

## PERHITUNGAN ENERGI KEADAAN DASAR ATOM LITHIUM MENGGUNAKAN METODE VARIASIONAL DUA PARAMETER

**\*Josua Timotius Manik**

Universitas Matana  
Josua.timotius@matanauniversity.ac.id

**Victor Reynaldi**

Institut Teknologi Bandung  
victorreynaldi@students.itb.ac.id

**Zaki Su'ud**

Institut Teknologi Bandung  
szaki@fi.itb.ac.id

\*Penulis Korespondensi

Naskah diajukan

23 Februari 2022

Naskah direvisi

9 Agustus 2022

Naskah disetujui

30 November 2022

Naskah dipublikasi

5 Desember 2022

**Abstrak** - Setiap atom memiliki energi pada keadaan dasar yang berbeda-beda. Semakin banyak jumlah elektron yang dimiliki oleh atom, maka semakin kompleks pula cara pengerjaan yang perlu dilakukan untuk menghitung energi keadaan dasarnya. Perhitungan energi tersebut dapat dilakukan dengan berbagai metode. Penelitian ini bertujuan untuk menghitung energi atom Lithium pada keadaan dasar secara analitik dan numerik. Salah satu metode yang dapat digunakan untuk perhitungan energi adalah metode variasional dengan menggunakan dua parameter variasi. Pengerjaan secara numerik dilakukan menggunakan aplikasi GNU Octave sebagai alat bantu. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa energi keadaan dasar atom Lithium adalah -201.28 eV. Hasil ini cukup mendekati nilai eksak hasil eksperimen yang terdapat pada referensi dengan deviasi sekitar 1.08%. Nilai parameter variasi  $\alpha$  dan  $\beta$  adalah 2.67 dan 1.36. Hal ini membuktikan bahwa metoda variasional dapat digunakan untuk menghitung energi keadaan dasar atom berelektron banyak.

**Kata Kunci** : Atom Lithium, energi dasar, metoda variasional

**Abstract** – Each atom has different ground state energy. The more electrons an atom has, the more complicated the work that needs to calculate that ground state energy. The energy calculation can be done using various method. This study aims to calculate the ground state energy of Lithium atom analytically and numerically. One method that can be used for energy calculation is variational method using two parameter variation. The numerical work was done using the GNU Octave application as a tool for calculation. The result shows that the ground state energy of the Lithium atom is -201.28 eV, where this result is quite close to the experimental value in reference with a deviation about 1.08%. Value of  $\alpha$  and  $\beta$  parameter about 2.67 and 1.36. This proves that the variational method can be used to calculate the ground state energy of many-electrons atom.

**Keywords** : Lithium atom, ground state energy, variational method

## A. PENDAHULUAN

Dalam perkembangan teori kuantum, terdapat beberapa metoda yang dapat digunakan untuk menghitung energi pada keadaan dasar dari sebuah atom. Beberapa metode yang tersedia antara lain metoda variasional, hartree-fock dan *density functional theory*. Metoda-metoda tersebut muncul sebagai solusi dari penggunaan teori gangguan sebab kita masih bisa memecahkan kasus untuk Hamiltonian tanpa gangguan (gangguan yang kecil namun masih bisa dipecahkan). Dalam penelitian ini, metoda yang digunakan adalah variasional dengan atom Lithium sebagai objek yang akan dihitung energi keadaan dasar (*ground state*) nya. Teknik variasional dianggap sebagai metode yang paling tepat untuk mengestimasi energi pada keadaan dasar dan fungsi gelombang dari suatu sistem kuantum (Al-Jaber, 2010:1099).

Prinsip dasar dari metode variasional adalah meminimalisasi fungsi gelombang untuk memperoleh nilai paling efektif dari parameter yang digunakan (Yulianto dkk, 2017:169). Perhitungan metode variasional dapat dilakukan dalam dua kasus, yaitu *screening* dan *non-screening*. Pada kasus *screening*, muatan inti dilindungi oleh elektron, sedangkan pada kasus tanpa *screening*, kita mengasumsikan bahwa muatan inti tidak dilindungi oleh elektron. Studi pendahuluan pada berbagai literatur tentang penggunaan metode variasional untuk menghitung energi keadaan dasar atom Helium menunjukkan bahwa hasil perhitungan energi lebih presisi dan akurat pada kasus *screening* yang artinya interaksi antar elektron-elektron yang ada dalam atom tidak diabaikan dan dihitung faktor koreksinya.

Penelitian ini berfokus pada penggunaan metode variasional untuk perhitungan energi dasar atom Lithium dalam kasus *screening*. Metoda variasional seperti diketahui cukup efektif untuk menghitung energi dasar dari atom berelektron banyak. Prinsip dasar dari metoda variasional adalah meminimalisasi fungsi gelombang untuk memperoleh nilai efektif parameter variasi yang digunakan sehingga energi keadaan dasar dapat dihitung.

## B. METODE

Atom Lithium mempunyai 3 buah elektron dengan koordinat  $r_1$ ,  $r_2$ , dan  $r_3$  masing-masing terhadap inti. Elektron-elektron ini mengelilingi inti yang bermuatan  $+3e$ . Operator Hamiltonian (non-relativistik) untuk atom berelektron lebih dari satu adalah :

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^n \left( -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i=1}^n \sum_{j>i} \frac{1}{r_{ij}}$$

dimana  $Z$  menunjukkan nomor atom yang ditinjau dan dalam hal ini nomor atom Lithium adalah tiga ( $Z = 3$ ). Maka, operator Hamiltonian yang digunakan pada atom Lithium adalah :

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} [(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \nabla_3^2] - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left[ \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{1}{r_3} \right] + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[ \left( \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} \right) + \frac{1}{r_{23}} \right]$$

dengan  $m$  adalah massa elektron,  $Z$  adalah nomor atom,  $e$  adalah muatan elektron,  $r$  adalah jarak elektron terhadap inti atom (untuk yang berindeks tunggal) dan jarak antar elektron (untuk yang

berindeks ganda). Persamaan Hamiltonian diatas terdiri dari energi kinetik elektron, energi potensial yang terjadi akibat interaksi antara elektron dengan inti atom, dan suku interaksi antar-elektron. Fungsi coba yang digunakan adalah fungsi gelombang Hidrogen dalam bentuk :

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) = \phi_1(\vec{r}_1) \phi_1(\vec{r}_2) \phi_2(\vec{r}_3)$$

dengan :

$$\begin{aligned} \phi_1(\vec{r}) &= C_1 e^{-\alpha r} \\ \phi_2(\vec{r}) &= C_2 (2 - \beta r) e^{-\beta r/2} \end{aligned}$$

di mana  $\alpha$  dan  $\beta$  adalah parameter variasi. Langkah pertama setelah menentukan fungsi coba gelombang adalah melakukan normalisasi untuk mendapatkan nilai konstanta  $C_1$  dan  $C_2$  dengan menggunakan persamaan :

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | \phi_1 \rangle &= \int C_1^2 e^{-2\alpha r} d^3r = 1 \\ \langle \phi_2 | \phi_2 \rangle &= \int C_2^2 (2 - \beta r)^2 e^{-\beta r} d^3r = 1 \end{aligned}$$

Setelah melakukan normalisasi, didapatkan bentuk  $C_1$  dan  $C_2$  yang kemudian kita substitusi ke fungsi gelombang masing-masing elektron dan didapatkan bentuk persamaan :

$$\begin{aligned} \phi_1(\vec{r}) &= \left(\frac{\alpha^3}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\alpha r} \\ \phi_2(\vec{r}) &= \left(\frac{\beta^3}{3\pi}\right)^{1/2} (2 - \beta r) e^{-\beta r/2} \end{aligned}$$

Dengan demikian, maka fungsi gelombang coba sebagai kombinasi  $\phi_1(\vec{r})$  dan  $\phi_2(\vec{r})$  dapat dinyatakan dengan :

$$\psi_t = \left(\frac{\alpha^6 \beta^3}{3\pi^3}\right)^{1/2} (2 - \beta r_3) e^{-[\alpha(r_1+r_2) + \beta r_3/2]}$$

Persamaan schrodinger untuk atom Lithium :

$$\hat{H}_0 \psi = E_0 \psi$$

Dengan bentuk Hamiltonian sistem adalah :

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} [(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \nabla_3^2] - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \left[ \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{1}{r_3} \right] + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[ \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{1}{r_1} \right]$$

Untuk memudahkan perhitungan, kita melakukan pengelompokan pada persamaan diatas sebagai berikut :

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} \right] + \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} \right] + \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_3^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_3} \right] + \\ &\quad \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[ \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{1}{r_1} \right] \end{aligned}$$

Setiap suku Hamiltonian diatas dimisalkan dengan menggunakan  $\hat{H}_{1s}$ ,  $\hat{H}_{2s}$ ,  $\hat{H}_{3s}$ , dan  $V_{ee}$ .

$$\begin{aligned} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_1} \right] &= \hat{H}_{1s} \\ \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_2} \right] &= \hat{H}_{2s} \\ \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_3^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r_3} \right] &= \hat{H}_{3s} \\ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[ \left( \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{1}{r_1} \right] &= V_{ee} \end{aligned}$$

sehingga :

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{1s} + \hat{H}_{1s} + \hat{H}_{2s} + V_{ee}$$

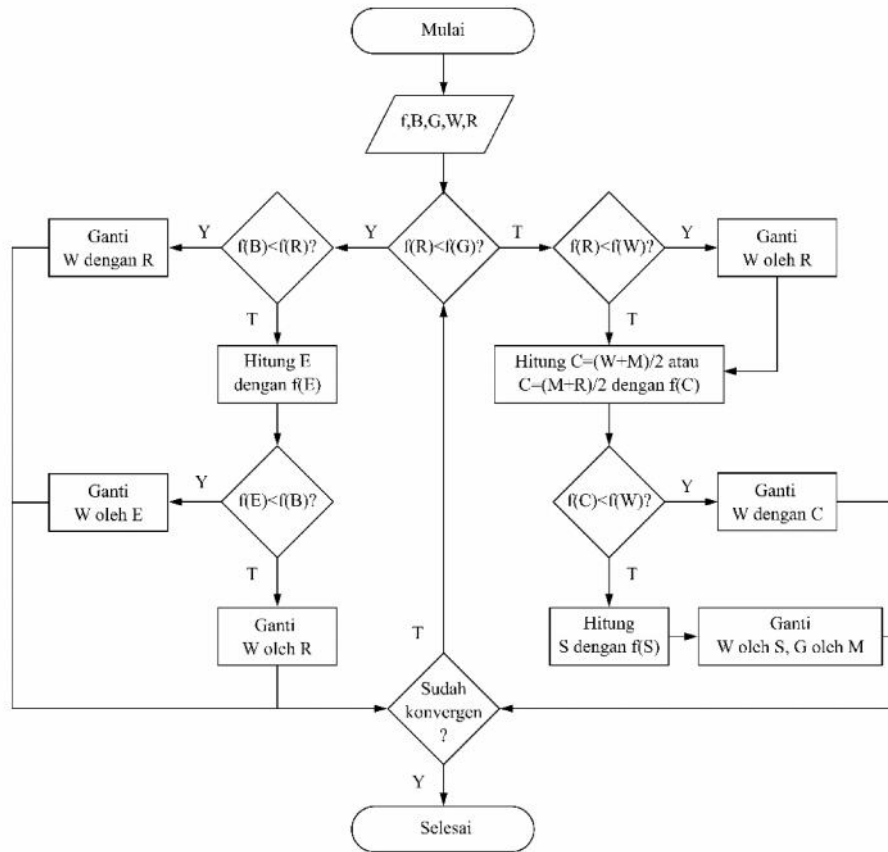
Perhitungan energi harap dari Hamiltonian diatas dilakukan satu per satu sesuai dengan pemisalan yang telah dibuat. Berdasarkan penurunan persamaan secara analitik, maka didapatkan persamaan ekspektasi energi keadaan dasar atom Lithium sebagai berikut :

$$\begin{aligned} E_0(\alpha, \beta) &= 2 \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \alpha^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \alpha \right] + \left[ \frac{\hbar^2}{8m} \beta^2 - \frac{Ze^2}{1 \pi\epsilon_0} \beta \right] + \frac{5e^2}{3 \pi\epsilon_0} \alpha \\ &+ \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{8 \alpha^5 \beta + 2 \alpha^4 \beta^2 + 1 \alpha^3 \beta^3 + 2 \alpha^2 \beta^4 + \alpha \beta^5}{(2\alpha + \beta)^5} \right] \end{aligned}$$

Energi ekspektasi keadaan dasar atom Lithium tersebut kemudian dihitung secara numerik menggunakan satuan energi Rydberg.

$$\begin{aligned} E_0 \left( \frac{\alpha}{a_0}, \frac{\beta}{a_0} \right) &= [8\alpha^2 + \beta^2] - 2Z [8\alpha + \beta] + \\ &\left[ 5\alpha + 16 \left( \frac{8 \alpha^5 \beta + 2 \alpha^4 \beta^2 + 1 \alpha^3 \beta^3 + 2 \alpha^2 \beta^4 + \alpha \beta^5}{(2\alpha + \beta)^5} \right) \right] \frac{1}{4} \text{Ry} \end{aligned}$$

Pada saat melakukan perhitungan numerik, metode Nelder-Mead digunakan untuk proses optimasi. Metode ini digunakan karena teknik ini tidak membutuhkan turunan dari fungsi yang dioptimasi. Metode ini sangat berguna untuk mengoptimasi permasalahan komputasi dengan menggunakan metode numerik atau permasalahan yang deskripsi analitik untuk gradiennya tidak diketahui. Algoritma proses penyelesaian perhitungan numerik ditunjukkan pada gambar 1.



**Keterangan**

B : Titika Terendah    G : Titik Terendah Kedua    W : Titik Tertinggi    Y : Iya    T : Tidak  
 M : Titik Tengah    C : Titik Kontraksi    S : Titik Penyusutan    R : Titik Refleksi

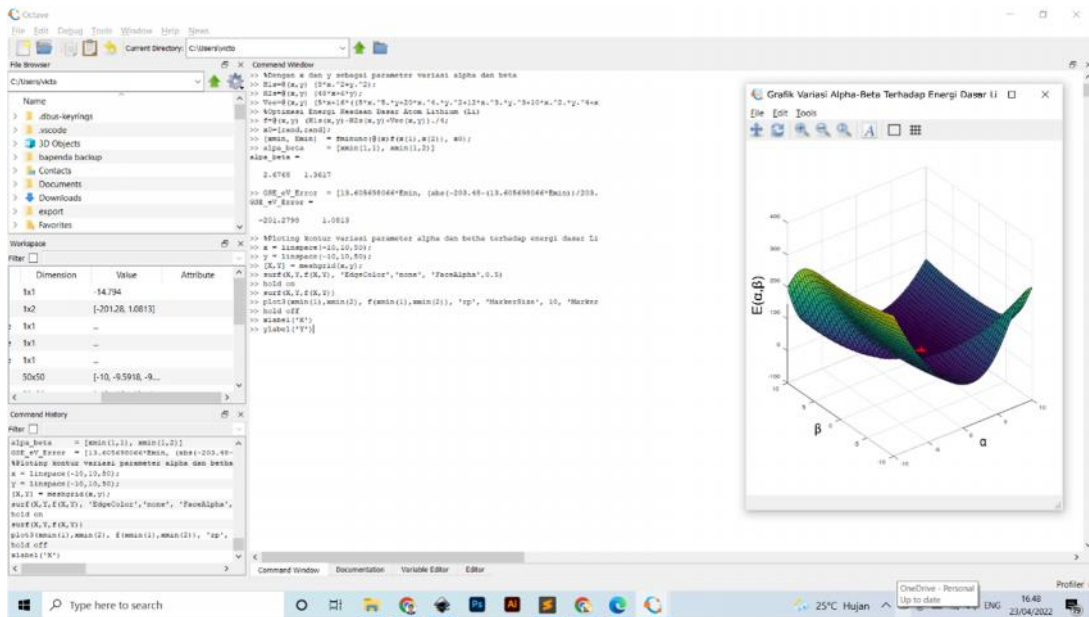
\*Terendah dan Tertinggi mengacu pada nilai energi terendah dan tertinggi

Gambar 1. Algoritma Metode Nelder-Mead

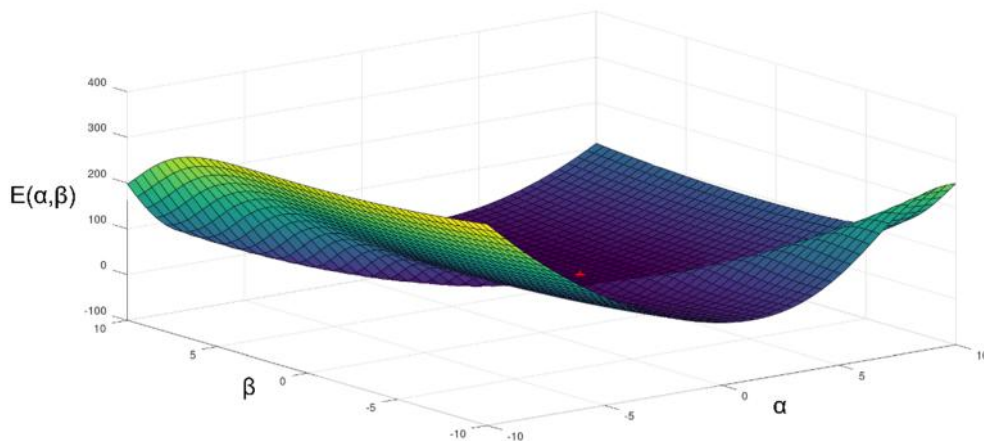
Setelah mendapatkan persamaan energi dengan dua parameter melalui penurunan secara analitik, maka besar energi keadaan dasarnya kemudian dihitung secara numerik menggunakan aplikasi GNU Octave. GNU Octave merupakan aplikasi gratis dan sumber terbuka yang ditujukan untuk komputasi numerik linear maupun non linear. Seperti halnya MATLAB, GNU Octave memiliki pustaka untuk melakukan manipulasi dan visualisasi data yang cukup lengkap sehingga memudahkan dalam proses pemrograman numerik. Oleh karena itu, dalam penelitian ini GNU Octave dipilih sebagai aplikasi alternatif pengganti MATLAB.

**C. HASIL DAN PEMBAHASAN**

Berdasarkan perhitungan secara numerik, didapatkan hasil perhitungan bahwa energi keadaan dasar atom Lithium adalah sebesar -201.28 eV. Hasil perhitungan energi secara numerik dan kontur energi atom Lithium ditunjukkan pada gambar 2 dan 3.



Gambar 2. Hasil Numerik Perhitungan Energi Keadaan Dasar Atom Lithium



Gambar 3. Kontur Energi Atom Lithium

Mengacu kepada hasil eksperimen yang terdapat pada literatur, maka energi dasar atom Lithium adalah -203.48 eV. Jika kita bandingkan hasil perhitungan dengan nilai eksperimen, maka deviasi untuk perhitungan ini adalah sebesar 1.08%. Adapun nilai parameter  $\alpha$  dan  $\beta$  yang dihitung dengan melakukan optimasi dengan metode Nelder-Mead, didapatkan perhitungan adalah sebesar 2.67 dan 1.36. Hasil ini cukup mendekati nilai energi referensi dan realistis karena nilai parameternya masih kurang dari tiga. Hal ini menunjukkan bahwa metode Nelder-Mead cukup baik untuk digunakan dalam menyelesaikan kasus optimasi. Hasil penelitian lain tentang penggunaan metode variasional untuk menghitung energi keadaan dasar dari atom Berilium menunjukkan perhitungan yang relatif sama dimana deviasi perhitungan relatif kecil jika dibandingkan dengan nilai energi referensi yaitu sebesar 1.26% (Nurlina dkk, 2020:83).

#### D. SIMPULAN

Dalam studi ini, telah dilakukan penghitungan energi keadaan dasar atom Lithium dengan menggunakan metode variasi 2 parameter variasi. Proses perhitungan dilakukan dengan menggunakan program GNU Octave. Dari hasil perhitungan, diperoleh nilai energi sebesar -201.28 eV dengan deviasi sebesar 1.08% dari energi referensi. Dari hasil tersebut, terlihat bahwa nilai energi keadaan dasar yang diperoleh dengan menggunakan metode variasi cukup mendekati energi referensi. Hal ini mengindikasikan bahwa metode variasi cukup baik dalam menjelaskan sifat-sifat keadaan dasar suatu atom. Selain itu, GNU Octave dapat menjadi aplikasi alternatif pemrograman numerik pengganti MATLAB. Nilai deviasi hasil perhitungan masih bisa ditekan lebih kecil dengan melakukan perhitungan analitik secara lebih teliti dan tepat ketika melakukan formulasi parameter, terkhususnya dalam penyelesaian konsep turunan serta memasukkan suku pertukaran dalam perhitungan untuk mendapat hasil dengan presisi yang lebih tinggi.

#### DAFTAR RUJUKAN

- Al-Jaber, S.M. 2010. Variational Method for Ground State Energy of Helium Atom in N Dimensions. *Nouvo Cimento*. 125B (9), 1099-1108.
- Nurlina, Bidalo, F., Su'ud, Z. 2020. Penentuan Energi Dasar Atom Berilium (Be) menggunakan Metode Variasional dengan Dua Parameter. *SAINTIFIK : Jurnal Matematika, Sains dan Pembelajarannya*. 6 (1), 79-84.
- McKenzie, D. K., & Drake, G.W. F. 1991. Variational Calculation for the Ground State of Lithium and QED Corrections for Li-like Ions. *Physical Review A*. 44 (11), 43-46.
- Puchalski, M., & Pachucki, K. 2006. Ground State Wave Function and Energy of the Lithium Atom, Article in *Physical Review A*. 1-15.
- Tambasco, M. 1997. Variational calculations for the lithium isoelectronic sequence. Master Thesis, University of Windsor, Canada.
- Yulianto, Y., Ramdani, R., Abidin, S., Su'ud, Z. 2017. Perhitungan Energi Ground State Atom Berilium dengan Menggunakan Metode Variasional. *Prosiding SKF 2017*. 169-173.
- Zettili, N. 2009. *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*, 2<sup>nd</sup> ed. John Wiley & Sons, Inc. United Kingdom.