

## BAB V

### KESIMPULAN DAN SARAN

#### A. Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan melalui hasil analisa dapat disimpulkan:

1. Prosedur penentuan nilai ekspektasi energi total keadaan dasar atom Boron ( $^{11}_5\text{B}$ ) dapat ditentukan menggunakan Variasi Monte Carlo.
2. Hasil ekspektasi energi total keadaan dasar atom Boron ( $^{11}_5\text{B}$ ) yang diperoleh dari perhitungan menggunakan program *Microsoft Excel* menghasilkan ekspektasi energi total dari hasil perhitungan  $\langle E \rangle = -23,206$  hartree. Hasil ini cukup baik karena perbedaan yang diperoleh relatif kecil jika dibandingkan dengan nilai energi referensi Hartree Fock STO-3G yaitu sebesar 4,06% dimana nilai ekspektasi energi total ketentuan Hartree Fock STO-3G  $\langle E \rangle = -24,149$  hartree.

3. Visualisasi dan analisa hasil ekspektasi energi total keadaan dasar atom Boron menggunakan *software OriginLab*.

- Visualisasi variasi parameter  $\zeta_1$  menunjukkan perubahan ekspektasi energi total akibat variasi parameter  $\zeta_1$ . Pada nilai parameter variasi  $\zeta_1 = 4,9$  dengan energi total  $\langle E \rangle = -23,195$  hartree merupakan nilai energi yang mendekati hasil perhitungan ekspektasi energi total.
- Visualisasi variasi parameter  $\zeta_2$  menunjukkan perubahan ekspektasi energi akibat variasi parameter  $\zeta_2$ . Pada nilai variasi parameter  $\zeta_2 = 2,5$  dengan energi total  $\langle E \rangle = -23,119$  hartree merupakan hasil energi yang mendekati hasil perhitungan ekspektasi energi total.
- Visualisasi variasi parameter  $\zeta_3$  menunjukkan perubahan ekspektasi energi total akibat variasi parameter  $\zeta_3$ . Pada nilai variasi parameter  $\zeta_3 = 2$  dengan ekspektasi energi total

$\langle E \rangle = -23,105$  hartree merupakan hasil energi yang mendekati hasil perhitungan ekspektasi energi total.

- Probabilitas ditemukannya elektron pada atom Boron. Elektron pertama orbital  $1s$  pada posisi  $r_1 = 0,21$  au, elektron kedua orbital  $1s$  pada posisi  $r_2 = 0,21$  au, elektron ketiga orbital  $2s$  pada posisi  $r_3 = 1,80$  au, elektron keempat orbital  $2s$  pada posisi  $r_4 = 1,90$  au dan elektron kelima orbital  $2p$  pada posisi  $r_5 = 2,04$  au..

## B. Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, terdapat hal-hal yang masih perlu dikembangkan. Hal yang dapat dikembangkan oleh peneliti selanjutnya adalah dapat menggunakan program yang lebih baik lagi untuk menghitung kasus penyelesaian atom elektron banyak, serta dapat dilakukan percobaan dengan metode yang berbeda untuk mencapai keadaan dasar atom dengan elektron banyak.