PENDAHULUAN

Di dalam modul ini Anda akan mempelajari aplikasi Fisika Kuantum dalam fisika atom dan fisika molekul yang mencakup: Fisika atom dan Fisika Molekul. Oleh karena itu, sebelum mempelajari modul ini Anda terlebih dahulu harus mempelajari modul nomor 5 dan sebelumnya.

Materi kuliah dalam modul ini merupakan dasar dari materi yang akan Anda pelajari pada modul-modul selanjutnya, terutama modul nomor 7 dari matakuliah Fisika Kuantum.

Pengetahuan yang akan Anda peroleh dari modul ini akan barmanfaat untuk mempelajari materi kuliah Fisika Zat Padat, Fisika Inti, Fisika Atom, Fisika Partikel, dan ilmu-ilmu Fisika lanjut lainnya.

Setelah mempelajari modul ini Anda diharapkan dapat mencapai beberapa tujuan instruksional khusus, sebagai berikut:

Anda harus dapat

1. menjumlahkan momentum sudut orbit dengan spin
2. menghitung perbedaan energi antara dua keadaan sebagai fungsi bilangan kuantum utama dan bilangan kuantum orbit.
3. menentukan keadaan yang mungkin untuk konfigurasi dasar.
4. menenutkan simetri dari suatu keadaan (state).
5. menentukan fungsi gelombang keadaan dasar untuk atom He.

Materi kuliah dalam modul ini akan disajikan dalam urutan sebagai berikut:

1. KB. 1 Fisika Atom. Di dalam KB. 1 ini Anda akan mempelajari sub-pokok bahasan : momentum sudut total dan atom-atom berelektron satu.

2. KB. 2 Fisika Molekul. Dalam KB. 2 ini Anda akan mempelajari sub-pokok bahasan: Prinsip Pauli, dan Tabel Periodik.

Agar Anda dapat mempelajari modul ini dengan baik, ikutilah petunjuk belajar berikut ini.

1. Bacalah tujuan instruksional khusus untuk modul ini.
2. Baca dan pelajari dengan seksama uraian setiap kegiatan belajar.
3. Salinlah konsep dasar dan persamaan-persamaan penting ke dalam buku latihan Anda.
4. Perhatikan dan pelajari dengan baik contoh-contoh soal/masalah dalam setiap kegiatan belajar.
5. Kerjakan semua soal latihan dan usahakan tanpa melihat kunci jawaban terlebih dahulu.

KB 1. Fisika Atom

Setelah Anda mempelajari metoda penjumlahan momentum sudut spin di dalam modul nomor 5 dan sifat-sifat Hamilton 3 dimensi di dalam modul nomor 3 dari Fisika kuantum, Anda sekarang akan diajak untuk mengaflikasikan kedua hal tersebut pada salah satu pokok bahasan dari Fisika Atom. Disamping kedua hal tersebut di atas, prinsif Pauli juga akan diaplikasikan.

1.1 Momentum sudut total $(\vec{J})$

Sebelum memulai pasal ini, cobalah anda ingat kembali prinsip penjumlahan momentum sudut spin dan orbit untuk sebuah sistem Fisika seperti yang telah diuraikan d alam modul 4 dari Fisika Kuantum. Seperti anda ketahui, bahwa momentum sudut total dari sebuah sistem Fisika, sebuah atom atau sebuah elektron, yang mempunyai momentum sudut spin $(\vec{S})$dan momentum sudut orbit $(\vec{L})$ diberi simbul dengan huruf $\vec{J}$, dimana $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

Jika $\vec{J}$ di " dot-product"kan (perkalian antara dua vektor yang menghasilkan skalar), maka Anda akan memperoleh hasil sebagai berikut :

$$\vec{J} \cdot \vec{J} = |J|^2 = |\vec{L} + \vec{S}|^2$$

$$|\vec{J}|^2 = J^2$$

$$|J|^2 = \vec{L} \cdot \vec{L} + \vec{S} \cdot \vec{S} + \vec{L} \cdot \vec{S} + \vec{S} \cdot \vec{L},$$

Karena $\vec{L} \cdot \vec{L} = L^2$, $\vec{S} \cdot \vec{S} = S^2$, dan $\vec{L}$ bersifat komutataif dengan $\vec{S}$, maka :

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2\ \vec{L}.\vec{S} \quad ....(1)$$

Komponen momentum sudut total $\vec{J}$ di dalam koordinat Cartesius adalah adalah :

$$\vec{J}_x = \vec{L}_x + \vec{S}_x \quad ,$$

$$\vec{J}_y = \vec{L}_y + S_y \quad , \text{dan}$$

$$\vec{J}_z = \vec{L}_z + \vec{S}_z \quad .$$

Dari matakuliah Fisika modern, anda ketahui bahwa sebuah elektron tunggal akan memiliki momentum sudut orbit $(\vec{L})$ dan spin $(\vec{S})$. Kedua vektor momentum sudut ini lalu bergabung untuk menghasilkan sebuah momentum sudut total $\vec{J}$. Proses penggabungan kedua vektor ini kita sebut Kopling L-S, atau Kopling Saunders-Russell. Sebagai contoh , perhatikan gambar 1 di bawah ini.

Gambar 1 Tampilan vektor dari kopling $\vec{L} - \vec{S}$. (a) menunjukan sebuah elektron $(\bar{e})$ dengan momentum sudut orbit $(\vec{L})$ dan $(\vec{S})$. (b) Kopling $\vec{L} - \vec{S}$ dalam tampilan vektor.

Dari modul nomor 2 Anda mengetahui bahwa : “eigenstate” (keadaan yang cocok) dari J^2 adalah juga eigenstate dari operator-operator komutatif : J_z, L^2, S^2 , dan J^2 itu sendiri. Dari keempat operator tersebut, kita dapat menyusun 6 buah Komutator , yaitu sebagai berikut :

$$\left[J^2, J_z\right] = \left[L^2 + S^2 + 2\vec{L}.\vec{S}, J_z\right] \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (2)$$

$$\left[J^2, L^2\right] = \left[L^2 + S^2 + 2\vec{L}.\vec{S}, L^2\right] \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (3)$$

$$\left[J^{2,}, S^2\right] = \left[L^2 + S^2 + 2\vec{L}\vec{S}, S^2\right] \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (4)$$

$$[L^2, J_z] = \left[L^2, L_z, S_z\right] \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (5)$$

$$\left[S^2, J_z\right] = \left[S^2, L_z + S_z\right] \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (6)$$

$$\left[L^2, S^2\right] \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (7)$$

Karena L^2 komutatif dengan semua komponen L (L_x , L_y , L_z) dan S^2 juga komutatif dengan semua komponen S (S_x ,S_y, S_z), serta $\vec{L} \text{dan} \vec{S}$ juga komutatif (sebab $\vec{L} \text{dan} \vec{S}$

berada pada ruang yang berbeda, yaitu ruang orbit dan ruang spin), maka persaman (komutator) (2) sampai (7) memiliki nilai sama dengan nol. Jadi

$$\left[J^2, J_z\right] = 0$$

$$\left[J^2, L^2\right] = 0$$

$$\left[J^2, S^2\right] = 0$$

$$\left[L^2, J_z\right] = 0$$

$$\left[S^2, J_z\right] = 0$$

$$\left[L^2, S^2\right] = 0$$

Hal ini dapat anda buktikan dengan menggunakan kaidah komutator di dalam Fisika kuantum . Sebagai contoh marilah kita hitung komutator $\left[L^2, J_z\right]$.

$$\left[L^2, J_z\right] = \left[L^2, L_z, S_z\right]$$

$$\left[L^2, J_z\right] = \left[L^2, L_z\right] + \left[L^2, S_z\right]$$

$\left[L^2, L_z\right] = 0$ (karena L^2 komutatif dengan L_z.Artinya $L^2 L_z = L_z L^2$, atau $L^2 L_z - L_z L^2 = 0$

$\left[L^2, S_z\right]$ = 0 (karena operator $\vec{L} \text{dan} \vec{S}$ bekerja pada ruang yng berbeda)

Jadi $\left[L^2, J_z\right]$ = 0 + 0

= 0

Contoh lain :

$$\left[J^2, L^2\right] = \left[L^2 + S^2 + 2\vec{L}.\vec{S}, L^2\right]$$

$$= \left[L^2, L\right] + \left[S^2, L^2\right] + \left[2\vec{L}.\vec{S}, L^2\right] .$$

Dengan menggunakan hubungan komutator :

$\left[AB, C\right] = A\left[B, C\right] + \left[A, C\right]$ B, kita dapatkan

$$\left[J^2, L^2\right] = \left[L^2, L^2\right] + \left[S^2, L^2\right] + 2L\left[S, L^2\right] + \left[2L, L^2\right] S$$

$$\left[J^2, L^2\right] = 0$$

Dengan demikian keempat operator tersebut merupakan sebuah himpunan (set) lengkap dari besaran-besaran fisika yang komutatif.

Dalam bahasa inggris keempat operator tersebut disebut sebuah complete set of Commuting observable atau disingkat CSCO

Latihan :

1. Buktikanlah bahwa :
   a. $\left[J^2, L^2\right] = 0$
   b. $\left[S^2, J_z\right] = 0$
   c. $\left[L^2, S^2\right] = 0$

Catatan untuk menjawab soal latihan ini Anda harus menggunakan sifat komutator sebagai berikut :

$$\left[A + B, C\right] = \left[A, C\right] + \left[B, C\right] \text{ dan}$$

$$\left[A.B, C\right] = A\left[B, C\right] + \left[A, C\right] B$$

Seperti telah dijelaskan dalam modul nomor 2 dari Fisika kuantum bentuk “eigenstate”dari operator-operator J^2, J_{z}, L^2, dan S^2 biasa ditulis dalam notasi Dirac sebagai sebuah “ket” yaitu sebagai berikut :

$\left|j, m_j, l, s\right\rangle$, sehingga persamaan eigenvalue untuk keempat operator tstb dapat ditulis sebagai berikut:

$$J^2\left|j, m_j, l, s\right\rangle = \hbar^2 j(j+1)\left|j, m_j, l, s\right\rangle$$

$$j_z\left|j, m_j, l, s\right\rangle = \hbar m_j\left|j, m_j, l, s\right\rangle$$

$$L^2\left|j, m_j, l, s\right\rangle = \hbar^2 l(l+1)\left|j, m_j, l, s\right\rangle$$

$$S^2\left|j, m_j, l, s\right\rangle = \hbar^2 s(s+1)\left|j, m_j, l, s\right\rangle$$

(Catatan: huruf l = ℓ).

Dengan demikian eigenvalue-eigenvalue:
J^2 adalah $\hbar^2$ j(j+1)
J_z adalah $\hbar$ m_j
L^2 adalah $\hbar^2$ $\ell(\ell + 1)$
S^2 adalah $\hbar^2$ s (s + 1)

Apakah Anda masih ingat hubungan antara nilai j dengan nilai m_j ? Bagaimanakah bentuk hubungan di antara kedua nilai tersebut ? Jika Anda lupa lagi coba pelajari kembali modul nomor 2 dari Fisika Kuantum. Disana dijelaskan bahwa untuk sebuah nilai j, nilai m_j memiliki rentang dari –j sampai +j dengan langkah sebesar +1. Jadi nilai m_j dapat ditulis sebagai berikut:

$$-j \le m_j \le +j, \qquad (8)$$

atau m_j = -j, -j +1, -j + 2, -j +3, ….., 0, 1, 2, 3, 4, ……, (j-2), (j-1), j (9)

Untuk sebuah kopling L-S, nilai-nilai ℓ dan s biasanya sudah diketahui. Selanjutnya jika nilai-nilai ℓ dan s telah diketahui, pertanyaan berikutnya adalah berapakah nilai-nilai j yang mungkin diperoleh ? Di dalam modul nomor 2 untuk Fisika Kuantum Anda sudah mempelajari prinsip penjumlahan momentum sudut. Coba Anda ingat-ingat kembali aturan penjumlahan tersebut ! Dengan menggunakan aturan penjumlahan ini Anda tentu masih ingat bahwa nilai j maksimum (j_{mak}) adalah ℓ + s dan nilai j minimum adalah *harga mutlak* dari ℓ – s. Jadi

$$|\ell - s| \le j \le (\ell + s), \qquad (10)$$

atau secara rinci nilai-nilai j tersebut dapat ditulis sebagai berikut:

$$j = (\ell + s), (\ell + s)-1, (\ell + s)-2, (\ell + s)-3, \ldots\ldots, |\ell - s|. \qquad (11)$$

Contoh: Tentukanlah nilai-nilai j dan m_j yang mungkin diperoleh dari sebuah kopling L-S dengan nilai ℓ = 2 dan s = ½ !
Jawab :
(a) dengan menggunakan persamaan (9) di atas kita peroleh nilai j sebagai berikut:
$$j = (2 + ½), (2 + ½)-1, (2 + ½)-2, \ldots\ldots.., |2 - ½|. \qquad (12)$$
Karena nilai j minimum adalah +3/2, maka nilai j yang mungkin diperoleh adalah hanya j = 5/2 dan j = 3/2.
Jadi Anda tidak mungkin memperoleh nilai j = ½ , meskipun dalam persamaan (12) nilai ini masih dicantumkan.
(b) Selanjutnya marilah kita tentukan nilai m_j.
Karena dari jawaban (a) di atas Anda memperoleh dua jenis nilai j, yaitu 5/2 dan 3/2 maka dalam hal ini Anda akan memperoleh dua set nilai m_j yaitu :
untuk j = 5/2, m_j = -5/2, -3/2, -1/2, +1/2, +3/2, dan + 5/2.
untuk j = 3/2, m_j = -3/2, -1/2, +1/2 dan +3/2.

Latihan
Tentukan nilai-nilai j dan m_j dari sebuah kopling L-S dengan nilai ℓ = 3, dan s = ½ .
Petunjuk untuk menjawab soal latihan: Gunakanlah persamaan (8) atau (9) dan persamaan (10) atau (11).

Dari jawaban (a) di atas Anda lihat bahwa untuk $s = ½$ nilai j adalah 5/2 dan 3/2. Jadi hanya ada dua nilai j. Karena itu untuk $s < \ell$ banyaknya nilai j yang mungkin diperoleh dapat ditentukan oleh nilai s, yaitu dengan menggunakan rumus:

$$2s + 1. \tag{13}$$

Kemudian, dari jawaban (b) pada contoh soal di atas Anda lihat bahwa banyaknya nilai m_j untuk $j = 5/2$ adalah 6 buah, dan banyaknya nilai m_j untuk $j = 3/2$ adalah 4 buah. Dari kenyataan ini Anda dapat menyimpulkan bahwa nilai m_j dapat ditentukan dengan menggunakan rumus:

$$2j +1. \tag{14}$$

Rumus-rumus 2s + 1 dan 2j +1 disebut *kelipatan*.

Banyaknya nilai-nilai j tersebut di atas adalah berkaitan dengan nilai-nilai energi yang berbeda untuk sebuah atom. Jadi untuk atom yang berelektron satu buah dengan $s = ½$, misalnya, tingkat energinya akan pecah menjadi dua tingkat yang masing-masing sesuai dengan nilai $j = \ell + ½$ dan $j - ½$. Hal ini karena *kelipatannya* adalah sama dengan 2. (Karena 2 (½) + 1).

Dalam fisika kuantum, kita biasa memberi nama untuk deret tingkat energi yang sesuai dengan nilai s. Nama-nama tersebut adalah sebagai berikut:

s = 0 disebut deret singlet (karena kelipatannya = 1)
s = ½ disebut deret doublet (karena kelipatannya = 2) (15)
s = 1 disebut deret triplet (karena kelipatannya =3),

dan seterusnya.

Keadaan untuk setiap tingkat biasa diberi notasi sebagai berikut:

$$^{2s+1}L_j, \tag{16}$$

diman L menyatakan huruf yang sesuai dengan nilai momentum sudut orbit (ℓ). Huruf-huruf tersebut ditentuan oleh nilai-nilai ℓ sebagai berikut:

ℓ	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
L	S	P	D	F	G	H	I	K	L	M	N

Contoh : untuk $\ell = 1$ dan $s = ½$ Anda akan memperoleh keadaan doublet sbb:

Nilai-nilai j yang mungkin didapat adalah $j = 3/2$ dan $j = ½$, sehingga Anda dapatkan doublet P (karena $\ell = 1$) sebagai berikut :

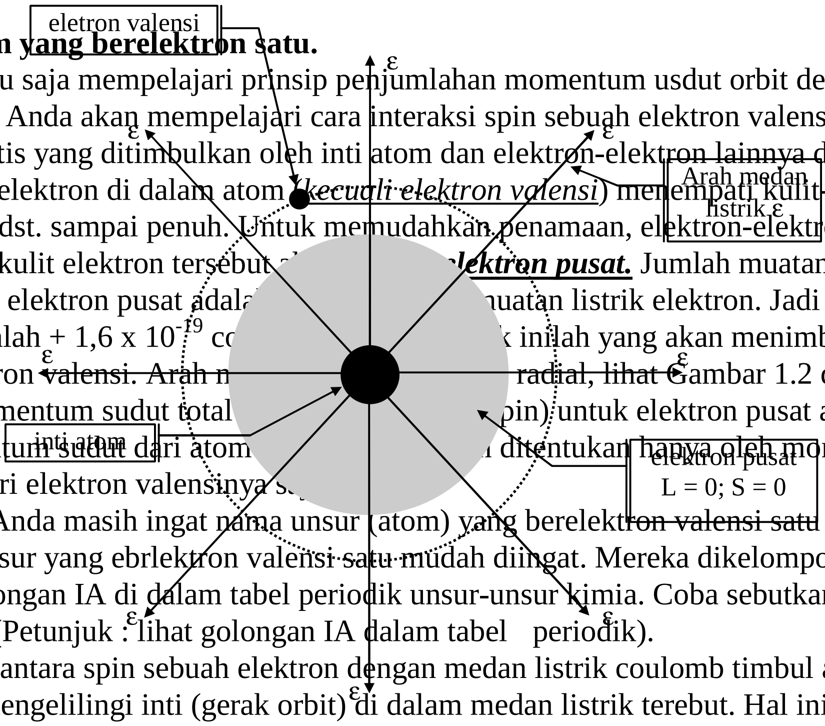
$^2P_{3/2}$ dan $^2P_{1/2}$.

Demikian juga untuk doblet G (untuk $\ell = 4$) Anda akan memperoleh:

$^2G_{9/2}$ dan $^2G_{7/2}$.

1. 2 Atom-atom yang berelektron satu.

Anda baru saja mempelajari prinsip penjumlahan momentum usdut orbit dengan spin. Di dalam bagian ini Anda akan mempelajari cara interaksi spin sebuah elektron valensi dengan medan listrik statis yang ditimbulkan oleh inti atom dan elektron-elektron lainnya di dalam atom tersebut. Semua elektron di dalam atom (*kecuali elektron valensi*) menempati kulit-kulit elektron K, L, M, N, ..., dst. sampai penuh. Untuk memudahkan penamaan, elektron-elektron yang memenuhi kulit-kulit elektron tersebut [illegible] ***elektron pusat.*** Jumlah muatan listrik antara inti atom dengan elektron pusat adala[illegible] muatan listrik elektron. Jadi muatan listrik total tersebut adalah + 1,6 x 10^{-19} co[illegible] inilah yang akan menimbulkan medan listrik bagi elektron valensi. Arah m[illegible] radial, lihat Gambar 1.2 di bawah. Selanjutnya, momentum sudut total [illegible] pin) untuk elektron pusat adalah nol, sehingga momentum sudut dari atom [illegible] ditentukan hanya oleh momentum sudut orbit dan spin dari elektron valensinya s[illegible]



Apakah Anda masih ingat nama unsur (atom) yang berelektron valensi satu ? Ya tentu ! Karena unsur-unsur yang ebrlektron valensi satu mudah diingat. Mereka dikelompokkan ke dalam unsur golongan IA di dalam tabel periodik unsur-unsur kimia. Coba sebutkan tiga nama unsur tersebut ! (Petunjuk : lihat golongan IA dalam tabel periodik).

Interaksi antara spin sebuah elektron dengan medan listrik coulomb timbul akibat adanya gerak elektron mengelilingi inti (gerak orbit) di dalam medan listrik terebut. Hal ini dapat dijelaskan sebagai berikut: jika seorang pengamat bergerak dengan kecepatan v dan memotong garis gaya medan listrik ε, maka teori relativitas khusus menyatakan bahwa di dalam medan magnet (β)di dalam kerangka pengamat dapat dinyatakan sebagai berikut :

$$\vec{\beta} = -\gamma\frac{\vec{v}}{c}\times\vec{\varepsilon}\,, \tag{17}$$

dimana γ didefinisikan oleh : $\frac{1}{\gamma^2} \equiv 1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2$. Jika kita menggunakan γ hanya sampai orde

Gambar 1.2 Elektron valensi, elektron pusat, inti atom dan arah radial medan listrik ε.

pertama , maka kita akan memperoleh $\gamma^2 = 1$, atau $|\gamma| = 1$. Sehingga persamaan (17) dapat kita tulis sebagai berikut:

$$\vec{\beta} = -\frac{\vec{v}}{c}\times\vec{\varepsilon}\,. \qquad (18)$$

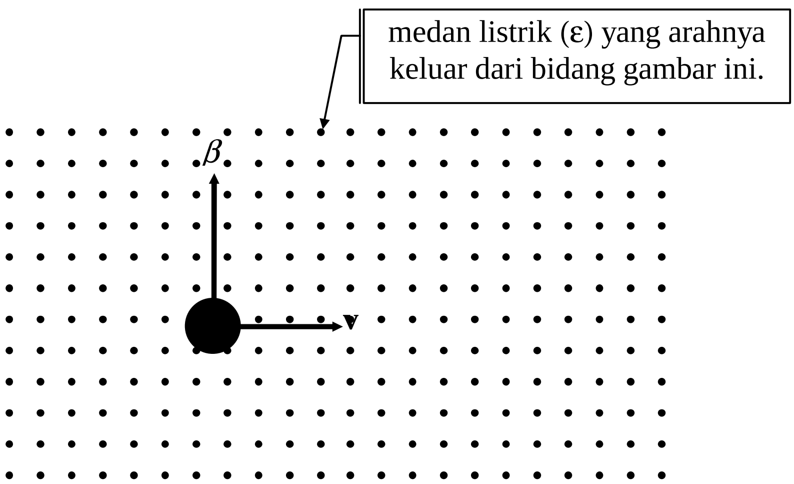
Jika persamaan (18) kita kalikan dengan m/m dan mengingat mv = momentum (p), maka hasilnya adalah:

$$\vec{\beta} = -\frac{\vec{p}}{mc}\times\vec{\varepsilon}\,. \qquad (19)$$

Hal yang sama akan terjadi jika pengamat diganti oleh sebuah elektron. Jadi jika sebuah elektron bergerak dengan momentum p dan memotong garis gaya medan listrik ε, maka elektron itu akan merasakan adanya medan magnet (β) sebesar :

$$\vec{\beta} = -\frac{\vec{p}}{mc}\times\vec{\varepsilon}\,, \qquad (20)$$

dimana m = massa diam sebuah elektron. Arah medan magnet ini ditunjukan oleh Gambar 1.3.



Gambar 1.3 Arah medan magnet β yang dialami elektron akibat gerakan orbitnya di dalam medan listrik ε.

Dalam modul nomor 5 Fisika kuantum Anda sudah mempelajari energi interaksi antara momen dipole magnet μ dengan medan magnet β. Dalam modul tersebut, besarnya energi interaksi ini adalah

$$H = -\frac{1}{2}\vec{\mu}\cdot\vec{\beta}\,. \qquad (21)$$

Karena μ dapat dihubungkan dengan spin (S) melalui persamaan

$$\vec{\mu} = \left(\frac{e}{mc}\right)\vec{S}\,,$$

maka energi interaksi antara spin elektron yang mengorbit inti atom dan medan magnet dapat dinyatakan dalam bentuk persamaan

$$H = -\left(\frac{e}{2mc}\right)\vec{S}\cdot\vec{\beta} \qquad (22)$$

Jika kita substitusikan persamaan (20) ke dalam persamaan (22) kita peroleh

$$H = -\left(\frac{e}{2mc}\right)\vec{S}\cdot\left(-\frac{\vec{p}}{mc}\times\vec{\varepsilon}\right)$$

$$= -\left(\frac{e}{2m^2c^2}\right)\vec{S}\cdot(\vec{\varepsilon}\times\vec{p}) \qquad (23)$$

Di dalam koordinat bola, medan listrik ε hanya memiliki komponen radial saja (ε_r). Nilai ε_r dinyatakan oleh

$$\varepsilon_r = -\frac{d}{dr}\Phi(r)\,,$$

dimana $\Phi(r)$ adalah potensial listrik statis. Karena vektor satuan dalam arah radial ® adalah $\frac{\vec{r}}{r}$, maka ε_r dapat dinyatakan dalam bentuk vektor sebagai berikut

$$\vec{\varepsilon}_r = -\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\Phi(r)\,\vec{r}\,. \qquad (24)$$

Dengan mensubstitusikan persamaan (24) ke dalam persamaan (23) kita peroleh nilai energi interaksi *H’* sebagai berikut:

$$H' = \left(\frac{e}{2m^2c^2}\right)\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\Phi(r)\right)(\vec{r}\times\vec{p})\cdot\vec{S} \qquad (25)$$

Karena $\vec{r}\times\vec{p}$ sama dengan momentum sudut orbit $(\vec{L})$, maka persamaan (25) dapat ditulis dalam bentuk

$$H' = \left(\frac{e}{2m^2c^2}\right)\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\Phi(r)\right)\vec{L}\cdot\vec{S} \qquad (26).$$

Persamaan Hamilton untuk atom yang berlektron satu buah biasa dituliskan sebagai (lihat kembali modul nomor 5 Fisika Kuantum):

$$H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) = \frac{\vec{p}_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r)\,, \qquad (27)$$

dimana L adalah momentum sudut orbit elektron valensi, p_r adalah momentum linier dalam arah radial, dan V = eΦ. Fungsi eigen (fungsi yang cocok/tepat) untuk H_0 adalah seperti fungsi eigen untuk atom hidrogen yang sudah dibahas dalam modul nomor 5.

Jika kita memasukan persamaan Hamilton untuk interaksi spin-orbit (persamaan 26) dengan H_0 maka kita akan memperoleh persamaan Hamilton total (H) sebagai berikut:

$$H = H' + H_0 = \frac{\vec{p}_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r) + \left(\frac{e}{2m^2c^2}\right)\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\Phi(r)\right)\vec{L}\cdot\vec{S} \qquad (28)$$

Untuk penyederhanaan penulisan, $\left(\frac{e}{2m^2c^2}\right)\left(\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\Phi(r)\right)$ akan ditulis sama dengan f(r) sehingga persamaan (28) menjadi

$$H = \frac{\vec{p}_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r) + f(r)\,\vec{L}\cdot\vec{S}\,. \qquad (29)$$

Dari persamaan 1 di atas kita tahu bahwa $J^2 = L^2 + S^2 + 2\ \vec{L}.\vec{S}$. Sehingga

$$\vec{L}.\vec{S} = J^2 - L^2 - S^2 \qquad (30)$$

Coba Anda subsitusikan persamaan (30) ke dalam persamaan (29)! Bagaimana hasilnya ? Pasti sama seperti persamaan di bawah ini:

$$H = \frac{\vec{p}_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r) + \frac{f(r)}{2}(J^2 - L^2 - S^2) \quad (31)$$

Karena J^2 , J_z , L^2 , S^2 bersifat komutatif dengan H_0 dan J^2 , J_z , L^2 , S^2 merupakan himpunan lengkap dari besaran-besaran fisika yang komutatif (CSCO = complete set of commuting observable), maka fungsi eigen dari persamaan hamilton total H dapat ditulis dalam bentuk:

$$|\varphi\rangle = |n\ell\rangle\, |j, m_j, \ell, s\rangle, \quad (32)$$

dimana $|nl\rangle$ merupakan komponen radial dari fungsi eigen H_0, sehingga

$$H_0\, |n\ell\rangle = E_n\, |n\ell\rangle, \quad (33)$$

dimana $H_0 = \frac{\vec{p}_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r)$.

Nah ! sekarang coba Anda tuliskan persamaan Schrodinger untuk operator H dan fungsi eigen $|\varphi\rangle$! Gunakan persamaan (31) dan (32) ! Bagaimanakah hasilnya ? Ya ! Pasti sama dengan persamaan di bawah ini:

$$H|\varphi\rangle = E_{n\ell j}\, |\varphi\rangle$$

Dengan menggunakan persamaan (31) dan (32) Anda harus memperoleh hasil sebagai berikut:

$$\left(H_0 + \frac{f(r)}{2}\left(J^2 - L^2 - S^2\right)\right) |n\ell\rangle\, |j, m_j, \ell, s\rangle = E_{n\ell j}\, |n\ell\rangle\, |j, m_j, \ell, s\rangle \quad (34)$$

dimana $H_0 = \frac{\vec{p}_r^2}{2m} + \frac{\vec{L}^2}{2mr^2} + V(r)$. Sekarang coba Anda selesaikan (34) di atas dengan menggunakan eigenvalue (nilai eigen) untuk J^2, L^2, dan S^2, serta eigenvalue untuk H_0. Tentu Anda masih ingat eigenvalue-eigenvalue untuk semua operator tersebut (J^2, L^2, dan S^2, serta H_0). Mereka adalah :

eigenvalue untuk J^2 adalah $\hbar^2\, j(j+1)$,
eigenvalue untuk L^2 adalah $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$,
eigenvalue untuk S^2 adalah $\hbar^2 s\,(s + 1)$,

eigenvalue untuk H_0 adalah E_n,

sehingga persamaan (34) dapat kita selesaikan sebagai berikut:

$$\left\{E_n + \frac{f(r)}{2}\hbar^2\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)\right]\right\} \left|n\ell\right\rangle \left|j,m_j,\ell,s\right\rangle = E_{n\ell j} \left|n\ell\right\rangle \left|j,m_j,\ell,s\right\rangle . \quad (35)$$

Khusus untuk atom yang berelektron satu, maka nilai spin (s) adalah ½ , sehingga persamaan (35) menjadi:

$$\left\{E_n + \frac{f(r)}{2}\hbar^2\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}\right]\right\} \left|n\ell\right\rangle \left|j,m_j,\ell,s\right\rangle = E_{n\ell j} \left|n\ell\right\rangle \left|j,m_j,\ell,s\right\rangle . \quad (36)$$

Meskipun $\left|n\ell\right\rangle \left|j,m_j,\ell,s\right\rangle$ bukanlah merupakan fungsi eigen dari operator Hamilton (H), tetapi karena pengaruh dari interaksi spin-orbit terhadap energi E adalah sangat kecil dibandingkan dengan E itu sendiri, maka $\left|n\ell\right\rangle \left|j,m_j,\ell,s\right\rangle$ boleh dianggap sebagai fungsi eigen dari H. Dengan demikian, nilai eigen dari Hamilton H dapat dihitung dengan cara menentukan nilai harap (expectation value) dalam fungsi eigen tersebut, yaitu sebagai berikut:

nilai harap untuk H biasa ditulis dalam notasi Dirac sebagai berikut

$$\left\langle\varphi\middle|H\middle|\varphi\right\rangle = E_{n\ell j} \text{ atau } \left\langle j,m_j,\ell,s\right| \left\langle n\ell\right| H \left|n\ell\right\rangle \left|j,m_j,\ell,s\right\rangle = E_{n\ell j}. \quad (37)$$

Jadi eigenvalue H (yaitu $E_{n\ell j}$) adalah

$$E_{n\ell j} = \left\langle j,m_j,\ell,s\right| \left\langle n\ell\right| \left(H_0 + \frac{f(r)}{2}\left(J^2 - L^2 - S^2\right)\right) \left|n\ell\right\rangle \left|j,m_j,\ell,s\right\rangle$$

$$= \left\langle j,m_j,\ell,s\right| \left\langle n\ell\right| H_0 \left|n\ell\right\rangle \left|j,m_j,\ell,s\right\rangle +$$

$$\left\langle j,m_j,\ell,s\right| \left\langle n\ell\right| \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4}\right] \left|n\ell\right\rangle \left|j,m_j,\ell,s\right\rangle +$$

$$\left\langle j,m_j,\ell,s\right| \left\langle n\ell\right| f(r) \left|n\ell\right\rangle \left|j,m_j,\ell,s\right\rangle .$$

$$= E_n + \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)\right] \left\langle j,m_j,\ell,s\right| \left\langle n\ell\right| f(r) \left|n\ell\right\rangle \left|j,m_j,\ell,s\right\rangle .$$

$$= E_n + \frac{\hbar^2}{2}\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - s(s+1)\right] \left\langle f(r)\right\rangle , \quad (38)$$

dimana $\left\langle f(r)\right\rangle = \left\langle j,m_j,\ell,s\right| \left\langle n\ell\right| f(r) \left|n\ell\right\rangle \left|j,m_j,\ell,s\right\rangle$.

Seperti Anda ketahui bahwa nilai *kelipatan* dinyatakan oleh rumus (2s + 1). Jadi untuk s = ½ , nilai kelipatannya adalah 2. Artinya untuk setiap nilai ℓ, nilai *j* yang mungkin diperoleh ada 2 jenis, yaitu : $j = (\ell + ½)$ dan $j = (\ell - ½)$. Hal ini berarti bahwa jika interaksi spin orbit disertakan dalam hitungan, maka tingkat energi untuk nilai ℓ tertentu akan pecah menjadi dua tingkat (deret doublet). Kedua tingkat (doublet) energi tersebut adalah: (subsitusikan $j = (\ell + 1/2)$ dan $j = (\ell - 1/2)$ ke dalam persamaan (38))

$$E^{+}_{n\ell j} \equiv E_{j=\ell+1/2} = E_n + \frac{\hbar^2}{2}\left\{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)\left(\left(\ell+\frac{1}{2}\right)+1\right)-\ell(\ell+1)-\frac{3}{4}\right\}\langle f\rangle_{n\ell}$$

dan

$$E^{-}_{n\ell j} \equiv E_{j=\ell-1/2} = E_n + \frac{\hbar^2}{2}\left\{\left(\ell-\frac{1}{2}\right)\left(\left(\ell-\frac{1}{2}\right)+1\right)-\ell(\ell+1)-\frac{3}{4}\right\}\langle f\rangle_{n\ell}.$$

Jika kedua persamaan itu diselesaikan maka Anda akan memperoleh hasil sebagai berikut:

$$E^{+}_{n\ell j} = E_n + \frac{\hbar^2}{2}\ell\langle f\rangle_{n\ell} \tag{39.a}$$

$$E^{-}_{n\ell j} = E_n - \frac{\hbar^2}{2}(\ell+1)\langle f\rangle_{n\ell} \tag{39.b}$$

Tugas kita selanjutnya adalah menentukan nilai $\langle f\rangle_{n\ell}$. Nilai ini dapat diperoleh dengan menggunakan fungsi gelombang hidrogen dan dengan menganggap bahwa energi potensial adalah sama dengan

$$\Phi(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \text{ dimana Z = nomor atom.}$$

Selanjutnya kita substitusikan $\Phi(r)$ ini ke dalam f(r), sehingga Anda akan memeperoleh:

$$f(r) = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\Phi(r) = \frac{-1}{2m^2c^2}\frac{Ze^2}{r}\frac{d}{dr}\left(\frac{1}{r}\right)$$

$$= \frac{Ze^2}{2m^2c^2}\frac{1}{r^3}.$$

Jadi : $\langle f\rangle_{n\ell} = \dfrac{Ze^2}{2m^2c^2}\left\langle\dfrac{1}{r^3}\right\rangle.$

Untuk atom-atom yang mirip atom hidrogen, $\left\langle\dfrac{1}{r^3}\right\rangle = \dfrac{2}{\left(a_0/Z\right)^3 n^3\ell(\ell+1)(2\ell+1)}.$

Apabila $\langle f\rangle_{n\ell}$ kita kalikan dengan $\dfrac{\hbar^2}{2n}$ dan kita substitusikan nilai $\left\langle\dfrac{1}{r^3}\right\rangle$ ke dalamnya, maka hasilnya adalah sebagai berikut:

$$\frac{\hbar^2}{2n}\langle f\rangle_{n\ell} = \frac{\left(me^4Z^2/2\hbar^2n^2\right)^2}{mc^2\ell\left(\ell+\frac{1}{2}\right)\left(\ell+1\right)} \qquad (40)$$

Energi untuk atom hidrogen biasa dinyatakan dalam bentukpersamaan $|E_n| = \dfrac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}$. Dengan menggunakan persamaan ini kita dapat menuliskan persamaan (40) dalam bentuk

$$\frac{\hbar^2}{2}\langle f\rangle_{n\ell} = \frac{n\,|E_n|^2}{mc^2\ell\left(\ell+\frac{1}{2}\right)\left(\ell+1\right)}\,. \qquad (41)$$

Konstanta struktur halus (fine-structure constant) biasa dinyatakan oleh persamaan:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137{,}037}\,; \quad \alpha^2 = \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 = 5{,}33 \text{ x } 10^{-5}.$$

Dengan menggunakan konstanta struktur halus (α) persamaan (41) di atas dapat kita tulis sebagai berikut:

$$\frac{\hbar^2}{|E_n|}\langle f\rangle_{n\ell} = \frac{(z\alpha)^2}{n}\,\frac{1}{\ell\left(\ell+\dfrac{1}{2}\right)\left(\ell+1\right)} \qquad (42)$$

Akhirnya dengan menggunakan persamaan (42), persamaan (39.a) dan persamaan (39.b) dapat ditulis dalam bentuk:

$$E^{+}_{n\ell j} = E_n + \frac{(z\alpha)^2}{n}\,\frac{E_n}{(2\ell+1)(\ell+1)} \qquad (43.a)$$

$$E^{-}_{n\ell j} = E_n - \frac{(z\alpha)^2}{n}\,\frac{E_n}{(2\ell+1)(\ell)} \qquad (43.b)$$

Jadi jika interaksi spin-orbit diperhitungkan, maka energi keadaan untuk nilai ℓ tertentu akan pecah menjadi dua bagian (doublet). Kedua energi keadaan tersebut ditunjukkan oleh persamaan (43.a) dan persamaan(43.b) di atas.

Rangkuman

1. $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

2. $J^2 = L^2 + S^2 + 2\ \vec{L}.\vec{S}$

$\vec{J}_x = \vec{L}_x + \vec{S}_x$,

$\vec{J}_y = \vec{L}_y + S_y$, dan

3. $\vec{J}_z = \vec{L}_z + \vec{S}_z$

4. $\left[J^2, J_z\right] = 0$

$\left[J^2, L^2\right] = 0$

$\left[J^2, S^2\right] = 0$

$\left[L^2, J_z\right] = 0$

$\left[S^2, J_z\right] = 0$

$\left[L^2, S^2\right] = 0$

5. eigenvalue-eigenvalue:
   J^2 adalah $\hbar^2$ j(j+1)
   J_z adalah $\hbar$ m_j
   L^2 adalah $\hbar^2$ $\ell(\ell + 1)$
   S^2 adalah $\hbar^2$ s (s + 1)

6. Rentang nilai m_j adalah : $-j \le m_j \le +j$
   atau m_j = -j, -j +1, -j + 2, -j +3, ….., 0, 1, 2, 3, 4, ……, (j-2), (j-1), j

7. Rumus-rumus 2s + 1 dan 2j +1 disebut *<u>kelipatan untuk s< l</u>*

8. s = 0 disebut deret singlet (karena kelipatannya = 1)
   s = ½ disebut deret doublet (karena kelipatannya = 2)
   s = 1 disebut deret triplet (karena kelipatannya =3).

9. Keadaan untuk setiap tingkat biasa diberi notasi sebagai berikut:

$^{2s+1}L_j$,

dimana L menyatakan huruf yang sesuai dengan nilai momentum sudut orbit (ℓ). Huruf-huruf tersebut ditentuan oleh nilai-nilai ℓ sebagai berikut:

ℓ	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
L	S	P	D	F	G	H	I	K	L	M	N

10. energi interaksi antara spin elektron yang mengorbit inti atom dan medan magnet dapat dinyatakan dalam bentuk persamaan

$$H = -\left(\frac{e}{2mc}\right)\vec{S}\cdot\vec{\beta}$$

11. jika interaksi spin-orbit diperhitungkan, maka energi keadaan untuk nilai ℓ tertentu akan pecah menjadi dua bagian (doublet). Kedua energi keadaan tersebut ditunjukkan oleh persamaan - persamaan

$$E^{+}_{n\ell j} = E_n + \frac{(z\alpha)^2}{n}\frac{E_n}{(2\ell+1)(\ell+1)}$$

$$E^{-}_{n\ell j} = E_n - \frac{(z\alpha)^2}{n}\frac{E_n}{(2\ell+1)(\ell)}$$

Tes Formatif

Petunjuk : Jawablah semua soal di bawah ini!

1. Persamaan komutator berikut di bawah ini adalah benar, <u>kecuali:</u>

   a. $\left[J^2, S^2\right] = 0$

   b. $\left[L^2, J_z\right] = 0$

   c. $\left[S^2, J_z\right] = 0$

   d. $[J_x, J_y] = 0$

2. Sebuah kopling L-S terjadi untuk $\ell = 2$ dan s = ½ .Berapakah nilai-nilai j yang mungkin diperoleh ?
   a. 5/2 dan 3/2.
   b. -5/2 dan +5/2
   c. 5/2, 3/2, dan ½.
   d. 5/2 .

3. Berapakah nilai-nilai m_j untuk nilai j = 5/2.
   a. m_j = -5/2, -3/2, - ½ , 0
   b. m_j = -5/2 dan +5/2.
   c. m_j = -5/2, -3/2, - ½, ½ , 3/2, 5/2.
   d. m_j = 5/2 dan 3/2.

4. Notasi keadaan untuk $\ell = 2$, s = ½ dan j = 3/2 adalah:
   a. $^{1/2}P_{3/2}$
   b. $^{5/2}D_{3/2}$
   c. $^{5/2}P_{1/2}$
   d. $^{1/2}D_{1/2}$.

5. Berapakan nilai-nilai tingkat energi doublet untuk elektron yang berada sub kulit $\ell = 1$ pada kulit L dari sebuah atom hidrogen! Diketahui $\alpha^2 = 5{,}33 \times 10^{-5}$.
   a. $E^{+}_{nlj} = |E_n|(1 - \alpha^2)$ dan $E^{-}_{nlj} = -|E_n|(1 + \alpha^2)$.

b. $E^{+}_{nlj} = |E_n| (1 - \alpha^2)$ dan $E^{-}_{nlj} = - |E_n| (1 + \alpha^2)$.

c. $E^{+}_{nlj} = |E_n| (1 + \alpha^2/12)$ dan $E^{-}_{nlj} = |E_n| (1 - \alpha^2/12)$.

d. $E^{+}_{nlj} = - |E_n| (1 - \alpha^2/6)$ dan $E^{-}_{nlj} = - |E_n| (1 + \alpha^2/6)$.

Tindak Lanjut (Balikan):

Cocokanlah jawaban Anda dengan kunci jawaban tes formatif 1 pada akhir modul ini, dan berilah skor (nilai) sesuai dengan bobot nilai setiap soal yang dijawab dengan benar. Kemudian jumlahkan skor yang Anda peroleh lalu gunakan rumus di bawah ini untuk mengetahui tingkat penguasaan (TP) Anda terhadap materi KB-1 ini.

Rumus (TP) = (jumlah skor/jumlah soal) x 100 %

Arti TP yang Anda peroleh adalah sebagai berikut :
90 % - 100 % = baik sekali.
80 % - 89 % = baik
70 % - 79 % = cukup
< 70 % = rendah.

Apabila TP Anda $\geq$ 80 %, maka Anda boleh melanjutkan pada materi KB 2, dan Selamat !!, Tetapi jika TP Anda < 80 %, Anda harus mengulang materi KB-1 di atas terutama bagian-bagian yang belum Anda kuasai.