

# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Permasalahan-permasalahan yang semakin kompleks dari waktu ke waktu menuntut manusia untuk selalu berkembang dan mencari pemecahan dari permasalahan tersebut. Hal ini mendorong semakin berkembang pula ilmu pengetahuan dan teknologi yang dapat membantu manusia dalam menyelesaikan permasalahan-permasalahannya. Salah satu disiplin ilmu tersebut adalah matematika, dimana dalam matematika terdapat suatu kajian tentang pemodelan dan simulasi dengan metode numerik yang sedikit banyak dapat membantu manusia untuk menyelesaikan masalahnya.

Pada laporan ini, dicoba untuk mengetahui distribusi probabilitas untuk atom berelektron tunggal dengan cara numerik dengan bantuan MATLAB. Dengan menggunakan metode numeric, solusi exact dari persoalan yang dihadapi tidak akan diperoleh. Metode numeric hanya bisa memberikan solusi yang mendekati atau menghampiri solusi sejati sehingga solusi numeric dinamakan juga solusi hampiran (approximation solution). Pendekatan solusi ini tentu saja tidak tepat sama dengan solusi sejati, sehingga ada selisih antara keduanya.

### 1.2 Perumusan Masalah

Rumusan masalah yang didapatkan adalah:

1. Bagaimana bentuk kesetimbangan partikel banyak?
2. Bagaimana distribusi partikel banyak setimbang oleh potensial Yukawa?
3. Bagaimana distribusi partikel banyak setimbang oleh potensial Lennard-Jones?

### 1.3 Tujuan

Tujuan diadakannya penelitian ini yaitu untuk mengetahui:

1. Bentuk kesetimbangan partikel banyak
2. Distribusi kesetimbangan partikel oleh potensial Yukawa
3. Distribusi kesetimbangan partikel oleh potensial Lennard-Jones

## BAB II

### LANDASAN TEORI

#### 2.1 Mekanika Hamiltonian

Mekanika Hamiltonian adalah sebuah teori yang dikembangkan sebagai reformulasi dari mekanika klasik dan dapat memprediksi sama halnya dengan mekanika non-Hamiltonian. Ini memiliki bentuk matematik yang berbeda lebih abstrak. Mekanika Hamiltonian juga berkontribusi dalam Mekanika Kuantum dan Mekanika Statistik.

Dalam mekanika Hamiltonian, sistem fisika klasik didefinisikan dengan sebuah himpunan koordinat kanonik  $r = (q, p)$ , dimana setiap koordinat  $q_i, p_i$  diindekskan sebagai kerangka acuan dari sistem.

Interpretasi sederhana dari mekanika Hamiltonian muncul dari aplikasinya untuk sistem satu dimensi yang terdiri dari satu partikel bermassa  $m$ . Hamiltonian dapat direpresentasikan sebagai energi total dari suatu sistem, yaitu jumlah dari energi kinetik dan energi potensial. Dimana energi kinetik sebagai fungsi dari momentum relatif dan potensial sebagai fungsi dari posisi relatif

$$H = T(p) + V(q) \quad (1)$$

Hamiltonian adalah hasil transformasi Legendre dari Lagrangian

$$H(q^j, p_j, t) = \sum_i \frac{dq^i}{dt} p_i - L(q^j, q'^j, t) \quad (2)$$

#### 2.2 Derajat Kebebasan

Dalam fisika, derajat kebebasan adalah parameter fisik independen yang menyatakan deskripsi formal dari keadaan sebuah sistem fisika. Himpunan dari semua keadaan dari sebuah sistem disebut dengan ruang fasa, dan derajat kebebasan adalah dimensi dari ruang fasa.

Posisi dari sebuah sistem pada ruang tiga dimensi membutuhkan tiga koordinat posisi. Dengan cara yang sama, arah dan kecepatan dari partikel juga dapat dideksripsikan dalam tiga komponen kecepatan, masing-masing relatif terhadap tiga dimensi kerangka referensi.

#### 2.3 Teori Medan Kuantum

Teori medan kuantum adalah kerangka teoritik untuk membangun model mekanika kuantum dari partikel subatomik dalam fisika partikel dan kuasipartikel dalam fisika zat terkondensasi. Teori tersebut merupakan seperangkat gagasan dan alat matematika yang menggabungkan medan klasik, relativitas khusus, dan mekanika kuantum, dan, ketika digabungkan dengan prinsip dekomposisi kluster,

teori tersebut adalah cara satu-satunya untuk melakukannya, dengan mempertahankan gagasan partikel titik kuantum dan lokalitas. Teori QFT secara historis diyakini luas sebagai suatu teori fundamental. Saat ini diyakini, terutama karena kegagalan kuantisasi relativitas umum yang terus berlanjut, hanya merupakan perkiraan energi rendah yang sangat baik, yakni suatu teori medan efektif, hingga beberapa teori yang lebih mendasar.

Dalam teori medan kuantum dimiliki tiga persamaan fundamental yang mendeskripsikan keadaan dari partikel. Yang pertama adalah persamaan Schrodinger untuk partikel klasik yang berkecepatan rendah. Hamiltonian dari partikel tersebut adalah

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V \quad (3)$$

Untuk partikel yang memiliki spin setengah dan berkecepatan tinggi yang merupakan fermion memenuhi persamaan Dirac dengan hamiltonian

$$\mathcal{H} = \beta mc^2 + c \sum_{n=1}^3 \alpha_n p_n + V \quad (4)$$

Sedangkan untuk partikel berkecepatan tinggi dan spin genap, yang merupakan boson memenuhi persamaan Klein-Gordon.

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} + V^2 = 0 \quad (5)$$

#### 2.4. Stabilitas dari Keseimbangan Hamiltonian

Sebuah sistem dikatakan setimbang apabila kecepatan relatif semua bagian sistem adalah nol. Setiap partikel akan menuju kearah potensial terendah. Hamiltonian untuk sistem yang memiliki kecepatan relatif nol adalah

$$\mathcal{H}(q) = V(q) \quad (6)$$

Persoalan berikutnya adalah bagaimana mencari posisi partikel setimbang dengan probabilitas terbesar. Partikel akan menduduki titik-titik minimum dari potensialnya. Hanya saja apabila di plot, potensial akan memiliki banyak titik minimum. Posisi partikel setimbang dengan probabilitas ditemukan terbesar adalah daerah dengan potensial terendah secara global

$$\mathcal{H}(q_i) = \min (\mathcal{H})_{p=0} \quad (7)$$

#### 2.5 Potensial Yukawa

Dalam ikatan kimia terlihat bahwa sebuah molekul saling mengikat dengan pertukaran elektron antara atom komponennya. Apakah mungkin mekanisme yang serupa bekerja dalam inti dengan nukleon komponen saling mengikat dengan pertukaran sejenis partikel antara nukleon itu ? Pada tahun 1932 oleh Heisenberg yang mengusulkan pendekatan bahwa elektron dan positron bolak balik antar nukleon. Sebuah neutron memancarkan elektron dan menjadi

proton, sedangkan sebuah proton dapat menyerap elektron menjadi sebuah neutron. Pendekatan ini tidak tepat karena ternyata gaya yang dihasilkan dalam pertukaran elektron dan positron terlalu kecil untuk berperan dalam struktur nuklir. Perhitungan berdasarkan data peluruhan beta menunjukkan bahwa gaya yang timbul dari pertukaran elektron dan positron oleh nukleon terlalu kecil dengan faktor 1014 supaya berperan dalam struktur nuklir. Seorang fisikawan Jepang Hideki Yukawa lebih berhasil dengan pengusulannya yang dianjurkan dalam tahun 1935 yang menyatakan bahwa terdapat partikel dengan besar massa antara elektron dan nukleon yang bertanggung jawab atas adanya gaya nuklir.

Sekarang partikel ini disebut pion. Pion dapat bermuatan ( $\pi^+, \pi^-$ ) atau netral ( $\pi^0$ ), dan merupakan anggota kelas partikel elementer yang secara kolektif disebut meson; kata pion ialah singkatan dari nama asalnya  $\pi$  meson. Menurut teori meson semua nukleon mengandung inti-inti identik dikitari oleh awan yang mengandung satu atau lebih meson. Meson-meson mungkin netral atau membawa suatu muatan positif atau negatif.

Menurut teori Yukawa, setiap nukleon terus-menerus memancarkan dan menyerap pion. Jika terdapat nukleon lain didekatnya, pion yang dipancarkan dapat menyebrang alih-alih kembali ke nukleon induknya; transfer momentum yang menyertainya setara dengan aksi gaya. Gaya nuklir saling tolak pada jangkauan sangat pendek dan saling tarik pada jarak nukleon-nukleon yang agak jauh, karena jika tidak demikian maka nukleon dalam inti akan menyatu dan salah satu kekuatan teori meson untuk gaya seperti ialah kedua aspek itu tercakup.

Potensial yang mengikat nukleon dalam inti disebut potensial Yukawa.

$$V_{Yukawa}(r) = -\frac{g^2 e^{r/r_0}}{r} \quad (8)$$

Apabila banyak nukleon lebih dari 2,

$$V_{Yukawa} = -\sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i=1}^n g^2 \frac{e^{|r_i - r_j|/r_0}}{|r_i - r_j|} \quad (9)$$

Karena pada nukleon terdiri atas proton dan netron, dianggap setiap proton membutuhkan satu netron, maka terjadi interaksi coulomb untuk proton disekitarnya, dan dianggap setiap dua proton diselisihi sebuah netron, maka interaksi coulombnya,

$$V_{coulomb} = \sum_{m=1}^n \sum_{n \neq m=1}^n \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_m - r_n|}$$

Potensial totalnya agar yang bermuatan(proton) daisekitar neutron, maka kita ambil misalkan genap untuk proton dan ganjil untuk neutron

$$V = V_{Yukawa} + V_{Coulomb}$$

$$V = - \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i=1}^n \left[ g^2 \frac{e^{|r_i - r_j|/r_0}}{|r_i - r_j|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_{j_{genap}} - r_{i_{genap}}|} \right]$$

Ketika Partikel mengorbit dengan momentum sudut L, potensial Yukawa menjadi

$$V_{Yukawa} = \frac{L^2}{2mr_i^2} - \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i=1}^n g^2 \frac{e^{|r_i - r_j|/r_0}}{|r_i - r_j|} \quad (10)$$

Agar mendapatkan keadaan yang paling setimbang, maka hamiltonian sistem nukleon haruslah minimum pada keadaan diam relatif, sehingga potensialnya juga harus nol.

## 2.6 Potensial Lennard-Jones

Penelitian tentang analisis system fisis vibrasi molekuler yang berada dalam pengaruh medan potensial Lenard-Jones atau dikenal pula dengan potensial 6-12 sudah dilakukan. Kajian tentang masalah ini menjadi sangat menarik untuk dikaji mengingat medan potensial yang mempengaruhi sistem gayut terhadap letak dan tidak simetri, sehingga penyelesaiannya menjadi tidak sederhana. Kegayutan terhadap letak ini mengandung konsekuensi logis pada keadaankeadaan energi yang tekuantisasi tersebut menjadi unik dan menarik.

Dalam mekanika kuantum dikenal berbagai model potensial V yang mana kehadirannya berpengaruh terhadap karakteristik sistem zarah yang pengaruhinya, diantaranya potensial sumur tak hingga, potensial sumur berhingga, potensial sumur bertangga, potensial Lennard\_Jones dan lain-lain. Model-model tersebut didesain dengan tujuan untuk mendekati bagaimana perilaku zarah yang berada di bawah pengaruh potensial tersebut.

Disamping model-model potensial tersebut, ada satu bentuk potensial unik yang selanjutnya akan dikaji oleh peneliti dalam penelitian ini, yaitu potensial Lennard-Jones. Potensial ini juga dikenal dengan potensial 12-6 oleh karena bentuknya yang melibatkan pangkat 12 dan 6 pada suku-sukunya. Secara eksplisit potensila ni dapat dituliskan sebagai

$$V_{LJ}(r) = 4V_0 \left[ \left( \frac{a}{r} \right)^{12} - \left( \frac{a}{r} \right)^6 \right] \quad (11)$$

Untuk banyak molekul yang berinteraksi

$$V_{LJ}(r) = 4V_0 \left[ \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i=1}^n \left[ \left( \frac{a}{|r_i - r_j|} \right)^{12} - \left( \frac{a}{|r_i - r_j|} \right)^6 \right] \right] \quad (12)$$

## 2.8 Algoritma Simulated Annealing

Simulated Annealing adalah algoritma untuk menentukan pendekatan solusi optimum global dari suatu permasalahan yang berbasiskan probabilitas dan mekanika statistic. Annealing adalah Teknik dalam ilmu material metalurgi yang merupakan proses pembentukan kristal dalam bahan. Agar kristal dapat terbentuk bagus, maka bahan dipanaskan sampai tingkat tertentu, lalu suhunya diturunkan secara eksponensial dan terkedali. Proses pemanasan ini disebut annealing. Ketika dipanaskan, atom atom penyusun akan memiliki energi yang besar sehingga dapat bergerak lebih bebas. Proses pendinginan ini akan menyebabkan partikel yang awalnya bergerak bebas menjadi menempati keadaan optimumnya, yaitu ketika keadaan setimbang pada suhu optimumnya, yang mana energi internalnya dapat mempertahankan partikel dalam posisi minimum

Algoritma yang digunakan dalam simulated Annealing adalah

*Mulai*

*Inisialisasi Keadaan Awal, yaitu suhu*

*Untuk suhu dari suhu tinggi ke suhu rendah*

*Didapatkan energi pada saat keadaan awal*

*Kemudian pindah ke keadaan selanjutnya, ns*

*Dapatkan energi pada keadaan selanjutnya*

*Dapatkan selisih energinya*

*Jika , selisih energinya kurang dari nol*

*kemungkinan fungsi energinya menurun*

*sehingga keadaan ini diterima*

*Juga, Jika probabilitasnya,  $e^{\frac{\Delta E}{T}}$  nesar untuk fungsi yg naik*

*keadaan bisa diterima walaupun tidak memenuhi*

*Diulangi*

*Selesai*

## 2.9 Skrip MATLAB

### 2.9.1 Potensial Yukawa

Mula-mula definisikan potensial yukawa oleh partikel yang berjarak relatif r. Untuk N partikel terdapat N posisi sehingga matriks r berdimensi N.

```
function Hamiltonian = Yukawa(x)
```

```
h = length(x);
```

Kemudian definisikan konstanta yg mau digunakan

```
e = 1.6e-19;
eps = 8.85e-12;
k = 1/(1e-15);
g = 10e-3;
```

Dikerjakan dahulu suku Yukawa. Dari persamaan 9 didapatkan untuk looping  $r_{ij}$

```
for i = 1:h
    for j = 1:h;
```

Karena  $r_{ij}$  berlaku jika  $i \neq j$ , maka

```
if j ~= i;
    V = V + 1e-4^2*exp(k*abs(x(i)-x(j)))/abs(x(i)-x(j));
else
    V = V;
end
end
end
```

Hamiltonian sementara,

```
Hamiltonian = V;
```

Kemudian dapatkan untuk suku potensial coulombnya

```
Vc = 0;
for i = 1:h
    for j = 1:h
        if j ~= i
```

Untuk partikel proton yang dapat berguna potensial coulombnya hanya di urutan partikel genap saja, sedangkan untuk partikel ganjil adalah netron yang tidak memberikan potensial coulomb

```
if mod(j,2) == 0
    if mod(i,2) == 0;
        Vc = Vc + e^2/(4*pi*eps*abs(x(i)-x(j)));
    else
        Vc = Vc;
    end
else
    Vc = Vc;
end
else
    Vc = Vc;
end
end
end
```

Hamiltonian Akhirnya

```
Hamiltonian = V+Vc;
```

Skrip keseluruhan untuk potensial Yukawa adalah

```
function Hamiltonian = Yukawa(x)
h = length(x);
V = 0;
e = 1.6e-19;
eps = 8.85e-12;
k = 1/(1e-15);
g = 10e-3;
for i = 1:h
    for j = 1:h;
        if j ~= i;
```

```

        V = V + 1e-4^2*exp(k*abs(x(i)-x(j)))/abs(x(i)-x(j));
    else
        V = V;
    end
end
end
Hamiltonian = V;
Vc = 0;
for i = 1:h
    for j = 1:h
        if j ~= i
            if mod(j,2) == 0
                if mod(i,2) == 0;
                    Vc = Vc + e^2/(4*pi*eps*abs(x(i)-x(j)));
                else
                    Vc = Vc;
                end
            else
                Vc = Vc;
            end
        else
            Vc = Vc;
        end
    end
end
end
Hamiltonian = V+Vc;

```

### 2.9.2 Potensial Lennard Jones

Mula-mula definisikan potensial Lennard-Jones oleh N partikel dengan posisi  $r$  yang berdimensi N

```

function Lendjon = Lennard(r)
h = length(r)

```

Definisikan konstanta yang digunakan

```

V0 = 0.97;
s = 3.4;
V = 0

```

Mulai looping sesuai persamaan 12

```

for i = 1:h
    for j = 1:h
        if i ~= j;
            V = V+4*V0*((s/abs(r(i)-r(j)))^12-(s/abs(r(i)-
r(j))))^6);
        else
            V = V;
        end
    end
end
end
Lendjon = V;

```

Skrip MATLAB secara keseluruhannya adalah



```

function Lendjon = Lennard(r)
h = length(r)
V0 = 0.97;
s = 3.4;
V = 0

for i = 1:h
    for j = 1:h
        if i ~= j;
            V = V+4*V0*((s/abs(r(i)-r(j)))^12-(s/abs(r(i)-
r(j))))^6);
        else
            V = V;
        end
    end
end
Lendjon = V;

```

### 2.9.3 Simulated Annealing

Mula-mula inisialisasi minimum dan maksimum global

```

clc;clear all;close all
global mmin mmax

```

Inisialisasi parameter

```

n=10;
mmin=0.1;
mmax=5;

```

Dapatkan nilai vektor yg akan memberikan nilai minimum

```

m=rand(1,n).*(mmax-mmin)+mmin*ones(1,n);

```

dan fungsi yang akan diminimalkan

```

y=Yukawa(m);

```

Inisialisasi kecepatan penurunan suhu, mula-mula data yg diterima, dan suhu awal dan laju penurunan , banyak iterasi, energi inisial, energi lama dan energi baru

```

decay=1; %konstanta peluruhan
accept=0;
T_init=2; %nilai awal temperatur
cs=0.4; %nilai 0.4 lebih bagus daripada 0.3 dan lainnya
T=T_init;
i=0;
maxGen=1000; %jumlah iterasi
E_init=y;
E_old=E_init;
E_new=E_old;

```

Dapatkan nilai sementara vektor yg memberikan nilai minimum sebagai nilai terbaik. Energi awal sebagai energi keadaan minimum. Interkuartil data

```

best=m;
errorbest=E_old;
me=zeros(maxGen,1);

```

```

igry=me;
Fit=[];
t=[T];
post=[];

```

Kemudian mulai iterasi untuk mencari titik minimum fungsi energi.

Dapatkan keadaan penurunan suhu

```

for i=1:maxGen
    T=decaytemp(T_init,decay,i,cs);
    t=[t;T];
dimana
function T=decaytemp(T0,decay,ii,cs)
T=T0*exp(-decay*(ii-1)^cs);
end

```

nilai terbaik ns didapatkan dari fungsi cauchy

```

ns=Cauchymov(best,T);
dimana
function Pmov=Cauchymov(P,T)
[m n]=size(P);
global mmin mmax
xmax1= repmat(mmax,m,1);
xmin1= repmat(mmin,m,1);
dif=rand(m,n)-0.5*ones(m,n);
changeRows=dif<0;
dif(find(changeRows))=-1;
changeRows=dif>0;
dif(find(changeRows))=1;
pwr=abs(2*rand(m,n)-ones(m,n));
yy=T*dif.*(1+1/T).^pwr-ones(m,n);
Pmov=P+yy.*(xmax1-xmin1);
end

```

kemudian dapatkan nilai keadaan ns terbaik setelah sesuai syarat batas

```

function [X] = batas(X)
global mmin mmax
n=length(X);
for i = 1:n
    if X(1,i) > mmax
        X(1,i) = mmax;
    elseif X(1,i) < mmin;
        X(1,i) = mmin;
    else
        X(1,i)=X(i);
    end
end
end

```

Dimana syarat batas ini hanya membiarkan diambil untuk nilai minimum dan maksimum. Kemudian definisikan fungsi energi baru oleh vektor nilai terbaik

```

E_new=Yukawa(ns);
Selang energinya
DeltaE=E_new-E_old;

```

Kemudian diberikan syarat selang E, dimana jika negatif, maka keadaan diterima karena menuju ke titik minimum

```

if DeltaE<0;
    best=ns;
    E_old=E_new;
    pos1=[best E_old];

```

```
post=[post;pos1];
```

Selanjutnya, jika positif, yang mana menuju ke titik maksimum, keadaan tidak semerta-merta ditolak, namun ada kemungkinan diterima jika dan hanya jika keadaan ini memiliki probabilitas yang cukup dari probabilitas acak.

```
elseif DeltaE>0 & exp(-DeltaE/(T))>rand;
    best=ns;
    E_old=E_new;
    pos1=[best E_old];
    post=[post;pos1];
end
```

Energi yang telah diproses ini dapat di jadikan energi lama untuk iterasi selanjutnya.

```
E_old=E_old;
```

Energi lama ini akan menjadi fungsi optimum sementara

```
f_opt=E_old';
```

Dapatkan posisi minimum energi

```
Fit=[Fit;f_opt];
[GYbest,indexgbest2]=min(E_old);
```

Dengan rata-rata

```
me(i)=mean(E_old);
```

dan interkuartil

```
iqry(i)=iqr(E_old);
```

Hasil optimumnya

```
errorbest(i+1)=GYbest;
```

Tampilkan hasil iterasi

```
fprintf('Iteration=%i, Minimum value=%.5f\n',i,GYbest)
```

selesai

```
end
```

Plot nilai minimum terhadap banyak iterasi

```
figure
plot(0:maxGen,errorbest,'LineWidth',2)
xlabel('Iteration','FontSize',14)
ylabel('Minimum Objective Function','FontSize',14)
```

Plot penurunan suhu setiap iterasi

```
figure
plot(0:maxGen,t,'k','LineWidth',2)
xlabel('Iteration','FontSize',14)
ylabel('Temperature','FontSize',14)
```

Skrip MATLAB keseluruhan untuk simulated Annealing

```
clc;clear all;close all
global mmin mmax
%----inisialisasi parameter----
n=10;
mmin=0.1;
mmax=5;
m=rand(1,n).*(mmax-mmin)+mmin*ones(1,n);
%----fungsi yg akan diminimalkan---
y=Yukawa(m);
%---inialisasi parameter---
```

```

decay=1; %konstanta peluruhan
accept=0;
T_init=2; %nilai awal temperatur
cs=0.4; %nilai 0.4 lebih bagus daripada 0.3 dan lainnya
T=T_init;
i=0;
maxGen=1000; %jumlah iterasi
E_init=y;
E_old=E_init;
E_new=E_old;

%----analisis data----
best=m;
errorbest=E_old;
me=zeros(maxGen,1);
iqry=me;
Fit=[];
t=[T];
post=[];
%----mulai iterasi----
for i=1:maxGen
    T=decaytemp(T_init,decay,i,cs);
    t=[t;T];
    ns=Cauchymov(best,T);
    ns=batas(ns);
    E_new=Yukawa(ns);
    DeltaE=E_new-E_old;
    %----mulai evaluasi keadaan optimum----
    if DeltaE<0;
        best=ns;
        E_old=E_new;
        pos1=[best E_old];
        post=[post;pos1];
    elseif DeltaE>0 & exp(-DeltaE/(T))>rand;
        best=ns;
        E_old=E_new;
        pos1=[best E_old];
        post=[post;pos1];
    end
    E_old=E_old;
    f_opt=E_old';
    Fit=[Fit;f_opt];
    [GYbest,indexgbest2]=min(E_old);
    me(i)=mean(E_old);
    iqry(i)=iqr(E_old);
    errorbest(i+1)=GYbest;
    fprintf('Iteration=%i, Minimum value=%.5f\n',i,GYbest)
end
%----plot----

figure
plot(0:maxGen,errorbest,'LineWidth',2)
xlabel('Iteration','FontSize',14)
ylabel('Minimum Objective Function','FontSize',14)

figure
plot(0:maxGen,t,'k','LineWidth',2)
xlabel('Iteration','FontSize',14)

```

```
ylabel('Temperature','FontSize',14)
```

## BAB III

### METODOLOGI PENELITIAN

#### 3.1 Jenis Penelitian

Jenis penelitian yang digunakan dalam penelitian ini adalah komputasi dan metoda numerik, yaitu untuk mengetahui posisi partikel banyak ketika setimbang jarak dekat oleh potensial Yukawa dan potensial Lennard-Jones.

#### 3.2 Peralatan yang Digunakan

Dalam melakukan penelitian ini digunakan software berupa MATLAB dan Microsoft Word.

#### 3.3 Lokasi dan Waktu Penelitian

Lokasi penelitian adalah di Departemen Fisika ITS dan di kontrakan Mawapres. Waktu penelitian dimulai pada Mei 2019.

#### 3.4 Prosedur Penelitian

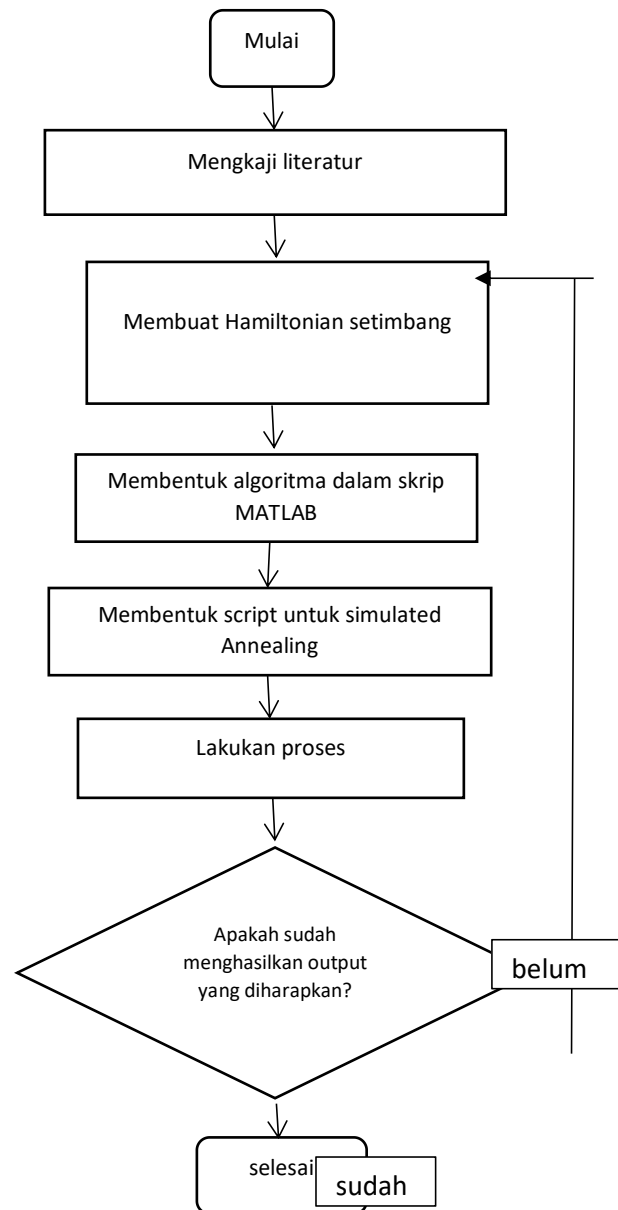
Adapun langkah-langkah yang akan digunakan peneliti dalam mencapai tujuan penelitian ini adalah:

1. Mencari dan mengumpulkan literatur untuk dikaji dan disitasi.
2. Membuat Hamiltonian ketika setimbang.
3. Membuat skrip matlab dari metoda yang perlu digunakan dalam analisis. Dalam penelitian ini digunakan algoritma Simulated Annealing.
4. Membuat fungsi-fungsi dalam matlab secara terpisah agar dapat digunakan terus menerus hanya dengan mengubah input yang diinginkan.
5. Melakukan running fungsi utama yang telah dibuat sebelumnya.
6. Didapatkan hasil berupa plot dan posisi partikel ketika setimbang.

### 3.5 Diagram Alir

Berikut adalah alir dalam melakukan penelitian:

diagram



## BAB IV

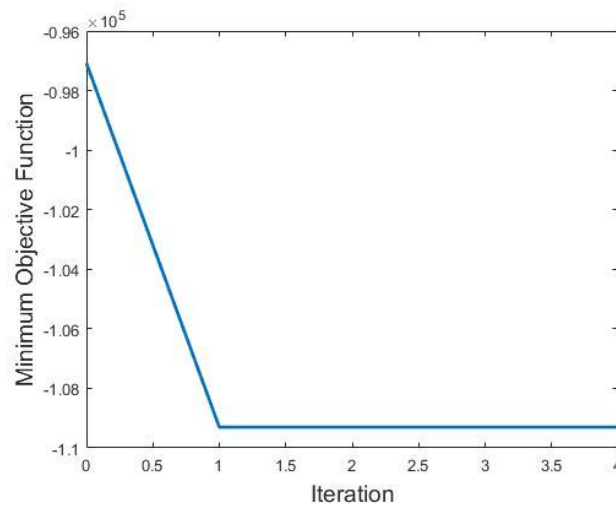
### HASIL DAN PEMBAHASAN

#### 4.1 Hasil

Berikut adalah hasil untuk nukleon Helium  $He_2^4$  potensial Yukawa

jarak\_setimbang =

0.1012   0.1373   5.0000



3.0048

Gambar 4.1 Jarak setimbang partikel dalam nukleon  $He_2^4$

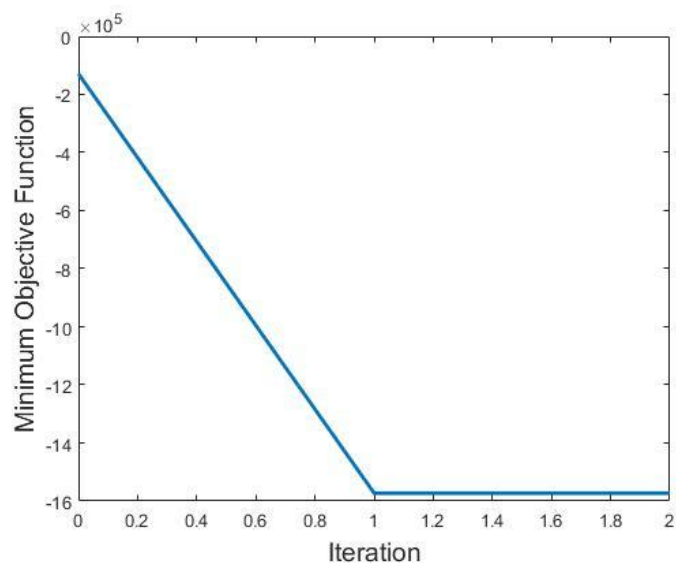
Berikut adalah hasil untuk nukleon Helium  $Li_3^6$  potensial Yukawa

jarak\_setimbang =

2.7517   5.0000   3.1962   3.6227   5.0000   4.2837

Gambar 4.1 Jarak setimbang partikel dalam nukleon  $He_2^4$



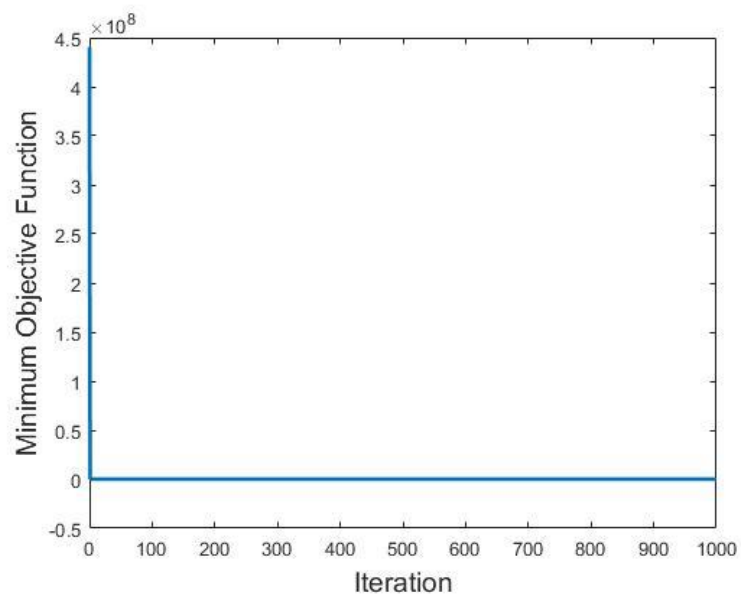


Gambar 4.2 jarak objektif terhadap iterasi partikel dalam nukleon  $Li_2^4$

Titik setimbang 2 partikel oleh ikatan Lennard-Jones

jarak\_setimbang =

5.0000 1.1836



Gambar 4.3 Fungsi Objektif terhadap iterasi

Kemudian apabila dibandingkan dengan metode DE untuk potensial Yukawa 5 partikel

No	SA					DE				
1	0.747	0.1	4.84	4.717	4.98	4.96	0.1	5	1.9	4.9
2	5.00	0.10	1.66	0.10	5.0	4.9	0.1	0.6	4.8	5
3	5.00	2.15	4.758	0.10	4.9	5	5	0.2	0.1	1.4
4	4.99	4.45	5.00	5.00	0.10	2.8	2.4	4.8	2.2	5

Kemudian apabila dibandingkan dengan metode DE untuk potensial Lennard Jones 5 partikel

No	SA					DE				
1	2.549	2.305	3.204	1.331	0.100	5.0	0.07	2.47	1.23	3.7
2	1.328	0.100	2.558	5.00	4.711	1.2	0.0001	2.49	5.0	2.9
3	0.130	2.503	1.402	5.00	3.63	1.06	3.7	2.4	4.7	0.0007
4	4.989	0.11	2.573	3.796	1.584	5.0	2.56	0.0001	1.26	3.740

## 1.2 Pembahasan

Pada analisis kesetimbangan partikel ini tidak dapat digunakan metode statistik kuantum. Hal ini dikarenakan pada metode statistik kuantum, partikel dianggap berjarak sangat jauh dan tidak ada interaksi diantara keduanya. Dalam penelitian ini digunakan potensial Lennard Jones dan Potensial Yukawa yang merupakan potensial berjarak dekat. Potensial Lennard-Jones adalah potensial oleh ikatan molekuler dan Potensial Yukawa adalah Potensial oleh ikatan nuklir kuat, yang mana keduanya adalah interaksi jarak dekat. Karena interaksinya jarak dekat, maka sistem tidak dapat dikerjakan dengan menggunakan metode statistik kuantum, namun dapat digunakan metode *many-body problem*.

Kesetimbangan untuk *many-body problem* ditentukan ketika momentum partikel relatif pada sistem adalah nol. Hal ini diakibatkan oleh partikel yang mulanya memiliki momentum, dan akibat dihambat oleh potensial interaksi antar partikel, maka dalam waktu yang cukup lama, partikel akan kehabisan momentum dan pada saat itu sistem setimbang.

Hamiltonian ketika sistem setimbang hanya diisi oleh potensial total dari sistem. Untuk mencari titik setimbangnya, maka energi partikel haruslah yang paling minimum, artinya partikel terjebak pada sumur potensial dengan energi serendah-rendahnya. Apabila terdiri dari banyak partikel, akan sangat sulit untuk menganalisa secara eksak, maka perlu metoda untuk meminimumkan. Potensial adalah fungsi dari posisi. Maka posisi kesetimbangan partikel dapat diketahui dengan mengetahui posisi ketika energi sistem paling minimum.

Metoda Simulated Annealing adalah algoritma untuk menentukan pendekatan solusi optimum global dari suatu permasalahan yang berbasiskan probabilitas dan mekanika statistic. Annealing adalah Teknik dalam ilmu material metalurgi yang merupakan proses pembentukan kristal dalam bahan. Agar kristal

dapat terbentuk bagus, maka bahan dipanaskan sampai tingkat tertentu, lalu suhunya diturunkan secara eksponensial dan terkedali. Proses pemanasan ini disebut annealing. Ketika dipanaskan, atom atom penyusun akan memiliki energi yang besar sehingga dapat bergerak lebih bebas. Proses pendinginan ini akan menyebabkan partikel yang awalnya bergerak bebas menjadi menempati keadaan optimumnya, yaitu ketika keadaan setimbang pada suhu optimumnya, yang mana energi internalnya dapat mempertahankan partikel dalam posisi minimum

## BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

### 5.1 Kesimpulan

Posisi setimbang partikel oleh potensial jarak dekat untuk *many-body problem* dapat didapatkan melalui Simulated Annealing

### 5.2 Saran

Saran yang ada yaitu dilakukan analisis untuk jenis potensial yang lain dan digunakan algoritma yang lain sebagai pembanding.

#### DAFTAR PUSTAKA

- Philips, A.C. 2003. *"Introduction to Quantum Mechanics"*. England: John Wiley & Sons.
- Kermode, M W, d.k.k. 1999. *"The effective-range function in the presence of a Yukawa potential"*. Journal of Physics G Nuclear Physics
- Purwanto, Agus. 2005. *"Fisika Kuantum"*. Yogyakarta: Penerbit Gava Media.
- Vijaykumar, Adithya, d.k.k. 2016. *"The intrinsic rate constants in diffusion-influenced reactions"*. Faraday Discussion, Researchgate
- Chapra, Steven C. dan Canale, Raymond P.. 2010. *"Numerical Methods for Engineers, Sixth Edition"*. New York: McGraw-Hill Company, Inc.
- Kiusalaas, Jaan. 2005. *"Numerical Methods in Engineering with MATLAB"*. United Kingdom: Cambridge University Press.

