Catatan Mekanika Kuantum 1

Keadaan Tunak, Operator Linier, Partikel dalam Kotak, Postulat Ekspansi

Acuan utama Gasiorowicz, *Quantum Physics* Ed. 3, Bab 3, Subbab 1 – 4

A. Keadaan tunak

Pada keadaan tunak atau keadaan stasioner (*stationary state*), sebuah partikel atau suatu sistem menjalani proses secara konstan; proses tersebut tetap, tidak bergantung pada waktu. Dengan demikian, interaksi dan energi potensial tidak bergantung pada waktu secara eksplisit: $V(x)$, bukan $V(x,t)$.[1] Persamaan Schrödinger yang kita temui:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi(x,t)\,. \tag{1}$$

Suku-suku operator pada persamaan (1) bergantung pada waktu saja atau pada posisi saja, tidak pada keduanya waktu dan posisi:

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

Dengan demikian, untuk mencari solusi persamaan itu, $\psi(x,t)$, kita dapat gunakan teknik separasi variabel:

$$\begin{aligned}
\psi(x,t) &= u(x)T(t) \qquad (3)\\
\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}u(x)T(t) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]u(x)T(t)\\
u(x)i\hbar\frac{d}{dt}T(t) &= T(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]u(x)\\
\frac{1}{T(t)}i\hbar\frac{d}{dt}T(t) &= \frac{1}{u(x)}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]u(x) = E = \text{konstan}\\
\rightarrow i\hbar\frac{d}{dt}T(t) &= ET(t)\\
T(t) &= Ce^{-iEt/\hbar},\ (C = \text{konstanta integrasi}) \qquad (4)\\
\rightarrow \psi(x,t) &= u(x)e^{-iEt/\hbar},\ (C\,\text{dimasukkan ke dalam}\,u(x)) \qquad (5)
\end{aligned}$$

[1] Dalam mekanika kuantum, seringkali V orang sebut sebagai potensial, tanpa kata energi, meski tentu saja dimensi V adalah energi. Demikian pula, V orang sebut sebagai interaksi, karena V merupakan (energi) potensial untuk interaksi (gaya) konservatif. Dalam mekanika kuantum, interaksi yang dipakai adalah interaksi konservatif.

dengan $u(x)$ memenuhi persamaan:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right] u(x) = E u(x)\,. \tag{6}$$

Persamaan (6) disebut persamaan Schrödinger tak bergantung waktu (time-independent Schrödinger equation). Pada keadaan tunak, dengan demikian, kebergantungan $\psi(x,t)$ pada waktu sudah diketahui, tidak perlu dicari-cari lagi, yaitu $e^{-iEt/\hbar}$, yang menjadi faktor fase:

$$|\psi(x,t)|^2 = |u(x)e^{-iEt/\hbar}|^2 = |u(x)|^2\,. \tag{7}$$

Yang harus dicari hanyalah $u(x)$, yang memenuhi persamaan Schrödinger tak bergantung waktu (6), yang bergantung pada interaksi $V(x)$.

Persamaan Schrödinger tak bergantung waktu (6) merupakan contoh persamaan nilai eigen (*eigenvalue*). Pada persamaan itu, $u(x)$ adalah fungsi eigen (*eigenfunction*) operator H

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\,, \tag{8}$$

dengan nilai eigen E. Secara umum, apabila sebuah operator $\hat{O}$ bekerja pada sebuah keadaan (fungsi gelombang) ψ, dihasilkan keadaan yang lain ϕ:

$$\hat{O}\psi = \phi\,. \tag{9}$$

Persamaan nilai eigen merupakan kasus khusus, yaitu sebuah operator bekerja pada suatu keadaan dan dihasilkan keadaan itu sendiri (dikalikan suatu nilai / konstanta), misalkan:

$$\hat{A}\psi = a\psi\,. \tag{10}$$

Dikatakan bahwa ψ merupakan fungsi eigen $\hat{A}$ dengan nilai eigen a.

B. Operator linier

Solusi persamaan Schrödinger (1) maupun (6) tidak hanya satu, tidak unik. Contoh, lihat persamaan (5), keadaan berbeda memiliki energi berbeda dan keadaan-keadaan itu memenuhi persamaan Schrödinger yang sama (dengan $V(x)$ sama). Beberapa bahkan banyak keadaan dapat memenuhi persamaan Schroödinger yang sama.

Misalkan, $\psi_1(x,t)$ dan $\psi_2(x,t)$ memenuhi persamaan Schrödinger (1):

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi_1(x,t) \tag{11}$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_2(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\psi_2(x,t)\,. \tag{12}$$

Jika dua persamaan (11) dan (12) dijumlahkan, diperoleh:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\psi_1(x,t)+\psi_2(x,t)) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right](\psi_1(x,t)+\psi_2(x,t))\,. \tag{13}$$

Dengan demikian, jika $\psi_1(x,t)$ dan $\psi_2(x,t)$ memenuhi suatu persamaan Schrödinger, maka $\psi_1(x,t)+\psi_2(x,t)$ juga memenuhi persamaan yang sama. Kita coba lagi dengan tambahan suatu konstanta a dan b, yang secara umum kompleks:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}a\psi_1(x,t) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]a\psi_1(x,t) \\ \rightarrow a\,i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_1(x,t) &= a\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi_1(x,t) \qquad (14)\\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}b\psi_2(x,t) &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]b\psi_2(x,t) \\ \rightarrow b\,i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_2(x,t) &= b\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right]\psi_2(x,t)\,. \qquad (15)\end{aligned}$$

Kita peroleh:

$$\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(a\psi_1(x,t)+b\psi_2(x,t)) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\right](a\psi_1(x,t)+b\psi_2(x,t))\,. \tag{16}$$

Jadi, jika $\psi_1(x,t)$ dan $\psi_2(x,t)$ memenuhi suatu persamaan Schrödinger, maka sembarang kombinasinya $a\psi_1(x,t)+b\psi_2(x,t)$ juga memenuhi persamaan yang sama. Dengan demikian, solusi umum persamaan Schrödinger (1) sesungguhnya merupakan kombinasi linier semua solusinya yang mungkin. Dalam hal ini, solusinya dibedakan oleh energinya. Secara umum, spektrum energi meliputi daerah energi diskrit dan juga daerah energi kontinyu. Dengan demikian, solusi umum persamaan Schrödinger (1) adalah:

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n u_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} + \int dE\, C(E) u_E(x) e^{-iEt/\hbar}\,. \tag{17}$$

Persamaan (14), (15), (16) menunjukkan sifat operator linier, dalam hal ini operator energi total, hamiltonian H:

$$H = i\hbar\frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)\,, \tag{18}$$

yaitu:

$$H(a\psi_1(x,t)+b\psi_2(x,t)) = a\,H\psi_1(x,t)+b\,H\psi_2(x,t)\,. \tag{19}$$

Sifat linier H itu memungkinkan persamaan (17) menjadi solusi umum persamaan (1). Sesungguhnya, bukan hanya H, melainkan semua operator yang merepresentasikan besaran fisika harus merupakan operator linier. Dengan $\hat{O}_L$ sebagai operator linier, sifat operator linier itu dapat dirangkum sebagai berikut:

$$\hat{O}_L(a\psi_1(x,t)+b\psi_2(x,t)) = a\,\hat{O}_L\psi_1(x,t)+b\,\hat{O}_L\psi_2(x,t)\,. \tag{20}$$

C. Partikel dalam kotak

Kita ambil kasus paling sederhana untuk dikaji menggunakan mekanika kuantum, yaitu partikel dalam kotak. Pada kasus ini, sebuah partikel bermassa m terperangkap dalam suatu daerah, sebut saja $0 < x < a$, dalam pengaruh potensial $V(x)$, sehingga tidak dapat dan tidak akan pernah dapat keluar dari daerah tersebut. Ini tentu saja keadaan ideal.[2] Potensial tersebut dinyatakan sebagai berikut:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \ (0 < x < a) \\ \infty & , \ (x < 0 \ \& \ x > a) \end{cases} . \tag{21}$$

Potensial itu seperti sebuah ruang dengan dinding yang sangat tinggi, sehingga tidak dapat ditembus atau diloncati.

Ini merupakan keadaan tunak, sehingga persamaan yang kita pakai adalah persamaan Schrödinger tak bergantung waktu:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right] u(x) = Eu(x)\,, \tag{22}$$

dengan $u(x)$ merepresentasikan keadaan partikel dan E energi partikel. Karena partikel hanya ada di dalam kotak, tidak pernah ada di luar kotak, kita cukup ambil daerah $0 < x < a$, sehingga persamaan yang kita hadapi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) = Eu(x)\,. \tag{23}$$

Kita cari $u(x)$ dan E sebagai berikut:

1. Kita ubah persamaan (23) menjadi persamaan differensial berikut:

   $$\frac{d^2}{dx^2}u(x) + k^2u(x) = 0\,, \qquad \left(k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\,, \tag{24}$$

   dan kita dapatkan solusinya, yaitu:

   $$u(x) = A\sin kx + B\cos kx\,. \tag{25}$$

2. Kita terapkan syarat batas pada $u(x)$. Di ujung-ujung jagad, $x = 0$ dan $x = a$, $u(x) = 0$, sehingga:

   $$u(0) = B = 0 \rightarrow u(x) = A\sin kx \tag{26}$$

   $$u(a) = A\sin ka = 0 \rightarrow ka = n\pi \rightarrow k = \frac{n\pi}{a}\,,\ (n = 1, 2, 3, ...) \tag{27}$$

   Perhatikan bahwa $n = 0$ tidak diperhitungkan, karena apabila $n = 0$, maka $u(x) = 0$ di seluruh daerah $0 < x < a$, yang berarti partikel tidak ada di situ.

[2]Contoh-contoh riil benda terperangkap, yaitu (1) kita terperangkap di bumi dalam pengaruh potensial / interaksi / gaya gravitasi bumi, (2) elektron terperangkap di atom dalam pengaruh potensial Coulomb atom. Dalam hal ini, kita dan elektron masih dapat keluar dari "kotak", apabila mendapat cukup energi.

3. Diperoleh energi E sebagai berikut:

$$E = \frac{k^2\hbar^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{28}$$

dan fungsi gelombang $u(x)$:

$$u(x) = A\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) . \tag{29}$$

Sampai di sini sebetulnya cukup. Namun, kita lanjutkan untuk menentukan konstanta normalisasi A. Kita ingin norm $u(x)$ sama dengan 1, supaya memudahkan perhitungan:

$$\begin{aligned}\int_0^a dx\, u^*(x)u(x) = 1 = |A|^2 \int_0^a dx\, \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \\ = |A|^2\frac{1}{2}\int_0^a dx\left[1 - \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right] \\ = |A|^2\frac{1}{2}\left[x - \frac{a}{2n\pi}\sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right)\right]_0^a \\ = |A|^2\frac{a}{2}\end{aligned} \tag{30}$$

$$\rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}} ,\ \text{(untuk kemudahan, dipilih } A \text{ riil)} \tag{31}$$

Jadi, untuk partikel dalam kotak diperoleh:

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) ,\ (n = 1, 2, 3, ...) \tag{32}$$

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} . \tag{33}$$

Pada $u(x)$ dan E kita berikan label n, dengan $n = 1, 2, 3, ...$ disebut bilangan kuantum.

Beberapa catatan:

- Partikel dalam kotak tidak memiliki energi bernilai sembarang, melainkan diskrit. Orang sebut ada tingkat-tingkat energi (*energy levels*). Energinya pada keadaan dasar (*ground state*) tidak nol, melainkan:

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} . \tag{34}$$

Pada keadaan-keadaan lain, energinya dapat ditulis sebagai:

$$E_n = n^2 E_1 . \tag{35}$$

Selang energi (*energy gap*) antar dua keadaan yang berurutan tidak tetap, melainkan bertambah secara linier bersama n:

$$\Delta E_{n+1,n} = E_{n+1} - E_n = \left[(n+1)^2 - n^2\right] E_1 = (2n+1)E_1 . \tag{36}$$

- Fungsi gelombang partikel dalam kotak memiliki sifat ortogonal (ingat kembali kuliah Fisika Matematika mengenai fungsi-fungsi khusus, tentang himpunan fungsi ortogonal (*a set of orthogonal functions*)):

$$\int_0^a dx\, u_m^*(x)u_n(x) = \frac{2}{a}\int_0^a dx\, \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = \delta_{mn}\,. \tag{37}$$

Selain ortogonal, $u_n(x)$ juga ternormalisasi, sehingga orang katakan juga bersifat ortonormal. Mengingat $n = 1, 2, 3, ...$, maka seluruh $u_n(x)$ membentuk satu himpunan fungsi, yang antar masing-masing anggotanya saling tegak lurus. Sifat ortogonal ternyata merupakan sifat semua fungsi gelombang, yang merupakan fungsi eigen operator besaran fisika. Dalam kasus ini, $u_n(x)$ merupakan fungsi eigen operator energi total H.

- Kita bandingkan $u_n(x)$ di titik $x = \frac{1}{2}a \pm b$:

$$\begin{aligned}\sin\left(\frac{n\pi}{a}\left(\frac{a}{2}\pm b\right)\right) &= \sin\left(\frac{n\pi}{2}\pm\frac{n\pi}{a}b\right)\\ &= \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)\cos\left(\frac{n\pi}{a}b\right)\pm\sin\left(\frac{n\pi}{a}b\right)\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right)\\ &= \begin{cases}\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)\cos\left(\frac{n\pi}{a}b\right) & ,\ (n = \text{ganjil})\\ \pm\sin\left(\frac{n\pi}{a}b\right)\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) & ,\ (n = \text{genap})\end{cases}\end{aligned} \tag{38}$$

$$\sin\left(\frac{n\pi}{a}\left(\frac{a}{2}+b\right)\right) - \sin\left(\frac{n\pi}{a}\left(\frac{a}{2}-b\right)\right) = \begin{cases}0 & ,\ (n = \text{ganjil})\\ 2\sin\left(\frac{n\pi}{a}\left(\frac{a}{2}+b\right)\right) & ,\ (n = \text{genap})\end{cases} \tag{39}$$

Dengan demikian, $u_n(x)$ memiliki simetri terhadap titik $x = \frac{1}{2}a$, untuk n ganjil bersifat simetrik dan untuk n genap bersifat antisimetrik.

- Nilai ekspektasi posisi partikel dalam kotak diperoleh sebagai:

$$\langle x\rangle = \int_0^a dx\, u_n^*(x)xu_n(x) = \frac{2}{a}\int_0^a dx\, x\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = \frac{a}{2}\,. \tag{40}$$

Ini berarti, jika kita cari partikel itu, rata-rata kita menemukannya di tengah-tengah kotak.

- Nilai ekspektasi momentum partikel dalam kotak diperoleh sebagai:

$$\langle p\rangle = \frac{\hbar}{i}\int_0^a dx\, u_n^*(x)\frac{d}{dx}u_n(x) = \frac{2n\pi\hbar}{ia^2}\int_0^a dx\, \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = 0\,. \tag{41}$$

Ini berarti, jika kita ukur momentum partikel itu, rata-rata kita dapatkan nol. Momentum besaran vektor, berarti punya arah, dalam hal ini arahnya ke x^+ atau ke x^-. Nilai ekspektasi nol menunjukkan partikel bergerak ke x^+ sama banyaknya dengan partikel itu bergerak ke x^- atau peluang partikel bergerak ke x^+ sama dengan peluangnya bergerak ke x^-.

D. Postulat ekspansi

Sesuai dengan sifat linier operator H, solusi umum persamaan Schrödinger (23) adalah:

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n u_n(x)\,. \tag{42}$$

Dengan kata lain, sembarang keadaan ψ dapat dinyatakan sebagai kombinasi linier atau dapat diekspansi dalam u_n, yang merupakan fungsi eigen H dengan nilai eigen E_n. Ini disebut sebagai postulat ekspansi. Postulat ekspansi sebetulnya sudah kita temui juga di persamaan (17).

Postulat ekspansi pada persamaan (42) menunjukkan bahwa u_n membentuk satu himpunan yang komplit dan antar anggotanya saling tegak lurus. Jika tidak komplit, kombinasi linier u_n mungkin dapat merepresentasikan sebagian keadaan, namun tidak dapat merepresentasikan semua sembarang keadaan ψ. Dua sifat tersebut menjadi sifat semua fungsi eigen operator besaran fisika, yaitu:

- ortogonal
- komplit.

Sekedar pembanding, agar lebih jelas, kita ambil contoh vektor. Sembarang vektor **A** dapat memiliki sembarang nilai dan sembarang arah. Untuk menyatakan sembarang vektor **A**, dibutuhkan tiga unit vektor $\hat{\mathbf{e}}_j$, yang antar ketiganya saling tegak lurus:

$$\mathbf{A} = \sum_{j=1}^{3} a_j \hat{\mathbf{e}}_j\,, \quad \hat{\mathbf{e}}_j \cdot \hat{\mathbf{e}}_k = \delta_{jk}\,. \tag{43}$$

Tiga unit vektor tersebut, meskipun terkesan jumlahnya sedikit, namun sudah komplit. Kita tidak perlu lebih dari tiga unit vektor, namun jika kurang dari tiga, kita tidak dapat menyatakan sembarang vektor.

Koefisien ekspansi A_n pada persaman (42) dapat diperoleh dengan memanfaatkan sifat ortogonal u_n:

$$\begin{aligned}
\int_0^a dx\, u_n^*(x)\psi(x) &= \sum_{m=1}^{\infty} A_m \int_0^a dx\, u_n^*(x) u_m(x) \\
&= \sum_{m=1}^{\infty} A_m \delta_{nm} \\
&= A_n \\
\rightarrow A_n &= \int_0^a dx\, u_n^*(x)\psi(x)\,. \qquad (44)
\end{aligned}$$

Koefisien A_n tersebut seperti komponen vektor a_j pada persamaan (43), yang dicari dengan memproyeksikan vektor $\mathbf{A}$ pada unit vektor $\hat{\mathbf{e}}_j$ sebagai berikut:

$$a_j = \hat{\mathbf{e}}_j \cdot \mathbf{A} \,. \tag{45}$$

Integral seperti pada persamaan (44) sering dinyatakan juga sebagai proyeksi ψ pada u_n atau perkalian skalar u_n dan ψ.

Kuadrat norm fungsi gelombang $\psi(x)$ diperoleh sebagai berikut:

$$\begin{aligned}\int_0^a dx\, \psi^*(x)\psi(x) &= \sum_{m=1}^{\infty} A_m^* \sum_{n=1}^{\infty} A_n \int_0^a dx\, u_m^*(x)u_n(x) \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} A_m^* \sum_{n=1}^{\infty} A_n \delta_{mn} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} |A_n|^2 \,. \end{aligned} \tag{46}$$

Ini juga serupa dengan kuadrat norm vektor $\mathbf{A}$:

$$|\mathbf{A}|^2 = \sum_{j=1}^{3} a_j \sum_{k=1}^{3} a_k \hat{\mathbf{e}}_j \cdot \hat{\mathbf{e}}_k = \sum_{j=1}^{3} a_j^2 \,. \tag{47}$$

Apabila $\psi(x)$ ternormalisasi, maka:

$$\int_0^a dx\, \psi^*(x)\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} |A_n|^2 = 1 \,. \tag{48}$$

Kita sudah mengenal bahwa persamaan (46) menunjukkan peluang total mendapatkan partikel di sembarang posisi di seluruh jagad, dalam hal ini $0 < x < a$. Sesuai postulat ekspansi, persamaan (46) memiliki makna lebih lengkap yaitu peluang total mendapatkan partikel di sembarang posisi di seluruh jagad $0 < x < a$ pada sembarang keadaan u_n, $(n = 1, 2, 3, ...)$. Apabila fungsi gelombang $\psi(x)$ ternormalisasi nilai peluang total tersebut sama dengan 1 (persamaan (48)).

Pengukuran energi total diperoleh sebagai nilai ekspektasi berikut (supaya lebih umum, anggap $\psi(x)$ tak ternormalisasi):

$$\begin{aligned}\langle H \rangle &= \frac{1}{\int_0^a dx\, \psi^*(x)\psi(x)} \int_0^a dx\, \psi^*(x) H \psi(x) \\ &= \frac{1}{\sum_{k=1}^{\infty} |A_k|^2} \sum_{m=1}^{\infty} A_m^* \sum_{n=1}^{\infty} A_n \int_0^a dx\, u_m^*(x) H u_n(x) \\ &= \frac{1}{\sum_{k=1}^{\infty} |A_k|^2} \sum_{m=1}^{\infty} A_m^* \sum_{n=1}^{\infty} A_n E_n \int_0^a dx\, u_m^*(x) u_n(x) \\ &= \frac{1}{\sum_{k=1}^{\infty} |A_k|^2} \sum_{m=1}^{\infty} A_m^* \sum_{n=1}^{\infty} A_n E_n \delta_{mn} \end{aligned}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|A_n|^2}{\sum_{k=1}^{\infty} |A_k|^2} E_n \,. \tag{49}$$

Bagaimana kita harus memahami nilai ekspektasi di persamaan (49) tersebut?

- Pertama, secara eksperimen. Bayangkan suatu pengukuran. Ada banyak sampel identik. Tiap satu pengukuran menghasilkan hanya satu nilai, yaitu E_n. Misalkan, pengukuran pertama memberikan hasil E_2, pengukuran kedua memberikan E_4, pengukuran ketiga kembali memberikan E_2, pengukuran kedua memberikan E_1, pengukuran kelima kembali memberikan E_1, demikian seterusnya sampai pengukuran terakhir (perhatikan, walaupun n bervariasi dari 1 sampai ∞, bukan berarti pengukuran harus dilakukan sebanyak ∞ kali). Pengukuran yang memberikan hasil E_n muncul sebanyak sekian kali, sebut saja N_n. Jika total jumlah pengukuran adalah N, maka:

$$\sum_{n=1}^{\infty} N_n = N \,. \tag{50}$$

Semua hasil pengukuran tersebut dihimpun dan dicari nilai rata-ratanya:

$$\bar{E} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{N_n}{N} E_n \,. \tag{51}$$

Itulah nilai ekspektasi di persamaan (49) secara ekserimen, $\langle H \rangle = \bar{E}$.

Jika kita bandingkan persamaan (49) dan (51), kita dapatkan:

$$\frac{|A_n|^2}{\sum_{k=1}^{\infty} |A_k|^2} = \frac{N_n}{N} \,. \tag{52}$$

Pada persamaan (52) N_n/N adalah peluang mendapatkan hasil pengukuran E_n. Dengan demikian, kita dapatkan makna dari ruas kiri persamaan (52), yaitu peluang mendapatkan partikel berada pada keadaan u_n, sebut saja P_n:

$$P_n = \frac{|A_n|^2}{\sum_{k=1}^{\infty} |A_k|^2} = \frac{\left| \int_0^a dx\, u_n^*(x) \psi(x) \right|^2}{\int_0^a dx\, \psi^*(x) \psi(x)} \,. \tag{53}$$

Jika $\psi(x)$ ternormalisasi, maka:

$$P_n = |A_n|^2 = \left| \int_0^a dx\, u_n^*(x) \psi(x) \right|^2 \,. \tag{54}$$

- Secara teori obyek ukur kita hanya satu, dalam hal ini partikel dalam kotak, dan nilai ekspektasi merupakan prediksi nilai suatu besaran fisika untuk obyek tersebut. Partikel dalam kotak hanya menempati satu keadaan, misalkan keadaan u_3, tidak dapat menempati beberapa keadaan ataupun berganti-ganti keadaan dengan sendirinya. Dengan demikian, nilai ekspektasi di persamaan (49) dipahami sebagai berikut: Apabila dilakukan pengukuran energi pada partikel dalam kotak, hasilnya mungkin E_n, dengan peluang sebesar P_n (lihat persamaan (53)).

Contoh, keadaan sebuah partikel dalam kotak diberikan (maknanya, diprediksi) sebagai berikut:

$$\psi(x) = \frac{\sqrt{5}}{3} u_1(x) - \frac{2}{3} u_3(x)\,, \tag{55}$$

yang berarti bahwa partikel hanya mungkin menempati salah satu keadaan, yaitu u_1 atau u_3, tidak mungkin menempati kedua keadaan bersamaan, dan juga tidak mungkin menempati keadaan selain u_1 atau u_3. Kita cek, sesuai persamaan (46), bahwa norm $\psi(x)$ sama dengan 1:

$$\int_0^a dx\, |\psi(x)|^2 = \left(\frac{\sqrt{5}}{3}\right)^2 + \left(-\frac{2}{3}\right)^2 = 1\,. \tag{56}$$

Nilai ekspektasi energi adalah **bukan**:

$$\langle H \rangle = \left(\frac{\sqrt{5}}{3}\right)^2 E_1 + \left(-\frac{2}{3}\right)^2 E_3 = \frac{1}{9}\,(5E_1 + 4E_3) = \text{suatu nilai}\,, \tag{57}$$

karena jika begitu berarti partikel menempati kedua keadaan u_1 dan u_3. Yang benar, nilai ekspektasi energi adalah:

$$\langle H \rangle = E_1 \text{ dengan peluang } \frac{5}{9} \text{ atau } E_3 \text{ dengan peluang } \frac{4}{9}\,. \tag{58}$$

Keadaan sembarang ψ dalam postulat ekspansi, seperti pada persamaan (42), menyatakan suatu ketidakpastian dalam apa yang kita ketahui mengenai partikel yang diamati. Kita ambil kembali contoh ψ di persamaan (55).

- Fungsi gelombang tersebut menunjukkan kita:
  - tahu pasti bahwa keadaan partikel adalah simetrik (lihat persamaan (39) dan pernyataan setelahnya),
  - tahu pasti bahwa partikel tidak menempati keadaan selain u_1 dan u_3,
  - tidak tahu pasti apakah partikel menempati keadaan u_1 atau keadaan u_3,
  - hanya dapat memperkirakan bahwa partikel menempati keadaan u_1 dengan peluang $\frac{5}{9}$ atau keadaan u_3 dengan peluang $\frac{4}{9}$.
- Apabila kita ukur energi satu partikel dalam kotak tersebut, hasilnya adalah mungkin E_1 dengan peluang $\frac{5}{9}$ atau E_3 dengan peluang $\frac{4}{9}$.
- Apabila setelah diukur ternyata hasilnya E_3, kini kita tahu pasti bahwa partikel menempati keadaan u_3. Fungsi gelombang partikel bukan lagi seperti pada persamaan (55), melainkan $\psi(x) = u_3(x)$. Sekarang, tidak ada ketidakpastian lagi, kita tahu degan pasti bahwa partikel menempati keadaan u_3. Jika kita ukur lagi energi partikel tersebut, kita tahu pasti bahwa hasilnya adalah E_3. Demikian pula, pengukuran-pengukuran energi berikutnya akan memberikan hasil yang pasti sama, yaitu E_3. Dengan demikian,

dikatakan bahwa pengukuran suatu besaran fisika menyebabkan keadaan partikel terproyeksikan pada atau runtuh (*collapse*) ke salah satu keadaan eigen yang mungkin untuk besaran fisika tersebut.