

PROJEK 2

PENCARIAN ENERGI TERIKAT SISTEM DI BAWAH PENGARUH POTENSIAL SUMUR BERHINGGA

A. PENDAHULUAN

Ada beberapa metode numerik yang dapat diimplementasikan untuk mengkaji keadaan energi terikat (*bonding energy*) 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 terikat 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 sembarang). 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).

B. 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.

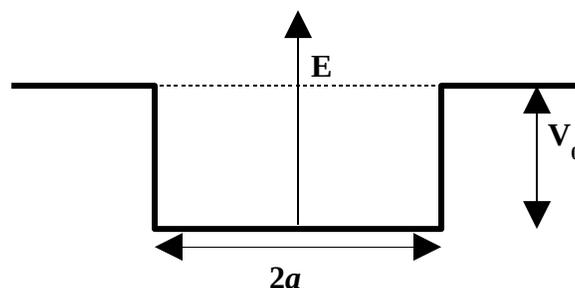
C. Manfaat Penelitian

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.

D. 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.

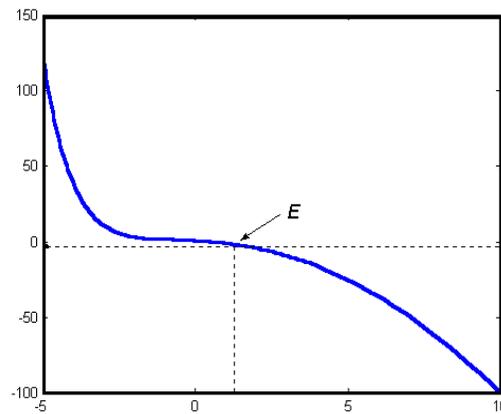
Dalam kenyataannya, akar-akar dari persamaan non linier tersebut tidak mudah untuk ditemukan secara analitik, kecuali pada kasus-kasus sederhana. Oleh sebab itu, alasan utama penyelesaian masalah-masalah persamaan tersebut menggunakan pendekatan numerik adalah bahwa penyelesaian menggunakan cara analitik 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.

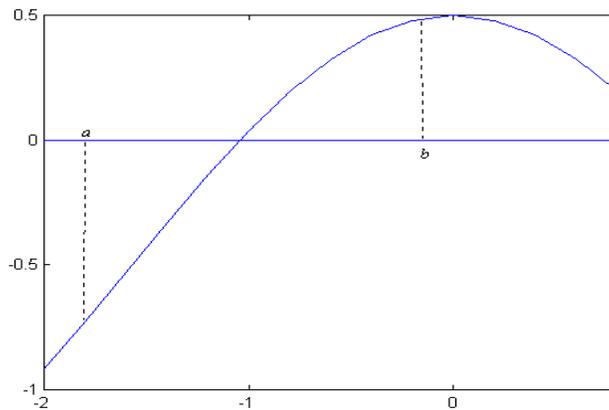


Gambar 2. Pencarian akar persamaan dengan metode grafik.

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.

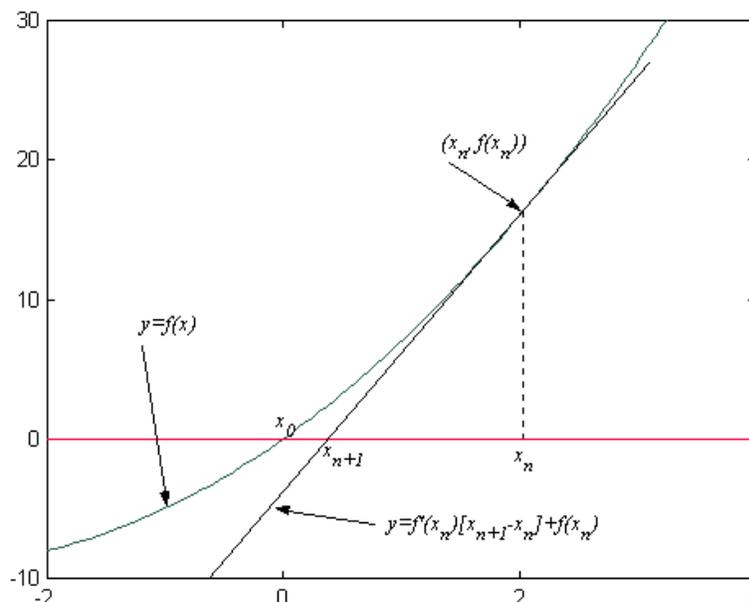


Gambar 3. Pencarian akar persamaan dengan metode bagi

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,
singgung
merupa
geomet



tarik garis
i biasanya
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.

E. METODE PENELITIAN

Penelitian dilakukan di Laboratorium Komputasi Fisika 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 penyederhaan, 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 dipeneuhi,

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

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

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

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

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

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