

# Simulasi Dinamika Paket Gelombang Gaussian

Fenfend Florena<sup>1,a)</sup>, Mirda Prisma Wijayanto<sup>1,b)</sup> dan Sparisoma Viridi<sup>2,c)</sup>

<sup>1</sup>Program Studi Magister Fisika,  
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung,  
Jl. Ganesha no. 10 Bandung, Indonesia, 40132

<sup>2</sup>Kelompok Keilmuan Fisika Nuklir dan Biofisika,  
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung,  
Jl. Ganesha no. 10 Bandung, Indonesia, 40132

<sup>a)</sup>fenda.florena@gmail.com (corresponding author)

<sup>b)</sup>mirda.foundation@gmail.com

<sup>c)</sup>dudung@gmail.com

## Abstrak

Solusi persamaan Schrodinger bergantung waktu dapat diselesaikan dengan menggunakan metode Split-Step Fourier. Metode ini membagi time step di ruang koordinat-x menjadi dua half-steps dengan interval waktu yang cukup kecil untuk memberikan solusi numerik yang lebih stabil. Solusi yang diperoleh diantaranya solusi dalam ruang posisi dan momentum yang dapat dihubungkan oleh Fast-Fourier Transform untuk mendapatkan bentuk diskrit sesuai dengan teorema sampling Nyquist-Shannon. Dalam penelitian ini, fungsi gelombang terlokalisasi direpresentasikan oleh paket gelombang Gaussian dengan meninjau dinamikanya dalam sumur potensial tak hingga 1 dimensi, serta efek terobosan oleh potensial tangga dan potensial kotak.

Kata-kata kunci: Persamaan Schrodinger, split-step fourier method, gelombang gaussian

## PENDAHULUAN

Dinamika sistem kuantum dapat dijelaskan dengan menggunakan persamaan Schrodinger. Secara umum, persamaan Schrodinger dapat dituliskan dalam bentuk :

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(\mathbf{r}, t)\rangle}{\partial t} = \mathcal{H} |\psi(\mathbf{r}, t)\rangle \quad (1)$$

Dimana  $\mathcal{H}$  merupakan Hamiltonian sistem. Solusi dari persamaan Schrodinger diberikan oleh fungsi gelombang  $|\psi(\mathbf{r}, t)\rangle$  yang bergantung posisi  $\mathbf{r}$  dan waktu  $t$ . Hamiltonian sistem secara umum didefinisikan oleh,

14.

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t) \quad (2)$$

Secara umum, potensial  $V$  merupakan suatu fungsi bergantung posisi dan waktu yang didefinisikan sebagai  $V(\mathbf{r}, t)$ . Apabila potensial tidak bergantung waktu  $V(\mathbf{r})$  maka solusi dari persamaan Schrodinger adalah keadaan stasioner yang bersifat *separable* antara bagian spasial (ruang) dan waktu. Dapat dituliskan sebagai berikut,

$$|\psi_n(\mathbf{r}, t)\rangle = e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} |\phi_n(\mathbf{r})\rangle \quad (3)$$

dengan  $|\psi_n(\mathbf{r}, t)\rangle$  yang menyatakan keadaan eigen ke- $n$  pada saat  $t$  yang memenuhi persamaan eigen

$$\mathcal{H}(\psi_n(\mathbf{r}, t)) = E_n \psi_n(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

Solusi dari persamaan Schrodinger bergantung waktu merupakan keadaan non stasioner yang tidak lagi bersifat *separable* seperti yang dijelaskan oleh persamaan (3). Secara umum solusi persamaan Schrodinger bergantung waktu dapat dituliskan dalam bentuk :

$$|\psi_n(\mathbf{r}, t)\rangle = \sum_n C_n(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'} |\psi_n(\mathbf{r}, t_0)\rangle \quad (5)$$

dimana  $C_n$  merupakan konstanta kombinasi linear. Secara analitik, solusi persamaan Schrodinger bergantung waktu dapat dipecahkan untuk meninjau dinamika sistem kuantum akibat interaksi dengan lingkungannya. Beberapa metode aproksimasi yang dapat digunakan diantaranya adalah teori perturbasi, metode variasi, serta metode *Wentzel-Kramer-Brillouin* (WKB).

Dalam penelitian ini akan ditinjau solusi persamaan Schrodinger bergantung waktu secara numerik yaitu dengan menggunakan metode *Split-Step Fourier* [1]. Sebagai batasan penelitian, akan ditinjau evolusi dinamika partikel bebas (tanpa interaksi medan luar, interaksi hanya terjadi antara partikel dengan potensial) yang terlokalisasi dalam ruang. Perilaku gelombang dari partikel yang terlokalisasi dapat dideskripsikan oleh paket gelombang  $\psi(x, 0)$  seperti misalnya paket Gelombang Gaussian. Dalam penelitian ini akan dibahas dinamika paket gelombang Gaussian dalam beberapa kasus diantara sumur potensial tak hingga 1 dimensi, serta efek terobosan paket gelombang Gaussian oleh potensial tangga dan potensial kotak.

## METODOLOGI

### Review Persamaan Schrodinger

Untuk kasus dinamika sistem kuantum 1 dimensi (misalnya partikel bergerak pada sumbu- $x$  maka persamaan (1) akan tereduksi dalam bentuk,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + V\psi(x, t) \quad (6)$$

Dapat dilihat bahwa fungsi gelombang bergantung pada posisi ( $x$ ) dan waktu ( $t$ ). Dalam penelitian ini pembahasan hanya dibatasi untuk menjelaskan aplikasi persamaan Schrodinger pada sumur potensial tak hingga 1 + 1 dimensi (Solusi persamaan Schrodinger bergantung waktu), serta efek terobosan pada potensial tangga dan potensial kotak.

#### *Kasus Partikel dalam Sumur Potensial Tak Hingga 1 Dimensi*

Tinjau partikel misalnya elektron dengan massa  $m$  yang hanya dapat bergerak sepanjang sumbu- $x$  didalam sebuah kotak dengan batas - batas  $x = 0$  dan  $x = L$ .

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = 0 \quad (7)$$

Didefinisikan  $E$  sebagai energi partikel. Persamaan Schrodinger tak bergantung waktu dari partikel dapat dituliskan dalam bentuk :

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi + k^2 \psi = 0 \quad (8)$$

dimana,

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (9)$$

Solusi dari persamaan (8) dapat dituliskan dalam bentuk :

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx \quad (10)$$

Dengan  $A$  dan  $B$  merupakan konstanta sembarang. Dengan menggunakan syarat batas dan syarat normalisasi, diperoleh :

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (11)$$

*Kasus Efek Terobosan oleh Potensial Tangga*

Potensial tangga dideskripsikan oleh dua daerah, daerah I ( $x < 0$ ) dan daerah II ( $x > 0$ ). Tinjau partikel yang bergerak dari sebelah kiri dengan energi  $E$ . Persamaan Schrodinger untuk daerah I dan daerah II dapat dituliskan, Daerah I ( $x < 0$ ):

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 = 0 \quad (12)$$

Solusi dari persamaan (12) adalah,

$$\psi_1 = A \exp(ik_1x) + B \exp(-ik_1x) \quad (13)$$

dimana,

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (14)$$

Dengan  $A$  dan  $B$  merupakan konstanta.

Daerah II ( $x > 0$ ):

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}\psi_2 = 0 \quad (15)$$

Diperoleh solusi

$$\psi_2 = C \exp(ik'_2x) + D \exp(-ik'_2x) \quad (16)$$

dimana,

$$k'_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}} \quad (17)$$

dengan  $C$  dan  $D$  merupakan konstanta. Selanjutnya nilai konstanta  $A$ ,  $B$ ,  $C$ , dan  $D$  dapat diperoleh dengan menerapkan syarat batas dan syarat kontinuitas dengan meninjau perbandingan energi partikel terhadap nilai potensial penghalang [2].

*Kasus Efek Terobosan oleh Potensial Kotak*

Tinjau suatu partikel dengan massa  $m$  dengan energi  $E$  yang bergerak dari sebelah kiri kemudian melewati potensial kotak yang didefinisikan sebagai berikut:

Daerah I :  $V(x) = 0$ , untuk  $x < 0$ ; Daerah II :  $V(x) = V$ , untuk  $0 \leq x \leq L$ ; Daerah III:  $V(x) = 0$ , untuk  $x > L$ . Untuk partikel klasik, jika energi partikel lebih besar dari ketinggian penghalang ( $E > V$ ), partikel melewati penghalang tanpa halangan apapun. Di dalam penghalang ( $x < 0 < L$ ), kecepatan partikel mengecil dan di luar penghalang ( $x < 0$  atau  $x > L$ ) partikel akan berperilaku seperti pada keadaan awalnya. Jika  $E < V$  partikel akan dipantulkan dari penghalang dan tidak dapat lagi menembus penghalang. Sedangkan untuk partikel kuantum, jika  $E > V$ , masih terdapat probabilitas terbatas bahwa partikel akan dipantulkan dari penghalang. Jika  $E < V$ , terdapat probabilitas terbatas bahwa partikel akan menembus penghalang dan akan ditemukan di sisi lain penghalang. Dengan demikian mekanika kuantum memungkinkan partikel melalui penghalang yang selanjutnya disebut sebagai efek terowongan (*tunneling effect*). Fenomena ini hanya dapat dijelaskan oleh mekanika kuantum dan tidak memiliki analogi klasik. Persamaan Schrodinger pada ketiga daerah dapat dijabarkan sebagai berikut :

Daerah I:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 = 0 \quad (18)$$

Solusi dari persamaan (18) dapat dituliskan dalam bentuk,

$$\psi_1(x) = A \exp(ik_1x) + B \exp(-ik_1x) \quad (19)$$

dengan

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (20)$$

Daerah II:

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m(E - V)}{\hbar^2}\psi_2 = 0 \quad (21)$$

Solusi dari persamaan (21) dapat dituliskan dalam bentuk,

$$\psi_2(x) = C \exp(k_2x) + D \exp(-k_2x) \quad (22)$$

dengan

$$k'_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V)}{\hbar^2}} \quad (23)$$

Dimana  $k'_2$  bernilai imajiner. Selanjutnya dapat didefinisikan,

$$k'_2 = ik_2 \quad (24)$$

dengan

$$k_2 = \sqrt{\frac{2m(V - E)}{\hbar^2}} \quad (25)$$

Daerah III:

$$\frac{d^2\psi_3}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_3 = 0 \quad (26)$$

$$\frac{d^2\psi_3}{dx^2} + k_3^2\psi_3 = 0 \quad (27)$$

dengan

$$k_3 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = k_1 \quad (28)$$

Solusi dari persamaan (27) dapat dituliskan dalam bentuk,

$$\psi_3(x) = F \exp(ik_1x) + G \exp(-ik_1x) \quad (29)$$

### Review Metoda Split-Step Fourier

Dalam pembahasan sebelumnya telah diuraikan solusi persamaan Schrodinger dalam berbagai kasus secara analitik. Berikut akan diuraikan solusi persamaan Schrodinger secara numerik yang menjadi inti dari penelitian ini. Terdapat beberapa metode yang dapat digunakan untuk menyelesaikan persamaan diferensial seperti persamaan Schrodinger diantaranya metode Numerov, metode *finite-difference*, metode *split-step Fourier* dan lain sebagainya [3-5]. Dalam penelitian ini analisis dilakukan menggunakan metode *split-step Fourier* dengan melibatkan *Fast-Fourier Transform* (FFT). Simulasi akan dilakukan dengan menggunakan bahasa pemrograman Python. Terdapat 3 kasus yang akan diselesaikan secara numerik dengan metode tersebut diantaranya kasus dinamika partikel dalam sumur potensial tak hingga, potensial tangga, serta potensial kotak. Perilaku partikel dapat diaproksimasi sebagai dinamika paket gelombang sebagai solusi dari persamaan Schrodinger bergantung waktu. Persamaan Schrodinger dapat dituliskan dalam bentuk umum ( $\hbar = 1$ ) sebagai berikut :

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = i\mathcal{L}\psi + i\mathcal{N}\psi \quad (30)$$

untuk Persamaan Schrodinger Bergantung Waktu, maka berlaku

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \mathcal{N} = -V(x) \quad (31)$$

Operator evaluasi waktu diberikan oleh:

$$\psi(x, t_0 + t) = \exp(i(\mathcal{L} + \mathcal{N})t) \psi(x, t_0) \quad (32)$$

Bentuk eksponensial pada persamaan (32) dapat dipecah untuk  $\mathcal{L}$  dan  $\mathcal{N}$  jika memenuhi  $[\mathcal{L}, \mathcal{N}] = 0$ . Kondisi ini dapat berlaku untuk interval waktu yang kecil  $\Delta t$ , dimana hubungan komutasi dapat diasumsikan benar dengan error pada orde  $\Delta t^2$ . Metode pemecahan suku eksponensial dengan menganggap interval waktu cukup kecil tersebut, dinamakan sebagai metode *Split-Step Fourier*. Langkah pertama yang dilakukan adalah dengan (sementara) mengabaikan suku  $\mathcal{L}$  pada interval waktu  $[t_0, t_0 + \frac{\Delta t}{2}]$ . Dengan hanya menyisakan suku  $\mathcal{N}$  di ruas kanan, maka persamaan (30) akan tereduksi menjadi persamaan diferensial biasa (dalam ruang koordinat kartesian) dengan solusi yang berbentuk:

$$\psi\left(x, t_0 + \frac{\Delta t}{2}\right) = \exp\left(\frac{i\Delta t\mathcal{N}}{2}\right)\psi(x, t_0) \quad (33)$$

Langkah selanjutnya adalah dengan (sementara) mengabaikan suku  $\mathcal{N}$ . Dengan hanya menyisakan suku  $\mathcal{L}$  diruas kanan, maka persamaan (30) akan tereduksi sebagai persamaan diferensial dalam ruang momentum, misalnya dinotasikan sebagai  $k$ . Dalam interval waktu penuh  $\Delta t$  solusinya dapat dituliskan dalam bentuk :

$$\tilde{\psi}(k, t_0 + \Delta t) = \exp(i\Delta t \mathcal{F}(\mathcal{L})) \tilde{\psi}(k, t_0) = \exp\left(\frac{-i\Delta t k^2}{2m}\right) \tilde{\psi}(k, t_0) \quad (34)$$

Untuk menentukan  $\tilde{\psi}(k, t_0)$  digunakan Transformasi Fourier dari hasil *time half step* pada persamaan (33). Sebagai langkah terakhir dihitung domain ruang (spasial) tambahan dari *time half step* untuk memulihkan aproksimasi *split-step* terhadap operator evolusi waktu  $\mathcal{L} + \mathcal{N}$  oleh  $\Delta t$ . Dalam bentuk lengkap, proses tersebut dapat dituliskan sebagai berikut:

$$\psi(x, t_0 + \Delta t) = \exp\left(\frac{i\Delta t \mathcal{N}}{2}\right) \mathcal{F}^{-1}\left(\exp(i\Delta t \mathcal{F}(\mathcal{L})) \mathcal{F}\left(\exp\left(\frac{i\Delta t \mathcal{N}}{2}\right) \psi(x, t_0)\right)\right) \quad (35)$$

Dalam metode *split-step* bentuk transformasi  $\tilde{\psi}(k, t_0)$  dari  $\psi(x, t_0)$  dilakukan dengan menggunakan *Fast Fourier Transform (FFT)* [6-8] dari *library SciPy*. Oleh karena itu perlu dipertimbangkan sifat - sifat diskrit dari input yang akan digunakan dengan cara melakukan diskritisasi terhadap  $\psi(x, t_0)$ . Caranya adalah dengan merubah pasangan Transformasi Fourier yang kontinu  $\psi(x, t) \leftrightarrow \tilde{\psi}(k, t)$  menjadi pasangan diskrit  $\psi(x_n, t) \leftrightarrow \tilde{\psi}(k_m, t)$ ; nilai  $x$  dan  $k$  pada aproksimasi kontinu diubah dalam bentuk indeks  $m$  dan  $n$  dalam aproksimasi diskrit. Berawal dari Transformasi Fourier kontinu, dapat dibentuk aproksimasi diskrit dengan menggunakan jumlah Riemann sebagai berikut:

$$\tilde{\psi}(k, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) e^{-ikx} dx \rightarrow \tilde{\psi}(k_m, t) \approx \frac{\Delta x}{\sqrt{(2\pi)}} \sum_{n=0}^{N-1} \psi(x_n, t) e^{-ik_m x_n} \quad (36)$$

Dengan demikian dapat diperoleh pasangan Transformasi Fourier diskrit :

$$\frac{\Delta x}{\sqrt{(2\pi)}} \psi(x_n, t) e^{-ik_0 x_n} \leftrightarrow \tilde{\psi}(k_m, t) e^{im\Delta k x_0} \quad (37)$$

dimana,

$$\Delta k = \frac{2\pi}{(N \Delta x)} \quad (38)$$

Perhatikan bahwa dengan membatasi kisaran nilai  $x$  (bernilai diskrit), maka juga diperlukan batasan untuk kisaran nilai  $k$ . Akibatnya komponen frekuensi tinggi dari gelombang akan hilang dalam aproksimasi *Split-Step Fourier*. Hal ini sesuai dengan *Teorema Sampling Nyquist-Shannon* yang menyatakan bahwa kondisi tersebut merupakan konsekuensi yang tidak dapat dihindari ketika memilih langkah-langkah diskrit dalam ruang [9,10] . Perlu dicatat bahwa fungsi gelombang hanya diperbolehkan bergerak didalam ruang, tidak boleh melewati batas ruang tersebut. Oleh karena itu domain ruang harus cukup besar dan fungsi gelombang awal harus dipilih sedemikian rupa, pada umumnya dipilih paket gelombang Gaussian.

$$\psi_3(x) = F \exp(ik_1 x) + G \exp(-ik_1 x) \quad (39)$$

### Paket Gelombang Gaussian

Sebuah paket gelombang Gaussian dapat digunakan untuk menyelidiki evolusi dinamika partikel kuantum karena sifatnya yang terlokalisasi baik di ruang nyata (misal dalam koordinat kartesian) maupun ruang momentum. Mengingat paket gelombang Gaussian dapat menyebar dari waktu ke waktu maka diperlukan pemilihan fungsi gelombang awal yang sesuai untuk menjaga paket gelombang tetap terlokalisasi cukup lama dalam suatu ruang [11-13]. Paket gelombang awal dapat didefinisikan dalam bentuk:

$$\psi(x, t_0 + \Delta t) \propto \exp\left(\frac{-(x - x_0)^2}{4 \sigma_0^2} + ik_0 x\right) \quad (40)$$

Dimana,

$$\sigma^2(t) = \sigma_0^2 + \frac{1}{\sigma_0^2} \frac{t^2}{4m^2} \quad (41)$$

Dalam penjarannya, profil paket gelombang dapat memiliki amplitudo tetap (non dispersif) atau berubah (dispersif).

### Simulasi

Simulasi dilakukan dengan menggunakan metode Split-Step Fourier. Metode yang digunakan dalam penelitian ini memodifikasi simulasi dasar persamaan *Schrodinger* dengan SSFM yang pertama kali dikembangkan oleh Jake Vanderplas [14] .

Didefinisikan transformasi Fourier :

$$\tilde{\psi}(k, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) e^{-ikx} dx \quad (42)$$

dan bentuk inversnya,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k, t) e^{ikx} dx \quad (43)$$

Substitusi persamaan (43) kedalam persamaan (6) sehingga diperoleh,

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tilde{\psi} + V \left( i \frac{\partial}{\partial k} \right) \tilde{\psi} \quad (44)$$

Langkah selanjutnya adalah menentukan solusi persamaan tersebut dengan metode *split-step* serta menghubungkan kedua solusi dengan menggunakan *fast-fourier transform*. Persamaan (6) dalam ruang koordinat  $x$  akan tereduksi menjadi :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = V(x) \quad (45)$$

untuk nilai *time-step*  $\Delta t$  yang kecil dapat dituliskan,

$$\psi(x, t + \Delta t) = \psi(x, t) e^{-\frac{i}{\hbar} V(x) \Delta t} \quad (46)$$

Sedangkan dalam ruang momentum  $k$  solusi dari persamaan (44) akan tereduksi menjadi persamaan :

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{k^2} \tilde{\psi} \quad (47)$$

untuk nilai *time-step*  $\Delta t$  yang kecil dapat dituliskan,

$$\tilde{\psi}(k, t + \Delta t) = \tilde{\psi}(k, t) e^{-\frac{i\hbar k^2}{2m} \Delta t} \quad (48)$$

Untuk melakukan diskritisasi terhadap fungsi gelombang input, didefinisikan *Fast-Fourier Transform* yang secara umum dapat dituliskan dalam bentuk :

$$\tilde{\mathcal{F}}_m = \sum_{n=0}^{N-1} cF_n e^{-2\pi i n m / N} \quad (49)$$

dan bentuk inversnya,

$$\mathcal{F} = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \tilde{\mathcal{F}}_m e^{-2\pi i n m / N} \quad (50)$$

Mekanisme transformasi dari pasangan Fourier kontinu dari persamaan (42) dan (43) menjadi pasangan Fourier diskrit dapat dilakukan dengan melakukan aproksimasi integral tak hingga menjadi integral berhingga dengan batas bawah  $a$  dan batas atas  $b$ . Dapat dituliskan,

$$\tilde{\psi}(k, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) e^{-ikx} dx \rightarrow \tilde{\psi}(k, t) = \frac{1}{2\pi} \int_a^b \psi(x, t) e^{-ikx} dx \quad (51)$$

dengan asumsi bahwa  $V(x) \rightarrow \infty$  untuk  $x \leq a$  dan  $x \geq b$ . Selanjutnya untuk merubah bentuk integral berhingga menjadi bentuk diskrit seperti ditunjukkan oleh persamaan (49-50), maka digunakan jumlah Riemann dari jumlah *time-step*  $N$  dengan mendefinisikan,

$$\Delta x = \frac{(b-a)}{N} \quad (52)$$

$$x_n = a + n\Delta x \quad (53)$$

Dengan demikian persamaan (51) dapat dituliskan menjadi,

$$\tilde{\psi}(k, t) = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=0}^{N-1} \psi(x_n, t) e^{-ik_m x_n} \Delta x \quad (54)$$

Selanjutnya didefinisikan:  $k_m = k_0 + \Delta k$  dengan  $\Delta k = \frac{2\pi}{(N \Delta x)}$ . Sehingga persamaan (51) dapat dituliskan dalam bentuk :

$$\tilde{\psi}(k_m, t) \approx \frac{1}{2\pi} \sum_{n=0}^{N-1} \psi(x_n, t) e^{-ik_m x_n} \Delta x \quad (55)$$

Pemilihan nilai  $k_m$  akan memenuhi teorema *Nyquist-Shannon Sampling* jika dipilih  $k_0 = \frac{2\pi}{(N \Delta x)}$ . Dengan demikian persamaan (55) dapat dituliskan kembali dalam bentuk :

$$\tilde{\psi}(k_m, t) \approx \frac{\Delta x}{2\pi} \sum_{n=0}^{N-1} \psi(x_n, t) \exp \left( -ix_n \left( k_0 + \frac{m2\pi}{N\Delta x} \right) \right) \quad (56)$$

$$\begin{aligned} &\approx \sum_{n=0}^{N-1} \left[ \frac{\Delta x}{2\pi} \psi(x_n, t) \exp(-ik_0 x_n) \right] \exp\left(\frac{-i2\pi m(a + n\Delta x)}{N\Delta x}\right) \\ \tilde{\psi}(k_m, t) \exp\left(\frac{2\pi ima}{N\Delta x}\right) &\approx \sum_{n=0}^{N-1} \left[ \frac{\Delta x}{2\pi} \psi(x_n, t) \exp(-ik_0 x_n) \right] \exp\left(\frac{-2\pi imn}{N}\right) \\ \tilde{\psi}(k_m, t) \exp(imx_0 \Delta k) &\approx \sum_{n=0}^{N-1} \left[ \frac{\Delta x}{2\pi} \psi(x_n, t) \exp(-ik_0 x_n) \right] \exp\left(\frac{-2\pi imn}{N}\right) \end{aligned} \quad (57)$$

dimana,

$$\frac{2\pi ima}{N\Delta x} = imx_0 \Delta k \rightarrow \frac{2\pi a}{N\Delta x} = x_0 \Delta k \quad (58)$$

$$\frac{2\pi}{N\Delta x} = \Delta k \quad (59)$$

dengan  $a = x_0$ . Bentuk transformasi Fourier inversnya dapat dituliskan dalam bentuk :

$$\left[ \frac{\Delta x}{2\pi} \psi(x_n, t) \exp(-ik_0 x_n) \right] = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \tilde{\psi}(k_m, t) \exp(imx_0 \Delta k) \exp\left(\frac{-2\pi imn}{N}\right) \quad (60)$$

Secara umum dapat disimpulkan bahwa, pasangan Fourier kontinu :

$$\psi(x, t) \leftrightarrow \tilde{\psi}(k, t) \quad (61)$$

Bersesuaian dengan pasangan Fourier diskrit

$$\frac{\Delta x}{\sqrt{2\pi}} \psi(x, t) \exp(-ik_0 x_n) \leftrightarrow \tilde{\psi}(k_m, t) \exp(-imx_0 \Delta k) \quad (62)$$

Secara keseluruhan dapat dirangkum Algoritma yang digunakan dalam penelitian ini adalah:

- 1) Tentukan a, b, dan  $k_0$  yang merepresentasikan keadaan awal dari fungsi gelombang  $\psi$ . Selanjutnya, tentukan  $\Delta x, \Delta k, x_n$  dan  $k_m$
- 2) Diskritisasi komponen fungsi gelombang input, meliputi :  $\psi_n(t), V_n(t), \tilde{\psi}_m(t)$ .
- 3) Digunakan *time-step*  $t' \rightarrow t + \Delta t$ , dimana  $\Delta t$  cukup kecil.
- 4) Hitung *half-step* di  $x$ :  $\psi_n \leftarrow \psi_n \exp\left(-i\left(\frac{\Delta t}{2}\right)\left(\frac{V_n}{\hbar}\right)\right)$
- 5) Hitung  $\tilde{\psi}_m$  dari  $\psi_m$  dengan menggunakan *Fast Fourier Transform*
- 6) Hitung *full step* di  $k$ :  $\tilde{\psi}_m \leftarrow \tilde{\psi}_m \exp\left(\frac{-ik(k,k)\Delta t}{(2m)}\right)$
- 7) Hitung  $\psi_n$  dari  $\tilde{\psi}_m$  dengan menggunakan *invers Fast Fourier Transform*
- 8) Hitung *half-step* kedua pada  $x$ :  $\psi_n \leftarrow \psi_n \exp\left(-i\left(\frac{\Delta t}{2}\right)\left(\frac{V_n}{\hbar}\right)\right)$
- 9) Ulangi langkah (3) hingga didapatkan bentuk keadaan awal dari paket gelombang yang akan disimulasikan.
- 10) Modifikasi bentuk potensial dengan mengatur:
  - (a)  $V_0$  = tinggi potensial
  - (b)  $L$  = Lebar Potensial

## HASIL DAN PEMBAHASAN

### Simulasi Dinamika Paket Gelombang Gaussian dalam Sumur Potensial tak Hingga 1+1 Dimensi

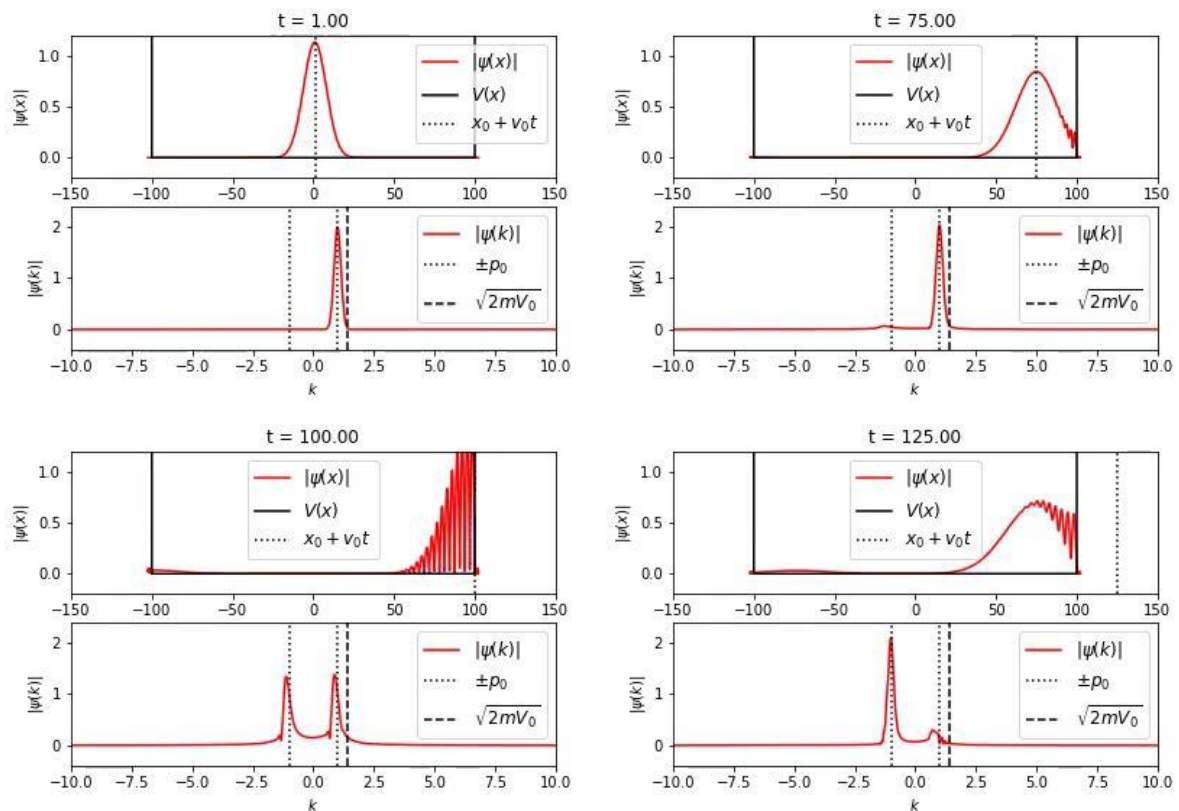
Nilai parameter untuk simulasi dinamika paket gelombang Gaussian dalam sumur potensial tak hingga 1+1 dimensi diberikan dalam Tabel 1.

Tabel 1. Parameter simulasi dinamika paket gelombang Gaussian dalam sumur potensial tak hingga 1+1 dimensi

$dt$	$t_{max}$	$N_{steps}$	$V_0$	$L$	$a$	$K_0$
0.01	500	100	$\infty$	200	0	0

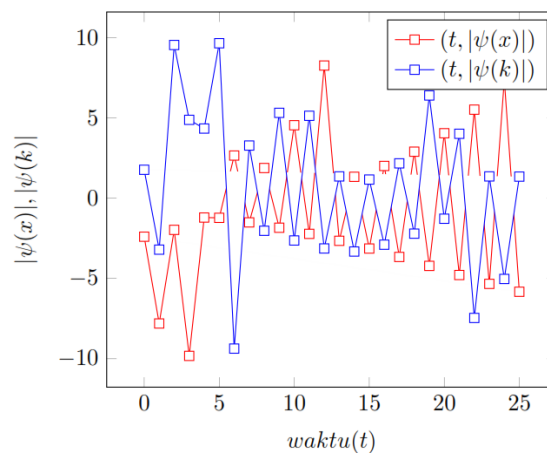
Hasil simulasi dinamika partikel kuantum dalam sumur potensial tak hingga 1+1 dimensi ditampilkan pada Gambar 1. Tinjau kasus propagasi paket gelombang Gaussian dalam sumur potensial tak hingga 1 dimensi dengan lebar sumur  $L = 200$ . Partikel diasumsikan pada awalnya berada di pusat sumur ( $x = 0$ ) dan kemudian bergerak ke kanan dengan kecepatan  $v$ . Diasumsikan energi partikel jauh lebih kecil daripada energi potensial sehingga partikel hanya dapat bergerak di sepanjang dinding. Ketika mengenai dinding potensial, maka paket gelombang

akan mengalami penyebaran dimana amplitudonya semakin besar dan terpecah menjadi kumpulan gelombang sinusoidal hingga kemudian memantul kembali pada arah yang berlawanan. Pada kondisi ini, momentum partikel juga meningkat. Partikel akan terus bergerak didalam dinding dan beresilasi ketika menumbuk dinding. Karena paket gelombang bersifat dispersif maka semakin lama mengalami tumbukan dengan dinding, amplitudo paket gelombang akan semakin mengecil hingga waktu tertentu. Data hasil simulasi sudah sesuai dengan teori dimana tidak ada fungsi gelombang yang bertransmisi keluar dinding, sehingga diluar dinding probabilitas menemukan partikel akan bernilai nol.



Gambar 1. Simulasi dinamika partikel dalam sumur potensial tak hingga 1+1 dimensi yang direpresentasikan oleh paket gelombang Gaussian pada berbagai waktu  $t$

Gambar 2 menunjukkan hubungan amplitudo paket gelombang Gaussian dalam ruang koordinat  $|\psi(x)|$  dan ruang momentum  $|\psi(k)|$  terhadap waktu ( $t$ ) ketika bergerak dalam sumur potensial tak hingga 1+1 dimensi.



Gambar 2. Grafik hubungan amplitudo dalam ruang koordinat  $|\psi(x)|$  dan ruang momentum  $|\psi(k)|$  terhadap waktu ( $t$ ) ketika bergerak dalam sumur potensial tak hingga 1+1 dimensi



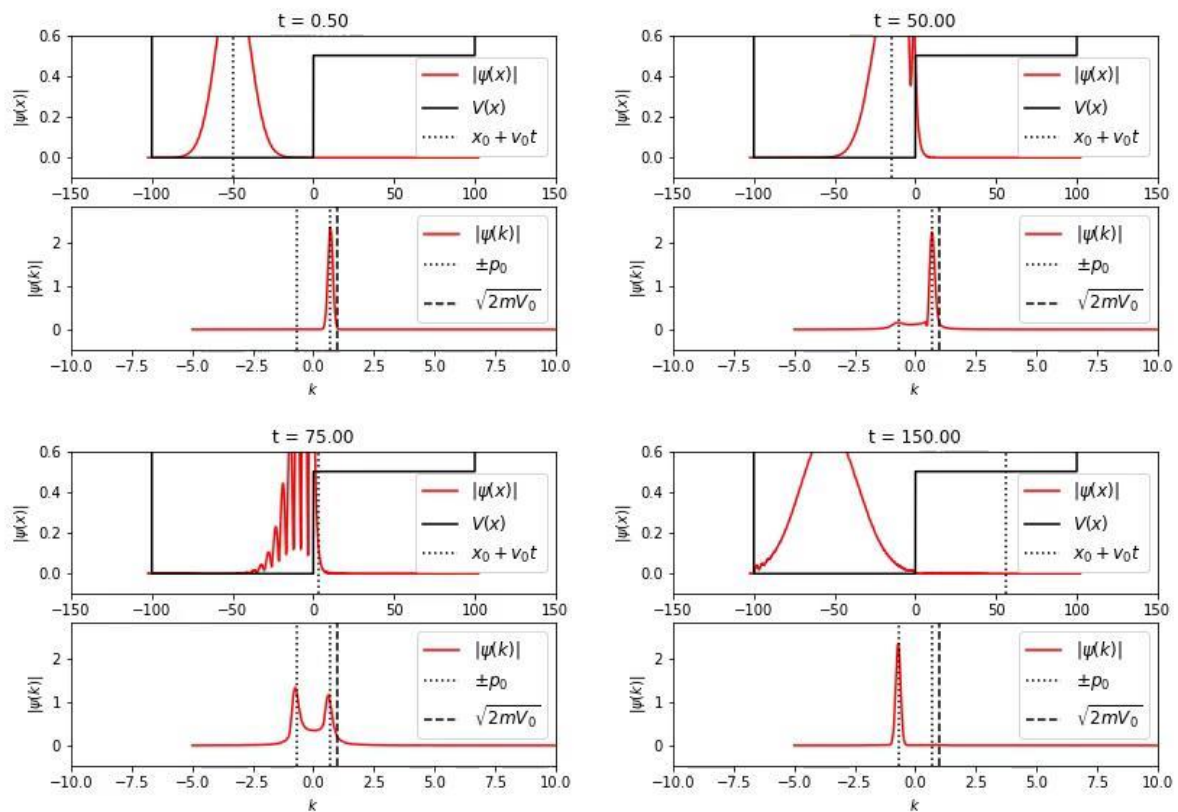
## Simulasi Efek Terobosan Paket Gelombang Gaussian oleh Potensial Tangga

Nilai parameter untuk simulasi dinamika paket gelombang Gaussian oleh potensial tangga diberikan dalam Tabel 2.

Tabel 2. Parameter simulasi dinamika paket gelombang Gaussian oleh potensial tangga untuk  $E < V$

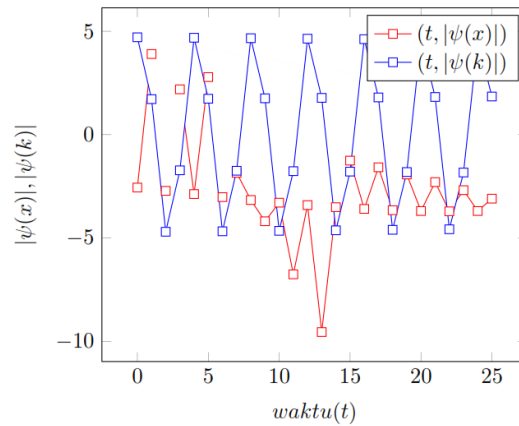
$dt$	$t_{max}$	$N_{steps}$	$V_0$	$L$	$a$	$K_0$
0.01	300	50	0.50	200	100	-50

Hasil simulasi dinamika partikel kuantum oleh potensial tangga untuk energi  $E < V$  ditampilkan pada Gambar 3. Secara klasik, jika energi partikel  $E$  lebih kecil dari potensial  $V_0$  maka seluruh partikel akan dipantulkan kembali pada arah yang berlawanan dengan semula. Akan tetapi untuk partikel kuantum, meskipun  $E < V$  masih terdapat probabilitas partikel bertransmisi melewati penghalang. Fenomena tersebut selanjutnya disebut sebagai efek terobosan (*tunneling effect*). Berdasarkan data hasil simulasi dapat dilihat bahwa masih ada partikel yang mampu bertransmisi melewati penghalang, ditandai dengan fungsi gelombang  $\psi(x)$  berwarna merah di sebelah kanan batas penghalang ( $x > 0$ ). Sebagian besar partikel dipantulkan kembali dan beresilasi ketika menumbuk dinding seperti pada kasus pertama. Begitu pula untuk penghalang berupa potensial kotak pada kasus ketiga. Untuk  $E < V$  masih terdapat probabilitas partikel melewati kotak. Secara keseluruhan data hasil penelitian telah sesuai dengan teori.



Gambar 3. Simulasi dinamika partikel oleh sumur potensial tangga untuk  $E < V$  yang direpresentasikan oleh paket gelombang Gaussian pada berbagai waktu  $t$

Gambar 4 menunjukkan hubungan amplitudo paket gelombang Gaussian dalam ruang koordinat  $|\psi(x)|$  dan ruang momentum  $|\psi(k)|$  terhadap waktu ( $t$ ) ketika melalui potensial penghalang tangga untuk  $E < V$ .



Gambar 4. Grafik hubungan amplitudo dalam ruang koordinat  $|\psi(x)|$  dan ruang momentum  $|\psi(k)|$  terhadap waktu ( $t$ ) ketika melewati potensial tangga untuk  $E < V$

### Simulasi Efek Terobosan Paket Gelombang Gaussian oleh Potensial Kotak

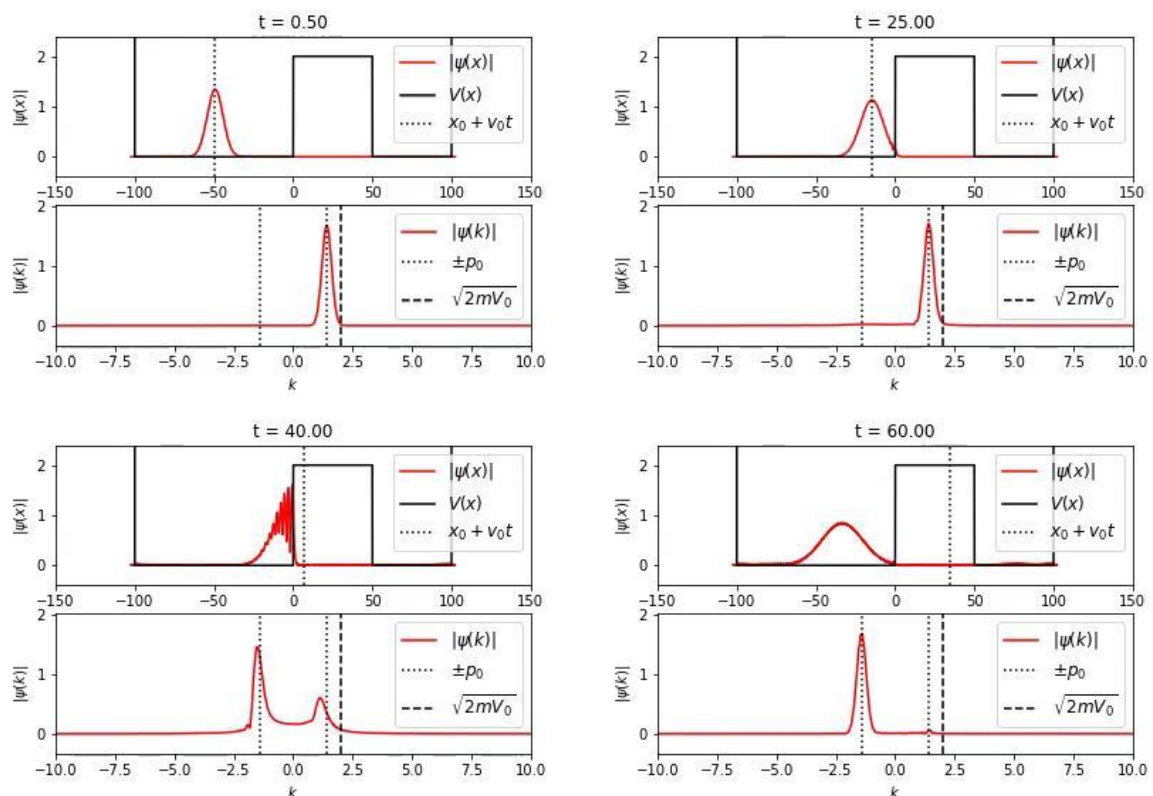
Nilai parameter untuk simulasi dinamika paket gelombang Gaussian oleh potensial tangga diberikan dalam Tabel 3.

Tabel 3. Parameter simulasi dinamika paket gelombang Gaussian oleh potensial kotak untuk  $E < V$

$dt$	$t_{max}$	$N_{steps}$	$V_0$	$L$	$a$	$K_0$
0.01	100	50	2	200	100	-100

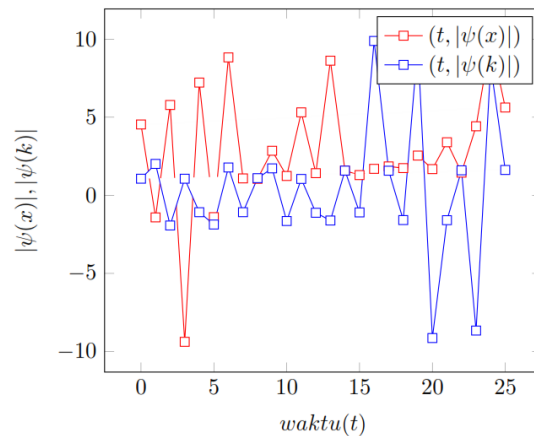
Hasil simulasi dinamika partikel kuantum oleh potensial kotak untuk energi  $E < V$  ditampilkan pada Gambar 5.

Untuk  $E < V$



Gambar 5. Simulasi dinamika partikel oleh sumur potensial kotak untuk  $E < V$  yang direpresentasikan oleh paket gelombang Gaussian pada berbagai waktu  $t$

Gambar 6 menunjukkan hubungan amplitudo paket gelombang Gaussian dalam ruang koordinat  $|\psi(x)|$  dan ruang momentum  $|\psi(k)|$  terhadap waktu ( $t$ ) ketika melalui potensial penghalang kotak untuk  $E < V$ .



Gambar 6. Grafik hubungan amplitudo dalam ruang koordinat  $|\psi(x)|$  dan ruang momentum  $|\psi(k)|$  terhadap waktu ( $t$ ) ketika melewati potensial kotak untuk  $E < V$

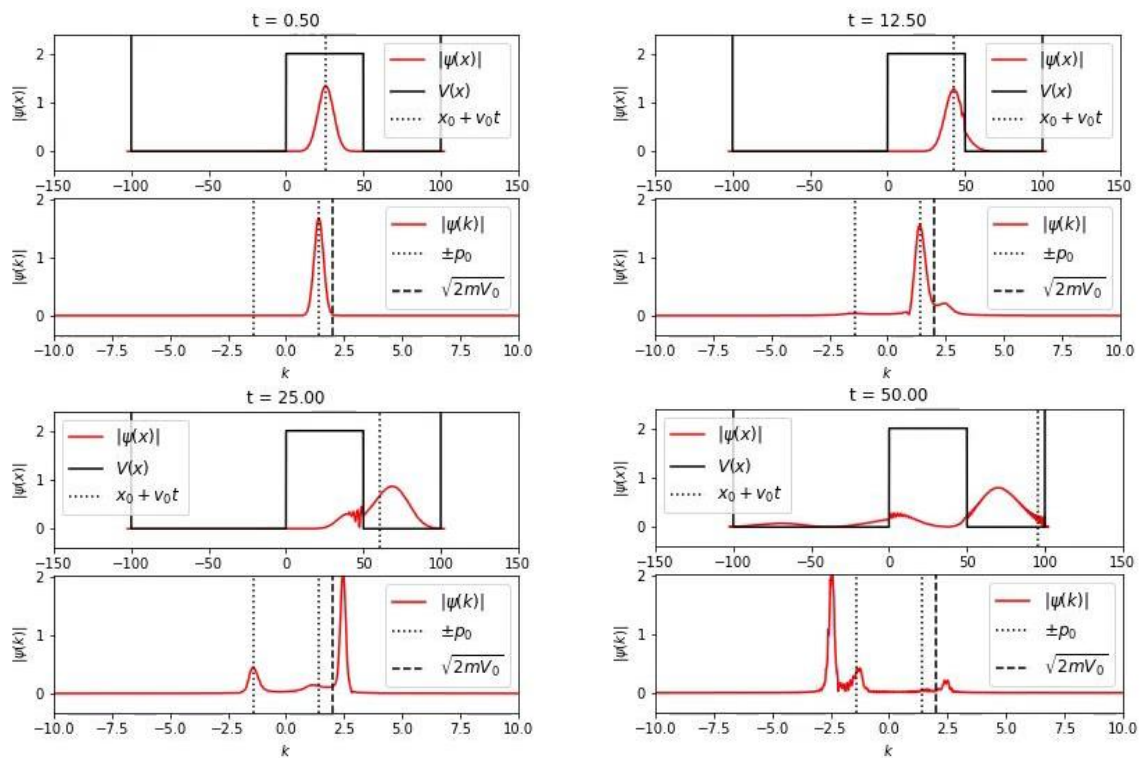
Untuk  $E > V$

Nilai parameter untuk simulasi dinamika paket gelombang Gaussian oleh potensial tangga diberikan dalam Tabel 4.

Tabel 4. Parameter simulasi dinamika paket gelombang Gaussian oleh potensial kotak untuk  $E > V$

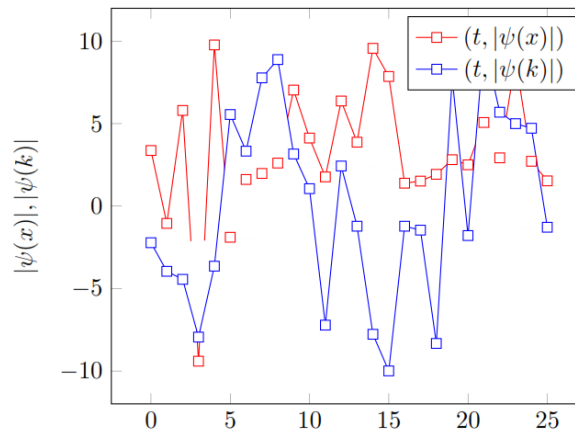
$dt$	$t_{max}$	$N_{steps}$	$V_0$	$L$	$a$	$K_0$
0.01	100	50	2	200	100	50

Hasil simulasi dinamika partikel kuantum oleh potensial kotak untuk energi  $E > V$  ditampilkan pada Gambar 7.



Gambar 7. Simulasi dinamika partikel oleh sumur potensial kotak untuk  $E > V$  yang direpresentasikan oleh paket gelombang Gaussian pada berbagai waktu  $t$

Gambar 8 menunjukkan hubungan amplitudo paket gelombang Gaussian dalam ruang koordinat  $|\psi(x)|$  dan ruang momentum  $|\psi(k)|$  terhadap waktu ( $t$ ) ketika melalui potensial penghalang tangga untuk  $E > V$ .



Gambar 8. Grafik hubungan amplitudo dalam ruang koordinat  $|\psi(x)|$  dan ruang momentum  $|\psi(k)|$  terhadap waktu ( $t$ ) ketika melewati potensial kotak untuk  $E > V$

## KESIMPULAN

Dalam penelitian ini telah dikaji pemodelan dinamika paket gelombang Gaussian dengan pendekatan numerik yaitu menggunakan metode *SplitStep Fourier*. Sebuah paket gelombang dapat diaproksimasi sebagai kumpulan komponen sinusoidal yang tak terbatas dari bilangan gelombang yang berbeda, dengan fase dan amplitudo sedemikian rupa sehingga dapat saling mengganggu secara konstruktif pada suatu wilayah kecil dalam ruang, dan secara destruktif di wilayah yang lain dalam ruang yang sama. Bentuk paket gelombang bergantung pada bentuk persamaan gelombang yang bersangkutan. Dalam penelitian ini paket gelombang Gaussian merupakan solusi aproksimasi dari persamaan Schrodinger (linier) bergantung waktu.

Berdasarkan data hasil simulasi dapat dilihat bahwa fungsi gelombang yang merupakan pasangan fourier dalam ruang posisi  $|\psi(x)|$  dan ruang momentum  $|\psi(k)|$  memiliki bentuk profil gelombang yang berubah terhadap waktu (amplitudo tidak konstan), sehingga dapat dikatakan bersifat dispersif. Dalam ruang koordinat kartesian, ketika amplitudo gelombang mengecil maka lebar paket gelombang semakin membesar. Dilain pihak dalam ruang momentum, amplitudo gelombang bernilai konstan selama penjalaran. Perubahan amplitudo pada ruang momentum terjadi ketika paket gelombang mengenai batas - batas potensial. Paket gelombang menjalar dengan kecepatan  $v$  dan vektor propagasi atau bilangan gelombang  $k = \sqrt{2mV_0}$  dimana  $m$  merupakan massa partikel, dan  $V_0$  merupakan tinggi potensial penghalang.

## TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada berbagai pihak yang telah membantu dalam penulisan makalah ini.

## REFERENSI

1. E. Figueiras, D. Olivieri, A. Paredes dan H. Michinel, *An Open Source Virtual Laboratory for the Schrodinger Equation*, European Journal of Physics **39** (2018), pp. 055802:1–12.
2. P. C W Davies, *Quantum Tunneling Time*, American Journal of Physics **73** (2005), pp. 23–27.
3. C. M. Dion, A. Hashemloo dan G Rahali , *Program for Quantum Wave-Packet Dynamics with Time-Dependent Potentials*, Comput. Phys. Comm. **185** (2014), pp. 407–414.
4. A. D. Bandrauk dan H Shen, *Improved Exponential Split Operator Method for Solving the Time-Dependent Schrodinger Equation*, Chemical Physics Letters **176** (1991), pp. 428–432.
5. G. R. Mocken dan C. H. Keitel, *FFT-Split-Operator Code for Solving the Dirac Equation in 2+1 Dimensions*, Computer Physics Communciation **178** (2008), pp. 868–882.
6. M. Ruf, H. Bauke dan C. H. Keitel, *A Real Space Split Operator Method for The Klein Gordon Equation*, Journal of Computational Physics **228** (2009), pp. 9092–9106.
7. M. D. Feit, J. A. Fleck Jr dan A. Steiger, *Solution of the Schrodinger Equation by a Spectral Method*, Journal of Computational Physics **47** (1982), pp. 412–433.

8. J. Javanainen dan J. Ruostekoski, *Symbolic Calculation in Development of Algorithms: Split-Step Methods for the Gross Pitaevskii Equation*, Journal of Physics A: Mathematical and General **39** (2006), pp. L179–L184.
9. G. M. Muslu dan H. A. Erbay, *Higher Order Split Step Fourier schemes for the Generalized Nonlinear Schrodinger Equation*, Mathematics and Computers in Simulation **67** (2004), pp. 658–667.
10. W. Harshawardhan, Q. Su dan R. Grobe, *Numerical Solution of the Time Dependent Maxwell Equations For Random Dielectric Media*, Physical Review E. **62** (2000), pp. 8705–8712.
11. A. Goldberg, H. M. Schey dan J. L. Schwartz, *Computer-Generated Motion Pictures of One Dimensional Quantum Mechanical Transmission and Reflection Phenomena*, American Journal of Physics **35** (1967), pp. 177–186.
12. B. I. Schneider dan L. A. Collins, *the Discrete Variable Method for the Solution of the Time Dependent Schrodinger Equation*, Journal of Non-Crystalline Solids **351** (2005), pp. 1551–1558.
13. M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov dan A. K. Geim, *Chiral Tunnelling and The Klein Paradox in Graphene* Nat. Phys. **2** (2006), pp. 62–625.
14. <https://github.com/jakevdp>

## GLOSARIUM

- $\hbar$  : konstanta planck (diasumsikan  $\hbar = 1$ )
- $m$  : massa partikel (diasumsikan  $m = 1$ )
- $x_0$  : koordinat awal paket gelombang
- $t_0$  : waktu awal ketika gelombang mulai bergerak ( $t_0 = 0$ )
- $t_{\{max\}}$  : waktu maksimal simulasi
- $V_0$  : tinggi potensial penghalang
- $L$  : lebar potensial penghalang
- $a$  : lebar paket gelombang Gaussian
- $dt$  : interval waktu (diasumsikan sangat kecil)
- Nsteps : jumlah interval yang akan dihitung. Perubahan total waktu di akhir langkah didefinisikan oleh  $dt * Nsteps$ . Digunakan nilai awal  $N = 1$ .
- $\Psi_{x0}$  : fungsi gelombang awal pada saat  $t=0$
- $p_0$  : nilai momentum awal paket gelombang Gaussian,  $p_0 = \sqrt{2mV_0}$ , digunakan untuk menghitung energi gelombang datang  $E = p_0 c$  dengan  $c \equiv 1$
- $k_0$  : Bilangan gelombang awal dari paket gelombang Gaussian. Dirumuskan  $k_0 = \frac{p_0}{\hbar}$