

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang Masalah

Mekanika kuantum merupakan ilmu yang mengkaji tentang perilaku partikel mikroskopik, seperti atom dan inti (Suparmi, 2017). Kajian yang berkaitan dengan atom dan inti atom salah satunya yaitu kajian tentang spektrum tingkat energi yang diungkapkan oleh teori Bohr. Teori Bohr merupakan salah satu teori yang menyatakan spektrum tingkat energi atom hidrogen. Bohr menganggap elektron mengorbit di sekitar proton. Spektrum tingkat energi atom ditemukan dengan perhitungan menggunakan persamaan Schrodinger (Indiani, 2022).

Penyelesaian menggunakan persamaan Schrodinger menghasilkan fungsi gelombang orbital elektron, energi orbital, energi potensial, dan energi total. Hasil-hasil tersebut digunakan untuk menggambarkan keadaan fungsi gelombang atom dengan elektron banyak. Persamaan Schrodinger dibentuk dari konsep operator energi (Hamiltonian). Operator energi (Hamiltonian) dapat digunakan pada teori *Self-Consistent Field* dengan metode Hartree-Fock untuk menyelesaikan solusi atom dengan elektron banyak (Mascar, 2021).

Metode Hartree-Fock dapat digunakan untuk menentukan hasil dari energi orbital, energi potensial, dan energi total dari atom dengan elektron

banyak. Metode Hartree-Fock menghasilkan fungsi gelombang konfigurasi tunggal yang sangat baik dari atom yang memiliki elektron banyak (Chen *et al.* 2020). Metode Hartree-Fock dengan model komputasi dapat digunakan secara baik untuk menentukan keadaan dasar atom banyak elektron menggunakan perhitungan *Self-Consistent Field* (Abou Taka *et al.* 2021). Untuk menghitung *Self-Consistent Field*, metode kimia komputasi dapat digunakan dengan mengacu orbital spin, interaksi dari konfigurasi elektron, dan bentuk lain dari fungsi gelombang yang dihasilkan oleh metode Hartree-Fock (Abou Taka *et al.* 2021).

Konsep keadaan dasar atom banyak elektron dengan perhitungan *Self-Consistent-Field* untuk mencapai keadaan setimbang, dijelaskan dalam firman Allah SWT dalam Q.S Al-Mulk ayat 3, yang berbunyi:

الَّذِي خَلَقَ سَبْعَ سَمَاوَاتٍ طِبَاقًا ۗ مَا تَرَىٰ فِي خَلْقِ الرَّحْمَنِ مِن تَفْوُتٍ ۗ
فَارْجِعِ الْبَصَرَ ۖ هَلْ تَرَىٰ مِن فُطُورٍ (۳)

Artinya: *Yang menciptakan tujuh langit berlapis-lapis. Tidak akan kamu lihat sesuatu yang tidak seimbang pada ciptaan Tuhan Yang Maha Pengasih. Maka lihatlah sekali lagi, adakah kamu lihat sesuatu yang cacat? (3).*

Pada firman Allah dalam Q.S Al-Mulk ayat 3 menjelaskan bahwa Allah telah menciptakan langit berlapis-lapis dengan terpisah-pisah antara langit yang satu dengan langit yang lain memiliki jeda dan semua ciptaan Allah memiliki kesempurnaan dan keseimbangan. Seperti yang dapat kita lihat segalanya tampak sempurna, Allah SWT menciptakan segalanya

sempurna sesuai dengan porsinya masing-masing. Tidak ada yang aneh pada masing-masing ciptaan Allah. Manusia dengan bentuknya yang sempurna, gunung-gunung dengan bentuknya yang sempurna, laut dengan kesempurnaannya, pepohonan yang rindang, hewan-hewan dengan bentuknya yang khas, semuanya diciptakan sesuai porsinya masing-masing, tak terkecuali makhluk kecil yang juga diciptakan dengan kesempurnaan dengan keseimbangan yang baik. Salah satu makhluk yang diciptakan dengan kesempurnaan adalah atom. Atom merupakan makhluk kecil yang di ciptakan oleh Allah SWT yang memiliki kecenderungan untuk mencapai keadaan seimbang. Hal tersebut terjadi karena Allah SWT sudah menetapkan dan menciptakan segala sesuatu pada keadaan sempurna dan seimbang, tidak terkecuali atom dengan elektron banyak yang memiliki kecenderungan untuk mencapai keadaan dasar atau keseimbangan.

Sebagaimana kita ketahui, ketersediaan atom dengan elektron banyak di alam semesta sangatlah banyak (Krisna *et al.* 2018). Untuk menguji metode Hartree-Fock pada atom berelektron banyak digunakan atom helium (${}^4_2\text{He}$) sebagai atom dengan elektron banyak yang paling sederhana. Atom helium (${}^4_2\text{He}$) hanya terdiri dari dua elektron dan satu nucleus (Makmum, Supriadi, and Prihandoko, 2020). Dalam mekanika kuantum jumlah atom dengan dua elektron yang berinteraksi dapat

menggambarkan atom dengan jumlah elektron banyak. Atom helium (${}^4_2\text{He}$) digunakan dalam evaluasi integral pada keadaan *Self-Consistent Field* karena keadaan fungsi gelombang yang dihasilkan konsisten, evaluasi integral pada keadaan *Self-Consistent Field* dapat digunakan untuk atom dengan elektron banyak, seperti lithium, berilium, dan boron (Li *et al.* 2019).

Metode Hartree-Fock dalam perhitungan *Self-Consistent Field* dapat diselesaikan menggunakan integrasi numerik untuk mempermudah dalam perhitungan dan menentukan hasil yang diperoleh agar lebih baik. Banyak sekali metode numerik yang dapat digunakan untuk menyelesaikan perhitungan *Self-Consistent Field*, di antaranya adalah metode nilai tengah, metode Trapesium, metode Simpson, metode Monte Carlo, dan masih banyak lagi (Bird, 2020). Untuk menentukan keadaan *Self-Consistent Field* suatu atom, ketetapan integrasi numerik yang digunakan adalah aturan Trapesium (Hoffman *and* Belbruno, 2005).

Aturan Trapesium merupakan metode pengembangan dari integrasi numerik Riemann, karena integral tertentu dihipotesis oleh persamaan Trapesium (Fauziyah, 2021). Aturan Trapesium adalah metode integrasi yang didasari oleh penjumlahan segmen-segmen berbentuk Trapesium. Aturan Trapesium merupakan aturan kuadrat bagi dua untuk setiap segmennya (Baskonus *and* Bulut, 2015). Penggunaan aturan Trapesium

untuk menentukan keadaan *Self-Consistent Field* atom masih perlu disempurnakan, karena aturan Trapesium masih memiliki ketelitian yang kurang akurat untuk menentukan keadaan fungsi gelombang yang konsisten. Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan oleh Rohadatul *et al* (2022) menyatakan bahwa dibandingkan aturan Trapesium, aturan Simpson lebih baik dalam mencapai nilai integral pecahan yang diberikan.

Penelitian keadaan *Self-Consistent Field* atom sebelumnya telah dilakukan oleh Hoffman pada tahun 2005 menggunakan aturan Trapesium, dan hasil yang diperoleh masih kurang akurat (Hoffman *and* Belbruno, 2005). Berdasarkan penelitian yang dilakukan oleh (Rohadatul *et al.* 2022) menyatakan bahwa Simpson lebih baik dalam mencapai nilai integral pecahan secara analitik dibandingkan dengan Trapesium. Pada penelitian ini penulis mencoba penelitian lain dengan menggunakan metode numerik. Penyelesaian integral tertentu tidak selamanya dapat diselesaikan dengan metode analitik, maka perlu penyelesaiannya menggunakan metode integrasi numerik.

Metode numerik pada penelitian ini menggunakan aturan Simpson. Aturan Simpson dapat digunakan untuk mencari fungsi gelombang yang konsisten dengan jumlah total energi dan nilai energinya mendekati akurasi yang lebih baik dibandingkan dengan ketetapan integrasi numerik

aturan Trapezium. Aturan Simpson merupakan aturan kuadrat yang lebih tinggi dibandingkan dengan aturan Trapezium. Aturan Simpson adalah aturan paling sederhana, bobot yang dihasilkan adalah bobot dengan nilai pangkat dua, dan nilai memiliki koefisien rumus orde tinggi yang disimpan dan dapat memperbesar efek kesalahan pembulatan pada aturan Simpson (Ullah, 2015).

Pada penelitian ini penulis mengambil penelitian tentang perbandingan aturan numerik Simpson terhadap aturan numerik Trapezium untuk evaluasi integral atom helium (${}^4_2\text{He}$) pada Keadaan *Self-Consistent Field* untuk mengetahui perbandingan akurasi nilai energi total dan energi orbital pada keadaan dasar atom helium (${}^4_2\text{He}$).

B. Batasan Masalah

1. Penelitian ini membatasi kajian pada penentuan keadaan *Self-Consistent Field* atom helium (${}^4_2\text{He}$) untuk keadaan dasar menggunakan metode integrasi numerik aturan Simpson 1/3 dan aturan Trapezium.
2. Perhitungan numerik dilakukan menggunakan variasi ukuran kisi \square sebesar 0,01; 0,03; 0,05; 0,07; 0,09; 0,11; 0,13; 0,15; 0,17; 0,19.
3. Perhitungan numerik dilakukan sebanyak sepuluh kali iterasi pada masing-masing ukuran kisi \square .

4. Analisis dilakukan dengan membandingkan hasil antara integrasi numerik Simpson 1/3 terhadap integrasi numerik Trapesium.

C. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang yang telah dituliskan, peneliti mengambil rumusan masalah sebagai berikut:

1. Bagaimana penyelesaian evaluasi integral pada keadaan *Self-Consistent Field* atom helium (${}^4_2\text{He}$) menggunakan aturan Simpson dan aturan Trapesium?
2. Bagaimana hasil yang diperoleh dari evaluasi integral pada keadaan *Self-Consistent Field* atom helium (${}^4_2\text{He}$) menggunakan aturan Simpson dan aturan Trapesium?
3. Bagaimana perbandingan evaluasi integral menggunakan aturan Simpson terhadap aturan Trapesium pada keadaan *Self-Consistent Field* atom helium (${}^4_2\text{He}$)?

D. Tujuan Penelitian

1. Untuk menentukan penyelesaian evaluasi integral pada keadaan *Self-Consistent Field* atom helium (${}^4_2\text{He}$) menggunakan aturan Simpson dan aturan Trapesium.

2. Untuk menentukan hasil dari evaluasi integral pada keadaan *Self-Consistent Field* atom helium (${}^4_2\text{He}$) menggunakan aturan Simpson dan aturan Trapesium.
3. Untuk menentukan perbandingan hasil evaluasi integral menggunakan aturan Simpson terhadap aturan Trapesium untuk menghasilkan keadaan *Self-Consistent Field* atom helium (${}^4_2\text{He}$).

E. Manfaat Penelitian

Hasil dari penelitian ini dapat menentukan keadaan dasar atom banyak elektron pada keadaan *Self-Consistent Field*. Pada penelitian ini atom yang digunakan yaitu atom helium (${}^4_2\text{He}$). Hasil yang diperoleh dari keadaan *Self-Consistent Field* dapat bermanfaat untuk mencapai keadaan dasar atom banyak elektron. Selain itu, penelitian ini bermanfaat untuk mengetahui nilai energi total dan energi orbital atom helium (${}^4_2\text{He}$) secara akurat, kemudian hasil dari energi total dan energi orbital tersebut digunakan untuk mengetahui perbandingan akurasi aturan numerik Simpson terhadap aturan numerik Trapesium. Penelitian ini diharapkan dapat bermanfaat sebagai sumbangsih wawasan keilmuan bagi para akademisi di bidang fisika teori dan fisika komputasi, karena penelitian ini mengkombinasikan antara teori atom banyak elektron menggunakan komputasi numerik.