

## METODA HARTREE FOCK UNTUK MENENTUKAN ENERGI TOTAL INTI HELIUM-4

Nursakinah Annisa Lutfin<sup>\*1</sup>, Fauziah A<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Program Studi Pendidikan Fisika, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Sulawesi Barat

<sup>2</sup>Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung

e-mail: <sup>1</sup>[nursakinahlutfin@unsulbar.ac.id](mailto:nursakinahlutfin@unsulbar.ac.id), <sup>2</sup>[fauziah.physics@gmail.com](mailto:fauziah.physics@gmail.com)

### Abstrak

*Helium-4 merupakan salah satu isotop Helium yang stabil. Perhitungan energi total Helium-4 pada level inti ditinjau dengan menganggap inti spherically symmetric. Pada penelitian ini dilakukan perhitungan energi keadaan dasar inti Helium-4 berdasarkan metoda Hartree Fock. Persamaan hamiltonian yang terdiri atas energi kinetik dan potensial dihitung menggunakan program Fortran. Berdasarkan hasil perhitungan yang dilakukan diperoleh energi total inti Helium-4 sebesar -28,4023952 MeV, memiliki kesalahan 0,70% jika dibandingkan dengan hasil penelitian lain dengan menggunakan metode yang sama. Namun memiliki kesalahan lebih kecil sebesar 0,36% jika dibandingkan dengan hasil eksperimen. Hal ini menunjukkan bahwa metode Hartree Fock sudah cukup baik digunakan untuk menghitung energi inti Helium-4.*

**Kata Kunci:** Helium-4, Energi keadaan dasar, Hartree Fock

## HARTREE FOCK METHOD TO DETERMINE THE TOTAL CORE ENERGY HELIUM-4

### Abstract

*Helium-4 is one of the stable Helium isotopes. The calculation of total energy of Helium-4 at the core level is reviewed by considering the spherically symmetric core. In this study the calculation of the Helium-4 core ground state energy is based on the Hartree Fock method. Hamiltonian equations consisting of kinetic and potential energy are calculated using the Fortran program. Based on the results of calculations obtained a total core energy of Helium-4 is -28,4023952 MeV, has an error of 0.70% when compared with the results of other studies using the same method. However, it has a smaller error of 0.36% when compared to the experimental results. These results indicate that Hartree-Fock method can be the good useful tool to calculated the ground state energy of Helium-4.*

**Kata Kunci:** Helium-4, Ground State Energy, Hartree Fock

### PENDAHULUAN

Pada sistem atom kompleks untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger tidak dapat dilakukan secara eksak tetapi dapat dilakukan dengan metode penghampiran [1]. Sama halnya dengan kasus atom, pada kasus inti metode penghampiran yang bisa digunakan untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger salah satunya adalah metode Hartree Fock. Metode Hartree Fock merupakan metode yang didasarkan pada penghampiran medan sentral serta metode variasi [2].

Pada penelitian ini, metode Hartree Fock digunakan untuk menentukan energi inti Helium-4. Helium adalah suatu unsur kimia dalam tabel periodik yang memiliki lambang He dengan nomor atom 2. Diketahui bahwa terdapat delapan isotop Helium. Salah satu isotop Helium yang stabil adalah Helium-4. Secara eksperimen diketahui bahwa Helium-4 memiliki energi total sekitar -28300,7 KeV. Inti atom Helium-4 identik dengan partikel alfa. Helium-4 memiliki stabilitas inti yang tidak lazim karena nukleonnya tersusun secara

peny. Isotop Helium-4, terdiri dari dua proton dan dua neutron.

Sebagaimana yang kita ketahui bahwa partikel tidak dapat didefinisikan seperti pada dunia klasik dalam skala subatomik. Pada saat partikel berukuran sangat kecil, maka suatu fenomena fisis harus dijelaskan dengan konsep mekanika kuantum. Dalam mekanika kuantum, perilaku partikel kuantum dapat dijelaskan dengan menggunakan persamaan Schrodinger yang memiliki bentuk umum :

$$\hat{H}\psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) \tag{1}$$

Untuk kasus bebas waktu, persamaan schrodinger didefinisikan dalam persamaan eigen :

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{2}$$

Di mana keadaan sistem fisis dapat terdefinisi oleh solusi fungsi gelombang  $\psi(\vec{r}, t)$ . Operator  $\hat{H}$  atau Hamiltonian mendefinisikan operator energi total tiap partikel dalam sistem. Hamiltonian satu partikel didefinisikan :

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \nabla^2 + V(\vec{r}) \tag{3}$$

Dimana  $-\frac{1}{2} \nabla^2$  merupakan bagian energi kinetik (atau dapat diganti dengan operator kinetik  $\hat{T}$ ), dan  $V(\vec{r})$  merupakan bagian potensial yang merupakan jumlah dari semua potensial pada partikel (dapat ditulis dengan operator potensial  $\hat{U}$ ). Dalam aplikasinya pada sistem banyak

$$\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle = \sum_{i=1}^N \langle i | t | i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \langle ij | v | [ij] - [ji] \rangle \tag{8}$$

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle &= \sum_{i=1}^N \int dy \varphi_i^*(y) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right) \varphi_i(y) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \int dy dy' \varphi_i^*(y) \varphi_j^*(y') v(y, y') \varphi_i(y) \varphi_j(y') \\ &- \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \int dy dy' \varphi_i^*(y) \varphi_j^*(y') v(y, y') \varphi_j(y) \varphi_i(y') \end{aligned} \tag{9}$$

Karena fungsi gelombang partikel tunggal belum diketahui maka fungsi gelombang

partikel, persamaan schrodinger akan menjadi rumit. Pada konteks ini kita tinjau suatu inti atom, dimana terdapat proton dan neutron. Maka hamiltonian untuk inti atom didefinisikan :

$$H = \sum_t^N \hat{t}_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N \hat{V}(x_i, x_j) \tag{4}$$

Sehingga Hamiltonian inti secara lengkap dinyatakan :

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_c + V_s \tag{5}$$

Maka untuk sistem banyak partikel, persamaan Schrodingernya pun menjadi :

$$\hat{H}\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \tag{6}$$

Dimana energi dari sistem dinyatakan :

$$E = \int \psi^* \hat{H} \psi dr \tag{7}$$

[3].

Pendekatan Hartree Fock mengasumsikan bahwa fungsi gelombang dapat dituliskan sebagai determinan Slater keadaan partikel tunggal.

Karena bentuk spasial eksaknya belum diketahui, maka keadaan partikel tunggal tersebut akan dikarakterisasi berdasarkan bilangan kuantumnya:  $1_{s_{1/2}}, 1_{p_{3/3}}, 1_{p_{1/2}}$  dst, yang familiar dengan model shell. Jumlah keadaan partikel tunggal dalam perhitungan diberikan oleh jumlah partikel (neutron dan proton) di dalam inti.

Nilai ekspektasi Hamiltonian (energi totalnya) dituliskan dengan :

tersebut diminimalkan terhadap energi. Turunan pertama nilai ekspektasi

berdasarkan fungsi gelombang partikel tunggal harus sama dengan nol.

$$\frac{\delta}{\delta \varphi_i^*(x)} [\langle \varphi | \hat{H} | \varphi \rangle - \sum_{i=1}^N \epsilon_i \int dy \varphi^*(y) \varphi(y)] = 0 \quad (10)$$

Dimana perkalian Lagrange, epsilon telah ditambahkan untuk memastikan bahwa fungsi gelombang di normalisasi.

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \sum_i \int dy \varphi_i^*(y) \varphi_j^*(y) v(x,y) \varphi_i(y) \right] \varphi_b(x) - \sum_i \int dy \varphi_i^*(x) v(x,y) \varphi_i(y) \varphi_b(y) = \epsilon_b \varphi_b(x) \quad (11)$$

Matriks densitas dinyatakan dengan

$$\rho(y) = \sum_{i=1}^N \varphi_i^*(y) \varphi_i(y) \quad (12)$$

dan

$$\rho(x,y) = \sum_{i=1}^N \varphi_i^*(x) \varphi_i(y) \quad (13)$$

Maka diperoleh :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \int dy \rho(y) v(x,y) \right] \varphi_b(x) - \int dy \rho(y) v(x,y) \varphi_b(y) = \epsilon_b \varphi_b(x) \quad (14)$$

Persamaan di atas dikenal sebagai persamaan Hartree Fock. Dimana potensialnya bergantung pada  $\rho = \sum_i \varphi_i^* \varphi_i$  yang bergantung pada fungsi gelombang yang akan dicari [4].

## METODE

### Program Fortran

Fortran yang merupakan singkatan dari Formula Translator/Translation merupakan bahasa pemrograman tingkat tinggi pertama dan prosedural. Pertama kali dikembangkan pada tahun 1956 oleh John Backus. Fortran bertujuan untuk mempermudah pembuatan aplikasi matematika, ilmu pengetahuan, dan tehnik dalam hal numerik. Fortran bisa menangani ekspresi matematika dan logika yang kompleks. Pernyataannya cukup pendek

dan sederhana. Program Fortran yang dikembangkan pada satu tipe komputer bisa dengan mudah dimodifikasi agar bisa bekerja pada tipe yang lain.

Terdapat beberapa hal yang menjadikan bahasa pemrograman Fortran lebih unggul dibandingkan dengan bahasa pemrograman lain yaitu,

1. Proses eksekusi / kompilasi program yang cukup cepat.
2. Metode penulisan program sangat fleksibel, setiap bagian blok program dapat ditulis secara tidak berurutan.
3. Mendukung teknik kompilasi secara menyeluruh (all compilation), maksudnya misalkan kita memiliki 5 buah file Fortran yang saling berhubungan maka semua file tersebut dapat langsung di kompilasi semua dalam satu perintah dengan bantuan makefile yang kita buat, bagian ini akan dijelaskan pada bab yang akan datang.
4. Memiliki kompilator (compiler) yang cukup banyak berkembang.

Perhitungan energi total inti Helium-4 dengan metode Hartree Fock dalam penelitian ini dilakukan menggunakan bahasa pemrograman fortran [5].

### Algoritma Hartree Fock

Masalah utama dalam menyelesaikan persamaan Hartree Fock adalah potensial bergantung pada fungsi gelombang yang tidak diketahui. Prosedur penyelesaian persamaannya adalah sebagai berikut.

1. Menebak initial set fungsi gelombang single partikel  $\{\varphi_i(x)\}$
2. Menghitung kerapatan  $\rho(x) = \sum_i \varphi_i^*(x) \varphi_i(x)$
3. Menghitung potensial  $u(x) = 2a\rho + 3b\rho^2$  dimana a dan b adalah parameter yang disesuaikan berdasarkan referensi.
4. Menghitung nilai energi coulomb

$$E_C = 4e^2 \varphi^4 r - \frac{9}{5} e^2 \left( \frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \left[ \frac{\varphi^2}{\pi} \right]^{\frac{4}{3}} \left[ \frac{1}{r_2} \right]^{\frac{5}{3}}$$

5. Menyelesaikan fungsi eigen

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + u(x) \right) \varphi_b(x) + E_c = \varepsilon_b \varphi_b(x)$$

Persamaan di atas diselesaikan bergantung pada set nilai eigen dan fungsi eigen yang tidak terbatas.

- Memilih nilai energi orbital terendah dari solusi yang diperoleh. Jika nilai tersebut identik dengan nilai yang digunakan pada langkah 2, berarti fungsi gelombang Hartree Fock konvergen telah ditemukan. Jika tidak maka mengulangi langkah 2 hingga solusi yang diperoleh konvergen.

Penyelesaian persamaan fungsi eigen dengan menggunakan prinsip variational untuk memperoleh nilai minimum energi di titik stationer. Metode untuk menentukan iterasi dari fungsi gelombang yang benar dilakukan selama proses antara proses menebak fungsi gelombang dengan penentuan eigenstate Hartree Fock, setiap keadaan single-particle  $\psi_i(x)$  dapat diekspansikan dalam basis keadaan Hartree Fock yang belum diketahui  $\{\varphi_i(x)\}$ .

$$\psi_i(x) = \sum_a C_{ai} \varphi_a(x) \tag{15}$$

Fungsi gelombang ini diikuti dengan operator terhitung dari hamiltonian Hartree Fock  $\hat{h}$ , yang terbentuk dari energi kinetik dan potensial Hartree Fock  $u(x)$ .

$$e^{-\delta(\hat{h}-\varepsilon_i)} \psi_i(x) \tag{16}$$

Dimana  $\delta$  adalah parameter yang akan dijelaskan nanti dan  $\varepsilon_i$  adalah nilai ekspektasi dari tebakan  $\hat{h}$  sementara pada keadaan  $\psi_i$ . Karena  $\{\varphi_a(x)\}$  terkonstruksi dari nilai eigen  $\hat{h}$  maka,

$$\begin{aligned} e^{-\delta(\hat{h}-\varepsilon_i)} \psi_i(x) &= \\ \sum_a C_{ai} e^{-\delta(\hat{h}-\varepsilon_i)} \varphi_a(x) &= \\ \sum_a C_{ai} e^{-\delta(\varepsilon_a-\varepsilon_i)} \varphi_a(x) & \end{aligned} \tag{17}$$

Kemudian energi Hartree Fock single partikel yang tinggi akan dihilangkan dari fungsi gelombang  $\varphi_a(x)$  trial karena

eksponensial. Keadaan energi Hartree Fock terendah, dengan  $\varepsilon_a$  terendah akan dipertahankan, dan pada iterasi berikutnya nilai  $\varepsilon_i$ , energi trial keadaan dikonvergenkan dengan  $\varepsilon_a$ . Iterasi dilakukan dengan menggunakan nilai tebakan  $\hat{h}$  dan menggunakan parameter kecil  $\delta$  untuk memastikan bahwa pathnya terbentuk dengan baik selama perhitungan fungsi gelombang Hartree Fock yang sebenarnya. Pengoperasian nilai eksponensial  $e^{-\delta(\hat{h}-\varepsilon_i)}$  dilakukan dengan menggunakan ekspansi fungsi Taylor dengan memastikan nilai  $\delta$  tetap kecil.

$$e^{-\delta(\hat{h}-\varepsilon_i)} \approx 1 - \delta(\hat{h} - \varepsilon_i) \tag{18}$$

Hal ini akan mengubah fungsi gelombang, sehingga harus di normalisasi untuk setiap iterasi [6].

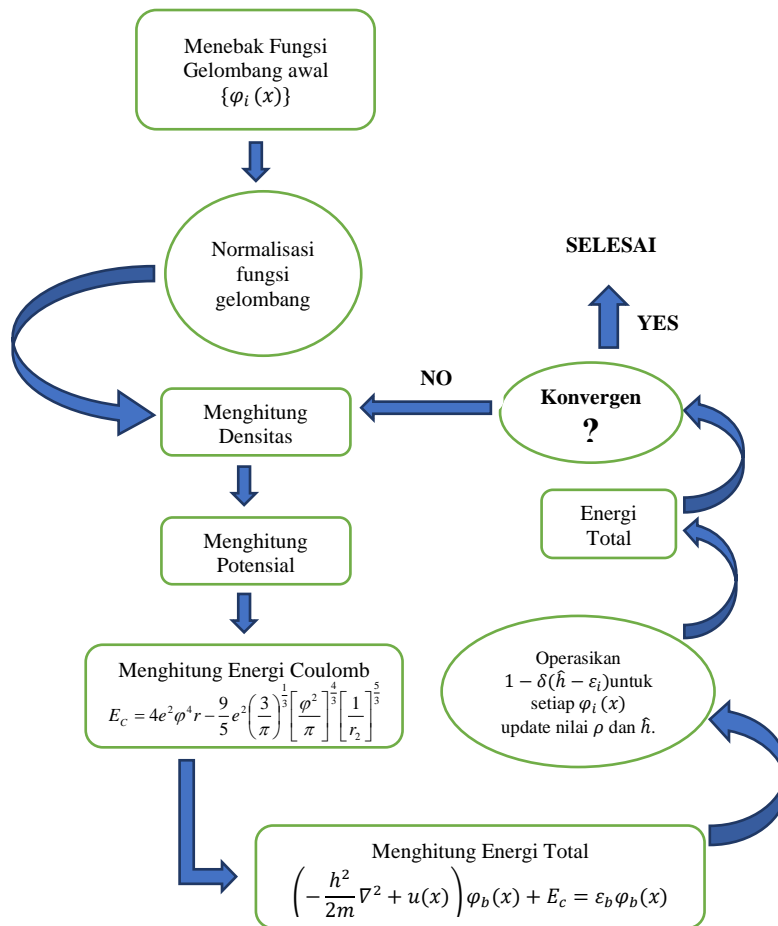
Metode ini akan diimplemetasikan dalam Algoritma Hartree Fock yang ditunjukkan pada flowchart berikut.

- Menebak inisial set fungsi gelombang single partikel  $\{\varphi_i(x)\}$
- Menghitung kerapatan  $\rho(x) = \sum_i \varphi_i^*(x) \varphi_i(x)$
- Menghitung potensial  $u(x) = 2a\rho + 3b\rho^2$  di mana a dan b adalah parameter yang disesuaikan berdasarkan referensi.
- Menghitung nilai energi coulomb

$$E_c = 4e^2 \varphi^4 r - \frac{9}{5} e^2 \left( \frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \left[ \frac{\varphi^2}{\pi} \right]^{\frac{4}{3}} \left[ \frac{1}{r_2} \right]^{\frac{5}{3}}$$

- Operasikan dengan  $1 - \delta(\hat{h} - \varepsilon_i)$  terus-menerus untuk setiap fungsi gelombang untuk mendekati nilai fungsi gelombang Hartree Fock yang sesungguhnya, update nilai  $\rho$  dan  $\hat{h}$ .
- Ketika operator fungsi gelombang tidak berubah lagi, sistem telah konvergen.

**Gambar 3.1** Flowchart Metode Hartree Fock



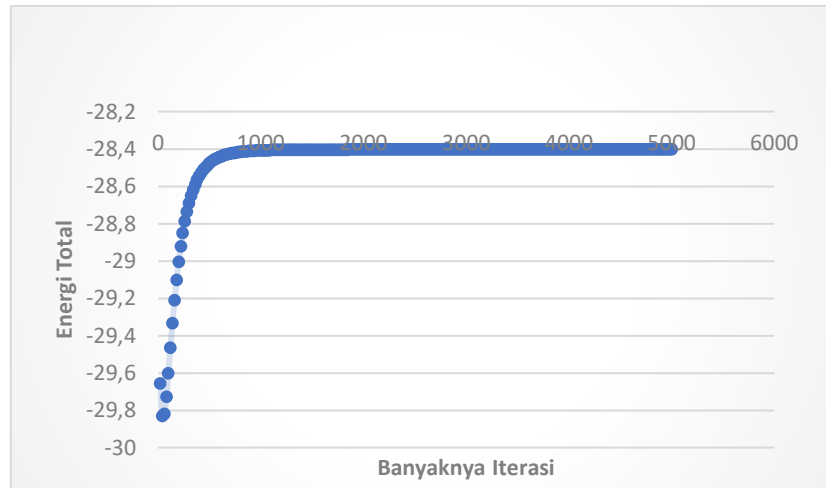
Algoritma ini diaplikasikan untuk kasus Hartree Fock paling sederhana. Inti Helium-4 berada dalam keadaan ground state dan spherically simetris di mana semua sisinya dianggap sama.

**HASIL DAN DISKUSI**

Penelitian ini bertujuan untuk menghitung nilai energi total inti Helium-4 dengan metode Hartree Fock menggunakan bahasa pemrograman Fortran. Dalam kasus ini inti Helium-4 berada dalam keadaan ground state dan spherically simetris dimana semua sisinya dianggap sama,

sehingga perhitungan dapat dilakukan menggunakan simple Hartree Fock dengan metode yang diperkenalkan oleh Paul Sevenston. Penyelesaian dilakukan dengan cara semi numerik. Beberapa persamaan seperti energi coulomb diselesaikan secara analitik sebelum mengubahnya dalam persamaan numerik untuk diinput dalam program.

Nilai energi total inti Helium-4 diperoleh dari energi Hartree Fock terendah yang telah konvergen. Iterasi dilakukan dengan menggunakan nilai tebakan  $\hat{h}$  dan menggunakan parameter kecil  $\delta$  untuk memastikan bahwa pathnya terbentuk dengan baik selama perhitungan fungsi gelombang Hartree Fock yang sebenarnya.



**Gambar 4.1** Grafik Hubungan antara Banyaknya Iterasi dan Energi Total Helium-4

Grafik di atas menunjukkan hubungan antara banyaknya iterasi dengan energi total inti Helium-4. Grafik ini menggambarkan bahwa nilai energi total inti Helium-4 menurun dengan meningkatnya jumlah iterasi, hingga pada iterasi ke 2840 energi total inti Helium-4 menjadi konvergen dengan iterasi sebelumnya dengan nilai total energi sebesar -28,4023952 MeV.

Energi total inti Helium-4 yang diperoleh dalam RBL ini adalah -

28,4023952 MeV dengan kesalahan 0.36% dibandingkan nilai total inti Helium-4 secara eksperimen yaitu -28,3007 MeV [7]. Jika dibandingkan dengan penelitian lain menggunakan metode yang sama, oleh [8] yang juga menggunakan metode Hartree Fock untuk memperoleh nilai energi inti Helium-4 dan memperoleh nilai energi sebesar -28,2 MeV. Kesalahan penelitian lain ini juga sebesar 0,36% dibandingkan nilai eksperimen dan 0,7% jika dibandingkan dengan hasil yang diperoleh dari RBL ini.

**Tabel 4.1** Perbandingan Energi Inti Helium-4 yang diperoleh dengan Referensi

Metode	Peneliti	Energi (MeV)	%Error
Hartree Fock	E.Boeker (1967)	-28,2	0,70
Eksperimen		<b>-28,3007</b>	0,36

Kesalahan cukup kecil yang diperoleh menunjukkan bahwa Hartree Fock merupakan metode yang cukup baik untuk digunakan menghitung energi total inti Helium-4. Hal ini juga menunjukkan bahwa Hartree Fock memiliki kelemahan. Kelemahan metode Hartree Fock dalam RBL ini kita menganggap inti Helium-4

berada dalam keadaan ground state dan spherically simetris dimana semua sisinya dianggap sama.

**SIMPULAN DAN SARAN**

Metode Hartree Fock dapat digunakan untuk menghitung energi total inti Helium-4. Berdasarkan hasil

perhitungan yang dilakukan diperoleh energi total inti Helium-4 sebesar - 28,4023952 MeV. Hasil Perhitungan yang diperoleh memiliki kesalahan 0,70% jika dibandingkan dengan hasil penelitian lain dengan menggunakan metode yang sama. Namun memiliki kesalahan lebih kecil sebesar 0,36% jika dibandingkan dengan hasil eksperimen. Hal ini disebabkan karena metode Hartree Fock masih memiliki kelemahan, tapi sudah cukup baik digunakan untuk menghitung energi inti.

#### DAFTAR PUSTAKA

- [1] Griffiths, David J. 2005. *Introduction Quantum Mechanics*. USA: Pearson Prentice Hall.
- [2] Sagert, Fann, Fattoyev1, Postnikov, Horowitz. 2016. *Quantum Simulations of Nuclei and Nuclear Pasta with the Multi-resolution Adaptive Numerical Environment for Scientific Simulations*. Indiana University.
- [3] Zettili, Nouredine. 2001. *Quantum Mechanics Concepts and Application*. New York: John Wiley & Sons, Ltd. Computational Nuclear Physics and Post Hartree-Fock Methods. Lecture Notes in Physics. DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-319-53336-0\\_8](https://doi.org/10.1007/978-3-319-53336-0_8)
- [4] Padman, Rachael. 2007. *Computational Physics Self Study Guide 2 Programming in Fortran 95*. University of Cambridge Department of Physics.
- [5] Raju, Cvavb Chandra. 2013. *Energy Levels of Helium Nucleus*. Journal of Modern Physics, 4, 459-462.
- [6] Justin Lietz, Samuel Novario, Gustav R. Jansen, Gaute Hagen, and Morten Hjorth-Jensen. 2016.
- [7] Stevenson, P.D. 2005. *Hartree-Fock Approximation in Nuclear Structure: A Primer NUSTAR'05 Neutron-Rich Minischool*. University of Surrey.
- [8] Boeker. 1967. *Hartree-Fock Calculations In Light Nuclei*. Nuclear Physics, 27-43; North-Holland Publishiny Co., Amsterdam.