

BUKU AJAR

# Fisika Atomik dan Molekuler

*dalam Kerangka  
Density-Functional Theory*



FEBDIAN RUSYDI

BUKU AJAR

# Fisika Atomik dan Molekuler

*dalam Kerangka  
Density-Functional Theory*

Pasal 113 Undang-Undang Nomor 28 Tahun 2014 tentang Hak Cipta:

- (1) Setiap Orang yang dengan tanpa hak melakukan pelanggaran hak ekonomi sebagaimana dimaksud dalam Pasal 9 ayat (1) huruf i untuk Penggunaan Secara Komersial dipidana dengan pidana penjara paling lama 1 (satu) tahun dan/atau pidana denda paling banyak Rp100.000.000 (seratus juta rupiah).
- (2) Setiap Orang yang dengan tanpa hak dan/atau tanpa izin Pencipta atau pemegang Hak Cipta melakukan pelanggaran hak ekonomi Pencipta sebagaimana dimaksud dalam Pasal 9 ayat (1) huruf c, huruf d, huruf f, dan/atau huruf h untuk Penggunaan Secara Komersial dipidana dengan pidana penjara paling lama 3 (tiga) tahun dan/atau pidana denda paling banyak Rp500.000.000,00 (lima ratus juta rupiah).
- (3) Setiap Orang yang dengan tanpa hak dan/atau tanpa izin Pencipta atau pemegang Hak Cipta melakukan pelanggaran hak ekonomi Pencipta sebagaimana dimaksud dalam Pasal 9 ayat (1) huruf a, huruf b, huruf e, dan/atau huruf g untuk Penggunaan Secara Komersial dipidana dengan pidana penjara paling lama 4 (empat) tahun dan/atau pidana denda paling banyak Rp1.000.000.000,00 (satu miliar rupiah).
- (4) Setiap Orang yang memenuhi unsur sebagaimana dimaksud pada ayat (3) yang dilakukan dalam bentuk pembajakan, dipidana dengan pidana penjara paling lama 10 (sepuluh) tahun dan/atau pidana denda paling banyak Rp4.000.000.000,00 (empat miliar rupiah).

BUKU AJAR

# Fisika Atomik dan Molekuler

*dalam Kerangka  
Density-Functional Theory*

FEBDIAN RUSYDI



**BUKU AJAR FISIKA ATOMIK DAN MOLEKULER**

**Dalam Kerangka *Density-Functional Theory***

Febdian Rusydi

ISBN :

© 2023 Penerbit **Airlangga University Press**

Anggota IKAPI dan APPTI Jawa Timur

Kampus C Unair, Mulyorejo Surabaya 60115

Telp. (031) 5992246, 5992247 Fax. (031) 5992248

E-mail: adm@aup.unair.ac.id

**Direktorat Inovasi dan Pengembangan Pendidikan UNAIR**

Kampus C Unair, Gedung Kahuripan Lt. 2, Ruang 203, Mulyorejo Surabaya 60115

Telp. (031) 5920424 Fax. (031) 5920532 E-mail: direktorat@ditipp.unair.ac.id

Redaktur (Anas Abadi)

Layout (Djaiful Eko Suharto)

Cover (Erie Febrianto)

AUP (1368/02.24)

Hak Cipta dilindungi oleh undang-undang.

Dilarang mengutip dan/atau memperbanyak tanpa izin tertulis dari Penerbit sebagian atau seluruhnya dalam bentuk apa pun.

# Prakata

Alhamdulillah.

Buku ajar ini adalah usaha kami untuk memenuhi kebutuhan buku teks di bidang fisika atomik dan molekuler, serta metode komputasional kuantum. Kebutuhan ini kami sadari dari dialog kami dengan tiga sahabat dan kolaborator kami, Prof. Aziz-an Ahmad (Kimia, Universiti Kebangsaan Malaysia, Bangi), Dr. Mark Lee (Kimia, Universiti Teknologi Malaysia, Johor Baru), dan Dr. Vera Khoirunisa (Teknik Fisika, Institut Teknologi Sumatera, Lampung). Dialog ini terjadi saat kami berkunjung ke UKM dan UTM pada bulan 16-23 Saban 1444 (9-16 Maret 2023). Bidang riset kami beririsan pada satu aspek: reaksi kimia dengan katalis (termasuk enzim) dan rekayasa dan perancangan material dengan fungsional baru. Aspek ini butuh pendekatan komputasional kuantum untuk mendapatkan pemahaman dasar (*insight*) interaksi-interaksi yang mengatur reaksi kimia dan fungsional material. Interaksi-interaksi tersebut adalah ranah fisika molekuler. Sementara itu buku teks terkait permasalahan ini belum banyak sehingga menjadi tantangan tersendiri bagi mahasiswa (sarjana dan pascasarjana) yang terlibat riset di bidang ini dan butuh belajar dari dasar.

Usaha kami ini meliputi pemilihan materi dan tata letak buku. Pemilihan materi berdasarkan publikasi kami, **2021rusydi**. Publikasi ini berasal dari tugas akhir mahasiswa kami, Roichatul Madinah (Caca), yang kemudian meneruskan sekolahnya di bawah bimbingan Prof. Aziz-an Ahmad. Publikasi ini dilengkapi dengan modul latihan (*handout*). *Handout* tersebut masih kami pakai untuk latihan mahasiswa. Sedangkan untuk tata letak buku, kami menggunakan templat monograf dari penerbit Springer Nature yang dapat diakses bebas. Selama ini kami menggunakan templat berbasis gaya Edward Tufte (ilmuwan komputer, profesor emeritus di Yale University, Amerika Serikat). Namun, menurut kami templat monograf Springer Nature lebih cocok untuk kebutuhan kami saat ini. Ada kesamaan di antara dua templat ini, yaitu

margin yang lebar, yang dapat pembaca pakai untuk mencoret-coret. Perbedaannya, margin pada templat monograf Springer Nature rata kiri-kanan. Dengan ukuran kertas A4, templat ini memberi daerah coret-coret lebih luas daripada templat Tufte yang hanya berukuran B5.

Lebih jauh tentang tata letak buku, kami optimalkan hiperteks untuk referensi silang dalam buku ini. Pemanfaatan hiperteks pada referensi silang ini bagian dari usaha kami merancang buku-elektronik. Distribusi buku dalam format elektronik memang sudah menjadi keniscayaan pada zaman sekarang. Tidak hanya masalah pemasaran, tetapi juga format buku-elektronik memudahkan pembaca untuk mengakses buku ajar ini. Kami belajar dari dua buku ajar kami sebelum ini, Listrik dan Magnet (ISBN: [978-6-02-473032-1](#)) dan Fisika Kuantum (ISBN: [978-6-02-473856-3](#)), yang tidak kami rancang untuk buku-elektronik. Meskipun demikian, kami tetap menganjurkan pembaca untuk memiliki versi cetak buku ini, supaya leluasa mencoret-coret di atas buku. Kami meyakini bahwa aktivitas mencoret-coret buku adalah bagian penting dari belajar. Selain templat dan hiperteks, fitur lain buku ini kami bahas pada Bab 1.3: *Bagaimana Menggunakan Hajar*.

Sebelum kami tutup prakata ini, kami berterima kasih kepada Caca dan Etika Desi Susanti (keduanya alumni Fisika Unair yang sekolah di bawah bimbingan Prof. Azizan Ahmad), dan Rizka Nur Fadilla (alumni Fisika Unair yang sekolah doktoral di bawah bimbingan Prof. Morikawa, Osaka University, Jepang). Mereka bertiga menjadi uji coba buku ajar ini, mencari typo, mencatat waktu membaca, dan mengerjakan soal-soal. Kami perbaiki naskah ini berdasarkan umpan-balik mereka.

Akhirulkalimat, Subhanallah, hanya Allah Yang Mahasempurna, yang lepas dari segala kekeliruan. Meski kami selalu mengecek Kamus Besar Bahasa Indonesia dan Ejaan Bahasa Indonesia yang Disempurnakan, pasti terdapat kesalahan ketik di sana dan di sini. Begitu juga dengan kalimat, pasti banyak kalimat-kalimat kami yang tidak jelas dan tidak jernih. Oleh sebab itu, kami mohon maklum dan mengundang pembaca untuk menyampaikan koreksi kepada kami.

Surabaya,

Mulai: Sabtu, 25 Saban 1444 || Selesai: Sabtu, 5 Zulhijah 1444

Durasi: 98 hari

Febdian Rusydi

# Kata Pengantar

## **How a scary subject becomes a tasty and crunchy talk**

Oleh: Dr. Mark Lee Wun Fui

Welcome to the captivating realm of atomic and molecular systems, where the interplay of electrons shapes the very fabric of matter. In this book, we embark on a quest to unravel the intricacies of electron-electron interactions, which hold the key to comprehending the properties of atoms and molecules.

Within the vast domain of quantum physics, we confront the daunting challenge of deciphering the time-independent Schrödinger equation (TiSE). Two significant hurdles emerge: the interdependent nature of nuclei and electrons, tethered to their respective positions, and the multidimensional solutions arising from their three-dimensional vector locations. However, rest assured, as this book is devoted to conquering these obstacles.

At the heart of our exploration lies the elegant and practical framework of density-functional theory (DFT). With its unassuming yet precise outcomes, DFT stands as a crucial tool in simplifying the complexities of atomic and molecular physics. Within these pages, we present the theory in a manner accessible to students, employing straightforward language, a clean layout, and optimized hypertext tailored to the e-book format.

Furthermore, we recognize the potential hindrance posed by excessive mathematical intricacies in the pursuit of fundamental principles. To alleviate this burden, we introduce two software companions: Wolfram Mathematica and Gaussian 16. By harnessing the power of these computational tools, students can focus on the core principles of physics, empowering them to delve into the realms of quantum chemistry and material design without being overwhelmed by mathematical intricacies.

This book caters to undergraduate and graduate students of physics and chemistry who yearn for a profound understanding of quantum chemistry and material design through computational methods. It serves as a valuable resource for those with a passion for research, offering a clear pathway to explore the frontiers of atomic and molecular systems.

As you embark on this intellectual odyssey, let this book be your guiding companion, unraveling the intricacies of electron interactions. With its clarity and simplicity, may it empower you to grasp the breathtaking world of atomic and molecular physics.

I personally thank to Dr. Febdian who I know precisely spent a great amount of time and effort to cook many sources such that this difficult subject becomes a tasty and crunchy material for bachelor students in chemistry and physics. May God rewards him, amin.

Johor Baru, Senin, 14 Zulhijah 1444

*Mark Lee Wun Fui*  
*Department of Chemistry*  
*Faculty of Science*  
*Universiti Teknologi Malaysia*  
*Johor Baru, Malaysia*

### **Membaca buku ini seperti hadir langsung di kelas beliau**

Oleh: Dr. Vera Khoirunisa

Assalamualaikum Warahmatullah Wabarakatuh

Fisika molekuler mempelajari perilaku dan sifat-sifat molekul dalam kaitannya dengan hukum-hukum fisika. Disiplin ini menyelidiki gaya-gaya yang mengatur interaksi molekuler, transfer energi dalam sistem, serta proses-proses dinamis pada tingkat atom dan molekul. Dengan perspektif fisika, kita dapat mengungkap prinsip-prinsip mendasar yang mengatur perilaku materi, menjembatani kesenjangan antara dunia mikroskopik dan makroskopik, sehingga kita bisa melakukan berbagai rekayasa dalam aplikasi medis.

Materi fisika molekuler termasuk materi sulit. Buku-buku referensi yang ada biasanya sudah ditingkat lanjut. Jika kita ingin buku referensi yang dasar, kita butuh banyak buku. Sebagian konsep ada di ranah kimia, sebagian di ranah matematika, dan tentu saja konsep utama ada di ranah fisika. Buku ajar yang ditulis oleh Dr.

Febdian ini sudah mengintegrasikan konsep-konsep yang dibutuhkan dalam sebuah narasi yang solid. Saya bersyukur Dr. Febdian menulis buku ini, secara khusus dalam bahasa Indonesia, untuk memudahkan kita semua mempelajari fisika molekuler.

Karena materi ini sulit, saya tidak percaya saat Dr. Febdian Rusydi memberikan draf buku ajar ini kepada saya untuk saya telaah dan kritisi. Beliau pembimbing saya sejak sarjana sampai doktoral. Beliau yang mengajarkan saya ilmu fisika molekuler dan komputasi kuantum sehingga saya dapat gunakan kedua ilmu tersebut untuk mempelajari reaksi antioksidan dari gnetin C buah melinjo. Wajar saya tidak percaya kalau Dr. Febdian meminta saya menelaah dan mengkritisi materi yang secara keilmuan jelas kepakaran beliau tidak diragukan. Saya baru paham kenapa saya harus menelaah dan mengkritisi setelah telaah saya memasuki dua bab terakhir buku ini.

Buku ini mengingatkan saya pada masa-masa kuliah ketika saya hadir di kelas beliau yang penuh dengan antusiasme dan kegembiraan. Membaca buku ini seakan-akan sedang mendengarkan beliau yang langsung bicara di depan kelas. Beliau acap kali menggunakan analogi dan cerita untuk memudahkan kami mencerna materi-materi fisika yang sulit. Gaya beliau yang khas membuat kami selalu menunggu cerita-cerita selanjutnya. Saking khusuknya mendengar cerita beliau, kami sering lupa mencatat dan akhirnya kena marah.

Lampung, Kamis, 1 Muharram 1445

*Vera Khoirunisa  
Prodi Teknik Fisika  
Jurusan Teknologi Produksi dan Industri  
Institut Teknologi Sumatera  
Lampung, Indonesia*

