

PENENTUAN ENERGI EIGEN PERSAMAAN SCHRODINGER DENGAN SUMUR POTENSIAL SEMBARANG MENGUNAKAN METODE MATRIKS TRANSFER NUMERIK

Nuraina Fika Lubis, Salomo, Defrianto

**Mahasiswa Program Studi S1 Fisika
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Riau
Kampus Bina Widya Pekanbaru, 28293, Indonesia
*nurainafikalubis@gmail.com***

ABSTRACT

A research has been done in order to find eigen energy for Schrodinger equation at arbitrary potential well by numerical transfer matrix method. Before transferring matrix MATLAB code was made for arbitrary potential well, transfer matrix program was created for square potential well. The calculation results obtained three levels of eigen energy, each of which was worth 0,02860 eV, 0,11282 eV and 0,24589 eV. Transfer matrix program at this potential was considered correct if the eigen energy results don't differ much with the eigen energy results on analytic formula. In the analytical formula, it was obtained three levels of eigen energy, each of which was worth 0,02854 eV, 0,11185 eV and 0,24579 eV. Comparison of eigen energy results obtained through both equation was slightly different, wherein the percentage difference was less than 0,01%. At arbitrary potential well, there were three levels of eigen energy each worth 0,10001 eV, 0,19001 eV and 0,36999 eV.

Keywords: Eigen energy, potential well, transfer matrix

ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian untuk menentukan energi eigen persamaan Schrodinger pada sumur potensial sembarang melalui metode matriks transfer numerik. Sebelum kode program MATLAB metode matriks transfer pada sumur potensial sembarang dibuat, dilakukan pembuatan program matriks transfer pada sumur potensial persegi. Hasil perhitungan tersebut diperoleh tiga tingkat energi eigen yang masing-masing bernilai 0,02860 eV, 0,11282 eV dan 0,24589 eV. Program matriks transfer pada potensial ini dianggap benar jika hasil energi eigen tidak berbeda jauh dengan hasil energi eigen pada rumusan analitik. Pada rumusan analitik, diperoleh tiga tingkat energi eigen yang masing-masing bernilai 0,02854 eV, 0,11185 eV dan 0,24579 eV. Perbandingan hasil energi eigen yang diperoleh melalui kedua rumusan tersebut berbeda tipis, dimana persentase perbedaan lebih kecil dari 0,01%. Pada sumur potensial sembarang, diperoleh tiga tingkat energi eigen yang masing-masing bernilai 0,10001 eV, 0,19001 eV dan 0,36999 eV.

Kata kunci: Energi eigen, sumur potensial, matriks transfer

PENDAHULUAN

Fisika Kuantum merupakan salah satu cabang ilmu Fisika yang mempelajari perilaku partikel atom yang tidak terjangkau oleh ilmu Fisika Klasik. Pengembangan Fisika Kuantum bertolak dari sifat gelombang partikel. Persamaan gelombang yang sudah diketahui dalam Fisika Klasik, diturunkan persamaan gelombang untuk partikel. Persamaan inilah yang disebut persamaan Schrodinger (Siregar, 2010:15).

Persamaan Schrodinger satu dimensi yang tidak bergantung waktu untuk suatu partikel dapat diselesaikan jika bentuk potensial yang dialami telah diketahui sebelumnya (Siregar, 2010:37). Persamaan Schrodinger ini mempunyai beberapa bentuk potensial sederhana, seperti potensial sumur, potensial tangga, potensial penghalang, potensial osilator harmonik, potensial atom hidrogen, dan lain-lain. Bentuk potensial sederhana dapat divariasikan menjadi bentuk sembarang, salah satunya variasi sumur potensial yakni potensial sumur sembarang (*arbitrary well potential*). Potensial sumur sembarang memiliki dasar yang tidak rata atau diagonal, sehingga persamaan Schrodinger pada potensial sumur ini harus diselesaikan secara numerik.

Perkembangan teknologi dan informasi dalam bidang komputasi sangat pesat pada saat ini. Perhitungan fisika menggunakan perangkat lunak (*software*) komputasi semakin marak dikembangkan, salah satunya MATLAB. MATLAB adalah perangkat lunak komputasi yang mempunyai bahasa pemrograman tingkat tinggi yang dapat diartikan secara langsung.

Energi eigen pada persamaan Schrodinger dengan potensial sumur

persegi dapat dirumuskan secara analitik. Namun, energi eigen pada persamaan Schrodinger dengan potensial sumur sembarang tidak mudah dirumuskan secara analitik. Pencarian energi eigen pada potensial sumur sembarang hanya bisa dilakukan secara numerik. Dalam makalah ini, penulis mencari perhitungan energi eigen dari persamaan Schrodinger dengan potensial sembarang menggunakan metode matriks transfer.

Metode tabel (*table method*) dan metode biseksi (*bisection method*) merupakan metode numerik pencari akar persamaan non-linear secara tertutup. Kedua metode ini digunakan sebagai pembanding rumusan analitik dengan rumusan matriks transfer pada potensial sumur persegi. Penulis menggunakan kedua metode tersebut karena persamaan matriks transfer untuk pencarian nilai eigen berbentuk seperti persamaan non linear. Kedua metode ini digunakan untuk membuktikan energi eigen yang sesuai pada rumusan analitik potensial sumur persegi.

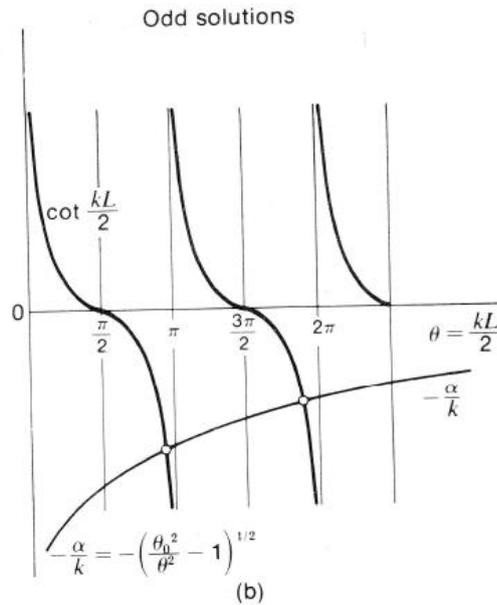
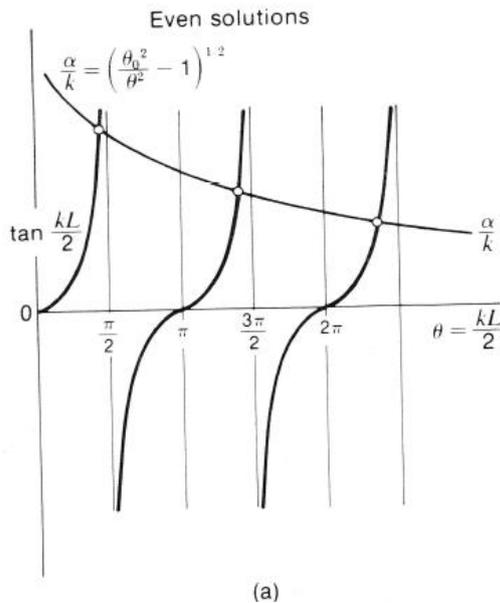
Pencarian energi eigen dengan metode matriks transfer dan metode numerik dilakukan menggunakan MATLAB. Program yang dibuat dengan MATLAB dapat menentukan energi eigen yang sesuai pada potensial sumur persegi dan sembarang.

TEORI

Persamaan Schrodinger adalah persamaan dasar fisika untuk menggambarkan keadaan mekanika kuantum. Potensial sumur persegi (*square well potential*) adalah sebuah penyelesaian persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu untuk sebuah elektron yang terperangkap oleh fungsi

potensial sumur yang berbentuk persegi. Sumur potensial persegi sering digunakan dalam mekanika kuantum saat situasi partikel bergerak di area khusus dengan pengaruh gaya pada area tersebut (Eisberg and Resnick, 1985:210).

Solusi ganjil (*odd*) dan genap (*even*) energi eigen pada sumur



Gambar 1. Grafik solusi energi eigen yang diizinkan pada potensial sumur persegi. (a) Grafik solusi genap, (b) Grafik solusi ganjil, (French and Taylor, 1994:160).

Kasus dimana tingkat energi eigen pada sumur potensial persegi tidak diketahui, maka berlaku rumus energi eigen pada keadaan dasar. Rumusan analitik energi eigen dalam keadaan dasar tanpa mengetahui tingkat energinya (Khan, 2011) dirumuskan dalam Persamaan 3.

$$2\sqrt{(V_0 - E)E} = (2E - V_0) \tan\left(\sqrt{\frac{2mEw^2}{\hbar^2}}\right) \quad 3$$

Metode matriks transfer (MMT) adalah suatu metode semi numerik yang membagi daerah solusi yang berbentuk sembarang menjadi beberapa bagian (N segmen) yang berukuran lebih kecil daripada ukuran lebar potensial yang ditinjau (Damayanti *et. al.*, 2013).

potensial persegi masing-masing ditulis pada Persamaan 1 dan 2.

$$\cot\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot w\right) = -\left(\frac{V_0 - E}{E}\right)^{\frac{1}{2}} = -\left(\frac{V_0}{E} - 1\right)^{\frac{1}{2}} \quad 1$$

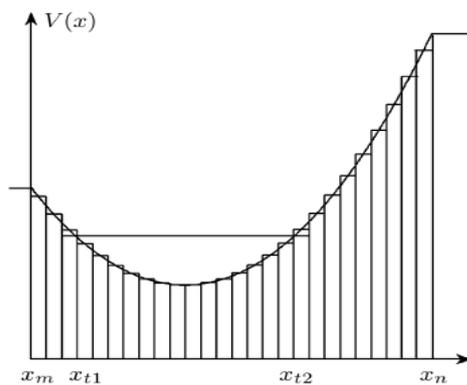
$$\tan\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \cdot w\right) = \left(\frac{V_0 - E}{E}\right)^{\frac{1}{2}} = \left(\frac{V_0}{E} - 1\right)^{\frac{1}{2}} \quad 2$$

Penjelasan energi eigen yang diizinkan pada solusi ganjil dan genap dijelaskan pada Gambar 1.

Secara umum, metode ini digunakan untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger satu dimensi untuk memperoleh energi eigen terkuantisasi pada sumur potensial heterostruktur (Jirauschek, 2009). Namun, metode ini dapat diaplikasikan untuk mencari energi eigen dari persamaan Schrodinger dengan sumur potensial sembarang (*arbitrary well potential*).

Sumur potensial sembarang merupakan sumur potensial dengan bentuk dasar yang tidak beraturan dengan elektron yang terperangkap di atasnya. Sumur potensial ini memiliki berbagai selang dengan tinggi potensial yang beragam. Metode matriks transfer

untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger untuk sumur potensial sembarang $V(x)$ merupakan langkah yang sederhana (Sanchez-Soto *et al.*, 2012). Cara kerja metode ini untuk potensial sembarang adalah membagi beberapa cacahan potensial berbentuk persegi panjang yang berada di bawah sumur potensial sembarang seperti Gambar 2.



Gambar 2. Contoh sumur potensial sembarang yang telah dicacah, (Ying *et al.*, 2010)

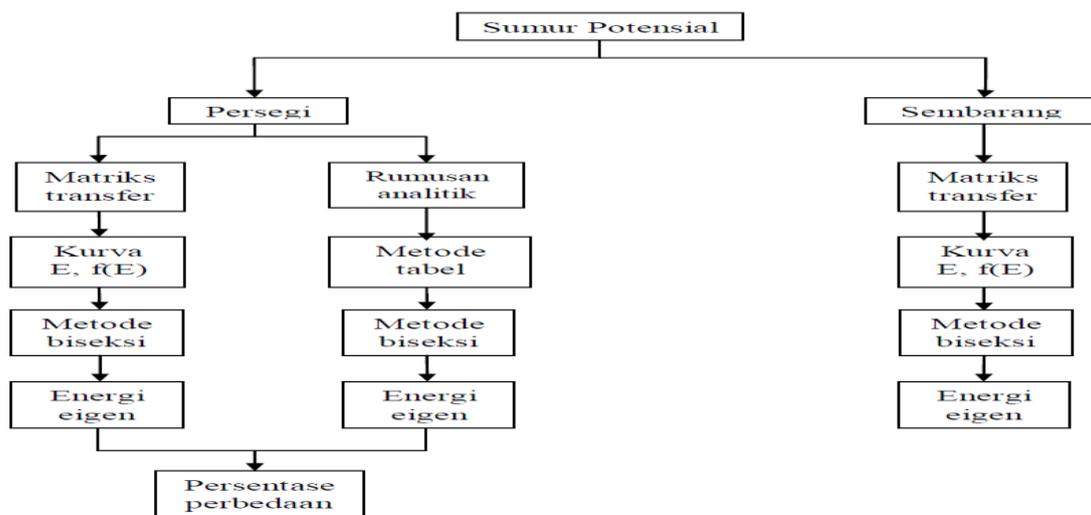
Persamaan matriks transfer dalam bentuk persamaan non-linear seperti Persamaan 4.

$$f(E) = [-P_m \quad 1] \prod_{i=1}^l M_i \begin{bmatrix} 1 \\ -P_n \end{bmatrix} = 0 \quad 4$$

Metode tabel (*table method*) adalah sebuah metode numerik dengan membagi kurva persamaan non-linear sebanyak N bagian sesuai panjang kurva non-linear. Metode biseksi (*bisection method*) adalah sebuah metode numerik dengan membagi dua dari tengah kurva persamaan non-linear, dimana satu bagian adalah bagian yang memberi nilai negatif dan bagian lainnya memberi nilai positif (Suarga, 2007:106). Metode biseksi dilakukan setelah metode tabel dengan selang pada metode biseksi didapat dari selang metode tabel. Pada setiap proses, panjang selang berkurang sebesar 50%, menimbulkan konvergensi linear monoton (Bachrathy and Stepan, 2012).

METODE PENELITIAN

Metode penelitian yang digunakan adalah studi literatur dan pembuatan program komputer. Perhitungan energi eigen secara matriks transfer dan numerik (metode tabel dan biseksi) dibuat menggunakan perangkat lunak MATLAB 8.0.0.783 (R2012b) di Pusat Komputer - Universitas Riau.



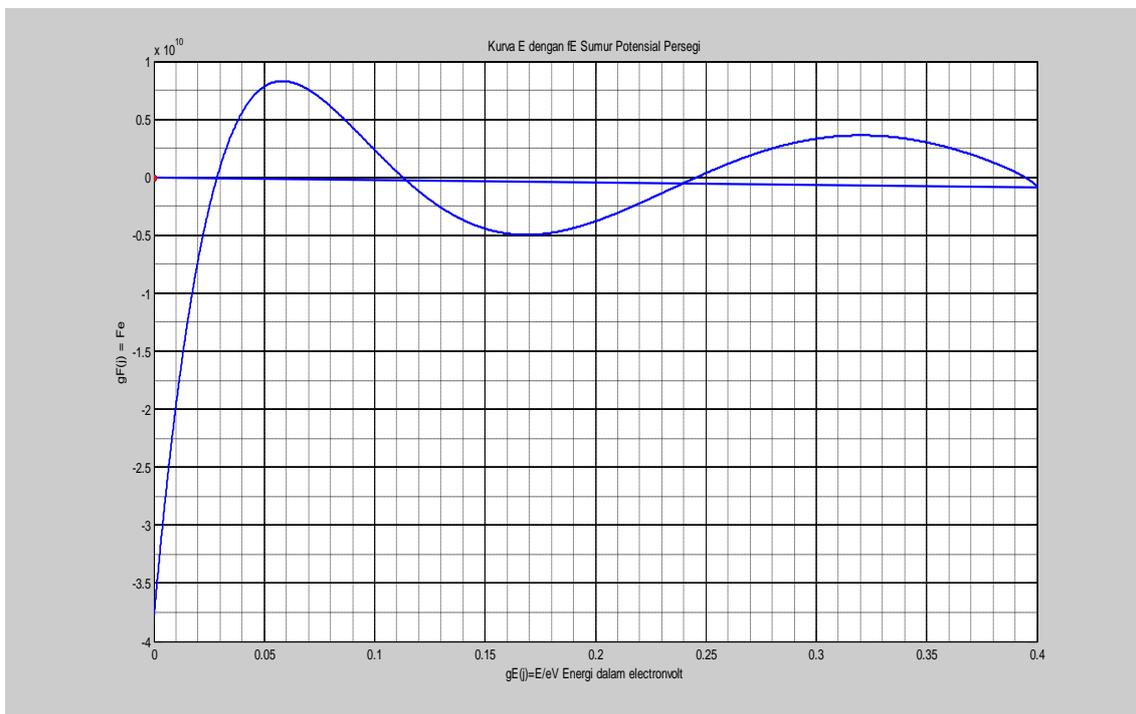
Gambar 3. Diagram alir penelitian

Persentase perbedaan antara energi eigen metode matriks transfer dengan rumusan analitik pada sumur potensial persegi dirumuskan dengan:

$$\% \text{ perbedaan} = \left| \frac{E_{\text{matriks transfer}} - E_{\text{rumusan analitik}}}{E_{\text{rumusan analitik}}} \right| \times 100\%$$

HASIL DAN PEMBAHASAN

Sumur potensial persegi merupakan contoh sumur potensial tunggal GaAs-Al_{0,38}GaO₆₂As dengan lebar (w) = 30 Å dan tinggi potensial sisi kiri (V_0) dan kanan (V_2) sebesar 0,4 eV (Ghatak *et al.*, 1988). Hasil energi eigen pada sumur ini melalui metode matriks transfer digambarkan dalam Gambar 4.



Gambar 4. Tampilan kurva energi eigen pada sumur potensial persegi dengan metode matriks transfer

Gambar 4 terlihat bahwa kurva E memotong kurva $f(E)$ sebanyak tiga kali. Hal ini menunjukkan bahwa pada sumur potensial persegi terdapat tiga tingkat energi. Untuk menentukan energi eigen pada tiga tingkat energi ini, digunakan metode biseksi.

Hasil perhitungan metode biseksi didapatkan energi eigen pada sumur potensial persegi pada iterasi terakhir. Pada tingkat energi ke-1, 2 dan 3 didapatkan energi eigen masing-

masing 0,02860 eV, 0,11282 eV dan 0,24589 eV. Ketiga tingkat energi tersebut berada di bawah tinggi sumur potensial persegi, yakni 0,4 eV.

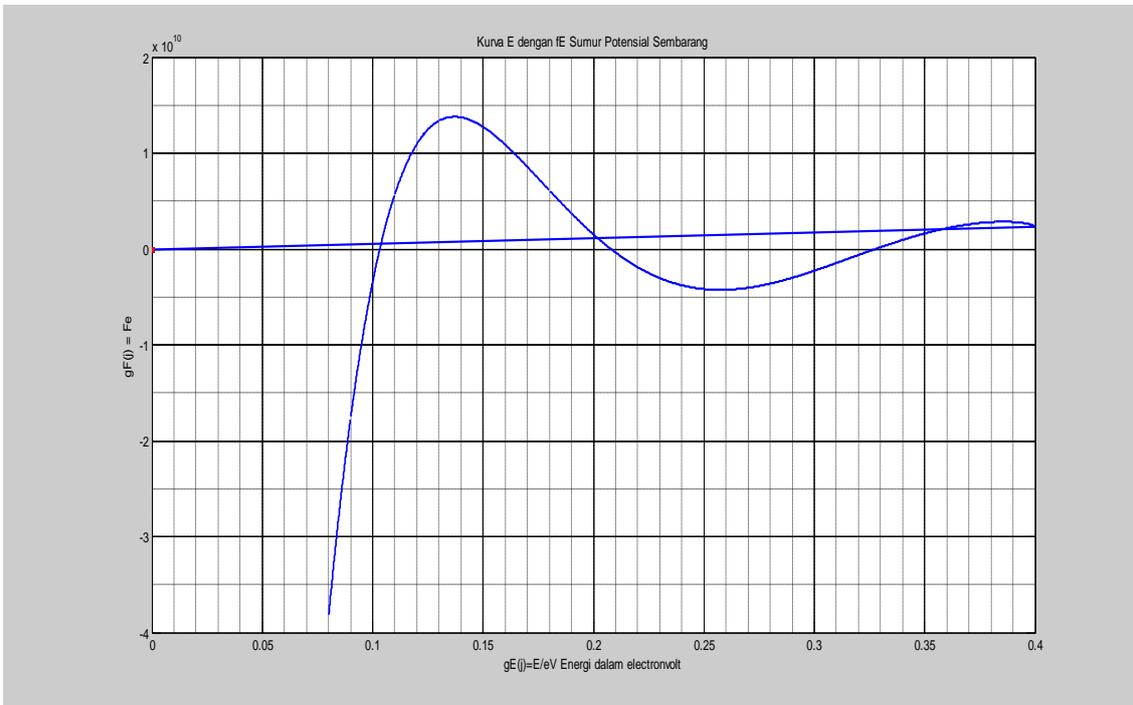
Cara membuktikan bahwa rumusan matriks transfer benar, maka digunakan rumusan analitik persamaan 3 sebagai pembanding. Persentase perbedaan yang sangat kecil antara kedua metode tersebut menunjukkan kode program matriks transfer sumur potensial persegi telah benar.

Tabel 1. Perbandingan energi eigen yang diperoleh melalui metode matriks transfer dan rumusan analitik

| Tingkat Energi | $E_{\text{Matriks Transfer}} \text{ (eV)}$ | $E_{\text{Rumusan Analitik}} \text{ (eV)}$ | Persentase Perbedaan |
|----------------|--|--|----------------------|
| 1 | 0,02860 | 0,02854 | 0,00216 % |
| 2 | 0,11282 | 0,11185 | 0,00865 % |
| 3 | 0,24588 | 0,24579 | 0,00039 % |

Sumur potensial sembarang mempunyai kedalaman sisi kiri sebesar 0,4 eV dan sisi kanan sebesar 0,2 eV. Lebar selang potensial ini masing masing 1,5 Å dengan lebar total 30 Å. Tinggi potensial masing-masing selang homogen dengan $V_1 = 0,01 \text{ eV}$,

sehingga tinggi potensial berikutnya dicari menggunakan rumus $V(x) = V(x + \frac{w}{2})$. Hasil energi eigen pada sumur ini melalui metode matriks transfer digambarkan dalam Gambar 6.



Gambar 5. Tampilan kurva energi eigen pada sumur potensial sembarang dengan metode matriks transfer

Gambar 5 menunjukkan bahwa sumur potensial sembarang memiliki tiga tingkat energi. Melalui metode biseksi untuk tingkat energi pertama, diambil nilai E minimum sebagai a , yakni sekitar 0,1 eV, sedangkan nilai nilai E maksimum sebagai b sekitar 0,11 eV. Kemudian, nilai a dan b dibagi

dua sehingga nilai E menjadi c . Hasil akhir energi eigen yang berupa c yang didapatkan setelah sepuluh kali iterasi adalah 0.10001 eV. Oleh karena itu, energi eigen berada di antara selang ke-10 dan ke-11 sumur potensial sembarang, dimana kedua selang tersebut memiliki tinggi sebesar 0,1 eV

dan 0,11 eV. Tingkat energi kedua pada nilai a sekitar 0,19 eV, sedangkan nilai b sekitar 0,21 eV. Hasil akhir c yang didapatkan setelah sebelas kali iterasi adalah 0,19001 eV. Oleh karena itu, energi eigen berada di antara selang ke-19 dan ke-20 sumur potensial sembarang, dimana kedua selang tersebut memiliki tinggi sebesar 0,19 eV dan 0,2 eV. Sedangkan tingkat energi ketiga, diambil nilai a sekitar 0,35 eV, sedangkan nilai b sekitar 0,37 eV. Hasil akhir c yang didapatkan setelah sebelas kali iterasi adalah 0,36999 eV. Oleh karena itu, energi eigen berada di atas selang ke-20 sumur potensial ini.

KESIMPULAN

Kesimpulan yang dapat ditarik dari hasil penelitian adalah:

1. Penentuan energi eigen pada sumur potensial persegi dilakukan dengan metode matriks transfer dan rumusan analitik. Melalui metode matriks transfer diperoleh tiga tingkat energi eigen dimana masing-masing bernilai 0,02860 eV, 0,11282 eV dan 0,24589 eV, sedangkan pada rumusan analitik diperoleh tiga tingkat tingkat energi eigen masing-masing 0,02854 eV, 0,11185 eV dan 0,24579 eV. Hasil energi eigen yang diperoleh melalui kedua rumusan tersebut hampir sama, dimana persentase perbedaan lebih kecil dari 0,01%.
2. Penentuan energi eigen pada sumur potensial sembarang melalui metode matriks transfer dilakukan dengan membagi 20 selang. Sumur potensial ini memiliki tiga tingkat energi

yang memiliki energi eigen masing-masing 0,10001 eV, 0,19001 eV dan 0,36999 eV.

DAFTAR PUSTAKA

- Bachrathy, D. & Stepan, G.. 2012. Bisection Method in Higher Dimensions and The Efficiency Number. *Mechanical Engineering*, 56/2: 81-86.
- Damayanti, I.D., Surungan, T., Juarlin, E.. 2013. Analisis Dinamika Kuantum Partikel Menggunakan Matriks Transfer. <http://repository.unhas.ac.id/handle/123456789/6754>.
- Eisberg, R. & Resnick, R.. 1985. *Quantum Physics of Atoms, Solids, Nuclei, and Particles: Second Edition*. Santa Barbara: John Wiley & Sons.
- French, A.P. & Taylor, E.F.. 1994. *An Introduction to Quantum Physics*. London: Chapman & Hall.
- Ghatak, A.K., Thyagarajan, K., Shenoy, M.R.. 1988. A Novel Numerical Technique for Solving the One-Dimensional Schrodinger Equation Using Matrix Approach – Application to Quantum Well Structures. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Vol. 24, No. 8.
- Jirauschek, C.. 2009. Accuracy of Transfer Matrix Approaches for Solving The Effective Mass Schrodinger Equation. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, Vol. 45, No. 9.



- Khan, I.. 2011. Analysis of a Finite Quantum Well. *Journal of Electrical Engineering*, Vol. EE 37, No. II.
- Sanchez-Soto, L. L., Monzon, J. J., Barriuso, A. G., Carinena, J.F.. 2012. The Transfer Matrix: A Geometrical Perspective. *Physics Report*, Vol. 513, Issue 4: 191-227.
- Siregar, R.E.. 2010. *FISIKA KUANTUM Teori dan Aplikasinya*. Bandung: Widya Padjadjaran.
- Suarga. 2007. *FISIKA KOMPUTASI Solusi Problema Fisika dengan MATLAB*. Yogyakarta: Penerbit Andi.
- Ying, H., Fan-Ming, Z., Yan-Fang, Y., Chun-Fang, L.. 2010. Energy Eigenvalues from An Analytical Transfer Matrix Method. *Chin. Phys.*, Vol 19, No. 4, 040306.