

Penentuan Energi Dasar Ion B^{2+} Dengan Menggunakan Metode Variasional Dua Parameter

Nursakinah Annisa Lutfin^{*1}, Fauziah A²

¹ Universitas Sulawesi Barat

² Institut Teknologi Bandung

e-mail: ^{*}nursakinahlutfin@unsulbar.ac.id, ²fauziah.physics@gmail.com

Abstrak

Penentuan energi dasar ion B^{2+} telah dilakukan dengan menggunakan metode variasional dengan dua parameter. Pada prinsipnya metode ini menggunakan suatu fungsi yang ternormalisasi. Selain itu, dengan sebuah fungsi coba dan penggunaan parameter akan memberikan pendekatan dan faktor koreksi yang lebih baik untuk memperoleh nilai energi dasar yang sebenarnya. Pada penelitian ini dilakukan pendekatan dengan membandingkan energi ion B^{2+} pada keadaan dasar yang diperoleh terhadap nilai energi eksperimen. Fungsi gelombang yang digunakan yaitu pendekatan fungsi gelombang atom Hidrogen. Energi Dasar ion B^{2+} dengan menggunakan metode variasional 1 parameter tanpa interaksi antar elektron yaitu sebesar -765 eV, sedangkan energi dengan interaksi antara elektron dengan 1 parameter yaitu -629.4823 eV. Energi Dasar ion B^{2+} dengan menggunakan 2 parameter tanpa interaksi elektron secara numerik yaitu sebesar -679.9999 eV, sedangkan energi dasar dengan interaksi elektron menggunakan metode variasional untuk 2 parameter yaitu -633.4906 eV. Perbandingan nilai yang diperoleh dengan membandikan hasil yang diperoleh dan hasil eksperimen memberikan persentase kesalahan perhitungan variasional 1 parameter energi tanpa interaksi sebesar 19.99% dan sebesar 1.26 % untuk energi dengan interaksi antara elektron, sedangkan untuk variasional 2 parameter tanpa interaksi sebesar 6.66% dan sebesar 0.633 % untuk energi dengan interaksi antara elektron .

Kata kunci: Metode Variasional, ion B^{2+} , Energi Dasar

1. PENDAHULUAN

Riccardo Borghi (2018) menyatakan bahwa mekanika kuantum dikenal dengan kerumitan problem matematika yang sering kali membuat kita lupa untuk memahami konsep fisiknya. Sehingga diperlukan metode untuk menghindari penggunaan problem matematika yang terlalu sulit. Salah satu masalah yang masih sulit diselesaikan adalah (*time-independent*) *Schrodinger equation*. Bahkan Wichmann (1971) dalam bukunya *Quantum Physics* menuliskan bahwa tidak ada pendekatan yang tepat untuk menyelesaikan persamaan *Scrodinger*.

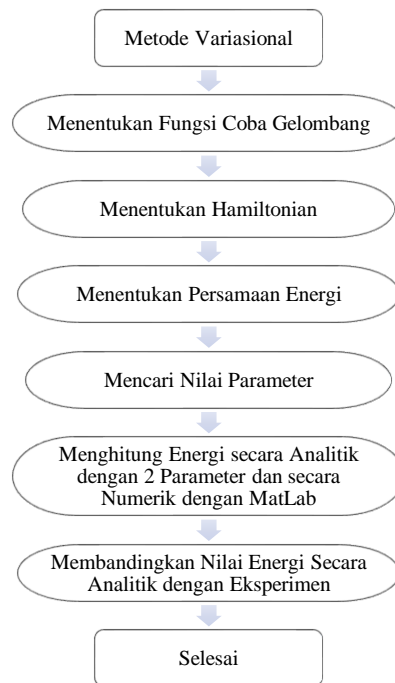
Penyelesaian persamaan *Scrodinger* diperlukan untuk menentukan energi suatu sistem. Untuk sistem sederhana seperti partikel dalam kotak, gerak harmonis satu dimensi (S. Keith Dunn: 2001) atau sistem atom hidrogen penyelesaian persamaan Schrodinger telah pernah dilakukan dan tidak membutuhkan kalkulasi yang terlalu rumit. Namun untuk sistem yang terdiri atas banyak partikel seperti pada atom berelektron banyak atau pada suatu molekul penyelesaian persamaan *Schrodinger* merupakan sesuatu yang sangat rumit. Sehingga, diperlukan suatu metode untuk menghitung *energi dasar* tanpa menyelesaikan persamaan *Scrodinger*. Metode pendekatan yang banyak digunakan dalam penentuan energi level dari sebuah atom atau molekul adalah metode variasional.

Metode variasional adalah salah satu cara untuk menemukan pendekatan energi terendah atau keadaan dasar. Adapun dasar metode variasi yaitu memilih sebuah fungsi gelombang yang bergantung pada satu atau lebih parameter dan menemukan nilai-nilai parameter ini dengan nilai harapan energi serendah mungkin. Tulisan ini akan membahas mengenai penggunaan metode variasional dalam mekanika kuantum untuk

menghitung energi dasar ion B^{2+} dengan menggunakan fungsi coba dua parameter yaitu α dan β . Kemudian hasil yang diperoleh dibandingkan dengan hasil eksperimen ($E_{\text{exp}} = -637,531 \text{ eV}$) dan penelitian sebelumnya.

2. METODE PENELITIAN

Penelitian ini merupakan penelitian yang berdasarkan studi literatur dan metode analitik dengan menggunakan metode variasional untuk menentukan energi dasar ion B^{2+} . Berdasarkan nilai energi dasar yang diperoleh dari hasil eksperimen, akan dilakukan pendekatan perhitungan untuk menentukan energi dasar tersebut. Berikut ini adalah bagan alur kerja dalam menghitung energi dasar ion B^{2+} dalam penelitian ini :



Gambar 1. Alur Kerja

2.1 Metode Variasional

Griffith (2005) menyatakan bahwa metode variational dapat digunakan untuk menghitung energi dasar, E_g , untuk sistem hamiltonian H yang diketahui dan persamaan *Schrodinger* yang tidak dapat diselesaikan. Metode variasional merupakan metode yang cukup sederhana, namun menggunakan prinsip dasar metode matematika yang rumit. Pada prinsipnya, metode variational ini didasari oleh operator Hamiltonian (H) yang merupakan operator penentu energi dasar.

Hal pertama yang dilakukan pada metode variational adalah memilih fungsi gelombang ternormalisasi ψ sembarang. Berlaku :

$$E_g \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \equiv \langle H \rangle \quad (1)$$

Persamaan di atas merupakan nilai ekspektasi H , dalam keadaan ψ adalah taksiran tinggi dari energi dasar.

Untuk sembarang fungsi gelombang ternormalisasi ϕ yang kondisi ikatannya sesuai dengan kondisi ikatan ψ maka berlaku :

$$\int \phi^* H \phi d\tau \geq E_g, \quad \phi \text{ ternormalisasi} \quad (2)$$

Dengan ψ adalah fungsi gelombang partikel yang sesungguhnya, sedangkan ϕ adalah fungsi gelombang aproksimasi atau fungsi variasi. Untuk membuktikan teorema tersebut maka suatu fungsi dapat diekspansi

menjadi kombinasi linear yang suku-sukunya merupakan fungsi eigen. Untuk itu ϕ diekspansi ke dalam fungsi eigen ψ_k sehingga :

$$\phi = \sum_k a_k \psi_k \quad (3)$$

karena ψ_k adalah fungsi eigen maka padanya berlaku :

$$H\psi_k = E_k \psi_k \quad (4)$$

Substitusi pers. (3) ke ruas kiri pers. (2) membuat ruas kiri menjadi :

$$\int \phi^* H \phi d\tau = \int \sum_k a_k^* \psi_k^* H \sum_j a_j \psi_j d\tau$$

Dengan menggunakan persamaan eigen (4) maka ruas kiri pers. (2) menjadi :

$$\int \phi^* H \phi d\tau = \int \sum_k a_k^* \psi_k^* \sum_j a_j E_j \psi_j d\tau \quad (5)$$

Karena a_j , a_k , dan E_k adalah bukan fungsi maka mereka dapat dikeluarkan dari tanda integral, sehingga :

$$\int \phi^* H \phi d\tau = \sum_k \sum_j a_k^* a_j E_j \int \psi_k^* \psi_j d\tau = \sum_k \sum_j a_k^* a_j E_j \delta_{kj} \quad (6)$$

Perlu diingat bahwa δ_{kj} berharga 1, jika $k = j$ dan 0 jika $k \neq j$ sehingga ruas kiri pers. (2) menjadi :

$$\int \phi^* H \phi d\tau = \sum_k a_k^* a_k E_k \text{ atau } \int \phi^* H \phi d\tau = \sum_j a_j^* a_j E_j \quad (7)$$

Karena $a_k^* a_k = a_k^2$ maka

$$\int \phi^* H \phi d\tau = \sum_k a_k^2 E_k \quad (8)$$

Mengingat E_g adalah tingkat energi terendah maka E_k pasti $> E_g$ sehingga :

$$\int \phi^* H \phi d\tau = \sum_k a_k^2 E_k > \sum_k a_k^2 E_g \quad (9)$$

Maka

$$\int \phi^* H \phi d\tau > E_g \sum_k a_k^2 \quad (10)$$

Karena ϕ adalah ternormalisasi maka $\int \phi^* \phi d\tau = 1$, dan jika ekspansi pers (3) dimasukkan ke dalam kondisi normalisasi ini maka :

$$1 = \int \phi^* \phi d\tau = \sum_k \sum_j a_k^* a_j \int \psi_k^* \psi_j d\tau = \sum_k \sum_j a_k^* a_j \delta_{kj} = \sum_k |a_k|^2 \quad (11)$$

Jika $\sum_k |a_k|^2 = 1$, dimasukkan pada pers. (10) maka diperoleh :

$$\int \phi^* H \phi d\tau \geq E_g \quad \phi \text{ ternormalisasi} \quad (12)$$

Dengan demikian pers.(2) sudah terbukti.

Teorema dengan pernyataan seperti pada pers. (2) adalah jika ϕ ternormalisasi. Bagaimana jika ϕ tidak ternormalisasi. Fungsi ϕ yang tidak ternormalisasi akan menjadi ternormalisasi jika dikalikan dengan suatu bilangan yaitu A yang disebut faktor normalisasi sehingga pers. (12) menjadi :

$$A^2 \int \phi^* H \phi d\tau \geq E_g \quad (13)$$

Harga A dapat dihitung dari sifat fungsi ternormalisasi yaitu $A^2 \int \phi^* \phi d\tau = 1$, jadi pers. (3) dapat ditulis menjadi :

$$\frac{\int \phi^* H \phi d\tau}{\int \phi^* \phi d\tau} \geq E_g \quad (14)$$

Keberhasilan penggunaan metode variasi ini ditentukan oleh kemampuan memformulasi ϕ berdasarkan data *boundary condition*.

Fungsi ϕ disebut fungsi variasi dan integral (2) atau integral (14) disebut integral variasional. Untuk dapat memperoleh aproksimasi yang bagus terhadap energi ground state E_g maka harus mencoba beberapa fungsi variasi yang memberikan hasil terendah tetapi tidak lebih rendah dari E_g yang sesungguhnya (yaitu E_g yang diperoleh melalui eksperimen).

2.2. Menentukan Fungsi Coba Gelombang

Jika diambil ψ_1 sebagai fungsi gelombang *ground state* yang sesungguhnya, dengan demikian berlaku:

$$H\psi_1 = E_g\psi_1 \quad (15)$$

Untuk fungsi variasi yang digunakan sama dengan ψ_1 , maka dengan mensubstitusi pers. (15) ke dalam pers. (2) akan terlihat bahwa integral variasional tepat sama dengan E_g . Jadi fungsi gelombang keadaan dasar menghasilkan integral variasional terendah untuk suatu sistem. Dalam prakteknya orang sering memasukkan beberapa parameter ke dalam fungsi variasi untuk memperoleh integral variasional yang semakin mendekati energi keadaan dasar yang sesungguhnya. Untuk kasus ion B^{2+} dalam penelitian ini digunakan nilai $Z = 5$ dan fungsi coba gelombang (Zettili : 2001) dalam bentuk dua parameter sebagai berikut:

$$\psi_1 = \psi_2 = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi a^3}} e^{-\frac{\alpha r_1}{a}} \quad \psi_3 = \sqrt{\frac{\alpha^3}{32\pi a^3}} \left(2 - \frac{\beta r_3}{a}\right) e^{-\frac{\alpha r_3}{2a}} \quad (16)$$

2.3 Menentukan Hamiltonian

Untuk menghitung energi keadaan dasar sistem untuk ion B^{2+} berlaku persamaan *Schrodinger* :

$$\left[-\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{z}{r_1} - \frac{z}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|} \right] \psi = E\psi \quad (17)$$

dengan operator Hamiltonian menjadi seperti di bawah ini :

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{z}{r_1} - \frac{z}{r_2} + \frac{1}{|r_1 - r_2|} \quad (18)$$

Dimana r_1 dan r_2 merupakan koordinat kedua elektron, $|r_1 - r_2|$ adalah jaraknya, dan Z adalah nomor atom (Pan, dkk : 2004), dimana nomor atom untuk ion B^{2+} dalam penelitian ini adalah 5.

2.4 Menentukan Persamaan Energi

Secara lengkap hasil integrasi hamiltonian untuk ion B^{2+} yang terdiri dari 3 elektron yang mengelilingi inti nukleus dengan 5 proton dan neutron menggunakan dua parameter α dan β .

Hamiltonian untuk sistem ini didefinisikan sebagai berikut.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \nabla_3^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{\alpha}{r_1} + \frac{\alpha}{r_2} + \frac{\beta}{r_3} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{|r_1 - r_2|} + \frac{1}{|r_1 - r_3|} + \frac{1}{|r_2 - r_3|} \right) \quad (19)$$

Hamiltonian ini terdiri dari energi tanpa interaksi yaitu, energi kinetik dan energi potensial dari ion B^{2+} dan energi interaksi yang terjadi antara ketiga elektron yang mengelilingi inti B^{2+} .

2.5 Menentukan Nilai Parameter Dan Energi Dasar

Penyelesaian nilai parameter dan energi dasar dilakukan dengan 2 cara yaitu secara analitik dan numerik. Penyelesaian analitik dilakukan dengan pendekatan metode variasional, sedangkan numerik dilakukan dengan menggunakan fungsi *nelder* dan *fminsearch* pada *MatLab*.

2.6 Membandingkan Energi Dasar

Langkah terakhir yang dilakukan dalam penelitian ini adalah membandingkan energi dasar yang diperoleh dari hasil analitik dan numerik dengan data eksperimen dan penelitian lainnya. Berikut ini adalah data hasil penelitian nilai energi dasar ion B²⁺ dengan metode variasional.

Tabel 1. Nilai Energi Dasar Ion B²⁺

Peneliti	Metode	Energi (V)
Youhei Tsubono	Variasional 2 parameter	-635.965
Frank, Rioux	Variasional 1 parameter	-629,604
Eksperimen		-637.531

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

3.1. Penentuan Energi Ion B²⁺ Dua Parameter (Numerik)

Secara lengkap hasil integrasi hamiltonian untuk ion B²⁺ yang terdiri dari 3 elektron yang mengelilingi inti nukleus dengan 5 proton dan neutron menggunakan dua parameter α dan β . Hamiltonian untuk sistem ini didefinisikan sebagai berikut.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \nabla_3^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{\alpha}{r_1} + \frac{\alpha}{r_2} + \frac{\beta}{r_3}\right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{|r_1 - r_2|} + \frac{1}{|r_1 - r_3|} + \frac{1}{|r_2 - r_3|}\right)$$

Hamiltonian ini terdiri dari energi tanpa interaksi yaitu, energi kinetik dan energi potensial dari ion B²⁺ dan Energi interaksi yang terjadi antara ketiga elektron yang mengelilingi inti B²⁺. Untuk mencari nilai energi optimasi B²⁺ ini maka kami membagi hamiltonian dan melakukan penyelesaian integrasi masing-masing untuk energi tanpa interaksi dan energi interaksi antara elektron untuk memperoleh energi total dari ion B²⁺. Berikut ini adalah penyelesaian integrasi energi tanpa interaksi dengan menggunakan prinsip mirip atom hidrogen.

3.1.1 Energi tanpa interaksi

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \nabla_3^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{\alpha}{r_1} + \frac{\alpha}{r_2} + \frac{\beta}{r_3}\right)$$

Nilai eigen

$$H\psi_{123} = E\psi_{123}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \nabla_3^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{\alpha}{r_1} + \frac{\alpha}{r_2} + \frac{\beta}{r_3}\right)\right]\psi_{123} = E\psi_{123}$$

Menggunakan separasi variabel dengan $\psi_{123} = \psi_1\psi_2\psi_3$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{\alpha}{r_1}\right)\psi_1\psi_2\psi_3 + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{\alpha}{r_2}\right)\psi_1\psi_2\psi_3 + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_3^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{\beta}{r_3}\right)\psi_1\psi_2\psi_3 = E\psi_1\psi_2\psi_3$$

Kedua ruas dikali $\frac{1}{\psi_1\psi_2\psi_3}$

$$\frac{1}{\psi_1}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r_1}\right)\psi_1 + \frac{1}{\psi_2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r_2}\right)\psi_2 + \frac{1}{\psi_3}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_3^2 - \frac{\beta e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r_3}\right)\psi_3 = E$$

$$E_1 + E_2 + E_3 = E$$

$$\frac{1}{\psi_1} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} \right) \psi_1 = E_1$$

$$\frac{1}{\psi_2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \right) \psi_2 = E_2$$

$$\frac{1}{\psi_3} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_3^2 - \frac{\beta e^2}{4\pi\epsilon_0 r_3} \right) \psi_3 = E_3$$

Bentuk persamaan energi di atas mirip dengan atom hidrogen yang bernilai $E = Z^2 E_0$, sehingga nilai energi untuk setiap bagiannya adalah sebagai berikut.

$$E_1 = \alpha^2 E_0$$

$$E_2 = \alpha^2 E_0$$

$$E_3 = \frac{\beta^2}{4} E_0$$

Energi total tanpa interaksi untuk ion B^{2+} dengan dua parameter diperoleh dari penjumlahan setiap bagian energi sebelumnya.

$$E_T = E_1 + E_2 + E_3$$

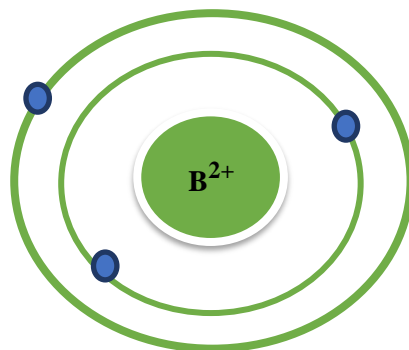
$$E_T = \alpha^2 E_0 + \alpha^2 E_0 + \frac{\beta^2}{4} E_0$$

$$E_T = 2\alpha^2 E_0 + \frac{\beta^2}{4} E_0$$

Energi tanpa interaksi untuk ion B^{2+} dengan dua parameter adalah $2\alpha^2 E_0 + \frac{\beta^2}{4} E_0$ dengan α sebagai parameter pertama, β sebagai parameter kedua, dan $E_0 = -13,6 \text{ eV}$.

3.1.2 Energi interaksi

Ion B^{2+} dengan 3 elektron yang mengelilingi inti mengakibatkan terjadinya interaksi antara ketiganya. Terdapat tiga energi interaksi antara elektron untuk ion B^{2+} yang terjadi yaitu, energi interaksi elektron 1 dan 2 yang kedua berada di kulit pertama, energi interaksi elektron 1 di kulit pertama dengan elektron 3 di kulit kedua, dan energi interaksi antara elektron 2 di kulit pertama dengan elektron 3 di kulit kedua. Hamiltonian untuk energi interaksi antara ketiga elektron ini ditunjukkan dalam persamaan berikut ini.



Gambar 2. Ilustrasi elektron pada B^{2+}

$$H = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{|r_1 - r_2|} + \frac{1}{|r_1 - r_3|} + \frac{1}{|r_2 - r_3|} \right)$$

Untuk mendapatkan nilai aproksimasi yang lebih baik maka digunakan prinsip metode variasi menggunakan fungsi gelombang coba sebagai berikut.

$$\psi_{100} = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi a^3}} e^{-\frac{\alpha r}{a}}$$

ψ_{100} adalah fungsi gelombang coba pada elektron 1 dan 2 di kulit pertama.

$$\psi_{200} = \sqrt{\frac{\beta^3}{32\pi a^3}} \left(2 - \frac{\beta r}{a}\right) e^{-\frac{\beta r}{2a}}$$

ψ_{200} adalah fungsi gelombang coba pada elektron 3 di kulit kedua. Interaksi antara elektron tersebut didefinisikan sebagai berikut.

$$\langle V_{ee} \rangle = \int_0^\infty \psi^* V_{ee} \psi d^3 r_1 d^3 r_2$$

Energi interaksi antara elektron total merupakan total energi interaksi antara ketiga elektron 1, 2, dan 3 sebagai berikut.

$$\langle V_{12} \rangle = -\frac{5}{4} \alpha E_0$$

$$\langle V_{13} \rangle = \frac{1}{2} \alpha^3 \beta^3 E_0 \left[\frac{48}{(2\alpha + \beta)^5} + \frac{24}{\beta(2\alpha + \beta)^4} + \frac{24}{\beta^2(2\alpha + \beta)^3} + \frac{16}{\beta^3(2\alpha + \beta)^2} - \frac{4}{\alpha^2 \beta^3} \right]$$

$$\langle V_{23} \rangle = \frac{1}{2} \alpha^3 \beta^3 E_0 \left[\frac{48}{(2\alpha + \beta)^5} + \frac{24}{\beta(2\alpha + \beta)^4} + \frac{24}{\beta^2(2\alpha + \beta)^3} + \frac{16}{\beta^3(2\alpha + \beta)^2} - \frac{4}{\alpha^2 \beta^3} \right]$$

Energi interaksi antar elektron total didefinisikan di bawah ini.

$$E_I = V_{12} + V_{13} + V_{23}$$

$$E_I = -\frac{5}{4} \alpha E_0 + \alpha^3 \beta^3 E_0 \left[\frac{48}{(2\alpha + \beta)^5} + \frac{24}{\beta(2\alpha + \beta)^4} + \frac{24}{\beta^2(2\alpha + \beta)^3} + \frac{16}{\beta^2(2\alpha + \beta)^2} - \frac{4}{\alpha^2 \beta^3} \right]$$

dengan α sebagai parameter pertama, β sebagai parameter kedua, dan $E_0 = -13,6$ eV.

Energi ion B²⁺

Setelah memperoleh hasil dari energi tanpa interaksi dan energi interaksi ion B²⁺ maka diperoleh nilai energi total ion B²⁺ dari penjumlahan keduanya,

$$E = E_{\text{tanpa interaksi}} + E_{\text{interaksi}}$$

Dengan,

$$E_{\text{Tanpa interaksi}} = 2\alpha^2 E_0 + \frac{\beta^2}{4} E_0$$

$$E_{\text{Interaksi}} = -\frac{5}{4} \alpha E_0 + \alpha^3 \beta^3 E_0 \left[\frac{48}{(2\alpha + \beta)^5} + \frac{24}{\beta(2\alpha + \beta)^4} + \frac{24}{\beta^2(2\alpha + \beta)^3} + \frac{16}{\beta^2(2\alpha + \beta)^2} - \frac{4}{\alpha^2 \beta^3} \right]$$

Sehingga energi totalnya adalah adalah,

$$E = 2\alpha^2 E_0 + \frac{\beta^2}{4} E_0 - \frac{5}{4} \alpha E_0 + \alpha^3 \beta^3 E_0 \left[\frac{48}{(2\alpha + \beta)^5} + \frac{24}{\beta(2\alpha + \beta)^4} + \frac{24}{\beta^2(2\alpha + \beta)^3} + \frac{16}{\beta^2(2\alpha + \beta)^2} - \frac{4}{\alpha^2 \beta^3} \right]$$

dengan α sebagai parameter pertama, β sebagai parameter kedua, dan $E_0 = -13,6$ eV.

Metode Variasional

Penyelesaian perhitungan energi dasar ion B^{2+} untuk sistem yang dideskripsikan dalam hamiltonian di bawah ini,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \nabla_3^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{\alpha}{r_1} + \frac{\alpha}{r_2} + \frac{\beta}{r_3}\right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{\alpha-5}{r_1} + \frac{\alpha-5}{r_2} + \frac{\beta-5}{r_3}\right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{|r_1-r_2|} + \frac{1}{|r_1-r_3|} + \frac{1}{|r_2-r_3|}\right)$$

Dilakukan dengan menggunakan metode variational dengan menggunakan prinsip sebagai berikut,

$$E_{gs} \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \equiv \langle H \rangle$$

Sehingga diperoleh energi dasar ion B^{2+} seperti yang ditunjukkan di bawah ini.

Tanpa interaksi elektron

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = 2\alpha^2 E_0 + \frac{1}{4}\beta^2 E_0 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}(\alpha-5)2\frac{\alpha}{a} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}(\beta-5)\frac{\beta}{4a}$$

Dengan interaksi elektron

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = -2\alpha^2 E_0 - \frac{1}{4}\beta^2 E_0 + \frac{59}{4}\alpha E_0 + \frac{10}{4}\beta E_0 + \frac{48\alpha^3\beta^3 E_0}{(2\alpha+\beta)^5} + \frac{24\alpha^3\beta^2 E_0}{(2\alpha+\beta)^4} + \frac{24\alpha^3\beta E_0}{(2\alpha+\beta)^3} + \frac{16\alpha^3 E_0}{(2\alpha+\beta)^2}$$

Berdasarkan prinsip metode variational, optimasi nilai energi dasar terendah untuk ion B^{2+} diperoleh dengan,

$$\frac{dE}{d\alpha} = 0 \quad \text{dan} \quad \frac{dE}{d\beta} = 0$$

Penyelesaian differensial ini terlalu kompleks untuk dilakukan secara analitik, sehingga dilakukan penyelesaian secara numerik menggunakan fungsi *fminsearch* dan fungsi *nelder* untuk mencari nilai α , β , dan energi optimasi terendah pada matlab. Penyelesaian energi optimasi yang dilakukan dengan fungsi *fminsearch* pada matlab menghasilkan nilai α , β , dan energi sebagai berikut.

Tabel 2. Hasil Numerik fungsi *fminsearch*

Nilai parameter 1	4.667006416653926
Nilai parameter 2	3.474346531048508
Energi	-633.4906313957516 eV
Persentase error	0.63375249 %

Penyelesaian energi optimasi yang dilakukan dengan fungsi *nelder* pada matlab menghasilkan nilai α , β , dan energi sebagai berikut.

Tabel 3. Hasil Numerik fungsi *nelder*

Nilai parameter 1	4.66742875186139
Nilai parameter 2	3.47396189757417
Energi	-633.490626788617 eV
Persentase error	0.6337532153547 %

3.2. Penentuan Energi Ion B^{2+} Satu Parameter (Analitik)

3.2.1 Energi tanpa interaksi

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \nabla_3^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{\alpha}{r_1} + \frac{\alpha}{r_2} + \frac{\alpha}{r_3}\right)$$

Nilai eigen

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \nabla_3^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{\alpha}{r_1} + \frac{\alpha}{r_2} + \frac{\alpha}{r_3}\right) \right] \psi_{123} = E\psi_{123}$$

Menggunakan separasi variabel dengan $\psi_{123} = \psi_1\psi_2\psi_3$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}\right)\psi_1\psi_2\psi_3 + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}\right)\psi_1\psi_2\psi_3 + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_3^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_3}\right)\psi_1\psi_2\psi_3 = E\psi_1\psi_2\psi_3$$

Kedua ruas dikali $\frac{1}{\psi_1\psi_2\psi_3}$

$$\frac{1}{\psi_1}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}\right)\psi_1 + \frac{1}{\psi_2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}\right)\psi_2 + \frac{1}{\psi_3}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_3^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_3}\right)\psi_3 = E$$

$$\begin{aligned} E_1 + E_2 + E_3 &= E \\ \frac{1}{\psi_1}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}\right)\psi_1 &= E_1 \\ \frac{1}{\psi_2}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}\right)\psi_2 &= E_2 \\ \frac{1}{\psi_3}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_3^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_3}\right)\psi_3 &= E_3 \end{aligned}$$

Bentuk persamaan energi di atas mirip dengan atom hidrogen yang bernilai $E = Z^2 E_0$, sehingga nilai energi untuk setiap bagiannya adalah sebagai berikut.

$$\begin{aligned} E_1 &= \alpha^2 E_0 \\ E_2 &= \alpha^2 E_0 \\ E_3 &= \frac{\alpha^2}{4} E_0 \end{aligned}$$

Energi total tanpa interaksi untuk ion B^{2+} dengan dua parameter diperoleh dari penjumlahan setiap bagian energi sebelumnya.

$$\begin{aligned} E_T &= E_1 + E_2 + E_3 \\ E_T &= \alpha^2 E_0 + \alpha^2 E_0 + \frac{\alpha^2}{4} E_0 \\ E_T &= \frac{9\alpha^2}{4} E_0 \end{aligned}$$

Energi tanpa interaksi untuk ion B^{2+} dengan dua parameter adalah $\frac{9\alpha^2}{4} E_0$ dengan dengan α sebagai parameter dan $E_0 = -13,6 \text{ eV}$.

3.2.2. Energi interaksi

Hamiltonian untuk energi interaksi antara ketiga elektron ini ditunjukkan dalam persamaan berikut ini.

$$H = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{|r_1 - r_2|} + \frac{1}{|r_1 - r_3|} + \frac{1}{|r_2 - r_3|} \right)$$

Untuk mendapatkan nilai aproksimasi yang lebih baik maka digunakan prinsip metode variasional menggunakan fungsi gelombang coba sebagai berikut.

$$\psi_{100} = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi a^3}} e^{-\frac{\alpha r}{a}}$$

ψ_{100} adalah fungsi gelombang coba pada elektron 1 dan 2 di kulit pertama.

$$\psi_{200} = \sqrt{\frac{\alpha^3}{32\pi a^3}} \left(2 - \frac{\alpha r}{a}\right) e^{-\frac{\alpha r}{2a}}$$

ψ_{200} adalah fungsi gelombang coba pada elektron 3 di kulit kedua. Interaksi antara elektron tersebut didefinisikan sebagai berikut.

$$\langle V_{ee} \rangle = \int_0^{\infty} \psi^* V_{ee} \psi d^3 r_1 d^3 r_2$$

Energi interaksi antara elektron total merupakan total energi interaksi antara ketiga elektron 1, 2, dan 3. Energi interaksi antar elektron total didefinisikan di bawah ini.

$$E_I = V_{12} + V_{13} + V_{23}$$

$$E_I = -\frac{5}{4} \alpha E_0 - \frac{150}{243} \alpha E_0 - \frac{150}{243} \alpha E_0$$

$$E_I = -2,48 \alpha E_0$$

dengan α sebagai parameter pertama dan $E_0 = -13,6 \text{ eV}$.

Energi ion B^{2+}

Setelah memperoleh hasil dari energi tanpa interaksi dan energi interaksi ion B^{2+} maka diperoleh nilai energi total ion B^{2+} dari penjumlahan keduanya,

$$E = E_{\text{tanpa interaksi}} + E_{\text{interaksi}}$$

Dengan,

$$E_{\text{Tanpa interaksi}} = \frac{9}{4} \alpha^2 E_0 = 2,25 \alpha^2 E_0$$

$$E_{\text{Interaksi}} = -2,48 \alpha E_0$$

Sehingga energi totalnya adalah,

$$E = 2,25 \alpha^2 E_0 - 2,48 \alpha E_0$$

dengan α sebagai parameter pertama, α sebagai parameter kedua, dan $E_0 = -13,6 \text{ eV}$.

Metode Variasional

Penyelesaian perhitungan energi dasar ion B^{2+} untuk sistem yang dideskripsikan dalam hamiltonian di bawah ini,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \nabla_3^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{\alpha}{r_1} + \frac{\alpha}{r_2} + \frac{\beta}{r_3} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{\alpha-5}{r_1} + \frac{\alpha-5}{r_2} + \frac{\beta-5}{r_3} \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{|r_1-r_2|} + \frac{1}{|r_1-r_3|} + \frac{1}{|r_2-r_3|} \right)$$

Dilakukan dengan menggunakan metode variational, dengan menggunakan prinsip sebagai berikut,

$$E_{gs} \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \equiv \langle H \rangle$$

Sehingga diperoleh energi dasar ion B^{2+} seperti yang ditunjukkan di bawah ini.

Tanpa Interaksi Elektron

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \nabla_3^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{\alpha}{r_1} + \frac{\alpha}{r_2} + \frac{\alpha}{r_3} \right) | \psi \rangle + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \langle \psi | \left(\frac{\alpha-5}{r_1} + \frac{\alpha-5}{r_2} + \frac{\alpha-5}{r_3} \right) | \psi \rangle$$

Berdasarkan prinsip metode variational, optimasi nilai energi dasar terendah untuk ion B^{2+} tanpa interaksi ditunjukkan pada Tabel 4 di bawah.

Tabel 4. Hasil energi tanpa interaksi

Nilai parameter 1	5
Energi	-765 eV
Persentase error	19,9 %

Energi dengan Interaksi Elektron

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \langle \psi | -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2 + \nabla_3^2) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{\alpha}{r_1} + \frac{\alpha}{r_2} + \frac{\beta}{r_3} \right) | \psi \rangle + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \langle \psi | \left(\frac{\alpha-5}{r_1} + \frac{\alpha-5}{r_2} + \frac{\beta-5}{r_3} \right) | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{|r_1-r_2|} + \frac{1}{|r_1-r_3|} + \frac{1}{|r_2-r_3|} \right) | \psi \rangle$$

Berdasarkan prinsip metode variational, optimasi nilai energi dasar terendah untuk ion B²⁺ dengan interaksi antara elektron ditunjukkan pada tabel 5 berikut.

Tabel 4. Hasil energi dengan interaksi elektron

Nilai parameter 1	4,5
Energi	-629,4823 eV
Persentase error	1,26 %

3.2.3 Pembahasan

Variasional merupakan salah satu metode analisis yang dapat digunakan untuk memecahkan persamaan Schrodinger untuk atom dengan dua elektron atau lebih. Prinsip metode ini yaitu dengan menentukan persamaan Hamiltonian untuk satu atau lebih parameter yang selanjutnya digunakan fungsi coba untuk menyelesaikan persamaan Hamiltonian tersebut. Hasil akhir yang didapatkan yaitu besarnya nilai eigen untuk energi dengan mensubstitusikan nilai parameter yang didapatkan. Tabel 6 di bawah ini menunjukkan rangkuman hasil analitik dan numerik energi ion B²⁺ pada keadaan dasar yang dibandingkan dengan energi hasil eksperimen ion B²⁺ yaitu - 637.531 eV.

Tabel 6. Hasil Energi Keadaan Dasar ion B²⁺

Metode	Parameter	Energi (eV)	%Error
Variasional 1 Parameter tanpa interaksi antara elektron	$\alpha = 5$	-765	19.99
Variasional 1 Parameter dengan interaksi elektron	$\alpha = 4.537$	-629.4823	1.26
Variasional 2 Parameter tanpa interaksi antara elektron (numerik)	$\alpha = 5.0000$ $\beta = 5.0000$	-765	19.99
Variasional 2 Parameter dengan fungsi fminsearch (numerik)	$\alpha = 4.6670$ $\beta = 3.4743$	-633.4906	0.633
Variasional 2 Parameter dengan fungsi nelder (numerik)	$\alpha = 4.6674$ $\beta = 3.4739$	-633.4906	0.633

Tabel 6 di atas menunjukkan energi keadaan dasar ion B²⁺ dengan metode variasional 1 parameter dengan analitik dan metode variasional 2 parameter dengan numerik menggunakan fungsi fminsearch dan nelder. Metode variasional dengan 1 dan 2 parameter tanpa interaksi memiliki error yang paling besar yaitu 19.99%. Metode variasional 2 parameter yang menggunakan numerik memiliki persentase error yang terkecil, yaitu 0.633%. Persentase tersebut dapat disebut cukup baik karena telah memiliki kesalahan di bawah 1%. Meskipun menggunakan metode variasional yang sama dan menggunakan fungsi coba gelombang yang sama namun metode variasional 1 parameter memiliki hasil yang berbeda dengan metode variasional 2 parameter.

Hasil ini menunjukkan angka bahwa metode variasional 2 parameter memiliki hasil yang lebih baik dibandingkan metode variasional 1 parameter dan variasional dengan memperhitungkan energi interaksi lebih baik daripada energi tanpa interaksi. Metode variasional merupakan salah satu metode yang dapat digunakan dalam penyelesaian permasalahan Schrodinger untuk atom dengan nomor atom 2 atau lebih, karena memiliki variasi nilai parameter yang nilai eigennya cukup mendekati nilai energi acuan.

4. KESIMPULAN

Metode variasional merupakan salah satu metode analisis untuk memecahkan persamaan Schrodinger yang kompleks seperti untuk atom berelektron 2 atau lebih yang bertujuan agar nilai harap dapat mendekati nilai energi acuan. Hasil akhir yang didapatkan yaitu besarnya nilai eigen untuk energi dengan mensubstitusikan

nilai parameter yang didapatkan. Berdasarkan hasil analitik dan numerik energi atom litium pada keadaan dasar yang telah dilakukan dengan menggunakan metode variasional, dapat disimpulkan bahwa energi Dasar ion B^{2+} dengan menggunakan metode variasional 1 parameter tanpa interaksi antar elektron yaitu sebesar -765 eV, sedangkan energi dengan interaksi antara elektron dengan 1 parameter yaitu -629.4823 eV, energi Dasar ion B^{2+} dengan menggunakan 2 parameter tanpa interaksi elektron secara numerik yaitu sebesar -765 eV, sedangkan energi dasar dengan interaksi elektron menggunakan metode variasional untuk 2 parameter secara numerik yaitu -633.4906 eV, dan perbandingan nilai yang diperoleh dengan membandingkan hasil yang diperoleh dan hasil eksperimen memberikan persentase kesalahan perhitungan variasional 1 parameter energi tanpa interaksi sebesar 19.99% dan sebesar 1.26 % untuk energi dengan interaksi antara elektron, sedangkan untuk variasional 2 parameter tanpa interaksi sebesar 19.99% dan sebesar 0.633 % untuk energi dengan interaksi antara elektron .

DAFTAR PUSTAKA

- Borghi, Riccardo. 2018. The Variational Method in Quantum Mechanics: an elementary Introduction. *European Journal of Physics*. 39 035410.
- Griffiths, David J. 2005. *Introduction Quantum Mechanics*. USA: Pearson Prentice Hall.
- Pan X. Y., Sahni V., dan Massa L., 2013. *Determination of a wave function functional: The constrained search variational method*. The Graduate School of the City University of New York.
- Rioux, Frank. 1999. Atomic Variational Calculations: Hydrogen to Boron. *Chem. Educator Vol 4*, 40-43.
- S. Keith Dunn, *Variational Method Applied To The Harmonic Oscillator*. Kentucky: Department Of Chemistry Centre College Danville.
- Wichmann E.H. 1971. *Quantum Physics (Barkeley Physics Course, Vol 04)*. New York: McGraw Hill Colloge.
- Tsubono, Youhei. 2018. Truth of Quantum Mechanical Variational Methods. <http://www7b.biglobe.ne.jp/~kcy05t/variational.html> diakses 03 desember 2019.
- Zettili, Nouredine. 2001. *Quantum Mechanics Concepts and Application*. New York: John Wiley & Sons, Ltd.