

ANALISIS DINAMIKA KUANTUM PARTIKEL MENGGUNAKAN MATRIKS TRANSFER

Irene Devi Damayanti¹, Tasrief Surungan¹, Eko Juarlin¹

¹Jurusan Fisika FMIPA Universitas Hasanuddin, Makassar 90245, Indonesia

Abstrak

Dinamika partikel dalam skala mikroskopik dinyatakan oleh persamaan Schrödinger. Penelitian ini membahas solusi persamaan Schrödinger dengan menggunakan metode numerik yaitu metode matriks transfer. Kode numerik metode ini dibuat dalam bahasa pemrograman/paket aplikasi Matlab. Variabel keluaran penelitian ini adalah fungsi gelombang, distribusi probabilitas, dan transmitansi. Potensial yang digunakan adalah potensial tanggul, potensial sumur, potensial parabolik, dan potensial periodik inti atom. Hasil yang diperoleh menunjukkan kesesuaian antara hasil analitik dan numerik. Untuk semua kasus potensial, bilangan gelombang semakin besar sesuai dengan penambahan energi elektron. Kebolehjadian menemukan elektron selalu lebih kecil pada daerah potensial penghambur. Transmitansi elektron semakin besar bila energi elektron semakin besar.

Kata kunci: Persamaan Schrödinger, kuantum partikel, metode matriks transfer, transmitansi.

Abstract

The dynamics of the particles in a microscopic scale is expressed by the Schrödinger equation. This research discusses solutions of the Schrödinger equation using numerical methods, i.e., transfer matrix method. This method is executed in Matlab. The calculated physical quantities in this research are wave function, probability distribution, and transmittance. Various types of potential are considered, i.e., potential square, potential wells, parabolic potential, and the periodic potential from atomic nuclei. The obtained results are in a good agreement with analytical to results. For all potential cases, the greater the energy of electron, the larger the wave number. The probability of finding electron is always smaller in the area of potential scattering. Electron transmittance is greater if the electron energy increases.

Key words: Schrödinger equation, quantum particles, the transfer matrix method, the transmittance.

1. PENDAHULUAN

Masalah hamburan dalam mekanika kuantum untuk kasus 1 dimensi (1D) banyak menjelaskan gagasan aktual dengan berbagai pendekatan, sehingga banyak artikel yang membahas lebih lanjut mengenai hamburan dalam mekanika kuantum untuk kasus 1D ^[1]. Hamburan dari potensial penghalang 1D dapat diselesaikan dengan persamaan Schrödinger tidak bergantung waktu.

Terdapat dua jenis metode untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger; yaitu metode analitik dan numerik. Dengan menggunakan metode numerik, seperti pada metode pendekatan potensial, didapatkan hasil yang akurat [2]. Salah satu metode numerik yang digunakan adalah metode matriks transfer (MMT). Sampai saat ini MMT merupakan metode yang lebih akurat dibandingkan metode beda hingga konvensional. Sebelumnya telah dilakukan perhitungan untuk mendapatkan rumusan analitik arus terobosan pada transistor dwikutub sambungan hetero Si/Si_{1-x}Gex/Si anisotropik dengan MMT [3].

MMT adalah suatu cara untuk menyelidiki keterkaitan dan keadaan hamburan pada struktur kuantum. Metode ini terutama digunakan untuk memecahkan persamaan Schrödinger 1D atau persamaan massa efektif misalnya, untuk memperoleh energi eigen yang terkuantisasi dalam sumur kuantum heterostruktur dan *Metal Organic Semiconductor* (MOS) atau koefisien transmisi potensial penghalang [4]. Potensial dari sistem ini sangat berbeda dengan yang telah dibahas dalam buku mekanika kuantum standar.

Koefisien transmisi adalah salah satu besaran penting dalam perhitungan hamburan kuantum. Sebelum menghitung koefisien transmisi dilakukan perhitungan amplitudo refleksi dan transmisi untuk hamburan yang didapatkan dari potensial penghalang 1D. Amplitudo refleksi dan transmisi dihitung dengan MMT yang dihubungkan dengan fungsi gelombang pada kedua sisi potensial penghalang. Hal ini juga diterapkan pada propagasi 1D dari gelombang elektromagnetik dalam sistem berlapis [5]. MMT dapat pula digunakan untuk analisis gelombang propagasi pada partikel kuantum, medan elektromagnetik, akustik, dan gelombang elastis. Setelah teknik ini dikembangkan untuk satu jenis gelombang, dengan mudah dapat diterapkan untuk masalah gelombang lainnya [6].

2. TEORI

Persamaan Schrödinger 1-dimensi (1D) tidak bergantung waktu dinyatakan sebagai berikut:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)\psi(x) = 0 \quad (1)$$

dengan $E = \hbar\omega$ dan $\hbar = h/2\pi$. V adalah energi potensial yang harus diketahui sebelumnya, sedangkan fungsi gelombang $\psi(x)$ dan energi E dari partikel merupakan solusi yang harus dicari dari persamaan tersebut.

Solusi umum dari persamaan Schrödinger tidak bergantung waktu dapat dinyatakan dalam bentuk fungsi gelombang [1].

$$\psi(x) = \begin{cases} A_+ e^{+ik(x-a)} + A_- e^{-ik(x-a)} & x < a \\ \psi_{ab}(x) & a < x < b \\ B_+ e^{+ik(x-b)} + B_- e^{-ik(x-b)} & x > b \end{cases} \quad (2)$$

dimana $k^2 = \mathcal{E}$, tanda + dan - menunjukkan bahwa gelombang masing-masing merambat ke kanan dan ke kiri.

Rapat probabilitas $P(x)$ terhadap $\psi(x)$ menurut persamaan Schrödinger dinyatakan sebagai berikut:

$$P(x)dx = |\psi(x)|^2 dx \quad (3)$$

Probabilitas untuk menemukan partikel antara x_1 dan x_2 adalah jumlah semua probabilitas $P(x)dx$ dalam selang antara x_1 dan x_2 sebagai berikut:

$$\int_{x_1}^{x_2} P(x)dx = \int_{x_1}^{x_2} |\psi(x)|^2 dx \quad (4)$$

Dari aturan ini, maka probabilitas untuk menemukan partikel di suatu titik sepanjang sumbu x , adalah 100 persen, sehingga berlaku [7]:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (5)$$

2.1 Aplikasi matriks transfer dalam dinamika kuantum partikel

MMT merupakan suatu metode semi numerik yang membagi/mencacah daerah solusi yang berbentuk sembarang menjadi beberapa bagian (N segmen) yang ukurannya jauh lebih kecil dibandingkan ukuran lebar potensial yang ditinjau, dimana energi potensial pada tiap-tiap segmen diasumsikan konstan. Telah dibuktikan bahwa MMT merupakan metode yang lebih akurat dibandingkan metode beda hingga konvensional [2].

Persamaan Schrödinger pada setiap segmen diselesaikan dengan menggunakan fungsi eksponensial dan kemudian disusun sekumpulan matriks-matriks yang berisi syarat batas pada setiap antarmuka segmen. Fungsi gelombang elektron di titik ke- i dinyatakan sebagai ψ_i . Di titik setelahnya, yaitu titik ke- j , fungsi gelombang elektron dinyatakan sebagai ψ_j . Perubahan fungsi gelombang titik ke- i ke titik ke- j dirumuskan:

$$\psi_i = I_{ij}\psi_j \quad (6)$$

dimana

$$I_{ij} = \begin{pmatrix} 1/t_{ij} & r_{ij}^*/t_{ij}^* \\ r_{ij}/t_{ij} & 1/t_{ij}^* \end{pmatrix} \quad (7)$$

Maka;

$$\psi_i = \begin{pmatrix} 1/t_{ij} & r_{ij}^*/t_{ij}^* \\ r_{ij}/t_{ij} & 1/t_{ij}^* \end{pmatrix} \psi_j \quad (8)$$

Empat tipe potensial yang diselesaikan adalah potensial tanggul, potensial sumur, potensial parabolik, dan potensial periodik inti atom. Potensial tanggul, dengan potensial penghalang $+Vo$ eV untuk x dari $-L$ sampai $+L$. Potensial sumur, dengan potensial penghalang $-Vo$ eV untuk x dari $-L$ sampai $+L$. Potensial parabolik, dengan nilai potensial penghalang untuk x dari $-L$ sampai $+L$ sebagai berikut:

$$V(x) = a(x - x_p)^2 + y_p \quad (9)$$

dan potensial periodik inti atom adalah:

$$V_n = \frac{K}{|x - x_n|} \quad (10)$$

dimana, inti atom ditempatkan secara teratur pada wilayah kerja. x_n adalah letak inti atom dan K adalah kekuatan energi potensial.

Bila ada sejumlah inti, energi potensial total adalah:

$$V_{\text{tot}} = \sum V_n \quad (11)$$

Koefisien refleksi dan transmisi diselesaikan dengan persamaan sebagai berikut:

$$r_{ij} = \frac{K_i - K_j}{K_i + K_j}, \quad t_{ij} = \frac{2\sqrt{K_i K_j}}{K_i + K_j} \quad (12)$$

K_n adalah bilangan gelombang yang dinyatakan dengan:

$$K_n^2 = 2m_e(E - V_n)/\hbar^2 \quad (13)$$

E adalah energi yang akan ditransmisikan, m_e dan \hbar merupakan variabel yang menjadi *input* pada program dan V_n adalah besar energi potensial.

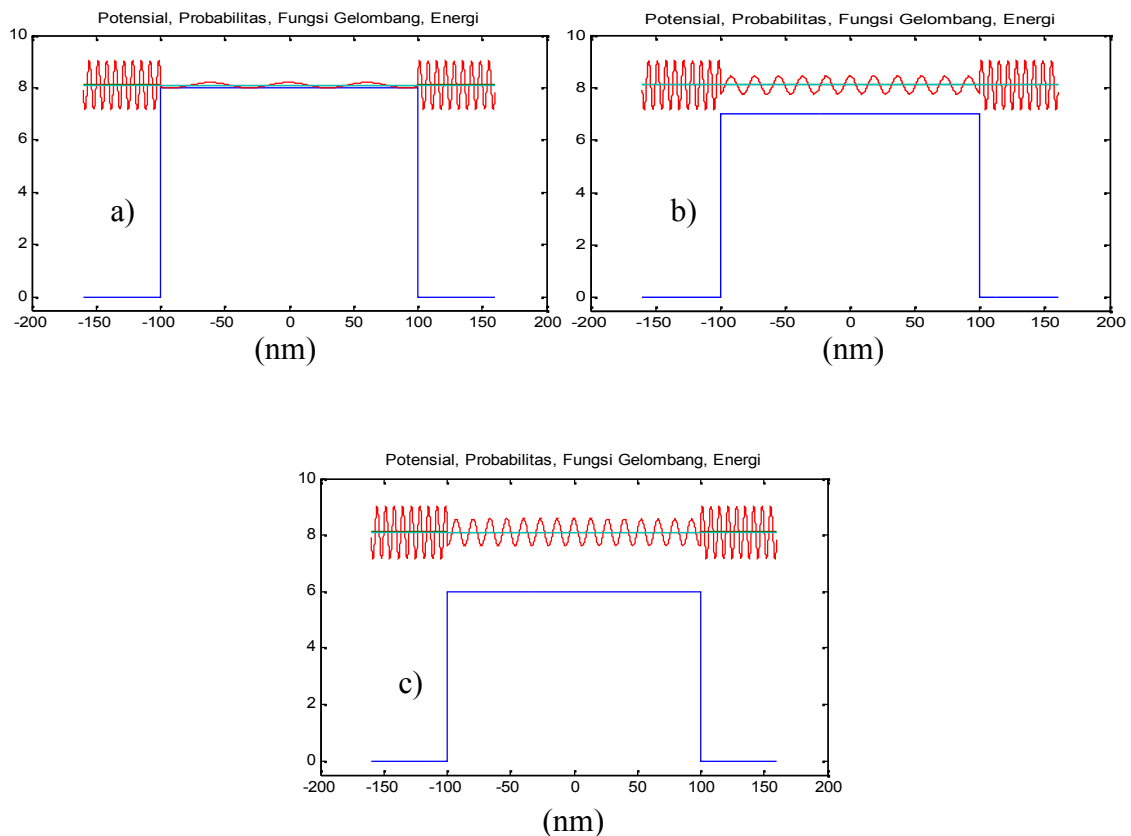
Perhitungan nilai transmisi pada empat tipe potensial tersebut diselesaikan dengan persamaan:

$$T = \left(\frac{1}{M_{11}}\right) \quad (14)$$

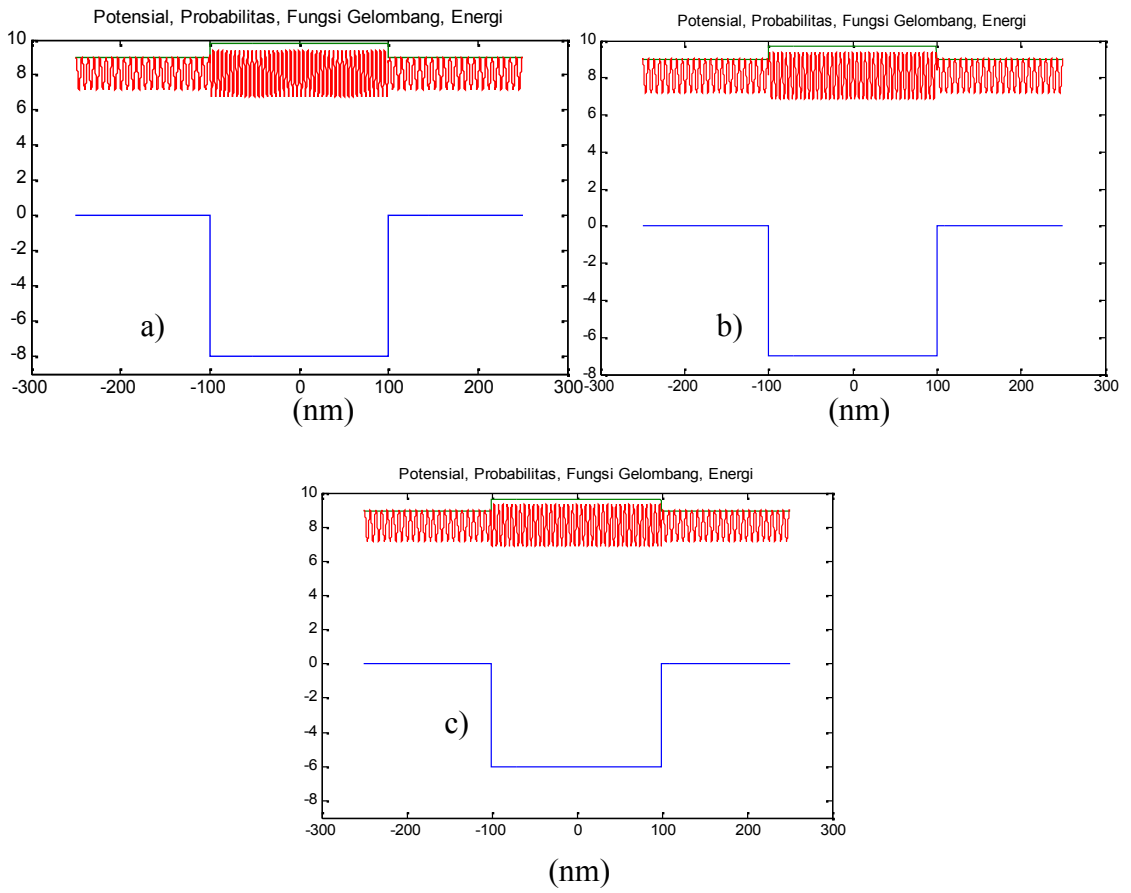
3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Pada penelitian ini dijelaskan fungsi gelombang untuk 4 tipe potensial, yaitu potensial tanggul, potensial sumur, potensial parabolik, dan potensial periodik inti atom. Daerah defenisi yaitu peubah x didiskritisasi dengan jarak antar titik diskritisasi sama dengan 4. Pada potensial tanggul diambil daerah defenisi $x \in [-160,160]$ pada daerah kerjanya. Untuk potensial sumur, potensial parabolik, dan potensial periodik inti atom daerah defenisi pada daerah kerjanya adalah $x \in [-250,250]$.

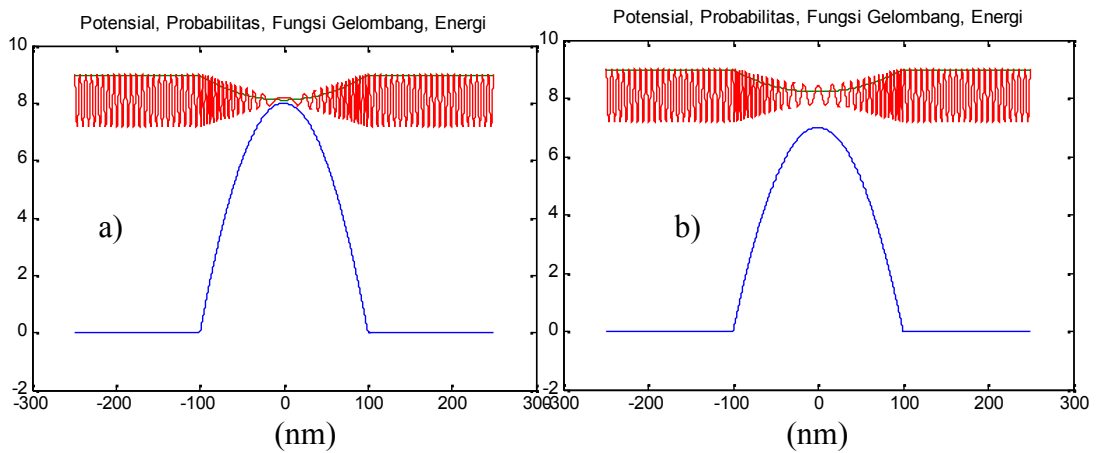
Ada dua hal yang hendak diteliti, yaitu bagaimana perilaku fungsi gelombang jika potensial dan energi elektron divariasikan. Pada potensial dilakukan dengan memvariasikan tinggi dan lebar potensial.

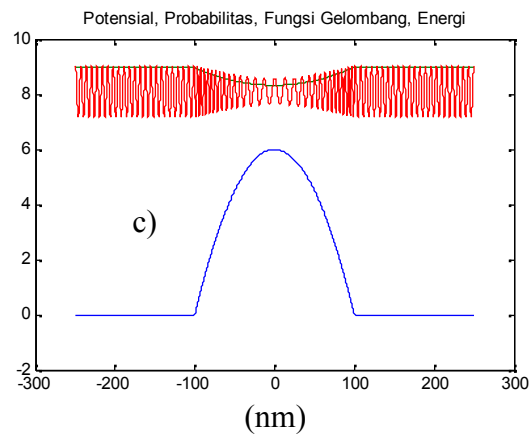


Gambar 1. Grafik probabilitas dan fungsi gelombang elektron dalam struktur potensial penghalang tanggul (a) $V = 8$ eV, (b) $V = 7$ eV, dan (c) $V = 6$ eV.



Gambar 2. Grafik probabilitas dan fungsi gelombang elektron dalam struktur potensial penghalang sumur (a) $V = -8$ eV, (b) $V = -7$ eV, dan (c) $V = -6$ eV

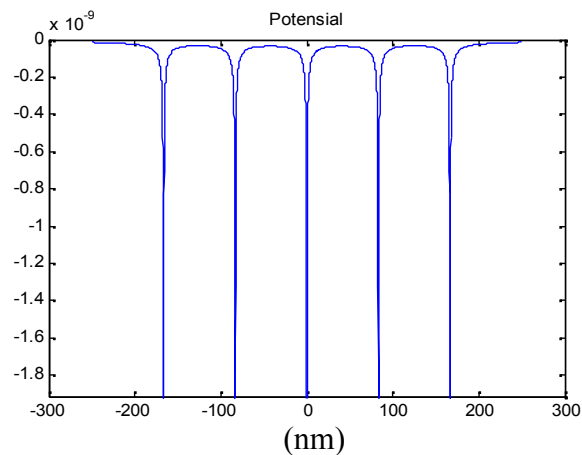




Gambar 3. Grafik probabilitas dan fungsi gelombang elektron dalam struktur potensial penghalang parabolik (a) $V = 8 \text{ eV}$, (b) $V = 7 \text{ eV}$, dan (c) $V = 6 \text{ eV}$

Pada gambar 1, gambar 2, dan gambar 3 potensial ditunjukkan oleh garis biru, fungsi gelombang ditunjukkan oleh garis merah, energi dan probabilitas ditunjukkan oleh garis hijau. Hasil menunjukkan bahwa bilangan gelombang semakin besar jika selisih antara energi elektron dan potensial penghalang semakin besar. Fenomena ini mirip dengan fenomena elektron dalam sumur potensial tak terhingga, yaitu semakin besar selisih energi antara energi elektron dengan energi potensial halang, semakin banyak gelombang terbentuk dalam jarak tertentu.

Probabilitas menemukan elektron di daerah energi potensial rendah lebih besar daripada di daerah energi potensial besar. Ini menunjukkan bahwa kebolehjadian menemukan elektron selalu lebih kecil pada daerah potensial penghambur. Nilai probabilitas menemukan elektron juga semakin kecil bila lebar potensial semakin besar.



Gambar 4. Potensial periodik inti atom yang berisi 5 inti atom

Untuk potensial periodik inti atom pada gambar 4 diperlihatkan inti atom tersebar merata dalam daerah kerjanya. Dalam bagian ini dijelaskan terpisah menurut variasi jumlah inti atom, kekuatan energi potensial, dan energi. Inti atom ditempatkan secara teratur pada daerah kerja. Dari hasil didapatkan potensial berbanding terbalik dengan probabilitasnya, yaitu semakin besar potensialnya, maka probabilitasnya semakin kecil dan begitupun sebaliknya.

Tabel 1. Hasil transmitansi dengan MMT dan teori/analitik dengan pias yang berbeda

Potensial (eV)	Energi (eV)	Lebar Potensial (nm)	Pias	TAnalitik	TMMT
1	2	200	40	3.89×10^{-29}	1.76×10^{-21}
			50		2.46×10^{-26}
			64		3.94×10^{-33}

Keterangan:

- TAnalitik : transmitansi dengan teori/analitik
- TMMT : transmitansi dengan MMT

Pada tabel 1 diperlihatkan hasil perbandingan nilai transmitansi dengan MMT dan transmitansi dengan teori/analitik, pias yang paling mendekati adalah 50 atau jarak antar pias adalah 4 nm yaitu nilai transmitansi dengan teori/analitik adalah 3.89×10^{-29} dan nilai transmitansi dengan MMT adalah 2.46×10^{-26} . Tidak semua pias yang diinput dapat mengeluarkan hasil yang sesuai, ini disebabkan karena adanya diskritisasi dan teknik simulasi yang digunakan.

Tabel 2. Hasil transmitansi dengan variasi energi elektron

Potensial (eV)	Energi (eV)	Lebar Potensial (nm)	Pias	Transmitansi
1	2	200	50	2.46×10^{-26}
	4			8.34×10^{-14}
	6			6.60×10^{-8}

Tabel 3. Hasil transmitansi dengan variasi tinggi potensial

Potensial (eV)	Energi (eV)	Lebar Potensial (nm)	Pias	Transmitansi
1	2	200	50	2.46×10^{-26}
0.5				6.21×10^{-22}
0.1				2.29×10^{-19}

Hasil transmitansi dari 4 tipe potensial dengan energi elektron yang divariasikan dan hasil transmitansi dengan potensial yang divariasikan. Energi potensial bernilai nol di luar potensial. Dari data hasil transmitansi dengan energi elektron yang berbeda diperlihatkan semakin besar energi elektron maka semakin besar nilai transmitansi. Sedangkan dari data hasil transmitansi dengan potensial yang divariasikan diperlihatkan hasil yang berbanding terbalik dengan hasil transmitansinya, yaitu semakin besar nilai potensial maka semakin kecil nilai transmitansi. Ini menunjukkan bahwa nilai transmitansi elektron yang terhambur semakin besar bila puncak potensial penghalang semakin kecil untuk semua tipe potensial.

4. KESIMPULAN

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan dapat disimpulkan bahwa MMT telah berhasil menjelaskan dinamika elektron dalam berbagai tipe potensial, yaitu potensial tanggul, potensial sumur, potensial parabolik, dan potensial periodik inti atom. Kemudian dilakukan perhitungan probabilitas menemukan elektron dengan menggunakan MMT. Hasil perhitungan memperlihatkan bahwa nilai probabilitas semakin besar bila selisih energi elektron dengan potensial penghalang semakin besar untuk setiap tipe potensial. Nilai probabilitas menemukan elektron semakin kecil bila lebar potensial semakin besar. Hasil menunjukkan bahwa nilai transmitansi elektron yang terhambur semakin besar bila puncak potensial penghalang semakin kecil untuk semua tipe potensial.

DAFTAR PUSTAKA

- [1]. S´anchez-Soto, L. L., Monz´on, J. J., Barriuso, A. G., Cariñena, J. F., 2012, *The Transfer Matrix: A Geometrical Perspective*, Spain.

- [2]. Zhang, A., Cao, Z., Shen, Q., Dou, X., Chen, Y., 2000, *Tunnelling Coefficients Across an Arbitrary Potential Barrier*, Shanghai 200240, People's Republic of China.
- [3]. Hasanah L., Khairurrijal, 2007, *Perhitungan Arus Terobosan pada Transistor Dwikutub Sambungan Hetero Si/Si1-XGeX/Si Anisotropik dengan Menggunakan Matriks Transfer*, Bandung.
- [4]. Jirauschek, C., 2009, *Accuracy of Transfer Matrix Approaches for Solving the Effective Mass Schrödinger Equation*, IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 45, No. 9.
- [5]. Torres del Castillo, G.F., García, I. R., 2007, *Transfer Matrices for Piecewise Constant Potentials*, Puebla, Pue., México.
- [6]. Markos, P., Soukoulis, C. M., 2008, *Wave Propagation*, Princeton University Press.
- [7]. <http://phys.usu.ac.id/bitstream/123456789/29984/.../Chapter%20II.pdf>. Diakses tanggal 31 Januari 2013.