

Penyelesaian Persamaan Schrodinger Tidak Bergantung Waktu Dengan Metode *Finite Difference*

I Gusti Agung Widagda^{*)}, I Nengah Artawan, Wayan Gede Suharta, I Gde Antha Kasmawan

¹⁾Departemen Fisika, Universitas Udayana, 80361

*Email korespondensi : igawidagda@unud.ac.id

DOI: <https://doi.org/10.20527/flux.v21i3.19289>

Submitted: 55 Mei 2024; Accepted: 07 Januari 2025

ABSTRAK- Penyelesaian persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu (*Time Independent Schrodinger Equation/TISE*) sudah diteliti oleh beberapa peneliti. Pada penelitian ini dicari solusi TISE dengan menggunakan metode beda hingga (*finite difference*) yang diimplementasikan ke dalam kode program komputer dengan bahasa Python. TISE yang berbentuk persamaan diferensial orde dua diselesaikan dengan menggunakan metode beda hingga. Untuk menormalisasi fungsi gelombang yang dihasilkan tersebut perlu dibagi dengan akar dari fungsi gelombang kuadrat tersebut. Metode integral yang dipergunakan adalah metode Riemann. Untuk membuktikan secara kuantitatif bahwa solusi TISE metode beda hingga sama dengan atau mendekati metode analitik maka dilakukan dengan menggunakan regresi linear dan uji z. Hasil penelitian menunjukkan bahwa hasil regresi linear dari kedua metode tersebut sangat mendekati. Hal ini terlihat dari nilai gradien (m), perpotongan (c) dan koefisien determinasi (R^2) mendekati nilai ideal yaitu 1, 0 dan 1, secara berurutan. Di samping itu dari uji z diperoleh kesimpulan bahwa hipotesa H_0 diterima yang berarti solusi beda hingga sama dengan solusi analitik dengan tingkat kepercayaan (*confidence level*) 95 persen.

KATA KUNCI: *Beda hingga, Schrodinger, Riemann, uji z, regresi linear*

ABSTRACT- The solution of time-independent Schrodinger equation (TISE) has been studied by several researchers. In this research, a TISE solution is found by using the finite difference method which is implemented in computer program code by using the Python language. TISE in the form of a second order differential equation is solved by using the finite difference method. In order to normalize the resulting wave function it is necessary to divide it by square root of the integral of the squared wave function. The integral method used is the Riemann method. In order to prove quantitatively that the TISE solution of the finite difference method is the same as or close to that of the analytical method, it is carried out by using linear regression and the z test. The research results show that the linear regression results from the two methods are nearly close. This is able to be seen from the values of gradient (m), intercept (c) and coefficient of determination (R^2) which are close to ideal values, namely, 1, 0 and 1, respectively. In addition, from the z test it is concluded that the null hypothesis H_0 is accepted, which means the solution of finite difference method is equal to analytical solution by a confidence level of 95 percent.

KEYWORDS: *Finite difference, Schrodinger, Riemann, z test, linear regression*

PENDAHULUAN

Penelitian di bidang fisika kuantum telah mengalami perkembangan dari waktu ke waktu. Penyelesaian fungsi gelombang pada persamaan Schrodinger merupakan bidang kajian yang sangat menarik di bidang fisika

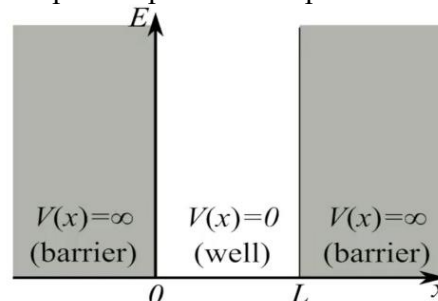
kuantum. Penyelesaian persamaan Schrodinger untuk gerak partikel bermuatan (seperti elektron) pada berbagai potensial telah diteliti oleh beberapa peneliti dengan menggunakan berbagai macam metode. (Gordillo-núñez et al., 2024) menyelesaikan

persamaan Schrodinger dengan tipe potensial Rosen-Morse dengan menggunakan metode Nikiforov-Uvarov. (Cecilia & Al-Faruq, 2019)) menemukan solusi persamaan Schrodinger pada potensial Non Sentral Coulombic Rosen Morse. (Ghafouri et al., 2020) menyelesaikan persamaan Schrodinger pada diode efek medan skala nano dengan metode numerik. (Lombu et al., 2013) juga menyelesaikan persamaan Schrodinger pada potensial halang (*barrier potential*). (Rahmayani et al., 2014) menyelesaikan persamaan Schrodinger pada kasus potensial sumur berhingga (*definite potential well*). Baik Ghafouri, Lombu dan Rahmayani semuanya menggunakan metode beda hingga (*Finite Difference*) dan diimplementasikan dalam kode program Matlab. (Humaidi et al., 2016) menemukan solusi persamaan Schrodinger dengan metode analitik yang diimplementasikan dalam bentuk program Mathematica. (Baeyens & Van Daele, 2021) menentukan solusi persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu (*Time Independent Schrodinger Equation (TISE)*) dengan metode *Constant Perturbations (CP)* yang diimplementasikan dalam bahasa C++. (Plokhotnikov, 2020) dalam penelitiannya menggunakan metode kombinasi Beda Hingga dan Monte Carlo untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger. (Jamshir et al., 2021) melakukan penelitian untuk mencari solusi TISE dengan metode turunan Kallil. Demikian juga penelitian oleh (Han et al., 2019) tentang penyelesaian persamaan Schrodinger dengan jaringan syaraf tiruan *deep learning*. Dari beberapa penelitian tersebut menghasilkan solusi persamaan Schrodinger dalam bentuk visual berupa fungsi gelombang dan tingkat-tingkat energi. Hasil tersebut kemudian dibandingkan dengan solusi yang diperoleh dengan metode analitik. Dari beberapa penelitian tersebut hanya membandingkan solusi secara kualitatif dari bentuk visual dari fungsi gelombang dan kerapatan kemungkinan dari solusi secara numerik dan secara analitik. Akan tetapi tidak ada satu pun dari penelitian tersebut membandingkan hasil secara kuantitatif misalnya dengan uji statistik (Bramer, 2020) dan regresi linear (Widagda et

al., 2023). Memang secara kualitatif solusi yang dihasilkan kelihatan hampir sama. Namun secara kuantitatif apakah hasil dari kedua metode ini memang sama. Berapa persen kita yakin bahwa hasil dari kedua metode tersebut memang sama. Oleh karena itu kita perlu membuktikan secara kuantitatif bahwa hasil dari kedua metode tersebut dengan menggunakan regresi linear dan statistik seperti uji z seperti yang akan dilakukan pada penelitian ini. Sehingga kita bisa yakin dengan tingkat kepercayaan tertentu bahwa kedua solusi tersebut sama.

Solusi Persamaan Schrödinger untuk Partikel yang Terjebak Dalam Sumur Potensial Tidak Berhingga

Sebuah partikel (elektron) dengan massa m terletak pada sumur potensial dengan panjang L yang memiliki energi potensial $V(x)$ tak berhingga di luar sumur dan nol di dalam sumur seperti diperlihatkan pada Gambar 1.



Gambar 1 Partikel dalam sumur potensial

Gambar 1 memperlihatkan bahwa:

$$V(x) = 0 ; 0 < x < L$$

$$V(x) = \infty ; x \leq 0, x \geq L$$

Persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu dinyatakan dengan Pers.(1) (Griffiths, 2005)(Weinberg, 2021):

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

Jika Hamiltonian \hat{H} dari TISE adalah:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (2)$$

maka Pers. (1) akan menjadi:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) + V(x) \quad (3)$$

Dari Gambar 1 untuk $0 < x < L$ maka nilai $V(x) = 0$, maka Pers. (1) akan menjadi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (4)$$

Maka operator \hat{H} akan menjadi:

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (5)$$

Ada dua syarat yang berlaku pada sistem tersebut yaitu:

a) Syarat batas (*boundary condition*) yaitu:

$$\psi(0) = \psi(L) = 0 \quad (6)$$

b) Syarat normalisasi (*normalising condition*) yaitu:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1 \quad (7)$$

$|\psi(x)|^2$ menyatakan kemungkinan menemukan partikel (*probability density*) pada lokasi antara x dan $x+dx$. Nilai integral untuk x dari 0 sampai L sama dengan 1. Dengan memakai syarat batas dan normalisasi maka solusi dari Pers. (4) adalah:

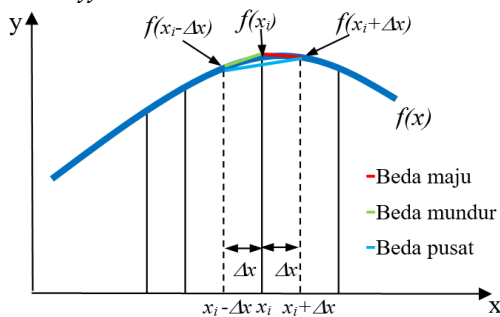
$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

atau sering dinyatakan dalam bentuk umum (Beiser, 2003)(Fleisch, 2020):

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad (8)$$

dimana $n = 1, 2, 3, \dots$ adalah bilangan kuantum yang menyatakan keadaan partikel atau elektron. Nilai $n = 1$ menyatakan elektron berada pada keadaan terikat (*bound state*), $n=2$ keadaan tereksitasi pertama (*1st excited state*), $n=3$ keadaan tereksitasi kedua (*2nd excited state*) dan seterusnya.

Solusi Turunan dengan Metode Benda Hingga (*Finite Difference*)



Gambar 2 Metode beda hingga

Secara numerik untuk menyelesaikan turunan (*derivative*) dapat ditentukan dengan metode Benda Hingga. Turunan pertama $f'(x)$ dari fungsi $f(x)$ pada x_i dapat ditentukan dengan 3 cara yaitu: beda maju, beda mundur,

dan beda pusat seperti diperlihatkan pada Gambar 2.

1. Beda maju (*forward difference*)

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{\Delta x} \quad (9)$$

2. Beda mundur (*backward difference*)

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_i - \Delta x)}{\Delta x} = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{\Delta x} \quad (10)$$

3. Beda pusat (*central difference*)

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x)}{2\Delta x} = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2\Delta x} \quad (11)$$

dimana $x_i + \Delta x$ dan $x_i - \Delta x$ dinyatakan dengan x_{i+1} , x_{i-1} , secara berurutan. Jika kita menentukan turunan pertama dengan metode beda maju:

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{\Delta x}$$

Maka turunan kedua $f''(x)$ dapat dinyatakan dengan:

$$f''(x_i) \approx \frac{f'(x_{i+1}) - f'(x_i)}{\Delta x} \quad (12)$$

Jika turunan pertama pada Pers. (12) ditentukan dengan metode beda mundur maka akan menghasilkan:

$$f''(x_i) \approx \frac{\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{\Delta x} - \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{\Delta x}}{\Delta x}$$

$$f''(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{\Delta x^2} \quad (13)$$

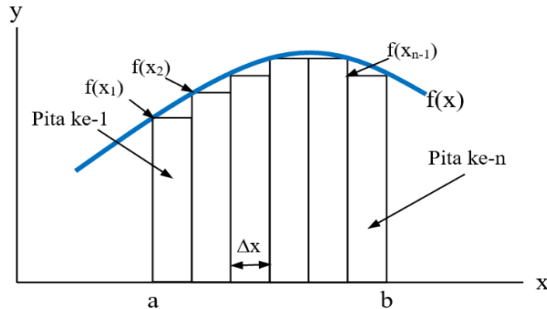
Dari Pers. (13) diperoleh operator turunan kedua $\frac{d^2}{dx^2}$ dapat dinyatakan dalam bentuk matrik tridiagonal yaitu:

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{(\Delta x)^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 - 2 \end{pmatrix} \quad (14)$$

Solusi Integral dengan Metode Riemann

Integral berhingga menyatakan luas daerah di bawah kurva $f(x)$. Perhitungan

integral berhingga secara numerik dapat ditentukan dengan metode Riemann. Metode ini dilakukan dengan membagi daerah di bawah kurva $f(x)$ dari a sampai b menjadi n buah pita berbentuk persegi panjang seperti diperlihatkan pada Gambar 3.



Gambar 3 Metode Riemann

Integral dari $f(x)$ dari a sampai b dapat ditentukan dengan:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\Delta x \tag{15}$$

$$= f(x_1)\Delta x + f(x_2)\Delta x + \dots + f(x_{n-1})\Delta x$$

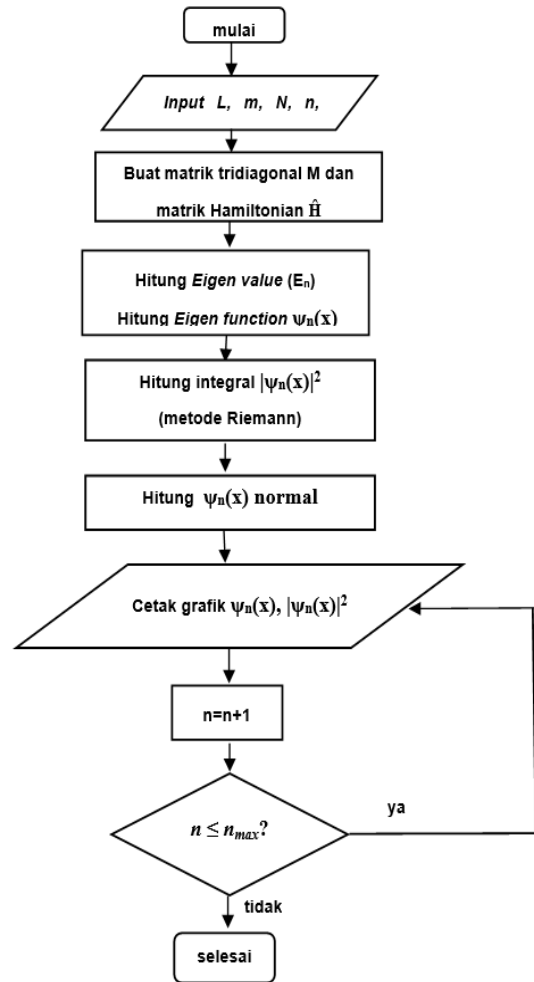
Lebar setiap pita adalah sama yaitu: $\Delta x=(b-a)/n$. Luas pita ke-1, ke-2 dan ke-n-1 dinyatakan dengan $f(x_1)\Delta x$, $f(x_2)\Delta x$, $f(x_{n-1})\Delta x$, secara berurutan.

METODE PENELITIAN

Penelitian dilakukan menggunakan laptop HP intel core i7 @1,30 GHz 4 cores dengan RAM 16 GB. Bahasa pemrograman yang dipakai adalah Python Anaconda 3.8 atau Google Colaboratory (Pine, 2019).

Diagram alir (flow chart) dari penyelesaian TISE dengan metode beda hingga ditampilkan pada Gambar 4. Proses dimulai dengan menginputkan nilai variabel lebar sumur (L), massa partikel (m), Jumlah segmen atau pita (N), nilai bilangan kuantum (n) dan nilai bilangan kuantum akhir (n_{final}) yang ingin ditampilkan kurvanya. Dilanjutkan dengan proses pembuatan matriks tridiagonal M (Pers.(14)) dan juga matriks Hamiltonian \hat{H} . Proses kemudian dilanjutkan dengan menghitung TISE yaitu *Eigen function* $\psi_n(x)$ dan *Eigen value* (E_n). Dengan metode Riemann kemudian dihitung integral $|\psi_n(x)|^2$. Hasil integral tersebut kemudian dipakai untuk menormalisasi fungsi $\psi_n(x)$ dengan jalan membagi fungsi $\psi_n(x)$ dengan akar dari hasil

integral $|\psi_n(x)|^2$ sehingga syarat normalisasi dari fungsi $\psi_n(x)$ terpenuhi (Pers. (7)). Setelah $\psi_n(x)$ ternormalisasi dihitung kemudian diteruskan dengan proses menampilkan grafik $\psi_n(x)$ dan $|\psi_n(x)|^2$. Proses pencetakan grafik tersebut akan diulang dari n sama dengan 1 sampai n_{final} . Setelah $\psi_n(x)$ dan $|\psi_n(x)|^2$ untuk nilai n_{final} tercetak program akan selesai.



Gambar 4 Diagram alir solusi TISE dengan metode Beda Hingga

Kode program python (source code) untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu (TISE) secara numerik dengan metode Beda Hingga adalah :

```

*****Personal Research Project by 2024*****
#Wave function Ψ and Probability density Ψ-square
# Numeric vs Analytic Solution of Schrodinger
#Equation for particles trapped in infinite potential #well
#Saving Ψ and Probability density Ψ-square into #Excel
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
#preparing the grid
L=0.1 #width of potential well
N=400 #number of grid between 0 - L
    
```

```

x_init=0
x_final=L
x_interval=(x_final-x_init)/N #interval between 2 grids
x=np.arange(x_init,x_final+x_interval,x_interval)
#x=x[1:-1] #2nd element to N-1 element, affected by
boundary conditions: Y(0) = Y(L)=0
delta_x = x_interval #x[1]-x[0]
#constant
hbar=1 #Plank constant/2pi
m=1 #particle mass
#Differential operator M of size (N,N)
M=np.diag(-2*np.ones(N-1))+np.diag(np.ones(N-2),1)\
+np.diag(np.ones(N-2),-1)# M tridiagonal matrix
#***Hamiltonian H
H=-hbar**2/(2*m)* 1/(delta_x)**2*M
#solving the equation
E,psi = np.linalg.eigh(H) #E=Eigen value, psi=Eigen
#vector
psi=psi.T #Transpose matrix psi
#print(psi)
#function to calculate integration by using Riemann
#method
def integral(f,axis=0): # axis=0 means sum along the
column, 1 along rows
    integ = np.sum(f*delta_x,axis=axis)
    return integ
normal=integral(psi**2) #normalisation of psi
psi=psi/np.sqrt(normal) #psi normal
row_psi = psi.shape[0] #number of row
col_psi = psi.shape[1] #number of column
#print(row_psi)
psi_anal = np.empty((row_psi,col_psi),dtype=float)
psi_square_anal =
np.empty((row_psi,col_psi),dtype=float)
#function to display subscript-typed fonts
def get_sub(x):
    normal = \
    "ABCDEFGHJKLMNOPQRSTUVWXYZ\
    abcdefghijklmnopqrstuvwxyz0123456789+==()"
    sub_s = \
    "aBcDeFgHiJkLmNoPqRstuVwXyZa b c d e f g h i j k l m n o p q r s t u v w x y z 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 +
    ==()"
    res = x.maketrans(''.join(normal),
    ''.join(sub_s))
    return x.translate(res)
for n in range(0,6,1):
    psi_anal[n] =
np.sqrt(2/L)*np.sin((n+1)*np.pi*x/L) #source : Griffiths,
Krane
psi_square_anal[n]=psi_anal[n]**2
plt.figure(figsize=(8,4))
if (n%4)==1 or (n%4)==2:
    plt.plot(x,-

```

```

psi[n], 'y',lw=2.5,label='Ψ{}'.format(get_sub(str(n+1)))
+'(x)-finite diff')
else:
    plt.plot(x,psi[n], 'y',lw=2.5,label='Ψ{}'.format(get
_sub(str(n+1)))+(x)-finite diff')
    plt.plot(x,psi_anal[n], '--
b',lw=2.5,label='Ψ{}'.format(get_sub(str(n+1)))+(x)-
analytic')

plt.plot(x,psi[n]**2, 'r',lw=2.5,label='|Ψ{}'.format(get_s
ub(str(n+1)))+(x)|\u00b2-finite diff')
    plt.plot(x,psi_square_anal[n], '--
k',lw=2.5,label='|Ψ{}'.format(get_sub(str(n+1)))\
+'(x)|\u00b2-analytic')
    plt.xlabel('x',fontsize=14)

plt.ylabel('Ψ{}'.format(get_sub(str(n+1)))+(x)',fontsize
=14)

plt.legend(loc='upper left',bbox_to_anchor=(1.0,
1.0),fontsize=12)
plt.show();
#***saving data to Excel
import pandas as pd
for n in range(0,6,1):
    df = pd.DataFrame(psi[n],psi_anal[n]) #(y,x)
    df.to_excel(excel_writer = "psi"+str(n)+".xlsx")
    df
pd.DataFrame(psi[n]**2,psi_square_anal[n])
df.to_excel(excel_writer
=
"psi_square"+str(n)+".xlsx")

```

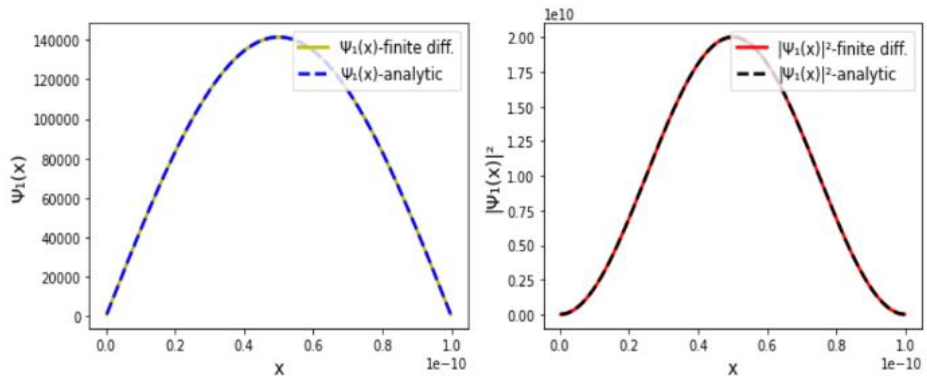
HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil akhir program aplikasi untuk menghitung TISE dengan metode Beda Hingga (*finite difference*) dan metode analitik bisa dilihat pada Gambar 5 sampai Gambar 9. Disamping solusi berupa kurva fungsi gelombang (*wave function*) $\psi_n(x)$ juga ditampilkan kurva kerapatan kemungkinan (*probability density*) $|\psi_n(x)|^2$, untuk $n = 1, 2, \dots, 5$. Lebar sumur potensial (L) = 1.10^{-10} m dan massa partikel (m) = $9,1.10^{-31}$ kg. Jumlah pita antara 0 sampai L adalah 400 pita.

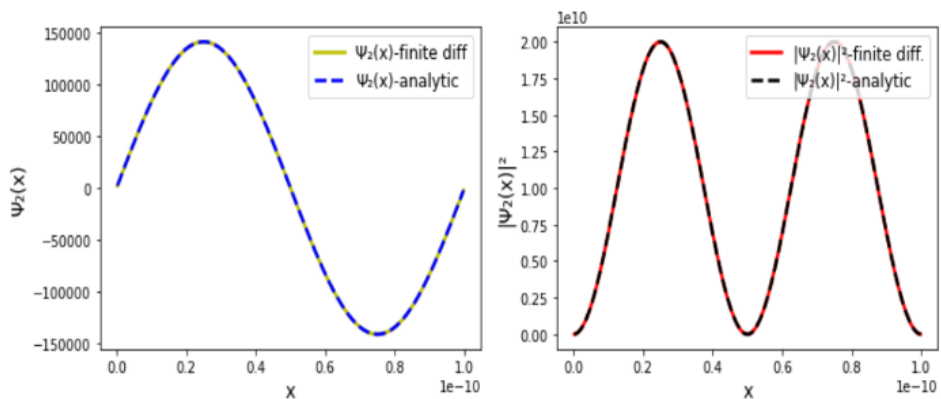
Selain itu program aplikasi juga menghasilkan 5 buah *file excel* yang mengandung nilai x_i dan fungsi gelombang ($\psi_n(x_i)$) hasil perhitungan dari metode Beda Hingga dan metode Analitik untuk nilai n dari 1 sampai 5. Beberapa contoh data yang terkandung pada *file excel* diperlihatkan pada **Error! Reference source not found.** dan **Error!**

Reference source not found. untuk bilangan kuantum $n = 1$ dan $n = 5$, secara berurutan.

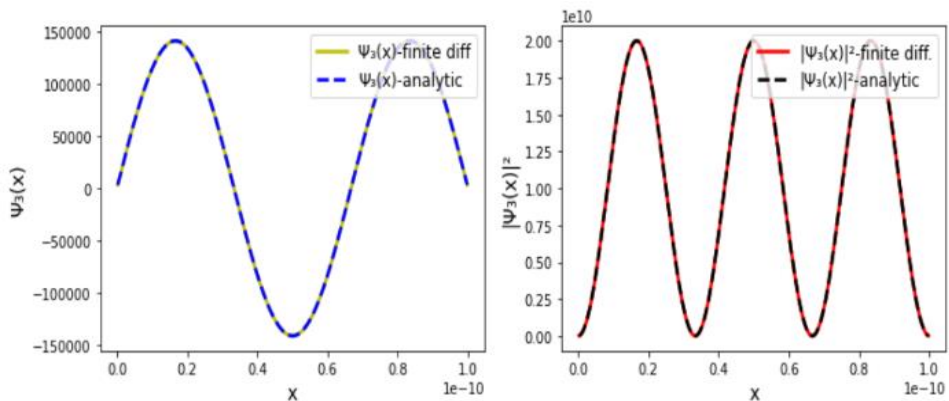
Nilai $i = 1, 2, 3, 4, \dots, 396, 397, 398, 399$.



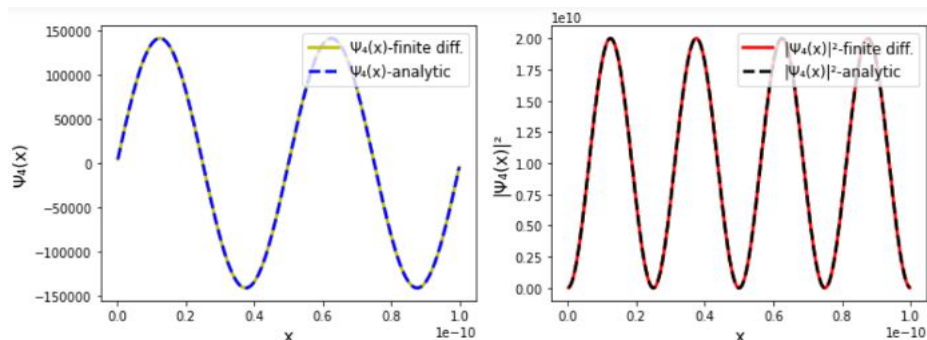
Gambar 5 Hasil program aplikasi untuk $\psi_1(x)$ dan $|\psi_1(x)|^2$



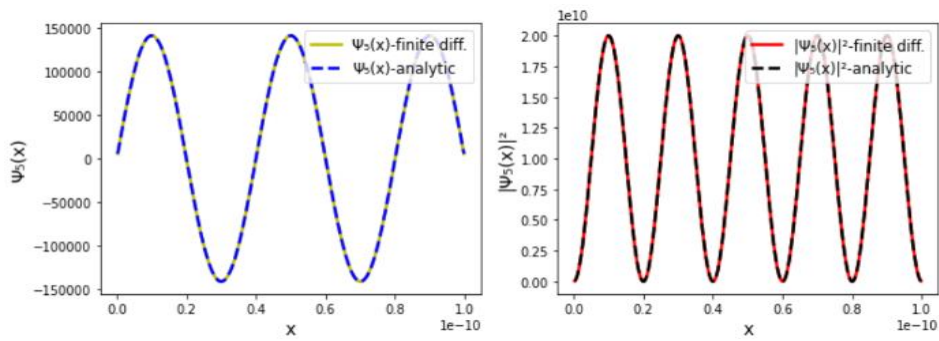
Gambar 6 Hasil program aplikasi untuk $\psi_2(x)$ dan $|\psi_2(x)|^2$



Gambar 7 Hasil program aplikasi untuk $\psi_3(x)$ dan $|\psi_3(x)|^2$



Gambar 8 Hasil program aplikasi untuk $\psi_4(x)$ dan $|\psi_4(x)|^2$



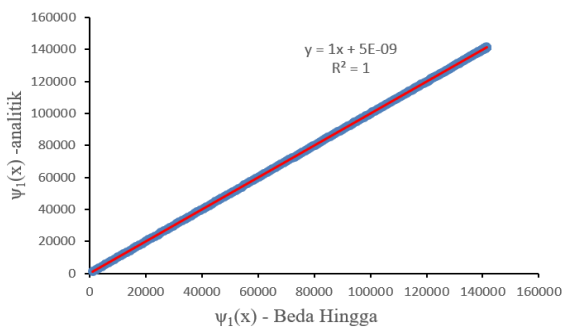
Gambar 9 Hasil program aplikasi untuk $\psi_5(x)$ dan $|\psi_5(x)|^2$

Tabel 1 Tabel hasil perhitungan $\psi_1(x)$ -beda hingga dan $\psi_1(x)$ -analitik

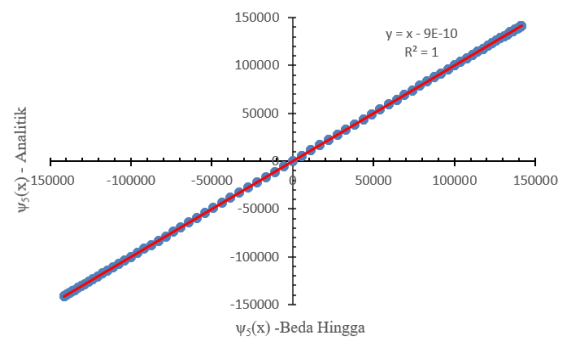
i	$x_i (10^{-10})$	$\psi_1(x_i)$ (beda hingga)	$\psi_1(x_i)$ (analitik)
1	0,0025	1110,70931543458	1110,70931543497
2	0,0050	2221,35011708668	2221,35011708745
3	0,0075	3331,85389540007	3331,85389540122
4	1,0000	4442,15214927078	4442,15214927228
⋮	⋮	⋮	⋮
396	0,9900	4442,15214927159	4442,15214927234
397	0,9925	3331,85389540069	3331,85389540128
398	0,9950	2221,35011708711	2221,35011708752
399	0,9975	1110,70931543480	1110,70931543504

Tabel 2 Tabel hasil perhitungan $\psi_5(x)$ -beda hingga dan $\psi_5(x)$ -analitik

i	$x_i (10^{-10})$	$\psi_5(x_i)$ (beda hingga)	$\psi_5(x_i)$ (analitik)
1	0,0025	5552,17639027321	5552,17639027438
2	0,0050	11095,7917269824	11095,7917269847
3	0,0075	16622,2981570877	16622,2981570911
4	1,0000	22123,1742082430	22123,1742082474
⋮	⋮	⋮	⋮
396	0,9900	22123,1742082443	22123,1742082476
397	0,9925	16622,2981570887	16622,2981570915
398	0,9950	11095,7917269832	16622,2981570915
399	0,9975	5552,17639027361	5552,17639027450



Gambar 10 Hasil regresi antara $\psi_1(x)$ -beda hingga dan $\psi_1(x)$ -analitik



Gambar 11 Hasil regresi antara $\psi_5(x)$ -beda hingga dan $\psi_5(x)$ -analitik

Tabel 1 Hasil regresi fungsi gelombang $\psi_n(x)$ untuk $n = 1, 2, \dots, 5$

n	$\psi_n(x)$	Gradien (m)	Intercept (c)	Koefisien Determinasi (R^2)
1	$\psi_1(x)$	1	5.10^{-9}	1
2	$\psi_2(x)$	1	-4.10^{-10}	1
3	$\psi_3(x)$	1	-4.10^{-10}	1
4	$\psi_4(x)$	1	-7.10^{-10}	1
5	$\psi_5(x)$	1	-9.10^{-10}	1

Regresi linear digunakan untuk membandingkan hasil perhitungan fungsi gelombang $\psi_n(x)$ analitik dan Beda Hingga dengan memakai aplikasi *excel*. Hasil regresi linear $\psi_1(x)$ dan $\psi_5(x)$ diperlihatkan pada Gambar 9 dan Gambar 10, secara berurutan.

Error! Reference source not found. memperlihatkan garis regresi berbentuk linear (warna merah) $y = mx + c$ yaitu: $y = x + 5.10^{-9}$ (Montgomery, Douglas C.; Peck, Elizabeth A.; Vining, 2021). Dari persamaan garis ini diperoleh gradien garis (m) adalah 1 dan nilai c yaitu 5.10^{-9} dengan nilai koefisien determinasi $R^2 = 1$. Sedangkan pada **Error! Reference source not found.** diperoleh garis regresi linear yaitu $y = x - 9.10^{-10}$, dengan nilai $m = 1$, $c = -9.10^{-10}$ dan $R^2 = 1$. Hasil regresi linier dari fungsi gelombang $\psi_n(x)$ untuk bilangan kuantum n dari 1 sampai 5 bisa dilihat pada

Tabel 1. Dari tabel tersebut dapat dilihat semua nilai m , c dan R^2 sama dengan atau mendekati nilai ideal yaitu 1, 0 dan 1, secara berurutan (Widagda et al., 2023). Hal ini menunjukkan bahwa nilai $\psi_n(x)$ hasil perhitungan analitik sangat mendekati hasil perhitungan metode Beda Hingga.

Untuk membandingkan antara hasil perhitungan $\psi_n(x)$ dari metode Beda Hingga dan metode Analitik juga bisa dilakukan

dengan uji z . Dengan memakai aplikasi *Excel*, hasil uji z dari data $\psi_1(x)$ pada Tabel 1 diperlihatkan pada **Error! Reference source not found.** Dalam hal ini hipotesis dari uji z adalah:

H_0 : Rata-rata (*mean* (μ)) dari $\psi_1(x)$ -beda hingga sama dengan rata-rata $\psi_1(x)$ -analitik atau bisa dinyatakan dengan:

$$\mu_{\psi_1(x)\text{-beda hingga}} = \mu_{\psi_1(x)\text{-analitik}}$$

H_a : Rata-rata (*mean* (μ)) dari $\psi_1(x)$ - beda hingga berbeda dengan rata-rata $\psi_1(x)$ -analitik atau

$$\mu_{\psi_1(x)\text{-beda hingga}} \neq \mu_{\psi_1(x)\text{-analitik}}$$

Jika kita memakai uji z dua arah (*two-tail*), jika z hitung bernilai positif dan lebih kecil dari nilai z kritis maka hipotesa nol (H_0) diterima dan hipotesa alternatif (H_a) ditolak. Dengan lain kata jika nilai z positif dan lebih besar dari nilai z kritis maka H_0 .

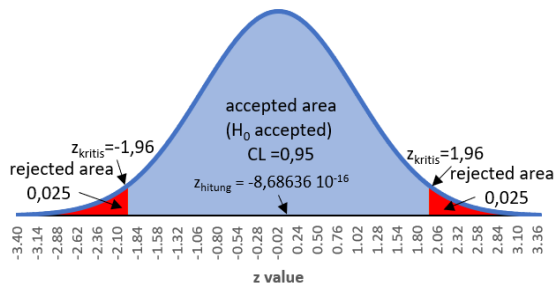
Pada **Error! Reference source not found.** terlihat bahwa nilai z hitung bernilai $-8,68636 \cdot 10^{-16}$ dan nilai z kritis $1,959963985$ ($=1,96$). Oleh karena nilai z hitung bernilai negatif dan lebih besar dari nilai $-z$ kritis ($-1,96$) maka H_0 diterima (*accepted*). Hal ini diperlihatkan pada Gambar 12 dimana z hitung terletak dalam wilayah yang diterima (*accepted area*) yang digambarkan dengan daerah diarsir berwarna biru.

Tabel 2 Hasil uji z antara $\psi_1(x)$ -Beda Hingga dan $\psi_1(x)$ -analitik (*significance level*, $\alpha = 0.05$)

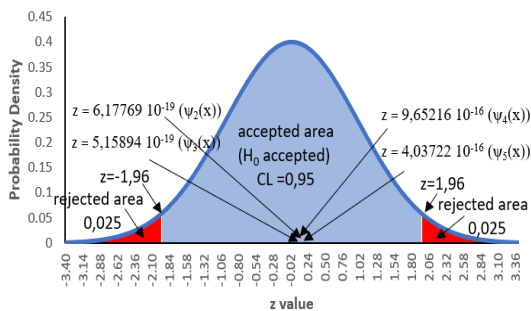
	Beda Hingga	Analitik
<i>Mean</i>	90256,810842033	90256,810842033
<i>Known Variance</i>	1,88349E+14	1,88349E+14
<i>Observations</i>	399	399
<i>Hypothesized Mean Difference</i>	0	
z	$-8,68636E-16$	
<i>P(Z<=z) one-tail</i>	0,5	
<i>z Critical one-tail</i>	1,644853627	
<i>P(Z<=z) two-tail</i>	1	
<i>z Critical two-tail</i>	1,959963985	

Tabel 3 Hasil uji z antara $\psi_n(x)$ -beda hingga dan $\psi_n(x)$ -analitik (*significance level, $\alpha = 0.05$*)

n	$\psi_n(x)$	z hitung	z kritis	Kesimpulan
1	$\psi_1(x)$	$-8,68636 \cdot 10^{-16}$	1,96	H_0 diterima
2	$\psi_2(x)$	$6,17769 \cdot 10^{-19}$	1,96	H_0 diterima
3	$\psi_3(x)$	$5,15894 \cdot 10^{-19}$	1,96	H_0 diterima
4	$\psi_4(x)$	$9,65216 \cdot 10^{-16}$	1,96	H_0 diterima
5	$\psi_5(x)$	$4,03722 \cdot 10^{-16}$	1,96	H_0 diterima



Gambar 12 Hasil uji z antara $\psi_1(x)$ -beda hingga dan $\psi_1(x)$ -analitik



Gambar 13 Hasil uji z antara $\psi_n(x)$ -beda hingga dan $\psi_n(x)$ -analitik untuk $n = 2, 3, \dots, 5$

Jadi dapat disimpulkan bahwa hasil perhitungan $\psi_1(x)$ dengan metode Beda Hingga sama dengan hasil perhitungan $\psi_1(x)$ dengan metode analitik dengan tingkat kepercayaan (*convidence level (CL)*) yaitu 95 % ($1-\alpha = 1-0,05 = 0,95 = 95\%$). Hasil uji z untuk $\psi_1(x), \psi_2(x), \dots, \psi_5(x)$ diperlihatkan pada **Error! Reference source not found..** Dari **Error! Reference source not found.** hasil uji z dari $\psi_2(x), \psi_3(x), \dots, \psi_5(x)$, semua nilai z hitung bernilai positif dan nilainya lebih kecil dari z kritis (1,96). Sehingga semua hipotesa H_0 diterima. Jadi bisa disimpulkan bahwa hasil perhitungan $\psi_1(x)$ sampai $\psi_5(x)$ dengan memakai metode Beda zHingga sama dengan hasil perhitungan dengan metode analitik dengan tingkat kepercayaan (*convidence level (CL)*) yaitu 95 % ($1-\alpha = 1-0,05 = 0,95$). Hasil uji z untuk $\psi_1(x)$ sampai $\psi_5(x)$ bisa dilihat pada Gambar 13. Dari Gambar 13 tersebut terlihat

semua nilai z hitung untuk $\psi_2(x)$ sampai $\psi_5(x)$ terletak pada daerah yang diterima (*accepted area*) dengan warna biru. Semuanya terletak antara $z = -0,02$ dan $z = 0,24$.

KESIMPULAN

Metode Beda Hingga bisa dipakai untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger tidak bergantung waktu (TISE). Penyelesaian TISE secara analitik sangat mendekati hasil perhitungan dengan metode Beda Hingga. Hal ini ditunjukkan oleh hasil regresi linear dimana nilai m, c dan R^2 sama atau mendekati nilai ideal 1, 0 dan 1, secara berurutan, serta hasil uji z yang menyimpulkan bahwa hasil perhitungan TISE dengan metode analitik sama dengan metode beda hingga dengan tingkat kepercayaan 95 %.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Kepala Laboratorium Fisika Komputasi, Program Studi Fisika, FMIPA, UNUD, Badung, Bali yang telah memberikan fasilitas dalam penelitian ini.

DAFTAR PUSTAKA

Baeyens, T., & Van Daele, M. (2021). The fast and accurate computation of eigenvalues and eigenfunctions of time-independent one-dimensional Schrödinger equations. *Computer Physics Communications*, 258, 107568. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2020.107568>

Beiser, A. (2003). *Concepts of modern physics* (6th ed.). New York: McGraw-Hill.

Bramer, M. (2020). *Principles of data mining* (4th ed.). London: Springer-Verlag London Ltd. <https://doi.org/10.1007/978-1-4471-7493-6>

- Cecilia, Y., & Al-Faruq, A. (2019). Solusi metode numerik beda hingga pada visualisasi fungsi Gelombang persamaan Schrödinger potential non sentral Coulombic Rosen Morse. *Sunan Kalijaga Journal of Physics*, 1(1), 28–36.
- Fleisch, D. A. (2020). *A Student's Guide to the Schrödinger Equation*. Great Britain: Cambridge University Press.
- Ghafouri, T., Golshan Bafghi, Z., Nouri, N., & Manavizadeh, N. (2020). Numerical solution of the Schrödinger equation in nanoscale side-contacted FED applying the finite-difference method. *Results in Physics*, 19. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2020.103502>
- Gordillo-núñez, G., Alvarez-nodarse, R., & Quintero, N. R. (2024). The complete solution of the Schrödinger equation with the Rosen – Morse type potential via the Nikiforov – Uvarov method. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 458(November 2023), 134008. <https://doi.org/10.1016/j.physd.2023.134008>
- Griffiths, D. J. (2005). *Introduction to quantum mechanics* (2nd ed.). USA: Pearson Prentice Hall.
- Han, J., Zhang, L., & E, W. (2019). Solving many-electron Schrödinger equation using deep neural networks. *Journal of Computational Physics*, 399, 108929. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.108929>
- Humaidi, S., Simbolon, T. R., Ong, R., & Afrida, W. N. (2016). Elektron dalam sumur potensial dengan menggunakan Mathematic 10. *Prosiding Seminar Nasional Fisika (E-Journal) SNF2016*, V, 19–24.
- Jamshir, N., Lari, B., & Hassanabadi, H. (2021). The time independent fractional Schrödinger equation with position-dependent mass. *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 565, 125616. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2020.125616>
- Lombu, O. Z., Simbolon, T. R., & Ginting, T. (2013). *Aplikasi metode beda hingga pada persamaan Schrödinger menggunakan Matlab*. 0–6.
- Montgomery, Douglas C.; Peck, Elizabeth A.; Vining, G. G. (2021). *Introduction to Linear Regression Analysis* (6th ed.). John Wiley & Sons, Inc.
- Pine, D. J. (2019). *Introduction to Python for Science and Engineering*. CRC Press.
- Plokhonnikov, K. E. (2020). About One Method of Numerical Solution of Schrodinger's Equation. *Mathematical Models and Computer Simulations*, 12(2), 221–231. <https://doi.org/10.1134/S2070048220020106>
- Rahmayani, H., Hidayati, & Razi, P. (2014). Perhitungan tingkat energi sumur potensial keadaan terikat melalui persamaan schrodinger menggunakan metode beda hingga. *Pillar of Physics*, 1, 17–24.
- Weinberg, S. (2021). *Foundations of Modern Physics*. Cambridge University Press.
- Widagda, I. G. A., Luh, N., Trisnawati, P., & Suharta, I. W. G. (2023). Perancangan aplikasi metode Newton-Rapshon termodifikasi dalam pembuktian panjang gelombang maksimum pada hukum pergeseran Wien. *Buletin Fisika*, 2, 154–161.