Catatan Mekanika Kuantum 1

Keadaan Terikat pada Potensial Sumur, Potensial Fungsi Delta, Osilator Harmonik

Acuan utama Gasiorowicz, *Quantum Physics* Ed. 3, Bab 4, Subbab 5 – 7

A. Keadaan Terikat pada Potensial Sumur

Kita kembali ke potensial sumur berikut:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \ (x < -a) \\ -V_0 & , \ (-a < x < a) \\ 0 & , \ (x > a) \end{cases} \quad . \tag{1}$$

Kini, kita bahas kasus dengan energi total E negatif $(-V_0 < E < 0)$. Ada tiga daerah yang diamati, dengan dua bidang batas, yaitu di titik $x = -a$ dan $x = a$. Kita mulai dengan persamaan Schrödinger, yang kita ubah menjadi persamaan differensial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V(x)u(x) = Eu(x) = -|E|u(x) \tag{2}$$

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) - \frac{2m[|E| + V(x)]}{\hbar^2}u(x) = 0 \tag{3}$$

Energi total E tetap sama, baik di daerah 1 $(x < -a)$, daerah 2 $(x > a)$, maupun di daerah potensial $(-a < x < a)$.

- Daerah 1 $(x < -a)$:

$$\frac{d^2}{dx^2}u_1(x) - \frac{2m|E|}{\hbar^2}u_1(x) = 0$$

$$\rightarrow \frac{d^2}{dx^2}u_1(x) - \alpha^2 u_1(x) = 0\,, \ \left(\alpha^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}\right) \tag{4}$$

$$\rightarrow u_1(x) = C_1 e^{\alpha x} \tag{5}$$

$$\frac{d}{dx}u_1(x) = \alpha C_1 e^{\alpha x} = \alpha u_1(x) \tag{6}$$

$$j_1(x) = 0\,. \tag{7}$$

Perhatikan bahwa jika $u_1(x)$ mengandung suku $e^{-\alpha x}$, maka $u_1(x) \rightarrow \infty$ pada $x \rightarrow -\infty$, yang berarti peluang mendapatkan partikel di daerah 1 tak berhingga. Ini tidak sesuai keadaan fisis, yaitu di daerah $x < -a$ partikel tidak ada, sehingga fungsi gelombangnya harus cepat meluruh dengan bergesernya x ke arah negatif. Dengan demikian, $u_1(x)$ hanya berisi suku $e^{\alpha x}$.

- Daerah 2 ($x > a$):

$$\frac{d^2}{dx^2}u_2(x) - \frac{2m|E|}{\hbar^2}u_2(x) = 0$$
$$\to \frac{d^2}{dx^2}u_2(x) - \alpha^2 u_2(x) = 0 \tag{8}$$
$$\to u_2(x) = C_2 e^{-\alpha x} \tag{9}$$
$$\frac{d}{dx}u_2(x) = -\alpha C_2 e^{-\alpha x} = -\alpha u_2(x) \tag{10}$$
$$j_2(x) = 0\,. \tag{11}$$

Perhatikan bahwa jika $u_2(x)$ mengandung suku $e^{\alpha x}$, maka $u_2(x) \to \infty$ pada $x \to \infty$, yang berarti peluang mendapatkan partikel di daerah 2 tak berhingga, tidak sesuai keadaan fisis. Dengan demikian, $u_2(x)$ hanya berisi suku $e^{-\alpha x}$.

- Daerah potensial ($-a < x < a$):

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) + \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2}u(x) = 0$$
$$\to \frac{d^2}{dx^2}u(x) + q^2 u(x) = 0\,, \left(q^2 = \frac{2m(V_0 - |E|)}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - \alpha^2\right) \tag{12}$$
$$\to u(x) = A\cos qx + B\sin qx \tag{13}$$
$$\frac{d}{dx}u(x) = -q(A\sin qx - B\cos qx) \tag{14}$$
$$j(x) = 0\,. \tag{15}$$

Fluks bernilai nol bukan berarti tidak ada partikel, melainkan bahwa di darah ini fluks partikel ke dua arah x positif maupun x negatif sama besar. Hukum kekekalan fluks dipenuhi, bahwa di seluruh daerah (daerah 1, daerah 2, daerah potensial) nilai fluks tetap, yaitu nol.

- Ingat kembali pembahasan mengenai paritas bahwa jika hamiltonian H bersifat simetrik, fungsi eigennya memiliki paritas tertentu, positif (genap) atau negatif (ganjil). Dengan demikian, ada dua kasus di sini, yaitu keadaan dengan paritas positif $u(x) = u^{(+)}(x) = A\cos qx$ dan keadaan dengan paritas negatif $u(x) = u^{(-)}(x) = B\sin qx$. Hasil yang sama juga diperoleh secara matematis sebagai berikut:

  Kita tinjau di bidang batas $x = -a$. Sesuai syarat kontinyu:

$$u(-a) = u_1(-a) \to A\cos qa - B\sin qa = C_1 e^{-\alpha a} \tag{16}$$
$$\frac{d}{dx}u(x)|_{x=-a} = \frac{d}{dx}u_1(x)|_{x=-a} \to q(A\sin qa + B\cos qa) = \alpha C_1 e^{-\alpha a} \tag{17}$$
$$\to \alpha = q\frac{A\sin qa + B\cos qa}{A\cos qa - B\sin qa}\,. \tag{18}$$

  Kita tinjau di bidang batas $x = a$. Sesuai syarat kontinyu:

$$u(a) = u_2(a) \to A\cos qa + B\sin qa = C_2 e^{-\alpha a} \tag{19}$$

$$\frac{d}{dx}u(x)|_{x=a} = \frac{d}{dx}u_2(x)|_{x=a} \to -q(A\sin qa - B\cos qa) = -\alpha C_2 e^{-\alpha a} \tag{20}$$

$$\to \alpha = q\frac{A\sin qa - B\cos qa}{A\cos qa + B\sin qa}\,. \tag{21}$$

Dari persamaan (18) dan (21) diperoleh:

$$\frac{A\sin qa + B\cos qa}{A\cos qa - B\sin qa} = \frac{A\sin qa - B\cos qa}{A\cos qa + B\sin qa} \tag{22}$$

$$\to (A\sin qa + B\cos qa)(A\cos qa + B\sin qa) = (A\sin qa - B\cos qa)(A\cos qa - B\sin qa)$$

$$\to (A^2 + B^2)\sin qa\cos qa + AB = (A^2 + B^2)\sin qa\cos qa - AB$$

$$\to AB = -AB = 0\,. \tag{23}$$

Persamaan (23) berarti bahwa ada dua kasus, yaitu $B = 0$ dan $A = 0$. Kita tidak ambil kasus $A = B = 0$, karena itu berarti bahwa $u(x) = 0$ atau tidak ada partikel di daerah potensial.

Pada kasus $B = 0$, $u(x) = u^{(+)}(x) = A\cos qx \to u^{(+)}(-a) = A\cos qa = C_1 e^{-\alpha a}$ dan $u^{(+)}(a) = A\cos qa = C_2 e^{-\alpha a} \to C_1 = C_2 = C$.

Pada kasus $A = 0$, $u(x) = u^{(-)}(x) = B\sin qx \to u^{(-)}(-a) = -B\sin qa = C_1 e^{-\alpha a}$ dan $u^{(-)}(a) = B\sin qa = C_2 e^{-\alpha a} \to C_1 = -C_2 = C$.

(a) Keadaan dengan paritas positif:

Untuk keadaan dengan paritas positif, persamaan (18) dan juga (21) menjadi:

$$\alpha = q\tan qa$$

$$\to \alpha a = qa\tan qa$$

$$\to \sqrt{(\alpha a)^2} = qa\tan qa$$

$$\to \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} - (qa)^2} = qa\tan qa$$

$$\to \sqrt{\lambda - y^2} = y\tan y\,, \quad \left(y = qa\,,\ \lambda = \frac{2mV_0a^2}{\hbar^2}\right)$$

$$\to \frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = \tan y\,. \tag{24}$$

Konstanta λ berisi parameter interaksi, *strength*-nya V_0 dan *range*-nya a, sedangkan variabel y berisi energi $|E|$. Persamaan (24) merupakan problem akar fungsi:

$$f(y) = \frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} - \tan y = 0 \to y = ? \tag{25}$$

Dengan mencari nilai y yang memenuhi persamaan (24) atau (25), kita dapatkan nilai energi $|E|$ yang mungkin untuk partikel dalam sumur potensial itu.

Metode numerik untuk mencari akar fungsi dipelajari di kuliah Fisika Komputasi. Kita selesaikan di sini secara kualitatif untuk mendapatkan gambaran tentang keadaan terikat dengan paritas positif pada sumur potensial. Lihat Gasiorowicz Fig. 4-7. Ruas kiri dan ruas kanan persamaan (24) di plot pada satu grafik dengan sumbu horisontal y, titik-titik potongnya merepresentasikan keadaan-keadaan yang memenuhi persamaan (24). Figure 4-7 menunjukkan contoh beberapa variasi nilai λ, yang berarti beberapa potensial berbeda *strength* atau *range* atau keduanya. Makin besar nilai λ, berarti makin kuat dan / atau makin jauh jangkauan potensialnya, terlihat makin banyak titik potong pada grafik, yang berarti makin banyak keadaan terikat yang mungkin, masing-masing dengan energi berbeda. Dapat dibayangkan bahwa sekecil-kecilnya λ, yang berarti selemah-lemahnya dan / atau sependek-pendeknya jangkauan potensial, selalu mungkin terdapat minimal satu keadaan terikat di $y \to 0$. Apabila λ sangat besar, maka kurva ruas kiri persamaan (24) relatif mendatar, sehingga jarak antar dua titik potong yang berurutan $\simeq \pi$, titik potong ada di:

$$y \simeq \left(n + \frac{1}{2}\right)\pi\,,\ n = 0, 1, 2, 3, ... \tag{26}$$

dan keadaan terikat terbentuk dengan energi:

$$E \simeq \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} - V_0\,,\ n = 0, 1, 2, 3, ... \tag{27}$$

(b) Keadaan dengan paritas negatif:

Untuk keadaan dengan paritas negatif, persamaan (18) dan juga (21) menjadi:

$$\begin{aligned} \alpha &= -\,q \cot qa \\ \to \alpha a &= -\,qa \cot qa \\ \to \sqrt{\lambda - y^2} &= -\,y \cot y \\ \to \frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} &= -\cot y\,. \end{aligned} \tag{28}$$

Kita selesaikan di sini secara kualitatif untuk mendapatkan gambaran tentang keadaan terikat dengan paritas negatif pada sumur potensial. Lihat Gasiorowicz Fig. 4-8. Ruas kiri dan ruas kanan persamaan (28) di plot pada satu grafik dengan sumbu horisontal y, titik-titik potongnya merepresentasikan keadaan-keadaan yang memenuhi persamaan (28). Figure 4-8 menunjukkan bahwa titik potong tidak mungkin ada pada daerah $y < \pi/2$. Titik potong mungkin terbentuk pada nilai y terkecil yaitu $y = \pi/2$ dan $\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = 0$ atau $\lambda = y^2 = \pi^2/4$. Dengan demikian, keadaan terikat dengan paritas negatif pada sumur potensial dapat terbentuk apabila dipenuhi syarat berikut:

$$\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2} \geqslant \frac{\pi^2}{4} \to V_0a^2 \geqslant \frac{\pi^2\hbar^2}{8m}\,. \tag{29}$$

Apabila λ sangat besar, maka kurva ruas kiri persamaan (28) relatif mendatar, sehingga jarak antar dua titik potong yang berurutan $\simeq \pi$, titik potong ada di:

$$y \simeq n\pi\,,\ n = 1, 2, 3, ... \tag{30}$$

dan keadaan terikat terbentuk dengan energi:

$$E \simeq \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} - V_0\,,\ n = 1, 2, 3, ... \tag{31}$$

B. Potensial Delta Dirac

Kita ambil sebuah potensial atraktif berisi sebuah fungsi delta Dirac $\delta(x)$ sebagai berikut:

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\lambda}{a}\delta(x)\,, \tag{32}$$

dengan m massa partikel, λ suatu parameter tak berdimensi, yang menyatakan *strength* potensial, dan a suatu nilai berdimensi panjang. Kita amati kasus dengan energi total negatif, dengan kata lain, kita akan perhatikan keadaan terikat. Setelah potensial $V(x)$ dimasukkan ke persamaan Schrödinger, kita peroleh persamaan differensial berikut:

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) - \kappa^2 u(x) = -\frac{\lambda}{a}\delta(x)u(x)\,,\ \left(\kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}\right)\,. \tag{33}$$

Kecuali untuk $x = 0$, persamaan (33) menjadi:

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) - \kappa^2 u(x) = 0\,, \tag{34}$$

dengan solusi umum:

$$u(x) = e^{\kappa x} + e^{-\kappa x}\,. \tag{35}$$

Sesuai syarat fisis bahwa fungsi gelombang di ujung jagad nol, maka $u(x)$ menjadi:

$$u(x) = \begin{cases} e^{\kappa x} & ,\ (x < 0) \\ e^{-\kappa x} & ,\ (x > 0) \end{cases}\,. \tag{36}$$

Fungsi gelombang tetap kontinyu pada $x \to 0$, namun turunan pertamanya tidak kontinyu, sebagai konsekuensi dari potensial yang berisi fungsi delta Dirac (untuk sembarang potensial yang tidak berisi fungsi delta Dirac, turunan pertama fungsi gelombang kontinyu):

$$\begin{aligned}\lim_{\epsilon\to 0}\left(\frac{d}{dx}u(x)\bigg|_{x=\epsilon} - \frac{d}{dx}u(x)\bigg|_{x=-\epsilon}\right) &= \lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\,\frac{d}{dx}\frac{d}{dx}u(x) \\ &= \lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\,\frac{d^2}{dx^2}u(x) \\ &= \lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\,\left(\kappa^2 u(x) - \frac{\lambda}{a}\delta(x)u(x)\right) \\ &= 0 - \frac{\lambda}{a}\lim_{\epsilon\to 0}\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\,\delta(x)u(x) \\ &= -\frac{\lambda}{a}u(0) \\ &\neq 0\,. \end{aligned} \tag{37}$$

Dari persamaan (36) kita dapatkan:

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left(\frac{d}{dx}u(x)\bigg|_{x=\epsilon} - \frac{d}{dx}u(x)\bigg|_{x=-\epsilon}\right) = \lim_{\epsilon\to 0}\left(-\kappa u(\epsilon) - \kappa u(-\epsilon)\right)\,. \tag{38}$$

Dari persamaan (37) dan (38) diperoleh:

$$-\kappa - \kappa = -2\kappa = -\frac{\lambda}{a} \to \kappa = \frac{\lambda}{2a} \,. \tag{39}$$

Persamaan (39) memberikan energi keadaan terikat pada potensial delta Dirac:

$$E = -\frac{\lambda^2 \hbar^2}{8ma^2} \,. \tag{40}$$

Kita lihat bahwa hanya ada satu keadaan terikat yang mungkin, dengan energi sebesar yang ditunjukkan oleh persamaan (40). Makin kuat potensial itu (λ makin besar), makin kuat ikatannya (E makin negatif).

Kini, kita lihat kasus untuk potensial delta Dirac ganda berikut:

$$V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\lambda}{a}\left[\delta(x-a) + \delta(x+a)\right] \,, \tag{41}$$

dalam hal ini a menunjukkan ukuran potensial ($2a$ adalah jarak antar dua titik singular pada potensial). Dari persamaan Schrödinger dengan potensial pada persamaan (41), diperoleh persamaan differensial untuk tiga daerah berbeda $x < -a$, $-a < x < a$, dan $x > a$:

$$\frac{d^2}{dx^2}u(x) - \kappa^2 u(x) = 0 \,, \quad \left(\kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}\right) \,. \tag{42}$$

Solusi persamaan (42) yang memenuhi syarat fisis adalah:

$$u(x) = \begin{cases} C_1 e^{\kappa x} & , \ (x < -a) \\ C_3 e^{\kappa x} + C_4 e^{-\kappa x} & , \ (-a < x < a) \\ C_2 e^{-\kappa x} & , \ (x > a) \end{cases} \,. \tag{43}$$

Melihat $V(x)$ simetrik, yang berarti hamiltonian H juga simetrik, maka fungsi gelombang atau keadaan partikel memiliki paritas tertentu. Jadi, ada dua kasus, yaitu keadaan dengan paritas positif dan keadaan dengan paritas negatif.

(a) Keadaan dengan paritas positif:

Dari persamaan (43), fungsi gelombang dengan paritas positif diperoleh sebagai berikut:

$$u(x) = \begin{cases} e^{\kappa x} & , \ (x < -a) \\ A \cosh \kappa x & , \ (-a < x < a) \\ e^{-\kappa x} & , \ (x > a) \end{cases} \,. \tag{44}$$

Kita lakukan perhitungan seperti persamaan (37) dan (38) di sekitar titik $x = a$ (kita cukup melakukannya hanya di sekitar titik $x = a$, tanpa melakukan hal yang sama di sekitar titik $x = -a$, karena hamiltonian simetrik, sehingga hasilnya sama apabila kita lakukan juga di titik $x = -a$). Dengan mengingat sifat kontinyu fungsi gelombang:

$$\lim_{\epsilon \to 0}\left(e^{-\kappa(a+\epsilon)} - A\cosh\kappa(a-\epsilon)\right) = 0 \,, \tag{45}$$

diperoleh:

$$e^{-\kappa a} = A\cosh\kappa a \tag{46}$$

$$-\kappa e^{-\kappa a} - \kappa A\sinh\kappa a = -\frac{\lambda}{a}e^{-\kappa a}\,. \tag{47}$$

Persamaan (47) dibagi persamaan (46), diperoleh:

$$\tanh y = \frac{\lambda}{y} - 1\,,\ (y = \kappa a)\,. \tag{48}$$

Dengan mencari akar fungsi pada persamaan (48) (nilai y untuk titik potong ruas kiri dan ruas kanan persamaan (48) pada grafik dalam Gasiorowicz Fig. 4-14), kita dapatkan nilai κ dan kemudian nilai energi E untuk keadaan terikat dengan paritas positif pada potensial delta Dirac ganda. Dari grafik pada Fig. 4-14, dapat disimpulkan bahwa selalu dapat terbentuk keadaan terikat dengan paritas positif, karena selalu ada titik potong. Mengingat $0 < |E| < \infty$, yang berarti $0 < \tanh y < 1$, maka didapat batasan nilai y dan juga κ yang mungkin:

$$0 < \frac{\lambda}{y} - 1 < 1 \to \lambda > y > \frac{\lambda}{2} \to \frac{\lambda}{a} > \kappa > \frac{\lambda}{2a}\,. \tag{49}$$

Dibandingkan dengan nilai κ untuk keadaan terikat pada potensial delta Dirac di persamaan (39), untuk keadaan terikat dengan paritas positif pada potensial delta Dirac ganda nilai κ lebih besar, berarti $|E|$ lebih besar atau E lebih negatif. Dengan demikian, ikatan untuk keadaan dengan paritas positif pada potensial delta Dirac ganda lebih kuat dari ikatan pada potensial delta Dirac tunggal.

Persamaan (48) dapat diuraikan sebagai berikut:

$$\frac{\lambda}{y} - 1 = \tanh y = \frac{e^{y} - e^{-y}}{e^{y} + e^{-y}} = \frac{1 - e^{-2y}}{1 + e^{-2y}}\,, \tag{50}$$

sehingga didapatkan problem akar fungsi yang sama, namun dalam bentuk lain:

$$e^{-2y} = \frac{2y}{\lambda} - 1 \quad \text{atau} \quad 2y = \lambda\left(1 + e^{-2y}\right)\,. \tag{51}$$

(b) Keadaan dengan paritas negatif:

Kita lakukan hal yang sama seperti untuk keadaan dengan paritas positif. Dari persamaan (43), fungsi gelombang dengan paritas negatif diperoleh sebagai berikut:

$$u(x) = \begin{cases} -e^{\kappa x} & ,\ (x < -a) \\ A\sinh\kappa x & ,\ (-a < x < a) \\ e^{-\kappa x} & ,\ (x > a) \end{cases}\,. \tag{52}$$

Kita lakukan perhitungan seperti persamaan (37) dan (38) di sekitar titik $x = a$ (kita cukup melakukannya hanya di sekitar titik $x = a$). Dengan mengingat sifat kontinyu fungsi gelombang:

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left(e^{-\kappa(a+\epsilon)} - A\sinh\kappa(a-\epsilon)\right) = 0\,, \tag{53}$$

diperoleh:

$$e^{-\kappa a} = A \sinh \kappa a \tag{54}$$

$$-\kappa e^{-\kappa a} - \kappa A \cosh \kappa a = -\frac{\lambda}{a} e^{-\kappa a}\,. \tag{55}$$

Persamaan (55) dibagi persamaan (54), diperoleh:

$$\coth y = \frac{\lambda}{y} - 1\,,\ (y = \kappa a)\,, \tag{56}$$

yang kebalikannya adalah:

$$\tanh y = \left(\frac{\lambda}{y} - 1\right)^{-1}\,. \tag{57}$$

Dengan mencari akar fungsi pada persamaan (57) (nilai y untuk titik potong ruas kiri dan ruas kanan persamaan (57) pada grafik dalam Gasiorowicz Fig. 4-16), kita dapatkan nilai κ dan kemudian nilai energi E untuk keadaan terikat dengan paritas negatif pada potensial delta Dirac ganda. Namun, Gasiorowicz Fig. 4-16 menunjukkan bahwa tidak selalu dapat terbentuk keadaan terikat dengan paritas negatif, karena tidak selalu ada titik potong. Keadaan terikat dengan paritas negatif dapat terbentuk apabila di $y = 0$ gradien ruas kiri lebih besar dari gradien ruas kanan persamaan (57).

$$\left.\frac{d}{dy} \tanh y\right|_{y=0} = (1 - \tanh^2 y)_{y=0} = 1 \tag{58}$$

$$\left.\frac{d}{dy}\left(\frac{\lambda}{y} - 1\right)^{-1}\right|_{y=0} = \left.\frac{\lambda}{(\lambda - y)^2}\right|_{y=0} = \frac{1}{\lambda}\,. \tag{59}$$

Dengan demikian, syarat terbentuk keadaan terikat dengan paritas negatif adalah:

$$1 > \frac{1}{\lambda} \to \lambda > 1\,. \tag{60}$$

Apabila keadaan terikat dengan paritas negatif terbentuk, mengingat $0 < |E| < \infty$, yang berarti $0 < \tanh y < 1$, maka dari persamaan (57) didapat batasan nilai y dan juga κ yang mungkin:

$$0 < \left(\frac{\lambda}{y} - 1\right)^{-1} < 1 \to 0 < \frac{y}{\lambda - y} < 1 \to 0 < y < \frac{\lambda}{2} \to 0 < \kappa < \frac{\lambda}{2a}\,. \tag{61}$$

Dibandingkan dengan nilai κ untuk keadaan terikat pada potensial delta Dirac di persamaan (39), untuk keadaan terikat dengan paritas negatif pada potensial delta Dirac ganda nilai κ lebih kecil, berarti $|E|$ lebih kecil atau E kurang negatif. Dengan demikian, ikatan untuk keadaan dengan paritas negatif pada potensial delta Dirac ganda lebih lemah dari ikatan pada potensial delta Dirac tunggal, juga lebih lemah dari ikatan untuk keadaan dengan paritas positif.

C. Osilator Harmonik

Potensial osilator harmonik adalah:

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2\,, \tag{62}$$

dengan k konstanta pegas (jika dilihat sebagai osilasi harmonik pegas) dan ω frekuensi osilasi.

- Dari persamaan Schrödinger dengan potensial osilator harmonik diperoleh persamaan differensial berikut:

$$\begin{aligned}
&\frac{d^2}{dx^2}u(x) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)u(x) = 0 \\
&\to \frac{d^2}{dx^2}u(x) + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)u(x) = 0 \\
&\to \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{-1}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)u(x) = 0 \\
&\to \frac{d^2}{dy^2}u(y) + \left(\epsilon - y^2\right)u(y) = 0\,, \quad \left(y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\,,\ \epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}\right)\,,
\end{aligned} \tag{63}$$

dengan baik y maupun ϵ tak berdimensi.

- Untuk daerah $y \to \infty$, suku ϵ pada persamaan differensial (63) dapat diabaikan, sehingga diperoleh:

$$\begin{aligned}
&\frac{d^2}{dy^2}u(y) - y^2u(y) = 0 \\
&\to \frac{d}{dy}\frac{d}{dy}u(y) - y^2u(y) = 0 \\
&\to \left(2\frac{d}{dy}u(y)\right)^{-1}\frac{d}{dy}\left(\frac{d}{dy}u(y)\right)^2 - y^2u(y) = 0 \\
&\to \frac{d}{dy}\left(\frac{d}{dy}u(y)\right)^2 - 2y^2u(y)\frac{d}{dy}u(y) = 0 \\
&\to \frac{d}{dy}\left(\frac{d}{dy}u(y)\right)^2 - y^2\frac{d}{dy}u^2(y) = 0 \\
&\to \frac{d}{dy}\left(\frac{d}{dy}u(y)\right)^2 - y^2\frac{d}{dy}u^2(y) - 2yu^2(y) + 2yu^2(y) = 0 \\
&\to \frac{d}{dy}\left(\frac{d}{dy}u(y)\right)^2 - \frac{d}{dy}y^2u^2(y) + 2yu^2(y) = 0 \\
&\to \frac{d}{dy}\left[\left(\frac{d}{dy}u(y)\right)^2 - y^2u^2(y)\right] = -\,2yu^2(y)\,.
\end{aligned} \tag{64}$$

Kita anggap fungsi gelombang memenuhi syarat fisis, yaitu pada $y \to \infty$ $u(y) \to 0$, sehingga ruas kanan persamaan (64) dapat diabaikan:

$$\frac{d}{dy}\left[\left(\frac{d}{dy}u(y)\right)^2 - y^2u^2(y)\right] = 0 \tag{65}$$

dan diperoleh:

$$\left(\frac{d}{dy}u(y)\right)^2 - y^2u^2(y) = C\,. \tag{66}$$

Karena, sesuai syarat fisis, fungsi gelombang dan turunan pertamanya di ujung jagad sama dengan nol, berarti $C = 0$ dan didapatkan:

$$\frac{d}{dy}u(y) = \pm yu(y)\,. \tag{67}$$

Persamaan yang memenuhi syarat fisis adalah:

$$\frac{d}{dy}u(y) = -yu(y)\,, \tag{68}$$

dengan solusi:

$$u(y) \sim e^{-\frac{1}{2}y^2}\,, \tag{69}$$

yang memenuhi anggapan awal bahwa ruas kanan persamaan (64) dapat diabaikan jika $y \to \infty$ (bandingkan tiap suku persamaan (64) untuk $u(y)$ dari persamaan (69) pada $y \to \infty$).

- Solusi umum persamaan (63) kini daat ditulis sebagai:

$$u(y) = h(y)e^{-\frac{1}{2}y^2}\,, \tag{70}$$

dengan $h(y)$ suatu fungsi yang akan ditentukan. Kita masukkan $u(y)$ dari persamaan (70) ke persamaan (63), diperoleh persamaan differensial untuk $h(y)$:

$$\frac{d^2}{dy^2}h(y) - 2y\frac{d}{dy}h(y) + (\epsilon - 1)h(y) = 0\,. \tag{71}$$

Kita cari $h(y)$ dengan teknik solusi deret (ingat kuliah Fisika Matematika 3):

$$h(y) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j y^j\,, \tag{72}$$

masukkan ke persamaan (71):

$$\begin{aligned}
&\sum_{j=0}^{\infty} j(j-1)a_j y^{j-2} - \sum_{j=0}^{\infty} 2ja_j y^j + \sum_{j=0}^{\infty}(\epsilon - 1)a_j y^j = 0 \\
&\quad \to \sum_{j=2}^{\infty} j(j-1)a_j y^{j-2} - \sum_{j=0}^{\infty}(2j - \epsilon + 1)a_j y^j = 0 \\
&\to \sum_{p=0}^{\infty}(p+2)(p+1)a_{p+2}y^p - \sum_{j=0}^{\infty}(2j - \epsilon + 1)a_j y^j = 0\,,\ (p = j-2) \\
&\to \sum_{j=0}^{\infty}(j+2)(j+1)a_{j+2}y^j - \sum_{j=0}^{\infty}(2j - \epsilon + 1)a_j y^j = 0 \\
&\quad \to \sum_{j=0}^{\infty}[(j+2)(j+1)a_{j+2} - (2j - \epsilon + 1)a_j]y^j = 0\,,
\end{aligned} \tag{73}$$

diperoleh relasi rekursi:

$$a_{j+2} = \frac{2j - \epsilon + 1}{(j+2)(j+1)}a_j\,. \tag{74}$$

Jika a_0 diketahui, maka semua suku deret dengan j genap diketahui, dan jika a_1 diketahui, maka semua suku deret dengan j ganjil diketahui. Jika $a_1 = 0$, deret hanya terdiri dari suku-suku dengan j genap, paritasnya positif, jika $a_0 = 0$, deret hanya terdiri dari suku-suku dengan j ganjil, paritasnya negatif. Suku-suku deret dengan j genap terpisahkan dari suku-suku dengan j ganjil, berarti ada dua keadaan paritas yang masing-masing berdiri sendiri, ini sesuai dengan sifat bahwa apabila hamiltonian simetrik, maka keadaan partikel atau sistem memiliki paritas tertentu, positif atau negatif.

- Sesuai syarat fisis, pada $y \to \infty$ $u(y) \to 0$:

$$\lim_{y\to\infty} u(y) = \lim_{y\to\infty} e^{-\frac{1}{2}y^2} \sum_{j=0}^{\infty} a_j y^j \to 0\,. \tag{75}$$

Dengan demikian, deret $h(y)$ tidak boleh merupakan deret tak berhingga, melainkan harus berhenti pada suku tertentu $j = n$, yaitu:

$$a_{n+2} = \frac{2n-\epsilon+1}{(n+2)(n+1)} a_n = 0 \to 2n-\epsilon+1 = 0 \to \epsilon = 2n+1\,. \tag{76}$$

Diperoleh energi E osilator harmonik sebagai berikut:

$$E = \frac{1}{2}\epsilon\hbar\omega = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,,\ \ (n = 0, 1, 2, ...)\,. \tag{77}$$

Persamaan differensial (71) menjadi:

$$\frac{d^2}{dy^2}h(y) - 2y\frac{d}{dy}h(y) + 2nh(y) = 0\,, \tag{78}$$

yang sudah dikenal sebagai persamaan differensial untuk polinomial Hermite, sehingga:

$$h(y) = H_n(y)\,, \tag{79}$$

dengan $H_n(y)$ polinomial Hermite orde n. Dengan demikian, fungsi gelombang osilator harmonik adalah:

$$u_n(y) = H_n(y)e^{-\frac{1}{2}y^2}\,. \tag{80}$$

Menarik untuk diperhatikan bahwa pada keadaan energ terendah (*groundstate*) energi tidak nol. Sifat kuantum ini menjelaskan, contoh, bahwa helium tidak membeku pada temperatur sangat rendah, melainkan tetap cair, bahwa pada keadaan energi terendah pun partikel tidak diam, melainkan tetap bergerak.