Catatan Mekanika Kuantum 1

Persamaan Schrödinger 3 Dimensi

Acuan utama Gasiorowicz, *Quantum Physics* Ed. 3, Bab 8, Subbab 1, 4, 5

A. Persamaan Schrödinger 3 dimensi

Persamaan Schrödinger 3 dimensi (3D) untuk sistem bermassa μ dalam keadaan tunak $|\psi\rangle$ dituliskan sebagai berikut:[1]

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}})\right)|\psi\rangle = E|\psi\rangle\,. \tag{1}$$

Di sini $\hat{\mathbf{r}}$ adalah operator posisi dan $\hat{\mathbf{p}}$ operator momentum. Dalam representasi posisi $\mathbf{r}$:

$$\hat{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{i}\nabla \tag{2}$$

$$\hat{V}(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \tag{3}$$

dan persamaan Schrödinger menjadi:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})\,. \tag{4}$$

Apabila, sebagai contoh, kita gunakan kerangka Cartesian, maka:

$$\hat{\mathbf{p}} = \hat{\mathbf{e}}_x\hat{p}_x + \hat{\mathbf{e}}_y\hat{p}_y + \hat{\mathbf{e}}_z\hat{p}_z \tag{5}$$

$$\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{e}}_x\hat{x} + \hat{\mathbf{e}}_y\hat{y} + \hat{\mathbf{e}}_z\hat{z} \tag{6}$$

$$\hat{V}(\hat{\mathbf{r}}) = \hat{V}(\hat{x},\hat{y},\hat{z})\,, \tag{7}$$

sehingga persamaan Schrödinger dituliskan sebagai:

$$\frac{1}{2\mu}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right)|\psi\rangle + \hat{V}(\hat{x},\hat{y},\hat{z})|\psi\rangle = E|\psi\rangle\,. \tag{8}$$

Dalam representasi posisi:

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\,,\ \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\,,\ \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \tag{9}$$

$$\hat{x} = x\,,\ \hat{y} = y\,,\ \hat{z} = z\,, \tag{10}$$

dan persamaan Schrödinger menjadi:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z) + V(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)\,. \tag{11}$$

[1] Sesungguhnya, μ adalah massa tereduksi (*reduced mass*) sistem yang terdiri dari 2 benda / partikel atau lebih.

Kita lanjutkan bekerja di ruang posisi dan ambil kasus khusus, yaitu:

$$V(x,y,z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)\,, \tag{12}$$

maka diperoleh persamaan Schrödinger berikut:

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z) + \left(V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)\right)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \\
\rightarrow \quad & \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V_1(x)\right)\psi(x,y,z) \\
& + \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + V_2(y)\right)\psi(x,y,z) \\
& + \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_3(z)\right)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)\,.
\end{aligned} \tag{13}$$

Persamaan (13) memberi sinyal bahwa kita dapat lakukan separasi variabel. Dengan mengambil fungsi gelombang $\psi(x,y,z)$ sebagai berikut:

$$\psi(x,y,z) = u(x)v(y)w(z)\,, \tag{14}$$

teknik separasi variabel memberikan 3 persamaan Schrödinger terpisah, sehingga lebih mudah untuk diselesaikan:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}u(x) + V_1(x)u(x) = E_1 u(x) \tag{15}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dy^2}v(y) + V_2(y)v(y) = E_2 v(y) \tag{16}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dz^2}w(z) + V_3(z)w(z) = E_3 w(z)\,, \tag{17}$$

dengan

$$E_1 + E_2 + E_3 = E\,. \tag{18}$$

Apabila $V_1(x)$, $V_2(y)$, $V_3(z)$ memiliki bentuk fungsi yang sama, maka cukup satu persamaan yang kita selesaikan, misalkan persamaan (15) untuk mendapatkan $u(x)$ dan E_1, kemudian hasilnya kita gunakan juga untuk $v(y)$ dan E_2 serta $w(z)$ dan E_3.

Gerak sistem 3D tidak terbatas hanya pada gerak translasi, melainkan juga gerak rotasi. Dengan demikian, bukan hanya momentum linier $\hat{\mathbf{p}}$ yang berperan, namun juga momentum angular $\hat{\mathbf{L}}$. Namun, dalam persamaan Schrödinger seperti di persamaan (1) tidak tampak operator momentum angular. Berikut ini kita munculkan operator momentum angular secara eksplisit dalam hamiltonian, yang berarti juga dalam persamaan Schrödinger. Kita kerjakan dalam kerangka Cartesian secara umum, bukan dalam suatu representasi tertentu.

Kuadrat komponen Cartesian momentum angular diperoleh sebagai berikut:

$$\hat{L}_x^2 = \left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)\left(\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y\right)$$

$$
\begin{aligned}
&= \hat{y}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z + \hat{z}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_y - \hat{z}\hat{p}_y\hat{y}\hat{p}_z \\
&= \hat{y}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_z + \hat{z}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_y\hat{p}_z\hat{z} - \hat{z}\hat{p}_z\hat{p}_y\hat{y} \\
&= \hat{y}\hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_z + \hat{z}\hat{z}\hat{p}_y\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_y\left(\hat{z}\hat{p}_z + [\hat{p}_z, \hat{z}]\right) - \hat{z}\hat{p}_z\left(\hat{y}\hat{p}_y + [\hat{p}_y, \hat{y}]\right) \\
&= \hat{y}\hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_z + \hat{z}\hat{z}\hat{p}_y\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_y\left(\hat{z}\hat{p}_z + \frac{\hbar}{i}\right) - \hat{z}\hat{p}_z\left(\hat{y}\hat{p}_y + \frac{\hbar}{i}\right) \\
&= \hat{y}\hat{y}\hat{p}_z\hat{p}_z + \hat{z}\hat{z}\hat{p}_y\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_y\hat{z}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_z\hat{y}\hat{p}_y - \frac{\hbar}{i}\left(\hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) && (19)
\end{aligned}
$$

$$
\hat{L}_y^2 = \hat{z}\hat{z}\hat{p}_x\hat{p}_x + \hat{x}\hat{x}\hat{p}_z\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_z\hat{x}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_x\hat{z}\hat{p}_z - \frac{\hbar}{i}\left(\hat{z}\hat{p}_z + \hat{x}\hat{p}_x\right) \tag{20}
$$

$$
\hat{L}_z^2 = \hat{x}\hat{x}\hat{p}_y\hat{p}_y + \hat{y}\hat{y}\hat{p}_x\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_x\hat{y}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_y\hat{x}\hat{p}_x - \frac{\hbar}{i}\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y\right). \tag{21}
$$

Kuadrat momentum angular dikerjakan sebagai berikut:

$$
\begin{aligned}
\hat{\mathbf{L}}^2 &= \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_x^2 \\
&= \hat{x}\hat{x}\left(\hat{p}_y\hat{p}_y + \hat{p}_z\hat{p}_z\right) + \hat{y}\hat{y}\left(\hat{p}_x\hat{p}_x + \hat{p}_z\hat{p}_z\right) + \hat{z}\hat{z}\left(\hat{p}_x\hat{p}_x + \hat{p}_y\hat{p}_y\right) \\
&\quad - \hat{x}\hat{p}_x\left(\hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) - \hat{y}\hat{p}_y\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_z\right) - \hat{z}\hat{p}_z\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y\right) - 2\frac{\hbar}{i}\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) \\
&= \hat{x}\hat{x}\left(\hat{p}_x\hat{p}_x + \hat{p}_y\hat{p}_y + \hat{p}_z\hat{p}_z\right) + \hat{y}\hat{y}\left(\hat{p}_x\hat{p}_x + \hat{p}_y\hat{p}_y + \hat{p}_z\hat{p}_z\right) + \hat{z}\hat{z}\left(\hat{p}_x\hat{p}_x + \hat{p}_y\hat{p}_y + \hat{p}_z\hat{p}_z\right) \\
&\quad - \hat{x}\hat{x}\hat{p}_x\hat{p}_x - \hat{y}\hat{y}\hat{p}_y\hat{p}_y - \hat{z}\hat{z}\hat{p}_z\hat{p}_z \\
&\quad - \hat{x}\hat{p}_x\left(\hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) - \hat{y}\hat{p}_y\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_z\right) - \hat{z}\hat{p}_z\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y\right) - 2\frac{\hbar}{i}\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) \\
&= \left(\hat{x}\hat{x} + \hat{y}\hat{y} + \hat{z}\hat{z}\right)\left(\hat{p}_x\hat{p}_x + \hat{p}_y\hat{p}_y + \hat{p}_z\hat{p}_z\right) \\
&\quad + \hat{x}\left([\hat{p}_x, \hat{x}] - \hat{p}_x\hat{x}\right)\hat{p}_x + \hat{y}\left([\hat{p}_y, \hat{y}] - \hat{p}_y\hat{y}\right)\hat{p}_y + \hat{z}\left([\hat{p}_z, \hat{z}] - \hat{p}_z\hat{z}\right)\hat{p}_z \\
&\quad - \hat{x}\hat{p}_x\left(\hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) - \hat{y}\hat{p}_y\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_z\right) - \hat{z}\hat{p}_z\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y\right) - 2\frac{\hbar}{i}\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) \\
&= \left(\hat{x}\hat{x} + \hat{y}\hat{y} + \hat{z}\hat{z}\right)\left(\hat{p}_x\hat{p}_x + \hat{p}_y\hat{p}_y + \hat{p}_z\hat{p}_z\right) \\
&\quad - \hat{x}\hat{p}_x\hat{x}\hat{p}_x - \hat{y}\hat{p}_y\hat{y}\hat{p}_y - \hat{z}\hat{p}_z\hat{z}\hat{p}_z + \frac{\hbar}{i}\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) \\
&\quad - \hat{x}\hat{p}_x\left(\hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) - \hat{y}\hat{p}_y\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{z}\hat{p}_z\right) - \hat{z}\hat{p}_z\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y\right) - 2\frac{\hbar}{i}\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) \\
&= \left(\hat{x}\hat{x} + \hat{y}\hat{y} + \hat{z}\hat{z}\right)\left(\hat{p}_x\hat{p}_x + \hat{p}_y\hat{p}_y + \hat{p}_z\hat{p}_z\right) \\
&\quad - \hat{x}\hat{p}_x\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) - \hat{y}\hat{p}_y\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) - \hat{z}\hat{p}_z\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) \\
&\quad - \frac{\hbar}{i}\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) \\
&= \left(\hat{x}\hat{x} + \hat{y}\hat{y} + \hat{z}\hat{z}\right)\left(\hat{p}_x\hat{p}_x + \hat{p}_y\hat{p}_y + \hat{p}_z\hat{p}_z\right) - \left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right)^2 + i\hbar\left(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{y}\hat{p}_y + \hat{z}\hat{p}_z\right) \\
&= \hat{\mathbf{r}}^2\hat{\mathbf{p}}^2 - \left(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)^2 + i\hbar\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\,. && (22)
\end{aligned}
$$

Dengan demikian, diperoleh kuadrat momentum linier sebagai berikut:

$$
\hat{\mathbf{p}}^2 = \frac{1}{\hat{\mathbf{r}}^2}\left[\hat{\mathbf{L}}^2 + \left(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)^2 - i\hbar\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right] \tag{23}
$$

dan persamaan Schrödinger 3D sebagai berikut:

$$
\frac{1}{2\mu\hat{\mathbf{r}}^2}\left[\hat{\mathbf{L}}^2 + \left(\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right)^2 - i\hbar\hat{\mathbf{r}}\cdot\hat{\mathbf{p}}\right]|\psi\rangle + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}})|\psi\rangle = E|\psi\rangle\,. \tag{24}
$$

Dalam representasi posisi, kita dapatkan kuadrat operator momentum linier:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{p}}^2 &= -\hbar^2\nabla^2 \\
&= \frac{1}{r^2}\left[\hat{\mathbf{L}}^2 - \hbar^2\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right)\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) - \hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r}\right] \\
&= \frac{1}{r^2}\left(\hat{\mathbf{L}}^2 - \hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r} - \hbar^2 r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r}\right) \\
&= \frac{1}{r^2}\left(\hat{\mathbf{L}}^2 - 2\hbar^2 r\frac{\partial}{\partial r} - \hbar^2 r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2}\right) \\
&= -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2}\right)
\end{aligned} \tag{25}$$

dan persamaan Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2}\right)\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})\,. \tag{26}$$

B. Persamaan Schrödinger dengan potensial sentral

Pada kasus interaksi / gaya / potensial sentral, $V(\mathbf{r}) = V(r)$ dan persamaan Schrödinger menjadi:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2}\right)\psi(\mathbf{r}) + V(r)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})\,, \tag{27}$$

sehingga lebih mudah diselesaikan dalam koordinat bola. Sistem bersifat invarian terhadap rotasi dan momentum angular tetap. Operator momentum angular komut dengan hamiltonian, yang berarti $\psi(\mathbf{r})$ juga merupakan fungsi eigen $\hat{\mathbf{L}}^2$ dengan nilai eigen $\hbar^2 l(l+1)$. Dengan demikian, persamaan Schrödinger menjadi:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)\psi(\mathbf{r}) + V(r)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})\,. \tag{28}$$

Suku $l(l+1)$ dapat digabungkan dengan suku potensial $V(r)$, sehingga kita lihat bahwa suku $l(l+1)$ berperan sebagai potensial, yang bersifat repulsif dan disebut sebagai potensial penghalang sentrifugal (*centrifugal barrier potential*):

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi(\mathbf{r}) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})\,. \tag{29}$$

Tiap suku pada persamaan (29), tidak termasuk $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r,\theta,\phi)$, hanya bergantung pada r, dengan demikian, kita dapat gunakan teknik separasi variabel untuk memisahkan kebergantungan $\psi(\mathbf{r})$ pada r dan pada θ,ϕ. Kita telah mengenal fungsi harmonik bola $Y_{lm}(\theta,\phi)$ sebagai fungsi eigen momentum angular, sehingga kebergantungan $\psi(\mathbf{r})$ pada θ,ϕ dapat dinyatakan dalam $Y_{lm}(\theta,\phi)$. Jadi, $\psi(\mathbf{r})$ dapat diberi label dan dinyatakan sebagai:

$$\psi_{Elm}(\mathbf{r}) = R_{El}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)\,, \tag{30}$$

dengan $R_{El}(r)$ disebut fungsi radial, yang bergantung hanya pada r. Kita masukkan $\psi_{Elm}(\mathbf{r}) = R_{El}(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$ ke persamaan (29), sebagaimana halnya menurut teknik separasi variabel, dan diperoleh persamaan untuk fungsi radial $R_{El}(r)$, yang disebut persamaan radial, sebagai berikut:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)R_{El}(r)+\left[V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]R_{El}(r)=ER_{El}(r)\,. \tag{31}$$

Persamaan radial (31) menjelaskan bahwa fungsi radial tidak ditentukan oleh nilai m, melainkan oleh energi E dan nilai momentum angular l. Kita lihat bahwa pada kasus gaya sentral problem penyelesaian persamaan Schrödinger tiga dimensi tereduksi menjadi problem penyelesaian persamaan radial satu dimensi untuk mendapatkan fungsi radial $R_{El}(r)$. Kebergantungan sistem pada θ, ϕ tidak perlu lagi dicari, karena sudah diketahui yaitu sesuai fungsi harmonik bola $Y_{lm}(\theta, \phi)$.

Seperti ditunjukkan dalam beberapa literatur, persamaan (31) dapat lebih disederhanakan dengan menyatakan sebuah fungsi $u_{El}(r)$ sebagai:

$$u_{El}(r)=rR_{El}(r)\,. \tag{32}$$

Kita dapatkan:

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dr^2}u_{El}(r) &= \frac{d}{dr}\frac{d}{dr}rR_{El}(r)\\ &= \frac{d}{dr}\left(r\frac{d}{dr}R_{El}(r)+R_{El}(r)\right)\\ &= r\frac{d^2}{dr^2}R_{El}(r)+\frac{d}{dr}R_{El}(r)+\frac{d}{dr}R_{El}(r)\\ &= r\frac{d^2}{dr^2}R_{El}(r)+2\frac{d}{dr}R_{El}(r)\\ &= r\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)R_{El}(r)\,.\end{aligned} \tag{33}$$

Dengan demikian, persamaan radial dapat juga dituliskan sebagai berikut:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dr^2}u_{El}(r)+\left[V(r)+\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}\right]u_{El}(r)=Eu_{El}(r)\,. \tag{34}$$

Sebagai fungsi gelombang eigen hamiltonian, $\psi_{Elm}(\mathbf{r})$ bersifat ortogonal:

$$\begin{aligned}\int d\mathbf{r}\psi^*_{E'l'm'}(\mathbf{r})\psi_{Elm}(\mathbf{r}) &= \int_0^\infty dr\, r^2 R^*_{E'l'}(r)R_{El}(r)\int_0^\pi d\theta\,\sin\theta\int_0^{2\pi}d\phi\, Y^*_{l'm'}(\theta,\phi)Y_{lm}(\theta,\phi)\\ &= \delta(E'-E)\delta_{l'l}\delta_{m'm}\end{aligned} \tag{35}$$

dan memiliki relasi kekomplitan:

$$\sum_{lm}\int dE\,\psi_{Elm}(\mathbf{r}')\psi^*_{Elm}(\mathbf{r})=\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r}) \tag{36}$$

$$\to\sum_{lm}\int dE\,R_{El}(r')Y_{lm}(\theta',\phi')R^*_{El}(r)Y^*_{lm}(\theta,\phi)=\frac{\delta(r'-r)}{r^2}\frac{\delta(\theta'-\theta)}{\sin\theta}\delta(\phi'-\phi)\,. \tag{37}$$

Kita telah mengetahui ortogonalitas fungsi harmonik bola dan relasi kekomplitannya. Kini kita dapatkan ortogonalitas fungsi radial $R_{El}(r)$:

$$\int_0^\infty dr\, r^2 R^*_{E'l'}(r) R_{El}(r) = \delta(E'-E)\delta_{l'l} \tag{38}$$

dan relasi kekomplitannya:

$$\sum_l \int dE\, R_{El}(r') R^*_{El}(r) = \frac{\delta(r'-r)}{r^2}\,. \tag{39}$$

C. Partikel bebas

Pada kasus partikel bebas, $V(r) = 0$, sehingga persamaan radial yang harus diselesaikan adalah:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) R_{El}(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} R_{El}(r) = E R_{El}(r)\,. \tag{40}$$

Kita lihat bahwa meskipun $V(r) = 0$, namun secara efektif masih ada suatu potensial yang bekerja, yaitu potensial penghalang sentrifugal. Kita sederhanakan persamaan radial menjadi:

$$\begin{aligned} &\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) R_{El}(r) + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] R_{El}(r) = 0\,,\ \left(k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}\right) \\ \to &\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right) R_{El}(\rho) + \left[1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] R_{El}(\rho) = 0\,,\ (\rho = kr)\,. \end{aligned} \tag{41}$$

Persamaan (41) dikenal sebagai persamaan differensial untuk fungsi Bessel bola (*spherical Bessel function*), dengan solusi reguler $j_l(\rho)$ dan solusi irreguler (disebut juga fungsi Neumann bola) $n_l(\rho)$. Untuk $\rho \to 0$ ($\rho \ll l$), fungsi $j_l(\rho)$ dan $n_l(\rho)$ bersifat seperti:

$$j_l(\rho) \propto \rho^l \quad \text{dan} \quad n_l(\rho) \propto \rho^{-(l+1)}\,, \tag{42}$$

sehingga fungsi $n_l(\rho) \to \infty$ dan, dengan demikian, tidak diambil untuk menyatakan $R_{El}(\rho)$. Syarat fisis meminta $R_{El}(r) = 0$ pada $r = 0$ dan ini dipenuhi oleh $j_l(\rho)$. Dengan demikian:

$$R_{El}(\rho) = A j_l(\rho) \quad \text{atau} \quad R_{El}(r) = A j_l(kr)\,, \tag{43}$$

dengan A konstanta normalisasi. Untuk $\rho \to \infty$ ($\rho \gg l$):

$$j_l(\rho) \simeq \frac{1}{\rho}\sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right)\,, \tag{44}$$

sehingga $R_{El}(\rho)$ secara asimptotik bersifat seperti:

$$\begin{aligned} R_{El}(\rho) &\sim \frac{A}{\rho}\sin\left(\rho - \frac{l\pi}{2}\right) \\ &\sim -\frac{A}{2i\rho}\left[e^{-i(\rho - l\pi/2)} - e^{i(\rho - l\pi/2)}\right] \end{aligned} \tag{45}$$

atau

$$R_{El}(r) \sim -\frac{A}{2ikr}\left[e^{-i(kr - l\pi/2)} - e^{i(kr - l\pi/2)}\right]\,, \tag{46}$$

yang menunjukkan fungsi gelombang bola (*spherical wave function*), dengan amplitudo yang mengecil selagi radius membesar. Suku pertama menggambarkan gelombang yang merambat menuju pusat dan suku kedua gelombang yang menjauhi pusat.

D. Partikel dalam kotak 3D

Pada kasus partikel dalam kotak 3D, potensial $V(r)$ sebagai berikut:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & , \ (r < a) \\ \infty & , \ (r > a) \end{cases} . \tag{47}$$

Kita tidak tertarik dengan keadaan di luar kotak ($r > a$), melainkan dengan keadaan di dalam kotak ($r < a$). Karena di dalam kotak $V(r) = 0$, persamaan radial yang harus diselesaikan sama dengan persamaan radial bebas (40), dengan solusi di persamaan (43). Yang membedakan kasus partikel dalam kotak 3D dari kasus partikel bebas adalah syarat batasnya. Untuk partikel dalam kotak 3D, selain syarat batas $R_{El}(r) = 0$ pada $r = 0$, berlaku juga syarat batas $R_{El}(r) = 0$ pada $r = a$:

$$R_{El}(a) = 0 \rightarrow j_l(ka) = 0 \, , \tag{48}$$

dengan demikian, ka adalah akar fungsi Bessel bola dan dari nilai akar tersebut diperoleh nilai k dan kemudian nilai energi E. Partikel dalam kotak 3D tidak dapat memiliki energi sembarang.

Apabila, contoh kasus, nilai ka besar sekali, maka $j_l(ka)$ bersifat seperti di persamaan (44), sehingga dari nilai akarnya diperoleh:

$$\sin\left(ka - \frac{l\pi}{2}\right) = 0 \rightarrow k_n = \left(n + \frac{l}{2}\right)\frac{\pi}{a} \rightarrow E_n = \left(n + \frac{l}{2}\right)^2 \frac{\hbar^2\pi^2}{2\mu a^2} \, , \ (n = 0, 1, 2, ...) \, . \tag{49}$$

Orang dapat melabel ulang fungsi gelombang menjadi $R_{nl}(r)$ dan $\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$. Ortogonalitas dan relasi kekomplitan $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ dan $R_{nl}(r)$ diberikan sebagai berikut:

$$\int d\mathbf{r}\psi^*_{n'l'm'}(\mathbf{r})\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = \delta_{n'n}\delta_{l'l}\delta_{m'm} \tag{50}$$

$$\sum_{nlm} \psi_{nlm}(\mathbf{r}')\psi^*_{nlm}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \tag{51}$$

$$\int_0^\infty dr \, r^2 R^*_{n'l'}(r)R_{nl}(r) = \delta_{n'n}\delta_{l'l} \tag{52}$$

$$\sum_{nl} R_{nl}(r')R^*_{nl}(r) = \frac{\delta(r' - r)}{r^2} \, . \tag{53}$$