

Review: Solusi Real Time and Real Space Persamaan Schrodinger 1D

Oleh

Andri S. Husein¹, Miftachul Hadi², Ikha Ummu Nabilah'alya³
Aliya Syauqina Hadi⁴, Rahayu Puji Lestari⁵, Intan Permata Sari⁶
Latifatul Umah

May 11, 2013

Lecture Notes of Institute for Theoretical Physics and Mathematics (ITPM)

1 Pendahuluan

Kami me-*review* metode FDTD general yang disusun Moxley *et al* untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger gayut waktu secara *real time and real space*. Skema FDTD general diuji dengan mensimulasikan sebuah partikel yang bergerak dalam ruang vakum dan kemudian menghantam dinding potensial. Hasil numerik yang kami diperoleh sesuai dengan paper.

Sebelum Anda membaca lebih lanjut, kami menyarankan untuk menguuduh paper Moxley *et al* pada tautan berikut scirp.open-access.

2 Informasi umum

- Judul paper: *A Generalized FDTD Method with Absorbing Boundary Condition for Solving a Time-Dependent Linear Schrodinger Equation.*
- Penulis 1: Frederick Ira Moxley III, Departement of Physics, Louisiana Tech University, Ruston, USA.
- Penulis 2: Fei Zhu, Department of Mathematics and Statistics, Lousiana Tech University, Ruston, USA.
- Penulis 3: Weizhong Dai, Department of Mathematics and Statistics, Lousiana Tech University, Ruston, USA. E-mail : dai@coes.latech.edu.
- Penerbit : American Journal of Computational Mathematics, doi:10.4236/ajcm.2012.23022. <http://www.SciRP/org/journal/ajcm>
- Tahun terbit : 2012.

3 Peryataan masalah

Persamaan yang akan diselesaikan adalah persamaan Schrodinger linear gayut waktu satu dimensi. Persamaan tersebut dinyatakan sebagai berikut:

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V(x, t) \psi(x, t), \quad (1)$$

dimana m adalah massa partikel (kg), $\hbar = 1.054 \times 10^{-34}$ (J·s) adalah konstanta Planck, $V(x, t)$ adalah potensial (J), $\psi(x, t)$ adalah variabel kompleks, dan $i = \sqrt{-1}$ adalah bilangan kompleks.

4 Abc

Absorbing boundary condition (ABC) merupakan syarat idelanya simulasi *traveling wave*. ABC diperlukan karena domain komputasi umumnya terbatas, maksimum selebar layar monitor komputer. Sedangkan apa yang terjadi ketika *traveling wave* mencapai tepi domain komputasi adalah otomatis akan dipantulkan kembali. Gejala pemantulan oleh tepi domain komputasi ini umumnya tidak diinginkan karena dapat mengganggu jalanya pengamatan dalam *problem space*. Salah satu metode yang populer digunakan adalah ABC orde dua yang diperoleh dari analisis kecepatan grup pada paket gelombang di bidang batas. Sayangnya, ABC tersebut tidak cukup sederhana untuk dapat diterapkan dalam simulasi. Sebagai alternatif, kami menyusun ABC yang lebih sederhana berdasarkan peluruhan gelombang dalam medium serap. Idenya adalah, pada bidang batas di kiri dan kanan *problem space* kami melakukan modifikasi sebagai berikut

$$\psi_{\text{real}}^n(k) = \alpha(k) \psi_{\text{real}}^{n-1}(k) + 2 \sum_{p=0}^N \frac{(-1)^{p+1}}{(2p+1)!} \left(\frac{\hbar}{4m} r \delta_x^2 - \frac{\Delta t}{2\hbar} V \right)^{2p+1} \psi_{\text{imag}}^{n-1/2}(k), \quad (2)$$

$$\psi_{\text{imag}}^{n+1/2}(k) = \alpha(k) \psi_{\text{imag}}^{n-1/2}(k) + 2 \sum_{p=0}^N \frac{(-1)^p}{(2p+1)!} \left(\frac{\hbar}{4m} r \delta_x^2 - \frac{\Delta t}{2\hbar} V \right)^{2p+1} \psi_{\text{real}}^n(k). \quad (3)$$

dengan

$$\alpha(k) = \exp(-\beta \cdot k/\lambda) \quad (4)$$

disebut juga dengan faktor redaman artifisial. Nilai β perlu dicari dengan *trial and error*. Selain mudah diterapkan, pendekatan ini terbukti dapat menghasilkan ABC dengan kemampuan menyerap lebih baik bila dibandingkan dengan hasil pendekatan sebelumnya. Adapun beberapa kelemahan ABC ini adalah selain nilai β perlu dicari dengan cara coba-coba, pada panjang gelombang tertentu ia juga memerlukan ketebalan tertentu agar berfungsi maksimal. Hal tersebut mengakibatkan ABC ini beresiko memunyai ukuran yang cukup tebal sehingga dapat mempersempit *problem space*. Juga, untuk kasus simulasi dengan multi panjang gelombang, pendekatan ini menjadi tidak praktis karena akan banyak memakan waktu untuk *trial and error*.

Figure 1: Simulasi perambatan elektron dalam ruang vakum yang kemudian menghantam dinding potensial. Skema FDTD-Q asli ini menggunakan $\mu = 0.46875$ dan tidak dilengkapi dengan *absorbing boundary condition*

5 Simulasi numerik

Pers (2) dan (3) digunakan untuk simulasi sebuah partikel yang bergerak dalam ruang vakum dan kemudian menghantam dinding potensial. Didefinisikan partikel mempunyai panjang gelombang λ dalam *Gaussian envelop* yang memiliki lebar σ dengan k_0 adalah posisi mula-mula dari *pulse center*. Kami menetapkan *problem space* sebesar 1600 titik dan menggunakan parameter-parameter sebagai berikut: $\hbar = 1.054 \times 10^{-34}$ J·sec, $m = 9.1 \times 10^{-31}$ kg, $\Delta x = 0.1 \times 10^{-10}$ m, $k_0 = 400$, dan $\sigma = \lambda = 10\Delta x = 1 \times 10^{-10}$ m. Kemudian V ditetapkan sebesar 0 pada 800 titik pertama dan 100 eV pada 800 titik selanjutnya.

Dua kuantitas penting dalam mekanika kuantum adalah nilai harap (*expected value*) dari energi kinetik dan energi potensial turut dihitung dengan *finite difference*. Ketika elektron bergerak dalam ruang vakum dan kemudian menghantam dinding potensial dengan energi total sekitar 150 eV. Energi elektron sepenuhnya berupa energi kinetik sebelum menumbuk dinding potensial. Seiring berjalannya waktu, elektron merambat ke kanan (arah positif) dan bentuk gelombangnya mengalami penyebaran, namun energi total tetap konstan. Setelah elektron menghantam dinding potensial, sebagian energinya dikonversi menjadi energi potensial. Bentuk gelombang mengungkapkan adanya probabilitas elektron diteruskan dan probabilitas elektron direfleksikan oleh dinding potensial. Bagaimanapun, energi total harus tetap tidak berubah.

Figure 1 dan 2 memperlihatkan simulasi elektron yang bergerak dalam ruang vakum dan kemudian menghantam dinding potensial sebesar 100 eV, yang diperoleh dari skema FDTD-Q asli ($N = 0$) dengan $\mu = 0.46875$. Dapat dilihat bahwa, ketika $\mu = 0.46875$, yang memberikan skema FDTD-Q stabil dan solusi numerik benar-benar tidak divergen. Figure 1 memperlihatkan ketika *absorbing boundary condition* tidak digunakan, paket gelombang mengalami distorsi pada $n \approx 5.0 \times 10^4$. Di sisi lain, Figure 2 memperlihatkan paket gelombang yang lenyap pada $n \approx 5.0 \times 10^4$ ketika *absorbing boundary conditions* digunakan. Hasil yang sama didapatkan ketika kami menggunakan skema FDTD general ($N = 2$) dengan $\mu = 0.46875$.

Figure 3 dan 4 memperlihatkan sebuah elektron yang bergerak dalam ruang vakum dan ke-

Figure 2: Simulasi perambatan elektron dalam ruang vakum yang kemudian menghantam dinding potensial. Skema FDTD-Q asli ini menggunakan $\mu = 0.46875$ dan dilengkapi dengan *absorbing boundary condition*

Figure 3: Simulasi perambatan elektron dalam ruang vakum yang kemudian menghantam dinding potensial. Skema orde dua FDTD-Q general ini menggunakan $\mu = 0.5$ dan tidak dilengkapi dengan *absorbing boundary condition*

Figure 4: Simulasi perambatan elektron dalam ruang vakum yang kemudian menghantam dinding potensial. Skema orde dua FDTD-Q general ini menggunakan $\mu = 0.5$ dan dilengkapi dengan *absorbing boundary condition*

mudian menghantam dinding potensial sebesar 100 eV, yang diperoleh dengan skema FDTD-Q general dengan $\mu = 0.5$. Dapat dilihat dalam Figure 3 bahwa ketika *absorbing boundary condition* tidak digunakan, paket gelombang mengalami distorsi pada $n \approx 5.0 \times 10^4$. Di sisi lain, ketika *absorbing boundary condition* digunakan, paket gelombang lenyap pada $n \approx 5.0 \times 10^4$ sebagaimana tampak dalam Figure 4.

Simulasi numerik di atas mengungkapkan bahwa skema FDTD-Q general akan mengeluarkan hasil yang sama dengan skema FDTD-Q asli ketika $\mu < 0.5$. Catatan penting di sini adalah bahwa, kita bisa menggunakan nilai μ yang lebih besar lagi jika N yang dipilih juga lebih besar dari skema FDTD-Q general.

6 Komentari

Paper Frederick Ira Moxley III *et al* telah memberikan arahan *step by step* yang lengkap untuk menyusun metode FDTD-Q general dengan baik. Pada bagian *absorbing boundary conditions* kami telah menyusun versi baru yang lebih mudah diterapkan.

References

- [1] Frederick Ira Moxley III, Fei Zhu, Weizhong Dai, *A Generalized Method with Absorbing Boundary Conditions for Solving a Time-Dependent Linear Schrodinger Equation*, American Journal of Computational Mathematics, Vol. 2. No. 3, doi:10.4236/ajcm.2012.23022, September 2012