

Kajian Sifat Radial Ion Hidrogenik Menggunakan Polinomial Laguerre

A Study on Radial Properties of Hydrogenic Ions using Laguerre Polynomials

Gerda Pandu¹, Redi Kristian Pingak^{1*}, Albert Zicko Johannes¹, Zakarias Seba Ngara¹

¹Jurusan Fisika, Fakultas Sains dan Teknik, Universitas Nusa Cendana, Kupang, NTT, Indonesia 85001
Email: *rpingak@staf.undana.ac.id (*corresponding author)

Abstrak – Telah dilakukan kajian awal mengenai sifat radial sistem hidrogenik menggunakan polinomial Laguerre. Tujuan dari kajian ini adalah mempelajari sifat radial dari ion hidrogenik yang ditunjukkan oleh besaran rapat probabilitas radial, jarak radial paling mungkin dan jarak rata-rata elektron dari inti ion hidrogenik. Berdasarkan hasil penelitian untuk $Z=1$ sampai $Z=10$ dengan bilangan kuantum utama (n)=1 sampai 5 menghasilkan 150 bentuk fungsi radial, 150 rapat probabilitas radial, 150 nilai jarak radial paling mungkin dan 150 nilai jarak rata-rata elektron. Jarak radial paling mungkin dari inti dibandingkan dengan model Bohr dan menunjukkan hasil yang sama dengan model Bohr.

Kata kunci: fungsi radial, ion hidrogenik, polinomial Laguerre, jarak radial, model Bohr

Abstract – A preliminary study has been carried out on the radial properties of the hydrogenic systems using the Laguerre polynomial. The aims of this study were to investigate radial properties of hydrogenic ions by evaluating the radial probability density, the most probable radial distance and the average distance of electron from the nuclei of hydrogenic ions. Based on the research results for $Z=1$ to $Z=10$ with the principal quantum number (n)=1 to 5, 150 radial function forms, 150 radial probability density, 150 most probable radial distance values and 150 electron average distance values were obtained. The most probable radial distance from the nucleus was compared with the Bohr model and showed the same results as the Bohr model.

Keywords: radial functions, hydrogenic ions, Laguerre Polynomials, radial distance, Bohr model

1. Pendahuluan

Solusi aproksimasi sederhana persamaan Schrödinger untuk sistem-sistem kuantum sederhana telah banyak dilaporkan di literatur seperti sistem helium dan helium-like [1-8] dan isotop-isotop molekul hidrogen [9-10]. Selain itu, kajian tentang sistem-sistem yang telah memiliki solusi analitik juga telah banyak dilakukan mulai dari sistem osilator harmonik [11-12], sumur potensial berhingga [13], dan sistem-sistem hidrogenik [14-16].

Walaupun solusi eksak persamaan Schrödinger untuk sistem hidrogenik telah diketahui, sistem-sistem ini tetap menarik dari sudut pandang teoritis salah satunya karena sistem-sistem ini merupakan *building block* untuk memahami sistem-sistem kuantum yang lebih kompleks. Dengan memahami sistem-sistem ini secara komprehensif, diharapkan pemahaman yang sama dapat dikembangkan untuk memahami sistem-sistem kuantum yang kompleks. Beberapa kajian teoritis terbaru tentang sistem-sistem hidrogenik antara lain dapat ditemukan di beberapa literature [17-19]. Meskipun demikian, sebagian besar kajian-kajian ini terbatas pada beberapa bilangan kuantum saja dan beberapa sistem hidrogenik saja. Oleh karena itu, kajian lebih komprehensif pada sistem-sistem ini menjadi sebuah topik yang menarik untuk dikaji.

Dalam penelitian ini, sistem hidrogenik dengan $Z=1-10$ untuk bilangan kuantum $n=1$ sampai $n=5$ dikaji. Kajian ini meliputi penentuan bentuk-bentuk eksplisit fungsi-fungsi radial sistem-sistem ini, yang kemudian digunakan untuk menentukan rapat probabilitas radial, jarak radial paling mungkin dan jarak rata-rata radial elektron dari inti atom ion-ion hidrogenik ini. Adapun penentuan fungsi-fungsi radial sistem-sistem ini dilakukan dengan menggunakan polinomial Laguerre. Nilai-nilai jarak radial paling mungkin elektron yang diperoleh dari formulasi mekanika kuantum, yakni dari interpretasi grafik rapat

probabilitas radial elektron, juga dibandingkan dengan nilai-nilai bersesuaian yang diperoleh dari model Bohr.

2. Metode Penelitian

2.1 Fungsi Radial dalam bentuk Polinomial Laguerre

Fungsi radial ion hidrogenik dapat ditulis dalam bentuk polynomial Laguerre seperti ditampilkan pada Persamaan (1) [20].

$$R_{nl}(r) = \left[\left(\frac{2Z}{na_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{(n+l)!(2n)} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right)^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2Zr}{na_0} \right) \exp\left(-\frac{Zr}{na_0} \right) \quad (1)$$

Dengan Z merupakan muatan inti, n dan l secara berturut-turut adalah bilangan kuantum utama dan bilangan kuantum orbital, $L_{n-l-1}^{2l+1}(2Zr/na_0)$ adalah polynomial Laguerre terasosiasi yang bergantung pada nilai n dan l dan a_0 adalah radius Bohr. Dalam penelitian ini, bentuk-bentuk eksplisit fungsi radial pada Persamaan (1) ditentukan dengan menentukan terlebih dahulu bentuk polynomial Laguerre dengan menggunakan Microsoft Excel untuk nilai Z , n dan l tertentu, yang kemudian digunakan untuk menentukan fungsi radial $R_{nl}(r)$.

2.2 Rapat probabilitas radial

Radius peredaran yang paling mungkin dari elektron ion hidrogenik dapat ditentukan dengan menghitung kebolehjadian menemukan elektron, disekitar inti atom dengan menggunakan fungsi radial. Rapat kebolehjadian bahwa elektron ada pada posisi antara r dan $r + dr$ dari pusat peredarannya [21] dapat dituliskan

$$f_{nl}(r) = r^2 |R_{nl}(r)|^2 \quad (2)$$

Lintasan yang paling mungkin untuk elektron pada setiap subkulit didapatkan jika dipenuhi [21]

$$\frac{df_{nl}(r)}{dr} = 0 \quad (3)$$

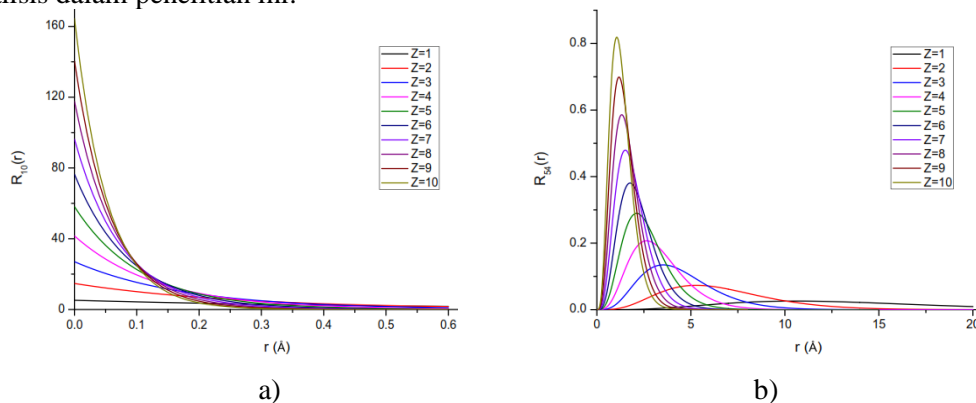
sedangkan nilai rata-rata jarak elektron dari inti atom dapat diperoleh dengan menghitung harga harap jari-jari lintasan elektron yaitu

$$\langle r_{nl} \rangle = \int_0^{\infty} R_{nl}^* r R_{nl} r^2 dr \quad (4)$$

3. Hasil Dan Pembahasan

3.1 Bentuk eksplisit fungsi radial

Bentuk-bentuk eksplisit fungsi radial untuk $Z=1$ sampai $Z=10$ untuk $n=1$ sampai $n=5$ telah diperoleh dan Gambar 1 menampilkan fungsi radial untuk $R_{10}(r)$ dan $R_{54}(r)$ sebagai representasi untuk state-state lain yang dianalisis dalam penelitian ini.

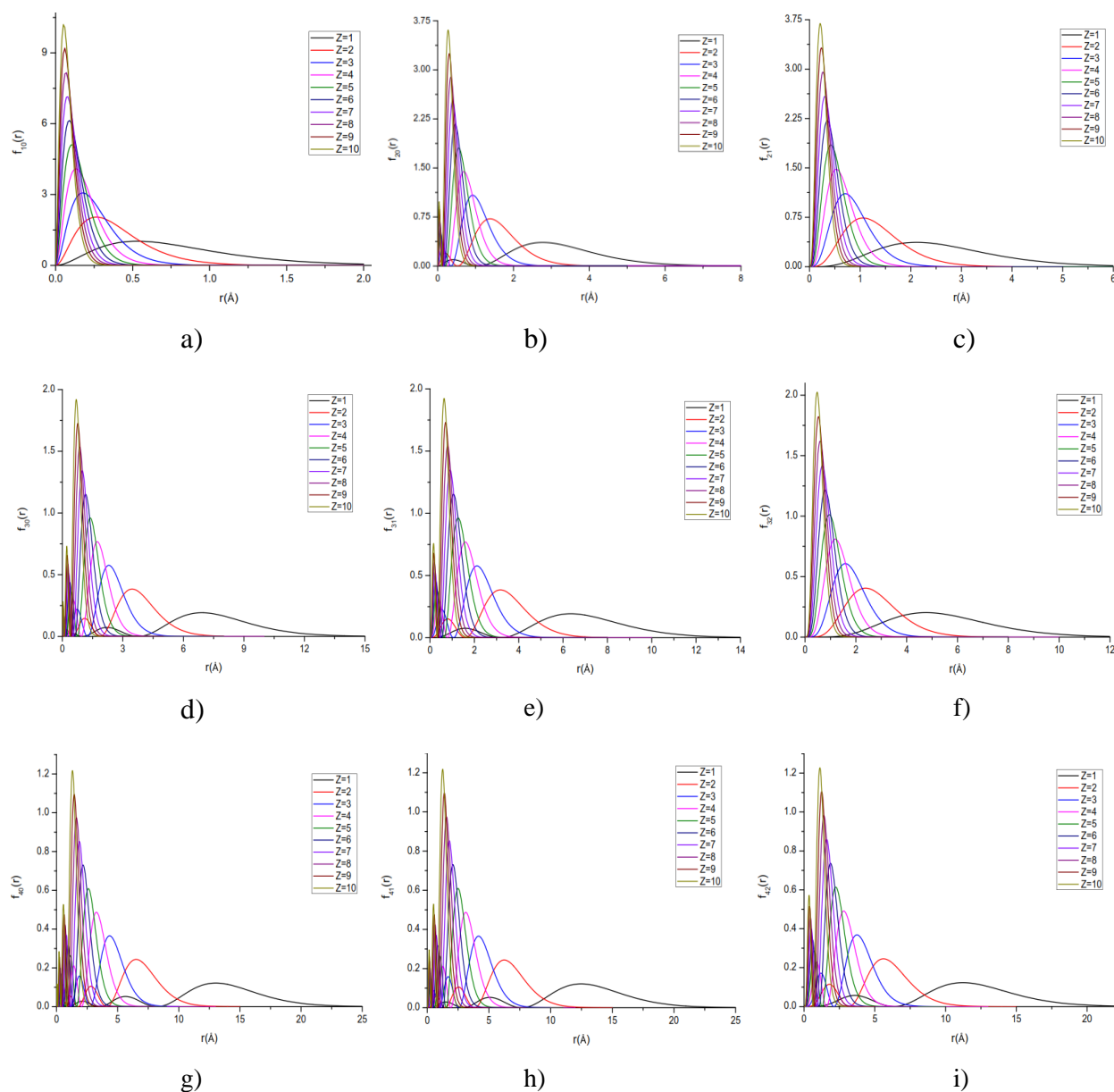


Gambar 1. Fungsi radial untuk ion hidrogenik untuk (a) $n=1$, $l=0$, dan (b) $n=5$, $l=4$.

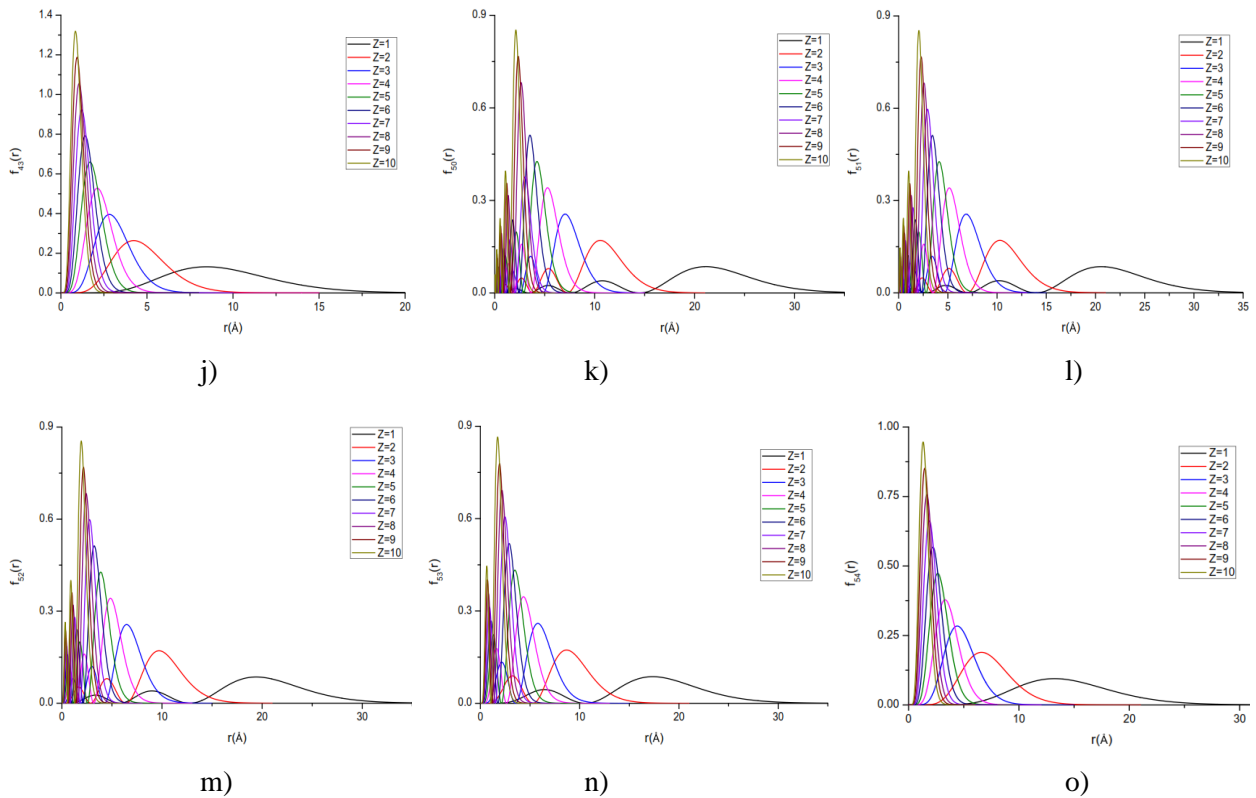
Gambar 1 menunjukkan bahwa semakin tinggi muatan inti Z dari ion hidrogenik, besar fungsi radial maksimumnya juga semakin tinggi dan nilai maksimum fungsi radial ini bergeser ke nilai r yang semakin kecil yakni jarak elektron yang semakin dekat ke inti atom. Hal ini akan memiliki implikasi pada interpretasi probabilitas radial yang akan dibahas pada bagian berikut.

3.2 Rapat probabilitas radial

Rapat probabilitas radial ditentukan dengan menggunakan Persamaan (2) dan diplot sebagai fungsi r . Gambar 2 menampilkan rapat probabilitas radial $f_{nl}(r)$ untuk ion-ion hidrogenik dari $Z=1$ sampai $Z=10$ dan untuk $n=1$ sampai $n=5$. Perlu dicatat bahwa nilai rapat probabilitas ini dapat bernilai lebih besar dari 1, namun peluang total menemukan elektron memiliki nilai maksimum sebesar 1 dan dapat ditentukan dengan menghitung total luasan di bawah kurva $f(r)$ untuk interval r tertentu [22].



Gambar 2. Rapat probabilitas radial untuk ion hidrogenik untuk $n=1$ sampai $n=5$. Dimana gambar a) sampai i) secara berturut-turut adalah rapat probabilitas radial untuk state $|n, l\rangle$: $|1, 0\rangle$, $|2, 0\rangle$, $|2, 1\rangle$, $|3, 0\rangle$, $|3, 1\rangle$, $|3, 2\rangle$, $|4, 0\rangle$, $|4, 1\rangle$, $|4, 2\rangle$, $|4, 3\rangle$, $|5, 0\rangle$, $|5, 1\rangle$, $|5, 2\rangle$, $|5, 3\rangle$, dan $|5, 4\rangle$.



Gambar 2. Rapat probabilitas radial untuk ion hidrogenik untuk $n=1$ sampai $n=5$. Dimana gambar j) sampai o) secara berturut-turut adalah rapat probabilitas radial untuk state $|n,l\rangle$: $|1,0\rangle, |2,0\rangle, |2,1\rangle, |3,0\rangle, |3,1\rangle, |3,2\rangle, |4,0\rangle, |4,1\rangle, |4,2\rangle, |4,3\rangle, |5,0\rangle, |5,1\rangle, |5,2\rangle, |5,3\rangle,$ dan $|5,4\rangle$.

Dari Gambar 2 terlihat jelas bahwa semakin besar muatan inti ion hidrogenik, nilai jarak radial maksimum, yakni jarak radial dengan peluang maksimum, semakin kecil. Hal ini karena semakin besar muatan inti ion, interaksi Coulomb antara inti atom dan elektron akan semakin besar sehingga elektron akan semakin terlokalisasi dekat dengan inti atom. Selain itu, Gambar 2 juga menunjukkan bahwa jumlah *node* radial adalah $n-l-1$, hal ini dapat dilihat muncul dari sifat koefisien polinomial Laguerre terasosiasi $L^{2l+1}_{n-l-1}(2Zr/na_0)$ yang memiliki tanda bergantian akibat adanya faktor $(-1)^m$ [20]. Untuk state-state yang memenuhi hubungan $n=l+1$, fungsi radial $R_{nl}(r)$ tidak memiliki *node* sehingga rapat probabilitas radial $f_{nl}(r)$ juga tidak memiliki *node*. Contoh-contoh state ini adalah state $|1,0\rangle, |2,1\rangle, |3,2\rangle, |4,3\rangle,$ dan $|5,4\rangle$ yang tidak memiliki *node* seperti terlihat pada Gambar 2.

3.3 Jarak radial paling mungkin dan jarak radial rata-rata elektron

Jarak radial paling mungkin elektron dari inti ditentukan dengan menggunakan hasil perhitungan dari rapat probabilitas radial. Dalam penelitian ini, jarak radial paling mungkin ini ditentukan dengan meninjau nilai jarak radial pada saat rapat probabilitas radialnya maksimum. Sementara itu, jarak radial rata-rata elektron dihitung menggunakan Persamaan (4). Nilai-nilai jarak radial paling mungkin dan jarak rata-rata elektron untuk ion Ne^{9+} ditampilkan pada Tabel 1 dan untuk ion-ion lain ($Z=1-9$) dapat diperoleh dengan request melalui email ke penulis.

Nilai jarak radial yang diprediksi oleh Bohr yang ditampilkan pada kolom 5 pada Tabel 1 ditentukan menggunakan Persamaan (5) [23].

$$r_{Bohr} = \frac{a_0}{Z} n^2 \tag{5}$$

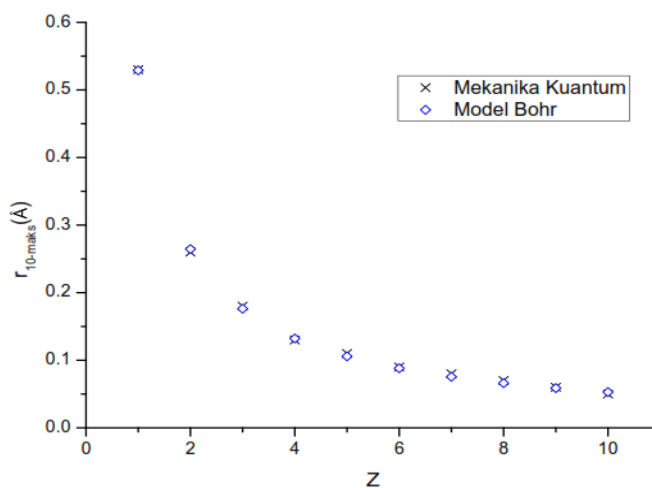
Tabel 1 menunjukkan bahwa nilai jarak radial yang diprediksi oleh model Bohr merupakan jarak radial paling mungkin yang diperoleh dari formulasi mekanika kuantum untuk nilai n tertentu dengan nilai l tertinggi yang mungkin untuk nilai n tersebut. Hal ini menunjukkan bahwa lintasan elektron yang diprediksi oleh Bohr berupa suatu lintasan tertentu sesungguhnya merupakan jarak radial paling mungkin dalam formulasi mekanika kuantum karena dalam formulasi kuantum, lintasan elektron yang pasti tidak relevan lagi karena elektron berpeluang ditemukan di posisi-posisi berbeda dalam ruang di sekitar atom.

Gambar 3 menunjukkan perbandingan jarak radial paling mungkin yang diperoleh pada penelitian ini dengan jarak radial yang diprediksi oleh Bohr.

Tabel 1. Jarak radial paling mungkin dan jarak radial rata-rata elektron dari inti ion Ne^{9+} ($Z=10$). Jarak radial yang diprediksi oleh Bohr juga ditampilkan. Jarak dinyatakan dalam Å.

n	l	r_{max}	$\langle r_{nl} \rangle$	r_{Bohr}
1	0	$r=0.05$	0.07935	0.0529
2	0	$r=0.28$	0.3174	0.2116
3	1	$r=0.21$	0.2645	0.2116
	0	$r=0.69$	0.71415	0.4761
4	1	$r=0.63$	0.66125	0.4761
	2	$r=0.48$	0.55545	0.4761
	0	$r= 1.3$	1.2696	0.8464
5	1	$r= 1.25$	1.2167	0.8464
	2	$r= 1.12$	1.1109	0.8464
	3	$r=0.85$	0.9522	0.8464
	0	$r=2.11$	1.98375	1.3225
6	1	$r=2.06$	1.93085	1.3225
	2	$r=1.94$	1.82505	1.3225
	3	$r=1.74$	1.66635	1.3225
	4	$r=1.32$	1.45475	1.3225

Gambar 3 menunjukkan bahwa model Bohr berhasil memprediksi dengan cukup baik jarak radial paling mungkin elektron dari inti atom hidrogenik walaupun hanya menggunakan metode semiklasik. Hal ini menunjukkan bahwa walaupun memiliki beberapa kelemahan, model Bohr tetap memiliki peran yang sangat penting dan menjadi salah satu jembatan dari teori klasik menuju teori kuantum [24].



Gambar 3. Perbandingan jarak radial paling mungkin dari mekanika kuantum dengan jarak radial prediksi Bohr untuk ion hidrogenik dari $Z=1$ sampai $Z=10$.

Beberapa kelemahan model Bohr antara lain adalah terkait dengan momentum sudut elektron, yang menurut model Bohr, terkuantisasi menurut $L=n\hbar$. Walaupun kemudian ditemukan bahwa momentum sudut elektron sebanding dengan konstanta Planck \hbar , namun tidak dalam kesebandingan dengan n . Sebagai contoh, untuk elektron pada keadaan dasar model Bohr memberikan nilai momentum sudut orbital sebesar 1 sedangkan dari model mekanika kuantum, nilai momentum sudut ini sebesar 0. Demikian juga untuk keadaan eksitasi pertama, model Bohr hanya memprediksi 1 nilai untuk momentum sudut yakni sebesar 2, sedangkan mekanika kuantum memprediksi 2 buah nilai untuk momentum sudut orbital yakni 0 dan 1. Salah satu konsekuensinya adalah terkait dengan r_{max} yang berbeda dari model Bohr dengan model mekanika kuantum seperti terlihat pada Tabel 1.

4. Kesimpulan

Kajian tentang sifat-sifat radial ion hidrogenik menggunakan polinomial Laguerre yang ditunjukkan oleh besaran rapat kebolehjadian, jarak radial paling mungkin dan jarak rata-rata elektron menunjukkan kesesuaian dengan model Bohr, dimana jarak radial yang diproduksi oleh model Bohr adalah jarak paling mungkin yang diperoleh dari formulasi mekanika gelombang. Juga telah diperoleh bentuk eksplisit dari fungsi radial ion hidrogenik untuk $n=1$ sampai $n=5$.

Pustaka

- [1] T. Winata and A. Kartono, Study of non-orthogonal Laguerre L^2 method for helium atom, *The European Physical Journal D: Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics*, vol. 28, no. 3, 2004, pp.307-315.
- [2] R. K. Pingak and U. A. Deta, A simple numerical matrix method for accurate triplet $1s2s-3S1$ energy levels of some light helium-like ions, *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 1491, no.1, 2020, pp. 012035.
- [3] A. Kartono, T. Winata and Sukirno, Applications of non-orthogonal Laguerre function basis in helium atom, *Applied Mathematics and Computation*, vol. 163, no.2, 2005, pp. 879-893.
- [4] E. Boimau, R. K. Pingak and Bernandus, Penentuan energi keadaan dasar sistem atom helium muonik eksotis $He\mu$ menggunakan prinsip variasi, *Jurnal Fisika: Fisika Sains dan Aplikasinya*, vol. 2, no.1, 2017, pp:1-9.
- [5] S. Purwaningsih, P. Nurwantoro and A. Hermanto, Calculation of ground state energy of helium using Hylleraas trial function expansion, *International Journal of Engineering Research and Technology*, vol.12, no.8, 2019, pp:1178-1182.
- [6] R. K. Pingak, R. Kolmate and Bernandus, A simple matrix approach to determination of the helium atom energies, *Jurnal Penelitian Fisika dan Aplikasinya*, vol.9, no.1, 2019, pp. 10-21.
- [7] S. Purwaningsih, Ground state energy of the helium using variational methods on trial wavefunctions, *International Journal of Sciences: Basic and Applied Research*, Vol. 54, No.4, 2020, pp:233-241.
- [8] R. K. Pingak, A. Ahab, and U. A. Deta, Ground state energies of Helium-like ions using a simple parameter-free matrix method, *Indonesian Journal of Chemistry*, vol.21, no.4, pp.1003-1015.
- [9] R. K. Pingak and A. Z. Johannes, Penentuan tingkat-tingkat energi vibrasi molekul hidrogen pada keadaan elektronik dasar menggunakan potensial Morse, *Wahana Fisika*, Vol. 5, No.1, 2020, pp:1-9.
- [10] R. K. Pingak, A. Z. Johannes, F. Nitti and M. Z. Ndi, A theoretical study on vibrational energies of molecular hydrogen and its isotope using a semi-classical approximation, *Indonesian Journal of Chemistry*, Vol. 23, No.1, 2021, pp:725-739.
- [11] Sutisna, Analytical solution of Schrodinger equation of the Harmonic oscillator system with position dependent mass using transformation method, *Jurnal Ilmu Dasar*, Vol. 10, No.2, 2009, pp: 114-120.
- [12] P. Pandiangan, Solusi persamaan Schrodinger osilator harmonik dalam ruang momentum, *Jurnal Matematika Sains dan Teknologi*, Vol. 6, No. 1, 2005, pp:20-30.
- [13] C. S. U. Luba, A. Warsito and R. K. Pingak, Kajian komputasi numerik energi elektron dalam sumur potensial berhingga, *Jurnal Fisika: Fisika Sains dan Aplikasinya*, Vol. 6, No.1, 2021, pp:17-23.
- [14] P. Pandiangan, S. Adi and A. Arkundato, Metode elemen hingga untuk penyelesaian persamaan Schrodinger atom hidrogenik, *Jurnal Matematika Sains dan Teknologi*, Vol. 7, No. 1, 2006, pp:11-23
- [15] F. Fuadah, S. H. B. Prastowo and L. Nuraini, Solusi persamaan Schrodinger atom deuterium dengan bilangan kuantum $n=4$, *FKIP e-proceeding*, Vol.3, No.2, 2019, pp:142-147.
- [16] B. Supriadi, S. H. B. Prastowo, S. Bahri, Z. R. Ridlo and T. Prihandono, The stark effect on the wave function of tritium in relativistic condition, *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 997, No. 1, 2018, pp:012045.
- [17] B. Supriadi, Z. R. Ridlo, F. Fuadah, M. A. Halim, M. Maulana and Y. R. Santoso, Solutions of spherical equation in 3 dimensions for hydrogen atom with quantum numbers $4 < n < 5$, *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 1211, no.1, 2019, 012054.

- [18] I. K. Mahardika, A. Harijanto, S. Bahri and Z. R. Ridlo, 3-dimensional eksternal electric field effect (Stark effect) on the ground state energy of Tritium atom, *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 1171, no.1, 2019, 012054.
- [19] B. Supriadi, A. Harijanto, M. Maulana, Z. R. Ridlo, W. D. Wisesa and A. Nurdiniaya, The function of the radial wave of a hydrogen atom in the principal quantum numbers (n) 4 and 5, *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 1211, no.1, 2019, 012052.
- [20] R. K. Pingak, 2015, *Bahan Ajar Fisika Kuantum*, Kupang: Universitas Nusa Cendana.
- [21] A. M. Juwono, 2017, *Pendahuluan Fisika Kuantum*. Malang: UB Press
- [22] A. Kohnle, A. Jackson, and M. Paetkau, The difference between a probability and a probability density, *The Physics Teacher*, Vol. 57, 2019, pp. 190-192.
- [23] R. A. Sani, and M. Kadri, 2017, *Fisika kuantum*. Jakarta: PT. Bumi Aksara.
- [24] K. W. Ford, Niels Bohr's first 1913 paper: still relevant, still exciting, still puzzling, *The Physics Teacher*, Vol. 56, 2018, pp. 500-502.