4 RUANG FUNGSI GELOMBANG PARTIKEL TUNGGAL *(ONE-PARTICLE WAVE FUNCTION SPACE)*

Interpretasi probabilistik dari fungsi gelombang $\psi(r,t)$ suatu partikel telah kita pelajari yaitu $|\psi(r,t)|^2 d^3r$ yang menyatakan peluang menemukan partikel pada waktu t disekitar r di dalam volume d^3r = dxdydz. Peluang total menemukan partikel di suatu tempat dalam ruang sama dengan satu.

$$\int_{seluruh\ ruang} |\psi(r,t)|^2 d^3r = 1 \tag{4.1}$$

A. Struktur Dari Suatu Ruang Fungsi Gelombang *f*

1. *f* sebagai vektor space

Dengan mudah dapat ditunjukkan bahwa *f* memenuhi seluruh kriteria sebagai vektor space. Contoh jika $\psi_1(r)$ dan $\psi_2(r)$ adalah elemen dari *f* maka:

$$\psi(r) = \lambda_1\psi_1(r) + \lambda_2\psi_2(r) \in f \tag{4.2}$$

dengan $\lambda_1$dan λ_2 adalah dua bilangan kompleks.

2. Produk skalar

Definisi :

$$(\varphi,\psi) = \int_{seluruh\ ruang} \varphi^*(r)\psi(r)d^3r \ \ldots 3D \tag{4.3}$$

$$(\varphi,\psi) = \int \varphi^*(x)\psi(x)dx \ \ldots.1D \tag{4.4}$$

(φ,ψ) adalah produk skalar dari $\psi(r)$ oleh $\varphi(r)$ (integral ini selalu konvergen jika φ dan $\psi \in f$).

Sifat-sifat Produk Skalar :

1. $(\varphi,\psi)^* = (\psi,\varphi)$
2. $(\varphi,\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi,\psi_1) + \lambda_2(\varphi,\psi_2)$ linier

3. $(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \psi) = \lambda_1^*(\varphi_1, \psi) + \lambda_2(\varphi_2, \psi)$ anti linier

4. Jika $(\varphi, \psi) = 0$ maka dikatakan φ dan ψ ortogonal satu sama lain

5. $(\psi, \psi) = \int |\psi(r)|^2 d^3 r = 1$ disebut ternormalisasi

6. $(\psi, \psi) = \int |\psi(r)|^2 d^3 r$ menghasilkan bilangan real dan positif dan akan berharga nol jika dan hanya jika $\psi(r) = 0$

7. $\sqrt{(\psi, \psi)}$ disebut Norm dari $\psi(r)$

B. Operator Linier

Definisi: Operator linier A adalah suatu besaran matematik yang berasosiasi dengan setiap fungsi $\psi(r) \in f$ menghasilkan fungsi lain $\psi'(r)$ dengan korespondensi linier.

$$A\psi(r) = \psi'(r) \tag{4.5}$$

$$A[\lambda_1\psi_1(r) + \lambda_2\psi_2(r)] = \lambda_1 A\psi_1(r) + \lambda_2 A\psi_2(r) \tag{4.6}$$

1. Beberapa contoh operator linier :

a. Operator Paritas Π

   Definisi   Πψ(x,y,z) = ψ (-x,-y,-z)

b. Operator Differensial

   Definisi $D_x\psi(x, y, z) = \dfrac{\partial \psi(x, y, z)}{\partial x}$

c. Perkalian dengan suatu fungsi V(x)

   Definisi Xψ(x,y,z) = xψ (x,y,z)

d. Perkalian dengan suatu konstanta

   Dua operator A dan B disebut sama A = B jika hasil opperasinya terhadap fungsi yang mana saja adalah identik.

2. Jumlah Operator

Definisi

$(A + B)\psi = A\psi + B\psi$ konsekuensinya

$$A + B + C = (A + B) + C = A + (B + C)$$

Bila $A + B = B + A$ maka disebut komut.

3. Perkalian operator-operator

Misalkan $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ adalah dua operator linier, maka perkalian A dan B didefinisikan sebagai berikut:

$$(\hat{A}\hat{B})\psi(x) = \hat{A}[\hat{B}\psi(x)] \tag{4.7}$$

urutannya: pertama $\hat{B}$ bekerja terlebih dahulu pada $\psi(x)$ yang menghasilkan $\varphi(x) = B\psi(x)$, berikutnya baru $\hat{A}$ beroperasi pada fungsi baru $\varphi(x)$.

Sifat-sifat: $\hat{A}\hat{A} = \hat{A}^2$

$$\hat{A}\hat{A}\hat{A} = \hat{A}^3$$

$$ABC = A(BC) = (AB)C$$

C. Sifat Tak Komutatif Perkalian Operator

Secara umum $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$

Contoh: $\hat{A} = \hat{x}$ dan $\hat{B} = \frac{d}{dx}$

$$\hat{A}\hat{B}\psi(x) = x\frac{d\psi(x)}{dx}$$

$$\hat{B}\hat{A}\psi(x) = \frac{d}{dx}x\psi(x) = \psi\frac{dx}{dx} + x\frac{d\psi}{dx} = \left(1 + x\frac{d}{dx}\right)\psi$$

Jadi $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$

Selanjutnya karena berlaku untuk setiap ψ maka dapat ditulis

$$\frac{d}{dx}x = 1 + x\frac{d}{dx}$$

$x\frac{d}{dx} - \frac{d}{dx}x = -1$ kalikan kedua ruas dengan $\frac{\hbar}{i}$

$$x\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx} - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}x = \hbar i$$

$XP - PX = \hbar i$ dengan $P = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$ disebut operator momentum.

Jadi operator X dan P tak komut XP ≠ PX.

D. Komutator Dari Operator-Operator

Komutator dari operator A dan B dituliskan [A,B] dan didefinisikan:

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\,. \qquad (4.8)$$

Bila A dan B komut maka $[\hat{A},\hat{B}] = 0$

Contoh: $[A,\lambda] = 0$ dengan λ konstanta

$[A,f(A)] = 0$

$[X,V(x)] = 0$

$[P,X] = 0$

Sifat-sifat Komutator

1. [A,B] = - [B,A]
2. [A,B + C] = [A,B] + [B,A]
3. [A,BC] = B [A,C] + [A,B] C
4. [A.k] =0 dengan k konstanta
5. [A + B,C] = {A,C] + [B,C]
6. [AB,C] = [A,C] B + A [B,C]
7. [A,[B,C]] + [B,[C,A]] + [C,[A,B]] = 0

Contoh pembuktian : Buktikanlah sifat komutator ke 3

[A,BC] = ABC – BCA

= ABC – BCA + BAC – BAC

= BAC – BCA + ABC – BAC

= B[A,C] + [A,B]C

Latihan!

1. Buktikan sifat-sifat komutator yang lainnya
2. Hitung komutator dari [X,Dx]
3. Hitunglah $[X,P^2]$, $[X^2,P]$, $[X^2,P^2]$
4. Buktikanlah $[X,P^n] = n\,P^{n-1}\,i\hbar$
5. Buktikanlah $[X^n,P] = n\,X^{n-1}\,i\hbar$
6. Hitung $[Dx,X^2]\,\psi(x) = 2\,X\,\psi(x)$
7. Buktikanlah [A,1/B] = -(1/B) [A,B] (1/B)

E. Basis Ortonormal Diskrit Dalam Ruang Fungsi Gelombang *(Wave Function Space)*

1. Definisi

Tinjau satu set terhitung pada *f* yang ditandai oleh indeks diskrit I (I= 1,2,3,4,…,n) dan U_1 (r), U_2 (r), U_3 (r),…, U_n (r) $\in f$. Set {U_i (r)} adalah ortonormal jika:

$$(U_i, U_j) = \int U_i^*(r) U_j(r) d^3 r = \delta_{ij} \tag{4.9}$$

dengan δ_{ij} adalah fungsi delta kronecker dimana $\delta_{ij} \begin{cases} =1 & untuk\ i=j \\ =0 & untuk\ i \neq j \end{cases}$

Set {U_i (r)} merupakan basis jika setiap fungsi $\psi(r) \in f$ dapat diekspansikan (dijabarkan) dalam term U_i (r) atau:

$$\psi(r) = \sum_{i=1}^{N} C_i U_i(r) \tag{4.10}$$

bila U_i (r) merupakan basis maka fungsi $\psi(r) \in f$ dinamakan fungsi lengkap *(complete set of function.*

2. Komponen-komponen Suatu Fungsi Gelombang dalam Basis U_i

Kalikan persamaan $\psi(r) = \sum_{i=1}^{N} C_i U_i(r)$ dengan Uj (r) dan integrasikan meliputi seluruh ruang.

$$(U_j, \psi) = \left(U_j, \sum_i C_i U_i \right) = \sum_i C_i (U_j, U_i) = \sum C_{ii} \delta_{ij} \tag{4.11}$$

bila i = j maka:

$$(U_j, \psi) = \sum C_j \delta_{jj} = C_j . \tag{4.12}$$

yang menyatakan komponen ke C_j dari ψ(r). Dengan cara yang sama maka diperoleh:

$$(U_i, \psi) = C_i = \int U_i^*(r) \psi(r) d^3 r \tag{4.13}$$

adalah komponen ke C_i dari ψ(r) yang sama dengan produk skalar ψ(r) oleh U_i. Set bilangan C_i dikatakan merepresentasikan ψ(r) dalam basis U_i(r).

3. Produk Skalar dalam Term Komponen-komponennya

Misal φ(r) dan ψ(r) adalah dua fungsi gelombang yang dijabarkan dalam basis-basisnya sebagai berikut:

$$\varphi(r) = \sum_i b_i U_i(r) \text{ dan } \psi(r) = \sum_j c_j U_j(r) \quad (4.14)$$

produk skalarnya adalah:

$$(\varphi,\psi) = \sum_i b_i U_i(r), \sum_j c_j U_j(r) \quad (4.15)$$

$$= \sum_i \sum_j b_i^* c_j \left(U_i(r), U_j(r)\right) = \sum_i \sum_j b_i c_j \delta_{ij} \quad (4.16)$$

untuk harga i = j maka :

$$\sum_i b_i^* c_i \,. \quad (4.17)$$

Dengan cara yang sama akan diperoleh:

$$(\psi,\psi) = \sum_i |c_i|^2 \quad (4.18)$$

Jadi produk skalar dari fungsi gelombang (atau kuadrat dari norm suatu fungsi gelombang) dapat disederhanakan dalam term komponen-komponen dari fungsi gelombang tersebut dalam basis {U_i(r)}.

4. Relasi Closure

Hubungan $(U_i, U_j) = \int U_i^*(r) U_j(r) d^3r = \delta_{ij}$ disebut ortonormal yang menyatakan bahwa fungsi-fungsi yang dinyatakan dengan basis U_i(r) ternormalisasi dan ortogonal satu sama lain. Jika U_i(r) adalah basis dalam f maka setiap fungsi gelombang ψ(r) ∈ *f* dapat dijabarkan ke dalam komponennya sebagai berikut:

$$\psi(r) = \sum_i c_i U_i(r) \quad (4.19)$$

sedangkan $c_i = (U_i, \psi)$ maka :

$$\psi(r) = \sum_i (U_i, \psi) U_i(r) = \sum_i \left[\int U_i^*(r') \psi(r') d^3r'\right] U_i(r), \quad (4.20)$$

tukarkan letak Σ dan $\int d^3r$ sehingga :

$$\psi(r) = \int d^3r \psi(r') \left[\sum U_i(r) U_i^*(r')\right], \quad (4.21)$$

persamaan yang berada dalam kurung persegi merupakan fungsi yang dinamakan fungsi karakteristik $\delta(r - r')$ atau:

$$\delta(r - r') = \sum U_i(r) U_i^*(r'). \quad (4.22)$$

Hubungan tersebut dinamakan relasi Closure. Sehingga :

$$\psi(r) = \int d^3r'\psi(r')\delta(r - r') \qquad (4.23)$$

Kebalikannya jika set ortonormal $\{U_i(r)\}$ memenuhi relasi Closure maka $U_i(r)$ merupakan basis. Setiap fungsi $\psi(r)$ dapat ditulis dalam bentuk pers.(4.23). Dengan mempertukarkan letak sumasi dan integral pers.(4.21), maka:

$$\psi(r) = \sum_i \left[\int U_i^*(r')\psi(r')d^3r'\right] U_i(r), \qquad (4.24)$$

$$= \sum_i (U_i, \psi) U_i(r) = \sum_i c_i U_i(r) \qquad (4.25)$$

Jadi $\{U_i(r)\}$ merupakan basis.

5. Operator Adjoint (Setangkup Hermit) dan Operator Hermit.

Terkait dengan suatu operator Â adalah suatu operator yang dinamakan operator Adjoint atau setangkup hermitnya, notasinya A^+.

Definisi :

$$(\Psi, A^+\varphi) = (A\Psi, \varphi) \qquad (4.26)$$

untuk setiap Ψ dan φ. Dalam bentuk integral menjadi:

$$\int \Psi^* A^+ \varphi \, dx = \int (A\Psi)^* \varphi \, dx \qquad (4.27)$$

Jadi suatu operator dalam produk skalar boleh kita pindahkan dari suatu ruang ke ruang lainnya, namun dalam pemindahan itu operator tersebut harus digantikan dengan setangkup hermitnya (Adjointnya).

Contoh : $(\lambda)^+ = \lambda^*$, dengan λ bilangan kompleks

$X^+ = X$

$(d/dx)^+ = - d/dx$, buktikan !

Bukti :

$(\Psi, (d/dx)^+ \varphi) = (d\Psi/dx, \varphi) = \int (d\Psi/dx)^* \varphi \, dx$

$= \int d\Psi^*/dx \, \varphi \, dx = \Psi^* \varphi \big|_{-\Box} - \int \Psi^* \, d\varphi/dx \, dx$

$= \varnothing + \int \Psi^* (-d/dx) \varphi \, dx$

$= (\Psi, (-d/dx) \varphi$

jadi $(d/dx)^+ = - d/dx$ (terbukti)

Sifat-sifat lainnya :

$$(A^+)^+ = A \tag{4.28}$$

$$(\lambda A)^+ = \lambda^* A^+ \tag{4.29}$$

$$(A + B)^+ = A^+ + B^+ \tag{4.30}$$

$$(A B)^+ = B^+ A^+ \tag{4.31}$$

konjugasi hermit dari perkalian dua operator sama dengan perkalian operator konjugasi hermitnya dengan menukarkan letak tempatnya.

Buktikan $(A B)^+ = B^+ A^+$

Bukti :

$(AB \varphi , \Psi) = (\varphi , (AB)^+\Psi)$ tetapi juga

$(AB \varphi , \Psi) = (B\varphi , A^+\Psi) = (\varphi, B^+ (A^+\Psi))$

$= (\varphi, B^+A^+\Psi)$, maka

$(\varphi , (AB)^+\Psi) = (\varphi , B^+A^+\Psi)$ atau

$(AB)^+ = B^+A^+$ terbukti.

Operator-operator yang sama dengan setangkup hermitnya dinamakan *operator Hermit*, $\hat{A} = A^+$. Contoh operator hermit bilangan real, X, V(x) dan P.

Contoh : Buktikan Operator P adalah Hermit !

$P^+ = [\hbar/i \, . \, d/dx]^+ = [\hbar/i\,]^+ \, [d/dx]^+ = -\hbar/i \; . \; -d/dx$

$= \hbar/i. \, d/dx$

$= P$ terbukti.

Untuk operator Hermit berlaku:

$$(\Psi , A\varphi) = (A\Psi , \varphi) \tag{4.32}$$

Karena operator-operator besaran dinamis (posisi, momentum) bersifat hermit maka operator V(x) dan K juga hamiltonian bersifat Hermit. (Buktikan!).

Soal : Buktikanlah i[A,B] adalah Hermit jika A dan B hermit!

6. Operator invers

Jika $\varphi = A\ \Psi$ dan $\Psi = B\ \varphi$ maka operator B tersebut operator invers dari A dan dinotasikan dengan A^{-1}.

Beberapa sifat operator invers :

$$A^{-1} A = A A^{-1} = 1 \quad (4.33)$$

$$(A^{-1})^{-1} = A \quad (4.34)$$

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1} \quad (4.35)$$

Buktikanlah pers.(4.35)!

7. Operator Uniter

Jika suatu operator U setangkup hermitnya sama dengan inversnya $U^{+}=U^{1}$, maka operator U disebut operator uniter, maka untuk operator uniter :

$$U^{+}U = U U^{+} = 1. \quad (4.36)$$

Sifat operator uniter tidak mengubah nilai produk skalarnya.

Contoh soal :

a. Buktikan $(U\Psi, U\varphi) = (\Psi, \varphi)$

Bukti : $(U\Psi, U\varphi) = (U^{+}U\Psi, \varphi) = (\Psi, \varphi)$ qed.

b. Jika H adalah operator Hermit, buktikanlah bahwa :

$U = \dfrac{1+iH}{1-iH}$ adalah operator uniter

jawab

$U = \dfrac{1+iH}{1-iH}$ karena H hermit maka dapat ditulis:

$U(1 - iH) = (1 + iH)$..............(*)

$(1 - iH)U = (1 + iH)$..............(**)

kalikan persamaan (*) dengan U^{+} dari sebelah kiri

$U^{+}U(1 - iH) = U^{+}(1 + iH)$.....(***)

Ambillah adjoint persamaan (**)

$[(1 - iH)U]^{+} = (1 + iH)^{+}$

$U^{+}(1 - iH)^{+} = (1 - iH)$...........(****)

Dari persamaan (***) dan (****) diperoleh :

$U^{+}U = 1$ jadi U adalah operator uniter.

8. Fungsi Eigen dan Harga Eigen

$$A\ \Psi_a = a\ \Psi_{a.} \tag{4.37}$$

$$AC\ \Psi_a = CA\ \Psi_a = C\ a\ \Psi_a = a\ C\ \Psi_a \tag{4.38}$$

9. Nilai Eigen Operator Hermit

Bila operator yang bekerja pada fungsi eigen berupa operator hermit maka:

1. Nilai eigennya semua real
2. Fungsi-fungsi eigennya dari nilai eigen yang berbeda orthogonal sesamanya.

Misalkan set nilai eigen {a} dari operator Hermit A seluruhnya diskrit dan tak berdegenerasi dan bila dipilih fungsi-fungsi eigen yang ternormalisasi maka akan diperoleh suatu set yang fungsi eigen { Ψ_a } dari A yang ortonormal.

$$(\ \Psi_a\ ,\ \Psi_a\ )\ =\ \delta_{aa'} \tag{4.39}$$

Apabila A yang Hermit itu adalah operator dari suatu besaran dinamis, kita selalu pula akan menambahkan bahwa set itu lengkap, yaitu fungsi gelombang $\Psi(x)$ sistem dapat dijabarkan terhadap set tersebut.

$$\Psi(x) = \Sigma\ \lambda_a\ \Psi_a \tag{4.40}$$

Untuk nilai-nilai eigen kontinu orthonormalitas itu masih bisa dipertahankan namun sekarang dalam bentuk orthonormalitas Dirac.

Contoh :

$\Psi(x) = 1/\ \sqrt{2\pi\hbar} \int \varphi(p)\ e^{ipx/\hbar}\ dp$ dengan $\Psi(p) = 1/\ \sqrt{2\pi\hbar} \int \varphi(x)\ e^{ipx/\hbar}\ dx$ adalah fungsi eigen dari operator momentum P Ψ_p (x) = p Ψ_p (x) yang menunjukkan nilai eigennya adalah p.