



DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR TABEL	viii
DAFTAR GAMBAR	ix
INTISARI	xiv
ABSTRACT	xv
I. PENDAHULUAN	1
I.1. Latar Belakang	1
I.2. Perumusan Masalah	5
I.3. Tujuan Penelitian	8
I.4. Manfaat Penelitian	8
II. DASAR TEORI	9
II.1. Penyelesaian Persamaan Schrödinger Gayut Waktu	9
II.2. Pendekatan Operator Terpisah (split-operator approach)	12
II.2.1. Pendekatan Orde Pertama	13
II.2.2. Pendekatan Orde Kedua	13
II.3. Komputasi Transformasi Fourier	14
II.3.1. Transformasi Fourier Diskret	14
II.3.2. Tranformasi Fourier Cepat (FFT: Fast Fourier Transform)	15
II.3.3. Transformasi Fourier Balik Cepat	15
III. CARA PENELITIAN	17
III.1 Algoritma Simulasi Metode Spektral	17
III.1.1 Parameter	19
III.1.2 Bentuk FFT untuk koordinat dan Momentum	19
III.1.3 Jumlah Titik Data	21
III.2 Fungsi Gelombang Input / Awal	22
III.3 Cara Penentuan Posisi dan Kecepatan Gelombang	23
III.4 Cara Penentuan Lebar Fungsi Gelombang ...	25
III.5 Sistem Kuantum yang Diteliti	25



Simulasi mekanika kuantum satu dimensi menggunakan metode Pseudo-Spektral
 DWIPUTRANTO, Surjawirawan, Dr. H. Sumartono Prawirosusanto
 Universitas Gadjah Mada, 2008. <http://eprints.ugm.ac.id/>

UNIVERSITAS
 GADJAH MADA

III.5.1 Partikel Bebas	26
III.5.2 Partikel dalam Potensial Linear	28
III.5.3 Partikel dalam Potensial Kuadratis (Osilator Harmonik)	29
III.5.4 Potensial Undak dan Potensial Tanggul	31
IV. HASIL DAN PEMBAHASAN	33
IV.1 Partikel Bebas	33
IV.1.1 Visualisasi	34
IV.1.2 Perbandingan hasil dengan teori	36
IV.1.3 Hasil Pengukuran Kecepatan Fungsi Gelombang	41
IV.1.4 Hasil Pengukuran Lebar Fungsi Gelombang	46
IV.2. Partikel dalam Potensial Linear	48
IV.3. Partikel dalam Potensial Osilator Harmonik	55
IV.3.1. Hasil Pengukuran Posisi Rata-rata ...	56
IV.3.2. Hasil Pengukuran Lebar Fungsi Gelombang	60
IV.4. Potensial Undak	61
IV.4.1. Pengaruh Penghalusan Tepi Potensial .	69
IV.5. Potensial Tanggul	73
IV.5.1. Pengaruh Penghalusan Tepi Potensial .	75
V KESIMPULAN	79
DAFTAR PUSTAKA	82
LAMPIRAN I	83
Transformasi Fourier Cepat (FFT:Fast Fourier Transform)	83
LAMPIRAN II	88
Pendekatan operator terpisah orde dua untuk potensial linear dan potensial kuadratis	88
LAMPIRAN III	91
Kode Program Simulasi	91



DAFTAR TABEL

	halaman
Tabel (4.1): Tabel jumlah cuplikan (N), lebar cuplikan (Δx), lebar jarak pengamatan (R_x) serta lebar cuplikan ruang momentum (Δk) dan lebar jangkauan momentum R_k .	33
Tabel (4.2): Hasil pengukuran kecepatan gelombang dan posisi awal partikel bebas berenergi 50 eV, dihitung dengan regresi linear.	44
Tabel (4.3): Tabel kemiringan grafik a dan perpotongan dengan sumbu vertikal b , dari hubungan $(\delta x(t))^2 = b + at^2$.	47
Tabel (4.4): Tabel parameter persamaan gerak gelombang dalam potensial linear pada Gambar (4.11)	52
Tabel (4.5): Perbandingan hasil simulasi Tabel (4.4) dengan teori.	53
Tabel (4.6): Nilai-nilai parameter grafik pada Gambar (4.12), sesuai dengan persamaan $(\delta x(t))^2 = b + at^2$.	55



DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar (1.1): Penggambaran sistem input-output metode spektral	3
Gambar (4.1): Grafik fungsi gelombang partikel bebas hasil simulasi untuk $n=512$, $ \psi(x,t) ^2$ sebagai fungsi x , untuk $t = 5,00 \cdot 10^{-21}$, $2,52 \cdot 10^{-17}$, $1,00 \cdot 10^{-16}$, $2,26 \cdot 10^{-16}$ detik. Massa partikel sebesar massa elektron, energi partikel 50 eV.	35
Gambar (4.2): Grafik deviasi hasil simulasi dengan teori untuk jumlah cuplikan $n=512$.	37
Gambar (4.3): Grafik deviasi hasil simulasi dengan teori untuk jumlah cuplikan $n=512$, untuk t dibawah $200 \cdot 10^{-18}$ detik.	38
Gambar (4.4): Grafik deviasi relatif antara hasil simulasi dengan teori, terhadap waktu untuk jumlah cuplikan $n=64, 128, 256$ dan 512 . Kurva yang membesar karena efek wrapping tidak diperlihatkan.	39
Gambar (4.5): Grafik deviasi relatif antara hasil simulasi dengan teori terhadap waktu per lebar daerah pengamatan untuk $n=64, 128, 256$ dan 512 .	41
Gambar (4.6): Grafik posisi gelombang terhadap waktu untuk jumlah cuplikan $n=512$, energi gelombang 50 eV.	42
Gambar (4.7): Grafik posisi gelombang terhadap waktu untuk jumlah cuplikan $n=64$, energi gelombang 50 eV	42



- Gambar(4.8): Gambar fungsi gelombang di ruang momentum $\psi(k)$ sebagai fungsi bilangan gelombang k , untuk $n=512$. Posisi puncak pada $k=3,6128$ angstrom⁻¹, lebar fungsi gelombang adalah $\delta k= 1,2566$ angstrom⁻¹. 45
- Gambar (4.9): grafik lebar fungsi gelombang δx^2 sebagai fungsi t^2 , untuk $n=512$. 46
- Gambar (4.10): Grafik deviasi relatif antara hasil simulasi dengan teori terhadap waktu untuk gelombang gauss-an dalam potensial linear, untuk jumlah cuplikan $n= 512$. Kurva yang membesar karena efek wrapping tidak diperlihatkan 50
- Gambar (4.11): Grafik posisi gelombang terhadap waktu gelombang gauss-an dalam potensial linear (V (eV)=-2,5 x (angstrom)) untuk jumlah cuplikan $n=512$. Gelombang mula-mula berada pada $x=-3$ angstrom dan berenergi mula-mula 50 eV 51
- Gambar (4.12): Grafik kuadrat lebar fungsi gelombang terhadap kuadrat waktu, untuk gelombang gauss-an dalam potensial linear (V (eV)=-2,5 x (angstrom)) untuk jumlah cuplikan $n=512$. Gelombang mula-mula memiliki lebar $dx=0,4$ angstrom dan berenergi mula-mula 50 eV 54
- Gambar (4.13): Grafik posisi rata-rata fungsi gelombang terhadap waktu, dalam potensial kuadratis $V(x)=0,08\left(\frac{512}{40}\right)^2 x^2$ eV 57
- Gambar (4.14): Grafik waktu posisi nol sebagai fungsi nomor posisi nol. 58
- Gambar (4.15): Grafik posisi dan lebar fungsi gelombang sebagai fungsi waktu. 61



- Gambar (4.16a): Grafik $P(x)=|\psi(x)|^2$ sebagai fungsi posisi x untuk energi partikel $E=70$ eV, ketika mengenai potensial undak $V_0=100$ eV.pada waktu $t=7,353 \cdot 10^{-17}$ detik. 63
- Gambar (4.16b): Grafik $P(x)=|\psi(x)|^2$ sebagai fungsi posisi x untuk energi partikel $E=70$ eV, ketika mengenai potensial undak $V_0=100$ eV.pada waktu $t=2,568 \cdot 10^{-16}$ detik. 64
- Gambar (4.16c): Grafik Koefisien Transmisi T dan Koefisien Refleksi sebagai fungsi waktu untuk energi partikel $E=70$ eV, ketika mengenai potensial undak $V_0=100$ eV. 65
- Gambar (4.17a): Grafik $P(x)=|\psi(x)|^2$ sebagai fungsi posisi x untuk energi partikel $E=100$ eV, ketika mengenai potensial undak $V_0=100$ eV.pada waktu $t=7,525 \cdot 10^{-17}$ detik. 66
- Gambar (4.17b): Grafik $P(x)=|\psi(x)|^2$ sebagai fungsi posisi x untuk energi partikel $E=100$ eV, ketika mengenai potensial undak $V_0=100$ eV.pada waktu $t=2,568 \cdot 10^{-16}$ detik. 66
- Gambar (4.18a): Grafik $P(x)=|\psi(x)|^2$ sebagai fungsi posisi x untuk energi partikel $E=130$ eV, ketika mengenai potensial undak $V_0=100$ eV.pada waktu $t=7,525 \cdot 10^{-17}$ detik. 67
- Gambar (4.18b): Grafik $P(x)=|\psi(x)|^2$ sebagai fungsi posisi x untuk energi partikel $E=130$ eV, ketika mengenai potensial undak $V_0=100$ eV.pada waktu $t=2,568 \cdot 10^{-16}$ detik. 68
- Gambar (4.19): Grafik Koefisien Transmisi T sebagai fungsi waktu untuk energi



partikel $E=100$ eV dan $E=130$ eV ketika mengenai potensial undak $V_0=100$ eV. 68

Gambar (4.20a): Grafik $P(x)=|\psi(x)|^2$ sebagai fungsi posisi x untuk energi partikel $E=70$ eV, ketika mengenai potensial undak $V_0=100$ eV yang diperhalus dengan $d=2$.pada waktu $t=7,353 \cdot 10^{-17}$ detik. 70

Gambar (4.20b): Grafik $P(x)=|\psi(x)|^2$ sebagai fungsi posisi x untuk energi partikel $E=70$ eV, ketika mengenai potensial undak $V_0=100$ eV yang diperhalus dengan $d=2$.pada waktu $t=2,568 \cdot 10^{-16}$ detik. 71

Gambar (4.21): Grafik Koefisien Transmisi T sebagai fungsi waktu untuk energi partikel $E=70$ eV, ketika mengenai potensial undak $V_0=100$ eV untuk potensial undak yang diperhalus dan potensial undak biasa. 72

Gambar (4.22a): Grafik $P(x)=|\psi(x)|^2$ sebagai fungsi posisi x untuk energi partikel $E=70$ eV, ketika mengenai potensial tanggul $V_0=100$ eV dengan lebar $a=1,56$ angstrom,.pada waktu $t=8,602 \cdot 10^{-17}$ detik. 74

Gambar (4.22b): Grafik $P(x)=|\psi(x)|^2$ sebagai fungsi posisi x untuk energi partikel $E=70$ eV, ketika mengenai potensial tanggul $V_0=100$ eV dengan lebar $a=1,56$ angstrom,.pada waktu $t=2,258 \cdot 10^{-16}$ detik. 75

Gambar (4.23a): Grafik $P(x)=|\psi(x)|^2$ sebagai fungsi posisi x untuk energi partikel $E=70$ eV, ketika mengenai potensial tanggul $V_0=100$ eV dengan lebar $a=1,56$ angstrom, dengan



penghalusan tepi potensial dengan $d=2$, pada waktu $t=8,602 \cdot 10^{-17}$ detik. 76

Gambar (4.23b): Grafik $P(x)=|\psi(x)|^2$ sebagai fungsi posisi x untuk energi partikel $E=70$ eV, ketika mengenai potensial tanggul $V_0=100$ eV dengan lebar $a=1,56$ angstrom, dengan penghalusan tepi potensial dengan $d=2$, pada waktu $t=2,258 \cdot 10^{-16}$ detik. 77

Gambar (4.24): Grafik koefisien transmisi T sebagai fungsi waktu untuk energi partikel $E=70$ eV, ketika mengenai potensial tanggul $V_0=100$ eV. 78