

KAJIAN METODE ANALISA DATA *GOAL SEEK* (*MICROSOFT EXCEL*) UNTUK PENYELESAIAN PERSAMAAN SCHRÖDINGER DALAM MENENTUKAN KUANTISASI ENERGI DIBAWAH PENGARUH POTENSIAL LENNARD-JONES

W Kurniawan[✉], S Trihandaru, A Pattiserlihu

Jurusan Pendidikan Fisika dan Fisika, FMIPA Universitas Kristen Satya Wacana Salatiga, Indonesia

Info Artikel

Sejarah Artikel:

Diterima Februari 2016

Disetujui Maret 2016

Dipublikasikan

April 2016

Keywords:

Potensial Lennard-Jones;

Metode Euler; Goal Seek;

Kuantisasi Energi

Abstrak

Penyelesaian persamaan Schrödinger dengan berbagai model potensial sangat penting dilakukan untuk memberikan gambaran perilaku zarah di bawah pengaruh potensial tersebut. Solusinya berupa fungsi gelombang yang memuat informasi penting tentang perilaku gelombang yang ditunjukkan dengan energi terikatnya. Pada penelitian ini kasus yang ingin diteliti adalah model potensial Lennard-Jones dengan menggunakan metode analisa *goal seek* yang tersedia pada *Microsoft excel*. Persamaannya dijabarkan dengan metode Euler terlebih dahulu selanjutnya syarat batas ditentukan agar ketelitian hasil diperoleh. Agar perhitungan *goal seek* dapat dilakukan maka harus diubah dari besaran fisis menjadi besaran yang tidak berdimensi dimana parameter v menunjukkan keklasikan suatu sistem dan nilai ϵ menunjukkan kuantisasi energi. Hasil yang diperoleh adalah bahwa dengan memasukkan parameter kontrol nilai v tertentu, telah diperoleh beberapa keadaan energi dengan batas Z_{kiri} dan Z_{kanan} tertentu. Ketika masukan parameter v yang diberikan semakin besar keadaan energinya pun lebih rapat (ditunjukkan *energy state* yang diperoleh semakin banyak) dibandingkan bila masukan v -nya lebih kecil. Penelitian ini bermanfaat untuk menyederhanakan kasus potensial yang lebih rumit, dimana solusinya dapat diperoleh dengan mudah dan konsep kuantisasi energi akibat model potensial L-J dapat dipahami secara utuh.

Abstract

Solution of the Schrödinger equation in various potential model is very important in order to provide an overview of behaviour's particle under influence of potential model. The solution is a wave function that contains important information are shown by energy state. In this research, the investigated is Lennard Jones potential by using Goal Seek analysis which are available in Microsoft Excel. The equation is described by the Euler method and then boundary condition is determined to precision result which are obtained. It must be changed in terms dimensionless where parameter v is represent a classical system and ϵ as energy state. The obtained result is value of v that have been included with specific value, have been obtained several energy state with certain limit Z_{left} and Z_{right} . When the parameter input v is greater the more dense its energy state (it is shown by the more energy state that can be obtained) compare with the smaller v -output. This Research can be useful to simplify potential case a much complicated, where the solution can be obtained easily and the concept of energy quantized of L-J potential model can be understood as a whole.

© 2016 Universitas Negeri Semarang

[✉] Alamat korespondensi:

Gedung C Lantai dasar, Kampus UKSW,
Jalan Diponegoro 50-62, Salatiga, 50711

ISSN 0215-9945

PENDAHULUAN

Dalam Mekanika kuantum, mempelajari model potensial yang bekerja pada suatu skala atom maupun interaksi antar molekul sangat penting untuk dilakukan yang bertujuan memberikan gambaran perilaku zarah dibawah pengaruh potensial tersebut (Supardi 2002; Sesma 2013). Tidak seperti mekanika Newtonian dimana keterlibatan gaya yang bekerja padanya diselesaikan dengan persamaan matematika Hukum Newton sehingga diperoleh solusi, namun dengan mekanika kuantum tak relativistik persoalan yang harus diselesaikan merupakan persamaan Schrödinger yang dipengaruhi oleh potensial tertentu dan bukan gayanya. Pemecahannya berupa fungsi gelombang yang memuat informasi penting tentang perilaku gelombang akibat model potensial yang mempengaruhinya (De Vries *et al.* 1994) dan ditunjukkan oleh keberadaan energi terikatnya.

Model potensial yang ingin dikaji dalam penelitian ini adalah potensial Lennard-Jones (L-J) yang umumnya dipakai untuk menjelaskan interaksi lemah Van der Walls seperti interaksi atom netral atau molekul seperti gas inert (He, Ne, Ar bahkan O₂, N₂, CO) (Venkataram 2012; Oobatake 1972).

$$V(r) = V_0 \left(\left(\frac{r_m}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_m}{r} \right)^6 \right) \quad (1)$$

Potensial L-J yang bergantung jarak terhadap titik kesetimbangan ini akan menentukan apakah interaksi yang dialaminya merupakan dorongan atau tarikan sehingga interaksi akibat potensial ini perlu dikaji. Selain itu pentingnya penelitian ini perlu dilakukan karena bentuk potensialnya yang tidak simetris berdampak pada bentuk perpaduan fungsi gelombang pada setiap keadaan yang unik dan informasi penting kuantisasi energi perlu dicarikan solusinya sehingga tantangannya perhitungan analitis akan menjadi sulit untuk dikerjakan. Pada penelitian yang sudah dilakukan terkait untuk penyelesaian model potensial L-J dengan menggunakan persamaan matematis mencari dua titik singular (Sesma 2013) memerlukan kecakapan matematis dan penurunan yang panjang serta melibatkan bantuan komputasi. Bagi mahasiswa yang sedang memahami konsep kuantum penggunaan cara ini akan banyak memakan waktu sehingga mahasiswa terfokus kesulitan

matematisnya dan mempersyaratkan kecakapan komputasi numerik. Oleh karenanya diperlukan metode yang lebih sederhana sehingga konsep kuantisasi model potensial ini dapat dipahami dan menjembatani teknik lanjutan ke ranah komputasi untuk mencari solusi yang lebih teliti. Metode sederhana yang sudah berhasil diterapkan oleh peneliti sebelumnya adalah penggunaan analisa *goal seek* pada *Microsoft Excel* dengan pendekatan metode Euler untuk menyederhanakan persamaan Schrödinger kasus osilasi harmonik dan anharmonik (Desman *et al.* 2015). Keluaran yang didapatkan menunjukkan kecocokan hasil dan menjadi lebih ringkas meski tidak dapat dipungkiri bahwa metode Euler memiliki ketelitian yang rendah dibandingkan metode numerik lainnya. Namun cara ini dapat memperlihatkan konsep kuantisasi energi serta fungsi gelombang pada setiap keadaan sehingga konsep kuantum untuk penyelesaian kasus akibat potensial L-J dapat diperoleh lebih sederhana. Penyelesaian kasus dengan model potensial L-J ini akan diselesaikan dengan cara yang sama sehingga konsep kuantisasi energi dan fungsi gelombang untuk suatu keadaan diharapkan dapat diperoleh dengan lebih mudah.

METODE

Bentuk Persamaan Schrödinger untuk fungsi gelombang $R(r)$ dari partikel yang bermassa m yang terikat oleh potensial $V(r)$ dengan energi E dan momentum sudut l dinyatakan dalam persamaan (2) dibawah ini

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

Dengan mensubstitusikan potensial L-J ke persamaan (2) maka dapat ditulis menjadi

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} R(r) + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - V_0 \left(\left(\frac{r_m}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_m}{r} \right)^6 \right) \right) R(r) = 0 \quad (3)$$

Seperti pada umumnya untuk mensimulasikan keadaan kuantisasi atau solusi dari persamaan diferensial ini terhadap potensial Lennard-Jones (L-J) maka harus didefinisikan besaran tak berdimensi dari variable radial r menjadi z , parameter energinya sebagai ϵ dan potensial minimum yang menunjukkan kekuatan interaksi dinyatakan sebagai v .

$$z \equiv \frac{r}{r_m}, \quad \varepsilon = \frac{2mr_m^2}{\hbar^2} E \quad \text{dan} \quad v = \frac{2mr_m^2}{\hbar^2} V_0 \quad (4)$$

Sedangkan fungsi gelombang dalam koordinat radial di ubah ke besaran variable baru

$$\Psi(z) \equiv R(r) \quad (5)$$

Sehingga persamaan Schrödinger menjadi

$$\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} - \frac{l(l+1)}{z^2}\Psi(z) + \left(\varepsilon - v \left(\left(\frac{1}{z} \right)^{12} - 2 \left(\frac{1}{z} \right)^6 \right) \right) \Psi(z) = 0 \quad (6)$$

Atau persamaan (6) dapat dinyatakan sebagai

$$\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} = - \left[-\frac{l(l+1)}{z^2} + \left(\varepsilon - v \left(\left(\frac{1}{z} \right)^{12} - 2 \left(\frac{1}{z} \right)^6 \right) \right) \right] \Psi(z) \quad (7)$$

Persamaan ini dapat dijadikan sistem persamaan diferensial orde pertama sebagai berikut

$$\frac{d\Psi(z)}{dz} = \Phi, \quad \text{dan} \quad (8)$$

$$\frac{d\Phi(z)}{dz} = - \left[-\frac{l(l+1)}{z^2} + \left(\varepsilon - v \left(\left(\frac{1}{z} \right)^{12} - 2 \left(\frac{1}{z} \right)^6 \right) \right) \right] \Psi(z) = f(z, E) \Psi(z) \quad (9)$$

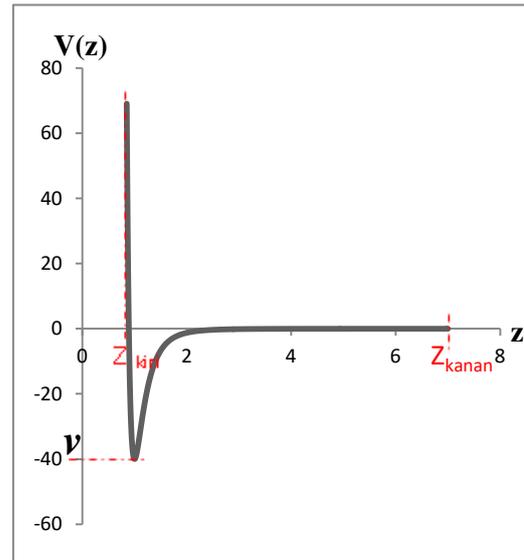
Persamaan (8) dan (9) didiskretisasi secara Euler (Semi Implisit) (Richard *et al.* 2006)

$$\Psi(z+ dz) = \Psi(z) + \Phi(z)dz \quad (10)$$

$$\Phi(z+ dz) = \Phi(z) + f(z, E)\Psi(z)dz \quad (11)$$

Dimana $f(z, E)$ merupakan bentuk lain dari diferensial orde kedua fungsi gelombang, z menyatakan jarak antar partikel dari titik pusat massa. Jumlah titik diskrit (N) yang digunakan adalah $N=2000$ dengan $\Delta z = \frac{(z_{kanan} - z_{kiri})}{N - 1}$ menggunakan sekecil mungkin sehingga $\Delta z = dz$. Dengan Asumsi $V_0 < E < 0$, maka $\Psi(z \rightarrow \infty) = 0$. Tentunya $\Psi(z \rightarrow 0) = 0$ karena disini potensialnya sangat tinggi. Dengan syarat batas kiri $\Psi(z \rightarrow 0) = 0$, dan $\Psi(z) \neq 0$ di z berhingga maka syarat batas kanan $\Psi(z \rightarrow \infty) = 0$. Penentuan syarat batas ini dapat dilihat pada Gambar

1. Setelah syarat batas ditentukan maka dapat dihitung dengan *goal seek* pada *Ms.Excel*. *Goal seek* dapat digunakan untuk menentukan nilai energi ε sesuai dengan persamaan yang dimasukkan, dimana hasil fungsi jika sesuai syarat batas harus bernilai nol maka *goal seek* dapat menentukan nilai energi yang cocok atau dapat dikatakan perhitungan fungsi terbalik dimana nilai fungsi dapat dicari dari nilai asalnya.



Gambar 1. Contoh Grafik Potensial L-J untuk menentukan syarat batas sebelum perhitungan goal seek dilakukan.

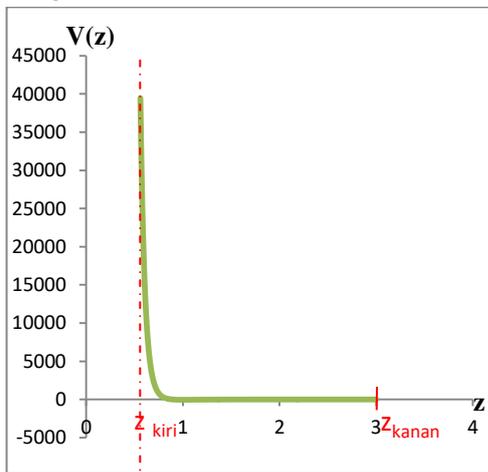
Solusi persamaan Schrödinger yakni tingkat energi E_n dan fungsi gelombang Ψ_n . Nilai keadaan energi E_n yang diperoleh dari analisa data *goal seek* dibandingkan terhadap hasil penelitian sebelumnya pada keadaan dasar E_0 (Sesma 2013). Literatur hanya menyajikan hasil nilai E_0 yang memiliki $v = -40$ pada setiap momentum sudut yang bervariasi dari $l=0$ hingga $l=5$, namun untuk melihat kecocokan hasil, pada penelitian ini hanya diberikan pada variasi $l=0$ hingga $l=2$ saja. Selain nilai keadaan energi E_0 yang diperbandingkan, grafik kuantisasi energi E_n untuk momentum sudut $l=0$ dan fungsi gelombang Ψ_n -nya juga diperlihatkan.

HASIL DAN PEMBAHASAN

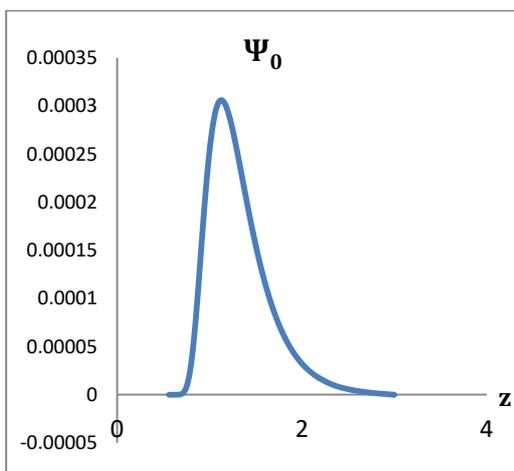
Pada penelitian ini untuk grafik potensial L-J (V_{L-J}) yang akan dicari solusinya perlu ditampilkan dalam grafik pada *Microsoft excel* untuk menentukan syarat batas karena pada kasus ini bentuk potensial yang akan diselesaikan tidak simetris sehingga

pemilihan syarat batas menjadi hal yang akan menentukan seberapa teliti hasil yang akan diperoleh. Syarat batas yang sudah ditentukan akan semakin baik dengan melihat langsung secara bersamaan dengan kecocokan hasil plot grafik Ψ_n . Kuantisasi bentuk fungsi gelombang pada keadaan dasar untuk potensial L-J harus memenuhi seperti halnya pada solusi fungsi gelombang osilasi harmonik Ψ_0 . Pada keadaan dasar Ψ_0 terbentuk satu bukit dan kondisi ini juga harus dipenuhi pada grafik Ψ_0 untuk potensial L-J.

Pada Gambar 2 diperlihatkan grafik potensial L-J terhadap jarak antar partikel yang dipergunakan untuk menentukan syarat batas dan grafik fungsi gelombang pada keadaan dasar Ψ_0 ditunjukkan pada Gambar 3 untuk menentukan apakah hasil perhitungan *goal seek* telah membentuk fungsi gelombang untuk suatu keadaan tertentu.



Gambar 2 Grafik potensial L-J terhadap jarak partikel dari suatu sistem yang memiliki nilai $v=-40$ dan momentum sudut $l=0$



Gambar 3 Grafik fungsi keadaan dasar yang terbentuk saat energi keadaan dasar terhitung dengan *goal seek*.

Syarat batas pada z kiri ditentukan berada pada nilai potensial yang tak berhingga $V(z)=\infty$ maka $\Psi(z_{kiri})=0$ harus dipenuhi karena tidak akan mungkin ada fungsi gelombang ataupun interaksi partikel yang berada pada batas potensial tersebut. Jika $\Psi(z_{kiri})\neq 0$ di z berhingga, maka syarat batas kanan $\Psi(z_{kanan}\rightarrow\infty)=0$, karena ketika pada jarak interaksi dua atom atau molekul yang cukup besar hingga mendekati tak berhingga maka tidak akan ada interaksi lagi sehingga fungsi gelombangnya nol. Pada gambar 2.2 untuk keadaan dasar $n=0$ dengan momentum sudut $l=0$ dan $v=-40$ pada batas $z_{kiri} = 0.67$ dan $z_{kanan}= 3$ sudah menunjukkan grafik Ψ_0 terbentuk satu bukit. Ketika hal ini sudah terpenuhi dengan menggunakan *goal seek*, hasil energi keadaan dasar yang dihitung adalah sebesar $\epsilon=-11.9090$. Hasil ini terbukti cocok dengan perhitungan menggunakan komputasi numerik yang telah dilakukan sebelumnya dimana hasil $\epsilon=-11.9091$ (Sesma 2013). Sedangkan hasil energi keadaan dasar untuk momentum sudut $l=1$ dan $l=2$ diberikan pada Tabel 1.

Tabel 1. Tabel perbandingan nilai energi pada keadaan dasar E_0 hasil perhitungan dengan *goal seek* dibandingkan hasil dari literatur pada berbagai variasi momentum sudut l .

Momentum sudut (l)	Syarat Batas		Nilai E_0	
	z_{kiri}	z_{kanan}	<i>Goal Seek</i>	Literatur (Sesma, 2013)
0	0.67	3	-11,9090	-11.9091
1	0.56	2.5	-9.90346	-10.4652
2	0.56	3	-5.90905	-7.6296

Dari hasil tersebut menunjukkan bahwa E_0 dengan momentum sudut yang bervariasi, nilai yang diperoleh dari perhitungan *goal seek* hampir mendekati literatur. E_0 dengan momentum sudut $l=0$ adalah yang paling akurat, namun untuk $l=1$ dan $l=2$ hasilnya memiliki error yang cukup besar. Hal ini sudah dipahami bahwa penentuan syarat batas akan memperkecil error, sehingga pemilihannya harus tepat. Selain itu juga disadari bahwa penggunaan metode Euler merupakan metode numerik yang memiliki ketelitian yang kecil, namun penerapan untuk penyederhanaan matematis sangat mudah dipahami tanpa melibatkan penurunan matematis yang rumit. Selanjutnya untuk menentukan energi keadaan dasar ke-1 dan setelahnya, dengan nilai $v=-40$ dan momentum sudut $l=0$, *goal seek* di pakai untuk

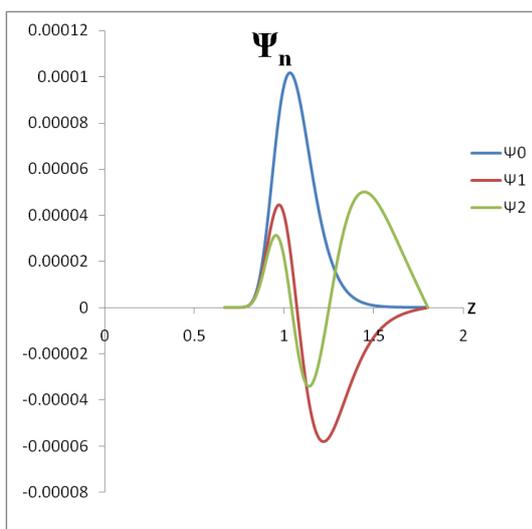
menentukan nilainya. Hasil keadaan kuantisasi setelahnya ternyata tidak didapati karena grafik fungsi gelombang tidak memperlihatkan bentuk kuantisasi saat $n=1$. Dalam penelitian warsono, agar keadaan kuantisasi setelah energi dasar terbentuk, maka potensial minimum yang dinyatakan sebagai parameter v atau dalam penelitian ini sebagai v harus diperbesar lebih dari -40.

Mengacu penelitian Sesma, nilai parameter v diubah menjadi -376.02 dengan momentum sudut $l=0$ karena hasil perhitungan *goal seek* memiliki ketelitian yang paling tinggi. Dengan nilai v tersebut, keluaran menunjukkan adanya kuantisasi energi dari $n=0$ hingga $n=2$ yang diperlihatkan dalam Tabel 2.

Tabel 2. Perbandingan nilai energi setiap keadaan E_n hasil perhitungan *goal seek* dengan nilai v yang berbeda

Momentum sudut (l)	Nilai E_n Hasil Perhitungan <i>Goal Seek</i>	
	$v = -40$	$v = -376.02$
0	-11,909	-269.9668
1	-	-120.5062
2	-	-35.3707

Setiap solusi energi setiap keadaan E_n yang didapatkan, kebenarannya dapat dibuktikan dengan adanya kesesuaian teori. Solusi yang dinyatakan sebagai fungsi gelombang yang menunjukkan keberadaan energi terikatnya akan membentuk grafik fungsi gelombang sebagaimana diperlihatkan pada Gambar 4.



Gambar 4. Grafik fungsi gelombang yang terbentuk dari keadaan $n=0$ hingga $n=2$ untuk nilai $v = -376.02$.

Hal ini dapat dijelaskan bahwa besarnya $v = \frac{2mr_m^2}{\hbar^2} V_0$ merupakan parameter alamiah yang menentukan sifat keklasikan dari sistem yang ditinjau (Koonin, 1990). Sistem klasik artinya massa yang dimilikinya jauh lebih besar dari nilai \hbar . Semakin besar nilai v maka keadaan energi yang terbentuk akan semakin banyak. Hal ini dapat dipahami karena nilai v yang besar menunjukkan massa sistem yang besar pula. Massa yang besar menimbulkan gaya Coulomb yang dibangun antara dua partikel semakin besar, sehingga energi yang diperlukan untuk memisahkan ikatannya lebih besar bila dibandingkan terhadap partikel yang tersusun atas atom-atom yang bermassa kecil (Warsono *et al.* 2002). Partikel dengan massa yang besar juga memiliki potensial yang besar pula untuk menjamin partikel tetap berada pada ikatannya. Sehingga setiap interaksi partikel yang berbeda akan memiliki karakteristik v yang khas. Misalnya dari partikel yang memiliki nilai $v=-40$ membutuhkan energi untuk memisahkan partikel (energi disosiasi) dari keadaan dasar sebesar -11.909. Energi disosiasinya jauh lebih kecil apabila dibandingkan terhadap partikel dengan nilai $v=-376.02$, yang membutuhkan energi disosiasi pada keadaan dasar sebesar -269.9668. Seperti halnya sistem untuk kasus dengan model potensial sumur berhingga, semakin besar nilai v yang artinya potensial sumur tersebut semakin dalam akan menunjukkan kekuatan gaya tarik antar partikel yang semakin besar. Jika sumur potensial tersebut semakin dalam maka semakin banyak pula keadaan-keadaan yang mungkin.

SIMPULAN

Penelitian yang telah dilakukan untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger untuk model potensial Lennard-Jones(L-J) dengan menggunakan analisa data *Goal Seek* (pada *Ms. Excel*) dapat diambil beberapa kesimpulan diantaranya (1) didapatkan solusi pemecahan yakni berupa tingkat energi E_n dan fungsi gelombang Ψ_n secara lebih mudah dengan hasil yang cukup baik, (2) konsep kuantisasi energi akibat potensial L-J menyatakan bahwa semakin besar nilai potensial minimum v maka sistem yang ditinjau semakin klasik, (3) masukan terhadap parameter nilai v tertentu akan menentukan cacah atau banyaknya keadaan energi (*energy state*) sistem dibawah

pengaruh model potensial L-J. Setiap keadaan untuk interaksi potensial pasangan dari partikel tertentu memiliki nilai energi spesifik tertentu, (4) sistem yang terpengaruh oleh model potensial L-J akan melakukan osilasi dengan batas z_{kiri} dan z_{kanan} tertentu.

DAFTAR PUSTAKA

Desman PG, Suryasatriya & Shanti MRS. 2015. *Simple Learning Using Goal Seek (Microsoft Excel) about Anharmonik Oscillator Potential in Quantum Mechanics Class*. International Conferences on Mathematics, Science and Education.

De Vries PL. 1994. *A Fisrt Course In Computational Physics*, New York: John Wiley & Sons, Inc.

Koonin SE & Meredith DC. 1990. *Computational Physics*, USA: Addison- Wesley Publishing Company, Inc.

Oobatake M & Ooi T. 1972. *Determination of Energy Parameters in Lennard-Jones Potentials from Second Virial Coefficients*. Progress of

Theoretical Physics, 48, (6). Diunduh dari : <http://ptp.oxfordjournals.org> pada tanggal 18 Agustus 2015

Richard B & Gabriel C. 2006. *Persamaan Diferensial. Edisi ketiga*. Penerbit Erlangga.

Sesma J. 2013. Exact solution of the Schrödinger equation with a Lennard-Jones potential. *Journal of Mathematical Chemistry* 51: 1881-1896.

Supardi. 2002. Perilaku Fungsi Gelombang Sistem Potensial Sumur Berhingga. *Jurnal Pendidikan Matematika dan Sains* VII.

Venkataram PS. 2012. *Final Project: Properties of the Lennard-Jones Potential*. Diunduh dari: http://en.wikipedia.org/wiki/Lennard-Jones_potential.

Warsono, Supahar & Supardi. 2002. *Laporan Penelitian: Kajian Komputasi Kuantisasi Semiklasik Vibrasi Molekuler Sistem Dibawah Pengaruh Potensial Lennard-Jones (Potensial 12-6)*. Universitas Negeri Yogyakarta.