

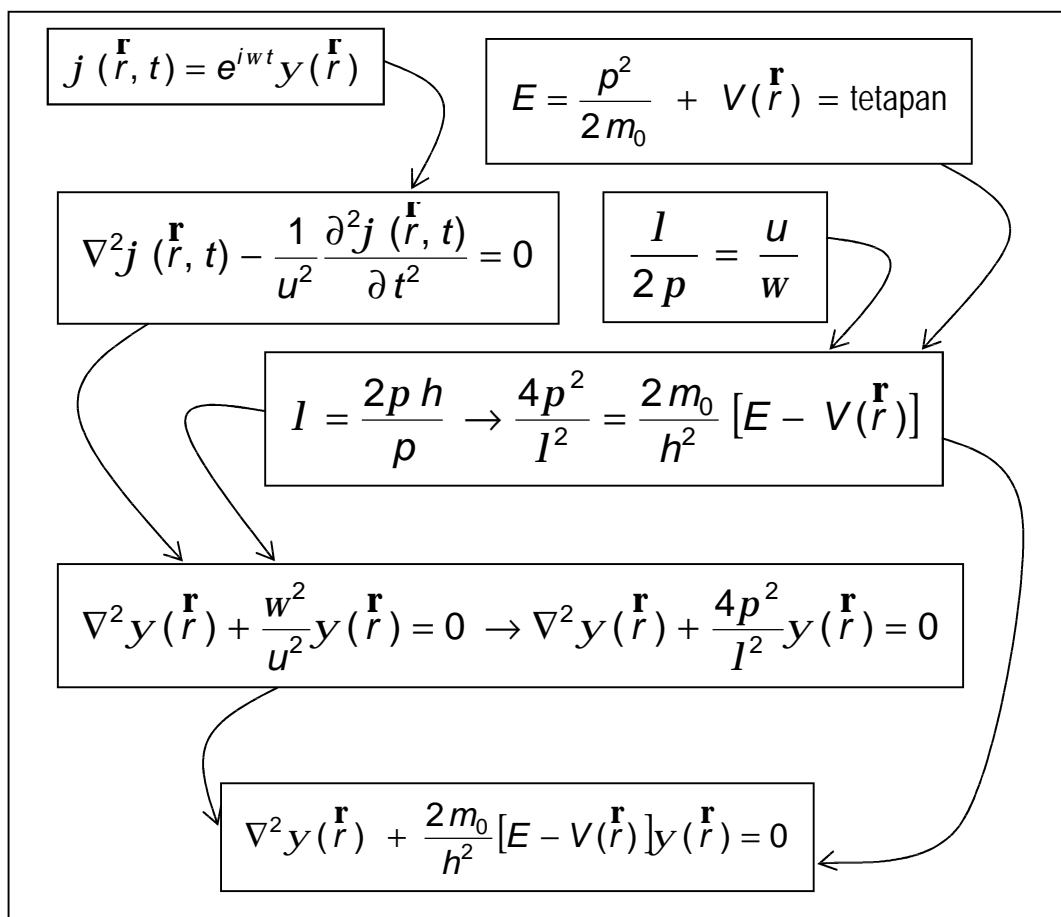
## MODUL-4 SIFAT-SIFAT DASAR FUNGSI DIRI DALAM MEKANIKA KWANTUM

## 1. Pendahuluan

Seperti telah dijelaskan pada modul sebelumnya bahwa fungsi diri (eigen function) itu dapat memberikan informasi tentang perilaku suatu zarah yang sedang ditinjau/ diamati dan dapat diperoleh dari solusi persamaan Schrödinger. Karena fungsi diri itu berperilaku sebagai gelombang, maka harus terdapat hubungan kenampakan antara persamaan diferensial gelombang dengan persamaan Schrödinger. Pada bagan di bawah ini diperlihatkan rute hubungan antara keduanya dalam bentuk persamaan Schrödinger yang bergantung dan tidak bergantung waktu.

## 2. Persamaan Schrödinger Tidak Bergantung Waktu

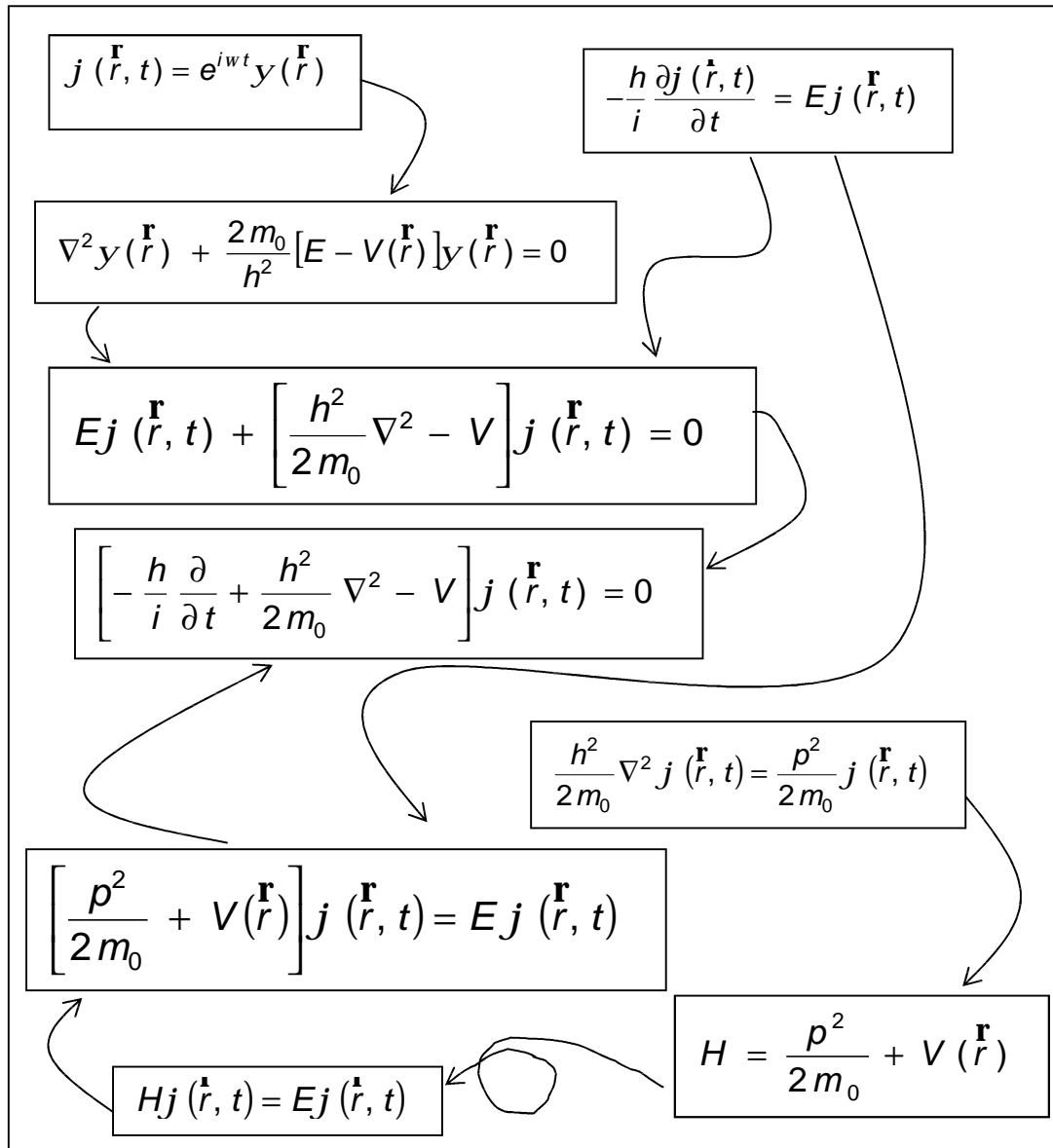
Bagan-1 di bawah ini memperlihatkan prosedur modifikasi persamaan gelombang menjadi persamaan Schrödinger yang tidak bergantung waktu dengan bantuan dari pernyataan tentang energi mekanik total yang merupakan jumlah antara energi kinetik dan potensial.



Bagan-1 Modifikasi persamaan gelombang menjadi persamaan Schrödinger tidak bergantung waktu

## 3. Persamaan Schrödinger Bergantung Waktu

Bagan-2 di bawah ini memperlihatkan modifikasi ke arah persamaan Schrödinger bergantung waktu dengan memanggil kembali persamaan Schrödinger tidak bergantung waktu dan pernyataan tentang fungsi diri dari Bagan-1 yang telah didekomposisi oleh metoda pemisahan menjadi perkalian antara fungsi yang hanya bergantung pada waktu dengan fungsi yang hanya bergantung pada ruang. Dalam prosedur modifikasi ini telah digunakan pernyataan tentang sebuah turunan terhadap waktu satu kali yang merupakan operator dari observabel energi total  $E$  dan turunan terhadap ruang dua kali yang merupakan operator dari observable energi kinetik  $p^2/2m_0$ .



Bagan-2 Modifikasi persamaan Schrödinger tidak bergantung waktu menjadi persamaan Schrödinger bergantung waktu secara langsung dan melalui operator Hamiltonian.

4. Sifat Ortonormalitas dan Orthogonalitas Fungsi Diri yang Diskrit

Makna terpenting dari keberadaan fungsi diri  $\psi$  adalah sebagai komponen pembentuk peluang (probabilitas) bersama dengan pasangan konjugasinya  $\psi^*$ . Perkalian keduanya,  $\psi \psi^*$ , merupakan rapat peluang (probability density) untuk mendapatkan zarah yang sedang diamati dalam suatu ruang tertentu, katakanlah ruang  $\Omega$ . Apabila peluang keberadaan zarah tersebut berhingga dan cukup besar (mendekati nilai satu), maka sudah hampir pasti bahwa zarah yang sedang diamati itu berada (entah di mana) dalam ruang  $\Omega$ . Masing-masing peluang dari setiap kemungkinan keberadaan zarah itu ( $n = 1, 2, 3, 4, \dots$  dst) dalam ruang  $\Omega$  yang boleh ada dinyatakan oleh  $\psi_n \psi_n^*$ , sehingga apabila dijumlahkan semua peluang dari masing-masing kemungkinannya akan bernilai  $\sum_n \psi_n \psi_n^* = 1$ ). Dengan kata lain, pernyataan itu bermakna bahwa zarah dimaksud berada dalam ruang  $\Omega$  bukan dalam ruang selain  $\Omega$ . Tetapi tentu saja ketika ditanya lebih fokus 'di mana zarah tersebut berada dalam ruang  $\Omega$ ?', masih sulit untuk dijawab, apakah di sini, di situ atau di sana.

Pada dasarnya solusi persamaan Schrödinger mengikuti solusi persamaan gelombang sebagai persamaan differensial orde dua. Beberapa syarat bagi solusi umum persamaan Schrödinger sebagai fungsi diri sangat diperlukan agar dapat digunakan bagi kepentingan interpretasi, di antaranya adalah fungsi diri harus: (1) bersifat kontinyu, (2) turunan pertamanya terhadap ruang juga harus kontinyu, (3) bernilai tunggal, dan (4) berhingga dalam ruang  $\Omega$  yang ditinjau. Fungsi diri yang memenuhi persyaratan tersebut tidak bersifat sembarang, tetapi hanya fungsi yang memiliki sejumlah parameter khusus yang kemudian disebut sebagai nilai diri (eigenvalues), misalnya  $E_1, E_2, E_3, \dots$  yang tidak lain merupakan nilai-nilai energi yang mungkin bagi fungsi diri  $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$ . Sejumlah nilai diri (spektrum energi) dan fungsi diri membentuk spektrum solusi yang mungkin bagi keberadaan zarah yang sedang dalam tinjauan. Jika gerakan zarah bersifat tidak terbatas dalam ruang  $\Omega$ , maka spektrum energi bersifat kontinyu, tetapi jika gerakannya terbatas, maka spektrum energi bersifat diskrit (tercatu).

Syarat normalitas dapat dibuktikan lewat telaah terhadap persamaan Schrödinger yang tidak bergantung waktu beserta pasangan konjugasinya dengan perkalian silang dan mendapatkan selisihnya, melalui prosedur berikut:

$$\left. \begin{aligned} \nabla^2 \psi_n + \frac{2m_0}{h^2} [E_n - V] \psi_n &= 0 \\ \nabla^2 \psi_{n'}^* + \frac{2m_0}{h^2} [E_{n'} - V] \psi_{n'}^* &= 0 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots(01)$$

Setelah perkalian silang, selisihnya menjadi:

---

\*) Bagi fungsi diri yang kontinyu pernyataan jumlah semua peluang yang mungkin dituliskan seperti pada kolom sebelah kanan. Dalam mekanika kuantum pernyataan ini disebut sebagai syarat normalitas, yang tidak selalu konvergen, sehingga diperlukan prosedur perata-rataan khusus.

$$\int_{\Omega} \psi_n^* \psi_{n'} d^3x = \delta_{nn'}$$

$$y_{n'}^* \nabla^2 y_n - y_n \nabla^2 y_{n'}^* + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E_n - E_{n'}] y_{n'}^* y_n = 0 \dots\dots\dots(02)$$

atau

$$\nabla \cdot [y_{n'}^* \nabla y_n - y_n \nabla y_{n'}^*] + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E_n - E_{n'}] y_{n'}^* y_n = 0 \dots\dots\dots(03)$$

jika suku pertama diwakili oleh:

$$\nabla \cdot \mathbf{\dot{B}} = \nabla \cdot [y_{n'}^* \nabla y_n - y_n \nabla y_{n'}^*] \dots\dots\dots(04)$$

maka pengintegrasian terhadap ruang S yang melingkupinya dapat dituliskan seperti:

$$\int \nabla \cdot \mathbf{\dot{B}} d^3x + \frac{2m_0}{\hbar^2} [E_n - E_{n'}] \int y_{n'}^* y_n d^3x = 0 \dots\dots\dots(05)$$

Integral volume terhadap suku pertama dapat diubah menjadi integral permukaan yang melingkupi volume tersebut dalam bentuk:

$$\int \nabla \cdot \mathbf{\dot{B}} d^3x = \oint \mathbf{B}_n dS = 0 \dots\dots\dots(06)$$

Integral itu bernilai nol dengan alasan bahwa jika permukaan yang melingkupinya adalah  $S = 4\pi r^2$ , dan perilaku fungsi diri pada tepian permukaan  $r \rightarrow \infty$  menuju nol lebih cepat dari  $1/r$ , karena pada umumnya fungsi diri menuju kelenyapannya di tepian secara eksponensial bagi fungsi diri yang diskrit (tercatu). Bagi fungsi diri yang kontinu terdapat perlakuan lain yang akan dibahas kemudian. Kebrlakuan persamaan (06) mengakibatkan persamaan (05) menjadi:

$$[E_n - E_{n'}] \cdot \int y_{n'}^* y_n d^3x = 0 \dots\dots\dots(07)$$

Untuk  $E_n \neq E_{n'}$  atau  $n \neq n'$ , maka berlaku sifat orthogonalitas fungsi diri:

$$\int y_{n'}^* y_n d^3x = 0 \dots\dots\dots(08)$$

sebaliknya untuk  $E_n = E_{n'}$  atau  $n = n'$ , maka berlaku sifat orthonormalitas fungsi diri:

$$\int y_{n'}^* y_n d^3x = 1 \dots\dots\dots(09)$$

Atau (08) dan (09) dapat dituliskan dengan menggunakan simbol Kronecker-Weierstrass  $d_{nn'}$  seperti berikut:

$$\int y_{n'}^* y_n d^3x = d_{nn'} \dots\dots\dots(10)$$

5. Sifat-sifat Fungsi Diri yang Kontinyu

Bagi sembarang fungsi  $F(x)$  yang tidak memiliki sifat khusus dapat diexpansikan ke dalam deret fungsi-fungsi yang orthonormal seperti yang telah dibahas pada penurunan persamaan (10) dalam bentuk  $F(x) = \sum_n C_n y_n(x)$ , kemudian dikalikan dengan  $y_{n'}^*(x)dx$  dan diintegrasikan terhadap ruang  $x$ , maka diperoleh:

$$\int y_{n'}^*(x) F(x) dx = \sum_n C_n \int y_{n'}^*(x) y_n(x) dx \dots\dots\dots(11)$$

Sehubungan dengan sifat orthonormalitas fungsi-fungsi penyusunnya, maka koefisien  $C_n$  dapat dinyatakan dalam bentuk:

$$C_n = \int y_{n'}^*(x') F(x') dx' \rightarrow F(x) = \sum_n \int dx' y_{n'}^*(x') F(x') y_n(x) \dots\dots(12)$$

Sementara itu sifat orthonormalitas fungsi-fungsi penyusun menghendaki bahwa penjumlahan pada ruas kanan memberikan arti sebagai fungsi delta ( $d$ -function) pada Gambar-1 seperti:

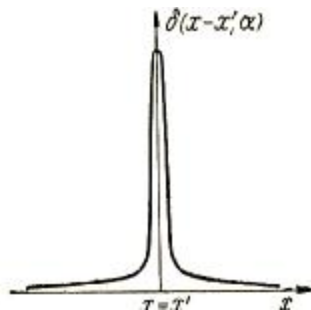
$$\sum_n y_{n'}^*(x') y_n(x) = d(x - x') \dots\dots\dots(13)$$

Fungsi delta ini bernilai nol kecuali dalam interval sempit di antara  $x' \sim x$ , sehingga persamaan (12) menjadi prosedur transformasi bagi  $F(x')$  ke dalam  $F(x)$ :

$$F(x) = \int F(x') d(x - x') dx' \dots\dots\dots(14)$$

Jika  $F(x)$  bernilai satu, maka persamaan (14) dapat ditulis seperti:

$$\int d(x - x') dx' = 1 \dots\dots\dots(15)$$



Gambar-1 Fungsi delta dengan regangan oleh parameter  $a$

Telaah terhadap fungsi delta dapat ditempuh dengan sedikit meregangkannya melalui introduksi suatu parameter  $a$  dan diekspansikan dalam deret Fourier\*) seperti:

$$\left. \begin{aligned} d(x - x') &= \frac{1}{L} \sum_n \exp \left[ \left( \frac{2p n}{L} \right) i(x - x') \right] \\ &= \frac{1}{2p} \sum_n \frac{2p}{L} \exp \left[ \left( \frac{2p n}{L} \right) i(x - x') \right] \\ &= \frac{1}{2p} \sum_n \Delta k \exp [i k(x - x')] \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots(16)$$

Persamaan (16) dapat ditulis ulang menjadi:

$$d(x - x') = \frac{1}{2p} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp [i k(x - x')] \dots\dots\dots(17)$$

Peregangan fungsi oleh parameter  $a$  dilakukan setelah persamaan (17) terbentuk dan kemudian menjadi:

$$\left. \begin{aligned} d(x - x'; a) &= \frac{1}{p} \int_0^{+\infty} dk \exp [-a |k|] \exp [i k(x - x')] \\ &= \frac{1}{p} \int_0^{+\infty} dk \exp [-a |k|] \cos [k(x - x')] \\ &= \frac{1}{p} \frac{a}{a^2 + (x - x')^2} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots(18)$$

Pada tepian (limit)  $a \rightarrow 0$ , maka fungsi delta bernilai  $d(x - x') = \infty$  apabila  $x = x'$ , dan bernilai  $d(x - x') = 0$  apabila  $x \neq x'$ . Pengintegrasian fungsi delta menjadi penghitungan luasan di bawah grafik fungsi delta dan di atas sumbu  $x$  memberikan nilai satu, seperti ditunjukkan oleh:

$$\int d(x - x') dx' = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{p} \int \frac{a dx'}{a^2 + (x - x')^2} = 1 \dots\dots\dots(19)$$

Pengetahuan tentang fungsi delta ini akan digunakan untuk menyelidiki spektrum dari fungsi diri yang bersifat kontinyu. Misalkan terdapat fungsi diri yang dinyatakan oleh:

\*) Nilai  $k = 2 p n / L \rightarrow \Delta k = (2 p / L) \Delta n ; \Delta n = 1 \rightarrow \Delta k = (2 p / L)$

$$\left. \begin{aligned} y(p) &= A \exp[i k x] = A \exp\left[i \frac{p}{\hbar} x\right] \\ y^*(p') &= A \exp[-i k' x] = A \exp\left[-i \frac{p'}{\hbar} x\right] \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots(20)$$

Normalisasi fungsi diri beserta pasangan konjugasinya dapat dituliskan seperti:

$$\left. \begin{aligned} \int y^*(p') y(p) dx &= A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left[i x \left(\frac{p}{\hbar} - \frac{p'}{\hbar}\right)\right] \\ &= 2p A^2 \hbar d(p - p') = d(p - p') \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots(21)$$

Berdasarkan persamaan (21) dapat diperoleh pernyataan untuk amplitudonya, yaitu:

$$A = \frac{1}{\sqrt{2p \hbar}} \rightarrow y(p) = \frac{1}{\sqrt{2p \hbar}} \exp\left[i \frac{p}{\hbar} x\right] \dots\dots\dots(22)$$

6. Penutup

Sebagai suatu inferensi dari pembelajaran tentang sifat normalitas fungsi diri pada modul-4 ini dapat disarikan bahwa:

$$\sum_{n'=n_1}^{n_2} \int y_{n'}^* y_n dx = \begin{cases} 1, & \text{jika } n \text{ berada di dalam wilayah } n_1 < n_2 \\ 0, & \text{jika } n \text{ berada di luar wilayah } n_1 < n_2 \end{cases} \dots\dots\dots(23)$$

Jika pernyataan pada (23) diubah ke dalam bentuk integral akan menjadi:

$$\int_{p_1}^{p_2} dp' \int y^*(p') y(p) dx = \begin{cases} 1, & \text{jika } p \text{ berada di dalam wilayah } p_1 < p_2 \\ 0, & \text{jika } p \text{ berada di luar wilayah } p_1 < p_2 \end{cases} \dots\dots(24)$$

Suatu fungsi diri sebagai solusi dari persamaan differensial Schrödinger dikatakan berperilaku baik apabila memenuhi persyaratan:

- Kontinuitas, yaitu:  $y(x)$  dan  $dy(x)/dx$  bersifat kontinyu untuk semua nilai  $x$  yang ril/ nyata (syarat kontinuitas baku),
- bernilai tunggal dan berhingga dalam ruang yang ditinjau (syarat batas baku).

Sejumlah nilai diri (eigenvalues) berkaitan dengan dan membatasi jumlah fungsi diri, dan sejumlah nilai diri yang mungkin membentuk suatu spektrum. Jika gerakan sebuah zarah tidak terbatas, maka spektrum energinya bersifat kontinyu, sedangkan jika ruang gerak zarah terbatas, maka spektrum energinya bersifat diskrit (tercatu).