

**PENENTUAN FUNGSI GELOMBANG DAN TINGKAT
ENERGI DARI SUATU PARTIKEL DENGAN METODE
OPERATOR FILTER**

SKRIPSI

Oleh:
LALU SUHAIMI
0710930030-93



JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS BRAWIJAYA
MALANG
2012

LEMBAR PENGESAHAN TUGAS AKHIR

**PENENTUAN FUNGSI GELOMBANG DAN TINGKAT
ENERGI DARI SUATU PARTIKEL DENGAN METODE
OPERATOR FILTER**

Oleh:
LALU SUHAIMI
0710930030-93

Telah dipertahankan di depan Majelis Penguji pada tanggal
Juni 2012 dan dinyatakan memenuhi syarat untuk memperoleh
gelar Sarjana Sains

Pembimbing I

Pembimbing II

Dr.Rer.nat.M.Nurhuda

Dr.Rer.nat.Abdurrouf

NIP : 196409101990021001

NIP: 197209031994121001

Mengetahui,
Ketua Jurusan Fisika
Fakultas MIPA Universitas Brawijaya

Adi Susilo, PhD

NIP. 196 312 271 991 031 002

LEMBAR PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : LALU SUHAIMI
NIM : 0710930030
Jurusan : FISIKA
Penulisan tugas Akhir berjudul : Penentuan fungsi gelombang dan tingkat energi dari suatu partikel dengan pendekatan metode operator filter.

Dengan ini menyatakan bahwa :

1. Tugas Akhir ini adalah benar-benar karya saya sendiri, dan bukan hasil plagiat dari karya orang lain. Karya-karya yang tercantum dalam Daftar Pustaka TA ini, semata-mata digunakan sebagai acuan/referensi.
2. Apabila kemudian hari diketahui bahwa isi TA saya merupakan hasil plagiat, maka saya bersedia menanggung akibat ukum dari keadaan tersebut.

Demikian pernyataan ini dibuat dengan segala kesadaran.

Malang, Juni 2012
Yang menyatakan,

(Lalu Suhaimi)

0710930030

PENENTUAN FUNGSI GELOMBANG DAN TINGKAT ENERGI DARI SUATU PARTIKEL DENGAN METODE OPERATOR FILTER

ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian tentang penentuan fungsi gelombang secara numerik pada potensial atom hidrogenik dan potensial osilator harmonik. Penelitian ini menggunakan metode numerik operator filter (*filter operator method*). Metode numerik ini melibatkan matriks dengan kebanyakan nol. Salah satu bentuk matriks yang elemen nolnya berpola adalah matriks pita (*banded matrix*). Lebar pita adalah maksimum banyaknya elemen taknol pada baris-baris suatu matriks pita. Matriks pita yang terkecil adalah yang lebar pitanya tiga atau dikenal sebagai tridiagonal matriks. Hasilnya menunjukkan bahwa fungsi gelombang yang ditentukan dengan menggunakan metode numerik Operator filter sama dengan hasil analitis. Hal ini dapat dilihat dari *error* yang dihasilkan yaitu untuk potensial atom hidrogenik pada keadaan $(n,l) = (1,0), (2,0), (2,1)$, dan $(3,0)$ masing-masing sebesar 0.2153%, 0.215%, 0.263%, dan 0.145%. Sedangkan *error* yang dihasilkan pada potensial osilator harmonik pada keadaan $n=0, n=5$ masing-masing sebesar 0.000839% dan 0.000597%. Selisih untuk tiga tingkat energi pertama dari atom hidrogenik terhadap harga perhitungan numerik dengan analitik masing-masing sebesar 0.248%, 0.08%, dan 0.02777%. Selisih energi dari potensial osilator harmonik pada keadaan kuantum $n = 0, n = 5, n = 10$, dan $n = 15$ terhadap harga perhitungan numerik dengan analitik masing-masing sebesar 0.0025%, 0.0138%, 0.0263%, dan 0.06015%.

Kata Kunci : Numerik, Potensial Atom Hidrogenik, Potensial Osilator Harmonik, Metode Operator Filter.

DETERMINATION OF WAVE FUNCTIONS AND ENERGY LEVEL OF PARTICLE BY USING FILTER OPERATOR METHODS

ABSTRACT

The research on the determination numerically of the wave functions of hydrogenic atom and harmonic oscillator potentials has been done. This study used operator filter methods. This numerical method involved a matrix with many zeros. One form of the element matrix is a matrix of zeros patterned ribbon (banded matrix). Bandwidth is the maximum number of nonzero elements in the rows of a matrix band. The smallest band matrix is a wide ribbon of three, known as tridiagonal matrix. The results show that the wave functions determined by using numerical methods Filter Operator are the same as the analytical result. This can be seen from the resulting error for hydrogenic atom potentials, which are $(n,l) = (1,0), (2,0), (2,1),$ and $(3,0)$ respectively by 0.2153%, 0.215%, 0.263%, and 0.145%. For the harmonic oscillator potential, when $n = 0$ and $n = 5$ the error are 0.000839% and 0.000597%. The for the difference first three energy levels of the hydrogenic atom from the numerical calculations with the analytic value each by 0.248%, 0.08%, and 0.02777%. The energy difference of the harmonic oscillator potential in quantum state $n = 0, n = 5, n = 10,$ and $n = 15$ from numerical calculations to the analytic method are 0.0025%, 0.0138%, 0.0263%, and 0.06015%.

Key words: Numerical, Hydrogenic Atom Potential, Potential Harmonic Oscillator, Filter Operator Method.

KATA PENGANTAR

Puji Syukur kehadiran Allah SWT yang telah melimpahkan rahmat, karunia, dan izin-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan penulisan skripsi ini untuk memenuhi sebagai persyaratan mendapatkan gelar Sarjana Sains dari Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Brawijaya.

Dalam penyusunan laporan ini, penulis tidak lepas dari bimbingan, pengarahan dan bantuan dari berbagai pihak, maka pada kesempatan ini penulis mencapaikan ucapan terima kasih kepada :

1. Kepada ibunda, ayahanda, adik-adik dan keluarga penulis tercinta, yang memberikan banyak sekali motivasi, semangat dan memberikan pelajaran arti kesabaran dan keikhlasan sehingga penulis dapat menyelesaikan laporan skripsi ini.
2. Adi Susilo, PhD selaku Ketua Jurusan Fisika Fakultas MIPA Universitas Brawijaya atas bimbingan dan nasihatnya
3. Dr.Rer.nat.M.Nurhuda, selaku Pembimbing I yang telah sabar mendampingi penulis, member motivasi, nasehat dan saran dalam penyusunan skripsi.
4. Dr.Rer.nat.Abdurrouf, selaku Pembimbing II yang juga telah banyak memberikan pelajaran, motivasi, nasehat dan saran dalam penyusunan skripsi.
5. Kepada rekan-rekan manajemen Beastudi Etos Malang dan adik-adik etoser yang selalu memberikan semangat kepada penulis, semoga tetap diberi semangat.
6. Teman-teman seperjuangan di Forum Kajian Islam FMIPA UB, Tim Mentoring UB, teman-teman liqo' yang banyak memberi pelajaran makna perjuangan dan makna tarbiyah.
7. Teman-teman angkatan 2007 atas kebersamaannya.

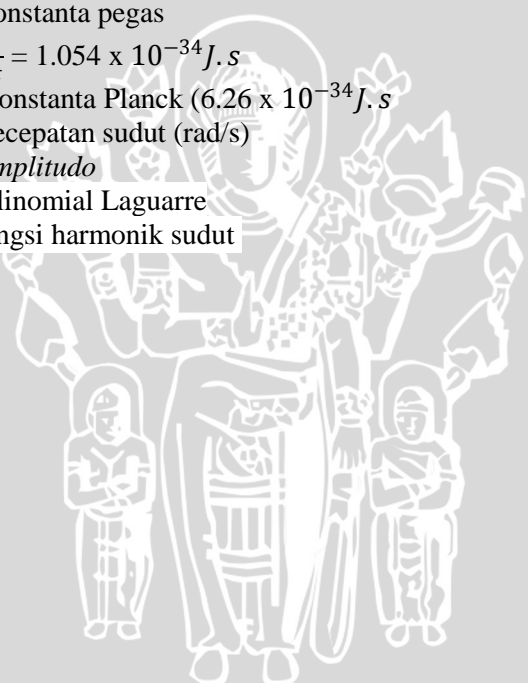
Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan. Untuk itu penulis mengharapkan kritik dan saran yang bersifat membangun demi hasil yang lebih baik lagi. Penulis juga berharap semoga laporan ini dapat memberi manfaat dan memberi tambahan ilmu bagi pembaca.

Malang, Juni 2012

Lalu Suhaimi

DAFTAR SIMBOL

Ψ	= Fungsi Gelombang
E	= Energi
p	= Momentum
m	= Massa atom
V	= <i>Energi Potensial</i>
H	= Hamiltonian
H_n	= Polinomial Hermitte dengan suku ke-n
n	= Bilangan Kuantum
k	= konstanta pegas
\hbar	= $\frac{h}{2\pi} = 1.054 \times 10^{-34} J \cdot s$
h	= Konstanta Planck ($6.26 \times 10^{-34} J \cdot s$)
ω	= kecepatan sudut (rad/s)
A	= <i>Amplitudo</i>
L	= polinomial Laguarre
$Y_{l,m}$	= fungsi harmonik sudut



DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
ABSTRAK	iv
ABSTRACT	v
KATA PENGANTAR	vi
DAFTAR SIMBOL	vii
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR LAMPIRAN	xiii
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1. Latar Belakang Masalah.....	1
1.2. Perumusan Masalah.....	3
1.3. Tujuan Penelitian	3
1.4. Batasan Masalah.....	3
1.5. Manfaat Penelitian.....	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1. Atom Hidrogenik.....	5
2.1.1. Persamaan Schrodinger untuk Atom Hidrogen...	5
2.1.2. Pemisahan Variabel.....	6
2.1.3. Persamaan Radial	7
2.1.4. Persamaan Angular	8
2.1.5. Fungsi Radial Atom Hidrogenik	11
2.2. Osilator Harmonik.....	15
2.2.1. Spektrum Energi Osilator Harmonik	15
2.2.2. Fungsi Gelombang Osilator Harmonik	17
2.3. Persamaan Schrodinger.....	18
2.3.1. Probabilitas dan Normalisasi.....	22
2.4. Metode Numerik	23
2.4.1 Metode Operator Filter.....	24

2.5. Sistem Tri-Diagonal Matriks	26
2.5.1 Metode Lower Upper Dekomposisi	27
2.6. Solusi Numerik Persamaan Schrodinger	29
BAB III METODOLOGI PENELITIAN	31
3.1. Tempat dan Waktu Penelitian.....	31
3.2. Peralatan Penelitian	31
3.3. Metode Penelitian	31
3.3.1. Alur Penelitian	31
3.3.2. Flowchart Pemrograman	32
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	41
4.1. Fungsi Gelombang dan Energi Atom Hidrogenik	41
4.2. Fungsi Gelombang dan Energi Osilator Harmonik	45
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	53
5.1. Kesimpulan	53
5.2. Saran.....	53
DAFTAR PUSTAKA	55
LAMPIRAN	58



DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar 2.1 Atom Hidrogen dan Koordinat Bola	5
Gambar 3.1 Diagram Alur Penelitian.....	31
Gambar 3.2 Diagram Alir Program Utama	32
Gambar 3.3 Diagram Alir Sub Program Eigenstate	34
Gambar 3.4 Diagram Alir SubProgram Invers.....	37
Gambar 3.5 Diagram Alir Sub Program Hamiltonian.....	38
Gambar 3.6 Diagram Alir Sub Program Iter	39
Gambar 4.1 (a) Fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk keadaan $n=1, l=0$ dengan menggunakan metode analitik (b) Gambar yang sama tetapi diperoleh dengan menggunakan metode operator filter.....	41
Gambar 4.2. (a) Fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk keadaan $n=2, l=0$ dengan menggunakan metode analitik (b) Gambar yang sama tetapi diperoleh dengan menggunakan metode operator filter.....	42
Gambar 4.3. (a) Fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk keadaan $n=2, l=1$ dengan menggunakan metode analitik (b) Gambar yang sama tetapi diperoleh dengan menggunakan metode operator filter.....	43
Gambar 4.4. (a) Fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk keadaan $n=3, l=0$ dengan menggunakan metode analitik (b) Gambar yang sama tetapi diperoleh dengan menggunakan metode operator filter.....	44
Gambar 4.5. Fungsi gelombang osilator harmonik dengan metode operator filter dan metode Analitik untuk $n=0$	46

Gambar 4.6. Fungsi gelombang osilator harmonik dengan metode operator filter dan metode analitik untuk $n = 5$ 47

Gambar 4.7. Fungsi gelombang osilator harmonik dengan metode operator filter dan metode analitik untuk $n = 10$ 48

Gambar 4.8. Fungsi gelombang osilator harmonik dengan metode operator filter dan metode analitik untuk $n = 15$ 49

UNIVERSITAS BRAWIJAYA



DAFTAR TABEL

Halaman

Tabel 2.1 Nilai besarnya <i>associated Legendre function</i> , $P_l^m(\cos \theta)$	10
Tabel 2.2 Nilai besarnya <i>spherical harmonics</i>	11
Tabel 2.3 Bagian radial dari fungsi gelombang $R_{n,l}(r)$	14



DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran

Halaman

- Lampiran 1. LISTING PROGRAM OPERATOR FILTER..... 58
Lampiran 2. Grafik fungsi gelombang radial atom hidrogenik dan potensial osilator harmonik untuk berbagai keadaan kuantum dengan menggunakan metode operator filter dan metode analitik 64



BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Di dalam mekanika kuantum, pemodelan terhadap suatu bentuk medan potensial merupakan hal yang sangat penting. Pemodelan dengan bentuk medan potensial tertentu akan memberikan sumbangan pada penggambaran mengenai karakteristik zarah yang dipengaruhi. Karakteristik zarah ini ditunjukkan oleh keberadaan energi-energi terikatnya serta perilaku fungsi gelombang yang bersesuaian dengan keadaan tersebut.

Dalam kaitannya dengan permasalahan yang dikaji, fungsi gelombang merupakan kuantitas teoritis fundamental dalam mekanika kuantum. Dari fungsi gelombang dapat diperoleh berbagai informasi tentang partikel itu sendiri, seperti kemungkinan terdapatnya partikel dalam suatu ruang pada saat itu. Dengan fungsi gelombang kita dapat mengetahui di mana partikel itu sering berada, dapat mengetahui momentum rata-rata dari partikel tersebut, dan juga beberapa besaran lain yang menggambarkan sifat-sifat partikel itu sendiri. Untuk mendapatkan fungsi gelombang partikel tersebut, digunakan sebuah persamaan energi dalam bentuk persamaan differensial atau yang lebih dikenal dengan Persamaan Schrodinger.

Penyelesaian Persamaan Schrodinger banyak menggunakan metode komputasi (numerik). Di antaranya adalah penyelesaian numerik Persamaan Scrodinger dalam sebuah sumur potensial satu dimensi (Lambert, 2001), penyelesaian numerik eksak sebuah Persamaan Schrodinger dengan pusat Coulomb dengan osilator harmonik (Khrebtukov, 1992), evolusi simulasi Persamaan Schrodinger yang bergantung waktu melalui metode numerik (Duffy, 2003), metode galerkin tak-kontinyu pada lokal konservatif untuk Persamaan Schrodinger yang bergantung waktu (Lu dkk, 2004), penyelesaian Persamaan Schrodinger dalam representasi osilator harmonik (Schmid, 1990), penyelesaian Persamaan Schrodinger dengan metode Numerov, penyelesaian Persamaan Schrodinger untuk atom berelektron banyak pada atom helium (Jesche, 2003) dan penyelesaian Persamaan Schrodinger pada atom hidrogenik.

Sistem yang ditinjau pada penelitian ini adalah sistem yang dipengaruhi oleh medan potensial osilator harmonik dan potensial atom hidrogenik. Sebagaimana keadaan zarah yang terjebak di dalam suatu medan potensial tertentu, maka muncul keadaan-keadaan terkuantisasi dengan keadaan energi tidak sembarang. Partikel dalam keadaan terjebak ini akan melakukan gerak osilasi dengan frekuensi dan periode tertentu. Hal ini bisa ditunjukkan dengan fungsi gelombang yang mewakilinya. Jika partikel berada pada keadaan energi dasar, maka gerakan yang dilakukan oleh zarah menjadi lebih lambat dibandingkan dengan zarah yang berada pada keadaan tereksitasi pertama. Demikian pula, zarah yang berada pada keadaan tereksitasi kedua mengalami gerakan yang lebih cepat dibandingkan dengan partikel pada keadaan tereksitasi pertama. Begitu seterusnya, zarah yang berada di keadaan energi yang lebih tinggi mengalami gerakan lebih cepat dibandingkan zarah yang berada pada keadaan energi yang lebih rendah.

Penyelesaian Persamaan Schrodinger pada potensial osilator harmonik dan atom hidrogenik sebenarnya sudah dilakukan secara analitik (Beiser, 1987). Hanya saja beberapa kasus, misalnya pada atom kompleks, akan membutuhkan penyelesaian matematis yang rumit, sehingga dibutuhkan suatu penyelesaian yang lebih sederhana dan mudah yaitu dengan menggunakan metode numerik. Oleh karena itu, penelitian yang dilakukan di sini adalah mencari penyelesaian numerik Persamaan Schrodinger pada potensial osilator harmonik dan atom hidrogen.

Metode numerik yang digunakan pada penelitian ini adalah salah satu metode numerik yang melibatkan matriks dengan kebanyakan elemennya bernilai nol. Salah satu bentuk matriks yang elemen nolnya berpola adalah matriks pita (*banded matrix*). Lebar pita adalah maksimum banyaknya elemen taknol pada baris-baris suatu matriks pita. Matriks pita yang terkecil adalah yang lebar pitanya tiga atau dikenal sebagai tridiagonal matriks. Metode numerik ini disebut metode Operator Filter yang dikembangkan oleh M. Nurhuda.

1.2 Rumusan Masalah

Dari latar belakang masalah di atas dapat dirumuskan permasalahan sebagai berikut, yaitu:

Bagaimana pengkajian fungsi gelombang dan tingkat energi dari suatu partikel pada potensial osilator harmonik dan potensial atom hidrogenik menggunakan pendekatan metode operator filter ?

1.3 Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji fungsi gelombang dan tingkat energi dari suatu partikel pada sistem yang berada di bawah potensial osilator harmonik dan potensial atom hidrogenik menggunakan pendekatan metode operator filter.

1.4 Batasan Masalah

Batasan masalah untuk penelitian ini yaitu hanya untuk kasus pada sebuah sistem yang berada di bawah potensial harmonik dan potensial atom hidrogenik.

1.5 Manfaat Penelitian

Hasil dari kajian komputasi numerik metode operator filter ini dapat digunakan sebagai pembanding hasil analitis matematis pada penyelesaian persamaan Schrodinger sistem tersebut. Penelitian ini juga memberikan sumbangan metode numerik yang baru untuk mengkaji fungsi gelombang dan tingkat energi pada suatu sistem yang dipengaruhi oleh potensial tertentu.

UNIVERSITAS BRAWIJAYA



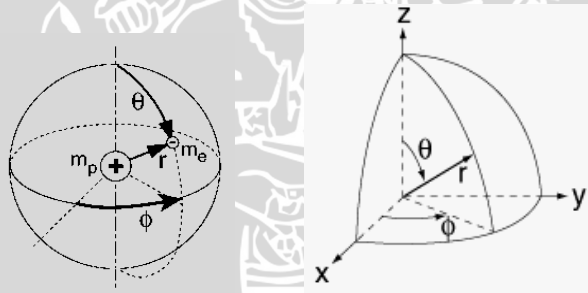
(Halaman ini sengaja dikosongkan)

BAB II TINJAUAN PUSTAKA

2.1. Atom Hidrogenik

Sebuah atom hidrogenik terdiri dari sebuah proton, partikel yang bermuatan listrik $+e$, dan sebuah elektron, partikel yang bermuatan $-e$ yang massanya 1.836 lebih ringan dari proton. Untuk kemudahan, kita akan menganggap protonnya diam dengan elektron bergerak di sekelilingnya tetapi di cegah untuk melarikan dirinya oleh medan listrik proton. Seperti dalam teori Bohr (gambar 2.1), koreksi gerak proton dapat dilakukan dengan mengganti massa elektron m_e dengan massa tereduksinya μ yang dinyatakan dengan persamaan

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \quad 2.1$$



Gambar 2.1 (a) Atom Hidrogen (b) Koordinat Bola

2.1.1 Persamaan Schrodinger untuk Atom Hidrogenik

Persamaan Schrodinger untuk elektron dalam tiga dimensi yang kita pakai untuk persoalan atom hidrogenik ialah

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + V(r)\psi = E\psi \quad (2.2)$$

Energi potensial V ialah energi potensial coulomb

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (2.3)$$

dari suatu muatan $-e$ pada jarak r dari muatan $+e$

Karena simetri atom hidrogenik yang berbentuk bola, maka digunakan penyelesaian dengan persamaan Schrodinger dalam koordinat polar berbentuk bola (polar sferis) r, θ, ϕ yang didefinisikan dalam gambar (2.1.b). Karena persamaan tersebut lebih mudah dan dapat dipisahkan menjadi tiga persamaan yang bebas, masing-masing hanya mengandung satu koordinat saja. Pemisahan seperti ini (yang tidak hanya terdapat pada persoalan atom hidrogen) terjadi karena fungsi gelombang $\psi(r, \theta, \phi)$ mengambil bentuk perkalian dari tiga fungsi yang berbeda: $R(r)$ yang hanya bergantung r , $\Theta(\theta)$ yang hanya bergantung θ , $\Phi(\phi)$ yang hanya bergantung ϕ (Beiser, 1987).

2.1.2 Pemisahan Variabel

Persamaan Schrodinger bebas waktu dalam koordinat polar berbentuk bola adalah :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) \right] + V\psi = E\psi \quad (2.4)$$

penyelesaian persamaan yang terpisah dapat kita peroleh dengan memisahkan variabel r, θ dan ϕ dari persamaan di atas, fungsi gelombang atom hidrogen adalah

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (2.5)$$

Dengan memasukan persamaan (2.5) ke persamaan (2.6), diperoleh

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{Y}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{R}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{R}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right) \right] + VRY = ERY \quad (2.6)$$

Dengan membagi persamaan diatas dengan $Y R$ dan mengkalikannya dengan $-2mr^2 / \hbar^2$ diperoleh :

$$\left\{ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] \right\} = -\frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right) \right\} \quad (2.7)$$

Persamaan pada suku kiri hanya bergantung pada r dan pada suku kanan hanya bergantung pada θ dan ϕ , kedua persamaan tersebut benar jika kedua belah suku itu sama dengan tetapan yang sama (konstanta) karena suku kiri dan kanan merupakan fungsi variabel yang berbeda (dijelaskan dilampiran II). Tetapan ini akan kita sebut $l(l+1)$ (D.J.Griffiths,1995)

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] = l(l+1) \quad (2.8)$$

$$\frac{1}{Y} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right) \right\} = -l(l+1) \quad (2.9)$$

2.1.3 Persamaan Radial

Sebagai catatan bahwa fungsi gelombang bagian *angular* $Y(\theta, \phi)$ adalah sama untuk semua potensial bola simetri, bentuk potensial $V(r)$ hanya berpengaruh pada fungsi gelombang bagian radial $R(r)$ yang di tentukan oleh persamaan

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2} [V(r) - E] R = l(l+1)R \quad (2.10)$$

Penyederhanaan persamaan ini dilakukan dengan merubah variabel

$$u(r) = r R(r) \quad (2.11)$$

Sehingga $R = u/r$, $dR/dr = [r(du/dr)-u] / r^2$, maka $(d/dr) [r^2 (dR/dr)] = rd^2u/dr^2$,

dan diperoleh

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dr^2} + \left[V + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \right] u = Eu \quad (2.12)$$

Persamaan diatas dikenal sebagai persamaan *radial*, dan potensial efektifnya adalah

$$V_{eff} = V + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} \quad (2.13)$$

2.1.4 Persamaan Angular

Persamaan (2.9) hanya bergantung pada θ dan ϕ , dengan mengkalikan persamaan tersebut dengan $Y \sin^2 \theta$ diperoleh

$$\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \left(\frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right) = -l(l+1) \sin^2 \theta Y \quad (2.14)$$

Dengan memasukan persamaan fungsi gelombang bagian *angular*

$$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \Phi(\phi) \quad (2.15)$$

ke dalam persamaan (2.14) dan dengan membaginya dengan $\Theta \Phi$ diperoleh

$$\left\{ \frac{1}{\Theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) \right] + l(l+1) \sin^2 \theta \right\} + \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = 0 \quad (2.16)$$

Persamaan pertama hanya bergantung pada θ , dan persamaan kedua hanya bergantung pada ϕ , sehingga dengan memberikan konstanta pemisah m_l^2 , persamaan diatas dapat diubah menjadi

$$\frac{1}{\Theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) \right] + l(l+1) \sin^2 \theta = m_l^2 \quad (2.17)$$

$$\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -m_l^2 \quad (2.18)$$

Penyelesaian umum persamaan diatas adalah

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -m_l^2 \Phi \rightarrow \Phi(\phi) = A e^{im_l \phi} \quad (2.19)$$

Dengan A adalah konstanta integrasi, komponen Φ merupakan dari fungsi gelombang ψ sehingga Φ harus berharga tunggal pada setiap titik dalam ruang, jadi fungsi itu harus memenuhi $\Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi)$, yang hanya berlaku bila m_l adalah bilangan 0 atau bilangan bulat positif atau negatif ($m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$). Konstanta m_l dikenal sebagai bilangan kuantum magnetik atom hidrogen.

Untuk persamaan θ adalah

$$\sin \theta \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + [l(l+1) \sin^2 \theta - m_l^2] \Theta = 0 \quad (2.20)$$

Penyelesaian persamaan diatas adalah

$$\Theta(\theta) = A P_l^{m_l}(\cos \theta) \quad (2.21)$$

Dimana $P_l^{m_l}$ adalah *associated Legendre function*, yang didefinisikan sebagai

$$P_l^{m_l}(x) \equiv (1-x^2)^{|m_l|/2} \left(\frac{d}{dx} \right)^{|m_l|} P_l(x) \quad (2.22)$$

Dengan $P_l(x)$ adalah *Legendre polynomial* ke- l atau sering disebut *Rodriguez formula* :

$$P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (1-x^2)^l \quad (2.23)$$

Tabel 2.1 : Nilai besarnya *associated Legendre function*, $P_l^{m_l}(\cos \theta)$

(Griffith, 1994)

$P_1^1 = \sin \theta$	$P_3^3 = 15 \sin \theta (1 - \cos^2 \theta)$
$P_1^0 = \cos \theta$	$P_3^2 = 15 \sin^2 \cos \theta$
$P_2^0 = \frac{1}{2} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$P_3^1 = \frac{3}{2} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1)$
$P_2^1 = 3 \sin \theta \cos \theta$	$P_3^0 = \frac{1}{2} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$
$P_2^2 = 3 \sin^2 \theta$	

Elemen volume dalam koordinat bola adalah

$$d^3 r = r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \quad (2.24)$$

sehingga dalam keadaan fungsi gelombang ternormalisasi

$$\int |\psi|^2 r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi = \int |R|^2 r^2 dr \int |Y|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1 \quad (2.25)$$

Untuk keadaan R dan Y masing-masing ternormalisasi:

$$\int_0^\infty |R|^2 r^2 dr = 1 \text{ dan } \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y|^2 \sin \theta d\theta d\phi = 1 \quad (2.26)$$

Normalisasi dari fungsi gelombang *angular* disebut *spherical harmonics*:

$$Y_l^{m_l}(\theta, \phi) = \varepsilon \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_l^{m_l}(\cos \theta) e^{-im_l \phi} \quad (2.27)$$

Dimana $\varepsilon = (-1)^m$ untuk $m \geq 0$ dan $\varepsilon = 1$ untuk $m \leq 0$, dengan $\theta = 0 \rightarrow \pi$ dan $\phi = 0 \rightarrow 2\pi$.

Tabel 2.2 : Nilai besarnya *spherical harmonics*, $Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$

(Griffith, 1994)

$$\begin{array}{ll}
 Y_0^0 = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} & Y_2^0 = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{\frac{1}{2}} (3\cos^2\theta - 1) \\
 Y_1^0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \cos\theta & Y_2^{\pm 1} = \pm \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta \cos\theta e^{\pm i\phi} \\
 Y_1^{\pm 1} = \pm \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\theta e^{\pm i\phi} & Y_2^{\pm 2} = \pm \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sin^2\theta e^{\pm i\phi}
 \end{array}$$

Tingkat energi dari atom hidrogen diberikan oleh persamaan berikut.

$$E_n = -\frac{Z^2 m e^4}{2n^2 \hbar^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (2.28)$$

Dimana dalam sistem atomik $\hbar = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$ dan $Z = 1$. Disini, n adalah bilangan kuantum utama yang menentukan tingkat-tingkat energi.

2.1.5 Fungsi Gelombang Radial Atom Hidrogen

Harga fungsi gelombang yang berkaitan dengan sebuah partikel bergerak pada suatu titik tertentu x, y, z dalam ruang pada saat t berpautan dengan peluang untuk mendapatkan partikel tersebut di tempat tersebut pada saat t . Namun, Ψ sendiri tidak mempunyai arti fisis langsung. Terdapat alasan yang sederhana mengapa Ψ tidak dapat langsung ditafsirkan berdasarkan eksperimen. Peluang P bahwa sesuatu berada di suatu tempat pada suatu saat mempunyai harga diantara dua batas : 0 yang bersesuaian dengan keabsennya, dan 1, bersesuaian dengan pasti kehadirannya. Namun, amplitudo suatu gelombang dapat berharga negatif tidak mempunyai arti. Jadi

Ψ itu sendiri tidak bisa merupakan kuantitas yang teramati. Kuadrat dari harga mutlak fungsi gelombang dikenal sebagai rapat peluang. Peluang untuk secara eksperimental mendapatkan partikel yang diberikan oleh fungsi gelombang Ψ pada titik x, y, z pada saat t berbanding lurus dengan harga $|\Psi|^2$ di tempat itu pada saat t . Harga $|\Psi|^2$ yang besar menyatakan peluang yang besar untuk mendapatkan partikel itu, sedangkan harga $|\Psi|^2$ yang kecil menyatakan peluang yang kecil untuk mendapatkan partikel itu. Selama $|\Psi|^2$ tidak nol, terdapat peluang tertentu untuk mendapatkan partikel tersebut di situ. Tafsiran ini mula-mula dikemukakan oleh Max Born dalam tahun 1926. Terdapat perbedaan yang besar antara peluang suatu kejadian dan kejadian itu sendiri. Walaupun fungsi gelombang Ψ yang menggambarkan suatu partikel, menyebar dalam ruang, ini tidak berarti bahwa partikel itu menyebar. Bila suatu eksperimen dilakukan untuk mendeteksi elektron, misalnya, sebuah elektron dapat ditemukan pada suatu tempat pada saat tertentu atau kita tidak dapat menemukannya, kerapatan yang sebenarnya dari partikel itu di x, y, z pada saat t berbanding lurus dengan harga $|\Psi|^2$. Kuadrat besaran mutlak $|\Psi|^2$ (atau sama dengan $\Psi\Psi^*$ jika Ψ kompleks) yang di cari pada suatu tempat tertentu pada suatu saat berbanding lurus dengan peluang untuk mendapatkan partikel itu di tempat itu pada saat itu. Momentum, momentum sudut, dan energi dari partikel dapat di peroleh dari Ψ . Persoalan mekanika kuantum ialah untuk menentukan Ψ untuk partikel itu bila kebebasan gerak di batasi oleh aksi gaya eksternal (Beiser, 1987).

Persamaan gelombang dari atom hidrogen dalam bentuk koordinat polar sebagai berikut,

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \right) \Lambda \psi = (V - E) \psi \quad (2.29)$$

Sebagaimana telah dipelajari tentang momentum sudut, Legendrian Λ hanya terdiri dari koordinat sudut (θ, φ) , dan ini memenuhi persamaan dengan fungsi harmonik sudut $Y_{l,m}$.

$$\Lambda Y_{l,m} = -l(l+1) Y_{l,m} \quad (2.30)$$

Dengan memperhatikan persamaan ini, marilah kita mengambil fungsi gelombang dalam bentuk sebagai berikut.

$$\Psi = R(r) \cdot Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (2.31)$$

Dari persamaan (2.29), (2.30) dan (2.31), didapatkan

$$R \left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - l(l+1) \right) R(r) + (U - E)(r) \right] Y_{lm} \quad (2.32)$$

Fungsi Ψ yang diperkenalkan pada persamaan (2.31) dapat menjadi solusi dari persamaan gelombang untuk atom hidrogenik, dengan persyaratan bahwa fungsi $R(r)$ akan ditentukan untuk memenuhi kondisi. Dalam cara ini, fungsi gelombang dari atom hidrogenik diberikan dalam bentuk yang merupakan produk dari bagian radial $R(r)$ dan bagian sudut $Y_{l,m}(\theta, \phi)$.

Persamaan untuk menentukan $R(r)$ diberikan sebagai berikut.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - l(l+1) \right) R(r) = (E - U)R(r) \right] \quad (2.33)$$

Fungsi-fungsi $R(r)$ untuk bagian radial diekspresikan dalam bentuk persamaan matematik yang dikenal sebagai polinomial Laguarre, L_α dan sebuah fungsi dari r yang diberikan di bawah ini sebagai ρ .

$$\rho = \frac{2Zr}{na_0} \quad (2.34)$$

$$a_0 = \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{\pi m e^2} \quad (2.35)$$

$$R_{nl}(\rho) = \sqrt{\frac{4(n-l-1)!}{n^4 [(n+1)!]^2}} \left(\frac{z}{a_0} \right)^{3/2} \rho^l e^{-\rho/2} L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho) \quad (2.36)$$

$$L_\alpha^\beta(\rho) = \frac{\partial^\beta}{\partial \rho^\beta} L_\alpha(\rho) \quad (\beta = 0, 1, 2, 3 \dots \rho \leq \alpha) \quad (2.37)$$

$$L_\alpha(\rho) = e^\rho \frac{\partial^\alpha}{\partial \rho^\alpha} (\rho^\alpha e^{-\rho}) \quad (\alpha = 1, 2, 3, \dots) \quad (2.38)$$

Dari persamaan (2.34), (2.35), (2.36), (2.37) dan persamaan (2.38) diperoleh bagian radial dari fungsi gelombang R_{nl} , seperti yang ditunjukkan pada tabel di bawah ini,

Tabel 2.3 : Bagian radial dari fungsi gelombang $R_{n,l}(r)$

$$R_{1,0} = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Z/a_0} r$$

$$R_{2,0} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Z/a_0} r$$

$$R_{2,1} = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-Z/2a_0} . r$$

$$R_{3,1} = \frac{2}{81\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(27 - \frac{18Zr}{a_0} + \frac{2Z^2 r^2}{a_0^2}\right) e^{-Z/3a_0} . r$$

Disini, L_a^β adalah polinomial Laguerre terasosiasi, a_0 adalah konstanta yang sama dengan radius Bohr.

Sifat matematik dari bagian radial fungsi gelombang atom hidrogen adalah

1. Dikarenakan adanya sebuah fungsi eksponensial maka nilai fungsional akan mendekati nilai 0 secara asimtotik bersamaan dengan meningkatnya r (bergerak ke arah luar dari inti atom, probabilitas untuk menemukan sebuah elektron akan menghilang).
2. Koefisien dari r dalam eksponen akan mengecil untuk bilangan kuantum utama, n yang besar dan ini membuat nilai fungsi akan mendekati 0 lebih lambat untuk n yang lebih besar. [Probabilitas untuk menemukan sebuah elektron akan berkembang pada daerah jauh dari inti jika berpindah dari bilangan kuantum utama $n = 1$, $n = 2$ dan $n = 3$].

3. Nilai fungsional pada $r = 0$ adalah 0 kecuali untuk $l = 0$ [tidak ada kemungkinan untuk menemukan sebuah elektron pada inti kecuali untuk $l = 0$].
4. Terdapat $n - l - 1$ jarak (bola) di mana tidak ada elektron yang dapat ditemukan dengan nilai fungsi jarak yang nol. [Dalam kasus $n - l > 1$, probabilitas untuk menemukan sebuah elektron menurun hingga daerah terluar dan memiliki sifat berosilasi].

2.2 Osilator Harmonik

Jika suatu sistem jenis tertentu bergetar disekitar konfigurasi setimbangnya maka akan terjadi gerak harmonik. Sistemnya bisa terdiri dari benda yang digantung pada sebuah pegas, molekul dwi atom, sebuah atom dalam kristal dan masih banyak sekali contoh dalam dunia mikroskopik maupun dunia makroskopik. Di dalam dunia kuantum, osilator harmonik berfungsi mendiskripsikan subjek yang berupa partikel atomik dalam sumber energi potensial. Partikel dibatasi oleh bidang energi potensial pada jarak tertentu.

Dalam skala nano sistem osilator harmonik ini dapat digunakan untuk mendiskripsikan interaksi ikatan diantara atom dalam molekul dengan mengasumsikan bahwa gaya potensial dalam ikatan adalah linear. Dinamika ikatan molekul dapat menjelaskan emisi elektromagnetik dan kemampuan serap dari berbagai molekul.

Persyaratan supaya gerak harmonik ini terjadi adalah terdapatnya gaya pemulih yang beraksi untuk mengembalikan ke konfigurasi setimbangnya jika sistem itu diganggu, kelembaman massa yang bersangkutan mengakibatkan benda melampui kedudukan seimbangnya, sehingga sistem itu berosilasi terus menerus jika tidak terdapat proses disipatif (Beiser, 1992).

2.2.1 Spektrum Energi Osilator Harmonik

Dipandang suatu osilator linear yang dibatasi gerakannya hanya pada sumbu-x, sehingga potensialnya adalah

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega x^2 \quad (2.39)$$

Hamiltoniannya

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega x^2 \quad (2.40)$$

Karena Hamiltoniannya tidak bergantung pada waktu atau sistem konservatif, maka persamaan nilai-eigennya adalah

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega x^2 \right] \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.41)$$

dimana $\psi(x)$ dan E masing-masing merupakan fungsi dan nilai eigen yang bersesuaian. Untuk memudahkan, kita sederhanakan persamaan (2.41) dengan memperkenalkan kuantitas tak-berdimensi

$$\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (2.42)$$

$$\zeta = \beta x \quad (2.43)$$

$$\psi(\zeta) = \psi(x)$$

$$\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega} \quad (2.44)$$

sehingga persamaan (2.41) menjadi

$$-\frac{d^2\psi(\zeta)}{d\zeta^2} + \zeta^2\psi(\zeta) = \varepsilon\psi(\zeta) \quad (2.45)$$

yang disebut sebagai persamaan Weber

Dari persamaan (2.43) dapat diperoleh suatu fungsi gelombang yang dapat diterima secara fisis.

Pemecahan persamaan yang dapat diterima dibatasi oleh persyaratan $\psi \rightarrow 0$ ketika $\zeta \rightarrow \infty$ supaya

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx = 1 \quad (2.46)$$

Jika tidak memenuhi syarat itu maka fungsi gelombangnya tidak dapat memberikan partikel yang sesungguhnya. Sehingga syarat tersebut dipenuhi hanya jika

$$\varepsilon = 2n + 1 \quad (2.47)$$

dengan $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Karena $\varepsilon \equiv \frac{2E}{\hbar\omega}$ menurut persamaan (2.42), tingkat energi osilator harmonic yang memiliki frekuensi klasik ω diberikan oleh persamaan

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (2.48)$$

dengan $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

Hasil di atas mengisyaratkan bahwa energi sebuah osilator harmonic terkuantisasi dengan langkah $\hbar\omega$, bukan malar seperti yang tampak secara klasik. Untuk $n = 0$

$$E_0 = \left(0 + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (2.49)$$

yang menyatakan energi terendah yang dapat dimiliki oleh osilator harmonic itu. Harga ini disebut energi titik-nol (*ground state energy*) karena sebuah osilator harmonic dalam keadaan setimbang dengan sekelilingnya akan mendekati $E = E_0$ dan bukan $E = 0$ ketika temperature 0 K.

2.2.2 Fungsi Gelombang Osilator Harmonik

Pada penelitian ini fungsi gelombang osilator harmonic dicari dengan dua cara yaitu metode analitik dan metode numerik operator filter.

Persamaan umum dari fungsi gelombang osilator harmonik adalah

$$\psi_n(x) = A_n H_n(x) e^{-(\alpha x)^2/2} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.50)$$

dimana

$$\alpha = [m \frac{k}{\hbar^2}]^{1/4} \quad (2.51)$$

$$A_n = [\frac{\alpha}{\pi^{0.5} n! 2^n}]^{0.5} \quad (2.52)$$

Sehingga rumus umum fungsi gelombang osilator harmonik ke n dapat ditulis sebagai berikut

$$\psi_n(x) = [\frac{\alpha}{\pi^{0.5} n! 2^n}]^{0.5} H_n(x) e^{-([m \frac{k}{\hbar^2}]^{1/4} x)^2 / 2} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.53)$$

Polinomial hermitte (H_n) untuk H_0 sampai H_6 , diberikan oleh

$$H_0(x) = 1$$

$$H_1(x) = 2 \cdot \alpha \cdot x$$

$$H_2(x) = 4 \cdot (\alpha \cdot x)^2 - 2$$

$$H_3(x) = 4 \cdot \alpha \cdot x [2 \cdot (\alpha \cdot x)^2 - 3]$$

$$H_4(x) = 12 - 48 \cdot (\alpha \cdot x)^2 + 16(\alpha \cdot x)^4$$

$$H_5(x) = 8 \cdot \alpha \cdot x [15 - 20 \cdot (\alpha \cdot x)^2 + 4(\alpha \cdot x)^4]$$

2.3 Persamaan Schrodinger

Konsep sentral dalam mekanika kuantum adalah persamaan Schrodinger yang merupakan persamaan diferensial orde dua yang identik dengan persamaan energi total suatu sistem pada mekanika klasik, di mana variabel dalam mekanika klasik berubah menjadi operator dalam mekanika kuantum. Persamaan Schrodinger dapat memberikan informasi suatu sistem tentang energi, posisi, ataupun momentumnya. Informasi-informasi di atas akan diperoleh bila kita

dapat menyelesaikan persamaan Schrodinger untuk menentukan tingkat-tingkat energi dan fungsi gelombang (Suparmi, 1992).

Dalam mekanika kuantum fungsi gelombang Ψ disesuaikan dengan variabel gelombang dalam gerak gelombang mekanik. Namun, Ψ bukanlah suatu kuantitas yang dapat diukur, dan dapat berupa kuantitas kompleks. Karena itu kita akan menganggap Ψ dalam arah x dinyatakan oleh

$$\Psi = Ae^{-i\omega(t-x/v)} \quad (2.54)$$

Jika kita ganti ω dalam rumus diatas dengan $2\pi\nu$ kita peroleh

$$\Psi = Ae^{-2\pi i(\nu t - x/\lambda)} \quad (2.55)$$

yang bentuknya menguntungkan, karena kita telah mengetahui hubungan dan dinyatakan dalam energi total E dan momentum p dari partikel yang digambarkan oleh Ψ . Karena

$$E = h\nu = 2\pi\hbar\nu \quad \text{dan} \quad \lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}$$

Kita peroleh persamaan matematis gelombang ekuivalen dari partikel bebas yang bernenergi E dan bermomentum p yang bergerak dalam arah $+x$.

$$\Psi = Ae^{-(i/\hbar)(Et - px)} \quad (2.56)$$

Untuk memperoleh persamaan Schrodinger kita mulai dengan cara mendiferensialkan persamaan (2.56) dua kali terhadap x sehingga menghasilkan

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi \quad (2.57)$$

dan sekali terhadap t , menghasilkan

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \psi \quad (2.58)$$

Untuk kelajuan yang kecil terhadap kelajuan cahaya, energi total partikel E ialah jumlah dari energi kinetik $p^2/2m$ dan energi potensial V , dengan V pada umumnya merupakan fungsi kedudukan x dan waktu t .

$$E = \frac{p^2}{2m} + V \quad (2.59)$$

Dengan mengkalikan kedua suku persamaan (2.59) dengan fungsi gelombang ψ menghasilkan :

$$E\psi = \frac{p^2\psi}{2m} + V\psi \quad (2.60)$$

dari persamaan (2.57) dan (2.58) dapat kita ketahui bahwa

$$E\psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (2.61)$$

dan

$$p^2\psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \quad (2.62)$$

Dengan mensubstitusikan pernyataan untuk $E\psi$ dan $p^2\psi$ dalam persamaan (2.60) maka diperoleh persamaan Schrodinger bergantung waktu dalam satu dimensi (Beiser, 1987).

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi \quad (2.63)$$

Dalam tiga dimensi persamaan Schrodinger bergantung waktunya ialah

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right] + V\psi \quad (2.64)$$

di mana energi potensial V merupakan fungsi dari x , y , z dan t . Jika energi potensial $V(r)$ dalam Hamiltonian bersifat bebas waktu, maka dari persamaan (2.64) diperoleh persamaan Schrodinger bebas waktu

$$H\psi(r) = E\psi(r) \quad (2.65)$$

atau

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(r)}{\partial x^2} + V(r)\psi(r) = E\psi(r) \quad (2.66)$$

Dengan H operator *Hamiltonian* (energi total) sistem, yaitu

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \quad (2.67)$$

Persamaan Schrodinger bebas waktu dalam koordinat polar berbentuk bola dapat dicari dengan memberikan nilai persamaan Laplacian dalam koordinat bola (r, θ, ϕ) dengan r adalah jari-jari bola, θ adalah sudut zenital dan ϕ adalah sudut azimutal, persamaan Laplacian dalam koordinat bola :

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \quad (2.68)$$

sehingga persamaan Schrodinger bebas waktu dalam koordinat polar berbentuk bola adalah :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right) \right] + V\psi = E\psi \quad (2.69)$$

2.3.1 Probabilitas dan Normalisasi

Fungsi gelombang $\psi(x)$ menyatakan suatu gelombang yang memiliki panjang gelombang dan bergerak dengan kecepatan fase yang jelas. Masalah yang muncul ketika hendak menafsirkan amplitudonya. Apakah yang dinyatakan oleh amplitudo $\psi(x)$ dan variabel fisika apakah yang bergetar? Ini merupakan jenis gelombang yang berbeda, yang nilai mutlaknya memberikan probabilitas untuk menemukan partikelnya pada suatu titik tertentu. artinya $|\psi(x)|^2 dx$ memberikan probabilitas untuk menemukan partikel dalam selang dx di x . Rapat probabilitas $P(x)$ terhadap $\psi(x)$ menurut persamaan Schrodinger sebagai berikut:

$$P(x) dx = |\psi(x)|^2 dx \quad (2.70)$$

Tafsiran $|\psi(x)|^2$ ini membantu memahami persyaratan kontinu $\psi(x)$, walaupun amplitudonya berubah secara tidak jelas dan kontinu. Probabilitas untuk menemukan partikel antara x_1 dan x_2 adalah jumlah semua probabilitas $P(x) dx$ dalam selang antara x_1 dan x_2 adalah sebagai berikut:

$$\int_{x_1}^{x_2} P(x) dx = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx \quad (2.71)$$

Dari aturan ini, maka probabilitas untuk menemukan partikel di suatu titik sepanjang sumbu x , adalah 100 persen, sehingga berlaku:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (2.72)$$

Persamaan (2.72) dikenal dengan syarat Normalisasi, yang menunjukkan bagaimana mendapatkan amplitudo. Dalam hal ini amplitudo tidak dapat ditentukan dari persamaan differensialnya. Sebuah fungsi gelombang yang tetapan pengalinya ditentukan dari persamaan (2.72) disebut ternormalisasikan. Hanya fungsi gelombang yang ternormalisasi secara tepat, yang dapat digunakan untuk melakukan semua perhitungan yang memiliki makna fisika. Jika normalisasinya sudah dilakukan secara tepat, maka persamaan (2.71) akan selalu menghasilkan suatu probabilitas yang terletak antara 0 dan 1.

Setiap persamaan Schrodinger yang menghasilkan $|\psi(x)|^2$ bernilai tak hingga, harus dikesampingkan. Karena tidak pernah terdapat probabilitas tak hingga untuk menemukan partikel pada titik

manapun. Maka harus mengesampingkan suatu pemecahan dengan mengembalikan faktor pengalinya sama dengan nol.

2.4 Metode Numerik

Persoalan yang melibatkan model matematika banyak muncul dalam berbagai disiplin ilmu pengetahuan, seperti dalam bidang fisika, kimia, atau pada bidang rekayasa (*engineering*), seperti Teknik Sipil, Teknik Elektro, dan sebagainya. Seringkali model matematika tersebut muncul dalam bentuk tidak ideal atau rumit. Model matematika yang rumit ini adakalanya tidak dapat diselesaikan dengan metode analitik yang sudah umum untuk mendapatkan solusi sejatinya (*exact solution*). Yang dimaksud dengan metode analitik adalah metode penyelesaian model matematika dengan rumus-rumus aljabar yang sudah baku (lazim). Metode analitik ini hanya unggul untuk sejumlah persoalan yang terbatas, yaitu persoalan yang memiliki tafsiran geometri sederhana. Padahal persoalan yang muncul dalam dunia nyata melibatkan bentuk dan proses yang rumit. Akibatnya nilai praktis penyelesaian metode analitik menjadi terbatas. Bila metode analitik tidak dapat lagi diterapkan, maka solusi persoalan sebenarnya masih dapat dicari dengan metode numerik. Metode numerik adalah teknik yang digunakan untuk memformulasikan persoalan matematik sehingga dapat dipecahkan dengan operasi perhitungan/aritmetika biasa.

Perbedaan utama antara metode numerik dengan metode analitik terletak pada dua hal. Pertama, solusi dengan menggunakan metode numerik selalu berbentuk angka. Bandingkan dengan metode analitik yang biasanya menghasilkan solusi dalam bentuk fungsi matematik yang selanjutnya fungsi matematik dapat dievaluasi untuk menghasilkan nilai dalam bentuk angka. Kedua, dengan metode numerik, kita hanya memperoleh solusi yang menghampiri atau mendekati solusi sejati sehingga solusi numerik dinamakan juga solusi hampiran (*approximation*) atau solusi pendekatan, namun solusi hampiran dapat dibuat seteliti yang kita inginkan. Solusi hampiran jelas tidak tepat sama dengan solusi sejati, sehingga ada selisih antara keduanya. Selisih inilah yang disebut dengan galat (*error*) (Luktanto,D., 2001).

Ada beberapa macam metode numerik yang kita kenal diantaranya metode Numerov atau metode Cowling, metode *finite difference* (FD), metode elemen hingga (*finite element methods*, FEM) dan sebagainya. Pada penelitian ini akan menggunakan salah satu metode numerik baru, yang dikembangkan oleh Nurhuda yang disebut metode Filter (*filter method*).

2.4.1 Metode Operator Filter

Pada bagian ini akan dibahas metode numerik baru, yang dikembangkan oleh Nurhuda yang disebut dengan metode operator filter (*filter operator method*). Metode numerik ini melibatkan matriks dengan kebanyakan nol. Salah satu bentuk matriks yang elemen nolnya berpola adalah matriks pita (*banded matrix*). Lebar pita adalah maksimum banyaknya elemen taknol pada baris-baris suatu matriks pita. Matriks pita yang terkecil adalah yang lebar pitanya tiga atau dikenal sebagai tridiagonal matriks.

Ekspansi sembarang fungsi dalam keadaan eigen:

$$\Psi(r) = \sum_n a_n \Phi_n(r) \quad (2.73)$$

Dengan Φ_n memenuhi persamaan eigen

$$H_n \Phi_n = E_n \Phi_n \quad (2.74)$$

Jika didefinisikan Operator Filter

$$\hat{F}(E_n) = \frac{1}{(H - E_n)} \quad (2.75)$$

maka

$$\begin{aligned} \hat{F}(E_n)\psi(r) &= \frac{1}{(H - E_n)} \sum a_k \Phi_k \\ &= \sum \frac{a_k \Phi_k}{(E_k - E_n)} \\ &= a_k \Phi_k \delta_{kn} \end{aligned} \quad (2.76)$$

Dengan $\begin{cases} \delta_{kn} = 1 & \text{bila } k = n \\ \delta_{kn} = 0 & \text{bila } k \neq n \end{cases}$

Karena fungsi gelombang tidak normalisasi sehingga perlu dilakukan normalisasi, dengan persamaannya yaitu;

$$\Phi_k^N = \frac{\Phi_k}{\langle \Phi_k | \Phi_k \rangle} \tag{2.77}$$

Selanjutnya, dengan mensubstitusikan persamaan (2.77) ke persamaan (2.76) dengan $k = n$ maka persamaan (2.76) menjadi

$$\frac{1}{(H-E_n)} \psi(r) = a_k \Phi_k \tag{2.78}$$

Dengan melakukan perkalian silang maka persamaan (2.78) menjadi:

$$(H-E_n) \Phi_k = \psi_n(r) \tag{2.79}$$

Atau

$$\left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V - E_n\right) \Phi_n = \psi_n(r) \tag{2.80}$$

Persamaan (2.80) adalah persamaan Schrodinger tak tergantung waktu. Dengan menerapkan solusi numerik persamaan Schrodinger maka didapatkan bentuk lain dari persamaan (2.80) yaitu sistem matrik tridiagonal berikut

$$\begin{pmatrix} (d_1-E) & -U_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -U_2 & (d_2-E) & -U_3 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -U_3 & (d_2-E) & -U_4 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & -U_{N-1} & (d_{N-1}-E) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \vdots \\ \Phi_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} \tag{2.81}$$

Metode komputasi numerik untuk penyelesaian sistem persamaan linear dapat dibagi dalam dua jenis, langsung dan iterasi (*iterative*). Metode langsung adalah metode dengan tidak adanya kesalahan pembulatan atau lainnya, akan memberikan penyelesaian yang tepat dalam jumlah operasi aritmetika elementer yang terbatas banyaknya. Metode dasar yang digunakan adalah eliminasi Gauss. Metode iterasi adalah dimulai dengan pendekatan permulaan menggunakan algoritma yang sesuai, untuk mendapatkan hasil pendekatan yang lebih baik. Metode iterasi bervariasi dalam algoritma dan kecepatan konvergensi. Kelebihan metode iterasi adalah kesederhanaan dan keseragamannya dari operasi yang dilakukan.

Beberapa metode di dalam menyelesaikan persamaan linear dengan pendekatan matriks yaitu Secant, Gauss Seidel dan lainnya tergantung dari korelasi elemen matriks tridiagonal. Di fisika sering dijumpai kasus penyelesaian nilai eigen dan fungsi eigen dari suatu fungsi keadaan. Metode yang efisien untuk menyelesaikan sistem persamaan linear dengan bentuk matriks tridiagonal adalah *Lower Upper Decomposition*.

2.5 Sistem Tridiagonal Matriks

Pada sistem tridiagonal mayoritas elemen matriksnya adalah nol. Komputasi dengan komputer dapat menghemat banyak ruang memori dengan hanya menyimpan elemen yang ada di diagonal mayor dan dua sub diagonal lainnya. Untuk sistem tridiagonal, digunakan tiga vektor a , b dan c untuk menyimpan nilai elemen yang bukan nol sepanjang diagonal mayor dan subdiagonalnya

$$\begin{pmatrix} d_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ a_2 & d_2 & c_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & d_3 & c_3 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{N-1} & d_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{N-1} & d_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_{N-1} \\ b_N \end{pmatrix} \quad (2.82)$$

Pemecahan sistem tridiagonal matriks ini menggunakan beberapa metode salah satunya adalah metode *Lower Upper Decomposition* (LU Dekomposisi).

2.5.1 Metode *Lower Upper Decomposition* (LU Dekomposisi)

Pada metode LU *Decomposition* matriks A didekomposisi menjadi LU, yaitu matriks segitiga bawah dan segitiga atas. Setelah didekomposisi (2.81) menjadi:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \alpha_2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_3 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \alpha_N & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta_1 & c_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \delta_2 & c_2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \delta_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \delta_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} \quad (2.83)$$

L U x b

Setelah perkalian matriks persamaan (2.83) menjadi

$$\begin{pmatrix} \delta_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_2 \delta_1 & \alpha_2 c_1 + \delta_2 & c_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_3 \delta_2 & \alpha_3 c_2 + \delta_3 & c_3 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \alpha_{N-1} \delta_{N-2} & \alpha_{N-1} c_{N-2} + \delta_{N-1} & c_{N-1} & \delta_N \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \alpha_N \delta_{N-1} & \alpha_N c_{N-1} + \delta_N & \delta_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_{N-1} \\ b_N \end{pmatrix} \quad (2.84)$$

Inti dari algoritma ini adalah mengubah elemen-elemen pada vektor a, d dan c dengan vektor α, δ dan c yang merupakan elemen-elemen dari L dan U. Jika dibandingkan persamaan (2.84) dengan (2.82) maka tampak bahwa:

$$\begin{aligned}
 \delta_1 = d_1 & \longrightarrow \alpha_2 \delta_1 = a_2 \longrightarrow \alpha_2 = a_2 / \delta_1 \\
 \alpha_3 \delta_2 = a_3 & \longrightarrow \alpha_3 = a_3 / \delta_2 \\
 \vdots & \\
 \alpha_N \delta_{N-1} = a_N & \longrightarrow \alpha_N = a_N / \delta_{N-1} \\
 \alpha_2 c_1 + \delta_2 = d_2 & \longrightarrow \delta_2 = d_2 - \alpha_2 c_1 \\
 \alpha_3 c_2 + \delta_3 = d_3 & \longrightarrow \delta_3 = d_3 - \alpha_3 c_2
 \end{aligned}$$

⋮

$$\alpha_N \delta_{N-1} + \delta_N = d_N \longrightarrow \delta_N = d_N - \alpha_N \delta_{N-1}$$

Langkah-langkah di atas dapat dengan mudah diprogram. Sebagai ilustrasi, 3 langkah pertama program tersebut dapat dituliskan sebagai berikut:

$$\begin{aligned} d(1) &= d(1) \\ a(2) &= a(2)/d(1) \\ a(3) &= a(3)/d(2) \\ d(2) &= d(2) - a(2)*c(1) \\ d(3) &= a(3) - a(3)*c(2) \end{aligned}$$

Setelah elemen-elemen pada vector a dan d dengan α dan δ , persamaan (2.81) dapat diproses lebih lanjut. Jika Ux disebut juga g , maka persamaan (2.81) dapat dituliskan

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \alpha_2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_3 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \alpha & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \\ \vdots \\ g_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix} \quad (2.85)$$

Dari (2.85) dapat diperoleh:

$$\begin{aligned} g_1 &= b_1 \\ \alpha_2 g_1 + g_2 &= b_2 \longrightarrow g_2 = b_2 - \alpha_2 g_1 \\ \alpha_3 g_2 + g_3 &= b_3 \longrightarrow g_3 = b_3 - \alpha_3 g_2 \\ &\vdots \\ &\vdots \end{aligned}$$

$$\alpha_N g_{N-1} + g_N = b_N \longrightarrow g_N = b_N - \alpha_N g_{N-1}$$

Dalam proses komputasi g disimpan dalam vector b , yaitu elemen-elemen diganti dengan yang baru. Tiga langkah pertama dalam program tertulis sebagai berikut:

$$\begin{aligned} b(1) &= b(1) \\ b(2) &= b(2) - a(2)*b(1) \\ b(3) &= b(3) - a(3)*b(2) \end{aligned}$$

karena g adalah Ux maka:

$$\begin{pmatrix} \delta_1 & c_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \delta_2 & c_2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \delta_{N-1} & c_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \delta_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_N \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \\ \vdots \\ g_N \\ g \end{pmatrix} \quad (2.86)$$

L x g

$$x_N = g_N / \delta_N$$

$$\delta_{N-1}x_{N-1} + c_{N-1}x_N = g_{N-1} \longrightarrow x_{N-1} = (g_{N-1} - c_{N-1}x_N) / \delta_{N-1}$$

$$\delta_{N-2}x_{N-2} + c_{N-2}x_{N-1} = g_{N-2} \longrightarrow x_{N-2} = (g_{N-2} - c_{N-2}x_{N-1}) / \delta_{N-2}$$

$$\delta_1x_1 + c_1x_2 = g_1 \longrightarrow x_1 = (g_1 - c_1x_2) / \delta_1$$

Dalam komputasi, tiga langkah pertama berbentuk:

$$x(N) = b(N) / d(N)$$

$$x(N-1) = [b(N-1) - c(N-1)*x(N)] / d(N-1)$$

$$x(N-1) = [b(N-2) - c(N-2)*x(N-1)] / d(N-2)$$

Elemen dari matriks A kebanyakan nol maka hanya digunakan tiga vektor dengan ukuran $1 \times N$ untuk menyimpan elemen bukan nol matriks A (Sembiring. K, 2011).

2.6 Solusi Numerik Persamaan Schrodinger

Persamaan Schrodinger dapat juga ditulis sebagai berikut:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V \psi(x) - E \psi(x) = 0 \quad (2.87)$$

atau

$$(H-E)\psi(x) = 0 \quad (2.88)$$

Dalam sistem atomik nilai dari \hbar dan m bernilai 1, sehingga persamaan (2.88) menjadi:

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V \psi(x) - E \psi(x) = 0 \quad (2.89)$$

Langkah-langkah yang digunakan untuk memecahkan persamaan Schrodinger ke dalam bentuk numerik yaitu aproksimasi beda hingga turunan pertama adalah:

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi(x_i) = \frac{\psi(x_{i+1}) - \psi(x_{i-1}))}{h} \quad (2.90)$$

dan turunan keduanya yaitu:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x_i) = \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1}))}{h^2} \quad (2.91)$$

subtitusikan persamaan (2.91) ke persamaan (2.89) maka didapatkan:

$$-\frac{1}{2} \left[\frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1}))}{h^2} \right] + V\psi(x) - E\psi(x) = 0 \quad (2.92)$$

atau

$$-\frac{1}{2h^2} [\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1}))] + V\psi(x) - E\psi(x) = 0 \quad (2.93)$$

$$\text{Bila dimisalkan } d_i = \frac{1}{h^2} + V_j \text{ dan } U_i = -\frac{1}{2h^2}$$

Maka persamaan (2.93) menjadi:

$$[-U_i\psi(x_{i-1}) + d_i\psi(x_i) - U_{i+1}\psi(x_{i+1}))] - E\psi(x_i) = 0 \quad (2.94)$$

Dapat juga ditulis:

$$[-U_i\psi_{i-1} + d_i\psi_i - U_{i+1}\psi_{i+1}] - E\psi_i = 0 \quad (2.95)$$

Persamaan (2.93) diterapkan pada setiap titik diskritisasi, yaitu $i=1, 2, \dots, N-1$. Sehingga terbentuk sistem persamaan linear dengan bentuk tri-diagonal yang dapat dipecahkan dengan metode Lower-Upper Dekomposisi.

Dari persamaan (2.40) untuk $0 \leq i \leq N$ diperoleh:

$$i=1; -U_0\psi_0 + d_1\psi_1 - U_2\psi_2 - E\psi_1 = 0$$

$$i=2; -U_2\psi_1 + d_2\psi_2 - U_3\psi_3 - E\psi_2 = 0$$

$$i=3; -U_3\psi_2 + d_3\psi_3 - U_4\psi_4 - E\psi_3 = 0$$

...

$$i = N-1; -U_{N-1}\psi_{N-2} + d_{N-1}\psi_{N-1} - U_N\psi_N - E\psi_{N-1} = 0$$

Pada kondisi dasar $U_0\psi_0 = U_N\psi_N = 0$

Dari $i=1$ hingga $i=N-1$ persamaan linear dapat dinyatakan dalam bentuk matriks dimensi $N \times N$ sebagai berikut:

$$\begin{pmatrix} (d_1-E) & -U_2 & 0 & 0 & \dots \\ -U_2 & (d_2-E) & -U_3 & 0 & \dots \\ 0 & -U_3 & (d_2-E) & -U_4 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ & & & -U_{N-1} & (d_{N-1}-E) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.96)$$

BAB III METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Tempat dan Waktu Penelitian

Penelitian ini telah dilakukan di ruang baca Jurusan Fisika Universitas Brawijaya dan di Laboratorium Fisika Komputasi Universitas Brawijaya. Penelitian ini mulai dilakukan pada bulan September 2011- Maret 2012.

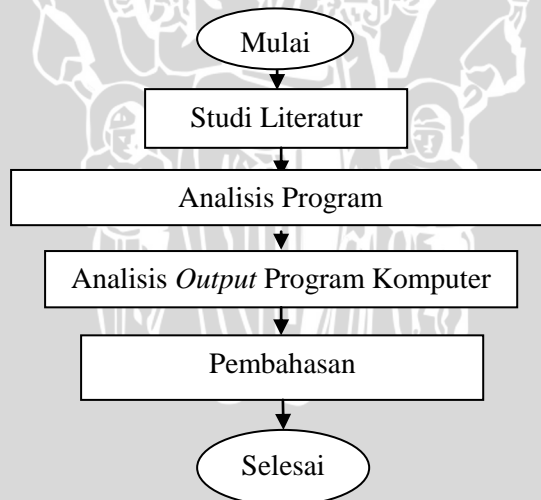
3.2 Peralatan Penelitian

Peralatan yang digunakan dalam penelitian ini adalah Notebook intel atom dual core 1.50 GHz,CPU N550, sistem operasi yang digunakan adalah WINDOWS, dilengkapi dengan bahasa pemrograman tingkat tinggi Fortran 77.

3.3 Metode Penelitian

3.3.1 Alur Penelitian

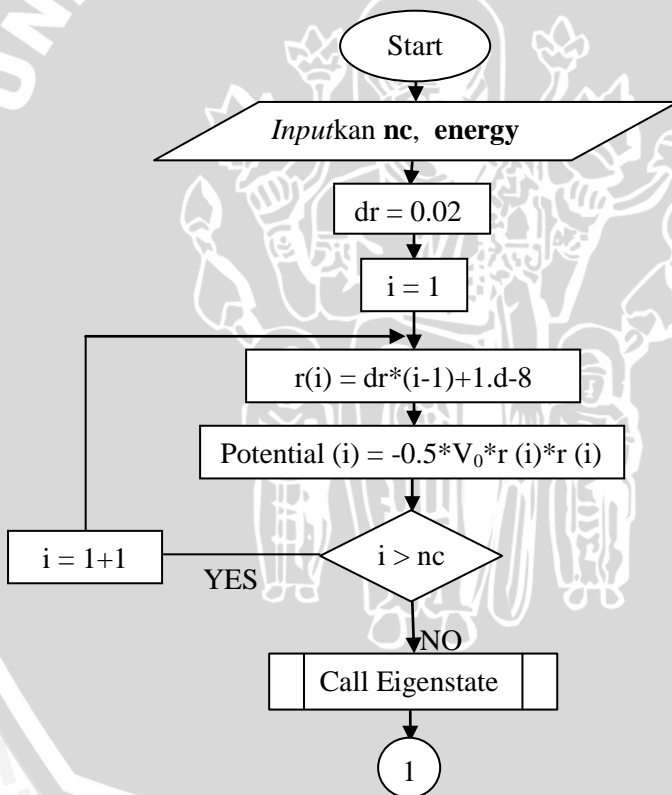
Berikut ini adalah diagram penelitian yang dilakukan:

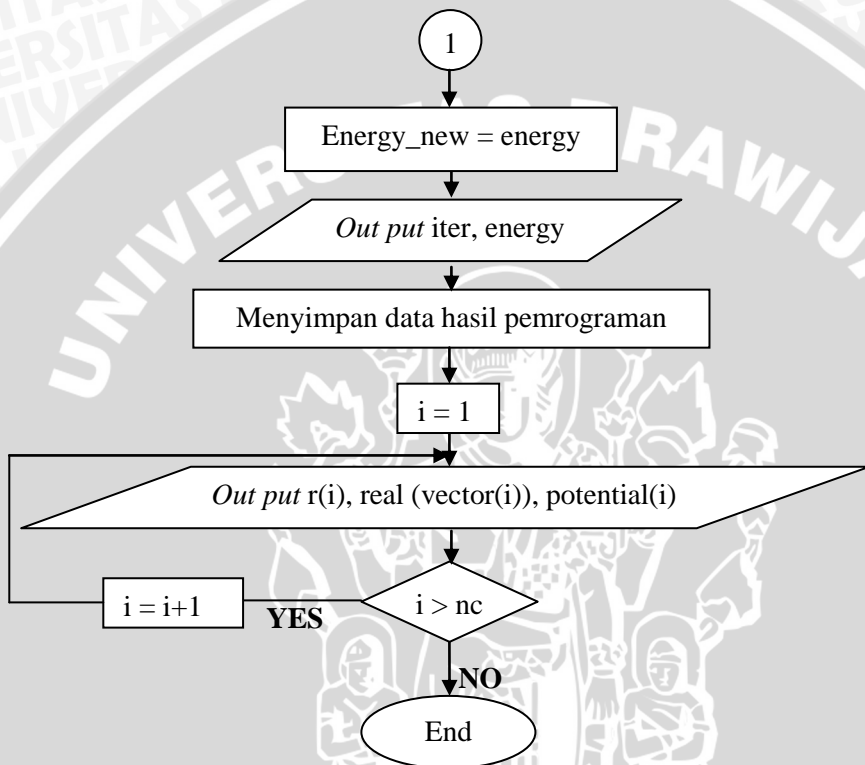


Gambar 3.1 Diagram alir penelitian

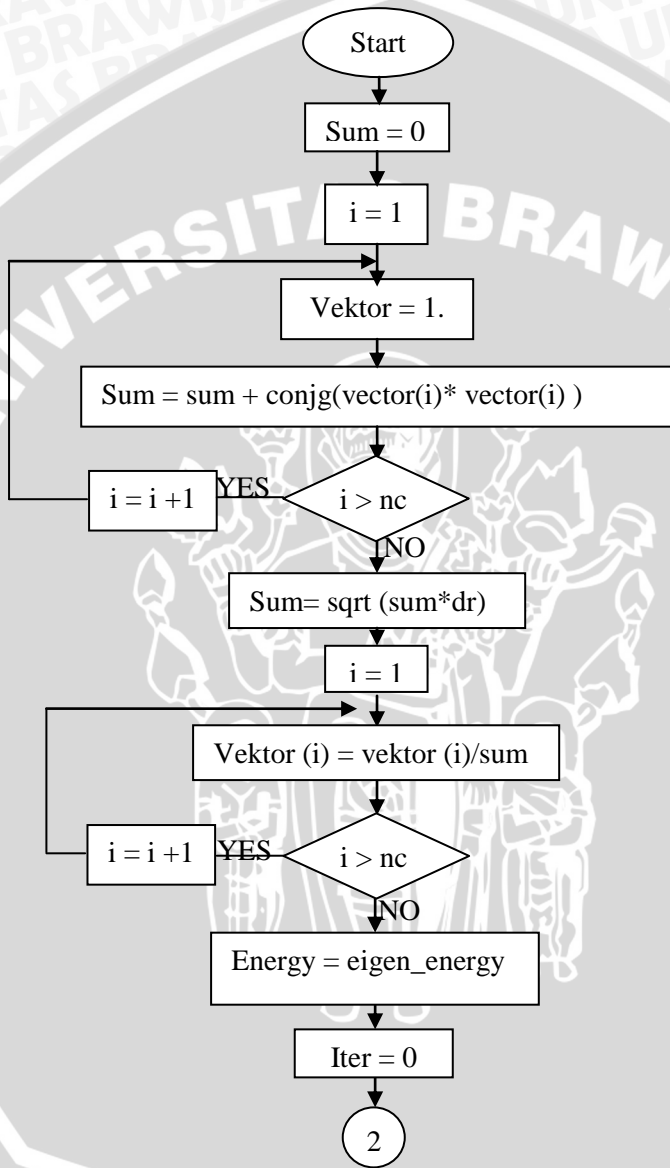
3.3.3 Flowchart Pemrograman

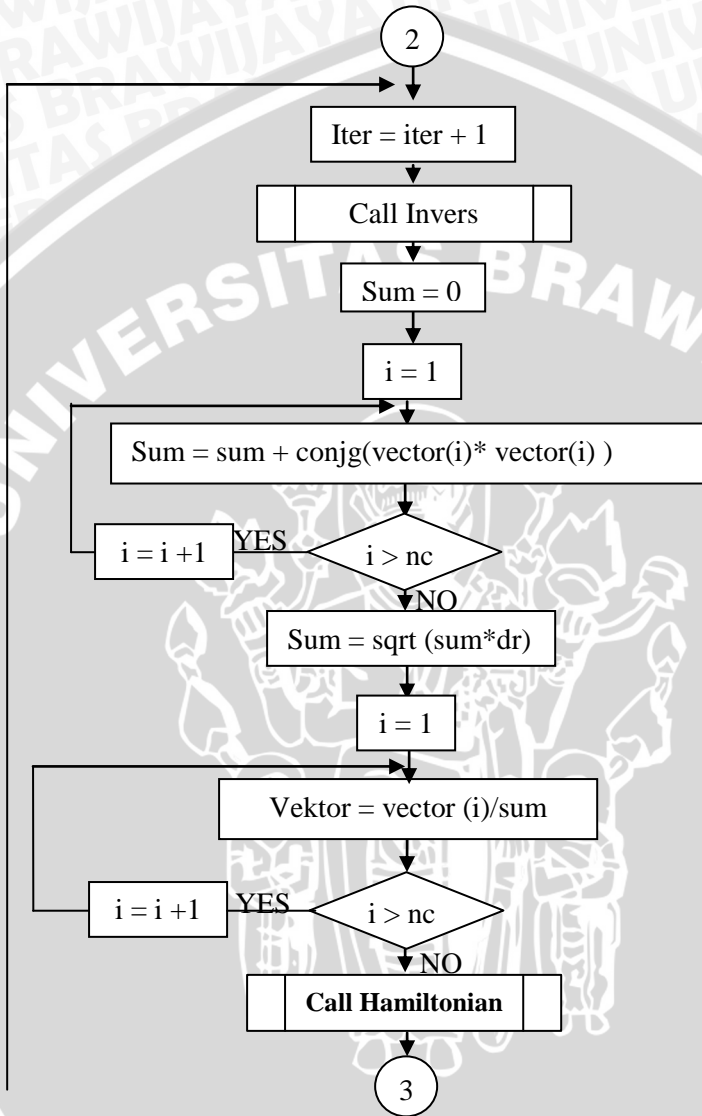
Pengkajian fungsi gelombang pada penelitian ini menggunakan metode operator Filter. Mula-mula didefinisikan bentuk Persamaan Schrodinger untuk potensial atom hidrogen dan potensial osilator harmonik. Kemudian persamaan tersebut diubah ke dalam bentuk numerik. Setelah didapatkan bentuk numeriknya, selanjutnya penyelesaian persamaan Schrodinger untuk potensial osilator harmonik dan potensial atom hidrogen diselesaikan dengan menggunakan bahasa pemrograman fortran. Dengan mengacu pada hal itu, maka diagram alir (*flow chart*) program yang dibangun pada penelitian ini ditunjukkan pada Gambar 3.2.

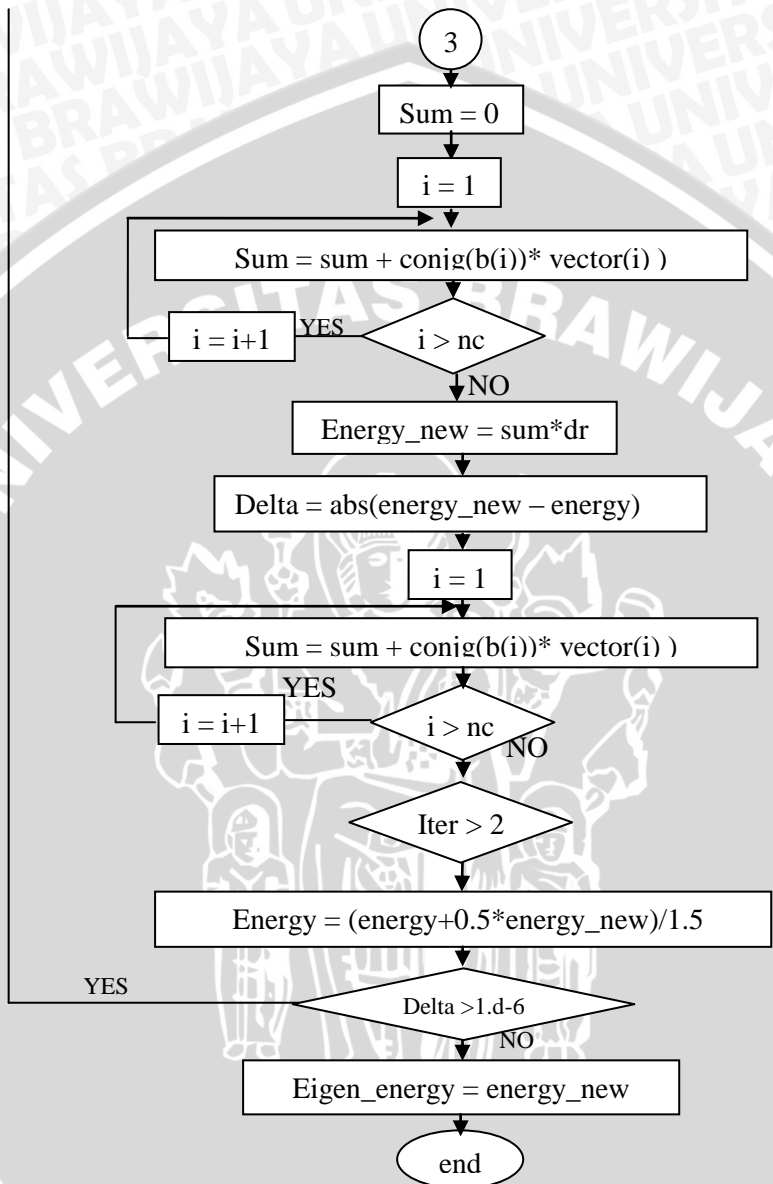




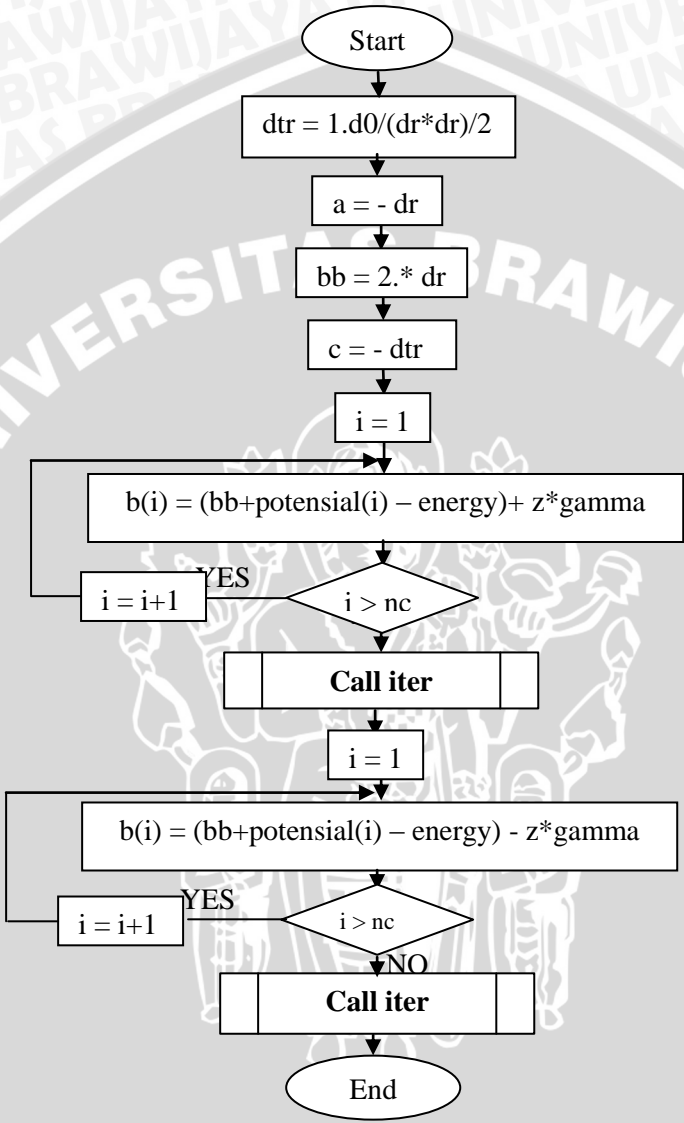
Gambar 3.2 Diagram alir 'program utama'



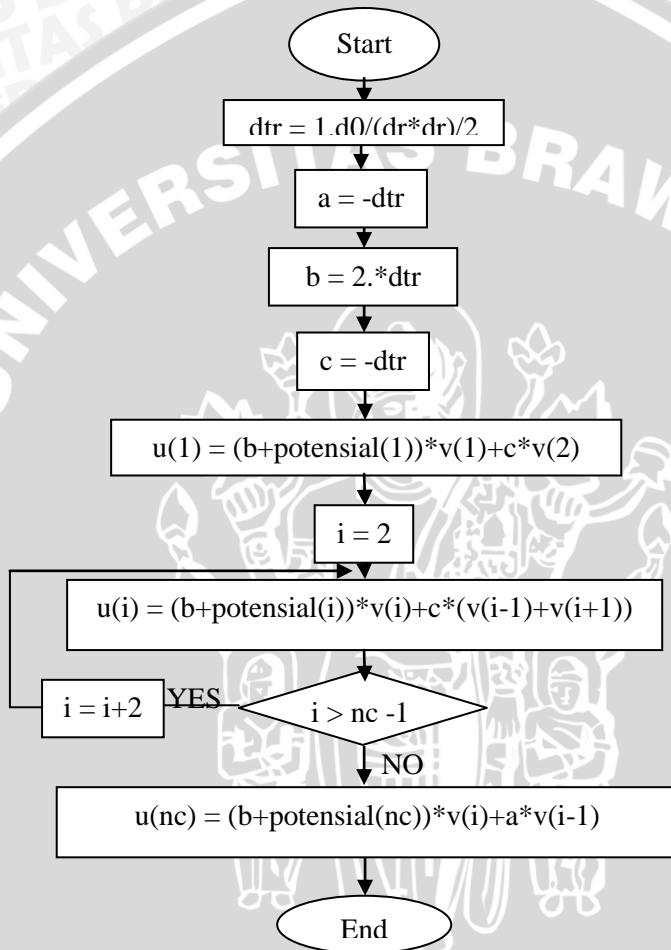




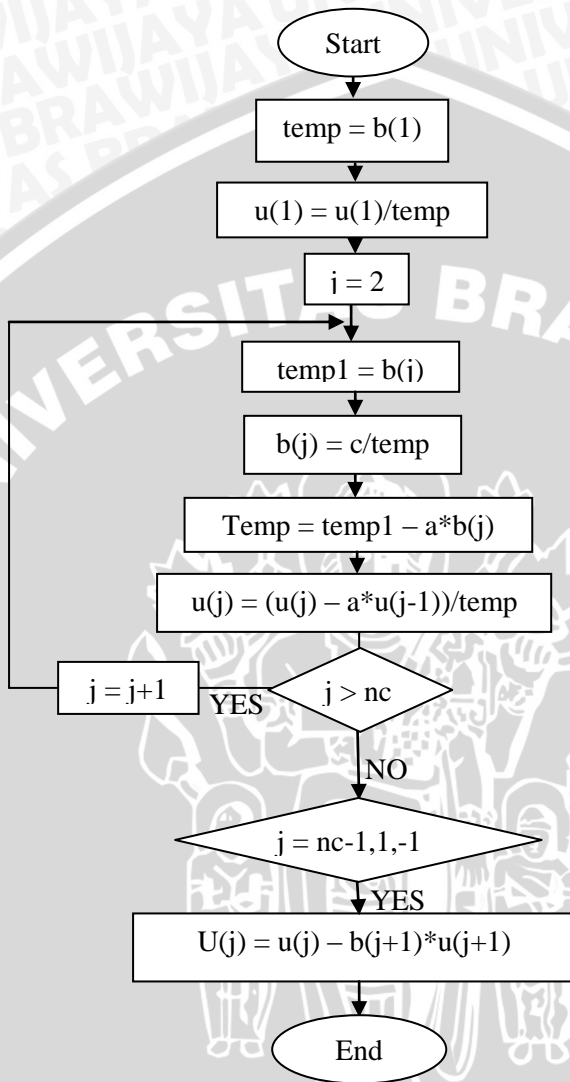
Gambar 3.3 Diagram alir subprogram 'eigenstate'



Gambar 3.4 Diagram alir subprogram 'invers'



Gambar 3.5 Diagram alir subprogram 'hamiltonian'



Gambar 3.6 Diagram alir subprogram 'iter'

UNIVERSITAS BRAWIJAYA



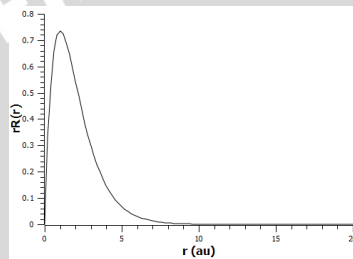
(Halaman ini Sengaja dikosongkan)

BAB IV

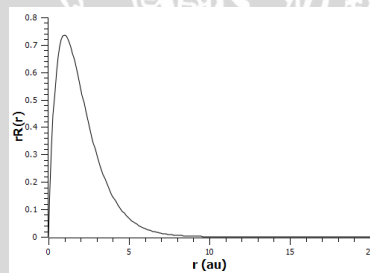
HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1 Fungsi Gelombang dan Energi Atom Hidrogenik

Berikut ini adalah grafik fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk berbagai keadaan kuantum dengan menggunakan metode operator filter dan metode analitik.

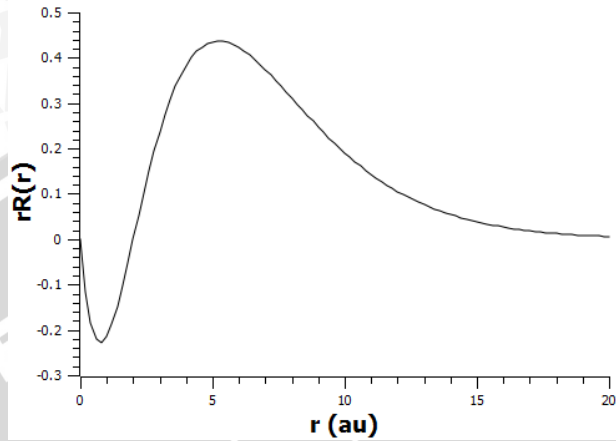


(a)

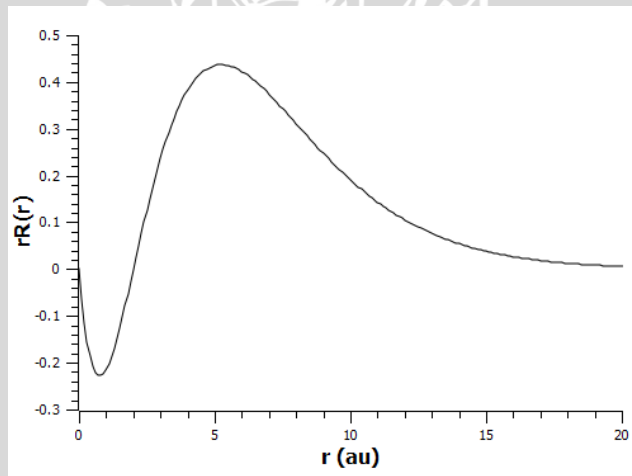


(b)

Gambar 4.1 (a) Fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk keadaan $n = 1$, $l = 0$ dengan menggunakan metode analitik (b) gambar yang sama tetapi diperoleh dengan menggunakan metode operator filter.

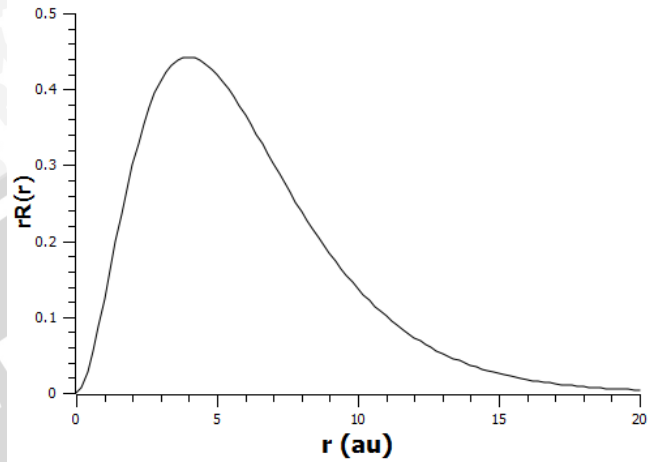


(a)

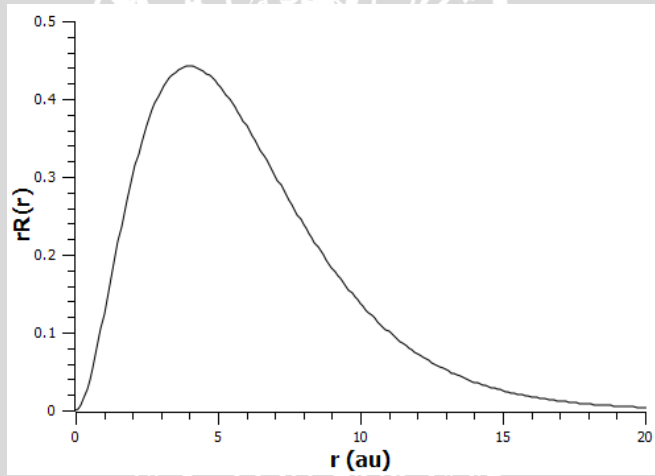


(b)

Gambar 4.2 (a) Fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk keadaan $n= 2, l = 0$ dengan menggunakan metode analitik (b) Gambar yang sama tetapi diperoleh dengan menggunakan metode operator filter.

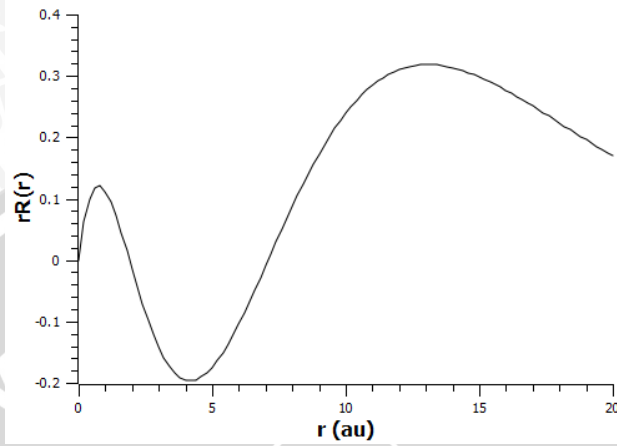


(a)

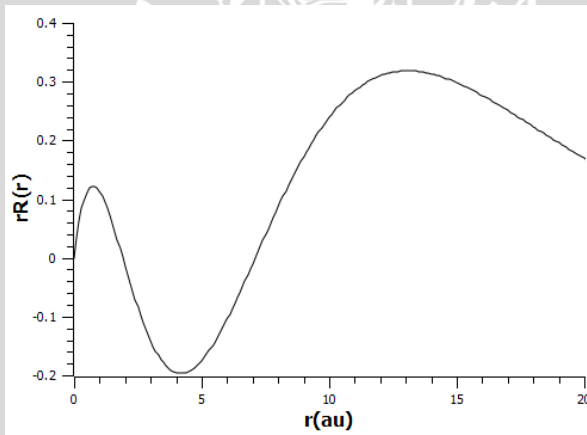


(b)

Gambar 4.3 (a) Fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk keadaan $n=2, l=1$ dengan menggunakan metode analitik (b) Gambar yang sama tetapi diperoleh dengan menggunakan metode operator filter.



(a)



(b)

Gambar 4.4 (a) Fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk keadaan $n = 3$, $l = 0$ dengan menggunakan metode analitik (b) Gambar yang sama tetapi diperoleh dengan menggunakan metode operator filter.

Berdasarkan hasil dari gambar tersebut terlihat bahwa hasil yang diperoleh untuk fungsi gelombang radial atom hidrogen pada berbagai keadaan kuantum dengan menggunakan numerik metode operator filter dan metode analitik adalah sama. Dari hasil ini dapat disimpulkan bahwa hasil dari penelitian sudah sesuai dengan hasil analitiknya.

Selain itu dari hasil program komputasi yang telah dibuat diketahui bahwa energi untuk tiga tingkat pertama pada atom hidrogenik (dalam sistem atomik) adalah

$$E_1 = -0.498 \text{ a.u.}, E_2 = -0.125 \text{ a.u.}, \text{ dan } E_3 = -0.055 \text{ a.u.}$$

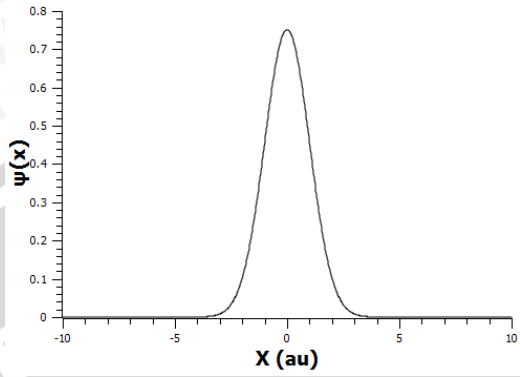
Sebagai perbandingan, analitik menghasilkan nilai sebagai berikut

$$E_1 = -0.500 \text{ a.u.}, E_2 = -0.125 \text{ a.u.}, \text{ dan } E_3 = -0.055 \text{ a.u.}$$

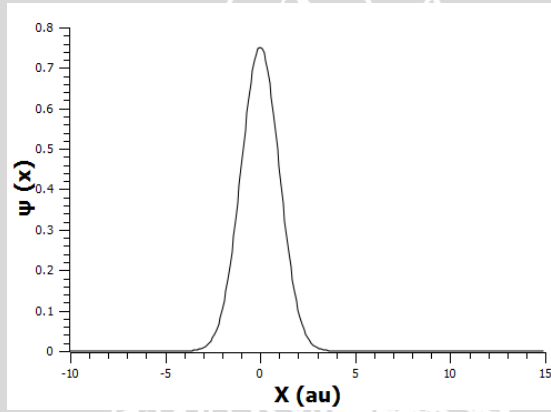
Jika dibandingkan hasil numerik dengan hasil analitik maka masing-masing memberikan selisih terhadap harga perhitungan analitik sebesar 0.248%, 0.0% dan 0.0%. Dari hasil ini dapat disimpulkan bahwa energi yang diperoleh dengan numerik metode operator filter dan metode analitik sangat berdekatan.

4.2 Fungsi Gelombang dan Energi Osilator Harmonik

Fungsi gelombang osilator harmonik dengan metode analitik dan metode operator filter untuk masing-masing keadaan dapat diperlihatkan oleh gambar-gambar berikut ini

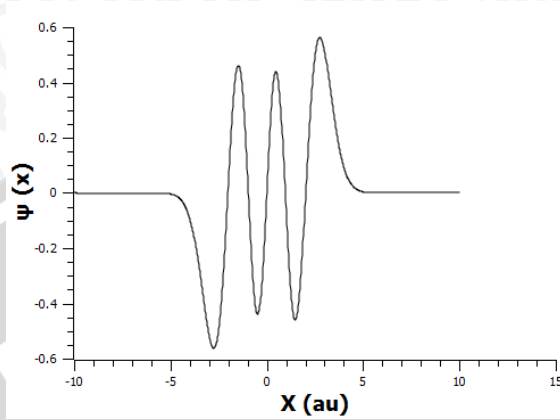


(a)

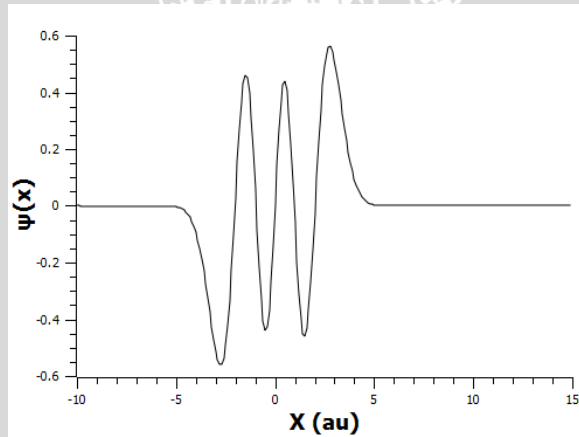


(b)

Gambar 4.5 (a) fungsi gelombang osilator harmonik dengan metode operator filter (b) metode analitik untuk $n = 0$

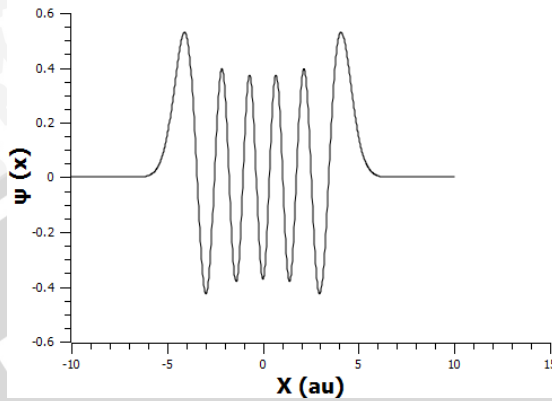


(a)

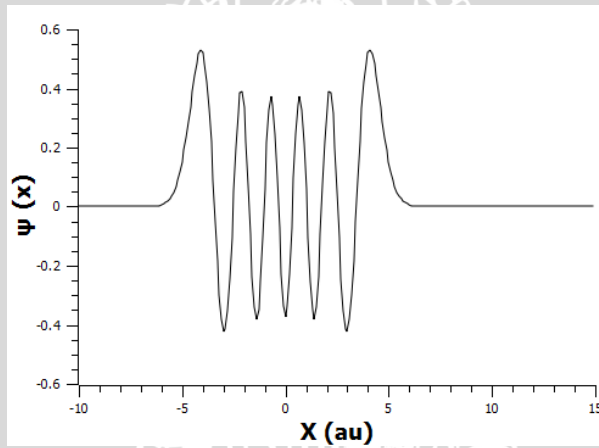


(b)

Gambar 4.6 (a) fungsi gelombang osilator harmonik dengan metode operator filter (b) metode analitik untuk $n = 5$

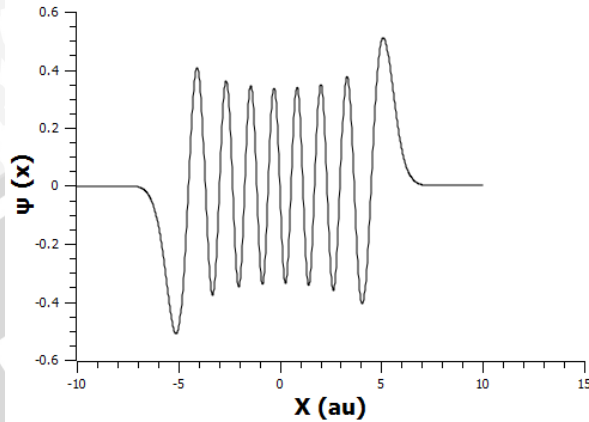


(a)

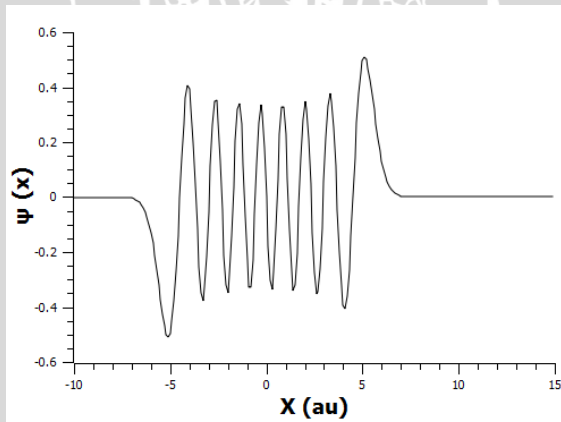


(b)

Gambar 4.7 (a) fungsi gelombang osilator harmonik dengan metode operator filter (b) metode analitik untuk $n = 10$



(a)



(b)

Gambar 4.8 (a) fungsi gelombang osilator harmonik dengan metode operator filter (b) metode analitik untuk $n = 15$

Dari hasil penelitian fungsi gelombang yang didapatkan dengan menggunakan numerik metode operator filter dan hasil analitik untuk

masing-masing keadaan kuantum adalah sama. Pada gambar 4.5 untuk keadaan $n = 0$ hasil fungsi gelombang secara numerik sama (nyaris sama) dengan hasil analitik. Dapat dilihat juga bentuk fungsi gelombang untuk keadaan $n = 0$, seperti lonceng atau sering disebut Gaussian. Secara fisis fungsi gelombang tersebut memiliki arti pada keadaan *ground state* ($n = 0$) maka energi yang dimiliki oleh partikel pada sumur potensial dapat direpresentasikan oleh fungsi gelombang yang ternormalisasi.

Untuk hasil fungsi gelombang pada keadaan n yang lain, hasil secara numerik sama dengan hasil analitik. Untuk keadaan $n = 5$, seperti yang diperlihatkan pada gambar 4.6 menunjukkan bahwa hasil metode operator sama dengan hasil analitik. Dari hasil ini dapat disimpulkan bahwa hasil penelitian sesuai dengan hasil analitiknya.

Pada gambar 4.8 terlihat bahwa fungsi gelombang untuk keadaan $n = 15$ memiliki lebih banyak puncak dibandingkan dengan fungsi gelombang pada keadaan $n = 10$. Berdasarkan hasil tersebut dapat dikatakan bahwa semakin banyak n maka semakin banyak puncaknya. Dan semakin besar nilai x maka nilai dari fungsi gelombang pada keadaan *ground state* semakin mendekati nilai 0.

Nilai energi pada keadaan $n = 0$, $n = 5$, $n = 10$, dan $n = 15$ dengan perhitungan numerik metode operator filter dalam sistem atomik masing-masing sebesar

$$E_0 = 0.499 \text{ a.u.}, E_5 = 5.499 \text{ a.u.}, E_{10} = 10.497 \text{ a.u.}, \text{ dan } E_{15} = 15.499 \text{ a.u.}$$

Dari perhitungan analitik telah diketahui nilainya adalah

$$E_0 = 0.500 \text{ a.u.}, E_5 = 5.500 \text{ a.u.}, E_{10} = 10.500 \text{ a.u.}, \text{ dan } E_{15} = 15.500 \text{ a.u.}$$

Jika dibandingkan hasil numerik dengan hasil analitik maka masing-masing memberikan selisih terhadap harga perhitungan analitik sebesar 0.200%, 0.020%, 0.028%, dan 0.006%. Dari hasil ini

dapat disimpulkan bahwa energi yang diperoleh dengan numerik metode operator filter dan metode analitik hasilnya sama.

Berdasarkan dari nilai-nilai tersebut, hasil pendekatan numerik metode operator filter sangat baik. Metode numerik ini juga memiliki kelebihan diantaranya adalah dapat digunakan untuk menyelesaikan persamaan dalam orde tingkat tinggi secara efektif, efisien, dan dengan hasil yang sangat mendekati nilai eksaknya. Selain itu juga jumlah perulangan yang dilakukan (iterasi) tidak terlalu banyak.



UNIVERSITAS BRAWIJAYA

(Halaman ini sengaja dikosongkan)



BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

Hasil fungsi gelombang dari suatu partikel pada sistem yang berada di bawah potensial osilator harmonik dan potensial atom hidrogenik menggunakan pendekatan metode operator filter ternyata sama dengan hasil analitiknya.

Hasil program komputasi yang telah dibuat, perhitungan numerik dengan metode operator filter untuk atom hidrogen, menunjukkan bahwa energi untuk tiga tingkat energi pertama dalam sistem atomik adalah

$$E_1 = -0.498 \text{ a.u.}, E_2 = -0.125 \text{ a.u.}, \text{ dan } E_3 = -0.055 \text{ a.u.}$$

dan selisih terhadap harga perhitungan analitik sebesar 0.248%, 0.08%, dan 0.02777%. Sedangkan untuk osilator harmonik nilai energi pada keadaan $n = 0$, $n = 5$, $n = 10$, dan $n = 15$ dengan perhitungan numerik metode operator filter dalam sistem atomik masing-masing sebesar

$$E_0 = 0.499 \text{ a.u.}, E_5 = 5.499 \text{ a.u.}, E_{10} = 10.497 \text{ a.u.}, \text{ dan } E_{15} = 15.499 \text{ a.u.}$$

Dan selisih terhadap harga perhitungan analitik sebesar 0.0025%, 0.0138%, 0.0263% ,dan 0.06015%.

5.2. Saran

Melihat dari diskusi yang telah dilakukan, maka perlu dilakukan penelitian lebih lanjut terutama dengan mencoba menguji fungsi gelombang dengan menggunakan kasus potensial yang lain seperti sumur potensial, potensial Lenard-Jones dan sebagainya. Demikian untuk mendapatkan validasi dan kecepatan komputasi metode

numerik operator filter perlu dilakukan perbandingan dengan metode numerik yang lain seperti metode numerov.

UNIVERSITAS BRAWIJAYA



DAFTAR PUSTAKA

- Aditya. 2009. *Pengkajian Osilator Harmonik Secara Kuantum dengan Simulasi Menggunakan Bahasa Pemrograman Delphi 7.0*. <http://www.digilib.uns.ac.id>, hal. 4-25. Tanggal akses: 8 Mei 2012.
- Ali.Matriks dan Solusi Persamaan Linear. <http://www.alifis.files.wordpress.com>, tanggal akses: 1 maret 2012.
- Beiser,A. 1986. *Konsep Fisika Modern*. Erlangga: Jakarta Pusat.
- Duffy, M., 2003, *Simulated Evolution Of The Time-Dependent Schrodinger Equation Through Numerical Methods*. <http://www.phys.ufl.edu>, hal.1, tanggal akses: 21 April 2012.
- Dunn, K. S., 2002, *Variational Method Applied to the Harmonic Oscillator*. <http://www.chemeddl.org>, hal.1-23, tanggal akses: 10 April 2012.
- Gasiorowicz, S., 1973. *quantum physics*. John Wiley and Sons. New York, USA, hal.33.
- GriffithS, David J. 1995. *Introduction to Quantum Mechanics*. Prentice Hall, Inc. United State of Amerika.
- <http://pdmmpa.ugm.ac.id/ojs/index.php/bimipa/article/viewFile/66/06>., tanggal akses: 3 Maret 2012
- Jeschke, G., 2003, *Many Electron Atoms*, <http://www.mpip-mainz.mpg.de>, hal.1 tanggal akses: 27 Maret 2012.
- Khrebtukov, D. B., 1992. *The Exact Numerical Solution Of a Schrodinger Equation With Two-Coulomb Center Plus*

Potensial. <http://www.iop.org>, hal.1, tanggal akses: 22 Maret 2012.

Lambert, N., 2001., *Numerical Solution Of Schrodinger Equation*, TB2. <http://brande.phy.umist.ac.uk>, hal.1, tanggal akses: 22 Maret 2012.

Lu,T., Cai, W. dan Zhang, P., 2004. *Conservative Local Discontinuous Galerkin Methods For Time-Dependent Schrodinger Equation*. <http://www.math.pku.edu.cn>, hal.1, tanggal akses: 22 Maret 2012.

Luktanto,D. 2001. *Bahan Kuliah Metoda Numerik Fakultas Teknik Sipil FT UGM*, Yogyakarta.

Riza,M., Suciyati,S.W.,dan Roniyus,MS. 2009. *Penyelesaian Numuerik Persamaan Schrodinger untuk Bagian Sudut Theta Pada Atom Hidrogen*. <http://www.lemlit.unila.ac.id>, hal.1-14, tanggal akses: 3 Maret 2012.

Schmid, E. W., Spitz, G. dan Losh, W., 1990. *Theoritical Physics On The Personal Computer Second Edition*. Spring-Verlag Berlin Heidelberg New York, hal.136 dan 158, tanggal akses: 18 Maret 2012.

Sembirin, Kurnia. 2011. *Solusi Persamaan Schrodinger Pada Partikel Bebas dan Partikel Dalam Kotak Dengan Metode Beda Hingga (Finite Difference Merhods)* <http://www.repository.usu.id>., hal. 2-26, tanggal akses: 15 Mei 2012.

Supardi, Warsono,dan Supahar. 2002. *Kajian Komputasi Kuantisasi Semiklasik Vibrasi Molekuler Sistem Di Bawah Pengaruh*

Potensial Lennard-Jones.<http://staff.uny.ac.id>., hal 1-16,
diakses tanggal: 3 Maret 2012.

Zetli,N., 2001. *Quantum Mechanics: Concepts and Application*. John
Wiley & Sons: New York. 229-237 and 334-347.

UNIVERSITAS BRAWIJAYA



LAMPIRAN

LAMPIRAN 1 LISTING PROGRAM OPERATOR FILTER

```
program test_eigen_function
```

```
  implicit real*8 (a-h,o-z)
```

```
  complex*16 vektor,b
```

```
  parameter (ngrid =30000)
```

```
  dimension vektor(ngrid),b(ngrid),r(ngrid),potential(ngrid)
```

```
  write(*,*)'enter energy '
```

```
  read(*,*)energy
```

```
  nc = 1000
```

```
  dr = 0.1
```

```
  rmin = dr*nc/2.
```

```
  l = 0
```

```
  V0 = 0.18
```

```
  a = 10
```

```
  A1 = 1
```

```
  r0 = 20
```

```
  do i =1,nc
```

```
    r(i) = dr*(i-1)+1.d-8 ! - rmin
```

```
    potential(i) = -1.d0/(r(i)) + l*(l+1)/(2.*r(i)*r(i))
```

```
  c    vp = -0.5*(r(i))**2 +l*(l+1)/(2.*r(i)*r(i))
```

```

end do
call eigenstate(vektor,r,potential,b,dr,nc,ngrid,energy,iter)
energy_new = energy
write(*,'(1x,i6,2g16.8)')iter,energy
open(1,file='wave.dat',status = 'unknown')
do i =1,nc
write(1,*)r(i),real(vektor(i)),potential(i)
end do
end

subroutine eigenstate(vektor,r,potential,b,dr,nc,ngrid,
+ eigen_energy,iter)
implicit real*8 (a-h,o-z)
complex*16 vektor,b
dimension vektor(ngrid),b(ngrid),r(ngrid),potential(ngrid)
c initial guess of wavepacket
sum = 0.
do i =1,nc
vektor(i) = 1. /r(i)*exp(-abs(r(i)))
sum = sum + conjg(vektor(i))*vektor(i)
end do
sum = sqrt(sum*dr)

```

```

do i = 1,nc
    vektor(i) = vektor(i)/sum
end do
energy = eigen_energy
isig = 1
if(eigen_energy.lt.0) isig = -1
iter = 0
1  iter = iter + 1
    call invers(vektor,potential,b,dr,nc,ngrid,energy)
sum = 0.
do i = 1,nc
    sum = sum + conjg(vektor(i))*vektor(i)
end do
sum = sqrt(sum*dr)
do i = 1,nc
    vektor(i) = vektor(i)/sum
end do
call hamilton(b,vektor,potential,dr,nc,ngrid)
sum = 0.
do i = 1,nc
    sum = sum + conjg(b(i))*vektor(i)
end do

```

```

energy_new = sum*dr
delta = abs(energy_new-energy)
if(iter.gt.2) energy= (energy + 0.5*energy_new)/1.5
c  if(iter.gt.3) energy = energy_new
if(delta.gt.1.d-10) goto 1
eigen_energy = energy_new
return
end
subroutine hamilton(u,v,pot,dr,n,ngrid)
implicit real*8(a-h,o-z)
complex*16 u,v
dimension u(ngrid),v(ngrid),pot(ngrid)
dtr = 1.d0/(dr*dr)/2.
a = -dtr
b = 2.*dtr
c = -dtr
u(1)= (b+pot(1))*v(1) + c*v(2)
do i=2,n-1
    u(i) = (b+pot(i))*v(i) + c*(v(i-1)+v(i+1))
end do
u(n) = (b+pot(n))*v(i) + a*v(i-1)
return

```



```

end
subroutine invers(u,pot,b,dr,n,ngrid,energy)
implicit real*8(a-h,o-z)
complex*16 z,u,b
dimension u(ngrid),pot(ngrid),b(ngrid)
data z,gamma/(0.d0,1.d0),1.d-5/
dtr = 1.d0/(dr*dr)/2.
a = -dtr
bb = 2.*dtr
c = -dtr
do i = 1,n
    b(i)= (bb +pot(i)-energy) + z *gamma
end do
call iter(a,b,c,u,n,ngrid)
do i = 1,n
    b(i)= (bb +pot(i) -energy) - z *gamma
end do
call iter(a,b,c,u,n,ngrid)
return
end
subroutine iter(a,b,c,u,n,ngrid)
implicit real*8(a-h,o-z)

```

```

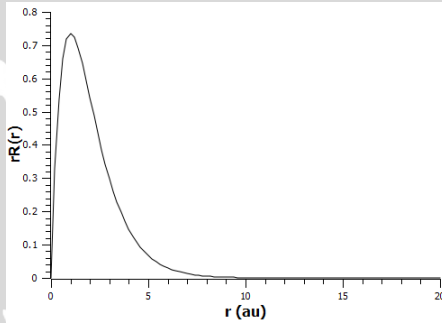
complex*16 b,u,temp,temp1
dimension b(ngrid),u(ngrid)
temp = b(1)
u(1) = u(1)/temp
do 11 j=2,n
    temp1 = b(j)
    b(j) = c/temp
    temp = temp1 -a*b(j)
    u(j) = (u(j) - a*u(j-1))/temp
11 continue
do 12 j=n-1,1,-1
    u(j) = u(j) -b(j+1)*u(j+1)
12 continue
return
end

```

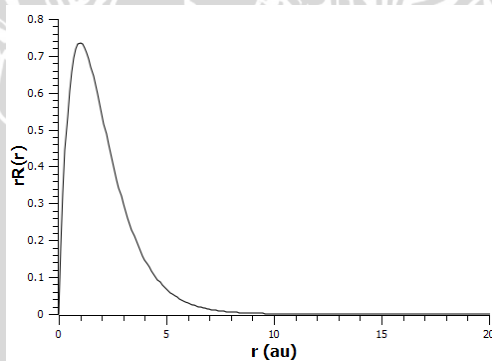


LAMPIRAN 2

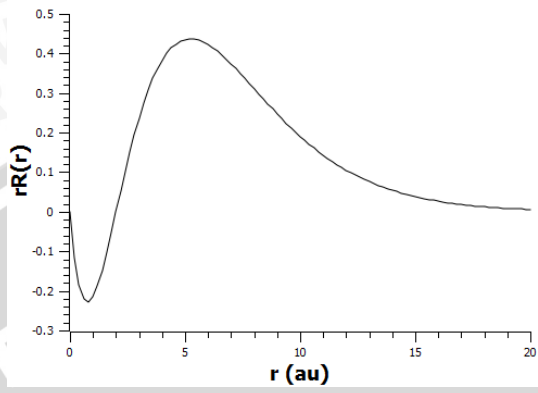
Lampiran 2 Grafik fungsi gelombang radial atom hidrogenik dan potensial osilator harmonik untuk berbagai keadaan kuantum dengan menggunakan metode operator filter dan metode analitik.



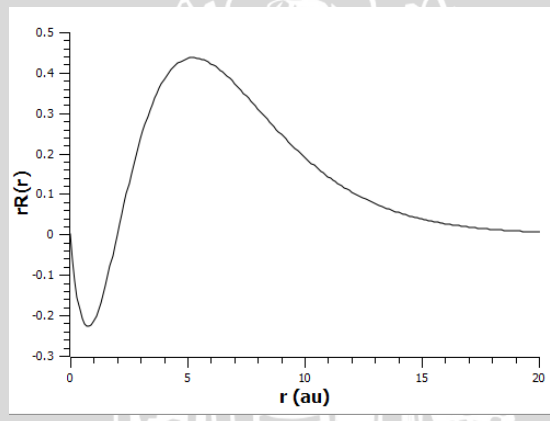
(a)



Gambar L .2.1. (a) Fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk keadaan $n = 1$, $l = 0$ dengan menggunakan metode analitik (b) gambar yang sama tetapi diperoleh dengan menggunakan metode operator filter.

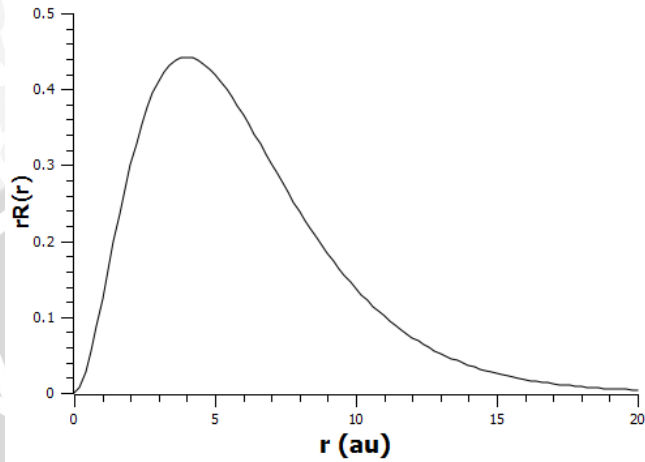


(a)

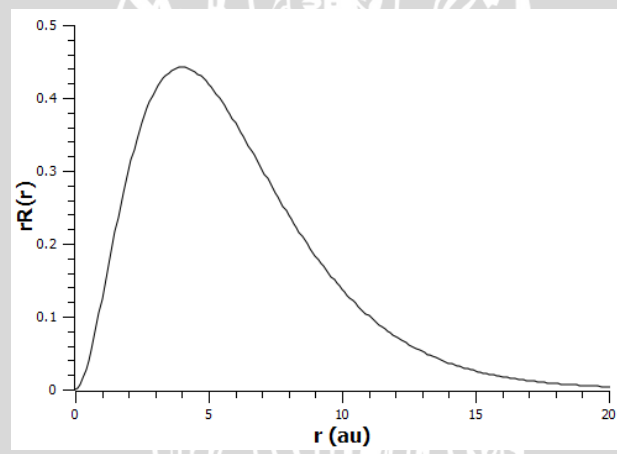


(b)

Gambar L .2.2 (a) Fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk keadaan $n= 2, l = 0$ dengan menggunakan metode analitik (b) gambar yang sama tetapi diperoleh dengan menggunakan metode operator filter.

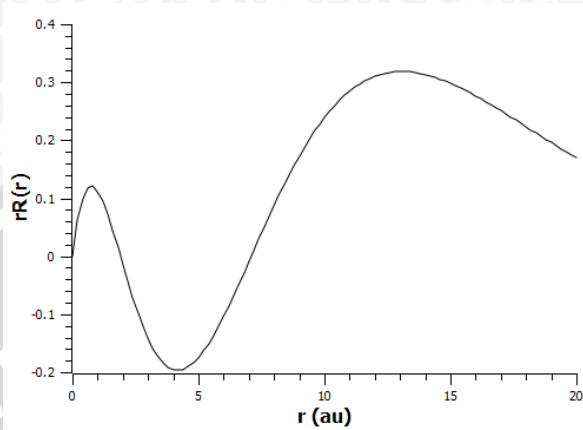


(a)

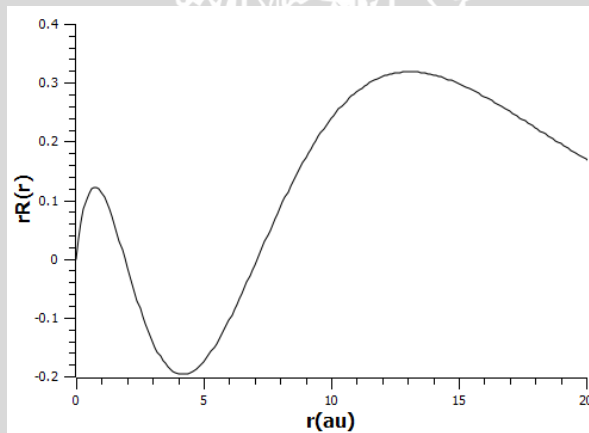


(b)

Gambar L. 2.3. (a) Fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk keadaan $n=2, l=1$ dengan menggunakan metode analitik (b) gambar yang sama tetapi diperoleh dengan menggunakan metode operator filter.

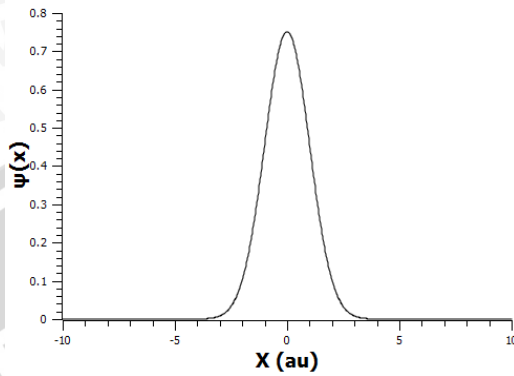


(a)

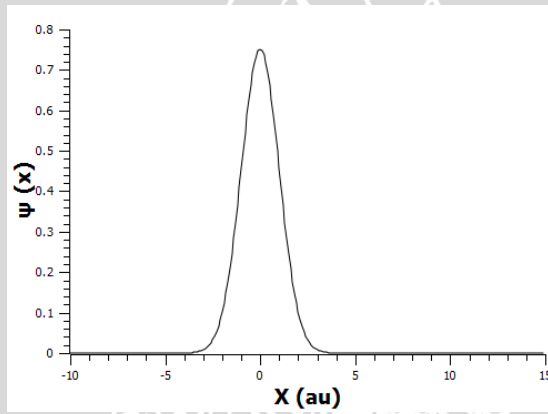


(b)

Gambar L. 2.4. (a) Fungsi gelombang radial atom hidrogen untuk keadaan $n=3, l=0$ dengan menggunakan metode analitik (b) Gambar yang sama tetapi diperoleh dengan menggunakan metode operator filter.

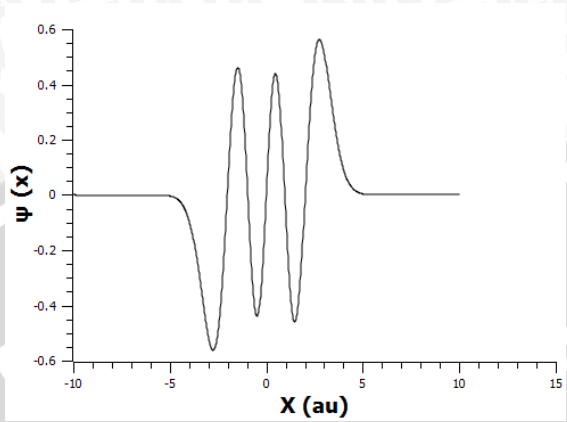


(a)

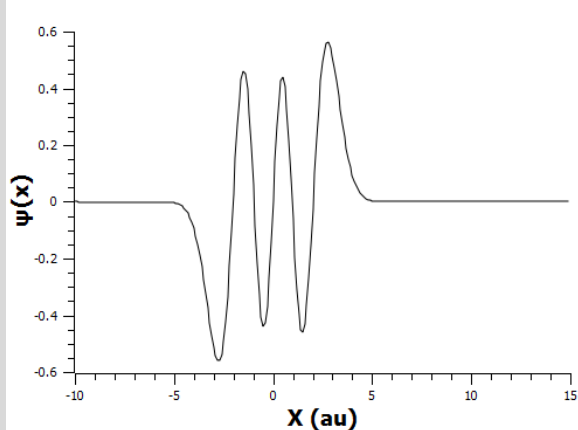


(b)

Gambar L. 2.5 (a) Fungsi gelombang osilator harmonik dengan metode operator filter (b) metode analitik untuk $n = 0$.

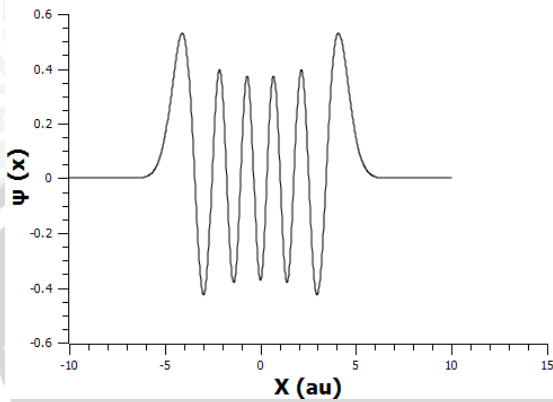


(a)

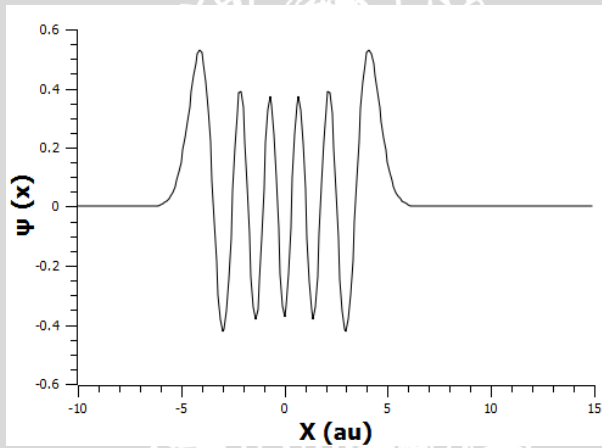


(b)

Gambar L .2.6. (a) Fungsi gelombang gsilator harmonik dengan metode operator filter (b) metode analitik untuk $n = 5$.

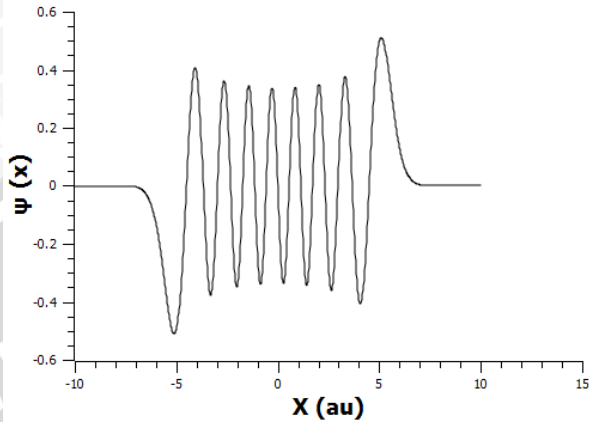


(a)

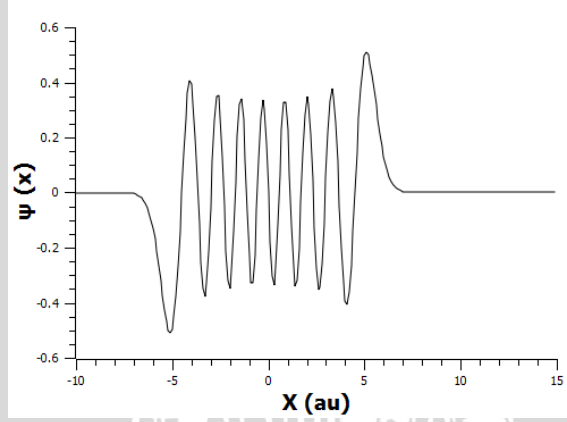


(b)

Gambar L.2.7. (a) fungsi gelombang osilator harmonik dengan metode operator filter (b) metode analitik untuk $n = 10$.



(a)



(b)

Gambar L.2.8. (a) fungsi gelombang osilator harmonik dengan metode operator filter (b) metode analitik untuk $n = 15$.