

# SIMULASI PENYELESAIAN TINGKAT ENERGI SISTEM MOLEKUL DALAM PENGARUH POTENSIAL KRATZER DENGAN METODE PARAMETRIK NIKIFOROV-UVAROV

Nani Sunarmi<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>Program Studi Tadris Fisika, FTIK, Universitas Islam Negeri Sayyid Ali Rahmatullah, Tulungagung, Jawa Timur, Indonesia

Corresponding author : Nani Sunarmi

E-mail : nanisunarmi@gmail.com

Diterima 15 Oktober 2022, Direvisi 16 November 2022, Disetujui 16 November 2022

## ABSTRAK

Telah dilakukan kajian terhadap potensial Kratzer pada sistem molekul dengan menggunakan metode Parametrik Nikiforov-Uvarov. Penelitian bermaksud mendapatkan persamaan tingkat energi sistem dalam pengaruh potensial Kratzer dan melakukan simulasi terhadap persamaan tingkat energi tersebut untuk molekul oksigen, iodin, karbon monoksida, nitrogen monoksida. Penyelesaian tingkat energi sistem diperoleh dengan memisahkan persamaan Schrodinger sistem partikel menjadi 3 bagian yakni radial, zenithal dan azimuthal. Penyelesaian tingkat energi diperoleh dengan meninjau persamaan Schrodinger sistem partikel bagian radial. Penyelesaian persamaan tingkat energi dilakukan dengan menerapkan metode Parametrik Nikiforov-Uvarov. Penyelesaian terhadap persamaan Schrodinger sistem partikel bagian radial dilakukan dengan mereduksi persamaan menjadi persamaan diferensial tipe hipergeometri. Komputasi numerik dan simulasi grafik tingkat energi dilakukan dengan menggunakan Matlab. Berdasarkan hasil penelitian diperoleh penyelesaian persamaan tingkat energi bergantung parameter energi disosiasi, panjang ikatan kesetimbangan, bilangan kuantum serta massa molekul. Molekul iodin memiliki tingkat energi paling rendah dibandingkan molekul oksigen, karbon monoksida, nitrogen monoksida.

**Kata kunci:** tingkat energi; potensial kratzer; metode parametrik nikiforov-uvarov.

## ABSTRACT

A study of the Kratzer potential in molecular systems has been carried out using the Nikiforov-Uvarov Parametric method. The research aims to obtain the energy level equations of the system under the influence of the Kratzer potential and carry out simulations of these energy level equations for oxygen, iodine, carbon monoxide, nitrogen monoxide molecules. The solution for the energy level of the system is obtained by separating the Schrodinger equation of the particle system into 3 parts, namely radial, zenithal and azimuthal. The solution for energy levels is obtained by considering the Schrodinger equation of the radial section particle system. Solving the energy level equation is done by applying the Nikiforov-Uvarov Parametric method. The solution to the Schrodinger equation of the radial section particle system is carried out by reducing the equation to a hypergeometric type differential equation. Numerical computations and graphical simulations of energy levels are carried out using Matlab. Based on the research results, it was found that the solution to the energy level equation depends on the parameters of dissociation energy, equilibrium bond length, quantum number and molecular mass. Iodine molecule has the lowest energy level compared to oxygen molecules, carbon monoxide, nitrogen monoxide.

**Keywords:** energy level; kratzer potential; nikiforov-uvarov parametric method.

---

## PENDAHULUAN

Teori dualisme gelombang-partikel memiliki implikasi salah satunya merubah konsep energi dari bernilai kontinu menjadi diskret (Sutopo, 2005). Berdasarkan teori dualisme gelombang, perilaku dan sifat fisis sistem partikel dapat digambarkan oleh persamaan fungsi gelombang yang diperoleh melalui penyelesaian persamaan Schrodinger

(Siregar, 2018). Persamaan Penyelesaian dari persamaan Schrodinger tidak hanya memberikan penyelesaian dalam bentuk persamaan fungsi gelombang sistem tetapi juga menghasikan persamaan tingkat energi (Sunarmi, 2022).

Persamaan Schrodinger dari suatu sistem partikel seringkali melibatkan potensial khusus. Penelitian berkaitan persamaan

Schrodinger dengan potensial telah banyak dikaji di antaranya melibatkan potensial Coulomb (Karomah et al., 2021), Osilator Harmonik (Rusmini et al., 2022), Kratzer (Onyenegecha et al., 2021). Selain itu, potensial yang dikaji juga dapat berupa gabungan dari beberapa jenis potensial seperti Hulthen-Hellmann (Akpan et al., 2021), Potensial Kuadrat Yukawa dan Eckart (Antia et al., 2020), Wood-Saxon (Suparmi et al., 2021), Hulthen-Non Sentral Posch Teller (Sunarmi et al., 2013) dan lain-lain. Semakin banyak potensial yang terlibat maka persamaan Schrodinger menjadi semakin rumit dan penyelesaian yang diperoleh dilakukan dengan metode aproksimasi. Metode tersebut antara Metode Wentzel–Kramers–Brillouin (Omugbe, 2020), *Asymptotic Iteration Method* (Ikot et al., 2020), *Supersymmetric Quantum Mechanics* (Purohit et al., 2021), Nikiforov-Uvarov (Fitriani & Suparmi, 2017).

Potensial sistem partikel yang ditinjau dalam penelitian ini adalah potensial Kratzer. Potensial Kratzer memainkan peran penting dalam kimia molekuler dan kuantum dan digunakan untuk menggambarkan struktur molekul dan interaksinya (Setare & Karimi, 2007). Selain itu, potensial Kratzer digunakan sebagai model potensial untuk menggambarkan getaran antar inti atom dalam molekul diatomik (Ikot et al., 2020). Bentuk umum potensial Kratzer sebagai berikut (Berkdemir, 2012):

$$V(r) = A - \frac{B}{r} + \frac{C}{r^2} \quad (1)$$

dengan parameter  $A, B, C$  merupakan konstanta yang berhubungan dengan potensial Kratzer. Ketika nilai  $A$  dan  $C$  bernilai 0 maka potensial ini tereduksi menjadi potensial Coulomb. Atau dengan kata lain potensial Coulomb merupakan salah satu bentuk khusus dari potensial Kratzer. Modifikasi potensial Kratzer dilakukan dengan mengatur parameter  $A = D_e, B = 2D_e r_e, C = D_e r_e^2$  dan menjadi potensial Kratzer termodifikasi.  $D_e$  merupakan energi disosiasi yang tidak lain adalah jarak vertikal antara batas disosiasi dan titik minimum dari kurva potensial, yang ditemukan pada kesetimbangan dengan panjang ikatan antar atom  $r = r_e$ .

Potensial potensial Kratzer menjadi penting untuk ditinjau karena potensial Kratzer merupakan model yang paling tepat untuk menggambarkan interaksi dari struktur molekul dalam mekanika kuantum. Pada beberapa penelitian bentuk umum potensial potensial Kratzer mengalami modifikasi dengan *shifting parameters* yang dapat disesuaikan (Ibrahim et al., 2022). Penelitian lainnya juga mengembangkan potensial Kratzer salah satunya mengkaji gabungan potensial Kratzer -

potensial *ring shaped* (Ikhdair & Sever, 2008) dengan metode Nikiforov-Uvarov. Terdapat pula penelitian lain yang mengkaji potensial Kratzer yang telah dimodifikasi dengan penambahan parameter dengan metode Nikiforov-Uvarov (Ibrahim et al., 2022). Ketiga penelitian tersebut menggunakan metode Nikiforov-Uvarov dengan bentuk potensial Kratzer telah dimodifikasi. Metode Nikiforov-Uvarov merupakan metode yang banyak digunakan pada penyelesaian persamaan diferensial orde 2 tipe hipergeometri (Nikiforov & Uvarov, 1988). Akan tetapi metode Nikiforov-Uvarov memiliki langkah yang panjang dan cukup rumit. Metode ini dikembangkan menjadi lebih sederhana yang dikenal dengan parametrik yang lebih dikenal dengan metode Parametrik Nikiforov-Uvarov (PNU). Selain menggunakan metode Nikiforov-Uvarov terdapat pula yang menerapkan metode lain yakni *Asymptotic Iteration Method* pada potensial Kratzer yang mengalami pengembangan dengan adanya parameter slope energi (Ikot et al., 2020). Potensial Kratzer pada penelitian ini berbeda dengan penelitian yang telah disebutkan, pada penelitian ini dikaji bentuk umum tanpa modifikasi dari potensial Kratzer seperti yang ditunjukkan oleh persamaan (1) dengan metode yang digunakan adalah metode Parametrik Nikiforov-Uvarov. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk memperoleh penyelesaian persamaan tingkat energi dari sistem dalam pengaruh potensial Kratzer tanpa modifikasi serta melakukan simulasi tingkat energi untuk molekul  $O_2, I_2, CO, NO$ . Pemilihan molekul tersebut dilakukan sebagai contoh kasus.

## METODE PENELITIAN

Penelitian dilakukan dengan dua tahapan. Tahap pertama adalah menentukan persamaan energi sistem dengan potensial Kratzer menggunakan metode Metode Parametrik Nikiforov-Uvarov. Persamaan tingkat energi diperoleh dari persamaan schrodinger bagian radial yang didapatkan melalui pemisahan variabel. Tahap selanjutnya adalah melakukan komputasi numerik dan simulasi terhadap persamaan tingkat energi yang diperoleh dari tahap pertama menggunakan aplikasi Matlab. Molekul yang akan ditinjau tingkat energinya adalah molekul  $O_2, I_2, CO, NO$ .

### Metode Parametrik Nikiforov-Uvarov

Metode Nikiforov-Uvarov (NU) merupakan metode yang didasarkan pada penyelesaian persamaan diferensial orde 2 tipe hipergeometri melalui ortogonalitas fungsi khusus. Untuk potensial tertentu dalam

koordinat bola, persamaan Schrodinger dapat direduksi menjadi persamaan umum dalam bentuk tipe hipergeometri. Hal tersebut dilakukan dengan mentransformasi koordinat dengan pendekatan  $r \rightarrow s$  dan kemudian dapat diselesaikan secara sistematis untuk menemukan solusi yang tepat. Bentuk umum persamaan diferensial orde 2 tipe hipergeometrik dapat dituliskan sebagai berikut (Nikiforov & Uvarov, 1988):

$$\frac{\partial^2 \psi(s)}{\partial s^2} + \frac{\bar{\tau}(s)}{\sigma(s)} \frac{\partial \psi(s)}{\partial s} + \frac{\bar{\sigma}(s)}{\sigma^2} \psi(s) = 0 \quad (2)$$

dengan polinomial berderajat satu  $\bar{\tau}(s)$  dan polinomial berderajat dua  $\sigma(s)$  dan  $\bar{\sigma}(s)$ . Penerapan metode Nikiforov-Uvarov dapat dilakukan dengan dua cara yakni secara konvensional atau parametrik yang lebih dikenal dengan metode Parametrik Nikiforov-Uvarov (PNU). Metode PNU sendiri merupakan generalisasi metode Nikiforov-Uvarov menggunakan parameter-parameter khusus. Metode Parametrik Nikiforov-Uvarov memiliki kelebihan dalam menghitung persamaan tingkat energi dengan lebih tepat untuk beberapa sistem kuantum yang dipecahkannya (Antia et al., 2020). Persamaan diferensial orde dua untuk metode Parametrik Nikiforov-Uvarov dituliskan sebagai berikut (Ita et al., 2017);

$$\psi''(s) + \frac{c_1 - c_2 s}{s(1 - c_3 s)} \psi'(s) + \frac{[-\chi_1 s^2 + \chi_2 s - \chi_3]}{s^2(1 - c_3 s)^2} \psi(s) = 0. \quad (3)$$

Jika dibandingkan dengan metode Nikiforov-Uvarov konvensional pada persamaan (2) maka diperoleh  $\bar{\tau}(s)$ ,  $\sigma(s)$  dan  $\bar{\sigma}(s)$  sebagai berikut:

$$\bar{\tau}(s) = c_1 - c_2 s \quad (4)$$

$$\sigma(s) = s(1 - c_3 s) \quad (5)$$

$$\bar{\sigma}(s) = [-\chi_1 s^2 + \chi_2 s - \chi_3] \quad (6)$$

Parameter pada persamaan (3) menjadi alat yang penting dalam memperoleh nilai eigen yang tidak lain adalah persamaan  $E$  dan fungsi eigen yang tidak lain adalah  $\psi(s)$ . Parameter  $c_1, c_2, c_3$  pada persamaan (3) adalah konstanta parametrik. Untuk konstanta parametrik yang lain ditentukan dengan persamaan berikut (Okon et al., 2021):

$$c_4 = 1/2(1 - c_1) \quad (7)$$

$$c_5 = 1/2(c_2 - 2c_3) \quad (8)$$

$$c_6 = c_5^2 + \chi_1 \quad (9)$$

$$c_7 = 2 c_4 c_5 - \chi_2 \quad (10)$$

$$c_8 = c_4^2 + \chi_3 \quad (11)$$

$$c_9 = c_3 c_7 + c_3^2 c_8 + c_6 \quad (12)$$

$$c_{10} = c_1 + 2c_4 + 2\sqrt{c_8} \quad (13)$$

$$c_{11} = c_2 - 2c_5 + 2[\sqrt{c_9} + c_3\sqrt{c_8}] \quad (14)$$

$$c_{12} = c_4 + \sqrt{c_8} \quad (15)$$

$$c_{13} = c_5 - [\sqrt{c_9} + c_3\sqrt{c_8}]. \quad (16)$$

Sedangkan untuk persamaan energi dapat ditentukan dengan persamaan (Okon et al., 2020) berikut:

$$c_2 n - (2n + 1)c_5 + (2n + 1)[\sqrt{c_9} + c_3\sqrt{c_8}] + n(n - 1)c_3 + c_7 + 2c_3 c_8 + 2\sqrt{c_8 c_9} = 0 \quad (17)$$

Persamaan tersebut tidak lain adalah persamaan yang digunakan untuk mencari eigen nilai energi. Hasil akhir persamaan gelombang dapat diketahui dengan menggunakan persamaan

$$\psi(s) = \phi(s) \chi_n(s) = N_n s^{c_{12}} (1 - c_3 s)^{c_{13}} P_n^{(c_{10}, c_{11})}(1 - 2c_3 s) \quad (18)$$

dengan  $N_n$  adalah konstanta normalisasi dan  $P_n^{(c_{10}, c_{11})}$  adalah polinomial Jacobi.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

### Penyelesaian Persamaan Schrodinger Radial Sistem Partikel dengan Potensial Kratzer

Persamaan Schrodinger untuk sistem partikel dengan potensial Kratzer dapat dituliskan sebagai berikut:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \Psi(r, \theta, \phi) = E \Psi(r, \theta, \phi). \quad (19)$$

Potensial Kratzer pada persamaan (1) hanya memiliki bagian radial maka persamaan Schrodinger persamaan (19) ditinjau hanya pada bagian radial saja. Bentuk persamaan Schrodinger bagian radial potensial Kratzer dituliskan sebagai berikut:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( E - \left[ A - \frac{B}{r} + \frac{C}{r^2} \right] - \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2\mu r^2} \right) R(r) = 0 \quad (20)$$

Persamaan bagian radial pada persamaan (20) merupakan persamaan diferensial orde dua tipe hipergeometrik.

Persamaan tingkat energi dari sistem partikel dapat diketahui dengan melakukan penyelesaian pada persamaan Schrodinger bagian radial. Penyelesaian bagian ini dilakukan dengan melakukan reduksi persamaan (20) menjadi persamaan diferensial tipe hipergeometri. Persamaan (20) dapat ditulis ulang sebagai berikut:

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{1}{r^2} \left[ \frac{2\mu(E-A)}{\hbar^2} r^2 + \frac{2\mu B}{\hbar^2} r - \left( \frac{2\mu C}{\hbar^2} + \ell(\ell + 1) \right) \right] R(r) = 0. \quad (21)$$

Persamaan (21) tersebut dapat disederhanakan

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR(r)}{dr} + \frac{1}{r^2} [-\alpha r^2 + \beta r - \gamma] R(r) = 0. \quad (22)$$

dimana

$$\alpha = -\frac{2\mu(E-A)}{\hbar^2} \quad (23)$$

$$\beta = \frac{2\mu B}{\hbar^2} \quad (24)$$

$$\gamma = \frac{2\mu C}{\hbar^2} + \ell(\ell + 1). \quad (25)$$

Persamaan (22) telah memenuhi bentuk umum persamaan diferensial orde dua untuk metode Parametrik Nikiforov-Uvarov seperti ditunjukkan oleh persamaan (3). Dengan demikian maka parameter-parameter pada metode Parametrik Nikiforov-Uvarov dapat diperoleh sebagai berikut:

$$c_1 = 2 \tag{26}$$

$$c_2 = 0 \tag{27}$$

$$c_3 = 0 \tag{28}$$

$$c_4 = -1/2 \tag{29}$$

$$c_5 = 0 \tag{30}$$

$$c_6 = \alpha \tag{31}$$

$$c_7 = -\beta \tag{32}$$

$$c_8 = 1/4 + \gamma \tag{33}$$

$$c_9 = \alpha \tag{34}$$

$$c_{10} = 1 + 2\sqrt{1/4 + \gamma} \tag{35}$$

$$c_{11} = 2\sqrt{\alpha} \tag{36}$$

$$c_{12} = -1/2 + \sqrt{1/4 + \gamma} \tag{37}$$

$$c_{13} = -\sqrt{\alpha}. \tag{38}$$

Persamaan tingkat energi ditentukan menggunakan persamaan (17) dengan mensubstitusikan parameter yang telah diperoleh pada persamaan (26-38). Hasil substitusi tersebut sebagai berikut:

$$(2n + 1)\sqrt{\alpha} - \beta + 2\sqrt{(1/4 + \gamma)\alpha} = 0 \tag{39}$$

Berdasarkan persamaan tersebut maka diperoleh hubungan antara  $\alpha$  dan  $\beta$

$$\alpha = \frac{\beta^2}{[(2n + 1) + 2\sqrt{(1/4 + \gamma)}]^2}. \tag{40}$$

Persamaan tingkat energi terdapat pada  $\alpha$  sehingga untuk memperoleh persamaan tersebut maka  $\alpha, \beta, \gamma$  perlu disubstitusikan pada persamaan (40). Penyelesaian persamaan energi tingkat pada sistem Partikel dengan potensial Kratzer dengan metode Parametrik Nikiforov-Uvarov

$$E = A - \frac{\mu B^2}{2\hbar^2 \left[ n + \frac{1}{2} + \sqrt{\left( \frac{2\mu C}{\hbar^2} + \left( \ell + \frac{1}{2} \right)^2 \right)} \right]^2} \tag{41}$$

Persamaan tingkat energi yang diperoleh pada persamaan (41) bergantung pada parameter parameter  $A, B, C$  serta  $n$  dan  $\ell$ . Bilangan  $n$  menyatakan bilangan kuantum vibrasional dan

$\ell$  menyatakan bilangan kuantum azimuthal. Parameter  $A, B, C$  untuk berbeda-beda untuk setiap molekul. Pada penelitian ini dipilih nilai  $A = 0, B = 2D_e r_e, C = D_e r_e^2$  sehingga diperoleh persamaan penyelesaian tingkat energi sistem dalam pengaruh potensial Kratzer pada persamaan (42).

$$E = - \frac{\mu D_e^2 r_e^2}{\hbar^2 \left[ n + \frac{1}{2} + \sqrt{\left( \frac{2\mu D_e r_e^2}{\hbar^2} + \left( \ell + \frac{1}{2} \right)^2 \right)} \right]^2} \tag{42}$$

dengan nilai  $D_e, r_e$  merupakan parameter spektrokopi dari molekul. Parameter tersebut ditunjukkan oleh tabel berikut (Ikot et al., 2020):

**Tabel 1.** Parameter spektroskopi dari berbagai molekul diatomik.

Melekul	$D_e$ (eV)	$r_e$ (Å)	$\mu$ (amu)
O <sub>2</sub>	5,156658828	1,2080	7,997457504
I <sub>2</sub>	1,581791863	2,6620	63,45223502
CO	10,84514471	1,1282	6,860586000
NO	8,043782568	1,1508	7,468441000

### Simulasi Numerik Persamaan Tingkat Energi sistem dengan Potensial Kratzer

Simulasi tingkat energi untuk molekul O<sub>2</sub>, I<sub>2</sub>, CO, NO dilakukan dengan menggunakan aplikasi Matlab berdasarkan persamaan energi yang telah diperoleh pada persamaan (42) serta parameter spektrokopi yang ditunjukkan oleh tabel 1. Bilangan kuantum  $n$  dan  $\ell$  divariasikan dari 1-5. Perhitungan eigen nilai energi untuk molukel dilakukan dengan menggunakan komputasi numerik menggunakan Matlab. Eigen nilai energi molekul hasil perhitungan komputasi numerik ditunjukkan oleh tabel 2. Simulasi grafik eigen nilai energi ditunjukkan oleh grafik 1.

**Tabel 2.** Komputasi Numerik Eigen nilai energi molekul O<sub>2</sub>, I<sub>2</sub> (eV)

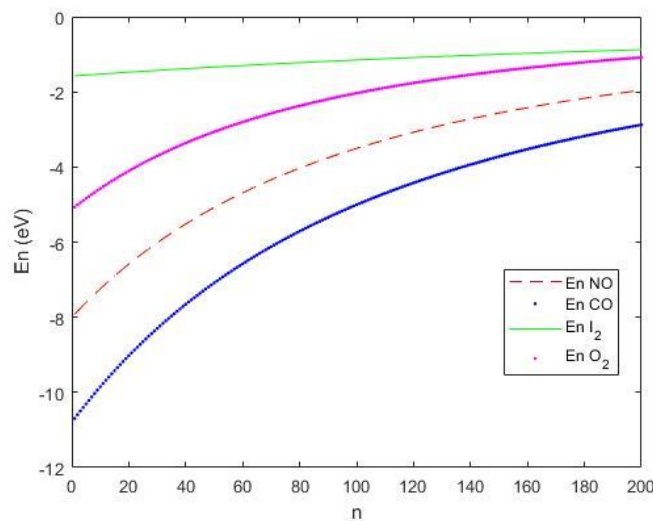
$n$	$\ell$	$E_{O_2}$ (eV)	$E_{O_2}$ (eV)	$E_{I_2}$ (eV)	$E_{I_2}$ (eV)
			(Ikot et al., 2020)		(Ikot et al., 2020)
1	0	-5.066640862	-5.066640766	-1.573687090	-1.573687115
	1	-5.066292035	-5.066291936	-1.573677864	-1.573677890
2	0	-5.007960645	-5.007960488	-1.568319230	-1.568319272
	1	-5.007617860	-5.007617702	-1.568310051	-1.568310094
	2	-5.006932430	-5.006932272	-1.568291695	-1.568291737
3	0	-4.950293978	-4.950293764	-1.562978787	-1.562978737
	1	-4.949957097	-4.949956880	-1.562969656	-1.562969715
	2	-4.949283472	-4.949283254	-1.562951393	-1.562951452
	3	-4.948273380	-4.948273160	-1.562924000	-1.562924059
4	0	-4.893617655	-4.893617382	-1.557665576	-1.557665652
	1	-4.893286542	-4.893286268	-1.557656491	-1.557656567
	2	-4.892624452	-4.892624178	-1.557638322	-1.557638398
	3	-4.891631654	-4.891631378	1.557611068	-1.557611144
	4	-4.890308555	-4.890308272	-1.557574731	-1.557574807

**Tabel 2.** Komputasi Numerik Eigen nilai energi molekul O<sub>2</sub>, I<sub>2</sub> (eV)

n	ℓ	E <sub>O<sub>2</sub></sub> (eV)	E <sub>O<sub>2</sub></sub> (eV)	E <sub>I<sub>2</sub></sub> (eV)	E <sub>I<sub>2</sub></sub> (eV)
			(Ikot et al., 2020)		(Ikot et al., 2020)
5	0	-4.837909126	-4.837908798	-1.552379412	-1.552379504
	1	-4.837583651	-4.837583322	-1.552370373	-1.552370466
	2	-4.836932834	-4.836932504	-1.552352296	-1.552352389
	3	-4.835956938	-4.835956606	-1.552325181	-1.552325274
	4	-4.834656362	-4.834656026	-1.552289029	-1.552289121
	5	-4.833031632	-4.833031292	-1.552243841	-1.552243934

**Tabel 3.** Komputasi Numerik Eigen nilai energi molekul CO, NO (eV)

n	ℓ	E <sub>CO</sub> (eV)	E <sub>CO</sub> (eV)	E <sub>NO</sub> (eV)	E <sub>NO</sub> (eV)
			(Ikot et al., 2020)		(Ikot et al., 2020)
1	0	-10.693839344	-10.69383928	-7.921456252	-7.921456326
	1	-10.693370644	-10.69337058	-7.921043237	-7.921043312
2	0	-10.594759935	-10.59475984	-7.841482992	-7.841483114
	1	-10.594297734	-10.59429764	-7.841076216	-7.841076336
	2	-10.593373452	-10.59337335	-7.840262791	-7.840262914
3	0	-10.497051145	-10.49705101	-7.762714735	-7.762714900
	1	-10.496595322	-10.49659519	-7.762314072	-7.762314236
	2	-10.495683796	-10.49568366	-7.761512872	-7.761513040
	3	-10.494316805	-10.49431667	-7.760311383	-7.760311552
4	0	-10.400687807	-10.40068763	-7.685127393	-7.685127602
	1	-10.400238247	-10.40023807	-7.684732723	-7.684732928
	2	-10.399339243	-10.39933907	-7.683943504	-7.683943714
	3	-10.397991031	-10.39799086	-7.682759981	-7.682760192
	4	-10.396193961	-10.39619379	-7.681182520	-7.681182728
5	0	-10.305645333	-10.30564512	-7.608697479	-7.608697730
	1	-10.305201921	-10.30520171	-7.608308681	-7.608308928
	2	-10.304315211	-10.30431500	-7.607531205	-7.607531456
	3	-10.302985435	-10.30298523	-7.606365292	-7.606365544
	4	-10.301212937	-10.30121273	-7.604811300	-7.604811550
	5	-10.298998178	-10.29899796	-7.602869710	-7.602869968



**Gambar 1.** Perbandingan eigen nilai energi molekul O<sub>2</sub>, I<sub>2</sub>, CO, NO (ℓ = 0)

Eigen nilai energi molekul  $O_2, I_2, CO, NO$  memiliki nilai negatif yang bermakna energi tersebut merupakan energi ikat sistem partikel. Berdasarkan hasil komputasi numerik pada eigen nilai energi molekul  $O_2, I_2, CO, NO$  dengan bilangan kuantum yang sama eigen nilai energi pada keempat molekul memiliki nilai yang beragam. Hal ini dikarenakan persamaan tingkat energi sistem memiliki kebergantungan pada parameter  $D_e, r_e$  dan  $\mu$  yang berbeda setiap molekulnya. Simulasi perbandingan perbedaan eigen nilai energi yang ditunjukkan oleh gambar 1, menunjukkan grafik kebergantungan tingkat energi terhadap bilangan  $n$ . Semakin besar nilai  $n$  yang menunjukkan posisi elektron terhadap inti maka nilai energi mengarah menuju  $E$  bernilai positif. Hal ini bermakna semakin jauh elektron terhadap inti atom maka energi ikat terhadap inti semakin kecil. Berdasarkan tabel 2 dan 3 didapati bahwa molekul  $I_2$  memiliki tingkat energi paling rendah dibandingkan  $O_2, CO, NO$ . Selain itu, berdasarkan tabel 2 dan 3 diperoleh perbandingan perhitungan penelitian dan perhitungan dengan menggunakan *Asymptotic Iteration Method* ketika faktor pengembangan dengan parameter slope energi bernilai 0 (Ikot et al., 2020). Komputasi numerik eigen nilai energi molekul  $O_2, I_2, CO, NO$  dengan metode Parametrik Nikiforov-Uvarov bersesuaian hingga ketelitian 5 angka dibelakang koma dengan *Asymptotic Iteration Method*.

### SIMPULAN DAN SARAN

Berdasarkan kajian yang dilakukan diperoleh penyelesaian persamaan tingkat energi yang ditunjukkan oleh persamaan (42) yang bergantung parameter  $D_e, r_e$ , bilangan kuantum  $n, \ell$  serta  $\mu$ . Simulasi dan komputasi terhadap tingkat energi pada molekul karbon dioksida, iodin, karbon monoksida, nitrogen monoksida menunjukkan bahwa molekul iodin memiliki tingkat energi paling rendah dibanding molekul lainnya.

### DAFTAR RUJUKAN

- Akpan, I. O., Inyang, E. P., & William, E. S. (2021). Approximate solutions of the Schrödinger equation with Hulthén-Hellmann potentials for a quarkonium system. *Revista Mexicana de Fisica*, 67(3), 482–490. <https://doi.org/10.31349/RevMexFis.67.482>
- Antia, A. D., Okon, I. B., Akankpo, A. O., & Usanga, J. B. (2020). Non-Relativistic Bound State Solutions of Modified Quadratic Yukawa plus  $q$ -Deformed Eckart Potential. *Journal of Applied Mathematics and Physics*, 08(04), 660–671. <https://doi.org/10.4236/jamp.2020.84051>
- Berkdemir, C. (2012). Theoretical Concepts of Quantum Mechanics. In *Theoretical Concepts of Quantum Mechanics*. InTech. <https://doi.org/10.5772/2075>
- Fitriani, S. N., & Suparmi. (2017). Solusi Persamaan Dirac Dengan Spin Simetri Untuk Potensial Scarf li Hiperbolik Terdeformasi-Q Plus Tensor Tipe Coulomb Dengan Menggunakan Metode Nikiforov Uvarov. *Kappa Journal*, 1(1), 13. <https://doi.org/10.29408/kappa.v1i1.407>
- Ibrahim, N., Okorie, U. S., Sulaiman, N., Rampho, G. J., & Ramantswana, M. (2022). Solutions of the Schrödinger equation of the shifted screened Kratzer potential and its thermodynamic functions using the extended Nikiforov–Uvarov method. *Frontiers in Physics*, 10(September), 1–12. <https://doi.org/10.3389/fphy.2022.988279>
- Ikhdaire, S. M., & Sever, R. (2008). Exact solutions of the modified kratzer potential plus ring-shaped potential in the D-dimensional Schrödinger equation by the nikiforovuvarov method. *International Journal of Modern Physics C*, 19(2), 221–235. <https://doi.org/10.1142/S0129183108012030>
- Ikot, A. N., Okorie, U., Ngiangia, A. T., Onate, C. A., Edet, C. O., Akpan, I. O., & Amadi, P. O. (2020). Bound state solutions of the Schrödinger equation with energy-dependent molecular Kratzer potential via asymptotic iteration method. *Eclética Química*, 45(1), 65–76. <https://doi.org/10.26850/1678-4618eqj.v45.1.p65-76>
- Ita, B. I., Louis, H., & Magu, T. O. (2017). Bound State Solutions of the Klein Gordon Equation with Woods-Saxon Plus Attractive Inversely Quadratic Potential Via Parametric Nikiforov-Uvarov Method. *World Scientific News*, 74, 280–287.
- Karomah, S. A., Jannah, A. R., Aini, N. R., Zumarotin, R., & Sunarmi, N. (2021). Visualisasi Rapat Peluang Posisi Elektron terhadap Sudut pada Atom Deuterium. *Newthon-Maxwell Journal of Physics*, 2(2), 35–44.
- Nikiforov, A. F., & Uvarov, V. B. (1988). *Special Functions of Mathematical Physics: A Unified Introduction with Applications*. Birkhauser Verlag Basel.
- Okon, I. B., Antia, A. D., Akankpo, A. O., & Essien, I. E. (2020). Eigen-Solutions to Schrödinger Equation with Trigonometric Inversely Quadratic Plus Coulombic

- Hyperbolic Potential. *Physical Science International Journal*, 24(3), 61–75. <https://doi.org/10.9734/psij/2020/v24i330183>
- Okon, I. B., Omugbe, E., Antia, A. D., Onate, C. A., Akpabio, L. E., & Osafire, O. E. (2021). Spin and pseudospin solutions to Dirac equation and its thermodynamic properties using hyperbolic Hulthen plus hyperbolic exponential inversely quadratic potential. *Scientific Reports*, 11(1), 1–21. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-77756-x>
- Omugbe, E. (2020). Non-relativistic Energy Spectrum of the Deng-Fan Oscillator via the WKB Approximation Method. *Asian Journal of Physical and Chemical Sciences*, 26–36. <https://doi.org/10.9734/ajopacs/2020/v8i130107>
- Onyenegecha, C. P., Njoku, I. J., Omame, A., Okereke, C. J., & Onyeocha, E. (2021). Dirac equation and thermodynamic properties with the Modified Kratzer potential. *Heliyon*, 7(9), e08023. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2021.e08023>
- Purohit, K. R., Parmar, R. H., & Rai, A. K. (2021). Energy and momentum eigenspectrum of the Hulthén-screened cosine Kratzer potential using proper quantization rule and SUSYQM method. *Journal of Molecular Modeling*, 27(12). <https://doi.org/10.1007/s00894-021-04965-0>
- Rusmini, E., Fauziah, F. A., Arianto, N. F., Izzah, D. H., Jayanti, S. D., Hasanah, R., & Sunarmi, N. (2022). Visualisasi osilator harmonik kuantum dengan polinomial hermite menggunakan simulasi pemrograman matlab. *Jurnal MIPA dan Pembelajarannya*, 2(3), 183–189. <https://doi.org/10.17977/um067v2i3p183-189>
- Setare, M. R., & Karimi, E. (2007). Algebraic approach to the Kratzer potential. *Physica Scripta*, 75(1), 90–93. <https://doi.org/10.1088/0031-8949/75/1/015>
- Siregar, R. E. (2018). *Fisika Kuantum*. Universitas Padjajaran.
- Sunarmi, N. (2022). Analisis Persamaan Energi Menggunakan Metode Parametrik Nikiforov-Uvarov Untuk Atom Berelektron Tunggal Dengan potensial Hulthen . *Jurnal Pendidikan Fisika dan Sains (JPFS)*, 5(2 SE-), 68–74. <https://doi.org/10.52188/jpfs.v5i2.275>
- Sunarmi, N., Suparmi, S., & Cari, C. (2013). Solusi Persamaan Schrödinger untuk Potensial Hulthen + Non-Sentral Poschl-Teller dengan Menggunakan Metode Nikiforov-Uvarov. *Indonesian Journal of Applied Physics*, 3(2), 169–180. <https://doi.org/10.13057/ijap.v3i02.1266>
- Suparmi, A., Permatahati, L. K., Faniandari, S., Iriani, Y., & Marzuki, A. (2021). Study of Bohr Mottelson Hamiltonian with minimal length effect for Woods-Saxon potential and its thermodynamic properties. *Heliyon*, 7(5), e06861. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2021.e06861>
- Sutopo. (2005). Pengantar Fisika Kuantum. In *Jurusan Fisika FMIPA UM*. Jurusan Fisika FMIPA UM.