).*((r/a0)-((r.^2)/((4).*(a0).^2))+
    ((r.^3)/((80).*(a0).^3))).*(exp(-r/(4.*a0)))).*10;
R42=((1/(192.*sqrt(5))).*((1)/((a0).^(1.5))).*((3.*(r.^2)/(a0).^2)-((r.^3)/((4)   .*
    (a0).^3))).*(exp(-r/(4.*a0)))).*10;
R43=((1/(768.*sqrt(35))).*((1)/((a0).^(1.5))).*((r.^3)/((a0).^3)).*
    (exp((-r)/(4.*a0)))).*10;
plot(er,R40,'b-',er,R41,'r-',er,R42,'m-',er,R43,'g-');
xlabel('r');ylabel('R(r)')
```

❖ Rapat probabilitas radial untuk bilangan kuantum $n = 4;\ l = 0,1,2,3$

```
n=0:0.01:40;
r=n*a0;
er=r/a0;
R40=(1/4).*((1)/((a0).^(1.5))).*(1-((3.*r)/(4.*a0))+((r.^2)/((8).*(a0).^2))-
    ((r.^3)/((192).*(a0).^3))).*(exp(-r/(4.*a0)));
R41=(5/(16.*sqrt(15))).*((1)/((aB).^(1.5))).*((r/a0)-((r.^2)/((4).*(a0).^2))+
    ((r.^3)/((80).*(a0).^3))).*(exp(-r/(4.*a0)));
R42=(1/(192.*sqrt(5))).*((1)/((a0).^(1.5))).*((3.*(r.^2)/(a0).^2)-((r.^3)/((4).*
    (a0).^3))).*(exp(-r/(4.*a0)));
R43=(1/(768.*sqrt(35))).*((1)/((a0).^(1.5))).*((r.^3)/((a0).^3)).*
    (exp((-r)/(4.*a0)));
P40=(abs(R40).^2).*(r.^2);
P41=(abs(R41).^2).*(r.^2);
P42=(abs(R42).^2).*(r.^2);
P43=(abs(R43).^2).*(r.^2);
sum(P40);
sum(P41);
sum(P42);
sum(P43);
fit=P40/sum(P40);
```

```
alf=P41/sum(P41);
ria=P42/sum(P42);
cit=P43/sum(P43);
mel=(fit).*100;
vin=(alf).*100;
mau=(ria).*100;
lana=(cit).*100;
plot(er,mel,'b-',er,vin,'r-',er,mau,'m-',er,lana,'g-')
xlabel('r');ylabel('P(r)')
```

Langkah III: Membuat simulasi grafik 3D rapat probabilitas angular atom hidrogen untuk $n = 2$

❖ Sebagai contoh diambil grafik 3D rapat probabilitas angular $l = 1; m = 0$.

```
%define the spherical grid
rslv = 401;
theta = linspace(0,2*pi,rslv);       %polar angle
phi = linspace(0,2*pi,rslv);         %azimuth angle
[theta,phi] = meshgrid(theta,phi);  %define the grid
%calculate the spherical harmonics
f1 = factorial(1-0);
f2 = factorial(1+0);
a = (2*1+1)*f1/(4*pi*f2);
pp = legendre(1,cos(theta));
if (1 == 0)
   rho = a.*pp;
else
   plm = pp(abs(0)+1,:);
   kk = 1;
   for k1 = 1:rslv
      for k2 = 1:rslv
      rho(k2,k1) = a*plm(kk)^2;
```

```
        kk = kk+1;
        end
    end
end
X=cos(phi).*sin(theta).*rho;   %convert to cartesian coordinate
Y=sin(phi).*sin(theta).*rho;
Z=cos(theta).*rho;
% the following code figures out the maximim
% coordinate value and then puts it as the range of all
% three coordinates X, Y and Z when drawing the figure.
xmax = 0;
ymax = 0;
zmax = 0;
tmp=max(X,[],1);
xmax=max(tmp);
tmp=max(Y,[],1);
ymax=max(tmp);
tmp=max(Z,[],1);
zmax=max(tmp);
amax = max([xmax ymax zmax]);
amaxn= amax*(-1.0);
%plot the spherical harmonics on the surface of a sphere
surf(X,Y,Z,'FaceColor','b','EdgeColor','none')
camlight left; lighting phong;
axis tight equal off
axis([amaxn amax amaxn amax amaxn amax]);
if (0 == 0)
    return;
end
```

Langkah IV: Membuat simulasi grafik 3D rapat probabilitas angular atom hidrogen untuk $n = 4$

❖ Sebagai contoh diambil grafik 3D rapat probabilitas angular $l = 3; m = 0$.

```
%define the spherical grid
rslv = 401;
theta = linspace(0,2*pi,rslv);      %polar angle
phi = linspace(0,2*pi,rslv);        %azimuth angle
[theta,phi] = meshgrid(theta,phi);  %define the grid
%calculate the spherical harmonics
f1 = factorial(3-0);
f2 = factorial(3+0);
a = (2*3+1)*f1/(4*pi*f2);
pp = legendre(3,cos(theta));
if (3 == 0)
   rho = a.*pp;
else
   plm = pp(abs(0)+1,:);
   kk = 1;
   for k1 = 1:rslv
      for k2 = 1:rslv
      rho(k2,k1) = a*plm(kk)^2;
      kk = kk+1;
      end
   end
end
X=cos(phi).*sin(theta).*rho;   %convert to cartesian coordinate
Y=sin(phi).*sin(theta).*rho;
Z=cos(theta).*rho;
% the following code figures out the maximim
% coordinate value and then puts it as the range of all
% three coordinates X, Y and Z when drawing the figure.
```

```
xmax = 0;
ymax = 0;
zmax = 0;
tmp=max(X,[],1);
xmax=max(tmp);
tmp=max(Y,[],1);
ymax=max(tmp);
tmp=max(Z,[],1);
zmax=max(tmp);
amax = max([xmax ymax zmax]);
amaxn= amax*(-1.0);
%plot the spherical harmonics on the surface of a sphere
surf(X,Y,Z,'FaceColor','b','EdgeColor','none')
camlight left; lighting phong;
axis tight equal off
axis([amaxn amax amaxn amax amaxn amax]);
if (0 == 0)
   return;
end
```