

## REVIEW PROBABILITAS MENEMUKAN ELEKTRON DENGAN FUNGSI GELOMBANG SIMETRI DAN ANTI SIMETRI PADA MOLEKUL $H_2^+$

Moh. Yusron<sup>1,2)</sup>, K. Sofjan Firdausi<sup>1)</sup>, Sumariyah<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>Laboratorium Fisika Atom & Nuklir, Jurusan Fisika, UNDIP

<sup>2)</sup>Laboratorium Komputasi Fisika, Jurusan Fisika, UNDIP

### ABSTRACT

The probability density of  $|\psi_S|^2$  and  $|\psi_A|^2$  for the symmetry and asymmetry wave function respectively, for  $H_2^+$  ion has been simulated. The  $\psi_S$  and  $\psi_A$  wave function have been obtained through the solutions of one dimensional time-independent Schrödinger equation. The  $\psi_S$  and  $\psi_A$  are formed then by linear combination of individual solution of wave function of hydrogen atom. The probability density is calculated and simulated for several values of inter nuclear distance in Bohr radius,  $a_0$  using Matlab 6.5. The interpretation of  $|\psi|^2$  shows that the probability in finding the electron in the space between inter nuclear distance of  $0,2a_0$  is very small for asymmetry and very large for symmetry wave function. If the inter nuclear distance is made larger in several  $a_0$ , the probability becomes smaller. The probability density is just equal to individual in finding electron in a hydrogen atom.

Key words: The probability density, symmetry and asymmetry wave function, the  $H_2^+$  ion.

### INTISARI

Telah disimulasikan rapat probabilitas  $|\psi_S|^2$  untuk fungsi gelombang simetri dan  $|\psi_A|^2$  untuk asimetri pada ion  $H_2^+$ . Fungsi gelombang  $\psi_S$  dan  $\psi_A$  diperoleh dari penyelesaian persamaan Schroedinger satu dimensi tak gayut waktu, dan merupakan kombinasi linier dari penyelesaian individu fungsi gelombang atom hirogen. Rapat probabilitas dihitung dan disimulasikan sebagai fungsi jarak antar inti, dalam radius Bohr  $a_0$ , menggunakan program Matlab 6.5. Interpretasi  $|\psi|^2$  menunjukkan bahwa, kebolehjadian menemukan elektron di sekitar jarak antar inti untuk  $|\psi_A|^2$  adalah sangat kecil, sedangkan untuk  $|\psi_S|^2$  adalah sangat besar. Bila jarak kedua proton dalam inti semakin besar, kebolehjadian menemukan elektron di ruang antar inti semakin kecil. Kebolehjadian menemukan elektron paling besar adalah 50% untuk masing-masing proton seperti pada atom hidrogen.

Kata kunci: Rapat kebolehjadian, fungsi gelombang simetri dan asimetri, ion  $H_2^+$

### PENDAHULUAN

Model atom terkini yang dikembangkan dalam waktu singkat menurut perumusan mekanika kuantum merupakan sumbangan penting pada pengetahuan mengenai alam semesta pada abad ini. Di samping pembaharuan pendekatan mengenai gejala atomik,

dengan teori mekanika kuantum dapat dimengerti berbagai hal yang dekat hubungannya seperti bagaimana atom berinteraksi membentuk molekul mantap, asal tabel periodik unsur-unsur, dan mengapa zat padat memiliki sifat karakteristik listrik, magnetis, optis dan mekanis dan lain sebagainya. Studi struktur atom hidrogen adalah langkah

yang penting untuk mempelajari lebih lanjut struktur atom kompleks dan molekul, bukan hanya karena atom hidrogen merupakan struktur atom yang paling sederhana melainkan juga sebagai basis dalam perlakuan terhadap struktur atom berelektron banyak maupun molekul kompleks [1].

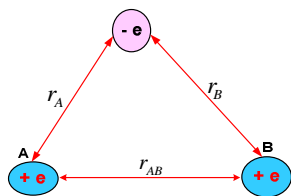
Sejalan dengan kemajuan teknologi, persoalan-persoalan fisika sekarang dapat disimulasikan dengan komputer. Dengan simulasi akan lebih mudah dan cepat untuk memperoleh suatu rumusan serta penginterpretasiannya. Pada tulisan ini, hendak dicari simulasi distribusi kebolehjadian menemukan elektron dari molekul yang paling sederhana, yakni ion  $H_2^+$ , melalui persamaan Schroedinger tak gayut waktu satu dimensi

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \psi + V \psi = E \psi \quad (1)$$

dengan  $m_e$  adalah massa elektron,  $V$  potensial,  $E$  energi total dan  $\psi$  fungsi gelombang elektron [2-3].

### Fungsi Gelombang Ion Hidrogen ( $H_2^+$ )

Molekul yang paling sederhana adalah ion,  $H_2^+$  sebab tersusun hanya dari 2 inti atom hidrogen dan satu elektron. Pada gambar 1 berikut, inti molekul  $H_2^+$  dilukiskan sebagai sebuah proton A dan B yang terpisah sejauh  $r_{AB}$ , sedangkan sebuah elektron bergerak di sekitarnya, dengan  $r_A$  jarak elektron ke inti atom hidrogen A dan  $r_B$  jarak antara elektron ke inti atom hidrogen B.



Gambar 1, ion molekul hidrogen memiliki dua inti dan satu elektron. Inti yang satu diberi label A dan yang lain B [1].

Untuk mendapatkan solusi dari fungsi gelombang ion molekul hidrogen,  $\psi$ , maka persamaan (1) perlu dimodifikasi menjadi berikut:

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m_e}{h^2} \left( W + \frac{e^2}{r_A} + \frac{e^2}{r_B} - \frac{e^2}{r_{AB}} \right) \psi = 0 \quad (2)$$

dengan  $m_e$  merupakan massa diam elektron,  $h$  konstanta planck, dan

$$W = -\frac{13.6}{n^2} eV .$$

Jika  $r_{AB}$  sangat besar maka

fungsi gelombang dari penyelesaian persamaan (2) dapat disusun dari dua fungsi gelombang yaitu  $u_A$  dan  $u_B$  (yaitu fungsi gelombang atom hidrogen antara elektron dengan inti atom A dan B dalam keadaan dasar). Untuk  $r_{AB}$  sangat kecil maka penyelesaian fungsi gelombang molekul ( $H_2^+$ ) merupakan kombinasi linier dari  $u_A$  dan  $u_B$ . Nilai *eigen* dari persamaan (2) dituliskan sebagai berikut [1]:

$$\begin{vmatrix} H_{AA} - W & H_{AB} - \Delta W \\ H_{BA} - \Delta W & H_{BB} - W \end{vmatrix} = 0 \quad (3)$$

dengan :

$$H_{AA} = \int u_A H u_A d\tau \quad (4)$$

$$H_{AB} = \int u_A H u_B d\tau \quad (5)$$

$$H = \frac{e^2}{r_{AB}} \quad (6)$$

dan

$$\Delta = \int u_A u_B d\tau \quad (7)$$

Persamaan (7) merupakan akibat dari posisi elektron terhadap inti A dan B. Sebagai akibat maka harus dipenuhi syarat  $H_{AA} = H_{BB}$  dan  $H_{AB} = H_{BA}$  sehingga diperoleh penyelesaian dari persamaan *sekuler*.

$$W_S = \frac{H_{AA} + H_{AB}}{1 + \Delta} \quad (8)$$

$$W_A = \frac{H_{AA} - H_{AB}}{1 - \Delta} \quad (9)$$

dan penyelesaian fungsi gelombang untuk ion molekul hidrogen yaitu [1,4-6]

$$\varphi_S = \frac{1}{\sqrt{2 + 2\Delta}} (u_A + u_B) \quad (10)$$

$$\varphi_A = \frac{1}{\sqrt{2 - 2\Delta}} (u_A - u_B) \quad (11)$$

dengan  $\Delta = e^{-D} (1 + D + \frac{1}{3} D^2)$ ,  $D = \frac{r_{AB}}{a_0}$

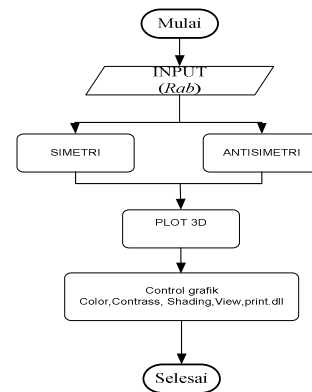
dan subskript S dan A melambangkan simetri dan asimetri.

### METODE PENELITIAN

Untuk menentukan  $|\psi_S|^2$  dan  $|\psi_A|^2$ , digunakan persamaan (10) dan (11). Hasil dari penyelesaian fungsi radial, polar, dan fungsi gelombang diplotkan ke dalam grafik yaitu 2D untuk grafik 2 dimensi dan 3D untuk grafik 3 dimensi menggunakan fasilitas *symbolic toolbox* pada program Matlab 6.5. Grafik 2D terdiri grafik rapat probabilitas dari fungsi gelombang dalam bentuk kontour, rapat probabilitas radial dan rapat probabilitas polar. Untuk grafik 3D merupakan penggambaran 3 dimensi dari rapat probabilitas radial serta rapat probabilitas polar. Dari grafik dapat diatur dari control grafik yang dibuat untuk mengubah warna grafik, kontras, *shading*, *print layout*, dan program bantuan.

Pada gambar 3, parameter masukkan untuk program simulasi rapat probabilitas pada ion  $H_2^+$  adalah jarak antar inti  $r_{AB}$ . Pada keadaan dasar, diperoleh penyelesaian fungsi gelombang simetri dan antisimetri. Dari kedua fungsi gelombang tersebut diperoleh rapat

probabilitas untuk menemukan elektron, dan diplotkan 3 dimensi.



Gambar 3 Flowchart program untuk mensimulasikan rapat probabilitas ion  $H_2^+$

### HASIL DAN PEMBAHASAN

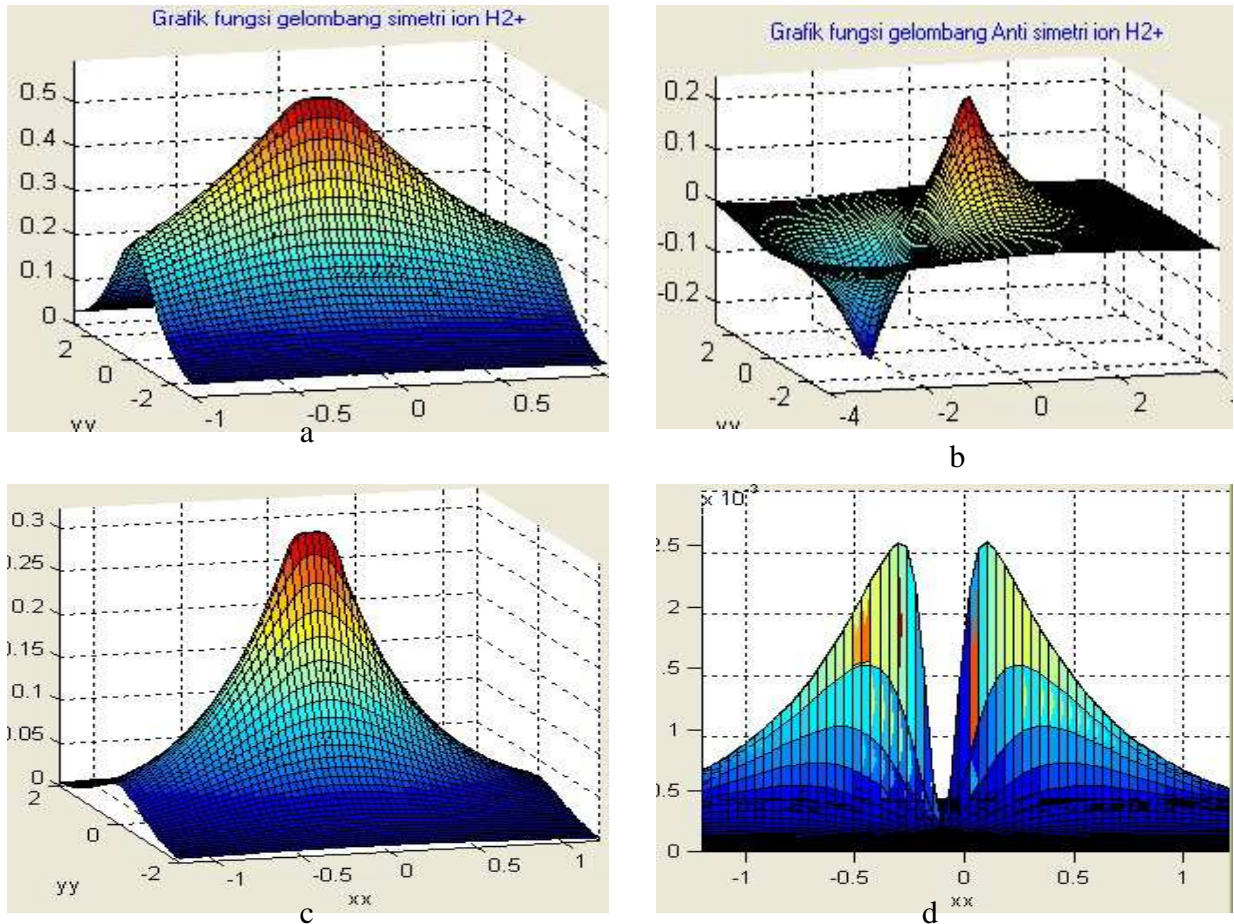
Pada gambar 4a dan 4b ditunjukkan penyelesaian fungsi gelombang simetri dan asimetri pada jarak antar protonnya sekitar  $0,2 a_0$ . Rapat probabilitas elektron pada ion  $H_2^+$  untuk masing-masing fungsi gelombang pada gambar 4c dan 4d. Di tengah-tengah jarak antar proton, elektron paling besar ditemukan bila fungsi gelombangnya simetri sedangkan untuk asimetri diperoleh peluang yang sangat kecil.

Hal ini menandakan pada ion  $H_2^+$  tidak terjadi ikatan kovalen dalam molekul jika dalam keadaan antisimetri. Pada kondisi simetri, jika jarak antar protonnya mendekati nol, tampak bahwa distribusi elektronnya pada keadaan dasar seperti atom tunggal dengan 2 proton pada intinya. Hal ini bersesuaian dengan referensi [6].

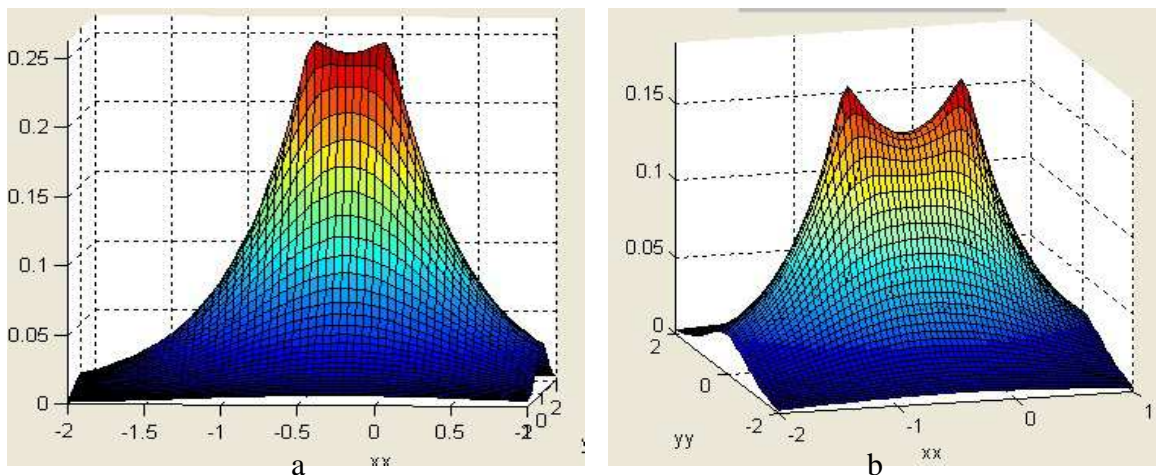
Jika jarak antar proton dijauhkan maka terlihat puncak-puncak gelombang akan semakin menjauh. Kemungkinan menemukan elektron elektron pada keadaan adalah di ruang antar proton. Pada gambar 4 diperlihatkan efek dari penambahan jarak antar inti pada keadaan simetri mengakibatkan rapat probabilitas di ruang antara inti semakin kecil. Semakin

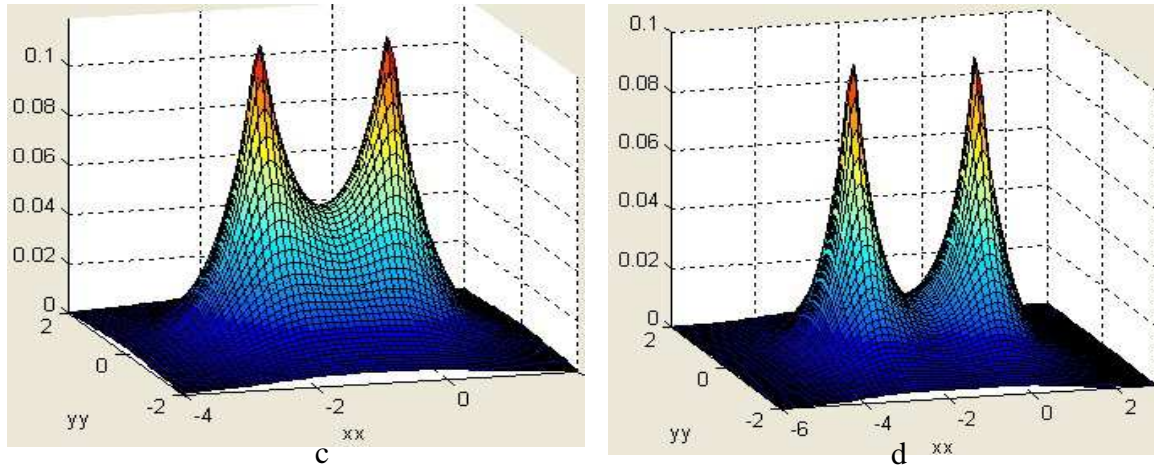
besar maka ion molekuler cenderung akan bersifat seperti atom. Hal ini dapat dilihat di puncak-puncak grafik rapat probabilitas yang semakin tinggi sementara probabilitas di ruang antar inti semakin kecil dengan bertambahnya jarak antar inti. Setelah

terpisah sejauh empat kali radius Bohr maka rapat probabilitas diruang antar inti mendekati nol, seolah-olah hanya rapat probabilitas elektron ada dua atom yang terpisah. Hal ini dapat dilihat di gambar 5.

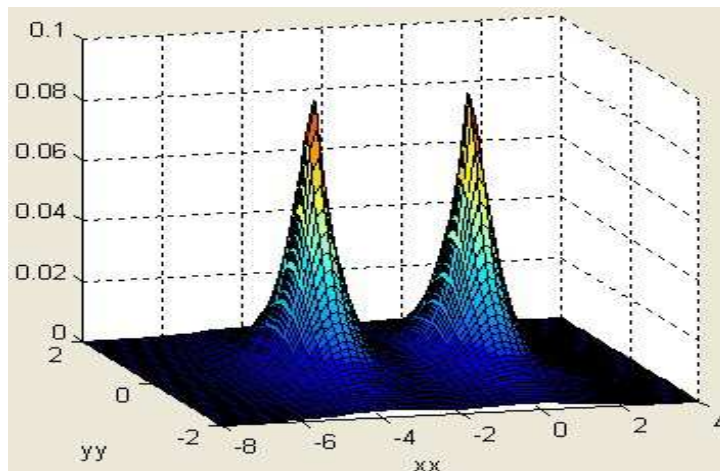


Gambar (3). Fungsi gelombang dan distribusi elektron pada molekul ion hidrogen pada jarak antar protonnya  $0,2a_0$  (a) fungsi gelombang simetri, (b) fungsi gelombang antisimetri, (c) grafik rapat probabilitas elektron simetri dan (d) grafik rapat probabilitas elektron antisimetri





Gambar 4 Distribusi rapat probabilitas molekul ion hidrogen dalam keadaan simetri pada jarak antar protonnya (a)  $0.5a_0$  (b)  $a_0$ , (c)  $2a_0$  (d)  $3a_0$



Gambar 5. Distribusi rapat kebolehjadian elektron pada molekul ion hidrogen dalam keadaan simetri pada jarak antar protonnya  $4a_0$ .

## KESIMPULAN

Berdasarkan hasil simulasi dapat diambil kesimpulan bahwa probabilitas menemukan elektron diruang antar proton pada molekul  $H_2^+$  keadaan simetri lebih besar dibandingkan pada keadaan antisimetri. Semakin jauh jarak antar proton  $H_2^+$  maka probabilitas untuk menemukan elektron di ruang antar proton pada keadaan simetri semakin kecil. Fungsi gelombang yang membentuk ikatan kovalen pada molekul  $H_2^+$  adalah pada keadaan simetri.

Untuk selanjutnya program ini dapat dikembangkan untuk atom berelektron banyak. Metode komputasi simbolik masih dibatasi dalam visualisasi grafis yang terbatas, sehingga diharapkan program ini dapat dikembangkan dengan metode numerik .

## DAFTAR PUSTAKA

- [1] Pauling, L.,1935, *Introduction To Quantum Mechanics: With Applications To Chemistry*, Tokyo, McGraw-Hill
- [2] Beiser, A., 1999, *Konsep Fisika Modern*, Jakarta, Erlangga.

- [3] Liboff, R.L., 1991, *Introductory Quantum Mechanics 2<sup>nd</sup> ed.* Addison-Wesley Publishing Company, USA
- [4] Banwell, C.N & Elaine M. Cash, 1994, *Fundamentals of Molecular Spectroscopy 4<sup>th</sup> ed.*, hal. 176-179, McGraw-Hill Book Company.
- [5] Svanberg, S., 1992, *Atomic and Molecular Spectroscopy. 2<sup>nd</sup> ed.*, hal 30, Springer-Verlag.
- [6] Haken, H. & H.C. Wolf, H., 1998, *Molekülphysik und Quantenchemie*, 3. Auflage, Springer-Verlag, Berlin.