BAB II

DASAR TEORI

2.1 Mekanika Kuantum Mengikuti Formulasi Matriks

Mekanika kuantum yang dikenal sekarang ini, pada mulanya muncul dari dua pendekatan matematika yang berbeda. Yang pertama dikenal sebagai mekanika gelombang dari Schrödinger, menekankan pada keadaan-keadaan kuantum yang dicirikan oleh fungsi gelombang ψ (huruf Yunani *psi*) yang merupakan prasyarat dari beberapa sifat kediskritan bagi fenomena atom. Fungsi gelombang ψ merupakan kuantitas variabel yang memberi karakteristik gelombang de Broglie. Harga fungsi gelombang yang berkaitan dengan sebuah benda bergerak pada suatu titik tertentu dalam ruang pada saat t berpautan dengan peluang untuk mendapatkan benda tersebut ditempat tersebut pada saat t. Yang kedua dikenal sebagai mekanika matriks dari Heisenberg telah mengambil pemahaman peralihan-peralihan kuantum yang diskrit sebagai bentuk penting fenomena atom yang harus dijabarkan secara matematika yaitu dengan teori aljabar matriks.

Kesetaraan formulasi Schrödinger dan Heisenberg, yaitu mekanika gelombang dan mekanika matriks bergantung pada sifat kelinearan teori kuantum. Fungsi gelombang Schrödinger diwakili oleh suatu vektor dan terapan operator pada vektor ini dianggap menjalankan suatu transformasi vektor untuk menjadi vektor lain. Transformasi-transformasi dalam hubungan-hubungan linear

antara vektor boleh diwakilkan dengan menggunakan matriks. Jadi operator teori Schrödinger diwakili oleh matriks dan fungsi gelombang ψ diwakili oleh vektor.

2.2 Notasi Bra dan Ket

Perkalian dalam (inner product) adalah suatu fungsi skalar dari dua vektor pada suatu waktu yang dinotasikan dengan :

$$\langle V_i | V_j \rangle \quad \text{(Shankar, 1986, h. 7)} \qquad (2.1)$$

Lambang "<" dan ">" masing-masing dikenal sebagai *"bra"* dan *"ket"* Dirac yang merupakan potongan kata Inggris *"bracket"*. Ket adalah lampiran mengenai data suatu pengukuran dengan sebuah garis vertikal dan sebuah garis bersudut bracket. Ket adalah suatu catatan katalog mengenai suatu dokumen deskriptif yang memuat hasil pengukuran. Ket mengharuskan kondisi dari sistem sebagai suatu pendekatan pengukuran. Lambang bracket diatas biasa digunakan dalam syarat ortonormalitas diantara vektor-vektor basis yang ditentukan oleh

$$\langle U_m | U_n \rangle = \int_V U_m \quad U_n \, dV = \delta_{mn} \quad \text{(Renreng, 1990, h. 254)} \qquad (2.2)$$

Dengan " " adalah tanda *degger* sebagai pengganti dari tanda vektor (memakai tanda panah atau ditulis tebal) dan tanda bintang bagi konjugasi kompleks.

Simbul δ_{mn} dinamakan delta kronecker sebagai syarat ortonormalitas yang memenuhi

$$\delta_{mn} \begin{cases} 1 \text{ untuk } m = n \\ 0 \text{ untuk } m \neq n \end{cases} \quad \text{(Renreng,1990,h. 253)} \qquad (2.3)$$

Besar (norm) suatu vektor $\vec{\psi}_a$, dimana $\vec{\psi}_a = \sum_i C_i \vec{U}_i$ didefinisikan sebagai

$$|\vec{\psi}_a| = \langle\psi_a|\psi_a\rangle^{1/2} = (\sum_i |Ci|^2)^{1/2} \quad \text{(Hussin, 1988, h. 230)} \qquad (2.4)$$

Jika terhadap vektor $\vec{\psi}_a$ diberikan suatu fungsi vektor $\vec{\psi}_b$

$$\vec{\psi}_b = \frac{e^{i\gamma}}{\langle \psi | \psi \rangle^{1/2}} \vec{\psi}_a \qquad (2.5)$$

Maka

$$\langle \psi_b|\psi_b \rangle = e^{i\gamma} \; e^{-i\gamma} \frac{1}{\langle \psi_a|\psi_a \rangle} \langle \psi_a|\psi_a \rangle = 1$$

Suatu vektor dengan norma unit dikatakan tenormalisasi dan membentuk $\vec{\psi}_b$ daripada $\vec{\psi}_a$ seperti yang ditunjukkan, disebut *penormalisasian*. (Hussin,1988,h. 230)

Dua vektor adalah ortogonal jika produk dalamnya berharga nol. (Shankar,1986,h. 8)

Sebuah set vektor $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \ldots, \vec{e}_n\}$ dikatakan ortonormal apabila bersifat ortogonal dan normal (dipenuhi nilai $|\vec{e}_i| = 1$) diantara anggota-anggota basis yang ditentukan oleh :

$$\langle e_i | e_j \rangle = \delta_{ij} \quad \text{(Shankar,1986,h. 8)} \qquad (2.6)$$

Jika x memainkan peranan didalam ket $|x\rangle$, maka x tersebut menandakan suatu tingkat posisi. Didalam bahasa posisi (language of position), tingkat $|\psi\rangle$, dapat dilambangkan didalam bahasa posisi $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$. Demikian pula fungsi gelombang yang menunjukkan suatu tingkat (state) $|p\rangle$ dari

momentum dapat dilambangkan dengan $\langle x|p\rangle = \psi_p(x)$. Suatu tingkat (state) adalah suatu ket, namun tidak semua ket adalah tingkat. Suatu ket $|\psi\rangle$ atau bra $\langle x|$ adalah merupakan kuantitas vektor, sedangkan lambang bracket $\langle x|\psi\rangle$ menandakan kuantitas skalar.

2.3 Transformasi Linear - Operator

Definisi operator secara matematis ialah sesuatu yang dapat mematikan setiap elemen (anggota) dari suatu ruang ke ruang .(Renreng,1990,h. 257)

Suatu transformasi mengikuti ruang vektor adalah suatu pemetaan yang menghubungkan secara unik setiap vektor $\vec{\psi}_a$ dengan vektor lain $\hat{A}\,\vec{\psi}_a$.

Vektor $\vec{\psi}_a$ ditransformasikan kepada vektor $\vec{\varphi}_b = \hat{A}\,\vec{\varphi}_a$ oleh operator $\hat{A}$ dinamakan linier jika memenuhi syarat :

$$\hat{A}\,(f_1 + f_2) = \hat{A}f_1 + \hat{A}f_2$$

$$\hat{A}\,(\lambda f_1) = \lambda(\hat{A}f_1) \qquad (2.7)$$

dengan f_1 dan f_2 adalah fungsi sembarang dan λ adalah konstanta kompleks. Transformasi $\hat{A}$ dikatakan linier jika ia memenuhi syarat :

$$\hat{A}\,(\lambda\vec{\psi}_a + \mu\vec{\psi}_b) = \lambda\,(\hat{A}\vec{\psi}_a) + \mu(\hat{A}\vec{\psi}_b) \qquad (2.8)$$

bagi sembarang vektor $\vec{\psi}_a$ dan $\vec{\psi}_b$ dan sembarang konstanta λ dan μ.

Jika A dan B adalah dua operator kuantum komutator dari dua operator tersebut dituliskan sebagai

$$[A,B] = (AB - BA) \qquad (2.9)$$

Dua operator A dan B commut bila harga komutatornya nol.

2.4 Hubungan Sifat-sifat Matriks dan Notasi Bra-Ket Dirac

Matriks adalah suatu sajian matematis dari suatu besaran berkomponen yang indeknya ganda dengan elemen - elemen tersusun dalam suatu deretan baris dan kolom sehingga berbentuk empat persegi panjang. Kalau suatu elemen dari suatu matrik A kita tandai dengan a_{ij}, dengan i menyatakan indeks baris dan j sebagai indeks kolom, maka sajiannya dapat ditulis sebagai

$$A = (a_{ij}) = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots\cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots\cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots\cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \qquad (2.10)$$

Produk skalar antara vektor nyata $\vec{a}$ dan $\vec{b}$ disajikan sebagai

$$\langle a|b\rangle = \vec{a}\,.\vec{b} = (a_1 \quad a_2 \;\cdots\cdots a_n)\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

$$= a_1b_1 + a_2b_2 + \cdots\cdots + a_nb_n \qquad (2.11)$$

Produk luar antara $\vec{a}$ dan $\vec{b}$, didefinisikan sebagai :

$|a\rangle\langle b| = \vec{a}\,\vec{b}$ (komposisi tanpa tanda)

$$= \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_n \end{bmatrix}\begin{bmatrix} b_1 & b_2 & \cdots b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1b_1 & a_1b_2 \cdots\cdots & a_1b_n \\ a_2b_1 & a_2b_2 \cdots\cdots & a_2b_n \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ a_nb_1 & a_nb_2 \cdots\cdots & a_nb_n \end{bmatrix}$$

(2.12)

Kalau $|a\rangle\langle b|$ kita operasikan terhadap $|c\rangle$ didapatkan :

$$|a\rangle\langle b|c\rangle = \langle b|c\rangle\,|a\rangle \qquad (2.13)$$

Yang menunjukkan bahwa $|\ a\ >\ <\ b\ |$ berperan sebagai operator.(Renreng,1990,h.262-264)

Suatu vektor basis juga dapat dituliskan sebagai

$$|e_i> \equiv |\ i\ > \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \qquad (2.14a)$$

dan

$$<e_i\ | \ \equiv\ <\ i\ | \ \Leftrightarrow\ (0,0,\ldots,1,\ldots,0) \qquad (2.14b)$$

Sehingga ket dan bra ψ_a dapat dituliskan sebagai

$$|\ a\ > = \sum\ a_i\ |\ i\ > \qquad (2.15a)$$

dan

$$<\ a\ | = \sum\ a_i^{*} <\ i\ | \ \text{(Shankar,1986,h. 15)} \qquad (2.15b)$$

Apabila (2.15a) dikalikan dengan vektor basis $<j|$ dari kiri diperoleh :

$$<j|a> = <j\ |\ \sum_i\ a_i\ |\ i\ > = \sum_i\ <j\ |\ i\ >\ a_i$$

$$= \sum_i \delta_{ij} a_i = a_j$$

Sehingga (2.15a) dapat dituliskan sebagai :

$$|a> = \sum_i <\ i|a\ >|i\ > = \sum_i\ |i\ ><i\ |a> \qquad (2.16a)$$

Demikian pula (2.15b) dapat dituliskan sebagai :

$$<a| = \sum_i <a|\ i\ ><\ i\ | \ \text{(Shankar,1986,h. 17)} \qquad (2.16b)$$

$\sum_i |i\ ><\ i|$ dinamakan operator identitas I, dan $|\ i\ ><\ i\ |$ dinamakan operator proyeksi P_i.(Shankar,1986,h. 25)

Bila hasil operasi H terhadap basis $\vec{\psi}_i$ dapat dituliskan

sebagai

$$H|i\rangle = \sum_j H_{ji} \; |j\rangle \qquad (2.17)$$

Dengan indeks ganda H_{ji} menunjukkan hubungan antara komponen ke i dengan ke j basis - basis dalam R_H terhadap operasi H.

Jika vektor $|a\rangle$ ditransformasikan kepada vektor $|b\rangle$ oleh operator linier H melalui persamaan :

$$|b\rangle = H|a\rangle \qquad (2.18)$$

Maka dengan memakai definisi (2.15a), persamaan (2.18) menjadi

$$\sum_j b_j \; |j\rangle = H \sum_i a_i |i\rangle = \sum_i a_i H \; | \; i \rangle$$

$$\sum_j b_j \; |j\rangle = \sum_i \sum_j a_i \; H_{ji} | \; i \rangle$$

Sehingga diperoleh hubungan

$$b_j = \sum_i a_i H_{ji} \qquad (2.19)$$

Persamaan (2.19) ini tak lain adalah persamaan linier yang melukiskan transformasi komponen a_i menjadi b_j yang dihubungkan oleh suatu koefisien H_{ji} yang berindeks ganda. Koefisien ini tak lain adalah merupakan elemen dari suatu matriks yang berbentuk bujur sangkar, yang dapat dituliskan sebagai :

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ b_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots\cdots\cdots & H_{1i} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots\cdots\cdots & H_{2i} \\ \vdots & \vdots & & \\ \vdots & \vdots & & \\ H_{i1} & H_{i2} & \cdots\cdots\cdots & H_{ii} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ a_i \end{pmatrix} . \qquad (2.20)$$

Bila (2.17) dikalikan dengan basis bra $\langle k|$ dari kiri dalam lambang bra dan ket, maka diperoleh

$$\langle k|H|i\rangle = \sum_j H_{ji} \langle k|j\rangle = H_{ki} \qquad (2.21)$$

Operator H telah memperoleh sajiannya dalam bentuk matriks. Dengan demikian setiap operator dalam masalah nilai eigen akan selalu dapat disajikan sebagai matriks. Penyeteraan perkalian matriks dan perkalian operator dapat dicari melalui aplikasi persamaan operator identitas I

$$\begin{aligned}\left(AB\right)_{ij} &= \langle i|AB|j\rangle = \langle i|A\ I\ B|j\rangle \\ &= \sum_k \langle i|A|k\rangle\langle k|B|j\rangle \\ &= \sum_k A_{ik}B_{kj} \quad \text{(Hussin,1988,h. 244)} \qquad (2.22)\end{aligned}$$

Bila didefinisikan operator C = AB, maka persamaan (2.22) apabila dijabarkan secara matriks adalah :

$$\begin{pmatrix} \langle i|A|k\rangle \longrightarrow \\ \downarrow \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle k|B|j\rangle \longrightarrow \\ \downarrow \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle i|AB|j\rangle \longrightarrow \\ \downarrow \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \cdots\cdots & A_{1k} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{i1} & A_{i2} \cdots\cdots & A_{ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} \cdots\cdots & B_{1j} \\ B_{21} \cdots\cdots & B_{2j} \\ \vdots & \vdots \\ B_{k1} \cdots\cdots & B_{kj} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} \cdots\cdots & C_{1j} \\ \vdots & \vdots \\ C_{i1} \cdots\cdots & C_{ij} \end{pmatrix} \qquad (2.23)$$

Beberapa bentuk kesamaan antara notasi dirac dan aljabar matriks diperlihatkan dibawah ini :

Notasi Dirac	Aljabar Matriks	
$\langle\lambda\|m\rangle = \langle m\|\lambda\rangle^*$	$U^{-1} = U$	
$\sum_m \langle\lambda_u\|m\rangle\langle m\|\lambda_v\rangle = \delta_{uv}$	$U^{-1}U = I$	(2.24)
$\langle m\|A\|\lambda\rangle = \lambda\langle m\|A\rangle$	$AU = U \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}$ (Chester,1987,h. 172)	

Operator identitas I dapat digunakan untuk menghitung bracket $\langle p|\psi\rangle$:

$$\langle p|\psi\rangle = \sum_x \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle = \sum_x \langle x|p\rangle^* \langle x|\psi\rangle$$

$$= \int dx \langle x|p\rangle^* \langle x|\psi\rangle \quad \text{(Chester,1987,h.56)} \qquad (2.25)$$

dengan

$$\sum_x = \int dx \quad \text{(Chester,1987,h.28)} \qquad (2.26)$$

yang menunjukkan bahwa integral suatu variabel mempunyai arti sebagai penjumlahan variabel tersebut.

Persamaan (2.21) apabila dikenakan operator identitas I menjadi :

$$\langle k|H|i\rangle = \sum_x \langle k|x\rangle\langle x|H|i\rangle = \sum_x \langle x|k\rangle^* H\langle x|i\rangle$$

$$= \int dx\, \psi_k^*(x)\, H\, \psi_i(x) \qquad (2.27)$$

yang menunjukkan :

$$\langle x|\, H = H\, \langle x| \qquad (2.28)$$

dengan H adalah nilai eigen dari operator H.

Untuk fungsi gelombang dengan tiga buah tingkat momentum murni (pure momentum state) didefinisikan sebagai :

$$\langle x,y,z|p_x,p_y,p_z\rangle = \langle x|p_x\rangle\, \langle y|p_y\rangle\, \langle z|p_z\rangle \qquad (2.29)$$

Dari pembahasan mengenai notasi dirac didalam hubungannya dengan aljabar matriks dan perumusan integral seperti yang telah dibahas diatas, ternyata notasi dirac merupakan suatu cara yang sangat baik untuk menyederhanakan persamaan-persamaan matamatika sehingga terlihat lebih sederhana dan ringkas serta lebih cepat didalam penyelesaian persamaannya.

2.5. Perhitungan Teori Gangguan Tak Bergayut Waktu Untuk Kasus yang Non Degenerasi.

Teori gangguan bertujuan untuk memperoleh nilai eigen dan fungsi eigen sesuatu sistem apabila dikenakan suatu gangguan kecil. Kedua istilah itu berasal dari bahasa Jerman Eigenwert, yang berarti "harga karakteristik yang sesungguhnya", dan Eigen funktion atau "fungsi karakteristik sesungguhnya"(Beiser,1981,h.150) .Nilai eigen merupakan besaran fisis yang dihasilkan akibat operasi suatu operator tertentu yang dikenakan pada suatu fungsi gelombang dari suatu sistem tertentu, sedangkan arti dari fungsi eigen adalah fungsi gelombang yang bersesuaian pada sistem tersebut. Persamaan gelombang Schrödinger diturunkan dari persamaan tenaga partikel atau Hamiltonian H, yang bersifat sebagai operator yang dioperasikan terhadap suatu fungsi gelombang yang melukiskan gerakan gelombang dari partikel. Pada kasus teori gangguan Hamiltonian H dapat dibagi atas dua bagian. H_o adalah bagian Hamiltonian yang agak ringkas bentuknya dan diketahui penyelesaiannya, sementara Hamiltonian tambahannya H^1 yang mengandung masalah-masalah interaksi diantara partikel-partikel yang terlibat didalam gangguan tersebut. H^1 adalah kecil jika dibandingkan dengan H_o, dan koreksi-koreksi kepada fungsi eigen dan nilai eigen yang dihasilkan oleh H^1 adalah kecil juga. Dengan ini H^1 dianggap sebagai suatu gangguan terhadap H_o.

Kemudian ditetapkan notasi U_m dan ϵ_m sebagai fungsi eigen ortonormal dan nilai eigen Hamiltonian tak terganggu H_o yang telah diketahui. Ψ digunakan untuk fungsi gelombang terganggu dan W bagi fungsi tenaga baru.

Persamaan Schrödinger sebelum ada gangguan

$$H_o|m\rangle = \epsilon_m|m\rangle \tag{2.30}$$

Persamaan Schrödinger sesudah ada gangguan

$$H|\psi\rangle = W|\psi\rangle \tag{2.31}$$

dengan

$$H = H_o + \lambda H^1 \quad \text{(Hameka, 1981, h. 218)} \tag{2.32}$$

untuk fungsi ortonormal berlaku

$$\langle U_m|U_k\rangle = \langle m|k\rangle = \delta_{mk} \quad \text{(Yariv, 1982, h. 20)} \tag{2.33}$$

Anggapan bahwa H^1 adalah kecil mencadangkan supaya fungsi eigen dan nilai eigen terganggu dikembangkan sebagai suatu deret pangkat mengikuti nilai H^1. Ini dapat dilaksanakan dengan menggunakan suatu parameter λ, yang nilainya diantara nol dan satu ($0 < \lambda < 1$) yang "menghidupkan" gangguan ($\lambda = 1$) atau "mematikan" ($\lambda = 0$), agar orde pangkat parameter λ sejalan dengan orde pangkat dalam perhitungan gangguan.

Fungsi gelombang ψ dan fungsi tenaga W dapat diungkapkan sebagai deret pangkat mengikuti λ.

$$|\psi\rangle = |\psi_o\rangle + \sum_{i=1}^{\infty} \lambda^i |\psi_i\rangle$$

$$W = W_o + \sum_{i=1}^{\infty} \lambda^i W_i \quad \text{(Yariv, 1982, h. 116)} \tag{2.34}$$

Substitusikan persamaan (2.34) dan (2.32) ke persamaan (2.31) menghasilkan :

$$(H_o + \lambda H^1)\,(|\psi_o\rangle + \sum_{i=1}^{\sim} \lambda^i |\psi_i\rangle) = (W_o + \sum_{i=1}^{\sim} \lambda^i |W_i) \quad x$$

$$(|\psi_o\rangle + \sum_{i=1}^{\sim} \lambda^i |\psi_i\rangle) \qquad (2.35)$$

Dengan menyamakan koefisien untuk $\lambda^o, \lambda, \lambda^2, \ldots, \lambda^n$ untuk kedua ruas persamaan diatas diperoleh :

$$H_o|\psi_o\rangle = W_o|\psi_o\rangle$$

$$H_o|\psi_1\rangle + H^1|\psi_o\rangle = W_o|\psi_1\rangle + W_1|\psi_o\rangle$$

$$H_o|\psi_2\rangle + H^1|\psi_1\rangle = W_o|\psi_2\rangle + W_1|\psi_1\rangle + W_2|\psi_o\rangle$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

$$H_o|\psi_N\rangle + H^1|\psi_{N-1}\rangle = W_o|\psi_N\rangle + W_1|\psi_{N-1}\rangle + \ldots + W_N|\psi_o\rangle \quad (2.36)$$

Persamaan paling awal dari (2.36) merupakan persamaan Hamiltonian sebelum diganggu atau orde ke nol yang sesuai dengan persamaan (2.30) menurut definisi :

$$|\psi_o\rangle = |m\rangle$$

$$W_o = \epsilon_m \qquad (2.37)$$

Persamaan kedua, ketiga dan seterusnya pada (2.36) untuk orde kesatu, kedua dan seterusnya dapat diselesaikan melalui pengembangan koreksi orde ke satu, kedua dan seterusnya bagi fungsi gelombang dalam fungsi eigen tak terganggu U_b, U_c, ..., U_n

$$|\psi_1\rangle = \sum_b a_b^{(1)} |b\rangle$$

$$|\psi_2\rangle = \sum_c a_c^{(2)} |c\rangle$$

$$\vdots \qquad \vdots$$

$$|\psi_{N-1}\rangle = \sum_l a_l^{(N-1)} |l\rangle$$

$$|\psi_N\rangle = \sum_n a_n^{(N)} |n\rangle \tag{2.38}$$

Indeks orde ke-N dapat dikorespendensikan dengan subscript sebagai

$$\begin{array}{cccccccc} 1 & 2 & 3 & \ldots\ldots & N-2 & N-1 & N \\ | & | & | & & | & | & | \\ b & c & d & & j & l & n \end{array} \tag{2.39}$$

Bila (2.38) disubtitusikan ke dalam (2.36) diperoleh

$$H_o|m\rangle = \epsilon_m|m\rangle$$

$$\sum_b a_b^{(1)}\epsilon_b|b\rangle + H^1|m\rangle = \epsilon_m \sum_b a_b^{(1)}|b\rangle + W_1|m\rangle$$

$$\sum_c a_c^{(N)}\epsilon_c|c\rangle + H^1 \sum_b a_b^{(1)}|b\rangle = \epsilon_m \sum_c a_c^{(2)}|c\rangle + W_1 \sum_b a_b^{(1)}|b\rangle + W_2|m\rangle$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

$$\sum_n a_n^{(N)}\epsilon_n|n\rangle + H^1 \sum_l a_l^{(N-1)}|l\rangle = \epsilon_m \sum_n a_n^{(N)}|n\rangle$$

$$W_1 \sum_l a_l^{(N-1)}|l\rangle + \ldots + W_{N-1} \sum_b a_b^{(1)}|b\rangle + W_N|m\rangle \tag{2.40}$$

Bila kedua ruas persamaan diatas dikalikan dengan bra $\langle k|$ dari kiri diperoleh :

$$\epsilon_k \; a_k^{(1)} + H^1_{km} = \epsilon_m \; a_k^{(1)} + W_1 \delta_{km}$$

$$\epsilon_k \; a_k^{(2)} + \sum_b a_b^{(1)} H^1_{kb} = \epsilon_m \; a_k^{(2)} + W_1 a_k^{(1)} + W_2 \delta_{km}$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

$$\epsilon_k \; a_k^{(N)} + \sum_l a_l^{(N-1)} H^1_{kl} = \epsilon_m \; a_k^{(N)} + W_1 a_k^{(N-1)} + \ldots +$$

$$W_{N-1} a_k^{(1)} + W_N \delta_{km} \qquad (2.41)$$

Untuk persamaan pertama dari (2.41), dengan $k \neq m$ diperoleh persamaan

$$(\epsilon_m - \epsilon_k) \; a_k^{(1)} = H^1_{km}$$

Untuk mencari nilai $a_m^{(1)}$ dengan mengganti subskript k dengan m, nilainya tak tentu sehingga disimpulkan nilai $a_m^{(1)} = 0$

Untuk persamaan kedua dari (2.41), dengan $k \neq m$ diperoleh persamaan

$$\begin{aligned}(\epsilon_m - \epsilon_k) \; a_k^{(2)} &= \sum_b a_b^{(1)} H^1_{kb} - W_1 a_k^{(1)} \\ &= \sum_b{}' a_b^{(1)} H^1_{kb} + a_m^{(1)} H^1_{km} - W_1 a_k^{(1)} \\ &= \sum_b{}' a_b^{(1)} H^1_{kb} - W_1 a_k^{(1)}\end{aligned}$$

dengan $\sum_b{}'$, yang artinya penjumlahan dengan indeks b itu tidak berlaku untuk b = m.

Jika persamaan (2.41) untuk $k \neq m$ disusun kembali, dengan $\Delta\epsilon_k = \epsilon_m - \epsilon_k$ diperoleh suatu persamaan baru

$$\Delta\epsilon_k \; a_k^{(1)} = H^1_{km}$$

$$\Delta\epsilon_k \; a_k^{(2)} = \sum_b{}' a_b^{(1)} H^1_{kb} - W_1 a_k^{(1)}$$

$$\Delta\epsilon_k \; a_k^{(3)} = \sum_c{}' a_c^{(2)} H^1_{kc} + a_m^{(2)} H^1_{km} - W_1 a_k^{(2)} - W_2 a_k^{(1)}$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

$$\Delta\epsilon_k \; a_k^{(N)} = \sum_l{}' a_l^{(N-1)} H^1_{kl} + a_m^{(N-1)} H^1_{km} - W_1 a_k^{(N-1)}$$

$$- \ldots - W_{N-1} a_k^{(1)} \qquad (2.42)$$

Bila k = m, pada (2.41) diperoleh besaran tenaganya

$$W_1 = H^1_{mm}$$

$$W_2 = \sum_b{}' a_b^{(1)} H^1_{mb}$$

$$W_3 = \sum_c{}' a_c^{(2)} H^1_{mc}$$

$$W_4 = \sum_d{}' a_d^{(3)} H^1_{md} - W_2 a_m^{(2)}$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

$$W_N = \sum_l{}' a_l^{(N-1)} H^1_{ml} - W_2 a_m^{(N-2)} - W_3 a_m^{(N-3)} - \ldots - W_{N-2} a_m^{(2)}$$

$$(2.43)$$

Untuk mencari nilai $a_m^{(N)}$ (N=1,2,...), normalisasikan fungsi gelombang ψ

$$1 = \langle\psi \mid \psi\rangle = (\langle m \mid + \lambda \sum_p \overset{*}{a}{}_p^{(1)} \langle p \mid$$

$$+ \lambda^2 \sum_p \overset{*}{a}{}_p^{(2)} \langle p \mid + \ldots) \times$$

$$(\mid m \rangle + \lambda \sum_s{}' a_s^{(1)} \mid s \rangle + \lambda^2 \sum_s a_s^{(2)} \mid s \rangle + \ldots)$$

Dengan definisi $\langle m|m\rangle = 1$ dan $\langle n|s\rangle = \delta_{ns}$, diperoleh

$$a_m^{(1)} + \overset{*}{a}{}_m^{(1)} = 0$$

$$a_m^{(2)} + \sum_p \overset{*}{a}{}_p^{(1)} a_p^{(1)} + \overset{*}{a}{}_m^{(2)} = 0$$

$$a_m^{(3)} + \sum_p \overset{*}{a}{}_p^{(1)} a_p^{(1)} + \sum_p \overset{*}{a}{}_p^{(2)} a_p^{(1)} + \overset{*}{a}{}_m^{(3)} = 0$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

$$a_m^{(N)} + \sum_p \overset{*}{a}{}_p^{(1)} a_p^{(N-1)} + \sum_p \overset{*}{a}{}_p^{(2)} a_p^{(N-2)} + \ldots +$$

$$\sum_p \overset{*}{a}{}_p^{(N-1)} a_p^{(1)} + \overset{*}{a}{}_m^{(N)} = 0 \qquad (2.44)$$

Sehingga diperoleh

$$a_m^{(1)} = 0$$

$$a_m^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_p{}' \overset{*}{a}{}_p^{(1)} a_p^{(1)} = -\frac{1}{2} \sum_p{}' |a_p^{(1)}|^2$$

$$a_m^{(3)} = -\frac{1}{2} \sum_p{}' (\overset{*}{a}{}_p^{(1)} a_p^{(2)} + \overset{*}{a}{}_p^{(2)} a_p^{(1)})$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

$$a_m^{(N)} = -\frac{1}{2} \sum_p{}' (\overset{*}{a}{}_p^{(1)} a_p^{(N-1)} + \overset{*}{a}{}_p^{(2)} a_p^{(N-2)} + \ldots + \overset{*}{a}{}_p^{(N-1)} a_p^{(1)})$$

$$- \frac{1}{2} (\overset{*}{a}{}_m^{(2)} a_m^{(N-2)} + \ldots + \overset{*}{a}{}_m^{(N-2)} a_m^{(2)}) \qquad (2.45)$$

Dari definisi untuk fungsi gelombang

$$\psi_1 = \sum_k a_k^{(1)} |k\rangle = \sum_k' a_k^{(1)} |k\rangle$$

$$\psi_2 = \sum_k a_k^{(2)} |k\rangle = \sum_k' a_k^{(2)} |k\rangle + a_m^{(2)} |m\rangle$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

$$\psi_N = \sum_k' a_k^{(N)} |k\rangle + a_m^{(N)} |m\rangle \tag{2.46}$$

dengan memasukkan nilai $a_k^{(N)}$ dan $a_m^{(N)}$ dari persamaan (2.42) dan (2.45) diperoleh perumusan untuk fungsi gelombang terganggu :

$$\psi_1 = \sum_k' \frac{H^1_{km}}{\Delta \epsilon_k} |k\rangle$$

$$\psi_2 = \sum_k' \left(\sum_b' \frac{a_b^{(1)} H^1_{kb}}{\Delta \epsilon_k} - \frac{W_1 a_k^{(1)}}{\Delta \epsilon_k} \right) |k\rangle - \frac{1}{2} \sum_{k=p}' |a_p^{(1)}|^2 |m\rangle$$

$$\psi_3 = \sum_k' \left(\sum_c' \frac{a_c^{(2)} H^1_{kc}}{\Delta \epsilon_k} + \frac{(a_m^{(1)}; b) H^1_{km}}{\Delta\epsilon_k} - \frac{W_1 a_k^{(2)}}{\Delta\epsilon_k} - \frac{W_2 a_k^{(1)}}{\Delta\epsilon_k} \right) |k\rangle - \frac{1}{2} \sum_{k=p}' \left(\overset{*}{a}_p^{(1)} a_p^{(2)} + \overset{*}{a}_p^{(2)} a_p^{(1)} \right) |m\rangle$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

$$\psi_N = \sum_k' \left(\sum_l' \frac{a_l^{(N-1)} H^1_{kl}}{\Delta \epsilon_k} + \frac{(a_m^{(N-1)}; j) H^1_{km}}{\Delta\epsilon_k} - \frac{W_1 a_k^{(N-1)}}{\Delta\epsilon_k} - \frac{W_{N-1} a_k^{(1)}}{\Delta\epsilon_k} \right) |k\rangle$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{k=p}' \left[\overset{*}{a}_p^{(1)} a_p^{(N-1)} + \ldots + \overset{*}{a}_p^{(N-1)} a_p^{(1)} \right] |m\rangle$$

$$-\frac{1}{2}\left[\overset{*}{a}_m^{(2)} a_m^{(N-2)} + \ldots + \overset{*}{a}_m^{(N-2)} a_m^{(2)} \right] |m\rangle \quad (2.47)$$

Keterangan,

1. $\sum_{k=p}'$ artinya notasi p diganti dengan k, untuk $p \neq m$
2. $a_m^{(2)}$; b artinya notasi p diganti dengan b, khusus untuk notasi dalam perumusan $a_m^{(2)}$ tersebut.
3. Notasi m, k, p tidak masuk dalam subskript yang dapat dikorespondensikan dengan indeks orde ke N. (N = 1,2,...).

(2.6) Penentuan Fungsi Gelombang dan Tenaga Pada Beberapa Orde Gangguan .

(2.6.1) Fungsi Gelombang Terganggu

$$\psi_1 = \sum_k' a_k^{(1)} |k\rangle = \sum_k' \frac{H^1_{km}}{\Delta \epsilon_k} |k\rangle$$

$$\psi_2 = \sum_k' \left[\sum_b' \frac{a_b^{(1)} H^1_{kb}}{\Delta \epsilon_k} - \frac{W_1 a_k^{(1)}}{\Delta \epsilon_k} \right] |k\rangle - \frac{1}{2} \sum_k' |a_p^{(1)}|^2 |m\rangle$$

$$= \left[\sum_{k,b}' \frac{H^1_{kb}}{\Delta\epsilon_k} \frac{H^1_{bm}}{\Delta\epsilon_b} - \sum_k' \frac{H^1_{km} H^1_{mm}}{\Delta\epsilon_k^2} \right] |k\rangle - \frac{1}{2} \sum_k' \frac{|H^1_{km}|^2}{\Delta\epsilon_k^2} |m\rangle$$

$$\psi_3 = \left[\sum_{k,c}' \frac{a_c^{(2)} H^1_{kc}}{\Delta \epsilon_k} + \sum_k' \frac{(a_m^{(1)} ; b) H^1_{km}}{\Delta\epsilon_k} - \sum_k' \frac{W_1 a_k^{(2)}}{\Delta\epsilon_k} \right.$$

$$- \sum_{k}{}' \frac{W_2 a_k^{(1)}}{\Delta\epsilon_k} \Big) |k\rangle - \frac{1}{2} \sum_{k}{}' \Big(\overset{*}{a}_p^{(1)} a_p^{(2)} + \overset{*}{a}_p^{(2)} a_p^{(1)} \Big) |m\rangle$$

$$= \Big(\sum_{k,b,c}{}' \frac{H^1_{kc} \; H^1_{cb} \; H^1_{bm}}{\Delta\epsilon_k \; \Delta\epsilon_b \; \Delta\epsilon_c} - \sum_{k,c}{}' \frac{H^1_{kc} \; H^1_{cm} \; H^1_{mm}}{\Delta\epsilon_c^2 \; \Delta\epsilon_k} \Big) |k\rangle +$$

$$\Big(\sum_{k}{}' \frac{(H^1_{mm})^2 \; H^1_{km}}{\Delta\epsilon_k^3} - \sum_{k,b}{}' \frac{|H^1_{bm}|^2 \; H^1_{km}}{2 \; \Delta\epsilon_b^2 \; \Delta\epsilon_k} \Big) |k\rangle -$$

$$\Big(\sum_{k,b}{}' \frac{H^1_{kb} \; H^1_{bm} \; H^1_{mm}}{\Delta\epsilon_b \; \Delta\epsilon_k^2} + \sum_{k,b}{}' \frac{|H^1_{mb}|^2 \; H^1_{km}}{\Delta\epsilon_b \; \Delta\epsilon_k^2} \Big) |k\rangle +$$

$$\Big(\sum_{k}{}' \frac{H^1_{mm} \; |H^1_{km}|^2}{\Delta\epsilon_k^3} - \sum_{k,b}{}' \frac{H^1_{mk} \; H^1_{kb} \; H^1_{bm} + H^1_{km} \; H^1_{mb} \; H^1_{bk}}{2 \; \Delta\epsilon_b \; \Delta\epsilon_k^2} \Big) |k\rangle$$

(2.48)

(2.6.2) Tenaga Terganggu

$$W_1 = H^1_{mm}$$

$$W_2 = \sum_{b}{}' a_b^{(1)} \; H^1_{mb} = \sum_{b}{}' \frac{|H^1_{mb}|^2}{\Delta\epsilon_b}$$

$$W_3 = \sum_{c}{}' a_c^{(2)} \; H^1_{mc} = \sum_{b,c}{}' \frac{H^1_{cb} \; H^1_{bm} \; H^1_{mc}}{\Delta\epsilon_b \; \Delta\epsilon_c} - \sum_{c}{}' \frac{|H^1_{mc}|^2 \; H^1_{mm}}{\Delta\epsilon_c^2}$$

(2.49)

dengan definisi $\sum_{b,c}{}' = \sum_{b}{}' \sum_{c}{}'$

(2.7) Penentuan Hamiltonian Gangguan

Apabila pada atom hidrogen dikenakan suatu medan gangguan luar maka didapat persamaan Hamiltonian gangguan:

$$H^1 = [H_o,\Omega] = H_o\Omega - \Omega H_o \qquad (2.50)$$

Dimana H_o adalah Hamiltonian atom hidrogen sebelum diganggu dan Ω adalah suatu operator tertentu.

Dengan meninjau definisi bahwa $\langle m|H_o = E_m\langle m|$ dan $H_o|m\rangle = E_m|m\rangle$ persamaan matriks H^1_{mn} dapat diubah ke dalam bentuk operator Ω_{mn} dan fungsi tenaga $\Delta E_n = (E_m - E_n)$.

$$\begin{aligned} H^1_{mn} &= \langle m|H^1|n\rangle = \langle m|[H_o,\Omega]|n\rangle \\ &= \langle m|H_o\Omega - \Omega H_o|n\rangle \\ &= (E_m - E_n)\ \langle m|\Omega|n\rangle \\ &= \Delta E_n\ \Omega_{mn} \qquad (2.51) \end{aligned}$$

Bila perumusan (2.51) diterapkan pada persamaan fungsi eigen dan nilai eigen gangguan maka untuk tenaga gangguannya cocok sampai orde ketiga sedangkan fungsi gelombang terganggunya cocok hanya untuk orde pertama saja.

$$W_1 = H^1_{mm}$$

$$W_2 = \sum_b \frac{|H^1_{mb}|^2}{\Delta E_b} = \sum_b H^1_{bm}\ \Omega_{mb}$$

$$= (\Omega H^1)_{mm} - H^1_{mm}\ \Omega_{mm}$$

$$W_3 = \sum_{b,c} \frac{H^1_{bm}\ H^1_{mc}\ H^1_{cb}}{\Delta E_b\ \Delta E_c} - \sum_c \frac{H^1_{mm}\ H^1_{mc}\ H^1_{cm}}{\Delta E_c^2}$$

$$= -\sum_{b,c}' H^1_{cb}\, \Omega_{bm}\, \Omega_{mc} + \sum_{c}' H^1_{mm}\, \Omega_{mc}\, \Omega_{cm}$$

$$= -\sum_{b}' \Omega_{bm}\, (\Omega\, H^1)_{mb} + \sum_{b}' \Omega_{bm}\, \Omega_{mm}\, H^1_{mb}$$

$$+ H^1_{mm}\, (\Omega^2)_{mm} - H^1_{mm}\, (\Omega_{mm})^2$$

$$= -(\Omega H^1 \Omega)_{mm} + \Omega_{mm}(\Omega\, H^1)_{mm} + \Omega_{mm}(\Omega H^1)_{mm}$$

$$-2(\Omega_{mm})^2\, H^1_{mm} + H^1_{mm}\, (\Omega^2)_{mm} \qquad (2.52)$$