Perhitungan teoritis energi ikat total atom berdasarkan metode Thomas-Fermi

Y. Soenarto, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=72346&lokasi=lokal>

Abstrak

Telah didapatkan kesesuaian hasil perhitungan teoritis energi ikat total atom (-) antara metode Thomas-Fermi terkoreksi dan metode Hartree-Fock untuk atom-atom netral dari $Z = 2$ sampai $Z = 102$. Kesesuaian paling nyata ditemukan pada atom-atom kompleks yang memiliki nomor atom Z besar dengan perbedaan sekitar 0,1 %, sementara untuk atom dengan Z kecil perbedaannya sekitar 5 %. Dibandingkan dengan data eksperimen, kedua metode pendekatan tersebut memberikan kesesuaian yang besar untuk atom yang mempunyai nomor atom Z besar dengan perbedaan sekitar 1,4 % untuk metode Thomas-Fermi terkoreksi dan perbedaan sekitar 1,5 % untuk metode Hartree-Fock, dan hasil perhitungan metode Hartree-Fock lebih mendekati nilai eksperimen dengan perbedaan 1,3 % sementara metode Thomas-Fermi terkoreksi memberikan perbedaan 6,3 %, untuk nomor atom $Z = 2$.