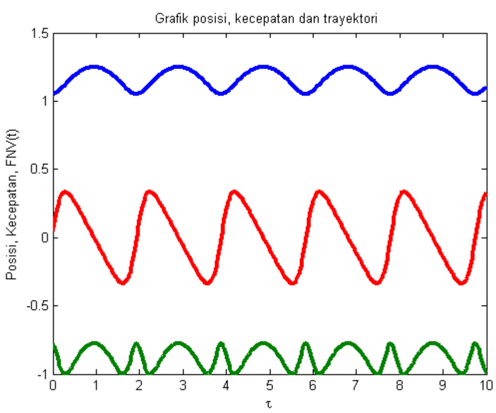
BAB IV
HASIL DAN PEMBAHASAN

Pengkajian dengan pendekatan numerik terhadap karakteristik zarah yang berada di bawah pengaruh potensial Lennard Jones telah diperoleh beberapa hasil. Karakteristik zarah yang diperoleh melalui penkajian numerik ini antara lain posisi zarah pada setiap saat, kecepatan zarah setiap saat, trayektori zarah, ketergantungan posisi titik balik dalam dan luar (Xin dan Xout) terhadap masukan Gamma dan gambaran energi setiap state terhadap masukan Gamma. Untuk lebih lengkapnya akan dijelaskan satu demi satu.

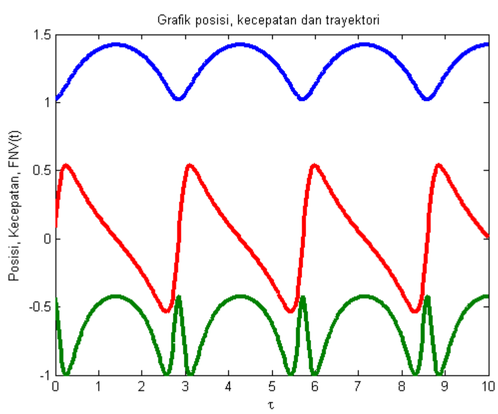
4.1 Posisi dan Kecepatan Zarah

Sebagaimana telah dijelaskan pada bagian metode penelitian bahwa asumsi yang digunakan untuk menentukan karakteristik zarah dalam pengaruh medan potensial Lennard-Jones adalah semi klasik. Dengan asumsi zarah semacam ini, maka karakteristik zarah dapat ditentukan dengan hukum gerak klasik atau hukum Newton. Hal ini sudah digunakan pada metode penelitian yang digunakan.

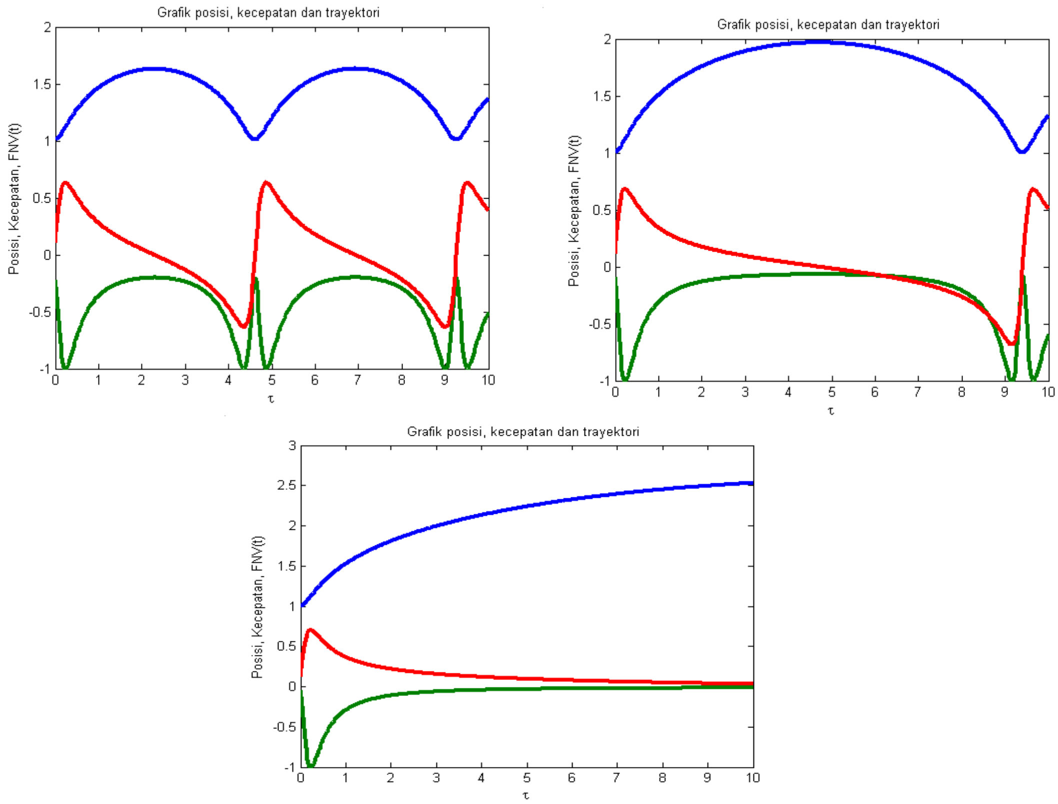
Setelah dilakukan simulasi terhadap posisi dan kecepatan, maka telah diperoleh beberapa hasil seperti terlihat pada gambar 4.1 dan gambar 4.2



(1a)

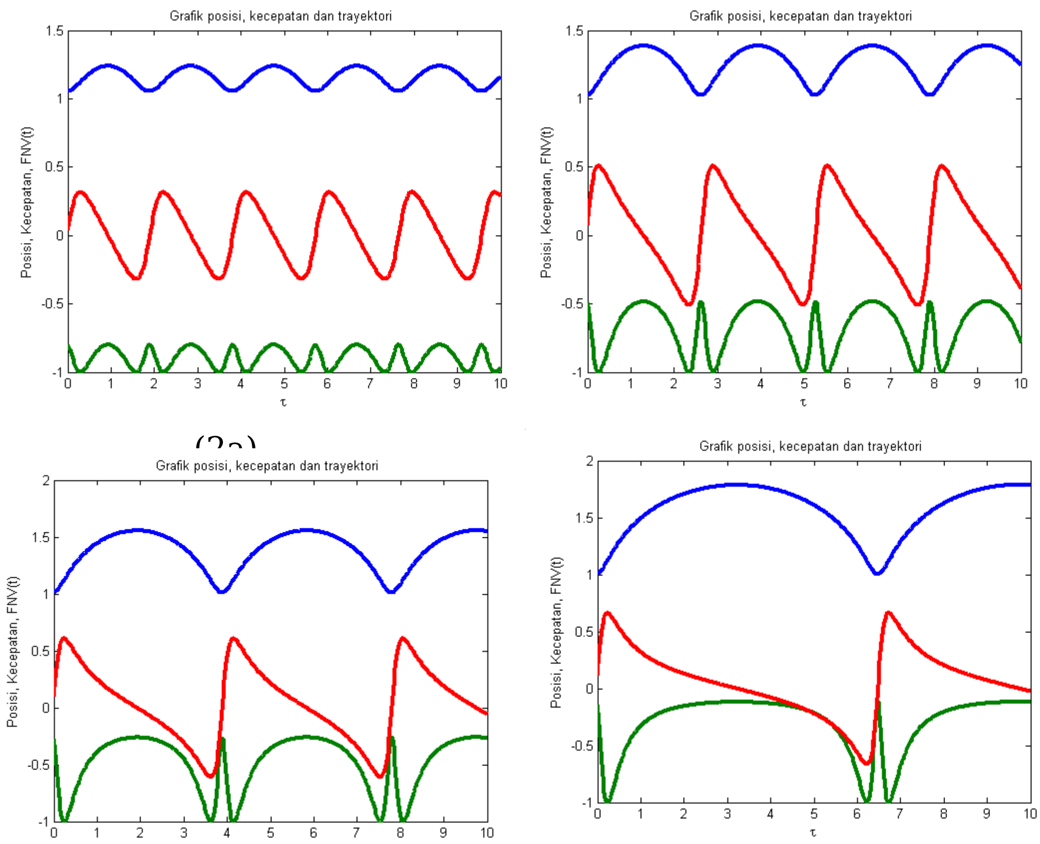


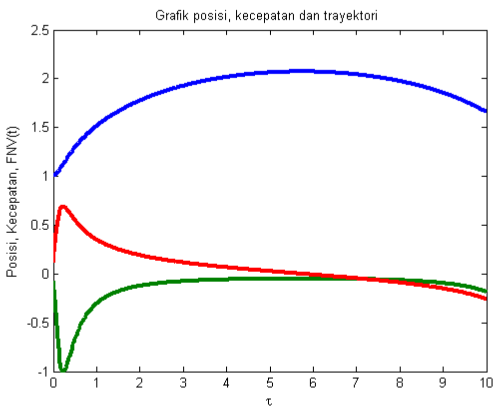
(1b)



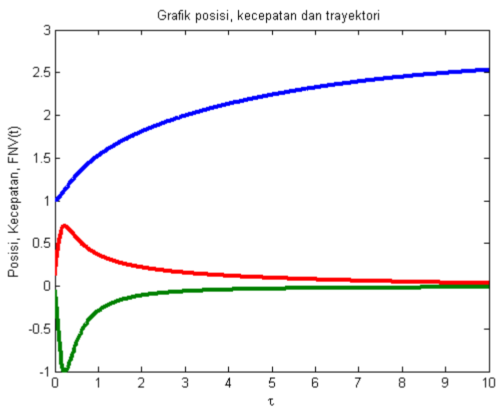
(1e)

Gambar 4.1. Posisi, kecepatan dan trayektori partikel pada harga gamma = 21.7 untuk keadan tereksitasi ke 4 (1a), keadan tereksitasi ke 3 (1b), keadan tereksitasi ke 2 (1c), keadan tereksitasi ke 1 (1d) dan keadaan groundstate (1e)





(2e)



(2f)

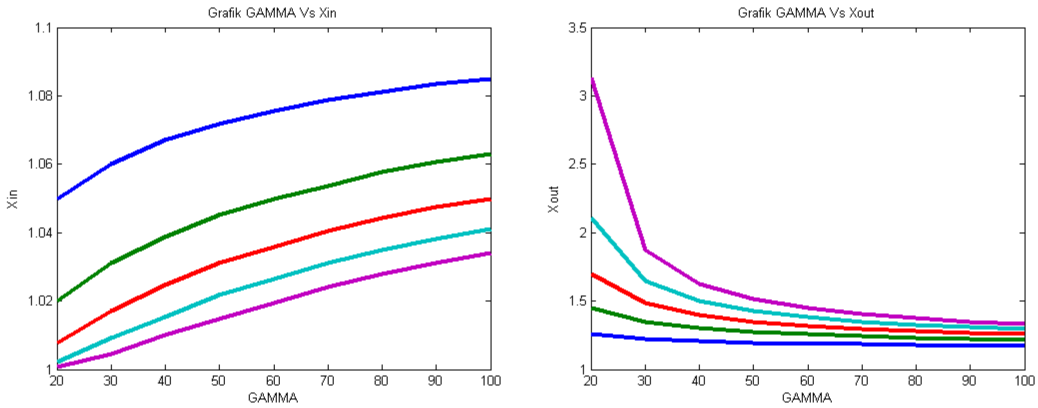
Gambar 4.2. Posisi, kecepatan dan trayektori partikel pada harga gamma = 24.8 untuk keadan tereksitasi ke 5 (2a), keadan tereksitasi ke 4 (2b), keadan tereksitasi ke 3 (2c), keadan tereksitasi ke 2 (2d), keadan tereksitasi ke 1 (1d) dan keadaan groundstate (2e)

Grafik pada gambar 4.1 dan 4.2 memberikan gambaran tentang posisi, kecepatan dan trayektori zarah untuk masukan masing $\gamma = 21.7$ - masing $\gamma = 24.8$. Nilai-nilai gamma ini merepresentasikan masing-masingmolekul H_2 dan HD . Parameter γ merupakan ukuran alamiah kuantum molekul tak berdimensi yang dimiliki oleh setiap molekul. Jika dituliskan kembali parameter tersebut berbentuk

$$\gamma = \sqrt{\frac{2\mathrm{ma}^2 V_o}{\hbar^2}}$$

Apabila ditinjau sebuah zarah klasik, maka dari ungkapan γ tersebut terlihat bahwa harga *m* sangat besar dibandingkan dengan elektron. Dengan demikian, harga γ menjadi sangat besar. Menurut penelitian yang dilakuakan oleh peneliti terdahulu, maka harga parameter γ pada molekul gas hidrogen dan molekul HD masing-masing seperti yang telash disampaikan tadi.

Sekarang lihat pada gambar 4.1 dan 4.2 bagian (1a) dan (2a). Posisi zarah dengan $\gamma = 21.7$ berosilasi disekitar 1.05 dan 1.25 dengan amplitudo 0.1, sedangkan zarah dengan $\gamma = 24.8$ berosilasi di sekitar 1.07 dan 1.20 dengan amplitudo sekitar . Kecepatan zarah pada kedua harga γ berosilasi di sekitar titik 0.065 sebagaimana yang terjadi pada gerak periodik. Tetapi jika dilihat secara seksama, osilasi kecepatan dengan jelas tidak sinusoidal, hal ini dikarenakan oleh keadaan alamiah fungsi potensial Lennard-Jones yang tidak simetri (*asymetric*)

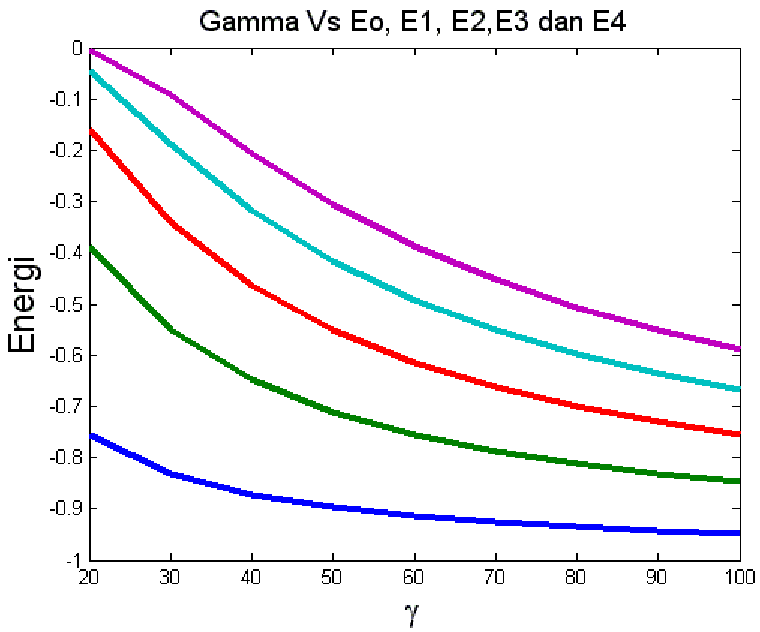


Gambar 4.3. Grafik hubungan antara Gamma vs Xin (3a) dan Gamma vs Xout (3b)

Gambar 4.3 diperlihatkan grafik hubungan antara parameter γ terhadap titik balik dalam (Xin) dan titik balik luar (Xout) pada saat partikel melakukan gerakan osilasi. Data diambil untuk 5 (lima) keadaan energi yaitu keadaan dasar (*ground state),* keadaan tereksitasi pertama, keadaan tereksitasi kedua, keadaan tereksitasi ketiga dan keadaan tereksitasi keempat.

Untuk grafik hubungan antara parameter γ dengan Xin terlihat bahwa semakin besar parameter γ yang diberikan, titik balik dalam tersebut semakin besar mendekati titik kesetimbangan yang berada di sekitar x= 1.12. Sedangkan untuk grafik hunbungan antara parameter γ dengan titik balik luar (Xout) terlihat dengan jelas bahwa semakin besar γ yang diberikan, maka harga Xout semakin mengecil. Hal ini berarti semakin besar γ dari sebuah partikel, maka titik balik luar semakin mendekati titik kesetimbangan.

Dari kedua buah grafik hubungan antara parameter γ dengan Xin dan Xout dapat disimpulkan bahwa semakin besar harga γ sebuah partikel klasik, maka osilasi partikel pada suatu keadaan terikat tertentu akan semakin mendekati titik kesetimbangan.

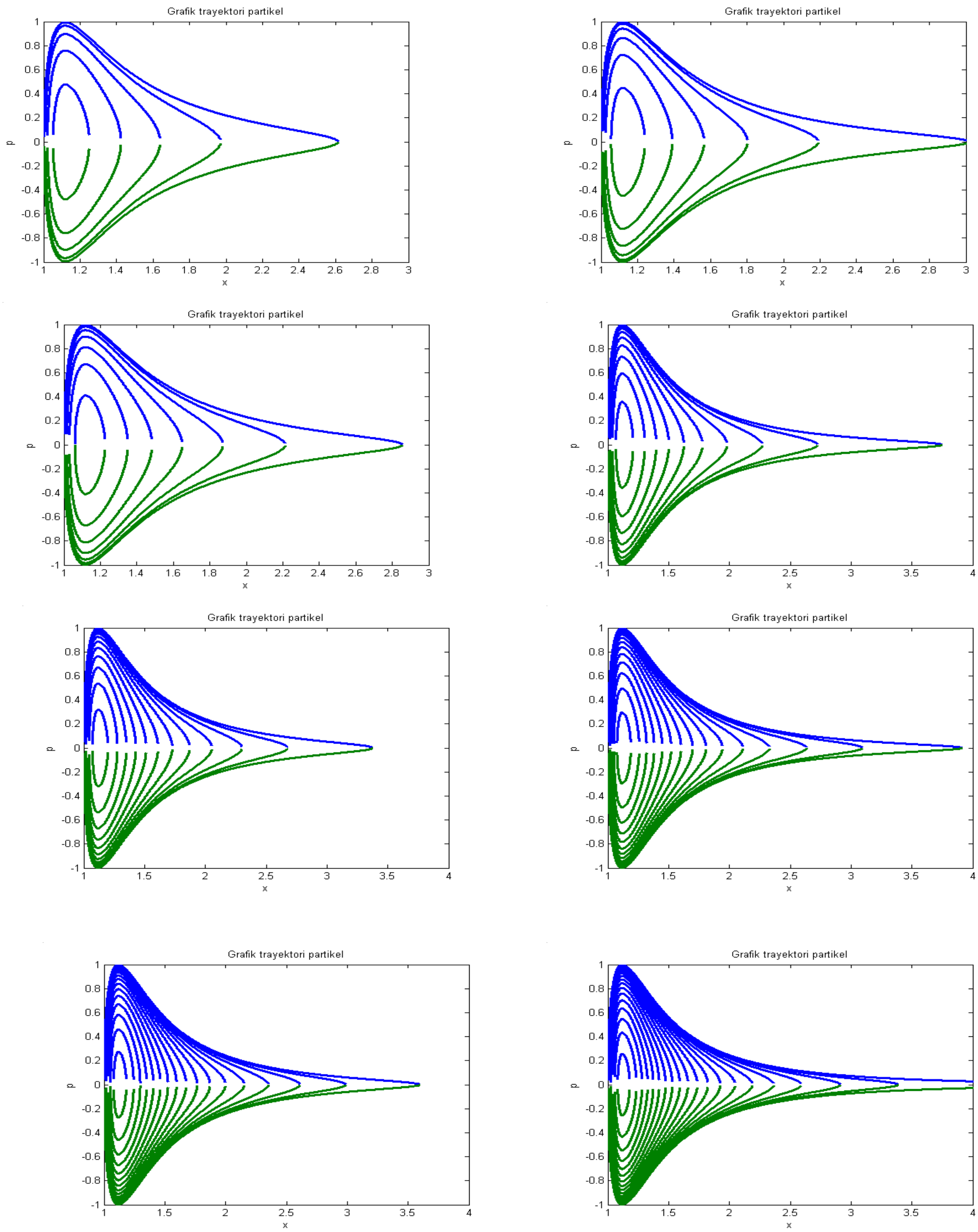


Gambar 4.4. Grafik hubungan antara Gamma terhadap Eo, E1, E2, E3 dan E4.

Gambar 4.4 ditunjukkan grafik hubungan antara parameter γ dengan besarnya energi terikat pada setiap keadaan energi. Garfik paling bawah adalah grafik hubungan tersebut pada keadaan dasar, kemudian dilanjutkan dengan keadaan tereksitasi pertama, tereksitasi kedua, tereksitasi ketiga dan tereksitasi keempat.

Dari gambar tersebut terlihat dengan jelas bahwa semakin besar parameter γ dari sebuah partikel klasik, maka harga energi terikat pada setiap keadaan akan semakin mengecil. Hal ini memiliki dua buah makna secara fisis, yakni

1. Sebuah partikel dengan ukuran besar (secara otomatis memiliki massa yang besar pula) akan memiliki kerapatan energi lebih besar dibandingkan dengan partikel dengan γ lebih kecil.
2. Partikel dengan ukuran besar, akan memiliki energi tiap keadaan lebih rendah dibandingkan partikel dengan γ lebih kecil.



Gambar 4.5. Grafik trayektori partikel dibawah pengaruh Potensial Lennard Jones.

Gambar 4.5 ditunjukkan trayektori secara lengkap untuk partikel dengan harga parameter γ masing-masing adalah $\gamma = 21.7$, 24.8, 30, 40, 50, 60, 70 dan 80. Dari gambar tersebut terlihat dengan jelas bahwa banyaknya trayektori pada setiap partikel dengan ukuran γ tertentu menyatakan pula sebagai banyaknya tingkat energi. Semakin besar parameter γ dari partikel klasik, maka semakin banyak pula jumlah keadaan energi terikat.

Tabel 4.1 memberikan informasi yang jelas bahwa tingginya harga parameter γ menentukan jumlah keadaan energi terikat sistem. Dapat dicontohkan, bahwa pada $\gamma = 21.7$ jumlah keadaan energi terikat ada 5 (lima buah), sedangkan pada $\gamma = 40$ jumlah energi terikat ada 10 buah.

Tabel 1.
Energi terikat setiap level energi, Titik balik dalam Xin dan titik balik luar (Xout) Partikel di bawah pengaruh medan potensial Lennard Jones.

1. Gamma =21.700000 jumlah level =5

N=0	ENERGI=-0.772333	Xin=1.052150	Xout=1.249806
N=1	ENERGI=-0.422119	Xin=1.021681	Xout=1.424025
N=2	ENERGI=-0.195664	Xin=1.009181	Xout=1.638868
N=3	ENERGI=-0.067095	Xin=1.002931	Xout=1.970118
N=4	ENERGI=-0.012387	Xin=1.000587	Xout=2.617775

2. Gamma =24.800000 jumlah level =6

N=0	ENERGI=-0.798763	Xin=1.055275	Xout=1.238868
N=1	ENERGI=-0.477979	Xin=1.025587	Xout=1.389650
N=2	ENERGI=-0.254446	Xin=1.012306	Xout=1.563868
N=3	ENERGI=-0.113040	Xin=1.005275	Xout=1.802931
N=4	ENERGI=-0.035744	Xin=1.002150	Xout=2.191212
N=5	ENERGI=-0.005266	Xin=1.000587	Xout=3.019337

3. Gamma =40.000000 jumlah level =10

N=0	ENERGI=-0.872131	Xin=1.066993	Xout=1.207618
N=1	ENERGI=-0.647830	Xin=1.038868	Xout=1.303712

N=2 ENERGI=-0.464377 Xin=1.024806 Xout=1.397462
N=3 ENERGI=-0.318364 Xin=1.015431 Xout=1.501368
N=4 ENERGI=-0.205887 Xin=1.009962 Xout=1.624025
N=5 ENERGI=-0.122393 Xin=1.006056 Xout=1.777931
N=6 ENERGI=-0.065149 Xin=1.002931 Xout=1.980275
N=7 ENERGI=-0.028981 Xin=1.001368 Xout=2.270118
N=8 ENERGI=-0.009684 Xin=1.000587 Xout=2.727150
N=9 ENERGI=-0.001420 Xin=1.000587 Xout=3.757618

4. Gamma =50.000000 jumlah level =12
N=0 ENERGI=-0.896657 Xin=1.071681 Xout=1.196681
N=1 ENERGI=-0.710784 Xin=1.045118 Xout=1.276368
N=2 ENERGI=-0.551334 Xin=1.031056 Xout=1.349806
N=3 ENERGI=-0.417030 Xin=1.021681 Xout=1.427150
N=4 ENERGI=-0.305689 Xin=1.014650 Xout=1.512306
N=5 ENERGI=-0.215506 Xin=1.009962 Xout=1.610743
N=6 ENERGI=-0.144520 Xin=1.006837 Xout=1.727931
N=7 ENERGI=-0.090901 Xin=1.004493 Xout=1.870900
N=8 ENERGI=-0.052537 Xin=1.002931 Xout=2.053712
N=9 ENERGI=-0.026629 Xin=1.001368 Xout=2.302931
N=10 ENERGI=-0.010669 Xin=1.000587 Xout=2.683400
N=11 ENERGI=-0.002666 Xin=1.000587 Xout=3.382618
5. Gamma =80.000000 jumlah level =20

N=0 ENERGI=-0.934746 Xin=1.081056 Xout=1.178712
N=1 ENERGI=-0.811981 Xin=1.057618 Xout=1.233400
N=2 ENERGI=-0.700089 Xin=1.044337 Xout=1.281056
N=3 ENERGI=-0.598532 Xin=1.034962 Xout=1.326368
N=4 ENERGI=-0.506820 Xin=1.027931 Xout=1.373243
N=5 ENERGI=-0.424506 Xin=1.021681 Xout=1.422462
N=6 ENERGI=-0.351533 Xin=1.017775 Xout=1.474025
N=7 ENERGI=-0.287178 Xin=1.013868 Xout=1.530275
N=8 ENERGI=-0.230916 Xin=1.010743 Xout=1.591212
N=9 ENERGI=-0.182218 Xin=1.008400 Xout=1.659181
N=10 ENERGI=-0.140630 Xin=1.006837 Xout=1.735743
N=11 ENERGI=-0.105422 Xin=1.005275 Xout=1.824025
N=12 ENERGI=-0.077041 Xin=1.003712 Xout=1.924806
N=13 ENERGI=-0.053654 Xin=1.002931 Xout=2.046681
N=14 ENERGI=-0.036139 Xin=1.002150 Xout=2.187306
N=15 ENERGI=-0.022618 Xin=1.001368 Xout=2.366212
N=16 ENERGI=-0.012962 Xin=1.000587 Xout=2.597462
N=17 ENERGI=-0.006474 Xin=1.000587 Xout=2.916993
N=18 ENERGI=-0.002602 Xin=1.000587 Xout=3.396681
N=19 ENERGI=-0.000201 Xin=1.000587 Xout=5.204493

BAB V
KESIMPULAN DAN SARAN

A. KESIMPULAN

Dari hasil yang diperoleh melalui simulasi dengan bantuan program komputer, akhirnya dapat disimpulkan beberapa poin penting antara lain:

1. Parameter γ merupakan parameter fisis yang memiliki arti fisis sebagai ukuran partikel klasik sekaligus massa partikel tersebut.
2. Besarnya parameter γ sebuah partikel akan menentukan dua hal yaitu:
   a) Jumlah keadaan energi terikat dari sebuah sistem. Semakin besar harga parameter γ sebuah partikel klasik, maka semakin banyak pula jumlah keadaan energi terikatnya. Dengan demikian kerapatan keadaan energi terikatnya juga semakin besar.
   b) Tingginya energi terikat setiap keadaan. Semakin besar parameter γ dari sebuah partikel klasik, maka besarnya energi terikat pada setiap keadaan akan semakin kecil.
2. Lintasan/trayektori pada keadaan energi yang sama semakin pendek, jika parameter γ tersebut semakin besar.

B. SARAN

Saran yang dapat diberikan kepada para peneliti selanjutnya yang akan mengkaji masalah ini antara lain

1. Perlu dicoba jenis potensial lainnya selain Lennard-Jones, misalnya potensial berbentuk parabola atau periodik.
2. Perlu ditinjau untuk partikel bukan klasik. Ini berarti tidak ada posisi dan kecepatan yang eksak sebagaimana diperoleh pada partikel klasik

DAFTAR PUSTAKA

Koonin, Steven E ., Meredith, dawn C., 1990**,** *Computational Physics***,** USA **:** Addison-Wesley Publishing Company, Inc.

De Vries, Paul L., 1994, *A First Course In Commputational Physics*, New York : John Wiley & Sons, Inc.

Press H., Flannery P., Teulosky A., Vetterling T., 1987, *Numerical recipes*, Cambridge : Press Syndicate of the Cambridge Universuty

LISTING PROGRAM 1

```
%PROJEK 1
clear;close all;
MAX=100;                             %JUMLAH MAKSIMUM KEADAN
TERIKAT
TOLX=0.0005;
TOLE=0.0005;        % TOLERANSI UNTUK SPACE DAN ENERGI
NPTS=40;                        %JUMLAH TITIK KUADRATUR
XMIN=2^(1/6);
%XMIN=10.5;
FNV=inline('4*(X.^(-12)-X.^(-6))','X');
%FNV=inline('X.^2','X');
fid=fopen('PROJEK.txt','w');
%for GAMMA=20:10:100 %
GAMMA=input('MASUKKAN NILAI GAMMA :');
if (GAMMA <=0)
    fprintf('NILAI GAMMA HARUS LEBIH BESAR DARI NOL..!!!');
end
E=-TOLE;
XIN=XMIN;
DX=0.1;

while (DX>TOLX)
    XIN=XIN-DX;
    if (FNV(XIN)>=E)
     XIN=XIN+DX;
   DX=DX/2;
    end

  %  fprintf('n=%i  Xin=%f\n',n,XIN);

end

XOUT=XMIN; DX=.1;
while(DX>TOLX)
    XOUT=XOUT+DX;
    if (FNV(XOUT)>=E)
       XOUT=XOUT-DX;
    DX=DX/2;
    end

   %     fprintf('%f\n',XOUT);
end
```

```
H=(XOUT-XIN)/NPTS;
SUM=sqrt(E-FNV(XIN+H));
FAK=2;
for I=2:NPTS-2
    X=XIN+I*H;
    if (FAK==2)
        FAK=4;
    else
        FAK=2;
    end
    SUM=SUM+FAK*sqrt(E-FNV(X));
end
SUM=SUM+sqrt(E-FNV(XOUT-H));
SUM=SUM*H/3;
SUM=SUM+(sqrt(E-FNV(XIN+H)))*2*H/3;
SUM=SUM+(sqrt(E-FNV(XOUT-H)))*2*H/3;
S=GAMMA*SUM;

NMAX=(S/pi-0.5);
NLEV=NMAX+1;
if(NLEV<=MAX)
    fprintf('Gamma =%f jumlah level =%i\n',GAMMA, NLEV);
else
     fprintf('JUMLAH KEADAAN TERIKAT HARUS LEBIH KECIL DARI
%i',MAX);
    fprintf('\n Cobalah untuk Gamma lebih kecil ..');
end


E1=-1;F1=0-pi/2;
for N=0:NMAX
    E2=E1+abs(E1)/4;
    DE=2*TOLE;

while (abs(DE)>=TOLE)
        E=E2;

        XIN=XMIN;
DX=0.1;
while (DX>TOLX)
    XIN=XIN-DX;
    if (FNV(XIN)>=E)
     XIN=XIN+DX;
    DX=DX/2;
    end
```

```
%    fprintf('Xin=%f\n',XIN);
end

XOUT=XMIN; DX=.1;
while(DX>TOLX)
    XOUT=XOUT+DX;
    if (FNV(XOUT)>=E)
       XOUT=XOUT-DX;
    DX=DX/2;
    end

 %       fprintf('XOUT%f\n',XOUT);
end

H=(XOUT-XIN)/NPTS;
SUM=sqrt(E-FNV(XIN+H));
FAK=2;
for I=2:NPTS-2
    X=XIN+I*H;
    if (FAK==2)
        FAK=4;
    else
        FAK=2;
    end
    SUM=SUM+FAK*sqrt(E-FNV(X));
end
SUM=SUM+sqrt(E-FNV(XOUT-H));
SUM=SUM*H/3;
SUM=SUM+(sqrt(E-FNV(XIN+H)))*2*H/3;
SUM=SUM+(sqrt(E-FNV(XOUT-H)))*2*H/3;
S=GAMMA*SUM;

       F2=S-(N+0.5)*pi;
        if (F2~=F1)
           DE=-F2*(E2-E1)/(F2-F1);
       else
       DE=0;
   end
           E1=E2; F1=F2;E2=E1+DE;
   if (E2>0)
            E2=-TOLE;
        end;
    end;
                fprintf('N=%i            ENERGI=%f    Xin=%f
Xout=%f\n',N,E,XIN,XOUT);
```

```
    fprintf(fid,'%i   %f    %f   %f \n',N,E,XIN,XOUT);
E1=E2;
F1=F2-pi;
%end
end
 fclose(fid);
 load PROJEK.txt;
 %N=N+1;
 x=PROJEK(:,3);
 y=PROJEK(:,4);
 z=PROJEK(:,2);
 %figure;
% plot(x,z);
 %figure;
 %plot(y,z);

%for i=1:N+1
 x1=PROJEK(1,3);
 x2=PROJEK(1,4);
 x=x1:.001:x2;
 z=PROJEK(1,2);
 p1=sqrt(z-FNV(x));
 p2=-sqrt(z-FNV(x));
  hold on;
% figure(1);
 plot(x,p1,x,p2,'LineWidth',2.5);
 xlim([1 3.0]);
 xlabel('x');
 ylabel('p');
 title('Grafik trayektori partikel')

 x1=PROJEK(2,3);
 x2=PROJEK(2,4);
 x=x1:.001:x2;
 z=PROJEK(2,2);
 p1=sqrt(z-FNV(x));
 p2=-sqrt(z-FNV(x));
 %figure(2);
 plot(x,p1,x,p2,'LineWidth',2.5);


 x1=PROJEK(3,3);
 x2=PROJEK(3,4);
 x=x1:.001:x2;
 z=PROJEK(3,2);
 p1=sqrt(z-FNV(x));
```

```
p2=-sqrt(z-FNV(x));
%figure(3);
plot(x,p1,x,p2,'LineWidth',2.5);

x1=PROJEK(4,3);
x2=PROJEK(4,4);
x=x1:.001:x2;
z=PROJEK(4,2);
p1=sqrt(z-FNV(x));
p2=-sqrt(z-FNV(x));
%figure(4);
plot(x,p1,x,p2,'LineWidth',2.5);


x1=PROJEK(5,3);
x2=PROJEK(5,4);
x=x1:.001:x2;
z=PROJEK(5,2);
p1=sqrt(z-FNV(x));
p2=-sqrt(z-FNV(x));
%figure(5);
plot(x,p1,x,p2,'LineWidth',2.5);


x1=PROJEK(6,3);
x2=PROJEK(6,4);
x=x1:.001:x2;
z=PROJEK(6,2);
p1=sqrt(z-FNV(x));
p2=-sqrt(z-FNV(x));
%figure(6);
plot(x,p1,x,p2,'LineWidth',2.5);
 hold off;
```

LISTING PROGRAM 2

```
load PROJEK.txt;
for j=1:6
%N=input('Masukkan jumlah langkah N :');
Xin=PROJEK(j,3); Xout=PROJEK(j,4);
%h=input('Masukkan ukuran langkah yang dinginkan h :');
h=0.02
N=500;
y0=Xin;
%y0=input('Masukkan syarat awal fungsi y0 :');
z0=0;
f=inline('z','t','y','z');
g=inline('12/(y.^13)-6/(y.^7)','t','y','z');
FNV=inline('4*(y.^(-12)-y.^(-6))','y');
z=z0;
y=y0;
fid=fopen('runge.txt','w');
for i=0:N
    t=i*h;
    k1=h*f(t,y,z);
    l1=h*g(t,y,z);
    k2=h*f(t+1/3*h,y+1/3*k1,z+1/3*l1);
    l2=h*g(t+1/3*h,y+1/3*k1,z+1/3*l1);
    k3=h*f(t+2/3*h,y+1/3*(k1+k2),z+1/3*(l1+l2));
    l3=h*g(t+2/3*h,y+1/3*(k1+k2),z+1/3*(l1+l2));
    k4=h*f(t+h,y+(k1-k2+k3),z+(l1-l2+l3));
    l4=h*g(t+h,y+(k1-k2+k3),z+(l1-l2+l3));
    y=y+1/8*(k1+3*k2+3*k3+k4);
    z=z+1/8*(l1+3*l2+3*l3+l4);
      fprintf(fid,'%12.5f      %12.5f      %12.4f      %12.5f
\n',t,y,FNV(y),z);
   % fprintf('%12.5f    %12.5f    %12.5f \n',t,y,z);
end
    fclose(fid);
   load runge.txt;
   t=runge(:,1);
   y=runge(:,2);
   z=runge(:,3);
   z2=runge(:,4);
   figure(j);
   plot(t,y,t,z,t,z2,'LineWidth',3.5);

   title('Grafik posisi, kecepatan dan trayektori ');
```

```
    xlabel('\tau');
    ylabel('Posisi, Kecepatan, FNV(t)');
end
```