LAMPIRAN A

PERSAMAAN SCHRÖDINGER SATU DIMENSI

TAK BERGANTUNG WAKTU

Persamaan gelombang Schrödinger memungkinkan ditentukannya fungsi Ψ untuk koordinat ruang dan waktu, yang disebut juga sebagai fungsi amplitudo peluang (*probability amplitude functions*) (Pauling dan Wilson,1985). Persamaan tersebut dinyatakan dalam bentuk persamaan differensial orde dua. Ditinjau suatu partikel dengan massa m yang bergerak pada satu garis lurus pada arah sumbu x dalam sebuah sistem yang ditentukan oleh suatu fungsi energi potensial $V(x)$ di seluruh daerah $-\infty < x < +\infty$. Persamaan Schrödinger untuk sistem ini dinyatakan dalam bentuk :

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t) = -\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} \qquad \text{(A.1)}$$

dengan $\Psi(x,t)$ adalah fungsi gelombang Schrödinger bergantung waktu yang merupakan hasil kali dua fungsi, yaitu fungsi yang bergantung pada waktu saja dan fungsi yang bergantung pada koordinat saja, dinyatakan sebagai berikut :

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t) \qquad \text{(A.2)}$$

dengan $\psi(x)$ adalah fungsi gelombang yang bergantung pada koordinat saja, dan $\varphi(t)$ adalah fungsi gelombang yang bergantung waktu saja.

Fungsi gelombang Schrödinger ini terkait erat dengan mekanika klasik Newton melalui hubungan sebagai berikut :

$$H(p_x, x) = T(p_x) + V(x) = E \qquad \text{(A.3)}$$

yang menyatakan bahwa tenaga total E merupakan jumlah dari tenaga kinetik dan tenaga potensialnya yang sama dengan fungsi Hamiltonian $H(p_x, x)$. Hamiltonian tersebut dinyatakan dalam bentuk :

$$H(p_x, x) = \frac{1}{2m} p_x^2 + V(x) = E \tag{A.4}$$

dengan p_x adalah momentum partikel.

Jika p_x diganti dengan operator diferensial $\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x}$ dan E dengan $-\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial t}$ dan dioperasikan terhadap fungsi $\Psi(x,t)$ maka pers.(A.4) menjadi :

$$H\left(\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial}{\partial x}, x\right)\Psi(x,t) = -\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi = -\frac{h}{2\pi i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{A.5}$$

yang identik dengan pers.(A.1). Dengan demikian persamaan Schrödinger juga dapat dinyatakan dalam bentuk :

$$H\Psi = E\Psi \tag{A.6}$$

Dengan mensubtitusi pers.(A.2) ke dalam pers.(A.1) kemudian dibagi dengan $\psi(x)\varphi(t)$, akan didapatkan bentuk sebagai berikut :

$$\frac{1}{\psi(x)}\left[-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x)\right] = -\frac{h}{2\pi i}\frac{1}{\varphi(t)}\frac{d\varphi(t)}{dt} \tag{A.7}$$

tampak bahwa suku di sebelah kanan pers.(A.7) adalah fungsi yang bergantung waktu saja dan di sebelah kiri adalah fungsi yang bergantung pada koordinat saja. Digunakan hubungan pers.(A.5) dan (A.6) , pers.(A.7) dapat dibagi menjadi dua persamaan sebagai berikut:

$$\frac{d\varphi(t)}{dt} = -\frac{2\pi i}{h} E\varphi(t) \tag{A.8a}$$

dan :

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \qquad \text{(A.8b)}$$

Pers.(A.8b) dikalikan dengan $-8\pi^2 m/h$ untuk mendapatkan :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - V)\psi = 0 \qquad \text{(A.9a)}$$

atau dituliskan dalam bentuk lain :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \qquad \text{(A.9b)}$$

dengan $\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$.

Pers. (A.9b) adalah persamaan Schrödinger satu dimensi tak bergantung waktu untuk gerak partikel pada sistem dengan arah sumbu x dan potensial V.

LAMPIRAN B

PENJABARAN PENYELESAIAN PERSAMAAN SCHRÖDINGER UNTUK KASUS OSILATOR HARMONIK

Dengan mengasumsikan gerakan satu partikel bermassa μ yang besarnya pergeseran x sama dengan perubahan jarak antar inti r-r_e molekul dan memasukkan persamaan tenaga potensial (3.4) ke dalam persamaan Schrödinger, maka:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - \tfrac{1}{2}kx^2\right)\psi = 0 \qquad \text{(B.1)}$$

dengan memasukkan nilai k dari pers.(3.12):

$$k = 4\pi^2\mu\nu^2 \qquad \text{(B.2)}$$

, didapatkan:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} - \left(\frac{2\pi\mu\nu}{\hbar}\right)^2 x^2\right]\psi = 0 \qquad \text{(B.3)}$$

Jika diketahui parameter sebagai berikut

$$\alpha = 2\pi\mu\nu/\hbar \quad \text{dan} \quad \beta = 2\mu E/\hbar^2$$

maka;

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\beta - \alpha x^2\right)\psi = 0 \qquad \text{(B.4)}$$

Persamaan di atas kemudian dinyatakan dalam variabel tak berdimensi:

$$u = \sqrt{\alpha}x = \left[\frac{2\pi\mu}{\hbar 2\pi}\left(\frac{k}{\mu}\right)^{1/2}\right]^{1/2} x = \frac{(k\mu)^{1/4}}{\hbar^{1/2}}\, x \qquad \text{(B.5)}$$

didapatkan:

$$\frac{d\psi}{dx} = \frac{du}{dx}\frac{d\psi}{du} = \sqrt{\alpha}\,\frac{d\psi}{du} \qquad \text{(B.6)}$$

dan;

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{du}{dx}\frac{d}{du}\left(\frac{d\psi}{dx}\right) = \alpha\,\frac{d^2\psi}{du^2} \qquad \text{(B.7)}$$

sehingga menjadi:

$$\alpha\,\frac{d^2\psi}{du^2} + \left(\beta - \alpha u^2\right) = 0 \qquad \text{(B.8)}$$

atau:

$$\frac{d^2\psi}{du^2} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - u^2\right)\psi = 0 \qquad \text{(B.9)}$$

Penyelesaian persamaan di atas harus memenuhi syarat bahwa $\psi(u)$ dan turunan pertamanya harus bernilai tunggal, kontinu dan terhingga untuk semua nilai u dari $-\infty$ sampai $+\infty$. Untuk itu dilakukan metode penyelesaian asimptotik untuk nilai $|u|$ yang sangat besar (Pauling dan Wilson,1985). Sehingga pers.(B.9) menjadi:

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = u^2\psi \qquad , \; |u| \to \infty \qquad \text{(B.10)}$$

Penyelesaian umum persamaan di atas dapat dinyatakan sebagai berikut:

$$\psi = Ae^{-u^2/2} + Be^{u^2/2} \qquad \text{(B.11)}$$

dengan A dan B adalah konstanta sembarang.

Bukti bahwa pers.(B.11) adalah penyelesaian pers.(B.10) dijabarkan sebagai berikut:

$$\frac{d\psi}{du} = A(-u)^2 e^{-u^2/2} + Bue^{u^2/2} \tag{B.11a}$$

dan:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi}{du^2} &= A(-u)^2 e^{-u^2/2} - Ae^{-u^2/2} + Bu^2 e^{u^2/2} + Be^{u^2/2} \\ &= A(u^2 - 1)e^{-u^2/2} + B(u^2 + 1)e^{u^2/2}\end{aligned} \tag{B.11b}$$

karena berlaku untuk $|u| \rightarrow \infty$, sehingga menjadi:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\psi}{du^2} &= Au^2 e^{-u^2/2} + Bu^2 e^{u^2/2} \\ &= u^2\left(Ae^{-u^2/2} + Be^{u^2/2}\right) \\ &= u^2\psi\end{aligned} \tag{B.11c}$$

Terlihat bahwa pers.(B.10) terbukti benar.

Karena eigenfungsi tersebut harus tetap terhingga pada saat $|u| \rightarrow \infty$, maka dari pers.(B.11) terlihat bahwa B harus sama dengan 0. Maka bentuk eigenfungsi-nya menjadi:

$$\psi(u) = Ae^{-u^2/2} \; ; \; |u| \rightarrow \infty \tag{B.12}$$

Langkah berikutnya adalah mencari penyelesaian untuk pers.(B.9) dalam bentuk:

$$\psi(u) = Ae^{-u^2/2} f(u) \tag{B.13}$$

dengan *f(u)* adalah fungsi yang akan dicari. Untuk mencari *f(u)* maka dihitung:

$$\frac{d\psi}{du} = -Aue^{-u^2/2} f + Ae^{-u^2/2} \frac{df}{du} \tag{B.14}$$

dan;

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = -Ae^{-u^2/2}f + Au^2e^{-u^2/2}f - Aue^{-u^2/2}\frac{df}{du}$$

$$-Aue^{-u^2/2}\frac{df}{du} + Ae^{-u^2/2}\frac{d^2f}{du^2} \quad \text{(B.15)}$$

$$= Ae^{-u^2/2}\left(-f + u^2f - 2u\frac{df}{du} + \frac{d^2f}{du^2}\right)$$

Kemudian ψ dan $d^2\psi/du^2$ disubtitusikan ke pers.(B.9) sehingga didapatkan:

$$Ae^{-u^2/2}\left(-f + u^2f - 2u\frac{df}{du} + \frac{d^2f}{du^2}\right) + \frac{\beta}{\alpha}Ae^{-u^2/2}f - Au^2e^{-u^2/2}f = 0 \quad \text{(B.16)}$$

Pers.(B.16) dibagi dengan $Ae^{-u^2/2}$, maka:

$$\frac{d^2f}{du^2} - 2u\frac{df}{du} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 1\right)f = 0 \quad \text{(B.17)}$$

Persamaan ini dapat diselesaikan dengan metode deret pangkat u dalam bentuk:

$$f(u) = a_0 + a_1u + a_2u^2 + a_3u^3 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} a_nu^n \quad \text{(B.18)}$$

Koefisien a_0, a_1, a_2,…ditentukan dengan memasukkan pers.(B.18) ke dalam pers.(B.17) dengan syarat bahwa persamaan akhirnya dapat terselesaikan untuk sembarang nilai u. Untuk itu dihitung :

$$\frac{df}{du} = \sum_{n=1}^{\infty} na_nu^{n-1} \equiv 1a_1 + 2a_2u + 3a_3u^2 + \dots. \quad \text{(B.19)}$$

dan;

$$\frac{d^2f}{du^2} = \sum_{n=2}^{\infty}(n-1)na_nu^{n-2} \equiv 1.2a_2 + 2.3a_3u + 3.4a_4u^2 + \dots. \quad \text{(B.20)}$$

Dengan memasukkan ke dalam pers.(B.17) akan didapatkan:

$$1.2a_2 + 2.3a_3u + 3.4a_4u^2 + 4.5a_5u^3 + ... - 2.1a_1u - 2.2a_2u^2 - 2.3a_3u^3 - ....$$
$$+ (\beta/\alpha - 1)a_0 + (\beta/\alpha - 1)a_1u + (\beta/\alpha - 1)a_2u^2 + (\beta/\alpha - 1)a_3u^3 + ... = 0 \qquad \text{...... (B.21)}$$

Karena persamaan tersebut harus dapat terselesaikan untuk seluruh nilai u , maka koefisien-koefisien untuk setiap nilai n harus sama dengan nol. Sehingga didapatkan untuk masing-masing nilai n:

$$\begin{aligned} u^0 &: \quad 1.2a_2 + (\beta/\alpha - 1)a_0 = 0 \\ u^1 &: \quad 2.3a_3 + (\beta/\alpha - 1 - 2.1)a_1 = 0 \\ u^2 &: \quad 3.4a_4 + (\beta/\alpha - 1 - 2.2)a_2 = 0 \\ u^3 &: \quad 4.5a_5 + (\beta/\alpha - 1 - 2.3)a_3 = 0 \end{aligned} \qquad \text{(B.22)}$$

Terlihat bahwa untuk setiap pangkat ke-n dari u didapatkan hubungan:

$$u^n : \ (n + 1)(n + 2)a_{n+2} + (\beta/\alpha - 1 - 2n) = 0 \qquad \text{(B.23)}$$

sehingga akan didapatkan hubungan sebagai berikut:

$$a_{n+2} = \frac{(2n + 1 - \beta/\alpha)}{(n + 1)(n + 2)} a_n \qquad \text{(B.24)}$$

Persamaan di atas disebut juga sebagai rumus rekursi (*recursion formula*).

Rumus rekursi di atas dapat digunakan untuk mencari koefisien $a_2, a_4, a_6, ...$ yang dinyatakan dalam a_0 dan koefisien $a_3, a_5, a_7, ...$ dalam a_1. Terlihat bahwa solusi persamaan B.17 akan memiliki dua konstanta sembarang yaitu a_0 dan a_1, yang sesuai karena pers.(B.17) merupakan persamaan diferensial orde kedua. Penyelesaian umum tersebut kemudian disajikan dalam bentuk deret sebagai berikut:

$$f(u) = a_0\left(1 + \frac{a_2}{a_0}u^2 + \frac{a_4}{a_2}\frac{a_2}{a_0}u^4 + \frac{a_6}{a_4}\frac{a_4}{a_2}\frac{a_2}{a_0}u^6 + \ldots\right)$$
$$+a_1\left(u + \frac{a_3}{a_1}u^3 + \frac{a_5}{a_3}\frac{a_3}{a_1}u^5 + \frac{a_7}{a_5}\frac{a_5}{a_3}\frac{a_3}{a_1}u^7 + \ldots\right) \qquad \text{(B.25)}$$

Terlihat bahwa deret pertama merupakan fungsi genap u dan deret kedua adalah fungsi gasal u. Namun dari persamaan di atas juga tampak bahwa untuk sembarang nilai β/α, maka deret tersebut akan memiliki jumlah suku yang tak berhingga. Hal ini tentu saja tidak dapat menghasilkan eigenfungsi yang memenuhi syarat. Eigenfungsi yang memenuhi syarat ini hanya dapat diperoleh jika f merupakan polinomial dengan suku yang berhingga, yaitu apabila deret f berakhir pada nilai n tertentu, sehingga koefisien a_n akan menjadi nol untuk harga n yang lebih tinggi dibanding nilai tertentu tersebut. Dengan demikian ψ akan mendekati nol pada saat $u \to \infty$ karena faktor $e^{-u^2/2}$. Kemudian didapatkan perbandingan a_{n+2}/a_n dengan menggunakan hubungan rekursi di atas:

$$\frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{(2n + 1 - \beta/\alpha)}{(n + 1)(n + 2)} \qquad \text{(B.26)}$$

Dari hubungan tersebut dapat dibuktikan bahwa jika:

$$\frac{\beta}{\alpha} = 2n + 1 \qquad \text{(B.27)}$$

dengan:

$n = 1,3,5,\ldots$ Jika $a_0=0$

$n=0,2,4,\ldots$ Jika $a_1=0$

maka $a_{n+2} = a_{n+4} = a_{n+6} = 0$, seperti yang diharapkan.

Perlu dicatat bahwa pers.(B.27) merupakan deret koefisien saja, yaitu deret n genap yang dimulai dengan a_0 dan deret n gasal yang dimulai dengan a_1. Jika n genap maka a_1=0 dan hanya pangkat u genap muncul pada polinomial. Jika n gasal maka a_0=0 dan hanya pangkat u gasal yang muncul pada polinomial. Maka dapat dikatakan bahwa pers.(B.27) adalah persyaratan yang perlu dan cukup supaya fungsi gelombang nya memiliki penyelesaian yang memenuhi syarat.

Dengan memasukkan nilai dari parameter-parameter β dan α ke dalam pers.(B.27) akan didapatkan:

$$\frac{2mE}{\hbar^2}\frac{\hbar}{2\pi m\nu} = \frac{2E}{2\pi\hbar\nu} = \frac{2E}{h\nu} = 2n+1$$

atau:

$$E = h\nu\left(n + \tfrac{1}{2}\right) \qquad \text{(B.28)}$$

Didapatkan eigennilai untuk tenaga potensial osilator harmonik sederhana berdasarkan Hukum Hooke yang dinyatakan dalam frekuensi vibrasi klasik ν.

Dalam pembahasan mengenai tingkat tenaga vibrasional molekul diatomik maka n dapat diganti dengan v = n = 0,1,2,3,.....yang merupakan bilangan kuantum vibrasional.

LAMPIRAN C

PENJABARAN PENYELESAIAN PERSAMAAN SCHRÖDINGER UNTUK KASUS OSILATOR ANHARMONIK DENGAN FUNGSI POTENSIAL MORSE

Tenaga potensial untuk osilator anharmonik dinyatakan secara empiris oleh P.M. Morse menurut persamaan berikut (Svanberg,1992) :

$$V(r - r_e) = D_e\left[1 - e^{-\alpha(r-r_e)}\right]^2 \tag{C.1}$$

yang disebut Fungsi Morse dengan D_e adalah tenaga disosiasi dan α adalah suatu konstanta yang nilainya berbeda untuk setiap molekul.

Jika fungsi Morse ini disubtistusikan ke dalam persamaan Schrödinger, sehingga persamaannya menjadi:

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - D_e\left(1 - e^{-\alpha(r-r_e)}\right)^2\right]\psi = 0 \tag{C.2}$$

Jika diperkenalkan parameter sebagai berikut:

$$q = \frac{r - r_e}{r_e} \tag{C.3}$$

dan:

$$\frac{dq}{dr} = \frac{1}{r_e} = r_e^{-1} \tag{C.4}$$

sehingga:

$$\frac{d\psi}{dr} = \frac{d\psi}{dq} \cdot \frac{dq}{dr} = \frac{1}{r_e} \frac{d\psi}{dq} \tag{C.5}$$

dan:

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} = \frac{dq}{dr} \frac{d}{dq} \left(\frac{d\psi}{dr} \right) = \frac{1}{r_e^{\ 2}} \frac{d^2\psi}{dq^2} \tag{C.6}$$

sehingga pers. (C.2) menjadi :

$$\frac{1}{r_e^{\ 2}} \frac{d^2\psi}{dq^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[E - D_e \left(1 - e^{-aq}\right)^2 \right] \psi = 0 \tag{C.7}$$

dengan:

$$a = \alpha r_e \tag{C.8}$$

Ruas kanan dan kiri pers. (C.7) kemudian dikalikan dengan r_e^2 sehingga didapatkan:

$$\frac{d^2\psi}{dq^2} + \frac{2\mu r_e^{\ 2}}{\hbar^2} \left[E - D_e \left(1 - e^{-aq}\right)^2 \right] \psi = 0 \tag{C.9}$$

diketahui bahwa:

$$I_e = \mu r_e^{\ 2} \tag{C.10}$$

maka pers.(C.9) berubah menjadi bentuk yang lebih sederhana:

$$\frac{d^2\psi(q)}{dq^2} + \frac{2 I_e}{\hbar^2} \left[E - D_e \left(1 - e^{-aq}\right)^2 \right] \psi = 0 \tag{C.11}$$

Langkah penyelesaian pers.(C.11) dimulai dengan memperkenalkan variabel baru yaitu :

$$y = e^{-aq}$$

sehingga persamaan tersebut berubah menjadi:

$$\frac{d^2\psi}{dy^2} + \frac{1}{y}\frac{d\psi}{dy} + \frac{2I_e}{a^2\hbar^2}\left(\frac{E - D_e}{y^2} + \frac{2D_e}{y} - D_e\right)\psi = 0 \qquad \text{(C.12)}$$

Kemudian fungsi ψ dinyatakan dalam bentuk :

$$\psi = \frac{f(y)}{\sqrt{y}} = y^{-\frac{1}{2}} f \qquad \text{(C.13)}$$

kemudian mencari turunan pertama dan kedua dari pers.(C.13) sebagai berikut :

$$\psi' = -\tfrac{1}{2}\, y^{-\frac{3}{2}} f + y^{-\frac{1}{2}} f' \qquad \text{(C.14)}$$

dengan ψ' dan f' menunjukkan turunan pertama ψ dan f, dan:

$$\psi'' = \tfrac{3}{4}\, y^{-\frac{5}{2}} f - y^{-\frac{3}{2}} f' + y^{-\frac{1}{2}} f'' \qquad \text{(C.15)}$$

dengan ψ'' dan f'' menunjukkan turunan kedua ψ dan f.

Subtitusi pers.(C.14) dan (C.15) ke dalam pers.(C.12) menghasilkan dan menyederhanakan notasi D_e=D :

$$\Leftrightarrow \psi'' + \frac{1}{y}\psi' + \frac{2I_e}{a^2\hbar^2}\left(\frac{E - D}{y^2} + \frac{2D}{y} - D\right)\psi = 0 \qquad \text{(C.16)}$$

$$\Leftrightarrow \tfrac{3}{4}\, y^{-\frac{5}{2}} f - y^{-\frac{3}{2}} f' + y^{-\frac{1}{2}} f'' + y^{-1}\left(-\tfrac{1}{2}\, y^{-\frac{3}{2}} f + y^{-\frac{1}{2}} f'\right) + \frac{2I_e}{a^2\hbar^2}\left(\frac{E - D}{y^2} + \frac{2D}{y} - D\right)\psi = 0 \qquad \text{(C.16a)}$$

$$\Leftrightarrow \tfrac{1}{4}\, y^{-\frac{5}{2}} f + y^{-\frac{1}{2}} f'' + \frac{2I_e}{a^2\hbar^2}\left(\frac{E - D}{y^2} + \frac{2D}{y} - D\right)\psi = 0 \qquad \text{(C.16b)}$$

dengan mengingat pers.(C.13), maka:

$$\Leftrightarrow y^{-\frac{1}{2}}\left(\tfrac{1}{4}\, y^{-2} f + f''\right) + \frac{2I_e}{a^2\hbar^2}\left(\frac{E - D}{y^2} + \frac{2D}{y} - D\right) y^{-\frac{1}{2}} f = 0 \qquad \text{(C.16c)}$$

pers.(C.16c) dibagi dengan $y^{-\frac{1}{2}}$ sehingga didapatkan:

$$\Leftrightarrow f'' + \tfrac{1}{4}\, y^{-2} f + \frac{2I_e}{a^2\hbar^2}\left(\frac{E-D}{y^2} + \frac{2D}{y} - D\right) f = 0 \qquad \text{(C.16d)}$$

$$\Leftrightarrow f'' + \left[\frac{1}{4y^2} + \frac{2I_e}{a^2\hbar^2}\left(\frac{E-D}{y^2} + \frac{2D}{y} - D\right)\right] f = 0 \qquad \text{(C.16e)}$$

$$\Leftrightarrow f'' + \left[\frac{2I_e}{a^2\hbar^2}\left(\frac{E-D}{y^2} + \frac{a^2\hbar^2}{8I_e y^2} + \frac{2D}{y} - D\right)\right] f = 0 \qquad \text{(C.16f)}$$

$$\Leftrightarrow f'' + \left[\frac{2I_e}{\hbar^2}\left(\frac{E-D}{a^2y^2} + \frac{\hbar^2}{8I_e y^2} + \frac{2D}{a^2 y} - \frac{D}{a^2}\right)\right] f = 0 \qquad \text{(C.16g)}$$

Jika diperkenalkan :

$$\lambda^2 = \frac{2I_e}{\hbar^2} \qquad \text{(C.17)}$$

pers.(C.16g) menjadi :

$$\Leftrightarrow f'' + \left[\lambda^2\left(\frac{E-D}{a^2y^2} + \frac{1}{4\lambda^2}\frac{1}{y^2} + \frac{2D}{a^2 y} - \frac{D}{a^2}\right)\right] f = 0 \qquad \text{(C.16h)}$$

$$\Leftrightarrow f'' + \left\{\lambda^2\left[\left(\frac{E-D}{a^2} + \frac{1}{4\lambda^2}\right)\frac{1}{y^2} + \frac{2D}{a^2 y} - \frac{D}{a^2}\right]\right\} f = 0 \qquad \text{(C.16i)}$$

dan diketahui :

$$Q = \frac{E-D}{a^2} + \frac{1}{4\lambda^2} \qquad \text{(C.18)}$$

didapatkan bentuk yang lebih sederhana untuk pers.(C.12) :

$$f'' + \lambda^2\left(\frac{Q}{y^2} + \frac{2D}{a^2 y} - \frac{D}{a^2}\right) f = 0 \qquad \text{(C.19)}$$

Langkah selanjutnya adalah mencari penyelesaian asimptotik pers.(C.19) untuk nilai y yang sangat besar. Pada pers.(C.19) tampak bahwa untuk nilai $y \to \infty$ maka suku-suku dengan penyebut y dapat diabaikan, sehingga persamaan tersebut berubah menjadi:

$$f'' - D\frac{\lambda^2}{a^2}f = 0 \qquad \text{(C.20)}$$

yang merupakan persamaan differensial orde dua. Penyelesaian umum persamaan ini kemudian dapat dilihat seperti pada kasus osilator harmonik yaitu:

$$f = Ae^{-\beta y} + Be^{\beta y} \qquad \text{(C.21)}$$

dengan : $$\beta^2 = \frac{\lambda^2}{a^2}D \qquad \text{(C.22)}$$

Analog dengan osilator harmonik maka suku kedua harus sama dengan nol untuk memenuhi syarat keterhinggaan fungsi f di seluruh daerah jangkauan y. Sehingga pers.(C.21) dapat disederhanakan kembali menjadi:

$$f(y) = Ae^{-\beta y} \qquad \text{(C.23)}$$

Langkah selanjutnya adalah mencari penyelesaian fungsi f dalam bentuk:

$$f(y) = Ae^{-\beta y}C(y) \qquad \text{(C.24)}$$

dengan $C(y)$ adalah fungsi yang dicari penyelesaiannya untuk penyelesaian fungsi f.

Dengan menghitung turunan pertama dan kedua dari f, memasukkannya ke dalam pers.(C.19) dan kemudian membaginya dengan $Ae^{-\beta y}$, akan didapatkan bentuk sebagai berikut:

$$C'' - 2\beta C' + \lambda^2\left(\frac{Q}{y^2} + \frac{2D}{a^2 y}\right)C = 0 \qquad \text{(C.25)}$$

Analog dengan penyelesaian untuk kasus osilator harmonik maka penyelesaian untuk C akan berbentuk deret pangkat yang dinyatakan dalam bentuk :

$$C = \sum_n b_n y^{k+n} \tag{C.26}$$

kemudian mencari turunan pertama dan kedua pers.(C.26) didapatkan:

$$C' = \sum (k+n) b_n y^{k+n-1} \tag{C.27}$$

$$C'' = \sum (k+n)(k+n-1) b_n y^{k+n-2} \tag{C.28}$$

dan dimasukkan ke dalam pers.(C.25)akan didapatkan:

$$\Leftrightarrow \sum_n b_n (k+n)(k+n-1) y^{k+n-2} - 2\beta \sum_n b_n (k+n) y^{k+n-1} + \lambda^2 \left(\frac{Q}{y^2} + \frac{2D}{a^2 y} \right) \sum b_n y^{k+n} = 0 \tag{C.29a}$$

$$\Leftrightarrow \sum_n b_n (k+n)(k+n-1) y^{k+n-2} - 2\beta \sum_n b_n (k+n) y^{k+n-1} + \lambda^2 Q \sum b_n \frac{y^{k+n}}{y^2} + 2 \frac{\lambda^2}{a^2} D \sum b_n \frac{y^{k+n}}{y} = 0 \tag{C.29b}$$

dengan mengingat pers.(C.22) maka pers.(C.29b) berubah menjadi:

$$\Leftrightarrow \sum_n b_n (k+n)(k+n-1) y^{k+n-2} - 2\beta \sum_n b_n (k+n) y^{k+n-1} + 2\beta^2 \sum_n b_n y^{k+n-1} + \lambda^2 Q \sum_n b_n y^{k+n-2} = 0 \tag{C.29c}$$

kemudian dengan menyamakan suku-suku dalam pers.(C.29c) tersebut dalam bentuk y^{k+n-1} sebagai berikut:

$$\Leftrightarrow \sum_n b_{n+1} [k+(n+1)][k+(n+1)-1] y^{k+(n+1)-2} - 2\beta \sum_n b_n (k+n) y^{k+n-1} + 2\beta^2 \sum_n b_n y^{k+n-1} + \lambda^2 Q \sum_n b_{n+1} y^{k+(n+1)-2} = 0$$

.....(C.29d)

$$\Leftrightarrow \sum_n b_{n+1}(k+n+1)(k+n)y^{k+n-1} - 2\beta\sum_n b_n(k+n)y^{k+n-1} + 2\beta^2\sum_n b_n y^{k+n-1} + \lambda^2 Q\sum_n b_{n+1}y^{k+n-1} = 0 \quad \text{(C.29e)}$$

Supaya persamaan ini berlaku untuk semua nilai y maka koefisien deret tersebut harus bernilai nol untuk setiap nilai y sehingga :

$$\left[(k+n-1)(k+n) + \lambda^2 Q\right]b_{n+1} + \left[2\beta^2 - 2\beta(k+n)\right]b_n = 0 \quad \text{(C.29f)}$$

maka didapatkan hubungan rekursi untuk koefisien-koefisien polinomial tersebut yang dinyatakan dalam bentuk :

$$\left[(k+n+1)(k+n) + \lambda^2 Q\right]b_{n+1} = \left[2\beta(k+n) - 2\beta^2\right]b_n \quad \text{(C.30)}$$

Untuk memenuhi syarat keterhinggaan polinomial C maka ditetapkan syarat batas b_0=0 dan b_{v+2}=0 sehingga dari hubungan rekursi di atas didapatkan:

1. Jika $b_0 = 0 \rightarrow b_n = 0$, untuk $n = 0$, maka subtitusi ke pers.(C.30) didapatkan:

$$\Leftrightarrow \left[(k+0+1)(k+0) + \lambda^2 Q\right]b_{0+1} = 0 \quad \text{(C.31a)}$$

karena $b_{0+1} = b_1 \neq 0$, maka :

$$\Leftrightarrow k(k+1) + \lambda^2 Q = 0$$
$$\Leftrightarrow k(k+1) = -\lambda^2 Q \quad \text{(C.31b)}$$

2. Jika $b_{v+2} = 0 \rightarrow b_{n+1} = 0$, untuk $n+1 = v+2$, sehingga $n = v+1$, maka subtitusi ke persamaan rekursi (C.30) menghasilkan :

$$0 = \left[2\beta(k+(v+1)) - 2\beta^2\right]b_{v+1} \quad \text{(C.32a)}$$

karena $b_{v+1} \neq 0$, maka :

$$\Leftrightarrow 2\beta(k + v + 1) - 2\beta^2 = 0$$

$$\Leftrightarrow 2\beta(k + v + 1) = 2\beta^2 \qquad (C.32b)$$

$$\Leftrightarrow k + v + 1 = \beta$$

Langkah selanjutnya adalah mensubtitusi nilai k pada pers.(C.32b) ke dalam pers.(C.31b) sebagai berikut :

$$\Leftrightarrow [\beta - (v + 1)]^2 + \beta - (v + 1) = -\lambda^2 Q \qquad (C.33a)$$

$$\Leftrightarrow \beta^2 - 2\beta(v + 1) + (v + 1)^2 + \beta - (v + 1) = -\lambda^2 Q \qquad (C.33b)$$

$$\Leftrightarrow \beta^2 - 2\beta v - 2\beta + v^2 + 2v + 1 + \beta - v - 1 = -\lambda^2 Q \qquad (C.33c)$$

$$\Leftrightarrow \beta^2 - 2\beta v - \beta + v^2 + v = -\lambda^2 Q \qquad (C.33d)$$

$$\Leftrightarrow \beta^2 - 2\beta(v + \tfrac{1}{2}) + v(v + 1) = -\lambda^2 Q \qquad (C.33e)$$

kemudian dengan mensubtitusikan nilai-nilai λ, Q dan β^2 dari pers. (C.17),(C.18) dan (C.22) berturut-turut didapatkan:

$$\Leftrightarrow \left(\frac{\lambda^2}{a^2}\right)D - 2\beta(v + \tfrac{1}{2}) + v(v + 1) = -\lambda^2\left(\frac{E - D}{a^2} + \frac{1}{4\lambda^2}\right) \qquad (C.33f)$$

$$\Leftrightarrow \left(\frac{\lambda^2}{a^2}\right)D - \left(\frac{\lambda^2}{a^2}\right)D - 2\beta(v + \tfrac{1}{2}) + v(v + 1) + \tfrac{1}{4} = \left(-\frac{\lambda^2}{a^2}\right)E \qquad (C.33g)$$

$$\Leftrightarrow E = 2\beta\left(\frac{a^2}{\lambda^2}\right)(v + \tfrac{1}{2}) - \left(\frac{a^2}{\lambda^2}\right)(v^2 + v + \tfrac{1}{4}) \qquad (C.33h)$$

$$E(v) = 2\beta \frac{a^2}{\lambda^2}(v + \tfrac{1}{2}) - \frac{a^2}{\lambda^2}(v + \tfrac{1}{2})^2 \qquad (C.33i)$$

Dengan memasukkan nilai λ dan memperkenalkan parameter baru yaitu(Kondratyev):

$$x_e = \frac{h\nu}{4D} \qquad (C.34)$$

dengan mengingat (Kondratyev):

$$\nu = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{\mu}} = \frac{a}{2\pi}\sqrt{\frac{2D}{I_e}} \tag{C.35}$$

maka didapatkan :

$$E(\mathrm{v}) = h\nu(\mathrm{v} + \tfrac{1}{2}) - h\nu x_e(\mathrm{v} + \tfrac{1}{2})^2 \tag{C.36}$$

dengan v=0,1,2,3..... adalah bilangan kuantum vibrasional seperti pada osilator harmonik. Pers.(C.36) menunjukkan tingkat-tingkat tenaga yang diijinkan untuk osilator anharmonik dengan pendekatan empiris yang dilakukan Morse. Parameter x_e disebut sebagai konstanta anharmonisitas (*anharmonicity constant*) dengan $\nu x_e \ll \nu$.

Jika pers.(C.36) dinyatakan dalam satuan cm^{-1} maka didapatkan nilai *term* untuk osilator anharmonik berikut ini(Herzberg,1950):

$$G(\mathrm{v}) = \varpi(\mathrm{v} + \tfrac{1}{2}) - \varpi x_e(\mathrm{v} + \tfrac{1}{2})^2 \tag{C.37}$$

dengan ϖ adalah bilangan gelombang (*wavenumber*) molekul.