

SOLUSI NUMERIK PERSAMAAN SCHRÖDINGER ATOM HIDROGEN DENGAN METODE ELEMEN HINGGA (FINITE ELEMENT METHODS)

(Numerical Solutions of the Schrodinger Equation of Hydrogen Atom using Finite Element Method)

Supriyadi¹, A. Arkundato¹, I. Rofi'i¹

Jurusan Fisika FMIPA Universitas Jember

ABSTRAK

Telah dihitung tingkat-tingkat energi atom hidrogen menggunakan metode numerik FEM (finite element methods). Untuk tiga tingkat energi paling rendah menghasilkan:

$$E_1 = -0.9417091337121758 \text{ Rydberg (1 R = 13,6 eV),}$$

$$E_2 = -0.2382036433048052 \text{ Rydberg,}$$

$$E_3 = -0.1067644617719800 \text{ Rydberg.}$$

Selisih terhadap hasil analitik untuk hasil tersebut adalah masing-masing 5,83% (-13,6 eV), 4,72% (-3,4 eV) dan 3,91% (-1,5 eV), dengan nilai dalam tanda kurung adalah hasil perhitungan analitik. Hasil numerik yang diperoleh cukup baik dan grafik fungsi gelombang yang didapat sesuai dengan analitik.

Kata kunci: FEM, Atom hidrogen, Persamaan Schrödinger

ABSTRACT

It has been computed the energy levels of Hydrogen Atom. The methods used for the computation is FEM (finite element methods). For first three energy levels the result of calculations are:

$$E_1 = -0.9417091337121758 \text{ Rydberg (1 R = 13,6 eV),}$$

$$E_2 = -0.2382036433048052 \text{ Rydberg,}$$

$$E_3 = -0.1067644617719800 \text{ Rydberg.}$$

There are small difference between two methods (numerically or analytically), i.e., 5,83% (-13,6 eV), 4,72% (-3,4 eV) and 3,91% (-1,5 eV). The values in the parentheses is the analytic ones.

Keywords : FEM, Hydrogen atom, Schrödinger equation.

Makalah diterima tanggal 1 Maret 2006

1. PENDAHULUAN

Telaah mikroskopis atom hidrogen dengan menggunakan persamaan Schrödinger sejauh ini telah dikerjakan dengan baik secara analitik (Brasden dkk,

1995; Gasiorowicz, 1995; Thankappan, 1985). Untuk atom bukan atom hidrogenik (atom multi elektron), maka solusi analitik yang diinginkan sebagai pemecahan persamaan Schrödingernya menjadi makin rumit diperoleh dan memerlukan

aproksimasi-aproksimasi lebih lanjut. Salah satu aproksimasi yang dapat diadopsi adalah mencari solusi numerik menggunakan metode-metode numerik yang ada. Metode numerik pemecahan persamaan diferensial (misalnya persamaan Schrödinger) yang umum digunakan adalah metode *finite difference* (FD). Metode numerik yang lain adalah metode elemen hingga (*finite element methods*, FEM) yang saat ini mulai banyak dieksplorasi dan berkembang cepat untuk diterapkan pada problem-problem fisika. Salah satu kelebihan FEM adalah dapat diterapkan untuk problem fisis dimana bentuk potensialnya (dalam persamaan Schrödinger) sangat kompleks dan kurang simetris (Ram dkk, 2002). Pada riset yang kami lakukan, sebagai riset pendahuluan, kami mencoba menggunakan metode FEM ini untuk atom hidrogen yaitu menghitung tingkat-tingkat energinya secara *first principle*, yaitu memecahkan persamaan Schrödinger untuk atom hidrogen. Hasil numerik yang diperoleh kemudian dibandingkan dengan hasil analitik yang sudah ada.

2. TEORI

A. Solusi Analitik Persamaan Schrödinger Atom Hidrogen

Potensial Coulomb untuk interaksi elektron dengan inti atom dalam atom hidrogen dapat dinyatakan dengan:

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}. \text{ (dalam CGS)} \quad (1)$$

Dengan potensial ini maka persamaan Schrödinger bebas waktu untuk atom Hidrogen adalah

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \mathbf{y}(\vec{r}) - \frac{e^2}{r} \mathbf{y}(\vec{r}) = E \mathbf{y}(\vec{r}). \quad (2)$$

Penyelesaian lengkap secara analitik secara panjang lebar telah banyak dibahas dalam buku teks Bradsen dkk, 1995; Gasiorowicz, 1995; Thankappan, 1985), yang menghasilkan solusi untuk atom hidrogen adalah:

$$E_n = -\frac{e^2}{2a_0 n^2} \cong -\frac{13,6}{n^2} eV \quad n=1,2,3,\dots \quad (4)$$

B. Solusi Numerik FEM Persamaan Schrodinger Atom Hidrogen

B.1. Integral Aksi

Dinamika sistem fisis, baik klasik maupun kuantum sebenarnya mengikuti rumusan persamaan diferensial yang dapat diturunkan dari prinsip aksi stasioner yang bersifat umum. Dalam hal ini, Euler dan Lagrange telah memberikan suatu *framework* untuk merealisasikan prinsip ini dalam memecahkan problem fisika. Di dalam mekanika klasik, maka azas aksi stasioner menyatakan untuk sistem konservatif integral berikut

$$\Lambda = \int_{t_a}^{t_b} L(q, \dot{q}, t) dt \quad (5)$$

bersifat stasioner (Ram dkk, 2002). L adalah Lagrangian. Variabel q disebut dengan integral aksi atau singkatnya disebut **aksi**. Berdasarkan syarat batas (B.C = boundary conditions) integral aksi Λ diambil pada nilai ekstrem menurut syarat

$$d\Lambda = 0 \quad (6)$$

Evaluasi integral aksi sangat membantu kita dalam mengkaji dinamika sistem kuantum, dalam hal ini persamaan Schrödinger, dengan menggunakan FEM.

B.2. Metode FEM

Konsep dasar yang melandasi FEM adalah prinsip diskritisasi. Secara umum, diskritisasi dapat diartikan sebagai upaya untuk membagi sistem dari problem yang akan diselesaikan (obyek) menjadi bagian-bagian yang lebih kecil. Bagian-bagian yang lebih kecil tersebut selanjutnya disebut sebagai elemen hingga. Diskritisasi ini muncul karena adanya kesulitan untuk mempelajari sistem secara keseluruhan. Secara tidak langsung, diskritisasi juga berarti pendekatan untuk sesuatu (problem) yang riil dan kontinu.

Dalam merumuskan suatu problem fisis ke dalam analogi diskritisasi FEM, ada beberapa pendekatan yang dapat digunakan. Pendekatan yang sering digunakan yaitu

metode Galerkin dan metode variasi (am dkk, 2002; Nikishov, 2004; Desai, 1988). Perumusan FEM dengan menggunakan metode Galerkin didasarkan pada minimasi residu (sisa) yang tertinggal setelah suatu solusi pendekatan disubsitusikan ke dalam persamaan diferensial dari suatu problem fisis. Sedangkan metode variasi didasarkan pada nilai-nilai stasioner dari suatu fungsi atau besaran skalar yang berkaitan dengan suatu problem fisis untuk mendapatkan solusinya (Desai, 1988).

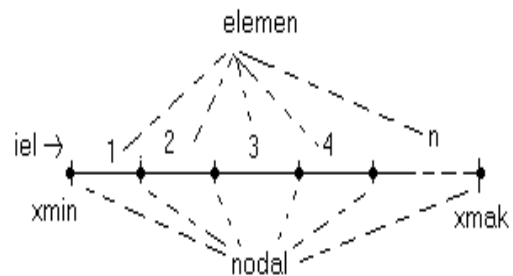
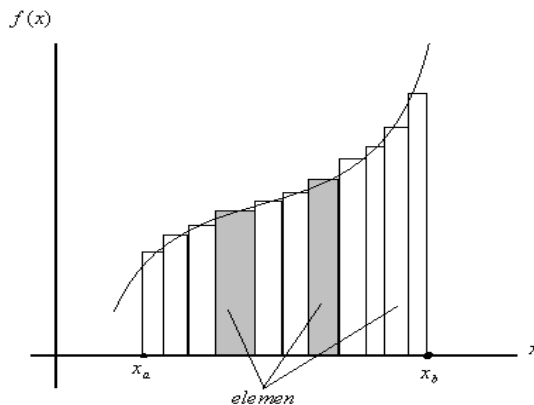
Perumusan FEM dalam penelitian ini dipilih pendekatan metode variasi dengan menggunakan integral aksi yang diperoleh dari prinsip aksi stasioner. Dengan pendekatan ini, perumusan FEM berangkat dari definisi integral fungsi. Misalkan kita mempunyai fungsi $f(x)$ yang akan diintegrasikan dalam selang dari x_a, x_b . Dengan metode trapezium kita dapat menghitung integral tertentu ini dalam bentuk jumlahan dari elemen-elemen luas secara keseluruhan, seperti pada gambar (1a).

Elemen-elemen luas diaproksimasi dengan sebuah konstanta atau lebih umum sebuah polinomial (Ram dkk, 2002) (Ram dkk, 2002).

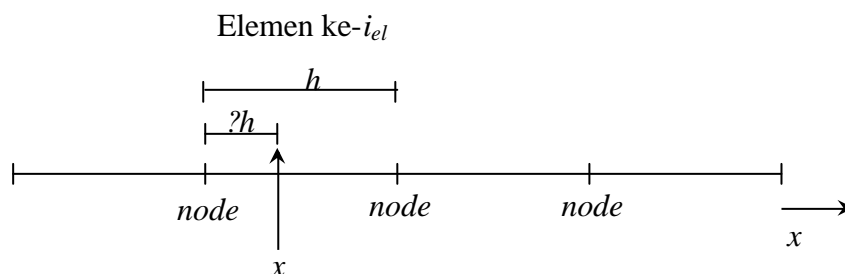
Untuk problem fisis satu dimensi dalam daerah $[x_{min}, x_{mak}]$ maka perhitungan integral aksi dapat dilakukan dalam bentuk diskritisasi region. Daerah integrasi dibagi menjadi elemen-elemen yang lebih kecil yang disebut elemen-elemen hingga, seperti pada gambar (1b). Integral aksi merupakan jumlahan integral-integral aksi itu sendiri pada masing-masing elemen sehingga dapat dituliskan menjadi

$$\Lambda = \sum_{(iel)}^{nelem} \Lambda^{(iel)} \quad (7)$$

Titik-titik koordinat $x_{min}, x_2, x_3, x_4, \dots, x_{max}$ disebut dengan *node* yaitu titik awal, titik-titik perpotongan antar elemen dan titik akhir. Elemen ke- i_{el} dari keseluruhan elemen ditunjukkan pada gambar (2) di bawah ini.



Gambar 1. (a) Integral $f(x)$ merupakan jumlahan elemen-elemen luas di bawah kurva
(b) Diskritisasi region



Gambar 2. Elemen ke- i_{el} dari diskritisasi

Dari gambar di atas, h menyatakan ukuran dari sebuah elemen dimana setiap elemen mempunyai ukuran yang sama yaitu

$$h = (x_{\max} - x_{\min}) / n_{elem} \quad (8)$$

Ada dua sistem koordinat yang digunakan dalam FEM yaitu koordinat global x dan koordinat lokal ξ . Koordinat global berlaku untuk seluruh elemen yaitu dari x_{\min} - x_{\max} , sedangkan koordinat lokal hanya berlaku pada sebuah elemen saja (Ram dkk, 2002). Hubungan antara koordinat global dan koordinat lokal dinyatakan

$$x = (i_{el} - 1)h + \xi h \quad (9)$$

Titik-titik *nodal* merupakan titik-titik yang strategis untuk menuliskan fungsi-fungsi matematis yang menggambarkan solusi-solusi yang belum diketahui. Fungsi matematis yang digunakan biasanya berupa polinomial karena memberikan perumusan FEM yang relatif mudah dan sederhana. Solusi yang belum diketahui, misalnya fungsi gelombang $\Psi(x)$ akan dinyatakan sebagai kombinasi linear dari interpolasi polinomial $N_j(x)$ dikalikan dengan koefisien yang juga belum diketahui Ψ_j di dalam masing-masing elemen. Ada beberapa interpolasi polinomial yang dapat digunakan misalnya interpolasi polinomial Lagrange, interpolasi polinomial Hermite dan lain sebagainya. Integral spasial dalam integral

aksi sekarang dapat dikerjakan di dalam seluruh masing-masing elemen, sedemikian hingga integral aksi diberikan dalam bentuk suku-suku koefisien-koefisien yang belum diketahui tersebut.

Polinomial yang digunakan tersebut di atas misalnya terdiri dari n_{intrap} buah polinomial, yang didefinisikan hanya pada elemen yang tertentu sedang pada selain elemen tersebut diatur nol. Dalam hal ini polinomial interpolasi dipilih sedemikian hingga koefisien-koefisiennya (Ψ_j) adalah nilai-nilai solusi pada titik-titik tertentu diantara elemen yang disebut dengan *nodal*. Jadi fungsi gelombang di dalam elemen ke- i_{el} adalah

$$\Psi(x) = \sum_j^{n_{intrap}} \Psi_j^{iel} N_j^{iel}(x) \quad (10)$$

Untuk menjamin sifat kontinuitas antar elemen maka disyaratkan bahwa nilai *nodal* pertama Ψ_1 pada sebuah elemen tertentu harus sama dengan nilai *nodal* terakhir $\Psi_{n_{intrap}}$ milik elemen sebelumnya. Untuk variabel *nodal* y_j^{iel} , kontinuitas fungsi gelombang harus memenuhi

$$y_2^{iel} = y_1^{iel+1} \quad (11)$$

Integral aksi di dalam elemen ke- i_{el} dapat dinyatakan dengan:

$$\Lambda^{(iel)} = \sum_{i,j}^{n_{intrap}} \Psi_i^* \left[\int dx N_i(x) O N_j(x) \right] \Psi_j = \sum_{i,j}^{n_{intrap}} \Psi_i^* M_{ij}^{iel} \Psi_j \quad (12)$$

O adalah operator rapat Lagrangian (Ram dkk, 2002). Pada rumusan di atas kita melakukan evaluasi integral elemen-demi elemen. Integral aksi dapat dinyatakan dalam matriks M .

$M_{11}^{(1)}$	$M_{12}^{(1)}$				
$M_{21}^{(1)}$	$M_{22}^{(1)} + M_{11}^{(2)}$	$M_{12}^{(2)}$			
	$M_{21}^{(2)}$	$M_{22}^{(2)} + M_{11}^{(3)}$	$M_{12}^{(3)}$		
		$M_{21}^{(3)}$	$M_{22}^{(3)} + M_{11}^{(4)}$	$M_{12}^{(4)}$	
			$M_{21}^{(4)}$	$M_{22}^{(4)} + M_{11}^{(5)}$	$M_{12}^{(5)}$
				$M_{21}^{(5)}$	$M_{22}^{(5)}$

Gambar 3. Matriks global untuk problem satu dimensi (Ram dkk, 2002)

Dalam sudut pandang titik *nodal*, interpolasi polinomial berhubungan dengan batas *node* dari dua buah elemen yang berdekatan sesuai dengan fungsi interpolasi pada *node* yang bersangkutan. Dengan menggunakan indeks global a dan β , maka total integral aksi diberikan oleh

$$\Lambda = \sum_{ab}^{nglobal} \Psi_a^* M_{ab} \Psi_b \quad (13)$$

Penerapan azas variasi *nodal* yaitu dengan memvariasikan integral aksi terhadap variabel *nodal* Ψ_a^* , maka didapatkan persamaan simultan untuk koefisien Ψ_β yang belum diketahui

$$\frac{d\Lambda}{d\Psi_a^*} = \sum_b M_{ab} \Psi_b = 0 \quad (14)$$

Beberapa koefisien Ψ_β diketahui dari syarat batas (BC) dan dimasukkan ke dalam persamaan simultan ini. Koefisien-koefisien yang lainnya dapat diperoleh dengan metode matriks standar setelah nilai batas diterapkan untuk koefisien yang bersangkutan (Ram dkk, 2002).

B.3. Rumusan FEM untuk Bagian Radial

Dalam penelitian ini, syarat batas simetri bola dibatasi untuk momentum sudut l sama dengan nol yaitu keadaan (state) ns . Dengan melakukan separasi variabel $\mathbf{y}(r, \mathbf{q}, \mathbf{j}) = R(r)Y(\mathbf{q}, \mathbf{j})$ dan mendefinisikan kembali fungsi radial $R(r)$ sebagai $\psi(r)$, maka persamaan fungsi

$$\begin{aligned} d\Lambda &= \int_{t_1}^{t_2} dt \int_V d\bar{r} \left[\frac{\partial O}{\partial \mathbf{y}} d\mathbf{y} + \frac{\partial O}{\partial (\nabla \mathbf{y})} d(\nabla \mathbf{y}) + \frac{\partial O}{\partial \dot{\mathbf{y}}} d\dot{\mathbf{y}} \right] = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_V d\bar{r} \left[\frac{\partial O}{\partial \mathbf{y}} d\mathbf{y} + \frac{\partial O}{\partial (\nabla \mathbf{y})} \nabla d\mathbf{y} + \frac{\partial O}{\partial \dot{\mathbf{y}}} \frac{\partial}{\partial t} d\mathbf{y} \right] \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \int_V d\bar{r} \left[\frac{\partial O}{\partial \mathbf{y}} - \nabla \cdot \frac{\partial O}{\partial (\nabla \mathbf{y})} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial O}{\partial \dot{\mathbf{y}}} \right] d\mathbf{y} + \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{\Sigma} da \frac{\partial O}{\partial (\nabla \mathbf{y})} d\mathbf{y} + \int_V d\bar{r} \frac{\partial O}{\partial \dot{\mathbf{y}}} d\dot{\mathbf{y}} \Big|_{t_1}^{t_2} = 0 \quad (18) \end{aligned}$$

Berdasarkan syarat variasi, dua suku yang terakhir dapat diabaikan sehingga

$$\frac{\partial O}{\partial \mathbf{y}} - \nabla \cdot \frac{\partial O}{\partial (\nabla \mathbf{y})} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial O}{\partial \dot{\mathbf{y}}} = 0 \quad (19)$$

Dengan membandingkan (16) dan (19) untuk variasi $d\psi^*$, didapat

$$O = \mathbf{y}^{*'}(r) \mathbf{y}'(r) - \mathbf{y}^*(r) \left(\frac{2}{r} + \mathbf{e} \right) \mathbf{y}(r) \quad (20)$$

gelombang radial atom hidrogen pers.(3) dapat dituliskan kembali menjadi

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) \right] - \frac{e^2}{r} \right\} \psi(r) = E \mathbf{y}(r) \quad (15)$$

Dengan memperkenalkan definisi satuan energi

$$\text{Rydberg } R_\infty = \frac{\hbar^2}{2m_e a_o^2} = \frac{e^2}{2a_o} = 13,6 \text{ eV}$$

dan memperkenalkan simbol e untuk energi tereduksi maka pers.(15) menjadi:

$$-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \mathbf{y}(r) \right) - \frac{2}{r} \mathbf{y}(r) = \mathbf{e} \mathbf{y}(r) \quad (16)$$

Prinsip aksi stasioner dapat diterapkan untuk menurunkan integral aksi persamaan Schrödinger. Untuk suatu sistem fisis, integral aksi dapat dituliskan (Koltun dkk, 1988; Thankappan, 1985)

$$\Lambda = \int_{t_a}^{t_b} L dt = \int_{t_a}^{t_b} dt \int_V d\bar{r} O[\mathbf{y}, \nabla \mathbf{y}; \dot{\mathbf{y}}; t] \quad (17)$$

dimana O merupakan rapat Lagrangian. Prinsip aksi stasioner mensyaratkan ψ bernilai ekstremum, dimana variasi O bernilai nol untuk sembarang variasi $d\psi$ dalam ψ dengan batasan bahwa $d\psi(r, t_a) = d\psi(r, t_b) = 0$.

Substitusi (20) ke (17) didapatkan integral aksi untuk bagian radial atom hidrogen:

$$\Lambda = \int_{t_1}^{t_2} dt \int_0^\infty dr r^2 \left[\mathbf{y}^{*'}(r) \mathbf{y}'(r) - \mathbf{y}^*(r) \left(\frac{2}{r} + \mathbf{e} \right) \mathbf{y}(r) \right] \quad (21)$$

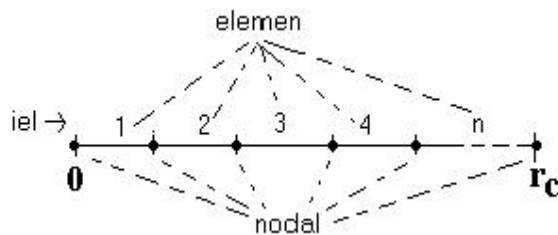
Ekstremum ψ tak bergantung pada waktu jadi integrasi terhadap waktu dapat diabaikan.

$$\Lambda = \int_0^{r_c} dr r^2 \left[\mathbf{y}^{*'}(r) \mathbf{y}'(r) - \mathbf{y}^*(r) \left(\frac{2}{r} + \mathbf{e} \right) \mathbf{y}(r) \right] \quad (22)$$

Pada daerah asimtotik yaitu di $r=8$, fungsi gelombang dan turunannya menghilang secara eksponensial, sehingga agar dapat diselesaikan secara numerik maka batas atas integral aksi harus diubah berhingga, $r = r_c$. Nilai r_c dipilih sedemikian rupa sehingga fungsi gelombangnya mendekati nol di daerah asimtotik jauh.

$$\Lambda = \int_0^{r_c} dr r^2 \left[\mathbf{y}^{*'}(r) \mathbf{y}'(r) - \mathbf{y}^*(r) \left(\frac{2}{r} + \mathbf{e} \right) \mathbf{y}(r) \right] \quad (23)$$

Dengan menggunakan prinsip diskritisasi region, maka integral aksi di atas dapat diperkirakan dengan memecah daerah integrasi menjadi *nelem* buah elemen kecil satu dimensi. Untuk daerah fisis $[0, r_c]$ seperti gambar di bawah



Gambar 4. Elemen di dalam daerah $0, r_c$

Ukuran setiap elemen yaitu

$$h = r_c / \text{nelem} \quad (24)$$

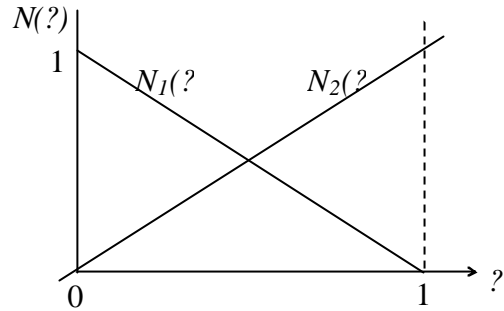
Pers. (23) dievaluasi dalam diskret dan untuk elemen ke- i_{el} dapat dinyatakan

$$\Lambda^{(iel)} = \int_0^h dr r^2 \left[\mathbf{y}^{*'}(r) \mathbf{y}'(r) - \mathbf{y}^*(r) \left(\frac{2}{r} + \mathbf{e} \right) \mathbf{y}(r) \right] \quad (25)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(r) &= \mathbf{y}_1^{iel} \left(\frac{[(i_{el} - 1)h + h] - [(i_{el} - 1)h + \mathbf{h}h]}{[(i_{el} - 1)h + h] - [(i_{el} - 1)h]} \right) + \mathbf{y}_2^{iel} \left(\frac{[(i_{el} - 1)h + \mathbf{h}h] - [(i_{el} - 1)h]}{[(i_{el} - 1)h + h] - [(i_{el} - 1)h]} \right) \\ &= \mathbf{y}_1^{iel} \left(\frac{h - \mathbf{h}h}{h} \right) + \mathbf{y}_2^{iel} \left(\frac{\mathbf{h}h}{h} \right) \\ &= \mathbf{y}_1^{iel} (1 - \mathbf{h}) + \mathbf{y}_2^{iel} (\mathbf{h}) \end{aligned} \quad (28)$$

Dari persamaan ini dapat diketahui bahwa fungsi interpolasi polinomial lokal pada titik awal $N_1(?) = 1 - ?$ dan pada titik akhir $N_2(?) = ?$. Turunan dari fungsi gelombang $?(r)$ adalah

Fungsi gelombang $?(r)$ pada persamaan ini dapat diinterpolasi dengan menggunakan interpolasi polinomial Lagrange. Interpolasi polinomial Lagrange yang digunakan memerlukan dua buah *node* ($n=2$) untuk setiap elemen, seperti ditunjukkan pada gambar 6.



Gambar (6). Fungsi Lagrange untuk interpolasi linier-dua node tiap elemen [2]

Substitusi fungsi polinomial N_j pada pers.(10), fungsi gelombang $?(r)$ menjadi

$$\begin{aligned} \mathbf{y}(r) &= \mathbf{y}_1^{iel} N_1^{iel}(r) + \mathbf{y}_2^{iel} N_2^{iel}(r) \\ &= \mathbf{y}_1^{iel} \left(\frac{r_2^{iel} - r}{r_2^{iel} - r_1^{iel}} \right) + \mathbf{y}_2^{iel} \left(\frac{r - r_1^{iel}}{r_2^{iel} - r_1^{iel}} \right) \end{aligned} \quad (26)$$

dimana r_1^{iel} dan r_2^{iel} merupakan titik-titik *nodal* pada elemen ke- i_{el} , r_1^{iel} merupakan titik awal dan r_2^{iel} merupakan titik akhir. Pada gambar (6) digunakan koordinat lokal $?$ dalam sebuah elemen yang mempunyai batas $[0,1]$ sehingga titik-titik *nodal*-nya

$$r_1^{iel} = (i_{el} - 1)h \quad (27)$$

$$r_2^{iel} = (i_{el} - 1)h + h$$

Substitusi titik-titik *nodal* (27) ke dalam fungsi gelombang (26) didapatkan

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{y}(r)}{dr} &= \mathbf{y}_1^{iel} \frac{1}{h} \frac{d}{dh} N_1(\mathbf{h}) + \mathbf{y}_2^{iel} \frac{1}{h} \frac{d}{dh} N_2(\mathbf{h}) = \mathbf{y}_1^{iel} \frac{1}{h} \frac{d}{dh} (1-\mathbf{h}) + \mathbf{y}_2^{iel} \frac{1}{h} \frac{d}{dh} (\mathbf{h}) \\ &= \frac{1}{h} (-\mathbf{y}_1^{iel} + \mathbf{y}_2^{iel}) \end{aligned} \quad (29)$$

Faktor h sebagai denominator muncul akibat perubahan koordinat dari r menjadi h . Jika integral aksi pada sebuah elemen (29) dituliskan dalam notasi matriks bujur sangkar 2×2 , maka

$$\begin{aligned} \Lambda^{(iel)} &= \int_0^1 h^3 d\mathbf{h} [(i_{el} - 1) + \mathbf{h}] \left\{ \mathbf{y}_1^{*(iel)}, \mathbf{y}_2^{*(iel)} \right\} \left[\frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. - \frac{2}{h(i_{el} - 1 + \mathbf{h})} \begin{pmatrix} (1-\mathbf{h})^2 & \mathbf{h}(1-\mathbf{h}) \\ \mathbf{h}(1-\mathbf{h}) & \mathbf{h}^2 \end{pmatrix} - \mathbf{e} \begin{pmatrix} (1-\mathbf{h})^2 & \mathbf{h}(1-\mathbf{h}) \\ \mathbf{h}(1-\mathbf{h}) & \mathbf{h}^2 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1^{(iel)} \\ \mathbf{y}_2^{(iel)} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (30)$$

Integral aksi di atas dapat dituliskan dalam bentuk

$$\Lambda^{(iel)} = \left\{ \mathbf{y}_1^{*(iel)}, \mathbf{y}_2^{*(iel)} \right\} \left[\begin{pmatrix} H_{11}^{(iel)} & H_{12}^{(iel)} \\ H_{21}^{(iel)} & H_{22}^{(iel)} \end{pmatrix} - \mathbf{e} \begin{pmatrix} U_{11}^{(iel)} & U_{12}^{(iel)} \\ U_{21}^{(iel)} & U_{22}^{(iel)} \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1^{(iel)} \\ \mathbf{y}_2^{(iel)} \end{pmatrix} \quad (31)$$

dimana

$$\begin{aligned} H_{11}^{(n)} &= h \left(\frac{1}{3} - n + n^2 \right) + h^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{2}{3} n \right) \\ H_{12}^{(n)} &= H_{21}^{(n)} = h \left(-\frac{1}{3} + n - n^2 \right) + h^2 \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{3} n \right) \\ H_{22}^{(n)} &= h \left(\frac{1}{3} - n + n^2 \right) + h^2 \left(\frac{1}{6} - \frac{2}{3} n \right) \end{aligned} \quad (33)$$

dan

$$\begin{aligned} U_{11}^{(n)} &= h^3 \left(\frac{1}{5} - \frac{1}{2} n + \frac{1}{3} n^2 \right) \\ U_{12}^{(n)} &= U_{21}^{(n)} = h^3 \left(\frac{1}{20} - \frac{1}{6} n + \frac{1}{6} n^2 \right) \\ U_{22}^{(n)} &= h^3 \left(\frac{1}{30} - \frac{1}{6} n + \frac{1}{3} n^2 \right) \end{aligned} \quad (34)$$

Matriks global dapat dibentuk dengan menjumlahkan keseluruhan kontribusi integral aksi dari *nelem* buah elemen dengan syarat bahwa antar elemen kontinu. Dalam representasi matriks, kontinuitas antar elemen memungkinkan penjumlahan elemen matriks $H_{11}^{(iel)}$ pada $H_{22}^{(iel-1)}$, hal ini berlaku juga untuk matriks U . Misalkan untuk tiga elemen dapat digambarkan

$$H_{ij} = \begin{bmatrix} H_{11}^{(1)} & H_{12}^{(1)} & & \\ H_{21}^{(1)} & H_{22}^{(1)} + H_{11}^{(2)} & H_{12}^{(2)} & \\ & H_{21}^{(2)} & H_{22}^{(2)} + H_{11}^{(3)} & H_{12}^{(3)} \\ & & H_{21}^{(3)} & H_{22}^{(3)} \end{bmatrix}$$

$$U_{ij} = \begin{bmatrix} U_{11}^{(1)} & U_{12}^{(1)} & & \\ U_{21}^{(1)} & U_{22}^{(1)} + U_{11}^{(2)} & U_{12}^{(2)} & \\ & U_{21}^{(2)} & U_{22}^{(2)} + U_{11}^{(3)} & U_{12}^{(3)} \\ & & U_{21}^{(3)} & U_{22}^{(3)} \end{bmatrix}$$

Gambar 7. Matriks global H dan U untuk tiga elemen

Kita akan mengubah indeks lokal menjadi indeks global untuk masing-masing *node* dan nilai *nodal*. *Node* 1 dan 2 dalam elemen i_{el} dinyatakan kembali sebagai *node* $a=i_{el}$ dan $a+1$, demikian juga nilai *nodal*

fungsi gelombang menjadi ψ_a dan ψ_{a+1} . Total integral aksi untuk seluruh elemen

$$\Lambda = \mathbf{y}_a^* [H_{ab} - eU_{ab}] \mathbf{y}_b ; \quad \mathbf{a}, \mathbf{b} = 1, 2, \dots, nelem + 1, \quad (35)$$

Matriks global H dan U memiliki dimensi $(nelem+1) \times (nelem+1)$.

Berdasarkan prinsip aksi stasioner dengan variasi integral aksi terhadap $d\mathbf{y}_a^*$, maka

$$d\Lambda = 0 = d\mathbf{y}_a^* \frac{d\Lambda}{d\mathbf{y}_a^*} = d\mathbf{y}_a^* (H_{ab} - eU_{ab}) \mathbf{y}_b \quad (36)$$

Karena variasi $d\mathbf{y}_a^*$ adalah sembarang maka bentuk umum persamaan nilai eigen

$$H_{ab} \mathbf{y}_b - eU_{ab} \mathbf{y}_b = 0 \quad (37)$$

Jadi problem nilai eigen akan dipecahkan sebagai problem matriks melalui persamaan ini. Variabel yang dicari adalah nilai eigen e yang merupakan energi atom hidrogen dalam satuan Rydberg R_8 .

3. HASIL KOMPUTASI DAN KESIMPULAN:

Dari program komputer yang telah dibuat, maka perhitungan numerik dengan metode FEM untuk atom hidrogen menunjukkan, (untuk 100 elemen), bahwa energinya untuk tiga tingkat energi pertama (dalam Rydberg = 13,6 eV):

$$E_1 = -0.9417091337121758$$

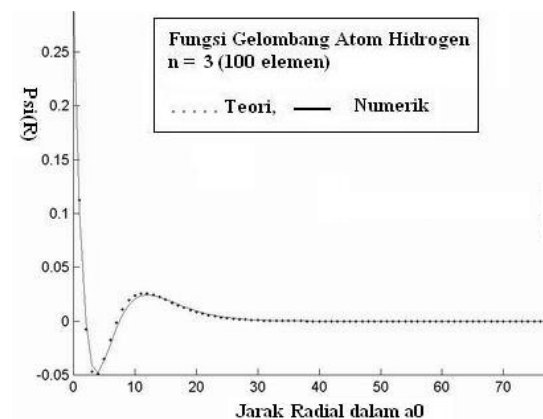
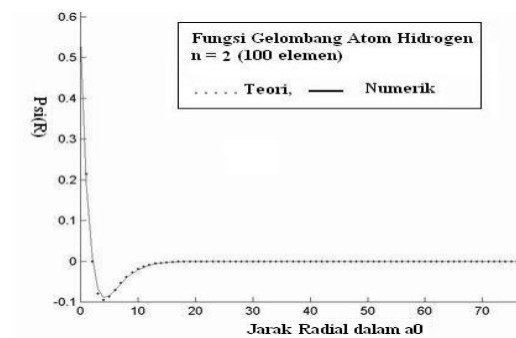
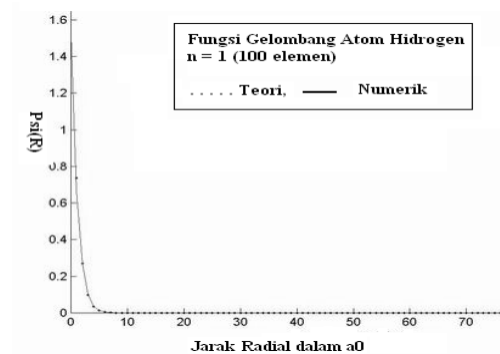
$$E_2 = -0.2382036433048052$$

$$E_3 = -0.1067644617719800$$

Dari perhitungan analitik kita telah mengetahui nilainya adalah

$$E_1 = -13,6 \text{ eV}, E_2 = -3,4 \text{ eV}, E_3 = -1,5 \text{ eV}$$

Jika kita bandingkan hasil numerik dengan analitik maka masing-masing memberikan beda terhadap harga perhitungan analitik sebesar 5,83%, 4,72% dan 3,91%. Oleh karena itu hasil pendekatan numerik metode FEM cukup baik, dan dengan pilihan parameter input yang tepat serta penyempurnaan pada program komputer serta algoritma perhitungan yang dibuat akan dapat meningkatkan akurasi hasil hitung. Fungsi gelombang hasil numerik dan analitik dapat dilihat pada gambar dibawah ini.



DAFTAR PUSTAKA:

- Brasden, B.H. dan C.J. Joachain. 1995. *Physics of Atoms and Molecules*. New York: John Wiley & Sons, inc
- Ram, L. Ramdas, Mohan. 2002. *Finite Element and Boundary Element Applications in Quantum Mechanics*. New York: Oxford University Press.
- [Http://www.science.gmu.edu/~jbrugion/RTF/qm1.htm](http://www.science.gmu.edu/~jbrugion/RTF/qm1.htm) (tanggal 19 Nov. 2004)

- Nikishkov, G.P. 2004. "Introduction to The Finite Element Method". Lecture Note. University of Aizau, Japan.(January, 19)
- Koltun, Daniel S. dan Judah M. Eisenberg. 1988. *Quantum Mechanics of Many Degrees of Freedom*. New York: John Wiley & Sons, inc
- Gasiorowicz, Stephen. 1995. *Quantum Physics*. USA: John Wiley & Sons, inc
- Thankappan, V.K. 1985. *Quantum Mechanics*. New Delhi: Wiley Eastern Limited.
- Desai, Candrakant S. 1988. *Dasar-Dasar Metode Elemen-Hingga*. Jakarta: Penerbit Erlangga