

**PERHITUNGAN NILAI ENERGI IKATAN VALENSI
DAN ENERGI KEADAAN ELEKTRONIK DARI H_2 ,
 HeH^+ , $HeHe^{2+}$ MENGGUNAKAN METODE MONTE-
CARLO**

Skripsi

**Disusun untuk memenuhi salah satu syarat
memperoleh gelar Sarjana Sains**










**Marliana Candra Kartika
1306619040**

**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS NEGERI JAKARTA
2023**

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

PERHITUNGAN NILAI ENERGI IKATAN VALENSI DAN ENERGI KEADAAN ELEKTRONIK DARI H_2 , HeH^+ , $HeHe^{2+}$ MENGGUNAKAN METODE MONTE-CARLO

Nama : Marliana Candra Kartika
No. Registrasi : 1306619040

	Nama	Tanda Tangan	Tanggal
Penanggung Jawab			
Dekan	: Prof. Dr. Muktiningsih N., M.Si NIP. 196405111989032001		24-08-2023
Wakil Penanggung Jawab			
Wakil Dekan I	: Dr. Esmar Budi, M.T NIP. 197207281999031002		24-08-2023
Ketua	: Dr. Iwan Sugihartono, M.Si NIP. 197910102008011018		15-08-2023
Sekretaris	: Haris Suhendar, M.Sc NIP. 199404282022031006		15-08-2023
Anggota			
Pembimbing I	: Dr. Teguh Budi Prayitno, M.Si NIP. 198205262008121001		15-08-2023
Pembimbing II	: Yanoar Pribadi Sarwono, Ph.D NIP. 198201072022021001		15-08-2023
Penguji	: Riser Fahdiran, M.Si NIP. 198307172009121008		15-08-2023

Dinyatakan lulus ujian skripsi tanggal 2 Agustus 2023.

LEMBAR PERNYATAAN ORISINALITAS

Saya menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi dengan judul **“Perhitungan Nilai Energi Ikatan Valensi dan Energi Keadaan Elektronik dari H_2 , HeH^+ , dan $HeHe^{2+}$ Menggunakan Metode Monte-Carlo”** yang disusun sebagai syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains dari Program Studi Fisika Universitas Negeri Jakarta adalah karya ilmiah yang saya buat dengan arahan dari dosen pembimbing.

Segala sumber informasi yang diperoleh dari penulis lain yang telah dipublikasikan yang disebutkan dalam teks skripsi ini, telah dicantumkan dalam “Daftar Pustaka” sesuai dengan norma, kaidah, dan etika penulisan ilmiah.

Jika kemudian hari ditemukan sebagian besar skripsi ini bukan hasil karya saya sendiri dalam bagian-bagian tertentu, saya bersedia menerima sanksi pencabutan gelar akademik yang saya sanding dan sanksi-sanksi lainnya sesuai dengan peraturan perundang-undangan yang berlaku.

Jakarta, 8 Agustus 2023



Marliana Candra Kartika

SURAT PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI



KEMENTERIAN PENDIDIKAN DAN KEBUDAYAAN
UNIVERSITAS NEGERI JAKARTA
UPT PERPUSTAKAAN

Jalan Rawamangun Muka Jakarta 13220
Telepon/Faksimili: 021-4894221
Laman: lib.unj.ac.id

LEMBAR PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI KARYA ILMIAH UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS

Sebagai sivitas akademika Universitas Negeri Jakarta, yang bertanda tangan di bawah ini, saya:

Nama : Marliana Candra Kartika
NIM : 1306619040
Fakultas/Prodi : FMIPA / Fisika
Alamat email : marliana.can123@gmail.com

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada UPT Perpustakaan Universitas Negeri Jakarta, Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif atas karya ilmiah:

Skripsi Tesis Disertasi Lain-lain (.....)

yang berjudul :

Perhitungan Nilai Energi Ikatan Valensi dan Energi Keadaan Elektronik dari H_2 , HeH^+ , $HeHe^{2+}$
Menggunakan Metode Monte-Carlo.

Dengan Hak Bebas Royalti Non-Eksklusif ini UPT Perpustakaan Universitas Negeri Jakarta berhak menyimpan, mengalihmediakan, mengelolanya dalam bentuk pangkalan data (*database*), mendistribusikannya, dan menampilkan/mempublikasikannya di internet atau media lain secara *fulltext* untuk kepentingan akademis tanpa perlu meminta ijin dari saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan atau penerbit yang bersangkutan.

Saya bersedia untuk menanggung secara pribadi, tanpa melibatkan pihak Perpustakaan Universitas Negeri Jakarta, segala bentuk tuntutan hukum yang timbul atas pelanggaran Hak Cipta dalam karya ilmiah saya ini.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Jakarta, 24 Agustus 2023

Penulis

(Marliana Candra Kartika)
nama dan tanda tangan

KATA PENGANTAR

Puji dan syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT yang telah memberikan rahmat dan karunia-Nya, sehingga saya dapat menyelesaikan penyusunan proposal ini dengan baik. Penelitian yang akan dilakukan adalah penelitian sains dengan judul “Perhitungan Nilai Energi Ikatan Valensi dan Energi Keadaan Elektronik dari H_2 , HeH^+ , $HeHe^{2+}$ Menggunakan Metode Monte-Carlo”. Dalam penyusunan proposal ini, pastinya tidak lepas dari bantuan berbagai pihak yang ikut berpartisipasi secara langsung maupun tidak langsung sehingga penulis ingin mengucapkan terima kasih kepada:

1. Mama, bapak, dan adik penulis yang selalu berada di samping penulis, membantu, mendukung, dan mendo'akan kelancaran maupun kesuksesan penulis selama ini.
2. Keluarga besar penulis yang selama ini selalu memberikan semangat dan mendo'akan kelancaran segala proses yang penulis tempuh.
3. Bapak Yanoar Pribadi Sarwono, Ph.D, selaku peneliti dari Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) yang telah memberikan ide penelitian dan selalu membimbing dalam pelaksanaan penelitian ini.
4. Dr. Teguh Budi Prayitno, M.Si, selaku dosen pembimbing yang selama ini telah banyak membantu selama masa perkuliahan, dan juga membimbing sekaligus mengarahkan dalam pelaksanaan dan penulisan skripsi.
5. Dr. Widyaningrum Indrasari, M.Si, selaku Koordinator Program Studi Fisika FMIPA Universitas Negeri Jakarta yang telah membantu dan mengatur perjalanan akademis penulis semasa perkuliahan.
6. Dr. Iwan Sugihartono, M.Si, yang telah banyak membantu dan memberi banyak saran atau masukan selama penelitian dan perkuliahan.
7. Seluruh dosen dari Program Studi Fisika FMIPA Universitas Negeri Jakarta atas segala ilmu yang telah diberikan.
8. Rekan satu tim bimbingan, yaitu Achmad Jaelani dan Fiqri Aditya Riyanto, yang selalu menyemangati, membantu, dan memberi dukungan

dari saat Praktik Kerja Lapangan (PKL) sampai dengan penelitian dan penulisan skripsi.

9. Teman masa awal kuliah saya, yaitu Ridha Octa, Rania Virda, Fatha Ramadhani, dan Saffanah Ghina. Terima kasih sudah saling menyemangati dan memberi dukungan selama masa perkuliahan dari awal semester sampai akhir masa perkuliahan.
10. Teman-teman KKN yang masih menyambung tali silaturahmi sampai akhir perkuliahan, yaitu Ferdiansyah Faturrachman, Febriana Yunhas, sekaligus Ridha dan Rania. Terima kasih atas dukungan dan semangatnya selama menjalani masa penelitian.
11. SEVENTEEN, terutama Jeon Wonwoo dan Lee Jihoon, yang selalu memberi konten bervariasi sehingga dapat menjadi penyemangat dikala lelah penelitian dan menulis skripsi. Mereka juga telah menjadi motivasi penulis karena sebagian anggotanya dapat menyelesaikan pendidikan master (S2) walaupun sibuk bekerja sebagai penyanyi.
12. Teman-teman penulis lainnya yang tidak bisa disebutkan satu-persatu, terima kasih atas dukungan secara verbal maupun non-verbal selama masa perkuliahan dan penelitian.

Penulis menyadari bahwa masih banyak kekurangan dalam penulisan laporan skripsi ini, sehingga kritik dan saran yang membangun diharapkan dapat menyempurnakan kekurangan dari penulisan proposal ini. Penulis berharap dengan tersusunnya skripsi ini dapat bermanfaat dan menambah pengetahuan bagi para pembaca.

Penulis,

Marliana Candra Kartika

ABSTRAK

MARLIANA CANDRA KARTIKA. Perhitungan Nilai Energi Ikatan Valensi dan Energi Keadaan Elektronik dari H_2 , HeH^+ , $HeHe^{2+}$ Menggunakan Metode Monte-Carlo. Dibawah bimbingan TEGUH BUDI PRAYITNO, YANOAR PRIBADI SARWONO

Telah dihitung energi ikatan valensi dan energi keadaan elektronik S_0 , S_1 , dan T_1 pada sistem H_2 , HeH^+ , dan $HeHe^{2+}$ menggunakan metode Monte-Carlo. Metode Monte-Carlo digunakan untuk menyederhanakan fungsi integral pada persamaan nilai ekspektasi energi dalam mekanika kuantum. Perhitungan dibangun dari fungsi gelombang yang diperluas dengan orbital ikatan dan anti-ikatan pada setiap atom dan dilengkapi dengan orbital eksponen. Data yang sangat besar sebanyak 50.000 titik diambil sampai 40 *running samplings* menggunakan *spreadsheet*. Energi terendah dari sistem H_2 didapatkan di bawah $-1,0 a.u$ dengan jarak kesetimbangan di sekitar 1,4 – 1,9 Bohr, dari sistem HeH^+ didapatkan di bawah $-2,6 a.u$ dengan jarak kesetimbangan di sekitar 1,3 – 1,6 Bohr, dan dari sistem $HeHe^{2+}$ didapatkan di bawah $-3,5 a.u$ dengan jarak kesetimbangan di sekitar 1,2 – 1,5 Bohr. Hasil energi terendah dan jarak kesetimbangan dari masing-masing sistem menunjukkan adanya pengaruh nilai orbital eksponen pada besarnya komponen energi sistem dan jarak kesetimbangan. Komponen energi diperhitungkan dan diplot untuk visualisasi pemahaman konsep dari energi ikatan valensi dan energi keadaan elektronik pada sistem mekanika kuantum.

Kata kunci: Komponen energi, ikatan valensi, keadaan elektronik, orbital eksponen

ABSTRACT

MARLIANA CANDRA KARTIKA. Calculation of Valence Bond Energy and Electronic States Energy of H_2 , HeH^+ , $HeHe^{2+}$ Using the Monte-Carlo Method. Under supervised by TEGUH BUDI PRAYITNO, YANOAR PRIBADI SARWONO

The valence bond energies and electronic state energies of S_0 , S_1 , and T_1 in the H_2 , HeH^+ , and $HeHe^{2+}$ systems have been calculated using the Monte-Carlo method. The Monte-Carlo method is used to simplify the integral function in the energy expectation value equation in quantum mechanics. The calculations are constructed from wavefunctions expanded with bonding and anti-bonding orbitals on each atom and complemented by exponential orbitals. A very large data set of 50,000 points was taken up to 40 running samplings using a spreadsheet. The lowest energy from the H_2 system is obtained below $-1.0 a.u$ with an equilibrium distance around 1.4 – 1.9 Bohr, from the HeH^+ system it is obtained below $-2.6 a.u$ with an equilibrium distance around 1.3 – 1.6 Bohr, and from the $HeHe^{2+}$ system it is obtained below $-3.5 a.u$ with an equilibrium distance around 1.2 – 1.5 Bohr. The results of the lowest energy and equilibrium bond length of each system show the effect of exponential orbital on the values of the system energy components and equilibrium distance. Energy components are calculated and plotted to visualize the concept of valence bond energy and electronic state energy in quantum mechanics systems.

Keywords: Energy component, valence bond, electronic state, exponent orbital

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI	i
LEMBAR PERNYATAAN ORISINALITAS	ii
SURAT PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI	iii
KATA PENGANTAR	iv
ABSTRAK	vi
ABSTRACT	vii
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR LAMPIRAN	xiv
BAB I. PENDAHULUAN	1
A. Latar Belakang	1
B. Rumusan Masalah	5
C. Tujuan Penelitian	5
D. Manfaat Penelitian	6
BAB II. KAJIAN PUSTAKA	7
A. Molekul Diatomik	7
1. Molekul Hidrogen (H_2)	7
2. Ion Helium Hidrida (HeH^+)	9
3. Ion Molekul $HeHe^{2+}$	10
B. Persamaan Schrödinger	11
C. Fungsi Gelombang	14
D. Teori Orbital	16
1. Orbital Atom	16
2. Orbital Molekul	17
3. Orbital Eksponen	19
E. Energi Ikatan Valensi	20
F. Energi Keadaan Elektronik	22
G. Nilai Ekspektasi Energi	25

H. Metode Integral Monte-Carlo.....	26
BAB III. METODOLOGI PENELITIAN	28
A. Tempat dan Waktu Penelitian	28
B. Metode Penelitian.....	28
1. Alat Penelitian	29
2. Prosedur Penelitian.....	30
3. Diagram Alir Penelitian.....	37
C. Teknik Pengumpulan dan Analisis Data	39
1. Teknik Pengumpulan Data Penelitian	39
2. Teknik Analisis Data Penelitian	39
BAB IV. HASIL DAN PEMBAHASAN	40
A. Energi Ikatan Valensi pada H_2	40
B. Energi Keadaan Elektronik pada H_2	45
C. Energi Ikatan Valensi pada HeH^+	51
D. Energi Keadaan Elektronik pada HeH^+	56
E. Energi Ikatan Valensi pada $HeHe^{2+}$	62
F. Energi Keadaan Elektronik pada $HeHe^{2+}$	66
G. Perbandingan Hasil Energi Sistem	72
BAB V. KESIMPULAN DAN SARAN.....	76
A. Kesimpulan.....	76
B. Saran	77
DAFTAR PUSTAKA	78
LAMPIRAN.....	83
DAFTAR RIWAYAT HIDUP.....	100

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1.	Ilustrasi ikatan H_2	8
Gambar 2.2.	Ilustrasi ikatan ion HeH^+	9
Gambar 2.3.	Ilustrasi ikatan ion $HeHe^{2+}$	10
Gambar 2.4.	Sketsa koordinat (x, y, z) dan koordinat (r, θ, φ)	13
Gambar 2.5.	Bentuk orbital s dengan koordinat (x, y, z)	16
Gambar 2.6.	Probabilitas elektron dari inti pada orbital $1s$	17
Gambar 2.7.	Penggabungan gelombang (a) satu fasa dan (b) beda fasa.....	18
Gambar 2.8.	Penggabungan dua orbital atom s membentuk orbital molekul (a) anti-ikatan dan (b) ikatan.....	19
Gambar 2.9.	Interaksi dua atom hidrogen terhadap jarak antar kedua inti.....	21
Gambar 2.10.	Diagram orbital molekul pada keadaan dasar.....	23
Gambar 2.11.	Diagram orbital molekul pada keadaan <i>singlet</i>	23
Gambar 2.12.	Diagram orbital molekul pada keadaan <i>triplet</i>	24
Gambar 3.1.	Ilustrasi molekul diatomik dengan jarak ikatan, R_{AB} , yang ditempatkan dalam kotak berukuran $6 \times 6 \times (6 + R_{AB})$ Bohr.....	34
Gambar 3.2.	Diagram alir penelitian.....	38
Gambar 4.1.	Grafik energi terendah dari ikatan valensi keadaan dasar pada H_2 dengan jarak ikatan $1,0 - 2,0$ Bohr.....	42
Gambar 4.2.	Grafik energi ikatan valensi H_2 dengan nilai $\alpha = 0,8/\text{Bohr}$	43
Gambar 4.3.	Grafik energi ikatan valensi H_2 dengan nilai $\alpha = 0,9/\text{Bohr}$	43
Gambar 4.4.	Grafik energi ikatan valensi H_2 dengan nilai $\alpha = 1,0/\text{Bohr}$	44
Gambar 4.5.	Grafik energi ikatan valensi H_2 dengan nilai $\alpha = 1,1/\text{Bohr}$	44
Gambar 4.6.	Grafik energi terendah dari keadaan elektronik dasar (S_0) H_2 pada jarak ikatan dari $1,0 - 2,0$ Bohr.....	46
Gambar 4.7.	Grafik energi terendah dari keadaan tereksitasi <i>singlet</i> 1 (S_1) H_2 pada jarak ikatan dari $2,5 - 4,0$ Bohr.....	48
Gambar 4.8.	Grafik energi keadaan elektronik H_2 dengan nilai orbital eksponen (α) = $0,8/\text{Bohr}$	49

Gambar 4.9.	Grafik energi keadaan elektronik H_2 dengan nilai orbital eksponen (α) = 0,9/Bohr	50
Gambar 4.10.	Grafik energi keadaan elektronik H_2 dengan nilai orbital eskponen (α) = 1,0/Bohr	50
Gambar 4.11.	Grafik energi keadaan elektronik H_2 dengan nilai orbital eskponen (α) = 1,1/Bohr	51
Gambar 4.12.	Grafik energi terendah dari ikatan valensi keadaan dasar pada HeH^+ dengan jarak ikatan dari 1,0 – 2,0 Bohr	53
Gambar 4.13.	Grafik energi ikatan valensi HeH^+ dengan nilai α = 1,6/Bohr....	54
Gambar 4.14.	Grafik energi ikatan valensi HeH^+ dengan nilai α = 1,7/Bohr....	54
Gambar 4.15.	Grafik energi ikatan valensi HeH^+ dengan nilai α = 1,8/Bohr....	55
Gambar 4.16.	Grafik energi ikatan valensi HeH^+ dengan nilai α = 1,9/Bohr....	55
Gambar 4.17.	Grafik energi terendah dari keadaan elektronik dasar (S_0) HeH^+ dengan jarak ikatan dari 1,0 – 2,0 Bohr	57
Gambar 4.18.	Grafik energi terendah dari keadaan tereksitasi <i>singlet</i> 1 (S_1) HeH^+ dengan jarak ikatan dari 2,2 – 3,7 Bohr	59
Gambar 4.19.	Grafik energi keadaan elektronik HeH^+ dengan nilai orbital eksponen (α) = 1,6/Bohr	60
Gambar 4.20.	Grafik energi keadaan elektronik HeH^+ dengan nilai orbital eksponen (α) = 1,7/Bohr	60
Gambar 4.21.	Grafik energi keadaan elektronik HeH^+ dengan nilai orbital eksponen (α) = 1,8/Bohr	61
Gambar 4.22.	Grafik energi keadaan elektronik HeH^+ dengan nilai orbital eksponen (α) = 1,9/Bohr	61
Gambar 4.23.	Grafik energi ikatan valensi $HeHe^{2+}$ dengan nilai orbital eksponen (α) = 1,9/Bohr	63
Gambar 4.24.	Grafik energi ikatan valensi $HeHe^{2+}$ dengan nilai orbital eksponen (α) = 2,0/Bohr	63
Gambar 4.25.	Grafik energi ikatan valensi $HeHe^{2+}$ dengan nilai orbital eksponen (α) = 2,1/Bohr	64

Gambar 4.26. Grafik energi ikatan valensi HeHe ²⁺ dengan nilai orbital eksponen (α) = 2,2/Bohr	64
Gambar 4.27. Grafik energi potensial dari keadaan dasar He ²⁺⁺ yang dihitung menggunakan fungsi SCF, interaksi konfigurasi (CI), dan ekspansi dari 40-terms.....	65
Gambar 4.28. Grafik energi terendah pada keadaan elektronik dasar (S ₀) HeHe ²⁺ dengan jarak ikatan dari 1,0 – 2,0 Bohr	67
Gambar 4.29. Grafik energi terendah pada keadaan tereksitasi <i>singlet</i> 1 (S ₁) HeHe ²⁺ dengan jarak ikatan dari 2,0 – 3,5 Bohr	69
Gambar 4.30. Grafik energi keadaan elektronik HeHe ²⁺ dengan nilai orbital eksponen (α) = 1,9/Bohr	70
Gambar 4.31. Grafik energi keadaan elektronik HeHe ²⁺ dengan nilai orbital eksponen (α) = 2,0/Bohr	70
Gambar 4.32. Grafik energi keadaan elektronik HeHe ²⁺ dengan nilai orbital eksponen (α) = 2,1/Bohr	71
Gambar 4.33. Grafik energi keadaan elektronik HeHe ²⁺ dengan nilai orbital eksponen (α) = 2,2/Bohr	71
Gambar 4.34. Perbandingan grafik energi ikatan valensi dan keadaan elektronik dari H ₂ saat nilai α = 1,0/Bohr	73
Gambar 4.35. Perbandingan grafik energi ikatan valensi dan keadaan elektronik dari HeH ⁺ saat nilai α = 1,8/Bohr	74
Gambar 4.36. Perbandingan grafik energi ikatan valensi dan keadaan elektronik dari HeHe ²⁺ saat nilai α = 2,1/Bohr	75

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1.	Komponen sudut dari beberapa fungsi gelombang umum.....	14
Tabel 3.1.	Rincian waktu penelitian.....	28
Tabel 4.1.	Tabel komponen energi terendah dari ikatan valensi dasar H_2	40
Tabel 4.2.	Tabel komponen energi terendah pada keadaan S_0 dari H_2	45
Tabel 4.3.	Tabel komponen energi terendah pada keadaan S_1 dari H_2	47
Tabel 4.4.	Tabel komponen energi terendah dari ikatan valensi dasar HeH^+	52
Tabel 4.5.	Tabel komponen energi terendah pada keadaan S_0 dari HeH^+	56
Tabel 4.6.	Tabel komponen energi terendah pada keadaan S_1 dari HeH^+	58
Tabel 4.7.	Tabel komponen energi terendah pada keadaan S_0 dari $HeHe^{2+}$	66
Tabel 4.8.	Tabel komponen energi terendah pada keadaan S_1 dari $HeHe^{2+}$	68



DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Penurunan rumus perhitungan nilai ekspektasi energi ikatan valensi dari H_2	84
Lampiran 2. Penurunan rumus perhitungan nilai ekspektasi energi keadaan elektronik dari H_2	88
Lampiran 3. Penurunan rumus perhitungan nilai ekspektasi energi ikatan valensi dari HeH^+	91
Lampiran 4. Penurunan rumus perhitungan nilai ekspektasi energi ikatan valensi dari $HeHe^{2+}$	93
Lampiran 5. Prosedur penelitian menggunakan <i>spreadsheet</i>	95
Lampiran 6. Hasil perhitungan nilai energi	99

