Catatan Mekanika Kuantum 2

Teori Perturbasi Tak Bergantung Waktu

Acuan Gasiorowicz, *Quantum Physics* Ed. 3, Bab 11, Subbab 1 – 2

Dipicu oleh suatu interaksi terbentuklah sebuah sistem. Beberapa yang telah kita lihat, antara lain, partikel dalam kotak, osilator harmonik, atom hidrogen. Sistem-sistem itu memiliki keadaan-keadaan dan nilai-nilai eigen energi (atau tingkat-tingkat energi). Jika sistem itu diusik atau diganggu sedikit saja (*perturbed*), sedemikian sehingga sistem itu tidak berubah menjadi sistem lain yang berbeda, seperti apa perubahan keadaan dan energinya. Bisa saja sistem itu dihitung ulang secara eksak, dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger yang baru (berisi potensial usikan), baik secara analitik (jika tidak terlalu rumit), maupun dengan bantuan komputer. Namun, dapat juga efek usikan itu dihitung dengan hanya menggunakan suatu pendekatan tingkat terendah, sehingga tidak terlalu rumit, tapi masih dapat memberikan gambaran yang bermanfaat tentang perubahan keadaan dan energi, yang diakibatkan usikan kecil itu. Pendekatan seperti itu yang disampaikan pada bagian ini.

A. Pergeseran tingkat energi dan keadaan eigen terusik

Ambillah H_0 sebagai hamiltonian sistem sebelum diusik. Di dalam H_0 ada potensial, yang menyebabkan sistem itu terbentuk. Keadaan eigen dan tingkat energi sistem itu berturut-turut dinyatakan dengan $|\phi_n\rangle$ dan $E_n^{(0)}$, sehingga diperoleh persamaan nilai eigen atau persamaan Schrödinger tak bergantung waktu:

$$H_0|\phi_n\rangle = E_n^{(0)}|\phi_n\rangle \,. \tag{1}$$

Sistem itu diberi usikan kecil, direpresentasikan oleh potensial usikan λH_1, sehingga hamiltonian menjadi:

$$H = H_0 + \lambda H_1 \,, \tag{2}$$

dan persamaan Schrödinger yang baru menjadi:

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \,, \tag{3}$$

dengan $|\psi_n\rangle$ dan E_n berturut-turut adalah keadaan dan energi sistem setelah diusik. Faktor λ dipakai untuk menyatakan orde pendekatan, yaitu perhitungan dinyatakan sebagai deret pangkat dalam λ, sehingga pendekatan terendah (orde pertama) berkenaan dengan λ pangkat 1, pendekatan orde ke-2 dengan λ pangkat 2, dan seterusnya. Sebagai pendekatan terendah, kita akan lihat di sini pendekatan sampai orde ke-2, mengingat untuk beberapa kasus pendekatan orde pertama tidak cukup atau tidak memberikan hasil. Potensial usikan bersifat hermitian, sebagaimana layaknya hamiltonian, sehingga:

$$H_1^+ = H_1 \,. \tag{4}$$

Keadaan $|\phi_n\rangle$ bersifat ortogonal dan komplit, sehingga dapat dipakai sebagai basis. Dengan demikian, keadaan $|\psi_n\rangle$ dapat diekspansikan dalam $|\phi_n\rangle$ sebagai berikut:

$$|\psi_n\rangle = N(\lambda)\left(|\phi_n\rangle + \sum_{k\neq n} C_{nk}(\lambda)|\phi_k\rangle\right) , \tag{5}$$

dengan $N(\lambda)$ konstanta normalisasi, sedemikian agar $|\psi_n\rangle$ ternormalisasi ($\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1$). Koefisien ekspansi $C_{nk}(\lambda)$ dan energi E_n dinyatakan sebagai deret pangkat dalam λ:

$$C_{nk}(\lambda) = \lambda C_{nk}^{(1)} + \lambda^2 C_{nk}^{(2)} + ... \tag{6}$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + ... \,. \tag{7}$$

Jelas kita lihat di sini bahwa jika $\lambda = 0$, dengan kata lain usikan dihilangkan atau tidak ada usikan, dan dibuat agar $N(0) = 1$, maka sistem kembali ke keadaan awal: $C_{nk}(0) = 0$, $|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle$, $E_n = E_n^{(0)}$.

Deret di Eqs. (6) dan (7) dimasukkan ke persamaan Schrödinger (3), diperoleh:

$$\begin{aligned}&(H_0 + \lambda H_1)\left(|\phi_n\rangle + \lambda\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}|\phi_k\rangle + \lambda^2\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}|\phi_k\rangle + ...\right)\\ &\quad = \left(E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + ...\right)\left(|\phi_n\rangle + \lambda\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}|\phi_k\rangle + \lambda^2\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}|\phi_k\rangle + ...\right) .\end{aligned} \tag{8}$$

Kita ambil bagian dari Eq. (8) dengan λ pangkat 1, diperoleh:

$$\begin{aligned}H_0\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}|\phi_k\rangle + H_1|\phi_n\rangle &= E_n^{(0)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}|\phi_k\rangle + E_n^{(1)}|\phi_n\rangle\\ \rightarrow \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)} H_0|\phi_k\rangle + H_1|\phi_n\rangle &= E_n^{(0)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}|\phi_k\rangle + E_n^{(1)}|\phi_n\rangle\\ \rightarrow \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)} E_k^{(0)}|\phi_k\rangle + H_1|\phi_n\rangle &= E_n^{(0)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}|\phi_k\rangle + E_n^{(1)}|\phi_n\rangle\\ \rightarrow E_n^{(1)}|\phi_n\rangle &= H_1|\phi_n\rangle + \sum_{k\neq n}\left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}\right) C_{nk}^{(1)}|\phi_k\rangle\\ \rightarrow \langle\phi_n|E_n^{(1)}|\phi_n\rangle &= \langle\phi_n|H_1|\phi_n\rangle + \langle\phi_n|\sum_{k\neq n}\left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}\right) C_{nk}^{(1)}|\phi_k\rangle\\ \rightarrow E_n^{(1)}\langle\phi_n|\phi_n\rangle &= \langle\phi_n|H_1|\phi_n\rangle + \sum_{k\neq n}\left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}\right) C_{nk}^{(1)}\langle\phi_n|\phi_k\rangle\\ \rightarrow E_n^{(1)} &= \langle\phi_n|H_1|\phi_n\rangle + \sum_{k\neq n}\left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)}\right) C_{nk}^{(1)}\delta_{nk}\end{aligned} \tag{9}$$

$$= \langle \phi_n | H_1 | \phi_n \rangle \,. \tag{10}$$

Jadi, didapatkan bahwa perubahan atau pergeseran energi orde pertama sama dengan nilai ekspektasi potensial usikan:

$$\Delta E_n^{(1)} = \lambda E_n^{(1)} = \langle \phi_n | \lambda H_1 | \phi_n \rangle \,. \tag{11}$$

Dapat dikatakan juga bahwa pergeseran energi orde pertama sama dengan elemen diagonal matriks potensial usikan dalam basis keadaan eigen hamiltonian tanpa usikan. Perhatikan bahwa apabila potensial usikan λH_1 bersifat antisimetrik, maka $\Delta E_n^{(1)} = 0$. Pada kasus ini, kita harus lihat efek usikan orde ke-2.

Sekedar contoh, anggaplah suatu sistem diberi potensial usikan V, sehingga hamiltonian menjadi:

$$H = H_0 + V \,. \tag{12}$$

Pergeseran energi orde pertama diperoleh sebagai:

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle \phi_n | V | \phi_n \rangle \,. \tag{13}$$

Misalkan, diketahui potensial usikan dalam ruang posisi sebagai $V(\mathbf{r})$, yang berarti bahwa potensial usikan itu bersifat lokal:

$$\langle \mathbf{r}' | V | \mathbf{r} \rangle = V(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \,, \tag{14}$$

maka $\Delta E_n^{(1)}$ dihitung dalam ruang posisi sebagai berikut:

$$\begin{aligned} \Delta E_n^{(1)} &= \int d\mathbf{r}' \, d\mathbf{r} \, \langle \phi_n | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | V | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \phi_n \rangle \\ &= \int d\mathbf{r}' \, d\mathbf{r} \, \phi_n^*(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}) \\ &= \int d\mathbf{r} \, \phi_n^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \phi_n(\mathbf{r}) \,. \end{aligned} \tag{15}$$

Jika potensial usikan diberikan dalam representasi matriks, maka perhitungan $\Delta E_n^{(1)}$ pun dilakukan dalam representasi matriks.

Untuk melihat perubahan keadaan eigen orde pertama, kita perlu menghitung $C_{nk}^{(1)}$. Kita proyeksikan Eq. (9) pada keadaan $|\phi_m\rangle$, dengan $m \neq n$:

$$\begin{aligned} \langle \phi_m | E_n^{(1)} | \phi_n \rangle &= \langle \phi_m | H_1 | \phi_n \rangle + \langle \phi_m | \sum_{k \neq n} \left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)} \right) C_{nk}^{(1)} | \phi_k \rangle \\ \rightarrow E_n^{(1)} \langle \phi_m | \phi_n \rangle &= \langle \phi_m | H_1 | \phi_n \rangle + \sum_{k \neq n} \left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)} \right) C_{nk}^{(1)} \langle \phi_m | \phi_k \rangle \\ \rightarrow 0 &= \langle \phi_m | H_1 | \phi_n \rangle + \sum_{k \neq n} \left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)} \right) C_{nk}^{(1)} \delta_{mk} \end{aligned}$$

$$= \langle\phi_m|H_1|\phi_n\rangle + \left(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}\right) C_{nm}^{(1)}$$
$$\rightarrow C_{nm}^{(1)} = \frac{\langle\phi_m|H_1|\phi_n\rangle}{\left(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}\right)} \,. \tag{16}$$

Keadaan $|\psi_n\rangle$ sampai orde pertama adalah:

$$|\psi_n\rangle = N(\lambda)\left(|\phi_n\rangle + \lambda\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}|\phi_k\rangle\right) \,. \tag{17}$$

Karena $|\phi_n\rangle$ bersifat ortonormal, normalisasi $|\psi_n\rangle$ diperoleh sebagai berikut:

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = |N(\lambda)|^2\left(\langle\phi_n|\phi_n\rangle + \lambda^2\sum_{k\neq n}|C_{nk}^{(1)}|^2\langle\phi_k|\phi_k\rangle\right) = |N(\lambda)|^2\left(1 + \lambda^2\sum_{k\neq n}|C_{nk}^{(1)}|^2\right) = 1\,. \tag{18}$$

Kita lihat $\langle\psi_n|\psi_n\rangle$ tidak memiliki suku perubahan orde pertama, melainkan langsung orde ke-2. Dengan demikian, jika kita hanya ingin menghitung $\langle\psi_n|\psi_n\rangle$ sampai orde pertama, maka suku dengan λ^2 tidak disertakan. Jadi, sampai orde pertama:

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = |N(\lambda)|^2 = 1 \rightarrow N(\lambda) = 1\,. \tag{19}$$

Dengan demikian, diperoleh $|\psi_n\rangle$ sampai orde pertama sebagai berikut:

$$|\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \lambda\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}|\phi_k\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{k\neq n}\frac{\langle\phi_k|\lambda H_1|\phi_n\rangle}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)}|\phi_k\rangle\,. \tag{20}$$

Berikutnya, kita lihat efek usikan orde ke-2. Kita ambil bagian dari Eq. (8) dengan λ pangkat 2, diperoleh:

$$H_0\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}|\phi_k\rangle + H_1\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}|\phi_k\rangle = E_n^{(0)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}|\phi_k\rangle + E_n^{(1)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}|\phi_k\rangle + E_n^{(2)}|\phi_n\rangle$$
$$\rightarrow \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}E_k^{(0)}|\phi_k\rangle + \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}H_1|\phi_k\rangle = E_n^{(0)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}|\phi_k\rangle + E_n^{(1)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}|\phi_k\rangle + E_n^{(2)}|\phi_n\rangle$$
$$\rightarrow \langle\phi_n|\left(\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}E_k^{(0)}|\phi_k\rangle + \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}H_1|\phi_k\rangle\right) = \langle\phi_n|\left(E_n^{(0)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}|\phi_k\rangle + E_n^{(1)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}|\phi_k\rangle + E_n^{(2)}|\phi_n\rangle\right)$$
$$\rightarrow \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}E_k^{(0)}\delta_{nk} + \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\langle\phi_n|H_1|\phi_k\rangle = E_n^{(0)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}\delta_{nk} + E_n^{(1)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\delta_{nk} + E_n^{(2)}$$
$$\rightarrow 0 + \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\langle\phi_n|H_1|\phi_k\rangle = 0 + 0 + E_n^{(2)}$$
$$\begin{aligned}
\rightarrow E_n^{(2)} &= \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\langle\phi_n|H_1|\phi_k\rangle \\
&= \sum_{k\neq n}\langle\phi_n|H_1|\phi_k\rangle C_{nk}^{(1)} \\
&= \sum_{k\neq n}\frac{\langle\phi_n|H_1|\phi_k\rangle\langle\phi_k|H_1|\phi_n\rangle}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} \\
&= \sum_{k\neq n}\frac{\langle\phi_n|H_1|\phi_k\rangle\langle\phi_n|H_1^{+}|\phi_k\rangle^*}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} = \sum_{k\neq n}\frac{\langle\phi_k|H_1^{+}|\phi_n\rangle^*\langle\phi_k|H_1|\phi_n\rangle}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} \\
&= \sum_{k\neq n}\frac{\langle\phi_n|H_1|\phi_k\rangle\langle\phi_n|H_1|\phi_k\rangle^*}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)} = \sum_{k\neq n}\frac{\langle\phi_k|H_1|\phi_n\rangle^*\langle\phi_k|H_1|\phi_n\rangle}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)}\right)}
\end{aligned}$$

$$= \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \phi_n | H_1 | \phi_k \rangle|^2}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \phi_k | H_1 | \phi_n \rangle|^2}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right)} . \tag{21}$$

Jadi, didapatkan pergeseran energi orde ke-2 sebagai berikut:

$$\Delta E_n^{(2)} = \lambda^2 E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \phi_n | \lambda H_1 | \phi_k \rangle|^2}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \phi_k | \lambda H_1 | \phi_n \rangle|^2}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right)} . \tag{22}$$

Beberapa catatan tentang $\Delta E_n^{(2)}$:

- Jika n menyatakan tingkat keadaan dasar (*ground state level*), maka $E_n^{(0)}$ bernilai paling rendah, sehingga di Eq. (22) $E_n^{(0)} - E_k^{(0)} < 0$. Dengan demikian, usikan membuat tingkat energi keadaan dasar turun menjadi lebih rendah.

- Persamaan (22) menunjukkan kontribusi tingkat keadaan lain selain n pada pergeseran energi orde ke-2 tingkat keadaan n, akibat usikan λH_1. Jika besar $\langle \phi_n | \lambda H_1 | \phi_k \rangle$ untuk berbagai nilai k kurang lebih sama, maka kontribusi terbesar diberikan oleh tingkat keadaan terdekat ke tingkat keadaan n, sebut saja, sebagai contoh, $k = n \pm 1$, karena $\left| E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right|$ bernilai terkecil.

- Anggaplah suatu tingkat keadaan $k = m$ memberikan kontribusi terbesar atau dominan pada $\Delta E_n^{(2)}$. Jika tingkat keadaan m berada di atas tingkat keadaan n, berarti $E_n^{(0)} - E_m^{(0)} < 0$, maka tingkat energi keadaan n turun, sehingga celah energi (*energy gap*) antara kedua tingkat keadaan n dan m makin lebar. Sebaliknya, jika tingkat keadaan m berada di bawah tingkat keadaan n, berarti $E_n^{(0)} - E_m^{(0)} > 0$, maka tingkat energi keadaan n naik, sehingga celah energi antara kedua tingkat keadaan n dan m juga makin lebar. Dengan demikian, kita lihat di sini kecenderungan tingkat-tingkat keadaan untuk saling menjauh.

B. Teori perturbasi terdegenerasi

Apabila terdapat degenerasi pada sistem, misalkan keadaan $|\phi_n\rangle$ dan $|\phi_m\rangle$ memiliki energi sama, yaitu $E_n^{(0)} = E_m^{(0)} = E^{(0)}$, maka kita temui masalah singularitas pada koefisien $C_{nm}^{(1)}$. Jadi, degenerasi ini harus ditangani lebih dulu, setelah itu kita terapkan rumus-rumus yang telah diperoleh di bagian sebelum ini. Di bagian ini kita lihat perhitungan efek usikan dengan kasus degenerasi, namun hanya sampai orde pertama. Sebagai contoh, kita lihat kasus berikut ini dalam representasi matriks berukuran 3×3.

Agar mudah dibandingkan dengan kasus tanpa degenerasi, kita lihat terlebih dahulu gambaran perturbasi sampai orde pertama dalam representasi matriks berukuran 3×3 untuk kasus tanpa degenerasi. Hamiltonian tanpa usikan H_0 diberikan sebagai berikut:

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(0)} \end{pmatrix} . \tag{23}$$

Sistem diusik dengan potensial usikan λH_1, yang diberikan sebagai berikut:

$$\lambda H_1 = \lambda \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} \\ h_{12}^* & h_{22} & h_{23} \\ h_{13}^* & h_{23}^* & h_{33} \end{pmatrix} . \tag{24}$$

Pada Eq. (24) paling kanan telah diterapkan sifat hermitian potensial usikan, yaitu $h_{ij} = h_{ji}^*$. Hamiltonian yang baru setelah diusik, yaitu H, adalah:

$$H = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} + \lambda h_{11} & \lambda h_{12} & \lambda h_{13} \\ \lambda h_{21} & E_2^{(0)} + \lambda h_{22} & \lambda h_{23} \\ \lambda h_{31} & \lambda h_{32} & E_3^{(0)} + \lambda h_{33} \end{pmatrix} . \tag{25}$$

Sesuai Eq. (11), untuk perturbasi sampai orde pertama hamiltonian H di Eq. (25) dapat dinyatakan sebagai berikut:

$$H = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} + \Delta E_1^{(1)} & \lambda h_{12} & \lambda h_{13} \\ \lambda h_{21} & E_2^{(0)} + \Delta E_2^{(1)} & \lambda h_{23} \\ \lambda h_{31} & \lambda h_{32} & E_3^{(0)} + \Delta E_3^{(1)} \end{pmatrix} . \tag{26}$$

Kini kita lihat kasus dengan degenerasi. Misalkan keadaan $|\phi_1\rangle$ dan $|\phi_2\rangle$ memiliki energi sama, yaitu $E_1^{(0)} = E_2^{(0)} = E^{(0)}$, maka hamiltonian tanpa usikan H_0 diberikan sebagai berikut:

$$H_0 = \begin{pmatrix} E^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & E^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(0)} \end{pmatrix} . \tag{27}$$

Sistem diusik dengan potensial usikan λH_1, yang diberikan di Eq. (24). Hamiltonian yang baru setelah diusik, yaitu H, adalah:

$$H = \begin{pmatrix} E^{(0)} + \lambda h_{11} & \lambda h_{12} & \lambda h_{13} \\ \lambda h_{21} & E^{(0)} + \lambda h_{22} & \lambda h_{23} \\ \lambda h_{31} & \lambda h_{32} & E_3^{(0)} + \lambda h_{33} \end{pmatrix} . \tag{28}$$

Perhitungan efek usikan dilakukan dalam dua tahap, yang secara ringkas disampaikan sebagai berikut:

1. *Mengatasi degenerasi:*

   Untuk mengatasi degenerasi, kita hanya perlu bekerja pada bagian matriks H, yang di situ terdapat degenerasi, dalam hal ini bagian pojok kiri atas submatriks 2×2 hamiltonian H. Bagian tersebut didiagonalisasi, sehingga matriks H berubah menjadi matriks H_D, yang digambarkan sebagai berikut:

$$H_D = \begin{pmatrix} E_1'^{(0)} & 0 & \lambda h_{13} \\ 0 & E_2'^{(0)} & \lambda h_{23} \\ \lambda h_{31} & \lambda h_{32} & E_3^{(0)} + \lambda h_{33} \end{pmatrix} . \tag{29}$$

2. *Menghitung efek usikan menggunakan rumus-rumus yang telah diperoleh di bagian sebelum ini:*

   Hamiltonian H_D di Eq. (29) dapat dinyatakan sebagai:

$$H_D = H_0' + \lambda H_1' \,. \tag{30}$$

   Dengan demikian, seolah-olah kita menemui sistem dengan hamiltonian tanpa usikan H_0', yang tidak mengandung degenerasi, dan potensial usikan $\lambda H_1'$, yang diberikan sebagai berikut:

$$H_0' = \begin{pmatrix} E_1'^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & E_2'^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(0)} \end{pmatrix} \,, \quad \lambda H_1' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \lambda h_{13} \\ 0 & 0 & \lambda h_{23} \\ \lambda h_{31} & \lambda h_{32} & \lambda h_{33} \end{pmatrix} \,. \tag{31}$$

   Serupa halnya dengan Eq. (26), untuk perturbasi sampai orde pertama H_D dapat dinyatakan sebagai berikut:

$$\begin{aligned} H_D &= \begin{pmatrix} E_1'^{(0)} & 0 & \lambda h_{13} \\ 0 & E_2'^{(0)} & \lambda h_{23} \\ \lambda h_{31} & \lambda h_{32} & E_3^{(0)} + \lambda h_{33} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} E^{(0)} + (E_1'^{(0)} - E^{(0)}) & 0 & \lambda h_{13} \\ 0 & E^{(0)} + (E_2'^{(0)} - E^{(0)}) & \lambda h_{23} \\ \lambda h_{31} & \lambda h_{32} & E_3^{(0)} + \lambda h_{33} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} E^{(0)} + \Delta E_1^{(1)} & 0 & \lambda h_{13} \\ 0 & E^{(0)} + \Delta E_2^{(1)} & \lambda h_{23} \\ \lambda h_{31} & \lambda h_{32} & E_3^{(0)} + \Delta E_3^{(1)} \end{pmatrix} \,. \end{aligned} \tag{32}$$

   Dengan demikian, diperoleh pergeseran energi orde pertama $\Delta E_1^{(1)} = E_1'^{(0)} - E^{(0)}$, $\Delta E_2^{(1)} = E_2'^{(0)} - E^{(0)}$, dan $\Delta E_3^{(1)} = \lambda h_{33}$.

   Jika Eq. (32) dibandingkan dengan Eq. (28) kita lihat bahwa sebetulnya yang mengalami diagonalisasi hanya submatriks potensial usikan λH_1:

$$\begin{pmatrix} \lambda h_{11} & \lambda h_{12} & \lambda h_{13} \\ \lambda h_{21} & \lambda h_{22} & \lambda h_{23} \\ \lambda h_{31} & \lambda h_{32} & \lambda h_{33} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \Delta E_1^{(1)} & 0 & \lambda h_{13} \\ 0 & \Delta E_2^{(1)} & \lambda h_{23} \\ \lambda h_{31} & \lambda h_{32} & \lambda h_{33} \end{pmatrix} \,. \tag{33}$$

   Elemen diagonal sebuah matriks atau submatriks diagonal adalah nilai eigen matriks atau submatriks tersebut. Jadi, kita simpulkan bahwa $\Delta E_1^{(1)}$ dan $\Delta E_2^{(1)}$ dalam hal ini tidak lain adalah nilai-nilai eigen bagian pojok kiri atas submatriks 2×2 potensial usikan λH_1:

$$\lambda \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix} \,. \tag{34}$$

Lebih detil tentang perhitungan tersebut dijelaskan sebagai berikut. Untuk diagonalisasi, diperlukan operator atau matriks transformasi $\hat{U}$, yang hanya mengubah bagian pojok kiri atas submatriks 2×2 hamiltonian H. Proses diagonalisasi dinyatakan sebagai berikut:

$$H_D = \hat{U}^+ H \hat{U} = \hat{U}^+ H_0 \hat{U} + \lambda \hat{U}^+ H_1 \hat{U} \,. \tag{35}$$

Matriks H_0 sudah diagonal. Karena itu, operator transformasi $\hat{U}$ tidak perlu mengubah H_0:

$$\hat{U}^+ H_0 \hat{U} = H_0 \,. \tag{36}$$

Matriks $\hat{U}$ dan konjugat hermitiannya, $\hat{U}^+$, digambarkan sebagai berikut:

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} a & b & 0 \\ c & d & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{dan} \quad \hat{U}^+ = \begin{pmatrix} a & c^* & 0 \\ b^* & d & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} . \tag{37}$$

Matriks $\hat{U}$ bersifat uniter, $\hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^+ = \hat{1}$, sehingga diperoleh:

$$a^2 + |c|^2 = |b|^2 + d^2 = 1 \quad \text{dan} \quad ab + c^* d = b^* a + dc = 0 \,. \tag{38}$$

Operator $\hat{U}$ dengan bentuk yang ditunjukkan di Eq. (37) tidak mengubah baris 3 dan kolom 3 matriks H_0. Bagian pojok kiri atas submatriks 2×2 hamiltonian H_0 juga tidak berubah, karena bagian itu dapat ditulis sebagai $E^{(0)}$ dikalikan dengan matriks satu $\hat{1}$, sehingga $\hat{U}^+ \hat{1} \hat{U} = \hat{U}^+ \hat{U} = \hat{1}$. Semua itu dapat ditunjukkan sebagai berikut:

$$\begin{aligned}
H_0 &= \begin{pmatrix} E^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & E^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(0)} \end{pmatrix} = E^{(0)} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(0)} \end{pmatrix} \\
\hat{U}^+ H_0 \hat{U} &= E^{(0)} \begin{pmatrix} a & c^* & 0 \\ b^* & d & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b & 0 \\ c & d & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&\quad + \begin{pmatrix} a & c^* & 0 \\ b^* & d & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(0)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b & 0 \\ c & d & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= E^{(0)} \begin{pmatrix} a & c^* & 0 \\ b^* & d & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b & 0 \\ c & d & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} a & c^* & 0 \\ b^* & d & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(0)} \end{pmatrix} \\
&= E^{(0)} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(0)} \end{pmatrix} \\
&= H_0 \,.
\end{aligned} \tag{39}$$

Jadi, kita dapat pastikan sembarang operator transformasi uniter $\hat{U}$ yang bentuknya ditunjukkan di Eq. (37) tidak mengubah H_0 yang diberikan di Eq. (27). Dengan demikian, kita dapat fokus pada diagonalisasi potensial usikan λH_1, dan yang harus didiagonalisasi hanya bagian pojok kiri atas submatriks 2×2 potensial usikan λH_1, yaitu:

$$\lambda \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix} . \tag{40}$$

Namun, kita cek terlebih dahulu berikut ini, apakah diagonalisasi tersebut dapat dilakukan dengan operator transformasi $\hat{U}$ yang diberikan di Eq. (37).

$$\begin{aligned} \hat{U}^{+}\lambda H_1 \hat{U} &= \lambda \begin{pmatrix} a & c^* & 0 \\ b^* & d & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b & 0 \\ c & d & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \lambda \begin{pmatrix} a & c^* & 0 \\ b^* & d & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{11}a + h_{12}c & h_{11}b + h_{12}d & h_{13} \\ h_{21}a + h_{22}c & h_{21}b + h_{22}d & h_{23} \\ h_{31}a + h_{32}c & h_{31}b + h_{32}d & h_{33} \end{pmatrix} \\ &= \lambda \begin{pmatrix} h_{11}a^2 + h_{12}ac + h_{21}c^*a + h_{22}|c|^2 & h_{11}ab + h_{12}ad + h_{21}c^*b + h_{22}c^*d & h_{13}a + h_{23}c^* \\ h_{11}b^*a + h_{12}b^*c + h_{21}da + h_{22}dc & h_{11}|b|^2 + h_{12}b^*d + h_{21}db + h_{22}d^2 & h_{13}b^* + h_{23}d \\ h_{31}a + h_{32}c & h_{31}b + h_{32}d & h_{33} \end{pmatrix} . \end{aligned} \tag{41}$$

Kita lihat bahwa diagonalisasi tersebut dapat dilakukan, dengan catatan elemen-elemen matriks $\hat{U}$ memenuhi tiga persamaan berikut:[1]

$$h_{13}a + h_{23}c^* = h_{13} \tag{45}$$

$$h_{13}b^* + h_{23}d = h_{23} \tag{46}$$

$$h_{11}ab + h_{12}ad + h_{21}c^*b + h_{22}c^*d = 0\,, \tag{47}$$

sehingga diperoleh:

$$\hat{U}^{+}\lambda H_1 \hat{U} = \lambda \begin{pmatrix} h_{11}a^2 + h_{12}ac + h_{21}c^*a + h_{22}|c|^2 & 0 & h_{13} \\ 0 & h_{11}|b|^2 + h_{12}b^*d + h_{21}db + h_{22}d^2 & h_{23} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{pmatrix} . \tag{48}$$

Setelah diagonalisasi, kita tahu bahwa elemen-elemen diagonal bagian pojok kiri atas submatriks 2×2 potensial usikan tidak lain adalah nilai-nilai eigen matriks di Eq. (40). Dengan demikian, kita tidak perlu mencari matriks $\hat{U}$ sesuai syarat Eqs. (45)-(47) dan melakukan perhitungan seperti di Eqs. (41) dan (48), karena kini permasalahan tereduksi menjadi pencarian nilai eigen matriks di Eq. (40), seperti telah disampaikan dalam diskusi sebelumnya (lihat

[1] Ada tiga persamaan lain, namun berdasarkan sifat hermitian potensial usikan tiga persamaan itu tidak lain merupakan konjugat kompleks tiga persamaan di Eqs. (45)-(47):

$$h_{31}a + h_{32}c = (h_{31}^*a + h_{32}^*c^*)^* = (h_{13}a + h_{23}c^*)^* = h_{13}^* \tag{42}$$

$$h_{31}b + h_{32}d = (h_{31}^*b^* + h_{32}^*d)^* = (h_{13}b^* + h_{23}d)^* = h_{23}^* \tag{43}$$

$$h_{11}b^*a + h_{12}b^*c + h_{21}da + h_{22}dc = (h_{11}ba + h_{12}^*bc^* + h_{21}^*da + h_{22}dc^*)^* = (h_{11}ba + h_{21}bc^* + h_{12}da + h_{22}dc^*)^* = 0\,. \tag{44}$$

Eqs. (33) dan (34)). Ambillah nilai eigen itu dinyatakan dengan λw. Untuk mencari w, kita selesaikan persamaan sekuler berikut (lihat catatan tentang mekanika matriks atau buku tentang aljabar linier):

$$\begin{vmatrix} \lambda h_{11} - \lambda w & \lambda h_{12} \\ \lambda h_{21} & \lambda h_{22} - \lambda w \end{vmatrix} = 0 \rightarrow \begin{vmatrix} h_{11} - w & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} - w \end{vmatrix} = 0\,. \tag{49}$$

$$\begin{aligned}
&\rightarrow (h_{11} - w)(h_{22} - w) - h_{12}h_{21} = 0 \\
&\rightarrow (h_{11} - w)(h_{22} - w) - |h_{12}|^2 = 0 \\
&\rightarrow w^2 - (h_{11} + h_{22})w + h_{11}h_{22} - |h_{12}|^2 = 0 \\
&\rightarrow w_\pm = \frac{1}{2}(h_{11} + h_{22}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(h_{11} + h_{22})^2 - h_{11}h_{22} + |h_{12}|^2} \\
&\qquad = \frac{1}{2}(h_{11} + h_{22}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(h_{11} - h_{22})^2 + |h_{12}|^2}\,.
\end{aligned} \tag{50}$$

Jadi, diperoleh potensial usikan setelah diagonalisasi, sebut saja λH_{1D}, sebagai berikut:

$$\lambda H_{1D} = \hat{U}^+ \lambda H_1 \hat{U} = \lambda \begin{pmatrix} w_+ & 0 & h_{13} \\ 0 & w_- & h_{23} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{pmatrix}. \tag{51}$$

dan hamiltonian H_D menjadi:

$$H_D = \begin{pmatrix} E^{(0)} + \lambda w_+ & 0 & \lambda h_{13} \\ 0 & E^{(0)} + \lambda w_- & \lambda h_{23} \\ \lambda h_{31} & \lambda h_{32} & E_3^{(0)} + \lambda h_{33} \end{pmatrix}. \tag{52}$$

Pergeseran energi orde pertama diperoleh sebagai berikut:

$$\Delta E_1^{(1)} = \lambda w_+\ ,\ \Delta E_2^{(1)} = \lambda w_-\ ,\ \Delta E_3^{(1)} = \lambda h_{33}\,. \tag{53}$$

Dari penjabaran panjang di atas kita lihat bahwa inti perhitungan ada di Eqs. (49)-(50), yaitu pencarian nilai eigen bagian potensial usikan, yang pada bagian itu terdapat degenerasi pada hamiltonian asal sebelum diusik. Berikut ini kita lihat perhitungan efek usikan pada kasus degenerasi dalam formulasi yang lebih umum, namun ekivalen dengan yang ditunjukkan dalam representasi matriks di atas.

Pada kasus degenerasi dua atau lebih keadaan menunjukkan nilai yang sama untuk suatu besaran fisika, sehingga keadaan-keadaan itu tak terbedakan. Karena itu, orang harus melihat suatu besaran fisika lain, yang nilainya berbeda untuk keadaan-keadaan tersebut, sehingga keadaan-keadaan itu menjadi terbedakan (ingat kembali kuliah Mekanika Kuantum 1). Jadi, pada keadaan sistem sebelum diusik, yaitu $|\phi_n\rangle$, kita tambahkan satu label, sebut saja i, untuk merepresentasikan besaran fisika lain, yang operatornya, sebut saja, $\hat{O}_i$, sehingga keadaan sistem sebelum diusik menjadi $|\phi_n^{(i)}\rangle$. Keadaan $|\phi_n^{(i)}\rangle$, dengan demikian, merupakan keadaan eigen bersama (*simultaneous eigenstate*) operator besaran fisika yang direpresentasikan oleh label n dan i. Pada besaran fisika yang direpresentasikan oleh label n, yaitu energi, terdapat degenerasi, sedangkan pada besaran fisika yang direpresentasikan oleh label i degenerasi tersebut tidak muncul. Ortonormalitas $|\phi_n^{(i)}\rangle$ diberikan sebagai berikut:

$$\langle\phi_m^{(j)}|\phi_n^{(i)}\rangle = \delta_{mn}\delta_{ji}\,. \tag{54}$$

Kini notasi $|\phi_n\rangle$ menyatakan keadaan sistem pada energi tertentu, tanpa keterangan jelas mengenai besaran fisika yang direpresentasikan oleh label i. Sesuai postulat ekspansi, $|\phi_n\rangle$ dapat diekspansikan dalam $|\phi_n^{(i)}\rangle$ sebagai berikut:

$$|\phi_n\rangle = \sum_i \alpha_i|\phi_n^{(i)}\rangle\,, \tag{55}$$

dengan, sesuai sifat ortonormal $|\phi_n\rangle$, koefisien ekspansi α_i memenuhi persamaan:

$$\sum_i |\alpha_i|^2 = 1\,. \tag{56}$$

Dengan demikian, keadaan sistem setelah diusik di Eq. (5) menjadi:

$$\begin{aligned}|\psi_n\rangle &= N(\lambda)\left(\sum_i \alpha_i|\phi_n^{(i)}\rangle + \sum_{k\neq n} C_{nk}(\lambda)\sum_i \beta_i|\phi_k^{(i)}\rangle\right)\\ &= N(\lambda)\left(\sum_i \alpha_i|\phi_n^{(i)}\rangle + \lambda\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\sum_i \beta_i|\phi_k^{(i)}\rangle + \lambda^2\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}\sum_i \beta_i|\phi_k^{(i)}\rangle + ...\right)\,. \end{aligned}\tag{57}$$

Setelah $|\psi_n\rangle$ dimasukkan ke persamaan Schrödinger (3), bagian dengan λ pangkat 1 diperoleh sebagai berikut:

$$\begin{aligned}&H_0\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\sum_i \beta_i|\phi_k^{(i)}\rangle + H_1\sum_i \alpha_i|\phi_n^{(i)}\rangle = E_n^{(0)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\sum_i \beta_i|\phi_k^{(i)}\rangle + E_n^{(1)}\sum_i \alpha_i|\phi_n^{(i)}\rangle\\ \rightarrow &\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}E_k^{(0)}\sum_i \beta_i|\phi_k^{(i)}\rangle + H_1\sum_i \alpha_i|\phi_n^{(i)}\rangle = E_n^{(0)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\sum_i \beta_i|\phi_k^{(i)}\rangle + E_n^{(1)}\sum_i \alpha_i|\phi_n^{(i)}\rangle\,. \end{aligned}\tag{58}$$

Kita proyeksikan Eq. (58) pada keadaan $|\phi_n^{(j)}\rangle$. Sesuai relasi ortonormal di Eq. (54) masing-masing suku pertama di ruas kiri dan kanan Eq. (58) tidak memberikan hasil, sehingga diperoleh:

$$\begin{aligned}&\langle\phi_n^{(j)}|H_1\sum_i \alpha_i|\phi_n^{(i)}\rangle = \langle\phi_n^{(j)}|E_n^{(1)}\sum_i \alpha_i|\phi_n^{(i)}\rangle\\ \rightarrow &\sum_i\langle\phi_n^{(j)}|H_1|\phi_n^{(i)}\rangle\alpha_i = E_n^{(1)}\alpha_j\\ \rightarrow &\sum_i\langle\phi_n^{(j)}|\lambda H_1|\phi_n^{(i)}\rangle\alpha_i = \lambda E_n^{(1)}\alpha_j\,. \end{aligned}\tag{59}$$

Persamaan (59) merupakan persamaan nilai eigen untuk potensial usikan λH_1. Dengan menyelesaikan Eq. (59) diperoleh nilai eigen $\lambda E_n^{(1)}$, yang tidak lain adalah pergeseran energi orde pertama. Dalam bentuk matriks, Eq. (59) dapat digambarkan sebagai berikut:

$$\left(\quad \lambda H_1 \quad \right) \left(\alpha \right) = \lambda E_n^{(1)} \left(\alpha \right) . \tag{60}$$

Persamaan (59) hanya dikerjakan untuk bagian λH_1, yang pada bagian itu terdapat degenerasi pada H_0. Jelas, bahwa hal ini sama dengan yang telah ditunjukkan dalam representasi matriks sebelum ini, yaitu di Eqs. (49)-(50). Sebagai contoh, jika terdapat degenerasi 2 lipatan (*two-fold degeneracy*), maka Eq. (59) menjadi:

$$h_{11}\alpha_1 + h_{12}\alpha_2 = E_n^{(1)}\alpha_1 \tag{61}$$

$$h_{21}\alpha_1 + h_{22}\alpha_2 = E_n^{(1)}\alpha_2 \tag{62}$$

atau:

$$\begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{21} & h_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = E_n^{(1)} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} , \tag{63}$$

dengan:

$$h_{ji} = \langle \phi_n^{(j)} | H_1 | \phi_n^{(i)} \rangle . \tag{64}$$

Kita lihat kasus khusus. Apabila potensial usikan λH_1 komut dengan operator besaran fisika, yang direpresentasikan oleh label i:

$$[\lambda H_1, \hat{O}_i] = 0 , \tag{65}$$

maka $|\phi_n^{(i)}\rangle$ juga merupakan keadaan eigen λH_1, sehingga λH_1 dalam basis $|\phi_n^{(i)}\rangle$ berupa matriks diagonal, $h_{ji} = h_{jj}\delta_{ji}$. Pada kasus ini, pergeseran energi orde pertama, yaitu $\lambda E_n^{(1)}$, tidak lain adalah elemen diagonal matriks λH_1. Sebagai contoh, bayangkan sebuah rotator pejal bebas bermuatan listrik q, dengan massa M dan momen inersia I. Hamiltonian rotator itu, H_0, diberikan sebagai berikut:

$$H_0 = \frac{1}{2I}\hat{\mathbf{L}}^2 , \tag{66}$$

sehingga energi eigen rotator ditentukan oleh nilai momentum angular orbital l sebagai berikut:

$$E_l^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1) . \tag{67}$$

Keadaan eigen hamiltonian H_0 rotator itu tidak lain adalah keadaan eigen operator momentum angular orbital $\hat{\mathbf{L}}^2$ dan $\hat{L}_z$, yaitu $|lm\rangle$. Untuk tiap nilai l terdapat $2l+1$ nilai m berbeda. Jadi, pada sistem ini terdapat degenerasi, yaitu ada $2l+1$ keadaan $|lm\rangle$ berbeda dengan energi sama $E_l^{(0)}$. Yang dapat membedakan keadaan-keadaan itu adalah operator $\hat{L}_z$.

Momen magnetik rotator itu adalah:

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{qg}{2M}\hat{\mathbf{L}} , \ (g = \text{ faktor giromagnetik}) . \tag{68}$$

Jika rotator itu ditempatkan dalam medan magnetik konstan $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$, timbul usikan pada rotator akibat interaksi medan magnetik dan momen magnetik. Hamiltonian usikan atau potensial usikan diberikan sebagai berikut:

$$V = -\frac{qg}{2M}\hat{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{B} = -\frac{qgB}{2M}\hat{L}_z\,. \tag{69}$$

Jelas bahwa potensial usikan V komut dengan operator $\hat{L}_z$. Dengan demikian, pergeseran energi orde pertama diperoleh sebagai elemen diagonal V:

$$\Delta E_l^{(1)} = \langle lm|V|lm\rangle = -\frac{qgB}{2M}\langle lm|\hat{L}_z|lm\rangle = -\frac{qgB\hbar}{2M}m\,. \tag{70}$$

Setelah diusik, tingkat energi rotator $E_l^{(0)}$ pecah menjadi $2l+1$ tingkat:

$$E_{lm}^{(0)} = \frac{\hbar^2}{2I}l(l+1) - \frac{qgB\hbar}{2M}m\,. \tag{71}$$

Catatan: Pergeseran energi rotator yang diperoleh di atas bukan merupakan suatu pendekatan, melainkan suatu hasil eksak, karena potensial usikan V komut dengan hamiltonian rotator H_0. Dengan demikian, keadaan eigen H_0 juga merupakan keadaan eigen hamiltonian baru rotator, yaitu H. Pada kasus ini, usikan hanya menyebabkan perubahan tingkat energi, namun tidak mengubah keadaan rotator.