

ISSN : 1410 - 1866

# JURNAL PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN SAINS

JPMS Tahun IX, Edisi Khusus, April 2004

## DAFTAR ISI (CONTENTS) :

- Masalah-Masalah Motivasi dalam Negosiasi Makna Matematika (*Motivational Problems in Negotiating Mathematical Meaning*), **Maria Tiarani & Susento**, (1-12)
- Perluasan Semigrup Terregularisasi (*An Extension of the Regularized Semigroup*), **Mardiyana**, (13-19)
- Simulasi Numerik Persamaan Diferensial Non-Linier Gerakan Stick-Slip Viscoelastic Slab dengan Gesekan (*Numerical Simulation of Nonlinear Differential Equation of Viscoelastic Friction Slab Stick-Slip Movement*), **Budi Eka N, Kirbani Sri Brotopuspito, Bambang Soedijono, Jowachim Wassermann, & Frank Scherbaum**, (20-27)
- Sifat Elemen Idempoten Semigrup Bentuk Bilinear (*The Properties of the Idempotent Element of the Bilinear Form Semigroup*), **Karyati**, (28-31)
- Analisis Teoretis Pemantulan dan Pembiasan Gelombang Elektromagnet Harmonik Kedua Terpolarisasi-p pada Bahan Magnet  $FeF_2$  dalam Konfigurasi (*Voigt Theoretical Analysis on Reflection and Transmission of p-Polarized Second Harmonic Electromagnetic Wave on Magnetic Material  $FeF_2$  in Voigt's Configuration*), **Roniyus, Muslim, & Kamsul Abraha**, (32-38)
- Pengaruh Anil Magnetik terhadap Struktur Kristal, Nisbah Magnetoresistansi serta Kesearahan Spin-Spin Elektron pada Lapisan Permalloy ( $Ni_{80}Fe_{20}$ ) (*The Effect of Magnetic Annealing on the Crystalline Structure, Magneto-Resistance Ratio and Direction of Electron Spins of Permalloy Thin Film ( $Ni_{80}Fe_{20}$ )*), **Moh. Toifur, Sukinem, Sujatmoko, Wiryoadi, Tono Wibowo, & Bambang Siswanto**, (39-45)
- Kajian Komputasi Kuantisasi Semiklasik Vibrasi Molekuler di bawah Pengaruh Potensial Lennard-Jones (Potensial 12-6) (*Computational Study of Semiclassical Quantization of Molecular Vibrations Under Lennard-Jones Potential (6-12 Potential)*), **Warsono, Supahar & Supardi**, (46-51)
- Persamaan Keadaan Terpadu Benzena Cair dan Benzena Padat (*Unified State Equation of Liquid and Solid Benzene*), **M. Utoro Yahya**, (52-56)

Terakreditasi sebagai Jurnal Ilmiah berdasarkan Keputusan Ditjen DIKTI Depdiknas No. 118/DIKTI/Kep/2001



# **JURNAL PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN SAINS**

## **(JPMS)**

ISSN: 1410-1866

**Terakreditasi sebagai Jurnal Ilmiah**  
*berdasarkan Keputusan Ditjen DIKTI Depdiknas No. 118/DIKTI/Kep/2001.*

**Visi:** Menjadi media komunikasi yang mampu secara nyata memberikan sumbangan terhadap perkembangan bidang MIPA dan Pendidikan MIPA di Indonesia

**Misi:** Menyebarkan hasil penelitian dan hasil kajian dalam bidang MIPA dan Pendidikan MIPA.

### **Diterbitkan oleh**

Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Yogyakarta

### **Ketua Penyunting:**

Prof. Suryanto, Ed.D

### **Penyunting Pelaksana:**

Prof. Suryanto, Ed.D

Bambang Subali, M.S.

K.H Sugiyarto, PhD

Paidi, M.Si.

Hari Sutrisno, Ph.D

Zuhdan Kun Prasetyo, M.Ed.

Sukiya, M.Si.

Fauzan, M.Sc.

Dr. Indyah Sulistyo Arty

Dadan Rosana, M.Si

### **Penyunting Ahli:**

Prof. Drs. Sugeng Mardiyono, MApp.Sc., Ph.D. (UNY)

Prof. Dr. Soeparno Darmawidjaja (UGM).

Prof. Dr. Ir. Djoko Marsono (UGM)

Prof. Dr. Wuryadi, M.S. (UNY)

Dr. Yateman Ariyanto (UGM)

### **Pembantu Pelaksana:**

Drs. Eko Purwono

Paekan

### **Alamat Dewan Penyunting:**

Kampus FMIPA Universitas Negeri Yogyakarta, Karangmalang, Yogyakarta, Gedung D01

Telp. (0274) 548203, Fax. (0274) 540713

Semua artikel yang dimuat dalam Jurnal Pendidikan Matematika dan Sains sepenuhnya merupakan pendapat dan tanggung jawab penulis, bukan pendapat anggota Dewan Penyunting.



## KAJIAN KOMPUTASI KUANTISASI SEMIKLASIK VIBRASI MOLEKULER DI BAWAH PENGARUH POTENSIAL LENNARD-JONES (POTENSIAL 12-6)

### COMPUTATIONAL STUDY OF SEMICLASSICAL QUANTIZATION OF MOLECULAR VIBRATIONS UNDER LENNARD-JONES POTENTIAL (6-12 POTENTIAL)

Warsono, Supahar dan Supardi  
Jurusan Pendidikan Fisika FMIPA Universitas Negeri Yogyakarta

#### ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian mengenai pengaruh potensial Lennard-Jones (potensial 12-6) terhadap sistem partikel yang tersusun oleh dua atom. Potensial Lennard-Jones merupakan bentuk potensial yang sulit diselesaikan dengan metode analitik biasa, oleh karena itu dalam penelitian ini digunakan metode komputasi dengan bantuan program komputer. Komputasi dilakukan dengan mengubah besaran fisis menjadi besaran universal yang tak berdimensi. Besaran tak berdimensi tersebut adalah  $\gamma$  yang didefinisikan sebagai  $\gamma = (2ma^2V_0 / \hbar^2)$ . Parameter ini selanjutnya dijadikan sebagai parameter yang mengontrol keklasikan suatu sistem. Apabila  $\gamma$  makin besar maka sistem yang ditinjau semakin klasik. Pada penelitian ini, nilai parameter  $\gamma$  yang diambil sebagai masukan ada 3 nilai yaitu 10, 40 dan 70. Hasil penelitian menunjukkan bahwa untuk setiap masukan  $\gamma$  diperoleh beberapa tingkat energi dengan posisi titik balik yang spesifik untuk setiap keadaan energi dan diperoleh grafik trayektori ruang fase dari gerak osilasinya. Makin besar nilai  $\gamma$  makin rapat keadaan energinya yang ditunjukkan dengan banyaknya cacah energi yang terbentuk. Berdasarkan grafik trayektori dapat diungkapkan bahwa sistem yang berada pada keadaan energi lebih tinggi, trayektori ruang fase gerak osilasinya lebih luas dibandingkan sistem yang berada pada keadaan energi lebih rendah.

Kata-kata kunci : kuantisasi semi klasik, vibrasi molekuler, potensial lennard-jones, ruang fase

#### ABSTRACT

*The research about influence of Lennard-Jones Potential (6-12 potential) in diatomic particle system was observed. The Lennard-Jones Potential is one of some potential form that is difficult to solve using simple analytical method, so that in this research we use computational method with computer programming assisted. Computation was taken by change physical quantities to dimensionless universal quantities. The dimensionless quantity is  $\gamma$  that defined by  $\gamma = (2ma^2V_0 / \hbar^2)$ . Later, this parameter is used to controlled classical system. If  $\gamma$  increased so the system is classic. In this research, we use three values of  $\gamma$ , those are 10, 14 and 70. The result show that for a one  $\gamma$  input we get some energy states with their specific turning point and graphical trajectory of phase space of their oscillations. If  $\gamma$  value is increased so the density of state energy is higher. Graphical trajectories show that the system with high energy states have trajectory of phase space in their oscillations more bigger then the system with low energy states.*

*Key words: semiclassical quantization, molecular vibration, Lennard-Jones potential, phase space.*

#### PENDAHULUAN

Telah dikenal berbagai model potensial  $V$  di dalam Mekanika Kuantum, misalnya potensial sumur tak hingga, potensial sumur

berhingga, dan potensial sumur bertangga. Model-model tersebut dirancang untuk mengetahui bagaimana perilaku zarah di bawah pengaruh medan potensial yang digambarkan melalui fungsi gelombangnya. Disamping



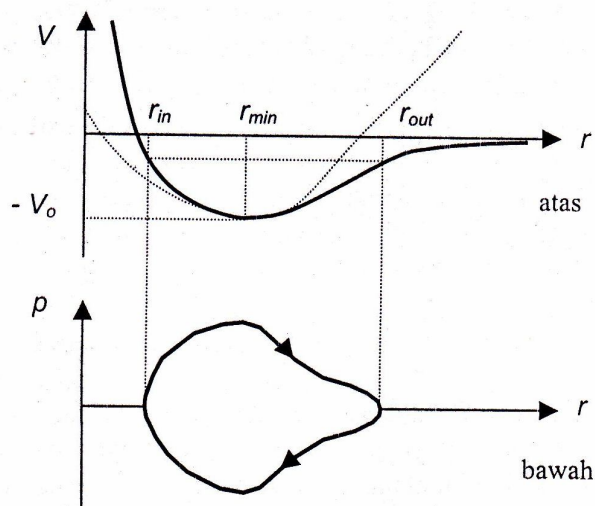
model-model tersebut, ada satu bentuk potensial unik yang selanjutnya akan dikaji oleh penulis pada penelitian ini, yaitu potensial Lennard-Jones, atau dikenal dengan potensial 12-6. Jika model-model potensial sumur tak hingga, potensial sumur berhingga atau potensial sumur bertangga dirancang untuk mengetahui perilaku zarah tunggal, maka model potensial Lennard-Jones digunakan untuk mengetahui bagaimana perilaku molekul diatomik (misalnya molekul O<sub>2</sub>) yang terdiri atas dua inti dan terikat bersama-sama oleh elektron-elektron yang mengitarinya (Koonin & Meredith, 1990).

Secara analitis, penyelesaian masalah zarah tunggal yang berada di bawah pengaruh potensial sumur tak hingga, potensial sumur berhingga atau potensial sumur bertangga dapat diatasi dengan kecakapan matematis biasa. Akan tetapi kita akan dihadapkan pada perhitungan yang sangat rumit, ketika potensial yang mempengaruhi sistem adalah potensial Lennard-Jones. Perhitungan yang rumit tersebut akan dapat diatasi dengan bantuan program komputer melalui proses numerik.

Apabila ditinjau sebuah molekul diatomik (misalnya O<sub>2</sub>) yang terdiri atas dua inti yang terikat bersama-sama oleh elektron-elektron yang mengitarinya, maka dapat dipahami bahwa elektron memiliki gerakan yang lebih gesit dibandingkan dengan inti atom karena massa inti jauh lebih besar dibandingkan dengan elektron. 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 sesuai dengan permasalahan ini adalah potensial Lennard-Jones atau potensial 12-6 seperti pada persamaan (1) (De Vries, 1994).

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

Bentuk potensial Lennard-Jones dilukiskan pada Gambar 1 bagian atas, sedangkan Gambar 1 bagian bawah menunjukkan trayektori dalam ruang fase.



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

Potensial mempunyai harga minimum pada posisi  $r = 2^{\frac{1}{6}} a$  dengan kedalaman  $V_0$ . Inti yang memiliki massa yang besar melakukan dua bentuk gerakan yaitu gerak rotasi dan gerak vibrasi. Pada penelitian ini, masalah yang ditinjau adalah gerak vibrasi yang menyebabkan terbentuknya keadaan-keadaan dengan energi tertentu. Penyelesaian untuk keadaan terikat akan melibatkan persamaan Schrödinger yang mengambil bentuk

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(r) \right] \psi_n = E_n \psi_n \dots\dots\dots (2)$$

dengan  $m$  adalah massa tereduksi dari kedua inti.

Masa inti yang besar berimplikasi pada gerakan mereka 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 dengan 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 (Press *et al.*, 1987).

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 dan titik balik luar,  $r_{in}$  dan  $r_{out}$ , terlihat pada gambar 1 (bawah). Selama melakukan osilasi tersebut, terjadi pertukaran energi dari energi kinetik dari gerak relatifnya dengan energi potensial. Oleh karena itu total energi mengambil bentuk

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r) \dots\dots\dots (3)$$

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 (3) untuk p.

$$p(r) = \pm [2m(E - V(r))]^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots (4)$$

Gerak klasik yang digambarkan di atas terjadi pada setiap energi diantara  $-V_o$  dan 0. Untuk mengkuantisasikan gerak di atas, dan memperoleh harga aproksimasi pada nilai eigen  $E_n$  yang muncul pada persamaan Schroedinger. Apabila ditinjau usaha (tak berdimensi) pada suatu energi tertentu maka persamaan usaha untuk satu siklus penuh adalah:

$$S(E) = \oint k(r) dr \dots\dots\dots (5)$$

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 (4) dan dengan mengingat kembali bahwa osilasi yang terjadi selalu melalui nilai  $r$  dua kali (sekali dengan

$p$  positif dan sekali dengan  $p$  negatif, maka diperoleh persamaan:

$$S(E_n) = 2 \left( \frac{2m}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{r_{in}}^{r_{out}} [E_n - V(r)]^{\frac{1}{2}} dr = \left( n + \frac{1}{2} \right) 2\pi \dots\dots\dots (6)$$

**METODE PENELITIAN**

Untuk menspesialisasikan keadaan kuantisasi terhadap potensial Lennard-Jones dari persamaan (1), kita definisikan besaran tak berdimensi:

$$\varepsilon = \frac{E}{V_o}, \quad x = \frac{r}{a}, \quad \gamma = \left( \frac{2ma^2V_o}{\hbar^2} \right) \dots\dots\dots (7)$$

sehingga pernyataan (6) menjadi

$$s(\varepsilon_n) = \frac{1}{2} S(\varepsilon_n V_o) = \gamma \int_{r_{in}}^{r_{out}} [\varepsilon_n - v(x)]^{\frac{1}{2}} dx = \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi \dots\dots (8)$$

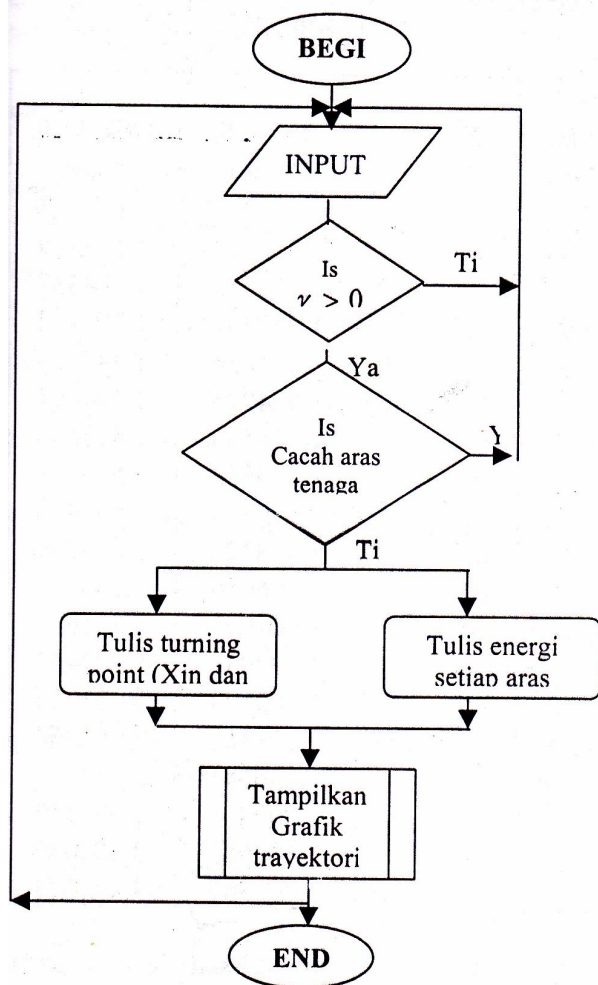
dengan

$$v(x) = 4 \left( \frac{1}{x^{12}} - \frac{1}{x^6} \right) \dots\dots\dots (9)$$

Jika persamaan (8) dapat dipecahkan, maka akan diperoleh energi setiap state  $\varepsilon_n$ , dan dengan demikian fungsi gelombanya dapat ditentukan.

Metode perhitungan yang digunakan dalam penelitian ini adalah metode numerik dengan bantuan program komputer. Untuk menentukan nilai energi setiap state  $\varepsilon_n$  dan titik-titik balik (turning points)  $X_{in}$  dan  $X_{out}$ , diperlukan masukkan nilai  $\gamma$  tertentu. Setelah titik-titik balik dan energi setiap state dihitung kemudian dibuat grafik trayektori ruang fasenya yaitu grafik hubungan antara momentum dengan jarak radial terhadap pusat molekul. Diagram alir dari program komputer ditunjukkan pada Gambar 2.





Gambar 2. Diagram alir program komputasi untuk memperoleh cacah keadaan dan energinya untuk masukan  $\gamma$  tertentu.

### HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN

Kajian masalah kuantisasi semiklasik vibrasi molekuler dibawah pengaruh potensial Lennard-Jones telah dapat diselesaikan dengan menggunakan bantuan program komputer. Program yang dibuat digunakan untuk mencari aproksimasi semiklasik bentuk energi keadaan terikat oleh pengaruh potensial Lennard-Jones (potensial 6-12) untuk setiap masukan gamma tertentu yang mengambil bentuk  $\gamma = \left( \frac{2ma^2V_o}{\hbar^2} \right)$ .

Parameter gamma merupakan ukuran alamiah dari sistem yang menentukan atau lebih tepatnya mengontrol tingkat 'ke-klasik-an' dari suatu sistem yang ditinjau. Pemilihan nilai gamma yang lebih besar berarti sistem yang akan ditinjau memiliki tingkat ke-klasik-an yang lebih tinggi dibandingkan pemilihan gamma yang lebih kecil. Hal yang demikian dapat difahami apabila diingat kembali formulasi gamma tersebut.

Sistem klasik memiliki kuantitas  $m$  yang jauh lebih besar dibandingkan daripada nilai tetapan  $\hbar$ . Hal ini menyebabkan harga dari gamma ( $\gamma$ ) besar sekali. Di lain pihak kuantitas  $m$  pada partikel berorde elektron memiliki nilai yang tidak terlampau jauh dengan tetapan Boltzman tersebut, sehingga dapat difahami bawa nilai dari  $\gamma$  jauh lebih kecil.

Jika momen inersia dari sistem molekul yang ditinjau ( momen inersia diperoleh dari gerak rotasi) dan energi disosiasi yaitu energi yang diperlukan untuk memisahkan atom-atom penyusun molekul diketahui, maka selanjutnya dapat ditentukan jarak antar atom penyusun  $a$  serta potensial yang berpengaruh pada sistem tersebut  $V_o$ . Setelah  $a$  dan  $V_o$  diketahui maka dapat ditentukan nilai gamma.

Dari referensi telah diketahui bahwa beberapa nilai  $\gamma$  untuk beberapa molekul antara lain, untuk molekul  $H_2$  nilai  $\gamma=21.7$ , untuk molekul  $HD$  nilai  $\gamma=24.8$ . Nilai  $\gamma$  untuk molekul  $HD$  memiliki harga lebih besar dibandingkan dengan nilai  $\gamma$  untuk molekul  $H_2$ , hal ini dikarenakan massa dari deuteron lebih besar dibandingkan dengan proton penyusun hidrogen. Ini berarti bahwa molekul  $HD$  lebih klasik dibandingkan dengan moleku  $H_2$ . Untuk molekul oksigen ( $O_2$ ) yang terdiri atas atom  $O^{16}$ , massanya jauh lebih besar dibandingkan dengan molekul  $H_2$ , sehingga harga  $\gamma$ -nya juga jauh lebih besar yaitu  $\gamma=150$ . Ukuran  $\gamma$  yang besar, ini mengindikasikan bahwa aproksimasi semiklasik sah untuk gerak vibrasinya.

Data hasil perhitungan mengenai energi untuk setiap keadaan dan titik-titik balik disajikan pada Tabel 1, Tabel 2 dan Tabel 3 untuk masukkan nilai  $\gamma$  masing-masing 10, 40



dan 70. Data yang diperoleh menunjukkan bahwa untuk setiap masukan  $\gamma$  tertentu, sistem akan menentukan jumlah keadaan termungkin beserta besarnya energi setiap keadaan tersebut. Partikel yang berada pada keadaan energi tertentu akan melakukan gerak vibrasi pada keadaan tersebut. Ketika partikel memperoleh tambahan energi dari luar dan dapat mencapai keadaan energi di atasnya, maka partikel akan melakukan gerak vibrasi pada keadaan yang lebih tinggi tersebut.

Tabel 1. Nilai energi dan titik balik setiap state untuk masukan  $\gamma = 10$

State (n)	Energi ( $E_n$ )	Titik Balik Dalam ( $X_{in}$ )	Titik Balik Luar ( $X_{out}$ )
0	-0.551492	1.031056	1.349806
1	-0.091197	1.004493	1.870118
2	-0.000500	1.000587	4.471679

Tabel 2. Nilai energi dan titik balik setiap state untuk masukan  $\gamma = 40$

State (n)	Energi ( $E_n$ )	Titik Balik Dalam ( $X_{in}$ )	Titik Balik Luar ( $X_{out}$ )
0	-0.872131	1.066993	1.207618
1	-0.647830	1.038868	1.303712
2	-0.464377	1.024806	1.397462
3	-0.318364	1.015431	1.501368
4	-0.205888	1.009962	1.624025
5	-0.122393	1.006056	1.777931
6	-0.065149	1.002931	1.980275
7	-0.028981	1.001368	2.270118
8	-0.009684	1.000587	2.727149
9	-0.001420	1.000587	3.757617

Tabel 3. Nilai energi dan titik balik setiap state untuk masukan  $\gamma = 70$

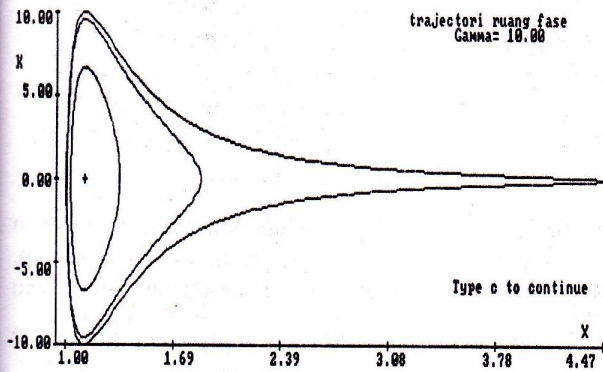
State (n)	Energi ( $E_n$ )	Titik Balik Dalam ( $X_{in}$ )	Titik Balik Luar ( $X_{out}$ )
0	-0.925641	1.078712	1.183399
1	-0.787179	1.053712	1.244337
2	-0.662701	1.040431	1.297462
3	-0.551490	1.031056	1.349806
4	-0.452942	1.024025	1.404493
5	-0.366433	1.018556	1.462306
6	-0.291274	1.013868	1.526368
7	-0.227069	1.010743	1.595900
8	-0.172677	1.008399	1.674806
9	-0.127361	1.006056	1.766212
10	-0.090778	1.004493	1.871681
11	-0.061861	1.002931	1.997462
12	-0.039670	1.002149	2.153712
13	-0.023509	1.001368	2.351368
14	-0.012469	1.000587	2.614649
15	-0.005532	1.000587	2.995117
16	-0.001817	1.000587	3.606055
17	-0.000500	1.000587	4.471679

Tabel 1 menunjukkan bahwa pada nilai  $\gamma$  yang relatif rendah, keadaan-keadaan energi yang terbentuk lebih sedikit dibandingkan dengan masukan nilai  $\gamma$  yang lebih besar. Hal ini dapat difahami, karena nilai  $\gamma$  yang semakin kecil menunjukkan partikel yang saling berinteraksi massanya lebih kecil dibandingkan dengan  $\gamma$  besar. Massa partikel kecil menimbulkan gaya Coulomb yang dibangun antara kedua partikel akan semakin kecil, sehingga energi yang diperlukan untuk melepaskan diri dari ikatannya lebih kecil dibandingkan dengan molekul yang tersusun atas atom-atom yang lebih besar.

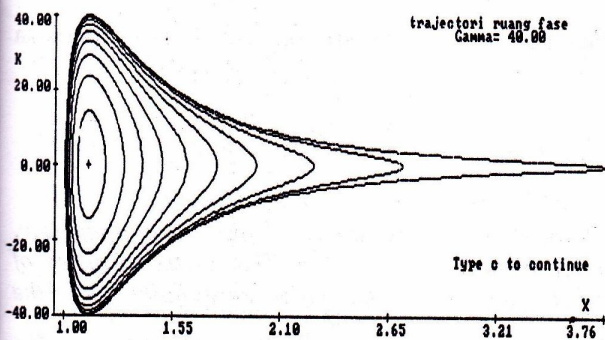
Partikel dengan massa besar juga memiliki potensial yang besar untuk menjamin bahwa partikel tetap berada pada ikatannya. Pada tabel ditunjukkan bahwa untuk keluar dari ikatannya, untuk molekul ringan dengan  $\gamma=10$  diperlukan energi = 0.551492, untuk  $\gamma=40$  diperlukan



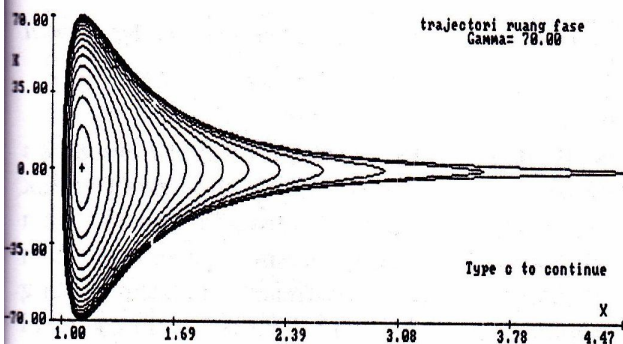
energi = 0.872131 dan untuk molekul dengan nilai  $\gamma=70$  diperlukan energi = 0.925641.



Gambar 3. Trayektori ruang fase untuk  $\gamma = 10,00$



Gambar 4. Trayektori ruang fase untuk  $\gamma = 40,00$



Gambar 5. Trayektori ruang fase untuk  $\gamma = 70,00$

Seperti halnya pada sistem potensial sumur berlingga, maka kedalaman sumur menunjukkan kuatnya gaya tarik antar partikel di dalam sistem. Semakin dalam sumur potensial tersebut, maka semakin banyak pula keadaan-keadaan yang mungkin.

## SIMPULAN

Parameter  $\gamma$  merupakan parameter yang mengontrol tingkat keklasikan molekul dwiatom. Parameter  $\gamma$  terkait dengan massa molekul, makin besar  $\gamma$  makin besar pula massanya. Pada penelitian ini, masukkan nilai  $\gamma$  yang besar, berarti massa molekulnya juga besar, menyebabkan cacah energi state sistem makin banyak. Untuk tiga masukkan nilai  $\gamma$ , yaitu 10, 40 dan 70 menghasilkan cacah energi state sistem masing-masing 3, 10 dan 18.

Setiap sistem yang dipengaruhi oleh potensial Lennard-Jones melakukan gerak osilasi dengan titik balik  $X_{in}$  dan  $X_{out}$  tertentu. Sistem yang berada pada keadaan energi lebih tinggi memiliki trayektori ruang fase lebih luas daripada sistem yang berada pada keadaan energi lebih rendah. Banyaknya trayektori ruang fase tergantung pada banyaknya cacah energi state yang terbentuk.

## DAFTAR PUSTAKA

- Koonin, S.E., Meredith, D.C. (1990). *Computational Physics*. New York: Addison-Wesley Publishing Company, Inc.
- De Vries, P.L. (1994). *A First Course In Computational Physics*. : New York: John Wiley & Sons, Inc.
- Press, H., Flannery, P., Teulosky, A., Vetterling, T. (1987). *Numerical Recipes*. Cambridge: Press Syndicate of Cambridge University.



#### DAFTAR ISI (CONTENTS) Lanjutan:

● Studi Struktur Senyawa Kompleks yang Tersusun oleh Kobalt(II) dan 3,5-bis(piridin-2-II)-1,2,4-Triazola dalam DMF dengan Spektrometri EXAFS (*Structural Study of Complex Compound Containing Cobalt(II) and 3,5-bis(pyridin-2-YI)-1,2,4-Triazole in DMF by EXAFS Spectrometry*), **Kristian H. Sugiyarto**, (57-62)

● Pengkajian Lingkungan Koordinasi Lokal Titanium Oksida dengan XANES dan EXAFS (*A Study of the Local Coordination Environment on Titanjum Oxyde by Using XANES and EXAFS*), **Hari Sutrisno**, (63-69)

● Sintesis dan Dentifikasi Senyawa Turunan Kurkumin Non-simetri melalui NMR-2D (*Synthese and Determination of the Derivat of Non-symmetric Curcumin By NMR-2D*), **Agus Sundaryono**, (70-73)

● Implementasi Pendekatan Konstruktivisme melalui Penggunaan Media Realia dan Pengembangan Kegiatan Praktikum untuk Peningkatan Belajar Bermakna Siswa SMU (*Implementation of Constructivist Learning Approach Through Realia- Media Usage and Practical Work Development for Improving the Meaningful Learning of Senior High School Students*), **Suratsih, Slamet Suyanto, & Paidi**, (74-90)

● Persebaran dan Pola Hubungan Fitoplankton Bulak Samas, Pantai Selatan Yogyakarta (*Distribution and Patterns of Association of Fitoplankton in Bulak Samas, Pantai Selatan Yogyakarta*), **Sudarsono, Suhandoyo & Ratnawati**, (91-98)

● Tanggapan Kacang Tanah Kultivar Lokal Jepara terhadap Irradiasi Sinar Gamma Co-60 Jepara (*Local Cultivar Peanuts Responses to Co-60 Gamma Rays Irradiation*), **Y. Ulung Anggraito & Enni Suwarsi Rahayu**, (99-104)

● Studi Karakteristik Pantai Tempat Peneluran Penyu di Kabupaten Bantul (*Study on Characteristics of Turtle Nesting Beach in Bantul Regency*), **Namastra Probosunu, Ardanti Yulia CS, & Soeparno**, (105-112)



SPONSORED BY JAPAN INTERNATIONAL COOPERATION AGENCY (JICA)