

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang Masalah

Helium merupakan unsur multi elektron yang paling sederhana karena hanya memiliki dua elektron saja. Sementara *helium sequence* merupakan ion yang memiliki jumlah elektron sebanyak 2 sama seperti helium. Kemudian *ground state* sendiri merupakan kondisi dimana suatu sistem berada pada keadaan energi terendah (Zettili, 2009). Tanpa adanya energi pada keadaan dasar atau *ground state energy* (GSE) suatu sistem dalam hal ini atom atau ion tidak dapat stabil, dan elektron dapat terjatuh ke arah inti (Simon, 1934). Selain itu GSE juga berperan mencegah membekunya helium pada suhu rendah (Dugdale dan Simon, 1953).

Perhitungan energi secara teoritis dari sistem dua elektron seperti pada atom helium dan *helium sequence* merupakan hal menarik sejak penemuan mekanika kuantum (Paterson et al, 2001), karena sistem ini merupakan suatu sistem dengan elektron banyak yang paling sederhana

(Yerokhin dan Pachuki, 2010). Selain itu terdapat data *exact* atau suatu data akurat yang dapat digunakan untuk menghitung akurasi data yang dihasilkan dari perhitungan secara teoritis yang telah dilakukan oleh peneliti.

Studi mengenai ilmu fisika sering melibatkan bidang lain seperti kimia salah satunya pada penelitian ini yang memadukan bidang kimia dan mekanika kuantum sehingga disebut sebagai kimia kuantum. Secara singkat kimia kuantum merupakan bidang yang menerapkan konsep mekanika kuantum pada bidang kimia (Levine I. N., 2014). Hal tersebut dapat dilihat pada isi secara fisik mekanika kuantum dan metodenya yang dapat “menjelaskan” permasalahan dalam bidang kimia. Namun hal itu dipandang hal yang cukup asing, hal ini dapat diatasi dengan melihat pada ilmu fisika modern bahwa teori atom dapat mereduksi kimia menjadi masalah dalam mekanika kuantum. Sebagai contohnya adalah bahwa pergerakan elektron dan inti atom dengan kecepatan yang jauh lebih kecil dari kecepatan cahaya dapat menyebabkan suatu materi memiliki sifat-sifat kimia.

Contoh lainnya yaitu ahli kimia menghitung beberapa permasalahan seperti termodinamika gas (menggunakan mekanika statistik), menghitung sifat-sifat keadaan transisi dalam reaksi kimia, sehingga memungkinkan estimasi konstanta laju dan permasalahan-permasalahan lain. Oleh karena itu permasalahan dalam bidang kimia dapat dijelaskan dalam mekanika kuantum (Kauzmann, 1957).

Perumusan suatu sistem kuantum digambarkan oleh fungsi keadaan ψ yang memiliki sifat probabilistik, kemudian variabel yang kemudian diteliti dalam operasi pengukurannya dinyatakan dalam suatu lambang operator yang sesuai dan terbebas dari sistem apapun yang ditinjau (Tjia, 2016). Salah satu contoh perumusan suatu sistem kuantum adalah fungsi gelombang satu parameter yang dilambang kan oleh $\psi(\alpha)$. Persamaan gelombang dapat berkembang menjadi persamaan energi dengan menggunakan metode yang tepat dan sesuai.

Dari penjelasan yang telah disebutkan diatas, penerapan konsep kimia kuantum dalam penelitian ini terletak pada objek yang diteliti yaitu atom helium dan *helium*

sequence, karena objek tersebut merupakan suatu unsur atau ion yang terdapat dalam ilmu kimia. Kemudian penggunaan konsep mekanika kuantum terjadi pada perhitungan GSE dari sistem dengan elektron banyak khususnya sistem dengan dua elektron yang terdapat pada atom helium dan *helium sequence*.

Penelitian mengenai GSE pada atom helium dan *helium sequence* telah beberapa kali dilakukan oleh para peneliti terdahulu seperti yang dilakukan oleh Varun Harbola yang menggunakan prinsip ketidakpastian untuk menemukan GSE untuk atom helium. Kemudian contoh yang lain yaitu yang dilakukan oleh Toichiro Kinoshita yang meneliti *ground state* pada atom helium yang terbagi menjadi 2 bagian tulisan yang berbeda. Selain itu pada tahun 2021 Redi Kristian Pingak et al melakukan penelitian mengenai GSE pada atom helium dan *helium sequence* menggunakan metode matriks sederhana pada orde 3×3 untuk metode analitik dan 25×25 untuk metode numerik. Metode analitik yang terdapat dalam penelitian ini dihimpun dari beberapa literatur

untuk memberikan penjelasan dan penegasan langkah dalam menghasilkan persamaan GSE untuk atom helium dan *helium sequence*. Variasi α dengan menggunakan pendekatan 2 desimal dibelakang koma berhubungan dengan proses pada Metode Numerik Monte Carlo yang akan dilakukan.

Dalam persamaan untuk mendapatkan nilai GSE, perhitungan diawali dengan penggunaan persamaan energi dalam prinsip variasi yang terdiri dari persamaan gelombang satu parameter, hamiltonian untuk *helium sequence* dan juga komponen elemen volume yang kemudian diintegalkan. Pada persamaan hamiltonian untuk *helium sequence* terdiri atas energi ionik untuk elektron dan kinetik masing-masing untuk elektron 1 dan 2 juga terdapat energi tolakan elektron. Dalam pengintegalnya energi tolakan elektron 1 dan 2 dianggap sebagai pengganggu karena tidak bisa di selesaikan secara bersama-sama dengan dua energi lainnya, maka dari itu perhitungannya menggunakan cara tersendiri. Konsep tersebut dikenal dengan Teori Perturbasi atau teori gangguan yang mana dalam teori tersebut jika ditinjau pada hamiltonian

yang digunakan dalam penelitian ini, suku energi tolakan elektron dianggap sebagai pengganggu.

Setelah semua komponen dalam persamaan energi didapatkan, ketiga energi tersebut dijumlahkan kembali dan dioperasikan sekali lagi dengan melakukan pendiferensialan pada persamaan tersebut, dihasilkan nilai dari parameter α . Substitusikan nilai α pada persamaan sebelumnya sehingga dihasilkan persamaan GSE untuk *helium sequence*. Variasi α dilakukan menggunakan persamaan GSE hasil penjumlahan semua komponen energi hasil perhitungan sebelumnya sebelum didiferensialkan dengan menggunakan pendekatan 2 desimal dibelakang koma karena berhubungan dengan proses pada metode numerik monte carlo yang akan dilakukan.

Mengenai penentuan nilai GSE menggunakan metode numerik, Stephen L. Davis pada tahun 2007 menghitung nilai GSE untuk atom helium menggunakan 10.000 baris data pada *microsoft excel* dengan melakukan 10 kali percobaan dan didapatkan nilai sebesar -2,8342 au pada nilai α sebesar 1,7.

Dari penelitian terdahulu yang sudah dilakukan, pada penelitian ini penulis ingin membuat suatu hal yang berbeda dengan penelitian sebelumnya. Penggunaan proses yang dibedakan pada Metode Numerik Monte Carlo yang menggunakan baris data lebih banyak yaitu 50.000 baris data dan pendekatan nilai desimal 2 angka dibelakang koma.

Hasil dari Metode Numerik Monte Carlo akan dibandingkan dengan hasil metode analitik dan juga hasil penelitian lain yang relevan untuk mengetahui bagaimana nilai yang dihasilkan terhadap nilai dari metode lain.

B. Batasan Masalah

1. Menggunakan fungsi gelombang satu parameter.
2. Energi total yang dihitung hanya pada keadaan dasar $1s^2$.
3. Dengan menggunakan Metode Numerik Monte Carlo variabel masukan disesuaikan dengan energi total yang dihitung yaitu pada keadaan dasar $1s^2$.
4. Baris data yang digunakan sebanyak 50.000.
5. Variasi nilai α menggunakan pendekatan 2 desimal dibelakang koma.

C. Rumusan Masalah

1. Berapa nilai GSE untuk atom helium dan *helium sequence*?
2. Bagaimana pengaruh variasi parameter α terhadap nilai energi yang dihasilkan pada atom helium dan *helium sequence*?
3. Bagaimana keakuratan Metode Monte Carlo dalam menghasilkan nilai GSE untuk atom helium dan *helium sequence*?

D. Tujuan Penelitian

1. Mengetahui nilai GSE untuk atom helium dan *helium sequence*.
2. Mengetahui pengaruh variasi parameter α terhadap nilai energi yang dihasilkan.
3. Mengetahui tingkat keakuratan metode monte carlo dalam menghasilkan nilai GSE untuk atom helium dan *helium sequence*.

E. Manfaat Penelitian

Penelitian ini mempunyai manfaat baik pada aspek teoretis maupun aspek praktis. Adapun manfaat-manfaatnya tercantum dalam poin-poin dibawah ini

1. Manfaat Teoretis

- a. Dapat digunakan untuk keperluan studi ataupun bisa digunakan untuk bahan baca dalam keperluan akademik.
- b. Nilai GSE memiliki peran agar atom helium dan *helium sequence* bisa stabil dan mencegah elektron terjatuh ke arah inti. Selain itu, GSE dapat mencegah membekunya atom helium pada suhu rendah.
- c. Membandingkan besar error dari nilai GSE untuk atom helium dan *helium sequence* yang dihasilkan melalui metode numerik monte carlo dengan metode analitik melui prinsip variasi dan hasil dari beberapa metode lain terhadap yang telah digunakan dapat dijadikan pertimbangan apakah Metode Numerik Monte Carlo dapat dijadikan metode alternatif untuk

menghitung nilai GSE atau tidak tergantung hasil analisis data yang dilakukan.

2. Manfaat Praktis

Memberi gambaran mengenai bagaimana simulasi Monte Carlo dilakukan agar bisa menjadi contoh bagi peneliti lain yang ingin mengembangkan atau melakukan simulasi monte carlo khususnya pada perhitungan nilai GSE untuk atom helium dan *helium sequence*.