

DISTRIBUSI PROBABILITAS RADIAL ELEKTRON SISTEM MOLEKUL DALAM PENGARUH POTENSIAL KRATZER DENGAN METODE PARAMETRIK NIKIFOROV-UVAROV

PROBABILISTIC RADIAL ELECTRON DISTRIBUTION IN MOLECULAR SYSTEMS UNDER THE INFLUENCE OF KRATZER POTENTIAL USING THE PARAMETRIC NIKIFOROV-UVAROV METHOD

Nani Sunarmi^{1*}

¹Program Studi Tadris Fisika, Fakultas Tarbiyah dan Ilmu Keguruan, Universitas Islam Negeri Sayyid Ali Rahmatullah Tulungagung, Indonesia

Email: nanisunarmi@gmail.com

Diterima: 15 September 2023. Disetujui: 21 Nopember 2023. Dipublikasikan: 18 Desember 2023

Abstrak: Sistem molekul yang dipengaruhi oleh potensial Kratzer telah diselidiki menggunakan metode parametrik Nikiforov-Uvarov. Penelitian ini bertujuan untuk memperoleh distribusi probabilitas radial elektron dari sistem yang berada dalam pengaruh potensial Kratzer tanpa modifikasi, dan untuk melakukan simulasi distribusi probabilitas radial untuk molekul oksigen, iodine, karbon monoksida, dan nitrogen monoksida. Distribusi probabilitas radial elektron diperoleh melalui pemecahan persamaan Schrodinger pada bagian radial. Persamaan Schrodinger bagian radial ini diperoleh dengan memisahkan persamaan Schrodinger sistem molekul menjadi tiga bagian: radial, zenithal, dan azimuthal. Pemecahan persamaan Schrodinger pada bagian radial menghasilkan persamaan gelombang radial, di mana nilai mutlak kuadratnya memberikan distribusi probabilitas radial posisi elektron terhadap inti atom. Penyelesaian persamaan Schrodinger bagian radial dilakukan dengan menerapkan metode parametrik Nikiforov-Uvarov. Penyelesaian terhadap persamaan Schrodinger pada bagian radial ini melibatkan reduksi persamaan menjadi persamaan diferensial tipe hipergeometrik. Komputasi numerik dan simulasi grafik distribusi probabilitas radial dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak Matlab. Hasil penelitian menunjukkan bahwa penyelesaian distribusi probabilitas radial elektron bergantung pada parameter spektroskopi seperti energi disosiasi, panjang ikatan kesetimbangan, dan massa molekul, serta bilangan kuantum seperti bilangan kuantum vibrasional (n) dan bilangan kuantum azimuth (l). Molekul iodine menunjukkan amplitudo plot distribusi probabilitas paling tinggi dibandingkan dengan molekul oksigen, karbon monoksida, dan nitrogen monoksida.

Kata Kunci : Distribusi probabilitas radial elektron, Potensial Kratzer, Metode Parametrik Nikiforov-Uvarov

Abstract: Molecular systems influenced by the Kratzer potential have been investigated using the parametric Nikiforov-Uvarov method. This research aims to obtain the radial electron probability distribution of systems under the influence of the Kratzer potential without modifications, and to perform simulations of the radial probability distribution for oxygen, iodine, carbon monoxide, and nitrogen monoxide molecules. The radial electron probability distribution is obtained through the solution of the Schrodinger equation in the radial component. The radial component of the Schrodinger equation is obtained by separating the molecular system Schrodinger equation into three components: radial, zenithal, and azimuthal. The solution of the radial Schrodinger equation yields a radial wave equation, where the square of the absolute value provides the radial probability distribution of the electron's position with respect to the atomic nucleus. The solution to the radial component of the Schrodinger equation is achieved by applying the parametric Nikiforov-Uvarov method. Solving the radial component of the Schrodinger equation involves reducing the equation to a hypergeometric-type differential equation. Numerical computations and graphical simulations of the radial probability distribution are performed using the Matlab software. The research results indicate that the solutions for the radial electron probability distribution depend on spectroscopic parameters such as dissociation energy, equilibrium bond length, and molecular mass, as well as quantum numbers such as vibrational quantum number (n) and azimuthal quantum number (l). Iodine molecules exhibit the highest amplitude in the probability distribution plot compared to oxygen, carbon monoxide, and nitrogen monoxide.

Keywords : Probabilistic radial electron distribution Kratzer Potential, The Parametric Nikiforov-Uvarov Method

PENDAHULUAN

Studi molekul diatomik sangat penting dan dapat diterapkan dalam banyak bidang ilmu kimia dan fisika. Pengeksitasi pada atom beberapa molekul diatomik, terutama molekul diatomik homonuklir, adalah prinsip yang digunakan dalam teknik spektrofotometri. Molekul diatomik mengandung dua atom per molekul dan bisa homonuklir jika mengandung dua atom jenis yang sama per molekul atau heteronuklir jika mengandung dua atom jenis

yang berbeda per molekul [1]. Menurut prinsip dualisme gelombang, karakteristik serta tingkah laku sistem partikel bisa dijelaskan dengan menggunakan persamaan fungsi gelombang yang diperoleh melalui solusi dari persamaan Schrodinger [2]. Solusi dari persamaan Schrodinger tidak hanya memberikan hasil dalam bentuk fungsi gelombang sistem, tetapi juga menghasilkan persamaan energi tingkat[3]. Persamaan gelombang menjadi hal yang mendasar untuk memahami spektrum molekul diatomik dalam

mekanika kuantum non relativistik, karena fungsi gelombang yang dihasilkan berisi semua informasi yang diperlukan untuk menggambarkan sistem kuantum secara menyeluruh.

Selain itu kuadrat dari nilai mutlak persamaan gelombang sistem menunjukkan probabilitas elektron berada di sekitar inti[4]. Menurut teori mekanika kuantum, posisi sebuah elektron hanya bisa digambarkan secara statistik. Teori ini juga menjelaskan metode untuk menghitung probabilitas menemukan sebuah elektron di suatu titik tertentu. Perhitungan ini menghasilkan suatu besaran yang disebut sebagai densitas/distribusi probabilitas radial elektron, yaitu suatu angka yang memberi tahu tentang probabilitas relatif menemukan sebuah elektron di titik tertentu dalam ruang.

Mekanika kuantum juga menyatakan bahwa sebuah elektron dapat dianggap sebagai gelombang stasioner atau awan muatan negatif. Menurut pandangan ini, densitas elektron adalah suatu angka yang memberi tahu seberapa besar muatan yang terletak di setiap titik dalam awan tersebut. Sehingga untuk mengetahui distribusi probabilitas elektron maka harus diketahui terlebih dahulu persamaan fungsi gelombang yang diperoleh dari penyelesaian persamaan Schrodinger.

Seringkali, dalam persamaan Schrodinger untuk sistem partikel, potensial khusus sering menjadi faktor utama yang mempengaruhi sistem. Potensial khusus tersebut diantaranya Coulomb [5], Osilator Harmonik [6], Kratzer [7]. Selain itu, potensial yang dikaji juga dapat berupa gabungan dari beberapa jenis potensial seperti Hulthen-Hellmann [8], Potensial Kuadratik Yukawa dan Eckart [9], Wood-Saxon [10], Hulthen-Non Sentral Posch Teller [11] dan lain-lain. Semakin banyak kombinasi potensial yang mempengaruhi maka semakin kompleks penyelesaian persamaan Schrodinger. Hal tersebut mengakibatkan metode yang digunakan untuk memperoleh penyelesaian menjadi semakin rumit. Penyelesaian persamaan Schrodinger seringkali menghasilkan solusi eksak maupun berupa pendekatan menggunakan metode aproksimasi. Metode tersebut diantara Metode Wentzel-Kramers-Brillouin [12], *Asymptotic Iteration Method* [13], *Supersymmetric Quantum Mechanics* [14], Nikiforov-Uvarov [15].

Dalam penelitian ini, potensial sistem partikel yang dikaji adalah potensial Kratzer. Potensial Kratzer memiliki peran besar dalam konteks kimia molekuler dan fisika kuantum, dan digunakan untuk mendeskripsikan struktur serta interaksi molekuler [16]. Dinamika antar molekul salah satunya digambarkan oleh getaran antar inti dalam molekul diatomik yang dimodelkan dengan potensial Kratzer dipandang sebagai model potensial yang menggambarkan getaran antar inti atom dalam molekul diatomik. Bentuk umum potensial Kratzer sebagai berikut [17]:

$$V(r) = A - \frac{B}{r} + \frac{C}{r^2}. \quad (1)$$

Parameter persamaan (1) menentukan konstanta yang berkaitan dengan energi disosiasi dan jarak ikatan molekul. Pada kondisi khusus, parameter A, B, C bisa merubah bentuk potensial Kratzer menjadi potensial lain. Misalnya nilai jika C dan A bernilai 0 bentuk umum persamaan (1) berubah menjadi potensial Coulomb. Hal ini menunjukkan bahwa potensial Coulomb merupakan varian khusus dari potensial Kratzer. Pada kondisi lain, potensial Kratzer termodifikasi ketika $A = D_e, B = 2D_e r_e, C = D_e r_e^2$ dan lebih dikenal potensial Kratzer termodifikasi. D_e adalah energi disosiasi, yang sebenarnya merupakan jarak vertikal antara titik minimum pada kurva potensial dan titik di mana disosiasi terjadi, yang ditemukan saat panjang ikatan antara atom mencapai $r = r_e$ pada titik kesetimbangan.

Pentingnya meninjau potensial Kratzer terletak pada kemampuannya sebagai model yang sangat tepat dalam menggambarkan interaksi dalam struktur molekuler dalam mekanika kuantum. Beberapa penelitian telah memodifikasi bentuk umum dari potensial Kratzer dengan mengubah parameter-parameter yang dapat disesuaikan misalnya *shifting parameters*[18]. Modifikasi lain dilakukan dengan kombinasi potensial Kratzer-potential *ring shaped* dan dikaji dengan metode Nikiforov-Uvarov [19]. Pada penelitian lainnya, dilakukan penambahan parameter parameter dan diselesaikan menggunakan metode metode Nikiforov-Uvarov [18]. Ketiga penelitian tersebut memiliki kesamaan yakni penerapan metode Nikiforov-Uvarov dengan bentuk potensial Kratzer telah dimodifikasi.

Penyelesaian persamaan Schrodinger dengan potensial-potensial khusus banyak melibatkan metode analitik untuk memperoleh solusi eksak dan aproksimasi. Salah satunya yang sering digunakan adalah metode Nikiforov-Uvarov. Hal ini dikarenakan adanya potensial khusus pada persamaan Schrodinger membuat bentuk umum persamaan menjadi persamaan diferensial orde 2 tipe hipergeometrik [20]. Namun, metode Nikiforov-Uvarov memiliki langkah-langkah yang cukup rumit dan memakan waktu. Untungnya, ada metode yang lebih sederhana yang disebut metode Parametrik Nikiforov-Uvarov (PNU) yang dikembangkan dari metode Nikiforov-Uvarov. Selain itu, beberapa penelitian juga menggunakan metode lain, yaitu Metode Iterasi Asimtotik, untuk menganalisis potensial Kratzer. Metode ini telah dikembangkan lebih lanjut dengan memperkenalkan parameter slope energi untuk membuatnya lebih efisien[13]. Dalam penelitian ini, Potensial Kratzer yang diselidiki tidak mengalami modifikasi seperti yang telah dibahas sebelumnya. Sebaliknya, penelitian ini berfokus pada bentuk umum dari Potensial Kratzer, sebagaimana dijelaskan dalam persamaan (1). Penyelesaian

persamaan Schrodinger sistem dilakukan dengan metode analisis yang menerapkan metode Parametrik Nikiforov-Uvarov. Memperoleh distribusi probabilitas radial elektron dari sistem dalam pengaruh potensial Kratzer tanpa modifikasi serta melakukan simulasi rapat peluang radial untuk molekul NO, CO, O_2, I_2 menjadi tujuan pada penelitian ini. Molekul NO, CO, O_2, I_2 dipilih sebagai contoh kasus.

METODE PENELITIAN

Analisis dan simulasi penyelesaian distribusi probabilitas radial elektron dilakukan dalam dua tahap. Tahap pertama adalah menentukan persamaan fungsi gelombang radial sistem molekul yang berada dalam pengaruh potensial Kratzer. Tahap ini dilakukan dengan memisahkan persamaan schrodinger bagian radial dari persamaan utama dengan teknik pemisahan variabel. Setelah persamaan Schrodinger bagian radial diperoleh maka langkah selanjutnya adalah menyelesaikan persamaan tersebut menggunakan metode Parametrik Nikiforov-Uvarov. Penyelesaian ini tahap ini menghasilkan persamaan fungsi gelombang radial. Dengan demikian, distribusi probabilitas radial elektron dapat diketahui melalui nilai kuadrat persamaan fungsi gelombang radialnya. Hubungan probabilitas radial elektron dengan persamaan fungsi gelombang radial ditunjukkan persamaan

$$\rho(r) = |R_{n,l}|^2. \quad (2)$$

Berdasarkan hubungan tersebut, tahap berikutnya dilakukan komputasi numerik dan simulasi terhadap persamaan probabilitas radial berdasarkan persamaan (2). Pada tahap ini dilakukan komputasi dan simulasi dengan menggunakan perangkat lunak Matlab. Molekul yang akan ditinjau tingkat energinya adalah molekul NO, CO, O_2, I_2 .

Metode Parametrik Nikiforov-Uvarov

Parametrik Nikiforov-Uvarov adalah perluasan dari metode Nikiforov-Uvarov (NU). Metode ini dikembangkan dari metode Nikiforov-Uvarov untuk pendekatan yang bertujuan untuk memperoleh penyelesaian persamaan diferensial orde dua tipe hipergeometrik dengan memanfaatkan sifat ortogonalitas fungsi khusus dengan lebih sederhana. Hal ini dikarenakan metode Nikiforov-Uvarov memiliki langkah yang panjang dan rumit dalam memperoleh solusi. Meski demikian, metode Parametrik Nikiforov-Uvarov tetap mempertahankan bentuk umum persamaan Nikiforov-Uvarov dalam langkah awalnya. Tahap awal dalam penyelesaian persamaan Schrodinger adalah melakukan transformasi koordinat. Dalam situasi khusus, misalnya persamaan diferensial melibatkan potensial tertentu maka koordinat yang digunakan perlu disesuaikan. Umumnya koordinat yang digunakan adalah sistem koordinat bola. Koordinat ini memerlukan penyederhanaan dengan melakukan

transformasi koordinat. Pendekatan yang digunakan dalam transformasi koordinat adalah $r \rightarrow s$. Hasil transformasi koordinat menghasilkan persamaan diferensial orde 2 tipe hipergeometrik yang memiliki bentuk umum [20]:

$$\frac{\square^2 \psi(s)}{\partial s^2} + \frac{\tau(s)}{\sigma(s)} \frac{\partial \psi(s)}{\partial s} + \frac{\sigma(s)}{\sigma^2} \psi(s) = 0 \quad (3)$$

dengan polinomial berderajat satu $\tau(s)$ dan polinomial berderajat dua $\sigma(s)$. Pada metode Parametrik Nikiforov-Uvarov (PNU) dilakukan perluasan dari metode Nikiforov-Uvarov dengan memunculkan parameter-parameter khusus berdasarkan bentuk umum persamaan diferensial orde 2 tipe hipergeometrik pada metode Nikiforov-Uvarov. Parameter yang diperoleh tersebut mampu memberikan hasil yang lebih akurat dalam perhitungan tingkat energi untuk beberapa sistem kuantum tertentu yang dianalisis[9]. Selain itu penyelesaian persamaan fungsi gelombang didefinisikan dengan lebih sederhana. Persamaan diferensial orde dua untuk metode Parametrik Nikiforov-Uvarov dituliskan sebagai berikut [21];

$$\psi''(s) + \frac{c_1 - c_2 s}{s(1 - c_3 s)} \psi'(s) + \frac{[-\chi_1 s^2 + \chi_2 s - \chi_3]}{s^2(1 - c_3 s)^2} \psi(s) = 0. \quad (4)$$

Jika membandingkan persamaan (4) dan (5), diperoleh bahwa metode Parametrik Nikiforov-Uvarov merubah persamaan fungsi $\tau(s)$, $\sigma(s)$ dan $\square(s)$ yang ada pada metode Nikiforov-Uvarov menjadi parameter-parameter c_1, c_2, c_3 . Hubungan $\tau(s)$, $\sigma(s)$ dan $\square(s)$ dan parameter c_1, c_2, c_3 ditunjukkan oleh persamaan berikut:

$$\tau(s) = c_1 - c_2 s \quad (5)$$

$$\sigma(s) = s(1 - c_3 s) \quad (6)$$

$$\square(s) = [-\chi_1 s^2 + \chi_2 s - \chi_3] \quad (7)$$

Parameter-parameter inilah yang dikenal sebagai Konstanta Parametrik. Konstanta parametrik digunakan dalam menentukan eigen nilai yang tidak lain adalah persamaan E dan fungsi eigen yang tidak lain adalah $\psi(s)$. Selain ketiga parameter c_1, c_2, c_3 pada persamaan (4) terdapat konstanta parametrik lainnya. Konstanta parametrik lainnya yang ditentukan dengan persamaan berikut [22]:

$$c_4 = \frac{1}{2}(1 - c_1) \quad (8)$$

$$c_5 = \frac{1}{2}(c_2 - 2c_3) \quad (9)$$

$$c_6 = \chi_1 + c_5^2 \quad (10)$$

$$c_7 = -\chi_2 + 2c_4 c_5 \quad (11)$$

$$c_8 = \chi_3 + c_4^2 \quad (12)$$

$$c_9 = c_6 + c_3^2 c_8 + c_3 c_7 \quad (13)$$

$$c_{10} = \sqrt{4c_8} + c_1 + 2c_4 \quad (14)$$

$$c_{11} = c_2 + 2[c_3\sqrt{c_8} + \sqrt{c_9}] - 2c_5 \quad (15)$$

$$c_{12} = \sqrt{c_8} + c_4 \quad (16)$$

$$c_{13} = c_5 - [c_3\sqrt{c_8} + \sqrt{c_9}]. \quad (17)$$

Berdasarkan konstanta parametrik tersebut, persamaan energi dapat ditentukan dengan persamaan berikut[23]:

$$c_2n - (2n + 1)c_5 + (2n + 1)[\sqrt{c_9} + c_3\sqrt{c_8}] \quad (18)$$

$$+ n(n - 1)c_3 + c_7 + 2c_3c_8 + 2\sqrt{c_8c_9} = 0$$

Persamaan tersebut tidak lain adalah persamaan yang digunakan untuk mencari eigen nilai energi. Sedangkan untuk penyelesaian persamaan fungsi gelombang diketahui dengan menggunakan persamaan [24]

$$\square(s) = \phi(s)\chi_n(s) = N_n s^{c_{12}}(1 - c_3s)^{-\frac{c_{13}-c_{12}}{c_3}} \quad (19)$$

$$P_n^{(c_{10}-1, \frac{c_{11}}{c_3}-c_{10}-1)}(1 - 2c_3s)$$

dengan N_n adalah konstanta normalisasi dan $P_n^{(c_{10}, c_{11})}$ adalah polinomial Jacobi.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Penyelesaian Persamaan Schrodinger Radial Sistem dengan Potensial Kratzer

Bentuk umum persamaan Schrodinger dari sistem partikel dituliskan sebagai berikut:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r)\right] \Psi(r, \theta, \phi) = E \Psi(r, \theta, \phi). \quad (20)$$

$V(r)$ pada persamaan 20 merupakan bagian potensial yang mempengaruhi sistem. Pada penelitian ini $V(r)$ merupakan persamaan Potensial Kratzer seperti yang ditunjukkan oleh persamaan (1) dan hanya memiliki variabel radial. Dengan demikian potensial ini hanya berpengaruh terhadap bagian radial dari sistem. Sehingga persamaan Schrodinger yang dipengaruhi juga hanya pada bagian radial. Dengan demikian persamaan Schrodinger (20) perlu mengalami pemisahan variabel. Bentuk persamaan Schrodinger bagian radial potensial Kratzer dituliskan sebagai berikut:

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left(E - \left[A - \frac{B}{r} + \frac{C}{r^2} \right] - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right) R(r) = 0 \quad (21)$$

Bentuk persamaan Schrodinger bagian radial (21) berupa persamaan diferensial orde dua tipe hipergeometrik. Penyelesaian persamaan (21)

menghasilkan persamaan fungsi gelombang yang merupakan penyelesaian yang memuat bagian radial saja. Meski demikian penyelesaian bagian radial memuat aspek energi tingkat dari partikel.

Persamaan fungsi gelombang radial dapat diketahui dengan melakukan penyelesaian pada persamaan Schrodinger bagian radial tersebut. Langkah awal yang dilakukan adalah dengan melakukan transformasi pada persamaan (21) agar menjadi persamaan diferensial tipe hipergeometrik. Persamaan (21) dapat ditulis ulang sebagai berikut:

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{2\mu(E-A)}{\hbar^2} r^2 + \frac{2\mu B}{\hbar^2} r - \left(\frac{2\mu C}{\hbar^2} + l(l+1) \right) \right] R(r) = 0. \quad (22)$$

Persamaan (22) tersebut dapat disederhanakan

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{1}{r^2} [-\alpha r^2 + \beta r - \gamma] R(r) = 0. \quad (23)$$

dimana

$$\alpha = -\frac{2\mu(E-A)}{\hbar^2} \quad (24)$$

$$\square = \frac{2\mu B}{\hbar^2} \quad (25)$$

$$\square = \frac{2\mu C}{\hbar^2} + l(l+1). \quad (26)$$

Persamaan (23), yang dihasilkan melalui transformasi persamaan (21), telah sesuai dengan bentuk umum dari persamaan diferensial orde dua yang digunakan dalam metode Parametrik Nikiforov-Uvarov, sebagaimana terlihat dalam persamaan (4). Konstanta Parametrik pada metode Parametrik Nikiforov-Uvarov diperoleh dengan membandingkan persamaan (21) dengan persamaan 4. Parameter yang diperoleh diantaranya

$$c_1 = 2 \quad (27)$$

$$c_2 = 0 \quad (28)$$

$$c_3 = 0 \quad (29)$$

$$c_4 = -1/2 \quad (30)$$

$$c_5 = 0 \quad (31)$$

$$c_6 = \alpha \quad (32)$$

$$c_7 = -\beta \quad (33)$$

$$c_8 = 1/4 + \gamma \quad (34)$$

$$c_9 = \alpha \quad (35)$$

$$c_{10} = 1 + \sqrt{1 + 4\gamma} \quad (36)$$

$$c_{11} = \sqrt{4\alpha} \quad (37)$$

$$c_{12} = -1/2 + \sqrt{1/4 + \gamma} \quad (38)$$

$$c_{13} = -\sqrt{\alpha}. \quad (39)$$

Persamaan fungsi gelombang ditentukan menggunakan persamaan (19) dengan mensubstitusikan parameter yang telah diperoleh pada persamaan (27-39). Pada penelitian ini diperoleh $c_3 = 0$ sehingga dilakukan pendekatan[24]:

$$P_n^{(c_{10}-1, c_{11}-c_{10}-1)}(1-2c_3s) = L_n^{c_{10}-1}(c_{11}s) \quad (40)$$

$$(1-c_3s)^{-\frac{c_{11}-c_{10}}{c_3}} = e^{c_{13}s}. \quad (41)$$

Penyelesaian persamaan fungsi gelombang bagian radial diperoleh dengan mensubstitusikan persamaan (40) dan (41) pada persamaan (19) sehingga diperoleh

$$R(r) = N_n r^{c_{12}} e^{c_{13}r} L_n^{c_{10}-1}(c_{11}r). \quad (42)$$

$$= N_n r^{-1/2+\sqrt{1/4+\gamma}} e^{-\sqrt{\alpha}r} L_n^{2\sqrt{1/4+\gamma}}(2\sqrt{\alpha}r). \quad (43)$$

Dan dengan N_n adalah konstanta normalisasi dan $L_n^{c_{10}-1}(c_{11}r)$ adalah polinomial Laguerre. Persamaan fungsi gelombang radial (43) tersebut mengandung besaran yang berhubungan dengan besaran tingkat energi yang dimiliki oleh partikel. Untuk persamaan energi tingkat berdasarkan metode Parametrik Nikiforov-Uvarov ditentukan dengan persamaan (18) dan diperoleh[25]:

$$E = A - \frac{\mu B^2}{2\hbar^2 \left[n + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(\frac{2\mu C}{\hbar^2} + \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 \right)} \right]^2}. \quad (44)$$

Berdasarkan persamaan (44), persamaan tingkat energi sistem partikel dalam pengaruh potensial Kratzer bergantung pada parameter parameter A, B, C yang merupakan konstanta pada persamaan potensial Kratzer. Persamaan energi tingkat juga dipengaruhi oleh bilangan kuantum n dan l . Bilangan n menggambarkan bilangan kuantum vibrasi, sementara l menggambarkan bilangan kuantum azimut. Parameter A, B, C berbeda-beda untuk setiap molekul. Dalam penelitian ini, dipilih nilai-nilai $A = 0, B = 2D_e r_e$, dan $C = D_e r_e^2$, yang mengakibatkan persamaan penyelesaian tingkat energi sistem dalam pengaruh potensial Kratzer pada persamaan (44) mengalami perubahan menjadi[25]:

$$E = - \frac{\mu D_e^2 r_e^2}{\hbar^2 \left[n + \frac{1}{2} + \sqrt{\left(\frac{2\mu D_e r_e^2}{\hbar^2} + \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 \right)} \right]^2}. \quad (45)$$

Nilai D_e, r_e adalah parameter spektroskopi dari molekul. Parameter spektroskopi tersebut ditunjukkan oleh tabel berikut [13]:

Tabel 1. Parameter spektroskopi dari berbagai molekul diatomik.

Moleku l	(amu)	D_e (eV)	r_e (Å)
CO	6,860586000	10,84514471	1,128 2
I ₂	63,45223502	1,581791863	2,662 0
O ₂	7,997457504	5,156658828	1,208 0
NO	7,468441000	8,043782568	1,150 8

Persamaan (40) selain mengandung polinomial Laguerre juga mengandung N_n sebagai konstanta normalisasi. Konstanta normalisasi ini diperoleh dengan syarat kondisi normalisasi

$$\int_0^\infty r^2 R(r)^2 dr = 1. \quad (46)$$

Dengan memasukan persamaan fungsi gelombang (43) maka akan diperoleh

$$N_n = \omega^{1+\frac{\nu}{2}} \sqrt{\frac{n!}{(2n+\nu+1)\Gamma(n+\nu+1)}} \quad (47)$$

dengan $\sqrt{1+4\gamma} = \nu$ dan $\sqrt{4\alpha} = \omega$. Dengan demikian persamaan gelombang radial (43) menjadi

$$R(\rho) = \sqrt{\frac{\omega^3 \Gamma(n+1)}{(2n+\nu+1)\Gamma(n+\nu+1)}} \rho^{\frac{\nu-1}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} L_n^\nu(\rho) \quad (48)$$

Dengan $\rho = \omega r$. Bentuk umum polinomial Laguerre dapat dituliskan[26]

$$L_n^\nu(\rho) = (-1)^n \frac{d^n}{d\rho^n} L_{n+\nu}(\rho) \quad (49)$$

$$L_n^\nu(\rho) = \frac{x^{-\nu} e^\rho}{n!} \frac{d^n}{d\rho^n} (\rho^{n+\nu} e^{-\rho}). \quad (50)$$

Distribusi probabilitas radial elektron secara umum dapat ditentukan dengan persamaan

$$\wp(r) = |R_{n,l}|^2. \quad (51)$$

Jika persamaan gelombang yang telah diperoleh pada persamaan (47) disubstitusikan pada persamaan (51) maka, distribusi probabilitas radial elektron dapat dituliskan

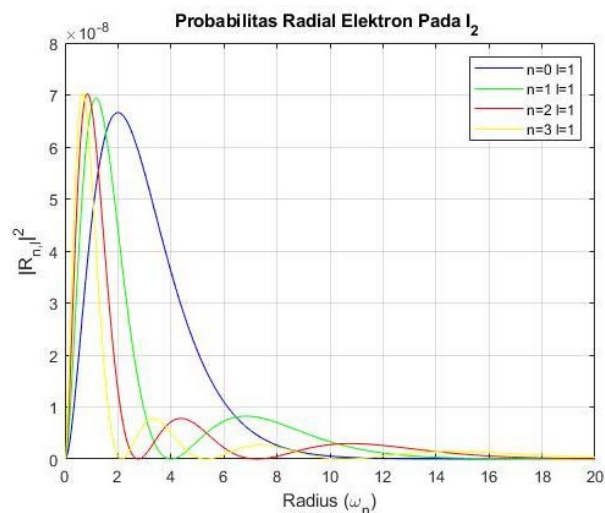
$$\wp(\rho) = \left| \sqrt{\frac{\omega^3 \Gamma(n+1)}{(2n+\nu+1)\Gamma(n+\nu+1)}} \rho^{\frac{\nu-1}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} L_n^\nu(\rho) \right|^2. \quad (52)$$

Persamaan 52 menunjukan adanya ketergantungan distribusi probabilitas radial elektron terhadap ν dan ω . Persamaan merupakan permissalan dari $\sqrt{4\alpha}$ yang tidak lain memiliki ketergantungan pada energi partikel (E) yang dirumuskan oleh persamaan (44). Dengan demikian dipengaruhi oleh bilangan n yang tidak lain bilangan kuantum vibrasional. Sedangkan untuk ω merupakan permissalan $\sqrt{1+4\gamma}$ yang memiliki ketergantungan terhadap l yang tidak lain adalah bilangan kuantum azimut. Selain dan

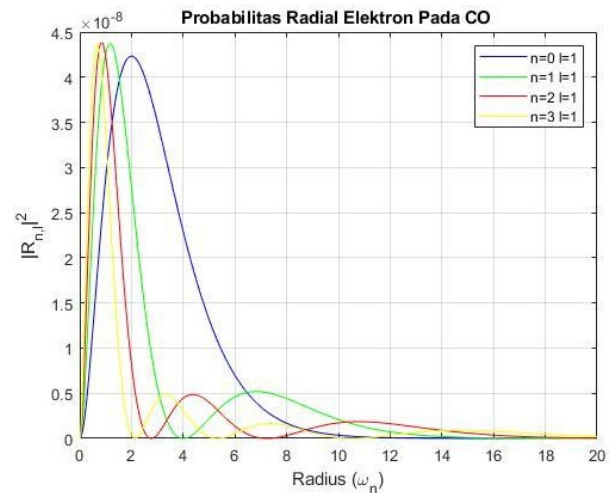
persamaan 52 memiliki ketergantungan terhadap parameter spektroskopi yang ditunjukkan oleh tabel 1.

Simulasi Numerik Rapat Peluang Radial sistem dengan Potensial Kratzer

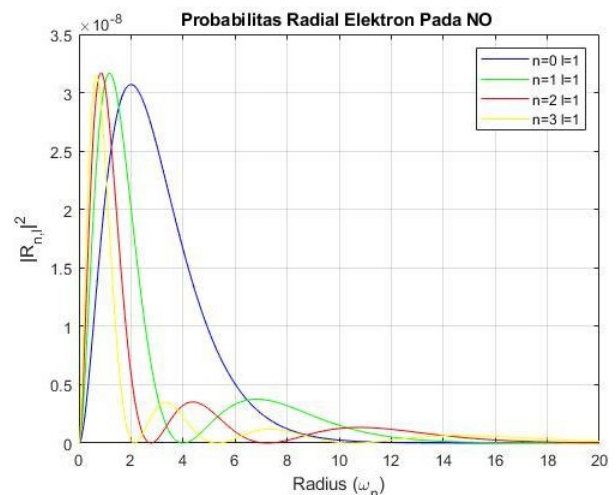
Rapat peluang radial dari sistem molekul dalam pengaruh potensial Kratzer ditunjukkan oleh persamaan (52). Dengan mempertimbangkan parameter spektroskopi pada tabel 1 dan persamaan tingkat energi (44) dilakukan perhitungan secara numerik menggunakan perangkat lunak Matlab untuk memperoleh distribusi probabilitas radial elektron. Komputasi numerik dan simulasi terhadap persamaan distribusi probabilitas radial elektron (52) dilakukan untuk mendapatkan plotting distribusi probabilitas radial elektron yang menyatakan ketergantungan peluang posisi elektron terhadap jaraknya ke inti. Penelitian ini meninjau distribusi probabilitas radial elektron dengan pada keadaan $n = 0$ sampai dengan $n = 4$. Persamaan (52) mengandung polinomial Laguerre bervariasi ρ . Variabel ρ sebelumnya dimisalkan dengan variabel radial yang dikalikan dengan yang merupakan persamaan $\sqrt{4\alpha}$ yang tidak lain memiliki ketergantungan pada energi tingkat partikel (E). Oleh karena itu pada simulasi distribusi probabilitas radial elektron dilakukan dengan bilangan radial berkelipatan yang memiliki nilai berbeda untuk setiap molekul karena energi tingkat partikel (E) berbeda. Berdasarkan hasil komputasi numeriknya dihasilkan simulasi rapat peluang radial pada sistem molekul O_2, I_2, CO, NO seperti yang ditunjukkan oleh gambar 1-4.



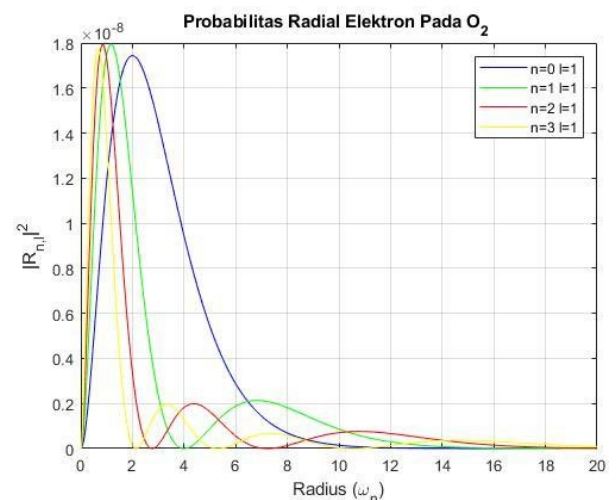
Gambar 1. Distribusi probabilitas radial elektron pada I_2



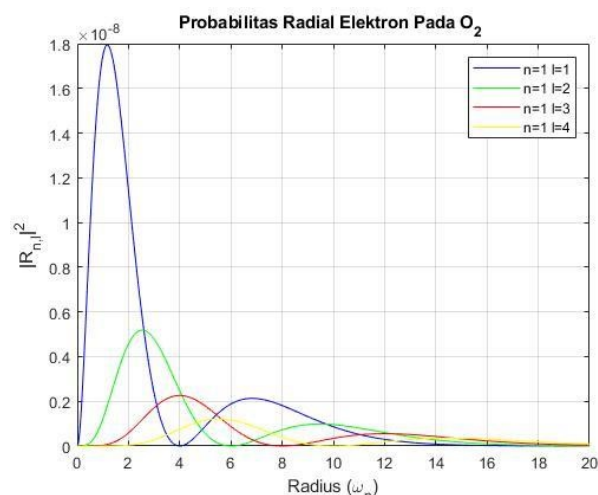
Gambar 2. Distribusi probabilitas radial elektron pada CO



Gambar 3. Distribusi probabilitas radial elektron pada NO



Gambar 4. Distribusi probabilitas radial elektron pada O_2



Gambar 5. Distribusi probabilitas radial elektron pada O_2 dengan variasi l

Berdasarkan gambar 1-4 terlihat secara umum variasi nilai n tidak mempengaruhi bentuk grafik rapat peluang radial pada masing-masing molekul O_2, I_2, CO, NO . Selain itu semakin jauh elektron dari inti atom menunjukkan probabilitasnya semakin berkurang hingga menuju 0. Akan tetapi nilai amplitudo grafik distribusi probabilitas radial elektron memiliki perbedaan dari setiap O_2, I_2, CO, NO dengan urutan molekul dengan amplitudo grafik distribusi probabilitas radial elektron radial dari besar ke kecil adalah I_2, CO, NO, O_2 . Perbedaan amplitudo pada grafik distribusi probabilitas radial elektron pada molekul I_2, CO, NO, O_2 dipengaruhi oleh banyak faktor diantaranya adalah parameter spektroskopi yang tersusun atas D_e, r_e, μ yang berbeda-beda setiap molekul. Parameter spektroskopi mengakibatkan besar energi tingkat yang berbeda meskipun molekul tersebut dalam n dan l yang sama seperti yang ditunjukkan oleh persamaan (44). Selain itu parameter spektroskopi D_e, r_e, μ menentukan nilai yang tidak lain permissalan dari $2\sqrt{1/4 + \gamma}$. Nilai pada dirumuskan oleh persamaan (26). Dimana menjadi salah satu parameter dalam persamaan distribusi probabilitas radial elektron.

Simulasi berikutnya dilakukan dengan melihat variasi bilangan kuantum vibrasional n terhadap distribusi probabilitas radial elektron pada salah satu molekul yakni O_2 dengan bilangan kuantum azimut l sama. Hasil simulasi ditunjukkan oleh gambar 5. Berdasarkan gambar 5, seiring bertambahnya bilangan kuantum vibrasional n membuat distribusi probabilitas radial elektron semakin berkurang yang ditunjukkan oleh amplitudo grafik rapat peluang radial semakin rendah. Selain itu semakin jauh elektron dari inti atom maka semakin kecil rapat peluang untuk mendapati elektron pada posisi tersebut.

KESIMPULAN

Distribusi probabilitas radial elektron pada molekul dalam pengaruh potensial Kratzer berbentuk

polinomial Laguerre dan konstanta normalisasi. Distribusi probabilitas radial tersebut dipengaruhi oleh dipengaruhi oleh banyak faktor diantaranya adalah parameter spektroskopi yang tersusun atas D_e, r_e, μ yang berbeda-beda setiap molekul. Selain itu bilangan kuantum vibrasional n dan bilangan kuantum azimut l menghasilkan amplitudo distribusi probabilitas radial elektron berbeda.

DAFTAR PUSTAKA

- [1] I. B. Okon, O. Popoola, dan C. N. Isonguyo, "Approximate Solutions of Schrodinger Equation with Some Diatomic Molecular Interactions Using Nikiforov-Uvarov Method," *Adv. High Energy Phys.*, vol. 2017, 2017, doi: 10.1155/2017/9671816.
- [2] R. E. Siregar, *Fisika Kuantum*. Jatinagor: Universitas Padjajaran, 2018.
- [3] N. Sunarmi, "Analisis Persamaan Energi Menggunakan Metode Parametrik Nikiforov-Uvarov Untuk Atom Berelektron Tunggal Dengan potensial Hulthen," *J. Pendidik. Fis. dan Sains*, vol. 5, no. 2, hal. 68–74, Sep 2022, doi: 10.52188/jpfs.v5i2.275.
- [4] Sutopo, *Pengantar Fisika Kuantum*. Malang: Jurusan Fisika FMIPA UM, 2005.
- [5] S. A. Karomah, A. R. Jannah, N. R. Aini, R. Zumarotin, dan N. Sunarmi, "Visualisasi Rapat Peluang Posisi Elektron terhadap Sudut pada Atom Deuterium," *Newthon-Maxwell J. Phys.*, vol. 2, no. 2, hal. 35–44, 2021.
- [6] E. Rusmini *et al.*, "Visualisasi osilator harmonik kuantum dengan polinomial hermitte menggunakan simulasi pemrograman matlab," *J. MIPA dan Pembelajarannya*, vol. 2, no. 3, hal. 183–189, 2022, doi: 10.17977/um067v2i3p183-189.
- [7] C. P. Onyenegecha, I. J. Njoku, A. Oname, C. J. Okereke, dan E. Onyeocha, "Dirac equation and thermodynamic properties with the Modified Kratzer potential," *Heliyon*, vol. 7, no. 9, hal. e08023, 2021, doi: 10.1016/j.heliyon.2021.e08023.
- [8] I. O. Akpan, E. P. Inyang, dan E. S. William, "Approximate solutions of the Schrödinger equation with Hulthén-Hellmann potentials for a quarkonium system," *Rev. Mex. Fis.*, vol. 67, no. 3, hal. 482–490, 2021, doi: 10.31349/RevMexFis.67.482.
- [9] A. D. Antia, I. B. Okon, A. O. Akankpo, dan J. B. Usanga, "Non-Relativistic Bound State Solutions of Modified Quadratic Yukawa plus $\delta(r)$-Deformed Eckart Potential," *J. Appl. Math. Phys.*, vol. 08, no. 04, hal. 660–671, 2020, doi: 10.4236/jamp.2020.84051.
- [10] A. Suparmi, L. K. Permatahati, S. Faniandari, Y. Iriani, dan A. Marzuki, "Study of Bohr Mottelson Hamiltonian with minimal length effect for Woods-Saxon potential and its thermodynamic properties," *Heliyon*, vol. 7,

- no. 5, hal. e06861, 2021, doi: 10.1016/j.heliyon.2021.e06861.
- [11] N. Sunarmi, S. Suparmi, dan C. Cari, "Solusi Persamaan Schrödinger untuk Potensial Hulthen + Non-Sentral Poschl-Teller dengan Menggunakan Metode Nikiforov-Uvarov," *Indones. J. Appl. Phys.*, vol. 3, no. 2, hal. 169–180, 2013, doi: 10.13057/ijap.v3i02.1266.
- [12] E. Omugbe, "Non-relativistic Energy Spectrum of the Deng-Fan Oscillator via the WKB Approximation Method," *Asian J. Phys. Chem. Sci.*, hal. 26–36, 2020, doi: 10.9734/ajopacs/2020/v8i130107.
- [13] A. N. Ikot *et al.*, "Bound state solutions of the Schrödinger equation with energy-dependent molecular Kratzer potential via asymptotic iteration method," *Eclet. Quim.*, vol. 45, no. 1, hal. 65–76, 2020, doi: 10.26850/1678-4618eqj.v45.1.p65-76.
- [14] K. R. Purohit, R. H. Parmar, dan A. K. Rai, "Energy and momentum eigenspectrum of the Hulthén-screened cosine Kratzer potential using proper quantization rule and SUSYQM method," *J. Mol. Model.*, vol. 27, no. 12, 2021, doi: 10.1007/s00894-021-04965-0.
- [15] S. N. Fitriani dan Suparmi, "Solusi Persamaan Dirac Dengan Spin Simetri Untuk Potensial Scarf Ii Hiperbolik Terdeformasi-Q Plus Tensor Tipe Coulomb Dengan Menggunakan Metode Nikiforov Uvarov," *Kappa J.*, vol. 1, no. 1, hal. 13, 2017, doi: 10.29408/kappa.v1i1.407.
- [16] M. R. Setare dan E. Karimi, "Algebraic approach to the Kratzer potential," *Phys. Scr.*, vol. 75, no. 1, hal. 90–93, 2007, doi: 10.1088/0031-8949/75/1/015.
- [17] [17] C. Berkdemir, *Theoretical Concepts of Quantum Mechanics*. USA: InTech, 2012.
- [18] N. Ibrahim, U. S. Okorie, N. Sulaiman, G. J. Rampho, dan M. Ramantswana, "Solutions of the Schrodinger equation of the shifted screened Kratzer potential and its thermodynamic functions using the extended Nikiforov–Uvarov method," *Front. Phys.*, vol. 10, no. September, hal. 1–12, 2022, doi: 10.3389/fphy.2022.988279.
- [19] S. M. Ikhdair dan R. Sever, "Exact solutions of the modified kratzer potential plus ring-shaped potential in the D-dimensional Schrödinger equation by the nikiforovuvarov method," *Int. J. Mod. Phys. C*, vol. 19, no. 2, hal. 221–235, 2008, doi: 10.1142/S0129183108012030.
- [20] A. F. Nikiforov dan V. B. Uvarov, *Special Functions of Mathematical Physics: A Unified Introduction with Applications*. Birkhauser: Birkhauser Verlag Basel, 1988.
- [21] B. I. Ita, H. Louis, dan T. O. Magu, "Bound State Solutions of the Klein Gordon Equation with Woods-Saxon Plus Attractive Inversely Quadratic Potential Via Parametric Nikiforov-Uvarov Method," *World Sci. News*, vol. 74, hal. 280–287, 2017.
- [22] I. B. Okon, E. Omugbe, A. D. Antia, C. A. Onate, L. E. Akpabio, dan O. E. Osafire, "Spin and pseudospin solutions to Dirac equation and its thermodynamic properties using hyperbolic Hulthen plus hyperbolic exponential inversely quadratic potential," *Sci. Rep.*, vol. 11, no. 1, hal. 1–21, 2021, doi: 10.1038/s41598-020-77756-x.
- [23] I. B. Okon, A. D. Antia, A. O. Akankpo, dan I. E. Essien, "Eigen-Solutions to Schrodinger Equation with Trigonometric Inversely Quadratic Plus Coulombic Hyperbolic Potential," *Phys. Sci. Int. J.*, vol. 24, no. 3, hal. 61–75, 2020, doi: 10.9734/psij/2020/v24i330183.
- [24] M. Abu-Shady dan H. . Fath-Allah, "The Parametric Generalized Fractional Nikiforov-Uvarov Method And Its Applications," *EAST Eur. J. PHYSICS.*, vol. 3, hal. 248–262, 2023, doi: 10.26565/2312-4334-2023-3-22.
- [25] N. Sunarmi, "Simulasi Penyelesaian Tingkat Energi Sistem Molekul Dalam Pengaruh Pengaruh Potensial Kratzer Dengan Metode Parametrik Nikiforov-Uvarov," *ORBITA J. Has. Kaji. Inov. dan Apl. Pendidik. Fis.*, vol. 8, no. 2, hal. 383–389, 2022, doi: <https://doi.org/10.31764/orbita.v8i2.11452>.
- [26] M. L. Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences*, 3 ed. USA: John Wiley & Sons, Inc, 1983.