

LAPORAN PENELITIAN

KAJIAN KOMPUTASI KUANTISASI SEMIKLASIK VIBRASI MOLEKULER SISTEM DIBAWAH PENGARUH POTENSIAL LENNARD-JONES (POTENSIAL 12-6)



Oleh :

Warsono, M.Si

Supahar, M.Si

Supardi, M.Si

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS NEGERI YOGYAKARTA

Penelitian ini dibiayai dengan anggaran DIK UNY

Nomor perjanjian : 633a/J35.13/PL?202, tanggal : 1 Mei 2002

2002

**KAJIAN KOMPUTASI KUANTISASI SEMIKLASIK VIBRASI
MOLEKULER SISTEM DIBAWAH PENGARUH POTENSIAL LENNARD-
JONES (POTENSIAL 12-6)**

Oleh : Supardi, Warsono, Supahar

Abstrak

Telah dilakukan penelitian dengan seksama pengaruh potensial Lennard-Jones (potensial 12-6) terhadap sistem partikel yang tersusun oleh dua atom. Potensial Lennard-Jones merupakan bentuk potensial yang sulit untuk dipecahkan dengan metode analitik biasa. Oleh karena itu, penelitian ini didukung dengan penggunaan program komputer melalui bahasa pemrograman tingkat tinggi.

Dengan menggunakan salah satu bahasa pemrograman tingkat tinggi, maka telah dilakukan kajian kuantisasi semiklasik vibrasi molekuler sistem dibawah pengaruh potensial tersebut. Untuk melakukan kerja komputasi tersebut dilakukan perubahan besaran fisis menjadi besaran universal yang tak berdimensi lagi. Hal ini dilakukan, karena komputasi bekerja melalui angka-angka. Salah satu besaran tak berdimensi tersebut adalah γ yang didefinisikan sebagai $\gamma = (2ma^2V_o/h^2)$. Parameter ini selanjutnya menjadi parameter yang mengontrol keklasikan suatu sistem. Semakin besar harga γ , maka sistem yang ditinjau tersebut semakin klasik.

Dengan menggunakan masukan parameter kontrol γ tersebut, telah diperoleh beberapa state energi dengan posisi titik balik yang spesifik untuk setiap keadaan energi. Dari kajian tersebut diperoleh bahwa sistem yang berada pada keadaan energi lebih tinggi trayektori ruang fase dari gerak osilasinya lebih luas dibandingkan dengan sistem yang berada pada keadaan energi lebih rendah. Dengan memberi masukan γ yang lebih besar, keadaan energinyapun lebih rapat dibandingkan dengan masukan γ yang kecil. Hal ini ditunjukkan dengan cacah keadaan energi yang terbentuk.

*Kata kunci : keadaan energi, potensial Lennard-Jones, kuantisasi, vibrasi,
Molekuler, trayektori, ruang fase, osilasi, parameter*

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang Masalah

Telah dikenal berbagai model potensial V di dalam mekanika kuantum, diantaranya potensial sumur tak hingga, potensial sumur berhingga, potensial sumur bertangga dan yang lainnya. Model-model tersebut didesain dengan tujuan untuk mengetahui perilaku zarah yang berada di bawah pengaruh potensial tersebut.

Disamping model-model tersebut, ada satu bentuk potensial unik yang dikaji oleh peneliti yaitu model potensial Lennard-Jones atau dikenal dengan potensial 12-6. Model tersebut mengambil bentuk sebagai

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

Kalau model-model potensial seperti halnya model sumur berhingga ataupun model parabolik digunakan untuk memodelkan perilaku zarah tunggal, maka bentuk potensial Lennard-Jones dimodelkan untuk mengetahui bagaimana perilaku molekul diatomik (misalnya O_2) yang terdiri atas dua inti dan 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 bertangga dapat diatasi dengan kecakapan matematis biasa. Akan tetapi, jika yang dihadapkan jenis potensial Lennard-Jones, maka perhitungan analitis menjadi sangat sulit untuk dikerjakan. Oleh sebab itu, telah dilakukan pendekatan secara numerik oleh peneliti untuk mendapatkan keadaan-keadaan energi pada setiap *state*.

B. PERUMUSAN MASALAH

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

1. Bagaimana membuat algoritma yang sesuai untuk memecahkan masalah pencarian swanilai pada setiap keadaan energi pada sistem molekul diatomik.
2. Menentukan trayektori ruang fase pada setiap keadaan energi.

C. TINJAUAN PUSTAKA

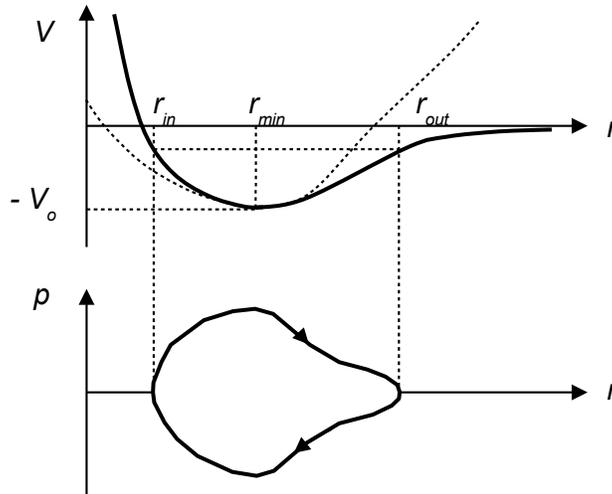
Ditinjau sebuah molekul diatomik (misalnya O_2) yang terdiri atas dua inti yang terikat bersama-sama oleh elektron-elektron yang mengitarinya. Karena massa inti jauh lebih besar dibandingkan dengan elektron, maka dapat dipahami bahwa elektron memiliki gerakan yang lebih gesit dibandingkan dengan inti atom (Koonin *et al.*, 1990). 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 meng-*handle* permasalahan ini adalah potensial Lennard-Jones atau potensial 12-6 seperti pada ungkapan (1). Bentuk potensial jenis ini dapat dilihat pada gambar 1.

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

Penyelesaian untuk keadaan terikat akan melibatkan persamaan Schroedinger yang mengambil bentuk

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

dengan m adalah massa tereduksi dari kedua inti (Press *et al.*, 1987).



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

Massa inti yang besar berimplikasi pada gerakan mereka yang mendekati gerak klasik. Oleh karena itu, nilai pendekatan 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 $-V_0 < E < 0$. 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 akibat gerak relatifnya dengan energi potensial. Oleh karena itu, total energi mengambil bentuk

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

dengan E adalah besarab energi yang bernilai konstan dan p adalah besaran momentum relatif inti. Dari ungkapan (3), selanjutnya dapat difikirkan tentang osilasi pada enrgi tertentu. Secara eksplisit persamaan trayektori dapat diperoleh dengan memecahkan persamaan (3) untuk p .

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

Gerak klasik yang digambarkan oleh ungkapan (4) terjadi pada setiap keadaan energi pada range potensial $-V_o$ dan 0. Untuk mengkuantisasikan gerak dan memperoleh harga pendekatan swanilai E_n yang muncul pada pada persamaan Scroedinger (2), maka akan dilakukan teknik komputasi. Apabila ditinjau besaran usaha (tak berdimensi) pada suatu keadaan energi tertentu

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

dengan $k(r) = h^{-1}p(r)$ adalah bilangan gelombang de Broglie. Ungkapan integral (5) merupakan integral satu lintasan osilasi penuh. Sedangkan besarnya usaha yang dilakukan ditunjukkan oleh daerah (dengan satuan h) yang dilingkupi oleh trayektori ruang fase. Aturan kuantisasi menegaskan bahwa pada energi-energi yang diijinkan E_n , usaha yang dilakukan adalah setengah integral dikalikan 2π (De Vries *et al.*, 1994). 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 kita memiliki

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

(6)

D. TUJUAN PENELITIAN

Berdasar latar belakang masalah serta dasar teori di atas, telah dikaji oleh peneliti antara lain

1. Harga energi pada setiap keadaan energi dengan bantuan komputer melalui proses numerik.
2. Menentukan trayektori ruang fase untuk setiap keadaan.

E. METODE PENELITIAN

Penelitian telah dilakukan di Laboratorium Fisika Komputasi Jurdik Fisika Universitas Negeri Yogyakarta. Perlengkapan penunjang yang tersedia di Laboratorium ini meliputi beberapa komputer pribadi yang telah terhubung satu sama lain dengan line jaringan. Sistem operasi yang digunakan adalah WINDOWS, dilengkapi dengan bahasa pemrograman tingkat tinggi Fortran Power Station, BASIC, serta paket aljabar numerik seperti Mathematica dan MAPLE.

Untuk mensimulasikan keadaan kuantisasi terhadap potensial Lennard-Jones (1), maka harus didefinisikan besaran tak berdimensi (Koonin *et al.*, 1994)

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

sehingga pernyataan (6) menjadi

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

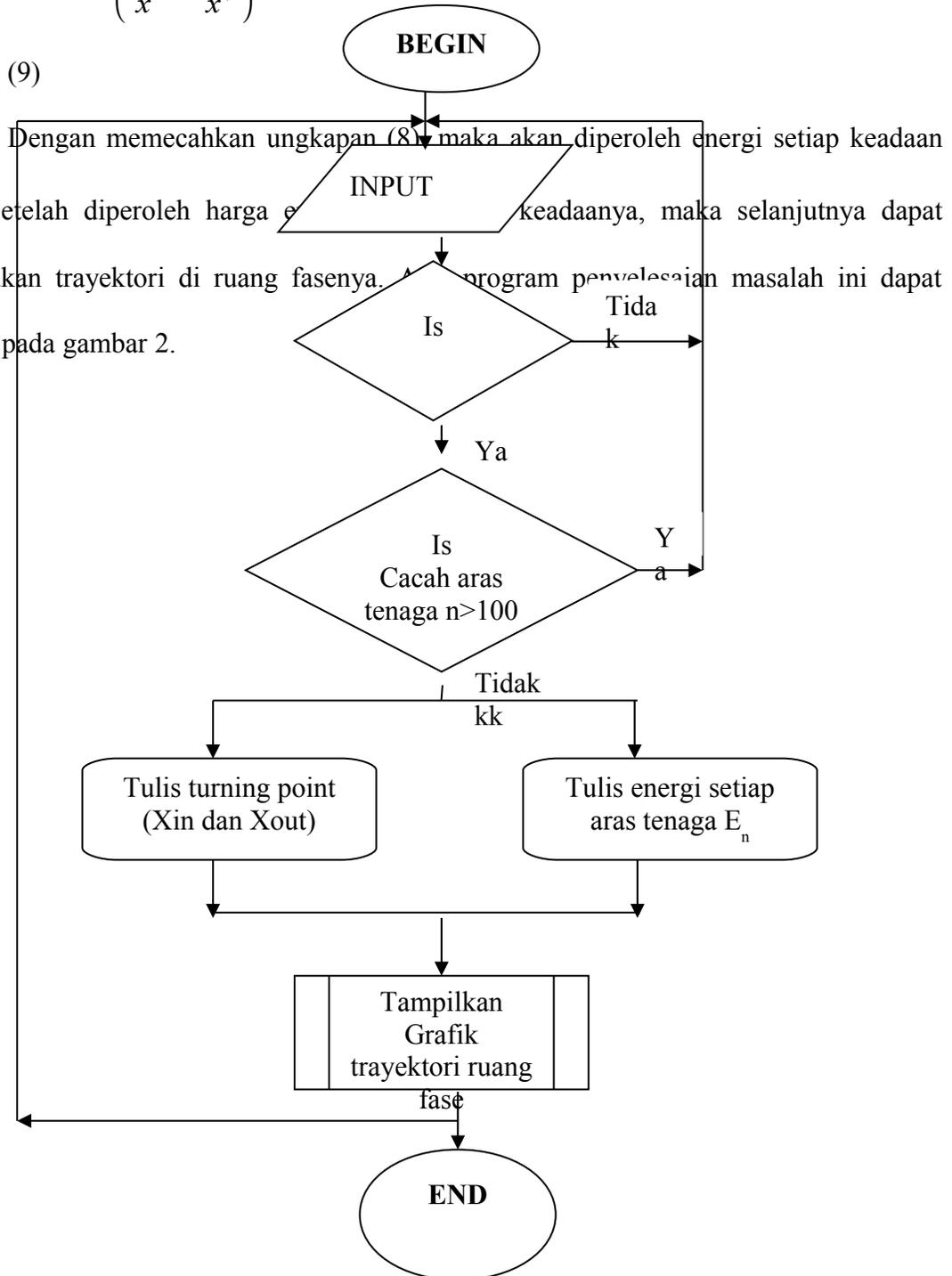
(8)

dengan

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

(9)

Dengan memecahkan ungkapan (8) maka akan diperoleh energi setiap keadaan ϵ_n . Setelah diperoleh harga ϵ_n keadaanya, maka selanjutnya dapat ditentukan trayektori di ruang fasenya. program penyelesaian masalah ini dapat dilihat pada gambar 2.



Gambar 2. Flowchart program komputasi numerik untuk memperoleh cacah keadaan dengan energinya untuk masukan tertentu.

F. PEMBAHASAN

Setelah dilakukan kajian secara seksama, maka masalah kuantisasi semiklasik dapat diselesaikan dengan menggunakan bantuan perangkat komputer yang dilengkapi dengan perangkat lunak. Data energi untuk setiap keadaan energi disajikan dengan disertai bentuk trayektori di ruang fase yang sesuai.

Program komputer (*source code*) yang dibuat telah digunakan untuk mencari pendekatan secara numerik keadaan energi terikat oleh pengaruh potensial Lennard-Jones (potensial 6-12) untuk setiap masukan parameter *gamma* tertentu yang mengambil bentuk

$\gamma = \left(\frac{2ma^2V_o}{h^2} \right)$. Parameter *gamma* merupakan ukuran alamiah dari sistem yang

menentukan atau lebih tepatnya mengontrol tingkat 'ke-klasik-an' dari suatu sistem yang ditinjau (Koonin *et al.*, 1994). 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 ungkapan gamma tersebut.

Sistem klasik memiliki besaran m yang jauh lebih besar dibandingkan dari nilai tetapan h . Hal ini menyebabkan harga gamma (γ) menjadi besar sekali. Di lain pihak, besaran m pada partikel berorde elektron memiliki nilai yang tidak terlampaui jauh dengan tetapan Boltzman tersebut, sehingga dapat difahami bahwa nilai dari γ jauh lebih kecil.

Dengan diketahui besaran 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, maka dapat ditentukan jarak antar atom penyusun a serta medan potensial yang berpengaruh pada sistem tersebut V_0 . Setelah a dan V_0 diketahui maka dapat ditentukan nilai gamma.

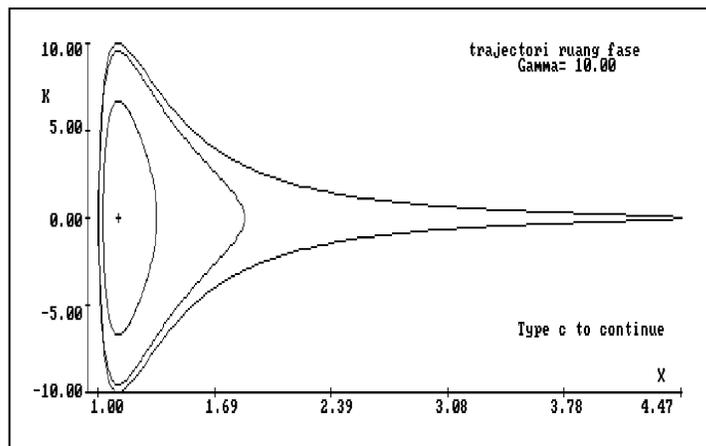
Dari referensi telah diketahui beberapa nilai γ untuk beberapa molekul antara lain, untuk molekul H_2 parameter gamma bernilai $\gamma = 21.7$, untuk molekul HD $\gamma = 24.8$. Disini, nilai γ untuk molekul HD memiliki harga lebih besar dibandingkan dengan nilai γ untuk molekul H_2 , hal ini akibat dari massa deuteron lebih besar dibandingkan dengan proton penyusun hidrogen. Ini berarti molekul HD lebih klasik dibandingkan dengan molekul H_2 . Untuk molekul oksigen (O_2) yang terdiri atas atom O^{16} , massanya jauh lebih besar dibandingkan dengan molekul H_2 , sehingga harga γ -nya juga jauh lebih besar

yaitu $\gamma = 150$. Ukuran γ yang besar ini mengindikasikan bahwa aproksimasi semiklasik sah untuk gerak vibrasinya.

Data yang diperoleh menunjukkan bahwa untuk setiap masukan γ 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. Keadaan energi tiap state dan titik balik (turning point) osilasi sistem pada keadaan energi tersebut dengan masukan parameter $\gamma = 10$

Keadaan ke	Keadaan Energi yang sesuai	Titik balik masuk (Xin)	Titik balik keluar (Xout)
0	-0.551492	1.031056	1.349806
1	-0.091197	1.004493	1.870118
2	-0.000500	1.000587	4.471679

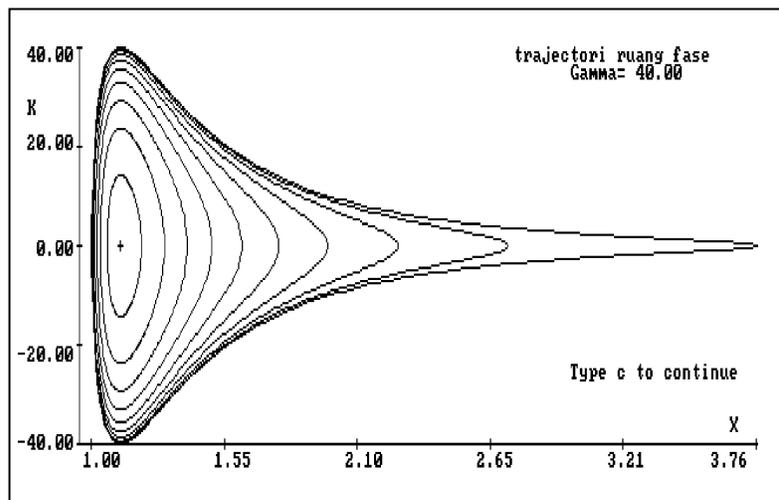


Gambar 3. Trayektori dalam ruang fase dengan masukan gamma=10

TABEL 2. Keadaan energi tiap state dan titik balik (turning point) osilasi sistem pada keadaan energi tersebut dengan masukan parameter $\gamma = 40$

Keadaan ke	Keadaan Energi yang sesuai	Titik balik masuk (Xin)	Titik balik keluar (Xout)
------------	----------------------------	-------------------------	---------------------------

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

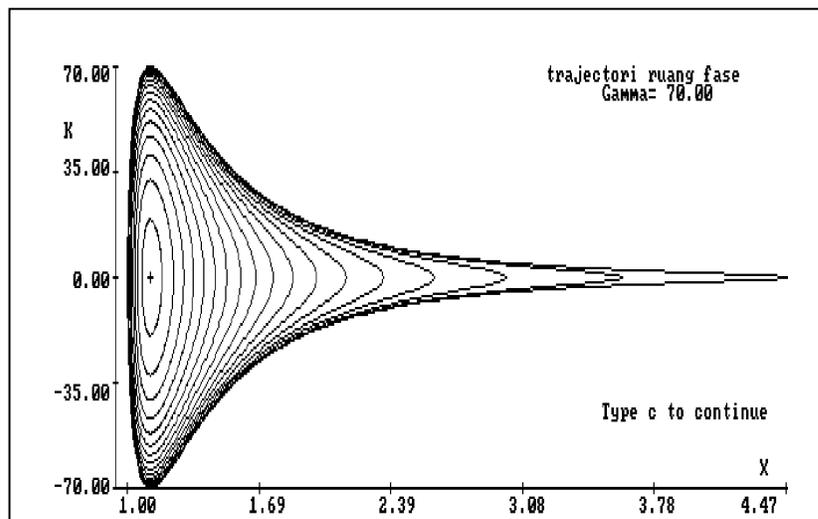


Gambar 4. Trayektori dalam ruang fase dengan masukan gamma= 40

TABEL 3. Keadaan energi tiap state dan titik balik (turning point) osilasi sistem pada keadaan energi tersebut dengan masukan parameter $\gamma = 70$

Keadaan ke	Keadaan Energi yang sesuai	Titik balik masuk (Xin)	Titik balik keluar (Xout)
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



Gambar 5. Trayektori dalam ruang fase dengan masukan gamma= 70

Tabel 1 ditunjukkan bahwa pada nilai γ yang relatif rendah, maka keadaan-keadaan energi yang terbentuk lebih sedikit dibandingkan dengan masukan nilai γ yang lebih besar. Hal ini dapat difahami, karena nilai γ yang semakin kecil menunjukkan partikel yang saling berinteraksi massanya lebih kecil dibandingkan dengan γ besar. Massa partikel kecil menimbulkan gaya Coulomb yang dibangun antara kedua partikel 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 = 0.55092, untuk $\gamma = 40$ diperlukan energi = 0.8711 dan untuk molekul dengan nilai $\gamma = 70$ diperlukan energi = 0.925. Seperti halnya pada sistem potensial sumur berhingga, 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.

BAB V

KESIMPULAN

Setelah dilakukan penelitian secara seksama melalui bantuan bahasa pemrograman komputer tingkat tinggi, maka kesimpulan yang dapat diambil dari penelitian ini antara lain:

1. Parameter γ merupakan parameter yang mengontrol tingkat ke'klasikan' molekul dwiatom.
2. Semakin besar harga parameter γ , maka semakin klasik sistem tersebut.
3. Masukan terhadap parameter γ tertentu menentukan cacah keadaan energi (*state*) sistem yang berada di bawah pengaruh potensial Lennard-Jones. Setiap keadaan memiliki energi yang spesifik.
4. Setiap sistem yang berada pada pengaruh potensial Lennard-Jones melakukan gerak osilasi dengan titik balik X_{in} dan X_{out} tertentu.
5. Sistem yang berada pada keadaan energi yang lebih tinggi memiliki trayektori ruang fase lebih luas dibandingkan sistem yang berada pada keadaan energi lebih rendah.

BAB VI

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 University.