LAMPIRAN A

TEORI IKATAN

Pembahasan dibatasi pada senyawa komplek oktahedral dari unsur deret transisi pertama, dengan mengasumsikan hanya ikatan σ saja yang digunakan. Atom komplek akan membentuk goemetri oktahedral jika bilangan koordinasinya enam.

Secara teori ikatan valensi, pembentukan ikatan dalam senyawa komplek dapat dijelaskan oleh struktur elektronik dan atomnya. Sebagai contoh untuk atom komplek $(Cr(H_2O)_6)^{3+}$, konfigurasi atom bebasnya

Cr [Ar] ↿ ↿ ↿ ↿ ↿ | __ | __ __ __ | __ __ __ __ __
3d | 4s | 4p | 4d

Konfigurasi atom Cr^{3+}

Cr^{3+} [Ar] ↿ ↿ ↿ __ __ | __ | __ __ __ | __ __ __ __ __
3d | 4s | 4p | 4d

Orbital yang kosong akan diisi oleh pasangan elektron dari ligan

$(Cr(H_2O)_6)^{3+}$ ↿ ↿ ↿ xx xx | xx | xx xx xx | __ __ __ __ __
3d | 4s | 4p | 4d

Dalam pembentukan atom komplek digunakan orbital

d^2sp^3, oleh karena itu atom komplek ini disebut *komplek orbital dalam* . Untuk atom komplek $(Ni(H_2O))^{2+}$, ikatan yang terjadi digambarkan sebagai berikut

	3d	4s	4p	4d
Ni^{2+} [Ar]	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑ ↑	__	__ __ __	__ __ __ __ __
$(Ni\ (H_2O)_6)^{2+}$	↑↓ ↑↓ ↑↓ ↑ ↑	xx	xx xx xx	xx xx __ __ __

Pembentukan atom komplek ini menggunakan orbital hibrida sp^3d^2 dan komplek ini disebut *komplek orbital luar*. Kedua komplek ini dapat dibedakan dari jumlah elektron yang tak berpasangan, yang ditunjukkan oleh sifat magnetnya. Kombinasi linier dari orbital atom menghasilkan 6 orbital d^2sp^3 yang ekivalen dengan

$$\psi_{(1)} = (1/6)^{1/2}\ \psi_s + (1/2)^{1/2}\ \psi_{pz} + (1/3)^{1/2}\ \psi_{dz^2} \qquad (\text{A.1})$$

$$\psi_{(2)} = (1/6)^{1/2}\ \psi_s - (1/2)^{1/2}\ \psi_{pz} + (1/3)^{1/2}\ \psi_{dz^2} \qquad (\text{A.2})$$

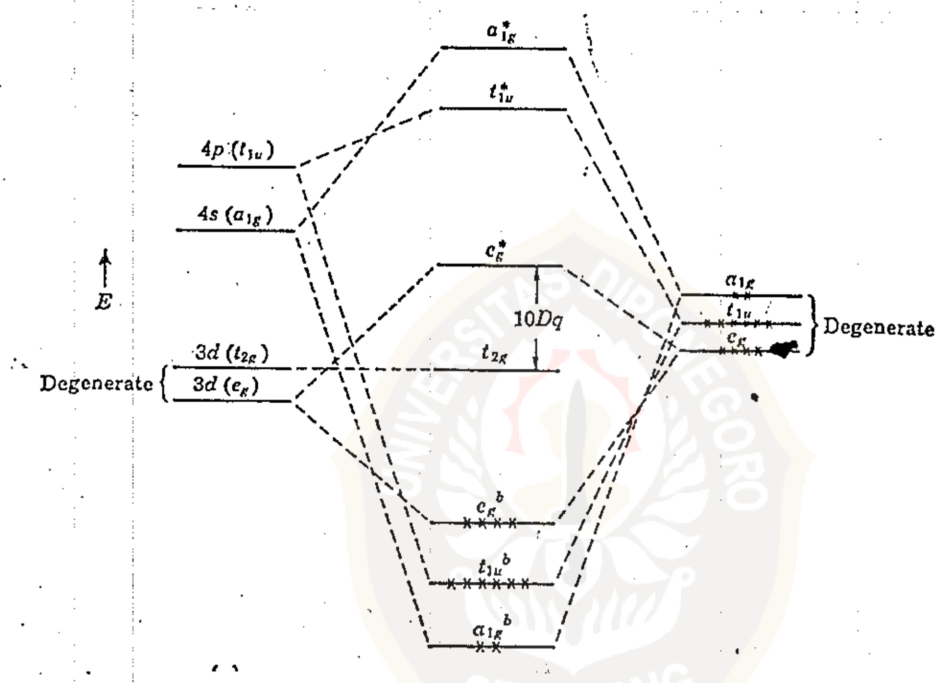
$$\psi_{(3)} = (1/6)^{1/2}\ \psi_s - (1/12)^{1/2}\ \psi_{dz^2} + 1/2\ \psi_{d(x^2-y^2)} + (1/2)\ \psi_{pz} \qquad (\text{A.3})$$

$$\psi_{(4)} = (1/6)^{1/2}\ \psi_s + (1/12)^{1/2}\ \psi_{dz^2} + (1/2)\ \psi_{d(x^2-y^2)} - (1/2)^{1/2}\ \psi_{pz} \qquad (\text{A.4})$$

$$\psi_{(5)} = (1/6)^{1/2}\ \psi_s + (1/12)^{1/2}\ \psi_{dz^2} - 1/2\ \psi_{d(x^2-y^2)} + (1/2)^{1/2}\ \psi_{pz} \qquad (\text{A.5})$$

$$\psi_{(6)} = (1/6)\ \psi_s + (1/12)\ \psi_{dz^2} - 1/2\ \psi_{d(x^2-y^2)} + (\ 1/2)^{1/2}\ \psi_{pz} \qquad (\text{A.6})$$

Dalam pendekatan yang digunakan, 6 orbital atom dari logam pusat dan 6 orbital atom dari 6 ligan membentuk 12 orbital molekul (6 orbital ikatan + 6 orbital anti ikatan). Untuk atom komplek Ti $(H_2O)_6^{3+}$ mempunyai satu elektron pada orbital 3dnya, bentuk skema diagram dari ikatan tersebut dapat dilihat pada gambar A.1

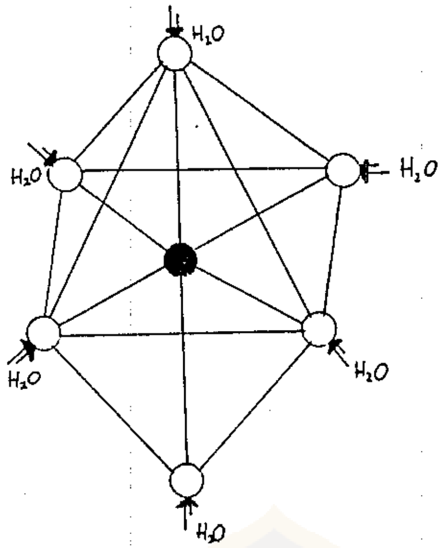


orbital atom logam orbital molekuker orbital ligan

Gambar A.1 Skema ikatan untuk atom komplek oktahedral

Dari gambar A.1, diketahui ke-12 orbital molekul menduduki orbital ikatan, dan sebuah elektron atom pusat terdapat pada orbital non ikatan t_{2g} . Dalam teori medan kristal, perbedaan antara orbital e_g dan t_{2g} adalah 10 Dq, yang merupakan beda energi antara tingkat anti ikatan t_{2g}

dan e_g. Gambar ikatan yang terjadi dalam geometri oktahedral seperti dalam gambar A.2.



Gambar A. 2. Gambar ikatan dalam geometri oktahedral.

LAMPIRAN B

FUNGSI - FUNGSI MATEMATIKA

I. Matrik

Matrik adalah himpunan bilangan skalar (bilangan riil atau komplek) yang disusun secara empat persegi panjang (menurut baris - baris dan kolom - kolom). Matrik diberi namadengan huruf besar A,B,P, dan sebagainya. Secara lengkap ditulis matrik A = (a_{ij}) artinya suatu matrik A yang elemen - elemennya a_{ij}, dimana indek i menyatakan baris ke-i dan indeks j menyatakan kolom ke-j dari elemen tersebut. Ditulis dengan

$$A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{vmatrix} \qquad \text{(B.I.1)}$$

I.1. Transpose Matrik

Suatu matrik A = (a_{ij}) berukuran (m x n), maka transpose dari A adalah matrik A^T berukuran (n x m),yang didapat dari A dengan menuliskan baris ke-i dari A sebagai kolom ke-i dari A^T. Ditulis dengan $A^T = (a_{ji})$.

I.2. Beberapa Jenis Matrik

1. Matrik bujursangkar ialah matrik yang mempunyai banyak baris = banyak kolom = n, dandisebut matrik bujur sangkar berodo n.

2. Matrik diagonal ialah matrik bujursangkaryang semua elemen diluar diagonal utama adalah nol. Ditulis dengan (a_{ij}) adalah matrik diagonal bila $a_{ij} = 0$, untuk $i = j$

3. Matrik identitas ialah matrik diagonal yang elemen - elemen diagonal utamanya sama dengan 1, dengan perkataan lain a_{ij} adalah matrik identitas bila $a_{ij} = 1$, untuk $i = j$ dan $= 0$, untuk $i = j$. Matrik identitas biasa ditulis I atau I_n , dimana n menunjukkan ukuran matrik bujursangkar.

4. Matrik simetris ialah matrik yang transposenya sama dengan dirinya sendiri, dengan perkataan lain bila $A = A^T$ atau $a_{ij} = a_{ji}$ untuk semua i dan j.

5. Matrik antisimetri ialah matrik yang transposenya adalah negatifnya. Dengan perkataan lain Bila $A = - A^T$ atau $a_{ij} = - a_{ji}$ untuk semua i dan j.

6. Matrik hermitian : matrik A disebut matrik hermitian bila transpose hermitiannya samadengan dirinya sendiri. Dengan perkataan lain bila $A^H = A$. Mudah dimengerti bila matrik yang simetris adalah matrik hermitian.

I.3. Beberapa Operasi Elementer Pada Baris Dan Kolom Suatu Matrik

1. Penukaran tempat baris ke-i dan baris ke-j . Ditulis H_{ij} (A). Contoh

$$A = \begin{vmatrix} 3 & 1 & 4 \\ 2 & 1 & 1 \\ 3 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad \text{maka } H_{12}\ (A) = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & 4 \\ 3 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

2. Penukaran tempat kolom ke-i dan kolom ke-j. Ditulis K_{ij} (A). Contoh

$$A = \begin{vmatrix} 3 & 1 & 4 \\ 2 & 1 & 1 \\ 3 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad \text{maka } K_{13}\ (A) = \begin{vmatrix} 4 & 1 & 3 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 3 \end{vmatrix}$$

3. Memperkalikan baris ke-i dengan skalar λ = 0. Ditulis $H_i^{(\lambda)}$(A). Contoh

$$A = \begin{vmatrix} 3 & 1 & 4 \\ 2 & 1 & 1 \\ 3 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad \text{maka } H_2^{(-2)}(A) = \begin{vmatrix} 3 & 1 & 4 \\ -4 & -2 & -2 \\ 3 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

4. Memperkalikan kolom ke-i dengan skalar $\lambda = 0$. Ditulis $K_i^{(\lambda)}$ (A). Contoh

$$A = \begin{vmatrix} 3 & 1 & 4 \\ 2 & 1 & 1 \\ 3 & 0 & 1 \end{vmatrix} \quad \text{maka } K_3^{(2)}(A) = \begin{vmatrix} 3 & 1 & 8 \\ 2 & 1 & 2 \\ 3 & 0 & 2 \end{vmatrix}$$

I.4. Determinan

Setiap matrik bujur sangkar A, selalu dikaitkan dengan suatu skalar yang disebut *determinan* mattrik tersebut. Determinan dari suatu matrik didefinisikan sebagai jumlah perkalian elemen – elemen dari sembarang baris / kolom dengan kofaktornya. Determinan matrik ditulis dengan det(A) atau |A|. Adapun sifat – sifat determinan antara lain :

1. Det(A) = det(A^T)
2. Tanda determinan berubah apabila 2 baris/kolom ditukar tempatnya.
3. Harga determinan menjadi λ kali, apabila suatu baris/kolom dikalikan dengan λ (suatu skalar).
4. Harga determinan tidaak berubah apabila baris/kolom i ditambahkan dengan λ baris/kolom j.

II. Fungsi legendre

II.1. Persamaan Diferensial Legendre

Persamaan diferensial yang dikenal sebagai persamaan diferensial Legendre derajat n, ditulis dengan

$$(1 - x^2) \frac{d^2 y}{dx^2} - 2x \frac{dy}{dx} + n (n + 1) = 0 \qquad (II.1)$$

Penyelesaian persamaan (II.1) adalah

$$P_n(x) = \sum_{r=o}^{n} (-1)^r \frac{(2n - 2r)}{2^n \; r! \; (n - r)! \; (r - 2r)!} \; x^{n-2r} \qquad (II.2)$$

dengan N = n/2 untuk n genap dan N = (n-1)/2 untuk ganjil dan $P_n(x)$ adalah suku banyak umum legendre.

II.2. Rumus Rodrigues Untuk Suku Banyak Legendre

Rumus Rodrigues untuk suku banyak legendre muncul dari persamaan differensial :

$$(1 - x^2) \frac{d^2 V_n}{dx^n} - 2x \frac{dV_n}{dx} + (n + 1) V_n = 0 \qquad (II.3)$$

$$\text{dengan} \quad V_n = \frac{d^n V}{dx^n} = \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \qquad (II.4)$$

V_n merupakan suku banyak derajat n. Persamaan Legendrrre mempunyai satu dan hanya satu penyelesaaian dari bentuk itu, yaitu $P_n(x)$, ini berarti $P_n(x)$ merupakan suatu kelipatan tetapan dari V_n, jadi diperoleh

$$P_n(x) = c\frac{d^n}{dx^n}\ (\ x^2 - 1\ )^n \qquad (\ II.5\ )$$

Untuk mendapatkan tetapan c, ditinjau pangkat tertinggi untuk x disetiap ruas persamaan diatas, yakni

$$\frac{(\ 2n\ )!}{2^n\ (n!)^2}\ x^n = c\ \frac{d^n}{dx^n}\ x^{2n}$$

$$= c\,\frac{(2n)!}{n!}\ x^n$$

sehingga $c = \dfrac{1}{2^n\ n!}$ (II.6)

Dengan mensubtitusikan nilai c kedalam persamaan (II.5), diperoleh

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n\ n!}\ \frac{d^n}{dx^n}\ (\ x^2 - 1\ )^n \qquad (\ II.7\ )$$

Bentuk ini adalah rumus Rodrigues untuk suku banyak Legendre

II.3. Fungsi Pembangkit Untuk $P_n(x)$

Suku banyak Legendre $P_n(x)$ adalah koefisien Z^n dalam ekspansi

$$\phi = \sqrt{1 - 2xZ + Z^2} \qquad (\ II.8\ )$$

dengan pangkat naik dalam Z. untuk memudahkan diambil

$2xZ - Z^2 = y$, dan mengekspansikan $(1 - y)^{-1/2}$ ke binomial, didapat

$$\phi = (1 - y)^{-1/2} = 1 + 1/2\ y + \frac{1/2 . 3/2}{2!} y^2 + \ldots.$$
$$= 1 + 1/2\ (2xZ-Z^2) + 3/8\ (2xZ-Z^2)^2 + \ldots$$
$$= 1 + xZ - 1/2\ Z^2 + 3/8\ (4x^2Z^2-4xZ^3+Z^4)$$
$$= 1 + xZ + Z^2 (3/8\ x^2 - 1/2)$$
$$= \sum_{n=0}^{n=\infty} An\ Z^n \qquad (II.9)$$

Jika diambil $x = 1$ dalam persamaan (II.8) maka akan didapat

$$\phi = (1 - 2Z + Z^2)^{-1/2} = \frac{1}{1 - Z}$$

$$= 1 + Z + Z^2 + Z^3 + \ldots.. + Z^n + \ldots.$$

An sama dengan 1 jika $x = 1$, sehingga An akan identik dengan $P_n(x)$ karena An satu - satunya suku banyak derajat n yang memenuhi persamaan itu dan mempunyai nilai 1 bila $x = 1$. Dengan mendifferensialkan persamaan (II.8) diperoleh

$$(1 - 2xZ + Z^2) \frac{\partial \phi}{\partial z} = (x - Z) \phi \qquad (II.10)$$

$$Z \frac{\partial \phi}{\partial z} = (x - Z) \frac{\partial \phi}{\partial x} \qquad (II.11)$$

Jika persamaan (II.9) disubtitusikan kedalam persamaan (II.10) dan koefisien Z^{n-1} pada kedua ruas disamakan didapat

$$n A_n - (2n - 1) x A_{n-1} + (n - 1) A_{n-2} = 0 \qquad (II.12)$$

Dengan mensubtitusikan kedalam persamaan (II.11) dari persamaan (II.9) dan menyamakan koefisien - koefisien Z^n pada kedua ruas diperoleh

$$x \frac{dA_{n-1}}{dx} - \frac{dA_{n-2}}{dx} = (n - 1) A_{n-1} \qquad (II.13)$$

Jika dalam persamaan (II.13), n diganti n+1, didapat

$$x \frac{dA_n}{dx} - \frac{dA_{n-1}}{dx} = n A_n \qquad (II.14)$$

Persamaan (II.12) didefrensialkan terhadap x dan dA_{n-2}/dx dieliminasikan diperoleh

$$\frac{dA_n}{dx} - x \frac{dA_{n-1}}{dx} = n A_{n-1} \qquad (II.15)$$

Persamaan (II.14) dikalikan dengan -x dan menjumlahkannya dengan persamaan persamaan (II.15) akan diperoleh

$$(1 - x^2) \frac{dA_n}{dx} = n (A_{n-1} - x A_n) \qquad (II.16)$$

Dengan mendiferensialkan persamaan (II.16) terhadap x dan menyederhanakan hasilnya dengan menggunakan persamaan (II.15) akan didapat

$$(1 - x^2) \frac{d^2 A_n}{dx} - 2x \frac{dA_n}{dx} + n (n + 1) A_n = 0 \qquad (II.17)$$

Persamaan ini memperlihatkan bahwa An adalah penyelesaian persamaan Legendre dengan demikian

$$A_n = P_n (x) \qquad (II.18)$$

Dengan mensubtitusikan persamaan (II.18) ke persamaan (II.9) diperoleh hubungan

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{1 - 2xZ + Z^2}} = \sum_{n=0}^{n=\infty} P_n(x) \; Z^n$$

Fungsi ϕ dinamakan *fungsi pembangkit* untuk $P_n(x)$.

LAMPIRAN C

PERHITUNGAN MATEMATIS

I. Bagian yang tegantung φ

I.a. Untuk m = m´ $\pm$ 4

$$< \phi_m \mid x^4 + y^4 \mid \phi_m > =$$

$$\int_0^{2\pi} e^{im\varphi} \left(\frac{e^{im\varphi} + e^{-im\varphi} + 6}{8} \right) e^{-im\varphi}\, d\varphi$$

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m'+4)\varphi} \left(\frac{e^{im\varphi} + e^{-im\varphi} + 6}{8} \right) e^{-im\varphi}\, d\varphi$$

$$\int_0^{2\pi} e^{i4\varphi} \left(\frac{e^{i4\varphi} + e^{-i4\varphi} + 6}{8} \right) d\varphi$$

$$\int_0^{2\pi} \left(\frac{e^{i8\varphi} + e^{-i8\varphi} + 6}{8} \right) d\varphi$$

$$= \frac{1}{8} \left(\frac{1}{8} e^{i8\varphi} + \frac{6}{4i} e^{4i\varphi} + \varphi \right|_0^{2\pi}$$

$$= \frac{2\pi}{8}$$

Normalisasi untuk $\phi_m = \frac{1}{2\pi}$, sehingga

$$= \frac{2\pi}{8} \; \frac{1}{2\pi}$$

$$= \frac{1}{8}$$

$$<\phi_m \mid x^4 + y^4 \mid \phi_m> = \frac{1}{8} \; r^4 \sin^4 \vartheta, \text{ untuk } m = m' \pm 4$$

I.b. Untuk m = m´

$$< \phi_m \mid x^4 + y^4 \mid \phi_m > =$$

$$\int_0^{2\pi} e^{im\varphi} \left(\frac{e^{im\varphi} + e^{-im\varphi} + 6}{8} \right) e^{-im\varphi} \, d\varphi$$

$$\int_0^{2\pi} e^{im'\varphi} \left(\frac{e^{im\varphi} + e^{-im\varphi} + 6}{8} \right) e^{-im\varphi} \, d\varphi$$

$$\int_0^{2\pi} \left(\frac{e^{i4\varphi} + e^{-i4\varphi} + 6}{8} \right) d\varphi$$

$$= \frac{1}{8} \left(\frac{1}{4i} \; e^{i4\varphi} - \frac{6}{4i} \; e^{-4i\varphi} + 6\varphi \right|_0^{2\pi}$$

$$= \frac{3\pi}{2}$$

Normalisasi untuk $\phi_m = \frac{1}{2\pi}$, sehingga

$$= \frac{3\pi}{2} \quad \frac{1}{2\pi}$$

$$= \frac{3}{4}$$

$$<\phi_m \mid x^4 + y^4 \mid \phi_m> = \frac{3}{4} \; r^4 \sin^4 \vartheta, \text{ untuk } m = m'$$

II. Solusi dari integral ϑ

II.a. Untuk $\theta_{2\pm1} = \sqrt{\frac{15}{4}} \; \sin\vartheta \cos\vartheta$

$$= r^4 <\theta_{2\pm1} \mid \frac{3}{4} \sin^4\vartheta + \cos^4\vartheta \mid \theta_{2\pm1}>$$

$$= \int_0^{\pi} r^4 \frac{15}{4} \sin^2\vartheta \cos^2\vartheta \; (\frac{3}{4} \sin^4\vartheta + \cos^4\vartheta) \sin\vartheta \; d\vartheta$$

$$= -\frac{15}{4} \; r^4 \int_0^{\pi} (\frac{3}{4} \sin^6\vartheta \cos^2\vartheta + \sin^2\vartheta \cos^6\vartheta) \; d\cos\vartheta$$

$$= -\frac{15}{2} \; r^4 \int_0^{\pi/2} \Big[\frac{3}{4} (1-\cos^2\vartheta)^3 \cos^2\vartheta + (1-\cos^2\vartheta) \cos^6\vartheta \Big]$$

$d\cos\vartheta$

$$= -\frac{15}{2} \; r^4 \Big[\frac{3}{4} \; (\frac{1}{3} \cos^3\vartheta - \frac{3}{5} \cos^5\vartheta + \frac{3}{7} \cos^7\vartheta$$

$$- \frac{1}{9} \cos^9 \vartheta) + (\frac{1}{7} \cos^7 \vartheta - \frac{1}{9} \cos^9 \vartheta) \Big|_{0}^{\pi/2}$$

$$= \frac{11}{21} r^4$$

II.b. Untuk $\theta_{2\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{16}} \sin^2 \vartheta$

$$= r^4 <\theta_{2\pm 2} \mid \frac{3}{4} \sin^4 \vartheta + \cos^4 \vartheta \mid \theta_{2\pm 2} >$$

$$= \int_0^{\pi} r^4 \frac{15}{16} \sin^4 \vartheta \left(\frac{3}{4} \sin^4 \vartheta + \cos^4 \vartheta \right) \sin \vartheta \, d\vartheta$$

$$= - \frac{15}{16} r^4 \int_0^{\pi} \left(\frac{3}{4} \sin^8 \vartheta + \sin^4 \vartheta \cos^4 \vartheta \right) d\cos\vartheta$$

$$= - \frac{15}{8} r^4 \int_0^{\pi/2} \left[\frac{3}{4} (1-\cos^2 \vartheta)^4 + (1-\cos^2 \vartheta)^4 \cos^4 \vartheta \right]$$

dcosϑ

$$= - \frac{15}{2} r^4 \left[\frac{3}{4} \left(\cos \vartheta - \frac{4}{3} \cos^3 \vartheta + \frac{6}{5} \cos^5 \vartheta - \frac{4}{7} \cos^7 \vartheta \right. \right.$$

$$+ \frac{1}{9} \cos^9 \vartheta) + (\frac{1}{5} \cos^5 \vartheta - \frac{2}{7} \cos^7 \vartheta - \frac{1}{9} \cos^9 \vartheta) \Big|_{0}^{\pi/2}$$

$$= \frac{13}{21} r^4$$

III. Penyederhanaan bagian radial

a. $<\psi(1)|V|\psi(1)> = <\psi(1)|\ x^4 + y^4 + z^4 - \frac{3}{5}\ |\psi(1)>$

$$= \frac{11}{21}\ D \int_0^\infty R^2_{nl}\ (r)\ r^4\ r^2\ dr - \frac{3}{5}\ D \int_0^\infty R^2_{nl}\ (r)\ r^4\ r^2\ dr$$

$$= \frac{55\ -\ 63}{105}\ D \int_0^\infty R^2_{nl}\ (r)\ r^4\ r^2\ dr$$

$$= \frac{-\ 8}{105}\ D \int_0^\infty R^2_{nl}\ (r)\ r^4\ r^2\ dr$$

$$= -\ 4\ \frac{2}{105}\ D \int_0^\infty R^2_{nl}\ (r)\ r^4\ r^2\ dr$$

$$= -\ 4\ Dq$$

b. $<\psi(2)|V|\psi(2)> = <\psi(2)|\ x^4 + y^4 + z^4 - \frac{3}{5}\ |\psi(2)>$

$$= \frac{13}{21}\ D \int_0^\infty R^2_{nl}\ (r)\ r^4\ r^2\ dr - \frac{3}{5}\ D \int_0^\infty R^2_{nl}\ (r)\ r^4\ r^2\ dr$$

$$= \frac{65\ -\ 63}{105}\ D \int_0^\infty R^2_{nl}\ (r)\ r^4\ r^2\ dr$$

$$= \frac{2}{105}\ D \int_0^\infty R^2_{nl}\ (r)\ r^4\ r^2\ dr$$

$$= \frac{2}{105}\ D \int_0^\infty R^2_{nl}\ (r)\ r^4\ r^2\ dr$$

$$= Dq$$

c. $<\psi(2)|V|\psi(\bar{2})> = <\psi(2)| \; x^4 + y^4 + z^4 - \frac{3}{5} \; |\psi\bar{(}2)>$

$$= \frac{73}{21} \; D \int_0^\infty R_{nl}^2 \; (r) \; r^4 \; r^2 \; dr - \frac{3}{5} \; D \int_0^\infty R_{nl}^2 \; (r) \; r^4 \; r^2 \; dr$$

$$= \frac{73 - 63}{105} \; D \int_0^\infty R_{nl}^2 \; (r) \; r^4 \; r^2 \; dr$$

$$= \frac{10}{105} \; D \int_0^\infty R_{nl}^2 \; (r) \; r^4 \; r^2 \; dr$$

$$= 5 \; \frac{2}{105} \; D \int_0^\infty R_{nl}^2 \; (r) \; r^4 \; r^2 \; dr$$

$$= 5 \; Dq$$

LAMPIRAN D

TEORI GANGGUAN TINGKAT PERTAMA UNTUK TENAGA YANG TERDEGENERASI

Teori gangguan bertujuan unutk memperoleh eigen value dan eigen function suatu sistem apabila dikenakan suatu gangguan . Eigen value merupakan besaran fisis yang dihasilkan akibat operasi suatu suatu operator tertentu, sedangkan eigen function adalah fungsi gelombang yang bersesuaian pada sistem tersebut.

Untuk membahas masalah - masalah fisis seperti problem potensial yang tetap, osilator harmonis, atom komplek, dan sebagainya, selalu dimulai dari persamaan schrödinger. Dari persamaan tersebut dapat diturunkan besar eigen tenaganya.

Untuk sistem yang mendapat gangguan sehingga menjadi tidak stasioner lagi, oleh adanya gangguan ini, akan memberikan perubahan pada sistem bentuk hamiltoniannya. Persamaan Schrödinger sebelum ada gangguan(Dhani, 1981)

$$H^{\circ} \psi^{\circ} - W^{\circ} \psi^{\circ} = 0 \qquad (D.1)$$

akan mempunyai tingkat energi

$$W^{\circ}_{0}, W^{\circ}_{1}, \ldots, W^{\circ}_{k}, \ldots$$

Sesudah ada gangguan, persamaan Schrödingernya menjadi

$$H \psi - W \psi = 0 \qquad (D.2)$$

dimana : $H = H^{\circ} + \lambda H' + \lambda^{2} H'' + \ldots$ (D.3)

Gangguan terhadap hamiltoniannya akan menjadi kecil untuk orde kedua dan orde seterusnya. Sehingga dapat diabaikan. Ekspansi gangguan ditulis sebagai :

$$H = H^{o} + \lambda H' \tag{D.4}$$

Persamaan Schrödinger yang memenuhi persamaan (D.4), ditulis dengan

$$(H^{o} + \lambda H') \psi = W \psi \tag{D.5}$$

Dan ekspansi ψ dan W terganggu dalam parameter λ ditulis (Pauling, 1963),

$$W_k = W_o + \lambda W_1 + \lambda^2 W_2 + \ldots \tag{D.6}$$

$$\psi_k = \psi_o + \lambda \psi_1 + \lambda^2 \psi_2 + \ldots \tag{D.7}$$

Subtitusikan harga H, ψ_k, dan W_k ke persamaan (D.3), akan menghasilkan

$$(H^{o} x^{o}_{kl} - W_k x^{o}_{kl}) + (H^{o} \psi'_k + H' x^{o}_{kl} - W^{o}_k \psi'_k - W'_k x'_{kl})\lambda$$
$$+ (H^{o} \psi''_k + H' \psi'_k + H'' \psi^{o}_k - W^{o}_k \psi''_k - W'_k \psi'_k - W''_k \psi^{o}_k)\lambda^2$$
$$+ \ldots\ldots = 0 \tag{D.8}$$

dimana $x^{o}_{kl} = \sum_{l=o}^{\infty} k_{ll'} \psi^{o}_{kl'}$, $l = 1,2,3,\ldots,\alpha$ (D.9)

Deret pada persamaan (D.8) adalah konvergen, sehingga berharga nol untuk seluruh deret dalam koefisien λ. Untuk koefisien dari λ^{o} sama dengan nol, sesuai persamaan (D.1), sehingga diperbolehkan untuk deret pada persamaan (D.6) dan persamaan (D.7) dalam bentuk ψ^{o} dan W^{o}, dan ditulis dengan(Pauling, 1963),

$$H^o \psi'_{kl} - W^o_k \psi'_{kl} = W'_k \chi^o_{kl} - H' \chi^o_{kl} \qquad (D.10)$$

dengan $\psi'_{kl} = \sum_{k'l'} a_{klk'l'} \psi^o_{k'l'}$ (D.11)

dan,

$$H^o \psi'_{kl} = \sum_{k'l'} a_{klk'l'} H^o \psi^o_{k'l'} = \sum_{k'l'} a_{klk'l'} W^o \psi^o_{k'l'} \qquad (D.12)$$

Subtitusikan persamaan (D.12) kedalam persamaan (D.10), sehingga

$$\sum_{k'l'} a_{klk'l'} (W^o_{k'} - W^o_k) \psi^o_{k'l'} = \sum_{l=o}^{\infty} k_{ll'} (W'_{kl'} - H')\psi^o_{kl'} \qquad (D.13)$$

Persamaan (D.13) dikalikan ψ^*_{kj} dan diintegralkan, didapat,

$$\sum_{k'l'} a_{klk'l'} (W^o_{k'} - W^o_k) \int \psi^{o*}_{kj} \psi^o_{k'l'} d\tau =$$

$$\sum_{l=o}^{\infty} k_{ll'} (W'_{kl'} \int \psi^{o*}_{kj} \psi^o_{k'l'} d\tau - \int \psi^{o*}_{kj} H' \psi^o_{k'l'} d\tau) \qquad (D.14)$$

Suku sebelah kiri akan berharga nol karena ψ^o_{kj} dan $\psi^o_{k'l'}$ adalah orthogonal ($k = k'$). Untuk selanjutnya persamaan (D.14) ditulis,

$$\sum_{l=o}^{\infty} k_{ll'} (H'_{kl'} - \Delta_{jl'} W'_{kl}) = 0 \qquad , j = 1,2,3,\ldots,\alpha \qquad (D.15)$$

dimana $H'_{jl'} = \int \psi^{o*}_{kj} H' \psi^o_{k'l'} d\tau$ (D.16)

$$\Delta_{jl'} = \int \psi^{o*}_{kj} \;\; \psi^{o}_{k'l'} \; d\tau \qquad \text{(D.17)}$$

Untuk sistem yang mempunyai degenerasi rangkap α, maka persamaan (D.15) dapat ditulis secara lengkap,

$$k_{l1} \; (H'_{11} - \Delta_{11} \; W'_{kl}) + k_{l2} \; (H'_{12} - \Delta_{12} \; W'_{kl'}) + \ldots + k_{l\alpha} \; (H'_{1\alpha} - \Delta_{1\alpha} \; W'_{kl}) = 0$$

$$k_{l1} \; (H'_{21} - \Delta_{21} \; W'_{kl}) + k_{l2} \; (H'_{22} - \Delta_{22} \; W'_{kl'}) + \ldots + k_{l\alpha} \; (H'_{2\alpha} - \Delta_{2\alpha} \; W'_{kl}) = 0$$

$$k_{l1} \; (H'_{\alpha 1} - \Delta_{\alpha 1} \; W'_{kl}) + k_{l2} \; (H'_{\alpha 2} - \Delta_{\alpha 2} \; W'_{kl'}) + \ldots + k_{l\alpha} \; (H'_{\alpha\alpha} - \Delta_{\alpha\alpha} \; W'_{kl}) = 0$$

(D.18)

Dari persamaan (D.18) dapat diketahui harga $W_{kl'}$, jika persamaan (D.18) tersebut mempunyai penyelesaian yang non trivial dan ditulis dalam bentuk matrik(Pauling, 1963),

$$\begin{vmatrix} (H'_{11} - \Delta_{11} \; W'_{kl}) & (H'_{12} - \Delta_{12} \; W'_{kl}) & \ldots & (H'_{1\alpha} - \Delta_{1\alpha} \; W'_{kl}) \\ (H'_{21} - \Delta_{21} \; W'_{kl}) & (H'_{22} - \Delta_{22} \; W'_{kl}) & \ldots & (H'_{2\alpha} - \Delta_{2\alpha} \; W'_{kl}) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ (H'_{\alpha 1} - \Delta_{\alpha 1} \; W'_{kl}) & (H'_{\alpha 2} - \Delta_{\alpha 2} \; W'_{kl}) & \ldots & (H'_{\alpha\alpha} - \Delta_{\alpha\alpha} \; W'_{kl}) \end{vmatrix} = 0$$

(D.19)

Bila fungsi gelombang asli ψ^{o}_{kl}, ... ,$\psi^{o}_{k\alpha}$ telah dinormalisasi dan saling orthoganal, maka fungsi $\Delta_{jl'}$ akan berharga satu untuk j = l´ dan nol untuk j = l´ , sehingga persamaan (D.19) menjadi

$$\begin{vmatrix} H'_{11} - W_{kl} & H'_{12} & \cdots & H'_{1\alpha} \\ H'_{22} & H'_{22} - W'_{kl} & \cdots & H'_{2\alpha} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ H'_{\alpha 1} & H'_{\alpha 2} & \cdots & H'_{\alpha\alpha} - W'_{kl} \end{vmatrix} = 0 \qquad \text{(D.20)}$$

Persamaan (D.20) sering dikenal dengan persamaan sekuler (*secular equation*) dan gangguan yang mempunyai penyelesaian seperti persamaan sekuler dinamakan gangguan sekuler (*secular pertubation*).