

BAB I

PENDAHULUAN

Latar Belakang Masalah

Ada beberapa metode numerik yang dapat diimplementasikan untuk mengkaji keadaan energi (*energy state*) dari sebuah sistem potensial sumur berhingga. Diantara metode-metode yang dikenal adalah metode bagi dua (*bisection*), metode Secant, Newton-Raphson, metode posisi palsu dan yang lainnya. Metode-metode ini tentunya memiliki kelebihan dan kekurangannya masing-masing. Tetapi, secara umum metode Newton-Raphson merupakan metode yang biasa digunakan diantara yang lainnya mengingat kecepatan konvergensi serta kesederhanaan algoritmanya. Penelitian ini dilakukan untuk mengkaji beberapa metode numerik tersebut untuk penyelesaian masalah swanilai atau keadaan energi pada sistem yang berada dibawah pengaruh medan potensial sumur berhingga.

Dalam bahasa matematika, masalah pencarian keadaan energi terikat ini terkait dengan pencarian akar persamaan nonlinier. Oleh sebab itu, metode numerik yang diimplementasikan adalah metode pencarian akar persamaan non linier.

Dalam kaitannya dengan permasalahan yang dikaji, fungsi gelombang merupakan besaran yang memegang peran penting dalam mekanika kuantum. Sebab di dalam besaran tersebut memuat semua informasi yang berkaitan dengan sistem. Sebegitu pentingnya hingga seluruh karakteristik sistem ditentukan oleh besaran ini.

Dalam kajian ini akan dijabarkan bagaimana keterkaitan fungsi gelombang yang telah diketahui *secara kasar* (karena koefisien-koefisien yang menempel pada fungsi

tersebut belum diketahui) dapat digunakan untuk menentukan harga energi pada keadaan yang bersesuaian.

Sistem yang ditinjau pada penelitian ini adalah sistem yang dipengaruhi oleh medan potensial berbentuk sumur berhingga. Sebagaimana keadaan zarah yang terjebak di dalam suatu medan potensial tertentu, maka muncul keadaan-keadaan terkuantisasi dengan keadaan energi spesifik (tidak sembarangan). Partikel dalam keadaan terjebak ini akan melakukan gerak osilasi dengan frekuensi dan periode tertentu. Hal ini bisa ditunjukkan dengan bentuk 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 terteksitasi pertama. Demikian pula, zarah yang berada pada keadaan terteksitasi kedua mengalami gerakan yang lebih cepat dibandingkan dengan partikel pada keadaan terteksitasi pertama. Begitu seterusnya, zarah yang berada di keadaan energi yang lebih tinggi mengalami gerakan lebih cepat dibandingkan zarah yang berada pada keadaan energi lebih rendah (Supardi, 2002).

Tujuan Penelitian

Penelitian yang sudah dilakukan bertujuan mengkaji kehandalan metode numerik Newton-Raphson untuk memperoleh harga-harga energi pada setiap keadaan pada sebuah sistem yang berada dibawah pengaruh medan potensial sumur berhingga. Dari penggunaan metode Newton-Raphson tersebut kemudian akan dibandingkan dengan metode pendekatan numerik lain.

Manfaat Penelitian

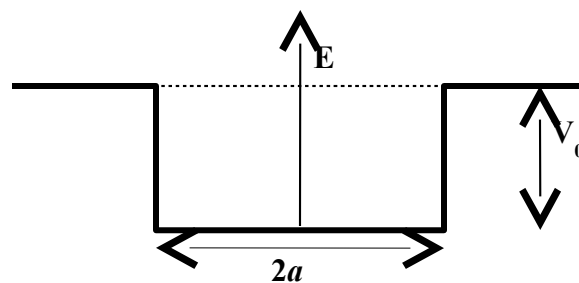
Hasil dari kajian komputasi numerik ini dapat digunakan sebagai pembandingan hasil analitis matematis pada penyelesaian persamaan Schroedinger sistem tersebut. Juga, penelitian ini memberikan sumbangan melalui pemodelan sistem yang dipengaruhi oleh potensial kotak.

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

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 dipengaruhinya (Supardi, 2002). Karakteristik zarah ini ditunjukkan oleh keberadaan energi-energi terikatnya serta perilaku fungsi gelombang yang bersesuaian dengan keadaan tersebut.

Untuk peninjauan pada karakteristik zarah yang dipengaruhi oleh medan potensial sumur berhingga, besaran yang sangat penting adalah energi dan tinggi potensial sumur. Apabila dalam sistem ini besarnya energi yang dimiliki zarah lebih besar dari tinggi potensial yang ada (atau $E > V$) maka yang terjadi adalah pelepasan zarah tersebut dari sistem atau dalam hal ini tidak ada lagi keadaan terikat (Koonin *at al.*, 1990). Tetapi jika zarah yang terjebak dalam medan potensial ini memiliki energi $E < V$, maka yang terjadi adalah terciptanya keadaan-keadaan energi terikat (*energy state*). Keadaan-keadaan terikat yang tercipta oleh sistem ini jumlahnya tertentu bergantung kepada tinggi rendahnya potensial, lain halnya dengan potensial Coulomb yang bekerja pada atom hidrogen seperti yang dinyatakan oleh model Bohr.



Gambar 1. Potensial sumur berhingga

Dalam mekanika kuantum persamaan Schroedinger memainkan peranan penting sebagaimana persamaan gerak Newton dalam mekanika klasik. Pemecahan terhadap persamaan tersebut akan memberikan informasi tentang banyak hal yang ingin diketahui mengenai karakteristik zarah (De Vries *et al.*, 1994). Persamaan Schrodinger dalam ruang satu dimensi dinyatakan oleh

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

Penyelesaian fungsi gelombang ψ untuk setiap daerah dapat dinyatakan sebagai berikut

- Untuk $x < -a$

$$\psi(x) = C_1 \exp(\kappa x) \quad \text{dengan} \quad \kappa^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2 \quad (2)$$

- Untuk $-a < x < +a$

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx) \quad \text{dengan} \quad k^2 = 2mE/\hbar^2 \quad (3)$$

- $x > +a$

$$\psi(x) = C_2 \exp(-\kappa x) \quad \text{dengan} \quad \kappa^2 = 2m(E - V_0)/\hbar^2 \quad (4)$$

Persamaan (2), (3) dan (4) ini merupakan penyelesaian penting yang akan menjadi titik tolak pencarian keadaan-keadaan terikat. Sayangnya, penyelesaian persamaan Schroedinger tersebut masih belum diketahui secara eksplisit koefisien-koefisiennya. Untuk menentukan koefisien-koefisien yang dicari dan spektrum keadaan terikatnya, maka akan digunakan syarat kontinuitas yaitu harga ψ dan turunannya pada perbatasan dinding

- di $x = -a$, $C_1 \exp(-\kappa a) = A \cos(ka) - B \sin(ka)$ (5)

- turunan di $x = -a$, $\kappa C_1 \exp(-\kappa a) = kA \sin(ka) + kB \cos(ka)$ (6)

- di $x = a$, $C_2 \exp(-\kappa a) = A \cos(ka) + B \sin(ka)$ (7)

- turunan di $x = +a$, $\kappa C_2 \exp(-\kappa a) = -kA \sin(ka) + kB \cos(ka)$ (8)

Persamaan (5), (6), (7) dan (8) memberikan inspirasi bahwa masalah ini selanjutnya dapat dibawa ke dalam masalah pencarian harga-harga akar persamaan E sedemikian hingga persamaan non-linier, $f(E) = 0$ dapat dipenuhi.

Dalam kenyataannya, akar-akar dari persamaan non linier tersebut tidak mudah untuk ditemukan secara analitik, kecuali pada kasus-kasus sederhana. Oleh sebab itu, alasan utama penyelesaian masalah-masalah persamaan tersebut menggunakan pendekatan numerik adalah bahwa penyelesaian menggunakan cara analitik biasanya akan menemui kesulitan, meskipun persamaan yang dikerjakan kelihatannya sederhana. Hal inilah yang menjadi asal-muasal metode numerik diperlukan untuk mendekati penyelesaian masalah ini (Press *et al.*, 1987).

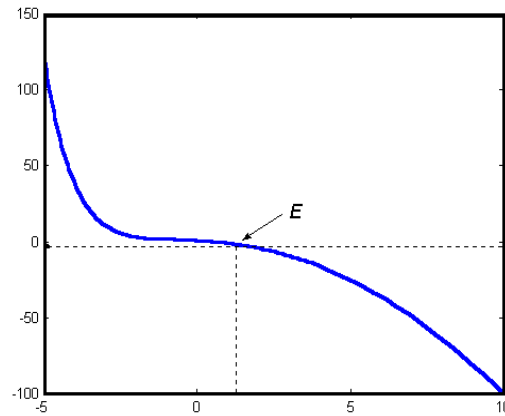
Metode Pencarian Akar Persamaan

Ada beberapa cara pendekatan numerik yang dapat digunakan untuk memecahkan masalah menemukan harga-harga akar persamaan non linier. Pada penelitian ini metode numerik yang akan dikaji adalah metode grafik, metode bagi dua dan metode Newton-Raphson.

Metode Grafik

Pencarian akar-akar persamaan dengan menggunakan metode grafik merupakan cara paling sederhana dibandingkan dengan yang lain. Untuk mendapatkan akar-akar persamaan ini cukup dilakukan pengeplotan terhadap fungsi yang dimaksud. Sebagai

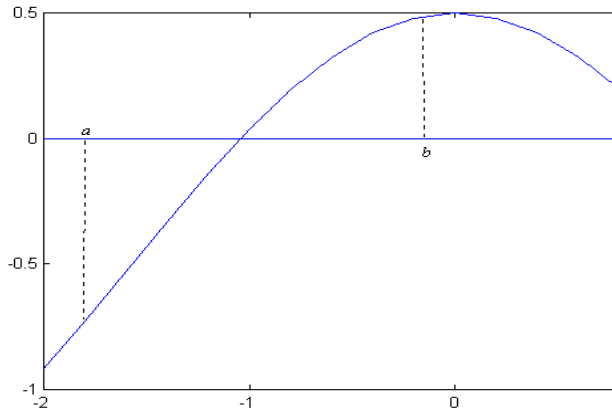
ilustrasi dapat dilihat pada gambar 2. Dengan menarik garis dari perpotongan antara grafik $f(E)$ dengan sumbu- E , maka dapat diperkirakan akar-akar persamaan yang dimilikinya. Kelemahan dari metode ini adalah bahwa harga akar yang ditemukan memiliki akurasi yang sangat kasar.



Gambar 2. Pencarian akar persamaan dengan metode grafik.

2.2 Metode Bagi Dua (Bisection)

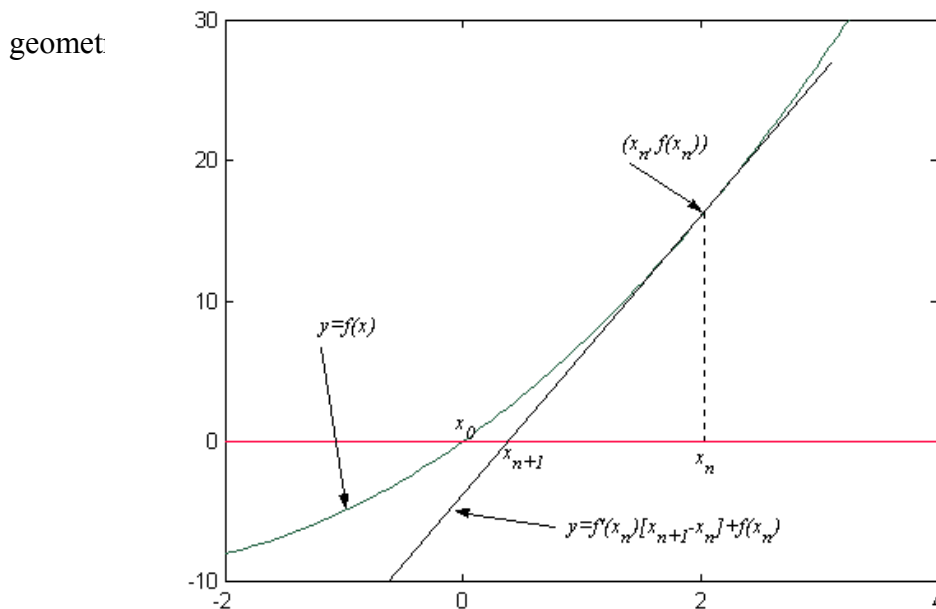
Metode bagi dua merupakan metode numerik paling sederhana diantara metode-metode analisis lain dalam pencarian akar persamaan nonlinier. Metode ini termasuk metode yang *robust*, atau tahan uji (Press, *at al.*, 1987). Salah satu kekurangan metode ini adalah bahwa harus diberikan dua terkaan awal, yaitu x_a dan x_b yang mengurung sebuah akar persamaan, sehingga apabila $f_a = f(x_a)$ dan $f_b = f(x_b)$, maka akan dipenuhi $f_a f_b \leq 0$. Contoh dari masalah ini digambarkan pada gambar 3. Apabila dipenuhi $f_a f_b = 0$ maka salah satu dari x_a dan x_b yang berada pada x_1 atau keduanya merupakan akar persamaan yang dicari.



Gambar 3. Pencarian akar persamaan dengan metode bagi dua.

2.3 Metode Newton-Raphson

Metode Newton-Raphson merupakan metode yang paling sering digunakan diantara metode-metode pencarian akar persamaan yang dikenal. Ide dari metode ini adalah, jika diberikan satu tebakan awal pada titik $(x_i, f(x_i))$ maka dapat ditarik garis singgung hingga memotong sumbu x . Titik potong dengan sumbu x ini biasanya merupakan tebakan akar yang lebih baik dibandingkan tebakan sebelumnya. Pendekatan



Gambar 4 Metode Newton-Raphson

Disamping menggunakan pendekatan geometris, metode ini juga dapat diturunkan dari ekspansi deret Taylor disekitar titik $x = x_0$, yaitu

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0) f'(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^2 f''(x_0) + O(|x - x_0|^2) \quad (2-7)$$

Dengan mengabaikan suku kuadrat dan suku-suku yang lebih tinggi dan dengan mengambil $f(x) = 0$, maka diperoleh harga x sebagai

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad (2-8)$$

Atau dalam bentuk hubungan rekursi (2-8) dapat dinyatakan kembali dalam bentuk

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (2-9)$$

Secara geometris, x_{n+1} dapat ditafsirkan sebagai harga pada sumbu x yang mana sebuah garis melalui titik $(x_n, f(x_n))$ memotong sumbu x tersebut.

BAB III

METODE PENELITIAN

Penelitian tentang masalah ini telah dilakukan di Laboratorium Fisika Komputasi Jurusan Pendidikan Fisika Universitas Negeri Yogyakarta. Metode penyelesaian yang digunakan adalah beberapa algoritma numerik antara lain, metode grafik, metode bagi dua dan metode Newton-Raphson.

Sebelum dilakukan komputasi numerik terhadap harga energi pada setiap keadaan, lebih dahulu dicari bentuk persamaan non linier yang dinyatakan dalam variabel bebas energi. Untuk tujuan ini, perlu dilakukan penyederhanaan terhadap ungkapan (5), (6), (7) dan (8). Setelah dilakukan langkah penyederhanaan, maka diperoleh harga besaran κ dalam A dan B yaitu

$$\kappa = k \frac{A \sin(ka) + B \cos(ka)}{A \cos(ka) - B \sin(ka)} \quad \text{di } x = -a \quad (9)$$

dan

$$\kappa = k \frac{A \sin(ka) - B \cos(ka)}{A \cos(ka) + B \sin(ka)} \quad \text{di } x = +a \quad (10)$$

Satu-satunya cara yang dapat dilakukan agar dua persamaan untuk κ konsisten adalah menghilangkan salah satu konstanta tersebut untuk kondisi-kondisi yang dipenuhi,

$$\text{Saat } A \neq 0 \quad \text{fungsi cosinus} \quad \text{paritas } +1 \quad \kappa = k \tan(ka) \quad (11)$$

$$\text{Saat } B \neq 0 \quad \text{fungsi sinus} \quad \text{paritas } -1 \quad \kappa = -k \cot(ka) \quad (12)$$

Jika ungkapan (9) dan (10) dinyatakan secara eksplisit terhadap variabel E , maka diperoleh ungkapan

- Untuk paritas +1

$$\sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2} \cos\left(a\sqrt{2m(E)/\hbar^2}\right) - \sqrt{2mE/\hbar^2} \sin\left(a\sqrt{2mE/\hbar^2}\right) = 0 \quad (13)$$

- Untuk paritas -1

$$\sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2} \sin\left(a\sqrt{2m(E)/\hbar^2}\right) + \sqrt{2mE/\hbar^2} \cos\left(a\sqrt{2mE/\hbar^2}\right) = 0 \quad (14)$$

Untuk kepentingan komputasi numerik, maka ungkapan (13) dan (14) baik diungkapkan dalam besaran-besaran universal atau besaran tak berdimensi. Oleh sebab itu, diambil asumsi

$$\epsilon = \frac{2ma^2E}{\hbar^2} \quad \text{dan} \quad \phi_0 = \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} \quad (15)$$

Selanjutnya, ungkapan (13) dan (14) dapat dinyatakan kembali sebagai

$$\sqrt{\epsilon - \phi_0} \cos\left(\sqrt{\epsilon}\right) - \sqrt{\epsilon} \sin\left(\sqrt{\epsilon}\right) = 0 \quad (16)$$

$$\sqrt{\epsilon - \phi_0} \sin\left(\sqrt{\epsilon}\right) + \sqrt{\epsilon} \cos\left(\sqrt{\epsilon}\right) = 0 \quad (17)$$

Dari ungkapan (16) dan (17) sudah siap untuk dilakukan perhitungan numerik untuk memperoleh swanilai ϵ untuk tiap keadaan.

BAB IV

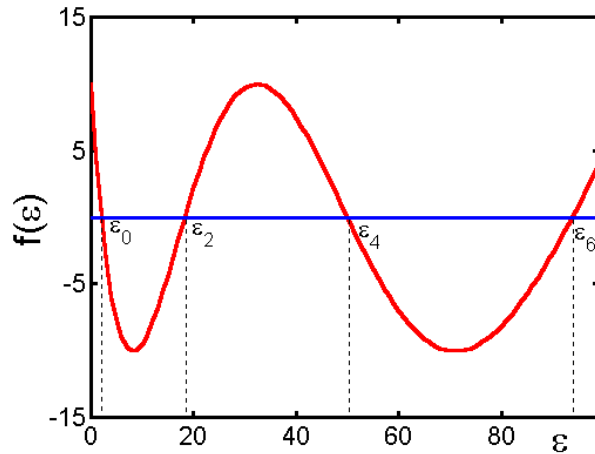
HASIL DAN PEMBAHASAN

Pada penelitian ini telah diambil harga tinggi potensial $\phi_0 = 100$. Dengan ketinggian potensial demikian diharapkan muncul beberapa keadaan energi terikat tertentu. Untuk memperoleh gambaran mengenai bengkitnya beberapa keadaan energi tersebut digunakan beberapa pendekatan numerik dan grafis.

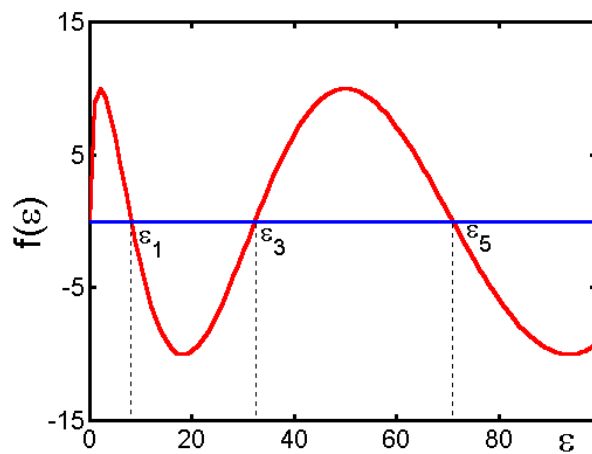
Pemecahan masalah yang pertama telah dilakukan dengan menggunakan metode grafis. Pendekatan penyelesaian melalui metode ini dapat dilihat pada gambar (5) dan (6). Hasil numerik yang ditampilkan oleh metode ini dapat diketahui dengan memperhatikan titik perpotongan fungsional energi dengan sumbu absis. Gambar (5) ditampilkan profil fungsional energi untuk paritas +1 dengan titik-titik perpotongan fungsional kira-kira di titik-titik 2.0, 18.0, 49.0, 93.0. Sedangkan gambar (5) ditampilkan titik-titik perpotongan di 9.0, 37.0, 70.0 untuk paritas -1. Titik-titik perpotongan antara fungsional energi dengan sumbu absis tersebut menyatakan aras-aras keadaan energi terikat pada sistem potensial sumur berhingga. Jika diperhatikan, harga-harga pendekatan numerik yang diberikan metode ini sangat kasar. Hal ini terlihat pada hasil yang tidak tampak angka signifikan di belakang koma.

Kecepatan konvergensi ke arah keadaan energi terikat menggunakan metode bagi dua dan Newton-Raphson ditampilkan pada gambar (6) dan (7). Grafik tersebut

memperlihatkan watak metode pendekatan itu saat digunakan untuk mencari keadaan-keadaan energi terikat.



Gambar 5. Pencarian keadaan energi menggunakan metode grafik untuk paritas genap



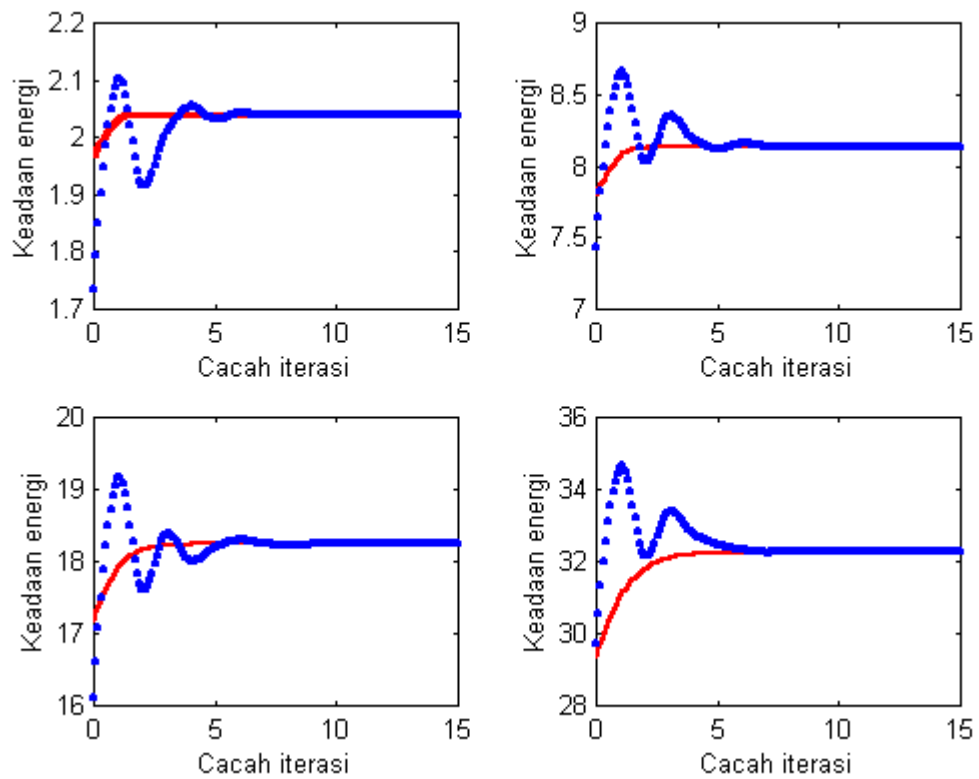
Gambar 6. Pencarian keadaan energi menggunakan metode grafik untuk paritas ganjil

Bila diperhatikan secara seksama grafik konvergensi pencarian keadaan energi pada gambar (7) dan (8), metode Newton-Raphson memiliki kecepatan konvergensi lebih tinggi dibandingkan dengan metode bagi dua, setidaknya pada saat pencarian keadaan energi dasar hingga keadaan terksitasi ke-4. Sedangkan, untuk keadaan energi pada aras ke-5 dan ke-6, kedua metode hampir bersamaan mencapai konvergensi. Melalui perhitungan secara numerik diperoleh tujuh keadaan energi terikat untuk sistem yang dipengaruhi oleh medan potensial sumur berhingga. Ketujuh keadaan energi tersebut dapat dilihat pada tabel 1.

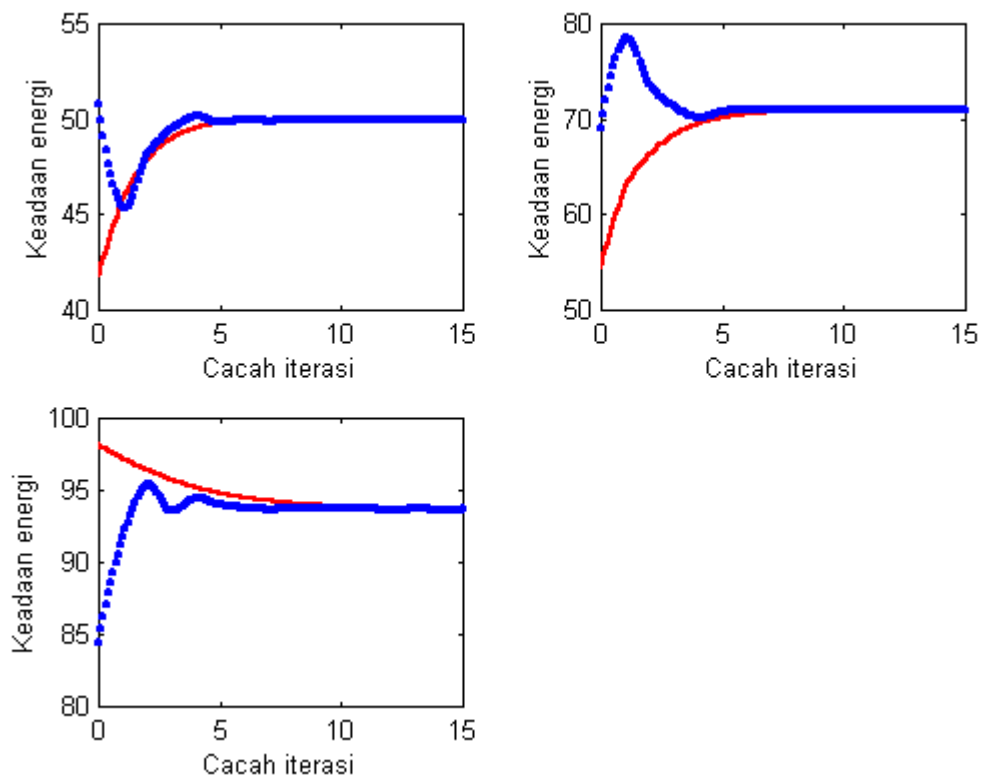
Tabel 1. hasil pendekatan numerik keadaan energi pada sistem yang berada di bawah pengaruh medan potensial sumur berhingga

Aras energi ke	Energi	Keterangan
0	2.03790	Keadaan dasar
1	8.13585	Keadaan tereksitasi ke-1
2	18.24226	Keadaan tereksitasi ke-2
3	32.25340	Keadaan tereksitasi ke-3
4	49.96922	Keadaan tereksitasi ke-4
5	70.95036	Keadaan tereksitasi ke-5
6	93.68080	Keadaan tereksitasi ke-6

Pada keadaan fisis yang sesungguhnya, model potensial sumur berhingga ini banyak ditemukan pada kasus-kasus atomik maupun subatomik. Salah satu keadaan yang jelas nyata adalah inti atom, dimana potensial di dalamnya adalah kempes (*flat*), seperti bentuk dalam dari tetesan cairan berbentuk bola.



Gambar 6. Pencarian keadaan energi untuk keadaan dasar, tereksitasi ke-1, tereksitasi ke-2 dan tereksitasi ke-3 dengan metode Newton-Rapson dan metode bagi dua. Tanda : metode bagi dua dan -: metode Newton-Raphson. Perhatikan, kecepatan konvergensi metode Newton-Raphson lebih cepat dibandingkan dengan metode bagi dua.



Gambar 7. Pencarian keadaan energi untuk keadaan tereksitasi ke-4, tereksitasi ke-5 dan tereksitasi ke-6 dengan metode Newton-Rapson dan metode bagi dua. Tanda : metode bagi dua dan -: metode Newton-Raphson.

BAB V

KESIMPULAN

Kesimpulan yang dapat diambil dari penelitian yang telah dilakukan oleh peneliti antara lain

- Metode Newton-Raphson memiliki kecepatan konvergensi lebih tinggi dibandingkan dengan metode bagi dua.
- Hasil pendekatan numerik yang diberikan oleh metode Newton-Raphson memiliki ketelitian lebih baik dibandingkan dengan metode grafik.
- Jumlah keadaan energi pada sistem yang berada di bawah pengaruh medan potensial sumur berhingga pada ketinggian sumur 100 berjumlah tujuh keadaan.

DAFTAR PUSTAKA

De Vries, Paul L. 1994. *A First Course In Computational Physics*, New York : John Wiley & Sons, Inc.

Koonin, Steven E ., Meredith, dawn C. 1990. *Computational Physics*, USA : Addison-Wesley Publishing Company, Inc.

Press H., Flannery P., Teulosky A., Vetterling T. 1987. *Numerical recipes*, Cambridge : Press Syndicate of the Cambridge University.

Supardi. 2002. Perilaku Fungsi Gelombang Sistem Potensial Sumur Berhingga, *Jurnal Pendidikan Matematika dan Sains, VII*,