

Tingkat Energi Pada Osilator Anharmonik 1 Dimensi Menggunakan Metode Perturbasi Orde 2

Nur Afifah Zen¹, Rany Nuraini²

¹ Program Studi Teknik Telekomunikasi, Fakultas Teknik Telekomunikasi dan Elektro
Institut Teknologi Telkom Purwokerto, Jl. DI Panjaitan No.128 Purwokerto, Indonesia

² Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Institut Teknologi Bandung, Jl. Ganesha No.10 Bandung, Indonesia

Info Artikel

Histori Artikel:

Diterima: 17 Februari, 2020
Direvisi: 24 Juni, 2020
Diterbitkan: 1 September, 2020

Kata kunci:

tingkat energi
osilator anharmonik
metode perturbasi
koreksi energi

Keywords:

energy level
anharmonic oscillator
perturbation method
energy correction

Penulis Korespondensi:

Nur Afifah Zen
afifah@ittelkom-pwt.ac.id

ABSTRAK

Penentuan tingkat energi dari potensial osilator anharmonik dapat diperoleh dengan berbagai metode pendekatan. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan koreksi tingkat energi osilator anharmonik 1 dimensi menggunakan metode perturbasi hingga orde 2 dimana potensial gangguan dianggap berbentuk kuartik αx^4 . Metode perhitungan orde 2 dilakukan menggunakan gambaran Heseinberg dengan mendefinisikan operator kreasi dan anihilasi untuk mendapatkan koreksi energi pada tingkat tersebut. Berdasarkan perhitungan yang dilakukan, potensial gangguan harus memiliki nilai pada rentang $0 < \lambda(\alpha) < 0.4$ agar metode yang digunakan valid. Perbandingan hasil koreksi tingkat energi perturbasi orde 2 dengan metode numerik dan WKB menunjukkan bahwa semakin tinggi tingkat energi semakin besar persentase *error*, sehingga metode perturbasi hanya sesuai jika digunakan pada tingkat energi rendah.

Determination of energy levels the oscillator potential can be obtained by various methods. This study discusses determining the energy level of a 1-dimensional anharmonic oscillator using perturbation methods up to 2nd order where the potential is considered to be quartic αx^4 . The 2nd order calculation method is carried out using Heseinberg's representation by confirming the creation and annihilation operators to obtain an energy correction at that level. Based on calculations, the perturbation potential must have a value with a range of $0 < \lambda(\alpha) < 0.4$ for the method used is valid. Comparison of 2nd order perturbation energy levels with numerical and WKB methods shows that the higher the energy level the greater the errors. The perturbation method is only suitable for use at low energy levels..

Copyright © 2020 Author(s)

1. PENDAHULUAN

Osilator harmonik merupakan model yang banyak digunakan sebagai aproksimasi dinamika dari molekul-molekul poliatomik. Apabila ditinjau dari energi vibrasi molekul-molekul tersebut maka model yang sesuai digunakan yaitu osilator anharmonik. Algoritma digunakan pada model anharmonik $^{12}\text{CO}_2$ dan $^{13}\text{CO}_2$ untuk menentukan potensial kubik dan kuartik dari potensial anharmonik (Pariseau dkk, 1965). Penentuan tingkat energi dari potensial anharmonik telah banyak diperoleh menggunakan berbagai metode pendekatan. Pada penelitian yang telah dilakukan sebelumnya diperoleh tingkat energi menggunakan metode pendekatan WKB (*Wentzel-Kramers-Brillouin*) (Lu, 1967; Kesarwani dan Varshni, 1981). Metode WKB memiliki kelebihan yaitu perhitungan yang

digunakan lebih sederhana dibandingkan metode numerik, namun metode WKB lebih sesuai untuk memecahkan permasalahan pada tingkat energi yang tinggi. Metode pendekatan lain yang lebih sederhana yaitu metode pendekatan perturbasi dimana nilai hamiltonian diberi potensial gangguan anharmonik. Penelitian sebelumnya menyatakan bahwa solusi eksak koreksi tingkat energi orde 3 diperoleh menggunakan metode pendekatan teori perturbasi secara konvensional dimana potensial gangguan yang diberikan berbentuk kuartik (Floyd dkk, 2011).

Penelitian ini bertujuan untuk menentukan koreksi tingkat energi hingga orde 2 sampai tingkat energi ke-4 menggunakan teori perturbasi, sehingga diperoleh karakteristik validitas potensial gangguan dari metode pendekatan perturbasi. Teori perturbasi dapat digunakan untuk menentukan perubahan tingkat energi dan fungsi gelombang akibat adanya interaksi antar partikel (Ohno, 2004). Potensial gangguan yang digunakan diambil seperti yang dilakukan oleh Floyd pada tahun 2011, namun dalam perhitungannya menggunakan notasi Dirac sehingga diperlukan operator kreasi dan anihilasi untuk mendapatkan hasil energi.

2. METODE

Metode perturbasi osilator anharmonik diawali dengan melakukan perhitungan tingkat energi serta koreksi energi dari orde 1 sampai orde 2. Perhitungan yang dilakukan selanjutnya diolah untuk menampilkan grafik koreksi energi pada keempat tingkat energi pada orde 2. Potensial gangguan berbentuk kuartik $V(x) = H_1 = \alpha x^4$ pada solusi osilator harmonik 1 dimensi. Pada persamaan Schroedinger dapat dinyatakan dalam bentuk (Griffiths, 2005; Zettili, 2009)

$$H\varphi_n = E_n\varphi_n \quad (1)$$

dengan

$$H = H_0 + H_1 = \left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} kx^2 \right) + \alpha x^4 \quad (2)$$

$$\varphi_n = \varphi_n^{(0)} + \lambda \varphi_n^{(1)} + \lambda^2 \varphi_n^{(2)} \quad (3)$$

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} \quad (4)$$

Maka koreksi energi orde 2 dapat diperoleh secara umum dalam bentuk persamaan (5)

$$E_n^{(2)} = \sum_{i \neq n} \frac{|(H_1)_{ni}|^2}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}} \quad (5)$$

Tingkat energi sampai orde 2 dapat dinyatakan dalam persamaan (6)

$$E_n = E_n^{(0)} + (H_1)_{nn} + \sum_{i \neq n} \frac{|(H_1)_{ni}|^2}{E_n^{(0)} - E_i^{(0)}}, \quad (6)$$

dengan

$$(H_1)_{nm} = \langle n | H_1 | m \rangle \quad (7)$$

$$E_n^{(0)} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega. \quad (8)$$

Operator kreasi dan anihilasi didefinisikan pada persamaan (9) dan (10)

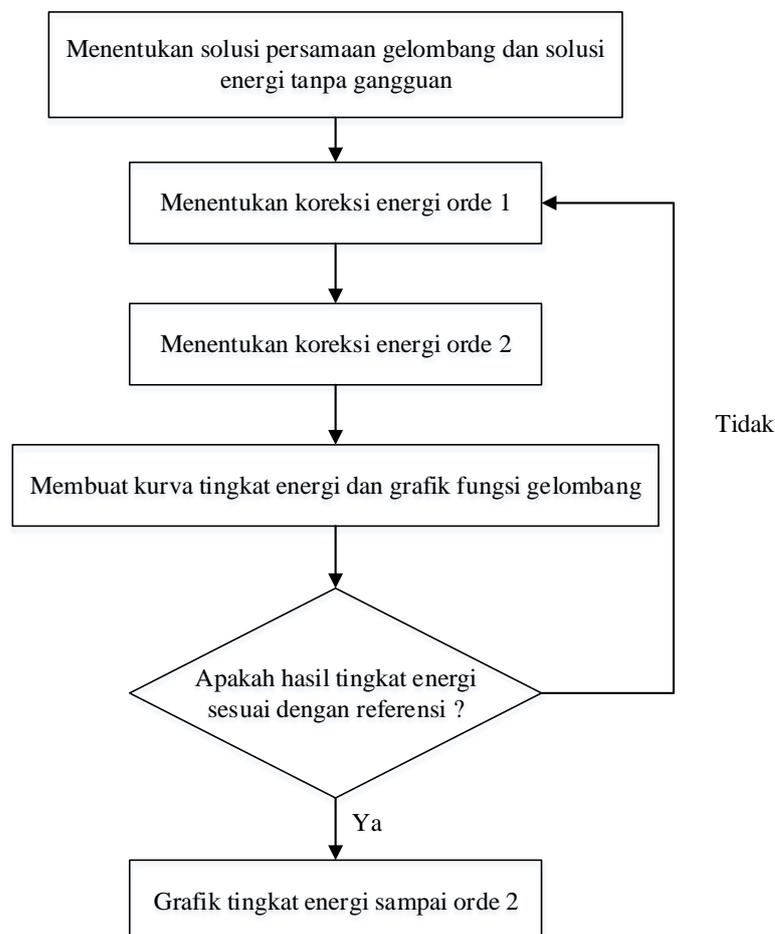
$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (x - ip) \tag{9}$$

$$a^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} (x + ip) \tag{10}$$

Notasi Dirac dapat dinyatakan $a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$ dan $a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$. Sehingga koreksi energi orde 1 dapat dituliskan menjadi

$$\langle n|(H_1)|n\rangle = \alpha \left(\frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{m^2 \omega^2} \right) (6n^2 + 6n + 3) \tag{11}$$

Algoritma penelitian dapat dilihat pada gambar 1.



Gambar 1. Diagram alir penelitian

3. HASIL DAN DISKUSI

Koreksi energi orde 1 diperoleh dalam persamaan berbentuk persamaan kuadrat untuk setiap tingkat energi. Semakin tinggi tingkat energi maka koreksi energi yang diberikan semakin besar. Hal tersebut membuktikan jika energi semakin besar $n \rightarrow \infty$ maka koreksi energi makin besar $E \rightarrow \infty$ yang menyebabkan teori gangguan tidak dapat diterapkan. Berbeda dengan koreksi energi pada

orde 2 dimana semakin besar tingkat energi $n \rightarrow \infty$ maka koreksi energi semakin kecil $E \rightarrow -\infty$ yang menyebabkan tingkat energi akan sama dengan keadaan dasarnya. Jika perhitungan yang digunakan sampai koreksi orde 2 maka teori perturbasi akan sesuai dimana koreksi energi yang dihasilkan akan kecil akibat selisih dari orde 1 yang semakin positif dan orde 2 yang semakin negatif.

Solusi umum osilator harmonik tak terganggu memiliki persamaan

$$\psi_n^{(o)} = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2^n n! x_o}} e^{-\frac{x^2}{2x_o^2}} H_n\left(\frac{x}{x_o}\right) \quad (12)$$

Solusi untuk tingkat energi ke-n dicari menggunakan polinomial Hermite

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \quad (13)$$

$$H_1(y) = 2y$$

$$H_2(y) = 4y^2 - 2$$

$$H_3(y) = 8y^3 - 12y$$

$$H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12$$

Sehingga solusi fungsi gelombang untuk tingkat energi ke-1 sampai ke-4 diuraikan dalam persamaan (14) hingga persamaan (17)

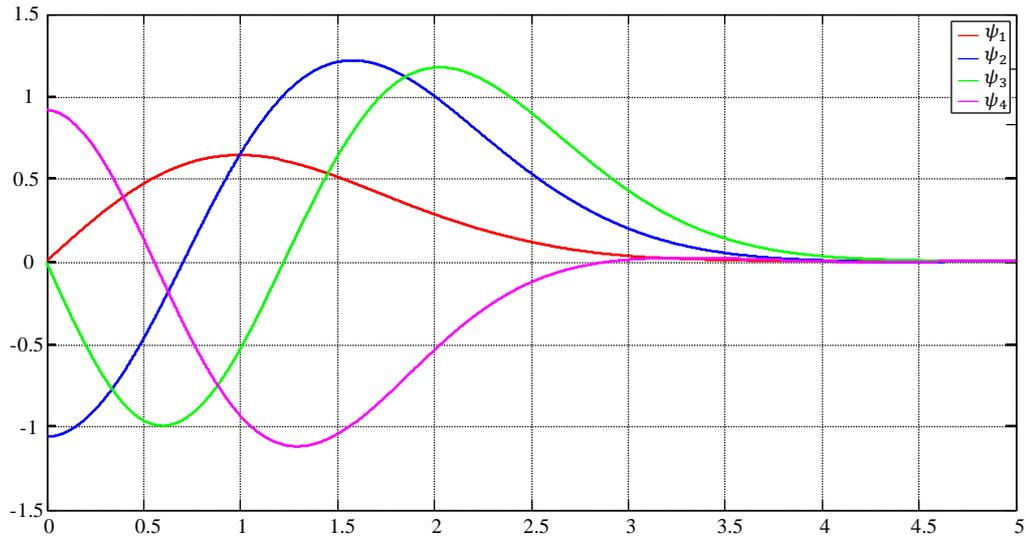
$$\psi_1^{(o)} = \frac{2}{\sqrt{\sqrt{\pi} 2x_o}} \frac{x}{x_o} e^{-\frac{x^2}{2x_o^2}} \quad (14)$$

$$\psi_2^{(o)} = \frac{2}{\sqrt{2}\sqrt{\sqrt{\pi} x_o}} \left(2\left(\frac{x}{x_o}\right)^2 - 1 \right) e^{-\frac{x^2}{2x_o^2}} \quad (15)$$

$$\psi_3^{(o)} = \frac{2}{\sqrt{3}\sqrt{\sqrt{\pi} x_o}} \left(2\left(\frac{x}{x_o}\right)^3 - 3\left(\frac{x}{x_o}\right) \right) e^{-\frac{x^2}{2x_o^2}} \quad (16)$$

$$\psi_4^{(o)} = \frac{2}{2\sqrt{6}\sqrt{\sqrt{\pi} x_o}} \left(4\left(\frac{x}{x_o}\right)^4 - 12\left(\frac{x}{x_o}\right)^2 + 3 \right) e^{-\frac{x^2}{2x_o^2}} \quad (17)$$

Fungsi gelombang dengan persamaan diatas dapat dinyatakan dalam bentuk grafik seperti yang ditunjukkan dalam Gambar 2.



Gambar 2. Grafik fungsi gelombang tak terganggu.

Koreksi energi orde 2 dapat dilihat pada Tabel 1 yang diperoleh 16 suku dari persamaan (5) dimana kondisi variabel n dan k divariasikan.

Tabel 1 Suku Perhitungan Koreksi Energi Orde 2

Suku Ke-	Koreksi Energi	Nilai Eigen	Kondisi
1	$\langle n (a^4) k\rangle$	$\sqrt{k}\sqrt{k-1}\sqrt{k-2}\sqrt{k-3}$	$\langle n k-4\rangle$
2	$\langle n (a^{+2}a^2) k\rangle$	$\sqrt{k}\sqrt{k-1}\sqrt{k-1}\sqrt{k}$	$\langle n k\rangle$
3	$\langle n (aa^+a^2) k\rangle$	$\sqrt{k}\sqrt{k-1}\sqrt{k-1}\sqrt{k-1}$	$\langle n k-2\rangle$
4	$\langle n (a^+a^3) k\rangle$	$\sqrt{k}\sqrt{k-1}\sqrt{k-2}\sqrt{k-2}$	$\langle n k-2\rangle$
5	$\langle n (a^2a^+a) k\rangle$	$\sqrt{k}\sqrt{k}\sqrt{k}\sqrt{k-1}$	$\langle n k-2\rangle$
6	$\langle n (a^+a^3a) k\rangle$	$\sqrt{k}\sqrt{k}\sqrt{k+1}\sqrt{k+2}$	$\langle n k+2\rangle$
7	$\langle n (aa^+a^2a) k\rangle$	$\sqrt{k}\sqrt{k}\sqrt{k+1}\sqrt{k+1}$	$\langle n k\rangle$
8	$\langle n (a^+aa^+a) k\rangle$	$\sqrt{k}\sqrt{k}\sqrt{k}\sqrt{k}$	$\langle n k\rangle$
9	$\langle n (a^3a^+) k\rangle$	$\sqrt{k+1}\sqrt{k+1}\sqrt{k}\sqrt{k-1}$	$\langle n k-2\rangle$
10	$\langle n (a^+a^2aa^+) k\rangle$	$\sqrt{k+1}\sqrt{k+1}\sqrt{k+1}\sqrt{k+2}$	$\langle n k+2\rangle$
11	$\langle n (aa^+aa^+) k\rangle$	$\sqrt{k+1}\sqrt{k+1}\sqrt{k+1}\sqrt{k+1}$	$\langle n k\rangle$
12	$\langle n (a^+a^2a^+) k\rangle$	$\sqrt{k+1}\sqrt{k+1}\sqrt{k}\sqrt{k}$	$\langle n k\rangle$
13	$\langle n (a^2a^+a^2) k\rangle$	$\sqrt{k+1}\sqrt{k+1}\sqrt{k+2}\sqrt{k+2}$	$\langle n k\rangle$
14	$\langle n a^4 k\rangle$	$\sqrt{k+1}\sqrt{k+2}\sqrt{k+3}\sqrt{k+4}$	$\langle n k+4\rangle$
15	$\langle n aa^+a^3 k\rangle$	$\sqrt{k+1}\sqrt{k+2}\sqrt{k+3}\sqrt{k+3}$	$\langle n k+2\rangle$
16	$\langle n (a^+aa^+a^2) k\rangle$	$\sqrt{k+1}\sqrt{k+2}\sqrt{k+2}\sqrt{k+2}$	$\langle n k+2\rangle$

Nilai tingkat energi untuk $n = 1, 2, 3, 4$ dapat dilihat pada persamaan (18) sampai persamaan (21).

$$E_1^{(2)} = -\frac{330\alpha^2\hbar^3}{16m^4\omega^5} \quad (18)$$

$$E_2^{(2)} = -\frac{1230\alpha^2\hbar^3}{16m^4\omega^5} \quad (19)$$

$$E_3^{(2)} = -\frac{3150\alpha^2\hbar^3}{16m^4\omega^5} \quad (20)$$

$$E_4^{(2)} = -\frac{6498\alpha^2\hbar^3}{16m^4\omega^5} \quad (21)$$

Sehingga secara keseluruhan tingkat energi yang diperoleh hingga tingkat energi ke-4 ditunjukkan pada persamaan (22) hingga persamaan (25)

$$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega + \frac{15}{4}\frac{\alpha\hbar^2}{m^2\omega^2} - \frac{330\alpha^2\hbar^3}{16m^4\omega^5} \quad (22)$$

$$E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega + \frac{39}{4}\frac{\alpha\hbar^2}{m^2\omega^2} - \frac{1230\alpha^2\hbar^3}{16m^4\omega^5} \quad (23)$$

$$E_3 = \frac{7}{2}\hbar\omega + \frac{75}{4}\frac{\alpha\hbar^2}{m^2\omega^2} - \frac{3150\alpha^2\hbar^3}{16m^4\omega^5} \quad (24)$$

$$E_4 = \frac{9}{2}\hbar\omega + \frac{123}{4}\frac{\alpha\hbar^2}{m^2\omega^2} - \frac{6498\alpha^2\hbar^3}{16m^4\omega^5} \quad (25)$$

Dengan mendefinisikan parameter λ dan energi ε sebagai

$$\lambda = \frac{2\alpha\hbar}{m^2\omega^3} \quad (26)$$

$$\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (27)$$

Sehingga tingkat energi dapat dituliskan sebagai berikut

$$\varepsilon_1 = 3 + \frac{15}{4}\lambda - \frac{165}{16}\lambda^2 \quad (28)$$

$$\varepsilon_2 = 5 + \frac{39}{4}\lambda - \frac{615}{16}\lambda^2 \quad (29)$$

$$\varepsilon_3 = 7 + \frac{75}{4}\lambda - \frac{1575}{16}\lambda^2 \quad (30)$$

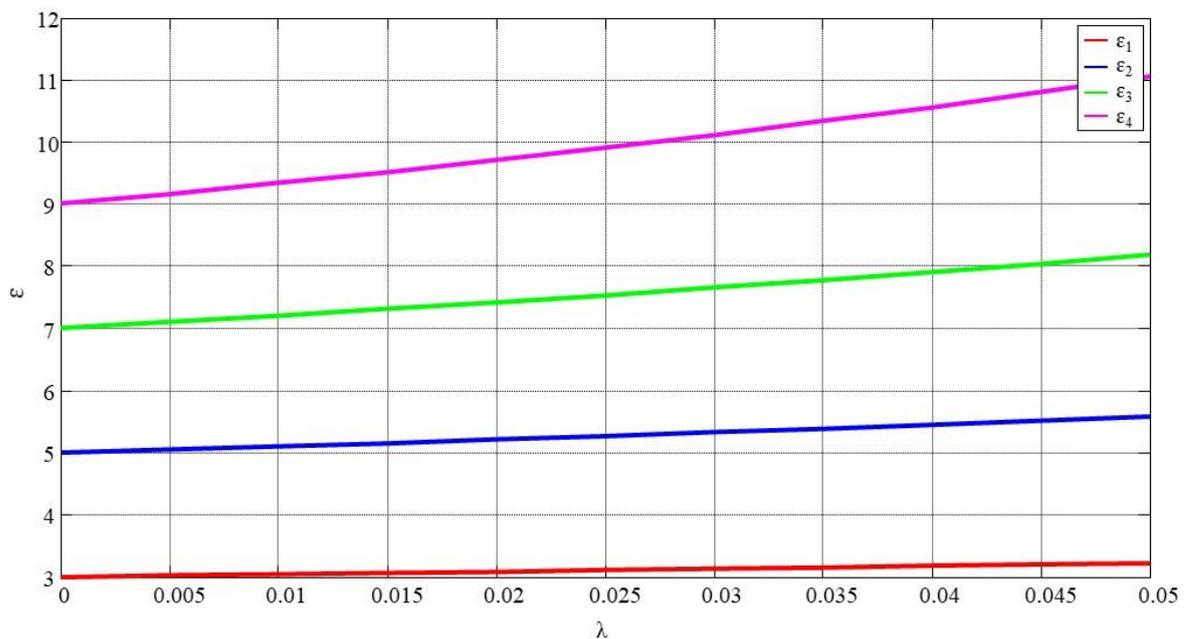
$$\varepsilon_4 = 9 + \frac{123}{4}\lambda - \frac{3249}{16}\lambda^2 \quad (31)$$

Perhitungan hingga tingkat energi ke-4 dilakukan dengan meninjau nilai $\lambda=0.1$. Data hasil perhitungan sampai tingkat energi ke-4 dengan perbandingan antara metode numerik, WKB dan perturbasi ditunjukkan pada tabel 2.

Tabel 2 Hasil Perbandingan Perhitungan Tingkat Energi Menggunakan Metode Numerik (Floyd dkk, 2011), WKB (Kesarwani dan Varshni, 1981) dan Perturbasi

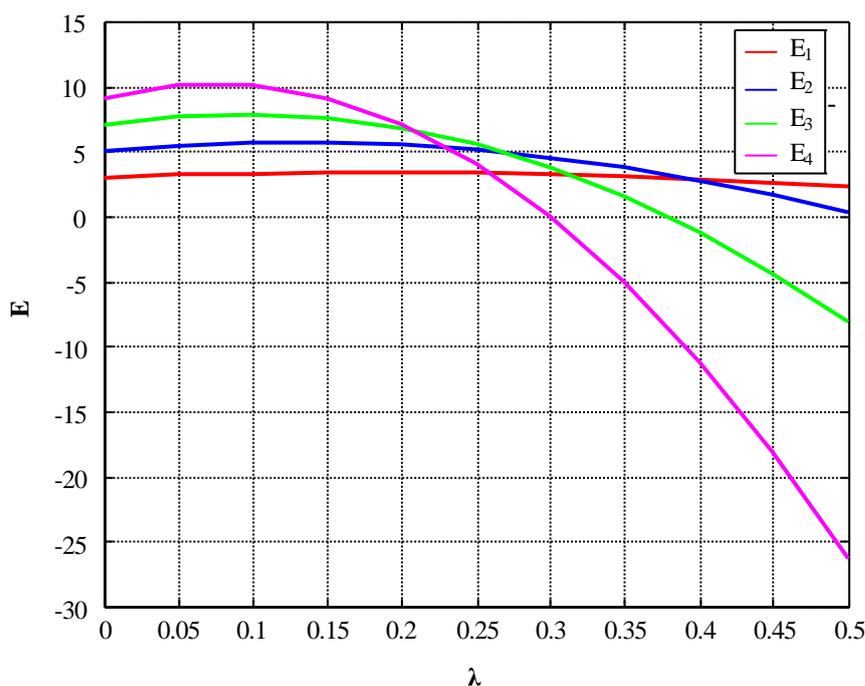
Tingkat Energi				
n	Numerik	WKB	Perturbasi	% Error Perturbasi
0	0.532645	0.532634	0.53094	0.320%
1	1.65344	1.653436	1.63593	1.059%
2	2.87398	2.873979	2.795315	2.737%
3	4.17634	4.176339	3.945315	5.532%
4	6.220304	6.220301	5.022188	19.261%

Pada Tabel 2 terlihat bahwa metode perturbasi orde 2 memiliki *error* yang semakin besar dengan bertambahnya tingkat energi dimana *error* pada tingkat energi ke-4 sebesar 19.261%.



Gambar 3. Grafik hasil perhitungan koreksi tingkat energi menggunakan metode perturbasi terhadap variasi nilai.

Gambar 3 menunjukkan bahwa semakin tinggi tingkat energi maka semakin besar koreksi energi dimana perubahan energi sebanding dengan λ (Sanubary dkk, 2012). Pemilihan orde berpengaruh terhadap hasil, dimana semakin tinggi orde maka semakin akurat hasil yang diperoleh. Potensial gangguan dapat diselesaikan dengan menggunakan metode perturbasi jika nilai λ diperbesar sampai batas tertentu.



Gambar 4. Hasil perhitungan dengan menggunakan metode perturbasi terhadap variasi nilai $\lambda(\alpha) < 0.5$.

Gambar 4 menunjukkan bahwa potensial gangguan harus memiliki nilai yang relatif kecil. Hal tersebut juga disebutkan pada penelitian sebelumnya yang menyatakan jika metode perturbasi hanya sesuai untuk suku pengganggu (λ) yang kecil (Wahdah dkk, 2016). Energi memiliki nilai negatif seiring bertambahnya nilai λ dimana nilainya sebanding dengan konstanta pada potensial gangguan yang diberikan $\lambda \sim \alpha$. Energi negatif tidak diinginkan sehingga nilai $\lambda = \frac{2\alpha \hbar}{m^2 \omega^3}$ harus pada rentang $0 < \lambda < 0.4$ agar metode perturbasi valid.

4. KESIMPULAN

Metode teori perturbasi valid apabila potensial gangguan kecil. Pada kasus osilator anharmonik, metode perturbasi dapat digunakan dimana parameter λ harus pada rentang $0 < \lambda < 0.4$. Hasil perbandingan koreksi energi menggunakan metode perturbasi dengan solusi numerik dan metode WKB menunjukkan *error* yang semakin besar dengan bertambahnya tingkat energi. *Error* yang diperoleh dibawah 10% hanya berhasil sampai tingkat energi ke-3. Dengan demikian metode perturbasi sesuai untuk menentukan tingkat energi kecil dengan potensial gangguan yang relatif kecil.

DAFTAR PUSTAKA

- Floyd, B. T., Ludes, A. M., Moua, C., Ostle, A. A., & Varkony, O. B. (2012). Anharmonic oscillator potentials: exact and perturbation results. *Journal of Undergraduate Research in Physics*, 25.
- Griffiths, D. J. (2005). Introduction to quantum mechanics. 2nd, Pearson, Chapter2. The time-independent schrodinger equation, 90-91.
- Kesarwani, R. N., & Varshni, Y. P. (1981). Eigenvalues of an anharmonic oscillator. *Journal of Mathematical Physics*, 22(9), 1983-1989.
- Lu, P. (1967). WKB calculation of the energy levels of anharmonic oscillators. *The Journal of Chemical Physics*, 47(2), 815-817.
- McGerver, J. D. (2017). *Quantum mechanics: concepts and applications*. Academic Press.
- Ohno, K. (2004). Quantum Chemistry.
- Pariseau, M. A., Suzuki, I., & Overend, J. (1965). Least-Squares Adjustment of Anharmonic Potential Constants: Application to $^{12}\text{CO}_2$ and $^{13}\text{CO}_2$. *The Journal of Chemical Physics*, 42(7), 2335-2344.

- Sanubary, I., Arman, Y., dan Azwar, A. (2012). Penentuan Energi Osilator Kuantum Anharmonik Menggunakan Teori Gangguan. *POSITRON*, *II*(2), 1-5.
- Wahdah, N., Arman, Y., Lapanporo, B.P. (2016). Penentuan Energi Keadaan Dasar Osilator Kuantum Anharmonik Menggunakan Metode Kuantum Difusi Monte Carlo. *POSITRON*, *VI*(2), 47-52.
- Zettili, N. (2009). *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*.