

USULAN PENULISAN BUKU

# ***Kimia Kuantum dan Spektroskopi Molekul***

***Dasar-Dasar Teoritis dan Komputasi Kimia***

**PERPUSTAKAAN UNIV. NEGERI PADANG  
TELAH TERDAFTAR**

**JUDUL :** KIMIA KUANTUM DAN SPEKTROSKOPI  
MOLEKUL : DASAR-DASAR TEORISTIS  
**PENYUSUN :** DESKI BERI  
**JENIS :** USULAN PENULISAN BUKU  
**NO. SURAT :** 37/UN.35.13/PE/KE/2021  
**TANGGAL :** 22 NOVEMBER 2021



Oleh:

**DESKI BERI, S.Si, M.Si**

**NIP. 197806222003121001**

**Jurusan Kimia**

**Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam**

**Universitas Negeri Padang**

**2013**

USULAN PENULISAN BUKU

# ***Kimia Kuantum dan Spektroskopi Molekul***

***Dasar-Dasar Teoritis dan Komputasi Kimia***

PERPUSTAKAAN UNIV. NEGERI PADANG  
TELAH TERDAFTAR



JUDUL : KIMIA KUANTUM DAN SPEKTROSKOPI  
MOLEKUL : DASAR-DASAR TEORITIS

PENYUSUN : DESKI BERI

JENIS : USULAN PENULISAN BUKU

NOMOR : 37 / UN.35.13 / PE.1E1 / 2021

TANGGAL : 22 NOVEMBER 2021



Oleh:

**DESKI BERI, S.Si, M.Si**

**NIP. 197806222003121001**

**Jurusan Kimia**

**Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam**

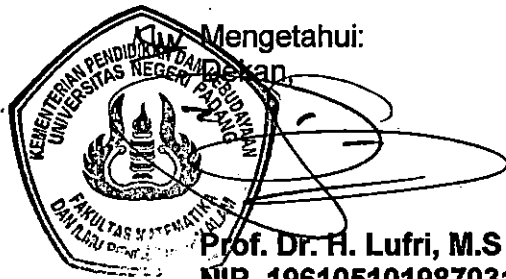
**Universitas Negeri Padang**

**2013**

## Halaman Identitas dan Pengesahan

1. Judul Buku : Kimia Kuantum dan Spektroskopi Molekul, Dasar-Dasar Teoritis dan Komputasi Kimia
2. Jenis Buku : Buku Teks untuk Perguruan Tinggi
3. Penulis :
- a. Nama Lengkap : Deski Beri, S.Si, M.Si
- b. NIP : 197806222003121001
- c. Jabatan Fungsional : Asisten Ahli
- d. Fakultas/ Jurusan/Prodi : MIPA/Kimia/Kimia

Padang, 15 Januari 2014



Penulis,

Deski Beri, S.Si, M.Si  
NIP. 197806222003121001

## Surat Pernyataan Tidak Plagiat

### SURAT PERNYATAAN

Yang bertanda tangan di bawah ini saya:

Nama : **Deski Beri, S.Si, M.Si**

NIP : **197806222003121001**

Fakultas : **Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam**

Jurusan/Prodi : **Kimia/Kimia**

dengan ini saya menyatakan bahwa buku berjudul **Kimia Kuantum dan Spektroskopi Molekul, Dasar-Dasar Teoritis dan Komputasi Kimia** yang saya tulis adalah benar-benar bebas dari bentuk plagiasi, belum pernah diterbitkan, dan tidak sedang dalam proses penerbitan.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenar-benarnya.

Padang, 15 Januari 2014

Yang menyatakan,



**Deski Beri, S.Si, M.Si**  
NIP. 197806222003121001

## Format Penilaian

No	Komponen	Keterangan	Catatan Pereview
1	Judul	Rumusan judul Kesesuaian dengan bidang keahlian/rumpun keilmuan	Judul sangat singkat dan mengacu pada bidang ilmu Kimia Fisika dan sesuai dengan materi yang diuraikan dalam buku.
2	Spesifikasi dan keunggulan buku	Spesifikasi unggulan	Buku ini membahas secara komplet tentang struktur atom dan molekul, interaksi antar mole- kul dan kaitannya dgn spektroskopi atom dan molekul.
3	Kualitas buku	Kedalaman materi, kebenaran isi	Materi yg dikisahkan dapat digunakan dan mempelajari buku dengan baik oleh mahasiswa maupun peneliti.
4	Penggunaan bahasa dan tata tulis	Kebakuan bahasa keterbacaan tata tulis	Materi disajikan dengan bahasa dan peragaan yg lebih sederhana sbg media untuk dipelajari.
5	Referensi	Kemutahiran referensi	Referensi yg digunakan dan buku ini sangat mendukung untuk menyusun buku ini menjadi lebih baik.
Skor total			

Padang, 15 Januari 2014

Reviewer,

**Budhi Oktavia, S.Si, M.Si, Ph.D**

NIP. 19721024 199803 1 001

*...Kuberikan persembahan kecil ini untuk Ayahku Tercinta Muhammad Akmal Mazni dan Ibuku Tersayang Rismawati. Untuk Istriku Tercinta Okriyeni Sudiar, dan Anak-Anakku yang Tersayang Asby Rodheim Beri dan Dziad Fairuz Beri. Kepada kalian segenap cinta dan cita kuberikan dan kupersembahkan...*

# Kata Pengantar



Kimia kuantum merupakan bagian kimia fisika yang memberikan kajian teoritis dan kuantitatif tentang struktur mikroskopik atom, interaksi dengan atom lainnya dan kaitannya dengan berbagai sifat unsur dan kombinasinya serta keterlibatan energi yang menyertai interaksi tersebut. Sebagai bagian integral dalam pembelajaran kimia fisika, maka kimia kuantum mendapatkan tempat yang istimewa karena merupakan kajian yang komprehensif tentang struktur atom dan molekul, interaksi antar molekul dan kaitannya dengan spektroskopi atom dan molekul. Sebagaimana halnya termodinamika yang mempelajari interaksi atom dan senyawa serta keterlibatan energi yang menyertai proses itu, dan kinetika yang mempelajari tentang laju reaksi, maka kimia kuantum mempelajari hakikat dari atom/unsur dan senyawa yang bereaksi tersebut. Karena merupakan kajian yang memiliki keunikan tersendiri, maka riset mengenai kimia kuantum ini sangat berkembang pesat.

Pembelajaran kimia kuantum memiliki aplikasi yang sangat luas dalam berbagai bidang pada ilmu pengetahuan alam dan teknologi terapan. Dalam ilmu fisika, kimia kuantum merupakan aplikasi dari mekanika kuantum yang secara teori dipelajari secara komprehensif dalam fisika teori. Pada rumpun ilmu hayati, kimia kuantum berperan besar dalam mengungkap berbagai fungsi biologis dan fisiologis dari senyawa aktif biologis dan obat-obatan serta interaksinya dengan fungsi biologis dan fisiologis tubuh, juga mekanisme kerja enzim dan material bioaktif dapat dipelajari dengan simulasi komputer menggunakan komputasi

monte carlo. Dalam rumpun teknik dan ilmu terapan, kimia kuantum berperan besar dalam mengenal sifat-sifat mikroskopis dari termodinamika pembakaran dari motor bakar, aspek mikroskopis dari rumpun mekanik yang berguna untuk mengenal bahan, karakteristik bahan, kelenturan dan kekerasan dari suatu bahan dan simulasi komputer dengan memasukkan kimia kuantum pada komputasinya. Bahkan sifat-sifat ketakpastian dari Heissenberg yang dikembangkan oleh Werner Heissenberg pada saat ini juga diaplikasikan dalam prediksi pasar saham dan perancangan ekonomi makro dan laju pertumbuhan ekonomi nasional. Sehingga ke depan pengembangan lebih lanjut terhadap mekanika kuantum dan kimia kuantum masih terbuka luas untuk dikembangkan.

Benturan yang cukup besar dalam pembelajaran kimia kuantum yang ada pada saat ini adalah terbatasnya literatur kimia kuantum dalam Bahasa Indonesia. Sehingga usaha untuk membumikan kimia kuantum menjadi rumpun ilmu yang dalam kacamata mahasiswa Indonesia menjadi mudah menjadi terhalang karena terbatasnya referensi dan pembeding. Karena itu usaha untuk menambah literatur kimia kuantum dalam Bahasa Indonesia merupakan tantangan tersendiri. Buku ini berusaha memberikan kimia kuantum dalam perspektif yang dibuat sesederhana mungkin, dengan usaha menjadikan berbagai persamaan yang ada dibuat lebih sederhana dan persamaan-persamaan yang penyelesaiannya menyita waktu kesabaran yang tinggi berusaha dieliminasi seminimal mungkin. Namun, karena buku ini memang ditujukan sebagai buku referensi dan bersifat akademis, maka penulisan buku ini dilakukan dengan bahasa teknis dan bahasa buku yang kaku dan standar, harapan kami para akademisi baik mahasiswa S1, S2 dan S3 yang menggunakan buku ini sebagai literatur dan referensi standar tidak kesulitan dalam pengalih bahasaan istilah yang sejak sekolah dasar telah umum mereka gunakan.



Penulis berusaha keras menyajikan buku ini dengan bahasa sedekat mungkin dengan Bahasa Indonesia yang dekat dengan lingkungan akademis. Secara jujur kita sadari bahwa Bahasa Indonesia khususnya dalam bidang keilmuan tertentu dan spesifik, peristilahannya masih terbatas, sehingga peristilahan bahasa untuk rumpun ilmu tertentu seperti kimia kuantum ini tidak ditemukan dalam Kitab Besar Bahasa Indonesia (KBBI), sehingga penulis dalam hal ini menggunakan pemakaian bahasa dan peristilahan yang paling dekat dengan rumpun Bahasa Melayu. Bagaimanapun, penulisan buku ini dibuat sesederhana mungkin, namun, sisi pandang dan pengalaman belajar seseorang berbeda-beda, sehingga penulis sangat mengharapkan kritik dan saran dari pembaca demi kesempurnaan buku ini.

Penulisan buku ini dikatalis oleh Proyek Pengembangan Rekonstruksi dan Pengembangan Universitas Negeri Padang dari Islamic Development Bank (IDB), sehingga pada kesempatan ini penulis menyampaikan ucapan banyak terima kasih kepada: Bapak Rektor Universitas Negeri Padang, beserta jajarannya, Bapak Prof. Ganefri, Ph.D, sebagai manajer PUMIL IDB, Bapak Dekan FMIPA beserta jajarannya, Ibu Dra. Andromeda, M.Si, sebagai Ketua Jurusan Kimia, Bapak Budhi Oktavia, Ph.D selaku Ketua Prodi Kimia dan Reviewer dari buku ini dan Bapak Prof. Ali Amran, Ph.D selaku pembina penulis dalam matakuliah kimia fisika yang di dalamnya diberikan dasar-dasar kimia kuantum selama satu semester pada kimia fisika 3. Dan ucapan banyak terima kasih juga ditujukan kepada pihak-pihak yang telah banyak membantu dalam mewujudkan buku ini dan tak bisa disebutkan satu-persatu.

Akhirnya, penulis menyadari bahwa “tidak ada gading yang tak retak”, sehingga kritik yang membangun demi kesempurnaan buku ini sangat penulis nantikan. Atas perhatian dari pembaca penulis ucapkan terima kasih.

~ 6 ~

**deski.beri@gmail.com**

**Deski Beri**

**Penulis**

# Daftar Isi

<b>1. Pendahuluan .....</b>	<b>12</b>
<b>2. Keruntuhan Mekanika Klasik .....</b>	<b>25</b>
2.1 Penemuan Elektron .....	25
2.2 Eksperimen Tetesan Minyak Milliken .....	31
2.3 Model Atom Rutherford.....	33
2.4 Radiasi Benda Hitam.....	39
2.5 Efek Fotolistrik .....	45
<b>3. Dualisme Gelombang-Partikel dari Materi dan Cahaya.....</b>	<b>48</b>
3.1 Cahaya (Radiasi Gelombang Elektromagnetik) .....	48
3.2 Materi .....	51
3.3 Persamaan Schrödinger Keadaan Tunak (Steady State) .....	58
<b>4. Mekanika Kuantum Partikel Dalam Kotak .....</b>	<b>62</b>
4.1 Solusi Persamaan Schrödinger untuk Partikel dalam Kotak.....	62
4.2 Model Mekanika Kuantum Partikel dalam Kotak .....	66
4.3 Postulat Mekanika Kuantum .....	69
<b>5. Osilator Harmonik.....</b>	<b>76</b>
5.1 Osilator Harmonik Klasik .....	76
5.2 Sistem fisis yang bisa didekati dengan osilator harmonik .....	79
5.3 Osilator Harmonik Mekanika Kuantum .....	83
<b>6. Rotor Kaku.....</b>	<b>89</b>
6.1 Rotasi Dua Partikel pada Posisi yang Tetap.....	89
6.2 Momentum Sudut Partikel.....	98
<b>7. Atom Hidrogen.....</b>	<b>104</b>
7.1 Persamaan Gelombang untuk Atom Hidrogen.....	107
7.2 Energi Atom Hidrogen .....	110
7.3 Bentuk dan Simetri dari Orbital .....	112
7.4 Pengaruh Medan Magnet.....	116
<b>8. Atom Helium.....</b>	<b>118</b>
8.1 Pendekatan Elektron yang tidak Berinteraksi .....	123

8.2 Pendekatan Elektron Menyendiri .....	125
<b>9. Atom Berelektron Banyak.....</b>	<b>131</b>
<b>10. Teori Orbital Molekul .....</b>	<b>141</b>
10.1 Prinsip Variasi .....	145
10.2 Pembuktian Teorema Variasi.....	146
<b>Referensi .....</b>	<b>157</b>
<b>Indeks .....</b>	<b>162</b>

# 1. Pendahuluan

M

ekanika kuantum yang berkembang pesat pada awal abad ke-20 merupakan tonggak sejarah baru dalam pengembangan fisika teori yang berhubungan erat dengan persoalan mendasar tentang perilaku partikel secara mikroskopis[1]. Sebagai suatu teori bisa jadi mekanika kuantum merupakan perluasan dari mekanika sebelumnya yang lebih umum disebut sebagai mekanika klasik, elektrodinamika, teori kinetika partikel dan cabang-cabang lain dari fisika teori yang telah ada sebelumnya. Perkembangan selanjutnya pada mekanika kuantum tidak hanya sesuai untuk sistem mikroskopis atau mikrokosmik, akan tetapi juga sesuai dengan sistem partikel makrokosmik alam semesta yang ukurannya bermiliar-miliar kali ukuran normal yang kita gunakan dalam kehidupan kita sehari-hari[2]. Sehingga pada tahun 1960-an sampai 2000-an, banyak ahli fisika teoritis mengelaborasi mekanika kuantum kedalam studi teoretis asal mula alam semesta, perkembangan alam semesta dan tentang ramalan akhir tentang alam semesta[3]. Seorang yang menonjol dalam riset ini adalah Stephen Hawking<sup>1</sup> ( 8 Jan 1942 – sekarang) yang menulis dalam berbagai buku tentang aplikasi mekanika kuantum dalam riset fisika teori modern[5].

---

<sup>1</sup> Stephen Hawking adalah mantan Lucassian Profesor of Mathematics di Universitas Cambridge dan penulis *A Brief History of Time* yang merupakan bestseller internasional. Sekarang Direktur Riset di Pusat Teoritis Kosmologi di Cambridge, buku yang lain untuk pembaca umum meliputi *Sejarah singkat sang waktu*, koleksi esai *Black Hole and Baby dan Universe in the Nutshell*. Sumber: <http://www.hawking.org.uk/>[4]

Dalam sejarah, perkembangan dari suatu teori baru dalam ilmu fisika selalu didahului dengan mengumpulkan sejumlah fakta pengamatan, kemudian ditemukan hukum semiempiris terhadap pengamatan itu, diikuti dengan pengembangan hipotesis, selanjutnya dibuat teori umum yang mampu menjelaskan fakta eksperimen dalam berbagai keadaan yang cocok dan menjelaskan berbagai fenomena. Sebagai contoh, sebelum ditemukan mekanika Newton<sup>2</sup> telah ditemukan berbagai hukum yang seolah-olah saling tidak terkait satu dengan lainnya seperti: hukum inersia, hukum gerak jatuh bebas karena pengaruh medan gravitasi bumi dan hukum Kepler<sup>3</sup> tentang hukum gerak planet-planet mengelilingi pusat tata surya[8]. Kebanyakan hukum itu ditemukan melalui kerja keras tahunan dari banyak ilmuwan fisika dan astronomi. Kita hargai perjuangan besar dari Copernicus<sup>4</sup>, Bruno<sup>5</sup>, Galileo<sup>6</sup> dan lain-lain untuk dapat

---

2 Lahir pada tanggal 4 Januari 1643, di Woolsthorpe, Inggris, Isaac Newton adalah seorang fisikawan mapan dan ahli matematika, dan dihargai sebagai salah satu pemikir besar abad ke-17. Dengan penemuan di optik, mekanika dan matematika, Newton mengembangkan prinsip-prinsip fisika modern. Pada 1687, ia menerbitkan karyanya yang paling terkenal *Philosophiae Naturalis, Principia Mathematica* (*Mathematical Principles of Natural Philosophy*), yang telah menjadi buku utama rujukan yang paling berpengaruh dalam ilmu fisika. Newton meninggal di London pada tanggal 31 Maret 1727. Sumber: <http://www.biography.com/people/isaac-newton-9422656>[6]

3 Lahir pada bulan Desember 1571, Kepler muda adalah anak sakit-sakitan dari orang tua miskin. Dia mendapat beasiswa ke Universitas Tübingen, di mana ia belajar untuk menjadi pendeta Lutheran. Sementara di sana, ia mempelajari karya Nicolaus Copernicus, yang mengajarkan bahwa planet-planet mengorbit matahari daripada Bumi, meskipun ia tidak memiliki bukti pengamatan untuk menawarkan sebagai bukti. Pada 1596, Kepler menulis makalah untuk publik pertama dari sistem Copernican ini dan merupakan sikap yang berbahaya, mengingat bahwa pada tahun 1539, Martin Luther, pendiri gereja Lutheran, mencemooh teori ini ketika ia pertama kali mendengarnya, sedangkan Gereja Katolik menganggap sesat seperti pada tahun 1615 mereka kemudian memperlakukan astronom Galileo Galilei sebagai tahanan rumah untuk publikasi pada subjek ini. Sumber: <http://www.space.com/15787-johannes-kepler.html>. [7]

4 Nicolaus Copernicus (1473-1543) adalah seorang ahli matematika dan astronom yang mengusulkan bahwa matahari adalah stasioner di pusat alam semesta dan bumi berputar di sekitarnya. Terganggu oleh kegagalan model geosentris Ptolemeus alam semesta yang mengikuti asumsi Aristoteles untuk gerak melingkar semua benda angkasa, dia bertekad untuk menghilangkan pandangan itu, Copernicus memutuskan bahwa ia bisa mencapai tujuannya hanya melalui model heliosentris. Sehingga ia menciptakan sebuah konsep alam semesta di mana jarak planet dari matahari melahirkan hubungan langsung dengan ukuran orbitnya. Pada saat ide

menyatakan bahwa Matahari adalah pusat tatasurya dan Bumi hanyalah planet pengiring yang perannya tidaklah lebih baik dari Merkurius, Venus, Mars dan Yupiter[12]. Dan adalah pekerjaan selama limabelas tahun yang dilakukan oleh Tycho Brahe<sup>7</sup> yang data pengamatannya digunakan oleh Kepler untuk merumuskan hukum semiempiris yang menjelaskan gerak planet-planet. Kemudian Newton berhasil memformulasikan secara teoretis hukum-hukum gerak dasar dalam tiga hukum yang fenomenal yang menjadi peletak dasar dalam pengembangan mekanika teori. Suatu terobosan yang sangat luar biasa dari

---

heliosentris Copernicus sangat kontroversial, namun, itu adalah awal dari perubahan dalam cara dunia dipandang, dan Copernicus datang untuk dilihat sebagai inisiator Revolusi Ilmiah. Sumber: <http://plato.stanford.edu/entries/copernicus/>[9]

5 Giordano Bruno, nama asli Filippo Bruno, julukan Il Nolano (lahir 1548, di Nola dekat Naples-meninggal 17 Februari 1600 di Roma), filsuf Italia, astronom, matematikawan, dan okultis yang diantisipasi teori ilmu pengetahuan modern. Yang paling terkenal di antaranya adalah teori tentang alam semesta yang tak terbatas dan banyaknya dunia, di mana ia menolak geosentris tradisional (atau bumi merupakan pusat semesta) ahli astronomi yang intuisinya melampaui teori heliosentris (Sun-centered) Copernicus; yang masih mempertahankan alam semesta terbatas dengan lingkup bintang tetap. Bruno, mungkin, terutama diingat untuk kematian tragisnya yang menderita di tiang gantungan karena kegigihannya mempertahankan gagasannya di tengah perselisihan antara Katolik Roma dan gereja-gereja reformis yang menegaskan bahwa konsep Aristoteles dan prinsip Gramedia adalah referensi baku dalam perjuangan mereka untuk pewartaan Injil di Eropa. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/82258/Giordano-Bruno> [10]

6 Galileo Galilei (lahir 15 Februari 1564, di Pisa Italia-meninggal 8 Januari 1642, Arcetri, dekat Florence), filsuf ilmu pengetahuan alam, astronom, dan ahli matematika Italia yang membuat kontribusi fundamental bagi ilmu-ilmu gerak, astronomi, dan kekuatan bahan juga dalam pengembangan metode ilmiah. Rumusannya gerak inersia, hukum benda jatuh, dan lintasan parabola menandai dimulainya perubahan mendasar dalam studi gerak benda-benda. Penekanannya bahwa buku ilmu pengetahuan alam ditulis dalam bahasa matematika mengubah filsafat alam dari catatan verbal kualitatif menjadi catatan penurunan matematika di mana eksperimen menjadi metode yang diakui untuk menemukan fakta-fakta alam. Kemudian, penemuannya tentang teleskop merevolusi astronomi dan membuka jalan bagi penerimaan sistem heliosentris Copernicus, tetapi proses advokasi gereja akhirnya menyebabkan proses inkuisisi terhadap dirinya. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/224058/Galileo>[11]

7 Seorang bangsawan Denmark, Tycho Brahe (1546-1601), membuat kontribusi penting dengan menyusun instrumen yang paling tepat tersedia sebelum penemuan teleskop untuk mengamati langit. Brahe membuat pengamatan dari Uraniborg, di sebuah pulau di Utara antara Denmark dan Swedia disebut Hveen. Instrumen Brahe memungkinkan dia untuk menentukan lebih tepat daripada yang dimungkinkan gerakan rinci tentang planet. Secara khusus, data Brahe secara ekstensif mengumpulkan informasi tentang planet Mars, yang kemudian menjadi bukti penting Kepler dalam perumusan tentang hukum gerak planet, karena data Brahe cukup tepat untuk menunjukkan bahwa orbit Mars bukan lingkaran tetapi elips. Sumber: <http://csep10.phys.utk.edu/astr161/lect/history/brahe.html>[13]

hukum Newton adalah prediksi Laverier<sup>8</sup> tentang keberadaan planet baru Neptunus berdasarkan rumusan teoritis tentang teori gangguan yang diprediksi dari penyimpangan gerak Planet Yupiter[15].

Hal yang sama juga dilakukan oleh Maxwell<sup>9</sup> yang memformulasikan tentang hukum-hukum elektrodinamika berdasarkan kepada hukum-hukum empiris yang telah ditemukan sebelumnya tentang gejala-gejala listrik dan

---

<sup>8</sup> Urbain-Jean-Joseph Le Verrier, (lahir 11 Maret 1811, Saint-Lô, Perancis.-meninggal 23 September 1877, Paris), astronom Perancis yang memprediksi secara matematika keberadaan planet Neptunus. Diangkat seorang guru astronomi di École Polytechnique ("Sekolah Politeknik"), Paris, pada tahun 1837, Le Verrier pertama melakukan studi ekstensif dari teori orbit planet Merkurius dan disusun secara periodek dalam tabel gerak planet itu. Pada tahun 1845 ia mengalihkan perhatiannya ke orbit yang tidak teratur dari Uranus, yang dijelaskan dengan mengasumsikan adanya sebuah planet yang tidak diketahui sebelumnya. Terpisah dari astronom Inggris John C. Adams, ia menghitung ukuran dan posisi benda yang tidak dikenal itu dan meminta kepada astronom Jerman Johann G. Galle untuk mencari benda itu. Pada 23 September 1846, setelah hanya satu jam mencari, Galle menemukan Neptunus hanya berbeda satu derajat dari posisi yang telah dihitung oleh Le Verrier. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/333461/Urbain-Jean-Joseph-Le-Verrier> [14]

<sup>9</sup> Ahli fisika Skotlandia James Clerk Maxwell, lahir 13 November 1831, meninggal 5 November 1879, melakukan pekerjaan revolusioner dalam elektromagnetisme dan teori kinetik gas. Setelah lulus (1854) dengan gelar di bidang matematika dari Trinity College, Cambridge, ia memegang profesor di Marischal College di Aberdeen (1856) dan King College di London (1860) dan menjadi orang pertama menjadi Profesor Fisika pada Cavendish Laboratory di Universitas Cambridge pada tahun 1871. Kontribusi besar pertama Maxwell untuk ilmu pengetahuan adalah studi cincin planet Saturnus, sifat yang banyak diperdebatkan. Maxwell menunjukkan bahwa stabilitas dapat dicapai hanya jika cincin terdiri dari banyak partikel padat kecil, penjelasan paling mungkin dan diterima. Maxwell selanjutnya melakukan studi molekul gas dalam gerakan cepat secara statistik dan mampu memperlakukan mereka secara statistik dalam perumusan sederhana pada tahun 1866, secara terpisah dari Ludwig Boltzmann sehingga saat ini disebut teori kinetika gas Maxwell - Boltzmann. Prestasi Maxwell paling penting adalah perluasan dan formulasi matematis dari teori Michael Faraday tentang listrik dan medan gaya magnetik. Dalam penelitiannya, yang dilakukan antara 1864 dan 1873, Maxwell menunjukkan bahwa beberapa persamaan matematika yang relatif sederhana bisa mengungkapkan perilaku listrik dan medan magnet dan alam saling terkait, yaitu, muatan listrik beresilasi menghasilkan medan elektromagnetik. Keempat persamaan diferensial parsial pertama kali muncul dalam bentuk sepenuhnya dikembangkan di Listrik dan Magnet (1873). Persamaan gelombang elektromagnetik Maxwell merupakan salah satu prestasi besar fisika abad ke-19. Sumber: <http://www.phy.pmf.unizg.hr/~dpaar/fizicari/xmaxwell.html>[16]



magnet. Hukum Coulomb<sup>10</sup> tentang interaksi antara muatan listrik dan magnet dan Biot<sup>11</sup>-Savart<sup>12</sup> yang menjelaskan tentang interaksi antara arus listrik dan medan magnet telah ditemukan sebagai hukum-hukum yang analog dengan hukum Newton tentang gravitasi. Kesemua fenomena tersebut dijelaskan dengan prinsip aksi pada jarak yang berjauhan. Kemudian setelah Newton dan pengamatan tentang fenomena listrik dan magnet juga diamati tentang fenomena optik cahaya. Pada masa-masa awal pengembangannya telah diamati bahwa cahaya terdiri dari gelombang transversal yang merambat dengan kecepatan yang tetap  $c \approx$

---

<sup>10</sup> Charles-Augustin de Coulomb, (lahir 14 Juni 1736, Angoulême, Prancis meninggal 23 Agustus 1806, Paris), fisikawan Perancis terkenal karena perumusan hukum Coulomb, yang menyatakan bahwa gaya antara dua muatan listrik sebanding dengan perkalian dari muatan itu dan berbanding terbalik dengan kuadrat jarak antara kedua muatan itu. Gaya Coulomb merupakan salah satu gaya utama yang terlibat dalam atom. Coulomb menghabiskan masa sembilan tahun di Hindia Barat sebagai insinyur militer dan kembali ke Prancis karena gangguan kesehatan. Setelah pecahnya Revolusi Prancis, ia mengundurkan diri ke sebuah perkebunan kecil di Blois dan mengabdikan dirinya untuk penelitian ilmiah. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/140071/Charles-Augustin-de-Coulomb>[17]

<sup>11</sup> Jean-Baptiste Biot, (lahir April 21, 1774, di Paris, Prancis meninggal dunia 3 Februari 1862, di Paris), fisikawan Perancis yang membantu merumuskan hukum Biot-Savart, yang menyangkut medan magnet, dan meletakkan dasar untuk saccharimetry, sebuah teknik yang berguna untuk menganalisis larutan gula. Dididik di École Polytechnique, Biot diangkat menjadi guru besar matematika di Universitas Beauvais pada 1797, kemudian menjadi profesor fisika matematika di College de France pada tahun 1800, dan terpilih menjadi anggota Akademi Ilmu Pengetahuan Perancis pada tahun 1803. Ia menemani J.-L. Gay-Lussac pada 1804 pada penerbangan balon pertama yang dilakukan untuk tujuan ilmiah. Keduanya menunjukkan bahwa medan magnet bumi tidak berbeda terasa dengan ketinggian, dan mereka menguji komposisi atmosfer bagian atas. Biot juga bekerja sama dengan fisikawan mencatat DFJ Arago dalam menyelidiki sifat pembiasan dari gas. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/66209/Jean-Baptiste-Biot>[18]

<sup>12</sup> Félix Savart ( 30 Juni 1791 - 16 Maret 1841 ) adalah anak Gérard Savart , seorang insinyur di sekolah militer dari Metz . Saudaranya , Nicolas mahasiswa École Polytechnique dan perwira korps teknik memang bekerja pada getaran . Di rumah sakit militer di Metz , Savart belajar kedokteran dan kemudian ia melanjutkan untuk melanjutkan studinya di Universitas Strasbourg , di mana ia menerima gelar medisnya pada tahun 1816 . Savart menjadi profesor di College de France pada tahun 1836 dan merupakan co - pencetus Hukum Biot - Savart , bersama dengan Jean - Baptiste Biot . Bersama-sama , mereka bekerja pada teori magnet dan arus listrik . Hukum mereka dikembangkan sekitar tahun 1820. Hukum Biot - Savart berkaitan medan magnet dengan arus listrik yang merupakan sumber mereka. Félix Savart juga mempelajari akustik . Ia mengembangkan roda Savart yang menghasilkan suara pada frekuensi tertentu menggunakan piringan berputar. Sumber: [http://en.wikipedia.org/wiki/F%C3%A9lix\\_Savart](http://en.wikipedia.org/wiki/F%C3%A9lix_Savart)[19]

$3 \times 10^8 \text{ m/det}$ . Namun, bagaimana hakikatnya pada saat itu belum sepenuhnya diketahui[20].

Kajian awal cahaya ini merupakan langkah awal perkembangan dari elektrodinamika, yang merupakan kerangka dasar dari bangunan teori Maxwell, yang seperti halnya hukum Newton merupakan generalisasi dari hukum-hukum terpisah dalam satu kesatuan elektrodinamika Maxwell[21]. Teori Maxwell memprediksi tentang keberadaan medan elektromagnetik yang membawa interaksi terus-menerus dari satu titik ke titik lainnya, juga prediksi tentang keberadaan gelombang elektromagnetik yang kemudian ditemukan oleh Hertz<sup>13</sup>. Teori tentang perambatan gelombang elektromagnetik menjadi dasar dalam pengembangan teknologi radio. Keberhasilan lain dari hukum Maxwell adalah tentang bukti dari *sifat gelombang dari cahaya*.

Pandangan tentang materi dan listrik memiliki struktur atom sangat penting dalam hubungannya dengan kemunculan mekanika kuantum. Pandangan tentang atom ini sebenarnya memiliki akar sejarah yang panjang namun, kurang memiliki dasar logika ilmiah sampai kemudian ditemukan dasar-dasar hukum dalam ilmu kimia; hukum perbandingan tetap, teori kinetik materi dan secara khusus teori kinetika gas yang berdasarkan kepada statistik Maxwell-Boltzmann, yang tetap menyisakan teori probabilitas tidak bisa secara sempurna dapat dijelaskan dengan teori mekanika Newton dan berisikan sejumlah parameter yang

---

<sup>13</sup> Heinrich Hertz, (lahir 22 Februari 1857 di Hamburg-meninggal 1 Januari 1894 di Bonn), fisikawan Jerman pertama yang menyiarkan dan menerima gelombang radio. Dia menerima gelar Ph.D. magna cum laude dari Universitas Berlin pada tahun 1880, di mana ia belajar di bawah bimbingan Hermann von Helmholtz. Pada tahun 1883 ia mulai melakukan studi tentang teori elektromagnetik dari James Clerk Maxwell. Antara 1885 dan 1889, sementara ia adalah profesor fisika di Politeknik Karlsruhe, ia menghasilkan gelombang elektromagnetik di laboratorium dan diukur panjang dan kecepatannya. Dia berhasil menunjukkan tentang sifat getaran dan kerentanan mereka terhadap refleksi dan refraksi. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/263899/Heinrich-Hertz>. [22]

hanya merupakan parameter kolektif dari sekumpulan partikel. Metoda statistik memungkinkan untuk menjelaskan sejumlah sifat makroskopis partikel seperti temperatur dan kalor jenis yang secara tak langsung menunjukkan keberadaan partikel elementer seperti atom. Suatu bukti yang tidak dapat ditolak tentang teori atom materi adalah perumusan fluktuasi, yaitu fluktuasi statistik dari perilaku partikel tunggal. Gerak Brown<sup>14</sup> merupakan contoh penting untuk ini karena menjelaskan tentang gerakan molekul dalam cairan[24]. Bukti yang tidak terbantahkan lagi adalah tentang struktur atom materi yang diamati oleh eksperimen Laue<sup>15</sup> tentang difraksi sinar-X dari kristal dan pengukuran spektroskopik plat fotografi yang dilakukan oleh Aston<sup>16</sup> tentang masa atom dari berbagai isotop unsur[27].

---

<sup>14</sup> Gerak Brown, juga disebut gerakan Brown merupakan salah satu dari berbagai fenomena fisik di mana beberapa benda kecil terus mengalami fluktuasi acak. Diambil dari nama ahli botani Skotlandia Robert Brown, yang pertama untuk mempelajari fluktuasi tersebut (1827). Jika sejumlah partikel tunduk pada gerak Brown dalam media tertentu dan tidak ada arah yang beraturan untuk beresilasi, maka selama periode waktu tertentu partikel akan cenderung tersebar merata di seluruh media. Dengan demikian, jika A dan B adalah dua daerah yang berdekatan dan, pada waktu  $t$ , A mengandung dua kali lebih banyak partikel B, pada saat itu kemungkinan partikel yang meninggalkan A untuk memasuki B dua kali lebih besar sebagai probabilitas bahwa partikel akan meninggalkan B untuk masuk ke A. Proses fisik di mana substansi cenderung menyebar terus dari daerah konsentrasi tinggi ke daerah konsentrasi rendah disebut difusi. Difusi dapat dianggap sebagai manifestasi makroskopik gerak Brown pada tingkat mikroskopis. Dengan demikian, adalah mungkin untuk mempelajari difusi dengan mensimulasikan gerak partikel Brown dan menghitung perilaku rata-ratanya. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/81815/Brownian-motion>[23]

<sup>15</sup> Max von Laue, lengkapnya Max Theodor Felix von Laue (lahir 9 Oktober 1879, di Pfaffendorf, dekat Koblenz, Jerman. = meninggal dunia April 23, 1960, di Berlin, Jerman.), Penerima Hadiah Nobel Jerman untuk Fisika pada tahun 1914 untuk penemuan difraksi sinar X pada kristal. Hal ini memungkinkan para ilmuwan untuk mempelajari struktur kristal dan karenanya ditandai cikal bakal dari fisika zat padat, bidang penting dalam pengembangan elektronika modern. Laue menjadi profesor fisika di University of Zurich pada tahun 1912. Laue adalah orang pertama yang menyarankan penggunaan kristal untuk bertindak sebagai kisi-kisi pada difraksi (*grating*). Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/332240/Max-von-Laue>[25]

<sup>16</sup> Francis William Aston, (lahir 1 September 1877, di Harborne, Birmingham, Inggris. = meninggal 20 November 1945, di Cambridge, Cambridgeshire, Inggris), fisikawan Inggris yang

Sebagai bagian dari mekanika kuantum, maka kimia kuantum dapat kita definisikan sebagai bagian dari mekanika kuantum yang diaplikasikan ke dalam ilmu kimia. Sejarah kelahiran kimia kuantum dapat dianggap bersamaan dengan kelahiran mekanika kuantum karena penyelesaian mekanika kuantum pertama yang berhasil dilakukan adalah untuk menemukan hakikat dari suatu unsur kimia yaitu hidrogen dan interaksinya dengan atom yang lain pada tahun 1926[28]. Sejak itu riset tentang kimia kuantum terus mengalami perkembangan yang sangat pesat, pada tahun 1990-2000-an merupakan puncak emas perkembangan riset komputasi kimia[29]. Sejak dikembangkan oleh Debye<sup>17</sup>, tentang interaksi antar molekul berdasarkan kepada pengembangan persamaan gas Van der Waals<sup>18</sup>,

---

memenangkan Hadiah Nobel Kimia pada tahun 1922 untuk penemuan sejumlah besar isotop, menggunakan spektrometer massa, dan untuk merumuskan "aturan seluruh nomor" yang memiliki massa isotop yang merupakan kelipatan bulat dari massa atom hidrogen. Spektrometer massa adalah perangkat yang memisahkan fragmen massa atom atau molekul yang berbeda dengan akurasi yang luar biasa. Alat ini banyak digunakan dalam geologi, kimia, biologi, dan fisika nuklir. Aston dididik dan dilatih sebagai ahli kimia, namun, pada kelahiran kembali fisika menyusul

penemuan sinar<sup>☉</sup>X pada tahun 1895 dan radioaktivitas pada tahun 1896, ia mulai pada tahun 1903

untuk mempelajari penciptaan sinar<sup>☉</sup>X oleh aliran arus melalui tabung yang diisi gas bertekanan rendah dan tegangan listrik yang tinggi. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/39838/Francis-William-Aston>[26]

<sup>17</sup> Peter Debye, nama lengkapnya Peter Joseph William Debye, nama Belanda Petrus

Josephus Wilhelmus Debije (lahir 24 Maret 1884, di Maastricht Belanda<sup>☉</sup>meninggal dunia 2 November 1966, Ithaca, New York, AS), ahli kimia fisik yang mengamati momen dipol, sinar-X, dan hamburan cahaya dalam gas yang kemudian membawanya Hadiah Nobel 1936 untuk bidang Kimia. Setelah mendapatkan gelar Ph.D. dalam bidang fisika dari University of Munich tahun 1908, Debye mengajar fisika di Universitas Zürich, Utrecht, Göttingen, dan Leipzig sebelum menjadi direktur Institut Kaiser Wilhelm (sekarang Max-Planck Institut) untuk bidang Fisika di Berlin tahun 1935. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/154823/Peter-Debye>[30]

<sup>18</sup> Johannes Diederik van der Waals, (lahir 23 November 1837 di Leiden Belanda<sup>☉</sup>meninggal dunia 9 Maret 1923 di Amsterdam Belanda), fisikawan Belanda, pemenang Hadiah Nobel 1910 dalam bidang Fisika untuk penelitiannya pada materi gas dan cairan. Buah karyanya membuat studi tentang suhu mendekati nol mutlak menjadi mungkin dilakukan. Seorang pria otodidak yang mendapat kesempatan belajar pada Universitas Leiden. Van der Waals pertama kali

kemudian Wang<sup>19</sup> dkk, pada tahun 1928 menunjukkan hubungan gaya lemah yang terjadi pada atom hidrogen dalam molekul, kemudian pada tahun 1936 London merumuskan teori umum tentang gaya molekul[33]. Setelah perkembangan mekanika kuantum interaksi molekul terus berkembang dengan pesat, berbagai teknik komputasi kimia bermunculan. Pendekatan Born<sup>20</sup>-Oppenheimer<sup>21</sup> yang

---

dikenal pada tahun 1873 melalui disertasi doktrinya tentang " On the Continuity of the Liquid and Gaseous State," yang dengan ini ia dianugerahi gelar doktor. Dalam menyelesaikan penelitiannya, ia mengungkapkan bahwa hukum gas ideal dapat diturunkan untuk menjelaskan sifat-sifat gas nyata. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/633658/Johannes-Diederik-van-der-Waals>[31]

<sup>19</sup> Shou Chin Wang (S.C. Wang) adalah fisikawan teoritis China yang pertama. Dia bekerja pada proyek pengembangan mekanika kuantum. Dia memasuki bidang mekanika kuantum pada waktu perkembangan awal kuantum dan melakukan pekerjaan yang monumental pada usia dini. Namun, kemudian ia meninggalkan dunia akademik dan menyadari bahwa hanya industri yang bisa menyelamatkan China selama masa perang, bukan mekanika kuantum. Dia adalah saudara dari Ming Chen Wang. Lahir tahun 1904 di Suzhou (苏州), Provinsi Jiangsu, Cina tahun 1922, memasuki Universitas Tsinghua, Beijing, Cina, tahun 1925, M.S. dalam bidang fisika di Cornell University, tahun 1925, sarjana sastra di fakultas sastra Harvard University tahun 1927, Ph.D. dalam bidang fisika di Universitas Columbia, tahun 1929-1931, profesor dan ketua Departemen Fisika di Universitas Zhejiang, Cina. Tahun 1931-1933, profesor dan ketua Departemen Fisika di Universitas Peking, Cina, tahun 1933-1943, karena invasi Jepang selama Perang Dunia II, ia meninggalkan akademisi dan menjadi terlibat dalam industri manufaktur yang memproduksi barang-barang militer dan sipil yang signifikan bagi China. Tahun 1943-1949, bekerja di kedutaan besar China di AS, tahun 1949-1969, kembali akademisi dan bekerja di MIT Lincoln Laboratory di AS dan tahun 1984 meninggal di AS. Sumber: <https://sites.google.com/site/kaizhangstatmech/chinese-scientists/scwang>. [32]

<sup>20</sup> Max Born, (lahir 11 Desember 1882, di Breslau, Jerman. [Sekarang Wroclaw, Polandia] – Meninggal dunia 5 Januari 1970, Göttingen, Jerman), Fisikawan Jerman yang berbagi Hadiah Nobel untuk Fisika pada tahun 1954 dengan Walther Bothe untuk interpretasi probabilistik tentang mekanika kuantum. Born berasal dari kelas menengah atas, keluarga Yahudi yang telah berasimilasi. Pada awalnya ia dianggap terlalu lemah untuk bersekolah di sekolah umum, jadi dia belajar di rumah sebelum diperbolehkan untuk menghadiri König Wilhelm Gymnasium di Breslau. Setelah itu ia melanjutkan studinya di bidang fisika dan matematika di universitas di Breslau, Heidelberg, Zürich, dan Göttingen. Di University of Göttingen dia menulis disertasinya (1906), berjudul stabilitas elastis dawai dan lembaran/lempeng tipis, di bawah arahan matematikawan Felix Klein, yang ia dianugerahi gelar doktor pada tahun 1907. Setelah memasuki wajib militer dan tinggal di Universitas Cambridge, di mana ia bekerja dengan fisikawan Joseph Larmor dan JJ Thomson, kembali ke Breslau pada tahun akademik 1908-1909 dan memulai studi ekstensif terhadap teori Albert Einstein tentang relativitas khusus. Melalui penguasaan mendalam di bidang ini, Born diundang kembali ke Göttingen sebagai asisten fisikawan matematis Hermann Minkowski. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/74253/Max-Born>[34]

<sup>21</sup> J. Robert Oppenheimer, atau lengkapnya Julius Robert Oppenheimer (lahir 22 April 1904, New York, New York, AS- meninggal dunia 18 Februari 1967, di Princeton, New Jersey), fisikawan teoretis Amerika dan administrator ilmu pengetahuan, tercatat sebagai direktur Los

pertama-tama menunjukkan terjadinya gangguan dari partikel elektron lain sebagaimana prediksi Lavelier dalam perintisan menemukan planet baru, menggugah para ilmuwan untuk menggali lebih jauh tentang bagaimana teori baru pembentukan molekul dan interaksi antar molekul[36].

Pendekatan Hartree<sup>22</sup>-Fock<sup>23</sup> dan fungsi gelombang SCF (*Self Consistent Field*) memberi warna baru kepada kita tentang sisi pandang terhadap fungsi gelombang. Dengan menggunakan pendekatan orbital atom-atom yang berikatan dapat dipandang menjadi bentuk yang tersederhanakan dalam fungsi gelombang yang relatif sederhana. Dengan menggunakan himpunan basis (*basis set*), orbital

---

laboratorium Alamos selama pengembangan bom atom ( 1943-1945 ) dan sebagai direktur Institute for Advanced Study , Princeton ( 1947-1966 ) . Tuduhan ketidaksetiaan menyebabkan sidang pemerintah yang mengakibatkan hilangnya izin keamanan dan kedudukannya sebagai penasihat eselon tertinggi pada pemerintah Amerika Serikat . Kasus ini menjadi terkenal di dunia ilmu pengetahuan karena implikasinya menyangkut masalah politik dan moral yang berkaitan dengan peran ilmuwan dalam pemerintahan. Oppenheimer adalah putra seorang imigran Jerman yang telah membuat kekayaannya dengan mengimpor tekstil di New York City . Selama studi sarjana di Universitas Harvard, Oppenheimer unggul dalam bahasa Latin , Yunani, fisika, dan kimia , puisinya diterbitkan oleh sebuah harian di AS, dan dia juga belajar filsafat Oriental . Setelah lulus pada 1925 , dia berlayar ke Inggris untuk melakukan penelitian di Laboratorium Cavendish di Universitas Cambridge di bawah arahan Lord Ernest Rutherford yang memiliki reputasi internasional untuk studi perintis pada struktur atom. Sumber: [global.britannica.com/EBchecked/topic/430220/J-Robert-Oppenheimer](http://global.britannica.com/EBchecked/topic/430220/J-Robert-Oppenheimer)[35]

<sup>22</sup> Douglas Hartree R., lengkapnya Douglas Rayner Hartree (lahir 27 Maret 1897, Cambridge, Cambridgeshire, Inggris.-meninggal dunia 12 Februari 1958 di Cambridge), fisikawan Inggris, matematikawan, dan perintis komputer. Di Manchester University di pertengahan 1930-an ia membangun sebuah komputer mekanis untuk memecahkan persamaan diferensial, berdasarkan analisa diferensial Vannevar Bush. Selama Perang Dunia II ia terlibat dengan proyek ENIAC di AS. Di Universitas Cambridge ia memperkenalkan suatu pendekatan Self-Consistent Field (SCF) yang merupakan dasar untuk perhitungan atom yang paling mungkin dari pemahaman fisik terhadap mekanika gelombang dari atom. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/256208/Douglas-R-Hartree>[37]

<sup>23</sup> Vladimir Aleksandrovich Fock, (lahir 22 Desember 1898, di St Petersburg, Rusia-meninggal dunia 27 Desember 1974, di St Petersburg, Rusia,). Fisikawan matematis Rusia yang membuat sumbangan besar dalam mekanika kuantum dan teori relativitas umum. Fock menjadi tuli pada usia muda karena cedera yang diderita akibat dinas militer di Perang Dunia I. Pada tahun 1922 ia lulus dari Universitas Petrograd (*Saint Petersburg State University*), dan ia mengajar di sana dari 1924, kemudian menjadi profesor pada tahun 1932. Persamaan Hartree-Fock, dikembangkan olehnya pada tahun 1930 dan menjadi metode pendekatan dasar untuk perhitungan yang melibatkan atom banyak elektron dalam mekanika kuantum. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/1474954/Vladimir-Aleksandrovich-Fock>[38]

atom yang kompleks dapat dibuat sederhana dengan hanya pembatasan orbital valensi sehingga dengan pendekatan ini geometri sederhana dari orbital pembentuk molekul dapat dibuat lebih sederhana menjadi ikatan sigma, phi dan mungkin delta yang merepresentasikan ikatan tunggal, rangkap dua, tiga dan mungkin empat pada struktur ikatan sederhana yang di kimia dasar mungkin dikenal mahasiswa sebagai struktur titik Lewis<sup>24</sup>[40].

Pendekatan ikatan valensi kemudian telah mampu menjelaskan secara lebih sederhana tentang bagaimana proses pembentukan ikatan ion dan kovalen serta resonansi yang terjadi antara struktur satu dengan struktur lainnya[41]. Walaupun dalam perkembangannya teori ikatan valensi ini mengalami kesulitan tersendiri terhadap perhitungan komputasinya, namun, pendekatan ikatan valensi ini sangat membantu dalam penjelasan ikatan antar molekul-molekul organik[42]. Sehingga ahli kimia organik sangat terbantu dengan pendekatan ikatan valensi ini walaupun mungkin sebagian besar teori ikatan molekul mengalami perkembangan yang lebih pesat namun, komputasi ikatan valensi lebih gampang untuk dipakai dalam kimia organik dalam perhitungannya[43].

Pada molekul poliatomik, perluasan persamaan gelombang Schrödinger<sup>25</sup> [44]membawa kita kepada pengembangan komputasi kimia yang diikuti dengan

---

<sup>24</sup> Gilbert N. Lewis, nama lengkap Gilbert Newton Lewis (lahir 23 Oktober 1875, Weymouth, Mass, AS-meninggal dunia tanggal 23 Maret 1946, di Berkeley, California), ahli kimia fisik Amerika terkenal karena kontribusinya untuk termodinamika kimia, Model pasangan elektron dari ikatan kovalen, teori elektronik asam dan basa, pemisahan dan studi deuterium dan senyawanya, dan karyanya pada fosforesensi dan keadaan triplet (di mana jumlah kuantum untuk jumlah momentum sudut spin adalah 1). Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/338142/Gilbert-N-Lewis>[39]

<sup>25</sup> Erwin Schrödinger lahir pada tanggal 12 Agustus 1887, di Wina , satu-satunya anak dari Rudolf Schrödinger , yang menikah dengan seorang putri dari Alexander Bauer , Profesor Kimianya pada Technical College of Vienna. Ayah Erwin berasal dari keluarga Bavarian yang generasi sebelumnya telah menetap di Wina. Dia adalah seorang pria yang sangat berbakat dengan berbagai bidang pendidikan. Setelah menyelesaikan studi kimia, ia mengabdikan dirinya selama

bertahun-tahun mendalami lukisan Italia. Setelah itu dia mengambil kuliah botani, dan menerbitkan sejumlah makalah pada filogeni tanaman. Perhatian luas Schrödinger tentang ilmu pengetahuan mulai terlihat pada tahun-tahun awal sekolah di Gymnasium, di mana ia tidak hanya memiliki keinginan untuk mendalami disiplin ilmu, tetapi juga sangat perhatian terhadap tata bahasa kuno dan keindahan puisi Jerman. (hal yang dibencinya adalah menghafal data dan belajar dari buku.) Dari 1906-1910 dia menjadi seorang mahasiswa di Universitas Wina, selama waktu itu dia berada di bawah pengaruh kuat dari Fritz Hasenöhl, yang menggantikan Boltzmann. Saat itulah tahun-tahun dimana Schrödinger memperoleh penguasaan terhadap masalah nilai eigen dalam fisika secara terus menerus, sehingga meletakkan dasar untuk pekerjaan besar pada masa depannya. Selanjutnya, sebagai asisten Franz Exner, ia bersama-sama dengan temannya KWF Kohlrusch melakukan kerja praktek bagi siswa. Selama Perang Dunia Pertama ia menjabat sebagai perwira artileri. Pada tahun 1920 ia mengambil posisi akademik sebagai asisten Max Wien, kemudian di Stuttgart (dosen luar biasa), Breslau (profesor biasa), dan di Universitas Zurich (menggantikan von Laue) di mana ia menetap selama enam tahun. Tahun-tahun ini Schrödinger mengenang dengan bahagia pengalamannya di Zurich ini, ia menikmati begitu banyak kontak dan persahabatan dari banyak rekan-rekannya, di antaranya Hermann Weyl dan Peter Debye. Itu juga periode paling subur, yang aktif terlibat dalam berbagai mata kuliah fisika teoretis. Makalahnya pada saat itu terkait dengan kalor jenis padatan pada persoalan termodinamika (dia sangat tertarik pada teori probabilitas Boltzmann) dan spektrum atom, di samping itu, ia menekuni studi fisiologis warna (sebagai hasil dari kontak dengan Kohlrusch dan Exner, dan kuliah Helmholtz). Penemuan besarnya yaitu persamaan gelombang Schrödinger, dibuat pada akhir zaman ini yaitu selama paruh pertama tahun 1926. Persamaan itu muncul sebagai akibat dari ketidakpuasannya terhadap kondisi kuantum dalam teori orbit Bohr dan keyakinannya bahwa spektrum atom harus benar-benar ditentukan oleh beberapa jenis masalah nilai eigen. Untuk pekerjaan ini ia bersama dengan Dirac mendapat Hadiah Nobel pada tahun 1933. Pada tahun 1927 Schrödinger pindah ke Berlin sebagai pengganti Planck. Ibukota Jerman itu merupakan pusat kegiatan ilmiah yang besar dan ia antusias mengambil bagian dalam kolokium mingguan antara rekan-rekan. Banyak dari mereka "melebihi dia dalam usia dan reputasi". Ketika zaman Hitler datang (1933), Schrödinger memutuskan dia tidak bisa melanjutkan risetnya di Jerman. Dia datang ke Inggris dan untuk sementara mengadakan kolaborasi dengan Universitas Oxford. Pada tahun 1934 ia diundang untuk memberi kuliah di *Princeton University* dan ditawarkan posisi permanen di sana tapi ia tidak menerima. Pada tahun 1936 ia ditawarkan posisi di *University of Graz*, yang diterimanya setelah banyak pertimbangan dan karena kerinduannya dengan negara asalnya melebihi kewaspadaannya. Dengan terjadinya aneksasi Austria pada tahun 1938, ia langsung dalam kesulitan karena itu dia meninggalkan Jerman pada tahun 1933 yang dianggap sebagai suatu tindakan yang tidak bersahabat. Segera setelah itu ia berhasil melarikan diri ke Italia, dari sana ia kemudian melanjutkan ke Oxford dan kemudian ke Universitas Ghent. Setelah tinggal sebentar ia pindah ke lembaga yang baru dibuat yaitu *Institute for Advanced Studies* di Dublin, di mana ia menjadi Direktur Sekolah untuk Fisika Teoretis. Dia menetap di Dublin sampai ia pensiun pada tahun 1955. Selama itu Schrödinger melanjutkan penelitian dan menerbitkan banyak makalah tentang berbagai topik, termasuk masalah gravitasi pemersatu dan elektromagnetisme, yang juga diserap Einstein dan yang masih belum terpecahkan, (dia juga penulis buku kecil terkenal "Apa itu Hidup?", 1944). Dia tetap sangat tertarik pada dasar-dasar fisika atom. Schrödinger menyukai deskripsi ganda yang berlaku umum dalam bentuk gelombang dan partikel, dengan interpretasi statistik untuk gelombang, dan mencoba untuk membuat sebuah teori dalam bentuk gelombang saja. Hal ini menyebabkan dia menjadi kontroversi dengan fisikawan terkemuka lainnya. Setelah pensiun, ia kembali ke posisi terhormat di Wina. Dia meninggal pada 4 Januari 1961, setelah lama sakit, meninggalkan seorang teman yang setia, Annemarie Bertel, yang dinikahinya pada tahun 1920. Sumber: From *Nobel Lectures, Physics 1922-1941*, Elsevier Publishing Company, Amsterdam, 1965

?

foot note  
1 hal



perkembangan pemrograman komputer[45]. Sehingga dalam beberapa dekade ini perkembangan kimia kuantum seiring dengan komputasi kimia[46]. Dengan perkembangan program Fungsi Gaussian<sup>26</sup> dengan komputer maka berkembang juga ilmu kimia kuantum[48]. Pada tahun 1990 – 2000-an perkembangan kimia kuantum mengalami kemajuan pesat dalam perhitungan secara *ab-initio* dan teori fungsi kerapatan (*density functional theory*), yang merupakan metoda perhitungan kekuatan ikatan pada tingkat molekul dengan menggunakan komputasi kimia[42]. Banyak sekali kimiawan yang telah berjasa dalam mengembangkan komputasi kimia ini, pada tahun 2013 ini anugerah tertinggi sains dalam bidang kimia diberikan kepada tiga orang kimiawan yang telah berjasa dalam mengembangkan komputasi kimia yaitu **Martin Karplus** dari Université de Strasbourg, Strasbourg, France, dan Harvard University, Cambridge, MA, USA, **Michael Levitt** dari Stanford University School of Medicine, Stanford, CA, USA dan **Ariel Warshel** dari University of Southern California, Los Angeles, CA, USA, atas usaha kerasnya dalam pengembangan model multiskala untuk sistem senyawa yang kompleks atau dalam bahasa Inggris : "*for the development of multiscale models for complex chemical systems*". Tidak berlebihan untuk menyatakan bahwa riset kimia kuantum dan komputasi kimia akan terus berkembang dalam beberapa tahun mendatang[49].

---

<sup>26</sup> Dalam matematika, fungsi Gaussian (dinamakan dari Carl Friedrich Gauss) adalah fungsi dari bentuk:  $f(x) = ae^{-\frac{(x-b)^2}{2c^2}} + d$  untuk beberapa konstanta riil  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$ , dan  $e \approx 2,71828$  ... (bilangan Euler). Grafik Gaussian merupakan karakteristik simetris berbentuk "kurva lonceng" parameter  $a$  adalah ketinggian puncak kurva ini,  $b$  adalah posisi tengah puncak, dan  $c$  (standar deviasi) mengontrol lebar "lonceng". Fungsi gaussian banyak digunakan dalam statistik di mana dia bisa menggambarkan distribusi normal, dalam pemrosesan sinyal cocok dipakai untuk mendefinisikan gangguan Gauss, dalam pengolahan pencitraan Gaussians dua dimensi digunakan untuk fungsi Gaussian, dan dalam matematika digunakan untuk menyelesaikan persamaan panas dan persamaan difusi untuk menentukan persamaan Weierstrass. Sumber: [47]

## 2. Keruntuhan Mekanika Klasik

### 2.1 Penemuan Elektron



ada akhir abad ke-19 para ahli fisika mengusulkan hipotesis tentang “aether”<sup>27</sup> yaitu suatu medium kasat mata yang mentransmisikan seluruh gelombang energi yaitu panas, magnet, listrik dan cahaya sehingga gelombang tersebut dapat merambat dalam ruang, sebagaimana gelombang pada air membutuhkan air sebagai medium untuk merambat, tanpa air, gelombang air tidak ada[12]. Analog dengan gelombang air, cahaya melintasi ruang dari matahari menuju bumi harus melewati medium (menurut dugaan waktu itu), demikian juga dengan medan magnet, gravitasi, dan sebagainya. Terlebih lagi kemudian hipotesis ini menjadi cukup kuat ketika Faraday<sup>28</sup> mengusulkan adanya “aether” yang menjadi medium untuk listrik, sehingga hipotesis tentang aether ini relatif kuat.

---

<sup>27</sup> Menurut ilmu pengetahuan kuno dan abad pertengahan, aether (Yunani αἰθήρ= aithēr), juga dieja sebagai eter, adalah materi yang mengisi wilayah alam semesta di atas lingkungan terestrial. Konsep eter digunakan dalam beberapa teori untuk menjelaskan beberapa fenomena alam, seperti rambatan cahaya dan gravitasi. Pada akhir abad ke-19, fisikawan mendalilkan bahwa ether meresap di seluruh ruang, menyediakan media sehingga cahaya bisa merambat dalam ruang hampa, namun keberadaan media tersebut dibantah dalam percobaan Michelson-Morley. Sumber: [http://en.wikipedia.org/wiki/Aether\\_%28classical\\_element%29](http://en.wikipedia.org/wiki/Aether_%28classical_element%29)[50]

<sup>28</sup> Kimiawan dan fisikawan Inggris Michael Faraday lahir 22 September 1791, meninggal dunia 25 Agustus 1867, dikenal dengan percobaan awal dalam listrik dan magnet. Banyak menganggap dia praktikan terbesar yang pernah hidup. Beberapa konsep beliau turunkan secara langsung dari percobaan, seperti garis gaya magnet telah menjadi gagasan dalam fisika modern. Faraday lahir di Newington, Surrey, dekat London. Ia menerima sedikit pendidikan dasar lebih lama, dan pada usia 14 tahun, ia magang ke penjilid buku. Di sana ia menjadi tertarik dengan ilmu fisika dan kimia pada waktu itu. Setelah mendengar kuliah kimia dari kimiawan terkenal Humphry Davy, ia mengirimkan catatan kepada Davy yang ditulis berdasarkan kuliahnya. Hasilnya Faraday diangkat sebagai asisten Davy di usia 21 tahun di laboratorium Royal Institution di London. Selama tahun-tahun awal karya ilmiahnya, Faraday menyibukkan diri terutama dengan masalah kimia. Dia menemukan dua klorida baru karbon dan berhasil mencairkan gas klorin dan beberapa

Walaupun hipotesis aether ini masih kabur, namun tidak sedikit ahli fisika yang menerimanya tanpa melakukan pengujian ilmiah. Pengujian ilmiah tentang hipotesis 'aether' ini dilakukan oleh dua orang ilmuwan Ohio, Amerika Serikat pada tahun 1887 yaitu Michelson<sup>29</sup> dan Morley. Dengan merancang peralatan yang disebut interferometer dan melakukan pengukuran yang sangat teliti, keduanya menemukan hasil bahwa "aether" itu tidak ada. Perambatan cahaya, gravitasi, medan magnet dan listrik ternyata tidak memerlukan medium. Hasil ini cukup kontroversial pada waktu itu, namun, cukup banyak juga ahli fisika yang menerimanya dan mengembangkan teori-teori baru, diantaranya adalah H. A. Lorentz<sup>30</sup>, ahli fisika Belanda. Lorentz mengembangkan transformasi gerak relatif terhadap benda tanpa keterlibatan medium. Pada awalnya transformasi ini tidak memberikan arti fisis yang berarti, namun, seorang pemuda pegawai paten di Swiss dengan sangat jenius mengembangkan transformasi Lorentz ini untuk

---

gas lainnya . Dia memisahkan senyawa benzena pada tahun 1825, tahun di mana ia diangkat sebagai ketua laboratorium. Davy, yang memiliki pengaruh besar dalam pemikiran Faraday telah menunjukkan pada tahun 1807 bahwa logam natrium dan kalium dapat diendapkan dari senyawanya dengan bantuan arus listrik, suatu proses yang dikenal sebagai elektrolisis . Faraday penuh semangat berusaha keras menjelaskan fenomena tersebut dan pada tahun 1834 dihasilkan hukum elektrolisis Faraday yang terkenal. Selain dalam bidang kimia, Faraday membuat berbagai riset dalam bidang fisika terutama dalam bidang listrik dan magnet. Sumber: <http://www.phy.pmf.unizg.hr/~dpaar/fizicari/xfaraday.html>[51]

<sup>29</sup> Percobaan Michelson-Morley dilakukan pada tahun 1887 oleh Albert Michelson dan Edward Morley di daerah *Case Western Reserve University di Cleveland , Ohio*. Dia mencoba untuk mendeteksi gerak relatif materi melalui stasioner *luminiferous* eter ("ether angin ") . Hasil negatif yang diperolehnya dianggap sebagai bukti kuat pertama melawan teori eter kemudian memulai jalur penelitian yang akhirnya membuahkan teori relativitas khusus, di mana konsep eter stasioner tidak memiliki peran. Percobaan Michelson - Morley telah diulang berkali-kali dengan terus meningkatkan sensitivitas . Termasuk percobaan pada tahun 1902-1905, dan serangkaian percobaan pada tahun 1920. Selain itu, percobaan resonator baru-baru ini telah mengkonfirmasi tidak adanya angin eter. Bersama dengan Ives - Stilwell dan Kennedy - Thorndike percobaan , percobaan Michelson - Morley membentuk salah satu tes dasar teori relativitas khusus. Sumber: [http://en.wikipedia.org/wiki/Michelson-Morley\\_experiment](http://en.wikipedia.org/wiki/Michelson-Morley_experiment)[52]

<sup>30</sup> Hendrik Antoon Lorentz Sabtu (18 Juli 1853-4 February 1928) adalah seorang fisikawan Belanda yang berbagi Penghargaan Nobel dalam Fisika 1902 dengan Pieter Zeeman untuk penemuan dan penjelasan teoritis efek Zeeman. Dia juga menemukan persamaan transformasi yang kemudian digunakan oleh Albert Einstein untuk menggambarkan ruang dan waktu dalam merumuskan Relativitas Khusus. Sumber: [http://en.wikipedia.org/wiki/Hendrik\\_Lorentz](http://en.wikipedia.org/wiki/Hendrik_Lorentz)[53]

mengembangkan teori gerak relatif terhadap partikel yang merambat dengan kecepatan cahaya dan tanpa medium. Pemuda ini bernama A. Einstein<sup>31</sup> dan

---

<sup>31</sup> Albert Einstein lahir di Ulm, di Württemberg, Jerman, pada tanggal 14 Maret 1879. Enam minggu kemudian keluarganya pindah ke Munich, di mana ia kemudian mulai sekolah di Lapangan Tenis Luitpold. Kemudian, mereka pindah ke Italia dan Albert melanjutkan pendidikannya di Aarau, Swiss dan pada tahun 1896 ia memasuki Sekolah Politeknik Federal Swiss di Zurich untuk dilatih sebagai seorang guru di fisika dan matematika. Pada tahun 1901, tahun ia mendapatkan ijazah, ia memperoleh kewarganegaraan Swiss dan, karena ia tidak dapat menemukan tempat untuk mengajar, ia menerima posisi sebagai asisten teknis di Kantor Paten Swiss. Pada 1905 ia memperoleh gelar doktor. Selama tinggal di Kantor Paten, dan dalam waktu luangnya, ia menghasilkan banyak karya yang luar biasa dan pada tahun 1908 ia ditunjuk sebagai dosen pribadi di Berne. Pada tahun 1909 ia menjadi Profesor Luar Biasa di Zurich, pada tahun 1911 Profesor Fisika Teoretis di Praha, kembali ke Zurich pada tahun berikutnya untuk mengisi pos serupa. Pada tahun 1914 ia diangkat sebagai Direktur Kaiser Wilhelm Fisik Institute (kini disebut Max Planck Institute) dan Profesor di Universitas Berlin. Ia menjadi warga negara Jerman pada tahun 1914 dan tetap di Berlin sampai 1933 ketika ia meninggalkan kewarganegaraannya karena alasan politik dan bermigrasi ke Amerika dan menempati posisi Profesor Fisika Teoretis di Princeton. Ia menjadi warga negara Amerika Serikat pada tahun 1940 dan pensiun dari jabatannya pada tahun 1945. Setelah Perang Dunia II, Einstein adalah seorang tokoh terkemuka dalam Gerakan Pemerintahan Dunia, ia ditawarkan Presiden Negara Israel tetapi menolak dan ia bekerja sama dengan Dr Chaim Weizmann dalam membangun Universitas Ibrani Yerusalem. Einstein selalu muncul untuk memiliki pandangan yang jelas tentang masalah-masalah fisika dan bertekad untuk menyelesaikannya. Dia punya strategi sendiri dan mampu memvisualisasikan tahap utama dalam perjalanan ke tujuannya. Ia menganggap prestasi utamanya semata-mata sebagai batu loncatan untuk kemajuan berikutnya. Pada masa awal kehidupannya, Einstein menyadari kekurangan mekanika Newton dan teori relativitas khususnya berasal dari upaya untuk mendamaikan hukum mekanika dengan hukum medan elektromagnetik. Dia berurusan dengan masalah klasik mekanika statistik dan masalah di mana mereka bergabung dengan teori kuantum: ini menyebabkan penjelasan tentang gerak Brown dari molekul. Dia meneliti sifat termal cahaya dengan kepadatan radiasi rendah dan pengamatan meletakkan dasar teori foton cahaya. Pada masa-masa awal di Berlin, Einstein menduga bahwa interpretasi yang benar dari teori relativitas khusus juga harus memberikan sebuah teori gravitasi dan pada tahun 1916 ia menerbitkan makalahnya tentang teori relativitas umum. Selama waktu ini ia juga memberikan kontribusi terhadap masalah-masalah teori radiasi dan mekanika statistik. Pada tahun 1920-an, Einstein memulai pembangunan teori medan terpadu, meskipun ia terus bekerja pada interpretasi probabilistik dari teori kuantum, dan dia bertahan dengan penelitian ini di Amerika. Dia berkontribusi terhadap mekanika statistik dengan pengembangan tentang teori kuantum gas monoatomik dan dia juga mencapai prestasi yang luar biasa berhubungan dengan probabilitas transisi atom dan kosmologi relativistik. Setelah pensiun, ia terus bekerja menuju penyatuan konsep dasar fisika, mengambil pendekatan yang berlawanan, dengan mayoritas para fisikawan. Penelitian Einstein menghasilkan karya-karya luar biasa termasuk *Special Theory of Relativity* (1905), *Relativity* (English translations, 1920 and 1950), *General Theory of Relativity* (1916), *Investigations on Theory of Brownian Movement* (1926), dan *The Evolution of Physics* (1938). Karya non ilmiah, *About Zionism* (1930), *Why War?* (1933), *My Philosophy* (1934), dan *Out of My Later Years* (1950) mungkin adalah yang paling penting. Albert Einstein menerima gelar doktor kehormatan di bidang ilmu pengetahuan, kedokteran dan filsafat dari universitas-universitas di Eropa dan di Amerika. Selama tahun 1920-an dia mengajar di Eropa, Amerika dan Timur Jauh, dan ia dianugerahi kehormatan atau keanggotaan semua akademi ilmiah terkemuka di seluruh

dengan kejeniusannya mengembangkan teori relativitas khusus yang sangat fenomenal sehingga namanya menjadi terkenal ke seantero dunia.

J.J Thomson<sup>32</sup>, melalui penelitian yang sangat berhati-hati di Laboratorium Cavendish di Universitas Cambridge di Inggris terhadap penyimpangan sinar katoda yang berasal dari lucutan tabung Crookes<sup>33</sup> oleh medan magnet, membawanya menemukan tentang partikel ion negatif yang disebut oleh Thomson sebagai *electron* (partikel negatif). Pada bagian kesimpulan Thomson menguraikan tentang hakikat partikel yang ditemukannya yaitu:

*As the cathode rays carry a charge of negative electricity, are deflected by an electrostatic force as if they were negatively electrified, and are acted on by a magnetic force in just the way in which this force would act on a negatively electrified body moving along the path of these rays, I can see no escape from the*

---

dunia. Ia memperoleh berbagai penghargaan sebagai pengakuan atas karyanya, termasuk Copley Medal dari Royal Society of London pada tahun 1925, dan Medali Franklin dari Institut Franklin pada tahun 1935. Einstein memberikan berbagai sumbangan pemikiran intelektual dan, untuk relaksasi, musik memainkan peran penting dalam hidupnya. Ia menikah Mileva Maric pada tahun 1903 dan mereka memiliki seorang putri dan dua orang putra; pernikahan mereka bubar pada tahun 1919 dan di tahun yang sama ia menikah dengan sepupunya, Elsa Lowenthal, yang meninggal pada tahun 1936. Dia meninggal pada tanggal 18 April 1955 di Princeton, New Jersey. Sumber: *Nobel Lectures, Physics 1901-1921*, Elsevier Publishing Company, Amsterdam, 1967, [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1921/einstein-bio.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1921/einstein-bio.html)[54]

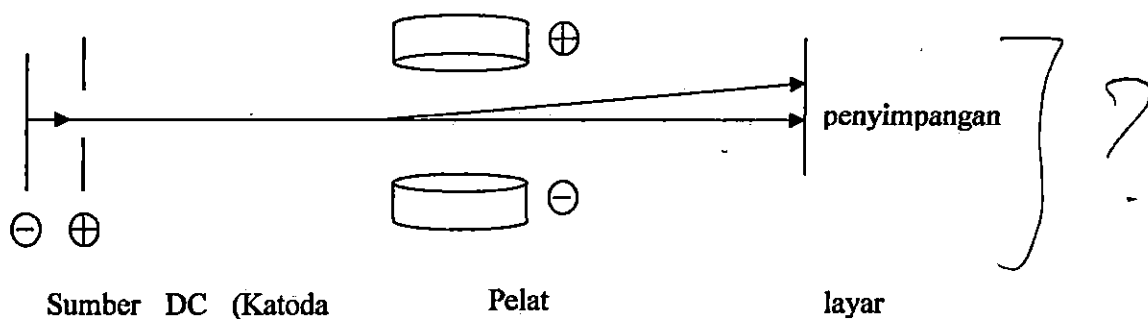
<sup>32</sup> Joseph John Thomson lahir pada 18 Desember 1856 di dekat Manchester, Inggris. Ayahnya meninggal saat "J. J." berumur enam belas tahun. Thomson muda memasuki Owens College Manchester, di mana profesor matematika mendorongnya untuk mengajukan permohonan beasiswa di Trinity College, salah satu tempat yang paling bergengsi dari perguruan tinggi di Universitas Cambridge. Thomson memenangkan beasiswa, dan pada tahun 1880 menempati posisi kedua di kelasnya (di belakang Joseph Larmor) dalam penelitian tugas akhir yang melelahkan dalam matematika. Trinity memberinya beasiswa dan dia tinggal di sana, mencoba untuk berbagai model matematika yang akan mengungkapkan sifat atom dan kekuatan elektromagnetik. Sumber: <http://www.aip.org/history/electron/jjthomson.htm>[55]

<sup>33</sup> Sir William Crookes, OM, FRS (17 Juni 1832 - 4 April 1919) adalah seorang kimiawan dan fisikawan yang memasuki *Royal College of Chemistry*, London, dan bekerja dalam bidang spektroskopi di Inggris. Dia adalah seorang pelopor tabung vakum, menemukan tabung Crookes. Crookes adalah penemu Crookes radiometer, yang saat ini dibuat dan dijual sebagai item istimewa. Sumber: [http://en.wikipedia.org/wiki/William\\_Crookes](http://en.wikipedia.org/wiki/William_Crookes)[56]

*conclusion that they are charges of negative electricity carried by particles of matter.*

—J. J. Thomson dalam *Philosophical Magazine*, 44, 293 (1897)

Walaupun M. Faraday (1860-1870-an) telah memperlihatkan melalui eksperimen elektrokimia bahwa jumlah arus listrik yang mengalir dalam larutan sebanding dengan jumlah massa yang diendapkan dalam sel elektrolisis (lihat Hukum Faraday I dan II). Namun, Thomsonlah yang pertamakali mengamati elektron sebagai partikel yang memiliki muatan dan massa.



2.1

Gambar 2.1.1. Bagan eksperimen penemuan elektron oleh J. J. Thomson tahun 1897

Thomson menemukan bahwa hasil pengukurannya tidak bergantung kepada bahan katoda yang dipakai dan komposisi residu gas yang digunakan. Sehingga disimpulkan bahwa elektron merupakan partikel khusus yang selalu ada dalam setiap materi.

Berdasarkan kepada mekanika klasik gaya yang diterima oleh elektron akibat beda voltase dari pelat penyimpang pada Gambar 2-1 adalah sama dengan:

$$F_y = \xi e \tag{2.1}$$

~ 29 ~

$F_y$ , adalah besar gaya yang diterima oleh elektron (saat waktu  $t=0$  ketika elektron memasuki daerah antara dua pelat). Menurut hukum II Newton  $F = m \cdot a$ , maka:

$$F_y = m \frac{dv_y}{dt} \quad (2.2)$$

Kombinasi pers. 2.1 dan 2.2 menjadi

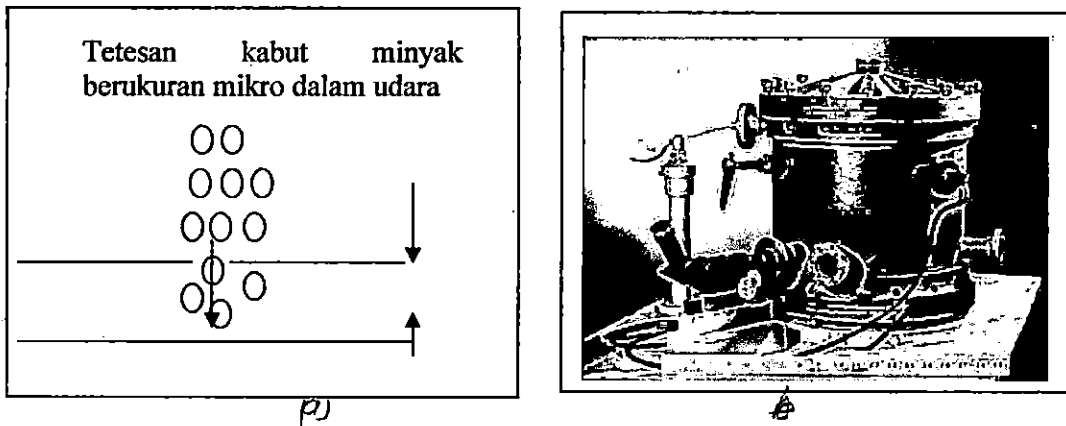
$$\frac{dv_y}{dt} = \xi \left( \frac{e}{m_e} \right) \Rightarrow \int dv_y = \xi \frac{e}{m_e} \int dt \quad (2.3)$$

Sehingga

$$v_y = \left( \frac{e}{m_e} \right) \xi t \Rightarrow v_y = 0 \text{ saat } t = 0 \quad (2.4)$$

Karena  $v_y = \frac{dy}{dx}$  dan  $y(t = 0) \Rightarrow y = \left( \frac{e}{m_e} \right) \frac{\xi t_f^2}{2}$  dengan  $t_f$  = saat elektron berada diantara kedua pelat, dengan mengatur voltase  $\xi$ , menghitung waktu  $t_f$ , dan mengukur perpindahan  $y \Rightarrow \left( \frac{e}{m_e} \right) = 1 \times 10^{11} \text{ C/kg}$ . Nilai pengukuran modern untuk  $\left( \frac{e}{m_e} \right) = 1,758 \times 10^{11} \text{ C/kg}$ .

## 2.2 Eksperimen Tetesan Minyak Milliken



2.2 (a)  
Gambar 2.2-1. (kiri) Bagan percobaan tetes minyak Millikan (1909-1910),  
(b) (kanan) peralatan yang digunakan untuk mengamati tetes minyak.

Pada tahun 1909 Robert Andrew Millikan<sup>34</sup> dari Universitas Chicago melakukan penelitian tetesan minyak untuk mengukur muatan partikel yang telah ditemukan oleh J. J. Thomson. Walaupun sebelumnya telah ditemukan bahwa partikel elektron Thomson memiliki massa dan muatan, namun nilai besaran massa dan muatan elektron tersebut belum dikenali, sehingga Millikan dan

---

<sup>34</sup> Robert Andrews Millikan, (lahir 22 Maret 1868, Morrison, Illinois, AS-meninggal 19 Desember 1953, San Marino, California), fisikawan Amerika yang dihormati dan memperoleh Hadiah Nobel untuk Fisika pada tahun 1923 untuk hasil kerjanya tentang dasar elektronika tentang efek fotolistrik. Millikan lulus dari Oberlin College (Oberlin, Ohio) pada tahun 1891 dan memperoleh gelar doktor di Universitas Columbia pada tahun 1895. Pada tahun 1896 ia menjadi asisten di University of Chicago, di mana ia menjadi profesor penuh pada tahun 1910. Pada tahun 1909 Millikan memulai serangkaian percobaan untuk menentukan muatan listrik yang dibawa oleh elektron tunggal. Dia mulai dengan mengukur jalannya tetesan air yang dikenakan dalam medan listrik. Hasil penelitiannya menunjukkan bahwa muatan pada tetesan merupakan kelipatan dari muatan listrik dasar, tetapi percobaan itu tidak cukup akurat dan meyakinkan. Ia memperoleh hasil yang lebih tepat pada tahun 1910 dengan Eksperimen tetesan-minyak yang terkenal dimana ia dibantu oleh mahasiswanya Harvey Fletcher. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/382902/Robert-Andrews-Millikan>[57]



mahasiswanya bernama Harvey Fletcher<sup>35</sup> melakukan eksperimen tetesan minyak untuk mengukur muatan elektron.

✂ Gaya gravitasi yang mendorong ke bawah nilainya  $F_g = -Mg$ ,  $M =$  massa tetesan,  $g =$  konstanta gravitasi. Jika gaya gesek melawan gravitasi ke atas adalah:

✂  $F_f = 6\pi r\eta v$ , dengan  $r =$  jari-jari tetesan,  $\eta =$  viskositas udara dan  $v =$  kecepatan 2.1

✂ Karena  $F_f \propto v$ , kecepatan akhir  $v_t$  akan dicapai jika gaya dorong dan tarik seimbang yaitu:

✂  $6\pi r\eta v_t = Mg$  dan massa tetesan menjadi  $M = 6\pi r\eta v_t / g$

✂ Pada saat ini digunakan sinar-x atau sinar- $\gamma$  untuk menambah muatan ( $ne$ ) pada tetesan. Voltase  $\xi$  di sepanjang pelat memperkuat gaya Coulomb  $F_c = \xi ne$  pada muatan tetesan. Dengan mengatur voltase sampai tetesan berhenti untuk

✂ jatuh;  $v = 0 \Rightarrow F_f = 0$ ,  $F_c = F_g$ . Sehingga pers.2.4 menjadi:

$$\xi ne = Mg \quad (2.5)$$

)jard?

---

<sup>35</sup>Harvey Fletcher lahir pada tanggal 11 September 1884 dan dibesarkan di Provo, Utah. Dibesarkan dalam komunitas *Latter Day Saints*, ia tetap aktif di gereja sepanjang hidupnya. Ia menerima pelatihan awal di *Brigham Young University* dari mana ia lulus pada tahun 1907. Dia mengajar di sana selama satu tahun dan menikah Lorena Chipman sebelum pindah ke Chicago untuk melanjutkan studinya. Di University of Chicago, Fletcher bekerja sama dengan Robert A. Millikan dalam mengukur muatan pada elektron. Penelitian fundamental ini memberikan kontribusi besar terhadap bidang elektronika dan untuk pengembangan industri radio dan televisi. Setelah mendengar Millikan mengeluh bahwa tetesan air menguap terlalu cepat dalam penelitian yang terkenal sebagai "Eksperimen tetesan minyak", Fletcher pergi ke toko perhiasan lokal untuk membeli minyak, dan membeli alat penyemprot parfum, dan membantu membawa percobaan Millikan sehingga sukses. Dia lulus dengan predikat *summa cum laude* pertama program Ph.D. yang pernah diberikan oleh Departemen Fisika di Chicago. Sumber: [http://www.ieceghn.org/wiki/index.php/Harvey\\_Fletcher\[58\]](http://www.ieceghn.org/wiki/index.php/Harvey_Fletcher[58])

Millikan melakukan ini terhadap banyak sekali tetesan,  $i = 1, 2, 3, \dots$ . Semua memiliki muatan yang berbeda ( $n_i e$ ) tetapi memiliki kelipatan bilangan bulat untuk muatannya ( $e$ ). Millikan mendapatkan nilai muatan elementer sebesar  $e = 1,59 \times 10^{-19} C$ , nilai ini sangat mendekati nilai muatan yang diperoleh dengan metoda modern ( $e = 1,602 \times 10^{-19} C$ ). Dengan menggabungkan nilai dari  $(\frac{e}{m_e})$  dan nilai ( $e$ ), kemudian diperoleh nilai untuk massa elektron sebesar :

$$m_e = 9,11 \times 10^{-31} kg$$

Nilai massa elektron ini kemudian dibandingkan dengan massa atom hidrogen yang telah terlebih dahulu ditentukan yaitu  $m_H = 1,66 \times 10^{-27} kg$ , sehingga diketahui massa elektron hanya sekitar 1/2000 dari massa atom hidrogen sehingga disimpulkan bahwa elektron adalah partikel subatom atau atom hidrogen itu masih ada bagiannya yaitu partikel lain yang disebut elektron. Pertanyaannya sekarang adalah dimana posisi elektron dalam atom?, harus ada rekonstruksi baru tentang atom dari teori sebelumnya (teori atom J. Dalton<sup>36</sup>).

## 2.3 Model Atom Rutherford

Professor Rutherford melakukan eksperimen penembakan partikel alfa kepada lempeng tipis emas dalam rangka pembuktian teori atom Thomson.

---

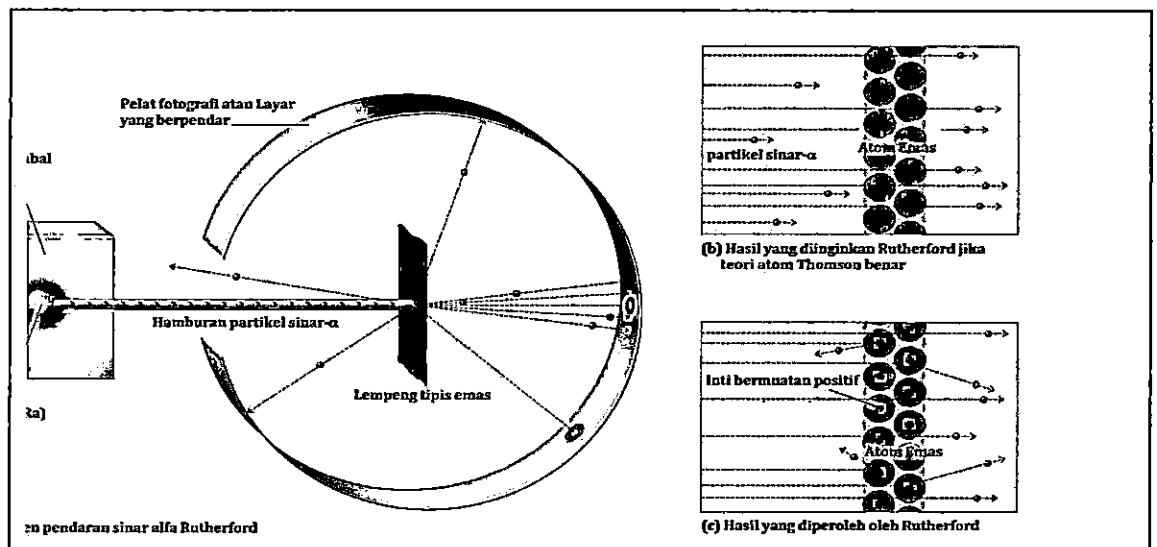
<sup>36</sup> Guru kimia Inggris dan fisikawan John Dalton, lahir 6 September 1766, meninggal dunia 27 Juli 1844, paling dikenal dalam mengembangkan konsep kuno atom menjadi teori ilmiah yang telah menjadi dasar dalam kimia modern. Ia menganggap dirinya terutama guru dan mendapat penghasilan dengan mengajar dan mengajar sampai pada tahun 1833, ketika ia dianugerahi dana pensiun sipil tahun itu. Kemudian ia melakukan sebuah eksperimen sendiri dan menciptakan peralatan yang sederhana namun efektif untuk pengujiannya. Walaupun dalam penulisannya sangat kasar, namun banyak data yang diperolehnya sangat akurat. Sumber: [http://en.wikipedia.org/wiki/John\\_Dalton](http://en.wikipedia.org/wiki/John_Dalton)[59]

Dalam penelitiannya Rutherford<sup>37</sup> dibantu oleh mahasiswanya Geiger<sup>38</sup> dan Marsden<sup>39</sup>. Bagan eksperimen yang dilakukan oleh Rutherford dapat kita ilustrasikan secara sederhana dalam Gambar 2.3.1.

---

<sup>37</sup> Ernest Rutherford, 1st Baron Rutherford of Nelson, OM FRS [ 1 ] ( 30 Agustus 1871 - 19 Oktober 1937 ) adalah seorang fisikawan kelahiran Selandia Baru dan kimiawan yang dikenal sebagai bapak fisika nuklir. Ia dianggap yang praktikan terbesar setelah Michael Faraday ( 1791-1867). Dalam karya awal ia menemukan konsep waktu paruh radioaktif, membuktikan bahwa radioaktivitas melibatkan transmisi menjadi suatu unsur kimia yang lain, dan juga dibedakan dan diberi nama radiasi alpha dan radiasi beta. Pekerjaan ini dilakukannya di McGill University di Kanada. Karya dalam bidang ini adalah dasar untuk Hadiah Nobel dalam Kimia yang dianugerahkan padanya pada tahun 1908 " untuk investigasinya ke disintegrasi unsur-unsur , dan kimia zat radioaktif ". Rutherford pindah pada tahun 1907 ke Victoria University of Manchester (hari ini disebut University of Manchester) di Inggris , di mana ia dan Roys Thomas membuktikan bahwa radiasi alpha adalah ion helium. Rutherford melakukan karyanya yang paling terkenal setelah ia menjadi peraih Nobel. Pada tahun 1911, meskipun ia tidak bisa membuktikan bahwa itu positif atau negatif, ia berteori bahwa atom memiliki muatan yang terkonsentrasi di inti sangat kecil, dan dengan demikian merintis model atom Rutherford, melalui penemuan dan interpretasi hamburan Rutherford dalam bukunya tentang percobaan foil emas. Dia secara luas dihargai sebagai orang pertama yang " membelah atom " pada tahun 1917 dalam reaksi nuklir antara nitrogen dan partikel alpha, di mana ia juga menemukan partikel positif (dan dinamai) proton. Rutherford menjadi Direktur Laboratorium Cavendish di Universitas Cambridge pada tahun 1919 . Di dalam kepemimpinannya neutron ditemukan oleh James Chadwick pada tahun 1932 dan pada tahun yang sama percobaan pertama untuk membelahi inti dengan cara dikendalikan sepenuhnya, dilakukan oleh mahasiswa yang bekerja di bawah arahnya , John Cockcroft dan Ernest Walton. Setelah kematiannya pada tahun 1937 , ia dihormati dan dikuburkan sebagai ilmuwan terbesar dari Britania Raya, kuburannya terletak di dekat makam Sir Isaac Newton di Westminster Abbey. Unsur kimia Rutherfordium (unsur ke-104) dinamakan untuk menghormatinya pada tahun 1997. Sumber: [http://en.wikipedia.org/wiki/Ernest\\_Rutherford](http://en.wikipedia.org/wiki/Ernest_Rutherford)[60]

<sup>38</sup> Johannes " Hans " Wilhelm " Gengar " Geiger (30 September 1882-24 September 1945) adalah seorang fisikawan Jerman . Ia mungkin paling dikenal sebagai co - penemu Geiger counter dan untuk percobaan Geiger - Marsden yang menemukan inti atom . Geiger lahir di Neustadt an der Haardt , Jerman . Dia adalah salah satu dari lima anak yang lahir dari Indologis Wilhelm Ludwig Geiger, yang memegang posisi profesor di Universitas Erlangen. Pada tahun 1902, Geiger mulai belajar fisika dan matematika di Universitas Erlangen dan dianugerahi gelar doktor pada tahun 1906 . Pada tahun 1907 ia mulai bekerja dengan Ernest Rutherford di Universitas Manchester dan pada tahun 1909 , bersama dengan Ernest Marsden , melakukan eksperimen terkenal Geiger - Marsden, eksperimen ini juga disebut " eksperimen lempeng tipis emas". Bersama-sama mereka menciptakan pencacah Geiger. Pada tahun 1911 Geiger dan John Mitchell Nuttall menemukan hukum Geiger - Nuttall dan uji coba yang dilakukannya menyebabkan lahirnya model atom Rutherford . Pada tahun 1928 Geiger dan muridnya Walther Müller menciptakan sebuah versi perbaikan dari pencacah Geiger. Geiger juga bekerja sama dengan James Chadwick . . Pada tahun 1912 ia menjadi pemimpin Reichsanstalt Fisik - Teknis di Berlin , tahun 1925 menjadi profesor di Kiel , tahun 1929 di Tübingen , dan dari tahun 1936 menjadi professor di Berlin. Dia adalah anggota dari Uranium Club. Geiger tidak pernah menyatakan sikapnya di depan umum tentang Nazi. Ada laporan tentang dia yang membantu juga menolak rekan Yahudi. Geiger meninggal di Potsdam, Jerman beberapa bulan setelah Perang Dunia II berakhir . Dia memiliki empat saudara : tiga saudara perempuan dan satu



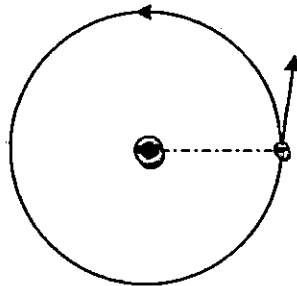
2.  
 Gambar 2.3-1. (a) Eksperimen hamburan sinar- $\alpha$  oleh Rutherford, (b) hasil yang diharapkan Rutherford jika Thomson benar dan (c) hasil eksperimen yang diperoleh oleh Rutherford. Sumber gambar: <http://2012books.lardbucket.org/books/principles-of-general-chemistry-v1.0m/s05-05-the-atom.html>[63]

saudara laki-laki semuanya berusia lebih muda dari dia . Saudaranya , Rudolph , sangat tertarik pada meteorologi dan klimatologi . Sumber: [http://en.wikipedia.org/wiki/Hans\\_Geiger](http://en.wikipedia.org/wiki/Hans_Geiger)[61]

<sup>39</sup> Sir Ernest Marsden ( 19 Februari 1889-15 Desember 1970) adalah seorang fisikawan Selandia Baru-Inggris. Ia lahir di East Lancashire, tinggal di Rishton dan dididik di Queen Elizabeth Grammar School , Blackburn , di mana anugrah keunggulan akademik diberikan atas namanya yaitu ( ' The Marsden Merit Trophy ' ). Dia bertemu Ernest Rutherford di Universitas Manchester . ketika masih sarjana ia melakukan percobaan terkenal yaitu percobaan Geiger - Marsden , yang disebut percobaan lempeng tipis emas , bersama dengan Hans Geiger pada tahun 1909 di bawah pengawasan Rutherford. Pada tahun yang sama ia membantu Geiger untuk mengembangkan pencacah Geiger. Pada tahun 1915 ia pindah ke Victoria University College di Selandia Baru sebagai Profesor Fisika, ia direkomendasikan oleh Rutherford. Marsden ditempatkan di Perancis selama Perang Dunia I sebagai Insinyur Kerajaan di bagian pengenalan khusus sandi suara dan memperoleh penghargaan Militer. Setelah perang ia menjadi ilmuwan Selandia Baru terkemuka, mendirikan Departemen Penelitian Ilmiah dan Industri (DSIR) pada tahun 1926 dan mengorganisir penelitian khususnya di bidang pertanian. Selama Perang Dunia II, ia bekerja pada penelitian radar dan pada tahun 1947 dan menjadi perwira penghubung ilmiah di London . Dia meninggal di rumahnya di Lowry Bay , Lower Hutt di tepi Wellington pelabuhan pada tahun 1970. Pengakuan terhadap karir Marsden termasuk persatuan Royal Society of London pada tahun 1946 , presiden Royal Society of New Zealand pada tahun 1947 , Rutherford Memorial Lecture pada tahun 1948 , dan gelar kebangsawanan pada tahun 1958 . The Marsden Grant untuk penelitian dasar di Selandia Baru didirikan pada tahun 1994 . Massey University telah menjadi sebuah tempat kuliah besar atas jasanya. Sumber: [http://en.wikipedia.org/wiki/Ernest\\_Marsden](http://en.wikipedia.org/wiki/Ernest_Marsden)[62]

Data eksperimen Rutherford memperlihatkan bahwa sebagian besar (98%) sinar- $\alpha$  yang ditembakkan kepada lempeng emas diteruskan dan sangat sedikit sekali (2%) dari sinar- $\alpha$  yang dibalikkan sehingga Rutherford menyimpulkan bahwa: (1) terdapat inti atom yang sangat kecil sekali dengan jari-jari  $\ll 10^{-10}m$ . (perkiraan awal Rutherford adalah  $10^{-14} m$ ). (2) sebagian besar penyusun atom emas (Au) adalah ruang kosong!. (3) elektron beredar mengelilingi inti atom mengikuti kaidah hukum fisika klasik sebagaimana planet mengelilingi matahari.

Model planet yang ditawarkan oleh Rutherford ini berdasarkan kepada hukum Newton II. Pengembangan hukum Newton untuk tarikan molekul bermuatan yang dikembangkan oleh Coulomb memainkan peranan yang besar dalam struktur atom yang dikembangkan oleh Rutherford (Gambar 2.3-2).



Gambar 2.3-2. Teori atom model planet yang ditawarkan oleh Rutherford

Dengan mengambil asumsi bahwa gaya sentripetal  $F_c = \frac{m_e v^2}{r}$  elektron mengelilingi inti atom dibangun oleh gaya Coulomb antara elektron dan inti

$F_c = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$  maka untuk orbit yang stabil diperoleh jari-jari rotasi elektron sebagai:

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (2.6)$$

Yaitu

$$r = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_e v^2} \quad (2.7)$$

Model ini sangat stabil dibandingkan jika dimasukkan nilai tarikan inti dan elektron secara terpisah:

$$E = E_k + E_p = \frac{1}{2} m_e v^2 + \left( -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} < 0 \quad (2.8)$$

Walaupun model ini cukup stabil, namun model ini tidak konsisten dengan elektrodinamika klasik karena: (1) penambahan kecepatan elektron mengelilingi inti akan **memancarkan radiasi** (cahaya)! Percepatan sentripetal  $= v^2/r$ , dan (2) karena cahaya merupakan energi (E) maka nilai percepatan sentripetal akan terus berkurang seiring berjalannya waktu. Sehingga nilai r akan semakin kecil setiap waktu mengakibatkan elektron akan **memutar secara spiral menuju inti** dan akhirnya punah (muatannya dinetralkan oleh inti)[27].

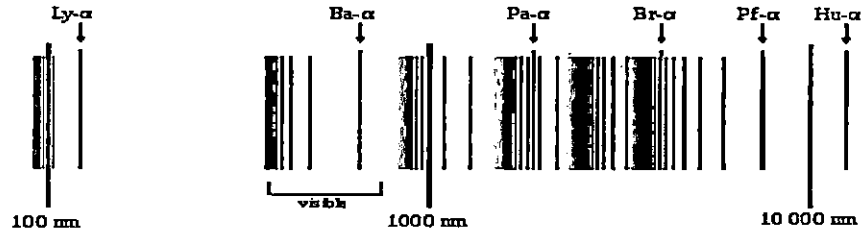
Selain itu, ketika jari-jari rotasi mengecil maka nilai  $\nu$  akan bertambah akibatnya frekuensi ( $\nu$ ) dari cahaya yang dipancarkan akan sama dengan frekuensi rotasi dari elektron.

$$\nu \left( \text{Hz} = \frac{\text{siklus}}{\text{det}} \right) = \frac{\text{kecepatan linier elektron } (v) \text{ dalam } (m / \text{det})}{2\pi r \left( \frac{m}{\text{siklus}} \right)} \quad (2.9)$$

Sebagai konsekuensinya maka atom akan memancarkan frekuensi cahaya dalam semua frekuensi atau menghasilkan **spektrum yang kontinu**.

Namun emisi radiasi (cahaya) setiap atom bukanlah spektrum kontinu melainkan diskrit. Pada eksperimen pengukuran spektrum atom H dengan pelat

fotografi untuk atom hidrogen didapatkan spektrum seperti terlihat dalam Gambar 2.5.



Gambar 2.3-3. Spektrum atom hidrogen

Pada atom hidrogen, Rydberg<sup>40</sup> berdasarkan eksperimen berhasil menunjukkan bahwa spektrum yang dihasilkan oleh atom-H sangat sesuai dengan rumus sederhana berikut:

$$\bar{\nu}(cm^{-1}) = \mathcal{R} \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (2.10)$$

Dengan  $n_1 = 1, 2, 3, \dots$  dan  $n_2 = n_1+1, n_1+2, n_1+3, \dots$  dan  $\mathcal{R} = 1,097 \times 10^5 cm^{-1}$  (konstanta Rydberg).

---

<sup>40</sup> Johannes ( Janne ) Robert Rydberg ( November 8, 1854 - 28 Desember 1919 ) adalah seorang fisikawan Swedia yang dikenal dalam menyusun formula Rydberg, pada tahun 1888. Formula ini digunakan untuk memprediksi panjang gelombang dari foton (radiasi elektromagnetik cahaya dan lainnya ) dipancarkan oleh perubahan tingkat energi elektron dalam atom hidrogen. Konstanta fisik yang dikenal sebagai konstanta Rydberg dinamai menurut namanya. Atom tereksitasi dengan nilai-nilai yang bersesuaian dengan bilangan kuantum utama , diwakili oleh n dalam formula Rydberg. Perhatian Rydberg menunjukkan bahwa kajian spektral dapat membantu dalam pemahaman teoritis dari atom dan sifat kimianya dibenarkan pada tahun 1913 oleh karya Niels Bohr (lihat spektrum hidrogen ) . Sebuah konstanta spektroskopi penting berdasarkan atom hipotetis massa tak terbatas disebut Rydberg ( R ) untuk menghormatinya. Ia aktif di Universitas Lund , Swedia , untuk semua kehidupan kerjanya. Kawah Rydberg di Bulan dan asteroid 10506 Rydberg yang dinamai untuk menghormatinya. Ada sebuah pub malam yang diadakan untuk menghormati Rydberg yang setiap hari Rabu di Departemen Fisika di Universitas Lund. Sumber: [http://en.wikipedia.org/wiki/Johannes\\_Rydberg](http://en.wikipedia.org/wiki/Johannes_Rydberg)[64]

Persamaan semiempiris ini kemudian berhasil digunakan untuk menentukan deret (tingkat energi) elektron atom hidrogen pada daerah UV dan Visibel. Nilai  $n_1 = 1$ , disebut sebagai deret Lyman yaitu transisi energi elektron dari kulit pertama dan seterusnya,  $n_1 = 2$ , diatribusikan kepada deret Balmer yaitu transisi energi elektron dari kulit kedua dan seterusnya,  $n_1 = 3$ ,  $n_1 = 4$ ,  $n_1 = 5$  diatribusikan secara berturut-turut kepada Paschen, Bracket dan Pfund.

## 2.4 Radiasi Benda Hitam

Para ahli fisika awal abad ke-20 melakukan penelitian sangat intensif terhadap perilaku benda hitam yang dipanaskan. Pemanasan benda sampai berpijar merupakan fenomena biasa bagi orang yang bekerja pada pabrik baja. Revolusi industri yang terjadi di Eropa menyebabkan eksploitasi bahan dan material khususnya baja dan logam. Keinginan untuk memperoleh baja yang unggul dalam hal ini tingkat kekerasan dan bobot menyeret ahli fisika dan kimia melakukan penelitian yang intensif terhadap bahan. Diantara fenomena alam yang membingungkan para ahli fisika teori adalah bahwa teori fisika klasik selalu menyimpang jika diterapkan untuk menjelaskan fenomena radiasi dari benda hitam berpijar ini.





Gambar 2.4-1. Fenomena benda hitam pada pemanasan baja sampai suhu tinggi yang akan memancarkan radiasi dari merah, kuning dan putih

Fenomena radiasi benda hitam ini telah diamati oleh ahli fisika Inggris abad ke-19 yang bernama Lord Rayleigh<sup>41</sup>. Melalui eksperimen yang berhati-hati

---

<sup>41</sup> John William Strutt, Baron III Rayleigh, lahir pada November 12, 1842 at Langford Grove, Maldon, Essex, sebagai anak dari John James Strutt, Baron II, dan istrinya Clara Elizabeth La Touche, putri sulung Kapten Richard Vicars, R. E. Dia adalah salah satu dari sedikit anggota bangsawan tinggi yang meraih ketenaran sebagai seorang ilmuwan yang luar biasa.

Seluruh masa kecil dan remaja dari fisik yang rapuh, pendidikan terganggu oleh sakit-sakitan, dan prospek menuju kematangan fisik yang menyedihkan. Setelah dibaptis di Eton pada usia 10, masa kecilnya banyak dihabiskan di sekolah sanatorium, tiga tahun di sebuah sekolah swasta di Wimbledon, dan tinggal sebentar di Harrow, akhirnya dia menghabiskan empat tahun Dengan Rev George Townsend Warner (1857) dan menjadi murid di Torquay.

Pada tahun 1861 dia Dimasukkan Trinity College, Cambridge, di mana dia mulai belajar matematika, kemampuannya yang menonjol dalam bidang matematika mengalahkan para pengasuh disitu. "Saya lulus dalam matematika Tripos pada tahun 1865 sebagai Senior Wrangler dan peroleh penghargaan Smith. Pada 1866 saya menjadi anggota Trinity Yang saya pegang sampai tahun 1871", tahun pernikahannya.

Serangan parah demam rematik pada 1872 membuatnya menghabiskan musim dingin di Mesir dan Yunani. Tak lama setelah ia kembali ayahnya meninggal (1873) dan menjadi baron, mengambil tempat tinggal di kursi tahta keluarga, di Terling Place, di Witham, Essex. Aku dipaksa untuk mengabdikan sebagian besar waktu untuk pengelolaan perkebunan (7000 hektar). Kombinasi keseluruhan pengetahuan ilmiah dan kecerdasan dengan pengetahuan yang diperoleh melalui pertanian membuat praktek dalam manajemen pertanian menjadi maju pada waktu itu. Namun demikian, pada tahun 1876 dia meninggalkan Seluruh pengelolaan tanah untuk adiknya.

"Sejak saat itu, aku bisa mencurahkan waktu penuh untuk ilmu pengetahuan lagi. Pada tahun 1879 saya ditunjuk untuk mengikuti James Clerk Maxwell sebagai Profesor Fisika Eksperimental dan Kepala Laboratorium Cavendish di Cambridge. Pada tahun 1884 saya meninggalkan Cambridge untuk melanjutkan pekerjaan eksperimental di tempat tinggal saya di Terling, Essex, dan 1887-1905 saya ditunjuk menjadi Profesor Filsafat Alam di Royal Institution of Great Britain, menjadi penerus Tyndall. Saya bertugas selama enam tahun sebagai Presiden Komite Pemerintah tentang Bahan Peledak, dan 1896-1919 Aku Advisor Ilmiah untuk Trinity House". dia diangkat menjadi Lord Letnan of Essex 1892-1901.

Penelitian pertama Lord Rayleigh adalah dalam bidang matematika, Mengenai optik dan sistem bergetar, tapi kemudian berlanjut hampir kepada seluruh bidang fisika, meliputi suara, teori gelombang, penglihatan warna, elektrodinamika, elektromagnetik, hamburan cahaya, aliran cairan, hidrodinamika, kepadatan gas, viskositas, kapilaritas, elastisitas, dan fotografi. Penelitiannya mengalami banyak hambatan ketika itu sampai kemudian fokus kepada masalah listrik dan magnetik. Lord Rayleigh adalah seorang instruktur yang sangat baik dan, di bawah pengawasan yang aktif, sistem instruksi praktis dalam fisika eksperimental di Cambridge dilakukan, mengembangkan eksperimen untuk siswa kelas lima dan enam ke sekolah lanjutan. Juga dia sudah kontribusi terhadap Encyclopaedia of Britannica.

Dia memiliki rasa yang baik gaya sastra, setiap kertas yang saya tulis, bahkan pada Subjek yang paling muskil, adalah model kejelasan dan kesederhanaan diksi. terdapat 446 makalahnya kemudian dicetak ulang dikumpulkan, ini jelas menunjukkan kapasitasnya untuk memahami segala sesuatu sedikit lebih dalam daripada orang lain. Meskipun anggota House of

dia menemukan hubungan antara kerapatan spektrum  $\rho(\nu)$ , dengan frekuensi  $\nu$  dari radiasi yang dipancarkan dalam selang  $\nu$  dan  $\nu + d\nu$ . Pengamatannya menunjukkan bahwa kerapatan spektrum sebanding dengan intensitas  $\rho(\nu) \sim I(\nu)$ . Hubungan matematis yang didapatkan oleh Lord Rayleigh adalah:

$$d\rho = \rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi kT}{c^3} \nu^2 d\nu \quad (2.11)$$

Dapat dilihat dari pers. 2.11 bahwa kerapatan spektrum sebanding dengan kuadrat frekuensi pada daerah selang  $\nu$  dan  $\nu + d\nu$  dan temperatur T. Pada pers. 2. 11,  $k$  adalah konstanta Boltzmann<sup>42</sup> yang nilainya adalah  $R/N_A$  atau  $1,38 \times 10^{-23}$  JK<sup>-1</sup> mol<sup>-1</sup>, sedangkan  $c$  adalah kecepatan cahaya dalam ruang hampa.

Lords, telah melakukan intervensi politik terhadap sains, dia berhasil melawan aturan tersebut. Rekreasi nya adalah jogging, tenis, fotografi dan musik.

Lord Rayleigh, mantan Rektor Universitas Cambridge, adalah Pencinta Perdamaian dan penerima gelar kehormatan sarjana hukum. Dia adalah seorang Fellow dari Royal Society (1873) dan menjabat sebagai Sekretaris 1885-1896, dan sebagai Presiden 1905-1908. Dia adalah seorang penerima Order of Merit (1902), dan pada tahun 1905 dia menjadi anggota majelis kehormatan. Dia adalah pemenang Richard Copley award, Royal, dan Rumford Medali Royal Society, dan Hadiah Nobel pada tahun 1904.

Pada tahun 1871 dia menikah dengan Evelyn, adik perdana menteri Earl of Balfour, dan putri dari James Maitland Balfour dan istrinya Blanche, putri dari Marquis II dari Salisbury. Mereka memiliki tiga orang putra, yang tertua kemudian Menjadi Profesor Fisika di Imperial College of Science and Technology, London. Lord Rayleigh meninggal pada 30 Juni 1919, di Witham, Essex [65].

<sup>42</sup> Ludwig Eduard Boltzmann, (lahir 20 Februari 1844, Wina, Austria - meninggal pada bulan September 5, 1906, Duino, Italia), fisikawan terbesar yang penuh prestasi dalam pengembangan mekanika statistik, dia mencoba menjelaskan dan memprediksi bagaimana sifat-sifat atom (seperti massa, muatan, dan struktur) menentukan sifat materi yang tidak terlihat (seperti viskositas, konduktivitas termal, dan difusi). Setelah Menerima gelar doktor dari Universitas Wina pada 1866, Boltzmann menjadi asisten professor dalam matematika dan fisika di Wina, Graz, Munich, dan Leipzig. Pada tahun 1870-an Boltzmann menerbitkan serangkaian makalah dalam hukum kedua termodinamika dan menjelaskannya, sehingga konsep pertukaran energi, bisa Dijelaskan dengan Menerapkan hukum mekanika dan teori probabilitas untuk gerakan atom. Dengan demikian, dia telah berjasa membuat penjelasan Bahwa hukum kedua merupakan pendekatan statistik. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/72401/Ludwig-Eduard-Boltzmann>[66]

Persamaan Rayleigh cukup tepat untuk suhu sangat rendah, namun ketika suhu terus dinaikkan akan terjadi penyimpangan. Fungsi kerapatan spektrum yang sebanding dengan kuadrat frekuensi terus mengalami penyimpangan pada suhu yang lebih tinggi, dimana untuk suhu tinggi maka benda hitam akan memancarkan banyak sinar-UV, daerah sinar-x, dan selanjutnya sampai tak berhingga sehingga dikenal istilah *UV-Catastrophe*. Namun teori ini tidak sejalan dengan eksperimen karena pada suhu sangat tinggi, eksperimen menunjukkan bahwa frekuensi yang dipancarkan terus meningkat, namun kerapatan spektrumnya secara eksponensial menurun. Gambar 2.4-2 mengilustrasikan tentang hubungan kerapatan spektrum dan frekuensi radiasi dan penyimpangan dari hukum Rayleigh-Jeans<sup>43</sup>.

---

<sup>43</sup> Lahir di Ormskirk , Lancashire , Jeans dididik di Sekolah Merchant Taylors , Northwood , Wilson Grammar School , Camberwell dan Trinity College, Cambridge . Pelatuhnya untuk Cambridge Mathematical Tripos adalah Robert Alfred Herman , dan pada tahun 1898 dia mendapat juara Kedua Wrangler . Jeans yang TERPILIH Fellow of Trinity College pada bulan Oktober 1901, dan - mengajar di Cambridge , tetapi pergi ke Princeton University pada tahun 1904 sebagai guru besar matematika terapan . Ia kembali ke Cambridge pada tahun 1910 .

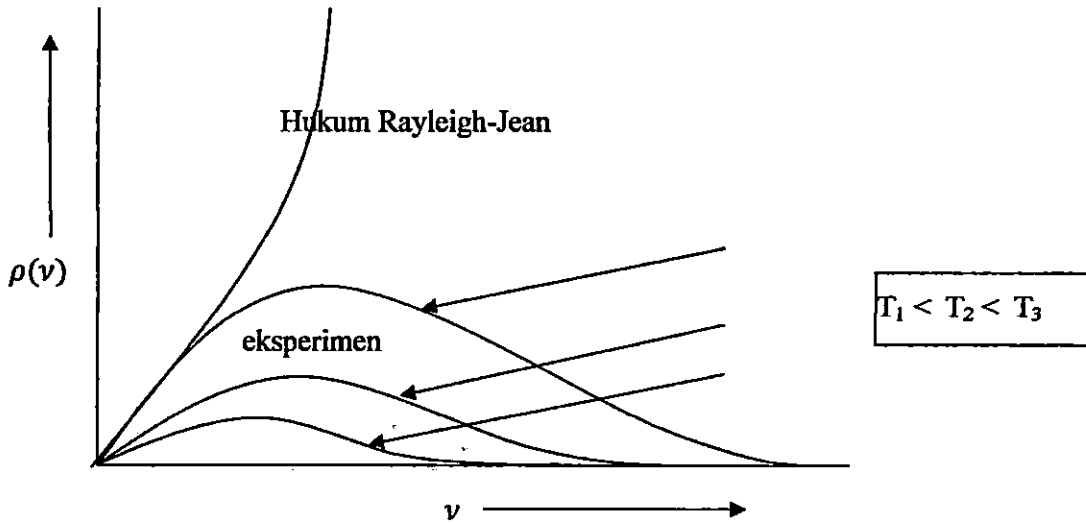
Jean telah membuat banyak Kontribusi penting dalam bidang fisika , termasuk teori kuantum , teori radiasi dan evolusi bintang . Analisisnya mengenai pemutaran benda membuatnya sampai pada kesimpulan bahwa teori Laplace tentang tata surya terbentuk dari awan gas tunggal tidak benar , mengusulkan bukannya Bahwa planet terbentuk dari pemadatan partikel yang terpenyalakibat terjadinya tumbukan dua bintang . Teori ini belum dapat diterima sampai hari ini.

Jeans , Seiring dengan Arthur Eddington , adalah pendiri kosmologi Inggris . Pada tahun 1928 Jeans adalah orang pertama yang menduga kosmologi steady state didasarkan pada penciptaan terus-menerus hipotesis materi di alam semesta . Teori ini dikesampingkan Ketika 1965 penemuan latar belakang gelombang mikro kosmik yang luas ditafsirkan sebagai pertanda terjadinya kisah Big Bang pada masa lalu .

Reputasi ilmiah yang didasarkan pada monograf The dinamis Teori Gas ( 1904 ) , Mekanika Teoritis ( 1906 ) , dan matematika Teori Listrik dan Magnet ( 1908 ) . Setelah pensiun pada tahun 1929 , dia menulis sejumlah buku untuk masyarakat awam , termasuk The Stars di Program mereka ( 1931 ) , The Universe Around Us , Melalui Ruang dan Waktu ( 1934 ) , The New Background of Science ( 1933 ) , dan The misterius Universe . Buku-buku ini dibuat Jeans cukup baik Dikenal sebagai expository dari penemuan-penemuan ilmiah yang revolusioner pada zamannya , Terutama Dalam relativitas dan kosmologi fisik .

Pada tahun 1939 , Journal of Astronomical Association, mengabarkan bahwa Jeans diusulkan sebagai calon parlemen untuk Cambridge University. Pemilihan , diharapkan terjadi pada tahun 1939 atau 1940 namun rumor tersebut tidak terbukti sampai 1945.

Dia juga menulis buku " Fisika dan Filsafat " ( 1943 ) di mana dia mengeksplorasi pandangan berbeda pada realitas dari dua perspektif yang berbeda : sains dan filsafat . Pandangan



Gambar 2.4-2. Kurva radiasi benda hitam dengan berbagai temperatur dan hukum Rayleigh-Jeans. Pada suhu rendah hukum Rayleigh sesuai dengan fakta eksperimen, namun, pada suhu tinggi terjadi penyimpangan dengan kerapatan spektrum yang terus naik dikenal dengan *UV-Catastrophe*.

Dengan menggunakan pendekatan semiempiris dan statistik, pada sekitar tahun 1900-an Max Planck<sup>44</sup> menawarkan konsep kuantum untuk menjelaskan

agamanya, Jeans adalah seorang agnostik. Jeans menikah dua kali, pertama dengan penyair Amerika Charlotte Tiffany Mitchell pada tahun 1907, kemudian dengan pemain organ Austria dan harpsichordist Suzanne Hock (lebih dikenal sebagai Susi Jeans) pada tahun 1935. Dia meninggal di Dorking, Surrey 1946. Sumber: [http://en.wikipedia.org/wiki/James\\_Jeans](http://en.wikipedia.org/wiki/James_Jeans) [67]

<sup>44</sup> Max Planck (1858-1947) adalah Fisikawan Jerman yang merumuskan persamaan yang menjelaskan spektrum radiasi benda hitam Eric Weisstein pada tahun 1900. Wien dan Rayleigh juga telah mengembangkan persamaan itu, tapi Wien hanya bekerja pada frekuensi tinggi, dan Rayleigh hanya bekerja pada frekuensi rendah. Spektrum Planck diperoleh dengan mempostulatkan bahwa energi itu berbanding lurus dengan frekuensi ( $E = h\nu$ ). Planck percaya bahwa kuantisasi ini bisa diterapkan pada penyerapan dan emisi energi oleh materi, bukan hanya untuk gelombang elektromagnetik sendiri. Namun, ternyata menjadi jauh lebih luas daripada yang bisa bayangkan ketika itu.

Planck menerima Hadiah Nobel dalam fisika pada tahun 1918 untuk teori kuantum setelah berhasil diterapkan untuk efek fotolistrik Eric Weisstein oleh Einstein dan teori atom oleh Niels Bohr. Planck menunjukkan ada kesulitan ketika berhubungan dengan teori statistik gerak molekuler untuk pendekatan termodinamika. Dia juga mengkritik interpretasi probabilistik entropi. Dia adalah orang pertama yang menuliskan persamaan yang biasanya dihubungkan dengan Boltzmann,  $S = k \log W$ . Bahkan, k konstan (sebagai lawan  $R / NA$ , di mana R adalah gas yang universal konstan Eric Weisstein Dunia Fisika dan NA adalah Avogadro nomor Eric

fenomena benda hitam. Model yang ditawarkan oleh Planck adalah bahwa radiasi yang dipancarkan oleh benda hitam analog dengan frekuensi yang ditimbulkan oleh osilator sehingga energi sebanding dengan frekuensi  $E \propto \nu$ . Besar energi yang dibangkitkan sebanding dengan perkalian integral dari jumlah osilator ke-n atau  $E \propto n\nu$ . Sehingga kesebandingan hubungan energi dan frekuensi dapat disamakan dengan faktor  $h$  (konstanta Planck =  $6,626 \times 10^{-34} \text{ Js}^{-1}$ ) menjadi pers. 2.

12.

$$E = n h \nu \quad (2.12)$$

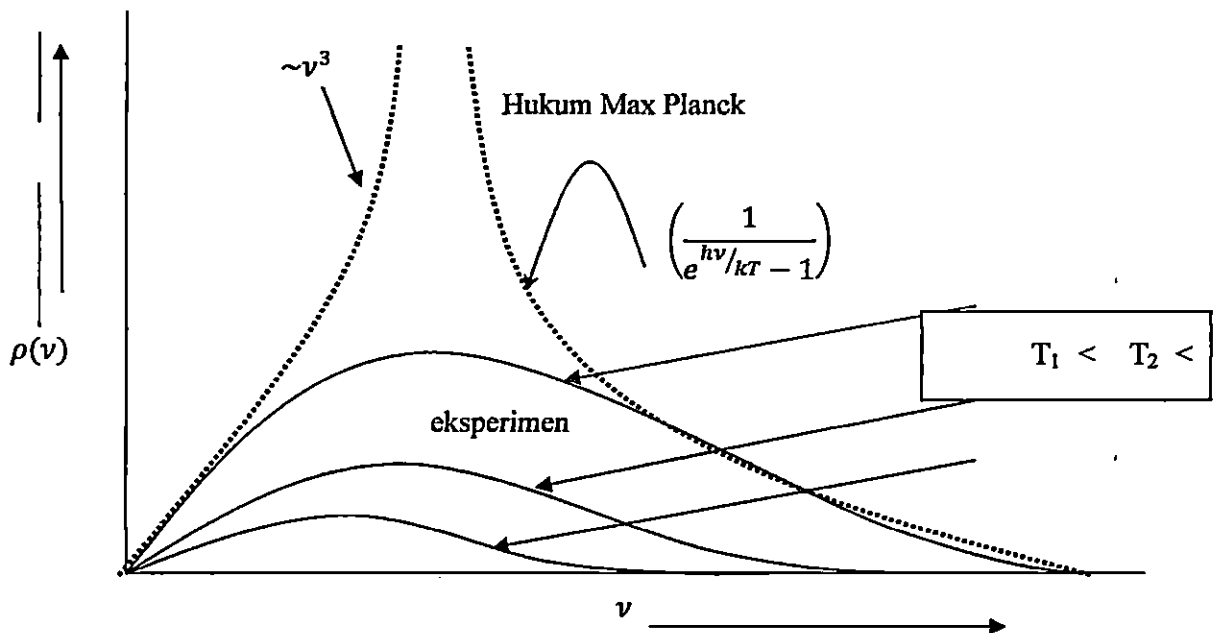
Sehingga dapat dinyatakan bahwa  $h\nu$  merupakan satu "quantum" energi. Dengan menggunakan mekanika statistik Planck menurunkan persamaan untuk radiasi benda hitam menjadi:

$$d\rho = \rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi h\nu}{c^3} \left( \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \right) d\nu \quad (2.13)$$

Pers. 2. 13 ini dapat menjelaskan secara lebih akurat tentang radiasi benda hitam yang sebelumnya telah gagal dijelaskan oleh Lord Rayleigh. Akhirnya mekanika klasik yang diwakili oleh Raleigh telah gagal menjelaskan fenomena kuantum. Ilustrasi penjelasan oleh Planck dapat dilihat pada Gambar 2.4-3.

Weisstein Dunia Fisika ) pertama kali digunakan oleh Planck pada tahun 1900 . Lorentz dan lain-lain yang disebut k konstanta Planck sampai 1911 ( Pais 1991 , p . 60 ) , ketika istilah konstanta Boltzmann Eric Weisstein Dunia Fisika menjadi berlaku umum .

Planck juga seorang filsuf ilmu pengetahuan. Dalam Scientific Autobiography dan lainnya, ia menyatakan bahwa " Sebuah kebenaran ilmiah baru tidak menang dengan meyakinkan lawannya dan membuat mereka melihat cahaya, melainkan karena lawan-lawannya akhirnya mati dan generasi baru tumbuh yang terbiasa dengan hal itu . " Pandangan ini bertentangan yang diteruskan oleh Karl Popper yang dikenal sebagai Prinsip Popper. Sumber: <http://scienceworld.wolfram.com/biography/Planck.html>[68]



Gambar 2.4-3. Rumusan semiempiris mekanika statistik Max Planck yang berhasil menjelaskan fakta eksperimen radiasi benda hitam.

## 2.5 Efek Fotolistrik

Teori gelombang cahaya yang dikembangkan oleh ahli fisika klasik seperti Huygens<sup>45</sup>, Thomas Young<sup>46</sup>, dan Newton juga gagal menjelaskan tentang

---

<sup>45</sup> Christiaan Huygens (lahir April 14, 1629, The Hague - meninggal 8 Juli 1695, The Hague), matematikawan Belanda, astronom, dan fisikawan, yang melahirkan teori gelombang cahaya, menemukan bentuk sebenarnya dari cincin Saturnus, dan pendiri untuk ilmu dinamika - studi tentang tindakan kekuatan pada benda.

Huygens berasal dari keluarga kelas menengah kaya dan terhormat. Ayahnya, Constantijn Huygens, diplomat, ahli Bahasa Latin, dan penyair, adalah teman dan koresponden dari banyak tokoh intelektual yang luar biasa saat itu, termasuk ilmuwan dan filsuf Rene Descartes. Sejak usia dini, Huygens menunjukkan bakat kepada mekanika ditandai dan bakat untuk menggambar dan matematika. Beberapa Upaya awal dalam geometri terkesan dari Descartes, seorang pengunjung yang sesekali singgah ke rumah tangga Huygens. Pada 1645 Huygens Memasuki University of Leiden, di mana dia Belajar matematika dan hukum. Dua tahun kemudian dia Dimasukkan ke College of Breda, di tengah-tengah kontroversi kemarahan atas

fenomena radiasi cahaya yang diamati pada awal abad ke-20. Jika cahaya dengan frekuensi tinggi mengenai permukaan suatu logam, maka elektron logam tersebut akan terlempar dengan energi tertentu. Energi elektron yang terlempar ke luar tersebut terkuantisasi. Penjelasan mekanika klasik menemui jalan buntu untuk menjelaskan fenomena ini, sampai kemudian Albert Einstein pada tahun 1905 berhasil merumuskan fenomena ini dengan menggunakan metoda kuantum cahaya yang sebelumnya telah dirintis oleh Max Planck. Dengan menggunakan hasil konstanta Planck yang telah diperoleh Planck secara mekanika statistik, Einstein menjelaskan tentang kuantisasi cahaya pada efek fotolistrik dengan dua hipotesis yaitu bahwa: (1) cahaya disusun oleh paket-paket cahaya yang disebut "foton", dan (2) energi dari foton tersebut sebanding dengan frekuensinya.

Menggunakan hipotesis tentang paket cahaya yang energinya tergantung kepada frekuensi maka cukup beralasan menyatakan bahwa dengan frekuensi ( $\nu$ ) yang cukup dan melampaui fungsi kerja ( $W$ ), maka elektron dari suatu atom akan terlempar dengan energi kinetik tertentu ( $\frac{1}{2}mv^2$ ) sesuai dengan rumus:

---

filsafat Descartes . Meskipun Huygens kemudian ditolak untuk menyebarkan ajaran tertentu dari Cartesian termasuk identifikasi ekstensi dan benda, namun dia selalu menegaskan bahwa penjelasan mekanik diperlukan oleh sains, suatu kenyataan yang kemudian terus berkembang dan tanpa dapat dicegah.[69]

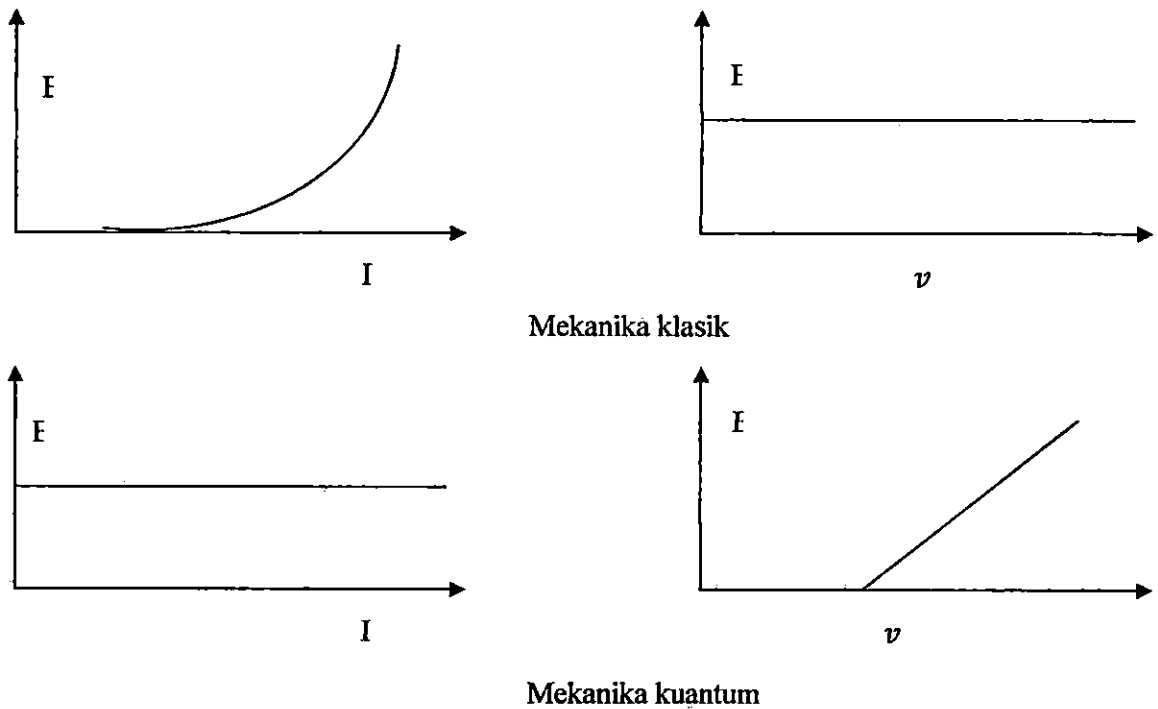
<sup>46</sup> Thomas Young, (lahir 13 Juni 1773, di Milverton, Somerset, Inggris-meninggal 10 Mei 1829, London), dokter dan ahli fisika Inggris yang melahirkan prinsip interferensi cahaya menjelaskan kembali tentang sifat gelombang cahaya. Dia juga seorang Egyptologist yang membantu memecahkan misteri Rosetta Stone.

Pada tahun 1799 Young muda membuka sebuah praktek medis di London. Bidang utamanya adalah dalam penyakit mata, saat masih menjadi mahasiswa kedokteran, dia telah menemukan cara di mana lensa mata berubah bentuk untuk fokus pada objek pada jarak yang berbeda. Dia menemukan penyebab astigmatisme pada tahun 1801, tahun yang sama dia beralih ke studi tentang cahaya.

Dengan Membiarkan cahaya melewati dua lubang kecil menuju ke layar, Young menemukan bahwa cahaya mengalami tumpang tindih, dan, di daerah tumpang tindih, timbul pita cahaya terang diselingi dengan pita cahaya gelap. Sumber: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/653983/Thomas-Young>[70]

$$h\nu = W + \frac{1}{2}mv^2 \quad (2.14)$$

secara klasik diasumsikan bahwa energi kinetik elektron akan meningkat jika intensitas sinar makin diperbesar, sebaliknya energi kinetik elektron akan tetap dengan menambah frekuensi foton yang masuk. Namun, hasil eksperimen ternyata sangat bertolak belakang dari ekspektasi klasik karena intensitas sinar yang diberikan sama sekali tidak menambah kecepatan elektron yang dipancarkan oleh logam namun dengan menambah frekuensi maka jumlah foton yang dipancarkan semakin banyak. Ilustrasinya bisa dilihat pada Gambar 2.5-1.



Gambar 2.5-1. Ilustrasi tentang perbandingan hubungan energi kinetik elektron yang dipancarkan dengan intensitas dan frekuensi pada efek fotolistrik



### 3. Dualisme Gelombang-Partikel dari Materi dan Cahaya

#### 3.1 Cahaya (Radiasi Gelombang Elektromagnetik)

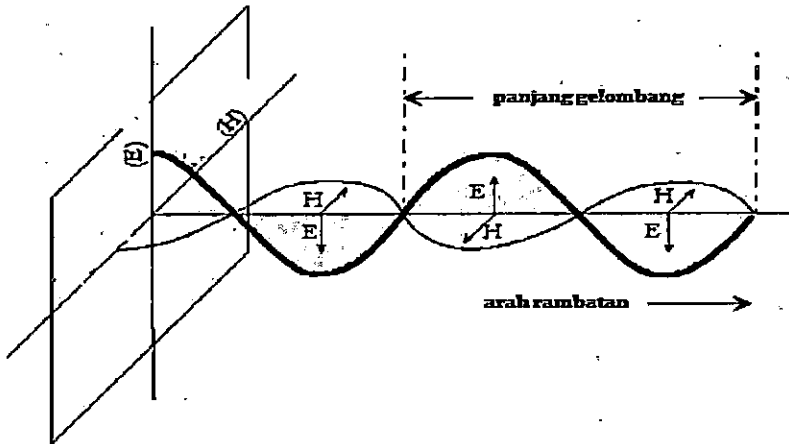
C

ahaya sebagai gelombang dijelaskan oleh ahli fisika Inggris J. C. Maxwell melalui teori elektrodinamika cahaya. Menurut Maxwell cahaya atau radiasi gelombang elektromagnetik merupakan superposisi saling tegak lurus antara medan listrik dan magnet. Sehingga dapat dirumuskan persamaan elektrodinamikanya sebagai;

$$\nabla \times \vec{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{4\pi\rho v}{c}, \quad \nabla \times \vec{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = 0, \quad 3.1$$

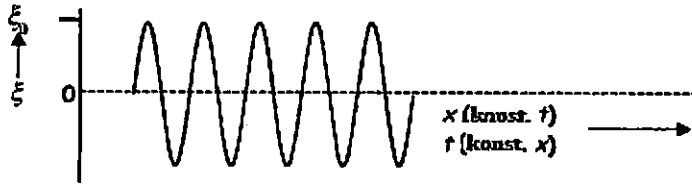
$$\nabla \cdot \vec{E} = 4\pi\rho, \quad \text{dan} \quad \nabla \cdot \vec{H} = 0 \quad 3.2$$

$\vec{E}$  dan  $\vec{H}$  adalah intensitas medan listrik dan medan magnet,  $\rho$  adalah kerapatan muatan, dan  $v$  adalah kecepatan.



Gambar 3.1-1. Gelombang elektromagnetik dibangun oleh superposisi gelombang medan magnet (H) dan medan listrik (E)

Mengambil sebuah persamaan gelombang, kita ambil arah rambatan polarisasi vektor searah-x seperti Gambar 3.1-1.

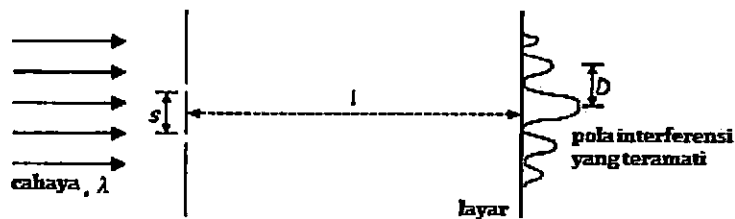


Gambar 3.1-2. Rambatan gelombang searah-x

maka kita dapatkan persamaan:

$$\xi(x, t) = \xi_0 \sin \left[ \frac{2\pi}{\lambda} (x - ct) \right], \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad 3.3$$

Pada saat tertentu katakanlah  $t = 0$ , maka dapat ditulis secara sederhana pers. 3.3 menjadi  $\xi(x, t = 0) = \xi_0 \sin(kx)$ . Seperti halnya gelombang pada air yang memiliki superposisi, maka gelombang cahaya (radiasi elektromagnetik) harus memiliki superposisi gelombang, baik interferensi konstruktif atau destruktif sehingga dapat menimbulkan garis gelap-terang pada cincin Newton. Untuk cahaya dapat diilustrasikan pada Gambar 13 tentang eksperimen T. Young yang menjelaskan sifat cahaya sebagai gelombang.



Gambar 3.1-3. Pola interferensi cahaya yang terjadi apabila cahaya melewati dua celah sempit. Pola ini teramati sebagai garis gelap-terang di layar.

Cahaya sebagai partikel dapat diamati pada eksperimen Compton<sup>47</sup> yaitu bahwa partikel cahaya (sinar-x, atau sinar- $\gamma$ ) yang memiliki energi tinggi melakukan tumbukan elastik dengan elektron, sehingga elektron dapat dilemparkan oleh cahaya (sinar). Hal ini hanya dimungkinkan jika cahaya bersifat sebagai partikel, jika cahaya hanya bersifat gelombang maka elektron yang mengelilingi inti atom hanya bergetar, namun, hasil eksperimen menunjukkan bahwa elektron dilemparkan dengan momentum yang seolah-olah menyerupai tumbukan dua partikel pejal.

Energi cahaya yang diberikan dapat dikonversi sebagaimana tumbukan elastik sempurna sebagaimana tumbukan dua bola bilyard berkecepatan tinggi. Pada eksperimen terlihat bahwa gelombang pendar bergeser ke arah spektrum berfrekuensi rendah atau geseran merah ( $\lambda' > \lambda$ ) sehingga energi cahaya (foton) berkurang setelah bertumbukan dengan elektron.

---

<sup>47</sup> Arthur Holly Compton ( September 10, 1892 - 15 Maret 1962 ) adalah seorang fisikawan Amerika yang memenangkan Hadiah Nobel dalam Fisika pada tahun 1927 untuk penemuan efek Compton , dan untuk kepemimpinannya dari Metallurgical Laboratory Proyek Manhattan . Ia menjabat sebagai Kanselir dari Washington University di St Louis 1945-1953 .

Pada tahun 1919 , Compton dianugerahi salah satu dari dua beasiswa Dewan Riset Nasional pertama yang memungkinkannya untuk belajar di luar negeri . Dia memilih untuk pergi ke Universitas Cambridge Cavendish Laboratory di Inggris , di mana ia mempelajari hamburan dan penyerapan sinar gamma : Penelitian lebih lanjut di sepanjang garis-garis ini menyebabkan penemuan efek Compton , yang menunjukkan sifat partikel dari radiasi elektromagnetik . Itu adalah penemuan sensasional pada waktu itu, untuk sifat gelombang cahaya telah baik ditunjukkan oleh Young dan Huygens, tetapi gagasan bahwa cahaya dapat memiliki sifat ganda (dualisme) tidak mudah diterima. Selama Perang Dunia II , Compton adalah tokoh kunci dalam Proyek Manhattan yang mengembangkan senjata nuklir pertama. Lapornya sangat penting dalam meluncurkan proyek ini. Pada tahun 1942 ia menjadi kepala Laboratorium Metalurgi , dengan tanggung jawab untuk memproduksi reaktor nuklir untuk mengubah uranium menjadi plutonium , mencari cara untuk memisahkan plutonium dari uranium dan untuk merancang bom atom . Compton mengawasi pembuatan reaktor nuklir pertama di Chicago Pile - 1 oleh Enrico Fermi, yang sangat kritis pada tanggal 2 Desember 1942 itu. Laboratorium metalurgi juga bertanggung jawab untuk desain dan operasi dari Graphite Reaktor X - 10 di Oak Ridge , Tennessee . Plutonium mulai diproduksi dalam reaktor Hanford Site pada tahun 1945. Sumber : [http://en.wikipedia.org/wiki/Arthur\\_Holly\\_Compton](http://en.wikipedia.org/wiki/Arthur_Holly_Compton)[71]

$$E' = \frac{hc}{\lambda'} < \frac{hc}{\lambda} = E \quad 3.4$$

Energi dan momentum ditransfer ke elektron, maka diperlukan mekanika relativitas untuk penyelesaian pers. 3. 4, sehingga akhirnya momentum partikel cahaya menjadi;

$$p = \frac{h\nu}{c} \quad 3.5$$

Pers. 3. 4 memberikan indikasi kepada kita bahwa cahaya juga bersifat sebagai partikel. Sehingga cahaya memiliki dua sifat yaitu sebagai gelombang dan sebagai partikel tergantung kepada aspek apa yang akan ditentukan dan sifat apa yang ingin diukur.

## 3.2 Materi

Kehidupan sehari-hari kita telah terbiasa mengamati adanya partikel materi. Bahkan seorang siswa SD sekalipun akan dengan gampang menunjukkan kepada kita berbagai contoh materi dalam kehidupan sehari-hari. Meja, kursi, air, tanah, udara, batu, bangunan dan lain-lain., merupakan materi yang umum diketahui dan semua contoh materi yang disebutkan itu tersusun atas partikel-partikel yang dapat dibuktikan dengan cara membagi-baginya menjadi satuan yang lebih kecil dan kesemua bagiannya masih memiliki massa dan ruang. Sehingga kita terbiasa mengatakan adanya partikel materi. Namun, mungkin masih kurang umum bagi sebagian orang untuk mengatakan bahwa materi juga bersifat gelombang.

Louis de Broglie<sup>48</sup> seorang bangsawan Perancis yang bekerja pada perusahaan radio dan sedang menyusun tesis Doktornya tentang fisika mengemukakan hipotesis yang cukup ganjil pada tahun 1929 yaitu: *“jika cahaya dapat bersifat gelombang dan partikel maka seharusnya materi juga bersifat partikel dan gelombang”*, untuk mendukung hipotesisnya, Broglie membuat

---

<sup>48</sup> Pangeran Louis - Victor de Broglie dari Akademi Perancis , Sekretaris Tetap Akademi Ilmu Pengetahuan , dan Profesor di Fakultas Ilmu di Universitas Paris , lahir di Dieppe (Seine Inferieure) pada 15 Agustus 1892, putra Victor , Duc de Broglie dan Pauline d' ARMAILLE . Setelah belajar di Lycée Janson dari Sailly, ia mendapat sertifikat sekolah pada tahun 1909 . Dia awalnya mempelajari studi sastra dan mengambil gelar dalam sejarah pada tahun 1910 . Kemudian, karena kegemarannya belajar kemudian melanjutkan untuk mengambil gelar dalam bidang ilmu pengetahuan alam, yang ia peroleh pada tahun 1913. Ia kemudian menjalani wajib militer untuk pelayanan radio bagi tentara, di mana dia tetap memegang jabatan tersebut sampai akhir perang tahun 1914-1918 . Selama periode ini ia ditempatkan di Menara Eiffel , di mana ia mengabdikan waktu luangnya untuk mempelajari masalah teknik dalam komunikasi radio . Pada akhir perang Louis de Broglie melanjutkan studinya dalam bidang fisika umum. Sementara mengambil minat dalam karya eksperimental yang dilakukan oleh kakaknya , Maurice , dan rekan kerja, dia mengkhususkan diri dalam bidang fisika teori khususnya, dalam studi masalah yang melibatkan quantum . Pada tahun 1924 di Fakultas Ilmu di Universitas Paris ia menyampaikan tesis Recherches sur la Théorie des Quanta ( Penelitian pada teori kuantum ) , dimana dia memperoleh gelar doktor . Tesis ini berisi serangkaian temuan penting yang telah diperoleh selama sekitar dua tahun. Ide-ide yang ditetapkannya dalam pekerjaannya pertama kali memunculkan keheranan karena kebaruannya, namun kemudian sepenuhnya dikonfirmasi oleh penemuan difraksi elektron dengan kristal pada tahun 1927 oleh Davisson dan Germer, mereka yang menjadi ilmuwan yang membuktikan kebenaran teori gelombang.

Setelah mempertahankan tesisnya dan sambil terus menerbitkan karya mendasar pada mekanika baru , Louis de Broglie mengambil tugas mengajar . Setelah menyelesaikan kuliah gratis dua tahun di Sorbonne ia diangkat untuk mengajar teori fisika di Institut Henri Poincaré yang baru saja dibangun di Paris . Tujuan dari Institute yang mengajarkan dan mengembangkan fisika dan matematika teoritis. Menempati posisi professor dalam fisika teori di Fakultas Ilmu di Universitas Paris sejak 1932 , Louis de Broglie menjalankan kursus pada subjek yang berbeda setiap tahun di Institut Henri Poincaré, dan beberapa kursus ini telah dipublikasikan . Banyak siswa Perancis dan asing telah datang untuk bekerja dengan dia dan banyak tesis doktor telah disusun di bawah bimbingan nya .

Antara 1930 dan 1950 , karya Louis de Broglie telah terutama dikhususkan untuk mempelajari berbagai ekstensi dari mekanika gelombang : Teori elektron Dirac , teori baru cahaya , teori umum spin partikel, aplikasi dari mekanika gelombang untuk fisika nuklir , dll . Ia telah menerbitkan berbagai catatan dan beberapa makalah tentang hal ini, dan adalah penulis lebih dari dua puluh lima buku tentang bidang kepentingan tertentu nya .

Terpilih sebagai anggota dari Akademi Ilmu Pengetahuan Institut Perancis pada tahun 1933 , Louis de Broglie telah menjadi Sekretaris Tetap untuk ilmu matematika sejak 1942 . Dia telah menjadi anggota dari Biro des Longitudes sejak tahun 1944 . Dia memegang Grand Cross dari Legio d' Honneur dan merupakan Officer Ordo Leopold dari Belgia . Dia adalah seorang doktor kehormatan dari Universitas Warsawa , Bucharest , Jakarta, Lausanne , Quebec , dan Brussels, dan anggota delapan belas akademi asing di Eropa , India , dan Amerika Serikat. Sumber: [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1929/broglie-bio.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1929/broglie-bio.html)[72]

hubungan matematis tentang persamaan gelombang materi yang diturunkan dari kombinasi relativitas khusus dan efek fotolistrik yang diusulkan oleh A. Einstein tahun 1905.

$$h \cdot \nu = m \cdot c^2, \Rightarrow \lambda = \frac{h}{p} \quad 3.6$$

Ajaib sekali bahwa pers. 3. 6 yang bermula dari sekedar hipotesis ternyata tepat dengan eksperimen yang dilakukan oleh Davisson<sup>49</sup> dan Germer<sup>50</sup>.

---

<sup>49</sup> Clinton Joseph Davisson lahir di Bloomington , Illinois , Amerika Serikat , 22 Oktober 1881, anak Yusuf Davisson , seorang tukang, asli Ohio , keturunan pemukim Belanda dan Perancis awal Virginia, veteran Perang Saudara Amerika, dan Mary Calvert, sekolah - guru , asli Pennsylvania , bahasa Inggris dan Scotch keturunan .

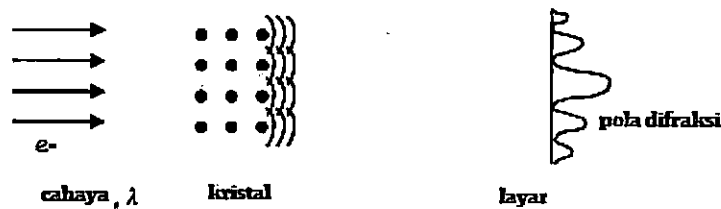
Dia memasuki sekolah umum Bloomington, dan lulus dari SMA pada tahun 1902 diberikan scholarship oleh University of Chicago untuk kecakapan dalam matematika dan fisika . Pada bulan September tahun itu ia masuk ke Universitas Chicago dan sekaligus di bawah supervisi Profesor RA Millikan. Karena alasan keuangan ia kemudian melanjutkan kuliah di Chicago dan pada tahun berikutnya ia menemukan pekerjaan pada perusahaan telepon di kota kelahirannya . Pada bulan Januari 1904 ia diangkat sebagai asisten dalam fisika di Universitas Purdue atas rekomendasi dari Profesor Millikan . Ia kembali ke Chicago pada bulan Juni 1904 dan tetap tinggal di Universitas sampai Agustus 1905. Pada September 1905 , juga atas rekomendasi dari Profesor Millikan, ia diangkat sebagai instruktur paruh waktu dalam bidang fisika di Princeton University. Posisi ini dia pegang sampai 1910, karena tugas-tugasnya diizinkan untuk belajar di bawah Profesor Francis Magie , Profesor EP Adams , Profesor (kemudian Sir ) James Jeans dan khususnya di bawah Profesor OW Richardson . Selama periode ini Davisson kembali ke Universitas Chicago untuk sesi musim panas dan dalam Agustus 1908 ia menerima gelar BS gelar dari institusi tersebut.

Ia dianugerahi Fellowship di Fisika di Princeton untuk tahun 1910-1911 dan selama tahun itu merupakan persyaratan untuk belajar pada tingkat Ph.D. yang ia terima pada tahun 1911. Tesisnya , di bawah Profesor Richardson , adalah On The Thermal Emisi Positif Ion Dari Alkaline Garam Bumi . Sejak September 1911 sampai Juni 1917 ia adalah seorang instruktur di Departemen Fisika di Carnegie Institute of Technology , Pittsburgh , Pa Selama musim panas 1913 ia bekerja di Laboratorium Cavendish di bawah Profesor (kemudian Sir ) JJ Thomson. Pada bulan April 1917 ia menolak pendaftaran di Angkatan Darat Amerika Serikat . Pada bulan Juni tahun yang sama ia menerima pekerjaan sukarela anti perang di Departemen Teknik dari Western Electric Company (kemudian Bell Telephone Laboratories ) , New York City - . Pada awalnya untuk musim panas , lalu , pada saat cuti dari Carnegie Tech, selama Perang Dunia . Pada akhir perang ia mengundurkan diri sebagai asisten professor karena ia telah ditunjuk di Carnegie Tech untuk melanjutkan pekerjaan sebagai Anggota Staf Teknis Laboratorium Telephone .

Rangkaian investigasi yang menyebabkan penemuan difraksi elektron tahun 1927 dimulai pada tahun 1919 dan dilanjutkan ke tahun 1929 dengan kolaborasi pertama dari Dr CH Kunsman , dan dari 1924 pada , Dr L.H. Germer . Selama penelitian dilakukan pekerjaan penembakan radiasi termal dengan kolaborasi Mr JR Weeks , dan thermionics dengan Dr HA Pidgeon dan Dr Germer .[73]

<sup>50</sup> Lester Halbert Germer (10 Oktober 1896 - 3 Oktober 1971 ) . Adalah seorang fisikawan Amerika, dengan Clinton Davisson , ia membuktikan dualitas gelombang - partikel

Eksperimen Davisson dan Germer menunjukkan bahwa terjadi pendaran elektron (partikel) dengan gejala interferensi gelombang sebagaimana halnya cahaya pada logam nikel yang ditembak dengan foton berfrekuensi tinggi. Efek gelombang yang ditimbulkan dari eksperimen ini tepat dengan panjang gelombang yang dikemukakan oleh de Broglie. Secara diagramatis eksperimen Davisson dan Germer ditunjukkan pada Gambar 3.2-1.



Gambar 3.2-1. Pola difraksi yang dihasilkan oleh partikel materi ( $\bar{e}$ ) cocok dengan pola gelombang yang dihasilkan oleh cahaya.

Sebagai konsekuensi dari sifat ini sangat besar karena partikel yang selama ini dipahami memiliki karakteristik berbeda dengan gelombang, harus ditata ulang secara konseptual karena ternyata partikel memiliki dualisme sifat yaitu sebagai materi dan gelombang.

materi dalam percobaan Davisson - Germer , yang penting bagi perkembangan mikroskop elektron . Studi-studi ini mendukung pekerjaan teoritis dari De Broglie . Dia juga belajar thermionics , erosi logam , dan kontak fisika . Dia dianugerahi Elliott Cresson Medal pada tahun 1931. Dari seorang mantan pilot pesawat tempur di Perang Dunia I , Germer kemudian bekerja di Bell Labs di New Jersey. Pada tahun 1945 ( pada usia 49 ) , Germer meluncurkan karir sampingan sebagai pemanjat tebing . Dia naik di berbagai pegunungan Timur Laut di seluruh Amerika Serikat, dan terutama di New York Shawangunk Ridge . Meskipun ada organisasi Appalachian Mountain Club di daerah tersebut pada saat itu , dan panjat tebing diatur secara ketat , Lester tidak pernah dikaitkan dengan klub, dia pernah terlibat konflik dengan pendaki terkemuka dalam klub itu bernama Hans Kraus , yang mengepalai Keselamatan AMC Komite. Ia pernah ditolak untuk memanjat dengan komentar " terlalu berani dan terlalu nekad . " Lester dikenal karena murah hati dan ramah .

Pada tahun 1971 , satu minggu sebelum ulang tahun ke-75 nya , Lester Germer meninggal karena serangan jantung saat memimpin pendakian batu di Shawangunk Ridge ( Alis , 5.6 ) . Sampai saat itu , Lester memiliki catatan keamanan yang sempurna duapuluh lima tahun di panjat tebing , ia bahkan tidak pernah membuat seorang anggotapun jatuh[74] .

Bangunan struktur atom Bohr yang menggunakan pendekatan semiklasik mengalami restrukturisasi, interferensi yang terjadi akibat dari sifat gelombang materi memaksa elektron untuk menempati posisi yang memungkinkan tercapai kestabilan. Jika gelombang elektron tidak cukup dekat ke inti maka destruktif interferensi akan menghancurkan elektron itu sendiri, sedangkan jika elektron cukup dekat ke inti maka terjadi konstruktif interferensi yang menjaga kelestariannya (seperti eksperimen garis gelap-terang T. Young), kelestarian elektron akan terjaga dengan mengasumsikan bahwa **momentum angular elektron harus terkuantisasi** sesuai persamaan:

$$2\pi r = n\lambda = \frac{nh}{p} = \frac{nh}{mv}$$

atau

$$mvr = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar \Leftrightarrow \ell = n\hbar$$

(3.7)

sa m akan  
ap bab 2

$n$  adalah bilangan kuantum utama,  $\hbar$  adalah  $\frac{h}{2\pi}$ ,  $v$  adalah kecepatan linier elektron,  $r$  adalah jari-jari lintasan dan  $\ell$  adalah momentum angular.

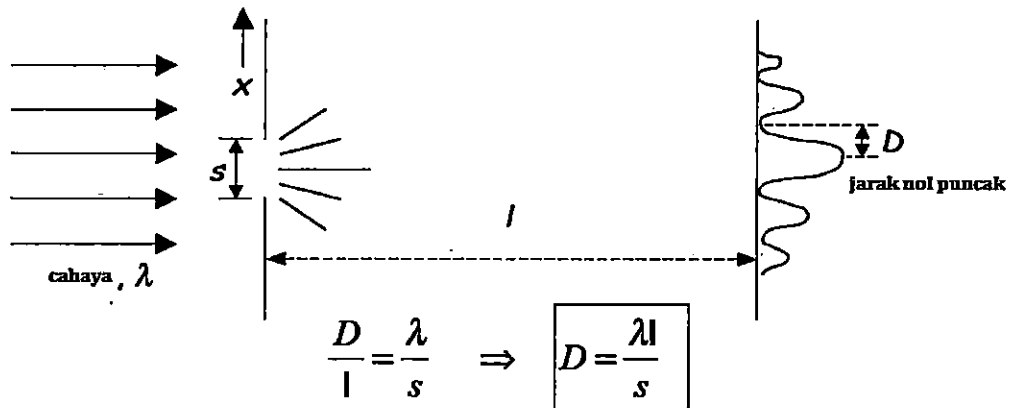
Selain menunjukkan kestabilan lintasan elektron oleh momentum angular dari elektron, sifat gelombang partikel juga membawa kepada sifat ketakpastian yang dirumuskan pertamakali oleh Werner Heisenberg<sup>51</sup>. Dengan mengambil

---

<sup>51</sup> Werner Karl Heisenberg ( 5 Desember 1901 - 1 Februari 1976 ) adalah seorang ahli fisika teoritis Jerman dan salah satu pencipta utama dari mekanika kuantum . Ia menerbitkan karyanya pada tahun 1925 dalam sebuah makalah terobosan . Pada seri berikutnya dari kertas Max Born dan Pascual Jordan , pada tahun yang sama , formulasi matriks mekanika kuantum ini secara substansial diuraikan . Pada tahun 1927 ia menerbitkan prinsip ketidakpastian, yaitu prinsip filsafat dan yang membuatnya paling dikenal . Heisenberg dianugerahi Penghargaan Nobel dalam Fisika untuk 1932 " untuk penciptaan mekanika kuantum ". Ia juga membuat kontribusi penting untuk teori hidrodinamika arus turbulen , inti atom , ferromagnetism , sinar kosmik , dan partikel subatomik , dan ia berperan dalam perencanaan reaktor pertama Jerman Barat nuklir di Karlsruhe , bersama-sama dengan reaktor riset di Munich , pada tahun 1957. Kontroversi mengelilingi karyanya pada penelitian atom selama Perang Dunia II . Setelah Perang Dunia II , ia diangkat



model partikel cahaya melewati celah sempit seperti diilustrasikan pada Gambar 3.2-2.



Gambar 3.2-2. Ilustrasi eksperimen cahaya yang melewati celah sempit

Mengambil kasus seberkas elektron dengan panjang gelombang de Broglie  $\lambda$ , analog dengan kasus pada Gambar 15, dimana celah membatasi kemungkinan posisi elektron pada arah-x setelah melewati celah sempit, elektron kemudian tersebar membentuk pola difraksi dengan lebar D. ini berarti bahwa elektron harus melalui celah dengan selang komponen kecepatan  $v_x$  yaitu:

$$\frac{\Delta v_x}{v} \approx \frac{D}{l} = \frac{\lambda}{s} = \frac{\lambda}{\Delta x}$$

Dan  $\Delta x \Delta v_x = \lambda v$  atau  $\Delta x \Delta p_x = \lambda p$ , karena menurut Broglie  $\lambda = \frac{h}{p}$ , maka,

$$\Delta x \Delta p_x = h$$

3. 8

sebagai direktur dari Institut Kaiser Wilhelm untuk Fisika, yang tidak lama kemudian berganti nama menjadi Institut Max Planck untuk Fisika. Dia adalah direktur lembaga itu sampai pindah ke Munich pada tahun 1958, ketika itu diperluas dan berganti nama menjadi Institut Max Planck untuk Fisika dan Astrofisika.

Heisenberg juga presiden Jerman Research Council, Ketua Komisi Fisika Atom, ketua Kelompok Kerja Fisika Nuklir, dan presiden Alexander von Humboldt Foundation. Sumber: [http://en.wikipedia.org/wiki/Werner\\_Heisenberg](http://en.wikipedia.org/wiki/Werner_Heisenberg)[75]

Sehingga, posisi dan momentum dari partikel tidak bisa ditentukan secara serentak dengan akurasi yang tepat, sehingga **semakin tepat pengukuran momentum akan mengurangi presisi pengukuran posisi dan sebaliknya**. Pernyataan ini dikenal sebagai prinsip ketakpastian Heisenberg yang secara konvensional dapat kita tuliskan sebagai:

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad 3.9^*$$

Bergantung kepada bagaimana “ketakpastian” ini didefinisikan baik itu setengah dari lebar 1/e atau FWHM (*full width half maximum*) dan lain-lain.

Namun, pernyataan umum tentang ketakpastian ini harus lebih besar dari  $\frac{\hbar}{2}$  dan tidak mungkin pernah lebih kecil.

#### Contoh Soal

Gunakan teori ketakpastian Heisenberg terhadap elektron pada atom hidrogen?

Jawab

Massa atom H =  $9,1 \times 10^{-31}$  kg,  $\Delta x \approx 10^{-10}$  m

$$\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2\Delta x} \Rightarrow \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x} \approx \frac{1}{2} \times 10^{-6} \text{ m/det}$$

Pada contoh soal terlihat bahwa jika kita bisa mengukur dimana posisi elektron, maka pada saat yang sama kita tidak tepat mengukur kecepatan elektron tersebut. Dengan ketakpastian ini asumsi Bohr mula-mula yang menyatakan bahwa posisi dan momentum partikel dapat diketahui dengan pasti telah gugur, sehingga gambaran struktur elektron sebagai bola pejal yang mengelilingi inti harus diganti dengan model gelombang. Hal ini bisa terjadi karena hanya perilaku gelombang dari partikel yang dapat menjelaskan anomali ketakpastian ini.

Jawaban pertanyaan ini ditawarkan oleh ahli fisika Austria bernama Erwin Schrödinger. Dalam tesisnya Schrödinger menawarkan solusi tentang perilaku gelombang dari partikel.

### 3.3 Persamaan Schrödinger Keadaan Tunak (Steady State)

Suatu partikel dalam keadaan tunak akan berperilaku sebagai gelombang yang memenuhi fungsi gelombang  $\psi_x$  untuk satu dimensi (1-D) yang memenuhi solusi persamaan differensial berikut.

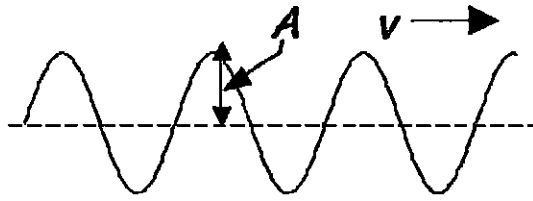
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E \psi(x) \quad \text{3.}$$

*10\**

*hemp. merah*

Persamaan ini menunjukkan hubungan kuantisasi energi gelombang dengan energi potensial gelombang tersebut. Secara umum kita tidak dapat membuktikan pers. 3.10 ini, namun, kita diberi alasan yang cukup untuk menyatakan bahwa nilai fisis dari persamaan ini berguna. Pers. 25 ini disebut juga sebagai **Persamaan Schrödinger Keadaan Tunak (PSKT)**. PSKT ini akan banyak kita gunakan dalam menyelesaikan berbagai persoalan untuk atom hidrogen dan atom seperti hidrogen.

Sebagai motivasi untuk menunjukkan tentang arti fisis dari persamaan Schrödinger ini dapat kita lihat pada contoh kasus gelombang berjalan pada Gambar 3.3-1.



Gambar 3.3-1. Ilustrasi gelombang berjalan searah sumbu-x

Persamaan gelombang searah-x positif untuk Gambar 3.3-1 dapat kita buat sebagai:

$$\phi_1(x, t) = A \sin(kx - \omega t) \quad (3.11)$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = 2\pi\nu \text{ dan } \lambda\nu = v$$

Hal yang sama persamaan gelombang searah-x negatif juga dapat kita nyatakan dengan:

$$\phi_2(x, t) = A \sin(kx + \omega t) \quad 3.12$$

Sehingga solusi untuk kedua pers. (3.11) dan 3.12 dapat kita nyatakan dengan:

$$\frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial t^2} \quad 3.13$$

Kemudian, jumlah dari persamaan gelombang yang bergerak searah-x atau searah (-x) juga merupakan solusi:

$$\Psi(x, t) = \phi_1(x, t) + \phi_2(x, t) \quad 3.14$$

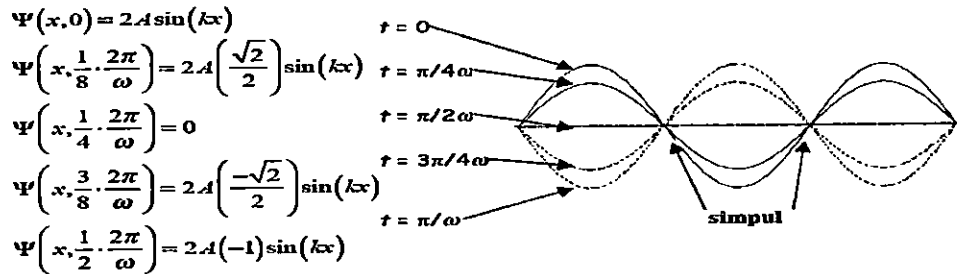
Menjadi

$$\Psi(x, t) = A [\sin(kx - \omega t) + \sin(kx + \omega t)] = 2A \sin(kx) \cos(\omega t) \quad 3.15$$

Pers. 3.15 disebut sebagai persamaan gelombang diam atau persamaan gelombang stasioner. Puncaknya berada dalam posisi stasioner sebagaimana yang

dapat diamati pada gelombang pada dawai yang diilustrasikan dalam Gambar 3.3-

2.



Gambar 3.3-2. Gelombang pada dawai dan fungsi gelombangnya dalam berbagai fungsi- t

Seperti terlihat pada Gambar 17, posisi simpul tidak bergantung kepada waktu (t). Hanya amplitudo dari bentuk gelombang yang sesuai saja yang bergantung kepada waktu. Sehingga bentuk umum persamaan gelombang dapat ditulis menjadi:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \cos(\omega t) \quad 3.16$$

Dalam kasus pada Gambar 17,  $\Psi(x, t) = 2A \sin(kx)$ . Bentuk persamaan umum yang memenuhi adalah:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2} = -\frac{\omega^2}{v^2} \Psi(x, t) = -k^2 \Psi(x, t) \Rightarrow \left(\frac{\omega}{k} = v\right) \quad 3.17$$

Memasukkan nilai  $\Psi(x, t) = \psi(x) \cos(\omega t)$  maka kita dapatkan

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -k^2 \psi(x) = -\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \psi(x) \quad 3.18$$

Kombinasi persamaan de Broglie  $\lambda = \frac{h}{p}$ , kita peroleh:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\left(\frac{p}{h}\right)^2 \psi(x) \quad 3.19$$

Sehingga,

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -p^2 \psi(x) \quad 3.20$$

Karena nilai  $p^2 = 2m (E_k) = 2m [E - V(x)]$  dengan asumsi bahwa potensial tidak bergantung kepada waktu, maka pers. 3. 20 dapat kita tautalangi menjadi:

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

Yang merupakan persamaan Schrödinger keadaan tunak (PSKT) yang telah dikemukakan pada pers. 3. 10. Pembuktian fisis ini cukup menjadi motivasi bahwa persamaan Schrödinger memiliki landasan filosofis fisis yang cukup berarti.

## 4. Mekanika Kuantum Partikel Dalam Kotak

### 4.1 Solusi Persamaan Schrödinger untuk Partikel dalam Kotak

**H**

ipotesis Schrödinger berangkat dari partikel imajiner yang terperangkap dalam medan potensial yang sangat besar tak hingga, sehingga partikel mengalami gerak acak dengan perilaku fisis memenuhi persamaan differensial orde-2

Schrödinger yaitu:

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

Penyelesaian terhadap persamaan ini merupakan kombinasi linier dari dua persamaan yaitu:

$$\psi(x) = A \phi_1(x) + B \phi_2(x) \quad 4.1$$

Nilai A dan B ditentukan oleh kondisi batas yang memenuhi fungsi  $\psi(x)$  dan  $\psi'(x)$ . Agar solusi bisa memenuhi syarat fisis maka kedua fungsi harus merupakan fungsi yang kontinu.

Pada partikel bebas, tidak ada kondisi batas yang harus dipenuhi sehingga nilai  $V(x) = 0$  maka solusi persamaan menjadi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E \psi(x) \quad 4.2$$

Kita definisikan nilai  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  atau  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ,  $V(x) = 0$ ,  $E = \frac{p^2}{2m}$ , sehingga  $p^2 = \hbar^2 k^2 \Rightarrow p = \hbar k$  sesuai dengan de Broglie  $p = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow k = \frac{2\pi}{\lambda}$ .

Maka persamaan gelombang menjadi:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -k^2 \psi(x) \quad 4.3$$

Dengan solusi terhadap pers. 38 yaitu  $\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$ , maka untuk partikel bebas tidak ada kondisi batas yang memenuhi sehingga semua nilai A dan B memenuhi dan semua nilai  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  memenuhi. Atau dengan kata lain semua solusi persamaan gelombang (bergerak ataupun diam) dengan semua panjang gelombang, vektor gelombang, momentum dan energi memenuhi persamaan gelombang ini.

Pada partikel dalam kotak, terdapat kondisi batas yang melingkupi partikel karena adanya potensial yang membatasi partikel tersebut untuk berada di dalam kotak. Potensial  $V(x) = \infty$  pada daerah  $x < 0, x > a$  dan potensial bernilai nol  $V(x) = 0$  saat  $0 \leq x \leq a$ . Dengan asumsi ini dapat kita nyatakan bahwa partikel berada di dalam kotak, dan tidak ditemukan partikel pada potensial  $V(x) = \infty$ . Sehingga persamaan gelombang partikel materi untuk  $V(x) = \infty$  menjadi:

$$\psi(x < 0, x > a) = 0$$

Sedangkan untuk partikel yang terperangkap dalam potensial  $V(x) = 0$  adalah sama dengan fungsi gelombang partikel bebas pada pers. 37. Sehingga

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

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -k^2 \psi(x)$$

Juga kita definisikan nilai  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$  atau  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ,  $V(x) = 0$ ,  $E = \frac{p^2}{2m}$ , sehingga  $p^2 = \hbar^2 k^2 \Rightarrow p = \hbar k$  sesuai dengan de Broglie  $p = \frac{h}{\lambda} \Rightarrow k = \frac{2\pi}{\lambda}$ , dan



solusi juga menjadi  $\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$ , namun, kali ini kita buat kondisi batas terhadap persamaan yaitu:

Fungsi kontinu pada  $\psi(x)$  akibatnya  $\psi(0) = \psi(a) = 0$ , maka  $\psi(0) = A \cos(0) + B \sin(0)$  menjadikan  $A = 0$ . Kemudian solusi kedua kita nyatakan bahwa  $\psi(a) = B \sin(ka) = 0$ . Disini kita tidak dapat mengambil nilai  $B = 0$ , karena ini berarti bahwa tidak ada partikel dimanapun dalam kotak, sehingga harus diambil nilai  $\sin(ka) = 0$ . Sehingga nilai  $ka = n\pi$  dengan nilai  $n = 1, 2, 3, \dots$

Disini terlihat bahwa  $k$  tidak kontinu namun merupakan nilai diskrit  $k = \frac{n\pi}{a}$ , sehingga merupakan nilai nya alami bilangan bulat. Sehingga solusi dari persamaan Schrödinger dengan kondisi batas dalam medan potensial nol menjadi:

$$\psi(0 \leq x \leq a) = B \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.4)$$

Solusi ini memberi gambaran energi keadaan stasioner atau keadaan diam partikel dalam kotak adalah

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow E_n = \frac{n^2 \hbar^2}{8ma^2} \quad 4.5$$

Pers. 4.5 menunjukkan bahwa energi partikel terkuantisasi dan keadaan atau tingkat energi partikel digambarkan oleh bilangan kuantum  $n$  sebagai bilangan bulat.

Solusi satu dimensi ini membawa kita kepada sifat-sifat keadaan stasioner dari partikel yaitu:

a). celah energi antar tingkat (keadaan) secara tajam makin melebar dengan bertambahnya nilai  $n$  sebagaimana sesuai dengan pers. 4.6

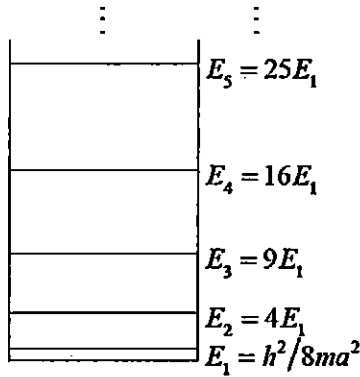
$$E_{n+1} - E_n = \{(n+1)^2 - n^2\} \frac{\hbar^2}{8ma^2} \quad 4.6$$

atau

$$E_{n+1} - E_n = (2n + 1)E_1$$

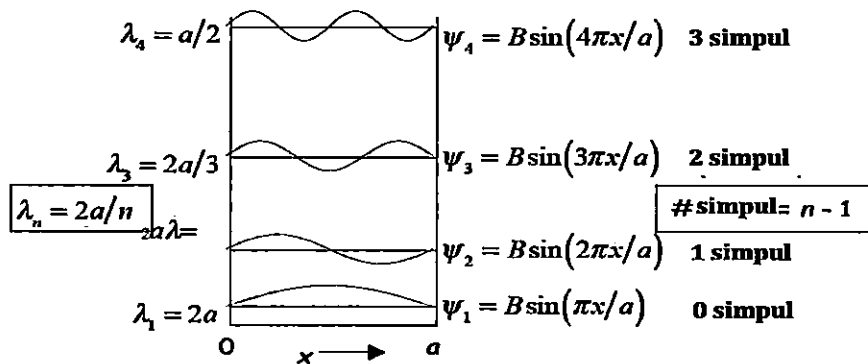
4.7

Sesuai model Gambar 4.1-1 berikut.



Gambar 4.1-1. Celah energi antar tingkat (keadaan) dari partikel dalam kotak

b). fungsi gelombang  $\psi(x)$  adalah sinusoidal, dengan jumlah simpul bertambah satu untuk setiap tingkat yang digantikan diilustrasikan pada Gambar 4.1-2.



Gambar 4.1-2. Fungsi gelombang dan simpul pada model partikel dalam kotak

c). Celah energi akan semakin bertambah jika ukuran kotak semakin diperkecil dengan faktor  $E \propto \frac{1}{a^2}$ .

## 4.2 Model Mekanika Kuantum Partikel dalam Kotak

Sebelumnya telah dikemukakan tentang fungsi gelombang partikel  $\psi(x)$  pada potensial  $V(x) = \infty$ , dan  $V(x) = 0$ , untuk partikel dalam kotak satu dimensi. Pertanyaan yang mengemuka saat ini adalah “apakah fungsi gelombang  $\psi(x)$  itu?”. Apakah fungsi gelombang memiliki makna fisis atau hanya ungkapan matematis dalam menyederhanakan persoalan fisis? Pertanyaan tersebut cukup sulit untuk dijelaskan dengan interpretasi langsung, namun Max Born membuat interpretasi untuk kuadrat dari fungsi gelombang  $\psi(x)$  itu sebagai peluang distribusi, sedangkan fungsi gelombangnya sendiri tetap menjadi ungkapan matematis yang interpretasi fisisnya hampir tidak ada dan sebenarnya juga tidak perlu.

Menurut interpretasi Born bahwa distribusi peluang atau kerapatan peluang mencari partikel dalam suatu interval tertentu dapat dinyatakan sebagai

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) \quad (4.8^*)$$

Sehingga secara fisis dapat dinyatakan bahwa  $|\psi(x)|^2 dx$  adalah peluang menemukan partikel dalam interval  $x$  dan  $x + dx$ .

Dengan mengambil pendekatan ini maka kita harus merubah cara pandang kita terhadap alam semesta, dimana sebenarnya kita hanya mengetahui peluang dari hasil suatu eksperimen, dan kita tidak mengetahui hasilnya secara persis. Secara bijak harus dipikirkan ulang tentang “kepastian” yang selama ini kita nyatakan untuk ilmu alam.

Karena total peluang untuk menemukan partikel dalam suatu interval tertentu adalah 1, maka untuk partikel dalam ruang satu dimensi harus dinyatakan sebagai:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_0^a |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (4.9)$$

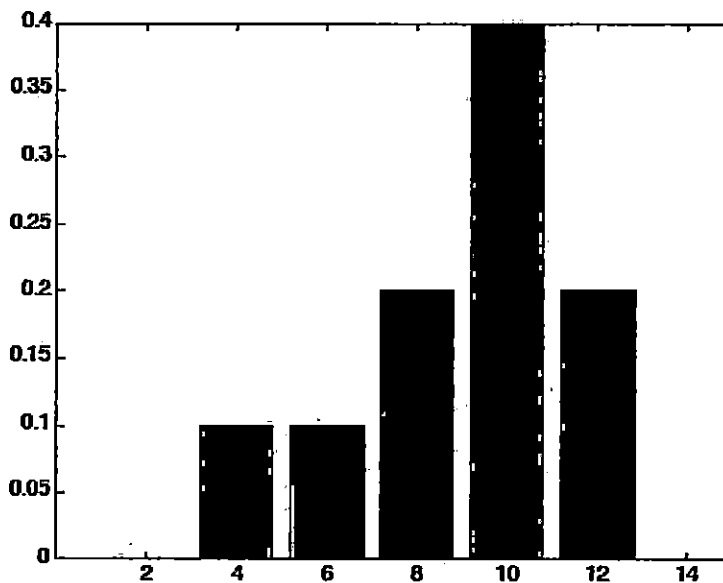
Pada kondisi normalisasi

$$\int_0^a B^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1 \Rightarrow B = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad 4.10$$

Dan fungsi gelombang yang dinormalisasi pada partikel dalam kotak menjadi

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), n = 1, 2, 3, \dots \quad 4.11$$

Interpretasi terhadap  $|\psi(x)|^2$  berdasarkan kepada hasil eksperimen/pengukuran, setiap pengukuran memberikan satu hasil. Apabila dilakukan pengukuran yang banyak sekali maka akan diperoleh distribusi hasil pengukuran atau disebut juga peluang distribusi pengukuran. Sehingga kita bisa mencari nilai harapan dari pengukuran tersebut atau nilai rata-rata dari pengukuran tersebut. Untuk distribusi pengukuran yang diskrit dapat kita cari dengan pola distribusi seperti pada Gambar 4.2-1 berikut ini.



Gambar 4.2-1. Peluang distribusi diskrit sebuah pengukuran

Maka nilai rata-rata  $\langle x \rangle$  dari  $x$  dapat kita tentukan terhadap hasil pengukuran Gambar 20 sebagai berikut:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= 4 (0,1) + 6 (0,1) + 8 (0,2) + 10 (0,4) + 12 (0,2) \\ &= 4 (P_4) + 6 (P_6) + 8 (P_8) + 10 (P_{10}) + 12 (P_{12}) \end{aligned} \quad 4.12$$

Jika  $P_x$  menyatakan peluang pengukuran yang memberikan nilai kepada  $x$  maka nilai harapan  $\langle x \rangle$  dari  $x$  menjadi:

$$\langle x \rangle = \sum x P_x \quad 4.13$$

Pers. 44 merupakan nilai harapan atau rata-rata untuk peluang distribusi yang diskrit. Mengubah nilai  $P_x \rightarrow |\psi(x)|^2 dx$ , dan  $\sum \rightarrow \int$  sehingga kita peroleh pers. 45 yang menyatakan peluang distribusi kontinu sebagai:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x)|^2 dx \quad 4.14$$

atau

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx \quad 4.15$$

Pers. 4.15 lebih disukai dalam bentuk komplemen karena lebih memiliki arti fisika. Dan bentuk komplemen dari pers. 4.16 adalah:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx \\ \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) x^2 \psi(x) dx \end{aligned}$$

Sehingga untuk partikel dalam kotak maka persamaan menjadi

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a x \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \quad 4.16$$

Dengan mengintegalkan bagian demi bagian akan diperoleh persamaan

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} \quad 4.17$$

atau dapat kita nyatakan bahwa posisi rata-rata partikel dalam sebuah kotak berada di tengah-tengah kotak.

### 4.3 Postulat Mekanika Kuantum

Supaya penyelesaian teoretis yang terdapat dalam persamaan Schrödinger dapat sesuai dengan persoalan fisis yang terdapat pada persoalan baik imajiner seperti partikel yang terperangkap dalam kotak medan potensial tak berhingga atau ke dalam persoalan nyata seperti atom hidrogen maka perlu untuk merumuskan **postulat mekanika kuantum**. Postulat ini merupakan batasan-batasan fisis yang memungkinkan persoalan teori dapat diperangkap dalam bidang batas yang diinginkan. Tanpa pembatasan ini, persoalan fisis yang dihadapi bisa melebar kedalam berbagai keadaan sehingga menyulitkan untuk membangun persamaan universal namun sederhana terhadap sistem yang kompleks. Adapun postulat tersebut dapat dinyatakan sebagai:

**Postulat 1:** Keadaan suatu sistem sepenuhnya dapat digambarkan oleh fungsi gelombang  $\psi(\mathbf{r}, t)$

Implikasi dan penggunaannya adalah sebagai berikut:

Kuantitas fisika yang bersesuaian dengan  $|\psi|^2$  adalah kerapatan peluang pada saat  $t$  dan posisi  $\mathbf{r}$  dapat dinyatakan sebagai

$$\psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$$

$\psi(r, t)$  harus dinormalisasikan menjadi

$$\int \psi^* \psi d\tau = 1$$

$\psi(r, t)$  harus berperilaku baik dalam arti bahwa fungsi gelombang harus memberikan nilai tunggal, fungsi gelombang harus kontinu dan terbatas, di luar itu postulat 1 tidak berfungsi

**Postulat 2:** Semua kuantitas yang dapat diukur atau dapat diamati semuanya dapat digambarkan melalui operator Hermit

Agar postulat 2 berfungsi maka seluruh kuantitas yang dapat diukur dalam persamaan harus dapat diwakilkan ke dalam operator Hermit. Sebagai contoh partikel dalam fungsi eigen yang berada dalam kotak  $\hat{H}$  yang memenuhi persamaan

$$\hat{H}(x)\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \Leftrightarrow \psi_n(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (4.18)$$

Namun, apabila  $\psi$  bukan merupakan fungsi eigen dari operator, maka pernyataan postulat 2 tidak berlaku.

Sebagai contoh:  $\psi_n(x)$ , pada pers. 4.18 merupakan operator momentum yang dapat kita turunkan sebagai berikut,

$$\hat{p}_n\psi_n(x) = -i\hbar \frac{d}{dx}\psi_n(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \left\{ \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right\} \neq p_n \left\{ \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \right\} 4.$$

19

Dapat dilihat bahwa operator momentum dengan nilai pada sisi kiri pertidaksamaan memiliki perbedaan nilai dengan sisi kanan pertidaksamaan. Atau operator momentum pada sisi kiri bukanlah nilai eigen momentumnya yang terdapat di sisi kanan pertidaksamaan.

Solusinya untuk menciptakan operator mekanika kuantum dari pengamatan klasik maka dapat dipakai ungkapan  $\hat{x} = x$  dan  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{d}{dx}$  dan mengganti persamaan-persamaan energi klasik. Misalnya pada energi kinetik yang dalam bentuk klasik dinyatakan dengan  $E_k = \frac{1}{2} m v^2$  diganti dengan  $E_k = \frac{1}{2m} \hat{p}^2 = \frac{1}{2m} (\hat{p}) (\hat{p}) = -\hbar^2 \frac{1}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$  untuk energi kinetik satu dimensi dan  $E_k = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$  ungkapan energi kinetik dalam ruang tiga dimensi.

Karena objek dalam ruang satu atau tiga dimensi melakukan gerak melingkar sehingga terjadi momentum sudut partikel sebesar  $L = r \times p$ . Jika momentum sudut tiga dimensi (resultan vektor momentum sudut) ini diuraikan menjadi komponen-komponennya dalam koordinat kartesian  $x, y, z$  maka akan diperoleh momentum sepanjang sumbu koordinat menjadi:

$$l_x = yp_z - zp_y = -i\hbar \left( y \frac{d}{dz} - z \frac{d}{dy} \right)$$

$$l_y = zp_x - xp_z = -i\hbar \left( z \frac{d}{dx} - x \frac{d}{dz} \right)$$

$$l_z = xp_y - yp_x = -i\hbar \left( x \frac{d}{dy} - y \frac{d}{dx} \right)$$

Operator momentum harus linear yang berarti bahwa memenuhi sifat matematis berikut,

$$\hat{A}[f(x) + g(x)] = \hat{A}f(x) + \hat{A}g(x) \text{ dan } \hat{A}[c f(x)] = c\hat{A}[f(x)] \quad 4.20$$

Persamaan harus bersifat Hermitian yang berarti bahwa:

$$\int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 d\tau = \int \psi_2 (\hat{A} \psi_1)^* d\tau \quad 4.21$$



Hal ini menyiratkan bahwa nilai eigen dari operator " $\hat{A}$ " harus merupakan bilangan riil. Hal ini sangat penting! Sebab nilai yang dapat diukur atau diobservasi harus merupakan bilangan riil. Sebagai bukti dapat kita ambil

$\hat{A}\psi = a\psi$ , menggunakan pers. 4. 21.

$$\int \psi^* \hat{A} \psi d\tau = \int \psi (\hat{A} \psi)^* d\tau$$

Dengan mengganti operator dengan nilai eigennya maka persamaan bernilai benar juga untuk:

$$\int \psi^* a \psi d\tau = \int \psi (a \psi)^* d\tau$$

Sehingga nilai  $a = a^*$ , nilai eigen ini hanya bernilai benar jika  $a$  adalah bilangan riil. Syarat selanjutnya adalah fungsi eigen dari operator hermit haruslah bersifat ortogonal, artinya apabila  $\hat{A}\psi_m = a_m \psi_m$  dan  $\hat{A}\psi_n = a_n \psi_n$ , kemudian nilai  $\int \psi \psi^* d\tau = 0$  jika  $m \neq n$  maka harus dapat dibuktikan bahwa selisih nilai eigen kedua persamaan bernilai nol saat  $m = n$  dan juga fungsi eigen bernilai nol saat  $m \neq n$ . Terbukti menggunakan pers. 4. 21 yang diturunkan menjadi,

$$\int \psi_m^* \hat{A} \psi_n d\tau = \int \psi_n (\hat{A} \psi_m)^* d\tau$$

$$a_n \int \psi_m^* \psi_n d\tau = a_m^* \int \psi_n \psi_m^* d\tau$$

Sehingga gabungan kedua persamaan diperoleh:

$$(a_n - a_m^*) \int \psi_m^* \psi_n d\tau = 0 \quad 4. 22$$

Maka kedua nilai eigen akan bernilai nol saat  $m = n$ , sedangkan fungsi eigen akan bernilai nol jika  $m \neq n$ , atau dapat dikatakan bahwa fungsi eigen ini **ortonormal**. Sebagai contoh dapat kita ambil fungsi eigen untuk partikel dalam

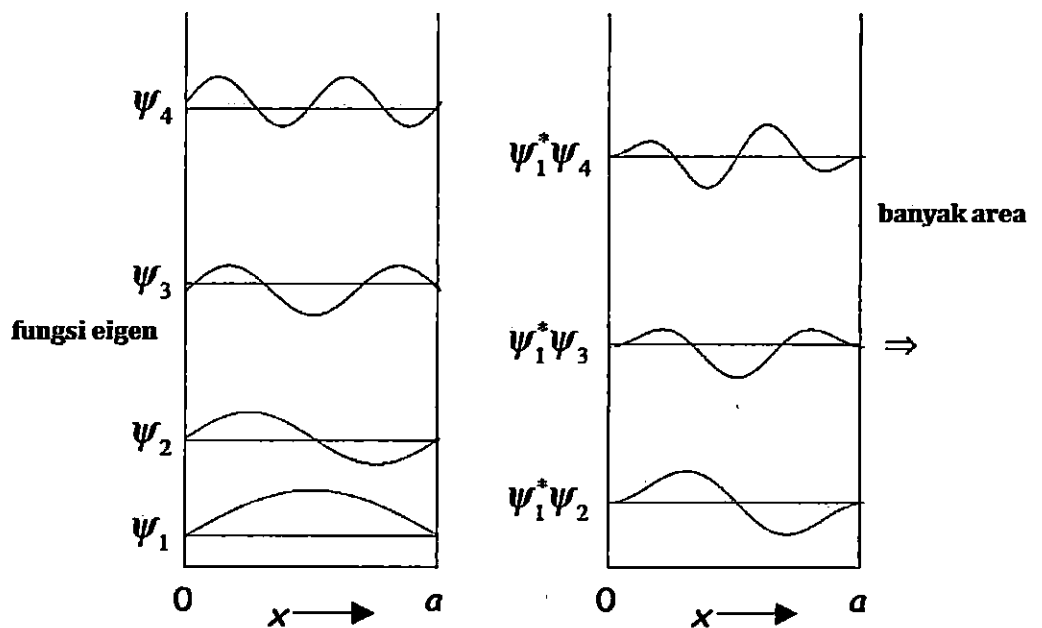
kotak satu dimensi dan kerapatan peluang partikel pada jarak tertentu sepanjang- $x$  ditunjukkan pada Gambar 4.3-1.

Perlu diketahui bahwa jika fungsi eigen dari operator " $\hat{A}$ " dinormalisasi, maka fungsi eigennya adalah ortonormal. Ortonormal fungsi eigen dapat direpresentasikan dengan pers. 4. 23 berikut dengan memperkenalkan konstanta delta krönecker  $\delta_{mn}$ .

$$\int \psi_n \psi_m^* d\tau = \delta_{mn} \quad 4. 23$$

Dengan memasukkan nilai delta krönecker terhadap pers. 4. 23 maka:

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1 & \text{jika } m \neq n \text{ (normalisasi)} \\ 0 & \text{jika } m = n \text{ (ortogonal)} \end{cases} \quad 4. 24$$



Gambar 4.3-1. Contoh fungsi eigen dan area peluang untuk partikel dalam kotak satu dimensi

**Postulat 3:** Hanyalah nilai-nilai " $A$ " yang ditentukan dalam pengukuran atau yang dapat diobservasi saja yang menjadi nilai eigen (karakteristik) " $a_n$ " dari

nilai operator " $\hat{A}$ ". Pengukuran merubah keadaan sistem pada fungsi eigen dari " $\hat{A}$ " dengan nilai eigen " $a_n$ "

Apabila " $\psi$ " adalah merupakan suatu fungsi eigen dari suatu operator, lalu kemudian dengan gampang dapat diungkapkan bahwa  $\hat{H}\psi_n = E_n \psi_n$  untuk pengukuran energi dan memberikan nilai energi yang benar. Akan tetapi permasalahan akan muncul jika " $\psi$ " bukan merupakan fungsi eigen dari sebuah operator. Sebagai contoh " $\psi$ " dapat berupa superposisi dari dua fungsi eigen atau lebih misalnya pada persamaan berikut,

$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 \quad 4.25$$

Dimana  $\hat{A}\phi_1 = a_1 \phi_1$  dan  $\hat{A}\phi_2 = a_2 \phi_2$  lalu hasil pengukuran terhadap  $A$  kembali membawa kedua nilai baik  $a_1$  maupun  $a_2$ , dengan peluang masing-masing adalah  $c_1^2$  dan  $c_2^2$ , dan melalui pengukuran akan merubah keadaan baik  $\phi_1$  maupun  $\phi_2$  sehingga disini postulat 3 tidak berlaku.

**Postulat 4:** Apabila sistem digambarkan sebagai fungsi gelombang ternormalisasi  $\psi$  kemudian nilai rata-rata yang dapat diamati dari operator " $\hat{A}$ " adalah

$$\langle a \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau$$

Postulat 4 berhubungan dengan nilai harapan dari suatu fungsi eigen, jika  $\psi_n$  adalah suatu fungsi eigen dari suatu operator " $\hat{A}$ ", lalu kemudian  $\hat{A}\psi_n = a_n \psi_n$  maka nilai harapan dari  $a$  menjadi;

$$\langle a \rangle = \int \psi_n^* \hat{A} \psi_n d\tau = a_n \int \psi_n^* \psi_n d\tau = a_n \quad 4.26$$

Sehingga nilai harapan yang paling mungkin adalah nilai eigennya. Sedangkan jika fungsi eigen merupakan superposisi dua fungsi  $\psi = c_1\phi_1 +$

$c_2\phi_2$  sebagaimana contoh pada postulat 3 di atas maka nilai harapan dapat ditentukan dengan;

$$\langle a \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\tau = \int (c_1\phi_1 + c_2\phi_2)^* \hat{A} (c_1\phi_1 + c_2\phi_2) d\tau = c_1^2 a_1 + c_2^2 a_2 \quad 4.$$

Di sini  $c_1^2$  merupakan peluang/kebolehjadian dari pengukuran  $a_1$ , sedangkan  $\langle a \rangle$  adalah nilai rata-rata yang paling mungkin bagi peluangnya.

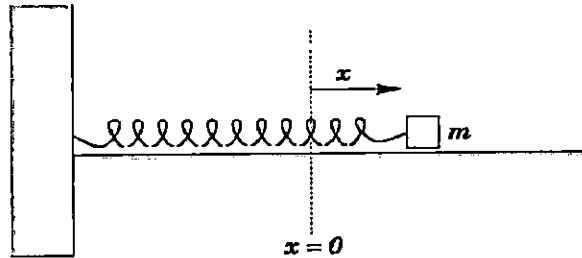
## 5. Osilator Harmonik



eluruh sistem fisis yang menjadi topik perhatian yang hampir mendekati kesetimbangan dapat didekati dengan pendekatan osilator harmonik. Berbagai permasalahan sistem fisika baik klasik maupun kuantum berhasil dimodelkan dengan pendekatan osilator harmonik. Sebagai contoh interaksi dua atom yang membentuk molekul dapat dimodelkan sebagai interaksi dua benda yang terikat dengan tali elastis atau sebuah pegas, atau interaksi antara spin momen magnet dengan medan magnet yang dapat dianggap merupakan sebuah osilasi di sekitar medan magnet sebagaimana interaksi gerakan benda yang menempel pada sumbu yang memiliki pegas lalu kemudian benda tersebut memutar pusat dengan rotasi yang berosilasi. Pemodelan osilator harmonik ini cukup berhasil menjelaskan fenomena-fenomena fisis yang cukup rumit sehingga menjadi sederhana dan gampang untuk dipelajari.

### 5.1 Osilator Harmonik Klasik

Pada fisika klasik osilator harmonik dapat dijelaskan dengan hukum Hooke yang merupakan pengembangan dari hukum Newton II untuk sistem yang terikat dengan pegas elastis. Untuk memahami hukum Hooke kita dapat menggunakan model sederhana benda dengan massa  $m$  yang terikat pada dinding kaku dengan sebuah pegas yang memiliki konstanta  $k$  sehingga apabila benda dikenai pengaruh gaya sebesar  $F$  maka benda akan mengalami perpindahan sebesar  $\Delta x$ . Pernyataan ini dapat kita ilustrasikan dengan Gambar 5.1-1.



Gambar 5.1-1. Ilustrasi benda  $m$  yang terikat pada pegas

Maka besar gaya yang dibutuhkan agar benda  $m$  kembali kepada posisi semula adalah;

$$f = -k (X - X_0) \equiv -kx \quad 5.1$$

Dengan menggunakan hukum Newton II maka;

$$f = m a = m \frac{d^2x}{dt^2} = -kx \quad 5.2$$

Sehingga diperoleh persamaan differensial homogen orde-2 sebagai,

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \left(\frac{k}{m}\right)x = 0 \quad 5.3$$

Penyelesaian umum dari persamaan differensial homogen orde-2 ini adalah fungsi trigonometrik kombinasi sin dan cos yaitu:

$$x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t) \text{ dimana } \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad 5.4$$

Atau bentuk solusi pers. 5.4 karena merupakan persamaan gelombang, dapat diubah menjadi bentuk lain dengan memasukkan nilai fasa  $\phi$  seperti berikut.

$$x(t) = C \sin(\omega t + \phi) \quad 5.5$$

Dimana nilai amplitudo  $A$ ,  $B$ ,  $C$  dan  $\phi$  ditentukan sebagai kondisi awal, misalnya saat  $x(0) = x_0$  nilai kecepatan  $v(0) = 0$ , pegas ditekan pada posisi  $x_0$  dan dilepaskan saat  $t = 0$ , kemudian;

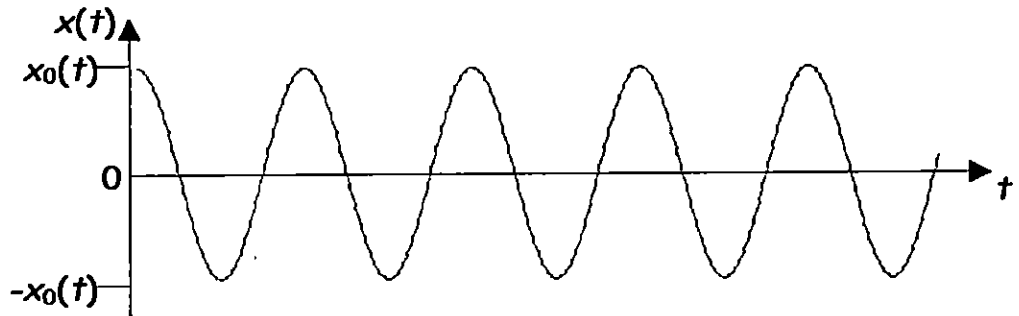
$$x(0) = A \sin(0) + B \cos(0) = x_0 \Rightarrow B = x_0$$

$$v(0) = \left. \frac{dx}{dt} \right|_{x=0} = \omega \cos(0) - \omega \sin(0) = 0 \Rightarrow A = 0$$

Sehingga

$$x(t) = x_0 \cos(\omega t) \tag{5.6}$$

Massa dan pegas berosilasi dengan frekuensi  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$  dan perpindahan maksimum  $x_0$  dari titik kesetimbangan adalah saat  $\cos(\omega t) = \pm 1$ . Model gelombang osilator harmonik pers. 5.6 dapat dilihat pada Gambar 5.1-2.

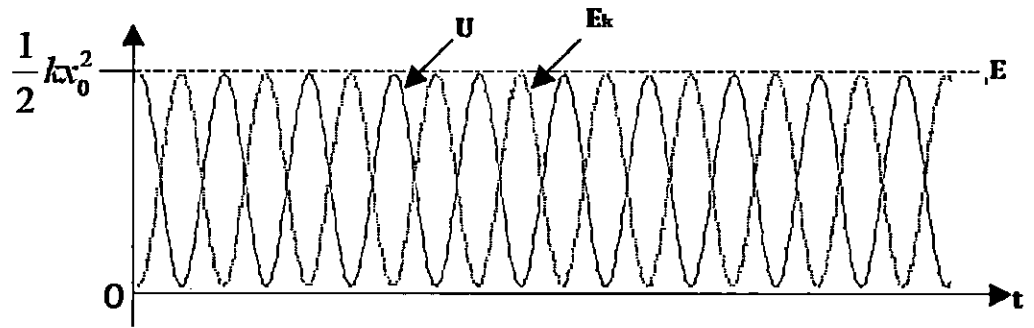


Gambar 5.1-2. Bentuk gelombang osilator harmonik

Energi kinetik osilator harmonik klasik dapat dinyatakan sebagai  $E_k = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} m (-\omega \sin(\omega t))^2 = \frac{1}{2} k x^2 \sin^2(\omega t)$ , sedangkan energi potensialnya  $U$  dapat dinyatakan sebagai  $f(x) = -\frac{dU}{dx} \Rightarrow U = -\int f(x) dx = \int (kx) dx = \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} k x^2 \cos^2(\omega t)$  sehingga energi total dari osilator klasik dapat dinyatakan sebagai:

$$E = \frac{1}{2} k x_0^2 [\sin^2(\omega t) + \cos^2(\omega t)] \text{ sehingga } E = \frac{1}{2} k x_0^2 \tag{5.7}$$

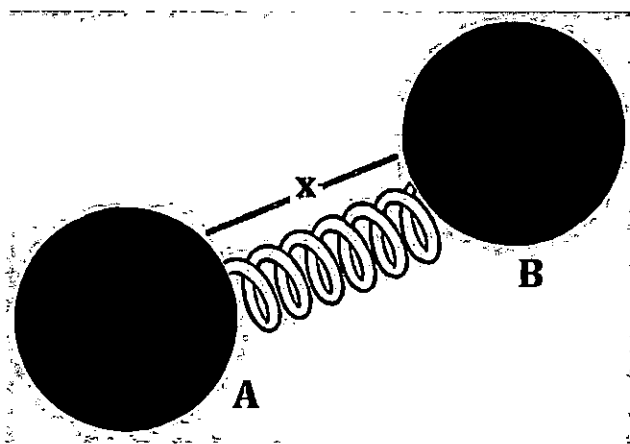
Hubungan energi kinetik dan potensial dapat dilihat pada Gambar 5.1-3 sebagai integral dari dua fungsi gelombang yang berinterferensi.



Gambar 5.1-3. Hubungan energi kinetik dan potensial energi pada osilator harmonik

## 5.2 Sistem fisis yang bisa didekati dengan osilator harmonik

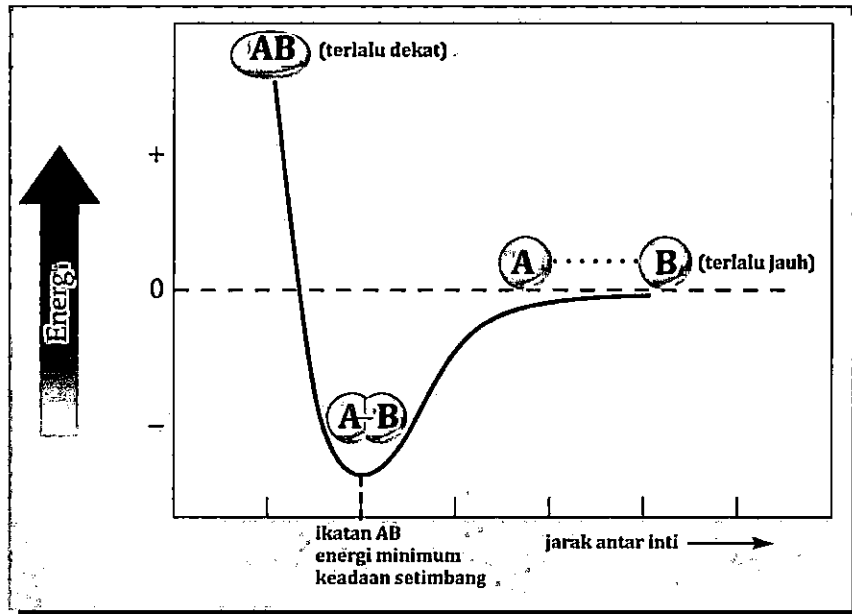
Berbagai sistem fisis dapat didekati dengan osilator harmonik, contoh yang paling umum adalah ikatan dua molekul diatomik seperti terlihat pada Gambar 5.2-1.



Gambar 5.2-1. Ilustrasi ikatan dua molekul yang terikat pada pegas dengan jarak- $x$



Energi potensial ikatan dua molekul diatomik ini dapat dimodelkan sebagai sumur potensial yang keadaannya setimbang merupakan potensial terendah untuk terbentuknya ikatan seperti diilustrasikan pada Gambar 5.2-2.



Gambar 5.2-2. Ilustrasi energi potensial molekul diatomik

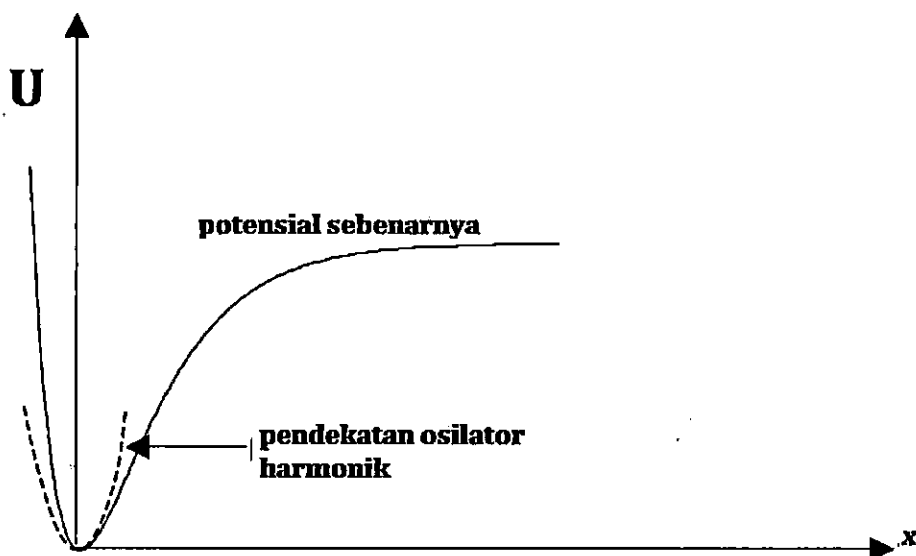
Energi potensial molekul diatomik dapat diformulasikan dengan persamaan berikut;

$$U(X) = U(X_0) + \left. \frac{dU}{dX} \right|_{X=X_0} (X - X_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{dX^2} \right|_{X=X_0} (X - X_0)^2 + \frac{1}{3!} \left. \frac{d^3U}{dX^3} \right|_{X=X_0} (X - X_0)^3 + \dots$$

Dengan mendefinisikan ulang bahwa  $x = X - X_0$  dan  $U(X - X_0) = U(x = 0) = 0$  sehingga diperoleh pers. 64

$$U(X) = \left. \frac{dU}{dX} \right|_{X=X_0} x + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{dX^2} \right|_{X=X_0} x^2 + \frac{1}{3!} \left. \frac{d^3U}{dX^3} \right|_{X=X_0} x^3 + \dots \quad 5.8$$

Pers. 5. 8 ini merupakan fungsi potensial dalam bentuk deret dan jika dilukiskan maka dapat digambarkan menurut Gambar 5.2-3.

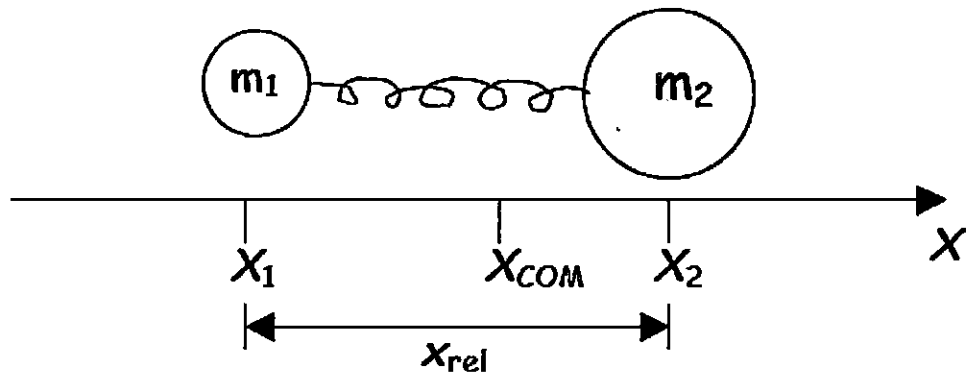


Gambar 5.2-3. Ilustrasi fungsi potensial dan pendekatan terhadap osilator harmonik

Pada kesetimbangan saat  $\left. \frac{dU}{dx} \right|_{x=0} = 0$ , untuk penyimpangan yang sekecil-kecilnya saat  $x^3 \ll x^2$  maka fungsi energi potensial osilator menjadi;

$$U(x) = \frac{1}{2} \left. \frac{d^2U}{dx^2} \right|_{x=0} x^2 \equiv \frac{1}{2} kx^2 \quad 5.9^*$$

Untuk model satu dimensi molekul yang terikat pada sebuah pegas dapat ditentukan dengan pendekatan osilator harmonik dengan memasukkan nilai dari massa tereduksinya.



$M = m_1 + m_2$  merupakan massa total, massa tereduksinya adalah  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ , pada keadaan setimbang  $X_{COM}$  masa menjadi  $X_{COM} = \frac{m_1 X_1 + m_2 X_2}{m_1 + m_2}$ , dan posisi relatif diperoleh;  $x_{rel} = X_2 - X_1 \equiv x$ . Sehingga energi kinetik molekul menjadi:

$$E_k = \frac{1}{2} m_1 \left( \frac{dX_1}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} m_2 \left( \frac{dX_2}{dt} \right)^2 = \frac{1}{2} M \left( \frac{dX_{COM}}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} \mu \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 \quad 5.10$$

$$U = \frac{1}{2} kx^2 \quad 5.11$$

$$E = E_k + U = \frac{1}{2} M \left( \frac{dX_{COM}}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} \mu \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} kx^2 \quad 5.12$$

Koordinat COM menggambarkan gerak translasi molekul sehingga energi translasi molekul adalah

$$E_{trans} = \frac{1}{2} M \left( \frac{dX_{COM}}{dt} \right)^2 \quad 5.13$$

Pers. 5.13 merupakan deskripsi mekanika kuantum yang mengungkapkan bahwa partikel bebas atau partikel dalam kotak dengan massa  $M$  melakukan gerak vibrasi relatif dengan energi sebesar:

$$E_{vib} = \frac{1}{2} \mu \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} kx^2 \quad 5.14$$

Dan pers. 5. 14 merupakan menyelesaikan permasalahan molekul diatomik secara mekanika kuantum.

### 5.3 Osilator Harmonik Mekanika Kuantum

Persamaan Schrödinger untuk osilator harmonik dapat diungkapkan menurut persamaan berikut

$$\hat{H}\psi(x) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2 \right] \psi(x) = E \psi(x) \quad 5.15$$

Dalam kasus molekul diatomik maka massa  $m$  diganti dengan massa tereduksi  $\mu$  untuk memperoleh nilai eigen dari energi  $E_n$  dan fungsi eigen  $\psi_n$  dari persamaan 5.15 di atas. Maka kita pertimbangkan kembali molekul kita terdiri dari dua bola pejal yang terhubung dengan sebuah pegas seperti pada kasus klasik di sesi 5.2.



Maka persamaan 5.15 dapat ditulis ulang menjadi:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[ E - \frac{1}{2} kx^2 \right] \psi(x) = 0 \quad 5.16$$

Perlu diperhatikan bahwa besaran yang termasuk di dalam kurung bukan merupakan konstanta sehingga fungsi sin dan cos (trigonometrik) tidak akan bekerja. Maka untuk penyelesaian persamaan ini dapat dilakukan dengan fungsi

coba. Misalnya diambil  $f(x) = e^{-\alpha x^2/2}$  atau fungsi Gaussian. Kuadrat fungsi menghasilkan:

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = -\alpha e^{-\alpha x^2/2} + -\alpha^2 x^2 e^{-\alpha x^2/2} = -\alpha f(x) + \alpha^2 x^2 f(x)$$

Atau dapat ditulis ulang sebagai

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} + \alpha f(x) - \alpha^2 x^2 f(x) = 0 \quad 5.17$$

Ternyata fungsi 5.17 mirip dengan pers. 5.15. Kedua persamaan akan benar sama apabila  $\alpha = \frac{2mE}{\hbar^2}$  dan  $\alpha^2 = \frac{mk}{\hbar^2}$ , sehingga;

$$E = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k}{m}} \quad 5.$$

18\*

Sehingga kita telah peroleh sebuah nilai eigen dan sebuah fungsi eigen

dengan kembali menyatakan bahwa frekuensi adalah  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$  atau  $\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$  maka besar energi vibrasi dapat ditentukan sebagai,

$$E = \frac{1}{2} \hbar \omega = \frac{1}{2} \hbar \nu \quad 5.$$

19\*

Ini merupakan nilai energi vibrasi terendah pada keadaan diam untuk partikel sederhana (seperti partikel dalam kotak).

Sedangkan untuk fungsi gelombang maka kita perlu menormalisasikan fungsi gelombang;

$$\psi(x) = N f(x) = N e^{-\alpha x^2/2}$$

dengan N merupakan konstanta normalisasi sehingga,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow N^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2/2} dx = 1 \quad 5.20$$

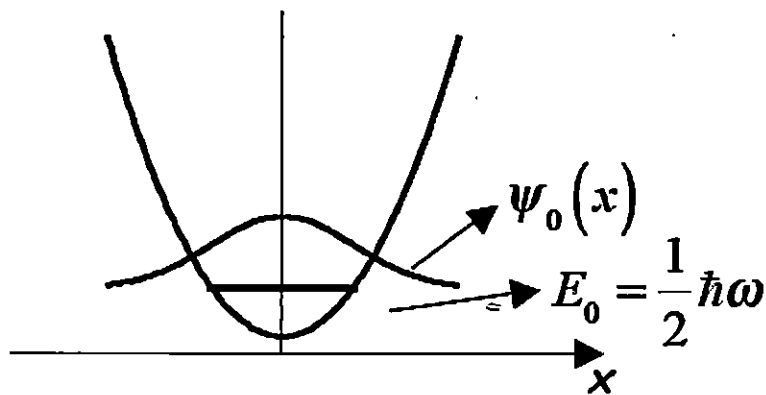
Penyelesaian persamaan ini (gunakan tabel integral) akan diperoleh nilai N sebagai;

$$N = \left[ \frac{\alpha}{\pi} \right]^{1/4}$$

Akhirnya fungsi gelombang ternormalisasi dan nilai eigen energi diperoleh sebagai;

$$\psi_0(x) = \left[ \frac{\alpha}{\pi} \right]^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} \text{ dan } E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 = \frac{1}{2} h \nu_0 \quad 5.21$$

Kedua persamaan digrafikkan menjadi Gambar 5.3-1.



Gambar 5.3-1. Fungsi eigen dan nilai eigen pada keadaan dasar dari suatu fungsi gelombang

Perlu dicatat bahwa  $\psi_0(x)$  adalah merupakan fungsi yang simetrik, selain itu juga merupakan fungsi genap dimana  $\psi_0(x) = \psi_0(-x)$  dengan tidak memiliki simpul dan hampir kesemua nilai untuk perpindahan osilator bernilai 0. Akibatnya hanya terdapat satu nilai eigen dan satu keadaan eigen yang memenuhi sejauh ini. Untuk nilai-nilai yang lain adalah sebagai berikut:

$$\begin{aligned}
\psi_0(x) &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2} & E_0 &= \frac{1}{2} h\nu \\
\psi_1(x) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} (2\alpha^{1/2} x) e^{-\alpha x^2/2} & E_1 &= \frac{3}{2} h\nu \\
\psi_2(x) &= \frac{1}{\sqrt{8}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} (4\alpha x^2 - 2) e^{-\alpha x^2/2} & E_2 &= \frac{5}{2} h\nu \\
\psi_3(x) &= \frac{1}{\sqrt{48}} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} (8\alpha^{3/2} x^3 - 12\alpha^{1/2} x) e^{-\alpha x^2/2} & E_3 &= \frac{7}{2} h\nu \\
& \vdots & & \vdots \\
& \text{dengan } \alpha &= & \left(\frac{km}{\hbar^2}\right)^{1/2}
\end{aligned}$$

Bentuk umum persamaan ini adalah

$$\psi_n(x) = \frac{1}{(2^n n!)^{1/2}} \left[\frac{\alpha}{\pi}\right]^{1/4} H_n(\alpha^{1/2} x) e^{-\alpha x^2/2} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Dengan  $H_n$  merupakan polinomial Hermit,  $\frac{1}{(2^n n!)^{1/2}} \left[\frac{\alpha}{\pi}\right]^{1/4}$  adalah faktor normalisasi dan  $(\alpha^{1/2} x) e^{-\alpha x^2/2}$  adalah Gaussian fungsi. Secara berturut-turut polinomial Hermit akan membentuk fungsi-fungsi berikut:

$$H_0(y) = 1 \quad \text{genap (n=0)}$$

$$H_1(y) = 2y \quad \text{ganjil (n=1)}$$

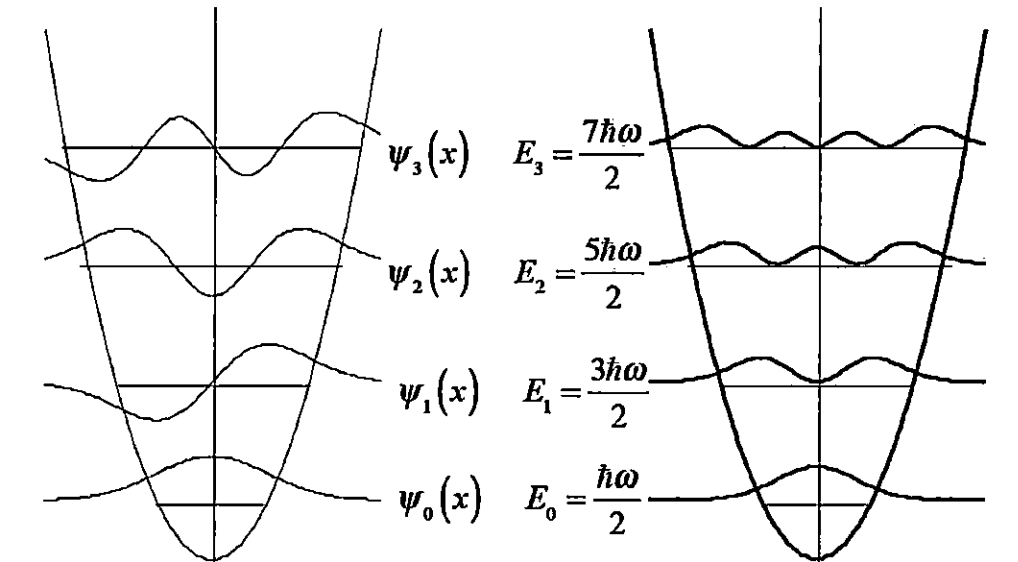
$$H_2(y) = 4y^2 - 2 \quad \text{genap (n=2)}$$

$$H_3(y) = 8y^3 - 12y^2 \quad \text{ganjil (n=3)}$$

$$H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12 \quad \text{genap (n=4)}$$

....

Sehingga



Gambar 5.3-2: Representasi fungsi dan nilai eigen dari fungsi gelombang partikel beresilai harmonik

Diperoleh energi gelombang menjadi

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu \quad 5.22^*$$

Perlu diingat bahwa  $E$  akan naik sebanding dengan  $n$ . Seperti terlihat dalam ilustrasi Gambar 5.3-2. Pada Gambar 5.3-2 juga diperlihatkan bahwa terdapat celah/ruang energi yang besarnya adalah:

$$E_{n+1} - E_n = \left\{ \left(n + 1\right) + \frac{1}{2} \right\} h\nu - \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu = h\nu \quad 5.23$$

Tanpa memandang  $n$  dapat dinyatakan bahwa terdapat energi titik nol yang nilainya sebesar

$$E_0 = \frac{1}{2} h\nu \quad 5.24$$

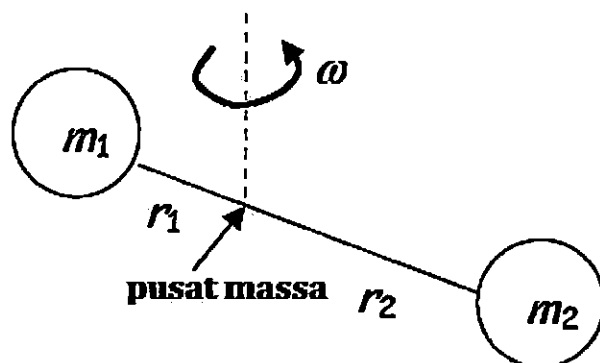


Nilai energi vibrasi terendah sesuai dengan pers. 5.24, yang memberikan indikasi bahwa tidak boleh terdapat energi yang bernilai nol karena tidak sesuai dengan asas ketakpastian Heisenberg.

## 6. Rotor Kaku

### 6.1 Rotasi Dua Partikel pada Posisi yang Tetap

**R**otasi dua partikel pada posisi tertentu yang boleh jadi sebuah elektron dengan sebuah proton (katakanlah dalam kasus atom hidrogen) ataupun rotasi dua inti (katakanlah pada molekul diatomik) secara klasik dapat dipandang sebagai kasus rotor kaku yang sederhana dan dapat menyederhanakan masalah kompleks pada atom/molekul. Dapat kita ilustrasikan pada gambar berikut.



Gambar 6.1-1. Rotasi dua partikel bermassa  $m_1$  dan  $m_2$  yang dapat dipandang seperti rotor kaku

Rotasi dua partikel yang terlihat seperti Gambar 6.1-1 memiliki momentum sudut sebesar  $L_i = I_i \omega$  dimana  $\omega$  adalah kecepatan angular/sudut dan  $I_i$  adalah momen inersia dari partikel yang besarnya  $I_i = m r_i^2$ . Perlu diketahui bahwa pada daerah pusat massanya maka dua partikel ini memiliki frekuensi sudut yang sama. Sehingga ungkapan Hamiltonian klasik bagi partikel ini adalah:

$$H = \frac{L_1^2}{2I_1} + \frac{L_2^2}{2I_2} = \frac{1}{2} m_1 r_1^2 \omega^2 + \frac{1}{2} m_2 r_2^2 \omega^2 = \frac{1}{2} (m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2) \omega^2 \quad 6.1$$

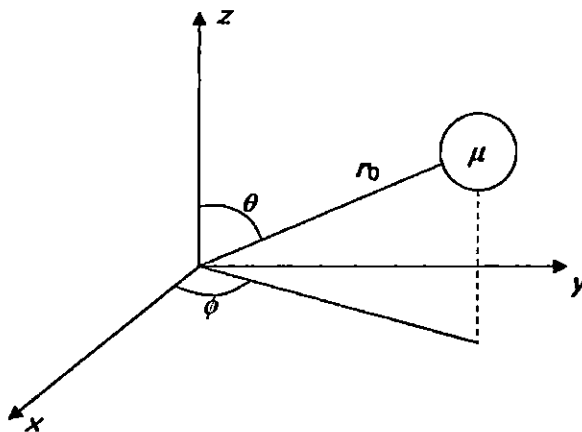
Dapat dilihat pada persamaan ini bahwa daripada menganggap terdapat dua partikel yang melakukan gerak rotasi lebih baik diasumsikan bahwa terdapat satu partikel efektif yang berotasi pada suatu sumbu. Dapat dilakukan dengan mendefinisikan momen inersia efektif partikel bernilai sebagai:

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 = \mu r_0^2 \quad 6.2$$

$\mu$  adalah massa efektif/ massa tereduksi yang nilainya  $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ , massa efektif ini merupakan asumsi bahwa sistem dua partikel berperilaku sebagai partikel tunggal dengan massa tereduksi  $\mu$  berotasi pada jarak  $R$  dari pusat massa. Sehingga sekarang diperoleh Hamiltonian

$$H = \frac{1}{2} I \omega^2 = \frac{L^2}{2I} \quad 6.3$$

Pada kesamaan kedua dari pers. 6.3 dapat didefinisikan momentum sudut dari partikel ini sebesar  $L = I\omega$  seperti pada ilustrasi Gambar 6.1-2 berikut.

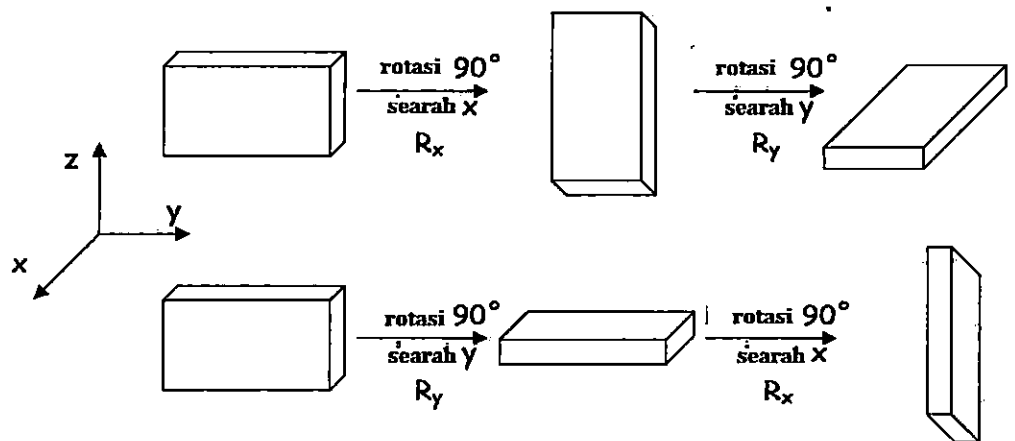


Gambar 6.1-2. Ilustrasi massa efektif pada koordinat kartesian untuk sistem partikel tunggal

Solusi yang sama juga dapat diterapkan terhadap sekelompok partikel yang terletak pada posisi kaku relatif antara satu dengan yang lain (katakanlah dalam atom atau kristal). Jika dirotasikan pada kecepatan sudut  $\omega$ , pada jarak  $r$

tertentu dengan metoda yang mirip dengan metoda yang dipakai untuk sistem dua atom, maka dapat dirumuskan secara lebih sederhana semua rotasi objek tunggal efektif dengan momen inersia  $I_r$ . Sehingga disini dapat diilustrasikan bahwa kita dapat merotasi pensil, spidol dan buku sedemikian rupa tanpa kita harus mempertimbangkan rotasi dari setiap atom atau molekul dari pensil atau buku tersebut.

Perlu diperhatikan bahwa dalam sistem yang sangat sederhana sekalipun rotasi di seputaran sumbu yang berbeda tidaklah saling komut antara satu dengan yang lain. Misalnya objek tiga dimensi berikut di rotasi searah sumbu  $x, y$  dan  $z$ .



Sehingga setiap orang akan mendapatkan hasil yang berbeda tergantung kepada rotasi tingkat mana yang dilakukannya kepada benda tersebut dan dalam arah mana rotasi dilakukan. Walaupun hasil yang diperoleh tidak berhubungan langsung dengan mekanika kuantum namun, hasil ini sangat terkait erat dengan geometri. Sehingga kita peroleh bahwa walaupun momentum linier akan komut (saling dapat dipertukarkan) antara satu dengan lainnya ( $\hat{p}_x \hat{p}_y = \hat{p}_y \hat{p}_x$ ), namun pada momentum sudut tidak berlaku karena sangat terkait erat dengan rotasi sehingga ( $\hat{L}_x \hat{L}_y \neq \hat{L}_y \hat{L}_x$ ).

Secara klasik, momentum sudut diberikan sebagai  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ . Ini berarti bahwa operator kuantum yang sesuai seharusnya adalah  $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ , operator vektor ini memiliki tiga komponen yang diidentifikasi sebagai operator momentum sudut untuk setiap dari tiga sumbu koordinat  $x$ ,  $y$  dan  $z$ .

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} &= (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \times (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z) = \begin{vmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \\ \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \hat{p}_x & \hat{p}_y & \hat{p}_z \end{vmatrix} \\ &= (\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)\mathbf{i} + (\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)\mathbf{j} + (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x)\mathbf{k}\end{aligned}$$

Sehingga kita peroleh momentum sudut menjadi

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

Operator momentum  $\hat{L}_x$ ,  $\hat{L}_y$ , dan  $\hat{L}_z$  tidak komut satu sama lain, sebagai contoh dapat kita buktikan

$$\begin{aligned}+\hat{L}_x\hat{L}_y &= +(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y)(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z) = +\hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_x - \hat{z}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_x - \hat{y}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_z + \hat{z}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_z \\ -\hat{L}_y\hat{L}_x &= -(\hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z)(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y) = -\hat{z}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_z + \hat{z}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_y - \hat{x}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z + \hat{x}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y\end{aligned}$$

$$\text{Sehingga } [\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{y}\hat{p}_x[\hat{p}_z, \hat{z}] + \hat{x}\hat{p}_y[\hat{z}, \hat{p}_z] = -i\hbar\hat{y}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{p}_y$$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \quad 6.4$$

Dengan prosedur yang sama kita peroleh

$$[\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \quad 6.5$$

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_y \quad 6.6$$

Sebagai catatan bahwa semuanya selalu tidak bergantung kepada permutasi siklis  $x \rightarrow y$ ,  $y \rightarrow z$  dan  $z \rightarrow x$ . Hal ini harus menjadi perhatian sebab pilihan kita terhadap sumbu  $x$ ,  $y$  dan  $z$  adalah acak dan relatif. Jika kita label ulang lagi terhadap sumbu  $x$ ,  $y$  dan  $z$  maka semua ungkapan matematika terhadap

persamaan tetap bekerja seperti halnya pers. 6.4, 6.5 dan 6.6. Hal yang perlu menjadi pertimbangan dalam pelabelan adalah searah kanan, atau kiralitas dari koordinat yang dibuat. Pemutaran melingkar ke arah kanan akan menukar sumbu  $x$  menjadi  $y$ , pemutaran balik akan membuat kesalahan dalam perhitungan. Ketidak konsistenan akibat orientasi koordinat ini akan mengurangi setiap kerja dengan faktor-3 sehingga kita perlu berhati-hati apabila bekerja dengan momentum sudut. Untuk selanjutnya kita dapat menyatakan hasil pada sumbu- $z$  dan kemudian menduga hasil yang mungkin untuk sumbu  $x$  dan  $y$  melalui permutasi melingkar. Disini dapat kita duga:

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z$$

$$\begin{array}{l} \xrightarrow{x \rightarrow y} \\ y \rightarrow z \\ z \rightarrow x \end{array} [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x$$

dan

$$\begin{array}{l} \xrightarrow{x \rightarrow y} \\ y \rightarrow z \\ z \rightarrow x \end{array} [\hat{L}_x, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_y$$

Karena momentum sudut tidak komut, maka momentum sudut tidak saling membagi himpunan fungsi eigennya. Sehingga disimpulkan bahwa suatu sistem tidak bisa secara tiba-tiba memiliki momentum sudut yang gampang didefinisikan di seputaran sumbu  $x$ ,  $y$  dan  $z$ -nya. Hal terbaik yang dapat kita harapkan dari momentum sudut yang terdefinisi adalah di sekitar satu sumbu.

Kembali kepada permasalahan rotor kaku, kita tertarik dengan keadaan eigen dari Hamiltonian

$$\hat{H} = \frac{\hat{L}^2}{2I} = \frac{1}{2I} (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2) \quad 6.7$$

Dapat ditunjukkan meskipun momentum sudut x, y dan z tidak saling komut satu sama lain namun, ketiganya akan komut dengan  $\hat{L}^2$

$$[L_z, L^2] = [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2] + [L_z, L_z^2]$$

Karena  $[L_z, L_z^2] = 0$

Maka

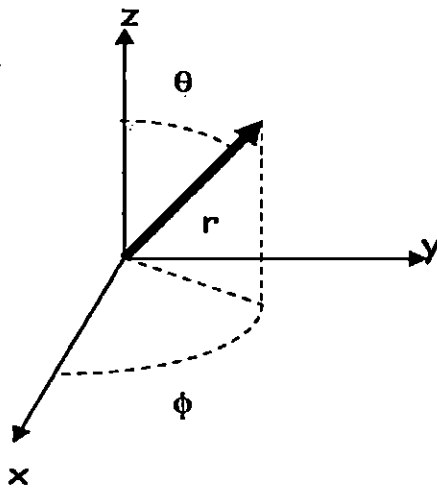
$$\begin{aligned} [L_z, L^2] &= [L_z, L_x^2] + [L_z, L_y^2] = [L_z, L_x]L_x + L_x[L_z, L_x] + [L_z, L_y]L_y + L_y[L_z, L_y] \\ &= -(i\hbar\hat{L}_y)L_x + L_x(-i\hbar\hat{L}_y) + (i\hbar\hat{L}_x)\hat{L}_y + \hat{L}_y(i\hbar\hat{L}_x) = 0 \end{aligned}$$

Sampai pada titik ini dapat kita nyatakan juga bahwa  $[L_y, L^2] = 0$  demikian juga  $[L_x, L^2] = 0$ . Karena " $\hat{L}_z$ " komut dengan " $L^2$ ", maka kedua operator saling berbagi fungsi eigen, sehingga kita dapat berbicara tentang partikel dengan komponen-z yang terdefinisi dengan baik (sebut  $l$ ). Sehingga jika kita mencari fungsi eigen dari Hamiltonian rotor kaku, maka sesungguhnya kita mencari dan menyatakan indeks terhadap dua bilangan kuantum yaitu  $l$  dan  $m$ . Akhirnya sangat masuk akal jika kita mulai dengan gambaran tiga dimensi yang kemudian memiliki tiga jenis bilangan kuantum. Namun, kita membatasi gerakan pada permukaan bola dua dimensi. Untuk sistem dua dimensi ini kita batasi hanya dua bilangan kuantum saja. Berdasarkan kepada analisis di atas, maka dapat kita kemukakan bahwa keadaan eigen dari momentum sudut dapat dinyatakan dengan  $Y_l^m$ , dengan  $m$  berasosiasi dengan nilai eigen dari " $\hat{L}_z$ " dan  $l$  berasosiasi dengan " $L^2$ ".

Kita tinggalkan dahulu bagian yang sulit ini dengan penyelesaian nilai eigen  $E_l$  dan keadaan eigen  $Y_l^m$ , dari rotor kaku. Perlu diingat bahwa nilai eigen dari Hamiltonian rotor kaku hanya akan bergantung kepada  $l$  sebab Hamiltonian

sebanding dengan  $L^2$ . Supaya benar-benar dapat diselesaikan, persamaan diferensial ini maka kita harus terbiasa dengan koordinat polar.

Agar terdapat kesamaan dalam melihat persoalan koordinat polar maka kita lakukan kesepakatan terlebih dahulu yaitu bahwa sudut relatif terhadap sumbu-z kita nyatakan sebagai  $\theta$ , sedangkan sudut relatif terhadap sumbu-x dan y kita nyatakan sebagai  $\phi$ . Kesepakatan ini diperlukan sebab kesalahan dalam pendefinisian sudut akan menimbulkan kesalahan dalam perhitungan sudut.



Gambar 6.1-3. Koordinat polar dengan kedudukan sudut  $\theta$  dan  $\phi$

Dengan mengambil model pada Gambar maka kita nyatakan sumbu koordinat kartesian relatif terhadap jari-jari sebagai:

$$x \equiv r \cos \phi \sin \theta$$

$$y \equiv r \sin \phi \sin \theta$$

$$z \equiv r \cos \theta$$

Sehingga dapat kita nyatakan operator koordinat kita  $\nabla^2$  (del kuadrat) sebagai:



$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \quad 6.8$$

Kita kembangkan dengan mengungkapkan operator momentum sudut dalam bentuk koordinat polar juga. Pengaturan ulang ini akan membawa kita kepada pemakaian yang sangat luas dari aturan rantai dan hasilnya dapat kita nyatakan sebagai berikut,

$$\hat{L}_x = -i\hbar \left( -\sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} - \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left( -\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

Kita nyatakan  $L^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$

Sehingga

$$L^2 = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \quad 6.9$$

Hasilnya persamaan Schrödinger untuk rotor kaku menjadi:

$$-\frac{\hbar^2}{2I} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] Y_l^m(\theta, \phi) = E_l Y_l^m(\theta, \phi) \quad 6.10$$

Perlu dicatat bahwa, karena rotasi partikel dibatasi hanya di permukaan bola dengan jari-jari  $r$ , maka fungsi gelombang harus hanya menjadi fungsi sudut  $\theta$  dan  $\phi$ . Selanjutnya hanya terdapat beberapa tipuan operator aljabar yang sangat cantik dalam memperoleh nilai eigen  $E_l$  dengan cepat. Tipuan aljabar ini analog dengan memperbesar atau memperkecil manipulasi operator yang dipakai untuk penyelesaian osilator harmonik, dan kita gunakan disini untuk menurunkan nilai eigen selanjutnya. Hasilnya adalah bahwa energi rotor kaku mematuhi persamaan:

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1), \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Hal yang membingungkan dalam momentum sudut adalah bahwa untuk momentum sudut yang berbeda digunakan huruf yang berbeda pula. Sehingga jika  $l$  digunakan untuk menyatakan gerak elektron memutar inti, maka huruf  $J$  dipilih untuk menyatakan rotasi molekul diatomik. Maka ungkapan untuk nilai eigen energi pada molekul diatomik dinyatakan sebagai;

$$E_J = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1), \quad J = 0, 1, 2, 3, \dots \quad 6.11$$

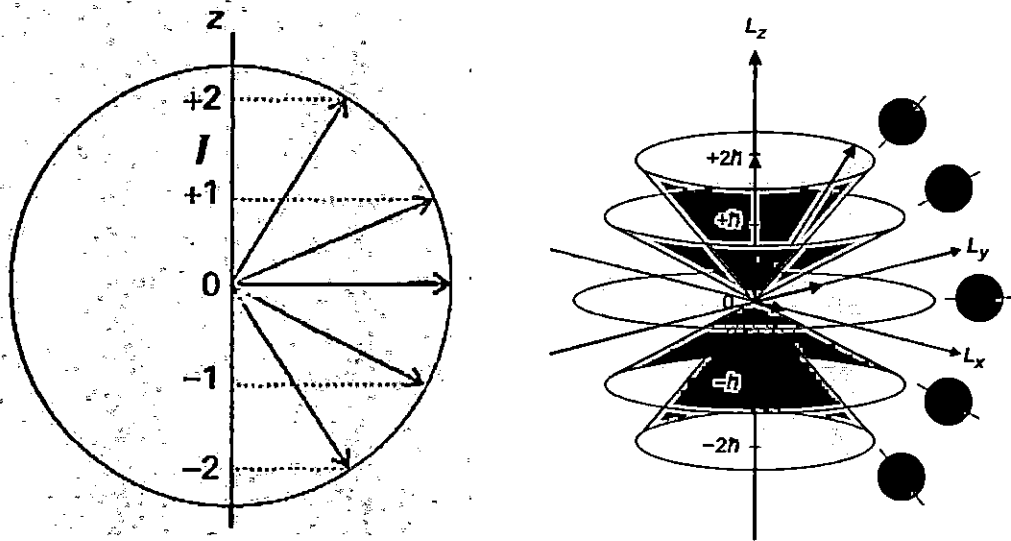
Sehingga celah antar tingkat energi akan meningkat dengan meningkatnya nilai  $J$ , tidak seperti halnya osilator harmonik, momentum sudut juga memiliki ruang yang sama.

$$E_{J+1} - E_J = \frac{\hbar^2}{2I} [(J+1)(J+2) - J(J+1)] = \frac{\hbar^2}{I} (J+1)$$

Selanjutnya untuk setiap nilai  $J$  kita kalikan nilai  $m$  yang paling mungkin.

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm J$$

Sehingga setiap tingkat energi merupakan degenerate lipat  $(2J+1)$ . Secara fisis  $m$  menyatakan komponen momentum sudut sepanjang sumbu- $z$ , untuk nilai  $J$  tertentu, nilai  $m$  mewakili perbedaan arah vektor momentum sudut yang ditunjukkan. Untuk nilai  $m$  positif yang besar, momentum sudut pada umumnya di sepanjang sumbu- $z$ ; jika  $m$  sama dengan nol, momentum sudutnya adalah tegak lurus pada sumbu- $z$  sebagaimana terlihat pada Gambar 6. 4. Secara fisika kita ketahui bahwa energi dari rotasi tidak bergantung kepada arah. Hal ini merefleksikan kenyataan bahwa energi hanya bergantung pada  $J$ , yang perlu diukur adalah panjang vektornya dan bukan arah vektornya.



Gambar 6.1-4. Komponen momentum sudut partikel

## 6.2 Momentum Sudut Partikel

Karena  $\hat{L}^2$  dan  $\hat{L}_z$  merupakan operator yang komut, maka kedua operator saling membagi fungsi eigennya. Fungsi ini sangat penting untuk mendeskripsikan permasalahan dalam momentum sudut karena fungsi tersebut menentukan nilai yang diperbolehkan dari momentum sudut dan untuk sistem seperti rotor kaku, maka tersedia energi pada sistem. Hal pertama yang perlu diketahui adalah nilai eigen yang bersesuaian dengan fungsi eigen ini. Catatan bahwa nilai eigen dari  $\hat{L}^2$  dan  $\hat{L}_z$  oleh  $\alpha$  dan  $\beta$  secara berturut-turut menjadi:

$$\hat{L}^2 Y_\alpha^\beta(\theta, \phi) = \alpha Y_\alpha^\beta(\theta, \phi), \quad \hat{L}_z Y_\alpha^\beta(\theta, \phi) = \beta Y_\alpha^\beta(\theta, \phi) \quad 6.12$$

Sederhananya kita abaikan ketergantungan dari keadaan eigen pada  $\theta$  dan  $\phi$  sehingga persamaan 6.12 berubah menjadi:

$$\hat{L}^2 Y_\alpha^\beta = \alpha Y_\alpha^\beta \quad \hat{L}_z Y_\alpha^\beta = \beta Y_\alpha^\beta \quad 6.13$$

Akan sangat berarti lagi jika didefinisikan penambahan atau pengurangan operator sebagaimana yang telah dilakukan pada osilator harmonik yaitu:

$$\hat{L}_{\pm} \equiv \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \quad 6.14$$

Yang memenuhi hubungan kekomutasian

$$[\hat{L}_+, \hat{L}_-] = 2\hbar\hat{L}_z \quad [\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] = \pm\hbar\hat{L}_{\pm} \quad [\hat{L}_{\pm}, \hat{L}^2] = 0$$

Hubungan ini dapat dibuktikan dengan relatif mudah menggunakan hubungan kekomutasian yang telah terlebih dahulu diturunkan di depan

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \quad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x \quad [\hat{L}_x, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_y$$

$$[\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0$$

Sebagai contoh

$$\begin{aligned} [\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] &= [\hat{L}_z, \hat{L}_x] \pm [\hat{L}_z, \hat{L}_y] \\ &= i\hbar\hat{L}_y \pm (-i\hbar\hat{L}_x) = \pm\hbar(\hat{L}_x \pm i\hat{L}_y) \\ &= \pm\hbar\hat{L}_{\pm} \end{aligned}$$

Penambahan atau pengurangan operator memiliki hubungan langsung dengan nilai eigen dari  $\hat{L}_z$

$$\hat{L}_z(\hat{L}_{\pm}Y_{\alpha}^{\beta}) = \{[\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] + [\hat{L}_{\pm}, \hat{L}_z]\}Y_{\alpha}^{\beta} = (\pm\hbar\hat{L}_{\pm} + \hat{L}_{\pm}\beta)Y_{\alpha}^{\beta} = (\beta \pm \hbar)(\hat{L}_{\pm}Y_{\alpha}^{\beta}) \quad 6.15$$

Sehingga  $\hat{L}_{\pm}(\hat{L}_{\pm})$  menambah atau mengurangi nilai eigen dari  $\hat{L}_z$  sebesar faktor  $\hbar$ . Karena penambahan dan pengurangan operator komut dengan  $\hat{L}^2$ , dimana operator tidak merubah nilai  $\alpha$  sehingga dapat ditulis sebagai

$$\hat{L}_{\pm}Y_{\alpha}^{\beta} \propto Y_{\alpha}^{\beta \pm \hbar}$$

Sehingga nilai eigen dari  $\hat{L}_z$  adalah **terkuantisasi**. Pertanyaannya sekarang berapakah nilai batas dari tangga nilai eigen ini? Kembali kepada osilator harmonik kita peroleh bahwa nilai eigen dan keadaan eigen minimum dapat dihasilkan dengan memakai pengganti operator penambah kepada keadaan terendah. Juga terdapat nilai eigen minimum dalam hal ini. Untuk melihatnya dapat diketahui dengan:

$$\langle \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \rangle = \langle \hat{L}_x^2 \rangle + \langle \hat{L}_y^2 \rangle \quad 6.16$$

Hasil ini menggambarkan secara sederhana kenyataan bahwa jika diambil suatu operator yang dapat diamati dan menguadratkannya maka akan diperoleh bilangan yang positif. Untuk memperoleh nilai negatif terhadap nilai rata-rata dari  $\hat{L}_x^2$  atau  $\hat{L}_y^2$  yang merujuk kepada nilai eigen imajiner dari  $\hat{L}_x$  dan  $\hat{L}_y$  yang tidak mungkin bernilai negatif karena operator ini bersifat Hermitian. Disamping itu, apa arti dari momentum sudut bernilai imajiner? Sekarang kita pakai persamaan di atas untuk fungsi gelombang khusus yaitu;

$$\begin{aligned} 0 &\leq \int Y_\alpha^{\beta*} (\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2) Y_\alpha^\beta = \int Y_\alpha^{\beta*} (\hat{L}^2 + \hat{L}_z^2) Y_\alpha^\beta \\ &= \int Y_\alpha^{\beta*} (\alpha + \beta^2) Y_\alpha^\beta \\ &= \alpha - \beta^2 \end{aligned}$$

Disini nilai  $\beta^2 \leq \alpha$  dan karena itu  $\sqrt{\alpha} \leq \beta^2 \leq \sqrt{\alpha}$  yang berarti bahwa terdapat kedua nilai maksimum dan minimum bahwa  $\beta$  dapat diambil untuk nilai  $\alpha$  tertentu. Apabila kita catat nilai ini melalui  $\beta_{max}$  dan  $\beta_{min}$  secara berturut-turut sehingga jelas bahwa;

$$\hat{L}_+ Y_\alpha^{\beta_{max}} = 0 \quad \text{dan} \quad \hat{L}_- Y_\alpha^{\beta_{min}} = 0$$

Kemudian dapat kita gunakan tipuan aljabar untuk menentukan hubungan antara  $\alpha$  dan  $\beta_{max}$  atau  $\beta_{min}$ . Pertama perlu dicatat bahwa:

$$\hat{L}_- \hat{L}_+ Y_\alpha^{\beta_{max}} = 0 \quad \text{dan} \quad \hat{L}_+ \hat{L}_- Y_\alpha^{\beta_{min}} = 0$$

Dapat kita perluas secara eksplisit dalam bentuk  $\hat{L}_x$  dan  $\hat{L}_y$  yaitu;

$$[\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - i(\hat{L}_y \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_y)] Y_\alpha^{\beta_{max}} = 0$$

dan

$$[\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 - i(\hat{L}_y \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_y)] Y_\alpha^{\beta_{min}} = 0$$

Namun, bentuk ini bukan bentuk operator momentum sudut yang paling diinginkan, karena kita tidak mengetahui bahwa  $\hat{L}_x$  atau  $\hat{L}_y$  yang bertindak pada  $Y_\alpha^\beta$ . Walaupun kita bisa menulis ulang ungkapan yang sama dalam bentuk  $\hat{L}^2$  dan  $\hat{L}_z$ :

$$[\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 \pm i(\hat{L}_y \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_y)] = 0$$

$$\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 = \hat{L}^2 - \hat{L}_z^2$$

$$i(\hat{L}_y \hat{L}_x - \hat{L}_x \hat{L}_y) = -i\hbar \hat{L}_z$$

Sehingga lalu kita dapatkan;

$$(\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z) Y_\alpha^{\beta_{max}} = 0 \quad \text{dan} \quad (\hat{L}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z) Y_\alpha^{\beta_{min}} = 0$$

$$(\alpha - \beta_{max}^2 - \hbar \beta_{max}) = 0 \quad \text{dan} \quad (\alpha - \beta_{min}^2 - \hbar \beta_{min}) = 0$$

$$\text{Sehingga } \alpha = \beta_{max}(\beta_{max} + \hbar) = \beta_{min}(\beta_{min} - \hbar)$$

$$\beta_{max} = -\beta_{min} \equiv \hbar l$$

Pada bagian terakhir kita definisikan variabel baru  $l$  yaitu besaran tanpa dimensi (perlu diperhatikan bahwa  $\hbar$  memiliki satuan momentum sudut). Maka

penggabungan nilai maksimum dengan nilai minimum kita dapatkan  $-\hbar l \leq \beta \leq \hbar l$ . Kemudian, karena kita dapat memiliki nilai eigen dari yang terendah sampai yang tertinggi untuk setiap kenaikan  $\hbar$  dengan memasukkan operator pengganti yang berfungsi sebagai penambah, sehingga menjadi jelas bahwa perbedaan antara nilai yang paling besar atau yang terkecil  $[\hbar j - [-\hbar j]] = 2\hbar l$  adalah merupakan perkalian bilangan bulat  $\hbar$ . Sehingga  $l$  sendiri dapat berupa bilangan bulat atau setengah bulat.

Dengan mengambil semua nilai secara bersama-sama maka kita simpulkan definisi  $m \equiv \beta/\hbar$  menjadi:

$$\boxed{\hat{L}^2 Y_l^m = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m \quad l = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots} \quad 6.$$

17\*

Dan

$$\boxed{\hat{L}_z Y_l^m = m \hbar^2 Y_l^m \quad m = -l, -l+1, \dots, l-1, l} \quad 6.$$

18\*

Disini  $\alpha$  telah diganti dengan  $l$  dan  $\beta$  diganti dengan  $m$  sehingga  $Y_\alpha^\beta$  diganti dengan  $Y_l^m$ . Pada persamaan pertama telah kita catat bahwa  $0 \leq (\hat{L}^2) = \hbar^2 l(l+1)$  dimana menunjukkan  $l \geq 0$ . Ini menjadi persamaan nilai eigen mendasar untuk semua bentuk momentum sudut.

Perlu menjadi perhatian disini bahwa terdapat perbedaan persamaan dengan apa yang telah kita tunjukkan dalam rotor kaku. Disini kita memiliki:

$$\boxed{E_j = \frac{\hbar^2}{2I} J(J+1) \quad J = 0, 1, 2, 3, \dots} \quad 6.$$

19\*

Sisanya sebagai bilangan kuantum  $J$  untuk rotor kaku akan ekuivalen dengan bilangan kuantum  $l$  yang didefinisikan di bagian atas. Disini

ketergantungan energi  $E \propto J(J + 1)$  pada  $J$  akan bernilai sama seperti yang diturunkan pada penurunan untuk  $\hat{L}^2$ . Faktor  $\frac{1}{2}I$  yang meningkat dari kenyataan bahwa Hamiltonian rotor kaku adalah  $\hat{L}^2/2I$  dibandingkan hanya sebagai  $\hat{L}^2$ . Nilai setengah bulat pada momentum sudut tidak muncul pada rotor kaku. Pada awalnya boleh jadi ada yang berpikiran bahwa inimerupakan kesalahan dalam perhitungan karena nilai  $l$  seharusnya adalah bilangan bulat dan bukan setengah bulat namun, sebenarnya perhitungannya adalah benar dan tidak ada kesalahan. Perbedaan ini dapat timbul karena kita mempertimbangkan untuk semua bentuk momentum sudut. Hal yang perlu dicatat bahwa elektron memiliki spin momentum sudut intrinsik yang nilainya adalah  $l = \frac{1}{2}$ , sehingga walaupun sistem tunggal mungkin memiliki pembatasan dalam nilai  $l$  yang diperbolehkan, namun momentum sudut akan selalu mematuhi persamaan nilai eigen di atas.



## 7. Atom Hidrogen



etelah kita berjibaku dengan perhitungan fisis tentang perilaku partikel dalam kotak dan tingkat energi partikel. Model yang diusulkan tentang perilaku partikel dalam kotak satu dimensi dan tiga dimensi yang merupakan bentuk penyederhanaan persoalan tanpa keterlibatan medan lain, perlu diuji kepada persoalan riil di lapangan. Model atom yang paling sederhana adalah atom hidrogen yang memiliki satu inti dan sebuah elektron yang bergerak mengelilingi inti. Kasus atom hidrogen ini secara matematis dijelaskan melalui persamaan Schrödinger yang dibentuk dalam koordinat polar sebagai:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right] \psi(r, \theta, \phi) + U(r, \theta, \phi) \psi(r, \theta, \phi) = E \psi(r, \theta, \phi) \quad 7.1$$

Energi potensial atom hidrogen dibangun oleh gaya Coulomb antara inti dan elektron sehingga  $U(r) = -\frac{ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ , maka pers. 7.1 dapat kita tulis ulang menjadi:

$$-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + 2\mu r^2 [U(r) - E] \psi(r, \theta, \phi) + \tilde{L}^2 \psi(r, \theta, \phi) = 0 \quad 7.2$$

Dapat dinyatakan bahwa kedua fungsi dapat dipisahkan menjadi fungsi  $-\hbar^2 \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + 2\mu r^2 [U(r) - E]$  yang merupakan fungsi yang hanya bergantung kepada  $r$  sedangkan fungsi  $\tilde{L}^2 \psi(r, \theta, \phi)$  adalah fungsi yang hanya bergantung kepada  $\theta$  dan  $\phi$ . Penyelesaian terhadap persamaan 7.2 akan membawa kita pada fungsi gelombang harmonik yaitu:

$$\boxed{\psi(r, \theta, \phi) = R(r) Y_l^m(\theta, \phi)} \quad 7.3$$

Dengan

$$\hat{L}^2 Y_l^m(\theta, \phi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \phi) \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots \quad 7.4$$

Persamaan radial untuk atom hidrogen adalah:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \left[ \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + U(r) - E \right] R(r) = 0}$$

Penyelesaian spasial  $R(r)$  dari fungsi gelombang radial atom hidrogen adalah;

Untuk kasus paling sederhana  $l = 0$ , solusinya adalah

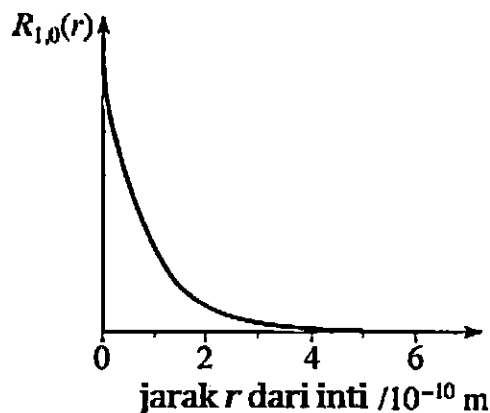
$$R(r) = 2 \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} \quad 7.5$$

Persamaan ini kalau dilukis ke dalam grafik merupakan peluruhan eksponensial menjauhi inti dengan nilai energi adalah

$$E = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 a_0} \quad 7.6$$

Yang merupakan nilai eigen energi terendah pada jari-jari Bohr sebesar:

$$a_0 = \frac{\epsilon_0 \hbar^2}{\pi \mu e^2} \quad 7.7$$



Gambar 6.2-1. Penyelesaian spasial dari fungsi gelombang atom hidrogen dengan  $l = 0$

Nilai eigen energi pada atom hidrogen adalah:

$$E = -\frac{z^2 e^2}{8\pi\epsilon_0 n^2} = -\frac{z^2 \mu e^4}{8\pi\epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad 7.8$$

Fungsi eigen radial menjadi:

$$R_{nl}(r) = -\left[\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}\right]^{1/2} \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{l+3/2} r^l e^{-Zr/na_0} L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right) \quad 7.9$$

Dimana  $L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)$  merupakan fungsi asosiasi Laguerre yang nilainya untuk  $n$  dan  $l$  kecil adalah:

$$n = 1 \quad l = 0 \quad l_1^1 = -1$$

$$n = 2 \quad l = 0 \quad l_2^1 = -2! \left(2 - Zr/a_0\right)$$

$$l = 1 \quad l_3^1 = -3!$$

$$n = 3 \quad l = 0 \quad l_3^1 = -3! \left(3 - 2Zr/a_0 + 2Z^2 r^2 / 9a_0^2\right)$$

$$l = 1 \quad l_3^2 = -4! \left(4 - 2Zr/3a_0\right)$$

$$l = 2 \quad l_3^3 = -5!$$

Kembali kita lihat normalisasi fungsi osilator harmonik melingkar adalah:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin\theta Y_l^{m*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) = 1 \quad 7.10$$

Sedangkan fungsi gelombang radialnya adalah:

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{nl}^*(r) R_{nl}(r) = 1 \quad 7.11$$

## 7.1 Persamaan Gelombang untuk Atom Hidrogen

Sehingga fungsi gelombang atom hidrogen total dapat digambarkan dengan lebih mudah menurut persamaan berikut:

$$\boxed{\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi)} \quad 7.$$

12\*

$n$  menyatakan bilangan kuantum utama dengan nilai 1, 2, 3, ...

$m$  menyatakan bilangan kuantum magnetik dengan nilai 0,  $\pm 1$ ,  $\pm 2$ ,  $\pm 3$ , ...

Energi atom hidrogen sangat bergantung pada  $n$ , dengan nilai  $n = -Z^2 e^2 / 8\pi\epsilon_0 a_0 n^2$ , nilai momentum sudut bergantung pada  $l$  dengan nilai  $|L| = \hbar\sqrt{l(l+1)}$ , sedangkan komponen-z momentum sudut bergantung pada  $m$  dengan nilai  $L_z = m\hbar$ . Fungsi gelombang atom hidrogen total dinormalisasi dan ortogonal sesuai persamaan:

Karena komponen  $R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \phi)$  dinormalisasi dan ortogonal, fungsi gelombang atom hidrogen total terkecil untuk  $n = 1$  dan  $n = 2$  dengan  $\sigma = Zr/a_0$  adalah:

$$n = 1 \quad l = 0 \quad m = 0 \quad \psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\sigma} = \psi_{1s}$$

$$n = 2 \quad l = 0 \quad m = 0 \quad \psi_{200} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (2 - \sigma)e^{-\sigma} =$$

$\psi_{2s}$

$$l = 1 \quad m = 0 \quad \psi_{210} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2} = \psi_{2pz}$$

$$l = 1 \quad m = \pm 1 \quad \psi_{2l\pm 1}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{64\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}$$

Atau kombinasi linier yang bersesuaian

$$\psi_{2p_x} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2} \sin \theta \cos \phi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2l+1} + \psi_{2l-1})$$

$$\psi_{2p_y} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2} \sin \theta \sin \phi = \frac{1}{\sqrt{2}i} (\psi_{2l+1} - \psi_{2l-1})$$

Nilai  $l$  yang bernilai  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$  merujuk kepada orbital s, p, d, f, ... sedangkan nilai  $m$  yang dinyatakan oleh huruf  $l = 1; m = 0, \pm 1$  (kombinasi linier) merujuk kepada orbital  $p_z, p_y,$  dan  $p_x$ . Fungsi gelombang atom seperti hidrogen disajikan pada Tabel 7.1.

Tabel 7-1. Fungsi gelombang dari atom seperti hidrogen

*pindah*

$\ell$	$m$	fungsi gelombang
0	0	$\psi_{1s} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\sigma}$
0	0	$\psi_{2s} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (2 - \sigma) e^{-\sigma/2}$
1	0	$\psi_{2pz} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2} \cos \theta$
1	$\pm 1$	$\psi_{2px} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2} \sin \theta \cos \phi$
		$\psi_{2py} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2} \sin \theta \sin \phi$
0	0	$\psi_{3s} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (27 - 18\sigma + 2\sigma^2) e^{-\sigma/3}$
1	0	$\psi_{3pz} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6 - \sigma)\sigma e^{-\sigma/3} \cos \theta$
1	$\pm 1$	$\psi_{3px} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6 - \sigma)\sigma e^{-\sigma/3} \sin \theta \cos \phi$
		$\psi_{3py} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6 - \sigma)\sigma e^{-\sigma/3} \sin \theta \sin \phi$
2	0	$\psi_{3d_{z^2}} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma^2 e^{-\sigma/3} (3 \cos^2 \theta - 1)$
2	$\pm 1$	$\psi_{3d_{xz}} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma^2 e^{-\sigma/3} \sin \theta \cos \theta \cos \phi$
		$\psi_{3d_{yz}} = \frac{\sqrt{2}}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma^2 e^{-\sigma/3} \sin \theta \cos \theta \sin \phi$
2	$\pm 2$	$\psi_{3d_{x^2-y^2}} = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma^2 e^{-\sigma/3} \sin^2 \theta \cos 2\phi$
		$\psi_{3d_{xy}} = \frac{1}{81\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma^2 e^{-\sigma/3} \sin^2 \theta \sin 2\phi$

$$\sigma = \frac{Z}{a_0} r$$

## 7.2 Energi Atom Hidrogen

Energi potensial dari dua elektron yang dipisahkan oleh jari-jari Bohr :  $U = e^2/4\pi\epsilon_0 a_0$  pada satu-satuan atom ( $a.u$ ) energi. Pada atom hidrogen,  $E = -\frac{Z^2 e^2}{8\pi\epsilon_0 n^2} = -\frac{Z^2}{2n^2} a.u$ . Sehingga dapat kita tabulasikan nilai kenaikan energi untuk setiap penambahan nilai  $n$  sebagai:

Tabel 7-2. Nilai eigen energi dengan kenaikan bilangan kuantum

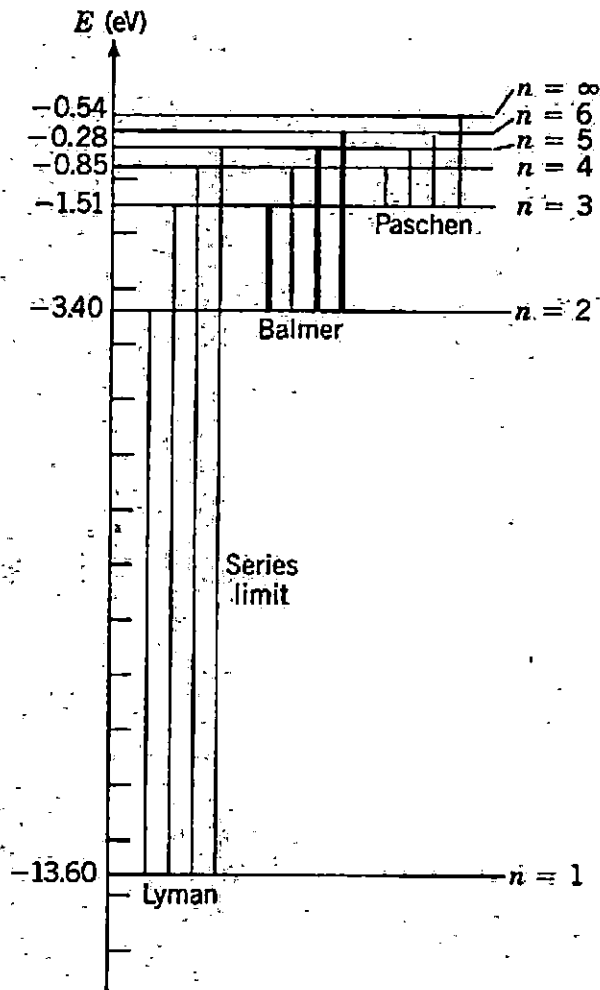
$n$	$E_n (a. u)$	$\bar{\nu} = E/hc$
1	-1/2	-109.680
2	-1/8	-27.200
3	-1/18	-12.187
4	-1/32	-6.855
5	-1/50	4.000
...	...	
	0	0

Data pada Tabel 7-2 memberikan penjelasan kepada kita tentang tingkat energi atom hidrogen dan proses terjadinya transisi elektronik untuk atom seperti hidrogen. Jika terjadi transisi elektronik dari suatu bilangan kuantum yang lebih tinggi kepada bilangan kuantum yang lebih rendah, maka akan terjadi pemancaran energi sebesar  $E_{n+1} - E_n = h\nu$  dengan jumlah energi yang terkuantisasi seperti

kuantisasi nilai yang ditunjukkan oleh Tabel 7-2. Ilustrasi transisi energi ini diperlihatkan pada Gambar 7.2.

Degenerasi tingkat energi atom hidrogen terjadi apabila jumlah bilangan kuantum utama  $n$  bertambah. Degenerasi membantu menempatkan posisi atom dalam tabel periodik. Total degenerasi atom seperti hidrogen adalah  $n^2$  dengan menulis bilangan kuantum yang paling mungkin untuk  $n = 1, 2, 3,$  dan  $4$ . Maka degenerasi totalnya adalah nilai dari semua bilangan kuantum  $n, l,$  dan  $m$ , misalnya untuk  $n=1$ , degenerasinya adalah 1, untuk  $n = 2$ , total degenerasinya adalah 4, yaitu  $2s, 2p_z, 2p_y$  dan  $2p_x$ , jika  $n=3$ , total degenerasinya 9 yaitu,  $3s, 3p_z, 3p_y, 3p_x, 3d_z^2, 3d_{x^2-y^2}, 3d_{xz}, 3d_{yz},$  dan  $3d_{xy}$ .





Gambar 7.2-1. Transisi dan energi atom hidrogen

### 7.3 Bentuk dan Simetri dari Orbital

Melihat data yang disajikan pada Tabel 7-1, maka kita dapat menentukan simetri dan bentuk orbital dari suatu atom. Misalnya pada fungsi gelombang  $1s$  dan  $2s$ , kita peroleh momentum sudut  $l=0$  yang berarti bahwa simetri orbital

adalah bulat, dengan melakukan plot kurva, kita peroleh jumlah perpotongan dengan sumbu-x atau simpul sebanyak 0 untuk 1s dan 1 buah pada 2s.

$$\psi_{1s} = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0}$$

$$\psi_{2s} = (32\pi a_0^3)^{-1/2} (2 - r/a_0) e^{-r/2a_0}$$

$l = 0$  simetri bola

$$n - l - 1 = 0$$

simpul radial

$$n - l - 1 = 1$$

$$l = 0$$

simpul sudut

$$l = 0$$

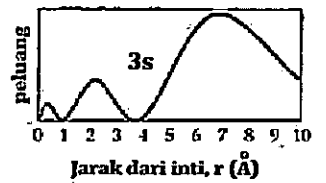
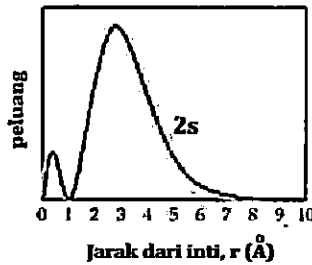
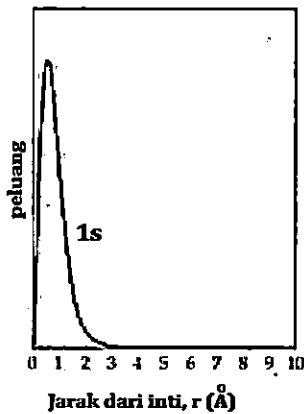
$$n - 1 = 0$$

simpul total

$$n - 1 = 1$$

Kerapatan peluang elektron diberikan oleh persamaan  $|\psi(r, \theta, \phi)|^2$ , dan peluang bahwa suatu elektron 1s terletak antara  $r$  dan  $r+dr$  dari inti adalah:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \psi_{1s}^*(r, \theta, \phi) \psi_{1s}(r, \theta, \phi) r^2 dr = 4\pi (\pi a_0^3)^{-1} e^{-2r/a_0} r^2 dr$$



Gambar 7.3-1. Grafik peluang elektron atom hidrogen pada orbital s

Pada orbital p, fungsi gelombangnya tidaklah berbentuk bulat (bola) simetris karena tergantung kepada  $\theta$  dan  $\phi$ , jika kita ambil data pada Tabel 7-1 untuk  $m = 0$ , fungsi gelombangnya adalah:

$$\psi_{210} = \psi_{2p_z} = (32\pi a_0^3)^{-1/2} (r/a_0) e^{-r/2a_0} \cos \theta$$

7. 13

Dari persamaan dapat dilihat bahwa  $\psi_{2p_z}$  tidak bergantung kepada  $\phi$  dan simetris di sekitar sumbu-z. Sehingga dapat kita katakan bahwa:

Simpul radial  $n - l - 1 = 0$

(tidak berbeda dengan 2s :  $R_{nl}(r)$  bergantung pada  $l$  demikian juga  $n$ )

Simpul sudut  $l = 1$

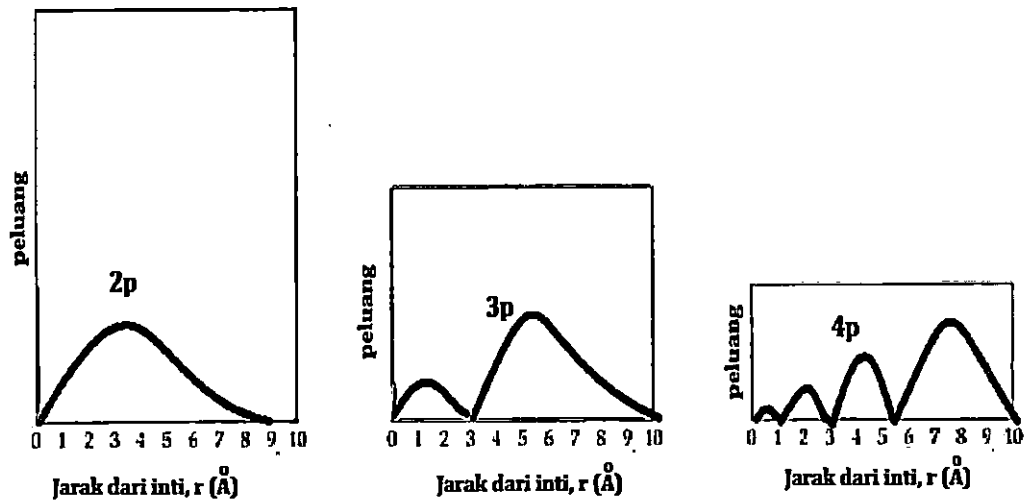
Simpul total  $n - 1 = 1$

Pada bidang  $x, y$  nilai amplitudo akan nol pada inti (sebab tidak terdapat elektron pada inti) sehingga kombinasi linier dari nilai  $m = \pm 1$  memberikan nilai:

$$\psi_{2p_x} = (32\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta \cos \phi$$

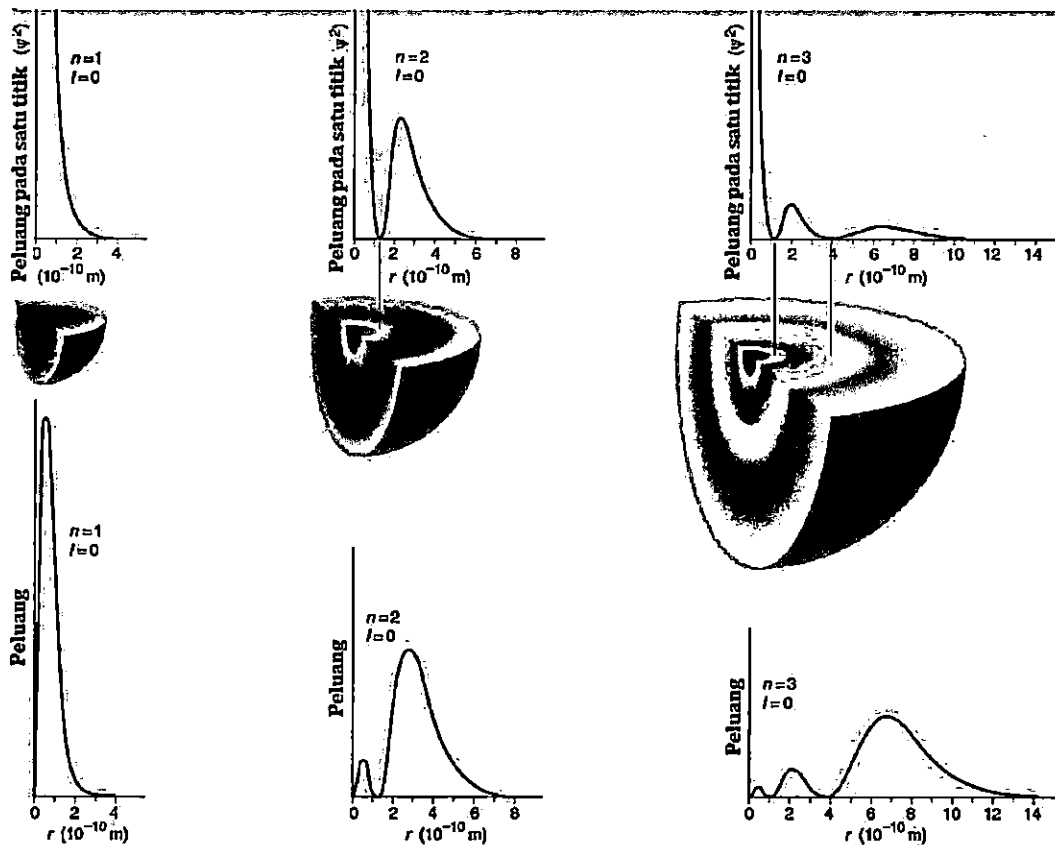
$$\psi_{2p_y} = (32\pi a_0^3)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta \sin \phi$$

Kedua nilai memberikan distribusi peluang yang ekuivalen dan grafik fungsi yang sesuai untuk fungsi gelombang 2p, 3p dan 4p.



Gambar 7.3-2. Grafik peluang elektron orbital p pada atom hidrogen

Berdasarkan fungsi kerapatan elektron dan simpul yang terbentuk pada orbital atom s, dapat kita ilustrasikan bangun orbital tiga dimensi untuk orbital s atom hidrogen sebagai fungsi bola sebagaimana yang telah diberikan pada fungsi gelombang orbital s di Tabel 7.1. Gambaran tiga dimensi dari fungsi kerapatan orbital s secara deskriptif dapat dilihat pada Gambar 7.5.



Gambar 7.3-3. Ilustrasi tiga dimensi orbital s berbentuk bola dengan simpul menunjukkan daerah peluang yang lebih jarang (disimbolkan dengan warna putih) dan perut fungsi menunjukkan peluang yang lebih besar (disimbolkan dengan warna biru lebih pekat).

## 7.4 Pengaruh Medan Magnet

Pada atom hidrogen terdapat sebuah elektron yang beredar mengelilingi inti. Sesuai dengan percobaan Oersted dan Faraday yang menunjukkan bahwa disekitar kawat yang dialiri oleh arus listrik akan menimbulkan medan magnet. Karena elektron yang bermuatan beredar mengelilingi inti sehingga menimbulkan momentum sudut orbital dan menimbulkan momen magnet sebesar:

$$\mu = -\frac{e}{2m_e} \mathbf{L} \quad 7.14$$

Eksperimen yang dilakukan oleh Zeeman yang menempatkan atom dalam medan magnet, sehingga medan magnet  $\mathbf{B}$  berinteraksi dengan  $\mu$  dan energi potensial menjadi:

$$U = -\mu \cdot \mathbf{B} = -\mu_z B_z = \frac{e B_z}{2m_e} L_z$$

Memasukkan nilai energi potensial ini ke dalam operator Hamiltonian akan kita peroleh:

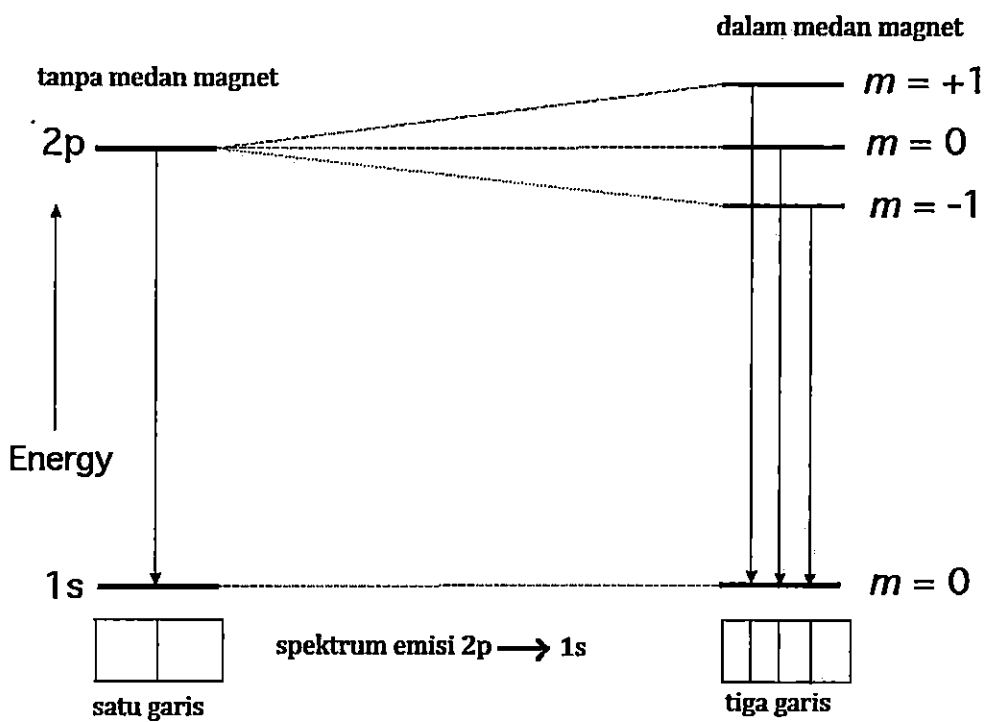
$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{e B_z}{2m_e} \hat{L}_z$$

Fungsi gelombang atom hidrogen merupakan fungsi eigen kedua operator fungsi eigen  $\hat{H}_0$  dan  $\hat{L}_z$  dari operator baru  $\hat{H}$ . Nilai eigen energi merupakan jumlah dari;

$$E = -\frac{Z^2 e^2}{8\pi\epsilon_0 n^2} + \frac{e B_z}{2m_e} m\hbar$$

Karena itu energi bergantung kepada bilangan kuantum magnetik  $m$  jika digunakan medan magnet. Pada orbital 2p nilai  $m = -1, 0, +1$  dinyatakan bahwa setiap nilai  $m$  memiliki nilai energi yang tidak setara, sehingga jika dikenai medan

magnet orbital akan terpecah, dengan nilai sebanding dengan besar medan magnet  $B_z$  yang digunakan. Ilustrasi pemakaian medan magnet disajikan pada Gambar 7.6. Fungsi kompleks  $\psi_{2l-1}$  dan  $\psi_{2l+1}$  merupakan fungsi eigen dari operator momentum sudut  $\hat{L}_z$  dengan nilai eigen  $\pm m\hbar$ . Sedangkan  $\psi_{2p_x}$  dan  $\psi_{2p_y}$  merupakan fungsi eigen dari  $\hat{H}_0$  namun bukan fungsi eigen untuk  $\hat{L}_z$  sehingga disimpulkan bahwa tidak ada fungsi eigen energi ketika medan magnet dipakai pada atom.

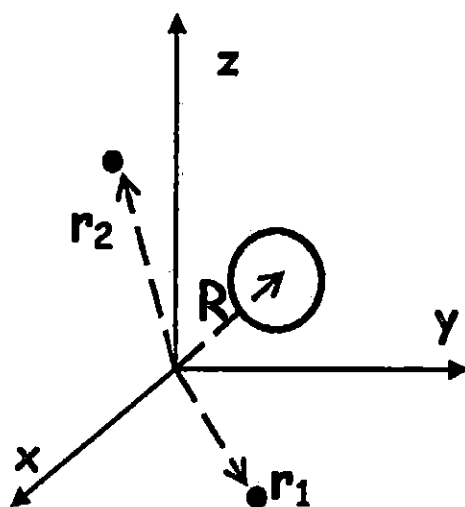


Gambar 7.4-1. Pemecahan spektrum emisi atom hidrogen akibat pemakaian medan magnet

## 8. Atom Helium

M

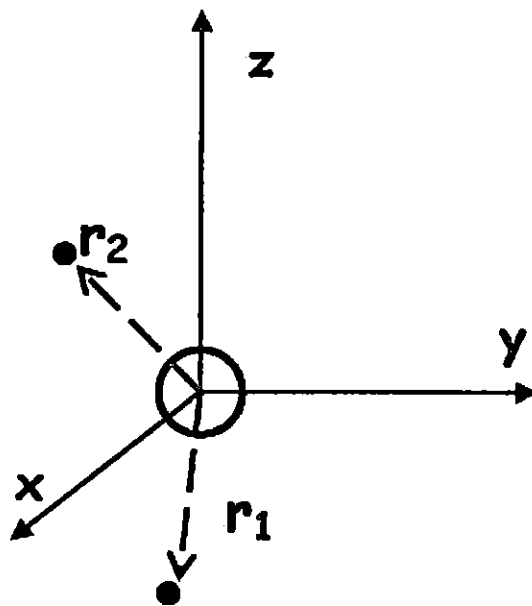
ari kita perlakukan atom seperti hidrogen dengan lebih menyeluruh, akan kita bahas sistem yang paling sederhana berikut yaitu atom helium. Pada atom helium kita memiliki dua elektron dengan koordinat  $r_1$  dan  $r_2$  yang beredar mengelilingi inti dengan muatan  $Z = 2$  yang terletak pada titik  $R$ . Pada atom hidrogen kita dapat mengabaikan gerakan inti dengan mentransformasi pusat massa. Kemudian kita tentukan persamaan Schrödinger untuk partikel efektif tunggal dengan massa tereduksi yang sangat dekat dengan massa elektron yang mengorbit pada titik pusat.



Gambar 7.4-1. Koordinat pusat massa untuk atom helium dengan dua elektron mengorbit pada koordinat  $r_1$  dan  $r_2$ .

Kemudian akan sangat sulit untuk mentransformasi pusat massa apabila partikelnya ada tiga buah seperti kasus atom helium. Namun, karena inti jauh lebih berat dari masing-masing elektron ( $M_{Nuc} \approx 7000 M_{el}$ ) sehingga merupakan

pendekatan yang sangat baik untuk menganggap inti terletak pada pusat massa atom. Pada pendekatan dengan koordinat pusat massa, kemudian  $R = 0$  dan koordinat elektron  $r_1$  dan  $r_2$  yang diukur untuk setiap elektron dan inti. Kemudian akan kita atur pemisahan gerak inti yang sebanding dengan translasi pada pusat massa dari atom dari jarak  $d$  relatif terhadap elektron yang mengorbit inti dengan kerangka acuan pusat massa. Sehingga disini kita hanya fokus terhadap gerak elektron, dan mengabaikan gerak inti.



Gambar 7.4-2. Kerangka acuan transformasi dua elektron pada suatu pusat massa

Kita perlakukan secara mekanika kuantum partikel-partikel (1, 2, 3, ...) dengan cara yang sama seperti yang digambarkan pada dimensi banyak masing-masing menurut Gambar 8-2. Kita temukan operator-operator posisi  $\hat{r}_1, \hat{r}_2, \hat{r}_3, \dots$  dan berasosiasi dengan operator momentum  $\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3, \dots$  operator untuk partikel tertentu ( $i$ ) akan diasumsikan komut dengan semua operator yang berasosiasi dengan suatu partikel lain ( $j$ ):



$$[\hat{r}_1, \hat{p}_2] = [\hat{p}_2, \hat{r}_3] = [\hat{r}_2, \hat{r}_3] = [\hat{p}_1, \hat{p}_3] = \dots \equiv 0 \quad 8-1$$

Kemudian, operator merupakan milik dari partikel yang sama yang mematuhi persamaan komutasi normal. Posisi dan momentum sepanjang sumbu tertentu dan tidak komut:

$$[\hat{x}_1, \hat{p}_{x_1}] = i\hbar \quad [\hat{y}_1, \hat{p}_{y_1}] = i\hbar \quad [\hat{z}_1, \hat{p}_{z_1}] = i\hbar \quad 8-2$$

Dimana semua komponen yang dimiliki oleh sumbu yang berbeda adalah komut:

$$\hat{x}_1 \hat{y}_1 = \hat{y}_1 \hat{x}_1 \quad \hat{p}_{z_1} \hat{y}_1 = \hat{y}_1 \hat{p}_{z_1} \quad \hat{p}_{z_1} \hat{p}_{x_1} = \hat{p}_{x_1} \hat{p}_{z_1} \quad 8-3$$

Sebagaimana yang dapat dilihat, suatu tantangan yang paling besar untuk memperlakukan berbagai elektron adalah ledakan dalam jumlah variabel yang diperlukan. Dalam bentuk operator ini, dapat kita tulis Hamiltonian untuk atom helium seperti ini:

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{p}_1^2}{2m_e} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_e} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hat{r}_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\hat{r}_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|\hat{r}_1 - \hat{r}_2|}$$

Hamiltonian ini terlihat sangat mengintimidasi, karena semua konstanta ( $e, m_e, \epsilon_0, \dots$ ) pada umumnya telah dipertimbangkan. Hasil dari konstanta ini adalah dari pemakaian satuan internasional yang digunakan (untuk panjang digunakan meter, massa dalam gram, dan waktu dalam detik). Namun, pendekatan ini cukup aneh juga karena massa yang kita pertimbangkan nilainya adalah  $10^{-28}$  gram, kemudian jarak/panjang yang kita pertimbangkan adalah  $10^{-10}$  m, dan energi yang kita pertimbangkan adalah dalam satuan  $10^{-18}$  Joule. Sehingga karena itu jauh lebih mudah apabila kita kerjakan segala sesuatunya dalam ukuran **satuan atom**. Dalam sistem satuan yang dipakai untuk satuan atom ini kita pilih untuk satuan massa adalah sama dengan massa elektron ( $m_e$ ), satuan muatan yang dipakai dalam satuan muatan elektron ( $e$ ), dan satuan untuk momentum sudut

adalah ( $\hbar$ ). Kemudian, kita pilihbekerja dengan satuan elektrostatika, sehingga permitivitas dalam ruang hampa ( $4\pi\epsilon_0$ ) juga bernilai 1. Hasil dari keempat nilai yang dipilih ini dilipat duakan. Pertama, Hamiltonian dari atom helium (dan disetiap atom atau molekul) secara sederhana pada umumnya karena semua konstanta adalah satuan yang dapat diabaikan dalam penulisan persamaan:

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{p}_1^2}{2} + \frac{\hat{p}_2^2}{2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|} = -\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|} \quad 8-4$$

Hal ini karena pada umumnya secara sederhana dalam aljabar pada masa depan dapat kita pakai satuan atom mulai dari saat ini. Keuntungan kedua dari pemilihan satuan ini karena satuan dari energi, massa, jarak, momentum sudut dan lain-lain merupakan ukuran tertentu yang berhubungan dengan atom dan molekul. Satuan-satuan yang umum digunakan diberikan pada Tabel 8-1.

Tabel 8-1. Satuan atom pada satuan internasional dan ekivalennya dengan satuan makroskopisnya.

Satuan atom dan ekivalen satuan internasionalnya		
Kuantitas	Satuan	Ekivalen satuan internasional

massa elektron	$m = 1$	$9.11 \times 10^{-31}$ kg
muatan elektron	$ e  = 1$	$1.06 \times 10^{-19}$ C
momentum sudut	$\hbar = 1$	$1.05 \times 10^{-34}$ J · s
permitivitas ruang hampa	$\kappa_0 = 4\pi\epsilon_0 = 1$	$1.11 \times 10^{-10}$ C <sup>2</sup> · J <sup>-1</sup> · m
panjang	$\kappa_0 \hbar^2 / m e^2 = a_0 = 1$ (bohr) (jari-jari Bohr)	$5.29 \times 10^{-11}$ m
energi	$m e^4 / \kappa_0^2 \hbar^2 = e^2 / \kappa_0 a_0 = 1$ (hartree) (dua kali energi ionisasi atom hidrogen)	$4.36 \times 10^{-18}$ J = 27.2
waktu	$\kappa_0^2 \hbar^3 / m e^4 = 1$ (periode dari elektron pada orbit pertama Bohr)	$2.42 \times 10^{-17}$ s
kelajuan	$e^2 / \kappa_0 \hbar = 1$ (kelajuan suatu elektron pada orbit pertama Bohr)	$2.19 \times 10^6$ kg
potensial listrik	$m e^3 / \kappa_0^2 \hbar^2 = e^2 / \kappa_0 a_0 = 1$ (potensial dari suatu elektron pada orbit pertama Bohr)	27.21 V
momen dipol magnet	$e \hbar / m = 1$ (dua kali magneton Bohr)	$1.85 \times 10^{-23}$ J · T <sup>-1</sup>

Sehingga, sejauh ini kita bekerja secara konsisten dengan satuan atom, kita berpeluang untuk menemukan energi dalam orde satu, jarak dalam orde satu, momentum dalam orde satu tanpa harus begitu peduli terlalu banyak pada notasi ilmiahnya.

Ketika Schrödinger telah selesai memecahkan masalah atom hidrogen, maka dipercayai bahwa solusi untuk atom helium secara umum akan mengikuti atom hidrogen sehingga solusinya akan ditemukan tidak lama setelah penyelesaian atom hidrogen. Namun, para ilmuwan telah mencoba selama berpuluh tahun untuk menyelesaikan masalah tiga atom seperti helium ini namun gagal. Berbagai pendekatan yang sangat-sangat akurat telah dikembangkan, namun, tidak pernah ditemukan hasil yang akurat untuk itu. sampai kemudian dinyatakan bahwa, meskipun telah dibuat penyederhanaan seperti yang dilakukan pada pers. 8-4 di atas, adalah tidak mungkin untuk

menentukan keadaan eigen dari atom helium. Hal ini sudah sangat umum terjadi dalam bidang kimia, pada umumnya permasalahan yang menarik perhatian kita tidak dapat diselesaikan dengan sangat tepat. Oleh karena itu kita dapat membuat berbagai pendekatan seperti yang akan kita lakukan dalam topik ini.

## 8.1 Pendekatan Elektron yang tidak Berinteraksi

Bagi atom helium, hal pertama yang perlu kita catat adalah bahwa Hamiltoniannya dapat dipisahkan jika kita dapat mengabaikan bentuk tolakan elektron-elektron dalam bentuk:

$$\hat{H}_{induksi} = \frac{\nabla_1^2}{2} + \frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{Z}{\hat{r}_1} - \frac{Z}{\hat{r}_2} = \frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{Z}{\hat{r}_1} + \frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{Z}{\hat{r}_2} \equiv \hat{H}_1 + \hat{H}_2$$

Sehingga apabila kita abaikan interaksi antara elektron dengan elektron, maka Hamiltoniannya akan mengurangi jumlah Hamiltonian dari dua atom hidrogen (dengan  $Z = 2$ ). Berdasarkan kepada pengalaman terhadap Hamiltonian yang dapat dipisahkan pada bagian sebelumnya (penambahan Hamiltonian menghasilkan perkalian fungsi gelombang dan bermuara pada penambahan energi), sehingga dapat kita tuliskan bahwa bentuk yang benar dari fungsi eigen dan nilai eigen dari Hamiltonian ini yaitu:

$$\Psi_{n_1 l_1 m_1 s_1; n_2 l_2 m_2 s_2}(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2) = \psi_{n_1 l_1 m_1 s_1}(r_1, \sigma_1) \psi_{n_2 l_2 m_2 s_2}(r_2, \sigma_2)$$

$$E_{n_1 n_2} = E_{n_1} + E_{n_2} = -\frac{Z^2}{2n_1^2} - \frac{Z^2}{2n_2^2}$$

Dimana, pada baris kedua kita gunakan satuan atom ( $\hbar = m_e = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$ ) untuk menyederhanakan persoalan. Sehingga dengan mengabaikan tolakan elektron (sebagai pendekatan) maka kita memindahkan persoalan yang

tidak mungkin diselesaikan menjadi hal yang mungkin dapat diselesaikan dengan mudah.

Namun, pertanyaan menarik dapat dimunculkan yaitu seberapa baikkah pendekatan yang dibuat ini? Jawabannya adalah dengan menguji pendekatan ini terhadap keadaan dasar dari atom. Menurut prinsip larangan Pauli, kita tidak dapat menempatkan dua elektron pada keadaan energi yang sama. Namun, seperti yang telah kita lihat dalam kimia dasar, kita bisa menempatkan suatu elektron dalam orbital 1s dengan spin ke atas (*up*) dan elektron lain pada orbital 1s dengan spin ke bawah (*down*):

$$\Psi_{1s\alpha;1s\beta}(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2) = \psi_{100\alpha}(r_1, \sigma_1)\psi_{100\beta}(r_2, \sigma_2)$$

Sehingga fungsi gelombang ini memiliki energi dengan nilai;

$$E_{11} = -\frac{Z^2}{2} - \frac{Z^2}{2} = -Z^2 = -4 \text{ s. a (s. a = satuan atom)} = -108,8 \text{ eV}$$

Hasil ini jika kita bandingkan dengan hasil sebenarnya dari eksperimen terlalu besar. Sekarang kita coba tentukan energi dasar dari atom helium dengan membuang satu elektron untuk menghasilkan  $\text{He}^+$  dan kemudian kita buang satu elektron lagi untuk menghasilkan  $\text{He}^{2+}$ . Pada eksperimen pembuangan elektron pada lintasan pertama diperlukan energi sebesar 24,2 eV, dan untuk membuang elektron kedua diperlukan energi sebesar 54,4 eV, yang berarti bahwa tingkat energi keadaan dasar atom helium yang benar adalah 78,8 eV. Sehingga gambaran pendekatan elektron yang tidak berinteraksi pada atom helium ternyata memiliki kesalahan sebesar 30 eV. Nilai 30 eV adalah nilai energi yang sangat besar. Sebagai informasi bahwa energi untuk melepas ikatan kovalen pada suatu molekul senyawa kimia hanya diperlukan energi sebesar 5 eV. Maka secara total dapat kita

simpulkan bahwa mengabaikan interaksi elektron bukanlah merupakan pendekatan yang baik.

## 8.2 Pendekatan Elektron Menyendiri

Lalu bagaimana cara memperbaiki pendekatan yang telah dibuat pada sesi 8.1? pertama perlu kita catat bahwa produk fungsi gelombang yang digambarkan di atas adalah tidak antisimetrik. Untuk membuktikan antisimetri harus kita ingat bahwa karena kedua elektron dalam kasus kita sebelumnya adalah identik maka pelabelan 1 dan 2 adalah acak, yang berarti bahwa nilai 1 untuk elektron pertama boleh dibalik dengan hasil yang tidak merubah hasil perhitungan. Dengan penukaran label 1 dan 2 dari suatu fungsi gelombang antisimetrik seharusnya akan memberikan nilai fungsi gelombang balik yang juga bertanda minus. Namun, pada fungsi gelombang yang telah kita buat sebelumnya hal ini tidak terjadi:

$$\begin{aligned} \psi_{1s\alpha}(r_1, \sigma_1)\psi_{1s\beta}(r_2, \sigma_2) &\xrightarrow{\text{saling tukar 1 dan 2}} \psi_{1s\alpha}(r_1, \sigma_1)\psi_{1s\beta}(r_2, \sigma_2) \\ &\neq -\psi_{1s\alpha}(r_1, \sigma_1)\psi_{1s\beta}(r_2, \sigma_2) \end{aligned}$$

Hal ini dapat menjadi masalah, karena kita katakan bahwa semua fungsi gelombang elektron seharusnya antisimetrik ketika dipertukarkan. Kemudian kita dapat memperbaiki permasalahan ini dengan mengambil kombinasi dari fungsi gelombang yang kita usulkan dan penukarannya;

$$\begin{aligned} \Psi_{1s\alpha;1s\beta}(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2) \\ \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1s\alpha}(r_1, \sigma_1)\psi_{1s\beta}(r_2, \sigma_2) - \psi_{1s\alpha}(r_2, \sigma_2)\psi_{1s\beta}(r_1, \sigma_1)] \end{aligned}$$

Dengan pemakaian faktor  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  menjamin bahwa fungsi gelombang baru tersebut telah dinormalisasi. Kita uji bahwa fungsi gelombang ini antisimetrik dengan:

$$\begin{aligned}
 \Psi_{1s\alpha;1s\beta}(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2) & \\
 & \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1s\alpha}(r_1, \sigma_1)\psi_{1s\beta}(r_2, \sigma_2) - \psi_{1s\alpha}(r_2, \sigma_2)\psi_{1s\beta}(r_1, \sigma_1)] \\
 & \xrightarrow{1 \leftrightarrow 2} \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1s\alpha}(r_2, \sigma_2)\psi_{1s\beta}(r_1, \sigma_1) - \psi_{1s\alpha}(r_1, \sigma_1)\psi_{1s\beta}(r_2, \sigma_2)] \\
 & = -\frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1s\alpha}(r_1, \sigma_1)\psi_{1s\beta}(r_2, \sigma_2) - \psi_{1s\alpha}(r_2, \sigma_2)\psi_{1s\beta}(r_1, \sigma_1)] \\
 & = -\Psi_{1s\alpha;1s\beta}(r_1, \sigma_1; r_2, \sigma_2)
 \end{aligned}$$

Kemudian kita tentukan apakah fungsi ini menghasilkan energi yang lebih sesuai? Walau pun seperti terlihat pada persamaan penukaran ini tidak memberikan perubahan dalam prediksi nilai energi yang dihasilkan, fungsi gelombang baru ini merupakan kombinasi linier dari dua keadaan eigen yang terdegenerasi dari Hamiltonian elektron menyendiri. Sebagaimana yang telah dibahas pada sesi sebelumnya, bahwa kombinasi linier dari dua solusi juga merupakan solusi dari keadaan eigen dengan nilai eigen yang sama. Sehingga, walaupun dalam mekanika kuantum menyebutkan bahwa kita harus membuat fungsi gelombang antisimetrik, namun sifat antisimetrik sendiri tidak mempengaruhi energi dari atom helium itu sendiri.

Cara yang paling sederhana untuk memperbaiki perkiraan kita tentang perkiraan energi keadaan dasar dari atom helium adalah dengan mempertimbangkan bukan hanya nilai eigen dari Hamiltonian pendekatan yang dibuat terhadap fungsi eigen pendekatan kita, namun, selain itu perlu juga mencari

energi rata-rata dari fungsi pendekatan kita dengan Hamiltonian yang sesungguhnya. Maka dapat kita nyatakan bahwa pendekatan yang lebih baik terhadap energi dapat dilakukan dengan Hamiltonian:

$$\langle \hat{H} \rangle = \int \Psi_{1s\alpha;1s\beta}^* \hat{H} \Psi_{1s\alpha;1s\beta} d\tau_1 d\tau_2$$

Dimana  $d\tau_1 = dr_1 d\sigma_1$  dan sama juga untuk  $d\tau_2$ . Kita rujuk gambaran ini sebagai **pendekatan elektron menyendiri**. Dalam hal ini fungsi gelombang elektron berperilaku sebagai elektron yang tidak saling berinteraksi, karena dianggap merupakan bentuk yang dapat dipisah-pisahkan. Namun, dalam pengukuran energi, kita lipat kembali interaksi ini menjadi suatu pendekatan dengan menghitung energi rata-rata termasuk interaksinya.

Secara sederhana dapat kita hitung energi rata-rata dengan cepat sebagai berikut,

$$\begin{aligned} & \int \Psi_{1s\alpha;1s\beta}^* \left( \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \frac{1}{|r_1 + r_2|} \right) \Psi_{1s\alpha;1s\beta} d\tau_1 d\tau_2 \\ & \Rightarrow \int \Psi_{1s\alpha;1s\beta}^* \left( -2 + -2 + \frac{1}{|r_1 + r_2|} \right) \Psi_{1s\alpha;1s\beta} d\tau_1 d\tau_2 \\ & \Rightarrow -4 \int \Psi_{1s\alpha;1s\beta}^* \Psi_{1s\alpha;1s\beta} d\tau_1 d\tau_2 + \int \Psi_{1s\alpha;1s\beta}^* \left( \frac{1}{|r_1 + r_2|} \right) \Psi_{1s\alpha;1s\beta} d\tau_1 d\tau_2 \\ & \Rightarrow -4 + \int \frac{|\Psi_{1s\alpha;1s\beta}^*|^2}{|r_1 + r_2|} d\tau_1 d\tau_2 \end{aligned}$$

Sehingga kita peroleh energi rata-rata sebagai:

$$\langle \hat{H} \rangle = -4 + \int \frac{|\Psi_{1s\alpha;1s\beta}^*|^2}{|r_1 + r_2|} d\tau_1 d\tau_2$$



Bentuk persamaan pertama merupakan nilai energi dari elektron yang tidak berinteraksi pada sesi 8.1. sedangkan bentuk kedua merupakan nilai rata-rata dari tolakan elektron dengan elektron. Karena nilai integran dijaga benar-benar positif (seperti yang diharapkan pada tolakan elektron) bentuk kedua ini hanya akan meningkatkan energi rata-rata saja. Hal baiknya adalah karena gambaran elektron yang tidak berinteraksi kita memberikan nilai energi 30 eV lebih rendah maka kita dapat mengembangkan bentuk tolakan ini berdasarkan pada bentuk antisimetrik dari fungsi gelombang. Pertama kita catat bahwa kita bisa memfaktorkan fungsi gelombang antisimetrik kedalam bagian spin ruang-waktu menjadi:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1s\alpha}(r_1, \sigma_1)\psi_{1s\beta}(r_2, \sigma_2) - \psi_{1s\alpha}(r_2, \sigma_2)\psi_{1s\beta}(r_1, \sigma_1)] \\ \Rightarrow & \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_{1s}(r_1) \alpha(\sigma_1)\psi_{1s}(r_2) \beta(\sigma_2) - \psi_{1s}(r_2) \alpha(\sigma_2)\psi_{1s}(r_1) \beta(\sigma_1)] \\ & \Rightarrow \psi_{1s}(r_1)\psi_{1s}(r_2) \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2) - \beta(\sigma_1)\alpha(\sigma_2)] \end{aligned}$$

Dapat dilihat bahwa  $\Psi_{\text{ruang}}(r_1, r_2) = \psi_{1s}(r_1)\psi_{1s}(r_2)$  dan  $\Psi_{\text{spin}}(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\alpha(\sigma_1)\beta(\sigma_2) - \beta(\sigma_1)\alpha(\sigma_2)]$ , sehingga dapat dinyatakan bahwa fungsi gelombang ruang dan spin dinormalisasi secara sendiri-sendiri. Catatan bahwa dengan ketiadaan magnet, kita bisa tuliskan fungsi eigen dan Hamiltonian fungsi ini dalam bentuk ini karena Hamiltonian dapat diisahkan dalam bentuk bagian ruang dan spin. Sehingga;

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{ruang}} + \hat{H}_{\text{spin}}$$

Dengan menganggap bahwa bagian spin bernilai nol, hasilnya adalah bahwa fungsi eigen dari Hamiltonian selalu dihasilkan oleh bagian ruang dan

bagian spin di atas. Dengan pemisahan bagian ruang dan spin ini, dapat kita nyatakan secara sederhana nilai tolakan dalam bentuk:

$$\begin{aligned}
 & \int \frac{|\Psi_{1s\alpha;1s\beta}|^2}{|r_1 + r_2|} d\tau_1 d\tau_2 \\
 &= \int \frac{|\Psi_{ruang} \Psi_{spin}|^2}{|r_1 + r_2|} dr_1 dr_2 d\sigma_1 d\sigma_2 \\
 &= \int \frac{|\Psi_{ruang}(r_1, r_2)|^2 |\Psi_{spin}(\sigma_1, \sigma_2)|^2}{|r_1 + r_2|} dr_1 dr_2 d\sigma_1 d\sigma_2 \\
 &= \int |\Psi_{spin}(r_1, r_2)|^2 d\sigma_1 d\sigma_2 \int \frac{|\Psi_{ruang}(r_1, r_2)|^2}{|r_1 + r_2|} dr_1 dr_2 \\
 &= \int \frac{|\Psi_{ruang}(r_1, r_2)|^2}{|r_1 + r_2|} dr_1 dr_2
 \end{aligned}$$

Penyelesaian integral 6 dimensi ini sangat menjemukan, namun hasilnya dapat dilihat seperti berikut,

$$\boxed{\int \frac{|\Psi_{ruang}(r_1, r_2)|^2}{|r_1 + r_2|} dr_1 dr_2 = \frac{5Z}{8} = \frac{5}{4} \text{ s. a} = +34 \text{ eV}}$$

Penambahan nilai rata-rata tolakan ini ke bentuk energi non interaksi akan memberikan nilai energi keadaan dasar yaitu:  $-108.8 \text{ eV} + 34 \text{ eV} = -74.8 \text{ eV}$ , nilai ini hanya berbeda 4 eV dari nilai energi yang sesungguhnya hasil eksperimen. Energi ini tidaklah sangat sesuai namun, setidaknya telah ada kemajuan. Nilai 4 eV itu tidak dapat sepenuhnya diabaikan, walaupun telah memperoleh banyak kemajuan, riset tentang mekanika kuantum tetap berkembang terus-menerus hingga saat ini.

Sebagaimana yang telah ditunjukkan, gambaran elektron menyendiri tidaklah demikian tepat untuk menjelaskan tentang atom. Namun, para kimiawan

sangat pragmatis dan menyadari sepenuhnya bahwa kemudahan dalam penyelesaian masalah elektron yang tidak berinteraksi sangat penting dan berharga, sebagaimana yang kemudian akan kita lihat selanjutnya, teori ini memberikan gambaran tentang teori orbital molekul yang memungkinkan kita untuk mengungkap secara luas tentang aplikasinya dalam bidang kimia. Karena itu, kimiawan sangat enggan untuk meninggalkan gambaran partikel menyendiri. Walaupun, banyak hal besar yang menjadi keberatan dalam membuat gambaran yang lebih akurat berdasarkan kepada partikel menyendiri melakukan koreksi yang lebih maju seperti yang dibuat di atas dengan memodifikasi Hamiltonian yang tidak berinteraksi menyajikan kepada kita model partikel menyendiri yang lebih baik. Kita akan gunakan berbagai model kualitatif tentang struktur atom/molekul dan ikatan berdasarkan model ini.

## 9. Atom Berelektron Banyak



Setelah menyelesaikan kasus tentang atom helium, sekarang kita lihat kasus model partikel menyendiri yang memberikan gambaran kualitatif yang benar tentang atom yang memiliki elektron lebih dari dua, seperti litium atau karbon. Akan kita lihat bahwa model partikel menyendiri dapat digunakan untuk memberikan gambaran yang lebih realistis tentang struktur atom yang penting dan sepadan dengan atom helium. Sebagai awal, mari kita atur koordinat kita sehingga inti berada pada pusat dan sejumlah  $N$  elektron berada pada jarak  $r_1, r_2, r_3, \dots, r_N$ . Dengan menggunakan variabel ini maka kita dapat menuliskan Hamiltonian untuk atom elektron banyak dalam satuan atom menjadi;

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \nabla_j^2 - \sum_{j=1}^N \frac{Z}{r_j} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{|r_i - r_j|}$$

Dimana  $-\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \nabla_j^2$  adalah energi kinetik partikel,  $\sum_{j=1}^N \frac{Z}{r_j}$  adalah tarikan antara elektron dengan inti dan  $\sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{|r_i - r_j|}$  adalah tolakan antara elektron dengan elektron. Sehingga Hamiltonian untuk elektron banyak akan sama dengan ketiga sumber energi sebagaimana yang terdapat dalam kasus dua elektron, tetapi banyaknya jumlah elektron membuat perhitungannya menjadi agak sedikit rumit. Seperti sebelumnya, dapat kita buat Hamiltonian yang dapat dipisah apabila kita bisa mengabaikan tolakan elektron dengan elektron.

$$H_{NI} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \nabla_j^2 - \sum_{j=1}^N \frac{Z}{r_j} = \sum_{j=1}^N \left\{ -\frac{1}{2} \nabla_j^2 - \frac{Z}{r_j} \right\} \equiv \sum_{j=1}^N \hat{h}_j \quad 9-1$$

Setiap masing-masing Hamiltonian menyendiri  $\hat{h}_i$  menyatakan suatu elektron tunggal dalam daerah suatu inti dengan muatan  $+Z$ . Berdasarkan pengalaman kita dengan Hamiltonian yang dapat dipisahkan, secara langsung dapat kita tuliskan keadaan eigen dari Hamiltonian ini sebagai produk dengan energi yang diberikan sebagai penjumlahan dari energi elektron menyendiri yaitu:

$$\Psi = \psi_{k_1}(1)\psi_{k_2}(2)\psi_{k_3}(3) \dots \psi_{k_N}(N)$$

$$E = E_{k_1} + E_{k_2} + E_{k_3} + \dots + E_{k_N}$$

Dengan penulisan (1) merupakan perwakilan untuk  $(r_1, \sigma_1)$  dan  $k_i \equiv \{n_i, l_i, m_i, s_i\}$  yang mewakili semua bilangan kuantum untuk keadaan eigen atom hidrogen yang diinginkan. Tentu saja, permasalahan dengan keadaan eigen yaitu bahwa keadaan eigen tidak antisimetrik. Untuk atom helium, kita sesuaikan ini dengan membuat kombinasi antisimetrik yang eksplisit dari dua keadaan produk yang terdegenerasi.

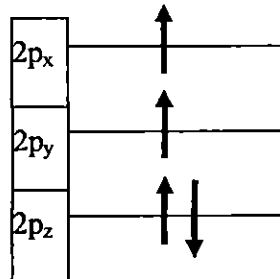
$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \psi_{1s\alpha}(1)\psi_{1s\beta}(2) - \psi_{1s\alpha}(2)\psi_{1s\beta}(1) \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{1s\alpha}(1) & \psi_{1s\alpha}(2) \\ \psi_{1s\beta}(1) & \psi_{1s\beta}(2) \end{vmatrix}$$

Pada bagian sebelah kanan kita nyatakan bahwa produk antisimetriknya dapat juga dituliskan sebagai determinan dari matriks  $2 \times 2$ . Ketika ini diteruskan maka dapat diteruskan dengan memperluas ide ini dengan menggenerasi keadaan antisimetrik partikel  $N$  dengan menghitung determinan  $N \times N$  yang disebut sebagai **determinan Slater**. Yaitu:

$$\Psi(1,2,3,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(1) & \psi_{k_2}(1) & \psi_{k_3}(1) & \dots & \psi_{k_N}(1) \\ \psi_{k_1}(2) & \psi_{k_2}(2) & \psi_{k_3}(2) & \dots & \psi_{k_N}(2) \\ \psi_{k_1}(3) & \psi_{k_2}(3) & \psi_{k_3}(3) & \dots & \psi_{k_N}(3) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{k_1}(N) & \psi_{k_2}(N) & \psi_{k_3}(N) & \dots & \psi_{k_N}(N) \end{vmatrix}$$

Seperti terlihat bahwa penyelesaian aljabar yang melibatkan determinan Slater ini sangat merepotkan. Karena itu hal yang paling penting adalah jika kita menyadari beberapa hal dalam keadaan ini sehingga kita terhindar dari pengerjaan aljabar yang tidak diinginkan, keadaan tersebut antara lain:

Suatu determinan Slater menunjukkan suatu diagram tongkat/garis tunggal. Sebagai contoh dapat dilihat pada persamaan berikut:



$$\Psi(1,2,3,4) = \begin{vmatrix} 1s\alpha(1) & 1s\beta(1) & 2s\alpha(1) & 2s\beta(1) \\ 1s\alpha(2) & 1s\beta(2) & 2s\alpha(2) & 2s\beta(2) \\ 1s\alpha(3) & 1s\beta(3) & 2s\alpha(3) & 2s\beta(3) \\ 1s\alpha(4) & 1s\beta(4) & 2s\alpha(4) & 2s\beta(4) \end{vmatrix}$$

Harus jelas bahwa perluasan ide ini bersesuaian dengan suatu determinan untuk diagram tongkat/garis.

*Suatu determinan Slater adalah antisimetrik terhadap penukaran dari dua elektron.* Kita sadari hal tersebut jika kita ambil suatu matriks dan saling menukar kedua barisnya maka determinan akan berubah tanda. Sehingga, penukaran terhadap 1 dan 2 di atas sebagai contoh:

$$\Psi(2,1, \dots, N)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(2) & \psi_{k_2}(2) & \psi_{k_3}(2) & \dots & \psi_{k_N}(2) \\ \psi_{k_1}(1) & \psi_{k_2}(1) & \psi_{k_3}(1) & \dots & \psi_{k_N}(1) \\ \psi_{k_1}(3) & \psi_{k_2}(3) & \psi_{k_3}(3) & \dots & \psi_{k_N}(3) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{k_1}(N) & \psi_{k_2}(N) & \psi_{k_3}(N) & \dots & \psi_{k_N}(2) \end{vmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{baris 1\&2 saling dipertukarkan}} - \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(1) & \psi_{k_2}(1) & \psi_{k_3}(1) & \dots & \psi_{k_N}(1) \\ \psi_{k_1}(2) & \psi_{k_2}(2) & \psi_{k_3}(2) & \dots & \psi_{k_N}(2) \\ \psi_{k_1}(3) & \psi_{k_2}(3) & \psi_{k_3}(3) & \dots & \psi_{k_N}(3) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{k_1}(N) & \psi_{k_2}(N) & \psi_{k_3}(N) & \dots & \psi_{k_N}(2) \end{vmatrix} = -\Psi(2,1, \dots, N)$$

Hal yang sama juga berlaku pada pasangan indeks yang lain, sehingga determinan Slater menjadi asimetrik dengan penggantian  $i \leftrightarrow j$ .

Determinan akan nol jika orbital yang sama muncul dua kali. Jika kita ambil suatu matriks dan saling mempertukarkan kedua kolomnya, maka determinan akan mengalami perubahan tanda. Asumsikan untuk  $k_1=k_3$  di atas:

$$\Psi(1,2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(1) & \psi_{k_2}(1) & \psi_{k_1}(1) & \dots & \psi_{k_N}(1) \\ \psi_{k_1}(2) & \psi_{k_2}(2) & \psi_{k_1}(2) & \dots & \psi_{k_N}(2) \\ \psi_{k_1}(3) & \psi_{k_2}(3) & \psi_{k_1}(3) & \dots & \psi_{k_N}(3) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{k_1}(N) & \psi_{k_2}(N) & \psi_{k_1}(N) & \dots & \psi_{k_N}(2) \end{vmatrix}$$

$$\xrightarrow{\text{kolom 1\&3 saling dipertukarkan}} - \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(1) & \psi_{k_2}(1) & \psi_{k_1}(1) & \dots & \psi_{k_N}(1) \\ \psi_{k_1}(2) & \psi_{k_2}(2) & \psi_{k_1}(2) & \dots & \psi_{k_N}(2) \\ \psi_{k_1}(3) & \psi_{k_2}(3) & \psi_{k_1}(3) & \dots & \psi_{k_N}(3) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{k_1}(N) & \psi_{k_2}(N) & \psi_{k_1}(N) & \dots & \psi_{k_N}(2) \end{vmatrix}$$

$$= -\Psi(1,2, \dots, N)$$

Dengan cara suatu bilangan sama dengan bilangan itu dengan tanda berlawanan jika nilainya adalah nol saja membuat sifat antisimetrik berlaku sesuai dengan **prinsip larangan Pauli**. Sehingga determinan Slater akan menuju pada

prinsip *aufbau* yang telah dipelajari dalam kimia dasar. Pada intinya kita tidak dapat menempatkan elektron pada orbital dengan bilangan kuantum yang sama, sehingga kita terpaksa harus mengisi orbital penuh dahulu sebelum mengisi orbital dengan tingkat energi yang lebih tinggi:  $1s \uparrow, 1s \downarrow, 2s \uparrow, 2s \downarrow, \dots$  dst. Pengisian ini sesuai dengan kenyataan bahwa orbital elektron adalah antisimetrik yang memuat kenyataan bahwa spin elektron menjadi  $\frac{1}{2}$ . Dalam perkembangan lebih lanjut diketahui bahwa semua partikel yang memiliki spin setengah bilangan bulat (fermion) memiliki sifat fungsi gelombang antisimetrik, sedangkan semua partikel yang memiliki spin berupa bilangan bulat (boson) memiliki sifat fungsi gelombang simetrik. (berandai-andai, seperti apa kira-kira alam semesta jika elektron atom merupakan partikel boson!)

$\Psi$  akan ternormalisasi jika orbital  $\psi_{k_1}$  juga ternormalisasi dan dua determinan akan ortogonal apabila memiliki dua orbital tunggal. Kedua kenyataan ini agak sulit dibuktikan namun, memiliki keterpakaian yang tinggi dalam perhitungan.

*Energi non-interaksi dari suatu determinan Slater merupakan energi pembangun dari suatu orbital.* Seperti halnya kasus atom helium, fungsi antisimetrik disini merupakan kombinasi linier dari bentuk eigen dari non-interaksi:

$$\begin{aligned} \Psi(1,2, \dots, N) = & \frac{1}{\sqrt{N!}} (\psi_{k_1}(1)\psi_{k_2}(2)\psi_{k_3}(3) \dots \psi_{k_N}(N) \\ & - \psi_{k_1}(2)\psi_{k_2}(1)\psi_{k_3}(3) \dots \psi_{k_N}(N) \\ & + \psi_{k_1}(3)\psi_{k_2}(1)\psi_{k_3}(2) \dots \psi_{k_N}(N) \\ & - \psi_{k_1}(1)\psi_{k_2}(3)\psi_{k_3}(2) \dots \psi_{k_N}(N) \dots ) \end{aligned}$$



Sehingga determinan itu sendiri merupakan keadaan eigen dari Hamiltonian non interaksi dengan nilai eigen yang sama pada setiap penjumlahan keadaan.

$$E_{\Psi} = E_{k_1} + E_{k_2} + E_{k_3} + \dots + E_{k_N}$$

Disini telah kita selesaikan gambaran separuh dari partikel tunggal. Kita memiliki energi non interaktif sehingga sisanya adalah menghitung energi rata-ratanya. Untuk menghitungnya, kita memerlukan integral dimensi  $2N$  yang mencakup determinan Slater pada sisi kiri, Hamiltonian di tengah dan suatu determinan Slater juga pada sisi kanan. Ungkapan pada buku dapat menyulitkan, namun, bisa kita lakukan pada kasus yang lebih umum. Hasilnya adalah bahwa energi dapat dibagi menjadi bentuk-bentuk yang telah dikenal yaitu:

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_{i=1}^N E_i + \sum_{i>j}^N \hat{J}_{ij} - \hat{K}_{ij}$$

Pada Hamiltonian ini, nilai  $\sum_{i=1}^N E_i$  merupakan energi yang tidak berinteraksi, sedangkan  $\sum_{i>j}^N \hat{J}_{ij} - \hat{K}_{ij}$  merupakan energi tolakan rata-rata. Nilai;

$$\hat{J}_{ij} \equiv \iint \psi_{k_i}^*(1) \psi_{k_j}^*(2) \frac{1}{|r_1 - r_2|} \psi_{k_i}(1) \psi_{k_j}(2) dr_1 dr_2 d\sigma_1 d\sigma_2$$

$$\hat{K}_{ij} \equiv \iint \psi_{k_i}^*(1) \psi_{k_j}^*(2) \frac{1}{|r_1 - r_2|} \psi_{k_i}(2) \psi_{k_j}(1) dr_1 dr_2 d\sigma_1 d\sigma_2$$

Bentuk persamaan energi ini memiliki nilai intuitif yang tinggi, terdapat sumbangan dari setiap orbital elektron dengan inti (operator J) sebanyak sumbangan tolakan dari setiap orbital (operator K). Energi tolakan ini memiliki karakteristik penukar energi tolakan Coulomb karena sifat antisimetri dari determinan Slater, yang membawa tanda minus setiap kita mempertukarkan angka

1 dengan 2. Sebagai contoh jika kita perluas determinan dalam bentuk fungsi produk, maka akan kita dapatkan bentuk seperti:

$$X \equiv \psi_{k_1}(1)\psi_{k_2}(2)\psi_{k_3}(3) \dots \psi_{k_N}(N)$$

Kita memiliki nilai yang cocok dengan menukar  $1 \leftrightarrow 2$  dengan suatu tanda minus:

$$Y \equiv \psi_{k_1}(2)\psi_{k_2}(1)\psi_{k_3}(?) \dots \psi_{k_N}(?)$$

Apabila dihitung tolakan rata-rata akan diperoleh:

$$\left\langle \frac{1}{r_{12}} \right\rangle \approx \iint (X - Y \dots) \frac{1}{r_{12}} (X - Y \dots) dr_1 dr_2 \dots$$

Bentuk  $+XX$  dan  $+XY$  menyatakan integral Coulomb dan bentuk lawannya  $-XX$  dan  $-XY$  menyatakan integral balikkannya. Perlu dicatat bahwa nilai Coulomb dan lawannya harus positif sehingga integral penukar selalu mengurangi energi tolakan untuk determinan Slater. Pendapat ini tidak memberikan bukti tentang ungkapan energi di atas, namun bertujuan untuk memberikan perasaan bahwa ungkapan ini cukup sesuai. Penurunan energi rata-rata sebenarnya cukup menyita waktu dengan mengolah banyak permutasi (seperti:  $1 \leftrightarrow 2 \leftrightarrow 4$  terhadap  $4 \leftrightarrow 2 \leftrightarrow 3 \dots$  jika kita ingin menelusuri secara mendalam tentang ini maka direkomendasikan mengambil nilai 5,73 yang meliputi banyak hal disini yang cocok untuk dipahami lebih lanjut.

Pada beberapa kasus, kebanyakan waktu yang digunakan dalam perhitungan tidak perlu mempertimbangkan detail tentang bagaimana ungkapan energi rata-rata diturunkan dari determinan utama. Biasanya apa yang ingin kita lakukan adalah menggunakan rumus untuk menghitung sesuatu yang menarik dibanding dengan menurunkan ulang rumus yang telah ada. Sampai pada bagian ini perlu dicatat bahwa integral penukar dan integral Coulomb di atas meliputi

integrasi terhadap variabel spin yang dapat dilakukan secara umum. Pada dasarnya, integrasi terhadap  $\sigma_1$  ( $\sigma_2$ ) memberikan nilai satu jika fungsi kiri dan kanan untuk elektron 1 (elektron 2) memiliki spin yang sama, dan akan nol jika sebaliknya. Untuk integral Coulomb, fungsi sisi kiri dan sisi kanan adalah sama, sehingga integrasi spin selalu memberi nilai 1 dan kita dapat mengeluarkan dari integrasi spinnya:

$$J_{ij} \equiv \iint \psi_i^*(1)\psi_j^*(2) \frac{1}{|r_1 - r_2|} \psi_i(1)\psi_j(2) dr_1 dr_2$$

Disini dapat kita pendekkan saja  $i = \{n_i, m_i, l_i\}$  untuk mewakili semua bilangan kuantum spasial bagi orbital ke- $i$ , dan hal yang sama untuk orbital ke- $j$ . Untuk integral penukar fungsi kiri berbeda dengan fungsi kanan dan sehingga integral penukar menjadi tidak nol jika orbital ke- $i$  dan orbital ke- $j$  memiliki bagian spin yang sama:

$$\bar{K}_{ij} = \begin{cases} \iint \psi_i^*(1)\psi_j^*(2) \frac{1}{|r_1 - r_2|} \psi_i(2)\psi_j(1) dr_1 dr_2 & \text{jika } s_i = s_j \\ 0 & \text{lainnya} \end{cases}$$

Pada prakteknya sangat berguna untuk memulai dengan ungkapan umum untuk partikel energi tidak terikat dan kemudian diintegrasikan keluar bagian spin sehingga diperoleh persamaan akhir yang hanya meliputi integral spasial  $J$  dan  $K$  dibandingkan dengan integral spin ruang  $J$  dan  $\bar{K}$ . Sebagai contoh, seandainya jika kita konfigurasi lithium menjadi  $1s \uparrow 1s \downarrow 2s \uparrow$ . Energinya adalah:

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle &= \sum_{i=1}^N E_i + \sum_{i < j}^N J_{ij} - \bar{K}_{ij} \\ &= E_{1s} + E_{1s} + E_{2s} + J_{1s\alpha;1s\beta} - \bar{K}_{1s\alpha;1s\beta} + J_{1s\alpha;2s\alpha} - \bar{K}_{1s\alpha;2s\alpha} + J_{1s\beta;2s\alpha} \\ &\quad - \bar{K}_{1s\alpha;2s\beta} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= E_{1s} + E_{1s} + E_{2s} + \int_{1s1s} - 0 + \int_{1s2s} - \bar{K}_{1s2s} + \int_{1s2s} - 0 \\
&= 2E_{1s} + E_{2s} + \int_{1s1s} + 2\int_{1s2s} - \bar{K}_{1s2s}
\end{aligned}$$

Sehingga, berangkat dari integrasi spin ruang menjadi integrasi ruang, kita memerlukan faktor yang lebih kecil dari 2, namun rumus masih seperti sebelumnya.

Bentuk ungkapan energi partikel tunggal ini sangat mangkus; karena memungkinkan kita untuk membuat perkiraan kasar tentang sesuatu seperti energi ionisasi dan energi eksitasi dengan menyelesaikan integral Coulomb dan integral penukar. Energipartikel tunggal ini juga memberikan gambaran kasar menyeluruh kepada kita tentang pengaruh lain yaitu tentang efek pelindung (*shielding*). Seperti yang terlihat bahwa walaupun orbital 2s dan 2p terbangkitkan (*terdegenerate*) energinya, pada atom hidrogen orbital ini tidak mungkin terbangkitkan sepanjang pengisian orbital terjadi. Sehingga 2s diisi terlebih dahulu sebelum pengisian orbital 2p. Penjelasan, secara fisik peningkatan ini karena orbital 2s memperlihatkan suatu muatan inti efektif yang lebih besar dibandingkan dengan 2p sebab orbital 2p sedikit terlindungi dibanding dengan orbital 2s. Hal ini akhirnya memunculkan kenyataan bahwa model partikel menyendiri (tunggal) hanya memiliki cara yang sederhana dalam menjelaskan hasil ini. Jika kita lihat pada konfigurasi litium  $1s \uparrow 1s \downarrow 2p_x \uparrow$  dan meneruskan persis sengan manipulasi yang sama dengan yang telah kita lakukan di atas untuk  $1s \uparrow 1s \downarrow 2s \uparrow$  kita peroleh bahwa:

$$\langle \hat{H} \rangle = 2E_{1s} + E_{2p_x} + \int_{1s1s} + 2\int_{1s2p_x} - \bar{K}_{1s2p_x}$$

Dengan mengambil perbedaan antara  $1s \uparrow 1s \downarrow 2p_x \uparrow$  dan  $1s \uparrow 1s \downarrow 2s \uparrow$  memberikan nilai:

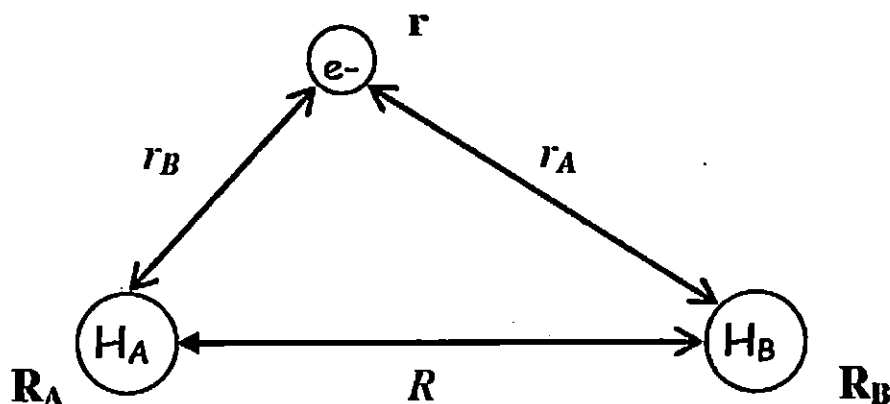
$$\begin{aligned}
\Delta E &= 2E_{1s^2 2p} + E_{1s^2 2s} \\
&= 2E_{1s} + E_{2p_x} + J_{1s1s} + 2J_{1s2p_x} - K_{1s2p_x} \\
&\quad - (2E_{1s} + E_{2s} + 2J_{1s2s} - K_{1s2s}) \\
&= 2J_{1s2p_x} - 2J_{1s2s} + K_{1s2s} - K_{1s2p_x} \neq 0
\end{aligned}$$

Sehingga walaupun  $1s \uparrow 1s \downarrow 2p_x \uparrow$  dan  $1s \uparrow 1s \downarrow 2s \uparrow$  memberikan energi yang sama jika elektronnya tidak berinteraksi, namun, **keduanya memberikan suatu energi yang berbeda apabila kita masukkan interaksi rata-rata.** Kemudian, menjadi jelas bagi kita dari persamaan di atas bahwa interaksi yang sesuai dengan orbital  $1s$  dan  $2p$  di satu sisi dan orbital  $1s$  dan  $2s$  di sisi yang lainnya. Dengan memakai pendapat tentang orbital pelindung, maka kita nyatakan bahwa orbital-orbital  $1s$  dan  $2s$  akan saling tolak menolak satu sama lain jika dibandingkan dengan orbital  $1s$  dan  $2p$ , yang membawa kita kepada kestabilan bahwa orbital  $1s \uparrow 1s \downarrow 2s \uparrow$  lebih stabil dibandingkan dengan orbital  $1s \uparrow 1s \downarrow 2p_x \uparrow$ .

## 10. Teori Orbital Molekul



ejauh ini kita telah menyelesaikan tentang mekanika kuantum dasar dan sekarang akan melangkah pada molekul. Sebagai langkah awal, akan kita lihat molekul yang paling sederhana dengan membayangkan sebuah molekul  $H_2^+$ . Molekul sederhana ini memungkinkan kita mendapatkan ide mendasar yang kemudian akan kita kembangkan menjadi teori orbital molekul. Jika kita tempatkan molekul  $H_2^+$  dalam sebuah sistem koordinat dengan posisi elektron berada pada  $r$ , dan kedua inti ditempatkan pada titik  $R_A$  dan  $R_B$ , dengan jarak  $R$  antara satu sama lain, seperti terlihat dalam Gambar 10-1.



Gambar 8.2-1. Koordinat  $H_2^+$  yang menunjukkan bahwa molekul yang terpisah dalam jarak  $R$  memiliki jarak  $r_A$  dan  $r_B$  antara elektron dan inti hidrogen

Dengan mengurai vektor energi dalam gambar 10-1 maka diperoleh Hamiltonian energi untuk molekul menjadi:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_r^2 - \frac{\nabla_A^2}{2M_A} - \frac{\nabla_B^2}{2M_B} - \frac{1}{|\hat{R}_A - \hat{r}|} - \frac{1}{|\hat{R}_B - \hat{r}|} + \frac{1}{|\hat{R}_A - \hat{R}_B|}$$

Dalam hal ini sebagaimana halnya atom maka dapat kita peroleh gambaran bahwa dapat dipisahkan gerak elektron dengan gerak inti. Pada atom helium, kita lakukan dengan menyatakan bahwa intinya jauh lebih berat dibanding elektron sehingga dapat didekati dengan pendekatan pusat massa sistem koordinat dengan menempatkan inti sebagai titik asal. Untuk molekul pendekatan yang sama dikenal sebagai **pendekatan Born-Oppenheimer**. Disini kita catat lagi bahwa inti jauh lebih berat dari elektron, sehingga pergerakan inti sangat jauh lebih lambat dari pergerakan elektron. Akibatnya dalam **pandangan elektron ini, inti hampir tidak bergerak sama sekali** dan pergerakan elektron menunjukkan medan statis yang terus meningkat dari inti. Dapat diibaratkan disini seperti seekor lalat bergerak memutar seekor gajah. Gajah mungkin saja dapat bergerak namun dalam pandangan lalat tentu saja gajah selalu diam ditempat. Dalam analogi ini gajah mewakili inti sedangkan lalat mewakili elektron.

Sebagai simpulan apabila kita tertarik mengetahui gerak elektron, maka dapat kita dekati dengan posisi inti yang mutlak diam dalam posisi  $R_A$  dan  $R_B$  dan hanya melihat pada gerak elektron dalam suatu molekul. Ini merupakan pendekatan Born-Oppenheimer yang kadangkala juga disebut sebagai pendekatan inti diam di tempat. Dengan memandang inti diam di tempat maka kita mendapatkan dua penyederhanaan dalam Hamiltonian kita yaitu: **pertama** kita dapat mengabaikan energi kinetik dari inti karena inti tidak bergerak dan **kedua** karena inti diam, maka kita dapat mengganti operator  $\hat{R}_A$  dan  $\hat{R}_B$  dengan bilangan  $R_A$  dan  $R_B$ . Sehingga Hamiltonian menjadi:

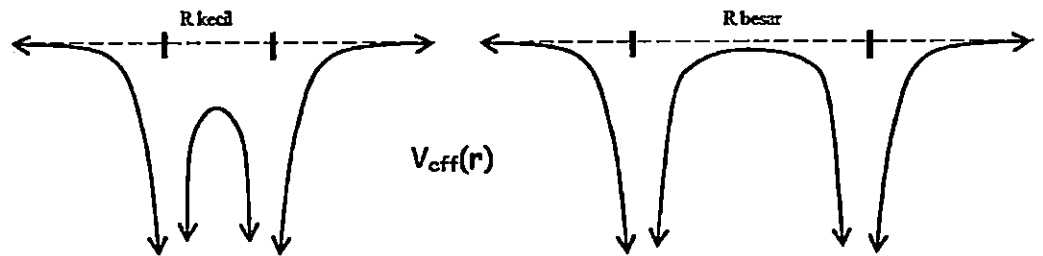
$$\hat{H}_{el}(R_A, R_B) = -\frac{1}{2}\nabla_r^2 - \frac{1}{|\hat{R}_A - \hat{r}|} - \frac{1}{|\hat{R}_B - \hat{r}|} + \frac{1}{|\hat{R}_A - \hat{R}_B|}$$

Dengan bentuk yang terakhir hanya suatu bilangan tolakan elektrostatis antara dua proton pada suatu pemisahan tertentu. Bentuk kedua dan ketiga hanya

tergantung kepada posisi dari suatu elektron,  $r$ , dan bukan momentumnya, sehingga kita segera mengidentifikasi hal ini sebagai suatu potensial dan menuliskannya menjadi:

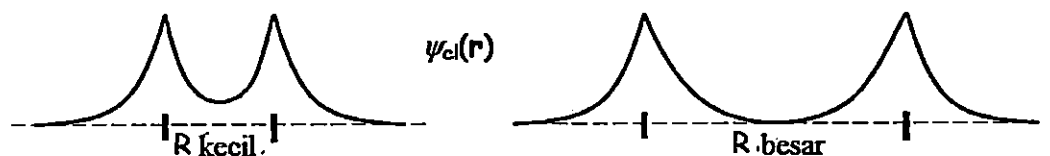
$$\hat{H}_{el}(R_A, R_B) = -\frac{1}{2}\nabla_r^2 + V_{\text{eff}}^{R_A, R_B}(\hat{r}) + \frac{1}{|\hat{R}_A - \hat{R}_B|}$$

Hamiltonian ini kini hanya memiliki operator untuk elektron sehingga dapat kita indeks dengan “ $e$ ”, tetapi nilai eigen dari Hamiltonian ini bergantung kepada jarak  $R$  antara dua inti. Sebagai contoh, dapat dilihat pada Gambar 10-2.



Gambar 8.2-2. Perbedaan antara potensial efektif apabila intinya cukup dekat dengan inti yang cukup jauh.

Sebagaimana halnya pengaruh gaya tarik antara inti yang dekat dengan yang jauh maka fungsi gelombangnya juga bergantung kepada jarak  $R$ . Seperti halnya Gambar 10-2 di atas, pembatasan di atas juga berlaku untuk Gambar 10-3.



Gambar 8.2-3. Fungsi gelombang elektron yang memiliki beda pengaruh potensial akibat perbedaan jarak  $R$

Karena fungsi eigen elektron bergantung kepada  $R$ , maka lalu kemudian energi eigen dari elektron juga bergantung kepada panjang ikatan. Secara



mekanika hal yang mesti kita lakukan adalah melakukan penyelesaian fungsi keadaan eigen dan nilai eigen yang bersesuaian pada berbagai nilai  $R$  yang tertentu dan berbeda. Metoda pengubahan nilai eigen dengan perbedaan  $R$  membawa kita mengetahui tentang bagaimana energi molekul berubah dengan memendek atau memanjangnya ikatan. Ini merupakan ide pokok dari pendekatan Born-Oppenheimer, dan hal ini sangat mendasar bagi para kimiawan dalam memandang molekul.

Bagi kimiawan mulai memandang molekul sebagai partikel yang intinya diam dalam berbagai posisi yang berbeda, dengan pendekatan mekanika kuantum elektron kemudian beredar dan melekat kepada inti pada saat bersamaan. Ketika inti berpindah maka energi sistem berubah karena energiorbital atom juga berubah. Terdapat situasi tertentu dimana pendekatan ini mengalami kegagalan, namun, secara umum pendekatan Born-Oppenheimer memberikan kepada kita gambaran yang berguna dan akurat untuk berpikir tentang kimia.

Lalu pertanyaan kemudian muncul, yaitu bagaimana kita menyelesaikan keadaan eigen tersebut? Perlu dijelaskan bahwa pencarian solusi pasti tentang ini akan membawa kita pada persoalan pokok secara umum. Bahkan untuk molekul  $H_2^+$  di atas, solusi yang diberikan sangat rumit dan untuk molekul yang lebih kompleks dari molekul  $H_2^+$  solusi pastinya hampir tidak memungkinkan. Sehingga solusinya adalah kita kembalikan lagi kepada pendekatan itu sendiri. Hal pertama yang perlu kita catat adalah bahwa jika kita lihat secara lebih dekat dengan intuisi tentang molekul  $H_2^+$  di atas maka kita kenali bahwa solusinya adalah seperti solusi penjumlahan orbital atom  $1s$  untuk dua atom hidrogen. Yaitu, kita catat bahwa pendekatan yang baik harus dapat dituliskan menjadi:

$$\psi_{el}(r) \approx c_1 1s_A(r) + c_2 1s_B(r)$$

Sekarang asumsikan bahwa kita memiliki suatu fungsi gelombang coba  $\psi$  pada fungsi gelombang keadaan dasar yang kemudian kita sebut sebagai fungsi

$$H\phi_0 = E_0\phi_0 \Leftrightarrow \langle H \rangle = \int \phi_0^* H \phi_0 d\tau = \int \phi_0^* E_0 \phi_0 d\tau = E_0$$

eigen keadaan dasar  $\phi_0$  menjadi:

Penyelesaian yang lebih maju dapat dilakukan dengan menggunakan prinsip variasi untuk memprediksi energi keadaan dasar dengan lebih akurat. Metode ini sangat umum dan dipakai secara meluas dalam kimia fisika. Sebagai asumsi yaitu kita telah memiliki suatu Hamiltonian dari suatu atom seperti helium namun kita tidak mengetahui energi keadaan dasarnya  $E_0$  dan atau fungsi

## 10.1 Prinsip Variasi

Dimana  $c_1$  dan  $c_2$  merupakan konstanta. Dalam jargon umum dapat dinyatakan bahwa fungsi pada sisi kiri disebut **fungsi orbital molekul**, sedangkan fungsi pada sisi kanan disebut sebagai **fungsi orbital atom**. Jika kita tulis bahwa fungsi orbital molekul merupakan kombinasi dari fungsi orbital atom maka kita nyatakan sebagai pendekatan Kombinasi Linier Orbital Atom (KLOA) atau dalam bahasa Inggris disebut *Linear Combination of Atomic Orbital* (LCAO). Tantangannya secara umum adalah menentukan pilihan yang paling baik untuk  $c_1$  dan  $c_2$  untuk molekul  $H_2^+$  yang terlihat seperti halnya pada keadaan dasar adalah saat  $c_1 = c_2$ . Namun, untuk mengetahui apakah ini merupakan pilihan yang paling tepat dan juga tidak hanya pada keadaan dasar ataupun untuk molekul yang lebih rumit dari molekul  $H_2^+$  maka kita memerlukan pendekatan baru.

gelombang coba-coba. Komputasi nilai rata-rata dari energi untuk fungsi gelombang coba membentuk persamaan:

$$E_{rata} = \frac{\int \psi^* \hat{H} \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} = \int \psi^* \hat{H} \psi d\tau \quad \text{jika } \psi \text{ ternormalisasi}$$

Teorema Variasi menyajikan kepada kita bahwa  $E_{rata} \geq E_0$  untuk pilihan dari fungsi gelombang coba yang diinginkan. Hal ini secara fisis sangat logis, karena energi keadaan dasar merupakan energi terendah yang paling mungkin, sehingga sangat tidak masuk akal apabila energi rata-rata lebih kecil lagi dibandingkan dengan energi keadaan dasar.

## 10.2 Pembuktian Teorema Variasi

Perluasan fungsi gelombang yang ternormalisasi  $\psi$  merupakan kombinasi linier dari keadaan eigen yang tidak diketahui  $\phi_n$  dari suatu hamiltonian:

$$\psi = \sum_n a_n \phi_n$$

Perlu dicatat bahwa dalam prakteknya kita tidak akan tahu keadaan eigen ini. Hal yang paling penting diketahui adalah bahwa tidak penting fungsi apa yang akan dipilih, namun setiap fungsi dapat diperluas dalam bentuk himpunan takhingga dari keadaan eigen ortonormal dari  $\hat{H}$ .

$$\begin{aligned} \int \psi^* \psi d\tau &= \sum_{n,m} a_n^* a_m \int \phi_n^* \phi_m d\tau = \sum_{n,m} a_n^* a_m \delta_{mn} = \sum_n |a_n|^2 = 1 \\ E_{rata} &= \int \psi^* \hat{H} \psi d\tau = \sum_{n,m} a_n^* a_m \int \phi_n^* \hat{H} \phi_m d\tau = \sum_{n,m} a_n^* a_m \int \phi_n^* E_m \phi_m d\tau \\ &= \sum_{n,m} a_n^* a_m E_m \delta_{mn} = \sum_n |a_n|^2 E_n \end{aligned}$$

Lalu, pengurangan energi keadaan dasar dari energi rata-rata membentuk persamaan:

$$E_0 = 1 \cdot E_0 = \sum_n |a_n|^2 E_0$$

Sehingga

$$E_{rata} - E_0 = \sum_n |a_n|^2 E_n - \sum_n |a_n|^2 E_0 = \sum_n |a_n|^2 (E_n - E_0) \geq 0, \quad \text{karena } E_n \geq E_0$$

Disini, dalam baris terakhir persamaan dapat kita nyatakan bahwa jumlah dari bentuk yang tidak negatif memiliki jumlah yang harus tidak negatif juga. Sangat penting untuk diketahui bahwa kesamaan tanda hanya diperoleh jika  $a_n = 0$  untuk semua keadaan yang memiliki nilai  $E_n > E_0$ . Disini fungsi gelombang  $\psi$  merupakan fungsi gelombang dari keadaan diam dari sistem (atau setidaknya dalam keadaan dasarnya, jika keadaan dasarnya terdegenerasi).

Metoda Variasi memberikan dua hal kepada kita. Pertama, metoda ini merupakan rata-rata dari perbandingan dua fungsi gelombang yang berbeda dan menceritakan fungsi gelombang mana yang lebih dekat dengan keadaan dasar, harus diingat bahwa nilai yang paling rendah merupakan pendekatan yang paling mungkin. Kedua, jika kita masukkan parameter dalam variasi fungsi gelombang yang kita miliki, maka akan memberikan rata-rata dari optimalisasi parameter-parameter dalam cara berikut. Asumsikan bahwa  $\psi$  bergantung kepada beberapa parameter  $c$  sebagaimana kasus pada fungsi gelombang Kombinasi Linier Orbital Atom (LCAO). Kita gunakan parameter  $\psi[c]$  agar differensialnya membentuk sesuatu seperti posisi yang berada juga dalam kurung yaitu  $\psi(r)$ . Kemudian energi rata-rata akan bergantung kepada parameter-parameter ini:

$$E_{rata}(c) = \frac{\int \psi [c]^* \hat{H} \psi [c] d\tau}{\int \psi [c]^* \psi [c] d\tau}$$

Perlu dicatat bahwa dengan menggunakan prinsip variasi, parameter-parameter terbaik akan menjadi satu dan meminimalkan energi. Sehingga, parameter terbaik akan memenuhi persamaan:

$$\frac{\partial E_{rata}(c)}{\partial c_i} = \frac{\partial}{\partial c_i} \frac{\int \psi [c]^* \hat{H} \psi [c] d\tau}{\int \psi [c]^* \psi [c] d\tau} = 0$$

Sehingga, kita dapat selesaikan untuk parameter-parameter optimum tanpa mengetahui apapun dalam keadaan eigen eksak. Mari kita gunakan persamaan ini kedalam kasus khusus dalam memperlakukan Orbital Molekul- Kombinasi Linier Orbital Atom (MO-LCAO) untuk atom  $H_2^+$ . Fungsi gelombang coba kita adalah:

$$\psi_{el} [c] = c_1 1s_A + c_2 1s_B$$

Dimana  $c = (c_1, c_2)$ . Jika kita ingin menentukan nilai  $c_1$  dan  $c_2$  yang paling baik dan teorema variasi menunjukkan kepadakita bahwa kita perlu meminimalkan energi rata-rata dan mencari nilai yang paling benar. Pertama, kita hitung energi rata-rata. Pembilangnya memberikan nilai:

$$\begin{aligned} \int \psi_{el}^* \hat{H} \psi_{el} d\tau &= \int (c_1 1s_A + c_2 1s_B)^* \hat{H} (c_1 1s_A + c_2 1s_B) d\tau \\ &= c_1^* c_1 \int 1s_A \hat{H}_{el} 1s_A d\tau + c_1^* c_2 \int 1s_A \hat{H}_{el} 1s_B d\tau + c_2^* c_1 \int 1s_B \hat{H}_{el} 1s_A d\tau + c_2^* c_2 \int 1s_B \hat{H}_{el} 1s_B d\tau \\ &\quad \equiv H_{11} \qquad \qquad \qquad \equiv H_{12} \qquad \qquad \qquad \equiv H_{21} \qquad \qquad \qquad \equiv H_{22} \\ &\equiv c_1^* H_{11} c_1 + c_1^* H_{12} c_2 + c_2^* H_{21} c_1 + c_2^* H_{22} c_2 \end{aligned}$$

sedangkan integral normalisasi memberikan:

$$\int \psi_{el}^* \psi_{el} d\tau = \int (c_1 1s_A + c_2 1s_B)^* (c_1 1s_A + c_2 1s_B) d\tau$$

$$\begin{aligned}
&= \dot{c}_1 \dot{c}_1 \int 1s_A 1s_A d\tau + \dot{c}_1 \dot{c}_2 \int 1s_A 1s_B d\tau + \dot{c}_2 \dot{c}_1 \int 1s_B 1s_A d\tau + \dot{c}_2 \dot{c}_2 \int 1s_B 1s_B d\tau \\
&\equiv S_{11} \qquad \qquad \equiv S_{12} \qquad \qquad \equiv S_{21} \qquad \qquad \equiv S_{22} \\
&\equiv \dot{c}_1 \dot{S}_{11} c_1 + \dot{c}_1 \dot{S}_{12} c_2 + \dot{c}_2 \dot{S}_{21} c_1 + \dot{c}_2 \dot{S}_{22} c_2
\end{aligned}$$

Sehingga energi rata-rata menjadi bentuk:

$$E_{rata}(c) = \frac{\dot{c}_1 \dot{H}_{11} c_1 + \dot{c}_1 \dot{H}_{12} c_2 + \dot{c}_2 \dot{H}_{21} c_1 + \dot{c}_2 \dot{H}_{22} c_2}{\dot{c}_1 \dot{S}_{11} c_1 + \dot{c}_1 \dot{S}_{12} c_2 + \dot{c}_2 \dot{S}_{21} c_1 + \dot{c}_2 \dot{S}_{22} c_2}$$

Kita catat bahwa terdapat beberapa penyederhanaan yang dapat kita lakukan terhadap rumus ini: sebagai contoh, karena fungsi  $1s$  kita dinormalisasi oleh  $S_{11} = S_{22} = 1$ . Tanpa penyederhanaan itu ungkapan persamaan akhir kita sedikit agak umum dan membantu kita untuk menggunakannya dalam situasi yang lebih umum.

Sekarang kita ingin meminimalkan energi rata-rata ini dengan memandang kepada  $c_1$  dan  $c_2$ . Dengan mengambil penurunan terhadap  $c_1$  dan mengaturnya menjadi sama dengan nol. Sehingga  $\frac{d}{dc_1}$  tidak memiliki pengaruh terhadap  $\dot{c}_1$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E_{rata}}{\partial c_1} = 0 &= \frac{\dot{c}_1 \dot{H}_{11} + \dot{c}_2 \dot{H}_{21}}{\dot{c}_1 \dot{S}_{11} c_1 + \dot{c}_2 \dot{S}_{12} c_2 + \dot{c}_2 \dot{S}_{21} c_1 + \dot{c}_2 \dot{S}_{22} c_2} \\
&\frac{\dot{c}_1 \dot{H}_{11} c_1 + \dot{c}_2 \dot{H}_{12} c_2 + \dot{c}_2 \dot{H}_{21} c_1 + \dot{c}_2 \dot{H}_{22} c_2}{(\dot{c}_1 \dot{S}_{11} c_1 + \dot{c}_2 \dot{S}_{12} c_2 + \dot{c}_2 \dot{S}_{21} c_1 + \dot{c}_2 \dot{S}_{22} c_2)^2} (\dot{c}_1 \dot{S}_{11} + \dot{c}_2 \dot{S}_{21}) \\
\Rightarrow 0 &= (\dot{c}_1 \dot{H}_{11} + \dot{c}_2 \dot{H}_{21}) - \frac{\dot{c}_1 \dot{H}_{11} c_1 + \dot{c}_2 \dot{H}_{12} c_2 + \dot{c}_2 \dot{H}_{21} c_1 + \dot{c}_2 \dot{H}_{22} c_2}{(\dot{c}_1 \dot{S}_{11} c_1 + \dot{c}_2 \dot{S}_{12} c_2 + \dot{c}_2 \dot{S}_{21} c_1 + \dot{c}_2 \dot{S}_{22} c_2)^2} (\dot{c}_1 \dot{S}_{11} + \dot{c}_2 \dot{S}_{21}) \\
\Rightarrow 0 &= (\dot{c}_1 \dot{H}_{11} + \dot{c}_2 \dot{H}_{21}) - E_{rata} (\dot{c}_1 \dot{S}_{11} + \dot{c}_2 \dot{S}_{21})
\end{aligned}$$

Pemakaian prosedur yang sama untuk  $c_2$  maka:

$$\frac{\partial E_{rata}}{\partial c_1} = 0 = \frac{c_1 \dot{H}_{11} + c_2 \dot{H}_{22}}{c_1 \dot{S}_{11} c_1 + c_2 \dot{S}_{12} c_2 + c_2 \dot{S}_{21} c_1 + c_2 \dot{S}_{22} c_2} - \frac{c_1 \dot{H}_{11} c_1 + c_2 \dot{H}_{12} c_2 + c_2 \dot{H}_{21} c_1 + c_2 \dot{H}_{22} c_2}{(c_1 \dot{S}_{11} c_1 + c_2 \dot{S}_{12} c_2 + c_2 \dot{S}_{21} c_1 + c_2 \dot{S}_{22} c_2)^2} (c_1 \dot{S}_{12} + c_2 \dot{S}_{22})$$

$$\Rightarrow 0 = (c_1 \dot{H}_{12} + c_2 \dot{H}_{22}) - \frac{c_1 \dot{H}_{11} c_1 + c_2 \dot{H}_{12} c_2 + c_2 \dot{H}_{21} c_1 + c_2 \dot{H}_{22} c_2}{(c_1 \dot{S}_{11} c_1 + c_2 \dot{S}_{12} c_2 + c_2 \dot{S}_{21} c_1 + c_2 \dot{S}_{22} c_2)^2} (c_1 \dot{S}_{12} + c_2 \dot{S}_{22})$$

$$\Rightarrow 0 = (c_1 \dot{H}_{12} + c_2 \dot{H}_{22}) - E_{rata} (c_1 \dot{S}_{12} + c_2 \dot{S}_{22})$$

Kita perhatikan bahwa persamaan di atas terlihat sangat mengikat seperti operasi vektor matriks. Sehingga kita kemudian dapat membuat persamaan ini menjadi eksplisit jika mendefinisikan matriks hamiltonian sebagai:

$$H \equiv \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \int 1s_A \hat{H}_e 1s_A d\tau & \int 1s_A \hat{H}_e 1s_B d\tau \\ \int 1s_B \hat{H}_e 1s_A d\tau & \int 1s_B \hat{H}_e 1s_B d\tau \end{pmatrix}$$

Dan matriks yang tumpang tindih (overlap) menjadi:

$$S \equiv \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \int 1s_A 1s_A d\tau & \int 1s_A 1s_B d\tau \\ \int 1s_B 1s_A d\tau & \int 1s_B 1s_B d\tau \end{pmatrix}$$

Lalu, nilai yang paling memungkinkan untuk  $c_1$  dan  $c_2$  yang memenuhi dari ungkapan persamaan matriks yaitu:

$$(c_1 \quad c_2) \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} = E_{rata} (c_1 \quad c_2) \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$$

Yang berarti bahwa:

$$\frac{\partial E_{rata}}{\partial c} = 0 \Leftrightarrow c^\dagger \bullet H = E_{rata} c^\dagger \bullet S$$

Persamaan ini belum terlihat familiar, sehingga kita perlu menguraikannya secara perlahan-lahan. Pertama, perlu diperhatikan bahwa jika kita mengambil turunan terhadap  $c_1^*$  dan  $c_2^*$  dan bukan terhadap  $c_1$  dan  $c_2$ , kita akan memiliki persamaan yang sangat berbeda yaitu:

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E_{rata} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

Atau

$$\frac{\partial E_{rata}}{\partial c^*} = 0 \Leftrightarrow H \bullet c = E_{rata} S \bullet c$$

Pengambilan turunan terhadap  $c_1^*$  dan  $c_2^*$  secara matematika sesuai dengan penurunan terhadap  $c_1$  dan  $c_2$  karena kita tidak mungkin merubah nilai  $c_1$  tanpa merubah kompleks konjugatnya dan sebaliknya. Sehingga, kedua persamaan matriks di atas harusnya ekuivalen, dan kedua versi penurunan itu seharusnya familiar. Selanjutnya kita dapat membuat persamaan di atas menjadi lebih familiar jika kita berfikir tentang limit dimana  $1s_A$  dan  $1s_B$  bersifat ortogonal (sebagaimana jika kita mengandaikan jika atom-atom terpisah sangat-sangat jauh). Lalu kita akan memiliki matriks overlap sebagai berikut:

$$S \equiv \begin{pmatrix} \int 1s_A 1s_A d\tau & \int 1s_A 1s_B d\tau \\ \int 1s_B 1s_A d\tau & \int 1s_B 1s_B d\tau \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 1$$

Maka, dalam suatu basis ortogonal matriks overlap hanya merupakan matriks identitas dan dapat kita tuliskan sebagai

$$\frac{\partial E_{rata}}{\partial c^*} = 0 \Leftrightarrow H \bullet c = E_{rata} c$$



Sekarang persamaan ini dalam bentuk dimana kita benar-benar mengenalnya sebagai suatu persamaan dari nilai eigen. Karena hubungan yang sangat dekat dengan persamaan nilai eigen standar maka persamaan di atas dikenal sebagai **persamaan nilai eigen umum**. Dalam kasus yang lebih umum, kita lihat bahwa hasil yang sangat tepat membuat **teorema Variasi memungkinkan kita untuk merubah operator aljabar menjadi aljabar matriks**. Pencarian terhadap energi keadaan LCAO yang paling rendah sangat sesuai dengan pencarian terhadap nilai eigen dari matriks Hamiltonian  $H$ . Kemudian pencarian terhadap  $c_1$  dan  $c_2$  yang tepat ekuivalen dengan pencarian terhadap vektor eigen terendah yang dimiliki oleh  $H$ .

Jika kita lanjutkan dengan pemakaian apa yang telah kita pelajari terhadap pencarian koefisien orbital molekul  $c_1$  dan  $c_2$  untuk  $H_2^+$ . Pada titik ini akan kita pakai penyederhanaan-penyederhanaan. Elemen matriks selain diagonal dari  $H$  akan identik karena Hamiltoniannya bersifat Hermitian dan orbitalnya harus riil:

$$\int 1s_A \hat{H}_{el} 1s_B d\tau = \left( \int 1s_B \hat{H}_{el} 1s_A d\tau \right)^* = \int 1s_B \hat{H}_{el} 1s_A d\tau \equiv V_{12}$$

Yang berarti bahwa elemen diagonalnya juga sama, tetapi untuk beberapa alasan. Elemen diagonal merupakan energi rata-rata dari keadaan  $1s_A$  dan  $1s_B$ . Jika energi ini berbeda, akan mengisyaratkan bahwa terdapat elektron pada satu sisi  $H_2^+$  lebih favorabel energik dibandingkan dengan elektron pada sisi yang lain, yang menimbulkan teka teki. Sehingga kita simpulkan bahwa:

$$\int 1s_A \hat{H}_{el} 1s_A d\tau = \int 1s_B \hat{H}_{el} 1s_B d\tau \equiv \epsilon$$

Akhirnya, kita ingat bahwa  $1s_A$  dan  $1s_B$  dinormalisasi, sehingga

$$\int 1s_A 1s_A d\tau = \int 1s_B 1s_B d\tau = 1$$

Dan karena orbital  $1s$  adalah riil, maka elemen diagonal dari  $S$  tentu demikian juga:

$$S_{12} = \int 1s_A 1s_B d\tau = \int 1s_B 1s_A d\tau = S_{21}$$

Bersamaan dengan penyederhanaan ini memberikan nilai eigen umum berbentuk persamaan:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon & V_{12} \\ V_{21} & \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E_{rata} \begin{pmatrix} 1 & S_{12} \\ S_{21} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

Semua program matematika yang tersedia pada komputer anda dapat digunakan seperti (Matlab, Mathematica, Maple, MatCad, ...) akan mampu menyelesaikan nilai eigen dan vektor eigen, dan untuk kasus yang lebih rumit disarankan untuk menggunakan program komputer tersebut. Namun, pada soal-soal yang sederhana dapat diselesaikan dengan coba-coba dan mengujinya. Berdasarkan intuisi fisika di atas, maka disarankan bahwa vektor eigen yang benar akan memiliki nilai  $c_1 = c_2$ . Dengan menggunakan nilai ini kita peroleh:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \varepsilon & V_{12} \\ V_{21} & \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} &= E_{rata} \begin{pmatrix} 1 & S_{12} \\ S_{21} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} (\varepsilon + V_{12}) & c_1 \\ (\varepsilon + V_{12}) & c_1 \end{pmatrix} &= E_{rata} \begin{pmatrix} 1 + S_{12} & c_1 \\ 1 + S_{12} & c_1 \end{pmatrix} \\ \Rightarrow E_{rata} &= \frac{\varepsilon + V_{12}}{1 + S_{12}} \equiv E_{\sigma} \end{aligned}$$

Sehingga, fungsi coba kita akan benar dan satu vektor eigen dari metrik ini memiliki nilai  $c_1 = c_2$ . Vektor eigen ini merupakan keadaan ikatan- $\sigma$  dari  $H_2^+$ , dan dapat kita tuliskan orbital yang cocok sebagai:

$$\psi_{el}^{\sigma} = c_1 1s_A + c_2 1s_B = c_1 1s_A + c_2 1s_B \propto 1s_A + 1s_B$$

Dimana pada bagian akhir persamaan dicatat bahwa  $c_1$  hanyalah merupakan konstanta normalisasi. Dalam kimia dasar telah diketahui keberadaan orbital ikatan- $\sigma$  dan persamaan ini merupakan dasar pemikiran asal mula terbentuknya ikatan itu.

Dengan metoda Variasi kita dapat juga memperoleh orbital anti-ikatan  $\sigma^*$  dengan prosedur yang sama. Karena matriks yang terbentuk merupakan matriks  $2 \times 2$  yang memiliki dua nilai eigen yang unik yaitu energi paling rendah yang merupakan tingkat energi ikatan dan tingkat energi yang lebih besar sebagai anti-ikatan. Kita dapat menduga lagi bentuk vektor eigen anti-ikatan, karena kita mengetahui dari karakteristik bentuk  $\frac{+}{-}$ , sehingga kita duga penyelesaiannya adalah  $c_1 = -c_2$ :

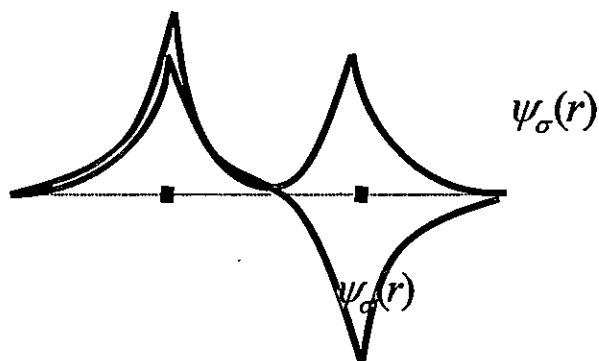
$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \varepsilon & V_{12} \\ V_{21} & \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ -c_1 \end{pmatrix} &= E_{rata} \begin{pmatrix} 1 & S_{12} \\ S_{21} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ -c_1 \end{pmatrix} \\ \Rightarrow \begin{pmatrix} (\varepsilon - V_{12}) & c_1 \\ -(\varepsilon - V_{12}) & c_1 \end{pmatrix} &= E_{rata} \begin{pmatrix} 1 - S_{12} & c_1 \\ -(1 - S_{12}) & c_1 \end{pmatrix} \\ \Rightarrow E_{rata} &= \frac{\varepsilon - V_{12}}{1 - S_{12}} \equiv E_{\sigma} \end{aligned}$$

Sehingga, lebih jauh dapat dinyatakan bahwa vektor eigen yang lain memiliki nilai  $c_1 = -c_2$ . Orbital anti-ikatan diberikan oleh persamaan

$$\psi_{el}^{\sigma^*} = c_1 1s_A + c_2 1s_B = c_1 1s_A - c_2 1s_B \propto 1s_A - 1s_B$$

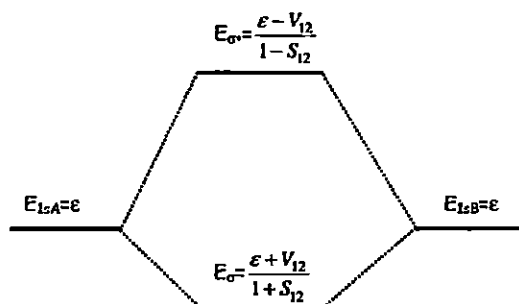
Kembali disini kita nyatakan bahwa  $c_1$  hanya merupakan konstanta normalisasi. Memasukkan bentuk ini ke dalam persamaan untuk orbital ikatan dan

anti-ikatan maka dapat kita gambarkan secara sederhana bentuk orbital molekul dari  $H_2^+$  menjadi Gambar 10.4.



Gambar 10.2-1. Orbital molekul ikatan dan anti ikatan pada molekul  $H_2^+$

Kita bisa memasukkan energi yang diperoleh pada persamaan di atas ke dalam diagram orbital molekul sederhana untuk molekul  $H_2^+$  yaitu:



Gambar 10.2-2. Diagram energi orbital molekul molekul  $H_2^+$ , energi yang lebih rendah merupakan energi ikatan sedangkan yang lebih tinggi disebut energi anti-ikatan

Pada sisi kiri dan kanan, kita gambar tingkat energi dari orbital atom  $1s_A$  dan  $1s_B$  yang membangun orbital molekul  $\sigma$  dan  $\sigma^*$  pada pusatnya. Perlu dicatat bahwa jika atom cukup dekat, energi orbital ikatan dan anti-ikatan bergeser kepada nilai yang berbeda:

$$E_{\sigma^*} - E_{1s} = \frac{\varepsilon - V_{12}}{1 - S_{12}} - \varepsilon = \frac{\varepsilon - V_{12}}{1 - S_{12}} - \frac{\varepsilon(1 - S_{12})}{1 - S_{12}} = \frac{\varepsilon S_{12} - V_{12}}{1 - S_{12}}$$

$$E_{1s} - E_{\sigma} = \varepsilon - \frac{\varepsilon - V_{12}}{1 - S_{12}} = \frac{\varepsilon(1 - S_{12}) - \varepsilon + V_{12}}{1 - S_{12}} = \frac{\varepsilon S_{12} - V_{12}}{1 - S_{12}}$$

Sekarang terlihat bahwa  $S_{12}$  merupakan tumpang tindih dari dua orbital  $1s$ .

Karena orbital tidak pernah bernilai negatif maka nilai  $S_{12}$  harus merupakan bilangan positif. Karena itu pembilang pertama lebih besar dari pembilang kedua, dari sini kita simpulkan bahwa:

$$E_{\sigma^*} - E_{1s} = \frac{\varepsilon S_{12} - V_{12}}{1 - S_{12}} > \frac{\varepsilon S_{12} - V_{12}}{1 + S_{12}} = E_{1s} - E_{\sigma}$$

Sehingga, orbital anti ikatan akan lebih didestabilisasi daripada orbital ikatan. Kesimpulan ini tidak semuanya berlaku untuk molekul diatomik, namun cukup baik untuk menjadi rujukan. Efek ini disebut sebagai pengaruh tolakan overlap. Perlu dicatat bahwa dalam kasus tertentu dimana tumpang tindih orbital dapat diabaikan, nilai  $S_{12}$  dianggap nol dan kedua orbital memiliki rentang yang sama. Akan tetapi jika nilai dari  $S_{12}$  tidak nol maka terjadi dua pengaruh yang menggeser energi yaitu: interaksi fisik antara atom-atom dan kenyataan bahwa orbital  $1s_A$  dan  $1s_B$  tidak ortogonal. Apabila didiagonalkan maka nilai operator  $H$  harus dicatat untuk kedua pengaruh ini, batas keortogonalan ini memaksa orbital untuk menaikkan energinya.

-0-

*Jika belum ajar → harus ada contoh perhitungannya dan soal lainnya*

## Referensi

- [1] "The Expanding Universe: From the Big Bang to Today," *Space.com*. [Online]. Available: <http://www.space.com/52-the-expanding-universe-from-the-big-bang-to-today.html>. [Accessed: 18-Dec-2013].
- [2] "Particle Physics For Non Physicists," *Goodreads*. [Online]. Available: [http://www.goodreads.com/work/best\\_book/1299264-particle-physics-for-non-physicists-a-tour-of-the-microcosmos](http://www.goodreads.com/work/best_book/1299264-particle-physics-for-non-physicists-a-tour-of-the-microcosmos). [Accessed: 18-Dec-2013].
- [3] S. Hawking, *Black holes and baby universes and other essays*. New York: Bantam Books, 1994.
- [4] "Stephen Hawking - Home." [Online]. Available: <http://www.hawking.org.uk/>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [5] S. Hawking, *A brief history of time*. New York: Bantam Books, 1998.
- [6] "Isaac Newton Biography - Facts, Birthday, Life Story - Biography.com." [Online]. Available: <http://www.biography.com/people/isaac-newton-9422656>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [7] "Spaceflight - News About Space Travel and Exploration | Space.com." [Online]. Available: <http://www.space.com/spaceflight/>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [8] Arthur Beiser, *Concepts of Modern Physics*. .
- [9] S. Rabin, "Nicolaus Copernicus," in *The Stanford Encyclopedia of Philosophy*, Fall 2010., E. N. Zalta, Ed. 2010.
- [10] "Giordano Bruno (Italian philosopher)," *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/82258/Giordano-Bruno>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [11] "Galileo (Italian philosopher, astronomer and mathematician)," *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/224058/Galileo>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [12] C. H. Blanchard, *Introduction to Modern Physics*, 2d ed. edition. Prentice-Hall, 1969.
- [13] T. Brahe, "The Observations of Tycho Brahe." [Online]. Available: <http://csep10.phys.utk.edu/astr161/lect/history/brahe.html>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [14] "Urbain-Jean-Joseph Le Verrier (French astronomer)," *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available:

- <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/333461/Urbain-Jean-Joseph-Le-Verrier>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [15] J. D. Walecka, *Introduction to modern physics: theoretical foundations*. Singapore [u.a.: World Scientific, 2008.
- [16] “James Clerk Maxwell.” .
- [17] “Charles-Augustin de Coulomb (French physicist),” *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/140071/Charles-Augustin-de-Coulomb>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [18] “Jean-Baptiste Biot (French physicist),” *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/66209/Jean-Baptiste-Biot>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [19] “Félix Savart,” *Wikipedia, the free encyclopedia*. 03-Jan-2014.
- [20] A. A. Sokolov, I. M. Ternov, and V. C. Zhukovskii, *Quantum Mechanics*. Imported Pubn, 1986.
- [21] W. Heisenberg, *Physics & philosophy: the revolution in modern science*. New York: HarperPerennial, 2007.
- [22] “Heinrich Hertz (German physicist),” *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/263899/Heinrich-Hertz>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [23] “Brownian motion (physics),” *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/81815/Brownian-motion>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [24] *Einstein His Life and Universe*. Simon & Schuster, 2012.
- [25] “Max von Laue (German physicist),” *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/332240/Max-von-Laue>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [26] “Francis William Aston (British physicist and chemist),” *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/39838/Francis-William-Aston>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [27] L. Pauling and E. B. Wilson, *Introduction to quantum mechanics: with applications to chemistry*. New York, N.Y.: Dover Publications, 1985.
- [28] T. Cohen, “Quantum Mechanics - Vol 1 - Cohen-Tannoudji,” *Scribd*. [Online]. Available: <http://www.scribd.com/doc/97319389/Quantum-Mechanics-Vol-1-Cohen-Tannoudji>. [Accessed: 09-Dec-2013].

- [29] A. Szabo and N. S. Ostlund, *Modern quantum chemistry: introduction to advanced electronic structure theory*. Mineola, N.Y.: Dover Publications, 1996.
- [30] "Peter Debye (American physical chemist)," *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/154823/Peter-Debye>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [31] "Johannes Diederik van der Waals (Dutch physicist)," *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/633658/Johannes-Diederik-van-der-Waals>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [32] "S. C. Wang or Shou Chin Wang 王守竞 (1904-1984) - Kai Zhang." [Online]. Available: <https://sites.google.com/site/kaizhangstatmech/chinese-scientists/scwang>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [33] E. Lewars, *Computational chemistry: introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics*. Dordrecht [Netherlands]; London; New York: Springer, 2011.
- [34] "Max Born (German physicist)," *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/74253/Max-Born>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [35] "J. Robert Oppenheimer (American physicist)," *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/430220/J-Robert-Oppenheimer>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [36] J. E. House, "Fundamentals of Quantum Chemistry," *kalahari.com*. [Online]. Available: [http://www.kalahari.com/Books/Fundamentals-of-Quantum-Chemistry\\_p\\_26316025](http://www.kalahari.com/Books/Fundamentals-of-Quantum-Chemistry_p_26316025). [Accessed: 09-Dec-2013].
- [37] "Douglas R. Hartree (English physicist and mathematician)," *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/256208/Douglas-R-Hartree>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [38] "Vladimir Aleksandrovich Fock (Russian mathematical physicist)," *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/1474954/Vladimir-Aleksandrovich-Fock>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [39] "Gilbert N. Lewis (American chemist)," *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/338142/Gilbert-N-Lewis>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [40] I. N. Levine, *Quantum chemistry*. Boston [u.a.]: Pearson, 2014.



- [41] D. A. McQuarrie, *Quantum chemistry*. Sausalito, Calif.: University Science Books, 2008.
- [42] R. J. Silbey, R. A. Alberty, and M. G. Bawendi, *Physical chemistry*. Hoboken, NJ: Wiley, 2005.
- [43] G. C. Schatz and M. A. Ratner, *Quantum mechanics in chemistry*. Mineola, NY: Dover Publ., 2002.
- [44] P. F. Bernath, *Spectra of atoms and molecules*. New York: Oxford University Press, 2005.
- [45] S. M. Blinder, *Introduction to quantum mechanics: in chemistry, materials science, and biology*. Amsterdam; Boston: Elsevier, 2004.
- [46] *Introduction to Perturbation Theory in Quantum Mechanics*. .
- [47] "Gaussian function," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 22-Dec-2013.
- [48] I. N. Levine, *Physical chemistry*. Boston: McGraw-Hill, 2009.
- [49] "The Nobel Prize in Chemistry 2013." [Online]. Available: [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/2013/](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2013/). [Accessed: 16-Dec-2013].
- [50] "Aether (classical element)," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 09-Jan-2014.
- [51] "Michael Faraday." [Online]. Available: <http://www.phy.pmf.unizg.hr/~dpaar/fizicari/xfaraday.html>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [52] "Michelson–Morley experiment," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 06-Jan-2014.
- [53] "Hendrik Lorentz," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 16-Jan-2014.
- [54] "Albert Einstein - Biographical." [Online]. Available: [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1921/einstein-bio.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1921/einstein-bio.html). [Accessed: 16-Jan-2014].
- [55] "J.J. Thomson (1856-1940)." [Online]. Available: <http://www.aip.org/history/electron/jjthomson.htm>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [56] "William Crookes," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 15-Jan-2014.
- [57] "Robert Andrews Millikan (American physicist)," *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/382902/Robert-Andrews-Millikan>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [58] "Harvey Fletcher - GHN: IEEE Global History Network." [Online]. Available: [http://www.ieeeghn.org/wiki/index.php/Harvey\\_Fletcher](http://www.ieeeghn.org/wiki/index.php/Harvey_Fletcher). [Accessed: 16-Jan-2014].
- [59] "John Dalton," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 15-Jan-2014.

- [60] "Ernest Rutherford," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 16-Jan-2014.
- [61] "Hans Geiger," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 03-Jan-2014.
- [62] "Ernest Marsden," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 02-Jan-2014.
- [63] "The Atom." [Online]. Available: <http://2012books.lardbucket.org/books/principles-of-general-chemistry-v1.0m/s05-05-the-atom.html>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [64] "Johannes Rydberg," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 26-Déc-2013.
- [65] "John William Strutt, 3rd Baron Rayleigh," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 09-Jan-2014.
- [66] "Ludwig Eduard Boltzmann (Austrian physicist)," *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/72401/Ludwig-Eduard-Boltzmann>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [67] "James Hopwood Jeans," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 09-Jan-2014.
- [68] E. W. Weisstein, "Planck, Max (1858-1947) -- from Eric Weisstein's World of Scientific Biography." [Online]. Available: <http://scienceworld.wolfram.com/biography/Planck.html>. [Accessed: 15-Dec-2013].
- [69] "Christiaan Huygens," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 15-Jan-2014.
- [70] "Thomas Young (British physician and physicist)," *Encyclopedia Britannica*. [Online]. Available: <http://global.britannica.com/EBchecked/topic/653983/Thomas-Young>. [Accessed: 16-Jan-2014].
- [71] "Arthur Compton," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 14-Jan-2014.
- [72] "Louis de Broglie - Biographical." [Online]. Available: [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1929/broglie-bio.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1929/broglie-bio.html). [Accessed: 16-Jan-2014].
- [73] "Clinton Davisson - Biographical." [Online]. Available: [http://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/physics/laureates/1937/davisson-bio.html](http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1937/davisson-bio.html). [Accessed: 16-Jan-2014].
- [74] "Lester Germer," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 03-Jan-2014.
- [75] "Werner Heisenberg," *Wikipedia, the free encyclopedia*. 13-Jan-2014.

# Indeks

- aether, 22, 23
- bilangan kuantum, 90
- cahaya, 13, 16, 22, 23, 33, 34, 36, 39, 40, 42, 43, 44, 45, 46, 47
- cincin newton, 43
- Compton, 44
- Coulomb, 12, 122
- de Broglie, 45, 47, 51, 52, 53
- efek fotolistrik, 39, 41, 45
- Efek Fotolistrik, 39
- Einstein, 24, 39, 45
- elektrodinamika, 9, 12
- elektron, 26, 27, 29, 32, 33, 35, 39, 40, 41, 44, 45, 46, 47, 48, 77, 84, 90, 91, 96, 99, 100, 101, 102, 104, 105, 106, 109, 110, 111, 112, 113, 115, 116, 118, 119, 121
- energi
  - energi potensial, 68, 69, 91, 96
- gaya Coulomb, 29, 32, 91
- gelombang elektromagnetik, 13, 42
- Gerak Brown, 14
- ikatan, 18, 68, 110, 115, 127
- ikatan valensi, 18
- ilmu hayati, 3
- interferensi gelombang, 45
- kimia organik, 18
- konstanta Boltzmann, 36
- Max Planck, 37, 39
- medan
  - medan gravitasi, 10, 12, 13, 22, 23, 25, 42, 43, 52, 54, 59, 65, 91, 102, 103, 126
- mekanika kuantum, 9
- molekul organik, 18
- partikel, 9
- partikel alfa, 30
- Persamaan Schrödinger, 49, 52, 71
- radiasi, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 42, 43
- Rayleigh, 36, 37, 38
- Rayleigh-Jeans, 36
- simulasi komputer, 3
- spektrum kontinu, 34
- statistik Maxwell-Boltzmann, 14
- superposisi gelombang, 43
- teori kinetika gas, 12, 14
- teori Maxwell, 13
- termodinamika, 3, 18, 19
- transformasi, 23, 105
- UV-Catastrophe, 36
- Van der Waals, 16

## PERSETUJUAN REVIEWER

Judul buku : **Kimia Kuantum dan Spektroskopi Molekul, Dasar-Dasar Teoritis dan Komputasi Kimia**

Penulis : **Deski Beri, S.Si, M.Si**

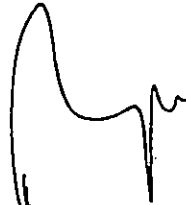
Program Studi : **Kimia**

Fakultas : **Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam**

Buku ini telah direview dan disetujui oleh reviewer

Padang, Januari 2014

Reviewer



**Budhi Oktavia, S.Si, M.Si, Ph.D**  
NIP. 197210241998031001