Apa itu Atom?

Miftachul Hadi

Applied Mathematics for Biophysics Group

Physics Research Centre, Indonesian Institute of Sciences (LIPI)

Kompleks Puspiptek, Serpong, Tangerang 15314, Banten, Indonesia

E-mail: itpm.indonesia@gmail.com

12 Januari 2009

Daftar Isi

Bab 1

Apa itu Atom?

1.1 Atom Berelektron Tunggal

1.1.1 Pengantar

Setiap atom memiliki dimensi keseluruhan sekitar 10^{-9} meter. Atom tersusun dari inti yang relatif masif (dimensinya berorde 10^{-14} meter), dimana elektron, masing-masing bermuatan $-e$, "mengisi" sisa volume atom, bergerak mengelilingi inti.

Inti tersusun dari partikel A (A adalah *bilangan massa*) disebut *nukleon*, partikel Z (Z adalah *bilangan atom* yang menunjukkan *jumlah proton*), masing-masing bermuatan $+e$, dan N $(= A - Z)$ adalah *neutron*, yang tak memiliki muatan listrik. Oleh karena itu, inti memiliki muatan positip $+Ze$. *Jumlah elektron dalam sembarang atom sama dengan jumlah proton.* Oleh karena itu, atom adalah sistem netral. Namun, dalam kasus tertentu atom dapat memperoleh atau kehilangan elektron, sehingga ia bermuatan positip atau negatip; dalam kasus ini ia disebut *ion*. Massa nukleon sekitar 1850 kali massa elektron, sehingga, massa atom secara praktis sama dengan massa intinya.

Z elektron dari atom bertanggung jawab untuk kebanyakan sifat atom yang ditunjukkan oleh sifat-sifat materi dalam material, semisal sifat elastisitas dan sifat elektromagnetik dari material yang berbeda. Interaksi elektromagnetik antara elektron dan inti dari atom-atom berbeda memegang peranan mendasar dalam pengikatan atom-atom untuk membentuk molekul, reaksi kimia, dan seluruh sifat materi dalam material.

Kita dapat menjelaskan gerak elektron mengelilingi inti, jika kita hanya meninjau interaksi elektromagnetik antara elektron dan komponen-komponen inti (proton dan neutron). Metode mekanika kuantum diperlukan saat kita menganalisa gerak elektron.

1.1.2 Atom Hidrogen

Atom yang paling sederhana adalah atom hidrogen. Inti atom hidrogen terdiri dari hanya satu partikel yakni proton, sehingga ia memiliki A=1 dan Z=1. Elektron tunggal bergerak mengelilingi proton. Dalam analisa dinamika elektron terhadap inti, kita akan membuat dua aproksimasi. Pertama, tinjau inti pada keadaan diam dalam kerangka inersia. Hal ini adalah asumsi yang beralasan, karena inti menjadi lebih masif dibanding elektron, secara praktis bertepatan dengan pusat massa atom, pada keadaan diam dalam sistem inersia, sepanjang tak ada gaya eksternal yang beraksi pada atom. Kedua, asumsikan bahwa medan listrik inti berasal dari muatan titik. Asumsi ini juga beralasan, karena inti memiliki ukuran yang sangat kecil (sekitar 10^{-14} meter), dibandingkan dengan jarak rata-rata elektron dari inti (sekitar 10^{-10} meter). Namun, dalam analisa yang lebih halus, ukuran dan bentuk inti harus diperhitungkan.

Gerak elektron relatif terhadap inti ditentukan oleh interaksi coulomb antara elektron dan inti. Interaksi coulomb ini dinyatakan oleh gaya pusat (gaya sentral) kuadrat terbalik yang bersifat tarik-menarik beraksi pada elektron, diberikan oleh

$$\mathbf{F} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}\mathbf{u_r}. \tag{1.1}$$

Energi potensial sistem elektron-inti adalah

$$E_p(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \tag{1.2}$$

Namun, karena kita menganalisa gerak elektron dengan menggunakan mekanika kuantum, kita tak dapat menyelesaikan persoalan dengan cara menerapkan persamaan gerak Newton $\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt$; sebagai gantinya kita menyusun *persamaan gerak Schrodinger* dengan energi potensial diberikan oleh persamaan (1.2). Karena gerak elektron adalah tiga dimensi, kita harus menggunakan persamaan Schrodinger untuk partikel yang bergerak dalam ruang

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+E_p(x,y,z)\psi=E\psi \tag{1.3}$$

Dengan mensubstitusikan energi potensial dari persamaan (1.2) ke persamaan (1.3), diperoleh persamaan Schrodinger berbentuk

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\psi=E\psi. \tag{1.4}$$

Marilah kita kenalkan suatu konstanta, disebut *konstanta Rydberg*, didefinisikan oleh

$$R_\infty=\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c}=1,0974\times 10^7 \ \ \text{meter}^{-1}. \tag{1.5}$$

Tingkat energi yang mungkin untuk *keadaan terikat stasioner* elektron, yang kita peroleh dari persamaan (1.4), diberikan oleh pernyataan

$$E_n=-\frac{R_\infty hcZ^2}{n^2} \tag{1.6}$$

dimana $n=1,2,3,...$ (integer positip). Jika terhadap persamaan (1.5) dilakukan perubahan satuan, kita peroleh

$$E_n=-\frac{13,607\ Z^2}{n^2} \ \ \text{eV}. \tag{1.7}$$

Catat bahwa nilai energi total adalah negatip. Hal ini bersesuaian dengan hasil klasik untuk gerak dalam gaya kuadrat terbalik ketika orbit adalah elips atau terikat. Titik nol energi ditetapkan untuk keadaan dimana dua partikel yakni elektron dan inti, pada keadaan diam terpisah jarak tak hingga.

Persamaan (1.7) berlaku untuk sembarang atom yang memiliki elektron tunggal. Sebenarnya, inti tidak pada kondisi diam dalam kerangka inersia; inti dan elektron berotasi terhadap pusat massa mereka. Kita dapat menganalisa gerak relatif elektron dan inti dengan cara mensubstitusikan, dalam persamaan (1.5), massa tereduksi sistem elektron-inti untuk massa elektron. Diberikan bahwa M adalah massa inti, maka massa tereduksi atom adalah

$$\mu = \frac{m_e M}{m_e + M} = \frac{m_e}{1 + m_e/M}. \tag{1.8}$$

Oleh karena itu, dalam persamaan (1.6) kita harus mengganti konstanta Rydberg R_∞ dengan

$$R = \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} = R_\infty \frac{\mu}{m_e} = R_\infty \left(\frac{1}{1 + m_e/M} \right) \tag{1.9}$$

sehingga tingkat energi diberikan oleh

$$E = -\frac{RhcZ^2}{n^2}. \tag{1.10}$$

Jelasnya, R_∞ berhubungan dengan kasus dimana inti memiliki massa tak hingga ($M = \infty$), dan hal ini menjelaskan alasan untuk subkrip pada simbol.

1.1.3 Penurunan Semi Klasik Persamaan Tingkat Energi Hidrogen

Anggaplah elektron mendeskripsikan orbit sirkuler. Momentumnya, p, adalah konstan untuk orbit sirkuler. Agar supaya orbit berhubungan dengan keadaan stasioner, adalah logis bahwa orbit harus dapat meneruskan gelombang tegak berpanjang gelombang $\lambda = h/p$. Hal ini mensyaratkan bahwa panjang gelombang orbit sama dengan perkalian integral dari λ; yakni, $2\pi r = n\lambda = nh/p$ atau

$$rp = nh/2\pi. \tag{1.11}$$

Catat bahwa rp adalah momentum sudut elektron, kita melihat bahwa keadaan stasioner adalah keadaan dimana momentum sudut merupakan perkalian integral dari $\hbar = h/2\pi$. Karena $p = m_e v$, kita dapat juga menulis persamaan (1.11) sebagai

$$m_e v r = nh/2\pi. \tag{1.12}$$

Pada sisi lain, persamaan gerak elektron mensyaratkan bahwa $F = m_e v^2/r$, dimana F adalah gaya sentripetal. Namun, dalam kasus elektron yang bergerak terhadap inti, gaya sentripetal adalah gaya coulomb diberikan oleh persamaan (1.1). Oleh karena itu,

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad \text{atau} \quad m_e v^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \tag{1.13}$$

Ketika kita mengeliminasi v antara persamaan (1.12) dan (1.13), kita memiliki

$$r = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m_e Z e^2} = \frac{n^2}{Z} a_0, \tag{1.14}$$

dimana

$$a_0 = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m_e e^2} = 5,2917 \times 10^{-11}\ meter \tag{1.15}$$

disebut *jari-jari Bohr.* Persamaan (1.14) memberi jari-jari orbit sirkuler yang diperkenankan dan jari-jari Bohr, a_0, adalah "jari-jari" orbit keadaan dasar (n=1) dalam hidrogen (Z=1).

Ketika kita menggunakan persamaan (1.2) untuk energi potensial sistem elektron-inti, kita dapat menyatakan energi elektron dalam orbit sirkuler sebagai

$$E = E_k + E_p = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \tag{1.16}$$

Karenanya, jika kita menggunakan persamaan (1.13) untuk mengeliminasi $m_e v^2$, kita memperoleh

$$E = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 (2r)}. \tag{1.17}$$

Perkenalkan nilai r sebagaimana diberikan oleh persamaan (1.14), kita memiliki

$$E = -\frac{m_e e^4 Z^2}{8\epsilon_{)}^2 h^2 n^2} = -\frac{R_\infty h c Z^2}{n^2}, \tag{1.18}$$

yang bersesuaian dengan persamaan (1.5) dan (1.7).

1.1.4 Gaya Konservatif

Ketika kita melemparkan bola ke atas maka terjadi perlambatan, karena energi kinetik diubah menjadi energi potensial. Namun, pada saat jatuh kembali, terjadi perubahan kebalikannya, dimana laju bola bertambah. Hal ini karena terjadi perubahan energi potensial menjadi energi kinetik. Misal, jika hambatan udara tidak ada, maka pada saat jatuh, bola akan bergerak dengan laju yang sama dengan laju saat bola dilemparkan.

Sebuah gaya yang mampu menghasilkan perubahan dua arah antara energi kinetik dan energi potensial dinamakan *gaya konservatif.* Contoh gaya konservatif adalah gaya gravitasi dan gaya pegas. Ciri penting dari gaya konservatif adalah kerja yang dihasilkannya selalu *reversibel* (dapat diubah kembali ke asalnya). Apa pun yang kita simpan ke dalam "gudang" energi, selalu dapat kita ambil kembali tanpa ada yang hilang. Aspek penting lain dari gaya konservatif adalah bahwa sebuah benda dapat berpindah dari suatu titik ke titik lain dengan berbagai lintasan, dengan kerja yang dilakukan oleh gaya konservatif tetap sama untuk tiap lintasan. Jika benda bergerak pada lintasan tertutup, yakni titik awal dan titik akhir berada pada titik yang sama, maka kerja *total* yang dilakukan oleh gaya konservatif, misal gaya gravitasi, akan selalu bernilai nol [2].

1.1.5 Mekanika Klasik

Mekanika klasik menggambarkan dinamika partikel atau sistem partikel. Dinamika partikel demikian, ditunjukkan oleh hukum-hukum Newton tentang gerak, terutama oleh hukum kedua Newton. Hukum ini menyatakan, "Sebuah benda yang memperoleh pengaruh gaya atau interaksi akan bergerak sedemikian rupa sehingga laju perubahan waktu dari momentum sama dengan gaya tersebut". Hukum-hukum gerak Newton baru memiliki arti fisis, jika hukum-hukum tersebut diacukan terhadap suatu kerangka acuan tertentu, yakni kerangka acuan inersia (suatu kerangka acuan yang bergerak serba sama - tak mengalami percepatan). Prinsip Relativitas Newtonian menyatakan, "Jika hukum-hukum Newton berlaku dalam suatu kerangka acuan maka hukum-hukum tersebut juga berlaku dalam kerangka acuan lain yang bergerak serba sama relatif terhadap kerangka acuan pertama".

Konsep partikel bebas diperkenalkan ketika suatu partikel bebas dari pengaruh gaya atau interaksi dari luar sistem fisis yang ditinjau (idealisasi fakta fisis yang sebenarnya). Gerak partikel terhadap suatu kerangka acuan inersia tak gayut (independen) posisi titik asal sistem koordinat dan tak gayut arah gerak sistem koordinat tersebut dalam ruang. Dikatakan, dalam kerangka acuan inersia, ruang bersifat homogen dan isotropik. Jika partikel bebas bergerak dengan kecepatan konstan dalam suatu sistem koordinat selama interval waktu tertentu tidak mengalami perubahan kecepatan, konsekuensinya adalah waktu bersifat homogen.

Jika ditinjau gerak partikel yang terkendala pada suatu permukaan bidang, maka diperlukan adanya gaya tertentu yakni gaya konstrain yang berperan mempertahankan kontak antara partikel dengan permukaan bidang. Namun sayang, tak selamanya gaya konstrain yang beraksi terhadap partikel dapat diketahui. Pendekatan Newtonian memerlukan informasi gaya total yang beraksi pada partikel. Gaya total ini merupakan keseluruhan gaya yang beraksi pada partikel, termasuk juga gaya konstrain. Oleh karena itu, jika dalam kondisi khusus terdapat gaya yang tak dapat diketahui, maka pendekatan Newtonian tak berlaku. Sehingga diperlukan pendekatan baru dengan meninjau kuantitas fisis lain yang merupakan karakteristik partikel, misal energi totalnya. Pendekatan ini dilakukan dengan menggunakan prinsip Hamilton, dimana persamaan Lagrange yakni persamaan umum dinamika partikel dapat diturunkan dari prinsip tersebut. Prinsip Hamilton mengatakan, "Dari seluruh lintasan yang mungkin bagi sistem dinamis untuk berpindah dari satu titik ke titik lain dalam interval waktu spesifik (konsisten dengan sembarang konstrain), lintasan nyata yang diikuti sistem dinamis adalah lintasan yang meminimumkan integral waktu selisih antara energi kinetik dengan energi potensial.".

Persamaan gerak partikel yang dinyatakan oleh persamaan Lagrange dapat diperoleh dengan meninjau energi kinetik dan energi potensial partikel tanpa perlu meninjau gaya yang beraksi pada partikel. Energi kinetik partikel dalam koordinat kartesian adalah fungsi dari kecepatan, energi potensial partikel yang bergerak dalam medan gaya konservatif adalah fungsi dari posisi.

Jika didefinisikan Lagrangian sebagai selisih antara energi kinetik dan energi potensial. Dari prinsip Hamilton, dengan mensyaratkan kondisi nilai stasioner maka dapat diturunkan persamaan Lagrange. Persamaan Lagrange merupakan persamaan gerak partikel sebagai fungsi dari koordinat umum, kecepatan umum, dan mungkin waktu. Kegayutan Lagrangian terhadap waktu merupakan konsekuensi dari kegayutan konstrain terhadap waktu atau dikarenakan persamaan transformasi yang menghubungkan koordinat kartesian dan koordinat umum mengandung fungsi waktu. Pada dasarnya, persamaan Lagrange ekivalen dengan persamaan gerak Newton, jika koordinat yang digunakan adalah koordinat kartesian.

Dalam mekanika Newtonian, konsep gaya diperlukan sebagai kuantitas fisis yang berperan dalam aksi terhadap partikel. Dalam dinamika Lagrangian, kuantitas fisis yang ditinjau adalah energi kinetik dan energi potensial partikel. Keuntungannya, karena energi adalah besaran skalar, maka energi bersifat invarian terhadap transformasi koordinat. Dalam kondisi tertentu, tidaklah mungkin atau sulit menyatakan seluruh gaya yang beraksi terhadap partikel, maka pendekatan Newtonian menjadi rumit pula atau bahkan tak mungkin dilakukan. Oleh karena itu, pada perkembangan berikutnya dari mekanika, prinsip Hamilton berperan penting karena ia hanya meninjau energi partikel saja [3].

1.1.6 Keadaan Stasioner

Ketika gelombang elektromagnetik berinteraksi dengan sistem bermuatan, misal atom, molekul, inti, medan listrik dan magnet gelombang mengganggu gerak sistem bermuatan. Dalam bahasa fisika klasik, kita dapat mengatakan bahwa gelombang mempengaruhi osilasi terpaksa pada gerak alami sistem bermuatan. Osilator klasik merespon, dalam cara yang paling mudah, ketika frekuensi osilator terpaksa sama dengan frekuensi alaminya, situasi yang disebut sebagai *resonansi*. Ketika terdapat resonansi, laju dimana osilator menyerap energi adalah maksimum.

Eksperimen menemukan bahwa atom, molekul, inti, secara umum, sembarang gabungan partikel bermuatan, memiliki deret frekuensi beresonansi $\nu_1, \nu_2, \nu_3, ...$ dimana penyerapan radiasi elektromagnetik cukup besar. Pada seluruh frekuensi yang lain penyerapan dapat diabaikan. Frekuensi resonansi $\nu_1, \nu_2, \nu_3, ...$ merupakan *spektrum absorpsi* substansi. Misal, kita asumsikan bahwa sistem pada awalnya memiliki keadaan energi minimum yang paling stabil, disebut *keadaan dasar*. Maka ketika sistem menyerap radiasi elektromagnetik, ia berpindah ke keadaan lain yang berenergi lebih tinggi, disebut *keadaan tereksitasi*. Dalam kasus dipol listrik berosilasi secara klasik, keadaan tereksitasi berhubungan dengan amplitudo osilasi yang lebih besar.

Jelasnya, sistem bermuatan dalam keadaan tereksitasi dapat melepaskan kelebihan energinya dalam bentuk radiasi elektromagnetik. Frekuensi teramati dalam radiasi yang diemisikan merupakan *spektrum emisi* sistem bermuatan. Pengalaman menunjukkan, *frekuensi teramati dalam spektrum absorpsi sistem bermuatan juga teramati dalam spektrum emisi sistem.*

Keberadaan spektrum yang terdiri dari frekuensi terdefinisi baik adalah suatu persoalan yang menjadi teka-teki fisikawan pada akhir abad 19. Untuk menyelesaikan persoalan ini, ide baru dan revolusioner diusulkan pada tahun 1913 oleh Niels Bohr. Bohr menggunakan konsep foton dan memperluas asumsi Planck sebagaimana dinyatakan sebagai $E = h\nu$. Anggap bahwa atom dalam keadaan energi E menyerap radiasi dengan frekuensi ν dan berpindah ke keadaan lain yang berenergi lebih tinggi E'. Perubahan energi atom adalah $E' - E$. Pada sisi lain, energi yang diserap dari radiasi dalam proses tunggal harus sebesar energi foton $h\nu$. Kekekalan energi mensyaratkan bahwa kedua kuantitas adalah sama. Oleh karena itu,

$$E' - E = h\nu,$$

disebut *formula Bohr*. Dengan cara yang sama, jika atom berpindah dari keadaan energi E' menuju keadaan energi yang lebih rendah, E, frekuensi radiasi yang diemisikan diberikan oleh persamaan (1.1.6).

Fakta bahwa hanya frekuensi tertentu $\nu_1, \nu_2, \nu_3, ...$ teramati dalam emisi dan absorpsi dapat dijelaskan, jika kita mengasumsikan bahwa energi atom dapat memiliki hanya nilai-nilai tertentu $E_1, E_2, E_3, ...$ Masing-masing nilai energi yang diperkenankan disebut *tingkat energi*. Maka hanya frekuensi yang mungkin yang dihasilkan dalam emisi atau absorpsi radiasi berhubungan dengan transisi antara dua tingkat energi yang diperkenankan; yakni, $\nu = (E_i - E_j)/h$. Jadi, asumsi Bohr dapat dinyatakan sebagai berikut: *Energi sistem bermuatan, baik atom, molekul atau inti, dapat memiliki hanya nilai-nilai tertentu* $E_1, E_2, E_3 ...$*; yakni, energi terkuantisasi. Keadaan yang berhubungan dengan energi-energi ini disebut keadaan stasioner dan nilai-nilai energi yang mungkin disebut tingkat-tingkat energi.*

Absorpsi radiasi elektromagnetik, atau sembarang energi yang lain, dihasilkan dalam transisi atom (atau molekul atau inti) dari satu keadaan stasioner ke keadaan stasioner lain yang berenergi lebih tinggi; emisi radiasi elektromagnetik dihasilkan dalam proses sebaliknya. Frekuensi radiasi yang tercakup dalam proses diberikan oleh persamaan (1.1.6).

1.1.7 Fungsi Gelombang

Apakah pengertian lintasan partikel atom sama dengan pengertian lintasan partikel makroskopis dalam mekanika klasik? Apakah elektron bergerak dalam orbit elips mengelilingi inti atom? Jika kita tak dapat membahas lintasan elektron atau sembarang partikel atomik yang lain, bagaimana kita dapat mendeskripsikan geraknya?

Informasi untuk menjawab pertanyaan ini disediakan oleh *medan materi*. Untuk memperoleh informasi demikian, kita dipandu oleh pengetahuan kita tentang *gelombang tegak*; yakni gelombang yang dikurung dalam daerah tertentu, misal dawai yang bergetar dengan ujung-ujung dawai tetap, sebuah kolom udara yang berosilasi tertutup pada kedua ujungnya, atau radiasi elektromagnetik yang dijebak dalam rongga yang memiliki dinding konduksi sempurna. Kita tinjau kembali bahwa dalam gelombang tegak, *amplitudo* gelombang ditetapkan pada masing-masing titik dalam ruang. Pada titik-titik dimana amplitudo lebih besar, gelombang lebih kuat.

Situasi yang sama terjadi dalam kasus partikel atomik. Tinjau, sebagai contoh, elektron dalam atom. Elektron tak pernah berpindah terlalu jauh dari inti; elektron terkurung dalam daerah ruang kecil dengan dimensi berorde 10^{-9} meter. Sehingga, medan materi terkait elektron dapat dinyatakan dalam hubungannya dengan gelombang tegak terlokalisasi dalam daerah ini, dengan amplitudo bervariasi dari satu titik ke titik lain dalam daerah dan secara praktis menjadi nol di luar daerah ini. Marilah kita menandai *amplitudo medan materi* dengan $\psi(x)$. Amplitudo ini $\psi(x)$ saat ini disebut *fungsi gelombang*, meski mungkin lebih baik jika disebut *amplitudo medan materi*.

Kita mengetahui bahwa intensitas gerak gelombang sebanding dengan kuadrat amplitudo. Oleh karena itu, *intensitas medan materi diberikan oleh* $|\psi(x)|^2$. Karena medan materi mendeskripsikan gerak partikel, kita dapat mengatakan bahwa *daerah ruang dimana partikel lebih mungkin dijumpai adalah daerah ruang dimana* $|\psi(x)|^2$ *besar.* Agar menjadi lebih kuantitatif, kita dapat mengatakan bahwa, *probabilitas menemukan partikel yang dideskripsikan oleh fungsi gelombang* $\psi(x)$ *dalam interval* dx *di sekitar titik* x *adalah* $|\psi(x)|^2\ dx$.

1.1.8 Persamaan Schrodinger

Ide keadaan stasioner di dalam atom yang berhubungan dengan gelombang materi tegak digunakan oleh Schrodinger di tahun 1926 untuk memformulasikan mekanika gelombang. Kuantitas yang memegang peranan penting dalam mekanika gelombang adalah fungsi gelombang sebagai ukuran "gangguan gelombang" dari gelombang materi. Sebagai contoh: untuk gelombang tali, gangguan gelombang adalah ukuran pergeseran transversal; untuk gelombang bunyi, gangguan gelombang adalah variasi tekanan dan untuk gelombang elektromagnetik, vektor medan listrik sebagai gangguan gelombangnya.

Mekanika gelombang diinspirasi oleh teori gelombang materi de Broglie, yang mengatakan, "Panjang gelombang materi sama dengan suatu konstanta fundamental (konstanta Planck) dibagi dengan momentum liniernya". Arti fisis mekanika gelombang pada tahapan ini belumlah jelas. Schrodinger pertama-tama meninjau gelombang materi de Broglie sebagai suatu entitas fisis. Interpretasi ini menemui kendala, karena gelombang dapat sebagian direfleksikan dan sebagian ditransmisikan pada suatu batas medium. Akan tetapi, partikel katakanlah elektron tidak dapat "dipecah", sebagian direfleksikan dan sebagian ditransmisikan. Kendala ini diselesaikan oleh Max Born yang mengusulkan interpretasi statistik gelombang materi de Broglie. Dalam pengembangan persamaan gelombang materi, Schrodinger mengetahui dari hasil karya Hamilton, adanya analogi antara mekanika Newton untuk partikel dan optika geometris. Schrodinger mempostulatkan, "Mekanika klasik Newton adalah bentuk khusus dari mekanika gelombang" [4].

Bagaimana menemukan aturan dimana amplitudo medan materi atau fungsi gelombang ψ dapat diperoleh untuk masing-masing persoalan dinamika? Jelasnya, fungsi gelombang $\psi(x)$ harus gayut keadaan dinamika partikel. Keadaan dinamiska ini ditentukan oleh gaya yang beraksi pada partikel dan energi total partikel. Namun, jika gaya adalah konservatif, gerak ditentukan oleh energi potensial $E_p(x)$ partikel. Sehingga, kita dapat berharap bahwa fungsi gelombang $\psi(x)$ harus gayut pada suatu cara pada energi potensial dan energi total partikel,

$$E = \frac{p^2}{2m} + E_p(x) \tag{1.19}$$

Aturan untuk menemukan $\psi(x)$ dinyatakan dalam bentuk persamaan diferensial, disebut *persamaan Schrodinger*, yang diformulasikan pada tahun 1926 oleh fisikawan Jerman Erwin Schrodinger. Persamaan ini, untuk kasus satu dimensi, adalah

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + E_p(x)\psi = E\psi, \tag{1.20}$$

dimana m adalah massa partikel. Persamaan Schrodinger adalah persamaan fundamental dalam mekanika kuantum sebagaimana persamaan Newton $\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt$ dalam mekanikan klasik atau persamaan Maxwell dalam elektromagnetik. Solusi ψ dari persamaan (1.20) gayut pada bentuk energi potensial $E_p(x)$.

1.1.9 Teori Formal Mekanika Kuantum

Dengan bantuan fungsi gelombang yang dihasilkan dari persamaan Schrodinger, kita dapat memperoleh informasi tingkat energi yang mungkin dari sistem, probabilitas menemukan sistem pada daerah ruang khusus, probabilitas transisi dari satu tingkat energi ke tingkat energi lain, frekuensi radiasi elektromagnetik yang diemisikan atau diserap, dan seterusnya.

Tinjau soal satu dimensi. Persamaan Schrodinger (1.20) dapat ditulis ulang dalam bentuk

$$\left[\frac{1}{2m}\left(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\right) + E_p(x)\right]\psi(x) = E\psi(x). \tag{1.21}$$

Ketika kita menulis sisi sebelah kiri, kita memfaktorkan keluar fungsi gelombang ψ sebagimana ia adalah faktor umum kuantitas dalam tanda kurung. Namun, masing-masing suku dalam kurung harus beraksi pada, atau beroperasi pada, $\psi(x)$ sesuai bentuk naturalnya. Yakni, $E_p(x)$ mengali dengan $\psi(x)$ namun d^2/dx^2 menghasilkan turunan kedua $\psi(x)$. Dalam bahasa matematika dapat kita katakan bahwa pernyataan

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}\left(-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\right) + E_p(x) \tag{1.22}$$

yang muncul dalam kurung adalah *operator*, ketika operator tersebut beraksi pada fungsi $\psi(x)$ (yakni, $\mathbf{H}\psi(x)$), menghasilkan fungsi baru sebagai hasil deret operasi matematika secara eksplisit terkandung dalam definisi $\mathbf{H}$. Secara khusus (1.21) dapat ditulis dalam bentuk simbolis

$$\mathbf{H}\psi(x) = E\psi(x), \tag{1.23}$$

yang berarti bahwa efek $\mathbf{H}$ pada $\psi(x)$ adalah mengalikan $\psi(x)$ dengan E konstan. Jelasnya, ketika $\mathbf{H}$ beroperasi pada fungsi sembarang hasilnya tak perlu fungsi yang sama dikalikan dengan konstanta, namun secara umum, fungsi yang lain, fungsi yang berbeda. Fungsi yang memenuhi persamaan (1.23) disebut *fungsi layak* dari operator $\mathbf{H}$, dan nilai terkait dari E adalah *nilai layak* operator.

Operator $\mathbf{H}$ yang diberikan oleh persamaan (1.22) memegang peranan penting dalam mekanika kuantum dan disebut *operator hamiltonian* sistem. Dalam mekanika klasik, energi total disebut hamiltonian tetap ketika ia dinyatakan dalam hubungannya dengan momentum dan koordinat sistem. Sehingga, untuk partikel yang bergerak dalam satu arah hamiltonian klasik adalah

$$H_{\text{klasik}} = \frac{1}{2m}p^2 + E_p(x). \tag{1.24}$$

Kita dapat menghubungkan hamiltonian mekanika klasik dan hamiltonian mekanika kuantum dalam cara yang sangat sederhana. Dengan membandingkan persamaan (1.22) dan (1.24), kita dapat mentransformasi hamiltonian klasik ke operator hamiltonian mekanika kuantum dengan membuat hubungan

$$p \to -i\hbar\frac{d}{dx}. \tag{1.25}$$

[Tanda minus dalam persamaan (1.25) adalah untuk kesesuaian]. Untuk gerak dalam tiga dimensi, hamiltonian klasik adalah

$$H_{\text{klasik}} = \frac{1}{2m}\mathbf{p}^2 + E_p(\mathbf{r}), \tag{1.26}$$

dimana $\mathbf{r}$ adalah vektor posisi partikel dan $\mathbf{p}^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$. Perluasan logis keterhubungan yang dinyatakan oleh persamaan (1.25) adalah

$$p_x \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z \to -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}. \tag{1.27}$$

Gunakan operator vektor ∇, baca del, didefinisikan oleh

$$\nabla = \mathbf{u}_x\frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{u}_y\frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{u}_z\frac{\partial}{\partial z},$$

kita dapat menulis persamaan (1.27) dalam bentuk yang lebih kompak,

$$\mathbf{p} \to -i\hbar\nabla. \tag{1.28}$$

Ganti $\mathbf{p}$ dalam hamiltonian klasik dengan operator $-i\hbar\nabla$, kita peroleh operator mekanika kuantum

$$\begin{aligned}\mathbf{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + E_p(\mathbf{r}) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial z^2}\right) + E_p(\mathbf{r})\end{aligned} \tag{1.29}$$

Operasikan dengan $\mathbf{H}$ pada fungsi $\psi(r)$, kita memiliki

$$\mathbf{H}\psi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + E_p(\mathbf{r})\psi.$$

Jika ψ adalah fungsi layak dari $\mathbf{H}$, kita memiliki $\mathbf{H}\psi = E\psi$, dimana E adalah nilai layak dari $\mathbf{H}$, atau

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) + E_p(\mathbf{r})\psi = E\psi. \tag{1.30}$$

Persamaan (1.30) adalah persamaan Schrodinger dalam tiga dimensi. Oleh karena itu, kita katakan bahwa persamaan (1.29) memberikan operator hamiltonian mekanika kuantum dari partikel dalam tiga dimensi.

1.1.10 Spektrum Hidrogen

Energi keadaan stasioner meningkat dengan bilangan kuantum n. Perbedaan energi antara tingkat-tingkat yang berhubungan, terhadap n_1 dan n_2 (dengan $n_2 > n_1$) untuk ion seperti hidrogen adalah

$$E_2 - E_1 = \left(-\frac{RhcZ^2}{n_2^2}\right) - \left(-\frac{RhcZ^2}{n_1^2}\right) = RhcZ^2\left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2}\right) \tag{1.31}$$

Ketika kita menerapkan kondisi Bohr, $\nu = (E_2 - E_1)/h$, persamaan (1.1.6), dan mengabaikan efek rekoil, frekuensi radiasi elektromagnetik yang diemisikan atau diabsorpsi oleh atom dalam transisi antara keadaan-keadaan berhubungan dengan n_1 dan n_2 adalah

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h} = RcZ^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right). \tag{1.32}$$

1.1.11 Kuantisasi Momentum Sudut

Energi sistem atom terkuantisasi. Kita dapat mengeksplorasi kemungkinan bahwa beberapa kuantitas fisis yang lain juga terkuantisasi; yakni, terbatas pada hanya nilai tertentu untuk sistem. Momentum dan atau energi adalah *konstanta gerak*; yakni, kuantitas yang nilainya tak berubah selama gerak partikel. Apakah konstanta gerak terkuantisasi, misal momentum sudut, juga terkuantisasi?

Kita mengetahui bahwa untuk gerak dalam gaya pusat, momentum sudut $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ relatif terhadap pusat gaya adalah konstanta gerak. Dalam mekanika kuantum hal ini juga benar. Analisa teoritik dan eksperimental yang hati-hati menunjukkan bahwa momentum sudut terkuantisasi; yakni, momentum sudut memiliki hanya nilai diskrit. Dapat ditunjukkan bahwa besar momentum sudut dicirikan oleh nilai

$$L^2 = l(l+1)\hbar^2, \tag{1.33}$$

dimana $l = 0, 1, 2, 3, ...$ adalah integer positip. Namun, dalam atom seperti hidrogen, nilai-nilai l untuk masing-masing tingkat energi dibatasi oleh nilai-nilai n yang berhubungan dengan tingkat energi, dan nilai maksimum l adalah $n - 1$. Oleh karena itu, *dalam medan coulomb, untuk tiap-tiap nilai n, mencirikan tingkat energi, terdapat n nilai berbeda momentum sudut dari l=0 hingga* $l = n - 1$.

Sebagai tambahan terhadap pembatasan besar momentum sudut, bukti eksperimen menunjukkan bahwa momentum sudut juga dibatasi dalam *arah*, kondisi yang disebut *kuantisasi ruang*. Hal ini berarti bahwa sudut $\mathbf{L}$ yang dibuat dengan sumbu z tak sembarang; dalam kata lain, dapat ditunjukkan bahwa nilai komponen L_z dikuantisasi dan diberikan oleh

$$L_z = m_l \hbar, \tag{1.34}$$

dimana $m_l = \pm 1, \pm 2, \pm 3, ..., \pm l$; yakni m_l adalah integer positip atau negatip dari 0 hingga l. Bilangan kuantum m_l tak dapat bernilai lebih besar dari l, karena L_z akan kemudian menjadi lebih besar dari $|\mathbf{L}|$, yang adalah tak mungkin. Oleh karena itu, kita dapat menyimpulkan, *untuk tiap-tiap nilai momentum sudut, terdapat nilai* $2l+1$ *dari* m_l *atau* $2l+1$ *arah yang berbeda dari* $\mathbf{L}$.

Dalam mekanika klasik, momentum sudut dalam gaya sentral adalah konstan dalam besar dan arah. Namun, dalam mekanika kuantum, besar momentum sudut diberikan oleh persamaan (1.33) dan salah satu komponennya oleh persamaan (1.34). Namun, untuk mencirikan arah momentum sudut, kita perlu mengetahui dua komponen yang lain, L_x dan L_y. Analisa yang lebih detil menunjukkan bahwa, *adalah tak mungkin untuk mengetahui, secara pasti, lebih dari satu komponen momentum sudut.*

Karenanya, jika kita mengetahui L_z, pengetahuan terbaik kita tentang L_x dan L_y adalah ketidakpastian ΔL_x dan ΔL_y, yang memenuhi hubungan ketidakpastian

$$\Delta L_x \, \Delta L_y \geq \frac{1}{2} \hbar L_z.$$

Hubungan ini sama dengan hubungan ketidakpastian untuk posisi dan momentum, energi dan waktu. Dalam kata lain, *dalam mekanika kuantum, adalah tak mungkin secara presisi menentukan arah momentum sudut.*

1.1.12 Spin Elektron

Bumi, sebagai tambahan terhadap gerak orbitalnya mengelilingi matahari, memiliki gerak rotasional atau gerak spin terhadap sumbunya. Karenanya, momentum sudut total dari bumi adalah penjumlahan vektor momentum sudut orbitalnya dan momentum sudut spinnya. Dengan analogi, kita berharap bahwa elektron terikat dalam atom juga berspin. Namun, kita tak dapat mendeskripsikan elektron sebagai partikel berspin bola karena kita mengabaikan struktur internal elektron. Sehingga, kita tak dapat menghitung momentum sudut spin elektron dalam cara yang sama kita menghitung momentum sudut spin bumi dalam hubungannya dengan jari-jari dan kecepatan sudutnya.

Ide spin elektron pertama kali diajukan pada tahun 1926 oleh G. Uhlenbeck dan S. Goudsmith untuk menjelaskan bentuk tertentu spektrum atom satu elektron. Jika $\mathbf{S}$ adalah momentum sudut *spin* elektron dan $\mathbf{L}$ adalah momentum sudut *orbital*, momentum sudut *total* adalah $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Untuk nilai-nilai yang diberikan dari $\mathbf{L}$ dan $\mathbf{S}$, nilai $\mathbf{J}$ gayut pada arah relatif $\mathbf{L}$ dan $\mathbf{S}$, dan kita dapat berharap hal ini ditunjukkan oleh sifat-sifat atom tertentu.

Keberadaan spin elektron terlahir oleh akumulasi besar bukti eksperimen. Sebagai contoh, spin elektron diwujudkan dalam cara yang sangat langsung oleh eksperimen Stern-Gerlach, pertama kali dilakukan pada tahun 1924. Dikarenakan elektron adalah partikel bermuatan, spin elektron seharusnya menghasilkan momen dipol magnetik spin atau momen dipol magnetik intrinsik $\mathbf{M}_S$ elektron. Jika elektron dapat dideskripsikan sebagai benda tegar bermuatan yang berotasi, hubungan antara $\mathbf{M}_S$ dan $\mathbf{S}$ akan sama sebagaimana hubungan antara $\mathbf{M}_L$ dan $\mathbf{L}$. Namun, hal ini tidaklah demikian, dan kita harus menulis

$$\mathbf{M}_S = -g_S \frac{e}{2m_e} \mathbf{S},$$

dimana g_S disebut *rasio giromagnetik* elektron. Momen dipol magnetik total dari elektron yang mengorbit dan berspin adalah, karenanya

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_L + \mathbf{M}_S = -\frac{e}{2m_e}(\mathbf{L} + g_S \mathbf{S}),$$

dan tentunya, gayut tak hanya pada besar $\mathbf{L}$ dan $\mathbf{S}$ namun juga pada arah relatif mereka [1].

1.2 Atom Berelektron Banyak

1.2.1 Pengantar

Seluruh atom, kecuali hidrogen dan ion tertentu, memiliki beberapa elektron. Bagaimana kita mendeskripsikan gerak tiap-tiap elektron individu dalam atom berelektron banyak, karena sebagai tambahan interaksi kelistrikan tiap-tiap elektron dengan inti, kita harus meninjau interaksi diantara elektron? Sehingga, energi potensial atom keseluruhan adalah

$$E_p = \Sigma_{\text{seluruh elektron}} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + \Sigma_{\text{seluruh pasangan}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}.$$

Penjumlahan terakhir menyediakan penggandengan gerak elektron, dan karenanya kita tak dapat meninjau tiap-tiap elektron sebagai partikel yang bergerak bebas terhadap elektron lain. Modifikasi gerak satu elektron mempengaruhi gerak seluruh elektron yang lain. Karenanya, kita tak dapat menyatakan energi individu tiap-tiap elektron, namun hanya energi atom (atau ion) keseluruhan. Untuk alasan yang sama, kita tak dapat menyatakan fungsi gelombang untuk tiap-tiap elektron, namun hanya fungsi gelombang untuk atom keseluruhan. Persoalan atom berelektron banyak tak dapat diselesaikan secara eksak, karenanya diperlukan aproksimasi tertentu.

1.2.2 Atom Helium

Dari seluruh atom banyak elektron, yang paling sederhana adalah atom dengan dua elektron, misal atom helium. Energi potensial atom helium dua elektron adalah

$$E_p = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}.$$

Dua suku pertama berhubungan dengan tarik-menarik antara inti dan tiap-tiap elektron dan suku terakhir berhubungan dengan tolak-menolak antara dua elektron.

1.2.3 Prinsip Eksklusi Pauli

Tinjau atom berelektron banyak dimana masing-masing elektron bergerak dalam medan listrik tarik-menarik yang dihasilkan oleh interaksi elektron dengan inti ditambah medan listrik tolak-menolak rata-rata dikarenakan interaksi elektron dengan elektron lain. Oleh karena itu, kita dapat mendeskripsikan keadaan dinamika tiap-tiap elektron dengan empat bilangan kuantum: n, l, m_l, dan m_s. Tiga bilangan kuantum pertama menunjukkan gerak orbit dan bilangan kuantum keempat menunjukkan arah spin. Energi gerak orbital gayut hanya pada n dan l, sehingga tiap-tiap keadaan elektron dicirikan dengan simbol nl. Seluruh elektron yang memiliki bilangan kuantum nl yang sama disebut *ekivalen*. Keadaan lengkap atom dicirikan, dengan menunjukkan jumlah elektron ekivalen dalam tiap-tiap keadaan nl. Hal ini adalah dasar konsep *konfigurasi*. Jika terdapat x elektron dalam keadaan nl. hal ini ditunjukkan sebagai nl^x. Sebagai contoh, konfigurasi keadaan dasar helium adalah $1s^2$ dan konfigurasi eksitasi pertama adalah $1s\ 2s$.

Regularitas dalam sifat-sifat atom menyarankan regularitas tertentu atau periodisitas gerak elektron dalam atom. Untuk menjelaskan regularitas ini, Wolfgang Pauli sekitar tahun 1925 mengajukan aturan baru, disebut *prinsip eksklusi*. Prinsip ekslusi Pauli menyatakan bahwa: *tak ada dua elektron dalam sebuah atom dapat memiliki himpunan bilangan kuantum yang sama*.

Bibliografi

[1] Marcelo Alonso, Edward J. Finn, *University Physics Volume III: Quantum and Statistical Physics*, Addison-Wesley, 1980.

[2] Hugh D. Young, Roger A. Freedman, T.R. Sandin, A. Lewis Ford, *Fisika Universitas Edisi 10*, Alih Bahasa: Endang Juliastuti, Erlangga, Jakarta, 2002.

[3] Miftachul Hadi, *A Brief of Classical Mechanics*, fisik@net, 2005, http://www.fisika.net.

[4] Miftachul Hadi, *A Brief of Wave Mechanics*, fisik@net, 2005, http://www.fisika.net.

[5] Miftachul Hadi, Suhadi Mulyono, *Mekanika Kuantum: Spin*, http://sivitas.lipi.go.id/mift001, 2008.

[6] Bob Foster, *Terpadu Fisika SMU Jilid 3B*, Penerbit Erlangga, 2000.