Jurnal PRIMA
Volume 3, Nomor 5, Juni 2006

ISSN 1411 - 0296

GENERATOR FUNGSI GELOMBANG HIDROGENOID

Oleh : Budi Santoso
LEMHANAS

ABSTRAK
Generator fungsi gelombang hidrogenoid dalam bentuk subroutine fortran disajikan. Generator dimaksudkan untuk memudahkan perhitungan berbagai proses atom seperti menghitung tingkat energi, matriks transisi, amplitudo hamburan dan interaksi kuantum pada umumnya yang dapat didekati dengan model hidrogenoid. Fungsi gelombang hidrogenoid berlaku bagi pendekatan non-relativistik untuk atomatau ion berelektron orbit satu. Fungsi gelombang tersebut diberikan oleh perkalian fungsi radial $R_{n\ell}(r) = \sum_{i=0}^{n} a_i r^i$ *dan fungsi gelombang harmonic bola* $Y_{n\ell}(\theta,\varphi) = \sum_{j=0}^{n} b_j x^j (1-x^2)^{m/2} e^{im\varphi}$ $x = \cos\theta$ *Generator ini membangkitkan koefisien* a_i *dan* b_j *, yang terlalu melelahkan untuk menghitungnya bagi* n *dan* l *di atas 3.*

1. PENDAHULUAN

Fungsi gelombang sistem elektron terikat dalam bentuk orbit dalam atom tidak mempunyai penyelesaian analitis kecuali atom hidrogen. Fungsi ini kemudian dijadikan model berbagai penyelesaian dengan modifikasi tertentu. Modifikasi dengan parameter baru namun bentuknya mirip dengan fungsi hidrogen dinamakan fungsi hidrogenoid. Beberapa parameter yang diintroduksian dapat dicari melalui suatu metode variasi, sebagai diperkenalkan oleh Hartree (1), Hartree-Fock (2) dan lain-lain. Penyelesaian fungsi gelombang hidrogen merupakan penyelesaian dari persamaan Schrodinger

$$\left(\nabla^2 + \frac{2mze^2}{\hbar^2 r} + \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(\bar{r}) = 0 \quad (1)$$

Fungsi gelombang mempunyai uraian sebagai

$$\psi(\bar{r}) = \frac{R_{n\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$$

$$= f_{n\ell}(r)\, Y_{\ell n}(\theta,\varphi) \quad (2)$$

yang memenuhi

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \in + \frac{2z}{\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right] R_{n\ell} = 0$$

(3)

dalam satuan atom. Dengan penyelesaian

$$f_{n\ell}(r) = N_{n\ell}\left(\frac{2z\rho}{n}\right)^{\ell}$$

$$F\left(-n+\ell+1,\ 2\ell+2;\ \frac{2z\rho}{n}\right) e^{-z\rho/n}$$

(4)

$$N_{n\ell} = \frac{1}{(2\ell+1)!}\sqrt{\frac{(n+\ell)!}{2n\,(n-\ell-1)!}}\ \left(\frac{2z}{n}\right)^{3/2}$$

F adalah fungsi hipergeometrik yang diberikan oleh

$$F(a,c;x) = 1 + \frac{a}{c}\frac{x}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)}\frac{x^2}{2!} +$$

Beberapa contoh penyelesaian analitik untuk n dan ℓ samapai 3 adalah

$n=1$ $\quad f_{10} = 2\,e^{-\rho}$ (5)

$n=2$ $\quad f_{20} =$

 ISSN 1411 - 0296

$$\frac{\sqrt{2}}{2}\left(1-\frac{1}{2}\rho\right)e^{-\rho/2}$$

$$,f_{21}=\frac{\sqrt{6}}{12}\rho\, e^{-\rho/2}$$

$n=3$ $f_{30}=$

$$\frac{2\sqrt{3}}{9}\left(1-\frac{2}{3}\rho+\frac{2}{27}\rho^2\right)e^{-\rho/3}$$

$$,f_{31}=\frac{4\sqrt{6}}{81}\left(\rho-\frac{1}{6}\rho^2\right)\rho\, e^{-\rho/3}$$

$$f_{32}=\frac{2\sqrt{30}}{955}\rho^3 e^{-\rho/3}$$

Bagian sudut memenuhi persamaan diferensial

$$\left[(1-x^2)\frac{d^2}{dx^2}-2x\frac{d}{dx}+\ell(\ell+1)-\frac{m^2}{(1-x^2)}\right]P_l^m(x)=0 \qquad (6)$$

$P_\ell^m(x)$ dinamakan fungsi Legendre terasosiasi dengan penyelesaian

$P_\ell^m(x)=$

$$(1-x^2)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}P_\ell(x)=\frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^\ell\,\ell\,!}$$

$$\left(\frac{d}{dx}\right)^{\ell+m}(x^2-1)^\ell;\ x=\cos(\theta)$$

Fungsi harmonik bola $Y_{\ell m}$ diberikan oleh :

$$(\theta,\varphi)=(-1)^m\left[\frac{(2\ell+1)\ (\ell-m)\,!}{4\pi(\ell+m)\,!}\right]^{1/2}$$

$$P_\ell^m(x)\,e^{im\varphi}$$

$Y_{\ell m}$

Contoh fungsi harmonik bola untuk ℓ dan m sampai 3

$$Y_{00}=\frac{1}{\sqrt{4\pi}},\qquad Y_{10}=\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos(\theta)$$

$$Y_{11}=-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin(\theta)^{i\varphi}$$

$$Y_{20}=\sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1)$$

$$Y_{21}=-\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin(\theta)\cos(\theta)e^{i\varphi};$$

$$Y_{22}=\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2(\theta)e^{2i\varphi}$$

$$Y_{30}=\sqrt{\frac{7}{16\pi}}(5\cos^2\theta-3\cos\theta)$$

untuk n yang tinggi di atas 3 penyelesaian dapat pula diperoleh dengan

$$Y_{31}=-\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\sin(\theta)\ (5\cos^2\theta-1)\ e^{i\varphi}$$

mendeferensialkan secara teliti rumusan yang telah diberikan, namun ini menjadi makin rumit. Apalagi bila diperlukan menghitung matriks elemen yang melibatkan suku-suku deret berpangkat tinggi. Melalui suatu otomasi program komputer, dapat disajikan langsung bentuk-bentuk polinomial fungsi gelombang baik bagian radialnya maupun bagian harmonik bolanya.

$$Y_{32}=\sqrt{\frac{105}{32\pi}}\sin^2\theta\cos\theta\ e^{2i\varphi};$$

$$Y_{33}=-\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\sin^3\theta\ e^{3i\varphi}$$

2. PEMROGRAMAN

Program fortran disusun dalam bentuk subroutine $RNL(n,\ell,Z,r)$ yang memerlukan masukan harga n, ℓ dan z (muatan inti atom), sedangkan keluarannya adalah vektor a yang menyimpan koefisien a_0, a_1, a_2, a_3 dan seterusnya dari fungsi.

$$f_{n\ell}\ (\rho)\ \sum_{i=0}^{\ell+1} a_i\ \rho$$

$$\ell = 0,1,2,\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots, n-1$$

Dengan $b_1 = N_{n\ell} \left(\frac{2z}{n} \right)^{\ell}$, maka

$$a_1 = b_1,\ a_2 = b_1\ \frac{(-n+\ell+1)}{(2\ell+2)\,1!} \left(\frac{2z\rho}{n} \right),$$

$$a_3 = b_1\ \frac{(-n+\ell+1)\ (-n+\ell+2)}{(2\ell+2)\ (2\ell+3)}\ \frac{1}{2!}$$

$$\left(\frac{2z\rho}{n} \right)^3 \ldots\ldots\ldots\ldots$$

$$y_i = b_2\ C_\ell^k\ \ (2\ell-2k)\ \ (2\ell-2k-1) \ldots..$$

$$\ldots\ldots\ (\ell-2k)(-1)^k$$

untuk fungsi $Y_{\ell n}$ diberikan oleh. Dengan

$$Y_{\ell n} = \sum_{i=0}^{2\ell+1} y_i\ x^i\ \sin^{2m}(\theta)\ e^{im\varphi}$$

$$F_{\ell n} = b_2 \left(\frac{d}{dx} \right)^{\ell-m} (x^2-1)^{\ell} =$$

$$b_2 \left(\frac{d}{dx} \right)^{\ell-m} \sum_{k=0}^{\ell} C_\ell^k\ \ x^{2\ell-2k}\ (-1)^k$$

$$b_2 = (-1)^m \left[\frac{(2\ell+1)\ \ (\ell-m)!}{4\pi\,(\ell+m)!} \right]^{1/2},$$

maka koefisien y_i diperoleh dari

dimana $C_\ell^k = \frac{\ell!}{k!\ (\ell-k)!}$ dan

$i = 2l - 2k,\ k = 0,1,\ldots\ldots\ldots\ell$

mengingat

Hasil numerik dari subroutine $R_{\ell m}$ dan $Y_{\ell m}$

Program $Y_{\ell m}$ diberikan oleh subroutine $YLM(\ell, m, y)$ dimana y adalah vektor yang memuat y_0, y_1, y_2 dan seterusnya dari deret. Contoh hasil perhitungan dengan program RNL, YLM dapat dilihat pada contoh tabel.

3. KESIMPULAN

Sebagai kesimpulan telah berhasil disusun program generator koefisien deret fungsi radial dan harmonik bola yang merepresentasikan fungsi gelombang hidrogenik untuk dapat digunakan pada perhitungan transisi atom yang menggunakan bentuk serupa.

4. DAFTAR PUSTAKA

1.Moleculer Quantum Mechanics, Atkins, PW, Clarendon Press, Oxford 1970
2.Quantum Mechanics, Messiah,Albert, North Holland`Publishing Company 1972
3.Eisberg, Robert and Resnick, Robert, Quantum Physics, John Wiley & Sons, New York 1974
4.Gasiorowicz, S , Quantum Physics, John Wiley & Sons, New` York 1996.

 ISSN 1411 - 0296

adalah sebagai ditunjukkan dalam tabel 1& tabel 2

Tabel –1. Harga a_i untuk n dan ℓ tertentu

Contoh hasil Program $Y_{n\ell}\ (r)$ dengan $z=1$

n	1	r^0	r^1	r^2	r^3	r^4	r^5
1	0	2.0					
2	0	0.7071068	-0.353553				
	1		0.2041241				
3	0	0.3849002	-0.2566001	0.0285111			
	1		0.1209625	-0.0201604			
	2			0.0090160			
4	0	0.25	-0.1875	0.03125	-0.0013021		
	1		0.0806872	-0.0201718	0.0010068		
	2			0.0069877	-0.0005823		
	3				0.2200921.E-3		
5	0	0.1788854	-0.1431084	0.0286217	-0.0019081	0.3816233 E-4	
	1		0.0584237	-0.0175271	0.0014022	-0.3115933 E-4	
	2			0.0053546	-0.0007140	0.2039857 E-4	
	3				0.2039856 E-3	-0.1019926 E-4	
	4					0.3399758 E-5	
6	0	0.1360828	-0.1134023	0.0252005	-0.0021000	0.700014 E-4	-0.7777937 E-6
	1		0.0447265	-0.0149088	0.0014909	-0.5521788 E-4	0.6573557 E-6
	2			0.0042169	-0.0007028	0.334671 E-4	-0.4648209 E-6
	3				0.1739001 E-3	-0.144916 E-4	0.268364 E-6
	4					0.3600483 E-5	-0.1200161 E-7
	5						0.3618124 E-7

Contoh hasil $Y_{\ell m} = (y_0 + y_1\ x\ +\ y_2\ x^2 + ...) \sin^{2m}(\theta)\ e^{im\varphi}$

ℓ	m	x^0	x^1	x^2	x^3	x^4	x^5
0	0	0.2820946					
1	0		0.4886022				
	1	0.3454939					
2	0	-0.3153914		0.9461742			
	1		-0.7725480				
	2	0.3862740					
3	0		-1.119528		1.8658810		
	1	0.3231800		-1.6159000			
	2		1.0219850				
	3	-0.4172235					

 ISSN 1411 - 0296

4	0	0.3173568		-31735650		3.7024920	
	1		1.4192610		-3.3116090		
	2	-0.3345231		2.3416610			
	3		-1.2516700				
	4	0.4425322					
6	0		-1.7542540		-8.1865180		7.3678660
	1	-0.3202814		-4.4839410		-6.7259100	
	2		-1.6947690		5.0843080		
	3	0.3459433		-1.1134890			
	4		1.4677130				
	5	-0.4641314					