



**OSILATOR HARMONIK PADA ION MOLEKUL HIDROGEN H_2^+ DENGAN
INTERAKSI VAN DER WAALS MENGGUNAKAN TEORI
PERTURBASI ORDE DUA**

SKRIPSI

Oleh

**Nur Karim
NIM 120210102092**

**PROGRAM STUDI PENDIDIKAN FISIKA
JURUSAN PENDIDIKAN MIPA
FAKULTAS KEGURUAN DAN ILMU PENDIDIKAN
UNIVERSITAS JEMBER
2017**



**OSILATOR HARMONIK PADA ION MOLEKUL HIDROGEN H_2^+ DENGAN
INTERAKSI VAN DER WAALS MENGGUNAKAN TEORI
PERTURBASI ORDE DUA**

SKRIPSI

diajukan guna melengkapi tugas akhir dan memenuhi salah satu syarat
untuk menyelesaikan Program Studi Pendidikan Fisika (S1)
dan mencapai gelar Sarjana Pendidikan

Oleh

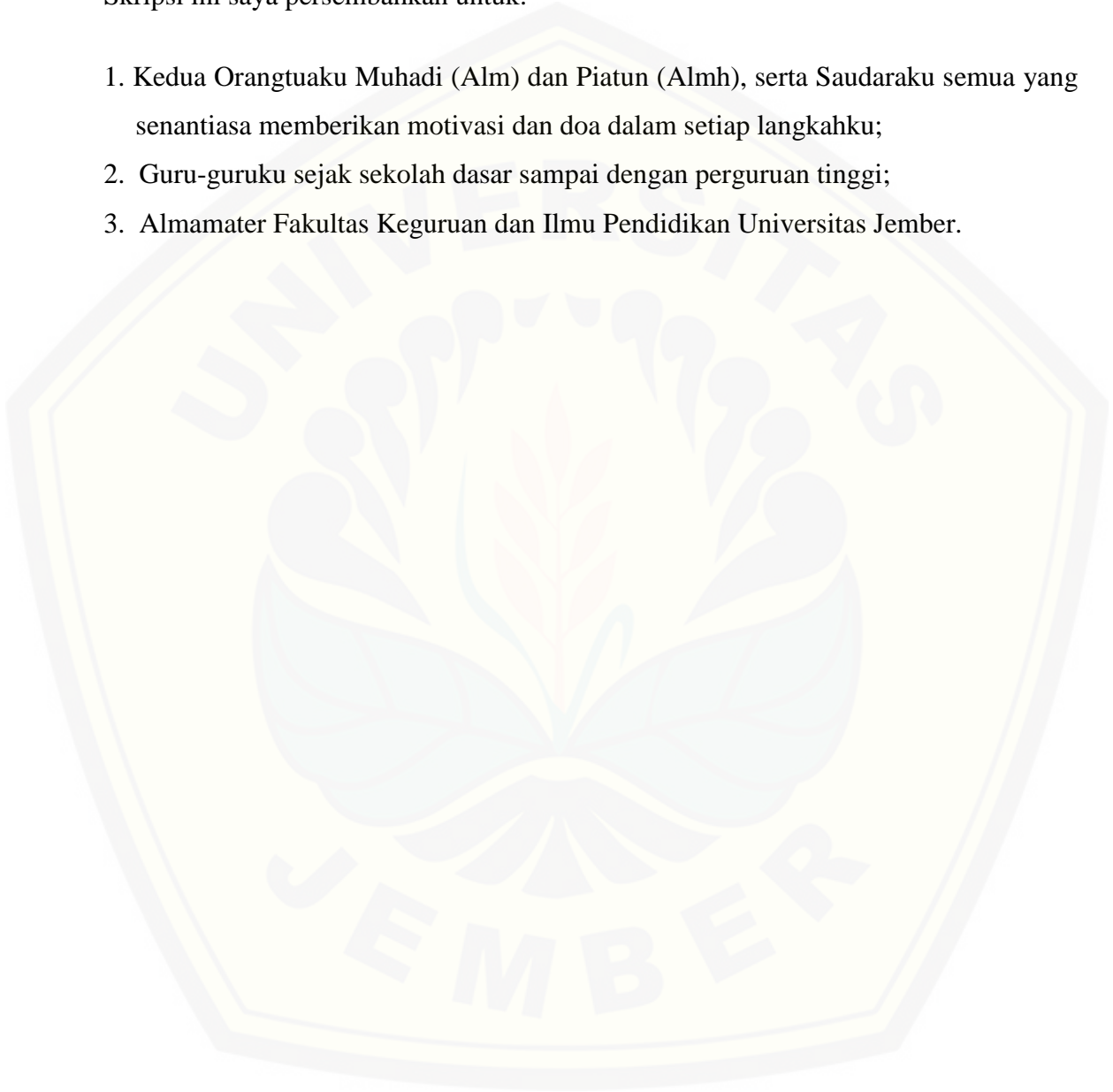
**Nur Karim
NIM 120210102092**

**PROGRAM STUDI PENDIDIKAN FISIKA
JURUSAN PENDIDIKAN MIPA
FAKULTAS KEGURUAN DAN ILMU PENDIDIKAN
UNIVERSITAS JEMBER
2017**

PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan untuk:

1. Kedua Orangtuaku Muhadi (Alm) dan Piatun (Almh), serta Saudaraku semua yang senantiasa memberikan motivasi dan doa dalam setiap langkahku;
2. Guru-guruku sejak sekolah dasar sampai dengan perguruan tinggi;
3. Almamater Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Jember.



MOTO

Sesungguhnya sesudah kesulitan itu ada kemudahan; 7. Maka apabila kamu telah selesai (dari suatu urusan) kerjakanlah dengan sungguh-sungguh (urusan) yang lain;

8. Dan hanya kepada Tuhanmulah hendaknya kamu berharap

(Terjemahan Q.S. Surat Al-Insyirah ayat 6-8)



Departemen Agama Republik Indonesia. 2010. *Al Qur'an dan Terjemahannya*.

Bandung: CV Penerbit Diponegoro.

PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Nur Karim

NIM : 120210102092

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi yang berjudul “Osilator Harmonik pada Ion Molekul Hidrogen H_2^+ dengan Interaksi van der Waals menggunakan Teori Perturbasi Orde Dua” adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali kutipan yang sudah saya sebutkan sumbernya, belum pernah diajukan pada institusi mana pun, dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya, tanpa ada tekanan dan paksaan dari pihak mana pun serta bersedia mendapat sanksi akademik jika ternyata di kemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember, 30 Maret 2017

Yang menyatakan,

Nur Karim

NIM 120210102092

SKRIPSI

**OSILATOR HARMONIK PADA ION MOLEKUL HIDROGEN H_2^+ DENGAN
INTERAKSI VAN DER WAALS MENGGUNAKAN TEORI
PERTURBASI ORDE DUA**

Oleh

Nur Karim

NIM 120210102092

Pembimbing

Dosen Pembimbing Utama : Drs. Bambang Supriadi, M.Sc.

Dosen Pembimbing Anggota : Drs. Sri Handono Budi Prastowo, M.Si

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Osilator Harmonik pada Ion Molekul Hidrogen H_2^+ dengan Interaksi van der Waals menggunakan Teori Perturbasi Orde Dua” telah diuji dan disahkan pada:

hari, tanggal : Kamis, 30 Maret 2017

tempat : Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan

Tim Penguji:

Ketua,

Sekretaris,

Drs. Bambang Supriadi, M.Sc

Drs. Sri Handono Budi Prastowo, M.Si.

NIP 196807101993021001

NIP 195803181985031004

Anggota I,

Anggota II,

Dr. Yushardi, S.Si., M.Si

Drs. Trapsilo Prihandono, M.Si

NIP 196504201995121001

NIP 196204011987021001

Mengesahkan

Dekan Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan

Universitas Jember,

Prof. Drs. Dafik, M.Sc., Ph.D.

NIP 196808021993031004

RINGKASAN

Osilator Harmonik pada Ion Molekul Hidrogen H_2^+ dengan Interaksi van der Waals menggunakan Teori Perturbasi Orde Dua; Nur Karim, 120210102092; 2017: 59 halaman; Program Studi Pendidikan Fisika Jurusan Pendidikan MIPA Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Jember.

Osilator harmonik adalah sistem yang dapat diselesaikan secara eksak baik dalam mekanika klasik maupun mekanika kuantum. Dalam mekanika kuantum, osilator harmonik pada keadaan dasar energinya tidak nol, melainkan bernilai $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Aplikasi dari osilator harmonik adalah vibrasi molekul diatomik di sekitar titik kesetimbangan (keadaan dasar). Salah satu molekul diatomik yang memiliki bentuk sederhana adalah ion molekul hidrogen H_2^+ . Ion molekul hidrogen H_2^+ dijumpai di planet nebula NGC 6120 dalam keadaan bervibrasi. Dalam pergerakannya, inti molekul akan bergerak mendekat dan menjauh satu sama lain. Pada saat elektron berada di antara kedua inti molekul, sedangkan kedua inti molekul berada pada jarak cukup jauh, maka timbul dipol terinduksi. Dipol terinduksi ini merupakan suatu bentuk interaksi van der Waals. Interaksi van der Waals dalam gerak vibrasi molekul dapat dianggap sebagai pengganggu. Untuk mengetahui energi dan fungsi gelombang total akibat pengganggu, dapat menggunakan teori perturbasi hingga orde tertentu. Beberapa kasus, energi orde satu bernilai nol, sehingga perlu ditingkatkan ke orde dua. Oleh karena itu, dilakukan penelitian mengenai osilator harmonik pada ion molekul hidrogen H_2^+ dengan interaksi van der Waals menggunakan teori perturbasi orde dua.

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui energi vibrasi dan fungsi gelombang vibrasi dari molekul H_2^+ pada keadaan dasar ketika tidak mendapat gangguan maupun ketika mendapat gangguan berupa interaksi van der Waals dengan menggunakan teori perturbasi orde dua. Selain itu, penelitian ini juga bertujuan untuk mengetahui dampak akibat adanya gangguan interaksi van der Waals pada ion molekul hidrogen H_2^+ .

Dalam pelaksanaannya, penelitian ini menggunakan dua cara, yaitu analitik dan numerik. Cara analitik dilakukan melalui persamaan matematis yang diperoleh dari pengembangan teori osilator harmonik dan teori perturbasi orde dua. Sedangkan cara numerik dilakukan dengan bantuan program Matlab R2015b. Metode yang digunakan adalah metode beda hingga (*finite difference method*). Data yang diambil sebanyak $N=212$, dengan matriks Hamiltonian 212×212 . Parameter gangguan λ yang digunakan adalah 1×10^{-4} , 2×10^{-4} , 3×10^{-4} , serta jarak antar inti molekul R yaitu $2,00 a_0$; $2,25 a_0$; $2,50 a_0$; $2,75 a_0$. Data yang diperoleh dari hasil perhitungan numerik adalah besarnya energi dan grafik fungsi gelombang tanpa gangguan. Dan fungsi gelombang dengan gangguan orde dua merupakan penjumlahan dari fungsi gelombang tanpa gangguan ditambah dengan beberapa suku fungsi gelombang yang terkait.

Berdasarkan hasil data yang diperoleh, didapatkan bahwa energi vibrasi ion molekul hidrogen pada keadaan dasar dari hasil perhitungan analitik adalah sebesar $0,142395$ eV dan perhitungan secara numerik yaitu $0,142210$ eV. Hasil tersebut apabila dibandingkan dengan penelitian Fabri *et al*, yaitu $0,142514$ eV, hanya memiliki selisih $0,000119$ eV. Sedangkan koreksi orde dua energi vibrasinya memiliki orde R^{-4} , yang mirip dengan hasil penelitian Holstein, namun ordenya R^{-6} . Untuk fungsi gelombang total vibrasi, secara keseluruhan memiliki bentuk pada keadaan dasar. Namun titik kesetimbangan sistem menjadi bergeser lebih besar.

Berdasarkan hasil dan pembahasan, maka dapat disimpulkan bahwa (a) Energi vibrasi ion molekul hidrogen pada keadaan dasar dapat didekati dengan osilator harmonik. Energi vibrasi hasil analitik adalah sebesar $0,142395$ eV dan secara numerik sebesar $0,142210$ eV; (b) Fungsi gelombang vibrasi ion molekul hidrogen merupakan fungsi eigen yang dihasilkan dari perhitungan numerik. Pada keadaan tanpa gangguan, fungsi gelombangnya dapat didekati dengan fungsi gelombang osilator harmonik. Sedangkan fungsi gelombang dengan gangguan interaksi van der Waals, bentuknya dipengaruhi oleh jarak antar inti molekul dan parameter gangguan .

PRAKATA

Puji syukur ke hadirat Allah Swt. atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Osilator Harmonik pada Ion Molekul Hidrogen H_2^+ dengan Interaksi van der Waals menggunakan Teori Perturbasi Orde Dua”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) pada Program Studi Pendidikan Fisika Jurusan Pendidikan MIPA Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Jember.

Penyusunan skripsi ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis menyampaikan terima kasih kepada:

1. Prof. Dr. Dafik, M.Sc. Ph.D., selaku Dekan Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan Universitas Jember;
2. Dr. Dwi Wahyuni, M.Kes., selaku Ketua Jurusan Pendidikan MIPA;
3. Drs. Bambang Supriadi, M.Sc., selaku Ketua Program Studi Pendidikan Fisika dan Dosen Pembimbing Utama dan Drs. Sri Handono Budi Prastowo, M.Si, selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah meluangkan waktu, pikiran, dan perhatian dalam penulisan skripsi ini;
4. Dr. Yushardi, S.Si., M.Si., selaku Dosen Penguji Utama, dan Drs. Trapsilo Prihandono, M.Si., selaku Dosen Pembimbing Akademik yang telah membimbing selama penulis menjadi mahasiswa dan Dosen Penguji Anggota yang telah meluangkan waktu untuk memberikan saran dan kritik serta masukannya demi kesempurnaan skripsi ini;
5. Kakak kandung saya Rokhama, S.Pd yang senantiasa memberi dukungan dan doa. disetiap langkah saya.
6. Febri Galuh Maharani, S.Pd selaku teman kuliah yang selalu membantu saya dalam banyak hal;

Penulis menerima segala kritik dan saran yang bersifat membangun dari semua pihak demi kesempurnaan penulisan skripsi ini. Akhirnya penulis berharap, semoga skripsi ini dapat bermanfaat.

Jember, Februari 2017

Penulis



DAFTAR ISI

| | Halaman |
|--|---------|
| HALAMAN JUDUL | i |
| HALAMAN PERSEMBAHAN | ii |
| HALAMAN MOTO | iii |
| HALAMAN PERNYATAAN | iv |
| HALAMAN PEMBIMBINGAN | v |
| HALAMAN PENGESAHAN | vi |
| RINGKASAN | vii |
| PRAKATA | ix |
| DAFTAR ISI | xi |
| DAFTAR TABEL | xiii |
| DAFTAR GAMBAR | xiv |
| DAFTAR LAMPIRAN | xvi |
| BAB 1. PENDAHULUAN | 1 |
| 1.1 Latar Belakang | 1 |
| 1.2 Rumusan Masalah | 3 |
| 1.3 Batasan Masalah | 4 |
| 1.4 Tujuan Penelitian | 4 |
| 1.5 Manfaat Penelitian | 4 |
| BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA | 5 |
| 2.1 Osilator Harmonik | 5 |
| 2.1.1 Osilator Harmonik Klasik | 5 |
| 2.1.2 Osilator Harmonik Kuantum | 6 |
| 2.2 Ion Molekul Hidrogen | 13 |
| 2.2.1 Pemisahan Gerak Inti dan Elektron | 13 |
| 2.2.2 Vibrasi Ion Molekul Hidrogen H_2^+ | 17 |
| 2.3 Interaksi van der Waals | 20 |

| | |
|--|----|
| 2.4 Teori Perturbasi Tak Bergantung Waktu pada Sistem | |
| Nondegenerate | 20 |
| 2.4.1 Koreksi Orde Satu | 22 |
| 2.4.2 Koreksi Orde Dua | 23 |
| 2.5 Metode Numerik | 27 |
| 2.5.1 Metode Beda Hingga | 27 |
| 2.5.2 Operator dalam Matriks | 28 |
| BAB 3. METODE PENELITIAN | 30 |
| 3.1 Waktu dan Tempat Penelitian | 30 |
| 3.2 Definisi Operasional Variabel | 30 |
| 3.3 Langkah Penelitian | 31 |
| 3.4 Diagram Alur Program | 33 |
| 3.5 Pengembangan Teori | 34 |
| 3.6 Data Simulasi | 35 |
| 3.7 Validasi Simulasi | 37 |
| BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN | 40 |
| 4.1 Hasil | 40 |
| 4.1.1 Energi Keadaan Dasar | 40 |
| 4.1.2 Fungsi Gelombang Keadaan Dasar | 43 |
| 4.2 Pembahasan | 52 |
| BAB 5. PENUTUP | 58 |
| 5.1 Kesimpulan | 58 |
| 5.2 Saran | 58 |
| DAFTAR PUSTAKA | 60 |
| LAMPIRAN | 62 |

DAFTAR TABEL

| | Halaman |
|---|---------|
| 2.1 Nilai polinomial Hermite sebagai fungsi dari u | 10 |
| 3.1 Energi keadaan dasar ion molekul hidrogen | 36 |
| 3.2 Data energi vibrasi keadaan dasar tanpa gangguan | 36 |
| 3.3 Koreksi energi orde dua dan energi total terkoreksi orde dua | 36 |
| 3.4 Fungsi gelombang keadaan dasar ion molekul hidrogen | 37 |
| 3.5 Data ion molekul hidrogen dengan pendekatan Born-Oppenheimer | 37 |
| 3.6 Fungsi gelombang dan tingkat energi dari tiga keadaan terendah | 38 |
| 4.1 Energi keadaan dasar ion molekul hidrogen | 40 |
| 4.2 Perbandingan koreksi orde dua energi vibrasi dengan penelitian lain | 40 |
| 4.3 Data energi vibrasi keadaan dasar tanpa gangguan | 41 |
| 4.4 Perbandingan energi vibrasi dengan penelitian lain | 41 |
| 4.5 Data energi vibrasi keadaan dasar dnegan gangguan | 41 |
| 4.6 Fungsi gelombang keadaan dasar ion molekul hidrogen | 44 |

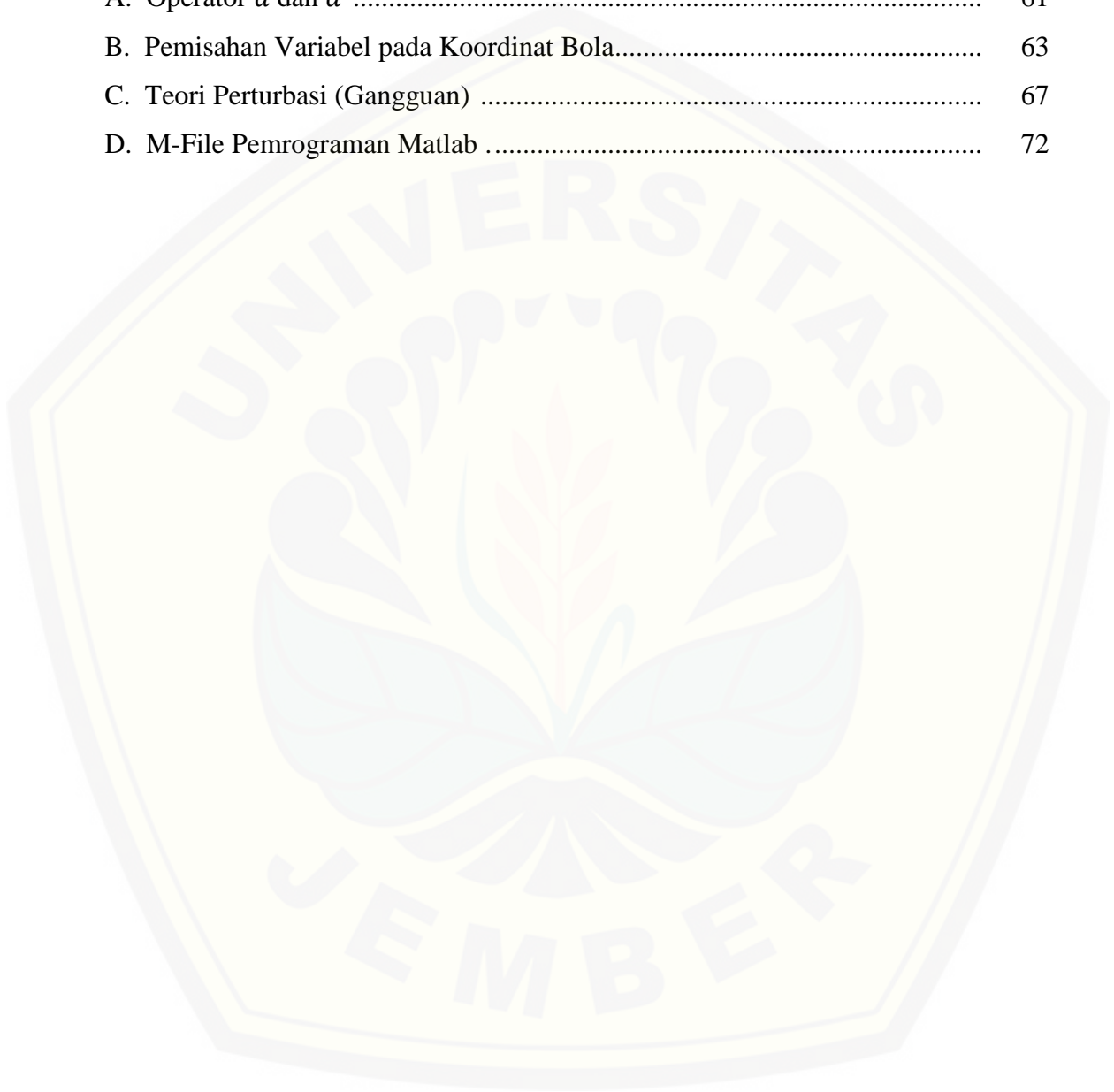
DAFTAR GAMBAR

| | Halaman |
|---|---------|
| 2.1 Benda bermassa m yang diikat dengan pegas | 6 |
| 2.2 Tingkat energi osilator harmonik satu dimensi | 11 |
| 2.3 Fungsi gelombang osilator harmonik satu dimensi | 11 |
| 2.4 Ion molekul hidrogen H_2^+ | 14 |
| 2.5 Energi elektron dan potensial tolakan antar inti molekul | 16 |
| 2.6 Energi potensial molekul dengan pendekatan osilator harmonik | 19 |
| 3.1 Bagan-bagan langkah penelitian | 31 |
| 3.2 <i>Flowchart</i> pemrograman komputer dengan Matlab | 33 |
| 3.3 (a) Vibrasi ion molekul hidrogen di titik kesetimbangan | 34 |
| (b) Model sederhana untuk interaksi van der Waals | 34 |
| 3.4 Fungsi gelombang dan rapat probabilitas osilator harmonik pada keadaan $n=0$ | 38 |
| 3.5 Fungsi gelombang dan rapat probabilitas osilator harmonik pada keadaan $n=1$ | 39 |
| 3.6 Fungsi gelombang dan rapat probabilitas osilator harmonik pada keadaan $n=2$ | 39 |
| 4.1 Grafik energi vibrasi ion molekul hidrogen H_2^+ | 42 |
| 4.2 Grafik energi van der Waals dengan $\lambda= 1 \times 10^{-4}$ | 43 |
| 4.3 Grafik energi van der Waals dengan $\lambda= 2 \times 10^{-4}$ | 43 |
| 4.4 Grafik energi van der Waals dengan $\lambda= 3 \times 10^{-4}$ | 44 |
| 4.5 Fungsi gelombang tanpa gangguan | 45 |
| 4.6 Fungsi gelombang terganggu untuk $R= 2,00 a_0$ dan $\lambda= 1 \times 10^{-4}$ | 46 |
| 4.7 Fungsi gelombang terganggu untuk $R= 2,00 a_0$ dan $\lambda= 2 \times 10^{-4}$ | 46 |
| 4.8 Fungsi gelombang terganggu untuk $R= 2,00 a_0$ dan $\lambda= 3 \times 10^{-4}$ | 47 |
| 4.9 Fungsi gelombang terganggu untuk $R= 2,25 a_0$ dan $\lambda= 1 \times 10^{-4}$ | 47 |

| | | |
|------|--|----|
| 4.10 | Fungsi gelombang terganggu untuk $R= 2,25 a_0$ dan $\lambda= 2 \times 10^{-4}$ | 48 |
| 4.11 | Fungsi gelombang terganggu untuk $R= 2,25 a_0$ dan $\lambda= 3 \times 10^{-4}$ | 48 |
| 4.12 | Fungsi gelombang terganggu untuk $R= 2,50 a_0$ dan $\lambda= 1 \times 10^{-4}$ | 49 |
| 4.13 | Fungsi gelombang terganggu untuk $R= 2,50 a_0$ dan $\lambda= 2 \times 10^{-4}$ | 49 |
| 4.14 | Fungsi gelombang terganggu untuk $R= 2,50 a_0$ dan $\lambda= 3 \times 10^{-4}$ | 50 |
| 4.15 | Fungsi gelombang terganggu untuk $R= 2,75 a_0$ dan $\lambda= 1 \times 10^{-4}$ | 50 |
| 4.16 | Fungsi gelombang terganggu untuk $R= 2,75 a_0$ dan $\lambda= 2 \times 10^{-4}$ | 51 |
| 4.17 | Fungsi gelombang terganggu untuk $R= 2,75 a_0$ dan $\lambda= 3 \times 10^{-4}$ | 51 |
| 4.18 | Pergeseran titik kesetimbangan akibat interaksi van der Waals | 52 |

DAFTAR LAMPIRAN

| | Halaman |
|--|---------|
| A. Operator a dan a^\dagger | 61 |
| B. Pemisahan Variabel pada Koordinat Bola..... | 63 |
| C. Teori Perturbasi (Gangguan) | 67 |
| D. M-File Pemrograman Matlab | 72 |



BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Gerak periodik merupakan gerak bolak-balik suatu sistem di sekitar titik setimbang, yang berarti bahwa sistem tersebut dapat dikatakan telah mengalami osilasi. Beberapa contoh gerak harmonik klasik adalah gerak osilasi pada pegas elastis, pendulum, kawat yang bergetar, resonansi pada rongga udara, dan gerak muatan pada suatu rangkaian listrik. Pada gerak harmonik, ketika pergeseran sistem terhadap titik setimbang cukup besar maka osilasi sistem menjadi tidak linier (Arya, 1998:58). Sebuah benda yang terikat pada ujung pegas ketika disimpangkan akan mengalami gerak harmonik sederhana akibat adanya gaya pemulih yang arahnya berlawanan dengan arah gerak benda. Gerak harmonik secara klasik dapat diselesaikan dengan hukum Newton yang menghasilkan solusi umum berbentuk fungsi sinusoidal.

Osilator harmonik adalah sistem yang dapat diselesaikan secara eksak baik dalam mekanika klasik maupun mekanika kuantum. Dalam mekanika kuantum, persamaan utama yang harus dipecahkan adalah suatu persamaan diferensial orde kedua, yang dikenal sebagai persamaan Schrodinger. Berbeda dari hukum Newton, pemecahan persamaan Schrodinger, yang disebut fungsi gelombang, memberikan informasi tentang perilaku gelombang dari partikel (Krane, 1992:134). Osilator harmonik memiliki tingkat energi terendah yang disebut *zero-point energy*. Energi titik nol bertanggung jawab pada kestabilan atom agar elektron tidak jatuh ke inti (Zettili, 2009:233). Osilator harmonik memiliki peranan penting dalam perkembangan mekanika kuantum. Vibrasi molekul diatomik adalah salah satu fenomena yang dapat dijelaskan dengan osilator harmonik kuantum.

Menurut Beiser (2003:281), molekul adalah kelompok atom netral yang terikat bersama dengan cukup kuat sehingga berperilaku sebagai partikel tunggal. Molekul dapat menyerap dan memancarkan radiasi elektromagnetik seperti halnya atom. Salah satu cara untuk menyerap dan memancarkan radiasi elektromagnetik adalah dengan mengubah keadaan gerak vibrasinya. Sebuah molekul yang

menyerap radiasi elektromagnetik akan menempati keadaan tereksitasi, setelah itu ia akan balik ke keadaan dasarnya dengan memancarkan radiasi elektromagnetik. Gerak vibrasi ini bergantung pada massa objek yang bervibrasi yaitu proton-proton, dan karena massa elektron sangat kecil maka pengaruhnya tidak berarti (Krane, 1992:556). Molekul dengan lebih dari dua atom dapat bervibrasi dengan banyak cara. Bentuk vibrasi yang paling sederhana adalah vibrasi pada molekul diatomik yang hanya memiliki satu mode vibrasi.

Ion molekul hidrogen H_2^+ merupakan molekul paling sederhana, karena terdiri dari sebuah elektron dan dua inti atom. Ion molekul hidrogen H_2^+ terbentuk dari molekul hidrogen biasa H_2 yang kehilangan satu elektron akibat proses tertentu, misalkan ionisasi. Ion molekul hidrogen H_2^+ adalah molekul nonpolar dan salah satu molekul interstellar. Heap dan Stecher (1981), menemukan bahwa pada planet nebula NGC 6120 terdapat penyerapan sinar UV-jauh oleh ion molekul hidrogen H_2^+ pada panjang gelombang kurang dari 1500 Å. Ion molekul hidrogen tersebut muncul melalui proses fotoionisasi dari H_2 menjadi H_2^+ , yang kemudian H_2^+ tersebut terdistribusi dalam beberapa keadaan vibrasi. Dalam penelitian Habib (2012) juga menyatakan bahwa pada keadaan simetri terjadi osilasi antar inti atom pada posisi kesetimbangan. Pada saat ion molekul hidrogen H_2^+ bervibrasi, terjadi interaksi antar inti-intinya. Interaksi terjadi dari antara dipol titik (*point dipole*) dengan proton terjauh. Interaksi tersebut dinamakan interaksi van der Waals. Interaksi van der Waals merupakan interaksi tarikan lemah yang terjadi karena sifat kelistrikan suatu molekul. Interaksi van der Waals merupakan salah satu interaksi yang terjadi pada ion molekul hidrogen, selain energi resonansi.

Adanya interaksi van der Waals pada ion molekul hidrogen akan menghasilkan suatu energi tertentu yang nilainya kecil. Akibatnya Hamiltonian sistem menjadi lebih kompleks dan sulit untuk diselesaikan secara eksak. Oleh karena itu, diperlukan suatu metode aproksimasi, salah satunya adalah teori gangguan (teori perturbasi). Teori ini sangat baik untuk menentukan perubahan nilai energi yang diskret dan fungsi eigen sistem akibat gangguan yang kecil, asalkan fungsi dan nilai eigen sistem diketahui (Rajasekar, 2015:331). Teori perturbasi memiliki tingkatan sampai orde tertentu. Semakin tinggi orde yang

digunakan, semakin tinggi pula tingkat ketelitiannya. Menurut Charles (2008:379) koreksi orde dua adalah koreksi yang penting untuk dilakukan karena dalam beberapa kasus koreksi orde satu lenyap. Hal ini dapat terjadi pada sebuah sistem yang memiliki potensial fungsi genap, sedangkan perturbasinya sebagai fungsi ganjil.

Penelitian yang berhubungan dengan ion molekul hidrogen sudah banyak dipublikasikan. Penelitian tentang ion molekul hidrogen dengan pendekatan Born-Oppenheimer telah dilakukan oleh Jean-Philippe (2002) dan Habib (2012) meninjau rapat probabilitas serta energi simetri dan antisimetri dari ion molekul hidrogen. Sedangkan Patil (2002) meneliti energi dan fungsi gelombang ion molekul hidrogen dalam dua dimensi. Penelitian lain yang berkaitan tentang teori gangguan yaitu Iklas (2012) penentuan energi osilator anharmonik dengan teori gangguan dalam bentuk polinomial. Cari dan Suparmi (2013) menyelesaikan persamaan Schrodinger untuk osilator harmonik tiga dimensi dengan potensial non sentral Rosen-Morse. Tetapi sejauh ini sangat jarang yang meneliti vibrasi ion molekul hidrogen dengan teori gangguan orde dua berupa interaksi van der Waals.

Berdasarkan beberapa uraian tersebut, peneliti tertarik untuk melakukan penelitian mengenai vibrasi ion molekul hidrogen H_2^+ dengan koreksi akibat interaksi van der Waals. Oleh sebab itu, peneliti melakukan penelitian yang berjudul **“Osilator Harmonik pada Ion Molekul Hidrogen H_2^+ dengan Interaksi Van Der Waals menggunakan Teori Perturbasi Orde Dua”**.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan uraian latar belakang, maka rumusan masalah yang dapat dikemukakan dalam penelitian ini adalah :

- a. Berapa besar energi vibrasi ion molekul hidrogen H_2^+ pada keadaan dasar terkoreksi orde dua akibat interaksi van der Waals ?
- b. Bagaimana bentuk fungsi gelombang vibrasi keadaan dasar ion molekul hidrogen H_2^+ terkoreksi orde dua akibat interaksi van der Waals ?

1.3 Batasan Masalah

Adapun batasan masalah yang dipergunakan dalam penelitian ini adalah sebagai berikut:

- a. Proton-proton diasumsikan melakukan gerak osilasi harmonik linier akibat gaya interaksi kedua proton.
- b. Teori gangguan yang digunakan adalah teori gangguan orde dua untuk sistem tak berdegenerasi dan stasioner.
- c. Fungsi gelombang dan energi pada ion molekul hidrogen yang terkoreksi menggunakan teori gangguan orde dua akibat interaksi van der Waals pada keadaan dasar ($n = 0$).
- d. Efek spin internal dari proton-proton diabaikan.

1.4 Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah, maka tujuan yang akan dicapai dalam penelitian ini adalah:

- a. Menentukan energi vibrasi ion molekul hidrogen H_2^+ pada keadaan dasar terkoreksi orde dua akibat interaksi van der Waals.
- b. Menentukan bentuk fungsi gelombang vibrasi keadaan dasar ion molekul hidrogen H_2^+ terkoreksi orde dua akibat interaksi van der Waals.

1.5 Manfaat Penelitian

Hasil penelitian ini diharapkan dapat memberikan manfaat, antara lain :

- a. Bagi peneliti, dapat dijadikan sebagai tambahan pengetahuan tentang vibrasi molekul diatomik dengan teori gangguan orde dua, serta menjadi pengalaman yang berharga dalam melakukan penelitian.
- b. Bagi pembaca, dapat dijadikan sebagai tambahan pengetahuan tentang vibrasi molekul diatomik dengan teori gangguan orde dua.
- c. Bagi lembaga, dapat memberikan sumbangan penelitian dan bahan referensi tambahan dalam mempelajari ion molekul H_2^+ .

BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Osilator Harmonik

Kajian tentang osilator harmonik memberikan peranan penting dalam perkembangan mekanika kuantum. Pada tahun 1900, Max Planck membuat sebuah asumsi bahwa atom-atom berperilaku seperti osilator dengan energi yang terkuantisasi ketika ia menyerap dan memancarkan radiasi. Kemudian pada tahun 1907 Einstein menyatakan bahwa vibrasi elastis zat padat dapat dianggap sebagai sistem osilator harmonik dengan energi yang terkuantisasi (Phillips, 2003:109). Sebelum membahas tentang osilator harmonik secara kuantum, terlebih dahulu akan dibahas tentang osilator harmonik secara klasik.

2.1.1 Osilator Harmonik Klasik

Osilator harmonik klasik paling sederhana adalah sebuah partikel yang terikat pada sebuah pegas dengan konstanta elastisitas k (Gambar 2.1) Ketika partikel digeser dari titik kesetimbangan sejauh x , maka terdapat gaya $F = -kx$ yang arahnya berlawanan terhadap arah perpindahan. Karena usaha yang dibutuhkan untuk menggerakkan partikel dari x ke $x + dx$ adalah $kx dx$, energi potensial yang tersimpan dalam pegas akibat perpindahan partikel dari titik kesetimbangan ke x adalah

$$V(x) = - \int_0^x -kx dx = \frac{1}{2} kx^2 \quad (2.1)$$

Energi potensial ini merupakan energi yang tersimpan dalam pegas berkonstanta pegas k yang diregangkan atau dirapatkan sejauh x , dan energi potensial tersebut akan diubah menjadi energi kinetik ketika partikel dilepaskan (Phillips,2003:110) .

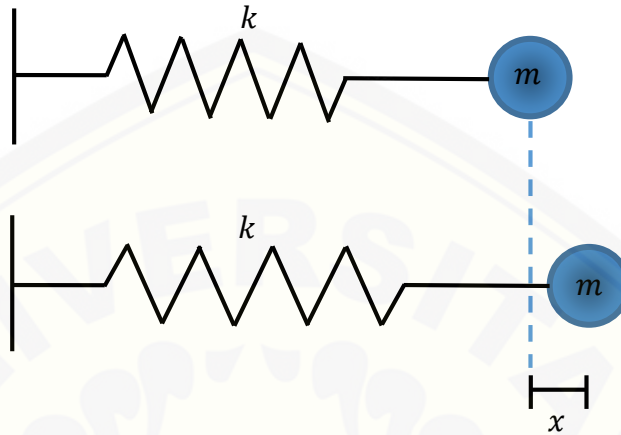
Persamaan gerak untuk partikel bermassa m berdasarkan pada hukum Hooke adalah

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = -kx \quad (2.2)$$

dengan salah satu solusi umumnya adalah

$$x(t) = A \sin(\omega t + \theta) \quad (2.3)$$

di mana A dan θ adalah dua konstanta yang dapat ditentukan dengan keadaan awal partikel.



Gambar 2.1 Benda bermassa m yang diikat dengan pegas dengan konstanta pegas k pada keadaan setimbang (atas), dan ketika disimpangkan sejauh x (bawah).

Persamaan (2.3) menggambarkan gerak harmonik sederhana dengan amplitudo A , fase θ dan frekuensi anguler ω atau periode $2\pi/\omega$. Selama partikel beresilasi, energi potensial dan energi kinetik selalu berubah-ubah. Tetapi energi total E , jumlah dari energi kinetik dan energi potensial bernilai tetap dan sama dengan

$$E = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 + \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 A^2 \quad (2.4)$$

dengan A adalah simpangan maksimum osilator harmonik (Phillips, 2003:110).

2.1.2 Osilator Harmonik Kuantum

Dalam mekanika kuantum, Hamiltonian suatu partikel bermassa m yang beresilasi dengan frekuensi anguler ω di bawah pengaruh potensial harmonik satu dimensi adalah

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 \quad (2.5)$$

dengan $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$. Suku pertama merepresentasikan operator energi kinetik untuk partikel bermassa m dan suku kedua merepresentasikan operator energi potensial untuk partikel dalam potensial kuadrat. Osilator harmonik kuantum dalam keadaan stasioner dapat dideskripsikan oleh suatu fungsi gelombang $\psi(x, t)$ yang memenuhi persamaan Schrodinger

$$\hat{H}\psi(x, t) = E\psi(x, t) \quad (2.6)$$

dengan Hamiltonian \hat{H} diberikan oleh persamaan (2.5). Untuk sistem dengan keadaan stasioner, persamaan Schrodinger takbergantung waktu adalah

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \psi(x) = E\psi(x) \quad (2.7)$$

Untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger (2.7) dapat dilakukan dengan dua cara, yaitu metode analitik dan aljabar. Metode analitik menyelesaikan persamaan Schrodinger tak bergantung waktu untuk sistem osilator harmonik menggunakan deret pangkat. Sedangkan metode aljabar menggunakan operator tangga yang terdiri dari operator kreasi dan anihilasi.

a. Metode Analitik

Persamaan Schrodinger tak bergantung waktu dari osilator harmonik satu dimensi dari persamaan (2.7) dapat dinyatakan dengan

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi = E\psi \quad (2.8)$$

jika kedua ruas persamaan dikalikan dengan $2/\hbar\omega$ menjadi

$$-\frac{\hbar}{m\omega} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \psi = \frac{2E}{\hbar\omega} \psi \quad (2.9)$$

Dalam menyelesaikan persamaan (2.9), perlu dilakukan analisis dimensi. Suku $\frac{m\omega}{\hbar}$ mempunyai dimensi yang sama dengan x^{-2} , maka dapat didefinisikan suatu variabel baru yaitu

$$\alpha = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad (2.10)$$

dengan α adalah variabel berdimensi panjang. Sedangkan suku $\frac{2E}{\hbar\omega}$ dapat diganti dengan variabel tak berdimensi

$$\xi = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (2.11)$$

Substitusi persamaan (2.10) dan (2.11) ke dalam persamaan (2.9) menjadi

$$-\alpha^2 \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{\alpha^2} x^2 \psi = \xi \psi \quad (2.12)$$

Hubungan antara variabel panjang α dan x dinyatakan oleh

$$x = u\alpha \quad (2.13)$$

dengan u adalah variabel tak berdimensi. Agar persamaan (2.12) menjadi takberdimensi, maka perlu dilakukan transformasi yaitu

$$\frac{d}{dx} = \frac{1}{\alpha} \frac{d}{du} \quad \rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{\alpha^2} \frac{d^2}{du^2} \quad (2.14)$$

Substitusi hasil (2.14) ke persamaan (2.12) menjadi

$$-\frac{d^2\psi}{du^2} + u^2\psi = \xi\psi \quad (2.15)$$

atau dapat ditulis menjadi

$$\frac{d^2\psi}{du^2} + (\xi - u^2)\psi = 0 \quad (2.16)$$

(Gasiorowicz, 1996:85).

Persamaan diferensial orde dua pada persamaan (2.16) dapat diselesaikan dengan menggunakan analisis asimtotik. Jika nilai u sangat besar maka dapat dilakukan suatu pendekatan $u^2 - \xi \approx u^2$, sehingga persamaan (2.16) dapat ditulis

$$\frac{d^2\psi}{du^2} \approx u^2\psi \quad (2.17)$$

dengan solusi umumnya adalah

$$\psi(u) = Ae^{-u^2/2} + Be^{u^2/2} \quad (2.18)$$

dengan A dan B adalah suatu konstanta. Suku kedua pada persamaan (2.18) tidak dapat dinormalisasi, karena nilainya menyebar pada $u \rightarrow \infty$. Solusi yang memenuhi persamaan diferensial (2.17) dapat ditulis dengan

$$\psi(u) = h(u)e^{-u^2/2} \quad (2.19)$$

dengan $h(u)$ adalah fungsi terhadap u . Maka persamaan (2.16) menjadi

$$\frac{d^2h(u)}{du^2} - 2u \frac{dh(u)}{du} + (\xi - 1)h(u) = 0 \quad (2.20)$$

Persamaan (2.20) dikenal sebagai persamaan Hermite, di mana penyelesaiannya dapat dinyatakan dalam suatu deret yang disebut dengan polinomial Hermite $H_n(u)$. Solusi deret dari persamaan (2.20) dapat dinyatakan dengan

$$h(u) = a_0 + a_1u + a_2u^2 + a_3u^3 + \dots = \sum_{j=0}^{\infty} a_j u^j \quad (2.21)$$

dengan a_j adalah suatu koefisien deret pada suku ke j . Polinomial ini harus memiliki nilai yang konvergen, artinya semakin besar nilai j maka semakin kecil nilai koefisiennya. Dengan mensubstitusi persamaan (2.21) ke persamaan (2.20) diperoleh hasil sebagai berikut

$$(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + (\xi-1)a_j = 0$$

atau

$$a_{j+2} = \frac{2j+1-\xi}{(j+2)(j+1)} a_j \quad (2.22)$$

Hubungan antar koefisien pada persamaan (2.22) disebut dengan hubungan rekursif. Hubungan rekursif ini menghubungkan antar koefisien pada solusi deret. Koefisien a_0 menghasilkan koefisien a_2, a_4, a_6, \dots yang memberikan solusi genap. Sedangkan koefisien a_1 menghasilkan koefisien a_3, a_5, a_7, \dots yang memberikan solusi ganjil.

Agar fungsi gelombang (2.19) dapat ternormalisasi, maka deret (2.21) harus bersifat konvergen. Untuk j yang maksimum maka nilai a_{j+2} pada persamaan (2.22) sebagai deret terakhir harus bernilai nol. Dengan menganggap $a_j \neq 0$, maka dari persamaan (2.22) dapat diperoleh

$$2j+1-\xi = 0 \quad (2.23)$$

dengan mengganti $j = n$ dan mensubstitusi nilai $\xi = \frac{2E}{\hbar\omega}$ ke persamaan (2.23), didapatkan bahwa

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (2.24)$$

dengan $n = 0, 1, 2, 3, \dots$. Persamaan (2.24) merupakan nilai eigen dari osilator harmonik satu dimensi pada bilangan kuantum n . Pada $n = 0$ energi osilator

harmonik kuantum adalah sebesar $E = \frac{1}{2} \hbar \omega$ yang dikenal dengan energi keadaan dasar atau energi titik nol (*zero-point energy*). Energi titik nol suatu sistem terikat tidak dapat bernilai nol, hal tersebut merupakan konsekuensi dari ketidakpastian Heisenberg (Zettili, 2009:243)

Langkah selanjutnya adalah menentukan fungsi eigen dari persamaan (2.7). Secara umum bentuk fungsi gelombang pada suku ke- n dapat ditulis dengan

$$\psi_n = A_n H_n(u) e^{-u^2/2} \quad (2.25)$$

dengan A_n konstanta normalisasi. Menggunakan sifat orthogonalitas dari polinomial Hermite $H_n(u)$ diperoleh konstanta normalisasi

$$A_n = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}$$

Bentuk terakhir dari fungsi gelombang keadaan stasioner untuk osilator harmonik untuk bilangan kuantum n adalah

$$\psi_n(u) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(u) e^{-u^2/2}$$

Menggunakan ungkapan (2.13) dan (2.10), persamaan tersebut dapat ditulis kembali menjadi

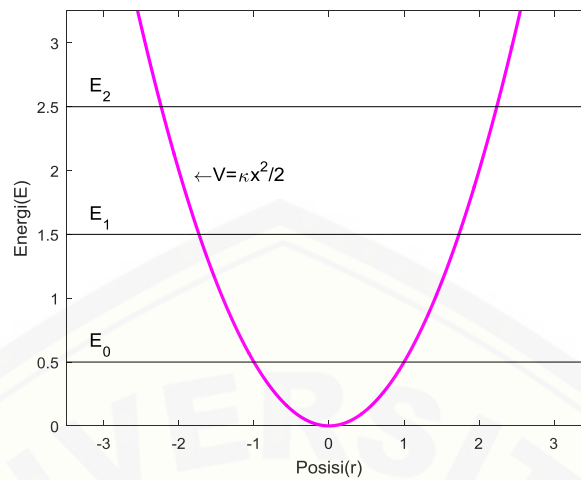
$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-m\omega x^2/2\hbar} \quad (2.26)$$

Berikut ini adalah beberapa nilai polinomial Hermite $H_n(u)$:

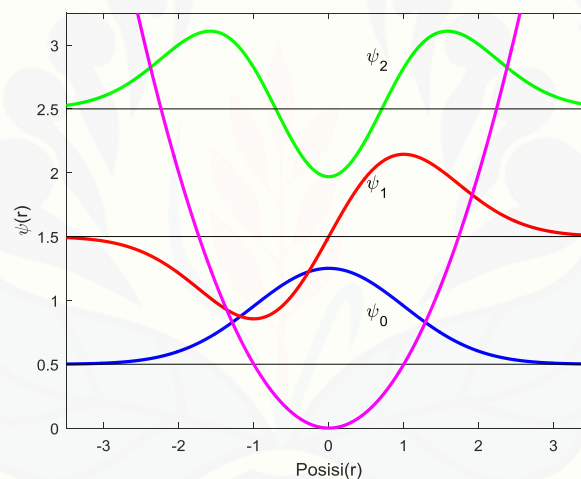
Tabel 2.1 Beberapa nilai polinomial Hermite sebagai fungsi dari u

| | |
|-------------------------------|----------------------------------|
| $H_0(u) = 1$ | $H_1(u) = 2u$ |
| $H_2(u) = 4u^2 - 2$ | $H_3(u) = 8u^3 - 12u$ |
| $H_4(u) = 16u^4 - 48u^2 + 12$ | $H_5(u) = 32u^5 - 160u^3 + 120u$ |

(Zettili,2009:240).



Gambar 2.2 Tingkat energi osilator harmonik satu dimensi untuk tiga keadaan terendah



Gambar 2.3 Fungsi gelombang osilator harmonik satu dimensi pada tiga keadaan terendah.

b. Metode Aljabar

Tinjau kembali Hamiltonian (2.8) osilator harmonik satu dimensi pada sumbu x dalam operator momentum \hat{p}_x dan posisi \hat{x} yaitu

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \quad (2.27)$$

Persamaan (2.27) dapat diselesaikan melalui metode operator. Definisikan dua operator tak Hermite yaitu

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}_x \quad ; \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\hat{p}_x \quad (2.28)$$

dengan \hat{a}^\dagger adalah Hermitian adjoint dari \hat{a} . Dari persamaan (2.28) didapatkan hubungan sebaliknya yaitu

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad ; \quad \hat{p}_x = -i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \quad (2.29)$$

Setelah melalui penjabaran matematis (Lampiran A), diperoleh Hamiltonian osilator harmonik persamaan (2.27) menjadi

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}) \quad (2.30)$$

(Levi,2006:283). Persamaan (2.30) menggambarkan energi osilator harmonik satu dimensi melalui operator \hat{a} dan \hat{a}^\dagger .

Cara untuk mengetahui makna fisis dari operator \hat{a} dan \hat{a}^\dagger dimulai dengan mengetahui hubungan komutator dua operator tersebut bahwa

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = -1 \quad ; \quad [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$$

Hasil tersebut diperoleh dengan menggunakan ungkapan $[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar$. Maka Hamiltonian (2.30) dapat dinyatakan dengan

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \quad (2.31)$$

Apabila persamaan (2.31) dibandingkan dengan (2.24) dapat diperoleh bahwa

$$\hat{a}^\dagger\hat{a} = n \quad (2.32)$$

Setelah itu, hubungan komutator antara \hat{a} dan \hat{a}^\dagger terhadap operator energi \hat{H} memberikan

$$[\hat{H}, \hat{a}] = \hbar\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = -\hbar\omega\hat{a} \quad ; \quad [\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega[\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hbar\omega\hat{a}^\dagger$$

Menggunakan kedua hasil komutator di atas, maka didapatkan persamaan eigen

$$\hat{H}\hat{a}\psi = (\hat{H} - \hbar\omega)\hat{a}\psi \quad (2.33)$$

dan

$$\hat{H}\hat{a}^\dagger\psi = (\hat{H} + \hbar\omega)\hat{a}^\dagger\psi \quad (2.34)$$

Hasil (2.33) memberikan informasi bahwa pengoperasian operator \hat{a} dapat menurunkan energi sebesar $\hbar\omega$, sehingga operator \hat{a} dapat disebut sebagai operator penurun. Pada hasil (2.34) juga memberikan informasi bahwa penggunaan operator \hat{a}^\dagger dapat menaikkan energi sebesar $\hbar\omega$, sehingga operator \hat{a}^\dagger disebut operator

penaik. Operator penurunan dan penaik secara umum disebut dengan operator tangga (Zettili,2009:241).

Menurut Griffith (2005:46), untuk mendapatkan fungsi gelombang tereksitasi ke- n dapat dilakukan dengan menerapkan operator \hat{a}^\dagger sebanyak n kali pada fungsi gelombang dasar ψ_0 yang secara umum dapat dinyatakan dengan

$$(\hat{a}^\dagger)^n \psi_0(x) = A_n \psi_n(x) \quad (2.35)$$

untuk $n = 0,1,2,3, \dots$. Berdasarkan persamaan (2.35), pengoperasian operator penaik \hat{a}^\dagger pada fungsi gelombang ψ_n akan menghasilkan fungsi gelombang ψ_{n+1} . Sebaliknya, pengoperasian operator penurunan \hat{a} pada ψ_n akan menghasilkan fungsi gelombang ψ_{n-1} , sehingga dapat ditulis bahwa

$$\hat{a}^\dagger \psi_n = A_{n+1} \psi_{n+1} \quad ; \quad \hat{a} \psi_n = A_{n-1} \psi_{n-1}$$

dengan A_{n+1} dan A_{n-1} adalah konstanta normalisasi yang akan ditentukan nilainya.

Dengan menggunakan syarat normalisasi fungsi gelombang diperoleh bahwa

$$\hat{a}^\dagger \psi_n = \sqrt{(n+1)} \psi_{n+1} \quad (2.36)$$

dan

$$\hat{a} \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1} \quad (2.37)$$

Dalam hal ini, operator \hat{a}^\dagger dapat disebut juga sebagai operator kreasi (pencipta), sedangkan operator \hat{a} disebut operator anihilasi (pemusnah).

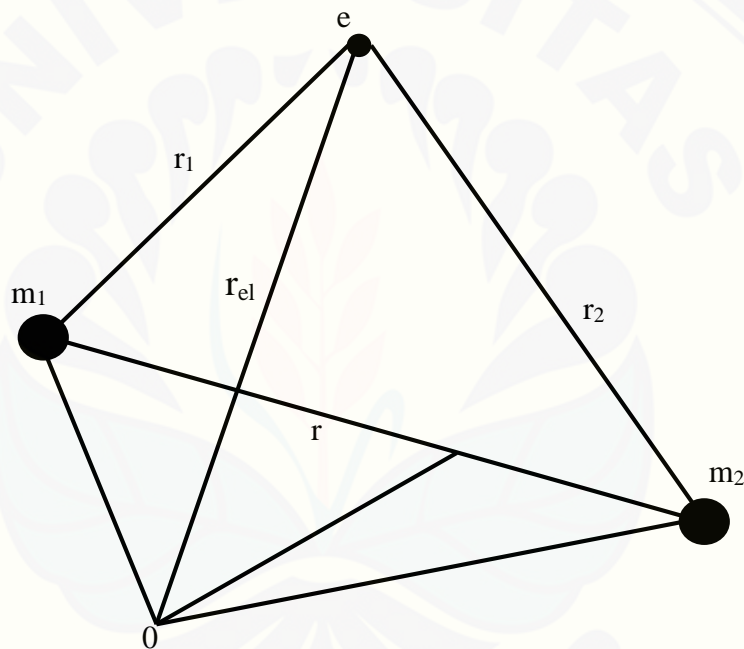
2.2 Ion Molekul Hidrogen

2.2.1 Pemisahan Gerak Inti dan Elektron

Tinjau sebuah sistem dari ion molekul hidrogen H_2^+ yang terdiri dari dua inti dan satu elektron. Kedua inti yang bermassa m_1 dan m_2 terpisah pada jarak r sebagaimana ditunjukkan dalam gambar 2.4. r_1 adalah jarak elektron dari inti m_1 dan r_2 adalah jarak elektron dari inti m_2 , sedangkan r_{el} adalah representasi dari koordinat elektron dari titik asal. Hamiltonian total dari ion molekul hidrogen adalah sebagai berikut

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.38)$$

Suku pertama dan kedua berturut-turut merepresentasikan operator energi kinetik dari inti m_1 dan m_2 , suku ketiga merupakan operator energi kinetik elektron, suku keempat dan kelima berturut-turut adalah potensial tarikan dari elektron dengan inti m_1 dan m_2 , sedangkan suku terakhir adalah potensial tolakan antar inti (McQuarrie, 2003:324).



Gambar 2.4 Ion molekul hidrogen H_2^+

Energi dan fungsi gelombang molekul dapat diperoleh melalui persamaan Schrodinger

$$\hat{H}\Psi(r_{el}, r) = E\Psi(r_{el}, r) \quad (2.39)$$

dengan $\Psi(r_{el}, r)$ adalah fungsi gelombang molekul sebagai fungsi dari koordinat elektron dan inti.

Penyelesaian dari persamaan Schrodinger untuk Hamiltonian total (2.38) dapat dilakukan dengan menggunakan pendekatan Born-Oppenheimer.

Menggunakan fakta bahwa elektron mempunyai massa yang lebih kecil dibandingkan dengan massa inti, sehingga asumsi yang dapat digunakan adalah elektron bergerak lebih cepat daripada inti. Akibatnya, inti dapat dianggap diam relatif terhadap elektron, sehingga gerak inti dan elektron dapat dibedakan. Menurut Linus (1935:261), prinsip pendekatan Born-Oppenheimer merupakan pendekatan yang menggunakan solusi fungsi gelombang molekuler yang terdiri atas fungsi gelombang elektron dan fungsi gelombang inti, sehingga dapat diungkapkan dengan

$$\Psi = \psi_{el}(r_{el}, r) \psi_N(r) \quad (2.40)$$

dengan $\psi_{el}(r_{el}, r)$ adalah fungsi gelombang elektron yang bergantung pada koordinat elektron dan inti, sedangkan $\psi_N(r)$ adalah fungsi gelombang inti yang hanya bergantung pada koordinat inti. Jika inti dianggap diam, maka suku energi kinetik dari persamaan (2.38) dapat diabaikan sehingga didapatkan persamaan gerak untuk elektron yaitu

$$[\hat{H}_{el} + V_{NN}] \psi_{el}(r_{el}, r) = U \psi_{el}(r_{el}, r) \quad (2.41)$$

dengan \hat{H}_{el} adalah Hamiltonian murni elektron yaitu

$$\hat{H}_{el} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} \quad (2.42)$$

dan V_{NN} merupakan potensial tolakan antar inti sebagai berikut

$$V_{NN} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (2.43)$$

Energi U pada persamaan (2.41) merupakan Hamiltonian elektron termasuk potensial tolakan antar inti. Persamaan gerak untuk elektron (2.41) bergantung pada koordinat elektron saja, koordinat inti dianggap tetap dan V_{NN} memiliki nilai yang konstan. Jika V_{NN} dihilangkan, diperoleh

$$\hat{H}_{el} \psi_{el}(r_{el}, r) = E_{el} \psi_{el}(r_{el}, r) \quad (2.44)$$

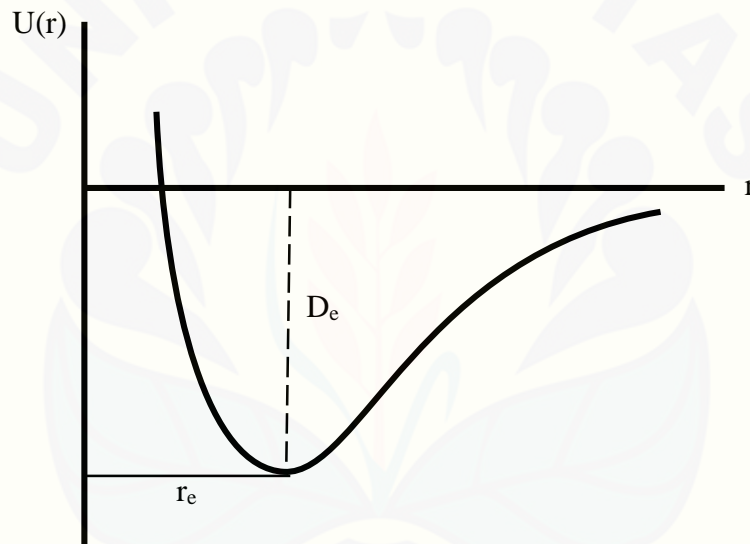
dengan E_{el} adalah energi murni elektron dengan \hat{H}_{el} diberikan oleh persamaan (2.42). Menurut persamaan (2.44), Fungsi gelombang dan energi elektron bergantung pada konfigurasi inti r secara parameter. Dari persamaan (2.41) dan (2.44) diperoleh hubungan

$$U(r) = E_{el} + V_{NN} \quad (2.45)$$

Energi $U(r)$ pada keadaan terikat dari molekul diatomik apabila diplotkan terhadap jarak antar inti r dapat ditunjukkan pada gambar 2.5. Pada jarak $r = 0$, tolakan antar inti menjadi takhingga. Jarak antar inti pada titik minimum dari kurva tersebut merupakan titik kesetimbang inti r_e . Perbedaan antara nilai U pada jarak antarmolekul takhingga dan pada jarak kesetimbangan r_e disebut energi disosiasi yaitu

$$D_e = U(\infty) - U(r_e) \quad (2.46)$$

dengan D_e adalah energi disosiasi molekul (Levine, 2000:268).



Gambar 2.5 Energi elektron termasuk tolakan antar inti sebagai fungsi dari jarak antar inti r untuk molekul diatomik keadaan terikat (kurva tebal).

Setelah menyatakan persamaan gerak elektron dan menghitung energi $U(r)$ untuk semua konfigurasi inti, langkah selanjutnya adalah menyatakan persamaan gerak untuk inti. Berdasarkan pendekatan Born-Oppenheimer, elektron bergerak lebih cepat daripada inti. Ketika inti mengubah sedikit konfigurasinya, misalkan dari r ke r' , seketika elektron menyesuaikan perubahan, dengan mengubah fungsi gelombang elektron dari $\psi_{el}(r_{el}, r)$ menjadi $\psi_{el}(r_{el}, r')$ dan energi elektron dari $U(r)$ menjadi $U(r')$. Jadi ketika inti bergerak, energi elektron bervariasi sebagai

fungsi parameter tertentu dari konfigurasi inti, dan $U(r)$ menjadi energi potensial dalam gerak inti. Elektron berperilaku seperti pegas yang menghubungkan kedua inti. Persamaan Schrodinger untuk gerak inti adalah sebagai berikut

$$\hat{H}_N \psi_N(r) = E \psi_N(r) \quad (2.47)$$

$$\hat{H}_N = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + U(r) \quad (2.48)$$

dengan μ adalah massa tereduksi dari kedua atom yaitu

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

Nilai energi E pada persamaan (2.47) adalah energi total molekul, karena Hamiltonian (2.48) meliputi operator energi inti dan energi elektron. Besaran E merupakan suatu kuantitas yang tidak bergantung pada koordinat manapun. Menurut Linus (1935:259), energi total molekul merupakan penjumlahan dari energi elektron, energi vibrasi dan energi rotasi yang secara matematis ditulis dengan

$$E = E_{el} + E_{vib} + E_{rot} \quad (2.49)$$

2.2.2 Vibrasi Ion Molekul Hidrogen H_2^+

Dari persamaan (2.47) dan (2.48), persamaan Schrodinger untuk gerak inti dari ion molekul hidrogen H_2^+ dapat dinyatakan dengan

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + U(r) \right] \psi_N(r) = E \psi_N(r) \quad (2.50)$$

dengan μ adalah massa tereduksi dari kedua atom yaitu

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$$

dan $\psi_N(r)$ adalah fungsi gelombang inti. Menurut Levine (2000:370), koordinat yang paling tepat digunakan untuk merepresentasikan gerak inti adalah koordinat bola. Radius r dalam koordinat bola mewakili jarak antar inti dalam molekul, sedangkan koordinat angular dinotasikan dengan θ dan ϕ yang merepresentasikan gerak rotasi molekul. Operator Laplacian dalam koordinat bola dinyatakan dengan

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}$$

sehingga persamaan (2.50) menjadi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{1}{r^2} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \phi^2} \right\} \right) + U(r) \right] \psi_N(r) = E \psi_N(r) \quad (2.51)$$

Solusi fungsi gelombang yang diharapkan berbentuk (Lampiran B)

$$\psi_N = \chi(r) \psi_{rot}(\theta, \phi) \quad (2.52)$$

dengan $\chi(r)$ adalah fungsi radial yang bergantung pada r dan $\psi_{rot}(\theta, \phi)$ adalah fungsi harmonik yang merepresentasikan gerak rotasi.

Karena energi potensial inti molekul bergantung pada r saja, dengan menggunakan nilai eigen $\psi_{rot}(\theta, \phi)$ (Lampiran B), persamaan Schrodinger untuk gerak inti dinyatakan dengan

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} + U(r) \right] \chi(r) = E \chi(r) \quad (2.53)$$

dengan l adalah bilangan kuantum azimuth. Energi potensial inti molekul $U(r)$ disekitar titik kesetimbangan r_e apabila dinyatakan dalam deret Taylor berbentuk

$$U(r) \approx U(r_e) + \frac{dU(r_e)}{dr} (r - r_e) + \frac{1}{2} \frac{d^2U(r_e)}{dr^2} (r - r_e)^2 + \dots \quad (2.54)$$

pada titik kesetimbangan r_e , $\frac{dU(r_e)}{dr} = 0$. Sedangkan untuk suku $(r - r_e)^2$ dan yang lebih tinggi memiliki nilai yang kecil. Definisikan konstanta gaya molekul yaitu

$$k = \frac{d^2U(r_e)}{dr^2}$$

sehingga diperoleh

$$U(r) \approx U(r_e) + \frac{1}{2} k (r - r_e)^2 \quad (2.55)$$

dengan $k = m\omega^2$, persamaan energi potensial (2.55) dapat dinyatakan dengan

$$U(r) \approx U(r_e) + \frac{1}{2} m\omega^2 (r - r_e)^2 \quad (2.56)$$

Gerak vibrasi ion molekul hidrogen direpresentasikan melalui fungsi radial, yang memiliki hubungan dengan fungsi gelombang vibrasi yaitu

$$\psi_{vib} = \chi(r) r \quad (2.57)$$

Maka persamaan Schrodinger (2.53) untuk gerak inti menjadi

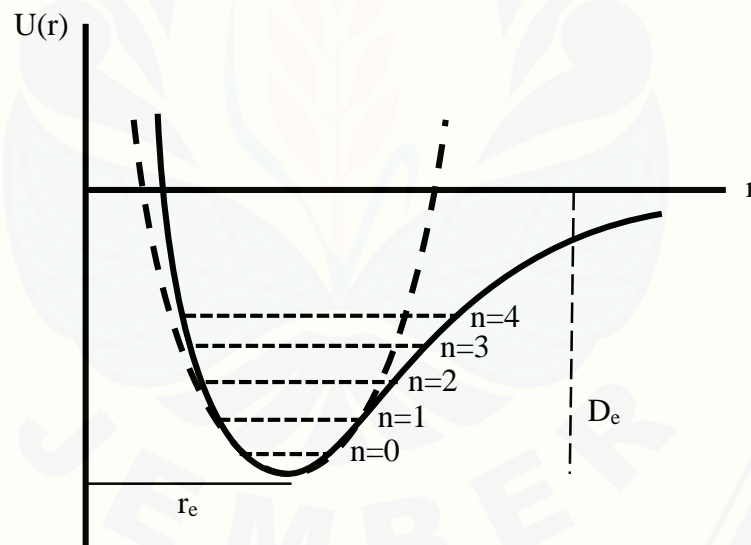
$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} r \frac{\partial^2 \psi_{vib}}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} \psi_{vib} r^{-1} + U(r_e) \psi_{vib} r^{-1} + \frac{1}{2} m \omega^2 (r - r_e)^2 \psi_{vib} r^{-1} = E \psi_{vib} r^{-1} \quad (2.58)$$

Jika $(r - r_e) = x$, maka penurunan terhadap r ekuivalen dengan penurunan terhadap x . Persamaan (2.58) apabila dibagi dengan r dan menggunakan perubahan variabel serta transformasi koordinat diperoleh

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi_{vib}}{\partial r^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi_{vib} = \left(E - \frac{l(l+1)}{2\mu r^2} - U(r_e) \right) \psi_{vib} \quad (2.59)$$

dengan $\frac{l(l+1)}{2\mu r^2}$ adalah energi rotasi, dan $U(r_e)$ adalah energi elektron pada jarak disekitar titik kesetimbangan. Menggunakan persamaan (2.49), didapatkan bahwa

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \psi_{vib}}{\partial r^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi_{vib} = E_{vib} \psi_{vib} \quad (2.60)$$



Gambar 2.6 Energi potensial molekul (garis tebal) dengan menggunakan pendekatan osilator harmonik (garis parabolik putus-putus).

Persamaan (2.60) merupakan persamaan Schrodinger untuk osilator harmonik satu dimensi seperti pada persamaan (2.7) dengan fungsi gelombang dan tingkat energi seperti pada persamaan (2.26) dan (2.24). Pendekatan energi potensial ini menggunakan energi potensial osilator harmonik hanya berlaku pada daerah

disekitar titik kesetimbangan dan pada keadaan yang rendah. Untuk keadaan yang lebih tinggi, pendekatan menggunakan osilator harmonik pada vibrasi molekuler tidaklah berlaku (Gambar 2.6).

2.3 Interaksi van der Waals

Ion molekuler hidrogen H_2^+ memiliki dua keadaan, yaitu keadaan simetri dan keadaan anti simetri (Habib, 2012). Keadaan simetri adalah keadaan yang memungkinkan terjadinya ikatan molekuler dimana probabilitas menemukan elektron paling besar berada di antara kedua proton. Pada saat jarak antar proton cukup jauh, ion molekuler hidrogen dapat dianggap sebagai atom hidrogen netral dan proton (Weissendanger, 1996:153). Medan listrik yang dihasilkan proton mempolarisasi atom hidrogen menjadi dipol terinduksi. Interaksi antara proton dengan dipol terinduksi menghasilkan gaya van der Waals (Chen, 1991). Menurut Atkins (2006:629), Gaya van der Waals pada ion molekuler hidrogen yang menghasilkan suatu potensial yang dapat dinyatakan dengan

$$W = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r-x} \right) \approx -\frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (2.61)$$

dengan x adalah jarak antara elektron dengan proton dalam atom hidrogen, sedangkan r adalah jarak antara proton. Gaya van der Waals dapat terjadi apabila $r \gg x$.

2.4 Teori Perturbasi Tak Bergantung Waktu pada Sistem Nondegenerate

Di dalam teori perturbasi, Hamiltonian sistem diuraikan menjadi dua bagian utama yaitu bagian tanpa gangguan dan bagian atau suku pengganggu. Suku pengganggu masih diklasifikasikan menjadi dua bagian yaitu gangguan stasioner atau tak bergantung waktu dan gangguan yang berubah terhadap waktu (Purwanto,2006:231). Hamiltonian sistem dapat ditulis dengan

$$H = H^{(0)} + \lambda W \quad (2.62)$$

dengan $H^{(0)}$ adalah Hamiltonian tak terganggu dan W adalah pengganggu. λ adalah parameter kecil yang digunakan untuk menjaga tingkat aproksimasi. Solusi

untuk Hamiltonian total yang mempunyai fungsi ψ_n dan energi E_n memenuhi persamaan eigen yaitu

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad (2.63)$$

atau dengan menggunakan mensubstitusi persamaan (2.63) ke persamaan (2.62) diperoleh

$$(H^{(0)} + \lambda W)\psi_n = E_n\psi_n \quad (2.64)$$

ketika $\lambda = 0$ persamaan (2.64) menjadi

$$H^{(0)}\psi_n^{(0)} = E_n\psi_n^{(0)} \quad (2.65)$$

dengan $\psi_n^{(0)} = \psi_n$ yaitu fungsi gelombang tak terganggu. Dalam teori perturbasi menyaratkan bahwa sistem dengan persamaan eigen (2.65) telah diselesaikan secara eksak. Karena perturbasi W diasumsikan sangat kecil, maka sangat mungkin untuk menyatakan ψ_n dan E_n dalam bentuk ekspansi deret pangkat.

Fungsi gelombang dan energi dari sistem yang terganggu dapat dinyatakan dengan deret pangkat dengan koefisien λ , yaitu

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} + \dots \quad (2.66)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (2.67)$$

dengan $\lambda \ll 1$. Substitusi pernyataan ekspansi (2.66) dan (2.67) ke dalam persamaan (2.64) diperoleh

$$(H^{(0)} + \lambda W)(\psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \dots) = (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots)(\psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \dots)$$

Perkalian pada kedua ruas persamaan akan memberikan hasil

$$\lambda^0 \quad (H^{(0)} - E_n^{(0)})\psi_n^{(0)} = 0 \quad (2.68)$$

$$\lambda^1 \quad (H^{(0)} - E_n^{(0)})\psi_n^{(1)} = (E_n^{(1)} - W)\psi_n^{(0)} \quad (2.69)$$

$$\lambda^2 \quad (H^{(0)} - E_n^{(0)})\psi_n^{(2)} = (E_n^{(1)} - W)\psi_n^{(1)} + E_n^{(2)}\psi_n^{(0)} \quad (2.70)$$

$$\lambda^3 \quad (H^{(0)} - E_n^{(0)})\psi_n^{(3)} = (E_n^{(1)} - W)\psi_n^{(2)} + E_n^{(2)}\psi_n^{(1)} + E_n^{(3)}\psi_n^{(0)} \quad (2.71)$$

Persamaan (2.68) disebut persamaan orde nol. Persamaan (2.69) adalah koreksi orde satu. Persamaan (2.70) adalah koreksi orde dua dan seterusnya.

2.4.1 Koreksi Orde Satu

Ungkapan koreksi energi orde satu diperoleh melalui perkalian antara persamaan (2.69) dengan $\psi_k^{(0)*}$, dan mengintegrasikan sehingga diperoleh

$$\begin{aligned} \int \psi_k^{(0)*} (H^{(0)} - E_n^{(0)}) \psi_n^{(1)} d^3r &= \int \psi_k^{(0)*} (E_n^{(1)} - W) \psi_n^{(0)} d^3r \\ \int \psi_k^{(0)*} H^{(0)} \psi_n^{(1)} d^3r - \int \psi_k^{(0)*} E_n^{(0)} \psi_n^{(1)} d^3r & \\ &= \int \psi_k^{(0)*} E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} d^3r - \int \psi_k^{(0)*} W \psi_n^{(0)} d^3r \end{aligned}$$

Suku pertama pada ruas sebelah kiri persamaan di atas dapat dinyatakan bahwa $\psi_k^{(0)*} H^{(0)} = \psi_k^{(0)*} E_k^{(0)}$, sehingga diperoleh

$$\int \psi_k^{(0)*} (E_k^{(0)} - E_n^{(0)}) \psi_n^{(1)} d^3r + \int \psi_k^{(0)*} W \psi_n^{(0)} d^3r = E_n^{(1)} \delta_{kn} \quad (2.72)$$

Untuk $k = n$, persamaan tersebut menjadi

$$E_n^{(1)} = \int \psi_n^{(0)*} W \psi_n^{(0)} d^3r = W_{nn} \quad (2.73)$$

dimana perhitungan tersebut menggunakan sifat orthonormal fungsi $\psi_n^{(0)}$. Persamaan (2.73) menyatakan bahwa koreksi energi orde satu merupakan harga ekspektasi dari suku pengganggu pada keadaan tak terganggu. Dengan mensubstitusi persamaan (2.73) ke persamaan (2.67) didapatkan energi terkoreksi orde satu yaitu

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda W_{nn} \quad (2.74)$$

Langkah selanjutnya adalah menentukan koreksi fungsi gelombang orde satu $\psi_n^{(1)}$. Persamaan (2.72) dapat dipandang sebagai dua kasus, yaitu pada $k \neq n$ dan $k = n$. Fungsi gelombang tak terganggu $\psi_n^{(0)}$ memiliki bentuk sebagai sekumpulan fungsi yang orthonormal, sehingga $\psi_n^{(1)}$ dapat diekspansi dalam basis $\psi_n^{(0)}$ yaitu

$$\psi_n^{(1)} = \left(\sum_k \psi_k^{(0)*} \psi_k^{(0)} \right) \psi_n^{(1)} = \sum_{k \neq n} (\psi_k^{(0)*} \psi_n^{(1)}) \psi_k^{(0)} = \sum_{k \neq n} c_k^{(1)} \psi_k^{(0)}$$

dan untuk $k = n$ diperoleh

$$\begin{aligned}\psi_n^{(1)} &= \left(\sum_k \psi_k^{(0)*} \psi_k^{(0)} \right) \psi_n^{(1)} = \sum_{k \neq n} \left(\psi_k^{(0)*} \psi_n^{(1)} \right) \psi_k^{(0)} = \sum_n \left(\psi_n^{(0)*} \psi_n^{(1)} \right) \psi_n^{(0)} \\ &= \sum_n c_n^{(1)} \psi_n^{(0)}\end{aligned}$$

Dari kedua hasil tersebut didapatkan ungkapan lengkap dari $\psi_n^{(1)}$ yaitu

$$\psi_n^{(1)} = \sum_n c_n^{(1)} \psi_n^{(0)} + \sum_{k \neq n} c_k^{(1)} \psi_k^{(0)} \quad (2.75)$$

Untuk $k \neq n$ persamaan (2.72) menjadi

$$\int \left(E_k^{(0)} - E_n^{(0)} \right) \psi_k^{(0)*} \psi_n^{(1)} d^3r + \int \psi_k^{(0)*} W \psi_n^{(0)} d^3r = 0$$

Dari persamaan tersebut diperoleh koefisien ekspansi dari $\psi_n^{(1)}$ adalah

$$c_k^{(1)} = \psi_k^{(0)*} \psi_n^{(1)} = \frac{\int \psi_k^{(0)*} W \psi_n^{(0)} d^3r}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right)} = \frac{W_{kn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right)} \quad (2.76)$$

Dengan mensubstitusi persamaan (2.76) ke persamaan (2.75) diperoleh

$$\psi_n^{(1)} = \sum_n c_n^{(1)} \psi_n^{(0)} + \sum_{k \neq n} \frac{W_{kn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right)} \psi_k^{(0)} \quad (2.77)$$

Selanjutnya adalah menentukan koefisien $c_n^{(1)}$. Koefisien ini dapat diperoleh melalui normalisasi fungsi gelombang terkoreksi ψ_n . Menggunakan persamaan (2.66) diperoleh

$$\int \psi_n^* \psi_n d^3r = 1 = 1 + \lambda c_n^{(1)*} + \lambda c_n^{(1)} + \int \lambda^2 \psi_n^{(0)*} \psi_n^{(2)} d^3r + \dots$$

dengan mengabaikan suku orde dua, diperoleh

$$c_n^{(1)*} + c_n^{(1)} = 2\text{Re}\left(c_n^{(1)}\right) = 0$$

yang berarti bahwa $c_n^{(1)}$ adalah bilangan imajiner yang dapat ditulis $c_n^{(1)} = ic$, dengan c adalah bilangan real. Berdasarkan hasil ini maka diperoleh koreksi fungsi gelombang orde dua adalah

$$\psi_n^{(1)} = \lambda ic \psi_n^{(0)} + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{W_{kn}}{\left(E_n^{(0)} - E_k^{(0)} \right)} \psi_k^{(0)} \quad (2.78)$$

dan fungsi gelombang terkoreksi orde satu menjadi

$$\psi_n = (1 + \lambda ic)\psi_n^{(0)} + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{W_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)}$$

$$\psi_n \approx e^{\lambda ic} \psi_n^{(0)} + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{W_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)}$$

Dari persamaan tersebut terlihat bahwa dampak dari koefisien c_n adalah merubah fungsi gelombang tak terganggu $\psi_n^{(0)}$ dalam ekspansi ψ_n . Untuk itu, penggunaan $c = 0$ akan memberikan $c_n^{(1)} = 0$, sehingga fungsi gelombang terkoreksi orde satu menjadi

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{W_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)} \quad (2.79)$$

2.4.2 Koreksi Orde Dua

Prosedur penyelesaian pada koreksi orde dua sama seperti halnya pada koreksi orde satu. Untuk mendapatkan ungkapan koreksi energi orde dua dapat dilakukan dengan mengalikan persamaan (2.70) dengan $\psi_r^{(0)*}$ dan mengintegrasikan pada kedua sisi persamaan yaitu

$$\begin{aligned} \int \psi_r^{(0)*} (H^{(0)} - E_n^{(0)}) \psi_n^{(2)} d^3r \\ = \int \psi_r^{(0)*} (E_n^{(1)} - W) \psi_n^{(1)} d^3r \\ + \int \psi_r^{(0)*} E_n^{(2)} \psi_n^{(0)} d^3r \end{aligned} \quad (2.80)$$

Ruas persamaan sebelah kiri sama dengan nol, sehingga diperoleh

$$\int \psi_r^{(0)*} W \psi_n^{(1)} d^3r = \int \psi_r^{(0)*} E_n^{(1)} \psi_n^{(0)} d^3r + E_n^{(2)} \delta_{rn} \quad (2.81)$$

Untuk $r = n$ persamaan di atas menjadi

$$E_n^{(2)} = \int \psi_n^{(0)*} W \psi_n^{(1)} d^3r \quad (2.82)$$

dengan mensubstitusi ungkapan $\psi_n^{(1)}$ dari persamaan (2.79) ke persamaan di atas didapatkan

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|W_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (2.83)$$

sehingga energi terkoreksi orde dua diperoleh dengan mensubstitusi persamaan (2.73) dan (2.83) ke persamaan (2.67) yaitu

$$E_n = E_n^{(0)} + W_{nn} + \sum_{k \neq n} \frac{|W_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (2.84)$$

Langkah selanjutnya adalah menentukan koreksi fungsi gelombang orde dua $\psi_n^{(2)}$. Persamaan (2.80) dapat dipandang sebagai dua kasus, yaitu untuk $r \neq n$ dan $r = n$. Fungsi gelombang tak terganggu $\psi_n^{(0)}$ memiliki bentuk sebagai sekumpulan fungsi yang orthonormal, sehingga untuk $r \neq n$ fungsi gelombang $\psi_n^{(2)}$ dapat diekspansi dalam basis $\psi_r^{(0)}$ yaitu

$$\psi_n^{(2)} = \left(\sum_r \psi_r^{(0)*} \psi_r^{(0)} \right) \psi_n^{(2)} = \sum_{r \neq n} \left(\psi_r^{(0)*} \psi_n^{(2)} \right) \psi_r^{(0)} = \sum_{r \neq n} c_r^{(2)} \psi_r^{(0)}$$

dan untuk $r = n$ diperoleh

$$\begin{aligned} \psi_n^{(2)} &= \left(\sum_k \psi_k^{(0)*} \psi_k^{(0)} \right) \psi_n^{(2)} = \sum_{k=n} \left(\psi_k^{(0)*} \psi_n^{(2)} \right) \psi_k^{(0)} = \sum_n \left(\psi_n^{(0)*} \psi_n^{(2)} \right) \psi_n^{(0)} \\ &= \sum_n c_n^{(2)} \psi_n^{(0)} \end{aligned}$$

Dari kedua hasil tersebut didapatkan ungkapan lengkap dari $\psi_n^{(2)}$ yaitu

$$\psi_n^{(2)} = \sum_{r \neq n} c_r^{(2)} \psi_r^{(0)} + \sum_n c_n^{(2)} \psi_n^{(0)} \quad (2.85)$$

Untuk $r \neq n$ persamaan (2.80) menjadi

$$\begin{aligned} \int (E_r^{(0)} - E_n^{(0)}) \psi_r^{(0)*} \psi_n^{(2)} d^3r &= \int \psi_r^{(0)*} E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} d^3r - \int \psi_r^{(0)*} W \psi_n^{(1)} d^3r \\ \int (E_n^{(0)} - E_r^{(0)}) \psi_r^{(0)*} \psi_n^{(2)} d^3r &= \int \psi_r^{(0)*} W \psi_n^{(1)} d^3r - \int \psi_r^{(0)*} E_n^{(1)} \psi_n^{(1)} d^3r \end{aligned}$$

Berdasarkan persamaan (2.76), suku $\psi_r^{(0)*} E_n^{(1)} \psi_n^{(1)}$ dapat dinyatakan sebagai

$\frac{E_n^{(1)} W_{rn}}{(E_n^{(0)} - E_r^{(0)})}$, sedangkan koreksi energi orde satu $E_n^{(1)} = W_{nn}$. Suku pertama sebelah

kanan ruas persamaan, menggunakan koreksi fungsi gelombang orde satu $\psi_n^{(1)} = \frac{W_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)}$. Jadi diperoleh

$$\begin{aligned} c_r^{(2)} &= \psi_r^{(0)*} \psi_n^{(2)} \\ &= \sum_{r \neq n} \frac{W_{kn} W_{rk}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_r^{(0)})} - \frac{W_{nn} W_{rn}}{(E_n^{(0)} - E_r^{(0)})^2} \end{aligned} \quad (2.86)$$

Semua koefisien telah diketahui, kecuali $c_n^{(2)}$. Koefisien ini dapat diperoleh melalui normalisasi fungsi gelombang terkoreksi ψ_n . Menggunakan persamaan (2.66) diperoleh

$$\int \psi_n^* \psi_n d^3r = 1 = 1 + \lambda c_n^{(1)} + \lambda c_n^{(1)*} + \lambda^2 c_n^{(2)} + \lambda^2 c_n^{(2)*} + \sum_k \lambda^2 c_k^{(1)*} c_k^{(1)}$$

Dari hasil sebelumnya diperoleh $c_n^{(1)} = 0$, maka

$$\begin{aligned} 2\lambda^2 c_n^{(2)} &= -\lambda^2 \sum_k c_k^{(1)*} c_k^{(1)} \\ c_n^{(2)} &= -\frac{1}{2} \sum_k |c_k^{(1)}|^2 \end{aligned} \quad (2.87)$$

Dengan memasukkan nilai $c_k^{(1)}$ dari persamaan (2.76) didapatkan

$$c_n^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_k \frac{|W_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \quad (2.88)$$

Maka diperoleh fungsi gelombang terkoreksi orde dua yaitu

$$\begin{aligned} \psi_n &= \psi_n^{(0)} + \sum_{k \neq n} \frac{W_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)} \\ &+ \sum_{r \neq n} \left(\sum_{k \neq n} \frac{W_{kn} W_{rk}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_r^{(0)})} \right. \\ &\quad \left. - \frac{W_{nn} W_{rn}}{(E_n^{(0)} - E_r^{(0)})^2} \right) \psi_r^{(0)} \\ &- \frac{1}{2} \sum_{k \neq n} \frac{|W_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \psi_n^{(0)} \end{aligned} \quad (2.89)$$

2.5 Metode Numerik

Metode numerik adalah teknik untuk menyelesaikan permasalahan-permasalahan yang diformulasikan secara matematis dengan cara operasi hitungan (*arithmetic*) (Bambang, 2002:1). Salah satu metode numerik yang dapat digunakan untuk memecahkan persamaan differensial seperti pada persamaan gelombang Schrodinger adalah metode beda hingga (*Finite Difference Methods*). Metode beda hingga lebih mudah dari segi pemrograman dengan komputer dan konsepnya tidak sulit dipahami (Lombu, 2013). Dalam penelitian ini aplikasi yang digunakan dalam pemrograman komputer adalah Matlab R2015b. Matlab adalah singkatan dari Matrix Laboratory, suatu perangkat lunak matematis yang menggunakan vektor dan matriks sebagai elemen data utama.

2.5.1 Metode Beda Hingga

Penurunan dari pendekatan metode beda hingga untuk turunan $f(x)$ berdasarkan pada ekspansi deret Taylor maju dan mundur dari fungsi $f(x)$ di sekitar x adalah

$$f(x + h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \dots \quad (2.90)$$

dan

$$f(x - h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \dots \quad (2.91)$$

Jika (2.90) dikurangi dengan (2.91) dan nilai setelah pangkat 2 diabaikan maka didapatkan

$$f'(x) = \frac{f(x + h) - f(x - h)}{2h} \quad (2.92)$$

Persamaan (2.92) disebut dengan pendekatan beda tengah pertama. Apabila (2.90) ditambah dengan (2.91) akan diperoleh

$$f''(x) = \frac{f(x + h) - 2f(x) + f(x - h)}{h^2} \quad (2.93)$$

(Kiusalaas, 2005:183). Metode beda hingga dapat diterapkan pada persamaan Schrodinger dengan mengganti notasi $f''(x)$ menjadi turunan kedua fungsi gelombang $\psi''(x)$ dan h menjadi Δx (interval yang nilainya sangat kecil). Dengan metode beda hingga yang dicari ψ pada x tertentu

$$x_{n+1} = x_n + \Delta x \quad (2.94)$$

Jika $n = 0$ maka $x_1 = x_0 + \Delta x$. Sehingga persamaan (2.93) dapat dinyatakan dengan

$$\psi''(x) = \frac{\psi(x_{n+1}) - 2\psi(x_n) + \psi(x_{n-1}))}{\Delta x^2} \quad (2.95)$$

Ungkapan (2.95) apabila digunakan untuk menyatakan operator energi kinetik menjadi

$$T\psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\psi(x_{n+1}) - 2\psi(x_n) + \psi(x_{n-1}))}{\Delta x^2}\right] \quad (2.96)$$

atau dapat ditulis dengan

$$T\psi_n = -\chi_0[\psi(x_{n+1}) - 2\psi(x_n) + \psi(x_{n-1}))] \quad (2.97)$$

dengan

$$\chi_0 = \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}$$

2.5.2 Operator dalam Matriks

Operator energi kinetik (2.97) apabila dinyatakan dalam bentuk matriks 5×5 menjadi

$$T = -\chi_0 \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \quad (2.98)$$

Matriks energi kinetik T 5×5 ini dapat dioperasikan pada vektor kolom 1×5 $|\psi\rangle$

$$T|\psi\rangle = -\chi_0 \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ \psi_5 \end{bmatrix} \quad (2.99)$$

Operator Hamiltonian merupakan penjumlahan dari operator energi kinetik dan operator energi potensial. Dengan menggunakan metode beda hingga pada operator Hamiltonian, diperoleh

$$H\psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\psi(x_{n+1}) - 2\psi(x_n) + \psi(x_{n-1}))}{\Delta x^2}\right] + V_n\psi_n \quad (2.100)$$

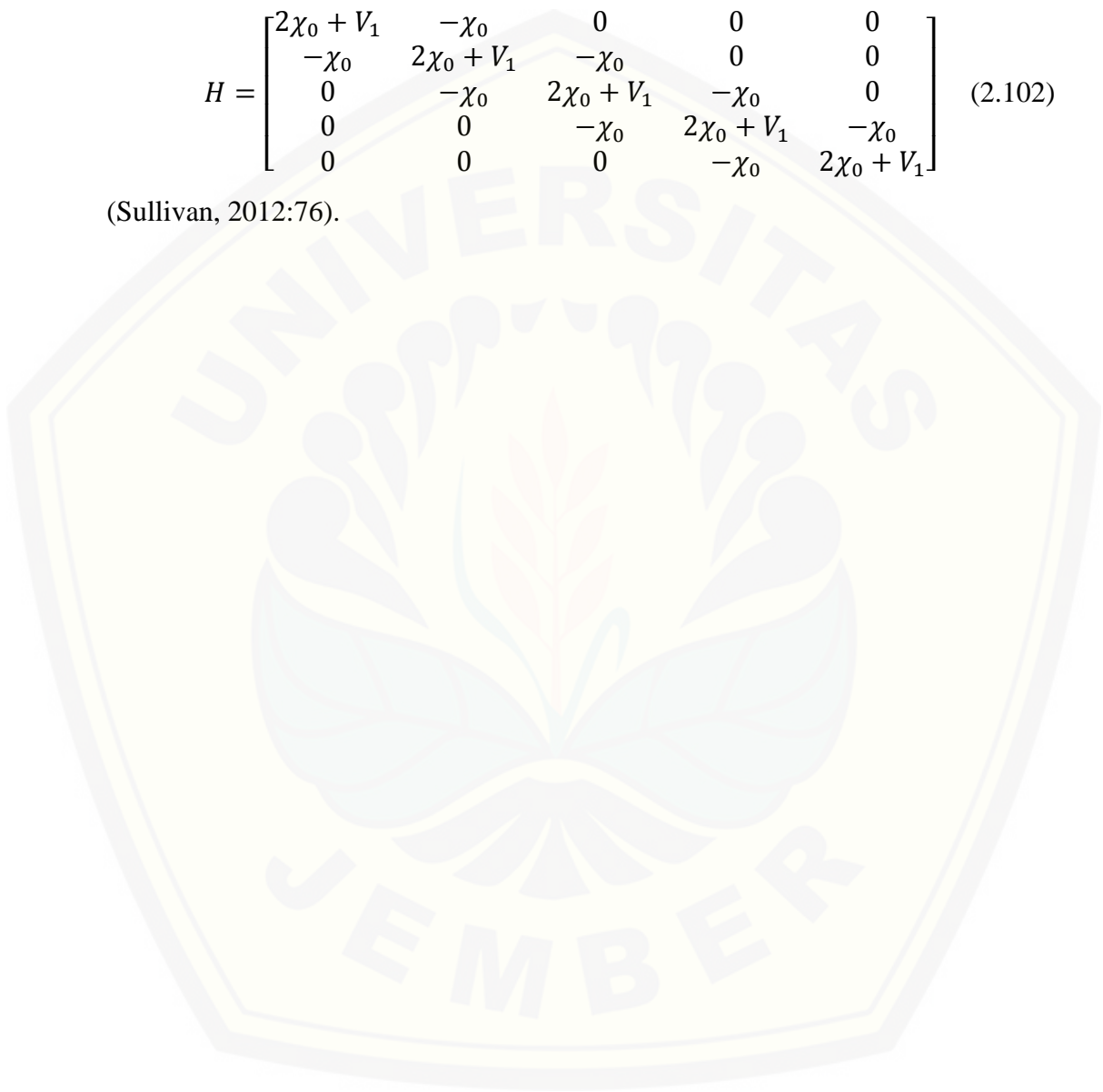
atau dapat dinyatakan dengan

$$H\psi_n = -\chi_0\psi(x_{n+1}) + (2\chi_0 + V_n)\psi(x_n) - \chi_0\psi(x_{n-1}) \quad (2.101)$$

di mana V_n adalah nilai energi potensial pada saat cell ke- n . Hamiltonian tersebut dapat dinyatakan dalam bentuk matriks menjadi

$$H = \begin{bmatrix} 2\chi_0 + V_1 & -\chi_0 & 0 & 0 & 0 \\ -\chi_0 & 2\chi_0 + V_1 & -\chi_0 & 0 & 0 \\ 0 & -\chi_0 & 2\chi_0 + V_1 & -\chi_0 & 0 \\ 0 & 0 & -\chi_0 & 2\chi_0 + V_1 & -\chi_0 \\ 0 & 0 & 0 & -\chi_0 & 2\chi_0 + V_1 \end{bmatrix} \quad (2.102)$$

(Sullivan, 2012:76).



BAB 3. METODE PENELITIAN

3.1 Jenis, Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini adalah penelitian non eksperimen. Penelitian ini dilakukan pada semester genap 2017 di Laboratorium Fisika, Program Studi Pendidikan Fisika, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Jember.

3.2 Definisi Operasional Variabel

Agar tidak terjadi kesalahan dalam mengartikan istilah-istilah penelitian, maka perlu adanya definisi operasional mengenai variabel penelitian. Adapun variabel-variabel yang akan diteliti dalam penelitian ini adalah sebagai berikut:

3.2.1 Osilator Harmonik

Osilator harmonik adalah suatu sistem yang mengalami gerak bolak-balik melalui titik kesetimbangan dengan frekuensi anguler tertentu. Model ini dapat digunakan untuk menjelaskan vibrasi suatu molekul dengan ciri potensialnya berbentuk kuadrat jarak perpindahan inti-inti molekul yaitu $\frac{1}{2}m\omega^2(R - R_e)^2$.

3.2.2 Fungsi gelombang vibrasi ion molekul hidrogen H_2^+

Fungsi gelombang vibrasi ion molekul hidrogen H_2^+ merupakan solusi dari persamaan Schrodinger ion molekul hidrogen H_2^+ untuk keadaan vibrasi inti molekul ion molekul hidrogen H_2^+ . Fungsi gelombang vibrasi ion molekul hidrogen H_2^+ pada keadaan dasar diperoleh melalui pemisahan variabel dari solusi lengkap fungsi gelombang ion molekul hidrogen H_2^+ dengan bilangan kuantum $l = 0$.

3.2.3 Energi dasar vibrasi ion molekul hidrogen H_2^+

Energi dasar vibrasi (*zero-point energy*) ion molekul hidrogen H_2^+ merupakan energi terendah dari keadaan vibrasi ion molekul hidrogen H_2^+ dengan bilangan kuantum $n = 0$.

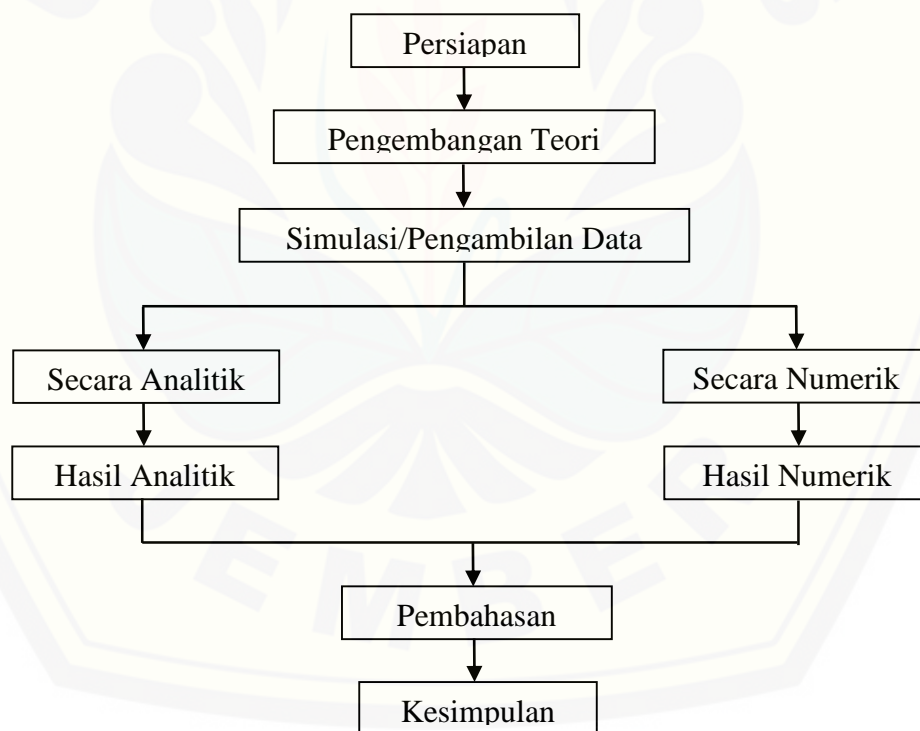
3.2.4 Koreksi interaksi van der Waals

Koreksi interaksi van der Waals merupakan koreksi terhadap fungsi gelombang dan energi vibrasi pada ion molekul hidrogen H_2^+ akibat adanya gaya dipol antara atom hidrogen dan proton (kation).

3.2.5 Teori perturbasi takbergantung waktu pada sistem tak berdegenerasi

Teori perturbasi merupakan suatu metode pendekatan untuk mengetahui tingkat pergeseran energi akibat adanya suatu gangguan. Sistem yang ditinjau adalah vibrasi ion molekul pada keadaan dasar yang tidak berdegenerasi. Gangguan yang digunakan dalam penelitian ini adalah interaksi van der Waals yang tak bergantung waktu.

3.3 Langkah Penelitian



Gambar 3.1 Bagan-bagan langkah penelitian

a. Persiapan

Tahap ini adalah mempersiapkan bahan-bahan yang dijadikan informasi yaitu buku tentang fisika modern, fisika kuantum, fisika kimia, fisika matematika, fisika komputasi serta jurnal-jurnal yang berkaitan dengan tingkat energi vibrasi ion molekul hidrogen dan gangguan berupa interaksi van der Waals pada ion molekul hidrogen.

b. Pengembangan Teori

Pada tahap ini peneliti mengembangkan teori yang sudah ada di buku dan jurnal mengenai vibrasi molekul diatomik. Teori yang dikembangkan adalah energi keadaan dasar dan fungsi gelombang keadaan dasar vibrasi ion molekul hidrogen yang mendapat gangguan berupa interaksi van der Waals.

c. Simulasi/Pengambilan Data

Pada tahap ini dilakukan perhitungan analitik dan perhitungan numerik. Perhitungan numerik dalam penelitian ini menggunakan metode beda hingga (*finite difference method*) dengan aplikasi Matlab R2015b. Untuk mendapatkan nilai dan fungsi eigen, digunakan command **eig** pada Matlab. Lalu fungsi eigen yang ada diplotkan dengan grafik. Sedangkan perhitungan analitik adalah menyelesaikan persamaan Schrodinger secara manual untuk mendapatkan nilai dan fungsi eigen.

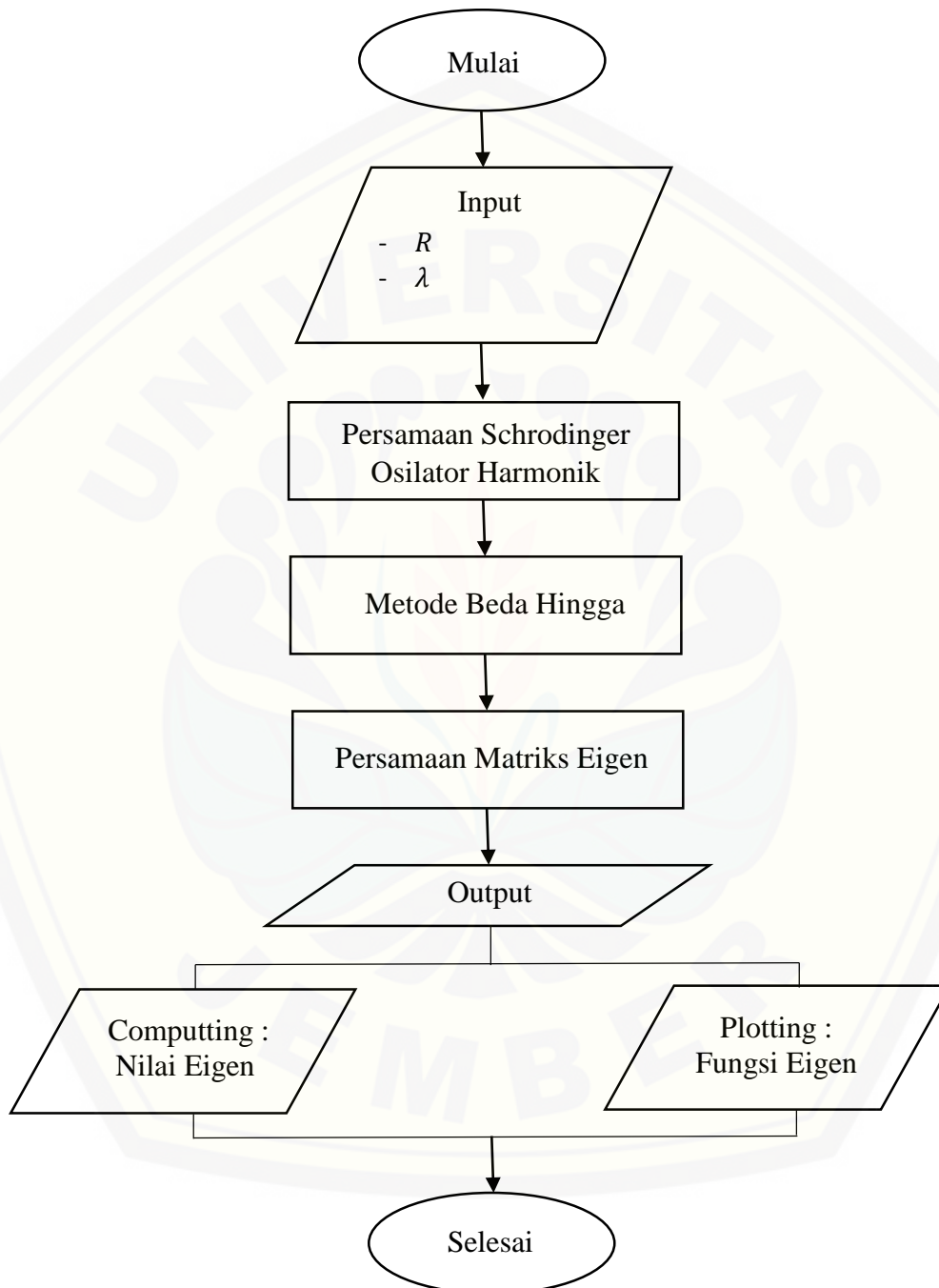
d. Pembahasan

Hasil dari perhitungan manual dan numerik akan dibahas lebih rinci mengenai fungsi gelombang dan energi vibrasi ion molekul hidrogen baik yang tanpa gangguan maupun dengan gangguan van der Waals terkoreksi orde dua.

e. Kesimpulan

Hasil dari pembahasan yang telah dilakukan kemudian disimpulkan untuk menjawab rumusan permasalahan penelitian.

3.4 Diagram Alir Program

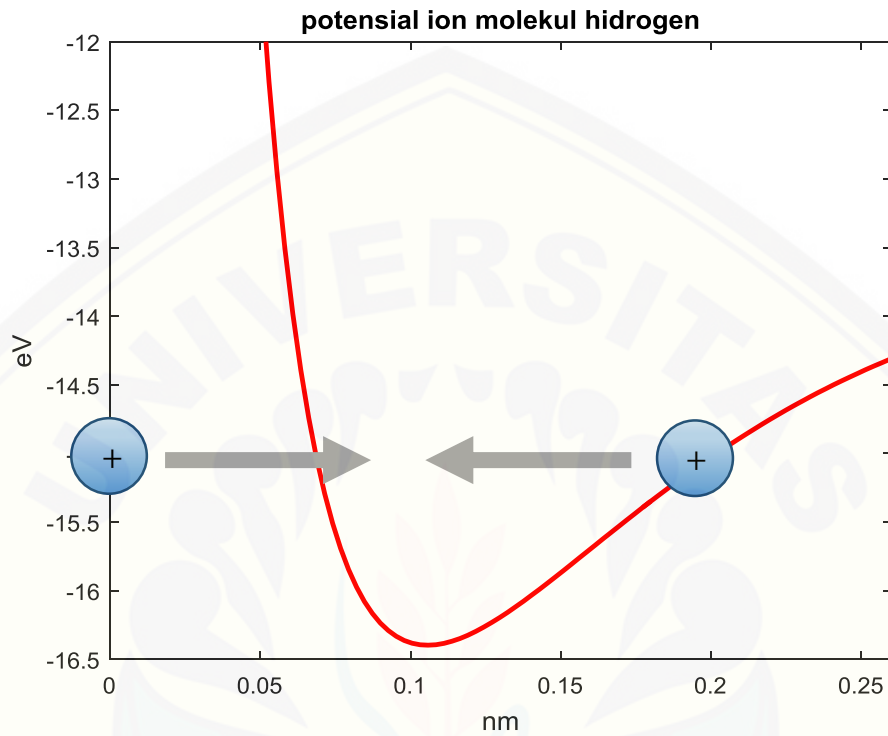


Gambar 3.2 *Flowchart* pemrograman komputer dengan Matlab

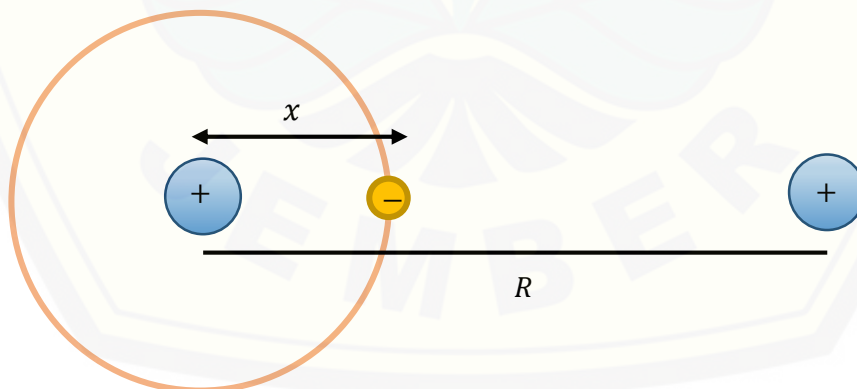
3.5 Pengembangan Teori

Teori yang digunakan dalam penelitian ini adalah sebagai berikut:

a. Skema vibrasi ion molekul hidrogen dan interaksi van der Waals



(a)



(b)

Gambar 3.3 (a) Vibrasi ion molekul hidrogen di sekitar titik kesetimbangan. Potensial ion molekul hidrogen merupakan hasil interpolasi data yang diambil dari jurnal Electron energy for H_2^+ in the Ground state, H. Wind (1965). (b) Model sederhana untuk interaksi van der Waals pada ion molekul hidrogen.

b. Fungsi gelombang osilator harmonik kuantum

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

c.. Tingkat energi osilator harmonik

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

d. Hamiltonian dari interaksi van der Waals

$$W = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{R-x}\right) \approx -\frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 R^2}$$

e. Hamiltonian total osilator harmonik terganggu

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2 - \lambda \frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 R^2}$$

f. Fungsi gelombang terganggu orde dua

$$\begin{aligned} \psi_n &= \psi_n^{(0)} + \lambda\psi_n^{(1)} + \lambda^2\psi_n^{(2)} \\ &= \psi_n^{(0)} + \lambda \sum_{k \neq n} \frac{W_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)} \\ &\quad + \lambda^2 \sum_{r \neq n} \left(\sum_{k \neq n} \frac{W_{kn}W_{rk}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_r^{(0)})} - \frac{W_{nn}W_{rn}}{(E_n^{(0)} - E_r^{(0)})^2} \right) \psi_r^{(0)} \\ &\quad - \frac{1}{2} \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|W_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \psi_n^{(0)} \end{aligned}$$

f. Energi terganggu orde dua

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} = E_n^{(0)} + \lambda W_{nn} + \lambda^2 \sum_{k \neq n} \frac{|W_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

3.6 Data Simulasi

Data yang diperoleh dari penelitian ini adalah energi vibrasi dan fungsi gelombang vibrasi. Energi dan fungsi gelombang vibrasi didapatkan melalui dua cara, yaitu analitik dan numerik. Untuk analitik, didapatkan energi vibrasi keadaan dasar dari osilator harmonik dan koreksi energi vibrasi orde dua. Sedangkan untuk

numerik, didapatkan energi vibrasi, grafik van der Waals, serta fungsi gelombang. Menggunakan program Matlab R2015b, metode yang digunakan adalah metode beda hingga (*Finite Difference Methods*). Banyaknya data $NN = 212$, sehingga matriks Hamiltonian memiliki dimensi 212×212 . Parameter λ yang digunakan adalah 1×10^{-4} , 2×10^{-4} , 3×10^{-4} , serta jarak antar inti molekul R yaitu $2,00 a_0$; $2,25 a_0$; $2,50 a_0$; $2,75 a_0$. Data dan hasil penelitian akan disajikan dalam beberapa tabel berikut:

Tabel 3.1 Energi keadaan dasar $1s\sigma_g$ ion molekul hidrogen H_2^+

| | |
|---------------------------------------|--|
| Tanpa gangguan | $E_0 = E_n^{(0)} =$ |
| Dengan gangguan (orde dua) | $E_0 = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)}$ = |

Tabel 3.2 Data energi vibrasi keadaan dasar $1s\sigma_g$ ion molekul hidrogen H_2^+ tanpa gangguan

| Keadaan | Frekuensi vibrasi ω | Energi tanpa gangguan (eV) | | selisih |
|-----------------------|-------------------------------|----------------------------|---------|---------|
| | | analitik | numerik | |
| Dasar $1s\sigma_g$ | | | | |

Tabel 3.3 Koreksi energi orde dua dan energi total (dari hasil analitik) terkoreksi orde dua dengan tiga parameter yang berbeda

| $R (a_0)$ | $E_0^{(2)}$ (eV) | | | $E_0 = E_0^{(0)} - E_0^{(2)}$ (eV) | | |
|-------------|----------------------------|----------------------------|----------------------------|------------------------------------|----------------------------|----------------------------|
| | $\lambda=1 \times 10^{-4}$ | $\lambda=2 \times 10^{-4}$ | $\lambda=3 \times 10^{-4}$ | $\lambda=1 \times 10^{-4}$ | $\lambda=2 \times 10^{-4}$ | $\lambda=3 \times 10^{-4}$ |
| 2,00 | | | | | | |
| 2,25 | | | | | | |
| 2,50 | | | | | | |
| 2,75 | | | | | | |

Tabel 3.4 Fungsi gelombang keadaan dasar ion molekul hidrogen H_2^+

| | | |
|---|-----------|------------------|
| Fungsi gelombang tanpa gangguan | | $\psi_0^{(0)} =$ |
| Koreksi terhadap fungsi gelombang | orde satu | $\psi_0^{(1)} =$ |
| | orde dua | $\psi_0^{(2)} =$ |
| Fungsi gelombang terkoreksi orde dua | | $\psi_0 =$ |

3.7 Perbandingan Simulasi

Adapun validasi dalam penelitian ini menggunakan data hasil eksperimen dalam menentukan energi dasar ion molekul hidrogen yang diperoleh dari jurnal-jurnal maupun pada buku referensi yang terkait dengan penelitian ini. Besarnya energi gangguan orde dua pada ion molekul hidrogen menggunakan pendekatan osilator harmonik dapat dibandingkan dengan jurnal yang terkait, yaitu The van der Waals Interaction karangan Barry R. Holstein, dengan hasil sebagai berikut

$$\Delta E_2 = V(R) = -\frac{e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 m^2 \omega_0^3 R^6}$$

Sedangkan untuk besarnya energi vibrasi keadaan dasar ion molekul hidrogen divalidasi dengan jurnal yaitu Adiabatic Jacobi Corrections on the Vibrational Energy Levels of H_2^+ Isotopologues karangan Fabri *et al* (2009) dengan hasil 0,142514 eV.

Tabel 3.5 Data ion molekul hidrogen dengan pendekatan Born-Oppenheimer yang diambil dari buku karangan Herzberg (1979)

| Keadaan | ω_e | R_e | E_0 |
|---------|--------------------------|--------------------|---------------------------|
| H_2^+ | $D_e = 2,648 \text{ eV}$ | $\mu = 0,503928u$ | |
| Dasar | 2297 cm^{-1} | $0,106 \text{ nm}$ | $1149,46 \text{ cm}^{-1}$ |

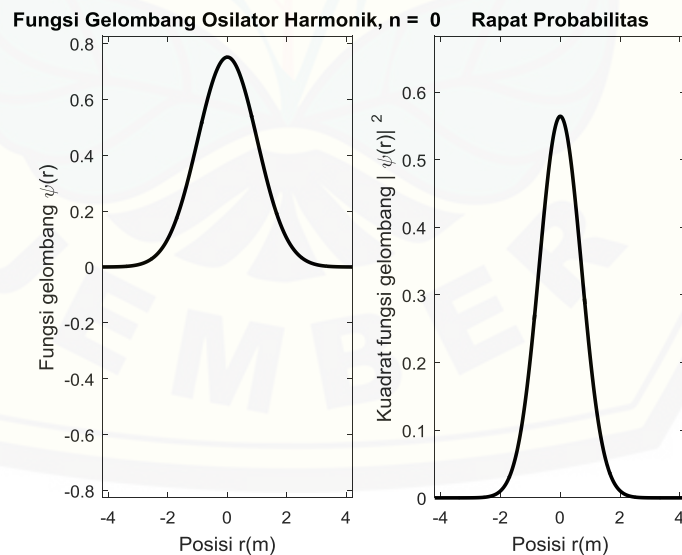
Keterangan :

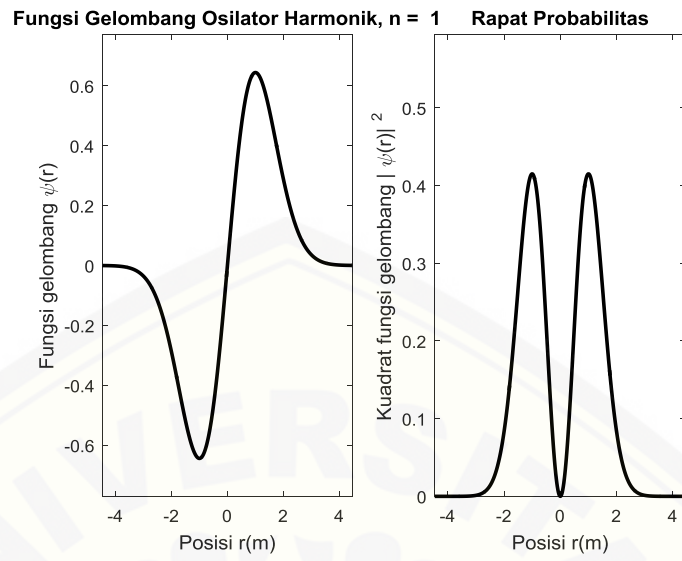
- D_e : energi disosiasi
- μ : massa tereduksi
- ω_e : frekuensi vibrasi dari hasil spektroskopi
- r_e : jarak kesetimbangan inti atom H_2^+
- E_0 : energi vibrasi pada keadaan dasar

Tabel 3.6 Fungsi gelombang dan tingkat energi dari tiga keadaan terendah osilator harmonik.

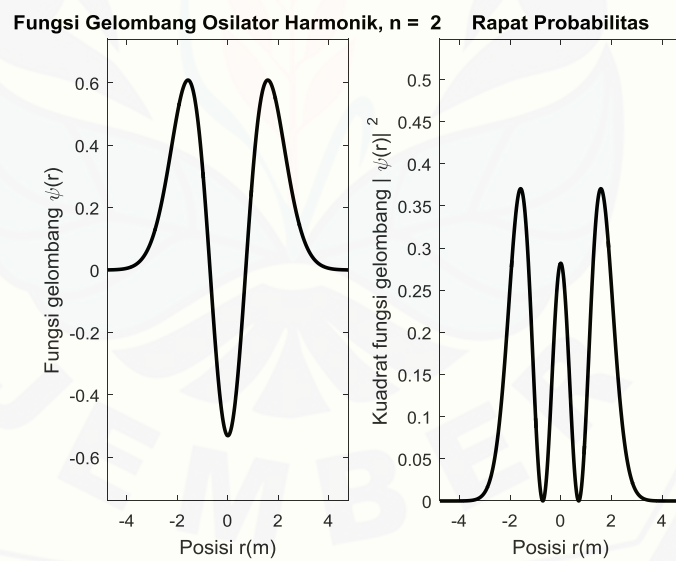
| Keadaan (n) | Fungsi gelombang | Energi |
|-------------|---|--------------------------|
| 0 | $\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-m\omega r^2/2\hbar}$ | $\frac{1}{2}\hbar\omega$ |
| 1 | $\psi_1 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} r e^{-m\omega r^2/2\hbar}$ | $\frac{3}{2}\hbar\omega$ |
| 2 | $\psi_2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2m\omega r^2}{\hbar} - 1\right) e^{-m\omega r^2/2\hbar}$ | $\frac{5}{2}\hbar\omega$ |

Sedangkan untuk validasi fungsi gelombang, diharapkan fungsi gelombang vibrasi terganggu yang terbentuk adalah superposisi dari tiga keadaan terendah fungsi gelombang osilator harmonik, namun lebih menyerupai fungsi gelombang osilator harmonik keadaan dasar karena kecilnya energi pengganggu pada orde satu dan dua. Berikut ini adalah simulasi dari fungsi gelombang tiga keadaan terendah osilator harmonik menggunakan Matlab R2015b (Levi,2006:294):

Gambar 3.4 Fungsi gelombang dan rapat probabilitas osilator harmonik pada keadaan $n = 0$



Gambar 3.5 Fungsi gelombang dan rapat probabilitas osilator harmonik pada keadaan $n = 1$



Gambar 3.6 Fungsi gelombang dan rapat probabilitas osilator harmonik pada keadaan $n = 2$

BAB 5. PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil dan pembahasan yang telah dilakukan dapat diperoleh kesimpulan sebagai berikut:

- a. Untuk vibrasi ion molekul hidrogen H_2^+ menggunakan potensial osilator harmonik, energi vibrasinya pada keadaan dasar dengan gangguan interaksi van der Waals besarnya bergantung pada jarak antar inti molekul H_2^+ dan parameter λ yang digunakan. Semakin besar jarak antar inti molekul, semakin rendah (menuju minus) energi vibrasinya yang bervariasi sebagai R^{-4} , begitu pula sebaliknya. Sedangkan apabila semakin besar parameter gangguan λ , semakin besar pula energi pengganggunya, begitu pula sebaliknya. Besarnya energi vibrasi molekul H_2^+ yang terganggu dalam penelitian ini adalah berkisar antara 0,087664 eV hingga 0,140693 eV.
- b. Secara garis besar, fungsi gelombang vibrasi keadaan dasar terganggu memiliki bentuk dasar yang menyerupai dengan fungsi gelombang vibrasi keadaan dasar tanpa gangguan, yaitu fungsi gelombang osilator harmonik. Bentuknya berbeda-beda bergantung pada besarnya jarak antar inti molekul H_2^+ dan parameter.

Dalam penelitian ini juga diperoleh kesimpulan lain bahwa apabila energi van der Waals lebih besar dari pada energi vibrasi, maka gerak vibrasi molekul menjadi tidak terlihat lagi. Selain itu juga bahwa gangguan interaksi van der Waals pada gerak vibrasi H_2^+ dapat menggeser titik kesetimbangannya menjadi lebih besar.

5.2 Saran

Dalam penelitian ini, gangguan yang digunakan adalah interaksi van der Waals yang menyaratkan jarak antar inti molekul cukup jauh. Namun dalam penelitian ini gerak vibrasi yang diamati hanya pada keadaan dasar yang berlaku pada jarak antar inti molekul berada di dekat titik kesetimbangan. Saran yang dapat diberikan adalah penelitian ini selanjutnya dapat dikembangkan untuk keadaan

yang lebih tinggi (eksitasi) agar gangguan yang ada nilainya kecil. Selain itu, dalam pembelajaran fisika kuantum di tingkat mahasiswa, khususnya teori perturbasi, penelitian ini dapat dijadikan sebagai pengembangan gambaran dari sistem yang terganggu selain gangguan medan listrik dan medan magnet.



DAFTAR PUSTAKA

- Arya, A. 1997. *Introduction to Classical Mechanics 2nd Edition*. Upper Saddle River, New Jersey : Pearson Prentice Hall, Inc.
- Atkins, Peter dan Julio de Paula. 2006. *Atkin's Physical Chemistry*. Oxford: Oxford University Press.
- Beiser, Arthur. 2003. *Concepts of Modern Physics 6th Edition*. New York : McGraw-Hill Companies, Inc.
- Burkhardt, C.E dan J.J Leventhal. 2008. *Foundations of Quantum Physics*. New York: Springer Science.
- Chen, C.J. 1991. Attractive Interatomic force as a Tunneling Phenomenon. *Journal Physics : Condensed Matter*. Vol. 3 1227. DOI: 0953-8984/3/10/002.
- Fabri, Csaba., Czako, Gabor., Tasi, Gyula., Csaszar, Attila. 2009. Adiabatic Jacobi Corrections on the Vibrational Energy Levels of H_2^+ Isotopologues. *The Journal of Chemical Physics*. Vol. 130. DOI: 10.1063/1.3097327.
- Gasiorowicz, Stephen. 2003. *Quantum Physics 3rd edition*. Minnesota : John Wiley & Sons, Inc.
- Griffiths, David. 2005. *Introduction to Quantum Mechanics 2nd Edition*. Upper Saddle River, New Jersey : Pearson Prentice Hall, Inc.
- Heap, S.R. Stecher, T.P. 1981. Discovery of the molecular hydrogen ion in the planetary nebulae. *Astrophysics Conference Paper*. NASA United States.
- Herzberg, Gerhard. 1950. *Molecular Spectra and Molecular Structure. I. Spectra of Diatomic Molecules 2nd Edition*. Canada : D. Van. Nostrand Company, Inc.
- Holstein, Barry R. 2001. The van der Waals Interaction. *American Journal Physics* Vol. 69. DOI : 10.1119/1.1341251.
- Kiusalaas, Jaan. 2005. *Numerical Methods in Engineering with MATLAB*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Krane, Kenneth S. 1992. *Modern Physics 3rd Edition*. Oregon USA : John Wiley and Sons, Inc.

- Levi, A.F.J. 2006. *Applied Quantum Mechanics Second Edition*. New York : Cambridge University Press.
- Levine, Ira. 2000. *Quantum Chemistry 5th Edition*. Upper Saddle River, New Jersey : Pearson Prentice Hall, Inc.
- Lombu, Odaligo Ziduhu., Simbolon, Tua Raja., Ginting, Tenang. 2013. *Aplikasi Metode Beda Hingga pada Persamaan Schrodinger Menggunakan Matlab*. Medan : Universitas Sumatera Utara.
- McQuarrie, Donald A., Simon, John D. 2003. *Physical Chemistry A Molecular Approach*. Sausalito : University Science Books.
- Mustofa, Habib., Supriadi, Bambang., Handayani, Rif'ati Dina. 2012. Energi Simetri dan Anti-Simetri pada Ion Molekul Hidrogen H_2^+ . *Jurnal Pembelajaran Fisika*. Vol. 1 no. 1. hal. 125-130.
- Pauling, Linus. 1935. *Introduction To Quantum Mechanics With Application to Chemistry*. New York : McGraw-Hill Book Company, Inc.
- Phillips. A.C. 2003. *Introduction to Quantum Mechanics*. Southern Gate, Chichester: John Wiley & Sons, Ltd.
- Purwanto, Agus. 2006. *Fisika Kuantum*. Yogyakarta : Penerbit Gava Media.
- Rajasekar, S., Velusamy, R. 2015. *Quantum Mechanics I. The Fundamentals*. New York: Taylor & Francis Group, LLC.
- Sullivan, Dennis M. 2012. *Quantum Mechanics for Electrical Engineers*. New Jersey: John Wiley & Sons, Inc.
- Triatmodjo, Bambang. 2002. *Metode Numerik Dilengkapi dengan Program Komputer*. Yogyakarta : Beta Offset.
- Weisendanger, R., Guntherodt J. 1996. *Scanning Tunneling Microscopy III. Theory of STM and Related Scanning Probe Methods 2nd Edition*. Heidelberg: Springer-Verlag.
- Wind, H. 1965. Electron Energy for H_2^+ in the Ground State. *Journal Chemical Physics*. Vol. 42 2371. DOI: 10.1063/1.1696302.
- Zettili, Nouredine. 2009. *Quantum Mechanics Concepts and Applications Second Edition*. Jacksonville : John Wiley & Sons, Ltd.

LAMPIRAN A. OPERATOR \hat{a} DAN \hat{a}^\dagger

Diketahui dua operator Non-Hermitian

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x \quad \text{dan} \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x$$

Operator momentum dalam sumbu x dinyatakan dengan

$$\hat{p}_x = -i \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)$$

dan operator posisi

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

Kuadrat dari kedua operator \hat{p}_x dan \hat{x} dapat dinyatakan

$$\hat{p}_x^2 = -\frac{m\omega\hbar}{2} (\hat{a}^2 - \hat{a}^\dagger a - a \hat{a}^\dagger + (\hat{a}^\dagger)^2)$$

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^2 + a \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger a + (\hat{a}^\dagger)^2)$$

Hamiltonian osilator harmonik menjadi

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 \\ &= \frac{1}{2m} \left(-\frac{m\omega\hbar}{2} (\hat{a}^2 - \hat{a}^\dagger a - a \hat{a}^\dagger + (\hat{a}^\dagger)^2) \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} m\omega^2 \left(\frac{\hbar}{2m\omega} (\hat{a}^2 + a \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger a + (\hat{a}^\dagger)^2) \right) \\ &= -\frac{\omega\hbar}{4} (\hat{a}^2 - \hat{a}^\dagger a - a \hat{a}^\dagger + (\hat{a}^\dagger)^2) + \frac{\omega\hbar}{4} (\hat{a}^2 + a \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger a + (\hat{a}^\dagger)^2) \\ &= \frac{\omega\hbar}{4} (2a \hat{a}^\dagger + 2\hat{a}^\dagger a) \\ &= \frac{1}{2} \omega\hbar (a \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger a) \end{aligned}$$

Hubungan komutator

$$\begin{aligned}
 [\hat{a}^\dagger, \hat{a}] &= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x \right] \\
 &= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} \right] + \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x, \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x \right] \\
 &= \left[-\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} \right] + \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}, \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x \right] \\
 &= -\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} [\hat{p}_x, \hat{x}] + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} [\hat{x}, \hat{p}_x] \\
 &= -\frac{i}{2\hbar} [\hat{p}_x, \hat{x}] + \frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}_x] \\
 &= -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = -1
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\hat{a}, \hat{a}^\dagger] &= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x \right] \\
 &= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x \right] + \left[\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x \right] \\
 &= \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x}, -\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x \right] + \left[\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \hat{p}_x, \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} \right] \\
 &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(-\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \right) [\hat{x}, \hat{p}_x] + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} [\hat{p}_x, \hat{x}] \\
 &= -\frac{i}{2\hbar} [\hat{x}, \hat{p}_x] + \frac{i}{2\hbar} [\hat{p}_x, \hat{x}] \\
 &= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1
 \end{aligned}$$

LAMPIRAN B. PEMISAHAN VARIABEL PADA KOORDINAT BOLA

Persamaan Schrodinger bebas waktu dari partikel dengan potensial $U(r)$ adalah sebagai berikut

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r)\right)\psi(r) = E\psi(r) \quad (\text{II.1})$$

dengan ∇^2 adalah operator Laplacian. Dalam koordinat bola (r, θ, φ) , operator ∇^2 dapat dinyatakan dengan

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}$$

Sehingga persamaan Schrodinger (II.1) di atas menjadi

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right\} \\ - U(r)\psi = E\psi \end{aligned} \quad (\text{II.2})$$

Selanjutnya, untuk mendapatkan solusi bagi persamaan di atas dilakukan pemisahan variabel yaitu

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \quad (\text{II.3})$$

Substitusi ungkapan (II.3) ke dalam persamaan (II.2) kemudian dikalikan $(2mr^2/\hbar^2)$ dan dibagi ungkapan (II.3) didapatkan

$$\begin{aligned} \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi \sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} \\ + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (E + U) = 0 \end{aligned} \quad (\text{II.4})$$

Persamaan (II.4) tampak bahwa suku pertama dan keempat hanya bergantung jari-jari r , suku kedua dan ketiga hanya bergantung pada sudut θ dan φ .

Penjumlahan suku-suku yang hanya bergantung pada jari-jari dan dua sudut ini akan selalu sama dengan nol untuk sembarang nilai r , θ dan φ jika masing-masing suku sama dengan suatu konstanta. Konstanta yang digunakan adalah $\pm l(l+1)$. Suku yang bergantung jari-jari menjadi

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (E + V) = l(l+1)$$

atau

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} (E + V)R = l(l + 1)R$$

Sedangkan suku yang hanya mengandung sudut θ dan φ menjadi

$$\frac{1}{\Theta \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi \sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -l(l + 1)$$

Setelah dikalikan dengan $\sin^2 \theta$, persamaan tersebut menjadi

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + l(l + 1) \sin^2 \theta = 0 \quad (\text{II.5})$$

Tampak bahwa persamaan (II.5) juga terpisah menjadi dua bagian yaitu bagian yang hanya bergantung pada sudut azimuth φ dan bagian yang bergantung pada θ . Selanjutnya tetapkan masing-masing bagian sama dengan konstanta $-m^2$ dan m^2 .

Kemudian pilih

$$\frac{1}{\Theta} \frac{d^2 \Theta}{d\varphi^2} = -m^2$$

atau

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + \Phi m^2 = 0$$

Sehingga

$$\frac{\sin \theta}{\Theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + l(l + 1) \sin^2 \theta = m^2$$

atau setelah dikalikan dengan $\Theta/\sin^2 \theta$ diperoleh

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left\{ l(l + 1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right\} = 0 \quad (\text{II.6})$$

Solusi dari persamaan tersebut adalah fungsi harmonik bola yang berbentuk umum

$$\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \equiv Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l + 1}{4\pi} \frac{(l + m)!}{(l - m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$$

OPERATOR MOMENTUM SUDUT DAN PERSAMAAN EIGENNYA

Momentum sudut dalam fisika klasik menyatakan besarnya perputaran (ke arah tertentu) suatu partikel terhadap suatu titik tertentu yang menjadi pusat. Momentum sudut klasik dinyatakan dengan

$$L = r \times p$$

dengan L adalah momentum sudut, p momentum linier dan r jarak partikel terhadap titik pusat. Di dalam teori kuantum, kuantitas ini menjadi operator melalui korespondensi persamaan ()

$$\begin{aligned} L = r \times p &= \hat{i}L_x + \hat{j}L_y + \hat{k}L_z \\ &= \hat{i}(yp_z - zp_y) + \hat{j}(zp_x - xp_z) + \hat{k}(xp_y - yp_x) \\ &= i\hbar \left\{ \hat{i} \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) + \hat{j} \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) + \hat{k} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \right\} \end{aligned}$$

dengan $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, $p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$, $p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$. Di dalam koordinat bola komponen-komponen operator momentum sudut di atas dapat dinyatakan sebagai berikut

$$L_x = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$L_y = i\hbar \left(\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Operator yang banyak digunakan adalah kuadrat dari momentum sudut yaitu

$$\begin{aligned} L^2 &= r^2 p^2 - (r \cdot p)^2 + i\hbar r \cdot p \\ &= r^2 (-\hbar^2 \nabla^2) - \left(-i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r} \\ &= -\hbar^2 \left\{ r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \\ &\quad - \left\{ -\hbar^2 r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r} \right\} + \hbar^2 r \frac{\partial}{\partial r} \\ &= -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \end{aligned}$$

Selanjutnya, perhatikan penerapan operator L_z pada fungsi $Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \left\{ \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \right\}$$

$$\begin{aligned}
&= i\hbar \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial\varphi} e^{im\varphi} \right) \\
&= i\hbar(im) \left\{ \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi} \right\} \\
&= m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi)
\end{aligned}$$

Jadi fungsi $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ merupakan fungsi eigen dari operator momentum sudut L_z dengan nilai eigen ($m\hbar$). Sedangkan pengoperasian L^2 dari $Y_{lm}(\theta, \varphi)$

$$L^2 Y_{lm} = -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right\} Y_{lm}$$

Menggunakan hasil perhitungan $L_z Y_{lm}(\theta, \varphi) = m\hbar Y_{lm}(\theta, \varphi)$, maka

$$\frac{\partial^2 Y_{lm}}{\partial\varphi^2} = (im)^2 Y_{lm} = -m^2 Y_{lm}$$

Karena itu

$$\begin{aligned}
L^2 Y_{lm} &= -\hbar^2 \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right\} Y_{lm} \\
&= -\hbar^2 \left[\left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right\} \Theta_{lm} \right] \Phi_m
\end{aligned}$$

Selanjutnya, menggunakan persamaan (II.6) untuk Θ_{lm}

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial\Theta_{lm}}{\partial\theta} \right) + \left\{ l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right\} \Theta_{lm} = 0$$

maka

$$\left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial\Theta_{lm}}{\partial\theta} \right) - \frac{m^2}{\sin^2\theta} \right\} \Theta_{lm} = l(l+1)\Theta_{lm}$$

dengan demikian diperoleh

$$\begin{aligned}
L^2 Y_{lm} &= -\hbar^2 [-l(l+1)\Theta_{lm}] \Phi_m \\
&= l(l+1)\hbar^2 \Theta_{lm} \Phi_m \\
&= l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}
\end{aligned}$$

Artinya, $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ juga merupakan fungsi eigen dari L^2 dengan nilai eigen $l(l+1)\hbar^2$.

LAMPIRAN C. TEORI PERTURBASI (GANGGUAN)**A. Gangguan berupa Interaksi van der Waals**

$$\begin{aligned}
 W &= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{R-x} \\
 &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{R-x} \right) \\
 &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{-x}{R^2 - Rx} \right)
 \end{aligned}$$

untuk $R \gg x$, maka

$$W = -\frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 R^2}$$

B. Teori Perturbasi**1. Orde Satu**

- Koreksi energi

$$\begin{aligned}
 E_n^{(1)} &= W_{nn} \\
 &= \langle n | W | n \rangle \\
 &= \left\langle n \left| -\frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 R^2} \right| n \right\rangle \\
 &= -\frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 R^2} \langle n | x | n \rangle
 \end{aligned}$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)$$

sehingga

$$\begin{aligned}
 E_n^{(1)} &= -\frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 R^2} \left\langle n \left| \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \right| n \right\rangle \\
 &= -\frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 R^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | n \rangle \\
 &= -\frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 R^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\langle n | \hat{a} | n \rangle + \langle n | \hat{a}^\dagger | n \rangle)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 R^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n}\langle n|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\langle n|n+1\rangle) \\
&= 0
\end{aligned}$$

- Koreksi Fungsi Gelombang

$$\begin{aligned}
\psi_n^{(0)} &= \sum_{k \neq n} \frac{W_{kn}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)} \\
&= \sum_{k \neq n} \frac{\langle k|W|n\rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)} \\
&= \sum_{k \neq n} \frac{\langle k|-\frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 R^2}|n\rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)} \\
&= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} \sum_{k \neq n} \frac{\langle k|x|n\rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)} \\
&= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} \sum_{k \neq n} \frac{\langle k|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)|n\rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)} \\
&= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_{k \neq n} \frac{\langle k|(\hat{a} + \hat{a}^\dagger)|n\rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)} \\
&= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_{k \neq n} \frac{(\langle k|\hat{a}|n\rangle + \langle k|\hat{a}^\dagger|n\rangle)}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)} \\
&= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_{k \neq n} \frac{(\sqrt{n}\langle k|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\langle k|n+1\rangle)}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)}
\end{aligned}$$

untuk $k = 0$, $\langle k|n+1\rangle = 1$, maka $k = 1$, sedangkan $\langle k|n-1\rangle = 0$, jadi

$$= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\sqrt{n+1}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})} \psi_k^{(0)}$$

$$= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\omega R^2} \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \psi_1^{(0)}$$

2. Orde Dua

- Koreksi Energi

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \sum_{k \neq n} \frac{|W_{kn}|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &= \sum_{k \neq n} \frac{\left| \left\langle k \left| -\frac{e^2 x}{4\pi\epsilon_0 R^2} \right| n \right\rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &= \frac{e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 R^4} \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k|x|n\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &= \frac{e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 R^4} \sum_{k \neq n} \frac{\left| \left\langle k \left| \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \right| n \right\rangle \right|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &= \frac{e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 R^4} \frac{\hbar}{2m\omega} \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &= \frac{e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 R^4} \frac{\hbar}{2m\omega} \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k | \hat{a} | n \rangle + \langle k | \hat{a}^\dagger | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &= \frac{e^4}{16\pi^2 \epsilon_0^2 R^4} \frac{\hbar}{2m\omega} \sum_{k \neq n} \frac{|\sqrt{n} \langle k | n-1 \rangle + \sqrt{n+1} \langle k | n+1 \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \end{aligned}$$

Hasil dari $|\sqrt{n} \langle k | n-1 \rangle + \sqrt{n+1} \langle k | n+1 \rangle|^2 = (n\delta_{k,n+1} + \sqrt{n}\sqrt{n+1}\delta_{k,n-1}\delta_{k,n+1} + \sqrt{n}\sqrt{n+1}\delta_{k,n-1}\delta_{k,n+1} + (n+1)\delta_{k,n+1})$

untuk $k = 0$, maka $k = 1$, sehingga

$$\begin{aligned} E_n^{(2)} &= \frac{e^4 \hbar}{32\pi^2 \epsilon_0^2 m\omega R^4} \frac{(n+1)}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \\ &= \frac{e^4 \hbar}{32\pi^2 \epsilon_0^2 m\omega R^4} \frac{1}{-\hbar\omega} \\ &= -\frac{e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 m\omega^2 R^4} \end{aligned}$$

- Koreksi Fungsi Gelombang

$$\psi_n^{(2)} = \sum_{r \neq n} \left(\sum_{k \neq n} \frac{W_{kn} W_{rk}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_r^{(0)})} - \frac{W_{nn} W_{rn}}{(E_n^{(0)} - E_r^{(0)})^2} \right) \psi_r^{(0)} - \frac{1}{2} \sum_{k \neq n} \frac{|W_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \psi_n^{(0)}$$

Dengan perincian sebagai berikut:

$$W_{kn} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{n}\delta_{k,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{k,n+1})$$

$$W_{rk} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{k}\delta_{r,k-1} + \sqrt{k+1}\delta_{r,k+1})$$

$$W_{nn} = 0$$

$$|W_{kn}|^2 = \frac{e^4 \hbar}{32\pi^2 \epsilon_0^2 m \omega R^4} (n\delta_{k,n+1} + \sqrt{n}\sqrt{n+1}\delta_{k,n-1}\delta_{k,n+1} + \sqrt{n}\sqrt{n+1}\delta_{k,n-1}\delta_{k,n+1} + (n+1)\delta_{k,n+1})$$

maka

$$W_{kn} W_{rk} = \frac{e^4 \hbar}{32\pi^2 \epsilon_0^2 m \omega R^4} (\sqrt{n}\sqrt{k}\delta_{k,n-1}\delta_{r,k-1} + \sqrt{n}\sqrt{k+1}\delta_{k,n-1}\delta_{r,k+1} + \sqrt{n+1}\sqrt{k}\delta_{k,n+1}\delta_{r,k-1} + \sqrt{n+1}\sqrt{k+1}\delta_{k,n+1}\delta_{r,k+1})$$

jadi untuk $n = 0$, maka diperoleh $k = 1$ dan $r = 2$, sehingga

$$\begin{aligned} \sum_{k \neq n} \frac{W_{kn} W_{rk}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_r^{(0)})} \psi_r^{(0)} &= \frac{e^4 \hbar}{32\pi^2 \epsilon_0^2 m \omega R^4} \times \\ &\frac{\sqrt{n+1}\sqrt{k+1}}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})(E_n^{(0)} - E_r^{(0)})} \psi_r^{(0)} \\ &= \frac{e^4 \hbar}{32\pi^2 \epsilon_0^2 m \omega R^4} \frac{\sqrt{2}}{(-\hbar\omega)(-2\hbar\omega)} \psi_2^{(0)} \\ &= \frac{e^4}{32\sqrt{2}\pi^2 \epsilon_0^2 m \hbar \omega^3 R^4} \psi_2^{(0)} \end{aligned}$$

dan

$$\begin{aligned}\sum_{k \neq n} \frac{|W_{kn}|^2}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \psi_n^{(0)} &= \frac{e^4 \hbar}{32\pi^2 \epsilon_0^2 m \omega R^4} \frac{(n+1)}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})^2} \psi_n^{(0)} \\ &= \frac{e^4 \hbar}{32\pi^2 \epsilon_0^2 m \omega R^4} \frac{(n+1)}{(-\hbar\omega)^2} \psi_0^{(0)} \\ &= \frac{e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 m \hbar \omega^3 R^4} \psi_0^{(0)}\end{aligned}$$



LAMPIRAN D. M-FILE PEMROGRAMAN MATLAB

```

%m.file untuk menentukan energi dan fungsi gelombang
clear all
NN = 212;
N_center = NN/2;
hbar = 1.054e-34; %konstanta Planck
m0 = 4.59054e-31; %massa tereduksi;
ecoul = 1.6e-19; %muatan elektron
omega=6.8862e13; %frekuensi vibrasi
miu = 8.854e-12; %permitivitas
eV2J = 1.6e-19; %konversi energi
J2eV = 1./eV2J; %konversi energi
del_x = 0.106e-9; %skala
DX = del_x*1e7;
XX = (DX:DX:NN*DX); %range
mid = DX*N_center;
% energi dalam eV
t0 = J2eV*hbar^2/(2*m0*del_x^2);
% ----- Spesifikasi energi potensial dalam eV
V = zeros(1,NN);
Eref = 0.28479;
k = m0*(eV2J*Eref/hbar)^2;
for n=1:NN
V(n) = J2eV*0.5*k*((N_center-n)*del_x)^2;
end

figure(1) %gambar energi vibrasi
plot(XX,V,'r-', 'linewidth',2);
TT = text( 0.15, 2, ['E_0 = 0.142395 eV' ]);
set(TT,'fontsize',12)
ylabel('Energi vibrasi H_2^+(eV)')
xlabel('nm')
Vmax = max(V);
axis( [ DX DX*NN -1 20 ])
set(gca,'fontsize',12)
grid on
% ---- membuat Hamiltonian dengan metode beda hingga
H = zeros(NN,NN);
H(1,1) = 2*t0+V(1);
H(1,2) = -1*t0;
for n=2:NN-1
H(n,n-1)= -1*t0;
H(n,n) = 2*t0+ V(n);
H(n,n+1)= -1*t0;
end
H(NN,NN-1) = -1*t0;
H(NN,NN) = 2*t0+V(NN);

% ----- menentukan nilai eigen dan fungsi eigen
[phi,D] = eig(H);
for n=1:NN
E(n) = D(n,n);
end

```



```

%----- plot fungsi eigen (tak terganggu)
amax = .5;
y0=-phi(:,1);
figure(2)
plot(XX,y0,'r-','linewidth',2)
TT = ylabel('\psi_0','fontsize',12);
xlabel('nm')
title('fungsi gelombang tanpa gangguan')
set(TT,'fontsize',12)
axis( [ 0.05 0.15 -0.5 1 ])
set(gca,'fontsize',12)
grid on

%----- konstanta gangguan
t=sqrt(1/(2*m0*hbar*omega));
k1=(ecoul^2/(4*pi*miu*omega))*t;
k2=(ecoul^4/(32*sqrt(2)*pi^2*miu^2*m0*hbar*omega^3));
k3=(ecoul^4/(64*pi^2*miu^2*m0*hbar*omega^3));

%----- fungsi gelombang terganggu untuk R=2a0 dan lambda=0.0001
y11=(1/1.0584e-10)^2*(0.0001)*k1*phi(:,2);
y21=(1/1.0584e-10)^4*(0.0001^2)*k2*phi(:,3);
y31=(1/1.0584e-10)^4*(0.0001^2)*k3*y0;
ytot1=y0+y11+y21-(0.5)*y31;

figure(3)
plot(XX,ytot1,'r-','linewidth',2)
TT = ylabel('\psi_t_o_t','fontsize',12);
xlabel('nm')
title('fungsi gelombang terganggu R=2a_0 dan \lambda=0,0001')
set(TT,'fontsize',12)
axis( [ 0.05 0.15 -0.5 1 ])
set(gca,'fontsize',12)
grid on

%----- fungsi gelombang terganggu untuk R=2a0 dan lambda=0.0002
y12=(1/1.0584e-10)^2*(0.0002)*k1*phi(:,2);
y22=(1/1.0584e-10)^4*(0.0002^2)*k2*phi(:,3);
y32=(1/1.0584e-10)^4*(0.0002^2)*k3*y0;
ytot2=y0+y12+y22-(0.5)*y32;

figure(4)
plot(XX,ytot2,'r-','linewidth',2)
TT = ylabel('\psi_t_o_t','fontsize',12);
xlabel('nm')
title('fungsi gelombang terganggu R=2a_0 dan \lambda=0,0002')
set(TT,'fontsize',12)
axis( [ 0.05 0.15 -0.5 1 ])
set(gca,'fontsize',12)
grid on

%----- fungsi gelombang terganggu untuk R=2a0 dan lambda=0.0003
y13=(1/1.0584e-10)^2*(0.0003)*k1*phi(:,2);
y23=(1/1.0584e-10)^4*(0.0003^2)*k2*phi(:,3);

```

```

y33=(1/1.0584e-10)^4*(0.0003^2)*k3*y0;
ytot3=y0+y13+y23-(0.5)*y33;

figure(5)
plot(XX,ytot3,'r-','linewidth',2)
TT = ylabel('\psi_t_o_t','fontsize',12);
xlabel('nm')
title('fungsi gelombang terganggu R=2a_0 dan \lambda=0,0003')
set(TT,'fontsize',12)
axis([ 0.05 0.15 -0.5 1 ])
set(gca,'fontsize',12)
grid on

%----- fungsi gelombang terganggu untuk R=2.25a0 dan
lambda=0.0001
y14=(1/1.1906e-10)^2*(0.0001)*k1*phi(:,2);
y24=(1/1.1906e-10)^4*(0.0001^2)*k2*phi(:,3);
y34=(1/1.1906e-10)^4*(0.0001^2)*k3*y0;
ytot4=y0+y14+y24-(0.5)*y34;

figure(6)
plot(XX,ytot4,'r-','linewidth',2)
TT = ylabel('\psi_t_o_t','fontsize',12);
xlabel('nm')
title('fungsi gelombang terganggu R=2,25a_0 dan \lambda=0,0001')
set(TT,'fontsize',12)
axis([ 0.05 0.15 -0.5 1 ])
set(gca,'fontsize',12)
grid on

%----- fungsi gelombang terganggu untuk R=2.25a0 dan
lambda=0.0002
y15=(1/1.1906e-10)^2*(0.0002)*k1*phi(:,2);
y25=(1/1.1906e-10)^4*(0.0002^2)*k2*phi(:,3);
y35=(1/1.1906e-10)^4*(0.0002^2)*k3*y0;
ytot5=y0+y15+y25-(0.5)*y35;

figure(7)
plot(XX,ytot4,'r-','linewidth',2)
TT = ylabel('\psi_t_o_t','fontsize',12);
xlabel('nm')
title('fungsi gelombang terganggu R=2,25a_0 dan \lambda=0,0002')
set(TT,'fontsize',12)
axis([ 0.05 0.15 -0.5 1 ])
set(gca,'fontsize',12)
grid on

%----- fungsi gelombang terganggu untuk R=2.25a0 dan
lambda=0.0003
y16=(1/1.1906e-10)^2*(0.0003)*k1*phi(:,2);
y26=(1/1.1906e-10)^4*(0.0003^2)*k2*phi(:,3);
y36=(1/1.1906e-10)^4*(0.0003^2)*k3*y0;
ytot6=y0+y16+y26-(0.5)*y36;

figure(8)

```

```
plot(XX,ytot6,'r-','linewidth',2)
TT = ylabel('\psi_t_o_t','fontsize',12);
xlabel('nm')
title('fungsi gelombang terganggu R=2,25a_0 dan \lambda=0,0003')
set(TT,'fontsize',12)
axis( [ 0.05 0.15 -0.5 1 ])
set(gca,'fontsize',12)
grid on

%----- fungsi gelombang terganggu untuk R=2.5a0 dan lambda=0.0001
y17=(1/1.3229e-10)^2*(0.0001)*k1*phi(:,2);
y27=(1/1.3229e-10)^4*(0.0001^2)*k2*phi(:,3);
y37=(1/1.3229e-10)^4*(0.0001^2)*k3*y0;
ytot7=y0+y17+y27-(0.5)*y37;

figure(9)
plot(XX,ytot7,'r-','linewidth',2)
TT = ylabel('\psi_t_o_t','fontsize',12);
xlabel('nm')
title('fungsi gelombang terganggu R=2,5a_0 dan \lambda=0,0001')
set(TT,'fontsize',12)
axis( [ 0.05 0.15 -0.5 1 ])
set(gca,'fontsize',12)
grid on

%----- fungsi gelombang terganggu untuk R=2.5a0 dan lambda=0.0002
y18=(1/1.3229e-10)^2*(0.0002)*k1*phi(:,2);
y28=(1/1.3229e-10)^4*(0.0002^2)*k2*phi(:,3);
y38=(1/1.3229e-10)^4*(0.0002^2)*k3*y0;
ytot8=y0+y18+y28-(0.5)*y38;

figure(10)
plot(XX,ytot8,'r-','linewidth',2)
TT = ylabel('\psi_t_o_t','fontsize',12);
xlabel('nm')
title('fungsi gelombang terganggu R=2,5a_0 dan \lambda=0,0002')
set(TT,'fontsize',12)
axis( [ 0.05 0.15 -0.5 1 ])
set(gca,'fontsize',12)
grid on

%----- fungsi gelombang terganggu untuk R=2.5a0 dan lambda=0.0003
y19=(1/1.3229e-10)^2*(0.0003)*k1*phi(:,2);
y29=(1/1.3229e-10)^4*(0.0003^2)*k2*phi(:,3);
y39=(1/1.3229e-10)^4*(0.0003^2)*k3*y0;
ytot9=y0+y19+y29-(0.5)*y39;

figure(11)
plot(XX,ytot9,'r-','linewidth',2)
TT = ylabel('\psi_t_o_t','fontsize',12);
xlabel('nm')
title('fungsi gelombang terganggu R=2,5a_0 dan \lambda=0,0003')
set(TT,'fontsize',12)
axis( [ 0.05 0.15 -0.5 1 ])
set(gca,'fontsize',12)
```

```
grid on

%----- fungsi gelombang terganggu untuk R=2.75a0 dan
lambda=0.0001
y110=(1/1.4552e-10)^2*(0.0001)*k1*phi(:,2);
y210=(1/1.4552e-10)^4*(0.0001^2)*k2*phi(:,3);
y310=(1/1.4552e-10)^4*(0.0001^2)*k3*y0;
ytot10=y0+y110+y210-(0.5)*y310;

figure(12)
plot(XX,ytot10,'r-','linewidth',2)
TT = ylabel('\psi_t_o_t','fontsize',12);
xlabel('nm')
title('fungsi gelombang terganggu R=2,75a_0 dan \lambda=0,0001')
set(TT,'fontsize',12)
axis([ 0.05 0.15 -0.5 1 ])
set(gca,'fontsize',12)
grid on

%----- fungsi gelombang terganggu untuk R=2.75a0 dan
lambda=0.0002
y111=(1/1.4552e-10)^2*(0.0002)*k1*phi(:,2);
y211=(1/1.4552e-10)^4*(0.0002^2)*k2*phi(:,3);
y311=(1/1.4552e-10)^4*(0.0002^2)*k3*y0;
ytot11=y0+y111+y211-(0.5)*y311;

figure(13)
plot(XX,ytot11,'r-','linewidth',2)
TT = ylabel('\psi_t_o_t','fontsize',12);
xlabel('nm')
title('fungsi gelombang terganggu R=2,75a_0 dan \lambda=0,0002')
set(TT,'fontsize',12)
axis([ 0.05 0.15 -0.5 1 ])
set(gca,'fontsize',12)
grid on

%----- fungsi gelombang terganggu untuk R=2.75a0 dan
lambda=0.0003
y112=(1/1.4552e-10)^2*(0.0003)*k1*phi(:,2);
y212=(1/1.4552e-10)^4*(0.0003^2)*k2*phi(:,3);
y312=(1/1.4552e-10)^4*(0.0003^2)*k3*y0;
ytot12=y0+y112+y212-(0.5)*y312;

figure(14)
plot(XX,ytot12,'r-','linewidth',2)
TT = ylabel('\psi_t_o_t','fontsize',12);
xlabel('nm')
title('fungsi gelombang terganggu R=2,75a_0 dan \lambda=0,0003')
set(TT,'fontsize',12)
axis([ 0.05 0.15 -0.5 1 ])
set(gca,'fontsize',12)
grid on
```