

SOLUSI NUMERIK UNTUK MENYELESAIKAN PERSAMAAN SCHRODINGER MENGGUNAKAN METODE FINITE DIFFERENCE TIME DOMAIN (FDTD) PADA KERANGKA KOORDINAT POLAR

Muh. Fachrul Latief

Jurusan Fisika, Faklutas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Gorontalo

Email : muh.fachrul@ung.ac.id

ABSTRAK

Teori dan konsep mekanika kuantum, baik persamaan maupun interaksi dapat dinyatakan dalam koordinat polar, yakni sebagai fungsi dari jari-jari (r) dan sudut (θ). Akan tetapi, koordinat polar ini dapat dikembangkan dalam kerangka 3 dimensi dan lebih dipahami dengan koordinat silinder dan koordinat bola. Dalam paper ini telah dibahas analisis numerik dengan metode FDTD untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger dalam koordinat polar 2 dimensi. Dalam metode ini berfokus pada pendekatan subgridding, yakni penambahan simpul-simpul baru yang jauh dari titik asal untuk mempertahankan ketepatan kisi grid. Selanjutnya dilakukan interpolasi trigonometri untuk menghitung turunan ada titik-titik tersebut. Sebagai validasi dan verifikasi hasil, maka dilakukan perbandingan dengan solusi analitik untuk osilator harmonik 2 dimensi pada koordinat polar. Selain itu, disajikan juga sebuah metode sederhana yang berbasis pada transformasi Fourier spasial.

Kata Kunci: *Persamaan Schrodinger dalam koordinat polar, metode numerik FDTD, osilator harmonik, kuantum dot, dan keadaan degenerasi.*

PENDAHULUAN

Persamaan Schrodinger merupakan persamaan diferensial yang sifatnya non-linier dan menjadi dasar dalam menjelaskan fenomena mekanika kuantum yang pertama kali diperkenalkan oleh fisikawan Erwin Schrodinger pada tahun 1926. Berbagai pendekatan numerik telah ditelaah untuk mencari solusi dari persamaan Schrodinger, termasuk metode pencocokan eksponensial dan metode transformasi Fourier untuk solusi dalam koordinat bola [1], metode yang didasarkan pada kolokasi dan fungsi basis radial [2], metode tipe Numerov [3-6], dan metode persamaan integral [7]. Namun di tahun 2001, Sullivan D., dkk. telah memberikan terobosan baru dalam menyelesaikan persamaan Schrodinger dengan memperkenalkan metode *Finite-Difference Time-Domain (FDTD)*, di mana metode ini menggunakan pendekatan diferensial dalam domain yang secara eksplisit dan secara implisit [8]. Metode ini memberikan keuntungan yang jelas karena dapat diterapkan pada berbagai ungkapan perambatan gelombang yang seiring dengan perkembangan algoritma. Selanjutnya, Sullivan D. dkk. juga menghitung fungsi eigen

dan nilai eigen dalam suatu perangkat kuantum dengan menggunakan metode FDTD yang berbasis transformasi Fourier yang dipercepat (*Fast Fourier Transform / FFT*) [9,10]. Selain itu, beberapa penelitian juga telah ditelaah untuk analisis, stabilitas dan konvergensi solusi numerik metode FDTD untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger [11,12]. Aplikasi dari metode FDTD untuk simulasi 3 dimensi dari kabel kuantum telah ditelaah [13].

Dari semua studi yang ada, solusi numerik metode FDTD masih dalam sistem koordinat kartesian. Dalam sistem koordinat ini, konsep dan operator analitik mekanika kuantum dapat diungkapkan dalam istilah jari-jari dan sudut azimuth, sehingga hasil transformasi ke dalam titik diskritisasi untuk koordinat Kartesian akan menjadi sulit dalam menjabarkan analisis numeriknya pada kasus-kasus tertentu. Sehingga perlu untuk dikaji kembali ungkapan metode numerik yang dinyatakan dalam koordinat polar atau koordinat bola dalam kerangka koordinat 3 dimensi serta menjelaskan operator-operator yang berlaku dan hasil langsung pada interaksi mekanika kuantum.

Ungkapan persamaan Schrodinger dalam koordinat polar memudahkan analisis ketika meninjau simetri rotasi karena bentuk potensialnya, sama seperti kasus pada osilasi harmonik dua dimensi atau kuantum dot. Selain itu, komponen dari momentum sudutnya mudah diperoleh dengan kerangka koordinat bola. Dengan kerangka tersebut, maka dapat dibangun solusi numerik dengan menggunakan metode FDTD yang diterapkan ke dalam koordinat tersebut untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger yang sifatnya non-linier. Metode numerik FDTD ini dibangun dengan melakukan pendekatan *subgridding*, yaitu menambahkan simpul baru di antara simpul-simpul yang lama dalam bidang sudutnya. Hal inilah yang akan dianalisis dalam paper ini bagaimana pengaruh pendekatan *subgridding* ini terhadap perubahan kisi yang semakin besar dan interpolasi trigonometri yang digunakan untuk menghitung nilai derivatif dari fungsi gelombang pada simpul-simpul tersebut.

Solusi numerik dengan metode FDTD yang telah ditelaah menggunakan bantuan perangkat lunak MatLab sebagai tools dalam melakukan simulasi osilator harmonik dan kuantum dot. Selain itu, diberikan tekni untuk menghilangkan degenerasi dari keadaan eigen dari kasus osilator harmonik dan kuantum dot setelah simulasi FDTD sebagai hasil langsung dari kerangka koordinat polar. Sebagai validasi dari hasil solusi numerik yang diperoleh, kemudian akan dibandingkan dengan solusi analitik.

A. Penurunan Formula FDTD untuk Solusi Persamaan Schrodinger pada Koordinat Polar

Persamaan Schrodinger merupakan salah satu landasan bagi postulat mekanika kuantum. Ungkapan persamaan Schrödinger bergantung waktu pada kerangka koordinat polar dapat dituliskan sebagai berikut

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r, \theta, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r, \theta, t) \right] \psi(r, \theta, t) \quad (1)$$

dengan ψ merupakan fungsi gelombang kompleks, ∇^2 adalah operator Laplace, m adalah massa partikel, dan V adalah potensial partikel. Selanjutnya operator Laplace dalam

koordinat bola dapat diungkapkan dalam bentuk

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} \quad (2)$$

Kehadiran medan magnet statis atau radiasi bebas elektromagnetik, maka potensial materi pada persamaan (1) tergantung sumber materi sehingga operator momentum pada setiap titiknya dapat dihitung [14,15].

Untuk melakukan diskritisasi pada fungsi gelombang kompleks ψ , maka perlu ditinjau bahwasanya fungsi gelombang tersebut terdiri dari bagian real (r) dan bagian imajiner (i), sehingga dapat dituliskan menjadi

$$\psi = \psi_r + i\psi_i \quad (3.a)$$

$$\frac{\partial \psi_r}{\partial t} = +\frac{1}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \psi_i \quad (3.b)$$

$$\frac{\partial \psi_i}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right] \psi_r \quad (3.c)$$

di mana bagian real dan bagian imajiner saling berhubungan satu sama lain pada setiap simpulnya. Persamaan (3) di atas yang merupakan gabungan bagian real dan bagian imajiner kemudian akan diselesaikan dengan metode FDTD pada setiap simpulnya. Bentuk diskritisasi dari persamaan (3) dituliskan menjadi

$$\frac{\partial \psi}{\partial r} = \frac{\psi(r+\Delta r, \theta) - \psi(r, \theta)}{\Delta r} \quad (4.a)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} = \frac{\psi(r+\Delta r, \theta) + \psi(r-\Delta r, \theta) - 2\psi(r, \theta)}{(\Delta r)^2} \quad (4.b)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \frac{\psi(r, \theta + \Delta \theta) - \psi(r, \theta)}{\Delta \theta} \quad (4.c)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} = \frac{\psi(r, \theta + \Delta \theta) + \psi(r, \theta - \Delta \theta) - 2\psi(r, \theta)}{(\Delta \theta)^2} \quad (4.d)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} = \frac{\psi(r+\Delta r, \theta) + \psi(r-\Delta r, \theta) - 2\psi(r, \theta)}{(\Delta r)^2} \quad (4.e)$$

$$\frac{\partial \psi_{r,i}}{\partial t} = \frac{\psi_{r,i}^{n+1}(r, \theta) - \psi_{r,i}^n(r, \theta)}{\Delta t} \quad (4.f)$$

di mana indeks atas pada persamaan (4f) menunjukkan langkah waktu (*time step*) dan indeks bawah menunjukkan bagian real dan imajiner dari fungsi gelombang. Pada dasarnya, analisis numerik metode FDTD pada kerangka koordinat kartesian sama dengan kerangka koordinat polar, namun pada kasus koordinat polar dapat diperluas pada telaah terkait turunan spasial dalam koordinat polar sebagai fungsi dari jari-jari (r) dan sudut (θ), sehingga perubahan kisi sel dapat dituliskan menjadi Δr dan $\Delta \theta$.

B. Simulasi Osilator Harmonik Kuantum 2 Dimensi

Osilator harmonik adalah sistem dinamis dasar yang dalam mekanika klasik dan mekanika kuantum yang kebanyakan solusinya dengan mudah diperoleh secara analitik. Osilator harmonik kuantum merupakan bagian penting yang dianalisis dari berbagai banyak fenomena dan perangkat fotnik kuantum serta fenomena elektromagnetik [15,16]. Pada kasus-kasus tertentu, pergerakan elektron dapat dibatasi pada satu arah, akan tetapi bebas dalam dua dimensi lainnya pada suatu material dengan potensial dalam bentuk

$$V = \frac{1}{2} m \omega_0^2 r^2 \tag{5}$$

di mana m adalah massa partikel, ω_0 adalah frekuensi sudut osilator, dan r adalah jari-jari. Simulasi osilator harmonik dengan potensial di atas akan lebih mudah diselesaikan dalam koordinat Kartesian dikarenakan sumbu x dan y tidak memiliki posisi yang istimewa dalam analisis tersebut. Berbeda pada koordinat polar karena adanya simetris rotasi. Nilai eigen dari osilator harmonik memiliki jarak yang sama pada interval $\hbar\omega_0$ [30], sehingga dapat dituliskan menjadi

$$E_{n_d, n_g} = (n_d + n_g + 1)\hbar\omega_0 = (n + 1)\hbar\omega_0 \tag{6}$$

di mana n_d adalah bilangan sirkular kanan dan n_g adalah bilangan sirkular kiri, dan hubungan keduanya adalah $n_d + n_g = n$, dengan n disebut sebagai bilangan kuantum utama. Fungsi eigen yang sesuai dengan nilai eigennya dapat dihitung dengan menggunakan operator a_d^\dagger dan a_g^\dagger dari kuantum sirkular kiri dan kanan serta operator ground state $|\Phi_{0,0}\rangle$ [16]:

$$|\chi_{n_d, n_g}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n_d)!(n_g)!}} (a_d^\dagger)^{n_d} (a_g^\dagger)^{n_g} |\Phi_{0,0}\rangle \tag{7}$$

Operator a_d^\dagger dan a_g^\dagger dalam koordinat polar didefinisikan sebagai

$$a_d^\dagger = \frac{e^{+i\theta}}{2} \left[\beta r - \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{\beta r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \tag{8.a}$$

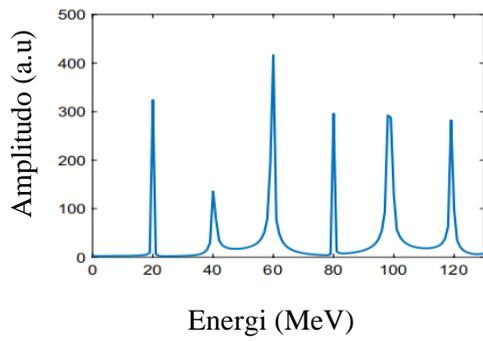
$$a_g^\dagger = \frac{e^{-i\theta}}{2} \left[\beta r - \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{i}{\beta r} \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \tag{8.b}$$

dengan $\beta = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}$.

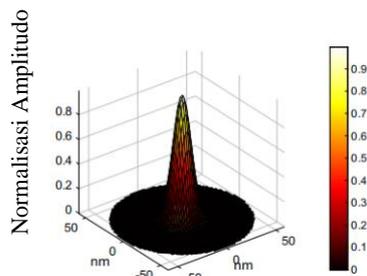
C. Simulasi Hasil dan Eigenstate Osilator Harmonik

Implementasi metode numerik FDTD pada kerangka koordinat polar disimulasikan dengan bantuan *software* MATLAB melalui pendekatan osilator harmonik. Untuk sistem diasumsikan bahwa keadaan energi dasar $E_0 = 20$ MeV pada bidang polarnya dan nilai $r = 50$ nm, $\Delta r = 1,8$ nm, $\Delta t = 0,12$ fs. Dengan pendekatan nilai-nilai tersebut, maka stabilitas dari metode FDTD pada kerangka koordinat polar dapat dipertahankan. Dalam sistem ini, keadaan diinisialisasi dengan fungsi gelombang Gaussian, dengan asumsi lebar 6 nm yang terdiri dari banyak keadaan eigen dari osilator harmonik sistem. Kebalikan dari total waktu simulasi dalam domain waktu adalah nilai terkecil dalam domain frekuensi atau resolusi kurva *Fast Fourier Transform* (FFT). Jika dianggap 1 meV sebagai resolusi FFT, maka total waktu simulasi dalam waktu setelah akhir simulasi (sekitar 4000 fs) transformasi Fourier cepat (FFT) dari fungsi gelombang pada titik awal. Hal ini tentunya memberikan nilai eigen yang sesuai dengan energi eigen osilator harmonik yang diharapkan. Amplitudo FFT dari setiap nilai eigen kemudian dihitung di semua node untuk mendapatkan keadaan eigen, sebuah metode yang dijelaskan dengan baik dalam Ref. [9].

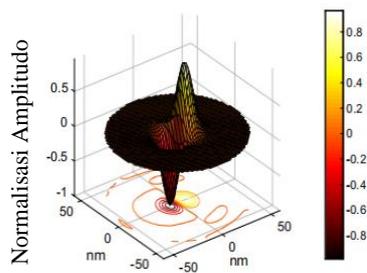
Spektrum FFT yang mengandung nilai eigen seperti yang ditunjukkan pada gambar 1 yang menunjukkan bahwa semua eigen adalah kelipatan bilangan bulat dari seperti yang diharapkan dari Persamaan 14. Gambar 2 menunjukkan fungsi gelombang bagian real dari 6 keadaan eigen yang ada osilator harmonik yang diperoleh dengan menggunakan metode FDTD polar. Nilai tersebut sesuai dengan enam puncak pertama menggunakan metode FDTD polar dalam spektrum FFT yang ditunjukkan pada gambar 1. Selanjutnya, hanya bagian real dari fungsi gelombang yang ditunjukkan dalam gambar, karena bagian imajiner menunjukkan perilaku yang sama.



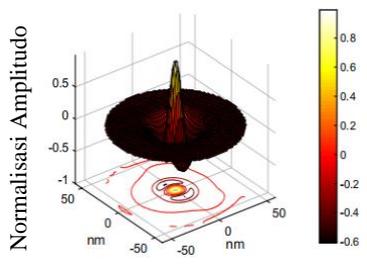
Gambar 1. FFT dari fungsi gelombang pada titik eksitasi awal di osilator harmonik dengan $E_0 = 20 \text{ meV}$



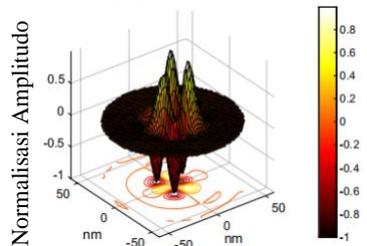
(a) Energi = 20 MeV



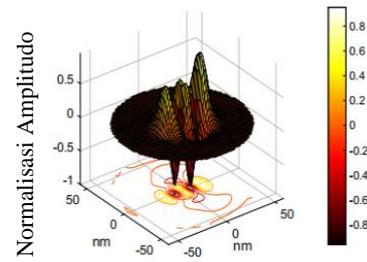
(b) Energi = 40 MeV



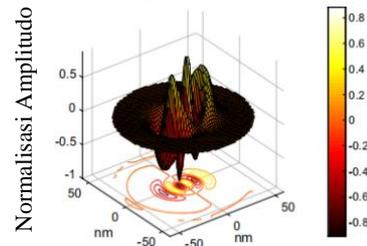
(c) Energi = 60 MeV



(d) Energi = 80 MeV



(e) Energi = 98 MeV



(f) Energi = 119 MeV

Gambar 2. Enam keadaan eigen yang eksis dari osilator harmonik yang diturunkan menggunakan metode FDTD kerangka koordinat polar

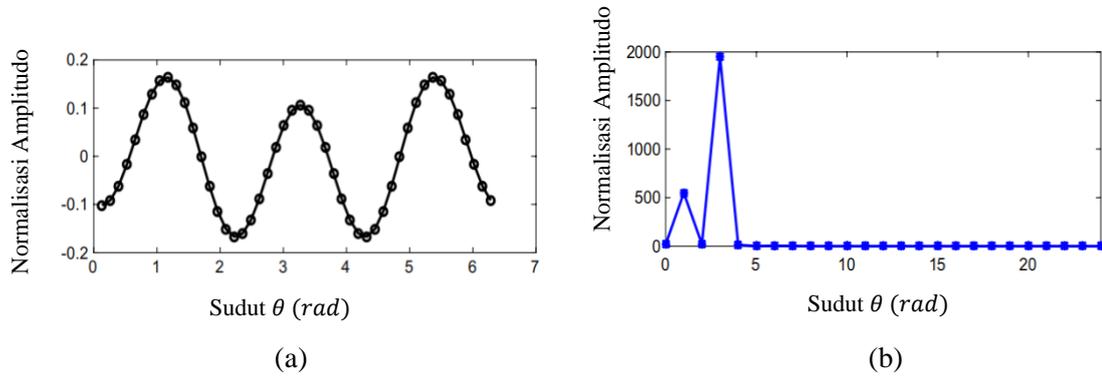
Untuk $n > 0$ pada persamaan 6, maka diperoleh mode merosot yang sesuai dengan satu nilai eigen yang identik n akan selalu eksis. Masing-masing mode degenerasi ini memiliki panjang gelombang spasial yang berbeda, seperti yang telah dijelaskan secara analitis oleh persamaan 7. Hal ini dikarenakan panjang gelombang spasialnya ditentukan langsung oleh perbedaan nilai m , di mana nilai $m = n_g - n_d$ yang merupakan bilangan kuantum polar (magnetik). Untuk setiap n, m , maka dapat memberikan nilai $m = n, n - 2, n - 4, \dots, -n + 2, -n$. Jadi ketika menghitung amplitudo FFT dari nilai eigen di semua simpul, maka mode degenerasi dapat dipisahkan tanpa mengulangi simulasi FDTD dengan gelombang inisialisasi baru. Hal inilah yang akan dijelaskan lebih detail dalam pembahasan selanjutnya.

D. Verifikasi Solusi Numerik Terhadap Solusi Analitik

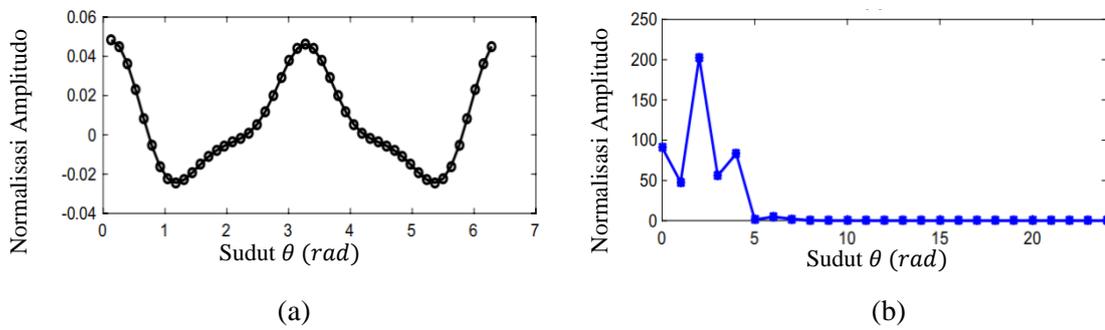
Sekarang ditinjau titik yang tepat untuk dapat melakukan verifikasi metode FDTD dalam kerangka koordinat polar terhadap solusi analitik. Hal ini bisa dilakukan melalui persamaan 7 dan 8. Keadaan eigen yang bersesuaian dengan tingkat $n = 2, 3, 4$ dan 5 dengan $m = n$ digambarkan oleh persamaan 10, diperoleh dengan menggunakan metode FDTD polar setelah memisahkan mode

degenerasi dan juga dari solusi analitiknya. Pemilihan n dan m sesuai dengan variasi

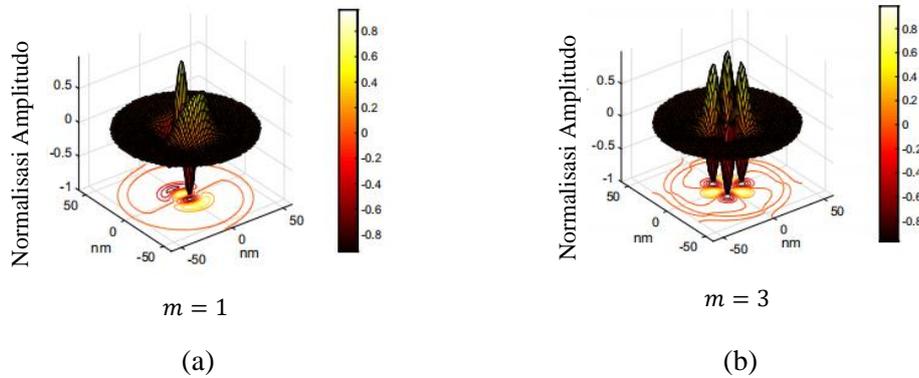
terbesar dalam arah bidang radial dan sudut angularnya.



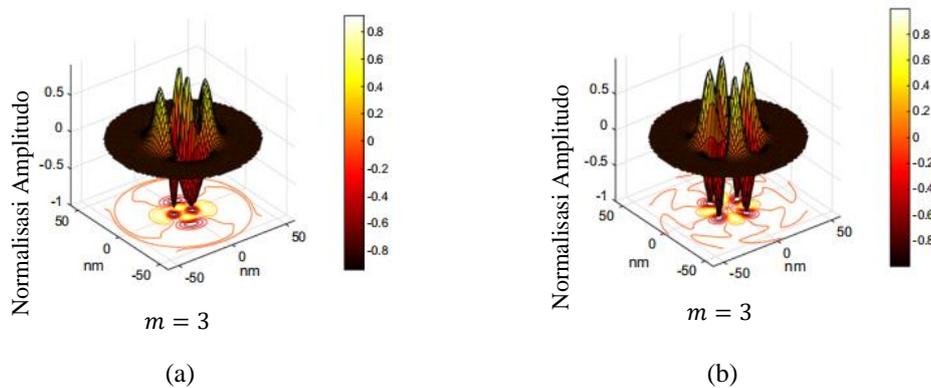
Gambar 3. (a) Bagian real dan (b) Transformasi Fourier Diskrit spasial untuk $n = 3$



Gambar 4. (a) Bagian real dan (b) Transformasi Fourier Diskrit spasial untuk $n = 4$



Gambar 5. Mode degenerasi yang terpisah dari osilator harmonik untuk $n = 3$ dan (a) $m = 1$ dan (b) $m = 3$



Gambar 6. Mode degenerasi yang terpisah dari osilator harmonik untuk $n = 3$ dan (a) $m = 2$ dan (b) $m = 4$

Hasilnya menunjukkan bahwasanya hasil *script* dan koding FDTD pada kerangka koordinat polar serta proses untuk menghilangkan degenerasi pada simpul dari isolator harmonik. Hal ini memungkinkan adanya beberapa solusi FDTD polar ini dibandingkan dengan solusi analiti, akan tetapi hal ini normal karena masalahnya memiliki simetri rotasi. Penyimpangan kecil pada garis nol dapat dilihat ketika menggunakan metode FDTD kutub. Namun, hal ini terutama terjadi pada daerah di mana amplitudo solusi hampir nol. Garis nol pada solusi analitik adalah garis lurus radial. Namun, kesalahan yang sangat kecil dalam fase DFT spasial di sekitar nol dalam metode numerik dapat menggeser lokasi di mana nol yang tepat terjadi dan oleh karena itu menggeser garis nol, sehingga tampak bengkok, meskipun masih di daerah di mana amplitudo solusi sangat kecil, yang membuat penyimpangan ini tidak terlalu penting.

E. Pertimbangan Terkait Metode FDTD

Metode FDTD kutub yang disajikan dengan pendekatan subgridding dapat diterapkan pada permasalahan dengan sistem simetri rotasi, yang dapat diperluas ke masalah vertikal susunan QD dalam kawat kuantum dan juga masalah dalam kerangka koordinat bola. Setiap operator kuantum yang merupakan fungsi dari jari-jari dan sudut dapat diselesaikan dengan lebih mudah menggunakan metode ini dibandingkan dengan algoritma FDTD Cartesian. Salah satu contoh satu keuntungan dari metode yang diusulkan adalah pembagian pemisahan mode-mode yang merosot berdasarkan penerapan L_Z yang disebut dengan metode isolasi keadaan eigen yang merosot ini.

F. Kesimpulan

Metode *Finite Difference Time Domain* (FDTD) polar untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger dalam kerangka koordinat kutub telah ditelaah. Metode ini menggunakan pendekatan subgridding untuk menambahkan simpul baru pada cincin dan dengan demikian meningkatkan jumlah pembagian di sekitar arah sudut, untuk mempertahankan resolusi spasial. Interpolasi trigonometri dari cincin sebelumnya diimplementasikan untuk

memasukkan simpul-simpul baru ke dalam persamaan *finite difference*. Singularitas pada titik asal diselesaikan dengan menggunakan integral dari gradien fungsi gelombang pada yang pertama cincin di sekitar titik asal. Transformasi Fourier cepat (FFT) dari variasi temporal dari fungsi gelombang digunakan untuk mendapatkan nilai eigen dan kemudian keadaan eigen.

Metode FDTD kutub ini dapat diterapkan untuk simulasi perangkat kuantum dengan fungsi potensial yang menunjukkan simetri rotasi atau masalah apa pun di mana bekerja dengan jari-jari dan sudut nyaman sementara pembagian sepanjang x dan y tidak memberikan keuntungan. Jelas, banyak operator kuantum operator tum dapat dinyatakan sebagai fungsi dari r , teta (dan teta) dan dengan demikian dapat ditangani dalam bidang kutub dengan lebih mudah. Eliminasi Penghapusan degenerasi tanpa perlu mengulangi proses Simulasi FDTD adalah hasil lain yang berhasil dari metode ini di bidang kutub. Metode FDTD polar dengan subgrid ini ding ini dapat diperluas ke koordinat silinder dan bola (dengan pendekatan pembangkitan simpul yang lebih dinamis), yang merupakan topik untuk penelitian di masa depan.

Daftar Pustaka

- Allison, A.R.A.: Exponential-fitting methods for the numerical solution of the Schrodinger equation. *Comput. Phys. Commun.* **14**, 1 (1978)
- Metiu, C.E.D.V.E.R.A.H. : Numerical solution of the time-dependent Schrodinger equation in spherical coordinat by Fourier transform methods. *Comput. Phys. Commun.* **63**, 435 (1991)
- Simos, T. : A Numerov-type method for the numerical solution of the radial Schrodinger equation. *Appl. Numer. Math.* **7**, 201 (1991)
- Simos, G.A.A.K.T.: A generalization of Numerov's method for the numerical solution of the Schrödinger equation in two dimensions. *Comput. Chem.* **24**, 577 (2000)

- Ramos, J.V.-A.H.: A variable-step Numerov method for the numerical solution of the Schrödinger equation. *J. Math. Chem.* **37**, 255 (2005)
- Simos, T.E.: A new Numerov-type method for the numerical solution of the Schrödinger equation. *J. Math. Chem.* **46**, 981 (2009)
- Shokri, M.D.A.: A numerical method for two-dimensional Schrödinger equation using collocation and radial basis functions. *Comput. Math. Appl.* **54**, 136 (2007)
- Mirzaei, M.D.D.: Numerical solution to the unsteady two-dimensional Schrödinger equation using meshless local boundary integral equation method. *Int. J. Numer. Meth. Eng.* **76**, 501 (2008)
- Sullivan, D.M., Citrin, D.: Determination of the eigenfunctions of arbitrary nanostructures using time domain simulation. *J. Appl. Phys.* **91**, 3219 (2002)
- Sullivan, D.M.: Determining a complete three-dimensional set of eigenfunctions for nanoscale structure analysis. *J. Appl. Phys.* **98**(1), 084311 (2005)
- Soriano, A., Navarro, E.A., Porti, J.A., Such, V.: Analysis of the finite difference time domain technique to solve the Schrödinger equation for quantum devices. *J. Appl. Phys.* **95**, 8011 (2004)
- Dai, W., Li, G., Nassar, R., Su, S.: On the stability of the FDTD method for solving a time-dependent Schrödinger equation. *Numer. Meth. Part. D. E.* **21**, 1140 (2005)
- Sullivan, D.M., Mossman, S., Kuzyk, M.G.: Time-domain simulation of three dimensional quantum wires. *PLoS ONE* **11**(1), e0153802 (2016)
- Sullivan, D., Citrin, D.: Time-domain simulation of two electrons in a quantum dot. *J. Appl. Phys.* **89**, 3841 (2001)
- Grynberg, G., Aspect, A., Fabre, C.: Introduction to Quantum Optics: From the Semi-Classical Approach to Quantized Light. Cambridge University Press, Cambridge (2010)
- Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., Laloë, F.: Quantum Mechanics. Wiley, New York (1977)