

ENERGI SIMETRI DAN ANTI-SIMETRI PADA ION MOLEKUL HIDROGEN H_2^+

Habib Mustofa, Bambang Supriadi, Rif'ati Dina Handayani

Program Studi Pendidikan Fisika FKIP Universitas Jember
email: Habib.mustofa.07@gmail.com

Abstract: Energy levels of the hydrogen molecular ion H_2^+ consists of the symmetric and anti-symmetric energy. Symmetry energy with the 1s orbital in the hydrogen atom has a minimum energy equilibrium at -15,3634 eV at the position $2,5a_0$, while the anti-symmetric energy does not have the energy balance at all distances between the nuclei. On the symmetric state, if the nuclei close together towards the equilibrium position, the energy will attract powerfull, while far from each other when the nuclei from equilibrium positions, the energy of attraction will be powerless. In anti-symmetric state energy, when the two nuclei close together, it has a repulsive energy powerfull, while the two atomic nuclei far from each other, it has a repulsive energy powerless.

Keywords: symmetry, anti-symmetry, energy, hydrogen molecular ion H_2^+ .

PENDAHULUAN

Atom adalah satuan unit terkecil dari sebuah unsur yang memiliki sifat-sifat dasar tertentu. Setiap atom terdiri dari inti atom dan sejumlah elektron bermuatan negatif yang bergerak mengitari intinya pada lintasan orbit tertentu. Di dalam inti atom terdapat proton yang bermuatan positif dan neutron yang bermuatan netral. Pada tahun 1913, Neils Bohr pertama kali mengajukan teori kuantum untuk atom hidrogen dan mengkaji ulang model atom Rutherford. Model atom Borh memiliki dua bentuk postulat yaitu 1) elektron tidak dapat berputar dalam lintasan yang sembarang, tetapi elektron hanya dapat berputar pada lintasan tertentu tanpa memancarkan energi, sehingga lintasan ini dalam keadaan stasioner dan 2) elektron yang berpindah dari kulit yang lebih dalam ke luar akan menyerap energi dan elektron yang berpindah dari kulit yang lebih luar ke bagian dalam akan memancarkan energi (Bambang, 1996). Model ini merupakan transisi antara model klasik dan mekanika gelombang, karena ketika elektron dalam keadaan stasioner, maka dapat ditinjau secara klasik, sedangkan ketika elektron dapat mengalami eksitasi, maka dapat ditinjau secara mekanika gelombang berdasarkan teori Max Planck.

Molekul merupakan grup netral secara listrik yang mengikat atom dengan cukup kuat sehingga berperilaku sebagai partikel

tunggal. Molekul dapat terbentuk karena adanya ikatan (ikatan ionik, ikatan kovalen, atau ikatan Van Der Waals) antara dua atom atau lebih. Penyebab utama ikatan pada molekul adalah gaya elektrostatis antara inti atom dan elektron. Gaya elektrostatis terdapat dua jenis, yaitu gaya tarik antara elektron dan inti atom dan gaya tolak antar inti atom. Gaya tarik yang dominan ketika jarak kedua atom cukup jauh, sedangkan gaya tolak yang dominan ketika jarak kedua atom sangat dekat. Molekul memiliki posisi keseimbangan pada jarak tertentu, jika gaya tarik dan gaya tolak seimbang. Kestabilan suatu molekul dapat dilihat dengan menggunakan kerapatan probabilitas orbit atom yang sangat berpengaruh pada ikatan molekul, hakikat molekul, dan sifat molekul.

Ion molekul hidrogen H_2^+ merupakan molekul paling sederhana, karena terdiri dari sebuah elektron dan dua inti atom. Ion molekul hidrogen H_2^+ terbentuk karena elektron terpisahkan dari salah satu molekul hidrogen H_2 . Elektron pada ion molekul hidrogen H_2^+ dapat mengorbit pada kedua inti atom. Menurut Krane (1992), terdapat dua kemungkinan elektron mengorbit pada kedua inti atom ion molekul hidrogen H_2^+ yaitu orbit elips yang mengelilingi kedua inti atom dan orbit berbentuk angka delapan yang setiap bulatannya hanya mengelilingi satu inti atom.

Hal ini disebabkan, karena tiap ikatan inti atom ditarik oleh elektron, maka dapatlah terbentuk suatu ikatan molekul. Solusi fungsi gelombang dalam penelitian ini menggunakan pendekatan metode *Linier Combination of Atomic Orbitals* (LCAO) yang diselesaikan dengan persamaan Schrodinger tak gayut waktu.

Energi pada ion molekul hidrogen dengan menggunakan pendekatan LCAO terdapat dua tingkatan energi, yaitu energi simetri dan energi anti-simetri. Energi simetri merupakan energi keadaan rendah, sedangkan energi anti-simetri merupakan energi keadaan tingkat tinggi. Ion molekul hidrogen H_2^+ dapat terbentuk, karena memiliki energi minimum (keseimbangan) untuk mempertahankan ikatannya.

Ion molekul hidrogen H_2^+ dapat diselesaikan dengan menggunakan koordinat ellips (seperti gambar 1) dalam orbital 1s dari atom hidrogen.

Menurut Bransden (1983), ion molekul hidrogen H_2^+ terdiri dari atas dua inti atom dan satu elektron, di mana elektron bergerak dalam pengaruh medan kedua inti atom. Operator hamiltonian untuk pergerakan elektron pada ion molekul hidrogen H_2^+ pada gambar 1 dapat dinyatakan sebagai berikut:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_A} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_B} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{AB}} \quad 1)$$

Ekspektasi energi pada ion molekul hidrogen adalah:

$$E_{\pm} = \frac{H_{AA} \pm H_{AB}}{1 \pm C} \quad 2)$$

dengan

$$H_{AA} = \int \chi^*(r_A) \left(E_H - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_B} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{AB}} \right) \chi(r_A) d\tau \quad 3)$$

$$H_{AB} = \int \chi^*(r_B) \left(E_H - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_B} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{AB}} \right) \chi(r_A) d\tau \quad 4)$$

$$C = e^{-r_{AB}/a_0} \left(1 + \frac{r_{AB}}{a_0} + \frac{r_{AB}^2}{3a_0^2} \right) \quad 5)$$

Solusi H_{AA} dari persamaan (3) dapat diselesaikan menjadi:

$$H_{AA} = E_H + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{AB}} + A \quad 6)$$

dengan A merupakan energi Coulomb. Energi Coulomb menyatakan bentuk ukuran interaksi antara inti atom dan kerapatan elektron yang berpusat pada inti. Oleh karena itu, didapatkan persamaan A sebagai berikut:

$$A = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \left(\frac{a_0}{r_{AB}} - e^{-\frac{2r_{AB}}{a_0}} \left(1 + \frac{a_0}{r_{AB}} \right) \right) \quad 7)$$

Sedangkan untuk menyelesaikan persamaan (4) adalah sebagai berikut:

$$H_{AB} = C \left(E_H + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{AB}} \right) + B \quad 8)$$

dengan B adalah energi *exchange* (resonansi) dengan hasil:

$$B = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} e^{-\frac{r_{AB}}{a_0}} \left(1 + \frac{r_{AB}}{a_0} \right) \quad 9)$$

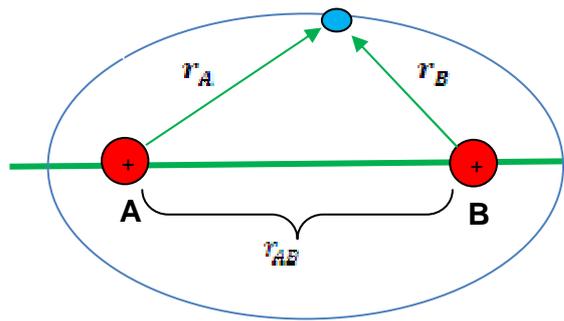
Subtitusikan persamaan (6) dan (8) ke persamaan (2), sehingga didapatkan energi pada ion molekul hidrogen H_2^+ yang dapat dinyatakan dengan:

$$E_{\pm}(r_{AB}) = E_H + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{AB}} + \frac{A \pm B}{1 \pm C} \quad 10)$$

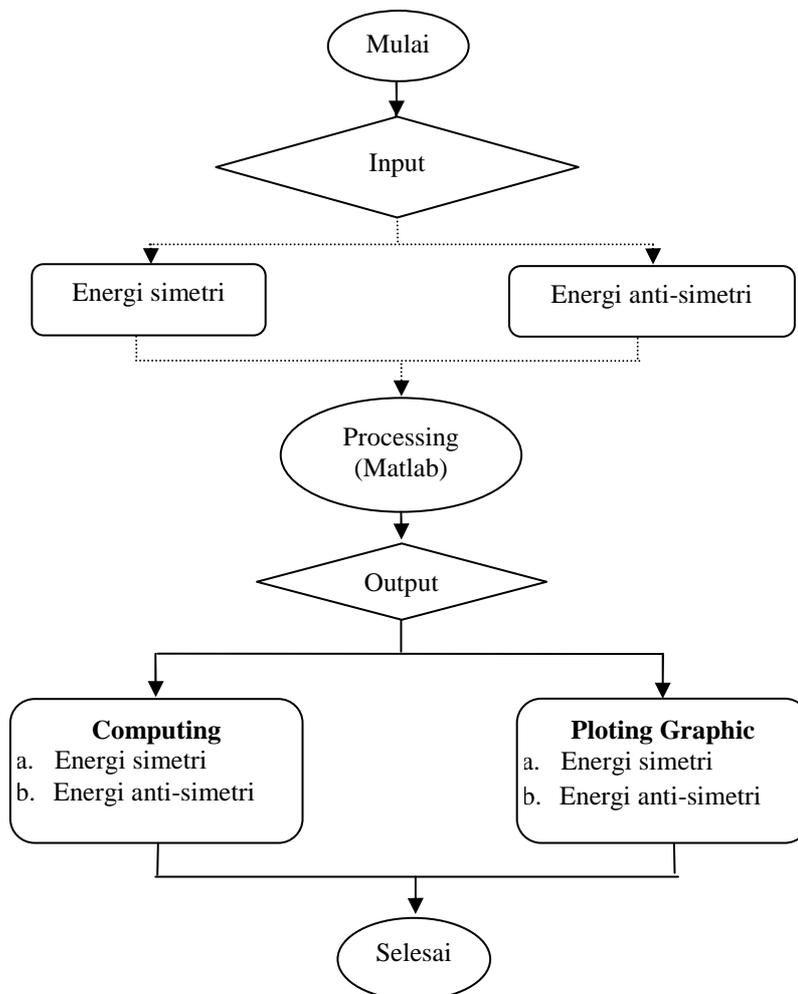
Keterangan: tanda (+) menunjukkan simetri dan tanda (-) menunjukkan anti-simetri.

METODE

Fungsi gelombang ion molekul hidrogen H_2^+ menggunakan pendekatan LCAO, kemudian fungsi gelombang tersebut diselesaikan secara matematis dengan menggunakan persamaan Schrodinger tak gayut waktu. Penyelesaian fungsi gelombang LCAO dengan menggunakan persamaan Schrodinger tak gayut waktu menghasilkan energi simetri dan anti-simetri. Energi simetri dan anti-simetri dihitung dan divisualisasikan ke dalam grafik dua dimensi dengan menggunakan program Matlab 7.7.0 471 (2008b). Adapun metode penelitian ini dapat dinyatakan dalam *flow chart* sebagaimana ditunjukkan pada gambar 2.



Gambar 1. Sistem koordinat Spheroidal dari ion molekul hidrogen H_2^+ . Dua inti atom A, B ditempatkan pada jarak r_{AB} . Elektron di tempatkan pada jarak r_A dan r_B dari inti A dan B. (Sumber: Rufus, 2001)



Gambar 2. Diagram *flowchart* program simulasi tingkat energi ion molekul hidrogen H_2^+ .

HASIL DAN PEMBAHASAN

Data hasil penelitian berupa energi simetri dan anti-simetri pada ion molekul hidrogen H_2^+ dengan menggunakan orbital 1s pada atom hidrogen. Adapun data hasil penelitian disajikan dalam tabel 1. Sedangkan gambar energi simetri dan anti-simetri masing-masing ditunjukkan pada gambar 3 dan 4.

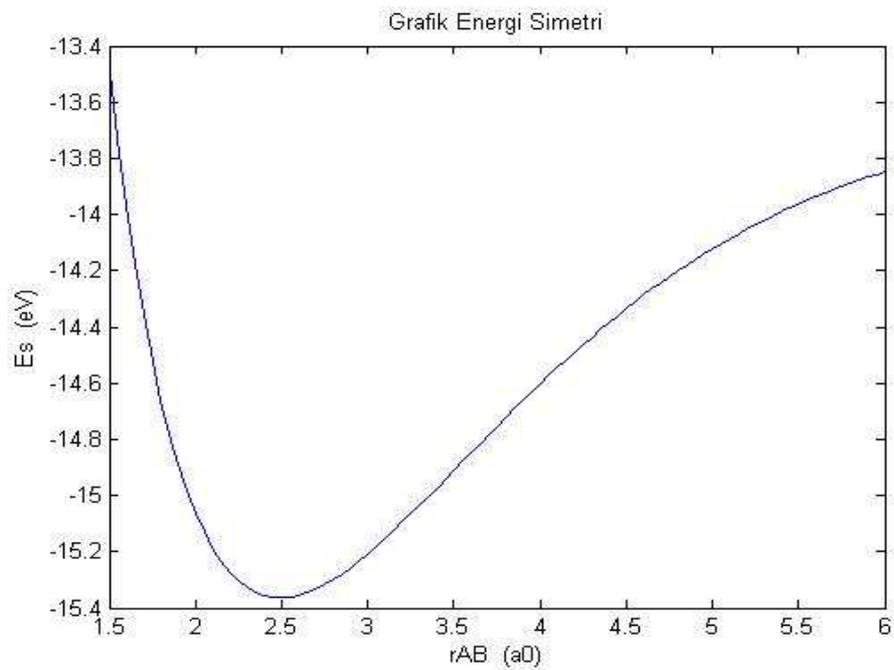
Energi elektron dengan menggunakan pendekatan LCAO pada ion molekul hidrogen keadaan orbital 1s memiliki dua tingkatan energi, yaitu energi keadaan dasar (simetri) dan energi tereksitasi (anti-simetri). Energi keadaan dasar (simetri) pada ion molekul hidrogen H_2^+ memiliki energi yang paling rendah, sedangkan energi tereksitasi memiliki energi paling tinggi. Hal ini disebabkan karena adanya energi *exchange* (resonansi) yang dimiliki oleh ion molekul hidrogen H_2^+ . Energi dalam keadaan simetri akan saling tarik menarik antara kedua inti atom, karena elektron berada di daerah kedua inti atom dan memiliki energi resonansi yang saling tarik-menarik, sedangkan energi dalam keadaan anti-simetri akan saling tolak menolak antara kedua inti atom, karena elektron berada di salah satu sisi inti atom dan memiliki energi resonansi yang saling tolak-menolak. Energi

keadaan simetri pada ion molekul hidrogen H_2^+ memiliki energi kestabilan pada jarak tertentu, sedangkan energi keadaan anti-simetri tidak memiliki energi kestabilan, sehingga energinya tolak menolak di semua jarak antar inti atom r_{AB} .

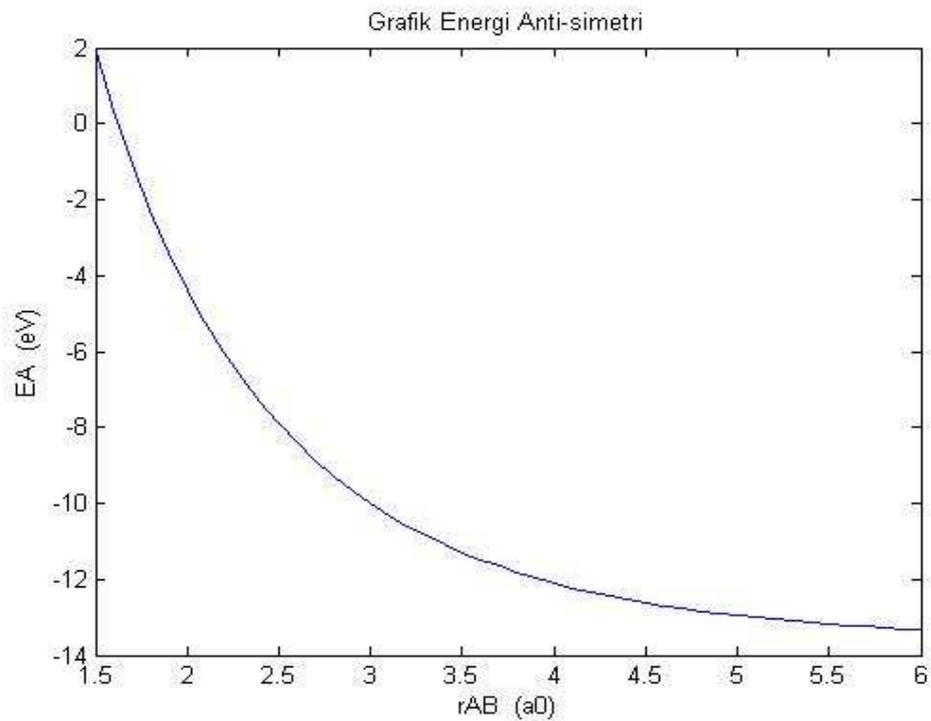
Tingkatan energi pada ion molekul hidrogen H_2^+ ditunjukkan pada tabel 1 yaitu energi keadaan dasar (simetri) dan tereksitasi (anti-simetri) yang berubah jarak antar inti atom r_{AB} . Energi keadaan simetri memiliki energi keseimbangan -15,3033 eV pada posisi $2,5a_0$, sedangkan energi keadaan anti-simetri tidak memiliki energi keseimbangan di semua jarak antar inti atom. Dalam grafik 3 terlihat bahwa energi keadaan simetri (E_+) akan saling tarik menarik sangat kuat menuju titik keseimbangan jika jarak antar inti atom bergerak dari jarak antar inti atom $6a_0$ menuju jarak keseimbangan $2,5a_0$. Hal ini menyebabkan kedua inti atom akan mengalami gaya tarik-menarik menuju posisi keseimbangan. Hal ini disebabkan karena adanya energi disosiasi sebesar 1,7634 eV atau energi keseimbangan -15,3033 eV yang digunakan untuk menstabilkan ikatan antara elektron terhadap kedua inti atom.

Tabel 1. Energi simetri dan anti-simetri ion molekul hidrogen H_2^+ dengan orbital atom hidrogen 1s.

n	r_{AB} (A^0)	E_{1s+} (eV)	E_{1s-} (eV)
1,5	0,7935	-13,4644	1,97365
1,75	0,9257	-14,5199	-1,69435
2	1,0580	-15,0626	-6,38013
2,25	1,1903	-15,3033	-6,38013
2,5	1,3225	-15,3634	-7,90547
2,75	1,4548	-15,3161	-9,08145
3	1,587	-15,207	-9,99763
3,25	1,7192	-15,0655	-107,174
3,5	1,8515	-14,9103	-11,2867
3,75	19,838	-147,535	-11,7394
4	2,116	-14,6028	-12,1009
4,25	2,2483	-14,4625	-12,3907
4,5	2,3805	-14,3352	-12,6237
4,75	2,5128	-14,2218	-12,8113
5	2,645	-14,1223	-12,9627
5,25	2,7773	-14,0362	-13,085
5,5	2,9095	-13,9623	-13,1839
5,75	3,0418	-13,8995	-13,2639
6	3,174	-13,8466	-13,3286



Gambar 3. Energi simetri sebagai fungsi jarak antar inti atom pada ion molekul hidrogen H_2^+ dengan orbital atom hidrogen 1s.



Gambar 4. Energi anti-simetri sebagai fungsi jarak antar inti atom pada ion molekul hidrogen H_2^+ dengan orbital atom hidrogen 1s.

Apabila jarak inti atom lebih kecil dari pada jarak keseimbangan $r_e=2,5a_0$, maka energi tarik-menarik keadaan simetri $E_+(r_{AB})$ akan semakin lemah. Hal ini memberikan indikasi bahwa pada jarak $r_{AB} < r_e = 2,5a_0$, maka inti atom akan saling tarik-menarik secara lemah dan pada posisi tertentu kedua inti atom akan saling tolak menolak, karena untuk menstabilkan ikatan antar inti atom. Apabila inti atom terpisah jauh sekali $r_{AB} \rightarrow \infty$, maka kedua inti atom akan terpisah dan menjadi atom hidrogen H.

Pada grafik 4 merupakan grafik energi keadaan anti-simetri yang tidak memiliki energi keseimbangan disemua jarak antar inti atom. Apabila kedua inti atom saling berdekatan, maka memiliki energi anti-simetri semakin besar, sedangkan apabila kedua inti atom saling berjauhan, maka memiliki energi anti-simetri semakin kecil. Hal ini disebabkan karena energi akan saling tolak menolak di semua jarak antar inti atom dan tidak terjadi tarik menarik antar inti atom, sehingga tidak terjadi ikatan antara kedua inti atom hidrogen. Energi anti-simetri akan saling tolak menolak sangat kuat, apabila ke dua inti atom saling berdekatan dan energi anti-simetri akan saling tolak menolak sangat lemah, apabila ke dua inti atom saling menjauh.

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil simulasi energi simetri dengan orbital 1s pada atom hydrogen H_2^+ memiliki energi keseimbangan -15,3634 eV pada posisi $2,5a_0$, sedangkan energi anti-simetri tidak memiliki energi keseimbangan di semua jarak antar inti atom. Pada keadaan simetri, apabila jarak inti atom lebih kecil dari pada jarak keseimbangan, maka energi tarik menarik akan semakin lemah, sedangkan apabila jarak antar inti atom bergerak dari jarak antar inti atom $6a_0$ menuju jarak keseimbangan, maka energinya akan saling tarik menarik sangat kuat. Pada keadaan anti-simetri, apabila kedua inti atom saling berdekatan, maka memiliki energi tolak-menolak semakin kuat, sedangkan apabila kedua inti atom saling berjauhan, maka memiliki energi tolak-menolak semakin lemah.

DAFTAR PUSTAKA

- Beiser, A. 1992. *Konsep Fisika Modern*. Jakarta: Erlangga.
- Bransden dan Joachain. 1983. *Physics Of Atoms And molecules*. New York: Longman Scientific and Technical.
- Krane, K. 1992. *Fisika Modern*. Jakarta: Universitas Indonesia Press.
- Linus, P. 1935. *Introduction To Quantum Mechanics*. New York: Mcgraw-Hill.