

# BAB I PENDAHULUAN

Penelitian tentang analisis system fisis vibrasi molekuler yang berada dalam pengaruh medan potensial Lenard-Jones atau dikenal pula dengan potensial 6-12 sudah dilakukan. Kajian tentang masalah ini menjadi sangat menarik untuk dikaji mengingat medan potensial yang mempengaruhi sistem gayut terhadap letak dan tidak simetri, sehingga penyelesaiannya menjadi tidak sederhana. Kegayutan terhadap letak ini mengandung konsekuensi logis pada keadaan-keadaan energi yang tekuantisasi tersebut menjadi unik dan menarik.

Dalam mekanika kuantum dikenal berbagai model potensial  $V$  yang mana kehadirannya berpengaruh terhadap karakteristik sistem zarah yang pengaruhinya, diantaranya potensial sumur tak hingga, potensial sumur berhingga, potensial sumur bertangga, potensial Lennard\_Jones dan lain-lain. Model-model tersebut didesain dengan tujuan untuk mendekati bagaimana perilaku zarah yang berada di bawah pengaruh potensial tersebut.

Disamping model-model potensial tersebut, ada satu bentuk potensial unik yang selanjutnya akan dikaji oleh peneliti dalam penelitian ini, yaitu potensial Lennard-Jones. Potensial ini juga dikenal dengan potensial 12-6 oleh karena bentuknya yang melibatkan pangkat 12 dan 6 pada suku-sukunya. Secara eksplisit potensila ni dapat dituliskan sebagai

$$V(r) = 4V_0 \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{12} - \left( \frac{a}{r} \right)^6 \right] \quad (1-1)$$

Kalau bentuk-bentuk potensial yang disebut di atas didesain untuk mengetahui perilaku zarah tunggal, maka bentuk potensial Lennard-Jones dimodelkan untuk mengetahui bagaimana perilaku

molekul diatomik (misalnya  $O_2$ ) yang terdiri atas dua inti yang terikat bersama-sama oleh elektron-elektron yang mengitarinya.

Secara analitis zarah tunggal yang berada di bawah pengaruh potensial sumur tak berhingga, potensial sumur berhingga atau potensial sumur bertangga dapat diselesaikan dengan kecakapan matematis biasa. Dilain pihak, kecakapan matematis tidak cukup untuk menyelesaikan persamaan yang melibatkan potensial Lennard-Jones. Penyelesaian yang rumit tersebut akan dapat diatasi dengan pendekatan numerik melalui komputasi numerik berbantuan komputer.

### **PERUMUSAN MASALAH**

Berdasarkan pada latar belakang masalah di atas, maka peneliti dapat merumuskan permasalahan sebagai berikut,

1. Bagaimana membuat algoritma yang sesuai untuk memecahkan persamaan Schroedinger bebas waktu sistem zarah yang berada dalam pengaruh medan potensial Lennard-Jones.
2. Bagaimana menentukan posisi dan kecepatan partikel diatomik tersebut melalui pendekatan numerik.
3. Bagaimana memperoleh harga-harga energi terikat pada sistem molekul diatomik yang berada dalam pengaruh medan potensial Lennard Jones.
4. Bagaimana menentukan trayektori partikel pada setiap keadaan energi terikat.

### **TUJUAN PENELITIAN**

Berdasar pada perumusan masalah di atas, tujuan dari penelitian ini antara lain

1. Menentukan posisi dan kecepatan partikel yang berada dalam pengaruh medan potensial Lennard-Jones
2. Menentukan posisi dan kecepatan partikel diatomik tersebut melalui pendekatan numerik.
3. Memperoleh harga-harga energi terikat pada sistem molekul diatomik yang berada dalam pengaruh medan potensial Lennard Jones.
4. Menentukan trayektori partikel pada setiap keadaan energi terikat.

### **MANFAAT PENELITIAN**

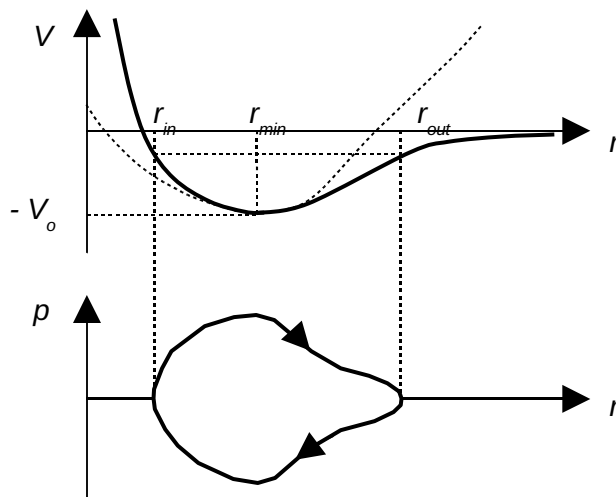
Sumbangan yang dapat diberikan melalui hasil dari penelitian ini antara lain adalah :

1. Dengan bantuan komputer, permasalahan mencari energi untuk setiap state pada sistem di bawah pengaruh potensial Lennard-Jones dapat diatasi.
2. Diperoleh informasi yang jelas tentang karakteristik dari sistem molekul diatomik yang berada di bawah pengaruh potensial Lennard-Jones.
3. Mendukung penelitian di bidang ilmu atomik.

## BAB II

### TINJAUAN PUSTAKA

Ditinjau sebuah molekul diatomik (misalnya  $O_2$ ) yang terdiri atas dua inti yang terikat bersama-sama oleh elektron-elektron yang mengitarinya. Karena massa inti jauh lebih besar dibandingkan dengan elektron, maka dapat dipahami bahwa elektron memiliki gerakan yang lebih gesit dibandingkan dengan inti atom. Ini berarti bahwa elektron dapat dengan mudah menyesuaikan terhadap perubahan posisi inti. Masalahnya adalah, bagaimana apabila gerakan inti dipengaruhi oleh potensial  $V$  yang hanya gayut terhadap  $r$  yang merupakan jarak antara kedua inti. Secara umum  $V$  adalah penarikan pada jarak yang jauh (interaksi Vanderwaals) dan penolakan pada jarak yang dekat (interaksi Coulomb pada inti dan larangan Pauli pada elektron). Bentuk umum potensial yang dapat handle permasalahan ini adalah potensial Lennard-Jones atau potensial 12-6 seperti pada (1-1). Secara grafis, potensial Lennard Jones dapat digambarkan seperti terlihat pada gambar 2-1.



Gambar 2-1. Potensial Lennard-Jonnes (atas) dan Trayektori dalam ruang fase (bawah)

Potensial berada pada posisi minimum pada  $r=2^{\frac{1}{6}}a$  dengan kedalaman  $V_o$ . Inti yang memiliki massa yang besar melakukan dua bentuk gerakan yaitu gerak rotasi dan gerak vibrasi. Dalam penelitian ini, yang ditinjau adalah gerak vibrasi yang menyebabkan terbentuknya keadaan-keadaan dengan energi tertentu.

Penyelesaian untuk keadaan terikat akan melibatkan persamaan Schroedinger yang mengambil bentuk

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} + V(r)\psi_n = E_n \psi_n \quad (2-1)$$

dengan  $V(r)$  adalah potensial Lennard-Jones dan  $\mu = \frac{mM}{m+M}$  adalah massa tereduksi dari kedua inti.

Massa inti yang besar memberi implikasi pada gerakan yang mendekati gerak klasik. Oleh karena itu, nilai aproksimasi dari energi vibrasi  $E_n$  dapat diperoleh dengan meninjau gerak klasik inti dalam potensial  $V$  dan menggunakan 'aturan kuantisasi' untuk menentukan energinya. Kuantisasi ini untuk pertama kalinya dikenalkan oleh Bohr-Somerfeld dan selanjutnya oleh Wilson, yang kelak menjadi cikal bakal dari teori kuantum modern.

Gerak klasik intermolekuler pada sistem terjadi pada daerah  $-V_o < E < 0$ . Jarak antara inti-inti yang berosilasi secara periodik (tetapi tidak wajib harmonis) antara titik balik dalam  $r_{in}$  dan titik balik luar  $r_{out}$ . Selama melakukan osilasi tersebut, terjadi pertukaran energi dari energi kinetik dari gerak relatifnya dengan energi potensial. Oleh karena itu total energi mengambil bentuk

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (2-2)$$

dengan  $E$  adalah konstan dan  $p$  adalah momentum relatif inti. Selanjutnya dapat difikirkan tentang osilasi pada energi tertentu. Secara eksplisit persamaan trayektori dapat diperoleh dengan memecahkan persamaan (2-2) untuk  $p$

$$p(r) = \pm [2m(E - V(r))]^{\frac{1}{2}} \quad (2-3)$$

gerak klasik yang digambarkan di atas terjadi pada setiap energi diantara  $-V_0$  dan 0. Untuk mengkuantisasikan gerak di atas, dan memperoleh harga aproksimasi pada nilai eigen  $E_n$  yang muncul pada persamaan Schroedinger (2-1). Apabila ditinjau untuk usaha (tak berdimensi) pada suatu energi tertentu

$$S(E) = \oint k(r) dr \quad (2-4)$$

dengan  $k(r) = \hbar^{-1} p(r)$  adalah bilangan gelombang de Broglie. Integral (5) merupakan integral satu siklus osilasi penuh. Sedangkan usaha yang dilakukan ditunjukkan oleh daerah (dengan satuan  $\hbar$ ) yang dilingkupi oleh trayektori ruang fase. Aturan kuantisasi menegaskan bahwa pada energi-energi yang diijinkan  $E_n$ , usaha yang dilakukan adalah setengah integral dikalikan  $2\pi$ . Jadi dengan menggunakan pernyataan (2-3) dan dengan mengingat kembali bahwa osilasi yang terjadi selalu melalui nilai  $r$  dua kali (sekali dengan  $p$  positif dan sekali dengan  $p$  negatif, maka kita memiliki

$$S(E_n) = 2 \left( \frac{2m}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{r_i}^{r_{out}} [E_n - V(r)]^{\frac{1}{2}} dr = \left( n + \frac{1}{2} \right) 2\pi \quad (2-5)$$

