

APLIKASI TEORI THOMAS-FERMI UNTUK MENENTUKAN PROFIL KERAPATAN DAN ENERGI ATOM HIDROGEN, ATOM LITIMUM, DAN MOLEKUL H_2 ¹

Renny Anwariyati, Irfan Wan Nendra, Wipsar Sunu Brams Dwandaru

Laboratorium Fisika Teori dan Komputasi, Jurusan Pendidikan Fisika,
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Yogyakarta, Bulaksumur,
Yogyakarta, 55281, Indonesia

Korespondensi No. HP: 0821 60 580 833; E-mail: wipsarian@yahoo.com

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui profil kerapatan dan energi atom Hidrogen, atom Litium, serta molekul H_2 untuk potensial kimia sama dengan nol. Selanjutnya, potensial kimiawi divariasi untuk berbagai energi atom Litium serta molekul H_2 .

Penelitian ini menggunakan metode Thomas-Fermi dalam satu dimensi pada keadaan dasar. Teori Thomas-Fermi memberi suatu bentuk fungsional energi untuk elektron total dalam suatu sistem gas elektron yang saling berinteraksi maupun tak berinteraksi. Teori ini juga mendefinisikan potensial eksternal tertentu sebagai fungsional dari kerapatan.

Hasil dari penelitian ini disajikan dalam bentuk grafik hubungan antara kerapatan dengan jarak elektron, dan grafik hubungan energi dengan potensial kimia dari atom Litium serta molekul H_2 . Berdasarkan grafik yang diperoleh, profil kerapatan untuk atom Hidrogen, atom Litium, dan molekul H_2 semakin kecil atau kerapatan mendekati nol saat jarak terhadap inti atom semakin besar. Saat jarak mendekati nol (mendekati inti atom), profil kerapatan semakin besar atau mendekati tak hingga. Hal ini merupakan ciri khas teori Thomas-Fermi. Namun, untuk profil kerapatan molekul H_2 terdapat dua daerah maksimum yang merupakan akibat dari seringnya elektron berada di daerah tersebut. Terdapat daerah landai di antara daerah maksimum yang kerapatannya tidak nol. Artinya, ada interaksi antar elektron. Energi dalam keadaan dasar ($\mu = 0$) untuk atom Litium diperoleh sebesar -10.5427 au serta untuk molekul H_2 sebesar -0.2220 au.

Kata kunci: Metode Thomas-Fermi, atom Hidrogen, atom Litium, molekul H_2 , fungsional energi, potensial kimia.

¹ Disajikan dalam Seminar Nasional Fisika di Universitas Negeri Semarang Tahun 2012.

I. PENDAHULUAN

Ilmu pengetahuan dan teknologi berkembang semakin pesat. Khususnya dalam bidang mekanika kuantum, semakin bervariasi metode yang digunakan untuk mencari karakteristik suatu sistem fisis. Salah satu karakteristik penting suatu sistem fisis adalah informasi keadaan dan energi aras dasar (*ground state*) dari sistem fisis tersebut[1,2]. Hal ini disebabkan sebagian besar sistem atau bahan yang ditemukan di alam ini berada dalam keadaan stabil pada aras dasar. Keadaan aras dasar memberi informasi penting tentang sistem fisis tersebut. Oleh karena itu, sangat penting untuk mempelajari energi dan keadaan aras dasar dari sistem atau bahan tersebut.

Pada tahun 1927, seorang fisikawan yang bernama **Llewellyn Thomas** dan **Enrico Fermi** mengemukakan sebuah teori untuk menghitung energi sebuah atom berdasarkan sebuah pendekatan melalui kerapatan, jarak elektron dan energi elektron yang bekerja pada aras dasar (*ground state*). Metode ini merupakan model yang pertama kali menggunakan kuantitas fisis kerapatan untuk menentukan profil energi dari atom, tanpa harus menggunakan persamaan gelombang Schrodinger yang rumit.

Pada prinsipnya, metode Thomas-Fermi mempelajari berbagai perilaku

sistem fisis melalui kerapatan yang hanya bergantung pada tiga variabel ruang (dalam tiga dimensi). Dengan demikian, metode Thomas-Fermi lebih mudah diaplikasikan dibandingkan metode-metode lainnya. Hal lainnya yang menjadikan metode Thomas-Fermi menarik untuk diteliti adalah aplikasinya yang luas. Metode Thomas-Fermi dapat digunakan untuk mempelajari ion, atom, molekul, nuklir, statistik klasik, semikonduktor, zat padat, kimia, dan lain-lain[3,4].

II. METODE DAN HASIL

Prinsip utama teori Thomas-Fermi adalah menjelaskan perilaku gas elektron dalam suatu material yang terdiri dari N buah elektron dari fungsional energi total terhadap kerapatan. Fungsional ini bersifat lokal dengan didasarkan pada pendekatan semi klasik.

Secara umum Energi Thomas-Fermi dapat dituliskan sebagai berikut:

$$E[\rho] = C_f \int \rho^{5/3} dr + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr' - Z \int \frac{\rho(r)}{r} dr, \quad (1)$$

dengan suku pertama merupakan energi kinetik, suku kedua merupakan interaksi antar elektron dalam sebuah sistem, dan suku ketiga merupakan interaksi antar inti dan elektron. Fungsional derivatif $E[\rho]$ terhadap ρ menghasilkan persamaan

kerapatan sebagai fungsi jarak sebagai berikut:

$$\rho(r) = \left(\left(\frac{3}{5C_f} \right) \left(\mu + \frac{Z}{r} - V_{coul}(r) \right) \right)^{3/2}. \quad (2)$$

Untuk atom netral dengan potensial kimia sama dengan nol atau $\mu = 0$, maka nilai energi dapat dicari dengan persamaan berikut[4]:

$$E = -0.76877^{7/3}. \quad (3)$$

Pada atom sebenarnya, energi ini diberikan jauh lebih rendah sekitar 15% bahkan lebih[4]. Untuk r semakin mendekati 0, maka nilai $\frac{Z}{r}$ akan jauh lebih besar dari μ dan V_{coul} , sehingga ρ dan V_{coul} dapat diabaikan. Sehingga nilai $\rho(r)$ sebanding dengan $r^{-3/2}$, atau

$$\rho(r) \sim r^{-3/2}. \quad (4)$$

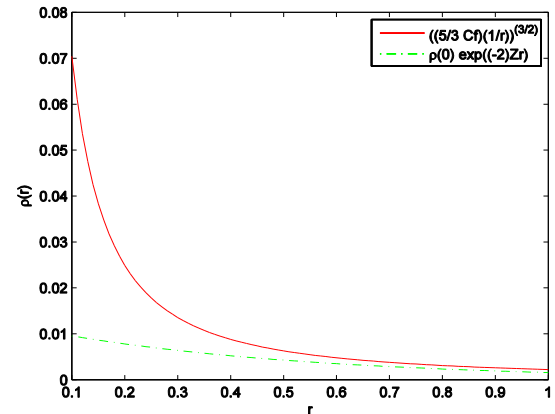
Dapat diamati bahwa untuk r mendekati inti atom, kerapatan (4) akan mendekati ∞ (tak berhingga). Namun, tentu saja hal ini tidak mungkin[5]. Parr dan Ghosh berpendapat kalau peluruhan kerapatan yang benar adalah eksponensial, untuk r mendekati 0 [4], atau

$$\rho(r) \rightarrow \rho(0) \exp(-2Zr). \quad (5)$$

Atom hidrogen dengan $Z = 1$, $\mu = 0$ atau atom pada keadaan netral, dan $V_{coul} = 0$, persamaan energi totalnya dalam satu dimensi dapat disederhanakan menjadi,

$$E[\rho] = C_f \int \left(\left(\frac{3}{5C_f} \right) \left(\frac{1}{r} \right) \right)^{5/2} dr - \int \frac{\rho(r)}{r} dr. \quad (6)$$

Dari persamaan (2) didapatkan profil kerapatan atom hidrogen seperti di bawah ini:



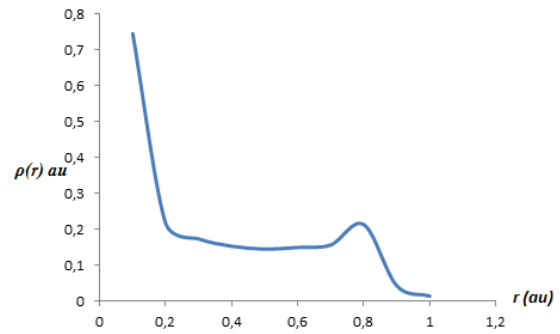
Gambar 1. Grafik ρ atom Hidrogen sebagai fungsi jarak (terhadap inti atom) dalam satu dimensi.

Pada **Gambar 1**, garis yang tidak putus-putus (warna merah) merupakan profil kerapatan sebagai fungsi jarak yang didapatkan dari penelitian ini. Sedangkan garis putus-putus pada **Gambar 1** merupakan profil kerapatan sebagai fungsi jarak yang didapat dari hasil empiris. Kedua profil tersebut menggunakan jarak dari 0.1 sampai 1.0 au. Grafik yang dihasilkan dari penelitian (tidak putus-putus) dan dari hasil empiris (putus-putus) saling berhimpit untuk $r \rightarrow \infty$. Hal tersebut diartikan bahwa profil atom hidrogen yang dihasilkan penelitian sama dengan profil atom Hidrogen secara empiris. Untuk grafik hasil penelitian,

dapat disimpulkan bahwa $\rho(r)$ saat r semakin mendekati 0 ($r \rightarrow 0$), nilai $\rho(r)$ semakin tak hingga ($\rho(r) \rightarrow \infty$) atau $\rho(r) \rightarrow r^{3/2}$. Artinya, jika elektron semakin mendekati inti atom, maka kerapatannya semakin besar. Hal ini, sekali lagi merupakan ciri khas teori Thomas-Fermi. Secara fisis hal tersebut tidak mungkin terjadi pada atom, karena semakin mendekati inti, kerapatan elektron mestinya berhingga. Teori Thomas-Fermi juga menyatakan bahwa saat r semakin mendekati tak hingga ($\rho(r) \rightarrow \infty$) maka nilai $\rho(r)$ semakin mendekati nol. Artinya, semakin menjauhi inti atom, kerapatan elektron semakin kecil atau mendekati 0. Hal tersebut sesuai dengan hasil empiris, di mana saat elektron semakin jauh dari inti atom, kerapatan elektron semakin mendekati nol. Khususnya dalam penelitian ini, digunakan jarak 0.1 sampai 1.0 au karena jarak tersebut sudah cukup mewakili hasil yang diinginkan, yaitu sesuai dengan hasil empiris.

Energi atom Hidrogen didapatkan dari persamaan (6). Hasil energi atom hidrogen pada penelitian ini sebesar -0.7632 au. Hasil penelitian tersebut tidak jauh berbeda jika dibandingkan dengan persamaan (3) yaitu -0.7687 au, yang merupakan nilai energi atom Hidrogen dari teori Thomas-Fermi. Hasil energi atom hidrogen ini cukup berdekatan dengan

hasil teoritik, dimana energi hidrogen secara teoritik sebesar 13.6 eV atau -0.4998 au. Hal ini dikarenakan profil kerapatan yang dihasilkan penelitian saat $r \rightarrow 0$ yaitu $\rho(r) \rightarrow \infty$ yang sekali lagi menandakan ciri khas teori Thomas-Fermi.



Gambar 2. Grafik hubungan ρ sebagai fungsi r untuk molekul H_2 dalam satu dimensi.

Untuk molekul H_2 , persamaan (2) menjadi

$$\rho(r) = \left(\left(\frac{3}{5C_f} \right) \left(\frac{1}{r} + \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' \right) \right)^{3/2}, \quad (7)$$

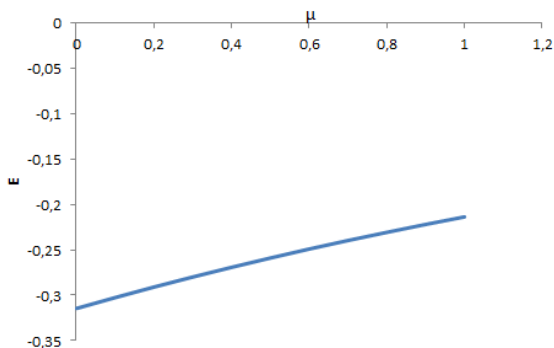
sedangkan energi molekul H_2 menjadi:

$$E[\rho] = C_f \int \rho(r)^{5/2} dr - \int \frac{\rho(r)}{r} dr + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr', \quad (8)$$

dimana r merupakan jarak antara titik acuan ke elektron 1, r' merupakan jarak antara titik acuan ke elektron 2, dan R merupakan jarak antar inti-inti atom.

Dari **Gambar 2** dapat dilihat adanya daerah maksimum lokal (bukit) pada jarak $r = 0.3$ dan $r = 0.8$. Hal ini menandakan peluang adanya dua elektron berada pada jarak-jarak tersebut dalam keadaan dasar (*ground state*). Sedangkan saat r mendekati 0, $\rho(r)$ semakin

mendekati tak hingga. Keadaan tersebut masih sesuai dengan ciri khas teori Thomas-Fermi pada sistem molekul. Hal yang sama juga terjadi pada saat r semakin besar atau mendekati tak hingga, $\rho(r)$ semakin mendekati 0. Dari **Gambar 2** dapat disimpulkan bahwa elektron suka atau sering berada pada jarak $r = 0.3$ au dan $r = 0.8$ au. Profil kerapatan molekul saat berada di antara titik 0.3 au dan 0.8 au landai atau mendekati nol. Hal tersebut membuktikan bahwa terdapatnya dua elektron yang saling mengitari masing-masing inti, atau dapat dikatakan kedua elektron tersebut seolah-olah saling berinteraksi. **Gambar 2** merupakan keadaan saat potensial kimianya 0, atau dapat dikatakan bahwa tidak ada gaya luar yang mengganggu sistem tersebut, sehingga sistem dalam keadaan netral. Energi molekul H_2 yang dihasilkan pada persamaan (8) adalah -0.2220 au. Artinya, energi ionisasi molekul H_2 sebesar 0.2220 au.



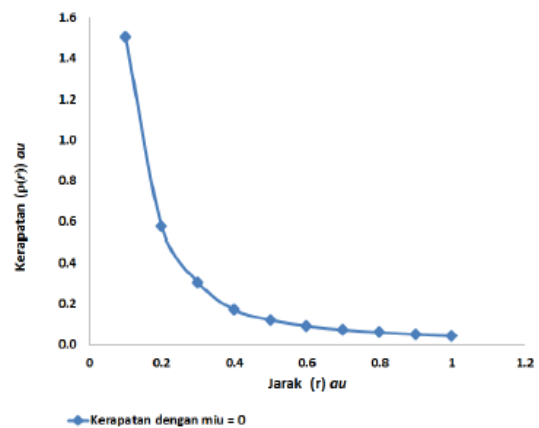
Gambar 3. Grafik hubungan energi dengan variasi potensial kimia pada molekul H_2 .

Gambar 3 merupakan hubungan antara energi molekul H_2 dengan potensial kimia. Semakin besar potensial kimia yang dikenakan pada sistem, energi total untuk mengubah sistem juga semakin besar.

Untuk atom yang berelektron lebih dari satu, dapat dicontohkan dengan atom litium. Berdasarkan persamaan (2) profil kerapatan untuk atom litium dapat dituliskan sebagai berikut:

$$\rho(r) = \left(\left(\frac{3}{5C_f} \right) \left(\mu + \frac{3}{r} - V_{coul}(r) \right) \right)^{3/2} \quad (9)$$

Berdasarkan persamaan di atas profil kerapatan $\rho(r)$ atom litium dalam keadaan netral ditampilkan seperti dalam grafik berikut:



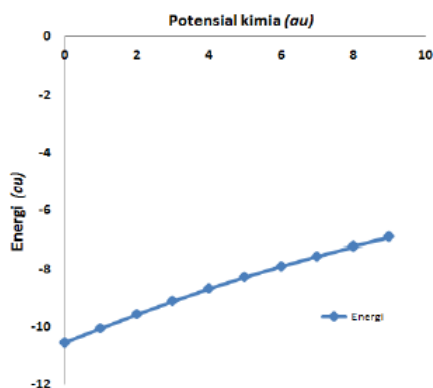
Gambar 4. Grafik hubungan kerapatan $\rho(r)$ dengan jarak (r) untuk atom Litium

Pada grafik teramati jelas terjadinya penurunan yang sangat tajam dari rentang jarak elektron $r = 0.1$ sampai 1.0 au. Pada rentang jarak elektron dari 0.1-1.0 au, kerapatan atom Litium dalam

keadaan dasar itu menurun dan mendekati 0. Namun, untuk $r > 1.0$ au, kerapatan dari atom litium untuk $\mu = 0$ akan semakin mendekati 0. Tetapi untuk $r \rightarrow 0$, nilai kerapatan akan semakin jauh tak hingga atau $\rho(r) = \infty$. Setelah memperoleh profil kerapatan atom litium, dapat dicari nilai energinya. Berdasarkan persamaan (1) energi atom litium dapat dituliskan sebagai berikut:

$$E[\rho] = C_f \int \rho^{5/3} dr + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr' - 3 \int \frac{\rho(r)}{r} dr. \quad (10)$$

Besarnya energi Thomas-Fermi untuk atom Litium pada keadaan dasar dengan potensial kimia $\mu = 0$ sebesar -10.5427 au. Nilai tersebut mendekati nilai energi Litium untuk atom netral yaitu sebesar -9.98 au. Selanjutnya, dengan memvariasi potensial kimia (μ), maka akan diperoleh grafik seperti berikut:



Gambar 5. Grafik hubungan energi $E(\rho)$ dengan potensial kimia (μ) untuk atom Litium

Grafik tersebut menunjukkan bahwa semakin besar nilai potensial kimia semakin besar nilai energi yang dihasilkan. Kenaikan energi yang dihasilkan berarti bahwa, semakin besar potensial kimia atom Litium maka makin besar pula energi eksitasi maupun deeksitasinya.

III. KESIMPULAN

Berdasarkan pembahasan di atas dapat diambil kesimpulan sebagai berikut:

1. bahwa kerapatan yang dihasilkan menggunakan metode Thomas-Fermi bergantung dengan jarak elektron. Semakin jauh jarak elektron, distribusi kerapatan semakin kecil dan mendekati 0. Nilai kerapatan terbesar terjadi di daerah inti atom.
2. Besarnya energi atom Hidrogen yang dihasilkan menggunakan metode Thomas-Fermi yaitu -0.7632 au. Energi tersebut mendekati energi atom netral sebesar -0.7687 au. Besar energi atom Litium yang dihasilkan adalah -10.5427 au dan telah mendekati energi atom Litium netral sebesar -9.98 au. Sedangkan energi H_2 yang dihasilkan sebesar -0.2220 au.
3. Besar potensial kimia (μ) mempengaruhi energi molekul H_2 dan atom Litium. Semakin besar potensial kimia yang dikenakan

pada sistem maka energi yang dihasilkan semakin besar.

VI. DAFTAR PUSTAKA

- [1] Beiser, Arthur. 1992. *Konsep Fisika Modern Edisi Keempat*. Jakarta: Erlangga. Eschrig, Helmut. 2003.
- [2] Wiyatmo, Yusman. 2008. *Fisika Atom Dalam Perspektif Klasik, Semiklasik, dan Kuantum*. Yogyakarta:Pustaka Pelajar.
- [3] *The Fundamentals of Density Functional Theory*. Dresden: Institute for Solid State and Materials Research Dresden.
- [4] Parr, Robert G dan Ghosh, Swapan K. 1986. *Thomas-Fermi theory for atomic systems*. Proc. Nati.Acad. Sci.USA Vol. 83.
- [5] Helmut Eschrig, 2003: 67