Penentuan Energi Dasar Atom Boron dengan Menggunakan Metode Variasional Satu Parameter

Irsan Rahman^{1*} dan Fisca Dian Utami²

¹Program studi Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Muslim Maros, Jl. Dr. Ratulangi No. 62 Maros, Sulawesi Selatan 90511, Indonesia

²Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung, Jl. Ganesha 10, Bandung 40132, Indonesia

**irsan275@yahoo.co.id*

ABSTRAK

Studi ini bertujuan untuk menghitung energi dasar atom Boron dengan menggunakan metode variasional satu parameter. Penghitungan energi dasar atom Boron dilakukan dengan menganggap fungsi gelombang atom Boron sama dengan fungsi gelombang atom Hidrogen. Pertama, perhitungan energi dilakukan dengan mengabaikan interaksi antar elektron. Selanjutnya energi interaksi antar elektron dihitung dengan menggunakan teori perturbasi atau teori gangguan. Terakhir fungsi energi dasar atom Boron divariasikan terhadap variabel Z yang kemudian memberikan besar nilai energi dasar atom Boron $-664,83 \text{ eV}$.

Kata kunci: atom Boron, energi dasar, metode variasional

ABSTRACT

This study discusses the calculation of the ground state energy of Boron atom using one-parameter variational method. Our calculations are based on the assumption that the wave function of a Boron atom is identical to the wave function of a Hydrogen atom. Initially, the energy calculation is determined by omitting the interaction between the electrons. Furthermore, this interaction energy is calculated using perturbation theory or interaction theory. In addition, we modified the energy function of Boron ground state with the variable Z and found that the value of the ground state atomic energy of Boron is -664.83 eV .

Keywords: Boron atom, ground state energy, variational method

I. PENDAHULUAN

Untuk menentukan energi dari sebuah atom pada dasarnya dapat dilakukan dengan cara menyelesaikan persamaan Schrodinger. Namun untuk atom-atom berelektron banyak, penyelesaian persamaan Schrodinger cenderung sulit untuk diselesaikan karena melibatkan persamaan yang cukup rumit. Beberapa pendekatan dikembangkan untuk menentukan energi dasar atom berelektron banyak seperti metode Hartree-Fock, Density Function Theory (DFT), metode variasional, dan lain sebagainya (Griffith, 1995; Puchalski dan Pachucki, 2006).

Pada kajian ini metode yang digunakan adalah metode variasional. Metode variasi ini adalah metode yang cukup baik dalam menentukan energi dasar dari sebuah atom (Mckenzie dan Drake, 1991; Griffith, 1995; Hu dkk., 2006). Disamping penentuan energi dasar, metode ini juga berpotensi untuk diaplikasikan dalam penentuan keadaan tereksitasi suatu atom menggunakan prinsip orthogonalitas dari solusi persamaan Schrodinger (Piela, 2014). Penggunaan metode ini sangat membantu dalam kemudahan perhitungan, mengurangi kompleksitas perhitungan dan memberikan batas error yang relatif kecil jika dibandingkan dengan data eksperimen (Rioux, 1999). Ide dasar dari metode ini adalah dengan meminimalisasi fungsi energi sistem untuk memperoleh suatu nilai parameter efektif yang akan digunakan untuk menghitung energi dasar sistem.

Perhitungan energi dasar atom Boron diperoleh dengan menyelesaikan persamaan energi Eigen dan energi antar partikel dihitung dengan menggunakan teori perturbasi atau gangguan. Fungsi gelombang atom Boron pada penelitian ini dianggap sama dengan fungsi gelombang atom Hidrogen dengan dua elektron pada kulit $n = 1$ dan tiga elektron pada kulit $n = 2$ (Eisberg, 1985).

II. METODE

Pada kajian ini, kami menggunakan bentuk Hamiltonian dari atom Boron yang mengacu pada kajian sebelumnya (Eisberg, 1985) ditampilkan pada persamaan (1)

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^5 -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^5 -\frac{kZe^2}{r_i} + \sum_{i<j}^5 -\frac{ke^2}{r_{ij}} \quad (1)$$

Indeks *i, j* menunjukkan elektron pada atom dengan elektron **1, 2** terletak pada kulit pertama *n = 1* dan elektron **3, 4**, dan **5** terletak pada kulit kedua *n = 2*. Fungsi gelombang elektron pada atom boron yang ternormalisasi dapat dituliskan

$$\varphi_1 = \varphi_2 = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a^3}} e^{-Zr_i/a} \quad (2)$$

$$\varphi_3 = \varphi_4 = \varphi_5 = \sqrt{\frac{Z^3}{32\pi a^3}} \left(2 - \frac{Zr_i}{a}\right) e^{-Zr_i/2a} \quad (3)$$

Dari fungsi coba pada persamaan (2) dan (3) nilai espektasi energi dari Hamiltonian sistem dapat diperoleh dari persamaan berikut

$$E = \langle H \rangle = \frac{\langle \psi^* | H | \psi \rangle}{\langle \psi^* | \psi \rangle} \quad (4)$$

Nilai energi pada persamaan (4) adalah nilai energi atom Boron tanpa melibatkan energi interaksi antar elektron. Energi interaksi antar elektron dapat diperoleh dengan menggunakan teori gangguan

$$\langle V_{ij} \rangle = \left\langle \varphi_{12345} \left| \frac{ke^2}{r_{ij}} \right| \varphi_{12345} \right\rangle \quad (5)$$

dengan φ_{12345} adalah fungsi coba yang diperoleh dari persamaan (2) dan (3).

III. HASIL DAN DISKUSI

3.1 Nilai ekspektasi dari Hamiltonian

Dengan menggunakan fungsi coba pada persamaan (2) dan (3) maka nilai ekspektasi dari Hamiltonian persamaan (4) didapatkan

$$\langle E \rangle = \left\langle \varphi_{12345} \left| \sum_{i=1}^5 -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^5 -\frac{kZe^2}{r_i} \right| \varphi_{12345} \right\rangle \quad (6)$$

Dengan menggunakan separasi variabel diperoleh nilai-nilai eigen untuk masing-masing elektron sebagai berikut :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{kZe^2}{r_1} \right) \varphi_1 = E_1 \varphi_1 \quad (7)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{kZe^2}{r_2} \right) \varphi_2 = E_2 \varphi_2 \quad (8)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_3^2 - \frac{kZe^2}{r_3} \right) \varphi_3 = E_3 \varphi_3 \quad (9)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_4^2 - \frac{kZe^2}{r_4} \right) \varphi_4 = E_4 \varphi_4 \quad (10)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_5^2 - \frac{kZe^2}{r_5} \right) \varphi_5 = E_5 \varphi_5 \quad (11)$$

Dimana nilai ekspektasi energi

$$\langle E \rangle = E_1 + E_2 + E_3 + E_4 + E_5 \quad (12)$$

dengan memecahkan persamaan (7)-(11) maka diperoleh

$$E_1 = E_2 = Z^2 E_0 \quad (13)$$

$$E_3 = E_4 = E_5 = Z^2 \frac{E_0}{4} \quad (14)$$

dimana E_0 adalah energi dasar dari atom Hidrogen (-13,6 eV). Dari kelima energi di atas maka nilai energi ekspektasi

$$\langle E \rangle = E_1 + E_2 + E_3 + E_4 + E_5$$

$$\langle E \rangle = \frac{11}{4} Z^2 E_0 \quad (15)$$

3.2 Energi interaksi antar elektron

Dengan menggunakan fungsi coba persamaan (2) dan (3) maka energi interaksi antar elektron pada persamaan (5) diperoleh

$$\langle V_{ee} \rangle = \langle V_{12} \rangle + \langle V_{13} \rangle + \langle V_{14} \rangle + \langle V_{15} \rangle + \langle V_{23} \rangle + \langle V_{24} \rangle + \langle V_{25} \rangle + \langle V_{34} \rangle + \langle V_{35} \rangle + \langle V_{45} \rangle$$

$$\langle V_{ee} \rangle = -4,31 Z E_0 \quad (16)$$

Dengan indeks i, j menggambarkan interaksi antara elektron i dengan elektron j .

Dari hasil (15) dan (16) maka energi total sistem diperoleh

$$E_{total} = E_{tanpa\ interaksi} + E_{interaksi}$$

$$E_{total} = \frac{11}{4} Z^2 E_0 - 4.31 Z E_0 \quad (17)$$

3.3 Menggunakan metode variasional

Selanjutnya menghitung energi sistem dengan memvariasikan parameter Z . Hamiltonian pada kondisi ini

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^5 -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^5 \frac{kZe^2}{r_i} + \sum_{i=1}^5 \frac{k(Z-5)e^2}{r_i} + \sum_{i<j}^5 \frac{ke^2}{r_{ij}} \quad (18)$$

Dengan menyelesaikan persamaan Hamiltonian di atas memberikan diperoleh solusi persamaan energi

$$\langle H \rangle = \left(-\frac{11}{4} Z^2 + 23.19 Z \right) E_0 \quad (19)$$

Sehingga diperoleh parameter Z untuk energi minimum $\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial Z} = 0$, $Z = 4,216$. Dengan memasukkan nilai parameter Z pada persamaan (19) diperoleh energi dasar atom Boron -664.83 eV atau berbeda **0,437%** dari nilai eksperimen (energi atom Boron dari eksperimen -667.75 eV).

IV. KESIMPULAN

Metode variasional dengan menggunakan satu parameter telah berhasil diaplikasikan untuk menentukan energi dasar atom Boron. Fungsi coba yang dipakai adalah fungsi gelombang pada atom Hidrogen. Penentuan energi dasar atom Boron dengan menggunakan metode Variasional memberikan nilai -664.83 eV. Hasil ini cukup baik karena perbedaan nilai yang didapat relatif kecil jika dikomparasikan dengan nilai eksperimen yaitu sebesar **0,437%**.

dimana hasil eksperimen menunjukkan nilai sekitar -667.75 eV. Ini membuktikan bahwa metode variasional sangat cocok dalam penentuan energy dasar sebuah atom. Persentase perbedaan ini juga dapat diperkecil dengan memasukkan efek relativistik dan efek spin elektron dalam perhitungan.

DAFTAR PUSTAKA

- D. Griffith, 1991. "Introduction to Quantum Mechanics", Prentice Hall, New Jersey, 1995
- D.K. Mckenzie dan G.W.F. Drake, "Variational Calculation for Ground State of Lithium and the QED Corrections for Li-like Ions", *Phys. Rev. A*, 44 (11),
- F. Rioux, 1999. "Atomic Variational Calculations: Hydrogen to Boron", *Chem. Educator*, 4(2), 40-43.
- L. Piela, 2014. "Two Fundamental Approximate Methods", *Ideas of Quantum Chemistry (Second Edition)*, Elsevier, 231-256,
- M. Puchalski dan K. Pachucki, 2006. "Ground-state Wave Function and Energy of the Lithium Atom", *Phys. Rev. A* 73,
- R. Eisberg, 1985. "Quantum Mechanics of Atom, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles. Second edition", John Wiley and Sons, New York,
- X-Q. Hu, J. Xu, Y. Ma, dan R-L . Zheng, 2006. "Four-parameter Sceme for Ground Level of Helium Atom, *Commun, Theo. Phys.* 45,