BAB III

Perhitungan Atom Hidrogen Terganggu

3.1. Pengaruh Gangguan Oleh Medan Listrik Luar

Suatu masalah gangguan menunjukkan respon dari atom hidrogen dalam keadaan state dasar adalah merupakan sebuah konstanta medan listrik luar $\vec{E} = \mathcal{E}\ \hat{k}$, keadaan tersebut dinamakan efek Stark. Untuk menghitung nilai $\vec{H}^1$ pertama-tama yang harus dikerjakan adalah menghitung $\mathcal{H}^1$, hal ini menjadi keseimbangan klasik (classical counterpart) dan kemudian membuat substitusi operator. Jika $\vec{r}_1$ dan $\vec{r}_2$ adalah vektor-vektor posisi dari elektron dan proton, dan $\phi(\vec{r})$ adalah potensial listrik dari $\vec{E}$ maka

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}^1 &= -e\phi(\vec{r}_1) + e\phi(\vec{r}_2) \\
&= e\ \{\ \phi(\vec{r}_2) - \phi(\vec{r}_1)\ \} \\
&= e\ (\ \vec{r}_1 - \vec{r}_2\ ).\ \vec{E} \qquad (\text{ mengingat } \vec{E} = -\vec{\nabla}\phi\ ) \\
&= e\ \vec{r}_{21}.\vec{E} \qquad (3.1)
\end{aligned}
$$

dengan $\vec{r}_{21}$ adalah koordinat relatif atau secara equivalen vektor posisi dari elektron didalam kerangka pusat massa dengan limit $m/M = 0$ (M = massa proton). $\mathcal{H}^1$ dinamakan interaksi dipol, untuk hubungan

$$\vec{\mu}_e = e\ (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = -e\vec{r}_{12} \qquad (3.2)$$

Momen dipol listrik dari sistem

$$\mathcal{H}^1 = -\vec{\mu}_e\ .\ \vec{E} \qquad (3.3)$$

Kemudian diberikan medan listrik

$$\vec{H}^1 = e\,\vec{z}\,\mathcal{E} \tag{3.4}$$

Sehingga energi gangguan orde pertama didalam keadaan tingkat dasar $|\ 100\ \rangle$

$$W_1 = E^1_{100} = \langle\ 100|\ e\ z\ \mathcal{E}\ |\ 100\ \rangle \tag{3.5}$$

dan dapat dibuktikan $E^1_{100} = 0$. Secara fisika E^1_{100} tidak ada karena didalam tingkat tidak terganggu, distribusi probabilitas elektron adalah simetri bola dan sampel-sampel elektron $\phi(\vec{r})$ dan $\phi(-\vec{r}) = -\phi(\vec{r})$ sama. Cara lain dapat dikatakan disini bahwa atom tak diganggu tidak mempunyai peluang terbentuknya harga harap momen dipol $\langle\vec{\mu}\rangle$, sehingga

$$E^1_{100} = \langle\ 100|\ -\vec{\mu}.\vec{E}\ |\ 100\ \rangle$$

$$= -\ \langle\ 100|\ \vec{\mu}\ |\ 100\ \rangle.\vec{E} = 0 \tag{3.6}$$

3.2. Penentuan Nilai Eigen Terganggu

Sekarang diharapkan perubahan energi orde dua tidak nol, karena pengaruh dari medan luar yang akan menurunkan distribusi probabilitas elektron sehingga tidak simetri bola lagi dan timbulnya induksi dari momen dipol yang berinteraksi dengan $\vec{E}$.

Bila dihitung

$$E^2_{100} = \sum_{nlm} \frac{e^2\mathcal{E}^2\ |\ \langle nlm|z|100\rangle|^2}{E^0_{100} - E^0_{nlm}} \tag{3.7}$$

dengan

$$E^{o}_{100} - E^{o}_{nlm} = -Ry\ (\ 1 - 1/n^{2}\ ) = Ry \left[\frac{1 - n^{2}}{n^{2}} \right] \qquad (3.8)$$

Tidak seperti pada kasus osilator, bagian-bagian perumusan ruas kanan pada (3.7) merupakan penjumlahan dengan batas indeks nlm tak berhingga.Walaupun dapat menggunakan kaidah seleksi dipol untuk mereduksi penjumlahan yaitu

$$W_{2} = E^{2}_{100} = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{e^{2}\gamma^{2}\ |\ \langle n10|z|100\rangle|^{2}}{E^{o}_{1} - E^{o}_{n}} \qquad (3.9)$$

Bila dicari bentuk persamaan (3.7) untuk sementara, ada beberapa cara untuk mencarinya.

Cara 1. Karena harga energi penyebutnya terus bertambah dengan n maka diperoleh pertidaksamaan

$$|E^{2}_{100}| \leq \frac{e^{2}\gamma^{2}}{|\ E^{o}_{1} - E^{o}_{2}\ |} \sum_{nlm}' \ |\ \langle nlm|z|100\rangle|^{2}$$

Akan tetapi karena

$$\sum_{nlm}' \ |\ \langle nlm|z|100\rangle|^{2}$$

$$= \sum_{nlm}' \langle 100|z|nlm\rangle\langle nlm|z|100\rangle$$

$$= \sum_{nlm} \langle 100|z|nlm\rangle\langle nlm|z|100\rangle - \langle 100|z|100\rangle^{2}$$

$$= \langle 100|z^{2}|100\rangle - \langle 100|z|100\rangle^{2}$$

$$= a^{2}_{o} - 0 = a^{2}_{o} \qquad (3.10)$$

maka

$$|E^2_{100}| \leq \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{|\,(\,e^2/2a_0)(\,1 - \frac{1}{4}\,)\,|}\; a_0^2$$

$$\leq \frac{8\; a_0^3\; \mathcal{E}^2}{3} \qquad (3.11)$$

Untuk mendapatkan sebuah ikatan yang lebih rendah pada $|\,E^2_{100}|$ yaitu dengan mencari bagian pertama di dalam persamaan (3.9) (karena semua bagian yang ada mempunyai tanda yang sama) :

$$|E^2_{100}| \geq \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{3\; e^2/\;8\; a_0} \;\; |\,\langle 210|z|100\rangle|^2 \qquad (3.12)$$

Sekarang

$$|\,\langle 210|z|100\rangle|^2 = 2^{15}\; a_0^2\; /\; 3^{10} \cong 0{,}55\; a_0^2 \qquad (3.13)$$

Sehingga

$$|E^2_{100}| \geq (\;0{,}55\;)\frac{8}{3}\; \mathcal{E}^2\; a_0^3 \qquad (3.14)$$

Kemudian diatur pembatasan $|E^2_{100}|$ pada interval

$$\frac{8}{3}\; \mathcal{E}^2\; a_0^3 \;\geq\; |E^2_{100}| \;\geq\; (\;0{,}55\;)\frac{8}{3}\; \mathcal{E}^2\; a_0^3 \qquad (3.15)$$

Cara 2.Dengan memakai perumusan (2.52) untuk energi gangguan orde kedua.

$$E^2_m = \sum_b{}' \frac{\langle m|H^1|b\rangle\langle b|H^1|m\rangle}{E_m - E_b} \qquad (3.16)$$

Jika pada masalah ini tidak terdapat penyebut energinya, dapat digunakan relasi yang lengkap untuk mengeliminasi penjumlahannya (setelah penjumlahan dan pembagiannya pada bagian m=n). Terdapat cara untuk mengeliminasi penyebut energinya, anggaplah didapatkan operator Ω, sedemikian rupa sehingga

$$H^1 = [H_o, \Omega] \tag{3.17}$$

Sehingga dengan melihat perumusan (2.52) diperoleh

$$W_2 = E^2_m = (\Omega H^1)_{mm} - H^1_{mm}\ \Omega_{mm} \tag{3.18}$$

Yang dinamakan perhitungan matriks tiga elemen. Tetapi merupakan masalah yang tidak mudah untuk mendapatkan Ω sehingga berlaku seperti persamaan (3.17). Cara sederhana untuk memperoleh Ω, sedemikian rupa sehingga berlaku

$$H^1 \mid m > = [\ H_o\ ,\ \Omega\ ] \mid m > \tag{3.19}$$

Pada masalah ini dibutuhkan pemecahan

$$H^1 \mid 100> = [\ H\ ,\ \Omega\ ] \mid 100> \tag{3.20}$$

Dengan pemilihan persamaan ini pada koordinat basis dengan Ω dianggap sebagai sebuah fungsi koordinat dan bukan momentum dapat diperlihatkan bahwa

$$\Omega \xrightarrow[\text{koordinat basis}]{} \frac{m\ a_o\ e\ \mathcal{E}}{\hbar^2}\left[\ \frac{r^2\ \cos\theta}{2} + a_o\ r\ \cos\theta\ \right]$$

(Shankar, 1986, h. 471) (3.21)

Kepastian perubahan orde dua menjadi

$$|E^2_{100}| = |\ <100|\Omega\ H^1|100> - 0\ |$$

$$= |\ <100|\ \Omega\ e\ z\ \mathcal{E}\ |100>\ |$$

$$= \frac{9}{4}\ a_o^3\ \mathcal{E}^2 = \left(\frac{27}{32}\right)\frac{8}{3}\ a_o^3\ \mathcal{E}^2$$

$$= (0.84)\ \frac{8}{3}\ a_o^3\ \mathcal{E}^2 \tag{3.22}$$

Yang secara kasar berada pada pertengahan interval yang dibatasi pada cara 1.

Telah diperlihatkan bahwa E^2_{100} mewakili interaksi

dari momen dipol dengan menggunakan medan. Seberapa besarnya induksi momen μ ? Satu cara untuk mendapatkannya adalah dengan menghitung $\langle\vec{\mu}\rangle$ pada gangguan tingkat dasar, dengan mengutif bentuk E^2_{100}. Anggaplah sistem yang tidak mempunyai momen dipol intrinsik dan perubahan pada medan listrik eksternal yang mula-mulanya nol dan bertambah terus pada harga $\vec{E}$. Selama waktu ini momen dipol bertambah dari nol sampai μ. Jika dibayangkan muatan $\pm q$, dipisahkan dengan jarak x sepanjang $\vec{E}$, dapat dilihat bahwa kerja tersebut telah dilakukan pada sistem dengan x diganti dx menjadi

$$dW = -q\,\mathcal{E}\,dx$$

$$= -\mathcal{E}\,d\mu \qquad (3.23)$$

Jika dianggap momen induksi adalah proporsional terhadap $\vec{E}$

$$\vec{\mu} = \alpha\,\vec{E} \qquad (3.24)$$

(dengan α dinamakan polarizabilitas), maka

$$dW = -\alpha\,\mathcal{E}\,d\mathcal{E}$$

atau

$$W = -\frac{1}{2}\alpha\,\mathcal{E}^2 \qquad (3.25)$$

Diidentifikasikan W dengan E^2_{100} dan menghitung polarizabilitas

$$\alpha = \frac{18}{4}\,a_0^3 \approx \frac{18}{4}\,(0{,}5\ A^\circ)^3 \approx 0{,}56\ (A^\circ)^3 \qquad (3.26)$$

Jika digunakan harga yang lebih akurat $a_0 = 0{,}53\ A^\circ$, didapatkan $\alpha = 0{,}67\ (A^\circ)^3$, hasil ini

mendekati harga pengukuran pada 0,68 $(A^{o})^{3}$. Maka jika diberikan $\vec{E}$, akan didapatkan $\vec{\mu}$ dari persamaan (3.2).

Sebagai catatan adalah bahwa harga E^{2}_{100} adalah negatif. Karena pengukuran perubahan energi E^{2}_{o} masing - masing pada orde satu berubah pada vektor tingkat dasar, dapat disimpulkan sistem tersebut berubah konfigurasinya sehingga energi terendahnya merupakan interaksi dengan medan luar.

Bila dihitung nilai-nilai operator $(\Omega H^{1} \Omega)_{mm}$, Ω_{mm}, H^{1}_{mm} untuk m = 100, nilainya adalah nol, sehingga perumusan tenaga gangguan orde ketiga yaitu

$$\begin{aligned} W &= E^{3}_{100} = -\langle 100|\Omega H^{1}\Omega|100\rangle + \langle 100|H^{1}|100\rangle\langle 100|\Omega^{2}|100\rangle \\ &\quad + \langle 100|\Omega|100\rangle(\langle 100|\Omega H^{1}|100\rangle + \langle 100|H^{1}\Omega|100\rangle) \\ &\quad -2 \langle 100|\Omega|100\rangle^{2}\langle 100|H^{1}|100\rangle \\ &= 0. \end{aligned} \tag{3.27}$$

Jadi diperoleh nilai eigen terganggunya adalah :

$$\begin{aligned} E &= E_{o} - \frac{\alpha}{2} \gamma^{2} \qquad (\text{dimana } \alpha = \frac{\rho}{2} a_{o}^{3}) \\ &= - \frac{m e^{4}}{2 \hbar^{2}} - \frac{\rho}{4} a_{o}^{3} \gamma^{2} \end{aligned} \tag{3.28}$$

3.3. Penentuan Fungsi Eigen Terganggu

Untuk fungsi gelombang terganggu orde kesatu adalah

$$\psi_{1} = \psi^{1}_{100} = -\Omega \,|100\rangle + \langle 100|\Omega|100\rangle \,|100\rangle$$

$$= -\Omega \; |100\rangle$$

$$= -\frac{m\, a_o\, e\, \mathcal{E}}{\hbar^2} \left(\frac{r^2 \cos\theta}{2} + a_o\, r \cos\theta \right) |\, 100\rangle \tag{3.29}$$

Akhirnya dapat dihitung suatu persamaan atom hidrogen yang mendapatkan gangguan medan listrik luar dalam bentuk persamaan Schrödinger untuk orde pertama didalam $\mathcal{E}$ adalah:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\psi + \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi + e\, \mathcal{E}\, r \cos\theta\, \psi = 0 \tag{3.30}$$

Pemecahan fungsi gelombangnya adalah

$$\psi = u_{100} + \psi^1_{100}$$

$$= \left[1 - \frac{m\, a_o\, e\, \mathcal{E}}{\hbar^2} \left(\frac{r^2 \cos\theta}{2} + a_o\, r \cos\theta \right) \right] |100\rangle$$

dengan nilai eigen tenaganya

$$E = -\frac{m\, e^4}{2\, \hbar^2} - \frac{9}{4} a_o^3\, \mathcal{E}^2 \tag{3.31}$$