MODUL-6 PERSAMAAN SCHRÖDINGER UNTUK POTENSIAL HARMONIK

1. Pendahuluan

Fungsi diri (eigen function) yang dapat memberikan informasi tentang perilaku suatu zarrah yang sedang ditinjau/ diamati merupakan solusi khusus persamaan Schrödinger. Solusi yang pertama kali diperoleh dari persamaan Schrödinger masih merupakan solusi umum. Setelah diberlakukan beberapa syarat batas dan syarat normalitas terhadap solusi umum sehingga bentuknya mengalami perubahan, barulah mejadi solusi khusus. Untuk mendapatkan solusi khusus bagi persamaan Schrödinger yang bergantung waktu, selain dikenakan syarat batas dan syarat normalitas juga diberlakukan syarat awal.

2. Persamaan Schrödinger Untuk Potensial Harmonik

Persamaan Schrödinger yang tidak bergantung waktu dalam tiga dimensi (3-D) dituliskan seperti berikut:

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}) + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E - V(\vec{r})\right]\psi(\vec{r}) = 0 \quad \text{......(01)}$$

Penulisannya dalam satu dimensi (1-D) adalah:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right]\psi(x) = 0 \quad \text{......(02)}$$

Potensial harmonik sebagai fungsi dari peubah *x* berbentuk:

$$V(x) = \tfrac{1}{2} m_0 \omega^2 x^2 \quad \text{......(03)}$$

Energi total dari gerak zarrah *E* bernilai lebih besar dari nilai pengaruh potensial $V(x)$ atau $E > V$ dalam ruang yang berpotensial, dan di luar ruang yang berpotensial $E < V$. Kondisi seperti ini mirip dengan gerak zarrah dalam sumur potensial, yang berbeda hanyalah pada bentuk fungsinya, yaitu semakin 'dalam' semakin sempit, sedangkan dalam sumur potensial lebar sumur sama tidak bergantung pada 'kedalaman'-nya. Sehingga persamaan (02) menjadi:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left(E - \tfrac{1}{2} m_0 \omega^2 x^2\right)\psi = 0 \quad \text{......(04)}$$

Penyederhanaan dapat dilakukan dengan melakukan transformasi beberapa tetapan seperti:

$$\alpha = \frac{2m_0 E}{\hbar^2}; \quad \beta = \frac{1}{x_0^2} = \frac{m_0 \omega}{\hbar}; \quad \frac{\alpha}{\beta} = \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad \text{......(05)}$$

Kemudian dilakukan pula transformasi peubah sehingga persamaan Schrödinger menjadi seperti:

$$x = x\sqrt{b} = \frac{x}{x_0} \rightarrow \frac{d^2y}{dx^2} + \left(l - x^2\right)y = 0 \text{ ....(06)}$$

2.1. Solusi Asimptotik

Apabila dicoba untuk kasus bahwa: $x \rightarrow \infty$ dan oleh karenanya l menjadi kecil dalam kasus itu, maka persamaan Schrödinger asimptotik menjadi:

$$x \rightarrow \pm\infty \Rightarrow \frac{d^2y_\infty}{dx^2} - x^2 y_\infty = 0 \text{ ....(07)}$$

Apabila dicobakan solusi umum asimptotik untuk persamaan diferensial seperti itu berbentuk:

$$\left.\begin{aligned} y_\infty(x) = \exp\left[e x^2\right] \rightarrow \frac{dy_\infty}{dx} &= 2e\,x\,y_\infty \\ \rightarrow \frac{d^2y_\infty}{dx^2} &= \left(4e^2x^2 + 2e\right)y_\infty \\ \rightarrow \frac{d^2y_\infty}{dx^2} &\approx 4e^2x^2y_\infty \end{aligned}\right\} \text{ ....(08)}$$

Ketika hasil akhir persamaan (08) dimasukkan ke dalam persamaan (07) akan diperoleh persamaan ciri (karakteristik) yang menentukan nilai e dan <u>solusi umum asimptotik</u> dalam bentuk:

$$e = \pm\tfrac{1}{2} \rightarrow y_\infty(x) = C_1 \exp\left[-\tfrac{1}{2}x^2\right] + C_2 \exp\left[+\tfrac{1}{2}x^2\right] \text{ ....(09)}$$

Pada $x \rightarrow \pm\infty$ nilai $y_\infty(x)$ harus berhingga, maka nilai C_2 harus lenyap karenanya, dan C_1 dapat diganti dengan nilai satu untuk sementara, maka <u>solusi khusus asimptotik</u> (09) menjadi:

$$y_\infty(x) = \exp\left[-\tfrac{1}{2}x^2\right] \text{ ....(10)}$$

2.2. Solusi Umum

Berdasarkan hasil pendekatan asimptotik, pemecahan masalah kembali kepada solusi tanpa pendekatan asimptotik dengan mencobakan solusi umum berbentuk:

$$y(x) = y_\infty(x)u(x) \text{ ....(11)}$$

Pernyataan (11) dimasukkan ke dalam persamaan (07) dengan terlebih dahulu menyelesaikan langkah-langkah berikut:

$$\left.\begin{aligned}
\frac{d}{dx}\left(e^{-\frac{1}{2}x^2}u(x)\right) &= \left(\frac{du}{dx} - xu\right)e^{-\frac{1}{2}x^2} \\
\frac{d^2}{dx^2}\left(e^{-\frac{1}{2}x^2}u(x)\right) &= \frac{d}{dx}\left(\left(\frac{du}{dx} - xu\right)e^{-\frac{1}{2}x^2}\right) \\
&= \left(\left(\frac{d^2u}{dx^2} - u\right) - x\left(\frac{du}{dx} - xu\right)\right)e^{-\frac{1}{2}x^2} \\
&= \left(\frac{d^2u}{dx^2} - x\frac{du}{dx} + \left(x^2 - 1\right)u\right)e^{-\frac{1}{2}x^2}
\end{aligned}\right\} \quad \text{............(12)}$$

sehingga persamaan Schrödinger menjadi:

$$\frac{d^2u}{dx^2} - 2x\frac{du}{dx} + (\,l\, - 1)\,u = 0 \quad \text{..(13)}$$

Gunakanlah solusi umum yang memiliki bentuk deret seperti berikut:

$$u(x) = \sum_{k=0} b_k x^k = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + b_3 x^3 + b_4 x^4 + \ldots.. \quad \text{............(14)}$$

Turunan pertamanya terhadap x adalah:

$$\left.\begin{aligned}
\frac{du}{dx} &= b_1 + 2b_2 x + 3b_3 x^2 + 4b_4 x^3 + \ldots\ldots \\
2x\frac{du}{dx} &= 2b_1 x + 4b_2 x^2 + 8b_4 x^4 + \ldots\ldots\ldots
\end{aligned}\right\} \quad \text{..................................(15)}$$

Turunan keduanya terhadap x adalah:

$$\frac{d^2u}{dx^2} = 2b_2 + 6b_3 x + 12b_4 x^2 + \ldots\ldots \quad \text{...(16)}$$

Apabila pernyataan (16), (15), dan (14) dimasukkan ke dalam persamaan (13) dengan proses pengelompokkan berdasarkan koefisien dari kepangkatan dari x^k, seperti berikut:

$$(16) \rightarrow \frac{d^2u}{dx^2} = 2b_2 + 6b_3 x + 12b_4 x^2 + ...$$

$$(15) \rightarrow -2x \frac{du}{dx} = -2b_1 x - 4b_2 x^2 - 8b_4 x^4 - ....$$

$$(14) \rightarrow (l-1)u = (l-1)b_0 + (l-1)b_1 x + (l-1)b_2 x^2 + (l-1)b_3 x^3 + ...$$

Diperoleh bahwa koefisien untuk setiap x^k berturut-turut adalah:

$$x^0 \rightarrow (2b_2 + (l-1)b_0) = 0 \qquad \text{(17)}$$

$$x^1 \rightarrow (6b_3 - 2b_1 + (l-1)b_1) = 0 \qquad \text{(18)}$$

$$x^2 \rightarrow (12b_4 - 4b_2 + (l-1)b_2) = 0 \qquad \text{(19)}$$

$$x^k \rightarrow ((k+2)(k+1)b_{k+2} - b_k(2k+1-l)) \qquad \text{(20)}$$

Sehingga persamaan (13) dapat ditulis menjadi:

$$\sum_k x^k \left[(k+2)(k+1)b_{k+2} - (2k+1-l)b_k\right] = 0 \qquad \text{(21)}$$

Dari koefisien untuk masing-masing x^k (17, 18, 19, dan 20) diperoleh persamaan rekursi seperti berikut:

$$b_{k+2} = b_k \frac{(2k+1-l)}{(k+2)(k+1)} \qquad \text{(22)}$$

Tampak bahwa deret pada (21) akan berupa deret pangkat genap apabila nilai *k* terkecil bersifat genap, dan akan berupa deret pangkat ganjil apabila nilai *k* terkecil bersifat ganjil.

Jika nilai *k* mulai dari suatu bilangan $k > (l-1)/2$ dan tanpa batas akhir, maka setiap suku akan bernilai positif akibatnya deret akan divergen pada $x \rightarrow \infty$. Solusi seperti itu tidak termasuk dalam maksud penyelesaian kita. Oleh karena itu, agar memenuhi syarat batas bahwa pada $x \rightarrow \infty$ solusi menjadi konvergen, yaitu: $y = 0$, maka diperlukan terminasi nilai maksimum dari *k*, yaitu: $k_{max} = n$, sedemikian rupa sehingga pada persamaan rekursi (22) harus berlaku bahwa untuk: $b_n \neq 0$ akan menghasilkan $b_{n+2} = 0$. Satu-satu jalan agar persyaratan itu terpenuhi, maka pembilang pada persamaan (22) harus lenyap ketika $k_{max} = n$, yaitu harus berlaku bahwa $l = 2n + 1$. Apabila hasil ini dikembalikan kepada persamaan (05), maka akan diperoleh pernyataan berikut:

$$E_n = \hbar w \left(n + \tfrac{1}{2}\right);\ n = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots\ldots \qquad (23)$$

Dalam proses pemecahan ini ternyata nilai diri (eigen value) diperoleh lebih dahulu dari pada fungsi dirinya. Pada pernyataan (23) telah diperoleh nilai diri yang memiliki tingkat dasar, yaitu ketika $n = 0$, $E_0 = \frac{1}{2}\,\hbar\,\omega$, yang merupakan energi osilator harmonik tingkat dasar.

Penerapan hubungan $l = 2n + 1$ pada persamaan rekursi (22) akan diperoleh:

$$\left.\begin{aligned}
& b_{k+2} = b_k \frac{(2k+1-l)}{(k+2)(k+1)} \rightarrow b_{k'} = b_{k'+2} \frac{(k'+2)(k'+1)}{(2k'+1-2n-1)} \\
& b_{k'} = -\,b_{k'+2} \frac{(k'+2)(k'+1)}{2(n-k')};\ \text{dengan } k' \rightarrow k-2,\ \text{maka} \\
& b_{k-2} = -b_k \frac{k(k-1)}{2(n-k+2)};\ \text{dengan } k \le n
\end{aligned}\right\} \qquad (24)$$

Mengingat bahwa $k_{max} = n$, dan penerapan $b_n = 2^n$ (pemilihan ini masih bersifat penyesuaian), terhadap rumusan akhir pada persamaan (24) akan diperoleh:

$$\left.\begin{aligned}
& b_{n-2} = -2^n \frac{n(n-1)}{4} = -\,2^{n-2} \frac{n(n-1)}{1!} \\
& b_{n-4} = -\,b_{n-2} \frac{(n-2)(n-3)}{8} = \left(2^{n-2} \frac{n(n-1)}{1!}\right)\left(\frac{(n-2)(n-3)}{8}\right) \\
& b_{n-4} = 2^{n-4} \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!};\ \text{dst}
\end{aligned}\right\} \qquad (25)$$

Penggunaan persamaan rekursi (24) pada solusi umum (14) akan menjadi:

$$\left.\begin{aligned}
& (14) \rightarrow \sum_{k=0} b_k x^k = b_0 x^0 + b_1 x^1 + b_2 x^2 + \ldots\ldots \\
& u(x) = \sum_{n=0} b_n x^n = \begin{cases} b_0 + b_2 x^2 + b_4 x^4 + \ldots\ldots \\ b_1 x + b_3 x^3 + b_5 x^5 + \ldots\ldots \end{cases}
\end{aligned}\right\} \qquad (26)$$

atau

$$
\begin{aligned}
u(x) = (2x)^n &- \frac{n(n-1)}{1!}(2x)^{n-2} \\
&+ \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}(2x)^{n-4} - .... + \begin{cases} b_0 \text{ untuk } n \text{ genap} \\ b_1 x \text{ untuk } n \text{ ganjil} \end{cases}
\end{aligned}
\qquad ....(27)
$$

$$
\left.
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^*(x)\psi_n(x)\,dx = 1 \rightarrow \int_0^{2\pi} AA^*\left(\frac{1}{k}\right) d(kx) = 1 \\
&AA^*\left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)(2\pi) = 1 \rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{\lambda}} \rightarrow \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\lambda}}\exp\left[i\frac{2\pi}{\lambda}nx\right]
\end{aligned}
\right\}
\qquad ....(08)
$$

Pernyataan akhir dari persamaan (08) itulah yang merupakan solusi khusus dari persamaan Schrödinger bagi zarrah yang bergerak bebas dan disebut sebagai fungsi diri (eigen function). Hasil telaah terhadap nilai petala *n*, nilai diri E_n, dan fungsi diri ψ_n dimuat dalam Tabel-1.

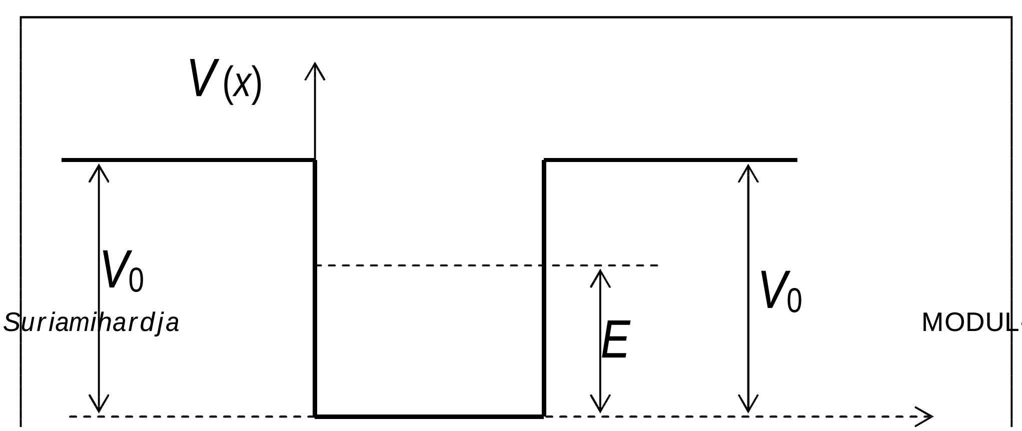
Tabel-1 Solusi persamaan Schrödinger beserta petala (tingkatan energi) gerak zarrah bebas

Petala (aras)	Nilai Diri	Fungsi Diri
$n = 1$	$E_1 = \dfrac{h^2}{2m_0\ l^2}$	$y_1(x) = \dfrac{1}{\sqrt{l}} e^{i\frac{2p}{l}x}$
$n = 2$	$E_2 = \dfrac{4h^2}{2m_0\ l^2}$	$y_2(x) = \dfrac{1}{\sqrt{l}} e^{i2\left(\frac{2p}{l}\right)x}$
$n = 3$	$E_3 = \dfrac{9h^2}{2m_0\ l^2}$	$y_3(x) = \dfrac{1}{\sqrt{l}} e^{i3\left(\frac{2p}{l}\right)x}$
$n = 4$	$E_4 = ...$	$y_4(x) = ...$

Barisan petala *n* menjelaskan bahwa energi gerak zarrah bebas, tidak lagi bersifat kontinyu, tetapi hanya boleh yang bernilai sesuai dengan urutan pembesaran bilangan bulat: 1, 2, 3, 4, dst. Tidak ada energi yang diperbolehkan di antara selang selang bilangan bulat itu. Kondisi seperti inilah yang merupakan gambaran kwantisasi energi tercatu (diskrit) dalam mekanika kwantum, sehingga berbeda dengan gambaran energi total dalam mekanika klasik yang bersifat kontinyu.

2.1. Gerak Zarrah Dalam Potensial Sumur [$V(x) \neq 0$]

Potensial yang berpengaruh pada gerak zarrah berenergi *E* terbagi menurut tiga bentangan, yaitu: bentangan tengah tidak memiliki potensial, sedangkan bentangan kiri dan kanan memiliki potensial V_0 yang lebih besar dari nilai *E*. Gambaran potensial yang dimaksud dapat dilihat pada Gambar-1 dan Tabel-2.



Gambar-1 Potensial bergantung pada x (potensial sumur) yang berpengaruh pada gerak zarrah

Tabel-2 Bentangan potensial sumur pada sumbu x yang berpengaruh pada gerak zarrah

Selang Bentangan	Potensial	Penamaan Bentangan
- ¥ < x < 0	$V(x) = V_0$	Wilayah-I
0 < x < ℓ	$V(x) = 0$	Wilayah-II
ℓ < x < + ¥	$V(x) = V_0$	Wilayah-III

Berdasarkan Gambar-1 dan Tabel-2 dapat dituliskan persamaan Schrödinger dengan rincian persamaan ciri dan solusi umumnya pada setiap wilayah. Tampak jelas gelagat solusi umum untuk wilayah-2 dan wilayah-3 memperlihatkan kemiripan, yaitu akan berupa fungsi-fungsi exponensial, sedangkan untuk wilayah-2 solusi umumnya akan berbentuk fungsi osilator. Apabila nilai keberlakuan potensial V_0 yang berpengaruh dan energi zarrah E dalam tinjauan ini memenuhi kriteria $0 < E < V_0$, maka gambaran penurunan solusi umumnya dapat dilihat pada Tabel-3.

Tabel-3 Persamaan Schrodinger beserta solusi umumnya pada tiga wilayah potensial

Wilayah-1 - ¥ < x < 0	Wilayah-2 **0** < x < ℓ	Wilayah-3 ℓ < x < + ¥
$y_1'' + k_1^2 y_1 = 0$	$y_2'' + k_2^2 y_2 = 0$	$y_3'' + k_3^2 y_3 = 0$
$k_1^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E - V_0\right]$	$k_2^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}E$	$k_3^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E - V_0\right]$
$k = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}\left[V_0 - E\right]}$	$k = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}E}$	$k = \sqrt{\frac{2m_0}{\hbar^2}\left[V_0 - E\right]}$
$y_1 = A_1 e^{kx} + B_1 e^{-kx}$	$y_2 = A_2 \sin kx + B_2 \cos kx$	$y_3 = A_3 e^{kx} + B_3 e^{-kx}$

Syarat batas bagi solusi umum pada wilayah-1 adalah apabila $x \to -\infty$, nilai y_1 tetap harus berhingga, maka B_1 harus bernilai 0. Sebaliknya syarat batas bagi solusi umum pada wilayah-3 adalah apabila $x \to +\infty$, nilai y_3 tetap harus berhingga, maka A_3 harus bernilai 0. Dengan persyaratan ini, maka solusi umum pada wilayah-1 dan wilayah-3 menjadi:

$$\left.\begin{aligned} y_1(x) &= A_1 \exp\left[x\sqrt{\tfrac{2m_0}{\hbar^2}\left(V_0 - E\right)}\right] \\ y_3(x) &= B_3 \exp\left[-\left(x - \mathbf{l}\right)x\sqrt{\tfrac{2m_0}{\hbar^2}\left(V_0 - E\right)}\right] \end{aligned}\right\} \text{..............................(09)}$$

Pencarian solusi khusus dalam kondisi seperti ini dapat dilanjutkan sendiri dengan menerapkan syarat kontinuitas pada x= 0 antara y_1 dan y_2, dan pada x= ℓ antara y_2 dan y_3. Dalam modul ini akan difokuskan pada kasus $x \to +\infty$, dan $V_0 \to +\infty$, sehingga pernyataan (09) menjadi lenyap. Kelenyapan pernyataan (09) membentuk syarat batas baru bagi solusi umum pada wilayah-2, yaitu:

$$\left.\begin{aligned} &y_2(x) = A_2 \sin kx + B_2 \cos kx \\ &y_2(x=0) = B_2 \cos k \cdot 0 = B_2 = 0 \\ &y_2(x=\mathbf{l}) = A_2 \sin k\mathbf{l} = 0 \to \sin k\mathbf{l} = 0;\ A_2 \neq 0 \end{aligned}\right\} \text{.........................(10)}$$

Nilai diri (eigen value) dapat diperoleh dari persamaan (10), yaitu:

$$k\,\mathbf{l} = np \to k^2 = \left(\tfrac{np}{\mathbf{l}}\right)^2 \to \frac{2m_0 E}{\hbar^2} = \left(\tfrac{np}{\mathbf{l}}\right)^2 \to E_n = \frac{1}{2m_0}\left(\frac{np\hbar}{\mathbf{l}}\right)^2 \text{...........(11)}$$

Nilai bilangan bulat (integer) n = 1, 2, 3, 4, ………. Solusi umum pada wilayah-2 sehubungan dengan nilai diri pada pernyataan (11) menjadi:

$$y_n(x) = A_n \sin\left[\left(\frac{np}{\mathbf{l}}\right)x\right] \text{..(12)}$$

Dalam hal ini telah terjadi penggantian A_2 oleh A_n dan y_2 oleh y_n sesuai dengan nilai diri yang telah diperoleh dan sehubungan dengan tidak ada lagi y_1 dan y_3 sebagai solusi dari wilayah-1 dan wilayah-3. Satu buah syarat lagi yang dapat memberikan nilai terhadap A_n adalah syarat normalitas, yaitu:

$$\left.\begin{aligned} &\int_0^{\mathbf{l}} y_n^{*} y_n\,dx = A_n^{\,2}\int_0^{\mathbf{l}} \sin^2\left(np\,\tfrac{x}{\mathbf{l}}\right)dx = 1 \\ &A_n^{\,2}\int_0^{\mathbf{l}} \tfrac{1}{2}\left(1 - \cos\left(2np\,\tfrac{x}{\mathbf{l}}\right)\right)dx = \tfrac{1}{2}A_n^{\,2}\mathbf{l} = 1 \to A_n = \sqrt{\tfrac{2}{\mathbf{l}}} \end{aligned}\right\} \text{...................(13)}$$

Dengan perolehan pada pernyataan (13), maka fungsi diri gerak zarrah dalam sumur potensial dapat dituliskan menjadi:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\tfrac{2}{\lambda}}\sin\left(n\pi \tfrac{x}{\lambda}\right)\text{...}(14)$$

Sampai di sini telah diperoleh sejumlah solusi khusus sebagai fungsi diri sesuai dengan nilai dirinya untuk setiap petala, setelah memenuhi serangkaian syarat batas dan normalitas. Hasil perolehan tersebut dapat dilihat pada Tabel-4.

Tabel-4 Petala nilai diri dan fungsi diri gerak zarah dalam sumur potensial

Petala (aras)	Nilai Diri	Fungsi Diri
$n = 1$	$E_1 = \frac{1}{2m_0}\left(\frac{\pi\hbar}{\lambda}\right)^2$	$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{\lambda}}\sin\left[\pi \frac{x}{\lambda}\right]$
$n = 2$	$E_2 = \frac{4}{2m_0}\left(\frac{\pi\hbar}{\lambda}\right)^2$	$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{\lambda}}\sin\left[2\pi \frac{x}{\lambda}\right]$
$n = 3$	$E_3 = \frac{9}{2m_0}\left(\frac{\pi\hbar}{\lambda}\right)^2$	$\psi_3(x) = \sqrt{\frac{2}{\lambda}}\sin\left[3\pi \frac{x}{\lambda}\right]$
$n = 4$	$E_4 =$	$\psi_4(x) =$ ....

3. Penutup