

SOLUSI METODE NUMERIK BEDA HINGGA PADA VISUALISASI FUNGSI GELOMBANG PERSAMAAN SCHRODINGER POTENSIAL NON SENTRAL COULOMBIC ROSEN MORSE

Cecilia Yanuarief^{1*}, Abdurrahman Al-Faruq¹

¹*Program Studi Fisika Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta*

Jl. Marsda Adisutjipto No. 1, Yogyakarta 55281

Telp : 274-512474, 274-589621 Fax. 274-586117

**E-mail : cecilia.yanuarief@uin-suka.ac.id*

INTISARI

Penelitian ini bertujuan untuk memperlihatkan dalam tampilan grafik nilai fungsi gelombang untuk potensial non sentral Coulombic Rosen Morse menggunakan metode numerik beda hingga. Metode numerik beda hingga menggunakan persamaan Schrodinger dan persamaan diferensial biasa orde II untuk mendapatkan persamaan pendekatan numerik. Persamaan pendekatan numerik kemudian dikerjakan dalam matriks dan dilakukan substitusi balik sehingga didapatkan fungsi gelombang bagian radial dan angular yang divisualisasikan dengan pemrograman komputer berbasis Matlab. Visualisasi fungsi gelombang radial yang terbentuk mendeskripsikan nilai probabilitas ditemukannya elektron pada suatu atom, sedangkan Visualisasi fungsi gelombang angular yang terbentuk memperlihatkan gerakan suatu elektron dalam suatu tingkat energi.

Kata kunci: metode numerik beda hingga, potensial non sentral Coulombic Rosen Morse

ABSTRACT

This research is aimed to show in graphic display wave functions for non central Coulombic Rosen Morse potential by using finite difference method. Finite difference methods use Schrodinger equation and second order ordinary difference equation to have numerical approximation equation. Numerical approximation equation is processed in matrix and treated reverse substitution to result the radial and angular part of wave functions visualized by Matlab based computer programming. The radial wave function visualization which perform are describing the probability values to find the electron of Hydrogen atom, whereas, The radial wave function visualization which perform are describing the probability value of finding an electron in an atom. The angular wave function visualization which perform are describing movement of an electron in a energy level.

Keywords: finite difference numerical methods, non central Coulombic Rosen Morse potential

Pendahuluan

Penelitian banyak dilakukan terhadap berbagai macam hal dari awal perkembangan ilmu pengetahuan sampai sekarang. Keutamaannya dilakukannya penelitian dan pemahaman atas segala hal yang terjadi disebutkan dalam al-qur'an, terdapat dalam surah Al-Imran ayat 190 yang berbunyi:

إِنَّ فِي خَلْقِ السَّمَوَاتِ وَالْأَرْضِ وَآخْتِلَافِ اللَّيْلِ وَالنَّهَارِ لَآيَاتٍ
لِّأُولِي الْأَلْبَابِ

Artinya: “*Sesungguhnya dalam penciptaan langit dan bumi, dan pergantian malam dan siang terdapat tanda-tanda (kebesaran Allah) bagi orang yang berakal*” [1].

Penelitian muncul dari rasa ingin tahu dan ide-ide atas berbagai fenomena yang terjadi baik itu dari yang sederhana sampai yang kompleks. Berbagai objek penelitian terkategori sangat beragam terutama dalam ilmu fisika, baik itu dalam ukuran yang sangat besar seperti planet, bintang, hingga ukuran melebihi tata surya, sampai dalam ukuran yang sangat kecil seperti partikel, atom, hingga unsur-unsur lainnya. Allah berfirman dalam surah Yunus ayat 61:

وَمَا تَكُونُ فِي شَأْنٍ وَمَا تَتْلُو مِنْهُ مِنْ قُرْآنٍ وَلَا تَعْمَلُونَ مِنْ عَمَلٍ إِلَّا
كُنَّا عَلَيْكُمْ شُهُودًا إِذْ تُفِيضُونَ فِيهِ وَمَا يَعْزُبُ عَنْ رَبِّكَ مِنْ مِثْقَالِ ذَرَّةٍ
فِي الْأَرْضِ وَلَا فِي السَّمَاءِ وَلَا أَصْغَرَ مِنْ ذَلِكَ وَلَا أَكْبَرَ إِلَّا فِي كِتَابٍ
مُبِينٍ

Artinya: “*Kamu tidak berada dalam suatu keadaan dan tidak membaca suatu ayat dari Al Quran dan kamu tidak mengerjakan suatu pekerjaan, melainkan Kami menjadi saksi atasmu di waktu kamu melakukannya. Tidak luput dari pengetahuan Tuhanmu biarpun sebesar zarah (atom) di bumi ataupun di langit. Tidak ada yang lebih kecil dan tidak (pula) yang lebih besar dari itu, melainkan (semua tercatat) dalam kitab yang nyata (Lauh Mahfuzh)*” [1]

Menurut tafsir Ibnu Katsir dari dua ayat di atas adalah tentang bagaimana Allah memberitahukan kepada nabi-Nya bahwa Allah selalu mengetahui semua keadaan dan kejadian umatnya serta semua makhluk pada tiap detik waktu. Tidak ada sesuatu pun yang tersembunyi dari pengetahuan-Nya barang sebesar atom pun yang ada di langit dan di bumi, dan tidak ada sesuatu pun yang lebih kecil atau lebih besar daripada itu, kecuali semuanya tercatat di dalam kitab yang nyata. Penafsiran Ibnu Katsir mengenai dua ayat diatas dapat dipahami dan membawa kepada suatu kesimpulan. Penelitian merupakan suatu hakikat yang dilakukan oleh manusia sebagai makhluk yang mempunyai akal pikiran dalam rangka memenuhi perintah Allah dan juga dalam rangka mencari kebaikan dan kesejahteraan peradaban manusia baik untuk individu maupun keseluruhan umat manusia. Segala yang ada pada alam semesta sudah

dalam pengawasan Allah dan merupakan suatu ketetapan, sehingga manusia cukup dipermudah dalam mempelajari, meneliti, dan mendapatkan pengetahuan atas apa yang terdapat di alam semesta.

Adanya penyebutan langit dan bumi dapat dianalogikan kepada bagaimana objek penelitian. Langit yang luasnya tak terbatas dapat dianggap sebagai objek makroskopis yang terdiri dari komponen-komponen yang sangat besar seperti bintang, planet, tata surya serta berbagai sifat fisiknya. Bumi yang merupakan hamparan yang terlingkup dan sangat kecil dibandingkan dengan langit dapat dianggap sebagai objek mikroskopis layaknya objek kuantum. Adanya pergantian siang dan malam menggambarkan terjadinya dinamika alam semesta serta penyebutan *zarrah* juga berarah pada fenomena fisis berukuran mikroskopis.

Berdasarkan sejarah perkembangan ilmu fisika, setelah ada dua sektor penting berupa keluarnya teori relativitas Einstein dan pencapaian metode eksperimental pada tingkat struktur atomik dan subatomik, fisika yang awalnya dikenal sebagai fisika klasik memasuki tahap baru yaitu fisika modern atau juga dikenal sebagai fisika kuantum. Berdasarkan pada hipotesis yang telah dikemukakan oleh de Broglie mengenai dualitas gelombang-partikel, Schrodinger membangun teori mekanika gelombang yang meliputi pergerakan dari partikel mikroskopis dikenal dengan fungsi gelombang. Fungsi gelombang adalah suatu persamaan matematis yang menjelaskan salah satu atau seluruh keadaan suatu partikel dari suatu sistem kuantum terisolasi, juga menunjukkan sifat-sifat gelombang dari partikel. Secara umum fungsi gelombang suatu sistem dapat dinyatakan dalam berbagai besaran fisika seperti momentum, posisi, energi dan sebagainya. Fungsi gelombang memuat amplitudo probabilitas yang menampilkan kemungkinan ditemukannya gelombang dari suatu sistem.

Perkembangan permasalahan yang semakin kompleks merupakan suatu fenomena yang tak terhindari. Berdasarkan hal tersebut maka diperlukan teknik pemecahan masalah. Bentuk dari pilihan alternatif atas permasalahan tersebut adalah metode numerik dan komputasi. Pendekatan metode numerik diperlukan karena penyelesaian yang biasa digunakan tidak mampu menyelesaikan perhitungan. Metode numerik menggunakan model matematis dalam menjelaskan suatu fenomena sehingga dapat meramalkan suatu kejadian di masa depan dalam bentuk suatu prediksi.

Objek yang dijadikan penelitian dalam bidang fisika kuantum berkembang dari waktu ke waktu. Demikian menunjukkan penelitian tentang penyelesaian fungsi gelombang pada persamaan Schrodinger merupakan penelitian yang sangat penting dalam ilmu fisika modern. Berbagai persamaan Schrodinger untuk gerak partikel bermuatan pada potensial-potensial yang membawa sifat kuantum beragam telah dipelajari dan diamati oleh banyak peneliti dengan metode yang berbeda dan dikembangkan. Penelitian yang telah dilakukan oleh beberapa peneliti salah satunya adalah penelitian menggunakan metode Nikiforov-Uvarov dan metode polinomial Romanovski pada potensial Coulomb [2] dan potensial Coulombic Rosen Morse [3]. Contoh penelitian lain adalah menggunakan metode beda hingga pada potensial halang [4] dan persamaan diferensial biasa [5].

Penelitian kali ini berangkat dari penelitian terkait yang menitikberatkan pada penyelesaian fungsi gelombang dan energi dari suatu elektron yang bergerak di dalam potensial non sentral Coulombic Rosen Morse yang merupakan kombinasi antara potensial Coulomb dan potensial non sentral Rosen Morse yang secara sistematis merupakan perwujudan dari atom hidrogen yaitu atom paling sederhana dari semua atom yang diciptakan di alam semesta. Hasil akhir akan ditampilkan dalam bentuk grafik fungsi gelombang dengan proses visualisasi dilakukan dengan menyelesaikan persamaan differensial orde dua schrodinger menggunakan metode numerik beda serta ditampilkan melalui pemrograman komputer berbasis matlab.

Metode Penelitian

Metode beda hingga merupakan suatu metode numerik yang berangkat dari persamaan deret Taylor. Deret Taylor merupakan fungsi matematis sebagai penjumlahan tak hingga dari suku-suku yang memiliki turunan fungsi di suatu titik. Diketahui $u(x)$ merupakan suatu variabel x , deret Taylor ditampilkan sebagai berikut:

$$u(x+h) = u(x) + \frac{h}{1!}u'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) + \dots, \quad (1)$$

$$u(x-h) = u(x) - \frac{h}{1!}u'(x) + \frac{h^2}{2!}u''(x) - \dots \quad (2)$$

dengan $h \rightarrow 0$.

Apabila dilakukan pemotongan deret dengan mengabaikan nilai bilangan setelah suku ketiga, serta dengan metode perbedaan hingga adalah fungsi gelombang u pada titik x tertentu yaitu,

$$x_{i+1} = x_i + h \quad (3)$$

Ketika $h = 0$, $x_1 = x_0 + h$, dengan menggunakan notasi ini maka dari (2) dan (1) akan didapatkan,

$$u'(x_i) = \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{2h}, \quad (4)$$

$$u''(x_i) = \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1}))}{h^2}, \quad (5)$$

Persamaan (4) dan (5) dikenal sebagai nilai pendekatan beda hingga. Keduanya sering kali digunakan untuk penyelesaian persamaan differensial biasa orde dua. Bentuk umum dari persamaan differensial biasa orde dua adalah,

$$\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + p(x)\frac{d\Psi(x)}{dx} + q(x)\Psi(x) = f(x), \quad (6)$$

dengan $u(x)$ merupakan fungsi gelombang satu dimensi, $p(x)$, $q(x)$ dan $f(x)$ masing-masing merupakan koefisien. Jika persamaan (4) dan (5) disubstitusikan kedalam persamaan (6) maka didapatkan,

$$\left[1 - \frac{1}{2}hp(x)\right]u(x_{i-1}) - \left[2 - h^2q(x)\right]u(x_i) + \left[1 + \frac{1}{2}hp(x)\right]u(x_{i+1}) = h^2f(x_i). \quad (7)$$

Persamaan (7) merupakan hasil dari substitusi nilai pendekatan beda hingga ke dalam persamaan diferensial tingkat dua dengan nilai batas. Persamaan ini merupakan bentuk umum dari suatu fungsi gelombang yang melalui proses metode beda hingga. Persamaan ini kemudian disebut persamaan hasil numerik [6].

Potensial non sentral yang merupakan kombinasi dari potensial Coulomb dengan non sentral Rosen Morse [3] adalah,

$$V(r, \theta) = \frac{-e^2}{r} + \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\frac{\nu(\nu+1)}{\sin^2 \theta} - 2\mu \cot \theta \right), \quad (8)$$

dengan persamaan Schrodinger yang digunakan menggunakan koordinat bola sesuai dengan variabel pada potensial persamaan (8), yaitu,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) + V(r) \right] \Psi(r, \theta, \phi) = E\Psi(r, \theta, \phi). \quad (9)$$

Potensial yang digunakan adalah potensial sentral karena hanya dipengaruhi oleh jarak r dari pusat koordinat dengan solusi pemisahan variabel pada persamaan Schrödinger,

$$\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)Y(\theta, \phi) \quad (10)$$

dengan $R(r)$ merupakan fungsi gelombang radial dan $Y(\theta, \phi)$ merupakan fungsi gelombang angular. Menggunakan persamaan (10) tersebut, maka persamaan (9) dapat dituliskan:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \left[\frac{2m_e}{\hbar^2} (E - V(r)) - \frac{\lambda}{r^2} \right] R(r) = 0, \quad (11a)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} + \lambda Y(\theta, \phi) = 0. \quad (11b)$$

Persamaan (11a) diselesaikan menggunakan metode Nikivorov-Uvarov menghasilkan fungsi gelombang radial $R(r)$,

$$R_{n_r, l}(r) = r^l e^{-\delta r} y_{n_r}(r), \quad (12a)$$

dengan

$$y_{n_r}(r) = \frac{B_{n_r}}{r^{(2l+1)} e^{-2\delta r}} \frac{d^{n_r}}{dr^{n_r}} \left[r^{(2l+1)+n_r} e^{-2\delta r} \right]. \quad (12b)$$

B_n merupakan konstanta normalisasi.

Persamaan (12a) diselesaikan menggunakan metode Polinomial Romanovski menghasilkan fungsi gelombang angular $Y(\theta, \phi)$ [3],

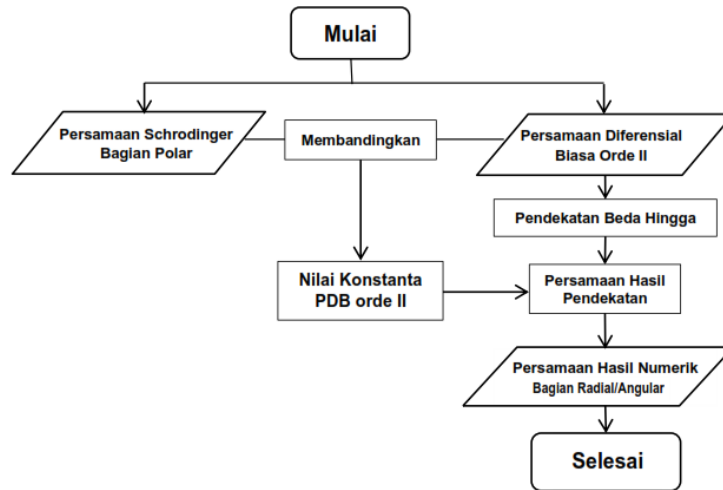
$$Y_l^m = \sqrt{(1+x^2)^{-\sqrt{m^2+v(v+1)-n_l}} e^{\frac{2\mu}{\sqrt{m^2+v(v+1)+n_l+\frac{1}{2}}} \tan^{-1}(x)}} \left(\frac{1}{(1+x^2)^{-\sqrt{m^2+v(v+1)-n_l}} e^{\frac{2\mu}{\sqrt{m^2+v(v+1)+n_l+\frac{1}{2}}} \tan^{-1}(x)}} \frac{d^n}{dx^n} \right) \left[(1+x^2)^{n_l} (1+x^2)^{-\sqrt{m^2+v(v+1)-n_l}} e^{\frac{2\mu}{\sqrt{m^2+v(v+1)+n_l+\frac{1}{2}}} \tan^{-1}(x)} \right] \quad (13)$$

Persamaan (12a), (12b) dan (13) akan memberikan solusi khusus jika nilai bilangan kuantum serta konstanta potensial rosen morse diberikan seperti pada tabel berikut:

Tabel 1. Solusi Khusus Fungsi Gelombang Persamaan Schrodinger Potensial non sentral Coulombic Rosen Morse [3]

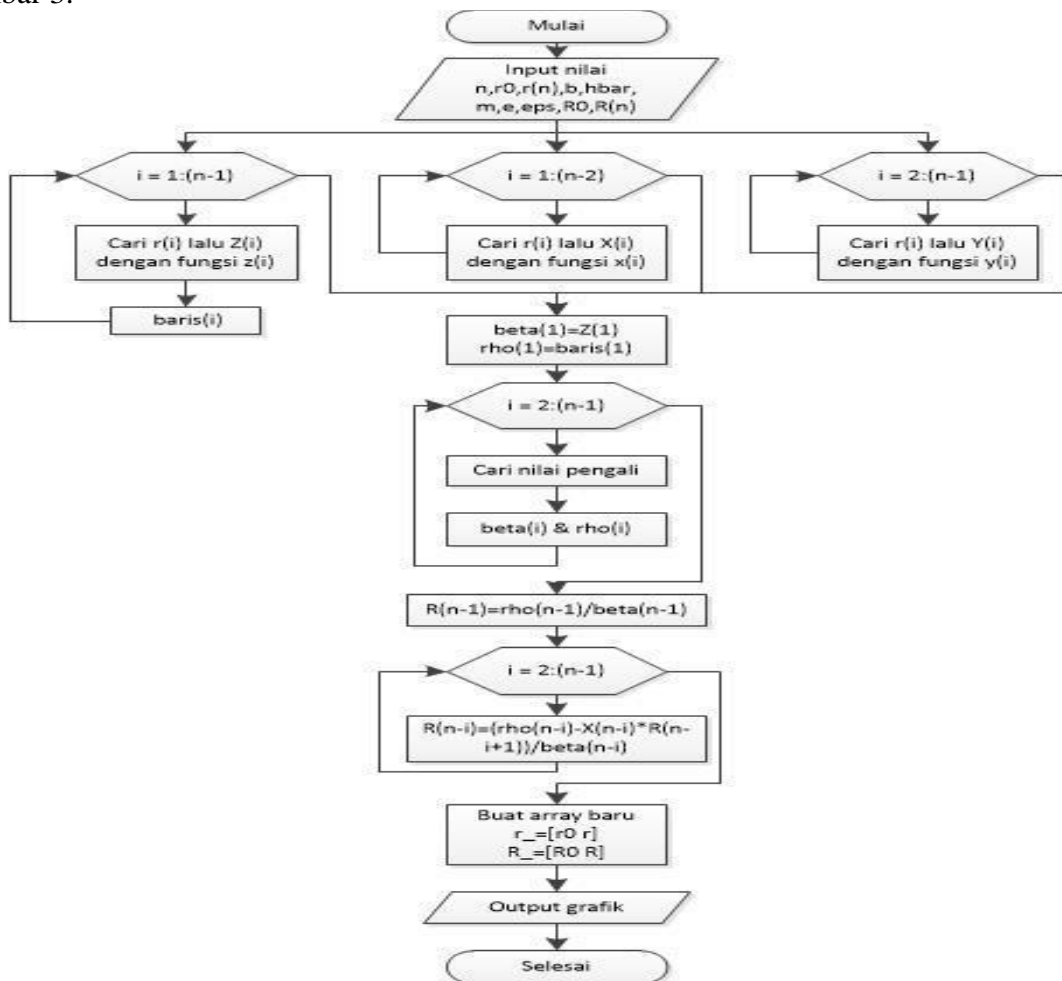
| n_r | n_l | m | v | μ | l | $R_{n_r, l}$ | Y_l^m |
|-------|-------|-----|-----|-------|-----|--|------------------------------|
| 2 | 1 | 1 | 0 | 0 | 2 | $\left[42r^2 - \frac{28}{5} \left(\frac{me^2}{\hbar^2} \right) r^3 + \frac{4}{25} \left(\frac{me^2}{\hbar^2} \right)^2 r^4 \right] e^{-\left(\frac{me^2}{5\hbar^2} \right) r}$ | $-2 \cos \theta \sin \theta$ |

Tahapan pengerjaan numerik ditampilkan dengan diagram alir pada Gambar 1.

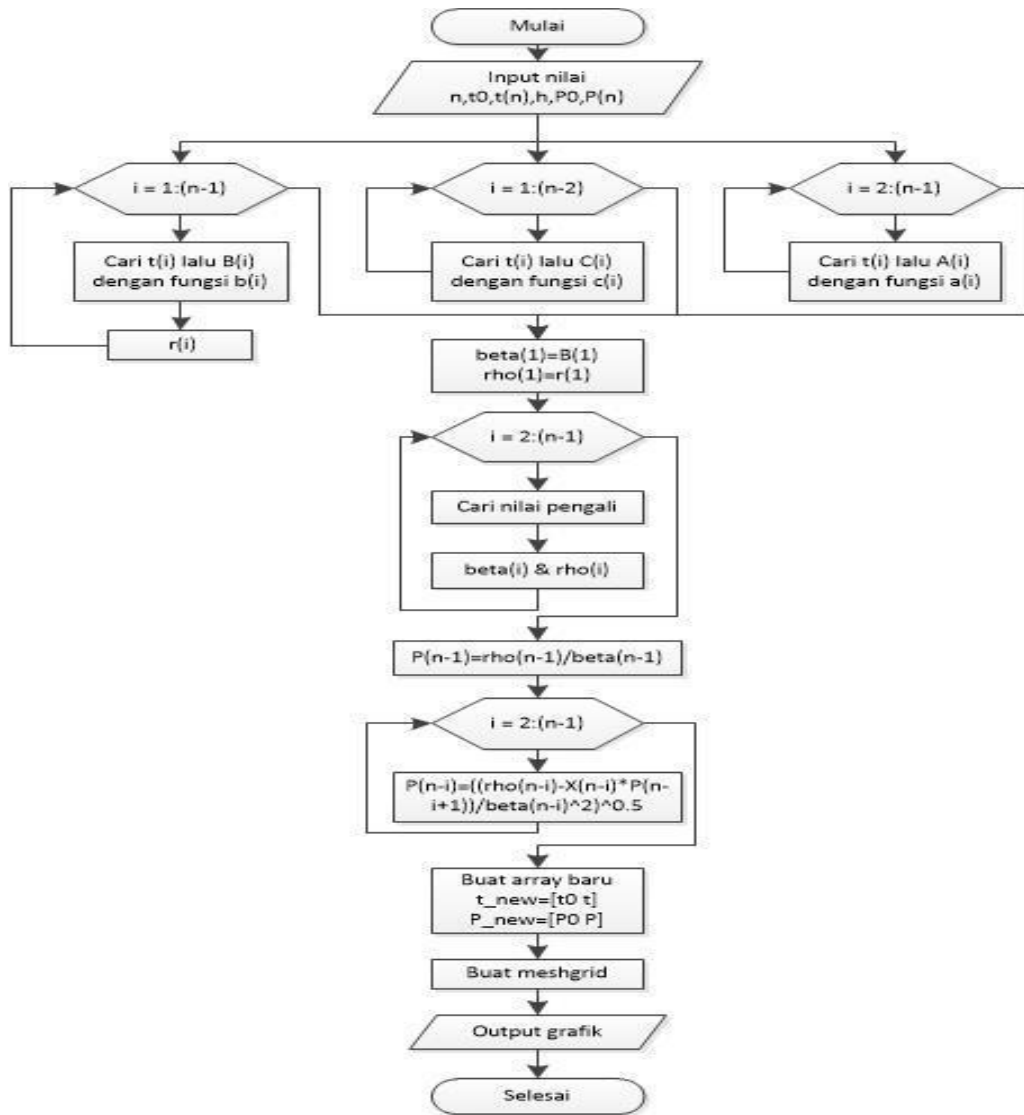


Gambar 1. Diagram alir pengerjaan numerik

Hasil pengerjaan numerik dari Gambar 1 kemudian digunakan untuk menampilkan grafik visualisasi fungsi gelombang melalui pemrograman komputer berbasis bahasa pemrograman matlab. Tahapan pemrograman komputer ditampilkan dengan diagram alir pada Gambar 2 dan Gambar 3.



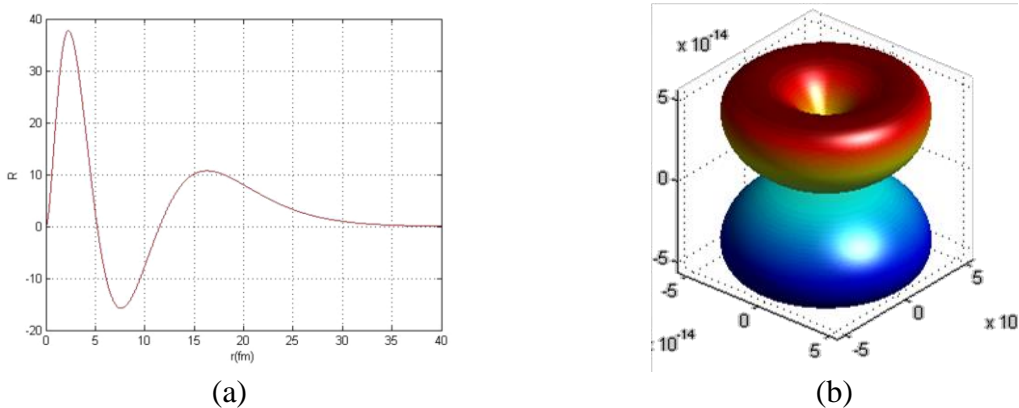
Gambar 2. Diagram alir visualisasi fungsi gelombang radial



Gambar 3. Diagram alir visualisasi fungsi gelombang angular

Hasil dan Pembahasan

Hasil visualisasi fungsi gelombang radial dan angular masing-masing ditunjukkan oleh Gambar 4.



Gambar 4. (a). Fungsi gelombang radial, (b). Fungsi gelombang angular

Program yang dibuat berkerja berdasarkan data-data yang dimasukkan. Pembuatan program untuk fungsi gelombang bagian radial dan fungsi gelombang bagian angular adalah hampir sama. Pertama kali yaitu memasukkan nilai batasan atas dan bawah serta variabel-variabel terkait. Variabel tertentu selain bernilai bilangan konstan yaitu merupakan bentuk fungsi persamaan dibuat terpisah pada *file* yang berbeda namun tetap dalam ekstensi yang sama (dikenal sebagai *function*) dan tetap terhubung dengan *script* program yang menjadi *file* utama. Matriks dibuat sesuai dengan nilai batasan dan variabel-variabel yang telah dimasukkan kemudian diubah melalui eliminasi Gauss menjadi matriks tridiagonal. Penyelesaian matriks diagonal berupa nilai-nilai fungsi gelombang yang berada diantara nilai batasan diperoleh dengan cara substitusi balik secara berurut dimulai dari fungsi gelombang terakhir yang merupakan batas atas sampai ke batas bawah.

Pada fungsi gelombang persamaan Schrodinger bagian radial, sumbu- x merupakan jarak antara elektron terhadap inti atom dan sumbu-y merupakan nilai fungsi gelombang bagian radial. Bentuk lintasan yang terbentuk adalah seperti grafik eksponensial dengan dua bukit dan satu lembah. Nilai sumbu-x adalah dalam satuan fentometer (fm) dan pada sumbu-y adalah tanpa satuan. Lintasan grafik yang terbentuk merupakan hasil yang sesuai dengan program yang telah dibuat. Nilai fungsi merupakan hasil dari substitusi balik. Batasan atas dan Batasan bawah yang merupakan nilai fungsi gelombang persamaan Schrodinger bagian radial telah diberikan diawal pengerjaan dengan nilai variabel $r = 0$ sebagai batasan bawah dan $r = 40$ sebagai batasan atas. Nilai-nilai konstanta fungsi gelombang tiap bagian diskrit disajikan dalam program sebagai matriks tridiagonal. Matriks tersebut dengan dilakukan eliminasi Gauss menyisakan dua konstanta dibaris akhir matriks, sehingga dapat ditentukan nilai fungsi gelombang tepat sebelum batas bawah. Nilai fungsi satu persatu akan diketahui berurutan dari fungsi gelombang bagian batas bawah sampai fungsi gelombang bagian batas atas. Nilai-nilai fungsi gelombang tersebut langsung ditampilkan dalam visualisasi berbentuk grafik fungsi gelombang radial yang mendeskripsikan kebolehjadian posisi ditemukannya elektron dihitung dari titik pusat atom.

Pada fungsi gelombang persamaan Schrodinger bagian angular, grafik yang ditampilkan terdiri dari dua yaitu grafik dua dimensi dan grafik tiga dimensi. Grafik dua dimensi merupakan perpotongan pada bidang sejajar sumbu-y dan sumbu-z dari grafik tiga dimensi. Grafik tiga dimensi sendiri merupakan visualisasi fungsi gelombang bagian angular dan menampilkan bentuk cawan yang simetris atas bawah. Nilai sumbu-x adalah dalam satuan radial dan pada sumbu-y adalah tanpa satuan. Nilai fungsi gelombang bagian angular melalui tahapan urutan yang sama sesuai dengan metode numerik beda hingga. Batasan atas dan batasan bawah merupakan nilai fungsi gelombang bagian radial dengan variabel $\theta = 0$ untuk batas bawah dan $\theta = 3,14$ untuk batas atas. Seluruh nilai fungsi diantara batas atas dan batas bawah diketahui berurutan dari batas bawah sampai batas atas dengan substitusi balik. Grafik yang ditampilkan merupakan gambaran pergerakan elektron pada satu tingkat energi.

Kesimpulan dan Saran

Grafik visualisasi fungsi gelombang persamaan Schrodinger potensial non sentral Coulombic Rosen Morse sebagai hasil dari numerik metode beda hingga terhadap hasil eksak memiliki perbedaan pada bagian angular dapat dilihat dengan tampilan grafik hasil eksak dan hasil numerik. Bagian radial menampilkan hasil yang sama baik berupa bentuk lintasan maupun nilai grafik fungsi gelombang. Perbedaan yang terjadi merupakan hasil dari pemotongan pada deret Taylor sehingga hanya mempengaruhi nilai fungsi gelombang, bukan bentuk lintasan. Oleh karena itu metode numerik beda hingga masih valid digunakan untuk menentukan pola pada potensial dalam sistem yang kontinu. Metode numerik beda hingga hanya merupakan salah satu dari sekian banyak metode pendekatan untuk menyelesaikan persamaan matematis.

Pengadaan penelitian lain menggunakan metode numerik berbeda dapat memunculkan gagasan ide baru atau memperkuat penelitian yang sudah ada. Dapat pula dilakukan metode beda hingga dengan skema selain FTCS seperti dengan Crank-Nicolson yang diketahui memiliki kestabilan yang lebih baik dari FTCS.

Daftar Rujukan

- [1] Penerjemah, T. (2004). *Al-Qur'an dan Terjemahannya*. Jakarta: Departemen Agama RI.
- [2] Berkdemir, C. (2012). Application of the Nikiforov-Uvarov Method in Quantum Mechanics. *Theoretical Concepts of Quantum Mechanics*.
- [3] Yanuarief, C., Suparmi, & Cari. (2012). Analisis Energi dan Fungsi Gelombang Potensial Non Sentral Coulombic Rosen Morse Menggunakan Polinomial Romanovski.
- [4] Lombu, O. Z., Simbolon, T. R., & Ginting, T. (2013). Aplikasi Metode Beda Hingga Pada Persamaan Schrödinger Menggunakan Matlab. *Jurnal Sainia Fisika*, 3(1), 0–6.
- [5] Sangadji. (2008). Metode beda hingga untuk solusi numerik persamaan diferensial. *Jurnal Mat Stat*, 8(9), 132–137.
- [6] Leveque, R. J. (2007). *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations*. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics.