Catatan Mekanika Kuantum 1

Sistem Banyak Partikel

Acuan utama Gasiorowicz, *Quantum Physics* Ed. 3, Bab 13, Subbab 1 – 3

Kini kita perhatikan sistem yang terdiri dari lebih dari satu partikel. Sesungguhnya, pada pembahasan tentang atom seperti hidrogen, kita mengamati sistem yang terdiri dari lebih dari satu, yaitu dua, partikel: inti atom dan satu elektron. Namun, karena interaksi pada atom seperti hidrogen bersifat sentral, problem atom seperti hidrogen dapat direduksi menjadi problem satu benda. Hal seperti ini telah kita ketahui juga dalam kuliah Mekanika Klasik.

A. Keadaan sistem N partikel

Untuk sistem yang terdiri dari N partikel, keadaannya dalam notasi Dirac dapat dinyatakan sebagai, contoh, ket berikut ini:

$$|\psi_1\psi_2...\psi_N, t\rangle \, . \tag{1}$$

Dalam representasi posisi, untuk mudahnya kita ambil ruang 1 dimensi, keadaan sistem tersebut dinyatakan oleh fungsi gelombang berikut:

$$\psi(x_1, x_2, ..., x_N, t) = \langle x_1, x_2, ..., x_N|\psi_1\psi_2...\psi_N, t\rangle \, . \tag{2}$$

Peluang total atau juga normalisasi keadaan sistem dihitung / dinyatakan sebagai:

$$\langle\psi_1\psi_2...\psi_N, t|\psi_1\psi_2...\psi_N, t\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \, ... \int_{-\infty}^{\infty} dx_N \, P(x_1, x_2, ..., x_N, t) \tag{3}$$

dengan

$$P(x_1, x_2, ..., x_N, t) = |\psi(x_1, x_2, ..., x_N, t)|^2 = \psi^*(x_1, x_2, ..., x_N, t)\psi(x_1, x_2, ..., x_N, t) \tag{4}$$

adalah rapat peluang mendapatkan partikel 1, partikel 2, ..., partikel N pada waktu t. (Ingat bahwa walaupun rapat peluang bergantung pada waktu t, namun peluang total tidak berubah terhadap waktu.) Beberapa contoh mencari peluang mendapatkan partikel:

- Peluang mendapatkan partikel 1 di posisi x_1 sampai $x_1 + dx_1$, partikel 2 di posisi x_2 sampai $x_2 + dx_2$, ..., partikel N di posisi x_N sampai $x_N + dx_N$ pada waktu t adalah:

$$dx_1 dx_2 \, ... dx_N \, P(x_1, x_2, ..., x_N, t) \, . \tag{5}$$

- Peluang mendapatkan partikel 1, partikel 2, ..., partikel N di sembarang posisi adalah sama dengan peluang total:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \ldots \int_{-\infty}^{\infty} dx_N \, P(x_1, x_2, ..., x_N, t)\,. \tag{6}$$

- Peluang mendapatkan partikel 1 di posisi x_1 sampai $x_1 + dx_1$, sedangkan partikel 2, ..., partikel N di sembarang posisi pada waktu t adalah:

$$dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \ldots \int_{-\infty}^{\infty} dx_N \, P(x_1, x_2, ..., x_N, t)\,. \tag{7}$$

- Peluang mendapatkan partikel 2 di posisi a sampai b, sedangkan partikel 1, partikel 3, ..., partikel N di sembarang posisi pada waktu t adalah:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \int_{a}^{b} dx_2 \ldots \int_{-\infty}^{\infty} dx_N \, P(x_1, x_2, ..., x_N, t)\,. \tag{8}$$

- Peluang mendapatkan partikel 1 di posisi a sampai b dan partikel N di posisi c sampai d, sedangkan partikel 2, ... partikel $N-1$ di sembarang posisi pada waktu t adalah:

$$\int_{a}^{b} dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \ldots \int_{c}^{d} dx_N \, P(x_1, x_2, ..., x_N, t)\,. \tag{9}$$

Keadaan sistem N partikel tersebut memenuhi persamaan Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_1 \psi_2 ... \psi_N, t\rangle = H |\psi_1 \psi_2 ... \psi_N, t\rangle\,, \tag{10}$$

dengan hamiltonian H sebagai berikut:

$$H = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + ... + \frac{\hat{p}_N^2}{2m_N} + \hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{N} \frac{\hat{p}_j^2}{m_j} + \hat{V}\,. \tag{11}$$

Dalam representasi posisi persamaan Schrödinger tersebut adalah:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x_1, x_2, ..., x_N, t) = H \psi(x_1, x_2, ..., x_N, t)\,, \tag{12}$$

dengan hamiltonian H sebagai berikut:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} - ... - \frac{\hbar^2}{2m_N} \frac{\partial^2}{\partial x_N^2} + V(x_1, x_2, ..., x_N) \tag{13}$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{m_j} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + V(x_1, x_2, ..., x_N)\,. \tag{14}$$

Untuk sistem N partikel berlaku relasi komutasi momentum linier dan posisi sebagai berikut:

$$[p_j, p_k] = 0\,, \quad [x_j, x_k] = 0\,, \quad [x_j, p_k] = i\hbar \delta_{jk}\,. \tag{15}$$

Dalam ruang 3 dimensi, diperoleh:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N, t) = \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N | \psi_1 \psi_2 ... \psi_N, t \rangle \tag{16}$$

$$\langle \psi_1 \psi_2 ... \psi_N, t | \psi_1 \psi_2 ... \psi_N, t \rangle = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 ... \int d\mathbf{r}_N \, P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N, t) \tag{17}$$

$$P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N, t) = |\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N, t)|^2 = \psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N, t)\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N, t) \tag{18}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N, t) = H\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N, t) \tag{19}$$

$$H = \sum_{j=1}^{N} \frac{\mathbf{p}_j^2}{2m_j} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N) = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_{j=1}^{N} \frac{1}{m_j}\boldsymbol{\nabla}_j^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N) \tag{20}$$

$$[\mathbf{p}_j, \mathbf{p}_k] = 0\,, \quad [\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k] = 0\,, \quad [\mathbf{r}_j, \mathbf{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}\,. \tag{21}$$

Pada kasus tertentu, interaksi tidak berubah apabila tiap partikel digeser posisinya sebesar $\mathbf{a}$:

$$\mathbf{r}_j \to \mathbf{r}_j + \mathbf{a}\,. \tag{22}$$

Pada kasus tersebut, interaksi bergantung pada posisi relatif antar partikel, bukan pada posisi eksak tiap partikel:

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N) = V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3, ..., \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4, ..., \mathbf{r}_{N-1} - \mathbf{r}_N)\,. \tag{23}$$

Operator energi kinetik ($\sim \boldsymbol{\nabla}^2$) tentu saja tidak berubah akibat pergeseran posisi menurut persamaan (22). Dengan demikian, hamiltonian sistem bersifat invarian terhadap translasi atau transformasi Galilei (persamaan (22)) dan momentum linier total konstan (menjadi konstanta gerak):

$$\left[H, \sum_{j=1}^{N} \mathbf{p}_j\right] = \left[H, \frac{\hbar}{i}\sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{\nabla}_j\right] = 0\,. \tag{24}$$

Apabila lebih dari itu interaksi bergantung bukan pada posisi relatif, melainkan pada jarak relatif antar partikel:

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N) = V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|, ..., |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|, |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4|, ..., |\mathbf{r}_{N-1} - \mathbf{r}_N|)\,, \tag{25}$$

dengan kata lain interaksi bersifat sentral, maka hamiltonian sistem bukan saja bersifat invarian terhadap translasi, melainkan juga terhadap rotasi. Pada kasus ini, selain momentum linier total, momentum angular total juga konstan:

$$\left[H, \sum_{j=1}^{N} \mathbf{L}_j\right] = \left[H, \frac{\hbar}{i}\sum_{j=1}^{N} \mathbf{r}_j \times \boldsymbol{\nabla}_j\right] = 0\,. \tag{26}$$

B. Sistem 2 partikel

Hamiltonian sistem 2 partikel adalah:

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\boldsymbol{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\boldsymbol{\nabla}_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \tag{27}$$

dan persamaan Schrödinger tak bergantung waktu (keadaan tunak) sistem 2 partikel adalah:

$$\left[\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\right]\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \tag{28}$$

atau

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\boldsymbol{\nabla}_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\boldsymbol{\nabla}_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\right]\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\,. \tag{29}$$

Pada persamaan (27) digunakan variabel bebas $\mathbf{r}_1$ dan $\mathbf{r}_2$ untuk mendeskripsikan sistem yang diamati. Untuk masing-masing variabel bebas $\mathbf{r}_1$ dan $\mathbf{r}_2$ ada variabel konjugate $\mathbf{p}_1$ dan $\mathbf{p}_2$, yang memenuhi relasi komutasi:

$$[\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1] = [\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2] = i\hbar \qquad [\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_2] = [\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_1] = 0\,. \tag{30}$$

Sistem 2 partikel tersebut dapat juga digambarkan dengan variabel bebas berikut (ingat sifat variabel bebas, yaitu tidak saling bergantung):

$$\text{posisi pusat massa: } \mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \tag{31}$$

$$\text{posisi relatif: } \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2\,, \tag{32}$$

dengan variabel konjugat masing-masing:[1]

$$\text{momentum total: } \mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{R}} \tag{35}$$

$$\text{momentum relatif: } \mathbf{p} = \frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2}{m_1 + m_2} = \frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{r}}\,. \tag{36}$$

Dari persamaan (35) dan (36) diperoleh:

$$\mathbf{p}_1 = \frac{m_1}{m_1 + m_2}\mathbf{P} + \mathbf{p} \qquad \mathbf{p}_2 = \frac{m_2}{m_1 + m_2}\mathbf{P} - \mathbf{p}\,. \tag{37}$$

[1]Sekedar cek, kita peroleh relasi komutasi yang benar:

$$\begin{aligned}
[\mathbf{R}, \mathbf{P}] &= \left[\frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2\right] \\
&= \frac{m_1}{m_1 + m_2}[\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1] + \frac{m_2}{m_1 + m_2}[\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2] \\
&= \frac{m_1}{m_1 + m_2}i\hbar + \frac{m_2}{m_1 + m_2}i\hbar \\
&= i\hbar
\end{aligned} \tag{33}$$

$$\begin{aligned}
[\mathbf{r}, \mathbf{p}] &= \left[\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2}{m_1 + m_2}\right] \\
&= \frac{m_2}{m_1 + m_2}[\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1] + \frac{m_1}{m_1 + m_2}[\mathbf{r}_2, \mathbf{p}_2] \\
&= \frac{m_2}{m_1 + m_2}i\hbar + \frac{m_1}{m_1 + m_2}i\hbar \\
&= i\hbar\,.
\end{aligned} \tag{34}$$

Jika persamaan (37) dimasukkan ke persamaan (27), diperoleh:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m_1}\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\mathbf{P}+\mathbf{p}\right)^2 + \frac{1}{2m_2}\left(\frac{m_2}{m_1+m_2}\mathbf{P}-\mathbf{p}\right)^2 + V(\mathbf{R},\mathbf{r}) \\ &= \frac{\mathbf{P}^2}{2(m_1+m_2)} + \frac{\mathbf{p}^2}{2}\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right) + V(\mathbf{R},\mathbf{r}) \\ &= \frac{\mathbf{P}^2}{2(m_1+m_2)} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m_1m_2/(m_1+m_2)} + V(\mathbf{R},\mathbf{r}) \\ &= \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{R},\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2M}\boldsymbol{\nabla}^2_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\boldsymbol{\nabla}^2_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{R},\mathbf{r})\,, \end{aligned} \tag{38}$$

dengan M massa total sistem dan μ massa tereduksi sistem:

$$M = m_1 + m_2 \qquad \mu = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}\,. \tag{39}$$

Jika interaksi hanya bergantung pada posisi relatif:

$$V(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = V(\mathbf{r})\,, \tag{40}$$

hamiltonian sistem menjadi

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2M}\boldsymbol{\nabla}^2_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\boldsymbol{\nabla}^2_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) \tag{41}$$

dan persamaan Schrödinger (28) dan (29) menjadi:

$$\left[\frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{R},\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\boldsymbol{\nabla}^2_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\boldsymbol{\nabla}^2_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{R},\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{R},\mathbf{r})\,. \tag{42}$$

Dengan demikian, kita dapat tereapkan teknik separasi variabel:

$$\psi(\mathbf{R},\mathbf{r}) = \Psi(\mathbf{R})\phi(\mathbf{r})\,, \tag{43}$$

sehingga diperoleh:

$$\frac{\mathbf{P}^2}{2M}\Psi(\mathbf{R}) = -\frac{\hbar^2}{2M}\boldsymbol{\nabla}^2_{\mathbf{R}}\Psi(\mathbf{R}) = E_M\Psi(\mathbf{R}) \to \Psi(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}/\hbar}\,,\ E_M = \frac{P^2}{2M} \tag{44}$$

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r})\right]\phi(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\boldsymbol{\nabla}^2_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r})\right]\phi(\mathbf{r}) = E_\mu\phi(\mathbf{r})\,. \tag{45}$$

Persamaan (44) menggambarkan gerakan sistem sebagai satu kesatuan atau gerakan pusat massa sistem sebagai sebuah benda bebas, sehingga energinya hanya berupa energi kinetik dan fungsi gelombangnya mudah diketahui, yaitu fungsi gelombang bidang. Dengan demikian, kita hanya perlu menyelesaikan persamaan (45) untuk mendapatkan $\phi(\mathbf{r})$ dan E_μ. Keadaan sistem $\psi(\mathbf{R},\mathbf{r})$ diperoleh sebagai:

$$\psi(\mathbf{R},\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{P}\cdot\mathbf{R}/\hbar}\phi(\mathbf{r}) \tag{46}$$

dan energinya:

$$E = \frac{P^2}{2M} + E_\mu\,. \tag{47}$$

Apabila sistem diamati dalam kerangka acuan pusat massa, maka gerakan pusat massa tidak ada, karena pusat massa tentu saja diam terhadap dirinya sendiri. Dengan demikian, dalam kerangka pusat massa fungsi gelombang sistem adalah $\phi(\mathbf{r})$ dan energinya E_μ, yang memenuhi persamaan Schrödinger (45).

C. Partikel identik

Partikel-partikel, seperti elektron, proton, netron, dalam mekanika kuantum bersifat identik, tak terbedakan (*indistinguishable*). Contoh, pada peristiwa tumbukan proton dan proton, bayangkan satu proton datang dari kiri dan satu proton datang dari kanan, setelah bertumbukan dideteksi satu proton yang terhambur ke arah tertentu. Dalam hal ini, orang tidak dapat menentukan apakah proton yang terdeteksi terhambur ke suatu arah tersebut adalah proton yang datang dari kanan atau proton yang datang dari kiri, karena proton-proton tersebut identik, tak terbedakan. Alhasil, dalam perhitungan mekanika kuantum, semua kemungkinan dimasukkan. Jadi, apabila ψ_1 menyatakan keadaan bahwa yang terdeteksi adalah proton yang datang dari kiri dan ψ_2 menyatakan keadaan bahwa yang terdeteksi adalah proton yang datang dari kanan, maka dalam perhitungan dipakai $\psi_1 + \psi_2$, semua kemungkinan diperhitungkan.

Untuk membahas sifat partikel identik, supaya mudah, pada bagian ini kita ambil saja sistem yang terdiri dari hanya 2 partikel identik dalam dunia 1 dimensi. Hamiltonian sistem ini diberikan sebagai berikut:

$$H(1,2) = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(x_1, x_2)\,. \tag{48}$$

Karena kedua partikel identik, interaksi tidak berubah jika kedua partikel itu saling dipertukarkan[2]:

$$V(x_1, x_2) = V(x_2, x_1) \tag{49}$$

dan, dengan demikian, hamiltonian bersifat simetrik terhadap pertukaran partikel:

$$H(1,2) = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(x_1, x_2) = \frac{p_2^2}{2m} + \frac{p_1^2}{2m} + V(x_2, x_1) = H(2,1)\,. \tag{50}$$

Persamaan nilai eigen energi (persamaan Schrödinger tak bergantung waktu) dinyatakan sebagai berikut:

$$H(1,2)|\psi(1,2)\rangle = E|\psi(1,2)\rangle \qquad \text{atau} \qquad H(2,1)|\psi(2,1)\rangle = E|\psi(2,1)\rangle\,. \tag{51}$$

Karena hamiltonian simetrik, maka

$$H(2,1)|\psi(1,2)\rangle = E|\psi(1,2)\rangle \tag{52}$$

[2]Mempertukarkan dua partikel dapat terjadi dengan cara secara fisik menukar kedua partikel, satu dengan yang lain, atau cukup menukar label partikel, label yang satu dengan label yang lain. Hasilnya sama saja, yaitu semua sifat atau nilai besaran fisika kedua partikel saling dipertukarkan: posisinya, momentumnya, energinya, spinnya, dan lain-lain; singkatnya, keadaan kedua partikel saling dipertukarkan.

dan demikian pula:

$$H(1,2)|\psi(2,1)\rangle = E|\psi(2,1)\rangle\,. \tag{53}$$

Kita ambil suatu operator P_{12}, yang mempertukarkan dua partikel, disebut operator pertukaran (*exchange operator*):

$$P_{12}|\psi(1,2)\rangle = |\psi(2,1)\rangle\,. \tag{54}$$

Jika dikerjakan dua kali berturut-turut, kita peroleh:

$$P_{12}^2|\psi(1,2)\rangle = P_{12}P_{12}|\psi(1,2)\rangle = P_{12}|\psi(2,1)\rangle = |\psi(1,2)\rangle\,. \tag{55}$$

Dengan demikian, operator pertukaran P_{12} memiliki dua nilai eigen $+1$ dan -1, serta keadaan eigen untuk masing-masing nilai eigen tersebut:

$$P_{12}|\psi^{(S)}(1,2)\rangle = |\psi^{(S)}(1,2)\rangle \qquad \text{dan} \qquad P_{12}|\psi^{(A)}(1,2)\rangle = -|\psi^{(A)}(1,2)\rangle\,. \tag{56}$$

Terhadap pertukaran partikel, keadaan eigen $|\psi^{(S)}(1,2)\rangle$ bersifat simetrik dan keadaan eigen $|\psi^{(A)}(1,2)\rangle$ bersifat antisimetrik. Jadi, operator pertukaran P_{12} menunjukkan sifat simetri sistem terhadap pertukaran partikel. Keadaan eigen $|\psi^{(S)}(1,2)\rangle$ dan $|\psi^{(A)}(1,2)\rangle$ dapat diperoleh sebagai berikut:

$$|\psi^{(S)}(1,2)\rangle = \frac{1}{N_{2S}}\left[|\psi(1,2)\rangle + |\psi(2,1)\rangle\right] = \frac{1}{N_{2S}}(1+P_{12})|\psi(1,2)\rangle \tag{57}$$

$$|\psi^{(A)}(1,2)\rangle = \frac{1}{N_{2A}}\left[|\psi(1,2)\rangle - |\psi(2,1)\rangle\right] = \frac{1}{N_{2A}}(1-P_{12})|\psi(1,2)\rangle\,, \tag{58}$$

dengan N_{2S} dan N_{2A} konstanta normalisasi. Dapat kita cek:

$$P_{12}|\psi^{(S)}(1,2)\rangle = \frac{1}{N_{2S}}(P_{12}+P_{12}^2)|\psi(1,2)\rangle = \frac{1}{N_{2S}}(P_{12}+1)|\psi(1,2)\rangle = |\psi^{(S)}(1,2)\rangle \tag{59}$$

$$P_{12}|\psi^{(A)}(1,2)\rangle = \frac{1}{N_{2A}}(P_{12}-P_{12}^2)|\psi(1,2)\rangle = \frac{1}{N_{2A}}(P_{12}-1)|\psi(1,2)\rangle = -|\psi^{(A)}(1,2)\rangle\,. \tag{60}$$

Kini, kita kerjakan P_{12} pada persamaan nilai eigen energi, diperoleh:

$$\begin{aligned} H(1,2)|\psi(1,2)\rangle &= E|\psi(1,2)\rangle \\ \to P_{12}H(1,2)|\psi(1,2)\rangle &= P_{12}E|\psi(1,2)\rangle \\ \to H(2,1)P_{12}|\psi(1,2)\rangle &= P_{12}E|\psi(1,2)\rangle \\ \to H(1,2)P_{12}|\psi(1,2)\rangle &= P_{12}H(1,2)|\psi(1,2)\rangle \\ \to H(1,2)P_{12} &= P_{12}H(1,2)\,. \end{aligned} \tag{61}$$

Dengan cara lain, diperoleh hal yang sama:

$$\begin{aligned} H(1,2)|\psi(2,1)\rangle &= E|\psi(2,1)\rangle \\ \to H(1,2)P_{12}|\psi(1,2)\rangle &= EP_{12}|\psi(1,2)\rangle \end{aligned}$$

$$\rightarrow H(1,2)P_{12}|\psi(1,2)\rangle = P_{12}E|\psi(1,2)\rangle$$
$$\rightarrow H(1,2)P_{12}|\psi(1,2)\rangle = P_{12}H(1,2)|\psi(1,2)\rangle$$
$$\rightarrow H(1,2)P_{12} = P_{12}H(1,2)\,. \tag{62}$$

Jadi, kita dapatkan relasi komutasi H dan P_{12} sebagai berikut:

$$[H, P_{12}] = 0\,. \tag{63}$$

Ini berarti, sifat simetri sistem merupakan konstanta gerak, tidak berubah. Suatu sistem yang terbentuk dengan keadaan simetrik / antisimetrik akan berada dalam suatu keadaan yang tetap simetrik / antisimetrik di waktu kemudian.

D. Prinsip Pauli

Kita telah lihat bahwa terhadap pertukaran partikel keadaan sistem dapat bersifat simetrik atau antisimetrik. Sifat simetri tersebut merupakan karakteristik partikel, dengan demikian, bukan sesuatu yang dapat orang buat atau tentukan. Partikel berdasarkan spinnya dapat dibagi dalam dua kelompok:

- Partikel dengan spin bernilai kelipatan ganjil dari setengah (*half odd*) disebut fermion dan mengikuti statistik Fermi-Dirac.
- Partikel dengan spin bernilai bulat (*integer*) disebut boson dan mengikuti statistik Bose-Einstein.

Pauli mendapatkan sifat simetri terhadap pertukaran partikel sebagai berikut:

- Keadaan sistem yang terdiri dari fermion identik bersifat antisimetrik. Contoh, keadaan sistem yang terdiri dari 3 fermion identik dapat dinyatakan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}|\psi^{(A)}(1,2,3)\rangle = \frac{1}{N_{3A}}\,&[|\psi(1,2,3)\rangle + |\psi(2,3,1)\rangle + |\psi(3,1,2)\rangle \\ &-|\psi(1,3,2)\rangle - |\psi(2,1,3)\rangle - |\psi(3,2,1)\rangle]\,.\end{aligned} \tag{64}$$

- Keadaan sistem yang terdiri dari boson identik bersifat simetrik. Contoh, keadaan sistem yang terdiri dari 3 boson identik dapat dinyatakan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}|\psi^{(S)}(1,2,3)\rangle = \frac{1}{N_{3S}}\,&[|\psi(1,2,3)\rangle + |\psi(2,3,1)\rangle + |\psi(3,1,2)\rangle \\ &+|\psi(1,3,2)\rangle + |\psi(2,1,3)\rangle + |\psi(3,2,1)\rangle]\,.\end{aligned} \tag{65}$$

D.1 Determinan Slater

Bayangkan N fermion identik yang tidak saling berinteraksi terperangkap dalam suatu potensial sumur. Hamiltonian untuk tiap fermion adalah:

$$H_j = \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \hat{V}_j \tag{66}$$

dan hamiltonian sistem:

$$H = \sum_{j=1}^{N} H_j = \sum_{j=1}^{N} \frac{\hat{p}_j^2}{2m} + \hat{V}_j \, . \tag{67}$$

Persamaan nilai eigen energi untuk tiap fermion adalah:

$$H_j|u_{E_j}(j)\rangle = E_j|u_{E_j}(j)\rangle \, , \tag{68}$$

dengan $|u_{E_j}(j)\rangle$ keadaan eigen fermion ke-j dan E_j energi eigennya. Persamaan nilai eigen energi untuk sistem adalah:

$$H|u_E(1,...,N)\rangle = E|u_E(1,...,N)\rangle \, , \tag{69}$$

dengan $|u_E(1,...,N)\rangle$ dan E masing-masing keadaan eigen dan energi eigen sistem. Karena fermion penyusun sistem tidak saling berinteraksi, berlaku:

$$|u_E(1,...,N)\rangle = |u_{E_1}(1)\rangle ... |u_{E_N}(N)\rangle \qquad \text{dan} \qquad E = E_1 + ... + E_N \, . \tag{70}$$

Keadaan sistem N fermion identik harus bersifat antisimetrik. Dengan demikian, kita lakukan antisimetrisasi pada keadaan sistem N fermion identik tersebut. Untuk $N = 2$, diperoleh:

$$|u_E^{(A)}(1,2)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|u_{E_1}(1)\rangle|u_{E_2}(2)\rangle - |u_{E_1}(2)\rangle|u_{E_2}(1)\rangle \right] . \tag{71}$$

Suku pertama pada keadaan $|u_E^{(A)}(1,2)\rangle$ tersebut menyatakan fermion 1 memiliki energi E_1 dan fermion 2 memiliki energi E_2, sedangkan suku kedua menyatakan fermion 1 memiliki energi E_2 dan fermion 2 memiliki energi E_1. Keadaan $|u_E^{(A)}(1,2)\rangle$ dapat dinyatakan sebagai determinan matriks 2×2 berikut:

$$|u_E^{(A)}(1,2)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} |u_{E_1}(1)\rangle & |u_{E_1}(2)\rangle \\ |u_{E_2}(1)\rangle & |u_{E_2}(2)\rangle \end{vmatrix} . \tag{72}$$

Untuk $N = 3$, diperoleh:

$$\begin{aligned} |u_E^{(A)}(1,2,3)\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \big[& |u_{E_1}(1)\rangle|u_{E_2}(2)\rangle|u_{E_3}(3)\rangle - |u_{E_1}(1)\rangle|u_{E_2}(3)\rangle|u_{E_3}(2)\rangle \\ & + |u_{E_1}(2)\rangle|u_{E_2}(3)\rangle|u_{E_3}(1)\rangle - |u_{E_1}(2)\rangle|u_{E_2}(1)\rangle|u_{E_3}(3)\rangle \\ & + |u_{E_1}(3)\rangle|u_{E_2}(1)\rangle|u_{E_3}(2)\rangle - |u_{E_1}(3)\rangle|u_{E_2}(2)\rangle|u_{E_3}(1)\rangle \big] \, , \end{aligned} \tag{73}$$

yang dapat dinyatakan sebagai determinan matriks 3×3 berikut:

$$|u_E^{(A)}(1,2,3)\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} |u_{E_1}(1)\rangle & |u_{E_1}(2)\rangle & |u_{E_1}(3)\rangle \\ |u_{E_2}(1)\rangle & |u_{E_2}(2)\rangle & |u_{E_2}(3)\rangle \\ |u_{E_3}(1)\rangle & |u_{E_3}(2)\rangle & |u_{E_3}(3)\rangle \end{vmatrix} . \tag{74}$$

Dengan demikian, untuk sembarang nilai N, keadaan sistem N fermion identik diperoleh sebagai determinan matriks, yang disebut determinan Slater:

$$|u_E^{(A)}(1,...,N)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |u_{E_1}(1)\rangle & \cdots & |u_{E_1}(N)\rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ |u_{E_N}(1)\rangle & \cdots & |u_{E_N}(N)\rangle \end{vmatrix} . \tag{75}$$

Beberapa catatan:

- Jika 2 dari N fermion identik tersebut dipertukarkan, itu sama saja dengan mempertukarkan 2 kolom yang bersesuaian dan memberikan determinan yang berlawanan tanda. Tiap kali 2 dari N fermion identik tersebut atau 2 kolom yang bersesuaian dipertukarkan, determinan berubah tanda, sesuai dengan sifat antisimetrik keadaan N fermion identik.

- Apabila terdapat dua keadaan yang sama dalam sistem N fermion identik tersebut, misalkan $E_3 = E_7$, berarti ada dua baris yang sama dan itu memberikan nilai determinan nol. Dengan demikian, sesuai larangan Pauli, dalam sistem fermion identik tidak ada 2 atau lebih fermion yang menempati keadaan yang sama. Perhatikan, pada contoh di sini suatu keadaan tertentu ditunjukkan oleh nilai energi tertentu. Secara umum, bukan hanya energi, melainkan juga besaran-besaran lain, seperti spin, yang semuanya secara bersama-sama menunjukkan suatu keadaan tertentu. Contoh, jika melibatkan hanya energi dan spin, maka dalam sistem fermion identik tidak ada 2 fermion atau lebih dengan energi dan spin yang sama. Dua atau lebih fermion identik dapat memiliki energi sama, namun spin berbeda, atau memiliki spin sama, namun energi berbeda. Jika fermion itu berspin $\frac{1}{2}$, seperti elektron, proton, netron, maka hanya ada maksimal 2 fermion yang menempati keadaan dengan energi yang sama, namun masing-masing memiliki spin berbeda, yang satu $+\frac{1}{2}$ (*up*) dan yang lain $-\frac{1}{2}$ (*down*). Lebih dari 2 fermion tersebut dapat menempati keadaan dengan spin yang sama, misalkan $-\frac{1}{2}$ (*down*), namun masing-masing memiliki energi berbeda.

- Posisi juga besaran fisika, sehingga bersama-sama dengan energi dan spin juga menyatakan suatu keadaan tertentu. Ini berarti, dua fermion identik dapat memiliki energi dan spin sama, namun posisi berbeda. Dua fermion identik dengan keadaan energi dan spin sama saling menjaga jarak, tidak berada di titik posisi yang sama. Meskipun apabila dua fermion identik tersebut dibayangkan tidak saling berinteraksi, namun secara efektif seperti ada interaksi antar keduanya yang menyebabkan keduanya saling menjaga jarak. Ini menjelaskan, antara lain, bahwa setelah bahan bakar bintang habis bereaksi, sisa bintang dalam keadaan tertentu bisa bertahan dari keruntuhan gravitasi yang memaksa partikel-partikel termasuk fermion saling berdekatan, sehingga menjadi obyek stabil, seperti bintang kerdil pucat (*white dwarf*), bintang netron. Dalam hal ini tarikan gravitasi tidak dapat membuat fermion-fermion identik terus saling mendekat dan berkumpul dalam ruang yang sangat kecil, sedemikian sehingga jarak antar fermion hampir nol.

D.2 Bila diperlukan antisimetrisasi?

Keadaan fermion identik yang bersifat antisimetrik berkaitan dengan larangan Pauli bahwa fermion-fermion identik tidak dapat menempati keadaan yang sama. Dengan demikian, orang lakukan antisimetrisasi pada keadaan atau fungsi gelombang sistem fermion identik. Namun, apakah antisimetrisasi ini sesungguhnya selalu perlu dilakukan? Untuk membahas hal ini, kita ambil sebagai contoh sistem 2 fermion identik dan lihat apakah keadaan atau fungsi gelombangnya selalu harus diantisimetrisasi.

Anggaplah dua keadaan yang mungkin ditempati masing-masing fermion, yaitu keadaan $|\psi_a\rangle$ dan $|\psi_b\rangle$. Tanpa antisimetrisasi, fungsi gelombang sistem dinyatakan sebagai berikut:

$$\psi_{ab}(x,y) = \psi_a^{(1)}(x)\psi_b^{(2)}(y)\,, \tag{76}$$

yaitu fermion 1 berada di x menempati keadaan $|\psi_a\rangle$ dan fermion 2 berada di y menempati keadaan $|\psi_b\rangle$. Dengan antisimetrisasi, fungsi gelombang sistem menjadi:

$$\psi_{ab}^{(A)}(x,y) = \frac{1}{N}\left[\psi_a^{(1)}(x)\psi_b^{(2)}(y) - \psi_b^{(1)}(x)\psi_a^{(2)}(y)\right]\,, \tag{77}$$

yaitu diperhitungkan juga pada suku kedua bahwa fermion 1 berada di x menempati keadaan $|\psi_b\rangle$ dan fermion 2 berada di y menempati keadaan $|\psi_a\rangle$. Kita gunakan fungsi-fungsi gelombang yang ternormalisasi:

$$\int dx\,|\psi_a(x)|^2 = \int dx\,|\psi_b(x)|^2 = 1\,. \tag{78}$$

Sebagai fungsi matematis $\psi_a^{(1)}(x) = \psi_a^{(2)}(x) = \psi_a(x)$ dan $\psi_b^{(1)}(x) = \psi_b^{(2)}(x) = \psi_b(x)$. Dengan demikian:

$$\begin{aligned}\int dx \int dy\,|\psi_{ab}(x,y)|^2 &= \int dx\,|\psi_a^{(1)}(x)|^2 \int dy\,|\psi_b^{(2)}(y)|^2\\ &= \int dx\,|\psi_a(x)|^2 \int dy\,|\psi_b(y)|^2\\ &= 1\end{aligned} \tag{79}$$

$$\begin{aligned}\int dx \int dy\,|\psi_{ab}^{(A)}(x,y)|^2 = \frac{1}{N^2}&\int dx\,|\psi_a^{(1)}(x)|^2 \int dy\,|\psi_b^{(2)}(y)|^2 + \frac{1}{N^2}\int dx\,|\psi_b^{(1)}(x)|^2 \int dy\,|\psi_a^{(2)}(y)|^2\\ &- \frac{1}{N^2}\int dx\,\psi_a^{*(1)}(x)\psi_b^{(1)}(x)\int dy\,\psi_b^{*(2)}(y)\psi_a^{(2)}(y)\\ &- \frac{1}{N^2}\int dx\,\psi_b^{*(1)}(x)\psi_a^{(1)}(x)\int dy\,\psi_a^{*(2)}(y)\psi_b^{(2)}(y)\\ =& \frac{1}{N^2}\int dx\,|\psi_a(x)|^2 \int dy\,|\psi_b(y)|^2 + \frac{1}{N^2}\int dx\,|\psi_b(x)|^2 \int dy\,|\psi_a(y)|^2\\ &- \frac{1}{N^2}\int dx\,\psi_a^*(x)\psi_b(x)\int dy\,\psi_b^*(y)\psi_a(y)\\ &- \frac{1}{N^2}\int dx\,\psi_b^*(x)\psi_a(x)\int dy\,\psi_a^*(y)\psi_b(y)\\ =& \frac{2}{N^2} - \frac{2}{N^2}\int dx\,\psi_a^*(x)\psi_b(x)\int dy\,\psi_b^*(y)\psi_a(y)\\ =& \frac{2}{N^2} - \frac{2}{N^2}\int dx\,\psi_a^*(x)\psi_b(x)\left(\int dy\,\psi_b(y)\psi_a^*(y)\right)^*\\ =& \frac{2}{N^2} - \frac{2}{N^2}\left|\int dx\,\psi_a^*(x)\psi_b(x)\right|^2\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{2}{N^2}\left[1 - \left|\int dx\, \psi_a^*(x)\psi_b(x)\right|^2\right] \\
&= 1 \qquad (80)
\end{aligned}
$$

$$
\to N = \left\{2\left[1 - |S_{ab}|^2\right]\right\}^{\frac{1}{2}} \,, \qquad (81)
$$

dengan:

$$
S_{ab} = \int dx\, \psi_a^*(x)\psi_b(x)\,. \qquad (82)
$$

Kita cari peluang mendapatkan elektron dengan keadaan $|\psi_a\rangle$ di daerah R. Tanpa antisimetrisasi diperoleh:

$$
\begin{aligned}
P_a(R) &= \int_R dx \int dy\, |\psi_{ab}(x_1, x_2)|^2 \\
&= \int_R dx\, |\psi_a(x)|^2 \int dy\, |\psi_b(y)|^2 \\
&= \int_R dx\, |\psi_a(x)|^2 \qquad (83)
\end{aligned}
$$

dan dengan antisimetrisasi diperoleh:

$$
\begin{aligned}
P_a(R) &= \int_R dx \int dy\, |\psi_{ab}^{(A)}(x,y)|^2 \\
&= \frac{1}{N^2}\int_R dx\, |\psi_a(x)|^2 \int dy\, |\psi_b(y)|^2 + \frac{1}{N^2}\int dx\, |\psi_b(x)|^2 \int_R dy\, |\psi_a(y)|^2 \\
&\quad - \frac{1}{N^2}\int_R dx\, \psi_a^*(x)\psi_b(x) \int_R dy\, \psi_b^*(y)\psi_a(y) \\
&\quad - \frac{1}{N^2}\int_R dx\, \psi_b^*(x)\psi_a(x) \int_R dy\, \psi_a^*(y)\psi_b(y) \\
&= \frac{2}{N^2}\int_R dx\, |\psi_a(x)|^2 - \frac{2}{N^2}\int_R dx\, \psi_a^*(x)\psi_b(x) \int_R dy\, \psi_b^*(y)\psi_a(y) \\
&= \frac{2}{N^2}\int_R dx\, |\psi_a(x)|^2 - \frac{2}{N^2}\left|\int_R dx\, \psi_a^*(x)\psi_b(x)\right|^2 . \qquad (84)
\end{aligned}
$$

Kita lihat bahwa tanpa dan dengan antisimetrisasi memberikan nilai peluang berbeda, yang secara signifikan terletak pada suku kedua persamaan (84), yang bergantung pada integral overlap berikut:

$$
S_{ab}(R) = \int_R dx\, \psi_a^*(x)\psi_b(x)\,. \qquad (85)
$$

Apabila di daerah R overlap kedua fungsi gelombang $\psi_a(x)$ dan $\psi_b(x)$ besar, maka perbedaan itu sangat berarti dan ini menunjukkan bahwa antisimetrisasi perlu dilakukan. Sebaliknya, apabila di daerah R overlap kedua fungsi gelombang $\psi_a(x)$ dan $\psi_b(x)$ sangat kecil, maka perbedaan itu tidak berarti dan antisimetrisasi tidak perlu dilakukan.

Kita pahami secara lebih detil. Kita punya dua fermion identik dengan keadaan berbeda, anggaplah keadaan fermion 1 $\psi_a(x)$ dan keadaan fermion 2 $\psi_b(x)$. Misalkan fermion 1 berada di $x = x_1$ dan fermion 2 di $x = x_2$. Kita ingat bahwa fungsi gelombang sebuah partikel meluruh menjadi makin kecil di daerah yang makin jauh dari posisi partikel itu. Jadi, $\psi_a(x)$ bernilai besar di sekitar $x = x_1$ dan bernilai makin kecil untuk x makin jauh dari x_1. Demikian pula, $\psi_b(x)$ bernilai besar di sekitar $x = x_2$ dan bernilai makin kecil untuk x makin jauh dari x_2. Apabila fermion 1 dan fermon 2 saling berdekatan, $|x_1 - x_2|$ kecil, maka overlap kedua fungsi gelombang $\psi_a(x)$ dan $\psi_b(x)$ di hampir seluruh daerah besar. Dengan demikian, pada kasus ini diperlukan antisimetrisasi. Jika fermion 1 dan fermon 2 saling berjauhan, $|x_1 - x_2|$ besar, maka overlap kedua fungsi gelombang $\psi_a(x)$ dan $\psi_b(x)$ di seluruh daerah kecil. Dengan demikian, pada kasus ini antisimetrisasi tidak diperlukan.