Catatan Mekanika Kuantum 1

Fungsi eigen momentum linier, Keadaan bebas, Degenerasi, Paritas

Acuan utama Gasiorowicz, *Quantum Physics* Ed. 3, Bab 3, Subbab 5 & 6

A. Fungsi eigen momentum linier

Telah kita lihat persamaan Schrödinger sebagai persamaan nilai eigen untuk operator energi total. Dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger untuk suatu sistem kuantum kita dapatkan nilai energi total dan fungsi gelombang yang merepresentasikan keadaan sistem itu dengan nilai energi tersebut. Kini kita lihat besaran fisika yang lain, yaitu momentum linier. Kita cari fungsi eigen operator momentum linier.

Di ruang posisi (dalam representasi posisi), operator momentum linier diperoleh sebagai berikut:

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\,. \tag{1}$$

Jika $u_q(x)$ adalah fungsi eigen momentum linier dengan nilai eigen (nilai momentum linier) q, persamaan nilai eigen momentum linier dinyatakan sebagai berikut:

$$\hat{p}u_q(x) = qu_q(x) \rightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}u_q(x) = qu_q(x)\,. \tag{2}$$

Kita peroleh $u_q(x)$ sebagai berikut:

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}u_q(x) &= qu_q(x) \\
\rightarrow \frac{1}{u_q(x)}\frac{\partial}{\partial x}u_q(x) &= \frac{i}{\hbar}q \\
\rightarrow \frac{1}{u_q(x)}du_q(x) &= \frac{i}{\hbar}qdx \\
\rightarrow u_q(x) &= Ce^{iqx/\hbar}
\end{aligned} \tag{3}$$

dengan C konstanta normalisasi. Jadi, fungsi eigen momentum linier adalah fungsi gelombang bidang (*plane wave*) dan nilai eigen momentum linier bersifat kontinyu, dapat bernilai berapa saja, dari $-\infty$ sampai ∞.

Sebagai fungsi eigen operator besaran fisika, $u_q(x)$ bersifat ortogonal:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_{q'}^*(x)u_q(x) = |C|^2\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-iq'x/\hbar}e^{iqx/\hbar}$$

$$
\begin{aligned}
&= |C|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-i(q'-q)x/\hbar} \\
&= |C|^2 2\pi\hbar\delta(q'-q)\,. \qquad (4)
\end{aligned}
$$

Karena nilai eigen momentum linier kontinyu, ortogonalitas fungsi eigen momentum linier diberikan bukan dalam delta Kronecker, melainkan dalam fungsi delta Dirac. Selanjutnya, dengan dipilih $C = (2\pi\hbar)^{-\frac{1}{2}}$, diperoleh $u_q(x)$ yang ortonormal dengan ortogonalitas sebagai berikut:

$$
u_q(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{iqx/\hbar} \qquad (5)
$$

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_{q'}^*(x) u_q(x) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-i(q'-q)x/\hbar} \\
&= \delta(q'-q)\,. \qquad (6)
\end{aligned}
$$

Selain ortogonal, $u_q(x)$ juga bersifat komplit, sehingga dapat dipakai untuk ekspansi suatu fungsi gelombang $\psi(x)$:

$$
\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi(p) u_p(x)\,. \qquad (7)
$$

Karena nilai eigen momentum linier kontinyu, ekspansi tersebut juga kontinyu, yaitu dalam bentuk integral, bukan deret. Pada persamaan (7), fungsi $\phi(p)$ merupakan koefisien ekspansi, yang diperoleh sebagai proyeksi $\psi(x)$ pada $u_p(x)$:

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_p^*(x)\psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_p^*(x) \int_{-\infty}^{\infty} dq\, \phi(q) u_q(x) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dq\, \phi(q) \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_p^*(x) u_q(x) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dq\, \phi(q) \delta(p-q) \\
&= \phi(p)\,. \qquad (8)
\end{aligned}
$$

Nilai $|\phi(p)|^2 dp$, dengan demikian, menyatakan peluang mendapatkan partikel bergerak dengan momentum linier p sampai $p + dp$. Ini dapat kita lihat dari perhitungan kuadrat norm $\psi(x)$ atau peluang total mendapatkan partikel bergerak dengan sembarang momentum linier dari $-\infty$ sampai ∞:

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi^*(x)\psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi^*(p) u_p^*(x) \int_{-\infty}^{\infty} dq\, \phi(q) u_q(x) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi^*(p) \int_{-\infty}^{\infty} dq\, \phi(q) \int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_p^*(x) u_q(x) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi^*(p) \int_{-\infty}^{\infty} dq\, \phi(q) \delta(p-q) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi^*(p) \phi(p) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dp\, |\phi(p)|^2\,. \qquad (9)
\end{aligned}
$$

Peluang mendapatkan partikel bergerak dengan sembarang momentum linier dari a sampai b, dengan demikian, dihitung sebagai:

$$\int_a^b dp\,|\phi(p)|^2\,. \tag{10}$$

Di ruang momentum linier (dalam representasi momentum linier), operator momentum linier adalah variabel moentum linier biasa p:

$$\hat{p} = p\,. \tag{11}$$

Jika $z_q(p)$ adalah fungsi eigen momentum linier dengan nilai eigen q, $z_q(p)$ dapat dicari sebagai transformasi Fourier dari $u_q(x)$:

$$z_q(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, u_q(x)e^{-ipx/\hbar} = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{iqx/\hbar}e^{-ipx/\hbar} = \delta(p-q)\,. \tag{12}$$

Ortogonalitas $z_q(p)$ ditunjukkan sebagai berikut:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp\, z_{q'}^*(p)z_q(p) = \int_{-\infty}^{\infty} dp\,\delta(p-q')\delta(p-q) = \delta(q'-q)\,. \tag{13}$$

B. Keadaan bebas

Apabila tidak ada interaksi, $V(x) = 0$, sehingga keadaan sistem atau partikel merupakan keadaan bebas dan juga stasioner. Persamaan Schrödinger menjadi terdiri dari hanya komponen energi kinetik:

$$H\psi_E(x) = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi_E(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) = E\psi_E(x)\,. \tag{14}$$

Fungsi eigen $\psi_E(x)$ diperoleh sebagai berikut:

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) &= E\psi_E(x)\\
\rightarrow \frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_E(x) &= 0\\
\frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) + k^2\psi_E(x) &= 0\,,\ \left(k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\\
\rightarrow \psi_E(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} &= Ae^{iqx/\hbar} + Be^{-iqx/\hbar}\,,\ (q = \hbar k = \sqrt{2mE})
\end{aligned} \tag{15}$$

Fungsi eigen operator energi total untuk keadaan bebas merupakan fungsi eigen atau kombinasi fungsi eigen operator momentum linier, dengan nilai momentum q dan nilai energi E berhubungan menurut $q = \sqrt{2mE}$.

Jagad untuk sebuah partikel bebas terentang dari $x = -\infty$ sampai $x = \infty$. Jika kita hitung kuadrat norm fungsi gelombang untuk keadaan bebas $\psi_E(x)$ yang diberikan di persamaan (15), kita dapatkan bahwa $\psi_E(x)$ tidak memenuhi syarat *square integrable*, sehingga ini tampak sebagai suatu masalah pada kasus partikel bebas:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\psi_E(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\left(|A|^2 + |B|^2 + A^*Be^{-ikx} + AB^*e^{ikx}\right) \not< \infty\,. \tag{16}$$

Ada setidaknya tiga cara untuk melihat hal tersebut sebagai tidak bermasalah:

1. Ingat kembali partikel dalam kotak. Fungsi gelombang partikel dalam kotak adalah fungsi trigonometri sinus dan cosinus, yang tidak lain adalah kombinasi dari fungsi eksponensial. Pada kasus partikel dalam kotak, tidak ditemui masalah terkait sifat *square integrable.* Dengan demikian, kita dapat anggap partikel bebas sebagai partikel dalam kotak $-a \leqslant x \leqslant a$, dengan $a \to \infty$. Pada partikel dalam kotak, nilai bilangan gelombang k sebanding dengan n/a, dengan n bilangan kuantum. Demikian pula, energi E sebanding dengan n^2/a^2. Dengan demikian, agar k dan E tetap punya nilai berarti (tidak nol), maka partikel bebas dianggap sebagai partikel dalam kotak $-a \leqslant x \leqslant a$, dengan $a \to \infty$, pada keadaan dengan bilangan kuantum n sangat besar.

2. Fungsi gelombang partikel bebas dilihat sebagai paket gelombang. Sebagai paket gelombang, fungsi gelombang eksponensial:

$$\psi(x) = Ce^{iqx/\hbar} \tag{17}$$

merupakan keadaan sangat khusus, ideal, dengan fungsi distribusi ekstrim berupa fungsi delta Dirac:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \phi(p) e^{ipx/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, \left[C\sqrt{2\pi\hbar}\delta(p-q) \right] e^{ipx/\hbar} = Ce^{iqx/\hbar} . \tag{18}$$

Jika kita pilih $\phi(p) = C\sqrt{2\pi\hbar}g(p-q)$, diperoleh:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, C\sqrt{2\pi\hbar}g(p-q)e^{ipx/\hbar} = Ce^{iqx/\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dp'\, g(p')e^{ip'x/\hbar} . \tag{19}$$

Apabila $g(p-q) = g(p')$ tidak tepat sama dengan fungsi delta Dirac $\delta(p-q)$, namun hanya sangat menyerupai, yaitu bernilai sangat besar di sekitar $p = q$ atau $p' = 0$ serta nol untuk nilai p yang lain, berarti:

$$\psi(x) = Ce^{iqx/\hbar} \times \text{suatu fungsi yang hampir konstan} . \tag{20}$$

Inilah yang lebih sesuai dengan kenyataan. Ingat kembali ketidakpastian heisenberg:

$$\Delta p \Delta x \geqslant \frac{\hbar}{2} . \tag{21}$$

Dengan demikian, jika kita nyatakan ada suatu partikel bebas dengan momentum linier q, sesungguhnya ada suatu ketidakastian momentum linier Δq, yang berhubungan dengan ketidakpastian posisi Δx. Makin akurat pernyataan bahwa momentum linier partikel adalah q, berarti Δq makin sangat kecil dan akibatnya Δx makin sangat lebar. Makin lebarnya Δx menunjukkan makin kita tidak tahu pasti posisi partikel, dengan kata lain peluang mendapatkan partikel di sembarang posisi hampir sama dan ini direpresentasikan oleh "suatu fungsi yang hampir konstan" pada persamaan (20):

$$|\psi(x)|^2 = |C|^2 \times |\text{suatu fungsi yang hampir konstan}|^2 = \text{hampir konstan} . \tag{22}$$

3. Salah satu kesulitan yang diakibatkan fungsi gelombang yang tidak *square integrable* adalah dalam menentukan konstanta normalisasi. Namun, konstanta normalisasi dapat ditentukan dengan cara lain. Kita lihat fluks peluang $j(x)$ untuk partikel bebas:

$$\begin{aligned} j(x) &= \frac{\hbar}{2im}\left[\psi^* \frac{d}{dx}\psi(x) - \left(\frac{d}{dx}\psi^*(x)\right)\psi(x)\right] \\ &= \frac{\hbar}{2im}|C|^2\left[e^{-iqx/\hbar}\frac{d}{dx}e^{iqx/\hbar} - \left(\frac{d}{dx}e^{-iqx/\hbar}\right)e^{iqx/\hbar}\right] \\ &= \frac{\hbar}{2im}|C|^2\left(\frac{iq}{\hbar} - \frac{(-i)q}{\hbar}\right) \\ &= |C|^2\frac{q}{m} \\ &= |C|^2 v\,,\ \ (v = \text{ kecepatan partikel})\,. \end{aligned} \tag{23}$$

Ingat, misalkan dalam fisika listrik, bahwa fluks listrik adalah rapat muatan dikalikan dengan kecepatan muatan. Dengan demikian, $|C|^2$ pada persamaan (23) dapat kita nyatakan sebagai rapat partikel yang kita amati, sehingga konstanta normalisasi dapat dihitung atau ditentukan.

C. Degenerasi

Kita hanya lihat sedikit mengenai degenerasi di sini. Kita akan bahas degenerasi lebih detil di kesempatan berikutnya. Ambillah dua keadaan bebas yang berbeda:

$$\psi^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{iqx/\hbar} \qquad \text{dan} \qquad \psi^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-iqx/\hbar}\,. \tag{24}$$

Kita hitung momentum liniernya:

$$\hat{p}\psi^{(+)}(x) = q\psi^{(+)}(x) \qquad \text{dan} \qquad \hat{p}\psi^{(-)}(x) = -q\psi^{(-)}(x)\,. \tag{25}$$

Kita dapat lihat bahwa momentum linier kedua keadaan tersebut tidak sama, dalam hal ini besarnya sama namun arahnya saling berlawanan. Dalam kata lain, jika orang lakukan pengukuran momentum pada kedua keadaan itu, orang dapat melihat bahwa kedua keadaan tersebut tidak sama. Kini kita hitung energinya:

$$H\psi^{(+)}(x) = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi^{(+)}(x) = \frac{q^2}{2m}\psi^{(+)}(x) \quad \text{dan} \quad H\psi^{(-)}(x) = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi^{(-)}(x) = \frac{q^2}{2m}\psi^{(-)}(x)\,. \tag{26}$$

Kita lihat bahwa energi kedua keadaan tersebut sama. Dalam kata lain, jika orang lakukan pengukuran energi pada kedua keadaan itu, orang tidak dapat melihat bahwa kedua keadaan tersebut berbeda. Padahal, dua keadaan itu berbeda (kita sudah lihat momentum liniernya berbeda). Di sini orang temui ada degenerasi, yaitu dua atau lebih fungsi eigen berbeda memiliki nilai eigen yang sama; fungsi-fungsi eigen seperti itu merupakan fungsi-fungsi terdegenerasi.

D. Paritas

Operasi paritas adalah melakukan pencerminan terhadap pusat koordinat ($x \to -x$, $p \to -p$). Paritas menyatakan sifat simetri terhadap operasi paritas. Contoh, fungsi $\sin x$ memiliki paritas negatif, karena $\sin(-x) = -\sin x$, sebaliknya, fungsi $\cos x$ memiliki paritas positif, karena $\cos(-x) = \cos x$.

Kita ambil $\hat{P}$ sebagai operator paritas, yang bekerja pada suatu keadaan atau fungsi gelombang sebagai berikut:

$$\hat{P}\psi(x) = \psi(-x)\,. \tag{27}$$

Jika $\hat{P}$ dikerjakan dua kali berturut-turut, diperoleh fungsi gelombang semula:

$$\hat{P}^2\psi(x) = \hat{P}\hat{P}\psi(x) = \hat{P}\psi(-x) = \psi(x)\,. \tag{28}$$

Kita cari fungsi eigen dan nilai eigen operator paritas:

$$\begin{aligned}
\hat{P}u(x) &= \lambda u(x)\,, (u(x)\,\&\,\lambda = \text{ fungsi \& nilai eigen}) \\
\hat{P}^2u(x) &= \lambda\hat{P}u(x) = \lambda^2u(x) = u(x) \\
\to \lambda &= \pm 1 && (29) \\
\to \hat{P}u^{(+)}(x) &= u^{(+)}(x) && (30) \\
\hat{P}u^{(-)}(x) &= -u^{(-)}(x)\,. && (31)
\end{aligned}$$

Jadi, $u^{(+)}(x)$ fungsi eigen $\hat{P}$ dengan nilai eigen 1 dan $u^{(-)}(x)$ fungsi eigen $\hat{P}$ dengan nilai eigen -1.

Dengan operator paritas $\hat{P}$ kita dapat membuat fungsi gelombang dengan paritas positif maupun negatif:

$$\begin{aligned}
\psi^{(+)}(x) &= C(\psi(x) + \psi(-x)) = C(\psi(x) + \hat{P}\psi(x)) = C(1+\hat{P})\psi(x) && (32) \\
\to \hat{P}\psi^{(+)}(x) &= C\hat{P}(1+\hat{P})\psi(x) = C(\hat{P}+\hat{P}^2)\psi(x) = C(\hat{P}+1)\psi(x) = \psi^{(+)}(x) \\
\psi^{(-)}(x) &= C(\psi(x) - \psi(-x)) = C(\psi(x) - \hat{P}\psi(x)) = C(1-\hat{P})\psi(x) && (33) \\
\to \hat{P}\psi^{(-)}(x) &= C\hat{P}(1-\hat{P})\psi(x) = C(\hat{P}-\hat{P}^2)\psi(x) = C(\hat{P}-1)\psi(x) = -\psi^{(-)}(x)\,.
\end{aligned}$$

Sembarang fungsi gelombang $\psi(x)$ dapat dipecah menjadi 2 bagian, masing-masing dengan paritas positif dan negatif:

$$\begin{aligned}
\psi(x) &= \frac{1}{2}\psi(x) + \frac{1}{2}\psi(x) \\
&= \frac{1}{2}\psi(x) + \frac{1}{2}\psi(x) + \frac{1}{2}\psi(-x) - \frac{1}{2}\psi(-x) \\
&= \frac{1}{2}\left[\psi(x) + \psi(-x)\right] + \frac{1}{2}\left[\psi(x) - \psi(-x)\right] \\
&= \frac{1}{2}\psi^{(+)}(x) + \frac{1}{2}\psi^{(-)}(x)\,. && (34)
\end{aligned}$$

Jika hamiltonian bersifat simetrik, fungsi eigennya pasti memiliki simetri / paritas tertetu, positif (simetrik) atau negatif (antisimetrik). Hamiltonian terdiri dari suku kinetik dan suku potensial. Suku kinetik bersifat selalu simetrik. Dengan demikian, sifat simetri hamiltonian ditentukan oleh suku interaksi / potensialnya. Terkadang, suatu potensial tidak terlihat memiliki simetri, contoh:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \ (0 < x < a) \\ \infty & , \ (x < 0 \ \& \ x > a) \end{cases} . \tag{35}$$

Namun, sebetulnya $V(x)$ pada persamaan (35) bersifat simetrik, hanya saja sifat simetriknya tidak tampak jelas, karena titik pusat koordinat ditaruh di $x = 0$. Jika titik pusat koordinat ditaruh di $x = a/2$, sifat simetrik $V(x)$ jelas terlihat:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \ (-a/2 < x < a/2) \\ \infty & , \ (|x| > a/2) \end{cases} . \tag{36}$$

Dengan demikian, penting menempatkan pusat koordinat demi kemudahan pemahaman dan perhitungan.

Mari kita anggap bahwa hamiltonian H dan operator paritas $\hat{P}$ saling komut:

$$[H, \hat{P}] = H\hat{P} - \hat{P}H = 0 \, . \tag{37}$$

Kita ambil persamaan Schrödinger bergantung waktu:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = H\psi(x,t) \, . \tag{38}$$

Kemudian, kerjakan operasi paritas:

$$\hat{P} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x,t) = \hat{P} H\psi(x,t) \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{P}\psi(x,t) = \hat{P} H\psi(x,t) \, . \tag{39}$$

Terapkan persamaan (37):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{P}\psi(x,t) = H\hat{P}\psi(x,t) \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\hat{P}\psi(x,t)\right] = H \left[\hat{P}\psi(x,t)\right] \, . \tag{40}$$

Dengan kata lain, $\hat{P}\psi(x,t)$ juga merupakan solusi persamaan Schrödinger yang sama. Kita lakukan lebih eksplisit, ambil fungsi eigen paritas:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\hat{P}\psi^{(+)}(x,t)\right] = H \left[\hat{P}\psi^{(+)}(x,t)\right] \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^{(+)}(x,t) = H\psi^{(+)}(x,t) \tag{41}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\hat{P}\psi^{(-)}(x,t)\right] = H \left[\hat{P}\psi^{(-)}(x,t)\right] \to i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^{(-)}(x,t) = H\psi^{(-)}(x,t) \, . \tag{42}$$

Kita lihat bahwa $\psi^{(+)}(x,t)$ dan $\psi^{(-)}(x,t)$ masing-masing memenuhi persamaan Schrödinger secara terpisah, tidak bercampur. Pada persamaan (41) hanya terdapat $\psi^{(+)}(x,t)$, pada persamaan (42) hanya terdapat $\psi^{(-)}(x,t)$. Ini berarti, dengan berjalannya waktu, paritas sistem / partikel / fungsi gelombang tetap; jika awalnya positif, tetap positif; jika awalnya negatif, tetap negatif. Ini disebabkan kita telah menerapkan bahwa H dan $\hat{P}$ saling komut (persamaan (37)). Dengan demikian, disimpulkan bahwa apabila suatu operator $\hat{A}$ komut dengan hamiltonian, $[H, \hat{A}] = 0$, maka nilai besaran yang direpresentasikan oleh operator $\hat{A}$ tersebut tetap. Contoh mudah, H komut dengan H, $[H, H] = 0$, karena itu energi total tetap.