

Penentuan Energi Keadaan Dasar Osilator Anharmonik Kuantum Menggunakan Metode Random Walk

Iklas Sanubary^{1,*}, Yudha Arman²

¹Jurusan Teknik Mesin Politeknik Negeri Sambas

²Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Tanjungpura, Pontianak

Info Artikel

Histori Artikel:

Diajukan: 15 Juni 2021

Direvisi: 2 Juli 2021

Diterima: 1 September 2021

Kata kunci:

Anharmonik osilator

Energi keadaan dasar

Random walk

Keywords:

Anharmonic oscillator

Ground state energy

Random walk

Penulis Korespondensi:

Email: iklassanubary@gmail.com

ABSTRAK

Osilator kuantum anharmonik tidak dapat diselesaikan secara analitik, sehingga diperlukan metode lain untuk menentukan energi keadaan dasarnya. Pada penelitian ini, energi keadaan dasar osilator anharmonik kuantum diperoleh menggunakan metode *random walk*. Metode ini didasarkan pada probabilitas pergerakan acak partikel. Suku anharmonik yang digunakan adalah λx^3 dengan memvariasikan nilai λ . Teori gangguan dan metode kuantum difusi Monte Carlo digunakan untuk memverifikasi hasil metode *random walk*. Energi keadaan dasar osilator anharmonik kuantum yang diperoleh menggunakan metode *random walk* memiliki sesilih maksimum sebesar 0,8% dibandingkan dengan teori gangguan dan 2,5 % dibandingkan dengan metode kuantum difusi Monte Carlo.

Quantum anharmonic oscillators cannot be solved analytically, so other methods are needed to determine the ground state energy. In this research, the random walk method solves the ground state energy of a quantum anharmonic oscillator. This method is based on random movement particles probability. An anharmonic term is used λx^3 by varying λ . Perturbation theory and diffusion quantum Monte Carlo Method are used to a verified result of the random walk method. The ground state energy of quantum anharmonic oscillator results from the random walk method a maximum difference is 0.8% compared to perturbation theory and 2.5% compared to diffusion quantum Monte Carlo Method.

Copyright © 2020 Author(s). All rights reserved

I. PENDAHULUAN

Dalam mekanika kuantum, persamaan Schrödinger memiliki peranan penting yaitu dapat mendeskripsikan perilaku gelombang sebagai partikel yang tidak bisa dijelaskan pada mekanika klasik (Beiser, 1992). Deskripsi perilaku gelombang sebagai partikel diperoleh dari solusi persamaan tersebut. Namun, solusi persamaan Schrödinger secara umum sulit untuk diselesaikan walaupun dalam bentuk yang relatif sederhana (Abdy, Ihsan and Dewi, 2021). Salah satu contohnya adalah persamaan Schrödinger dengan potensial osilator anharmonik kuantum (Jafarpour and Afshar, 2001). Osilator anharmonik kuantum adalah model penting dalam studi banyak masalah dalam fisika (Ivanov, 1998; Sharma and Fiase, 2000; Zen and Nuraini, 2020). Namun, berbeda dengan osilator harmonik kuantum (Pandiangan, 2005) yang dapat diselesaikan secara analitik, osilator anharmonik kuantum tidak dapat diselesaikan secara analitik. Oleh karena itu, diperlukan metode lain untuk menyelesaikan persamaan tersebut.

Salah satu metode pendekatan yang dapat digunakan untuk mendapatkan solusi dari persamaan Schrödinger adalah teori gangguan (Floyd *et al.*, 2012; Men, Setianto and Wibawa, 2017). Namun, kelemahan dari teori gangguan ini adalah solusi yang diperoleh hanya cocok untuk suku gangguan (λ) yang kecil saja. Jika λ yang digunakan besar maka energi koreksi yang ditimbulkannya juga besar (Sanubary, Arman and Azwar, 2012).

Persamaan Schrödinger merupakan bentuk persamaan diferensial parsial orde kedua. Secara numerik, terdapat beberapa metode yang dapat digunakan untuk menyelesaikan persamaan diferensial parsial orde kedua seperti metode beda hingga (Asih, Waluya and Supriyono, 2018), metode elemen hingga (Supriyadi, Arkundato and Rofi'i, 2006), metode *random walk* (Gapar, Arman and Apriansyah, 2015; Godja, Ihwan and Apriansyah, 2016), dan kuantum difusi Monte Carlo (Wahdah, Arman and Lapanporo, 2016). Beberapa metode numerik tersebut tentunya memiliki kelebihan dan kelemahan masing-masing. Metode *random walk* memiliki kelebihan pada kesederhanaan algoritma yang digunakan. Pada metode ini, solusi diperoleh berdasarkan probabilitas pergerakan acak partikel dan probabilitas partikel tersebut untuk menggandakan diri atau menghilang (Anderson, 2002).

Pada penelitian ini, persamaan Schrödinger dengan potensial osilator anharmonik kuantum diselesaikan secara numerik menggunakan metode *random walk*. Solusi yang diperoleh berupa energi keadaan dasar osilator anharmonik kuantum dengan suku anharmonik λx^3 . Hasil metode *random walk* akan dibandingkan dengan teori gangguan (Sanubary, Arman and Azwar, 2012) dan metode kuantum difusi Monte Carlo (Wahdah, Arman and Lapanporo, 2016). Solusi ditentukan berdasarkan kesesuaian hasil yang diperoleh dari metode *random walk* dengan penelitian sebelumnya. Karena kemudahan yang dimiliki oleh metode *random walk*, metode ini dapat dijadikan metode alternatif untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger dengan potensial osilator anharmonik kuantum.

II. METODE

Menurut Anderson (2002), untuk menafsirkan persamaan Schrödinger dalam istilah random walk adalah dengan mensubstitusikan $\tau = it/\hbar$ ke dalam persamaan Schrödinger bergantung waktu untuk partikel bebas dalam ruang satu dimensi, yang dapat dituliskan sebagai

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

dengan t adalah waktu dan \hbar adalah $h/2\pi$.

Solusi umum dari persamaan (1) dapat ditulis sebagai (Gould, Tobochnik and Christian, 2007)

$$\psi(x, \tau) = \sum_n c_n \phi_n(x) e^{-E_n \tau} \quad (2)$$

Untuk τ yang cukup besar, suku yang berpengaruh pada persamaan (2) berasal dari suku yang merupakan nilai eigen energi terendah (E_0), yaitu:

$$\psi(x, \tau \rightarrow \infty) = c_0 \phi_0(x) e^{-E_0 \tau} \quad (3)$$

dengan E_0 dan c_0 merupakan nilai eigen dan koefisien energi terendah. Permasalahan yang muncul dari prosedur tersebut adalah *walker* akan menuju ke nol jika $E_0 > 0$ atau meningkat hingga jumlah tak

terbatas jika $E_0 < 0$. Untuk menghindari permasalahan ini, E_0 dihitung dari potensial referensi, V_{ref} , yang disesuaikan untuk mencapai populasi *random walker* yang *steady* (Gould, Tobochnik and Christian, 2007).

Persamaan (1) kemudian dapat dituliskan sebagai:

$$\frac{\partial \psi(x, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, \tau)}{\partial x^2} - [V(x) - V_{ref}] \psi(x, \tau) \quad (4)$$

dengan

$$\psi(x, \tau) = c_0 \phi_0(x) e^{-(E_0 - V_{ref})\tau} \quad (5)$$

Potensial referensi dapat diestimasi dari potensial rata-rata $\langle V \rangle$ dan perubahan jumlah *random walker* selama $\Delta\tau$ sesuai dengan persamaan:

$$V_{ref} = \langle V \rangle - \frac{a}{N_0 \Delta\tau} (N - N_0) \quad (6)$$

dengan N merupakan jumlah *random walker* yang baru, $\langle V \rangle$ adalah potensial rata-rata dan a adalah sebuah tetapan yang membuat jumlah *random walker* N tetap konstan. Pengintegralan persamaan (4) terhadap x untuk $x = -\infty$ hingga $x = \infty$, serta kondisi dimana suku $\partial \psi(x, \tau) / \partial x$ dapat diabaikan untuk

nilai $|x| \rightarrow \infty$ dan suku $\frac{\partial^2 \psi(x, \tau)}{\partial x^2} = 0$ maka persamaan (4) dapat dituliskan sebagai:

$$\int \frac{\partial \psi(x, \tau)}{\partial \tau} dx = - \int V(x) \psi(x, \tau) dx + V_{ref} \int \psi(x, \tau) dx \quad (7)$$

Karena diferensial persamaan (8) terhadap x akan menghasilkan

$$\frac{\partial \psi(x, \tau)}{\partial \tau} = (V_{ref} - E_0) \psi(x, \tau) \quad (8)$$

maka energi keadaan dasar dapat dituliskan sebagai:

$$E_0 = \frac{\int V(x) \psi(x, \tau) dx}{\int \psi(x, \tau) dx} \quad (9)$$

Selisih diperoleh dengan membandingkan hasil energi keadaan dasar dengan metode *random walk* dengan penelitian sebelumnya. Untuk menghitung selisih digunakan persamaan

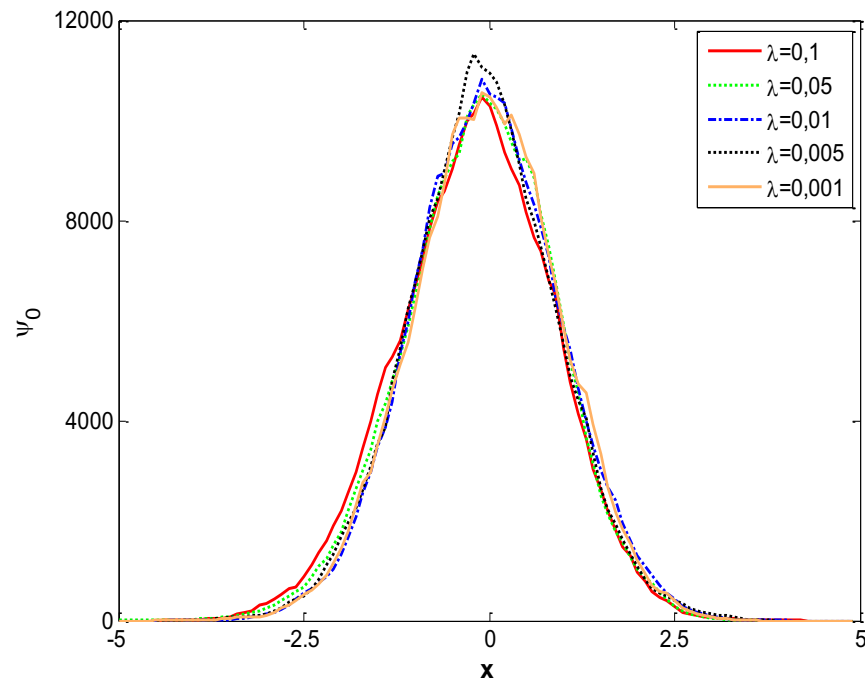
$$Selisih = \left| \frac{E_{0,rw} - E_0}{E_0} \right| \times 100\% \quad (10)$$

dengan $E_{0,rw}$ adalah energi keadaan dasar osilator kuantum anharmonik yang diperoleh menggunakan metode *random walk* dan E_0 adalah energi keadaan dasar osilator kuantum anharmonik yang diperoleh dari penelitian sebelumnya.

III. HASIL DAN DISKUSI

Simulasi ini menggunakan algoritma metode *random walk* untuk potensial osilator anharmonik kuantum, $V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \lambda x^3$. Parameter *input* dalam metode *random walk* ini adalah jumlah *walker* awal (N_0), jumlah *bins* yang merupakan jumlah selang posisi untuk estimasi fungsi gelombang keadaan dasar dan panjang langkah (ds) (Gould, Tobochnik and Christian, 2007). Parameter *input* yang digunakan $N_0=50$, jumlah *bins*=100 dan $ds=0,1$. Metode ini dapat mengestimasi fungsi gelombang keadaan dasar dan energi keadaan dasar serta menghitung jumlah *walker* pada akhir simulasi.

Hasil estimasi fungsi gelombang keadaan dasar osilator anharmonik kuantum untuk beberapa nilai λ menggunakan metode *random walk* dapat dilihat pada gambar 1.



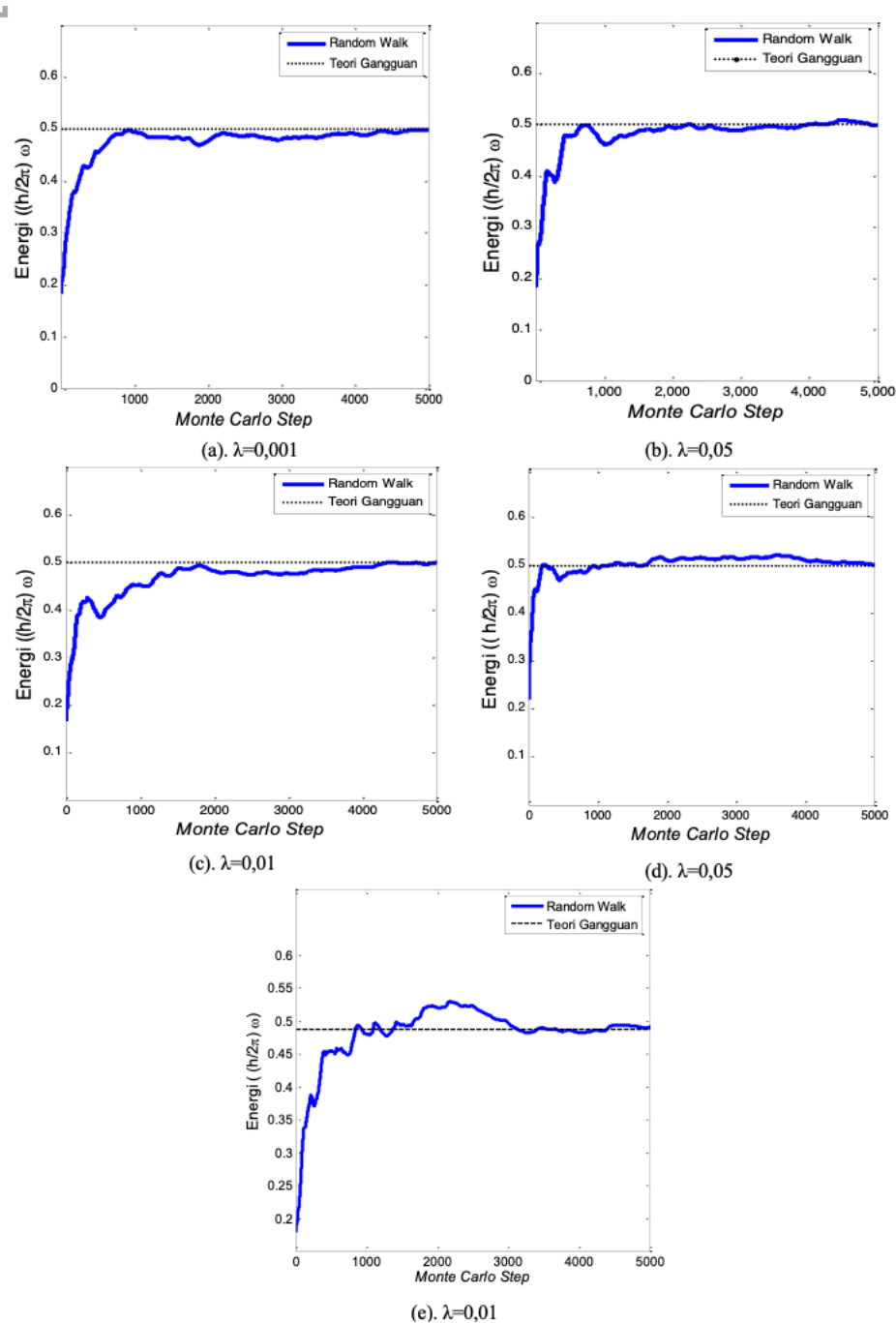
Gambar 1 Estimasi fungsi gelombang keadaan dasar osilator anharmonik kuantum untuk beberapa nilai λ

Dari gambar 1 terlihat fungsi gelombang keadaan dasar osilator anharmonik kuantum yang diperoleh menggunakan metode *random walk* untuk beberapa nilai λ memiliki pola yang hampir sama. Pada metode ini perubahan nilai λ membuat fungsi gelombang keadaan dasar osilator kuantum anharmonik menjadi berubah, namun perubahannya tidak linier. Hal ini terjadi karena metode ini didasarkan pada probabilitas pergerakan acak partikel dan probabilitas partikel tersebut untuk menggendakan dirinya atau menghilang. Jadi estimasi fungsi gelombang keadaan dasar osilator kuantum anharmonik sangat bergantung pada bilangan acak yang dibangkitkan. Puncak fungsi gelombang tertinggi terjadi pada $\lambda=0,005$ dan terendah pada $\lambda=0,1$.

Estimasi fungsi gelombang keadaan dasar diperoleh dengan menjumlahkan distribusi spasial *walker* pada selang posisi. Pertama *walker* akan ditempatkan pada posisi $-1 \geq x \leq 1$ kemudian *walker* akan digerakan secara acak. *Walker* bergerak secara acak ke kiri atau kanan dengan langkah yang tetap yaitu sebesar $ds = 0,1$. Gerak *walker* ke kiri atau ke kanan ditentukan oleh bilangan acak, apabila bilangan acak yang dibangkitkan $< 0,5$ maka *walker* akan bergerak ke kanan selain itu maka *walker* akan bergerak ke kiri. Pada saat *walker* bergerak, maka posisi *walker* akan berubah, posisi inilah yang diplot sebagai estimasi fungsi gelombang. Posisi *walker* ini akan terus berubah sampai diperoleh hasil yang konvergen.

Gambar 2 merupakan estimasi energi keadaan dasar osilator anharmonik kuantum dengan metode *random walk* yang dibandingkan dengan teori gangguan untuk beberapa nilai λ . Dari gambar 2 terlihat bahwa pada akhir simulasi, energi keadaan dasar osilator anharmonik kuantum yang diperoleh dengan metode *random walk* dan teori gangguan hampir sama. Selisih maksimum terdapat pada $\lambda=0,1$ sebesar 0,8%.

Estimasi energi keadaan dasar osilator anharmonik kuantum merupakan jumlah seluruh energi potensial rata-rata pada tiap langkah Monte Carlo dibagi dengan jumlah langkah Monte Carlo yang dilakukan. Energi keadaan dasar ini akan di hitung pada tiap langkah Monte Carlo sampai diperoleh solusi yang konvergen.



Gambar 2 Estimasi energi keadaan dasar osilator anharmonik kuantum untuk beberapa λ

Metode *random walk* sangat bergantung pada bilangan acak yang dibangkitkan sehingga solusi yang dihasilkan tidak selalu konvergen. Hal ini disebabkan oleh banyaknya *walker* yang menghilang pada saat simulasi. Dampak dari hal tersebut adalah estimasi fungsi gelombang akan berhenti dan energi keadaan dasar menjadi tidak konvergen. Masalah ini dapat dihindari dengan melakukan perubahan nilai konstanta a pada perhitungan V_{ref} . konstanta a berfungsi untuk membuat populasi *walker* tetap konstan.

Kelemahan yang dimiliki oleh metode *random walk* adalah keterbatasan untuk mengestimasi fungsi gelombang dan energi keadaan dasar osilator anharmonik kuantum. Hal ini disebabkan oleh banyaknya *walker* yang menghilang pada saat simulasi. Tidak terdapat konstanta a yang sesuai untuk keadaan ini sehingga sulit untuk membuat jumlah *walker* tetap konstan. Pada proses mengestimasi fungsi dan energi keadaan dasar osilator anharmonik kuantum ini tidak ada *walker* yang bergerak pada selang posisi yang ditentukan sehingga hasil menjadi tidak konvergen.

Energi keadaan dasar osilator anharmonik kuantum yang diperoleh menggunakan metode *random walk*, teori gangguan (Sanubary, Arman and Azwar, 2012) dan kuantum difusi Monte Carlo (Wahdah, Arman and Lapanporo, 2016) untuk beberapa λ disajikan dalam tabel 1 sebagai berikut

Tabel 1 Perbandingan metode random walk dengan penelitian sebelumnya

λ	Metode <i>Random Walk</i> (RW) ($\hbar\omega$)	Teori Gangguan (TG) ($\hbar\omega$)	Kuantum Difusi Monte Carlo (MC) ($\hbar\omega$)	Selisih (RW-TG)	Selisih (RW-MC)
0.001	0.498005	0.499998	0.500300	0.4 %	0.4 %
0.005	0.497827	0.499965	0.501300	0.4 %	0.6 %
0.01	0.498578	0.499862	0.502000	0.3 %	0.7 %
0.05	0.500029	0.496562	0.500900	0.7 %	1.7 %
0.1	0.490357	0.486250	0.491600	0.8 %	2.5 %

Berdasarkan tabel 1 terlihat bahwa kedua metode memperoleh energi keadaan dasar yang hampir sama untuk setiap λ . Metode *random walk* dan teori gangguan memiliki selisih maksimum sebesar 0,8 % , sedangkan selisih maksimum metode *random walk* dan kuantum difusi Monte Carlo sebesar 2,5 % . Dari perbandingan tersebut juga terlihat bahwa penambahan nilai λ cenderung menambah selisih metode *random walk* dengan penelitian sebelumnya.

IV. KESIMPULAN

Metode *random walk* sangat bergantung pada bilangan acak yang dibangkitkan sehingga solusi yang dihasilkan tidak selalu konvergen. Namun, dengan pemilihan konstanta a yang tepat dapat membuat solusi yang dihasilkan menjadi konvergen. Oleh karena itu solusi hanya dapat diperoleh apabila energi keadaan dasar yang dihasilkan sudah konvergen. Hasil penelitian menunjukkan bahwa energi keadaan dasar osilator kuantum anharmonik yang dihitung menggunakan metode *random walk* dan teori gangguan memiliki selisih 0,8 % , sedangkan selisih maksimum metode *random walk* dan kuantum difusi Monte Carlo sebesar 2,5 % . Berdasarkan hal tersebut dapat disimpulkan bahwa metode *random walk* dapat diterima sebagai solusi.

DAFTAR PUSTAKA

- Abdy, M., Ihsan, H. and Dewi, D. A. R. ,2021, ‘Solusi Persamaan Schrodinger dengan Menggunakan Metode Transformasi Diferensial’, *JMathCos (Journal of Mathematics, Computations, and Statistics)*, 4(1), pp. 47–54. doi: 10.35580/jmathcos.v4i1.20449.
- Anderson, J. B., 2002, *Diffusion and Green’s Function Quantum Monte Carlo Methods*, John von Neumann Institute for Computing.
- Asih, T. S. N., Waluya, B. and Supriyono, S., 2018, ‘Perbandingan Finite Difference Method dan Finite Element Method dalam Mencari Solusi Persamaan Diferensial Parsial’, *PRISMA, Prosiding Seminar Nasional Matematika*, 1, pp. 885–888.
- Beiser, A., 1992, *Konsep fisika modern*, Penerbit Erlangga.
- Floyd, B. *et al.*, 2012, ‘Anharmonic Oscillator Potentials: Exact and Perturbation Results’, 25.
- Gapar, G., Arman, Y. and Apriansyah, A., 2015, ‘Solusi Penyelesaian Persamaan Laplace dengan Menggunakan Metode Random Walk’, *POSITRON*, 5(2). doi: 10.26418/positron.v5i2.12019.
- Godja, B. Y., Ihwan, A. and Apriansyah, 2016, ‘Penentuan Distribusi Suhu pada Permukaan Geometri Tak Tentu Menggunakan Metode Random Walk’, *POSITRON*, 6(1). doi: 10.26418/positron.v6i1.15922.
- Gould, H., Tobochnik, J. and Christian, W., 2007, *An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems*. Pearson Addison Wesley.

- Ivanov, I. A., 1998, 'Sextic and octic anharmonic oscillators: connection between strong-coupling and weak-coupling expansions', *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 31(26), pp. 5697–5704. doi: 10.1088/0305-4470/31/26/009.
- Jafarpour, M. and Afshar, D., 2001, 'Calculation of energy eigenvalues for the quantum anharmonic oscillator with a polynomial potential', *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 35(1), pp. 87–92. doi: 10.1088/0305-4470/35/1/307.
- Men, L. K., Setianto, S. and Wibawa, B. M., 2017, 'Energi Total Keadaan Dasar Atom Berilium dengan Teori Gangguan', *Jiif (Jurnal Ilmu dan Inovasi Fisika)*, 1(2), pp. 99–104. doi: 10.24198/jiif.v1i02.12858.
- Pandiangan, P., 2005, 'Solusi Persamaan Schrödinger Osilator Harmonik Dalam Ruang Momentum', *Jurnal Matematika Sains dan Teknologi*, 6(1), pp. 20–30.
- Sanubary, I., Arman, Y. and Azwar, A., 2012, 'Penentuan Energi Osilator Kuantum Anharmonik Menggunakan Teori Gangguan', *POSITRON*, 2(2). doi: 10.26418/positron.v2i2.985.
- Sharma, L. K. and Fiase, J. O., 2000, 'Non-perturbative energy expressions for the generalized anharmonic oscillator', *European Journal of Physics*, 21(2), pp. 167–174. doi: 10.1088/0143-0807/21/2/306.
- Supriyadi, -, Arkundato, A. and Rofi'i, I., 2006, 'Solusi Numerik Persamaan Schrödinger Atom Hidrogen Dengan Metode Elemen Hingga (Finite Element Methods)', *BIMIPA*, 16(2), pp. 51–59.
- Wahdah, N., Arman, Y. and Lapanporo, B. P., 2016, 'Penentuan Energi Keadaan Dasar Osilator Kuantum Anharmonik Menggunakan Metode Kuantum Difusi Monte Carlo', *POSITRON*, 6(2), pp. 47–52. doi: 10.26418/positron.v6i2.16837.
- Zen, N. A. and Nuraini, R., 2020, 'Tingkat Energi Pada Osilator Anharmonik 1 Dimensi Menggunakan Metode Perturbasi Orde 2', *JURNAL ILMU FISIKA | UNIVERSITAS ANDALAS*, 12(2), pp. 70–78. doi: 10.25077/jif.12.2.70-78.2020.