# Perhitungan Energi *Ground State* Atom Berilium dengan Menggunakan Metode Variasional

Y. Yulianto[1,a)], R. Ramdani[2,b)], M. S. Abidin[3,c)] dan Z. Su'ud[1,d)]

[1]Kelompok Keilmuan Fisika Nuklir dan Biofisika, Jurusan Fisika,
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung,
Jl. Ganesha No. 10 Bandung, Indonesia, 40132

[2]Jurusan Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, UIN Sunan Gunung Djati Bandung,
Jl. A. H. Nasution No. 105, Bandung, Indonesia, 40164

[3]Program Studi Teknik Elektromedik, STIKES Mandala Waluya Kendari,
Jl. Jend. A.H. Nasution No. G-37, Kendari, Indonesia, 93231

[a)] yacyulianto@gmail.com (corresponding author)
[b)] ridwan@fst.uinsgd.ac.id
[c)] sainalxp2@gmail.com
[d)] szaki@fi.itb.ac.id

## Abstrak

*Sifat-sifat ground state suatu atom, khususnya yang berkaitan dengan energi ground state, dapat dikaji dengan menggunakan beberapa metode. Salah satu metode yang dapat digunakan adalah metode variasional. Dalam studi ini, rumusan energi ground state atom Berilium telah diturunkan dengan menggunakan metode variasional. Proses perhitungan pun telah dilakukan dengan menggunakan program Matlab. Dari hasil perhitungan, dengan menggunakan metode variasional 1 parameter variasi, diperoleh nilai energi sebesar -386,662 eV (3,12 % dari energi referensi). Dengan menggunakan metode variasional 2 parameter variasi, diperoleh nilai energi sebesar -398,614 eV (0,12% dari energi referensi). Dari hasil tersebut terlihat bahwa nilai energi ground state yang diperoleh cukup mendekati nilai energi referensi. Hal ini mengindikasikan bahwa metode variasional cukup baik dalam menjelaskan sifat-sifat ground state suatu atom, khususnya yang berkaitan dengan energi ground state.*

*Kata-kata kunci: atom Berilium, energi ground state, metode variasional, Nelder-Mead.*

## PENDAHULUAN

Dalam mengkaji sifat-sifat atom, terutama yang berkaitan dengan energi *ground state*, selain menggunakan metode *Hartree-Fock*, metode variasional juga terbukti cukup baik dalam menjelaskan hasil eksperimen energi *ground state* atom. Hal ini dapat dilihat dari hasil perhitungan energi yang diperoleh dengan menggunakan metode variasional untuk atom Helium [1,2], Litium [3,4], dan Boron [5].

Dalam studi ini, atom Berilium dipilih untuk diturunkan rumusan energi *ground state*-nya karena secara teori, konfigurasi elektron atom Berilium adalah $1s^2\ 2s^2$, di mana seluruh kulit *s* terisi penuh (kulit *s* dapat menampung maksimal dua elektron), sehingga konfigurasi ini cukup menarik untuk diteliti, sebagaimana yang telah dilakukan oleh peneliti sebelumnya.

Rumusan energi *ground state* atom Berilium diturunkan dengan menggunakan teori gangguan dan metode variasional karena kedua metode ini telah banyak digunakan dalam memperoleh solusi pendekatan untuk atom berelektron lebih dari satu [1,6]. Prinsip dasar dari metode variasional adalah meminimalisasi fungsi

gelombang untuk memperoleh nilai efektif parameter yang digunakan sehingga energi *ground state* atom dapat dihitung. Tujuan dari studi ini adalah untuk menghitung energi *ground state* atom Berilium dengan menggunakan teori gangguan dan metode variasional.

## TEORI, SOLUSI ANALITIK, DAN METODE OPTIMASI

Operator Hamiltonian (non-relativistik) untuk atom berelektron lebih dari satu dapat dinyatakan sebagai [6,7]:

$$\hat{H}_{NR} = \sum_{i=1}^{4}\left(-\frac{1}{2}\nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i}\right) + \sum_{i=1}^{4}\sum_{j>i}\frac{1}{r_{ij}} \tag{1}$$

dengan Z adalah nomor atom yang diteliti. Untuk atom Berilium, operator Hamiltonian yang digunakan adalah [8]

$$\hat{H} = \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\left(\left[\nabla_1^{\,2}+\nabla_2^{\,2}\right]+\left[\nabla_3^{\,2}+\nabla_4^{\,2}\right]\right) - e^2\left(\left[\frac{4}{r_1}+\frac{4}{r_2}\right]+\left[\frac{4}{r_3}+\frac{4}{r_4}\right]\right)+\frac{e^2}{r_{12}}+\left[\frac{e^2}{r_{23}}+\frac{e^2}{r_{14}}+\frac{e^2}{r_{24}}+\frac{e^2}{r_{13}}\right]+\frac{e^2}{r_{34}}-2K_{1s2s}\right) \tag{2}$$

dengan $\hbar$ adalah konstanta Plank tereduksi, *m* adalah massa elektron, *e* adalah muatan elektron, *r* adalah jarak elektron terhadap inti atom (untuk yang berindeks tunggal) dan jarak antar-elektron (untuk yang berindeks ganda), dan $K_{1s2s}$ adalah suku pertukaran. Empat suku pertama adalah energi kinetik elektron, empat suku kedua adalah energi potensial yang terjadi akibat interaksi elektron dengan inti atom, enam suku ketiga merupakan suku interaksi antar-elektron, dan suku terakhir merupakan suku pertukaran. Fungsi gelombang yang digunakan adalah fungsi gelombang atom Hidrogen, yang dinyatakan sebagai [7]

$$\varphi_{100}(r) = \left(\frac{\alpha_1^{\,3}}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \exp^{(-\alpha_1 r)} \tag{3}$$

$$\varphi_{200}(r) = \left(\frac{\alpha_2^{\,3}}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (2-\alpha_2 r)\exp^{\left(-\frac{\alpha_2 r}{2}\right)} \tag{4}$$

di mana $\alpha_n = Z_n/a_0$ adalah parameter variasi, dengan $n=1,2$ dan $a_0$ adalah radius *Bohr* [1]. Dari pers. (1), dapat diturunkan fungsi energi atom Berilium yang dinyatakan sebagai [8]:

$$\begin{aligned} E = {} & 2\int \psi_{1s}\left[\hat{H}_0\right]\psi_{1s}\,dt + 2\int \psi_{2s}\left[\hat{H}_0\right]\psi_{2s}\,dt + \int \psi_{1s}(1)\left[\frac{1}{\vec{r}_{12}}\right]\psi_{1s}(2)\,dt_1\,dt_2 + 4\int \psi_{1s}(1)\left[\frac{1}{\vec{r}_{12}}\right]\psi_{2s}(2)\,dt_1\,dt_2 \\ & + \int \psi_{2s}(3)\left[\frac{1}{\vec{r}_{34}}\right]\psi_{2s}(4)\,dt_3\,dt_4 - 2\int \psi_{1s}(1)\psi_{2s}(1)\left[\frac{1}{\vec{r}_{12}}\right]\psi_{1s}(2)\psi_{2s}(2)\,dt_1\,dt_2 \end{aligned} \tag{5}$$

Selanjutnya, pers. (5) disederhanakan sedemikian sehingga diperoleh rumusan

$$\begin{aligned} E = {} & 2\int \varphi_{100}^*(\vec{r}_1)\left[\tfrac{-\hbar^2}{2m}\nabla_1^{\,2}\right]\varphi_{100}(\vec{r}_1)\,d^3\vec{r}_1 + 2\int \varphi_{200}^*(\vec{r}_3)\left[\tfrac{-\hbar^2}{2m}\nabla_2^{\,2}\right]\varphi_{200}(\vec{r}_3)\,d^3\vec{r}_3 + 2\int \varphi_{100}^*(\vec{r}_1)\left[\tfrac{-4e^2}{r_1}\right]\varphi_{100}(\vec{r}_1)\,d^3\vec{r}_1 \\ & + 2\int \varphi_{200}^*(\vec{r}_3)\left[\tfrac{-4e^2}{r_3}\right]\varphi_{200}(\vec{r}_3)\,d^3\vec{r}_3 + \int \varphi_{100}^*(\vec{r}_1)\varphi_{100}^*(\vec{r}_2)\left[\frac{1}{\vec{r}_{12}}\right]\varphi_{100}(\vec{r}_1)\varphi_{100}(\vec{r}_2)\,d^3\vec{r}_1\,d^3\vec{r}_2 \\ & + 4\int \varphi_{100}^*(\vec{r}_2)\varphi_{200}^*(\vec{r}_3)\left[\frac{e^2}{\vec{r}_{23}}\right]\varphi_{100}(\vec{r}_2)\varphi_{200}(\vec{r}_3)\,d^3\vec{r}_2\,d^3\vec{r}_3 + \int \varphi_{200}^*(\vec{r}_3)\varphi_{200}^*(\vec{r}_4)\left[\frac{1}{\vec{r}_{34}}\right]\varphi_{200}(\vec{r}_3)\varphi_{200}(\vec{r}_4)\,d^3\vec{r}_3\,d^3\vec{r}_4 \\ & - 2\int \varphi_{100}^*(\vec{r}_1)\varphi_{100}^*(\vec{r}_3)\left[\frac{e^2}{\vec{r}_{13}}\right]\varphi_{200}(\vec{r}_1)\varphi_{200}(\vec{r}_3)\,d^3\vec{r}_1\,d^3\vec{r}_3 \end{aligned} \tag{6}$$

Dari hasil penurunan rumusan, jika $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ (1 parameter variasi), diperoleh hubungan sebagai berikut:

$$\begin{aligned} E(\alpha) = {} & 2\left(\frac{\alpha^2}{2}e^2a_0\right) + 2\left(\frac{\alpha^2}{8}a_0e^2\right) + 2\left(-4\alpha e^2\right) + 2\left(-\frac{4\alpha}{4}e^2\right) \\ & + \left(\frac{5}{8}\alpha e^2\right) + 4\left(\frac{17}{81}\alpha e^2\right) + \left(\frac{77}{512}\alpha e^2\right) - 2\left(\frac{16}{729}\alpha e^2\right) \end{aligned} \tag{7}$$

Jika $\alpha_1 \neq \alpha_2$ (2 parameter variasi), maka diperoleh rumusan sebagai berikut:

$$E(\alpha_1,\alpha_2)=2\left(\frac{\alpha_1^{\,2}}{2}\right)e^2+2\left(\frac{\alpha_2^{\,2}}{8}\right)e^2+2(-4\alpha_1)e^2+2\left(-\frac{4\alpha_2}{4}\right)e^2+\left(\frac{5}{8}\alpha_1\right)e^2+\frac{77}{512}\alpha_2 e^2 + 4\left(\frac{8\alpha_1^{\,5}\alpha_2+20\alpha_1^{\,4}\alpha_2^{\,2}+12\alpha_1^{\,3}\alpha_2^{\,3}+10\alpha_1^{\,2}\alpha_2^{\,4}+\alpha_1\alpha_2^{\,5}}{32\alpha_1^{\,5}+80\alpha_1^{\,4}\alpha_2+80\alpha_1^{\,3}\alpha_2^{\,2}+40\alpha_1^{\,2}\alpha_2^{\,3}+10\alpha_1\alpha_2^{\,4}+\alpha_2^{\,5}}\right)e^2-2\left(\frac{16}{729}\alpha_1\right)e^2 \quad (8)$$

Dalam melakukan proses optimasi, digunakan metode *Nelder-Mead* karena metode ini tidak membutuhkan derivatif (turunan) dari fungsi yang dioptimasi. Metode ini sangat berguna untuk mengoptimasi permasalahan komputasi dengan menggunakan metode numerik atau permasalahan yang deskripsi analitik untuk gradiennya tidak diketahui [9]. Sebagai contoh, terdapat fungsi $f(x,y)$ yang akan dioptimasi. Sebagai langkah awal, diambil tiga titik koordinat awal, yakni $(x_1,y_1)$, $(x_2,y_2)$, dan $(x_3,y_3)$. Setelah masing-masing titik koordinat ini dimasukkan ke dalam fungsi, maka ketiga koordinat awal diberi notasi dengan ketentuan sebagai berikut: $B=(x_1,y_1)$ sebagai *vertex* terbaik 1 (*vertex* yang memberi nilai paling minimum), $G=(x_1,y_1)$ sebagai *vertex* terbaik 2, dan $W=(x_1,y_1)$ sebagai *vertex* terbaik 3. Selanjutnya, dilakukan proses sesuai algoritma berikut:

Tabel 1. Algoritma metode *Nelder-Mead* [10].

Jika $f(R)<f(G)$, maka
  Lakukan Alur i
Jika tidak
  Lakukan Alur ii

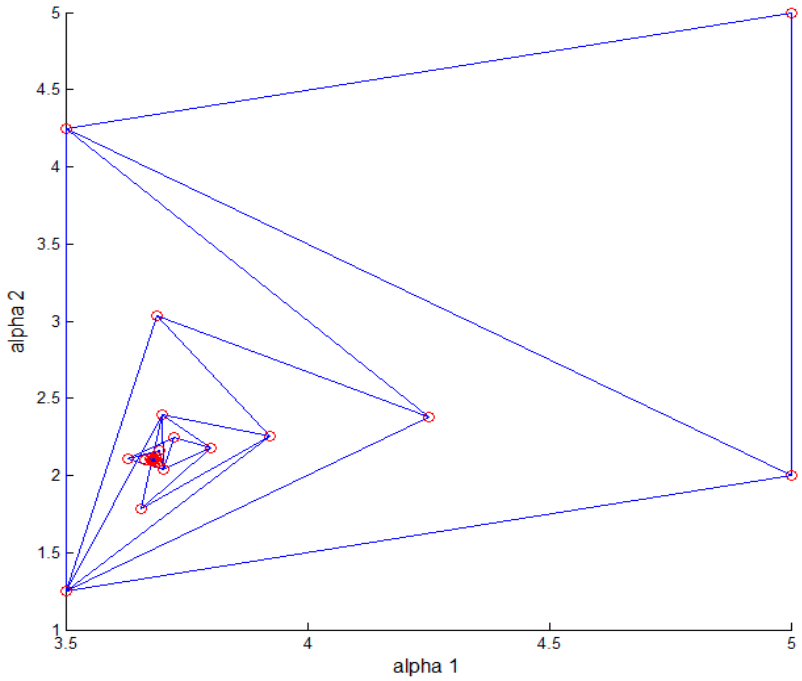
| Alur i | Alur ii |
|---|---|
| $R=2\mathrm{M}-\mathrm{W}$ | $M=(B+G)/2$ |
| $E=2\mathrm{R}-\mathrm{M}$ | Mulai |
| Mulai | Jika $f(B)<f(W)$ maka |
| Jika $f(B)<f(R)$ maka | Gantikan W dengan R |
| Gantikan W dengan R | Hitung $C=(W+M)/2$ |
| Jika tidak | atau $C=(R+M)/2$ dan $f(C)$ |
| Hitung E dan $f(E)$ | Jika $f(C)<f(W)$ maka |
| Jika $f(E)<f(B)$ maka | Gantikan W dengan C |
| Gantikan W dengan E | Jika tidak |
| Jika tidak | Hitung S dan $f(S)$ |
| Gantikan W dengan R | Gantikan W dengan S |
| Selesai | Gantikan G dengan M |
| Selesai | Selesai |
| Ulangi hingga konvergen | Ulangi hingga konvergen |
| Selesai | Selesai |

## METODE, HASIL, DAN ANALISIS PERHITUNGAN

Dalam studi ini, energi atom Berilium yang dijadikan referensi merupakan hasil yang diperoleh oleh Bransden dan Joachain, yakni sebesar -399,110 eV. Untuk perhitungan dengan menggunakan 1 parameter variasi, diperoleh nilai $\alpha=3{,}372$ dengan nilai energi sebesar -386,662 eV (3,12 % dari energi referensi). Selanjutnya dilakukan perhitungan dengan menggunakan dua parameter variasi. Proses perhitungan dilakukan dengan bantuan *script-code* yang ditulis dalam bahasa Matlab, di mana nilai tebakan awal untuk *vertex* adalah [2 4; 4 2; 4 4] dengan toleransi konvergensi energi sebesar $10^{-20}$ eV. Proses optimasi dengan menggunakan metode *Nelder-Mead* untuk perhitungan kedua ini dapat dilihat pada gambar 1.

Dari hasil perhitungan, diperoleh nilai $\alpha_1=3{,}681$ dan $\alpha_2=2{,}099$ dengan nilai energi yang dihasilkan sebesar -398,614 eV (0,1241 % dari energi referensi). Hasil perhitungan yang diperoleh lebih mendekati nilai energi referensi jika dibandingkan dengan nilai energi hasil perhitungan pertama. Adapun hasil perhitungan untuk masing-masing suku energi dapat dilihat pada Tabel 2. Dalam studi ini, hasil perhitungan yang telah diperoleh juga dibandingkan dengan hasil perhitungan yang diperoleh oleh beberapa peneliti, yang disajikan pada Table 3. Dari Tabel 3, terlihat bahwa hasil yang diperoleh telah cukup baik mendekati hasil yang diperoleh oleh beberapa peneliti sebelumnya, khususnya Baretti. Perbedaan mendasar antara studi ini dan Baretti terletak pada proses optimasi, di mana pada proses optimasi yang dilakukan oleh Baretti, terlebih dahulu diatur nilai $\alpha_1$ pada posisi konstan, yakni sebesar $\alpha_1=Z-\frac{5}{16}$, dan selanjutnya dilakukan optimasi

untuk $\alpha_2$ dengan metode pencocokan kurva. Hal ini tidak dilakukan dalam studi ini, di mana nilai $\alpha_1$ dan $\alpha_2$ tidak diatur, melainkan diperoleh berdasarkan hasil optimasi yang dilakukan dengan menggunakan metode *Nelder-Mead*. Hasil yang diperoleh pun cukup mendekati nilai energi referensi. Hal ini mengindikasikan bahwa metode *Nelder-Mead* cukup baik dalam menyelesaikan kasus optimasi.




Gambar 1. Proses optimasi dengan menggunakan metode *Nelder-Mead*.

Tabel 2. Hasil perhitungan energi *ground state* untuk masing-masing suku energi atom Berilium.

| Parameter | Nilai Energi (eV) |
|---|---|
| $E_{tanpa\ koreksi}$ | -544,228 |
| $\Delta E_{12}$ | 68,028 |
| $\Delta E_{23}$ | 22,844 |
| $\Delta E_{34}$ | 16,369 |
| $\Delta E_{1s2s}$ | -4,778 |
| $\Delta E_{terkoreksi}$ | 170,997 |
| $E_{terkoreksi}$ | -373,231 |
| $E_{variasional}$ (1 parameter) | -386,662 |
| $E_{variasional}$ (2 parameter) | -398,614 |

Tabel 3. Perbandingan hasil perhitungan energi *ground state* atom Berilium.

| Referensi | Tahun | Metode | Energi (a.u.) | Energi (eV) |
|---|---|---|---|---|
| Bransden dan Joachain [6] | 1983 | *Hartree-Fock* | -14,573 | -396,552 |
| | | eksak* | -14,667 | -399,110 |
| M. Tabasco [11] | 1997 | variasional | -14,325 | -389,800 |
| M. Puchalski, dkk. [12] | 2013 | *quantum electrodynamics* | -14,667 | -399,122 |
| Baretti [8] | 2013 | variasional (1 parameter) | -14,200 | -386,402 |
| | | variasional (2 parameter) | -14,640 | -398,375 |
| Studi ini | 2017 | variasional (1 parameter) | -14,210 | -386,662 |
| | | variasional (2 parameter) | -14,649 | -398,614 |

* dijadikan sebagai energi referensi

## KESIMPULAN

Dalam studi ini, telah dilakukan penghitungan energi *ground state* atom Berilium dengan menggunakan metode variasional. Proses perhitungan dilakukan dengan menggunakan program Matlab. Dari hasil perhitungan, diperoleh nilai energi sebesar -386,662 eV (3,12 % dari energi referensi) dengan menggunakan metode variasional 1 parameter variasi. Dengan menggunakan metode variasional 2 parameter variasi, diperoleh nilai energi sebesar -398,614 eV (0,12% dari energi referensi). Dari hasil tersebut, terlihat bahwa nilai energi *ground state* yang diperoleh dengan menggunakan metode variasional cukup mendekati energi referensi. Hal ini mengindikasikan bahwa metode variasional cukup baik dalam menjelaskan sifat-sifat *ground state* atom, khususnya yang berkaitan dengan energi *ground state*.

## UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Laboratorium Nuklir Lanjut Jurusan Fisika FMIPA ITB yang telah mendanai dan memfasilitasi penelitian ini. Penulis juga mengucapkan terima kasih kepada Prof. Reinaldo Baretti Machín (Brazil) untuk diskusi dan sarannya kepada penulis.

## REFERENSI

1. D. Griffith, *Introduction to Quantum Mechanics*. Prentice Hall, New Jersey (1995)
2. X.-Q. Hu, J. Xu, Y. Ma, dan R.-L. Zheng, *Four-Parameter Scheme for Ground Level of Helium Atom*, Commun. Theor. Phys. **45** (2006)
3. D. K. McKenzie dan G. W. F. Drake, *Variational calculation for the ground state of lithium and the QED corrections for Li-like ions*, Phys. Rev. A **44** (11) (1991)
4. M. Puchalski dan K. Pachucki, *Ground-state wave function and energy of the lithium atom*, Phys. Rev. A **73** (2006)
5. M. B. Ruiz dan M. Rojas, *Variational Calculations on the $^2P_{1/2}$ ground state of boron atom using hydrogenlike orbitals*, Computational Methods in Science and Technology **9** (1-2) (2003)
6. B. H. Bransden dan C. J. Joachain, *Physics of Atoms and Molecules*. John Wiley & Sons, New York (1983)
7. R. Eisberg, *Quantum Mechanics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles. Second Edition*, John Wiley & Sons, New York (1985)
8. R. Baretti, *Ground State Energies of Lithium and Beryllium*, http://www1.uprh.edu/rbaretti/LQMch11.htm, diakses Agustus 2017
9. W. Press, S. Teukolsky, W. Vetterling, dan B. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 90: The Art of Parallel Scientific Computing - Second Edition*. Press Syndicate of the University of Cambridge, New York (1996)
10. J. Mathews dan K. Fink, *Numerical Methods Using Matlab - Third Edition*. Prentice Hall, New Jersey (1999)
11. M. Tambasco, 1997. *Variational calculations for the lithium isoelectronic sequence*. Master Thesis. University of Windsor, Canada. http://www.collectionscanada.gc.ca/obj/s4/f2/dsk2/ftp01/MQ31007.pdf
12. M. Puchalski, J. Komasa, dan K. Pachucki, *Testing quantum electrodynamics in the lowest singlet states of beryllium atom*, Phys. Rev. A **87** (2013)