

---

## Penerapan metode relaksasi Gauss-Seidel untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger

### Nanik Andelita

Program Studi Fisika, Universitas Mataram, Indonesia  
Surat-e: nanikandelita@gmail.com

### I Wayan Sudiarta

Program Studi Fisika, Universitas Mataram, Indonesia  
Surat-e: wayan.sudiarta@unram.ac.id

**Abstrak.** Metode numerik, seperti metode *finite difference*, *finite element* dan *Fourier*, untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger telah banyak digunakan sebelumnya. Metode *finite difference time domain* (FDTD) telah dikembangkan oleh Sudiarta dan Geldart (2007). Metode FDTD telah berhasil diaplikasikan untuk berbagai sistem kuantum, satu partikel ataupun lebih. Salah satu kelemahan metode FDTD adalah pada kasus tertentu seperti potensial kotak dan potensial osilator harmonik ditemukan iterasi FDTD lebih lambat menuju konvergen sehingga memerlukan waktu komputasi yang lebih lama. Untuk mengatasi hal tersebut, metode relaksasi Gauss-Seidel digunakan. Pada paper ini, metode relaksasi diaplikasikan untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger satu partikel pada berbagai potensial.

**Kata kunci:** persamaan Schrödinger, metode relaksasi Gauss-Seidel, metode FDTD.

**Abstract.** Numerical methods, such as finite difference, finite element and Fourier methods to solve the Schrödinger equation have been used previously. The finite difference time domain (FDTD) method has been developed by Sudiarta and Geldart (2007). The FDTD method has been successfully applied to various quantum systems, for one particle or more. One of the weaknesses of the FDTD method is that in certain cases such as the box potential and harmonic oscillator it has been found that FDTD iterations are slower to converge and thus require longer computation time. To overcome this, the relaxation Gauss-Seidel method can be used. In this paper, the relaxation method was applied to solve the Schrödinger equation for one particle in various potential wells.

**Keywords:** Schrödinger equation, relaxation Gauss-Seidel method, FDTD method.

---

### I. Pendahuluan

Persamaan Schrödinger merupakan persamaan diferensial orde dua yang menggambarkan segala keadaan sistem kuantum. Jika fungsi energi potensial untuk sistem telah diketahui, kita dapat menyelesaikan persamaan dan mendapatkan fungsi gelombang serta energi dari keadaan yang diperbolehkan untuk sistem [1]. Namun, pada kenyataannya persamaan Schrodinger tidak mudah diselesaikan secara analitik, sehingga metode numerik perlu diterapkan untuk mendapatkan solusinya.

Metode numerik, seperti metode *finite difference* (FD), *finite element* (FE), dan *Fourier*, untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger telah banyak digunakan sebelumnya [2-6]. Metode *finite difference time domain* (FDTD) telah berhasil dikembangkan [7-9] untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger dimensi satu, dua, dan tiga. Penyelesaian persamaan Schrödinger oleh Sudiarta dan Geldart [9] dilakukan dengan cara mengubah persamaan Schrödinger menjadi persamaan difusi dengan cara mentransformasi waktu *real* menjadi waktu imajiner. Persamaan difusi kemudian digunakan untuk mendapatkan keadaan

*ground state* (keadaan dasar) dan *excited state* (keadaan tereksitasi). Salah satu masalah yang menjadi kelemahan metode FDTD adalah pada kasus tertentu ditemukan iterasi FDTD lebih lambat menuju konvergen sehingga memerlukan waktu komputasi yang lebih lama. Untuk mengatasi hal tersebut, metode relaksasi Gauss-Seidel dapat digunakan.

Metode Relaksasi telah diterapkan untuk menghitung fungsi eigen dan nilai eigen dari persamaan Schrodinger [10-11]. Tahun 2017 Schroeder [12] menggunakan metode relaksasi Gauss-Seidel untuk mendapatkan *ground state* dari sistem kuantum. Untuk mencapai tujuan penelitiannya, Schroeder mengubah bentuk persamaan Schrödinger menjadi persamaan Poisson.

Berdasarkan pada uraian yang telah diungkapkan, dalam paper ini akan diterapkan metode relaksasi Gauss-Seidel untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger satu partikel pada berbagai sumur potensial. Algoritma dari metode relaksasi Gauss-Seidel dijelaskan pada bagian berikut ini,

## II. Metode Penelitian

Solusi persamaan Schrödinger menggunakan metode relaksasi Gauss-Seidel berawal dari penyelesaian persamaan Poisson, agar lebih sederhana hanya ditinjau persamaan dimensi dua, yang berbentuk [13]

$$\nabla^2 \psi(x, y) = \rho(x, y) \quad (1)$$

$\rho(x, y)$  adalah fungsi sumber. Untuk mempermudah dalam penulisan persamaan numerik, notasi  $\psi_{(i,j)} \equiv \psi(i\Delta x, j\Delta x)$  digunakan. Pendekatan beda hingga (*finite difference*) untuk Laplacian ( $\nabla^2 \psi(x, y)$ ) dengan spasi  $\Delta x = \Delta y$  yaitu

$$\nabla^2 \psi_{(i,j)} \approx \frac{\psi_{(i-1,j)} - 2\psi_{(i,j)} + \psi_{(i+1,j)}}{(\Delta x)^2} + \frac{\psi_{(i,j-1)} - 2\psi_{(i,j)} + \psi_{(i,j+1)}}{(\Delta x)^2} \quad (2)$$

atau dapat dituliskan lebih sederhana dengan

$$\nabla^2 \psi_{(i,j)} = \frac{4}{(\Delta x)^2} [\bar{\psi}_{(i,j)} - \psi_{(i,j)}] \quad (3)$$

dengan  $\bar{\psi}_{(i,j)}$  merupakan nilai rata-rata bagian luar.

$$\bar{\psi}_{(i,j)} = \frac{1}{4} (\psi_{(i-1,j)} + \psi_{(i+1,j)} + \psi_{(i,j-1)} + \psi_{(i,j+1)}) \quad (4)$$

Substitusi “persamaan (3)” ke “persamaan (1)” diperoleh persamaan numerik berikut ini.

$$\psi_{(i,j)} = \bar{\psi}_{(i,j)} - \rho_{(i,j)} \frac{(\Delta x)^2}{2d} \quad (5)$$

dengan  $d$  adalah dimensi ruang, untuk kasus dimensi dua,  $d = 2$ . “Persamaan (5)” digunakan secara iteratif dan bergiliran secara terus menerus sampai nilai  $\psi_{(i,j)}$  tidak berubah atau mencapai nilai tetap atau keadaan konvergen.

“Persamaan (5) dapat juga digunakan untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger dengan cara terlebih dahulu mengubah bentuk persamaannya.” Persamaan Schrödinger yang tidak bergantung waktu pada dimensi dua diberikan oleh

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y) + V(x, y) \psi(x, y) = E \psi(x, y) \quad (6)$$

Agar lebih sederhana dalam perhitungannya, satuan atomik digunakan sehingga  $\hbar = 1$  dan  $m = 1$  dan persamaan Schrodinger dapat dituliskan menjadi

$$\nabla^2 \psi(x, y) = 2[V(x, y) - E] \psi(x, y) \quad (7)$$

Memperhatikan “persamaan (1)” dan “persamaan (7)”, diperoleh bahwa

$$\rho(x, y) = 2[V(x, y) - E] \psi(x, y) \quad (8)$$

Persamaan numerik yang sesuai untuk persamaan Schrodinger (substitusi “persamaan (8)” ke “persamaan (5)”) adalah

$$\psi_{(i,j)} = \bar{\psi}_{(i,j)} - 2(V_{(i,j)} - E)\psi_{(i,j)} \frac{(\Delta x)^2}{2d} \quad (9)$$

Setelah dengan manipulasi sederhana diperoleh persamaan numerik berikut ini.

$$\psi_{(i,j)} = \frac{\bar{\psi}_{(i,j)}}{1 + (V_{(i,j)} - E) \frac{(\Delta x)^2}{d}} \quad (10)$$

Persamaan (10) digunakan untuk menghitung fungsi gelombang secara iterasi dimulai dengan menggunakan nilai  $E = 0$  dan  $\psi_{(i,j)}$  bernilai bilangan acak. Pada setiap langkah iterasi nilai fungsi gelombang dinormalisasi dengan skala

$$A = \frac{1}{\sum_i \sum_j |\psi_{(i,j)}|^2} \quad (11)$$

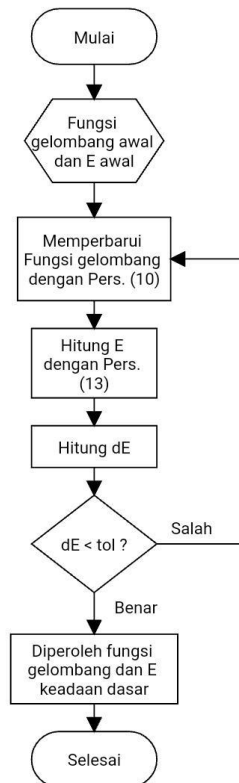
Nilai energi dihitung dengan persamaan berikut ini.

$$E_0 = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (12)$$

Setelah mengikuti teknik yang diberikan oleh Sudiarta dan Geldart (2007), diperoleh persamaan numerik untuk energi yaitu

$$E = \frac{1}{\sum_i \sum_j |\psi_{(i,j)}|^2} \left\{ \sum_i \sum_j \left[ -\frac{\psi_{(i,j)}^* \left[ (\psi_{(i-1,j)} + \psi_{(i+1,j)} + \psi_{(i,j-1)} + \psi_{(i,j+1)} - 4\psi_{(i,j)}) \right]}{2(\Delta x)^2} + \psi_{(i,j)}^* V_{(i,j)} \psi_{(i,j)} \right] \right\} \quad (13)$$

Setelah melakukan iterasi, seperti yang ditunjukkan pada Gambar 1, fungsi gelombang dan energi mencapai nilai konvergen atau energi keadaan dasar ketika perubahan energi sistem lebih kecil dari nilai toleransi (tol).



**Gambar 1.** Proses komputasi numerik untuk mendapatkan fungsi gelombang dan energi keadaan dasar sistem kuantum

### III. Hasil Penelitian dan Pembahasan

Dalam penelitian ini diterapkan sistem kuantum satu partikel dalam dua jenis potensial yaitu potensial kotak dan potensial osilator harmonik dimensi satu, dua dan tiga.

#### Potensial Kotak

Untuk menguji keakuratan hasil penelitian pada sistem satu partikel dalam potensial kotak, dibutuhkan validasi dengan nilai eksak. Tabel 1 menunjukkan hasil numerik energi keadaan dasar pada ruang 1D, 2D dan 3D. Hasil yang diperoleh menggunakan metode relaksasi Gauss-Seidel telah sesuai dengan nilai eksak yang ada dengan perbedaan nilai energi sekitar 0,04%-0,48%. Fungsi gelombang keadaan dasar diperoleh berdasarkan persamaan (10) yang bergantung pada nilai energi yang didapatkan sebelumnya. Kondisi syarat batas (*boundary condition*) untuk fungsi gelombang pada dinding-dinding kotak adalah bernilai nol,  $\psi(0) = \psi(1) = 0$ .

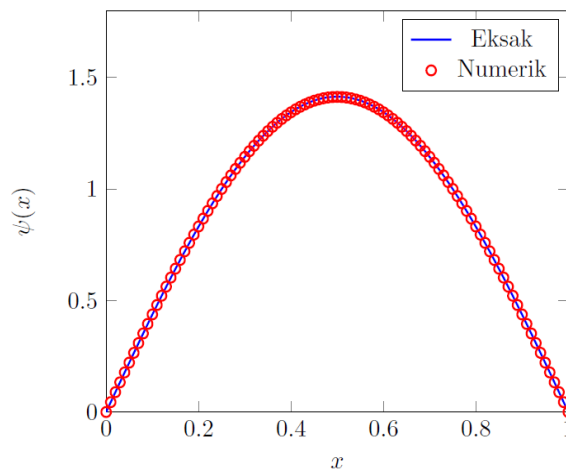
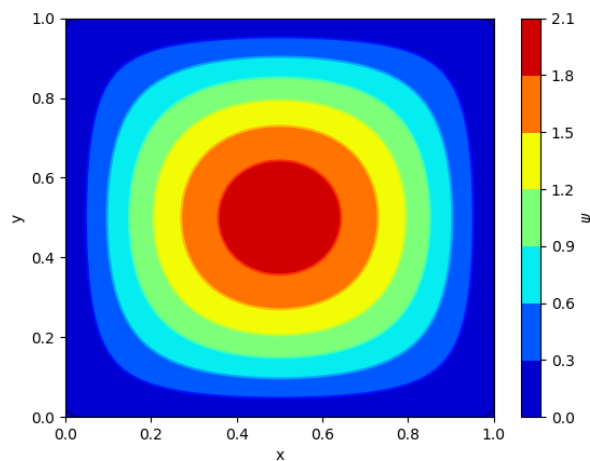
Gambar 2 menunjukkan perbandingan hasil numerik fungsi gelombang keadaan dasar dengan solusi analitik (eksak) untuk sebuah partikel di dalam potensial kotak 1D. Fungsi gelombang keadaan dasar 2D diberikan pada gambar 3. Hasil stabil serta nilai konvergen diperoleh lebih cepat dibandingkan dengan menggunakan metode FDTD sesuai dengan tabel 2. Berdasarkan gambar 2 dan 3 jelas terlihat bahwa hasil numerik sangat sesuai dengan hasil eksak.

**Tabel 1.** Perbandingan hasil numerik energi keadaan dasar dengan nilai eksak untuk sebuah partikel di dalam potensial kotak 1D, 2D dan 3D dengan panjang sisinya  $a = 1$

Dimensi	$E_0$ -Numerik	$E_0$ -Eksak	$\Delta E$ (%)
1	4,934399	4,934802	0,04
2	9,866359	9,869604	0,32
3	14,799549	14,804406	0,48

**Tabel 2.** Perbandingan jumlah iterasi menuju nilai konvergen pada kasus potensial kotak menggunakan metode FDTD dengan metode relaksasi Gauss-Seidel

Dimensi	FDTD	Relaksasi Gauss-Seidel
1	2191	806
2	3478	1444
3	2572	2151

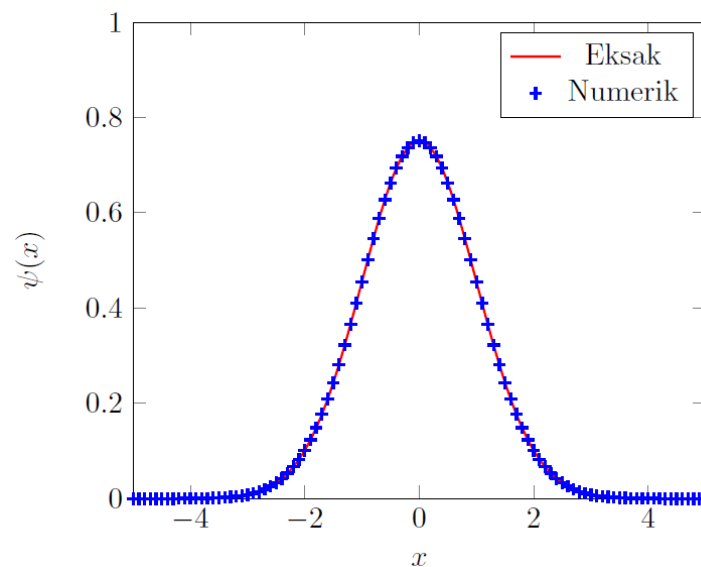
**Gambar 2.** Perbandingan hasil numerik fungsi gelombang keadaan dasar dengan hasil eksak untuk sebuah partikel di dalam potensial kotak 1D dengan panjang grid  $LX = 1$ , jumlah grid  $NX = 100$ , dengan spasi grid  $\Delta x = 0,01$ .**Gambar 3.** fungsi gelombang keadaan dasar untuk sebuah partikel di dalam potensial kotak 2D dengan panjang  $LX = 1$ ,  $NX = 50$ ,  $NY = 50$  dan spasi grid  $\Delta x = \Delta y = 0,2$ .

### Potensial Osilator Harmonik

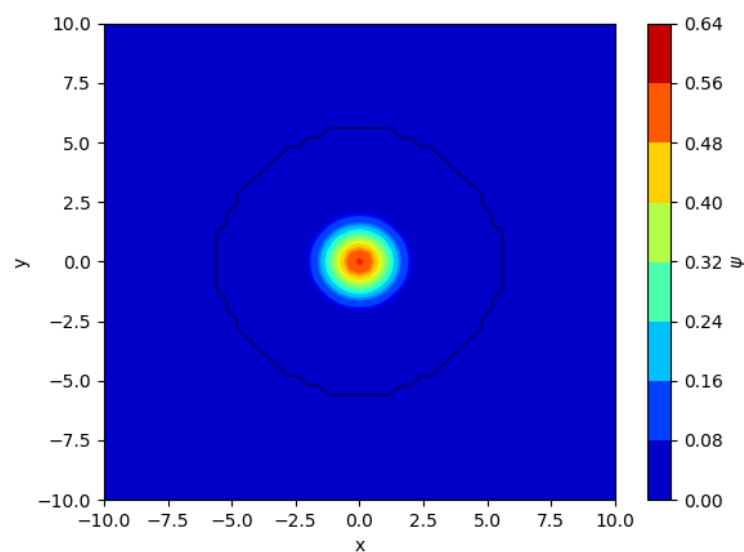
Hasil numerik yang didapatkan menggunakan parameter yang sama pada kasus potensial kotak diberikan pada tabel 2 untuk nilai energi keadaan dasar berbagai dimensi. Dalam Kasus potensial osilator harmonik, nilai energi keadaan dasar yang diperoleh juga sesuai dengan nilai eksak. Fungsi gelombang keadaan dasar pada Gambar 4 diperoleh dengan menyesuaikan parameter berupa jumlah grid  $NX = 100$  dengan spasi grid  $\Delta x = 0,1$ . Perbandingan fungsi gelombang keadaan dasar untuk sebuah partikel dalam potensial osilator harmonik 2D dan 3D dapat dilihat pada gambar 5 dan 6, gambar tersebut menunjukkan kesesuaian hasil numerik dengan hasil eksak.

**Tabel 3.** Perbandingan hasil numerik energi keadaan dasar dengan nilai eksak untuk sebuah partikel di dalam potensial osilator harmonik 1D, 2D dan 3D dengan konstanta pegas  $k = 1$ .

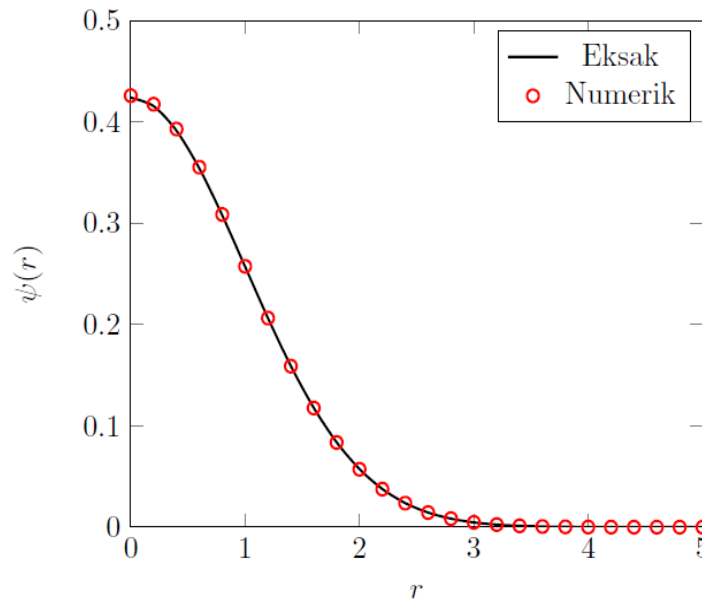
Dimensi	$E_0$ -Numerik	$E_0$ -Eksak	$\Delta E$ (%)
1	0,499687	0,50	0,03
2	0,989897	1,00	1,01
3	1,496241	1,50	0,37



**Gambar 4.** Perbandingan hasil numerik fungsi gelombang keadaan dasar dengan hasil eksak untuk sebuah partikel dalam potensial osilator harmonik 1D dengan  $LX = 10$ ,  $NX = 100$  dengan spasi grid = 0,1 untuk 1000 kali iterasi.



**Gambar 5.** fungsi gelombang keadaan dasar untuk sebuah partikel dalam potensial osilator harmonik 2D dengan panjang grid ke arah sumbu x dan y dibuat sama yaitu  $LX = LY = 20$ , jumlah grid  $NX = NY = 50$  dan spasi grid  $\Delta x = \Delta y = 0,4$ .



**Gambar 6.** Perbandingan hasil numerik fungsi gelombang keadaan dasar sebagai fungsi  $r$  dengan hasil eksak untuk sebuah partikel dalam potensial osilator harmonik 3D. Parameter yang digunakan yaitu  $NX = NY = NZ = 50$ , spasi grid  $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 0,2$ .

#### IV. Kesimpulan

Metode numerik relaksasi Gauss-Seidel telah berhasil diaplikasikan untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger untuk sistem satu partikel di dalam potensial pada dimensi satu, dua dan tiga. Langkah awal yang dilakukan pada metode relaksasi ini adalah memodifikasi persamaan Schrodinger sehingga membentuk sebuah persamaan Poisson. Kemudian dari persamaan Poisson diterapkan metode relaksasi yang banyak ditemukan di buku teks metode numerik. Algoritma numerik dengan metode relaksasi ditemukan efisien, stabil, akurat dan pemrograman yang sederhana tanpa memerlukan latar belakang komputasi numerik yang banyak.

#### Ucapan Terimakasih

Ucapan terimakasih disampaikan kepada dosen-dosen serta mahasiswa-mahasiswa di Kelompok Riset Fisika Teori dan Komputasi Fakultas MIPA Universitas Mataram yang telah membantu dan memberi dukungan dalam mengerjakan penelitian ini. Penelitian ini didanai dari Hibah Penelitian Berbasis Kompetensi tahun anggaran 2019.

#### Kepustakaan

- [1] R. A. Serway, J. W. Jewett, "Mekanika kuantum," in *Fisika untuk Sains dan Teknik*, 6th Ed. Jakarta: Salemba Teknik, 2010, ch. 41, sec. 4, pp. 342–344.
- [2] R. Becerril, F.S. Guzman, A. Rendon-Romero, S. Valdez-Alvarado, "Solving the time-dependent Schrodinger equation using finite difference methods," in *Revista Mexicana De Fisica E* 54, 2008, pp. 120-132.
- [3] F. S. Levin, J. Shertzer, "Finite-element solution of the Schrodinger equation for the helium ground state," *The American Physical Society*, Vol. 32, No. 6, 1985, pp. 3285-3290.
- [4] J. Ackermann, R. Roitzsch, "A two-dimensional multilevel adaptive finite element method for the time-independent Schrodinger equation," *Chemical Physics Letters*, Berlin, Vol. 214, No. 1, 1993, pp. 109-117.
- [5] C. C. Marston, G. G. BalintKurti, "The Fourier grid Hamiltonian method for bound state eigenvalues and eigenfunctions," in *Journal of Chemical Physics*, Vol. 91, No. 6, 1989, pp. 3571-3576.
- [6] D. Kosloff, R. Kosloff, "A fourier method solution for the time dependent Schrodinger equation as a tool in molecular dynamics," in *Journal of Computational Physics*, vol. 52, 1983, pp. 35-53.
- [7] A. Soriano, E. A. Navarro, J. A. Portí, V. Such, "Analysis of the finite difference time domain technique to solve the Schrödinger equation for quantum devices," in *Journal of Applied Physics*, Vol. 95, No. 12, 2004, pp. 8018.
- [8] W. Dai, G. Li, R. Nassar, S. Su, "On the stability of the FDTD method for solving a time-dependent Schrodinger equation," in *Wiley InterScience*, 2005, pp. 1140-1154.

- [9] I. W. Sudiarta, D. J. W. Geldart, "Solving the schrödinger equation using the finite difference time domain method," in *Journal of Physics A: Math. Theor.* 40, 2007, pp. 1885-1896.
- [10] R. Kosloff, H. Tal-Ezer, "A direct relaxation method for calculating eigenfunctions and eigenvalues of the Schrodinger equation on a grid," *Chemical Physics Letters*, Vol. 127, No. 3, 1986, pp. 223-230.
- [11] C. Bottcher, M. R. Strayer, A. S. Urnar, P. G. Reinhard, "Damped relaxation techniques to calculate relativistic bound states," *The American Physical Society*, Vol. 40, No. 8, 1989, pp. 4182-4189.
- [12] D. V. Schroeder, "the Variational-relaxation algorithm for finding quantum bound states," in *the American Journal of Physics*, 2017.
- [13] A. Trellakis, A. T. Galick, A. Pacelli, U. Ravaioli, "Iteration scheme for the solution of the two-dimensional Schrödinger-Poisson equations in quantum structures," *Journal of Applied Physics*, Vol. 81, No. 12, 1997, pp. 7880-7884.
- [14] F. Marsiglio, "The harmonic oscillator in quantum mechanics: A third way," in *American Journal of Physics*, Vol. 77, No. 3, 2009, pp. 253-258.