

## Bab 2: Partikel dalam Kotak

### Daftar Isi

|   |                                      |    |
|---|--------------------------------------|----|
| 1 | Bab 2: Partikel dalam Kotak          | 2  |
| 2 | Persamaan Diferensial                | 2  |
| 3 | Partikel dalam Kotak Satu Dimensi    | 3  |
| 4 | Partikel Bebas dalam Satu Dimensi    | 10 |
| 5 | Partikel dalam Sumur Persegi Panjang | 11 |
| 6 | Penerowongan (Tunneling)             | 13 |
| 7 | Ringkasan                            | 15 |
| 8 | Soal-soal                            | 15 |

# 1 Bab 2: Partikel dalam Kotak

Fungsi gelombang keadaan stasioner dan tingkat energi dari sistem satu partikel, satu dimensi ditemukan dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger tak-bergantung waktu (1.19). Dalam bab ini, kita akan menyelesaikan persamaan Schrödinger tak-bergantung waktu untuk sistem yang sangat sederhana, yaitu partikel dalam kotak satu dimensi (Bagian 2.2). Karena persamaan Schrödinger adalah persamaan diferensial, kita akan membahas terlebih dahulu persamaan diferensial.

## 2 Persamaan Diferensial

Bagian ini hanya membahas persamaan diferensial biasa, yaitu persamaan yang hanya memiliki satu variabel independen. (Persamaan diferensial parsial memiliki lebih dari satu variabel independen. Contohnya adalah persamaan Schrödinger bergantung waktu (1.16), di mana  $t$  dan  $x$  adalah variabel independen.) Persamaan diferensial biasa adalah hubungan yang melibatkan variabel independen  $x$ , variabel dependen  $y(x)$ , dan turunan pertama, kedua, ..., ke- $n$  dari  $y$  ( $y'$ ,  $y''$ , ...,  $y^{(n)}$ ). Contohnya adalah

$$y''' + 2x(y'')^2 + y' \sin x = 3e^x \quad (1)$$

Orde dari suatu persamaan diferensial adalah orde dari turunan tertinggi dalam persamaan tersebut. Jadi, (1) adalah persamaan orde ketiga.

Jenis khusus dari persamaan diferensial adalah persamaan diferensial linear, yang memiliki bentuk

$$A_n(x)y^{(n)} + A_{n-1}(x)y^{(n-1)} + \dots + A_1(x)y' + A_0(x)y = g(x) \quad (2)$$

di mana  $A$ 's dan  $g$  (beberapa di antaranya mungkin nol) adalah fungsi dari  $x$  saja. Dalam persamaan diferensial linear orde ke- $n$  (2),  $y$  dan turunannya muncul dengan pangkat pertama. Persamaan diferensial yang tidak dapat diletakkan dalam bentuk (2) adalah non-linear. Jika  $g(x) = 0$  dalam (2), persamaan diferensial linear tersebut adalah homogen; jika tidak, ia adalah non-homogen. Persamaan Schrödinger satu dimensi (1.19) adalah persamaan diferensial linear homogen orde kedua.

Dengan membagi dengan koefisien dari  $y''$ , kita dapat menempatkan setiap persamaan diferensial linear homogen orde kedua ke dalam bentuk

$$y'' + P(x)y' + Q(x)y = 0 \quad (3)$$

Misalkan  $y_1$  dan  $y_2$  adalah dua fungsi independen, yang masing-masing memenuhi (3). Dengan independen, kami berarti bahwa  $y_2$  bukanlah kelipatan sederhana dari  $y_1$ . Maka solusi umum dari persamaan diferensial linear homogen (3) adalah

$$y = c_1y_1 + c_2y_2 \quad (4)$$

di mana  $c_1$  dan  $c_2$  adalah konstanta arbitrer. Ini mudah diverifikasi dengan mensubstitusikan (4) ke sisi kiri (3):

$$\begin{aligned} & (c_1y_1 + c_2y_2)'' + P(x)(c_1y_1 + c_2y_2)' + Q(x)(c_1y_1 + c_2y_2) \\ &= c_1y_1'' + c_2y_2'' + P(x)(c_1y_1' + c_2y_2') + Q(x)(c_1y_1 + c_2y_2) \\ &= c_1(y_1'' + P(x)y_1' + Q(x)y_1) + c_2(y_2'' + P(x)y_2' + Q(x)y_2) \\ &= c_1 \cdot 0 + c_2 \cdot 0 = 0 \end{aligned}$$

di mana fakta bahwa  $y_1$  dan  $y_2$  memenuhi (3) telah digunakan. Solusi umum dari persamaan diferensial orde ke- $n$  biasanya memiliki  $n$  konstanta arbitrer. Untuk menetapkan konstanta-konstanta ini, kita mungkin memiliki kondisi batas, yaitu kondisi yang menentukan nilai  $y$  atau berbagai turunannya pada satu titik atau lebih. Misalnya, jika  $y$  adalah perpindahan senar yang bergetar yang ditahan pada dua titik, kita tahu  $y$  harus nol pada titik-titik ini.

Kasus khusus yang penting adalah persamaan diferensial linear homogen orde kedua dengan koefisien konstan:

$$y'' + py' + qy = 0 \quad (5)$$

di mana  $p$  dan  $q$  adalah konstanta. Untuk menyelesaikan (5), mari kita asumsikan sementara solusi berbentuk  $y = e^{sx}$ . Kita mencari fungsi yang turunannya, ketika dikalikan dengan konstanta, akan menghilangkan fungsi aslinya. Fungsi eksponensial mengulang dirinya sendiri ketika diturunkan dan dengan demikian merupakan pilihan yang tepat. Substitusi ke dalam (5) memberikan

$$\begin{aligned} s^2 e^{sx} + p s e^{sx} + q e^{sx} &= 0 \\ s^2 + p s + q &= 0 \end{aligned}$$

Persamaan (??) disebut persamaan bantu. Ini adalah persamaan kuadrat dengan dua akar  $s_1$  dan  $s_2$  yang, asalkan  $s_1$  dan  $s_2$  tidak sama, memberikan dua solusi independen untuk (5). Jadi, solusi umum dari (5) adalah

$$y = c_1 e^{s_1 x} + c_2 e^{s_2 x} \quad (6)$$

Sebagai contoh, untuk  $y'' + 6y' - 7y = 0$ , persamaan bantu adalah  $s^2 + 6s - 7 = 0$ . Rumus kuadrat memberikan  $s_1 = 1$ ,  $s_2 = -7$ , sehingga solusi umumnya adalah  $c_1 e^x + c_2 e^{-7x}$ .

### 3 Partikel dalam Kotak Satu Dimensi

Bagian ini menyelesaikan persamaan Schrödinger tak-bergantung waktu untuk partikel dalam kotak satu dimensi. Dengan ini kita maksudkan partikel yang dikenakan fungsi energi potensial yang tak hingga di mana-mana sepanjang sumbu  $x$  kecuali untuk segmen garis sepanjang  $l$ , di mana energi potensialnya nol. Sistem seperti itu mungkin tampak tidak realistis secara fisik, tetapi model ini dapat diterapkan dengan beberapa keberhasilan pada molekul terkonjugasi tertentu; lihat Soal 2.17. Kita menempatkan titik asal di ujung kiri segmen garis (Gambar 2.1).

Kita memiliki tiga daerah untuk dipertimbangkan. Di daerah I dan III, energi potensial  $V$  sama dengan tak hingga dan persamaan Schrödinger tak-bergantung waktu (1.19) adalah

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = (E - V) \psi$$

Karena  $V = \infty$ , maka untuk menjaga sisi kiri tetap terbatas,  $\psi$  harus nol di daerah ini. Oleh karena itu, kita menyimpulkan bahwa  $\psi$  adalah nol di luar kotak:

$$\psi_I = 0, \quad \psi_{III} = 0 \quad (7)$$

Untuk daerah II,  $x$  antara nol dan  $l$ , energi potensial  $V$  adalah nol, dan persamaan Schrödinger (1.19) menjadi

$$\frac{d^2 \psi_{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi_{II} = 0 \quad (8)$$



Gambar 1: Fungsi energi potensial  $V(x)$  untuk partikel dalam kotak satu dimensi.

di mana  $m$  adalah massa partikel dan  $E$  adalah energinya. Kita mengenali (8) sebagai persamaan diferensial linear homogen orde kedua dengan koefisien konstan. Persamaan bantu (??) memberikan

$$s^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} = 0$$

$$s = \pm \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$s = \pm i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

di mana  $i = \sqrt{-1}$ . Menggunakan (6), kita memiliki

$$\psi_{II} = c_1 e^{i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x} + c_2 e^{-i \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x} \quad (9)$$

Untuk sementara, misalkan  $u = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x$ . Maka  $\psi_{II} = c_1 e^{iu} + c_2 e^{-iu}$ . Kita memiliki  $e^{iu} = \cos u + i \sin u$  [Persamaan (1.28)] dan  $e^{-iu} = \cos(-u) + i \sin(-u) = \cos u - i \sin u$ , karena  $\cos(-u) = \cos u$  dan  $\sin(-u) = -\sin u$ .

$$\cos(-u) = \cos u \quad \text{dan} \quad \sin(-u) = -\sin u \quad (10)$$

Oleh karena itu,

$$\begin{aligned}\psi_{II} &= c_1(\cos u + i \sin u) + c_2(\cos u - i \sin u) \\ &= (c_1 + c_2) \cos u + i(c_1 - c_2) \sin u \\ &= A \cos u + B \sin u\end{aligned}$$

di mana  $A$  dan  $B$  adalah konstanta arbitrer baru. Jadi,

$$\psi_{II} = A \cos \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x \right) + B \sin \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x \right) \quad (11)$$

Sekarang kita mencari  $A$  dan  $B$  dengan menerapkan kondisi batas. Tampaknya masuk akal untuk mengemukakan bahwa fungsi gelombang akan kontinu; artinya, tidak akan ada lompatan mendadak dalam nilai (lihat Gambar 3.4). Jika  $\psi$  harus kontinu pada titik  $x = 0$ , maka  $\psi_I$  dan  $\psi_{II}$  harus mendekati nilai yang sama pada  $x = 0$ :

$$\begin{aligned}\lim_{x \rightarrow 0} \psi_I &= \lim_{x \rightarrow 0} \psi_{II} \\ 0 &= \lim_{x \rightarrow 0} \left[ A \cos \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x \right) + B \sin \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x \right) \right] \\ 0 &= A\end{aligned}$$

karena  $\sin 0 = 0$  dan  $\cos 0 = 1$ .

$$\sin 0 = 0 \quad \text{dan} \quad \cos 0 = 1 \quad (12)$$

Dengan  $A = 0$ , Persamaan (11) menjadi

$$\psi_{II} = B \sin \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x \right) \quad (13)$$

Menerapkan kondisi kontinuitas pada  $x = l$ , kita mendapatkan

$$B \sin \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} l \right) = 0 \quad (14)$$

$B$  tidak boleh nol karena ini akan membuat fungsi gelombang nol di mana-mana – kita akan memiliki kotak kosong. Oleh karena itu,

$$\sin \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} l \right) = 0$$

Titik nol dari fungsi sinus terjadi pada  $0, \pm\pi, \pm2\pi, \pm3\pi, \dots = n\pi$ . Oleh karena itu,

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} l = n\pi \quad (15)$$

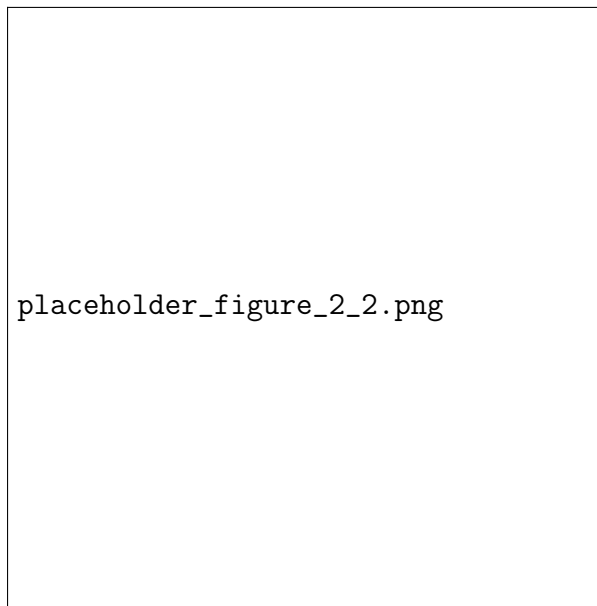
Nilai  $n = 0$  adalah kasus khusus. Dari (15),  $n = 0$  sesuai dengan  $E = 0$ . Untuk  $E = 0$ , akar-akar (??) dari persamaan bantu adalah sama dan (9) bukanlah solusi lengkap dari persamaan Schrödinger. Untuk menemukan solusi lengkap, kita kembali ke (8),

yang untuk  $E = 0$  berbunyi  $d^2\psi_{II}/dx^2 = 0$ . Integrasi memberikan  $d\psi_{II}/dx = c$  dan  $\psi_{II} = cx + d$ , di mana  $c$  dan  $d$  adalah konstanta. Kondisi batas bahwa  $\psi_{II} = 0$  pada  $x = 0$  memberikan  $d = 0$ , dan kondisi bahwa  $\psi_{II} = 0$  pada  $x = l$  kemudian memberikan  $c = 0$ . Jadi,  $\psi_{II} = 0$  untuk  $E = 0$ , dan oleh karena itu  $E = 0$  bukanlah nilai energi yang diizinkan. Maka,  $n = 0$  tidak diizinkan.

Menyelesaikan (15) untuk  $E$ , kita memiliki

$$E = \frac{n^2 h^2}{8ml^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (16)$$

Hanya nilai-nilai energi (16) yang memungkinkan  $\psi$  memenuhi kondisi batas kontinuitas pada  $x = l$ . Penerapan kondisi batas telah memaksa kita pada kesimpulan bahwa nilai-nilai energi terkuantisasi (Gambar 2.2). Ini sangat kontras dengan hasil klasik bahwa partikel dalam kotak dapat memiliki energi non-negatif apa pun. Perhatikan bahwa ada nilai minimum, lebih besar dari nol, untuk energi partikel. Keadaan energi terendah disebut keadaan dasar. Keadaan dengan energi lebih tinggi dari energi keadaan dasar adalah keadaan tereksitasi. (Dalam mekanika klasik, energi terendah yang mungkin dari partikel dalam kotak adalah nol. Partikel klasik diam di dalam kotak dengan energi kinetik nol dan energi potensial nol.)



Gambar 2: Empat tingkat energi terendah untuk partikel dalam kotak satu dimensi.

## Contoh

Sebuah partikel bermassa  $2.00 \times 10^{-26}$  g berada dalam kotak satu dimensi sepanjang 4.00 nm. Cari frekuensi dan panjang gelombang foton yang dipancarkan ketika partikel ini berpindah dari tingkat  $n = 3$  ke tingkat  $n = 2$ .

## Solusi Contoh

Berdasarkan kekekalan energi, energi  $h\nu$  dari foton yang dipancarkan sama dengan perbedaan energi antara dua keadaan stasioner [Persamaan (1.4); lihat juga Bagian 9.9]:

$$\begin{aligned} h\nu &= E_{\text{atas}} - E_{\text{bawah}} = \frac{n_{\text{atas}}^2 h^2}{8ml^2} - \frac{n_{\text{bawah}}^2 h^2}{8ml^2} \\ \nu &= \frac{(n_{\text{atas}}^2 - n_{\text{bawah}}^2)h}{8ml^2} \\ &= \frac{(3^2 - 2^2)(6.626 \times 10^{-34} \text{ J s})}{8(2.00 \times 10^{-29} \text{ kg})(4.00 \times 10^{-9} \text{ m})^2} \\ &= 1.29 \times 10^{12} \text{ s}^{-1} \end{aligned}$$

di mana ‘atas’ dan ‘bawah’ masing-masing berarti tingkat energi atas dan bawah. Menggunakan  $\lambda\nu = c$  memberikan  $\lambda = 2.32 \times 10^{-4} \text{ m}$ . (Kesalahan umum siswa adalah menyamakan  $h\nu$  dengan energi salah satu keadaan alih-alih perbedaan energi antara keadaan.)

## Latihan

Untuk sebuah elektron dalam kotak satu dimensi tertentu, transisi panjang gelombang terpanjang terjadi pada 400 nm. Cari panjang kotak tersebut. (Jawaban: 0.603 nm.)

Substitusi (15) ke dalam (13) memberikan fungsi gelombang

$$\psi_{II} = B \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (17)$$

Penggunaan tanda negatif di depan  $n\pi$  tidak memberikan solusi independen lain. Karena  $\sin(-u) = -\sin u$ , kita hanya akan mendapatkan konstanta,  $-1$ , dikalikan dengan solusi dengan tanda plus.

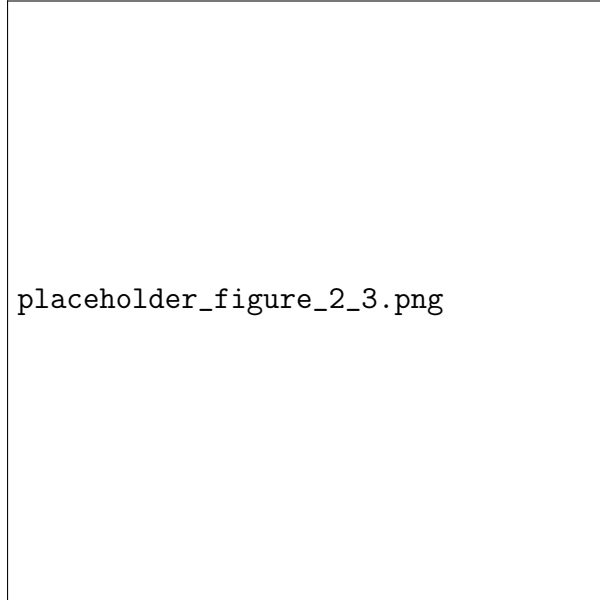
Konstanta  $B$  dalam Persamaan (17) masih arbitrer. Untuk menetapkan nilainya, kita menggunakan persyaratan normalisasi, Persamaan (1.24) dan (1.22):

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx &= 1 \\ \int_{-\infty}^0 |\psi_I|^2 dx + \int_0^l |\psi_{II}|^2 dx + \int_l^{\infty} |\psi_{III}|^2 dx &= 1 \\ 0 + |B|^2 \int_0^l \sin^2\left(\frac{n\pi x}{l}\right) dx + 0 &= 1 \\ |B|^2 \frac{l}{2} &= 1 \end{aligned} \quad (18)$$

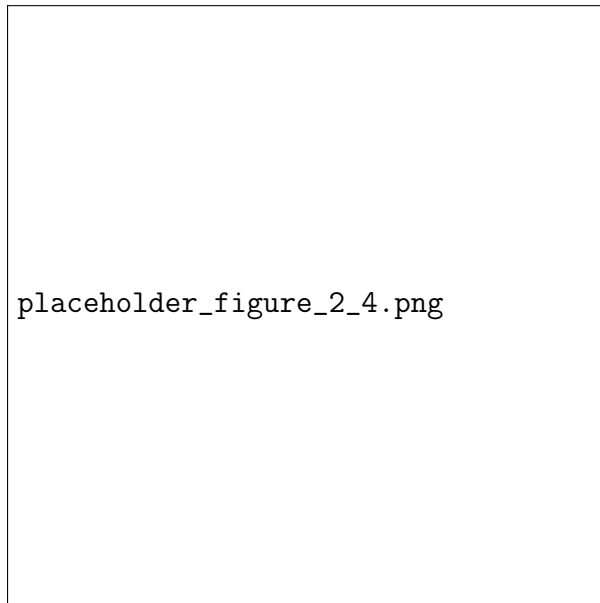
di mana integral dievaluasi menggunakan Persamaan (A.2) di Apendiks. Kita memiliki  $|B| = \sqrt{2/l}$ . Perhatikan bahwa hanya nilai absolut dari  $B$  yang telah ditemukan.  $B$  bisa  $-\sqrt{2/l}$  serta  $\sqrt{2/l}$ . Selain itu,  $B$  tidak harus bilangan real. Kita bisa menggunakan bilangan kompleks apa pun dengan nilai absolut  $\sqrt{2/l}$ . Yang bisa kita katakan adalah bahwa  $B = \sqrt{2/l}e^{i\alpha}$ , di mana  $\alpha$  adalah fase  $B$  dan bisa berupa nilai apa pun dalam rentang 0 hingga  $2\pi$  (Bagian 1.7). Memilih fase menjadi nol, kita tulis sebagai fungsi gelombang keadaan stasioner untuk partikel dalam kotak

$$\psi_{II} = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (19)$$

Grafik fungsi gelombang dan rapat probabilitas ditunjukkan pada Gambar 2.3 dan 2.4. Bilangan  $n$  dalam energi (16) dan fungsi gelombang (19) disebut bilangan kuantum. Setiap nilai  $n$  yang berbeda memberikan fungsi gelombang yang berbeda dan keadaan yang berbeda.



Gambar 3: Grafik  $\psi$  untuk tiga keadaan partikel-dalam-kotak energi terendah.



Gambar 4: Grafik  $|\psi|^2$  untuk keadaan partikel-dalam-kotak energi terendah.

Fungsi gelombang adalah nol pada titik-titik tertentu; titik-titik ini disebut node. Untuk setiap peningkatan satu dalam nilai bilangan kuantum  $n$ ,  $\psi$  memiliki satu node lagi. Keberadaan node dalam  $\psi$  dan  $|\psi|^2$  mungkin tampak mengejutkan. Jadi, untuk  $n = 2$ , Gambar 2.4 mengatakan bahwa ada probabilitas nol untuk menemukan partikel di tengah kotak pada  $x = l/2$ . Bagaimana partikel bisa berpindah dari satu sisi kotak ke sisi lain tanpa pada waktu apa pun ditemukan di tengah? Paradoks yang tampak ini muncul

dari upaya untuk memahami gerakan partikel mikroskopis menggunakan pengalaman sehari-hari kita tentang gerakan partikel makroskopis. Namun, seperti yang dicatat dalam Bab 1, elektron dan partikel mikroskopis lainnya tidak dapat sepenuhnya dan secara benar dijelaskan dalam istilah konsep fisika klasik yang diambil dari dunia makroskopis.

Gambar 2.4 menunjukkan bahwa probabilitas menemukan partikel di berbagai tempat dalam kotak sangat berbeda dari hasil klasik. Secara klasik, partikel dengan energi tetap dalam kotak memantul bolak-balik secara elastis antara kedua dinding, bergerak dengan kecepatan konstan. Jadi, kemungkinan menemukannya di titik mana pun dalam kotak adalah sama. Secara mekanika kuantum, kita menemukan maksimum probabilitas di tengah kotak untuk tingkat energi terendah. Saat kita beralih ke tingkat energi yang lebih tinggi dengan lebih banyak node, maksimum dan minimum probabilitas semakin mendekat, dan variasi probabilitas sepanjang panjang kotak pada akhirnya menjadi tidak terdeteksi. Untuk bilangan kuantum yang sangat tinggi, kita mendekati hasil klasik dari rapat probabilitas seragam. Hasil ini, bahwa dalam batas bilangan kuantum besar mekanika kuantum beralih ke mekanika klasik, dikenal sebagai prinsip korespondensi Bohr. Karena mekanika Newton berlaku untuk benda makroskopis (bergerak dengan kecepatan jauh lebih kecil dari kecepatan cahaya), kita berharap mekanika kuantum non-relativistik memberikan jawaban yang sama dengan mekanika klasik untuk benda makroskopis. Karena ukuran konstanta Planck yang sangat kecil, kuantisasi energi tidak dapat diamati untuk benda makroskopis. Karena massa partikel dan panjang kotak kuadrat muncul di penyebut Persamaan (16), objek makroskopis dalam kotak makroskopis yang memiliki energi gerak makroskopis akan memiliki nilai  $n$  yang sangat besar, dan oleh karena itu, menurut prinsip korespondensi, akan menunjukkan perilaku klasik.

Kita memiliki seluruh set fungsi gelombang, masing-masing sesuai dengan energi yang berbeda dan dicirikan oleh bilangan kuantum  $n$ , yang merupakan bilangan bulat positif. Misalkan subskrip  $i$  menunjukkan fungsi gelombang tertentu dengan nilai  $n_i$  untuk bilangan kuantumnya:

$$\psi_i = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n_i \pi x}{l}\right), \quad 0 < x < l$$

$$\psi_i = 0 \quad \text{di tempat lain}$$

Karena fungsi gelombang telah dinormalisasi, kita memiliki

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j dx = 1 \quad \text{jika } i = j \quad (20)$$

Sekarang kita menanyakan nilai integral ini ketika kita menggunakan fungsi gelombang yang sesuai dengan tingkat energi yang berbeda:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j dx = \int_0^l \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n_i \pi x}{l}\right) \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n_j \pi x}{l}\right) dx, \quad n_i \neq n_j$$

Penggunaan Persamaan (A.5) di Apendiks memberikan

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j dx = \frac{2}{l} \left[ \frac{\sin((n_i - n_j)\pi)}{2(n_i - n_j)\pi/l} - \frac{\sin((n_i + n_j)\pi)}{2(n_i + n_j)\pi/l} \right] = 0 \quad (21)$$

karena  $\sin m\pi = 0$  untuk  $m$  bilangan bulat. Jadi kita memiliki

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j dx = 0, \quad i \neq j \quad (22)$$

Ketika (22) berlaku, fungsi  $\psi_i$  dan  $\psi_j$  dikatakan ortogonal satu sama lain untuk  $i \neq j$ . Kita dapat menggabungkan (20) dan (22) dengan menulis

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^* \psi_j dx = \delta_{ij} \quad (23)$$

Simbol  $\delta_{ij}$  disebut delta Kronecker (setelah seorang matematikawan). Ia sama dengan 1 ketika kedua indeks  $i$  dan  $j$  sama, dan ia sama dengan 0 ketika  $i$  dan  $j$  tidak sama:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{untuk } i \neq j \\ 1 & \text{untuk } i = j \end{cases} \quad (24)$$

Sifat (23) dari fungsi gelombang disebut ortonormalitas. Kita membuktikan ortonormalitas hanya untuk fungsi gelombang partikel-dalam-kotak. Kita akan membuktikannya secara lebih umum di Bagian 7.2.

Anda mungkin bingung dengan Persamaan (22) dan bertanya-tanya mengapa kita ingin mengalikan fungsi gelombang dari satu keadaan dengan fungsi gelombang dari keadaan yang berbeda. Kita akan melihat nanti (misalnya, Bagian 7.3) bahwa seringkali sangat membantu untuk menggunakan persamaan yang berisi jumlah yang melibatkan semua fungsi gelombang suatu sistem, dan persamaan semacam itu dapat mengarah pada integral seperti pada (22).

Cara yang lebih ketat untuk melihat partikel dalam kotak dengan dinding tak hingga adalah dengan terlebih dahulu memperlakukan partikel dalam kotak dengan lompatan energi potensial terbatas di dinding dan kemudian mengambil batas ketika lompatan  $V$  menjadi tak hingga. Hasilnya, ketika batas diambil, akan sama dengan (16) dan (19) (lihat Soal 2.22). Kita hanya mempertimbangkan keadaan stasioner dari partikel dalam kotak satu dimensi. Untuk contoh keadaan non-stasioner dari sistem ini, lihat contoh di dekat akhir Bagian 7.8. Beberapa simulasi komputer daring tentang partikel dalam kotak dapat ditemukan di [www.chem.uci.edu/undergraduate/applets/dwell/dwell.htm](http://www.chem.uci.edu/undergraduate/applets/dwell/dwell.htm) (menunjukkan efek pada fungsi gelombang dan tingkat energi ketika penghalang dengan tinggi dan lebar variabel diperkenalkan di tengah kotak); [web.williams.edu/wp-etc/chemistry/dbingemann/Chem153/particle.html](http://web.williams.edu/wp-etc/chemistry/dbingemann/Chem153/particle.html) (menunjukkan kuantisasi dengan memplot solusi persamaan Schrödinger saat energi divariasikan dan saat panjang kotak divariasikan); dan [falstad.com/qm1d/](http://falstad.com/qm1d/) (menunjukkan keadaan tak-bergantung waktu dan bergantung waktu; lihat Soal 7.47).

## 4 Partikel Bebas dalam Satu Dimensi

Dengan partikel bebas, kita maksudkan partikel yang tidak dikenai gaya apa pun. Untuk partikel bebas, integrasi (1.12) menunjukkan bahwa energi potensial tetap konstan tidak peduli berapa nilai  $x$ . Karena pilihan tingkat nol energi adalah arbitrer, kita dapat menetapkan  $V(x) = 0$ . Persamaan Schrödinger (1.19) menjadi

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0 \quad (25)$$

Persamaan (25) sama dengan Persamaan (8) (kecuali untuk kondisi batas). Oleh karena itu, solusi umum dari (25) adalah (9):

$$\psi = c_1 e^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} + c_2 e^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} \quad (26)$$

Kondisi batas apa yang bisa kita terapkan? Tampaknya masuk akal untuk mengemukakan (karena  $\psi^*\psi dx$  merepresentasikan probabilitas) bahwa  $\psi$  akan tetap terbatas saat  $x$  menuju  $\pm\infty$ . Jika energi  $E$  kurang dari nol, maka kondisi batas ini akan dilanggar, karena untuk  $E < 0$  kita memiliki  $i\sqrt{2mE} = i\sqrt{-2m|E|} = i \cdot i \cdot \sqrt{2m|E|} = -\sqrt{2m|E|}$  dan oleh karena itu suku pertama dalam (26) akan menjadi tak hingga saat  $x$  mendekati minus tak hingga. Demikian pula, jika  $E$  negatif, suku kedua dalam (26) menjadi tak hingga saat  $x$  mendekati plus tak hingga. Jadi, kondisi batas mensyaratkan

$$E \geq 0 \quad (27)$$

untuk partikel bebas. Fungsi gelombang berosilasi dan merupakan kombinasi linear dari suku sinus dan kosinus [Persamaan (11)]. Untuk partikel bebas, energi tidak terkuantisasi; semua energi non-negatif diizinkan. Karena kita menetapkan  $V = 0$ , energi  $E$  dalam kasus ini adalah seluruhnya energi kinetik. Jika kita mencoba mengevaluasi konstanta arbitrer  $c_1$  dan  $c_2$  dengan normalisasi, kita akan menemukan bahwa integral  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx$  adalah tak hingga. Dengan kata lain, fungsi gelombang partikel bebas tidak dapat dinormalisasi dalam arti biasa. Ini dapat diharapkan secara fisik karena tidak ada alasan bagi probabilitas menemukan partikel bebas untuk mendekati nol saat  $x$  menuju  $\pm\infty$ . Masalah partikel bebas adalah situasi yang tidak nyata karena kita tidak mungkin memiliki partikel yang tidak berinteraksi dengan partikel lain di alam semesta.

## 5 Partikel dalam Sumur Persegi Panjang

Pertimbangkan partikel dalam kotak satu dimensi dengan dinding setinggi terbatas (Gambar 2.5a). Fungsi energi potensial adalah  $V = V_0$  untuk  $x < 0$ ,  $V = 0$  untuk  $0 \leq x \leq l$ , dan  $V = V_0$  untuk  $x > l$ . Ada dua kasus yang perlu diperiksa, tergantung pada apakah energi partikel  $E$  kurang dari atau lebih besar dari  $V_0$ .

Kita pertama-tama mempertimbangkan  $E < V_0$ . Persamaan Schrödinger (1.19) di daerah I dan III adalah  $d^2\psi/dx^2 + (2m/\hbar^2)(E - V_0)\psi = 0$ . Ini adalah persamaan diferensial linear homogen dengan koefisien konstan, dan persamaan bantu (??) adalah  $s^2 + (2m/\hbar^2)(E - V_0) = 0$  dengan akar-akar  $s = \pm\sqrt{(2m/\hbar^2)(V_0 - E)}$ . Oleh karena itu,

$$\begin{aligned} \psi_I &= C \exp\left(\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}x\right) + D \exp\left(-\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}x\right) \\ \psi_{III} &= F \exp\left(\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}x\right) + G \exp\left(-\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}x\right) \end{aligned}$$

di mana  $C, D, F$ , dan  $G$  adalah konstanta. Seperti di Bagian 2.3, kita harus mencegah  $\psi_I$  menjadi tak hingga saat  $x \rightarrow -\infty$ . Karena kita mengasumsikan  $E < V_0$ , kuantitas  $\sqrt{V_0 - E}$  adalah bilangan real positif, dan untuk menjaga  $\psi_I$  terbatas saat  $x \rightarrow -\infty$ , kita harus memiliki  $D = 0$ . Demikian pula, untuk menjaga  $\psi_{III}$  terbatas saat  $x \rightarrow +\infty$ , kita harus memiliki  $F = 0$ . Oleh karena itu,

$$\psi_I = C \exp\left(\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}x\right), \quad \psi_{III} = G \exp\left(-\frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}x\right)$$

Di daerah II,  $V = 0$ , persamaan Schrödinger adalah (8) dan solusinya adalah (11):

$$\psi_{II} = A \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + B \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) \quad (28)$$



Gambar 5: (a) Energi potensial untuk partikel dalam sumur persegi panjang satu dimensi. (b) Fungsi gelombang keadaan dasar untuk potensial ini. (c) Fungsi gelombang keadaan tereksitasi pertama.

Untuk menyelesaikan masalah, kita harus menerapkan kondisi batas. Seperti halnya partikel dalam kotak dengan dinding tak hingga, kita mensyaratkan fungsi gelombang kontinu pada  $x = 0$  dan pada  $x = l$ ; jadi  $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$  dan  $\psi_{II}(l) = \psi_{III}(l)$ . Fungsi gelombang memiliki empat konstanta arbitrer, jadi lebih dari dua kondisi batas ini diperlukan. Selain mensyaratkan  $\psi$  kontinu, kita akan mensyaratkan bahwa turunannya  $d\psi/dx$  kontinu di mana-mana. Untuk membenarkan persyaratan ini, kita catat bahwa jika  $d\psi/dx$  berubah secara diskontinu pada suatu titik, maka turunannya (laju perubahan sesaatnya)  $d^2\psi/dx^2$  akan menjadi tak hingga pada titik tersebut. Namun, untuk partikel dalam sumur persegi panjang, persamaan Schrödinger  $d^2\psi/dx^2 = (2m/\hbar^2)(V - E)\psi$  tidak mengandung sesuatu yang tak hingga di sisi kanan, jadi  $d^2\psi/dx^2$  tidak bisa menjadi tak hingga. [Untuk argumen yang lebih ketat, lihat D. Branson, Am. J. Phys., 47, 1000 (1979).] Oleh karena itu,  $d\psi_I/dx = d\psi_{II}/dx$  pada  $x = 0$  dan  $d\psi_{II}/dx = d\psi_{III}/dx$  pada  $x = l$ .

Dari  $\psi_I(0) = \psi_{II}(0)$ , kita mendapatkan  $C = A$ . Dari  $d\psi_I/dx|_{x=0} = d\psi_{II}/dx|_{x=0}$ , kita mendapatkan (Soal 2.21a)  $B = \frac{\sqrt{V_0 - E}}{\sqrt{E}}A$ . Dari  $\psi_{II}(l) = \psi_{III}(l)$ , kita mendapatkan persamaan rumit yang memungkinkan  $G$  ditemukan dalam bentuk  $A$ . Konstanta  $A$  ditemukan dengan normalisasi. Mengambil  $d\psi_{II}/dx|_{x=l} = d\psi_{III}/dx|_{x=l}$ , membaginya dengan  $\psi_{II}(l) = \psi_{III}(l)$ , dan menyatakan  $B$  dalam bentuk  $A$ , kita mendapatkan persamaan

berikut untuk tingkat energi (Soal 2.21b):

$$(2E - V_0) \sin\left(\frac{\sqrt{2mEl}}{\hbar}\right) = 2\sqrt{V_0E - E^2} \cos\left(\frac{\sqrt{2mEl}}{\hbar}\right) \quad (29)$$

(Meskipun  $E = 0$  memenuhi (29), ia bukanlah nilai energi yang diizinkan, karena ia memberikan  $\psi = 0$  (Soal 2.30).) Mendefinisikan konstanta tak berdimensi  $\epsilon$  dan  $\beta$  sebagai

$$\epsilon \equiv E/V_0 \quad \text{dan} \quad \beta \equiv \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}l \quad (30)$$

kita bagi (29) dengan  $V_0$  untuk mendapatkan

$$(2\epsilon - 1) \sin(\beta\sqrt{\epsilon}) - 2\sqrt{\epsilon - \epsilon^2} \cos(\beta\sqrt{\epsilon}) = 0 \quad (31)$$

Hanya nilai-nilai  $E$  tertentu yang memenuhi (29) yang memberikan fungsi gelombang yang kontinu dan memiliki turunan yang kontinu, sehingga tingkat energi terkuantisasi untuk  $E < V_0$ . Untuk menemukan tingkat energi yang diizinkan, kita dapat memplot sisi kiri (31) versus  $\epsilon$  untuk  $0 < \epsilon < 1$  dan menemukan titik-titik di mana kurva memotong sumbu horizontal (lihat juga Soal 4.31c). Sebuah studi rinci (Merzbacher, Bagian 6.8) menunjukkan bahwa jumlah tingkat energi yang diizinkan dengan  $E < V_0$  adalah  $N$ , di mana  $N$  memenuhi

$$N - 1 < \beta/\pi \leq N, \quad \text{di mana} \quad \beta \equiv \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}l \quad (32)$$

Sebagai contoh, jika  $V_0 = \hbar^2/ml^2$ , maka  $\beta/\pi = 2\sqrt{2} = 2.83$ , dan  $N = 3$ .

Gambar 2.5 menunjukkan  $\psi$  untuk dua tingkat energi terendah. Fungsi gelombang berosilasi di dalam kotak dan mati secara eksponensial di luar kotak. Ternyata jumlah node meningkat satu untuk setiap tingkat yang lebih tinggi. Sejauh ini kita hanya mempertimbangkan keadaan dengan  $E < V_0$ . Untuk  $E > V_0$ , kuantitas  $\sqrt{V_0 - E}$  adalah imajiner, dan alih-alih mati menjadi nol saat  $x$  menuju  $\pm\infty$ ,  $\psi_I$  dan  $\psi_{III}$  berosilasi (mirip dengan  $\psi$  partikel bebas). Kita tidak lagi memiliki alasan untuk menetapkan  $D$  dalam  $\psi_I$  dan  $F$  dalam  $\psi_{III}$  menjadi nol, dan dengan konstanta tambahan ini tersedia untuk memenuhi kondisi batas pada  $\psi$  dan  $\psi'$ , ditemukan bahwa  $E$  tidak perlu dibatasi untuk mendapatkan fungsi gelombang yang berperilaku baik. Oleh karena itu, semua energi di atas  $V_0$  diizinkan.

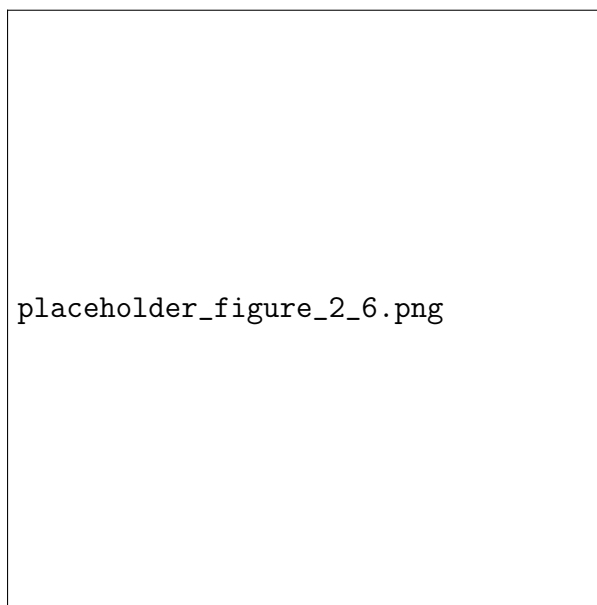
Keadaan di mana  $\psi \rightarrow 0$  saat  $x \rightarrow \pm\infty$  disebut keadaan terikat. Untuk keadaan terikat, probabilitas signifikan untuk menemukan partikel hanya ada di wilayah ruang yang terbatas. Untuk keadaan tak terikat,  $\psi$  tidak menuju nol saat  $x \rightarrow \pm\infty$  dan tidak dapat dinormalisasi. Untuk partikel dalam sumur persegi panjang, keadaan dengan  $E < V_0$  terikat dan keadaan dengan  $E > V_0$  tak terikat. Untuk partikel dalam kotak dengan dinding yang sangat tinggi, semua keadaan terikat. Untuk partikel bebas, semua keadaan tak terikat. Untuk simulasi daring partikel dalam sumur, kunjungi [www.falstad.com/qm1d](http://www.falstad.com/qm1d) dan pilih Finite Well di kotak Setup. Anda dapat mengubah lebar dan kedalaman sumur dan melihat efeknya pada tingkat energi dan fungsi gelombang.

## 6 Penerowongan (Tunneling)

Untuk partikel dalam sumur persegi panjang (Bagian 2.4), Gambar 2.5 dan persamaan untuk  $\psi_I$  dan  $\psi_{III}$  menunjukkan bahwa untuk keadaan terikat ada probabilitas bukan

nol untuk menemukan partikel di daerah I dan III, di mana energi totalnya  $E$  kurang dari energi potensialnya  $V = V_0$ . Secara klasik, perilaku ini tidak diizinkan. Persamaan klasik  $E = T + V$  dan  $T \geq 0$ , di mana  $T$  adalah energi kinetik, berarti  $E$  tidak bisa kurang dari  $V$  dalam mekanika klasik.

Pertimbangkan partikel dalam kotak satu dimensi dengan dinding setinggi dan setebal terbatas (Gambar 2.6). Secara klasik, partikel tidak dapat keluar dari kotak kecuali energinya lebih besar dari penghalang energi potensial  $V_0$ . Namun, perlakuan mekanika kuantum (yang dihilangkan) menunjukkan bahwa ada probabilitas terbatas bagi partikel dengan energi total kurang dari  $V_0$  untuk ditemukan di luar kotak. Istilah penerowongan (tunneling) menunjukkan penetrasi partikel ke daerah yang dilarang secara klasik (seperti pada Gambar 2.5) atau lewatnya partikel melalui penghalang energi potensial yang tingginya melebihi energi partikel. Karena penerowongan adalah efek kuantum, probabilitas terjadinya lebih besar semakin kurang klasik perilaku partikel. Oleh karena itu, penerowongan paling umum terjadi pada partikel bermassa kecil. (Perhatikan bahwa semakin besar massa  $m$ , semakin cepat fungsi  $\psi_I$  dan  $\psi_{III}$  dari Bagian 2.4 mati menjadi nol.)



Gambar 6: Energi potensial untuk partikel dalam kotak satu dimensi dengan tinggi dan ketebalan terbatas.

Elektron menerowong dengan cukup mudah. Atom dan ion hidrogen menerowong lebih mudah daripada atom yang lebih berat. Emisi partikel alfa dari inti radioaktif melibatkan penerowongan partikel alfa melalui penghalang energi potensial yang dihasilkan oleh gaya nuklir tarik-menarik jarak pendek dan gaya tolak-menolak Coulomb antara inti anak dan partikel alfa. Molekul  $\text{NH}_3$  berbentuk piramida. Ada penghalang energi potensial untuk inversi molekul, dengan maksimum energi potensial terjadi pada konfigurasi planar. Atom hidrogen dapat menerowong melalui penghalang ini, sehingga membalik molekul. Dalam  $\text{CH}_3\text{CH}_3$  ada penghalang untuk rotasi internal, dengan maksimum energi potensial pada posisi ter-eklips dari hidrogen. Hidrogen dapat menerowong melalui penghalang ini dari satu posisi staggered ke posisi berikutnya. Penerowongan elektron penting dalam reaksi reduksi oksidasi dan dalam proses elektroda. Penerowongan biasanya berkontribusi secara signifikan terhadap laju reaksi kimia yang melibatkan transfer atom hidrogen. Lihat R. P. Bell, *The Tunnel Effect in Chemistry*, Chapman & Hall, 1980.

Penerowongan atom H terjadi dalam beberapa reaksi yang dikatalisis enzim; lihat *Quantum Tunnelling in Enzyme-Catalyzed Reactions*, R. Allemann dan N. Scrutton (eds.), RSC Publishing, 2009. Mikroskop penerowongan pemindaian (scanning tunneling microscope), yang ditemukan pada tahun 1981, menggunakan penerowongan elektron melalui ruang antara ujung kawat logam yang sangat halus dan permukaan padatan konduktif listrik untuk menghasilkan gambar atom individu pada permukaan padatan. Tegangan kecil diterapkan antara padatan dan kawat, dan saat ujung digerakkan melintasi permukaan pada ketinggian beberapa angstrom, ketinggian ujung disesuaikan untuk menjaga aliran arus konstan. Plot ketinggian ujung versus posisi memberikan gambar permukaan.

## 7 Ringkasan

Solusi umum untuk persamaan diferensial linear, homogen, orde kedua, koefisien konstan  $y''(x) + py'(x) + qy(x) = 0$  adalah  $y = c_1 e^{s_1 x} + c_2 e^{s_2 x}$ , di mana  $s_1$  dan  $s_2$  adalah solusi dari persamaan bantu  $s^2 + ps + q = 0$ .

Untuk partikel dalam kotak satu dimensi (energi potensial  $V = 0$  untuk  $0 \leq x \leq l$  dan  $V = \infty$  di tempat lain), fungsi gelombang keadaan stasioner dan energi adalah  $\psi = \sqrt{2/l} \sin(n\pi x/l)$  untuk  $0 \leq x \leq l$ ,  $\psi = 0$  di tempat lain, dan  $E = n^2 h^2 / (8ml^2)$ , di mana  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Jumlah node (tempat di mana  $\psi = 0$ ) meningkat 1 untuk setiap peningkatan 1 dalam bilangan kuantum  $n$ . Fungsi gelombang adalah ortonormal [Persamaan (23)].

Untuk partikel bebas ( $V = 0$  di mana-mana), semua energi non-negatif diizinkan, dan fungsi gelombang tidak dapat dinormalisasi dalam arti biasa.

Partikel dalam sumur persegi panjang satu dimensi dengan dinding setinggi terbatas memiliki sejumlah terbatas keadaan terikat [Persamaan (32)]. Fungsi gelombang keadaan terikat beresilasi di dalam sumur dan mati secara eksponensial menjadi nol di luar sumur. Energi dari keadaan tak terikat tidak terkuantisasi.

Penerowongan adalah penetrasi partikel ke daerah yang dilarang secara klasik atau lewatnya partikel melalui penghalang energi potensial yang tingginya lebih besar dari energi partikel.

## 8 Soal-soal

| Bagian | Soal-soal          |
|--------|--------------------|
| 2.1    | 2.1, 2.2, 2.3, 2.4 |
| 2.2    | 2.5 – 2.19         |
| 2.3    | 2.20               |
| 2.4    | 2.21 – 2.30        |
| Umum   | 2.31, 2.32         |

- (a) Selesaikan  $y''(x) + y'(x) - 6y(x) = 0$ . (b) Evaluasi konstanta arbitrer dalam solusi jika kondisi batasnya adalah  $y = 0$  pada  $x = 0$  dan  $y' = 1$  pada  $x = 0$ .
- Jika  $y = c_1 e^{(2+i)x} + c_2 e^{(2-i)x}$ , di mana  $c_1$  dan  $c_2$  adalah konstanta, temukan persamaan diferensial linear homogen orde kedua dengan koefisien konstan yang dipenuhi oleh  $y$ .

- (a) Untuk kasus akar-akar yang sama dari persamaan bantu,  $s_1 = s_2 = s$ , kita hanya menemukan satu solusi independen dari persamaan diferensial linear homogen orde kedua:  $e^{sx}$ . Verifikasi bahwa  $xe^{sx}$  adalah solusi kedua dalam kasus ini. (b) Selesaikan  $y''(x) - 2y'(x) + y(x) = 0$ .
2. Untuk setiap pilihan  $F$  berikut dalam hukum kedua Newton (1.8), klasifikasikan (1.8) sebagai persamaan diferensial linear atau non-linear ( $a, b, c$ , dan  $k$  adalah konstanta). (a)  $F = c$ ; (b)  $F = -kx$ ; (c)  $F = -ax^3$ ; (d)  $F = b \sin ax$ ; (e)  $F = a - kx$ . [Sistem mekanika klasik yang menunjukkan perilaku kacau (Bagian 1.4) mematuhi persamaan diferensial non-linear, tetapi tidak semua persamaan diferensial non-linear menimbulkan perilaku kacau.]
3. Benar atau salah? (a) Energi keadaan dasar partikel dalam kotak (PIB) adalah nol. (b) Tingkat energi PIB berjarak sama. (c) Peningkatan energi keadaan stasioner PIB sesuai dengan peningkatan jumlah node dalam fungsi gelombang. (d) Setiap solusi dari persamaan Schrödinger tak-bergantung waktu PIB adalah fungsi gelombang keadaan stasioner yang diizinkan. (e) Transisi PIB yang menyerap foton dengan panjang gelombang terpanjang adalah dari tingkat  $n = 1$  ke tingkat  $n = 2$ .
4. Untuk partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang  $l$ , pertimbangkan interval tak hingga panjang  $dl$  yang terletak di dalam kotak. Untuk setiap keadaan stasioner berikut, nyatakan lokasi interval mana yang memberikan probabilitas maksimum dan mana yang memberikan probabilitas minimum untuk menemukan partikel dalam interval tersebut. (a)  $n = 1$ ; (b)  $n = 2$ ; (c)  $n = 3$ .
5. Pertimbangkan partikel dengan bilangan kuantum  $n$  yang bergerak dalam kotak satu dimensi sepanjang  $l$ . (a) Temukan probabilitas menemukan partikel di sepelempat kiri kotak. (b) Untuk nilai  $n$  berapa probabilitas ini maksimum? (c) Berapa batas probabilitas ini untuk  $n \rightarrow \infty$ ? (d) Prinsip apa yang diilustrasikan dalam (c)?
6. Pertimbangkan elektron dalam kotak satu dimensi sepanjang  $2.000 \text{ \AA}$  dengan ujung kiri kotak pada  $x = 0$ . (a) Misalkan kita memiliki satu juta sistem ini, masing-masing dalam keadaan  $n = 1$ , dan kita mengukur koordinat  $x$  elektron di setiap sistem. Kira-kira berapa kali elektron akan ditemukan antara  $0.600 \text{ \AA}$  dan  $0.601 \text{ \AA}$ ? Pertimbangkan interval tersebut sebagai tak hingga. Petunjuk: Periksa apakah kalkulator Anda diatur ke derajat atau radian. (b) Misalkan kita memiliki sejumlah besar sistem ini, masing-masing dalam keadaan  $n = 1$ , dan kita mengukur koordinat  $x$  elektron di setiap sistem dan menemukan elektron antara  $0.700 \text{ \AA}$  dan  $0.701 \text{ \AA}$  dalam 126 pengukuran. Kira-kira berapa banyak pengukuran elektron akan ditemukan antara  $1.000 \text{ \AA}$  dan  $1.001 \text{ \AA}$ ?
- (a) Buat sketsa kasar grafik  $\psi$  dan  $|\psi|^2$  untuk keadaan partikel-dalam-kotak  $n = 4$  dan  $n = 5$ . (b) Gunakan kalkulus untuk menemukan kemiringan kurva  $|\psi|^2$  untuk  $n = 4$  pada  $x = l/2$  dan periksa apakah kurva Anda digambar dengan kemiringan yang benar.
7. Gambaran yang sangat kasar tentang elektron valensi dalam atom atau molekul memperlakukannya sebagai partikel dalam kotak satu dimensi yang panjangnya seukuran atom dan molekul. (a) Untuk elektron dalam kotak satu dimensi sepanjang

- 1.0 Å, hitung pemisahan antara dua tingkat energi terendah. (b) Hitung panjang gelombang foton yang sesuai dengan transisi antara dua tingkat ini. (c) Di bagian mana dari spektrum elektromagnetik panjang gelombang ini berada?
8. Untuk objek makroskopis bermassa 1.0 g yang bergerak dengan kecepatan 1.0 cm/s dalam kotak satu dimensi sepanjang 1.0 cm, temukan bilangan kuantum  $n$ .
  9. Ketika partikel bermassa  $9.1 \times 10^{-28}$  g dalam kotak satu dimensi tertentu berpindah dari tingkat  $n = 5$  ke tingkat  $n = 2$ , ia memancarkan foton dengan frekuensi  $6.0 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ . Temukan panjang kotak tersebut.
  10. Ketika elektron dalam tingkat energi tereksitasi tertentu dalam kotak satu dimensi sepanjang 2.00 Å membuat transisi ke keadaan dasar, foton dengan panjang gelombang 8.79 nm dipancarkan. Temukan bilangan kuantum dari keadaan awal.
  11. Frekuensi absorpsi  $n = 1$  ke  $n = 2$  untuk partikel tertentu dalam kotak satu dimensi tertentu adalah  $6.0 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ . Temukan frekuensi absorpsi  $n = 2$  ke  $n = 3$  untuk sistem ini.
  12. Elektron dalam keadaan stasioner kotak satu dimensi sepanjang 0.300 nm memancarkan foton dengan frekuensi  $5.05 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ . Temukan bilangan kuantum awal dan akhir untuk transisi ini.
  13. Kita akan melihat di Bagian 9.9 bahwa ketika partikel bermuatan dalam kotak satu dimensi (PIB) menyerap atau memancarkan foton, bilangan kuantum  $n$  harus berubah dengan bilangan bulat ganjil:  $\Delta n = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots$ . Transisi dengan  $\Delta n$  berubah dengan bilangan bulat genap tidak diizinkan untuk PIB. Tunjukkan bahwa frekuensi transisi yang diizinkan memiliki bentuk  $\nu = k(h/8ml^2)$ , di mana  $k$  mengambil nilai bilangan bulat tertentu. Temukan nilai terkecil dari  $k$  di mana dua nilai  $\Delta n$  yang berbeda memberikan frekuensi emisi yang sama. Petunjuk: Pertama periksa pola frekuensi transisi di mana  $n$  berubah sebesar 1 dan nilai  $n$  tingkat bawah adalah 1 atau 2 atau 3 atau ...; kemudian pertimbangkan  $n$  berubah sebesar 3 dengan tingkat bawah menjadi 1 atau 2 atau 3 atau ...
  14. Perlakuan kasar terhadap elektron  $\pi$  dari molekul terkonjugasi menganggap elektron-elektron ini bergerak dalam potensial partikel-dalam-kotak Gambar 2.1, di mana panjang kotak sedikit lebih dari panjang rantai terkonjugasi. Prinsip pengecualian Pauli (Bab 10) tidak mengizinkan lebih dari dua elektron menempati setiap tingkat kotak. (Kedua elektron ini memiliki spin berlawanan.) Untuk 1,3-butadiena,  $\text{CH}_2\text{CHCHCH}_2$ , ambil panjang kotak sebagai 7.0 Å dan gunakan model ini untuk memperkirakan panjang gelombang cahaya yang diserap ketika elektron  $\pi$  tereksitasi dari tingkat kotak terisi tertinggi ke tingkat kotak kosong terendah dari keadaan dasar elektronik molekul. Nilai eksperimental adalah 217 nm.
  15. Untuk partikel dalam kotak satu dimensi sepanjang  $l$ , kita bisa saja menempatkan titik asal koordinat di tengah kotak. Temukan fungsi gelombang dan tingkat energi untuk pilihan titik asal ini.
  16. Persamaan Schrödinger tak-bergantung waktu partikel-dalam-kotak mengandung konstanta  $h$  dan  $m$ , dan kondisi batas melibatkan panjang kotak  $l$ . Oleh karena itu, kita mengharapkan energi keadaan stasioner menjadi fungsi dari  $h$ ,  $m$ , dan  $l$ ;

yaitu,  $E = f(h, m, l)$ . [Kita menemukan  $E = (n^2/8)(h^2/ml^2)$ .] Buktikan bahwa satu-satunya nilai  $a, b$ , dan  $c$  yang memberikan produk  $h^a m^b l^c$  dimensi energi adalah  $a = 2, b = -1, c = -2$ .

17. Tuliskan fungsi gelombang bergantung waktu untuk partikel bebas dengan energi  $E$ .
- (a) Untuk partikel dalam sumur persegi panjang (Bagian 2.4), verifikasi bahwa  $B = \frac{\sqrt{V_0 - E}}{\sqrt{E}} A$ . (b) Verifikasi Persamaan (29).
18. Untuk partikel dalam sumur persegi panjang (Bagian 2.4), tunjukkan bahwa dalam batas  $V_0 \rightarrow \infty$  (a) Persamaan (29) memberikan  $E = n^2 h^2 / (8ml^2)$  seperti pada Persamaan (16); (b) fungsi gelombang menuju Persamaan (7) dan (17).
19. Untuk elektron dalam sumur persegi panjang satu dimensi sedalam 15.0-eV dengan lebar 2.00 Å, hitung jumlah keadaan terikat. Gunakan (6.107).
20. Temukan tingkat energi keadaan terikat yang diizinkan untuk sistem Soal 2.23 dengan menggunakan kalkulator atau komputer yang dapat diprogram untuk menghitung sisi kiri (31) untuk  $\epsilon$  yang bergerak dari 0 ke 1 dalam langkah-langkah kecil.
21. Sketsakan  $\psi$  untuk tingkat terikat terendah berikutnya pada Gambar 2.5.
22. Untuk partikel dalam sumur persegi panjang satu dimensi, (a) apakah harus ada setidaknya satu keadaan terikat? (b) apakah  $\psi'$  kontinu pada  $x = 0$ ?
23. Untuk elektron dalam sumur persegi panjang tertentu dengan kedalaman 20.0 eV, tingkat energi terendah terletak 3.00 eV di atas dasar sumur. Temukan lebar sumur ini. Petunjuk: Gunakan  $\tan u = \sin u / \cos u$ .
24. Untuk elektron dalam sumur persegi panjang tertentu dengan kedalaman 2.00 aJ, ada tiga tingkat energi terikat. Temukan lebar minimum dan maksimum yang mungkin dari sumur ini. Satu attojoule (aJ) sama dengan  $10^{-18}$  J.
25. Untuk partikel dalam sumur persegi panjang dengan kedalaman  $V_0$  dan lebar  $l$ , nyatakan apakah jumlah tingkat energi keadaan terikat meningkat, menurun, atau tetap sama (a) saat  $V_0$  meningkat pada  $l$  tetap; (b) saat  $l$  meningkat pada  $V_0$  tetap.
26. Untuk kasus  $E = 0$  dari partikel dalam sumur persegi panjang kedalaman  $V_0$ , solusi persamaan Schrödinger di dalam sumur adalah  $\psi_{II} = ax + b$  [lihat diskusi setelah Persamaan (15)]. (a) Gunakan kondisi batas untuk menemukan empat persamaan yang menghubungkan konstanta  $a$  dan  $b$  dengan  $C$  dan  $G$  dalam persamaan sebelum (28). (b) Tunjukkan bahwa jika  $C > 0$  (atau jika  $C < 0$ ), persamaan dalam (a) mengarah pada kontradiksi bahwa  $G$  lebih kecil dan lebih besar dari nol. Oleh karena itu,  $C = 0$ . (c) Tunjukkan bahwa  $C = 0$  memberikan  $\psi = 0$  di mana-mana. Oleh karena itu,  $E = 0$  tidak diizinkan.
27. Energi sebagian besar bintang berasal dari fusi inti hidrogen menjadi inti helium. Suhu interior matahari (bintang tipikal) adalah  $15 \times 10^6$  K. Pada suhu ini, hampir tidak ada inti yang memiliki energi kinetik yang cukup untuk mengatasi tolakan elektrostatis antara inti dan mendekat cukup dekat untuk mengalami fusi. Oleh karena itu, ketika Eddington mengusulkan pada tahun 1920 bahwa fusi nuklir adalah

sumber energi bintang, idenya ditolak. Jelaskan mengapa fusi memang terjadi di bintang, meskipun ada kesulitan yang disebutkan di atas.

28. Benar atau salah? (a) Keadaan dasar partikel-dalam-kotak (PIB) memiliki bilangan kuantum  $n = 0$ . (b) Fungsi gelombang keadaan stasioner PIB diskontinu pada titik-titik tertentu. (c) Turunan pertama dari setiap fungsi gelombang keadaan stasioner PIB diskontinu pada titik-titik tertentu. (d) Rapat probabilitas maksimum untuk setiap keadaan stasioner PIB berada di tengah kotak. (e) Untuk keadaan stasioner PIB  $n = 2$ , probabilitas menemukan partikel di seperempat kiri kotak sama dengan probabilitas menemukannya di seperempat kanan kotak. (Jawab pertanyaan ini dan pertanyaan berikutnya tanpa mengevaluasi integral apa pun.) (f) Untuk keadaan stasioner PIB  $n = 1$ , probabilitas menemukan partikel di sepertiga kiri kotak sama dengan probabilitas menemukannya di sepertiga tengah. (g) Panjang gelombang transisi absorpsi PIB dari bilangan kuantum  $n$  ke  $n + 1$  menurun seiring dengan peningkatan nilai bilangan kuantum  $n$ . (h) Rapat probabilitas untuk keadaan stasioner PIB konstan sepanjang panjang kotak. (i) PIB mekanika kuantum memiliki energi keadaan dasar yang lebih besar daripada energi terendah yang mungkin dari partikel mekanika klasik dalam kotak.

## Pustaka

- [1] D. Branson, "Continuity of the wave function and its derivative in quantum mechanics", *Am. J. Phys.*, vol. 47, no. 11, pp. 1000–1001, 1979.
- [2] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3rd ed., Wiley, 1998. (Referensi ke bagian 6.8)
- [3] R. P. Bell, *The Tunnel Effect in Chemistry*. Chapman & Hall, 1980.
- [4] R. Allemann and N. Scrutton (eds.), *Quantum Tunnelling in Enzyme-Catalyzed Reactions*. RSC Publishing, 2009.