Catatan Mekanika Kuantum 1

Peluang dan Nilai Ekspektasi

Acuan utama Gasiorowicz, *Quantum Physics* Ed. 3, Bab 2, Subbab 6 – 7

A. Rapat peluang dan fluks peluang

- Beberapa catatan mengenai fungsi gelombang $\psi(x,t)$:
  - $\psi(x,t)$ merepresentasikan keadaan sebuah partikel atau sebuah sistem kuantum.
  - $|\psi(x,t)|^2$ berhubungan dengan peluang mendapatkan partikel di posisi x pada waktu t.
  - Secara umum, $\psi(x,t)$ merupakan fungsi kompleks.
  - $\psi(x,t)$ memenuhi prinsip superposisi (dapat dijumlahkan dengan mengikuti kaidah penjumlahan gelombang)
- Peluang mendapatkan partikel berada di posisi x sampai $x + dx$ pada waktu t adalah:

$$|\psi(x,t)|^2 dx\,. \tag{1}$$

Dengan demikian, $P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ merupakan rapat peluang (*probability density*).[1] Peluang mendapatkan partikel di sembarang posisi di daerah $x = a$ sampai $x = b$ adalah:

$$\int_a^b P(x,t)dx = \int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx\,. \tag{2}$$

Peluang mendapatkan partikel di sembarang posisi di daerah $x = a$ sampai $x = b$ serta di daerah $x = c$ sampai $x = d$ adalah:

$$\int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx + \int_c^d |\psi(x,t)|^2 dx\,. \tag{3}$$

Peluang mendapatkan partikel di sembarang posisi di seluruh jagad 1 dimensi yang terbentang dari $-\infty$ sampai ∞ adalah:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1\,. \tag{4}$$

[1]Sekedar pembanding, jika kita punya seutas kawat dengan rapat massa linier $\rho(x)$, maka massa secuil kawat tersebut dari x sampai $x + dx$ adalah $\rho(x)dx$.

Peluang pada persamaan (4) disebut peluang total, yaitu peluang mendapatkan partikel di sembarang posisi di daerah tempat partikel itu ada (*exist*). Sekedar ilustrasi, jika alam semesta hanya bumi yang kita tempati, maka peluang menemukan sesorang di sembarang lokasi di seluruh bumi itu disebut peluang total, yang sama dengan jumlah peluang menemukannya di Indonesia, di Jepang, di Jerman, dan lain-lain, sehingga mencakup seluruh bumi.

Rapat peluang $P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ harus bersifat kontinyu di setiap posisi x. Dengan demikian, fungsi gelombang $\psi(x,t)$ juga harus bersifat kontinyu.

- Persamaan (1) – (4) untuk menghitung peluang berlaku untuk fungsi gelombang $\psi(x,t)$ dengan norm sama dengan 1 (ingat kembali kuliah Fisika Matematika mengenai fungsi khusus). Norm $|N|$ fungsi gelombang $\psi(x,t)$ diperoleh sebagai berikut dan bernilai berhingga:

$$|N|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx < \infty \,. \tag{5}$$

Persamaan (5), dengan demikian, menuntut juga bahwa fungsi gelombang $\psi(x,t)$ harus bersifat *square integrable*.

Secara umum, untuk fungsi gelombang dengan norm tidak sama sama dengan 1, peluang dihtung sebagai berikut:

- peluang mendapatkan partikel berada di posisi x sampai $x + dx$ pada waktu t:

$$\frac{|\psi(x,t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx} = \frac{|\psi(x,t)|^2 dx}{|N|^2} \,. \tag{6}$$

- peluang mendapatkan partikel di sembarang posisi di daerah $x = a$ sampai $x = b$ adalah:

$$\frac{\int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx} = \frac{\int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx}{|N|^2} \,. \tag{7}$$

- peluang mendapatkan partikel di sembarang posisi di daerah $x = a$ sampai $x = b$ serta di daerah $x = c$ sampai $x = d$ adalah:

$$\frac{\int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx + \int_c^d |\psi(x,t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx} = \frac{\int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx + \int_c^d |\psi(x,t)|^2 dx}{|N|^2} \,. \tag{8}$$

- peluang mendapatkan partikel di sembarang posisi di seluruh jagad adalah:

$$\frac{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx}{|N|^2} = 1 \,. \tag{9}$$

Untuk kemudahan, biasanya (tidak harus) orang pilih $|N| = 1$.

- Kita ambil, sebagai contoh, persamaan (7):

$$\frac{\int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx} = \frac{1}{|N|^2} \int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx = \int_a^b \left| N^{-1} \psi(x,t) \right|^2 dx \,. \tag{10}$$

Pada persamaan (10), N^{-1} disebut konstanta normalisasi, yang dapat berupa bilangan kompleks, dan $N^{-1}\psi(x,t)$ disebut sebagai fungsi gelombang ternomalisasi. Norm Untuk fungsi gelombang ternormalisasi bernilai 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = |N|^2 \neq 1\,, \quad (\psi(x,t) \text{ tak ternormalisasi}) \tag{11}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |N^{-1}\psi(x,t)|^2 dx = \frac{1}{|N|^2}\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1\,, \quad (N^{-1}\psi(x,t) \text{ ternormalisasi})\,. \tag{12}$$

- Kita ambil kembali, sebagai contoh, persamaan (7). Jika kita kalikan $\psi(x,t)$ dengan sembarang nilai A (A dapat berupa bilangan kompleks), diperoleh:

$$\frac{\int_a^b |A\psi(x,t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |A\psi(x,t)|^2 dx} = \frac{|A|^2\int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx}{|A|^2\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx} = \frac{\int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,t)|^2 dx}\,. \tag{13}$$

Dengan demikian, $\psi(x,t)$ dan $A\psi(x,t)$ kedua-duanya merepresentasikan keadaan yang sama. Begitu pula, kedua superposisi fungsi gelombang berikut:

$$\psi_1(x,t) + \psi_2(x,t) \quad \text{dan} \quad A\psi_1(x,t) + A\psi_2(x,t) = A\left[\psi_1(x,t) + \psi_2(x,t)\right] \tag{14}$$

serta fungsi gelombang tak ternormalisasi dan fungsi gelombang ternormalisasi:

$$\psi(x,t) \quad \text{dan} \quad N^{-1}\psi(x,t) \tag{15}$$

merepresentasikan keadaan yang sama.

- Ambillah superposisi fungsi gelombang $\psi_1(x,t)$ dan $\psi_2(x,t)$ sebagai berikut:

$$\alpha\psi_1(x,t) + \beta\psi_2(x,t) = \alpha\left[\psi_1(x,t) + \frac{\beta}{\alpha}\psi_2(x,t)\right]\,. \tag{16}$$

Pada persamaan (16), $\frac{\beta}{\alpha}$ disebut fase relatif keadaan $\psi_2(x,t)$ terhadap keadaan $\psi_1(x,t)$, yang bentuknya dapat dinyatakan sebagai $e^{i\phi}$ (ingat kembali fase gelombang), sehingga $\left|\frac{\beta}{\alpha}\right| = |e^{i\phi}| = 1$. Kita hitung kuadrat superposisi fungsi gelombang itu:

$$\begin{aligned}
|\alpha\psi_1(x,t) + \beta\psi_2(x,t)|^2 &= |\alpha|^2 \left|\psi_1(x,t) + \frac{\beta}{\alpha}\psi_2(x,t)\right|^2 \\
&= |\alpha|^2 \left[\psi_1^*(x,t) + \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^* \psi_2^*(x,t)\right]\left[\psi_1(x,t) + \frac{\beta}{\alpha}\psi_2(x,t)\right] \\
&= |\alpha|^2 \Bigg[|\psi_1(x,t)|^2 + \left|\frac{\beta}{\alpha}\right|^2 |\psi_2(x,t)|^2 \\
&\qquad + \frac{\beta}{\alpha}\psi_1^*(x,t)\psi_2(x,t) + \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^* \psi_2^*(x,t)\psi_1(x,t)\Bigg] \\
&= |\alpha|^2 \Bigg[|\psi_1(x,t)|^2 + |\psi_2(x,t)|^2 \\
&\qquad + \frac{\beta}{\alpha}\psi_1^*(x,t)\psi_2(x,t) + \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^* \psi_2^*(x,t)\psi_1(x,t)\Bigg]\,.
\end{aligned} \tag{17}$$

Kita lihat dua suku pertama pada persamaan (17) tidak bergantung pada fase relatif, namun dua suku terakhir, yang disebut suku interferensi, bergantung pada fase relatif. Dengan demikian, fase relatif berbeda memberikan kuadrat superposisi fungsi gelombang yang berbeda. Ini menunjukkan pentingnya fase relatif. Keadaan yang direpresentasikan oleh fungsi gelombang pada persamaan (16) ditentukan juga oleh fase relatif. Fase relatif berbeda berkaitan dengan keadaan yang berbeda.

Apabila $\psi_1(x,t)$ dan $\psi_2(x,t)$ fungsi riil, persamaan (17) mnejadi:

$$\begin{aligned}|\alpha\psi_1(x,t)+\beta\psi_2(x,t)|^2 &= |\alpha|^2\Big[\psi_1^2(x,t)+\psi_2^2(x,t) \\ &\qquad + e^{i\phi}\psi_1(x,t)\psi_2(x,t)+e^{-i\phi}\psi_2(x,t)\psi_1(x,t)\Big] \\ &= |\alpha|^2\Big[\psi_1^2(x,t)+\psi_2^2(x,t)+2\psi_1(x,t)\psi_2(x,t)\cos\phi\Big]. \end{aligned} \tag{18}$$

- Fungsi gelombang merepresentasikan kadaan partikel, yang tidak diam di tempat, melainkan berpindah, sehingga peluang mendapatkan partikel pun bergeser. Dengan demikian, selain rapat peluang $P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ terdapat juga rapat arus atau fluks peluang $j(x,t)$, yang keduanya memenuhi persamaan kontinyuitas (ingat kembali, contoh, pembahasan mengenai fluida), yang tidak lain merepresentasikan kekekalan peluang total:

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t)+\frac{\partial}{\partial x}j(x,t)=0\,. \tag{19}$$

Dari persamaan kontinyuitas (19) kita dapatkan fluks peluang $j(x,t)$:[2]

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) &= \frac{\partial}{\partial t}\left[\psi^*(x,t)\psi(x,t)\right] \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x,t)\right)\psi(x,t)+\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2im}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*(x,t)-\frac{1}{i\hbar}V(x)\psi^*(x,t)\right)\psi(x,t) \\ &\quad + \psi^*(x,t)\left(-\frac{\hbar}{2im}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)+\frac{1}{i\hbar}V(x)\psi(x,t)\right) \\ &= \left(\frac{\hbar}{2im}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*(x,t)\right)\psi(x,t)+\psi^*(x,t)\left(-\frac{\hbar}{2im}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)\right) \\ &= \frac{\hbar}{2im}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*(x,t)\right)\psi(x,t)-\frac{\hbar}{2im}\psi^*(x,t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)\end{aligned}$$

[2] Ingat kembali persamaan Schrödinger:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t)+V(x)\psi(x,t) \tag{20}$$

dan konjugat kompleksnya (ingat bahwa $V(x)$ adalah energi potensial, yang berarti riil):

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi^*(x,t)+V(x)\psi^*(x,t)\,. \tag{21}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{\hbar}{2im}\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t)\right)\right)\psi(x,t) - \frac{\hbar}{2im}\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\right) \\
&= \frac{\hbar}{2im}\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t)\right)\psi(x,t)\right] - \frac{\hbar}{2im}\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t)\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\right) \\
&\quad - \frac{\hbar}{2im}\frac{\partial}{\partial x}\left[\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\right] + \frac{\hbar}{2im}\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t)\right)\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\right) \\
&= \frac{\hbar}{2im}\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t)\right)\psi(x,t)\right] - \frac{\hbar}{2im}\frac{\partial}{\partial x}\left[\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\right] \\
&= \frac{\hbar}{2im}\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t)\right)\psi(x,t) - \psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\right] \\
\rightarrow j(x,t) &= \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) - \left(\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t)\right)\psi(x,t)\right] \qquad (22)
\end{aligned}
$$

Seperti rapat peluang $P(x,t)$, fluks peluang $j(x,t)$ juga harus kontinyu. Dengan demikian, bukan hanya fungsi gelombang $\psi(x,t)$ yang harus kontinyu, turunan pertama fungsi gelombang $\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)$ juga harus kontinyu.

- Anggap jagad partikel terbatas pada $-R \leqslant x \leqslant R$. Di luar jagad ($|x| > R$), tidak ada partikel, yang berarti rapat peluang sama dengan nol:

$$
P(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = 0\,, \quad (|x| > R)\,. \qquad (23)
$$

Sedikit di luar jagad pun rapat peluang bernilai 0:

$$
\lim_{\epsilon\to 0}|\psi(\pm R \pm \epsilon, t)|^2 = |\psi(x,t)|^2 = 0\,, \quad (|x| > R)\,. \qquad (24)
$$

Sesuai sifat kontinyu fungsi gelombang $\psi(x,t)$, dengan dmikian, di ujung-ujung jagad fungsi gelombang sama dengan nol; untuk jagad $-R \leqslant x \leqslant R$, $\psi(\pm R, t) = 0$; untuk jagad $-\infty \leqslant x \leqslant \infty$, $\psi(\pm\infty, t) = 0$.

Mengingat di luar jagad tidak ada partikel, berarti di luar jagad fluks peluang sama dengan nol dan tepat di ujung-ujung jagad tidak ada peluang yang "bocor" ke / dari luar jagad. Dengan kata lain, di ujung-ujung jagad fluks peluang $j(x,t)$ sama dengan nol, yang berarti $\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)$ juga sama dengan nol.

- Kita hitung perubahan rapat peluang total terhadap waktu. Supaya mudah, kita pilih $\psi(x,t)$ yang ternormalisasi:[3]

$$
\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, P(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{d}{dt}P(x,t)\,, \quad x \;\&\; t \text{ variabel bebas, tidak saling bergantung}
$$

[3] x dan t variabel bebas, tidak saling bergantung, sehingga:

$$
dP(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}P(x,t)dx + \frac{\partial}{\partial t}P(x,t)dt \qquad (25)
$$

$$
\rightarrow \frac{d}{dt}P(x,t) = \frac{\partial}{\partial x}P(x,t)\frac{dx}{dt} + \frac{\partial}{\partial t}P(x,t)\frac{dt}{dt} = \frac{\partial}{\partial t}P(x,t)\,. \qquad (26)
$$

$$
\begin{aligned}
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial}{\partial t} P(x,t) \\
&= -\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial}{\partial x} j(x,t) \\
&= -\, j(x,t)\Big|_{-\infty}^{\infty} \\
&= 0\,, \quad \text{di ujung-ujung jagad fluks peluang nol}
\end{aligned} \tag{27}
$$

Dengan demikian, peluang total konstan:

$$
\int_{-\infty}^{\infty} dx\, P(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, P(x,0)\,. \tag{28}
$$

Ini dapat mudah dipahami. Sebuah partikel dapat saja bergerak, sehingga posisinya berubah dari waktu ke waktu, namun tetap berada di dalam jagad tempatnya berada. Dengan demikian, jika dicari di seluruh jagad pada saat kapan pun, pasti partikel itu ditemukan.

B. Nilai ekspektasi

- Bayangkan kita melakukan pengukuran. Untuk mendapatkan hasil yang baik, dilakukan pengukuran beberapa kali. Nilai akhir hasil pengukuran, dengan demikian, merupakan rata-rata nilai hasil pengukuran yang banyak (lebih dari satu) tersebut. Bagaimana menghitung nilai rata-rata? Misalkan saja, kita mengukur panjang rata-rata $\bar{l}$ dari N helai daun. Ada N_1 helai daun dengan panjang l_1, N_2 helai daun dengan panjang l_2, dan seterusnya. Diperoleh:

$$
\sum_j N_j = N \tag{29}
$$

$$
\bar{l} = \frac{1}{N}\sum_j l_j N_j = \sum_j l_j \left(\frac{N_j}{N}\right)\,. \tag{30}
$$

  N_j/N dapat disebut frekuensi kemunculan atau peluang mendapakan atau faktor distribusi untuk panjang daun l_j. Peluang total mendapatkan daun dengan panjang sembarang diperoleh sama dengan 1:

$$
\sum_j \left(\frac{N_j}{N}\right) = \frac{1}{N}\sum_j N_j = 1\,. \tag{31}
$$

- Dalam mekanika kuantum, nilai suatu besaran fisika dihitung sebagai prediksi nilai hasil pengukuran, yaitu sebagai prediksi nilai rata-rata atau disebut juga dengan nilai ekspektasi. Ini tentu saja tidak mengherankan, karena pada akhirnya orang harus membandingkan antara keduanya, hasil eksperimen dan hasil perhitungan teoretis. Melihat persamaan (31), N_j/N seperti yang kita kenal dalam mekanika kuantum sebagai rapat peluang untuk fungsi gelombang ternormalisasi. Pada persamaan (30), l_j merupakan nilai besaran fisika hasil salah satu dari banyak pengukuran. Dalam mekanika kuantum, yang kita punya bukanlah nilai besaran fisika, melainkan "hanya" representasi dari keadaan partikel / sistem, yaitu fungsi gelombang. Namun, dari fungsi gelombang itu kita dapat mencaritahu nilai suatu besaran fisika, yaitu dengan melakukan suatu operasi matematis pada fungsi gelombang, atau secara teknis, dengan mengerjakan suatu operator matematik pada fungsi gelombang.

Untuk fungsi gelombang $\psi(x,t)$ ternormalisasi:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |\psi(x,t)|^2 = 1\,, \quad \text{(bandingkan dengan persamaan (31))} \tag{32}$$

dan nilai ekspektasi suatu besaran $\langle B \rangle$ dihitung sebagai berikut:

$$\langle B \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x,t)\hat{B}\psi(x,t)\,, \quad \text{(bandingkan dengan persamaan (30))} \tag{33}$$

dengan $\hat{B}$ adalah operator untuk besaran fisika yang dihitung.

- Pada persamaan (29), N_j mengingatkan kita pada rapat peluang untuk sembarang fungsi gelombang (tak ternormalisasi). Persamaan (30) dapat ditulis sebagai:

$$\bar{l} = \frac{1}{N}\sum_j l_j N_j = \frac{\sum_j l_j N_j}{\sum_j N_j}\,. \tag{34}$$

Dengan demikian, kita dapatkan rumus nilai ekspektasi yang lebih umum, tidak hanya untuk fungsi gelombang ternormalisasi, yaitu:

$$\langle B \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x,t)\hat{B}\psi(x,t)}{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x,t)\psi(x,t)}\,. \tag{35}$$

- Apabila suatu operator merupakan fungsi dari operator $\hat{B}$, misalkan $f(\hat{B})$, maka nilai ekspektasi besaran yang direpresentasikan oleh $f(\hat{B})$ adalah:

$$\langle f(B) \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x,t)f(\hat{B})\psi(x,t)}{\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x,t)\psi(x,t)}\,. \tag{36}$$

- Contoh besaran fisika adalah posisi x. Jika kita bekerja dengan fungsi gelombang dalam representasi posisi x, yatu $\psi(x,t)$, maka operator posisi $\hat{x} = x$. Dengan demikian, operasi $\hat{x} = x$ pada $\psi(x,t)$ merupakan perkalian biasa x dan $\psi(x,t)$:

$$\hat{x}\psi(x,t) = x\psi(x,t)\,. \tag{37}$$

Jadi, nilai ekspektasi $\langle x \rangle$ diperoleh sebagai (agar sederhana, kita pilih $\psi(x,t)$ ternormalisasi):

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x,t)\hat{x}\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x,t)x\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x|\psi(x,t)|^2\,. \tag{38}$$

- Contoh lain, momentum linier. Operator momentum linier diperoleh sebagai (lihat Gasiorowicz):

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\,, \tag{39}$$

sehingga nilai ekspektasi momentum diperoleh sebagai berikut (kita pilih $\psi(x,t)$ ternormalisasi):

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x,t)\hat{p}\psi(x,t) = \frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\,. \tag{40}$$

Meski operator momentum liner bersifat kompleks, namun nilai ekspektasinya riil, sebagaimana yang dituntut dari nilai besaran fisika. Kita cek berikut ini bahwa $\langle p \rangle^* = \langle p \rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle^* - \langle p \rangle &= -\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi^*(x,t) - \frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x,t)\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) \\
&= -\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \frac{\partial}{\partial x}|\psi(x,t)|^2 \\
&= -\frac{\hbar}{i}\left(|\psi(\infty,t)|^2 - |\psi(-\infty,t)|^2\right) \\
&= 0\,, \quad \text{(ingat sifat fungsi gelombang di ujung jagad)}\,.
\end{aligned} \tag{41}$$

Dalam matematika, operator yang nilainya riil merupakan operator hermitian. Dengan demikian, tidak hanya operator momentum linier, melainkan semua operator besaran fisika harus merupakan operator hermitian.

Jikapun jagad tempat partikel berada bersifat terbatas, misalkan $-R \leqslant x \leqslant R$, persamaan (41) tetap berlaku, karena sifat fungsi gelombang di ujung-ujung jagad tetap saja nol, tidak bergantung pada bentuk atau ukuran jagad. Dengan demikian, sifat hermitian operator momentum linier berlaku umum.

- Kuadrat operator momentum linier diperoleh sebagai berikut:

$$\hat{p}^2 = \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right) = \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x} = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\,. \tag{42}$$

Dengan demikian, persamaan Schrödinger dapat ditulis sebagai:

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) \\
&= \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t)
\end{aligned} \tag{43}$$

Selanjutnya, persamaan Schrödinger dapat ditulis sebagai:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = H\psi(x,t)\,, \tag{44}$$

dengan

$$H = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \tag{45}$$

disebut hamiltonian, yang merupakan operator energi total.

- Kita telah mengenal 2 operator, yaitu operator posisi $\hat{x}$ dan operator momentum $\hat{p}$. Kita kerjakan berkut ini:

$$\begin{aligned}
\hat{p}\hat{x}\psi(x,t) &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}x\psi(x,t) \\
&= \frac{\hbar}{i}\psi(x,t) + x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) \\
&= \frac{\hbar}{i}\psi(x,t) + \hat{x}\hat{p}\psi(x,t) \qquad (46)\\
\to (\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p})\psi(x,t) &= \frac{\hbar}{i}\psi(x,t) \neq 0 \qquad (47)\\
\to \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} &= \frac{\hbar}{i} \neq 0 \qquad (48)
\end{aligned}$$

Ternyata untuk operator, urutan itu penting, seperti ditunjukkan persamaan (48) bahwa $\hat{p}\hat{x} \neq \hat{x}\hat{p}$. Ini tentu tidak mengherankan. Operator melakukan operasi pada fungsi gelombang. Urutan operasi tentu penting. Sekedar ilustrasi, (1) memasukkan gula ke dalam secangkir kopi dan (2) mengaduk tidak sama hasilnya dari (1) mengaduk dan (2) memasukkan gula ke dalam secangkir kopi. Jadi, secara umum untuk dua operator, misalkan $\hat{A}$ dan $\hat{B}$, berlaku $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$, yaitu $\hat{A}$ dan $\hat{B}$ tidak komut ($\hat{A}$ *and* $\hat{B}$ *do not commute*). Namun, pada kasus khusus mungkin saja dijumpai untuk dua operator, misalkan $\hat{C}$ dan $\hat{D}$, berlaku $\hat{C}\hat{D} = \hat{D}\hat{C}$, bahwa $\hat{C}$ dan $\hat{D}$ komut ($\hat{C}$ *and* $\hat{D}$ *commute*). Dalam hal ini didefinisikan komutator 2 operator sebagai berikut:

$$[\hat{A},\hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\,. \qquad (49)$$

Komutator adalah juga operator, sehingga dapat dioperasikan pada fungsi gelombang, contoh:

$$[\hat{A},\hat{B}]\psi(x,t) = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi(x,t)\,. \qquad (50)$$

Untuk contoh-contoh operator di atas:

$$\begin{aligned}
[\hat{p},\hat{x}] &= \frac{\hbar}{i}\,, (\hat{p} \textit{ and } \hat{x} \textit{ do not commute}) \qquad (51)\\
[\hat{A},\hat{B}] &\neq 0\,, (\hat{A} \textit{ and } \hat{B} \textit{ do not commute}) \qquad (52)\\
[\hat{C},\hat{D}] &= 0\,, (\hat{C} \textit{ and } \hat{D} \textit{ commute})\,. \qquad (53)
\end{aligned}$$

Relasi komutator:

$$\begin{aligned}
[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] &= \hat{B}[\hat{A},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} \qquad (54)\\
[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] &= \hat{A}[\hat{B},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{C}]\hat{B} \qquad (55)\\
[\hat{A}\hat{B},\hat{C}\hat{D}] &= \hat{A}[\hat{B},\hat{C}\hat{D}] + [\hat{A},\hat{C}\hat{D}]\hat{B} \\
&= \hat{A}\hat{C}[\hat{B},\hat{D}] + \hat{A}[\hat{B},\hat{C}]\hat{D} + \hat{C}[\hat{A},\hat{D}]\hat{B} + [\hat{A},\hat{C}]\hat{D}\hat{B}\,. \qquad (56)
\end{aligned}$$

- Dalam mekanika klasik, hubungan antar besaran fisika sesungguhnya berlaku untuk nilainya. Nilai diperoleh sebagai hasil pengukuran / pengamatan. Dengan demikian, dalam mekanika kuantum hubungan antar besaran fisika sebagaimana dikenal dalam mekanika klasik berlaku untuk nilai ekspektasi besaran tersebut. Contoh, nilai ekspektasi momentum linier berhubungan dengan nilai ekspektasi posisi sebagai berikut:

$$\langle p \rangle = m\frac{d}{dt}\langle x \rangle \,. \tag{57}$$

C. Ruang momentum (representasi momentum)

Kita sudah ketahui bahwa keadaan partikel / sistem kuantum dapat direpresentasikan dalam ruang atau representasi yang berlain-lainan. Selain representasi posisi, kita telah temui juga representasi momentum.

- Fungsi gelombang dalam ruang momentum $\phi(p,t)$ merupakan transformasi Fourier dari fungsi gelombang dalam ruang posisi $\psi(x,t)$:

$$\phi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi(x,t)e^{-ipx/\hbar} \,. \tag{58}$$

- Hal-hal yang disampaikan sebelum ini juga berlaku untuk $\phi(p,t)$. Contoh, nilai ekspektasi:

$$\langle B \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi^*(p,t)\hat{B}\phi(p,t)}{\int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi^*(p,t)\phi(p,t)} \,. \tag{59}$$

- Dalam representasi momentum, operator momentum $\hat{p} = p$. Dengan demikian, operasi $\hat{p}$ pada $\phi(p,t)$ merupakan perkalian biasa p dan $\phi(p,t)$:

$$\hat{p}\phi(p,t) = p\phi(p,t) \,. \tag{60}$$

  Nilai ekspektasi $\langle p \rangle$ diperoleh sebagai (agar sederhana, kita pilih $\phi(p,t)$ ternormalisasi):

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi^*(p,t)\hat{p}\phi(p,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi^*(p,t)p\phi(p,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, p|\phi(p,t)|^2 \,. \tag{61}$$

- Operator posisi diperoleh sebagai (lihat Gasiorowicz):

$$\hat{x} = i\hbar\frac{\partial}{\partial p} \,, \tag{62}$$

  sehingga nilai ekspektasi posisi diperoleh sebagai berikut (kita pilih $\phi(p,t)$ ternormalisasi):

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi^*(p,t)\hat{x}\phi(p,t) = i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi^*(p,t)\frac{\partial}{\partial p}\phi(p,t) \,. \tag{63}$$

- Komutator tidak bergantung pada representasi. Kita kerjakan lagi komutator $\hat{p}$ dan $\hat{x}$, kali ini di ruang momentum:

$$\begin{aligned}[\hat{p},\hat{x}]\phi(p,t) &= (\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p})\phi(p,t) \\ &= \hat{p}\hat{x}\phi(p,t) - \hat{x}\hat{p}\phi(p,t)\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= i\hbar p\frac{\partial}{\partial p}\phi(p,t) - i\hbar\frac{\partial}{\partial p}p\phi(p,t) \\
&= i\hbar p\frac{\partial}{\partial p}\phi(p,t) - i\hbar p\frac{\partial}{\partial p}\phi(p,t) - i\hbar\phi(p,t) \\
&= \; - i\hbar\phi(p,t) \\
&= \frac{\hbar}{i}\phi(p,t) \qquad (64) \\
\rightarrow [\hat{p},\hat{x}] &= \frac{\hbar}{i}\,. \qquad (65)
\end{aligned}
$$