

**MAKALAH PEMODELAN
QUANTUM MEKANIK
SIMULASI PERGERAKAN ELEKTRON DALAM ZAT PADAT –
KRISTAL NaCl 1 DIMENSI**

Disusun Oleh :

Ivan Muhammad Siegfried	(140310120027)
Heri Fernando S	(140310120011)
Heraldo Yanindra P	(140310120015)
Zahra Inatsa Hauna	(140310120017)
Muhammad Wahyudin	(140310120031)
Nurul Dwi Anggraeni	(140310120033)
Erwin	(140310120045)
Kiki Winda Veronica	(140310120059)



**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS PADJADJARAN**

2015

KATA PENGANTAR

Makalah Pemodelan yang berjudul “**Simulasi Pergerakan Elektron dalam Kristal NaCl 1 Dimensi**” ini kami buat untuk memenuhi salah satu komponen tugas kuliah yang diberikan. Dalam pengerjaan simulasi ini, kami membagi tugas kami pada masing – masing anggota kelompok dengan tujuan mempermudah pengerjaan proyek simulasi dan juga untuk menjaga kekompakan dari kelompok. Untuk itu, kami lampirkan pembagian tugas makalah Pemodelan pada halaman terakhir dari makalah ini. Kami juga berterimakasih kepada Dr. Eng. I Made Joni, M.Sc. selaku dosen pemodelan yang telah membimbing kelompok kami dalam menyelesaikan proyek ini.

Kami mohon maaf apabila dalam presentasi dan pembuatan makalah ini terdapat banyak kesalahan. Semoga makalah ini dapat bermanfaat di masa mendatang.

Bandung, 20 Desember 2015

Kelompok Permodelan Quantum Mechanics

DAFTAR ISI

Contents

KATA PENGANTAR	2
DAFTAR ISI	3
DAFTAR TABEL	5
DAFTAR GAMBAR	5
BAB I PENDAHULUAN	6
1.1. Latar Belakang	6
1.2. Rumusan Masalah	6
1.3. Tujuan	7
1.4. Batasan Masalah.....	7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN ALGORITMA	8
2.1. Kristal NaCl	8
2.2. Lennard – Jones Potential	10
2.2.1. Potensial L-J untuk NaCl	12
2.2.2. Diskritisasi dan Algoritma	13
2.3. Finite Difference Methods	14
2.3.1. Diskritisasi dan Algoritma	15
2.4. Matrix Methods	18
2.4.1. Diskritisasi dan Algoritma	19
BAB III HASIL DAN PEMBAHASAN	21
3.1. L – J Potensial NaCl	21
3.1.1. Hasil.....	21
3.1.2. Pembahasan	22
3.2. Finite Difference Methods	22
3.2.1. Hasil.....	22
3.2.2. Pembahasan	24
3.3. Matrix Methods	24
3.3.1. Hasil.....	24

3.3.2. Pembahasan	29
3.4. Analisa Hasil keseluruhan	31
BAB IV KESIMPULAN	33
DAFTAR PUSTAKA	34
Lampiran – Lampiran	36
1.1. Listing Lennard – Jones Potensial	36
1.2. Listing FDM (Finite Difference Methods).....	39
1.3. Listing Matrix Methods	41
1.4. Kontribusi Anggota Kelompok	Error! Bookmark not defined.

DAFTAR TABEL

Tabel 1. Kontribusi Anggota Kelompok Dalam Pembuatan Makalah	Error! Bookmark not defined.
Tabel 2. Keaktifan dan Kehadiran Anggota Kelompok.....	Error! Bookmark not defined.
Tabel 3. Catatan Setiap Anggota.....	Error! Bookmark not defined.

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1. Struktur Kristal NaCl (FCC)	8
Gambar 2. Kurva Interaksi antar dua atom, Na dan Cl	9
Gambar 3. Model Potensial Lennard-Jones	12
Gambar 4. Model L-J Potensial untuk 1 Molekul NaCl	12
Gambar 5. Model Susunan Lattice Kristal NaCl, N=3	13
Gambar 6. Diagram Alir FDM untuk menyelesaikan Persamaan Schrodinger	17
Gambar 7. Model L-J Potensial Kristal NaCl, N=1	21
Gambar 8. Model lattice L-J Potensial Kristal NaCl, N= 3	21
Gambar 9. L-J Potensial NaCl untuk FDM.....	22
Gambar 10. Pergerakan Elektron dalam NaCl menggunakan FDM.....	23
Gambar 11: L-J Potensial 3 Buah NaCl untuk FDM	23
Gambar 12: Pergerakan Elektron dalam 3 Buah NaCl menggunakan FDM	24
Gambar 13. L-J Potensial NaCl 1 Molekul untuk Matrix Methods	25
Gambar 14. Spektrum Energi Elektron pada 1 Molekul Kristal NaCl	25
Gambar 15. Hasil Simulasi pada 1 molekul NaCl	26
Gambar 16. Hasil Simulasi Pada Tingkat Energi Pertama n=1	26
Gambar 17. Spektrum Energi Elektron Pada 3 Molekul Kristal NaCl	27
Gambar 18. Hasil Simulasi Pada 3 Molekul NaCl.....	27
Gambar 19. Hasil Simulasi Pada Tingkat Energi Pertama n = 1	28
Gambar 20. Hasil Simulasi Pada Tingkat Energi Kedua n=2.....	28
Gambar 21. Grafik Analisa Hasil Simulasi.....	31

BAB I

PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Fisika Komputasi/Permodelan adalah salah satu cabang dari ilmu fisika yang mempelajari simulasi sistem fisis yang berdasarkan pada penurunan rumus dan teori yang didapatkan dari eksperimen. Ketika sulit untuk melakukan suatu percobaan fisika, maka kita dapat melakukan permodelan untuk memodelkan suatu kejadian fisika yang tentunya harus sesuai dengan konsep-konsep fisika yang ada.

Tahapan umum dalam memodelkan kejadian fisika adalah dengan terlebih dahulu membuat atau mengumpulkan literatur yang berhubungan dengan sistem yang ingin kita buat. Lalu tahapan yang berikutnya adalah membuat fungsi umum/*governing equations* yang menggambarkan pergerakan atau perilaku dari sistem. Lalu tahapan selanjutnya adalah dengan melakukan diskritisasi untuk membuat perumusan diskrit yang dapat dihitung secara iteratif. Lalu kemudian adalah tahapan penampilan hasil. Hasil inilah yang mesti dibandingkan dengan keadaan sebenarnya agar bisa dianggap model yang kita buat valid atau tidak.

Salah satu contoh kejadian sistem fisis yang dapat kita simulasikan adalah pergerakan elektron di Kristal NaCl. Hal yang perlu diperhatikan sebelum mensimulasikan pergerakan elektron di Kristal NaCl adalah menggambarkan potensial yang dihasilkan oleh Kristal NaCl, lalu menyelesaikan persamaan schrodinger bebas waktu dengan menggunakan metoda *Finite Difference Method/FDM* dan *Matrix Method*.

1.2. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang yang diungkapkan, maka dapat dirumuskan beberapa permasalahan yang akan diselesaikan pada simulasi pemodelan ini. Berikut adalah rumusan masalah yang diangkat

- a. Bagaimana mensimulasikan pergerakan elektron dalam Kristal NaCl 1 Dimensi?
- b. Bagaimana membuat Potensial yang dihasilkan NaCl?
- c. Bagaimana menyelesaikan persamaan Schrodinger bebas waktu yang dibuat untuk menggambarkan pergerakan dan probabilitas dari elektron yang bergerak dalam Kristal NaCl 1 dimensi?
- d. Apa interpretasi sifat fisis NaCl dari hasil simulasi ini?

1.3. Tujuan

Berdasarkan rumusan permasalahan yang diangkat, maka tujuan simulasi ini adalah

- a. Mensimulasikan pergerakan elektron dalam Kristal NaCl 1 Dimensi.
- b. Membuat model potensial dari kristal NaCl
- c. Menyelesaikan persamaan Schrodinger bebas waktu untuk menggambarkan pergerakan elektron dalam kristal NaCl serta menentukan probabilitas dari elektron yang bergerak dalam Kristal NaCl 1 dimensi.
- d. Menginterpretasi sifat fisis NaCl ditinjau dari pergerakan elektron dalam kristal.

1.4. Batasan Masalah

Simulasi ini dibatasi dalam beberapa hal, yakni

- a. Kristal yang digunakan adalah kristal NaCl 1 Dimensi.
- b. Jumlah molekul dalam kristal NaCl sebanyak 3 buah molekul.
- c. Muatan yang melewati kristal adalah elektron dengan massa $m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$ dan besar muatan $e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ coulomb}$

BAB II

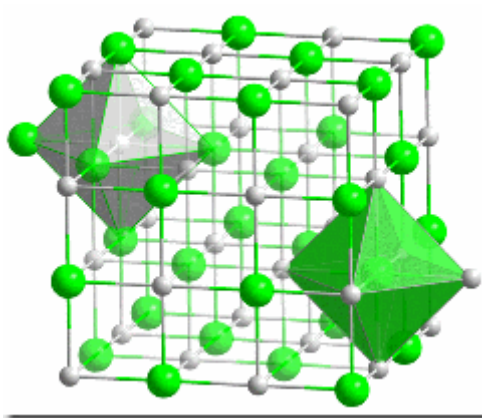
TINJAUAN PUSTAKA DAN ALGORITMA

2.1. Kristal NaCl

Natrium klorida, yang juga dikenal sebagai garam, merupakan senyawa ion dengan rumus NaCl. Natrium Klorida adalah garam yang berbentuk kristal atau bubuk berwarna putih. NaCl memiliki ikatan ionik. Ikatan ionik pada NaCl dijelaskan seakan-akan sebuah elektron dari atom Na lepas hingga terbentuk Na^+ dan elektron itu pindah ke atom Cl sehingga terbentuk Cl^- dan kemudian kedua atom bermuatan ini saling tarik menarik hingga terbentuk molekul NaCl yang netral.

Keelektronegatifan atom Na dan Cl dalam skala Pauling adalah 0,93 dan 3,16. Perbedaan keelektronegatifan kedua atom adalah 2,23. Jadi senyawa NaCl adalah senyawa ionik yang terdiri dari ion Na^+ dan ion Cl^- .

Kisi kristal NaCl adalah kubus berpusat muka (Face Centered Cubic) seperti pada gambar



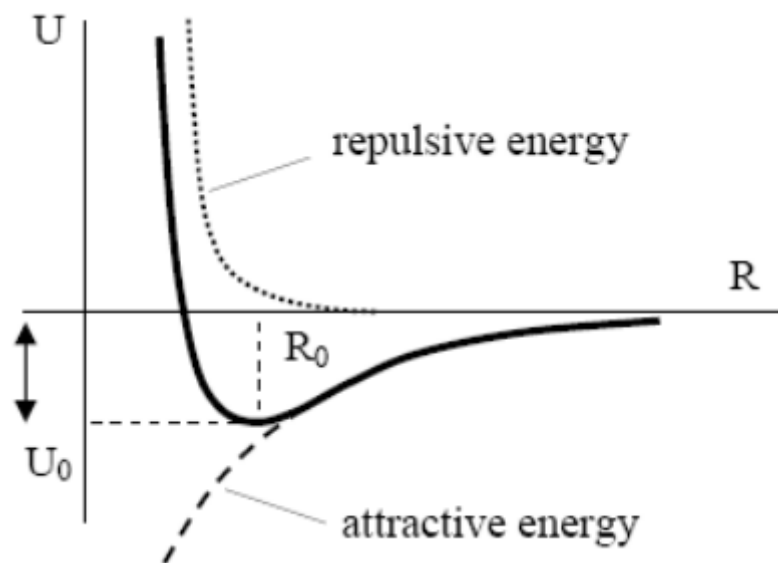
Gambar 1. Struktur Kristal NaCl (FCC)

Ion-ion Na^+ ditunjukkan dengan bola berwarna putih dan Cl^- dengan bola berwarna hijau yang dihubungkan dengan garis – garis. Garis-garis yang menghubungkan bola-bola tersebut bukan lambang dari ikatan kovalen karena ikatan antara ion-ion yang ada merupakan ikatan ionik. Garis-garis tersebut digambarkan

untuk memudahkan dalam mengidentifikasi bentuk dari kisi kristal senyawa ionik dan geometri yang terbentuk oleh suatu ion dengan ion-ion yang muatannya berlawanan yang ada disekitarnya pada jarak yang sama.

Dalam kristal ionik, banyaknya anion yang mengelilingi kation dengan jarak yang sama merupakan bilangan koordinasi dari kation, sebaliknya banyaknya kation yang mengelilingi anion dengan jarak yang sama merupakan bilangan koordinasi dari anion. Pada gambar di atas setiap ion Na^+ dikelilingi oleh 6 ion Cl^- dengan geometri oktahedral *vice versa*. Jadi bilangan koordinasi ion Na^+ dan ion Cl^- yang terdapat dalam NaCl adalah 6.

Interaksi antar dua atom Na dan Cl sebagai fungsi jaraknya digambarkan dalam kurva berikut



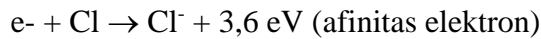
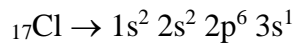
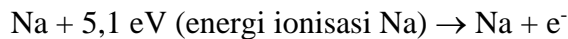
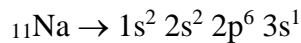
Gambar 2. Kurva Interaksi antar dua atom, Na dan Cl

Pada kurva ini, energi potensial minimum (U_0) adalah energi kohesifnya. Dari kurva tersebut tampak bahwa energi potensial minimum terjadi pada jarak R_0 yang disebut jarak interatomik seimbang. Gaya interaksi antar atom ditentukan dari gradien energi potensialnya

$$F(R) = \frac{-\partial U}{\partial R} \dots (1)$$

Untuk $R < R_o$, maka $F(R) > 0$. Artinya gaya antar atom bersifat repulsif. Sedangkan untuk $R > R_o$, maka $F(R) < 0$, artinya gaya antar atom bersifat atraktif (tarik-menarik)

Gaya atraktif tersebut menggambarkan adanya ikatan antara atom dalam zat padat, sedangkan gaya repulsif terjadi dikarenakan adanya prinsip larangan Pauli yang menyatakan “tidak dibenarkan adanya dua elektron berada dalam satu orbital yang memiliki bilangan kuantum yang sama.” Kedua gaya tersebut terjadi pada struktur kristal NaCl yang terbentuk dari interaksi elektrostatis antara ion Na^+ dengan Cl^- .



2.2. Lennard – Jones Potential

Lennard Jones potential merupakan pendekatan model potensial interatomic (potensial pasangan) diantara sepasang atom neutral atau molekul. Bentuk dari potensial interatomic ini pertama kali di publikasikan pada tahun 1924 oleh John Lennard-Jones. Bentuk persamaan yang paling umum dari Lennard-Jones potensial adalah

$$V(r_{ij}) = 4 \epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \dots (2)$$

Dengan

ϵ : Kedalaman dari sumur potensial (eV)

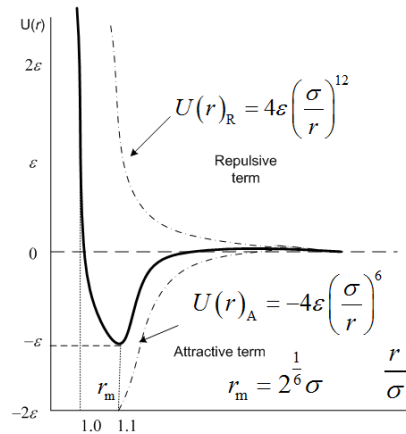
σ : jarak terhitung dimana potensial antar-atom bernilai nol atau disebut dengan *equilibrium bond distance* (nm)

r_{ij} : merupakan jarak antar atom (nm)

Nilai σ dan ϵ pada persamaan (2) merupakan parameter spesifik pada Potensial Lennard-Jones, nilainya berbeda untuk setiap interaksi antar atom yang berbeda. Pada persamaan (2) suku $\left(\frac{1}{r_{ij}}\right)^{12}$ merupakan gaya repulsif antar atom ketika mereka berdekatan satu sama lain. Secara fisis hal tersebut terkait dengan prinsip larangan Pauli, yang menyatakan bahwa ketika awan elektron yang menyelimuti atom mulai tumpang tindih, energi sistem meningkat pesat. Sedangkan suku $\left(\frac{1}{r_{ij}}\right)^6$ menjadi dominan ketika r_{ij} meningkat, hal tersebut merepresentasikan gaya tarik menarik akibat interaksi yang lemah antar dua atom seperti ikatan di *closed-shell systems*. Dengan demikian, hal tersebut dapat mendeskripsikan dengan baik interaksi *Van Der Waals* pada gas inert dan sistem molekular.

Konsep potensial pasangan menang dapat menjelaskan dengan baik sistem ionic dan gas inert, akan tetapi konsep ini tidak memiliki kebergantungan dengan lingkungan, secara umum memang kurang baik untuk sistem ikatan kovalen karena tidak memperhatikan aspek penting seperti *many-body effects*. Namun karena kesederhanaannya dalam komputasi, potensial Lennard-Jones sering digunakan dalam bidang pemodelan dan komputasi, meskipun ada jenis potensial lainnya yang lebih akurat.

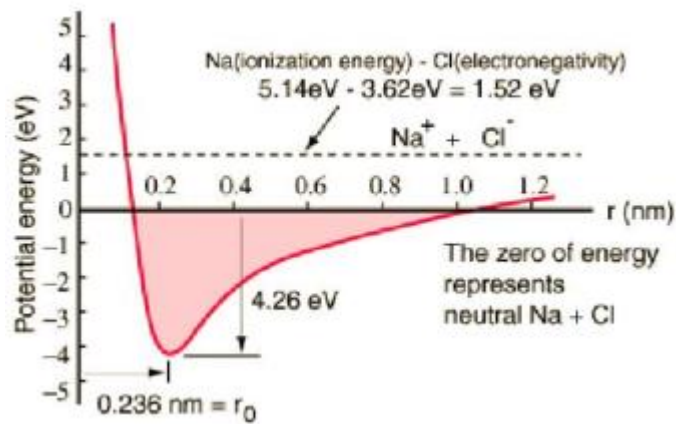
Meskipun konsep potensial pasangan dapat menjelaskan dengan baik sistem ionik dan gas inert, akan tetapi tidak memiliki kebergantungan lingkungan, kemudian secara umum juga kurang baik untuk sistem kovalen dimana *many-body effects* merupakan hal penting. Model Potensial Pasangan Lennard-Jones ditunjukkan pada gambar



Gambar 3. Model Potensial Lennard-Jones

2.2.1. Potensial L-J untuk NaCl

Pada proyek ini, kami memilih NaCl sebagai kristal yang akan dilewati oleh elektron. Model Potensial NaCl dengan menggunakan model potensial Lennard-Jones tampak seperti Gambar



Gambar 4. Model L-J Potensial untuk 1 Molekul NaCl

Model potensial diatas merupakan model potensial untuk satu buah molekul NaCl dengan parameter $\sigma = 0.236 \text{ nm}$ dan $\epsilon = 4.26 \text{ eV}$.

Jumlah molekul NaCl yang akan disimulasikan pada proyek ini sebanyak 3 buah molekul NaCl, yang dapat direpresentasikan dalam gambar dibawah ini



Gambar 5. Model Susunan Lattice Kristal NaCl, $N=3$

2.2.2. Diskritisasi dan Algoritma

Untuk memodelkan potensial NaCl dengan L-J potensial, diperlukan persamaan umum (*Governing Equation*) untuk NaCl. Berikut adalah persamaan L-J potensial untuk NaCl, dari persamaan (2) diperoleh fungsi diskritisasi untuk L-J Potensial sebagai berikut

$$U(c_n) = 4 \epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{x(c_n)} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{x(c_n)} \right)^6 \right] \dots (3)$$

Dengan ketentuan

$x(c_n)$: Jarak antar partikel (nm)

ϵ : 4.26 eV

σ : 0.236 nm

Algoritma pembuatan potensial NaCl dengan L-J Potensial

1. Menentukan jumlah titik data (n)
2. Menentukan parameter Well
 - a. epsilon : Maximal well-depth of the attractive part of the potential (eV)
untuk NaCl = 4,26 eV
 - b. sigma : Equilibrium bond distance ; untuk NaCl = 0.236 nm
 - c. xMin : jarak sumbu x awal
 - d. xMax : jarak sumbu x akhir
 - e. X(c_n) : Jarak antar partikel

3. Perhitungan Lennard – Jones Potential sesuai dengan $x(c_n)$ dari x_{Min} hingga x_{Max} dengan menggunakan persamaan (3)
4. Plotting Kurva
5. Konversi Pulsa menjadi Matriks $U(c_n)$ untuk digunakan pada Matrix Methods.

2.3. Finite Difference Methods

Metode beda hingga (Finite Difference Method) dapat digunakan untuk memecahkan Persamaan Schrodinger agar menemukan solusi yang dapat diterima secara fisik. FDM menggunakan fungsi PDB Matlab untuk memecahkan Persamaan Schrodinger namun lebih kompleks. Metode beda hingga memungkinkan dengan mudah menyelidiki ketergantungan fungsi gelombang pada total energi. Dasar dari metoda FDM adalah aproksimasi menggunakan turunan kedua menggunakan diferensiasi:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{\psi(x + \Delta x) - 2\psi(x) + \psi(x - \Delta x)}{\Delta x^2} \dots (4)$$

Persamaan Schrodinger diekspresikan sebagai berikut:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k(x)^2\psi(x) \dots (5)$$

$$k(x) = \sqrt{\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right) (E - U(x))} \dots (6)$$

Tujuan kita adalah untuk menemukan solusi dari bentuk persamaan schrodinger untuk fungsi potensial energi yang menangkap partikel didalam suatu region. Gradient negative dari potensial energi akan memberikan gaya terhadap partikel. Partikel harus berdasarkan hubungan kondisi batas dari fungsi gelombang. Probabilitas menemukan partikel haruslah berjumlah satu. Fungsi gelombang haruslah mencapai nilai nol ketika posisi dari *region* sumur meningkat. Akan dihasilkan set diskrit nilai untuk total energi E dari partikel sesuai dengan fungsi gelombang dari energi tersebut.

Proses untuk mencari nilai E secara fisis dan fungsi gelombang $\varphi(x)$ secara otomatis dapat dicari dengan menghitung jumlah zero crossing dari fungsi gelombang dan menebak nilai E hingga kondisi $\varphi(x_{max}) = 0$ Untuk keadaan energi yang berada di keadaan dasar E1, fungsi gelombang bernilai nol hanya untuk nilai x yang besar, nilai crossing juga bernilai nol keadaan eksitasi pertama E2 akan memiliki nilai 1 crossing dan n keadaan eksitasi E_{n+1} memiliki n crossing.

2.3.1. Diskritisasi dan Algoritma

- **Diskritisasi**

Persamaan Schrodinger bebas waktu diturunkan dari hubungan persamaan Schrodinger dengan besaran-besaran klasik yaitu:

Persamaan Gelombang Klasik	$\frac{\partial^2 \Psi^2(x,t)}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi^2(x,t)}{\partial t^2} = 0$
Momentum de Broglie	$p = mv = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$
Energi Kinetik	$K = \frac{1}{2} m v^2$
Energi Total	$E = K(x) - U(x)$
Fungsi Gelombang (Periodik terhadap waktu untuk koordinat t)	$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-i\omega t}$

Dari hubungan diatas, persamaan Schrodinger bebas waktu satu dimensi dapat ditulis sebagai berikut:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + U(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad \dots(7)$$

Lalu, dengan mengingat kembali perumusan FDM, maka:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{\psi(x + \Delta x) - 2\psi(x) + \psi(x - \Delta x)}{\Delta x^2} \dots (8)$$

Dan Persamaan Schrodinger dapat diubah menjadi:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k(x)^2\psi(x) \dots (9)$$

$$kc(x) = \sqrt{\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)(E - U(x))} \dots (10)$$

Menggunakan metode beda hingga, kita mulai dengan:

$$x = [x(1), x(2), \dots, x(N)] \quad k = [k(1), k(2), \dots, k(N)] \dots (11)$$

Dimana N merupakan nilai maksimum dari koordinat x, $x(1) = x_{min}$ dan $x(N) = x_{max}$, maka syarat batas haruslah:

$$\psi(x_{min}) = \psi(x(1)) = 0 \text{ and } \psi(x(2)) = \psi(x(1) + \Delta x) = 1 \dots (12)$$

Dengan mensubstitusikan persamaan schrodinger bebas waktu dengan persamaan FDM yang tadi kita telah jelaskan, maka didapatkan persamaan diskrit yang dapat menentukan $\psi(x)$ secara iterative yaitu sebagai berikut:

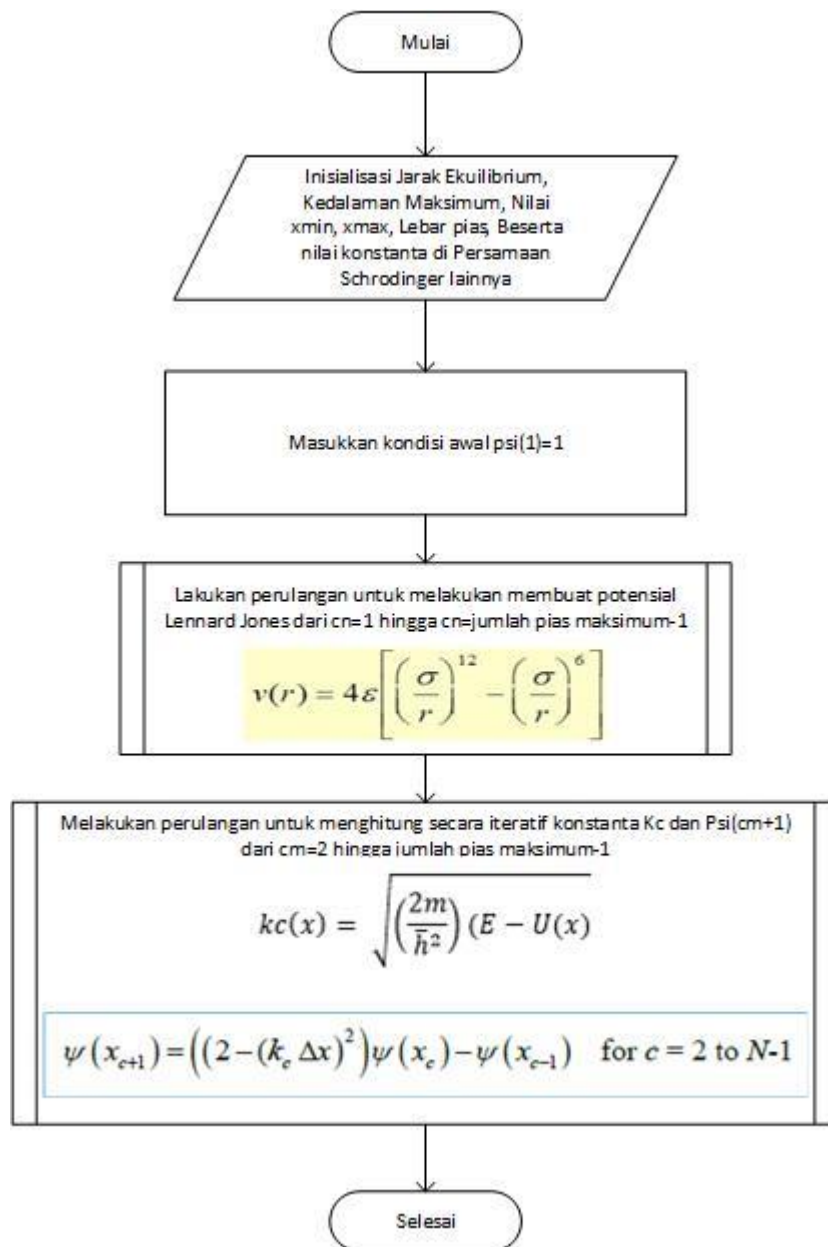
$$\psi(x_{c+1}) = \left((2 - (k_c \Delta x)^2)\psi(x_c) - \psi(x_{c-1})\right) \text{ for } c = 2 \text{ to } N-1 \dots (13)$$

Hasil iterasi tersebut dinormalisasikan menggunakan persamaan berikut:

$$\int_{x(1)}^{x(N)} |\psi(x)|^2 dx = A_n \quad \rightarrow \quad \psi_n(x) = \frac{\psi(x)}{\sqrt{A_n}} \dots (14)$$

- **Algoritma**

Algoritma didasarkan pada flowchart berikut ini:



Gambar 6. Diagram Alir FDM untuk menyelesaikan Persamaan Schrodinger

2.4. Matrix Methods

Persamaan Schrodinger 1D bebas waktu digambarkan oleh :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \dots (15)$$

$$H\psi(x) = E\psi(x) \dots (16)$$

Dimana terdapat beberapa parameter sebagai berikut :

- Persamaan Gelombang Mekanik

$$\frac{\partial^2 \psi^2(x, t)}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi^2(x, t)}{\partial t^2} = 0 \dots (17)$$

- Momentum (de Broglie)

$$p = mv = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \dots (18)$$

- Energi Total

$$E = K(x) - U(x) \dots (19)$$

- Fungsi Gelombang

$$\psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\omega t} \dots (20)$$

Untuk sistem atomik, jarak antar atom/pergerakan atom digambarkan pada satuan nanometer (nm) dan energinya digambarkan pada satuan elektron volt (eV).

Disini digunakan nilai literatur :

- Length (Lse) = 1×10^9 nm
- Energi (Ese) = $1,6 \times 10^{-19}$ eV

Maka persamaan schrodinger dapat dituliskan sebagai :

$$\left[\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{1}{L_{se}^2 E_{se}} \right) \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \psi(x) = E \psi(x) \quad \dots(21)$$

$$\left[C_{se} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) \right] \psi(x) = E \psi(x) \quad \text{where} \quad C_{se} = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \right) \left(\frac{1}{L_{se}^2 E_{se}} \right) \quad \dots(22)$$

$$H \psi(x) = E \psi(x) \quad \dots(23)$$

2.4.1. Diskritisasi dan Algoritma

Diskritisasi dan Algoritma untuk matrix methods adalah

- Mendefinisikan Hamiltonian Matrix. Matrix yang dipakai adalah turunan kedua yang diturunkan dari Finite-Difference Method. Pertama-tama kita representasikan operator di bawah ini :

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \dots (24)$$

Operator diatas direpresentasikan sebagai matriks $(N-2) \times (N-2)$. Dari definisi turunan pertama dan kedua dari fungsi $y(x)$, dapat diaproksimasi dengan menggunakan Finite-Difference Method

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_{n-1/2}} \approx \frac{y_n - y_{n-1}}{\Delta x}$$

$$\left. \frac{d^2 y}{dx^2} \right|_{x_n} \approx \frac{1}{\Delta x} \left(\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_{n+1/2}} - \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_{n-1/2}} \right) = \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{\Delta x^2}$$

Kemudian, energi kinetik [K] didefinisikan sebagai :

$$[K] = C_{se} [SD]$$

Dan Hamiltonian Matrixnya didefinisikan sebagai :

$$[H] = [K] + [U]$$

- Menentukan matrixnya merupakan matriks 4×4 yang berbentuk

$$[\mathbf{SD}] = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

- Menentukan nilai dan fungsi eigen
- Menentukan set diskrit nilai eigen dan normalisasi fungsi eigen
- Menyelesaikan persamaan schrodinger dengan matrix methods

BAB III

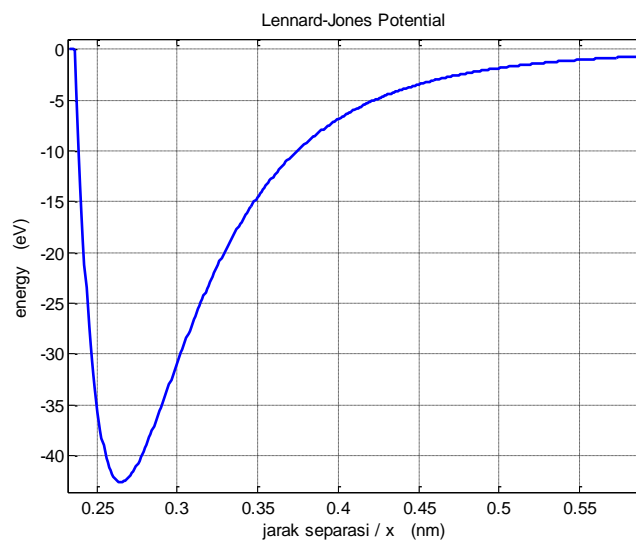
HASIL DAN PEMBAHASAN

3.1. L – J Potensial NaCl

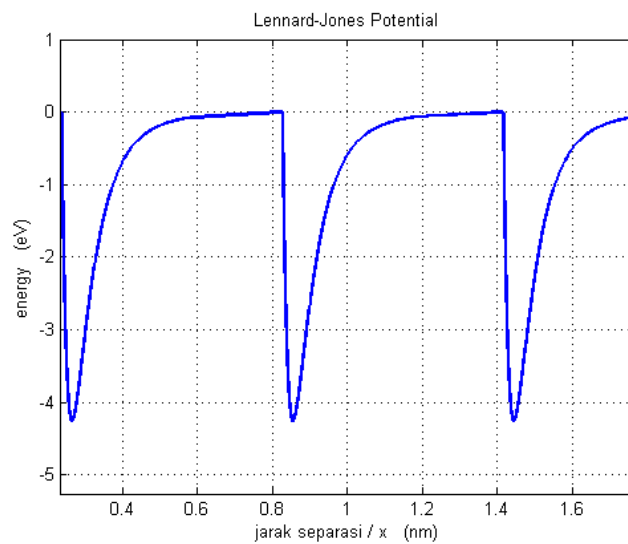
3.1.1. Hasil

Dari hasil simulasi diperoleh model L-J potensial Untuk Kristal NaCl 1

Dimensi dengan banyak molekul $N = 1$ dan $N = 3$.



Gambar 7. Model L-J Potensial Kristal NaCl, $N=1$



Gambar 8. Model lattice L-J Potensial Kristal NaCl, $N=3$

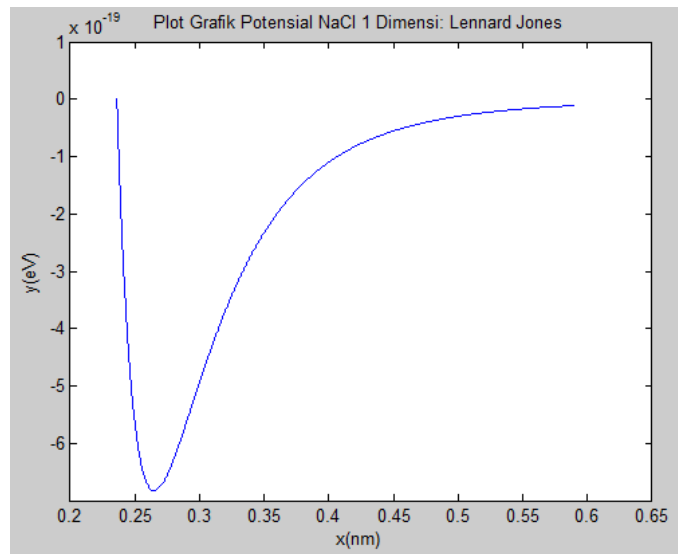
3.1.2. Pembahasan

Pada hasil simulasi untuk memodelkan potensial Lennard-Jones diperoleh potensial NaCl baik untuk $N=1$ ataupun $N=3$ Molekul. Kedalaman sumur potensial dari Kristal NaCl adalah -4.26 eV, sedangkan titik equilibrium nya adalah 0.236 nm. Pada kristal dengan 3 molekul NaCl jarak equilibrium setiap lembah sumur bernilai 0.236 nm, 0.472 nm, dan 0.708 nm. Hal tersebut didapatkan berdasarkan percobaan, karena tidak ada literature yang menyatakan potensial L-J secara kontinyu atau Lattice.

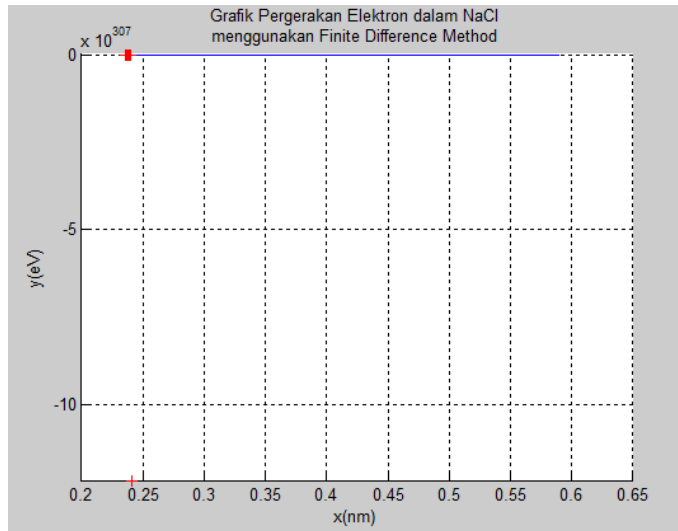
3.2. Finite Difference Methods

3.2.1. Hasil

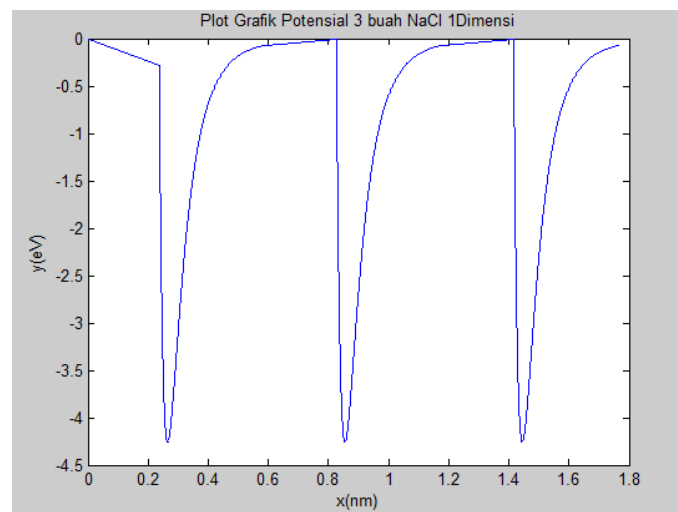
Dari hasil simulasi diperoleh model penyelesaian Persamaan Schrodinger untuk elektron yang bergerak dalam kristal NaCl 1 dimensi.



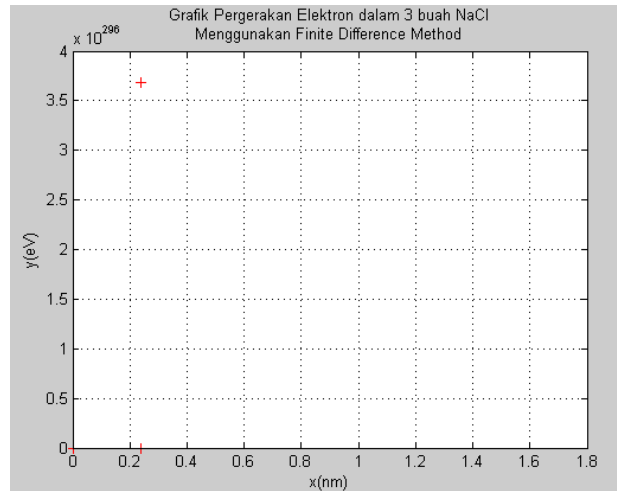
Gambar 9. L-J Potensial NaCl untuk FDM



Gambar 10. Pergerakan Elektron dalam NaCl menggunakan FDM



Gambar 11: L-J Potensial 3 Buah NaCl untuk FDM



Gambar 12: Pergerakan Elektron dalam 3 Buah NaCl menggunakan FDM

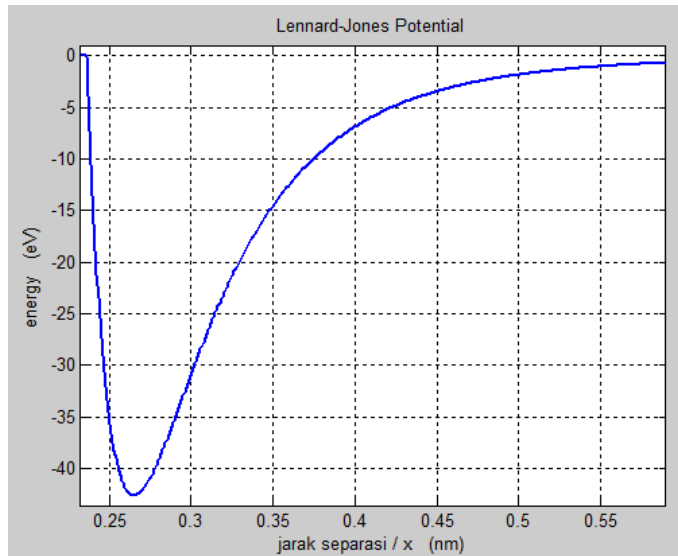
3.2.2. Pembahasan

Dari hasil yang didapat diatas, dapat dilihat bahwa penyelesaian persamaan Schrodinger bebas waktu tidak dapat dilakukan menggunakan metode FDM. Hal ini disebabkan bahwa kurvatur/gradien yang tidak dalam satu nilai menyebabkan persamaan menjadi divergen. Maka dari itu, metode lain yaitu metode matriks dibuat untuk menyelesaikan permasalahan ini. Kemudian, kita ketahui pula bahwa persamaan Schrodinger merupakan persamaan eigen. Maka dari itu, penyelesaian dengan menggunakan solusi persamaan eigen lebih tepat dibandingkan dengan menggunakan *Finite Difference Method*.

3.3. Matrix Methods

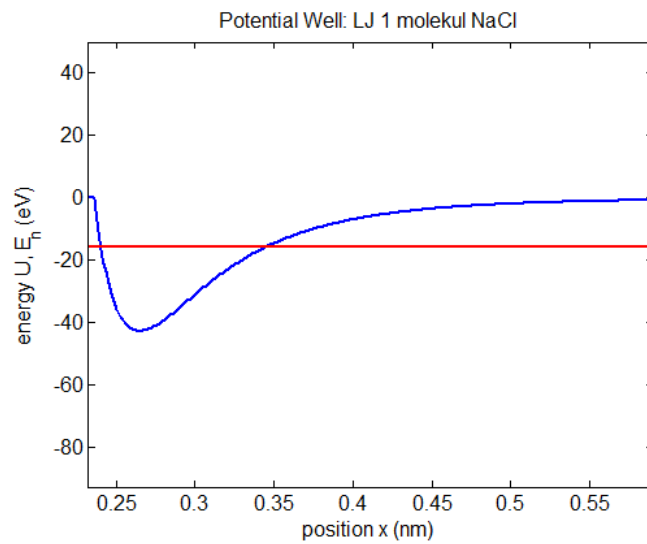
3.3.1. Hasil

Dari hasil simulasi diperoleh model penyelesaian Persamaan Schrodinger untuk elektron yang bergerak dalam kristal NaCl 1 dimensi dengan menggunakan matrix methods.

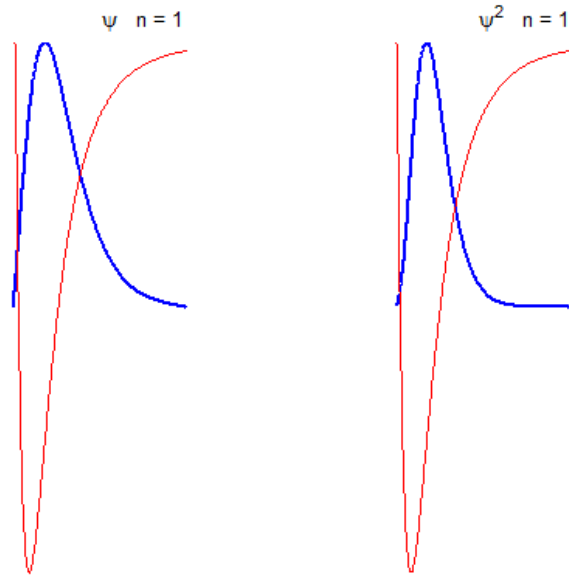


Gambar 13. L-J Potensial NaCl 1 Molekul untuk Matrix Methods

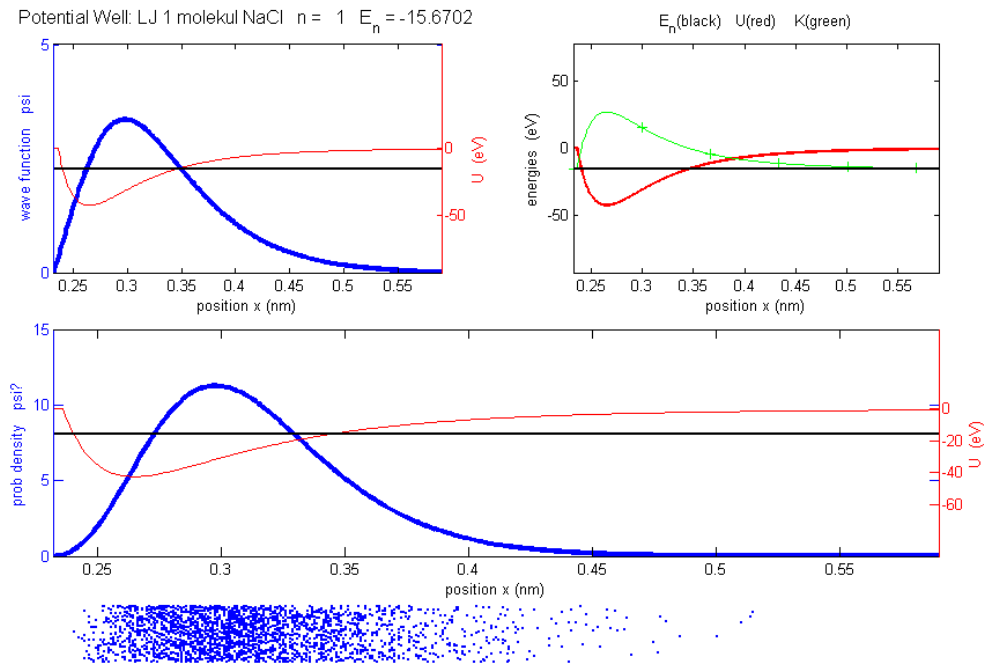
- **Penyelesaian pada Kristal NaCl 1 Molekul**



Gambar 14. Spektrum Energi Elektron pada 1 Molekul Kristal NaCl

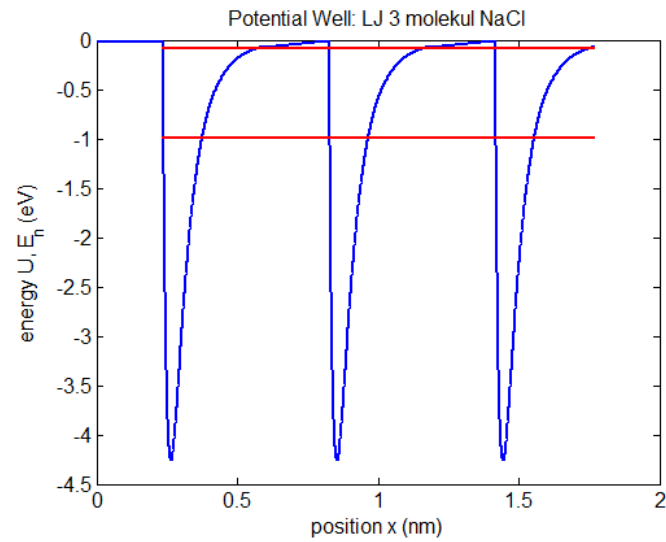


Gambar 15. Hasil Simulasi pada 1 molekul NaCl
(a) Vektor Eigen dari Schrodinger Eq. (b) Probabilitas Density Elektron dalam Kristal

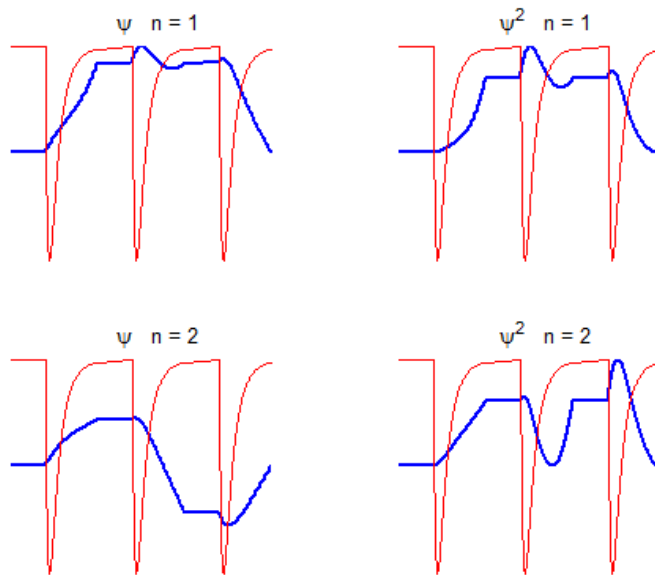


Gambar 16. Hasil Simulasi Pada Tingkat Energi Pertama $n=1$
(a) fungsi gelombang elektron dalam NaCl, (b) nilai eigen dari fungsi eigen elektron, (c) Probability of Density elektron dalam kristal NaCl, $N=1$

- **Penyelesaian pada Kristal NaCl 3 Molekul**

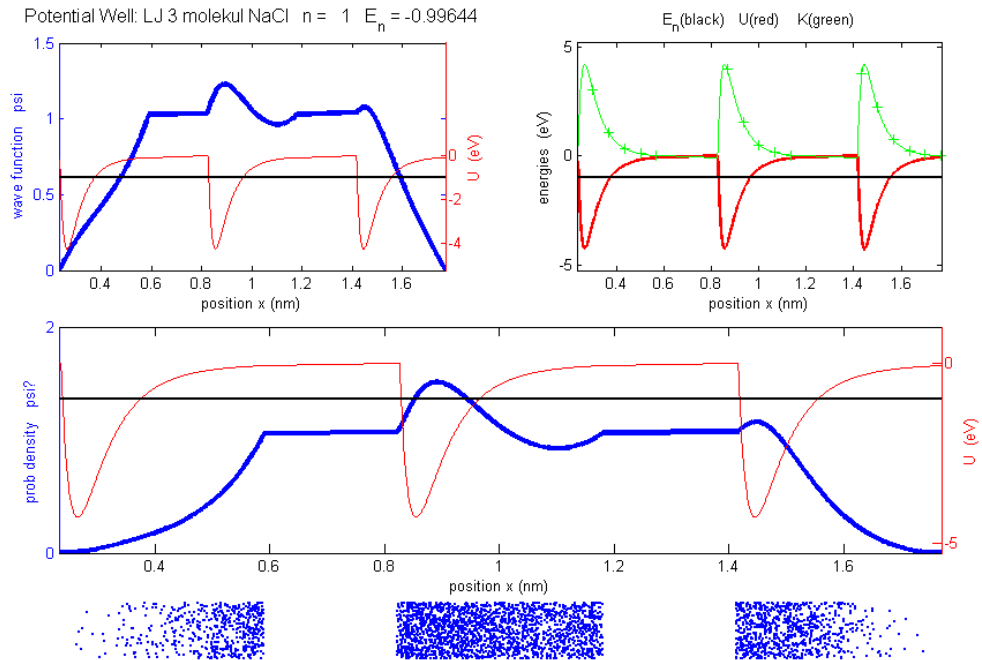


Gambar 17. Spektrum Energi Elektron Pada 3 Molekul Kristal NaCl

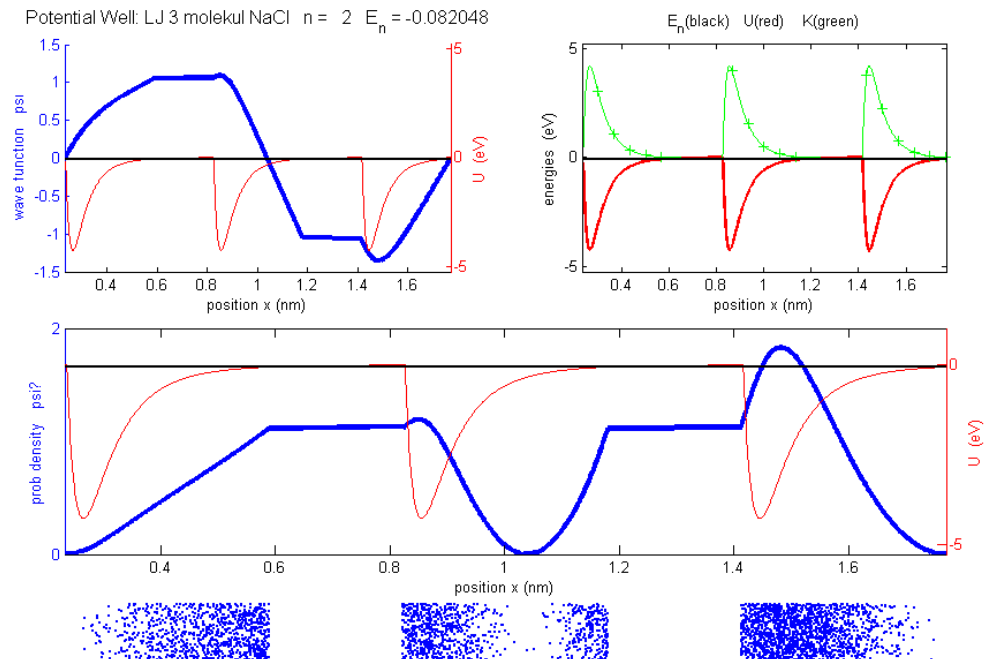


Gambar 18. Hasil Simulasi Pada 3 Molekul NaCl

(a) Vektor Eigen dari P.Schrodinger (b) ProbDensity elektron dalam 3 molekul NaCl



Gambar 19. Hasil Simulasi Pada Tingkat Energi Pertama $n = 1$
 (a) fungsi gelombang elektron dalam NaCl, (b) nilai eigen dari fungsi eigen elektron, (c) Probability of Density elektron dalam kristal NaCl, $N=3$



Gambar 20. Hasil Simulasi Pada Tingkat Energi Kedua $n=2$
 (a) fungsi gelombang elektron dalam NaCl, (b) nilai eigen dari fungsi eigen elektron, (c) Probability of Density elektron dalam kristal NaCl, $N=3$

3.3.2. Pembahasan

Sebagai awal, pada Gambar 11. ditampilkan potensial yang akan dilewati oleh elektron dalam satu molekul NaCl menggunakan program Lennard-Jones Potential. Kemudian, perhitungan potensial L-J satu molekul NaCl ini direpresentasikan ke dalam program Matrix Method dengan langkah yang telah dijelaskan. Maka didapat hasil pada Gambar 12 dan Gambar 13.

Pada Gambar 12 dan Gambar 13 menunjukkan hubungan antara energi potensial dengan pergerakan molekul dan perbandingannya dengan pergerakan elektron. Pada simulasi ini, dihasilkan pergerakan molekul NaCl hanya ada pada satu tingkat energi. Di sini direpresentasikan bahwa pada keadaan energi tertentu, terdapat gaya repulsif antara elektron dan molekul NaCl, serta juga terdapat gaya tarik-menarik antara elektron dan molekul NaCl. Hal ini tergambar pada grafik kedua yang mendeskripsikan fungsi gelombang pada spektrum energi satu molekul. Untuk lebih jelasnya, disajikan pula grafik pada Gambar 14.

Grafik pada Gambar 14 ini menunjukkan bahwa elektron mengalami gaya repulsif terhadap molekul NaCl sehingga pada grafik digambarkan pergerakan elektron makin menjauh. Pada grafik ini, gaya repulsif dikatakan dominan.

Sedangkan pada program simulasi matrix method tiga molekul, NaCl didapat dua tingkatan energi seperti yang terlihat dalam Gambar 15 dan 16. Di program ini juga didapat nilai eigen yang merupakan energi potensial molekul, yaitu $-0,99644$ eV pada tingkat energi pertama, dan $-0,082048$ pada tingkat energi kedua. Untuk penjelasannya digambarkan pula dalam Gambar 17 dan 18.

Pada Gambar 17, hasilnya merupakan bentuk interaksi 3 molekul NaCl dan elektron pada tingkat energi pertama berdasarkan grafik fungsi gelombang dan jaraknya, dari grafik tersebut didapatkan bahwa gaya repulsif antara molekul NaCl yang kedua dan elektron bersifat dominan. Namun pada molekul NaCl yang ketiga, dilihat bahwa ada gaya tarik menarik antara molekul NaCl dan elektron. Kemudian pada grafik energi elektron terhadap jarak, diketahui bahwa pergerakan elektron

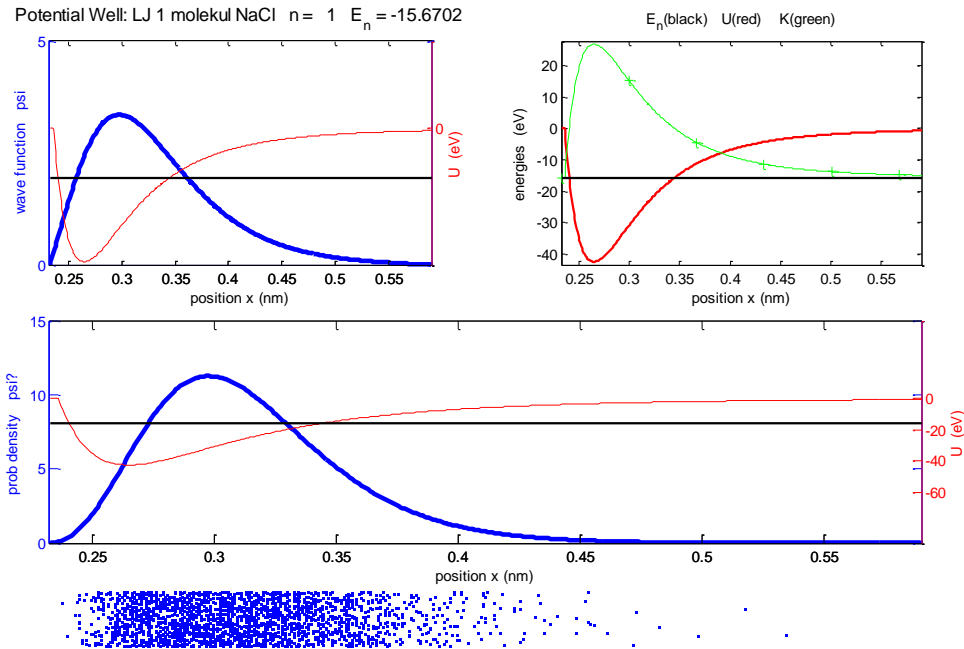
cenderung mendekati 0 dan hampir tidak ada pergerakan sama sekali, hal ini menunjukkan resistivitas dari NaCl.

Kemudian, untuk interaksi pada tingkat energi kedua dijelaskan pada Gambar 18. Pada grafik fungsi gelombang dan jarak, dapat dilihat pada grafik pertama, Pada grafik pertama, terlihat bahwa pada interaksi antara elektron dan molekul pertama cenderung saling menjauh. Hal ini terlihat fungsi gelombang elektron yang nilainya menjauhi di atas nol, dan fungsi gelombang molekul NaCl yang nilainya dibawah nol. Pada molekul pertama NaCl, pergerakannya menjauhi dan mendekati geraknya pada elektron, sedangkan elektron lebih dominan gaya repulsif, artinya menjauh terus-menerus.

Kemudian, pada molekul kedua, fungsi gelombang elektron mengalami penurunan terus-menerus hingga melewati titik 0, pada saat pergerakan elektron menuju titik nol, pergerakan molekul NaCl cenderung mendekati elektron, artinya seolah-olah terjadi gaya tarik-menarik. Namun setelah melewati titik nol, elektron dan molekul NaCl bergerak saling menjauh. Disitu terjadi gaya repulsif.

Pada molekul ketiga, pergerakan molekul NaCl dan elektron saling mendekat seolah-olah terjadi gaya tarik-menarik. Artinya, pada grafik tiga molekul, gaya tarik-menarik dan gaya tolak-menolak antara molekul NaCl dan elektron terjadi secara selang-seling.

3.4. Analisa Hasil keseluruhan



Gambar 21. Grafik Analisa Hasil Simulasi

Grafik Pertama :

Grafik pertama menjelaskan hubungan antara jarak dan fungsi gelombang. Jarak sebagai variabel bebas dan berada pada sumbu x (absis). Fungsi gelombang sebagai variabel terikat dan berada pada sumbu y (ordinat). Pada grafik ini tergambarkan dua kurva. Kurva pertama berwarna merah, kurva ini menggambarkan potensial Lennard Jones. Kurva kedua berwarna biru, kurva ini menggambarkan jalur yang ditempuh oleh elektron saat elektron berinteraksi dengan molekul NaCl (diproyeksikan dalam bayangan kita berada diantara/diapit oleh kurva biru dan kurva merah). Dari kurva biru terlihat bahwa pada awal pergerakan sampai pertengahan kurva (sebelum puncak kurva) elektron seolah-olah bergerak keluar dan menjauhi molekul NaCl, sebaliknya pada pertengahan sampai akhir elektron seolah-olah bergerak ke dalam dan mendekati molekul NaCl. Untuk menjelaskan hal ini, kita amati kurva merah dan kurva biru pada grafik. Setelah diamati terlihat bahwa kurva merah dan kurva biru memiliki korelasi. Korelasi ini tergambarkan saat titik merah nilainya terus menurun, titik biru

nilainya justru meningkat. Kemudian saat titik merah nilainya meningkat, titik biru nilainya justru menurun. Hal lainnya lagi yang perlu dipahami untuk menjelaskan peristiwa itu adalah bahwa kurva potensial Lennard Jones adalah kurva yang menjelaskan dua gaya utama yang diberikan oleh molekul NaCl, yaitu gaya repulsi (tolakan) dan gaya atraksi Coulomb (tarikan). Penurunan titik merah merupakan saat dimana gaya repulsi lebih dominan. Kenaikkan titik merah merupakan saat dimana gaya atraksi Coulomb lebih dominan. Dari fakta-fakta tersebut dapat kita tarik kesimpulan yang menjelaskan peristiwa diatas. Jadi pergerakan elektron yang tergambar di kurva biru seolah-olah menjauh itu sebenarnya karena pada kenyataannya elektron benar-benar menjauh dari molekul NaCl karena adanya dorongan dari gaya repulsi. Sementara pergerakan elektron mendekati molekul NaCl dikarenakan adanya tarikan dari gaya atraksi Coulomb.

Grafik Kedua :

Grafik kedua menggambarkan hubungan antara jarak dan energi elektron. Jarak sebagai variabel bebas dan berada pada sumbu x (absis). Energi sebagai variabel terikat dan berada pada sumbu y (ordinat). Pada grafik ini tergambar dua kurva. Kurva pertama berwarna merah, kurva ini menggambarkan potensial Lennard Jones. Kurva kedua berwarna merah, kurva ini menggambarkan jumlah energi yang dimiliki elektron pada jarak tertentu. Dari kurva warna hijau ini kita dapat menyimpulkan bahwa molekul NaCl ini memiliki resistansi listrik. Mengapa demikian? Ini karena saat setelah melewati molekul NaCl terlihat bahwa energi elektron mengalami penurunan. Berarti bisa kita asumsikan selama interaksi dengan molekul NaCl, elektron terus-menerus kehilangan energi. Apabila elektron kehilangan energi (terutama energi kinetik) bahkan sampai 0, maka elektron juga akan kehilangan kecepatan bahkan sampai 0. Saat elektron tidak memiliki kecepatan lagi maka elektron tidak mengalami pergerakan lagi. Tidak adanya pergerakan elektron berarti tidak ada arus listrik (karena arus listrik didefinisikan sebagai pergerakan atau aliran elektron). Apabila molekul NaCl dapat menghambat arus listrik maka jelas bahwa NaCl memiliki nilai resistansi listrik.

BAB IV

KESIMPULAN

Dari hasil simulasi Pergerakan Elektron di dalam zat padat kristal NaCl ini, maka didapat kesimpulan sebagai berikut :

- a. Dengan menggunakan Model Potensial Lennard-Jones, potensial NaCl dapat dimodelkan dengan parameter kedalaman sumur potensial pada molekul dari Kristal NaCl ($N = 1$ dan $N = 3$) adalah -4.26 eV dengan titik equilibrium nya adalah 0.236 nm. Pada kristal dengan 3 molekul NaCl, jarak equilibrium setiap lembah sumur bernilai 0.236 nm, 0.472 nm, dan 0.708 nm
- b. Pergerakan elektron dalam NaCl pada proyek ini masih belum dapat dimodelkan dengan metode Finite-Difference disebabkan kurvatur/gradien yang tidak dalam satu nilai yang menyebabkan persamaan menjadi divergen.
- c. Dengan metode matriks, didapatkan harga eigen yang merupakan energi potensial sebesar -15.6702 eV untuk satu molekul NaCl, dan pada kasus tiga molekul NaCl didapatkan energi potensial sebesar -0.99644 eV pada tingkat energi pertama, dan -0.082048 pada tingkat energi kedua.
- d. Hasil dari metode matriks menghasilkan grafik yang menunjukkan adanya interaksi antara elektron dengan molekul NaCl. Pada grafik yang dihasilkan dari metode matriks, diketahui bahwa ada gaya tarik-menarik (gaya atraksi Coulomb) yang disebabkan ikatan atom Na dan Cl dalam satu zat padat dan gaya tolak-menolak (gaya repulsif) pada nilai energi tertentu yang didasarkan pada prinsip larangan Pauli.
- e. Gaya repulsif antara elektron dan molekul NaCl menunjukkan bahwa NaCl memiliki resistivitas listrik.

DAFTAR PUSTAKA

- Cooper, Ian. *Doing Physics in Matlab : Quantum Physics, Schrodinger Equation*.
University of Sydney
- Rachmantio, Honorius. 2004. *Pengantar Material Sains I : Atom – Molekul – Padat*.
Hal. 227-228. Yogyakarta : Penerbit Tabernakelindo
- Types of Simple Pair and Lattice Potentials
https://courses.physics.illinois.edu/phys466/sp2013/lnotes/pot_2body.html
- Empirical potentials
<http://uspex.stonybrook.edu/qzhu-thesis/sect0018.html>
- The Lennard–Jones potential
<http://cps-www.bu.edu/Wasser/robert/work/node8.html>
- Minimisation Problems
Minimisation Problems, David-Alexander Robinson, 08332461, 5 February
2010
- Obtaining values and plotting Lennard-Jones function
<http://www.mathworks.com/matlabcentral/answers/210306-obtaining-values-and-plotting-lennard-jones-function>

Lampiran – Lampiran

1.1. Listing Lennard – Jones Potensial

- Untuk 1 Molekul Kristal NaCl

```
clear all
closeall
clc

num = 401; % Banyaknya titik data (sumbu x)

% Potential well parameters -----
----
U = zeros(num,1); % inisialisasi awal nilai U(cn)
epsilon = 42.6; % Maximal well-depth of the attractive part of the
               % potential well / kedalaman sumur potensial. Untuk
               % NaCl = 4.26 eV
sigma = 0.236; % Equilibrium bond distance (nm): NaCl = 0.236 nm

xMin = 0.985*sigma; % jarak sumbu x awal
xMax = 2.5*sigma; % jarak sumbu x akhir

dx = (xMax-xMin)/(num-1);
x = xMin : dx : xMax;

% Perhitungan L-J Potensial -----
----

for cn = 5 : num
    U(cn) = 4* epsilon * ((sigma/x(cn))^12 - (sigma/x(cn))^6 );
end

%Plot Kurva -----
----

figure(1);
set(gcf, 'Name', 'Potential Energi', 'NumberTitle', 'off')
plot(x, U, 'LineWidth', 2);
axis([xMin-eps xMax min(U)-1 max(U)+1]);

title('Lennard-Jones Potential');
xlabel('jarak separasi / x (nm)');
ylabel('energi (eV)');
grid on

% Parameter Untuk menyelesaikan schrodinger eq.

% Kosntanta -----
----
hbar = 1.055e-34; % J.s
e = 1.602e-19; % C
```

```

me = 9.109e-31;           % kg  massa elektron
mp = 1.67252e-27;        % kg  massa proton
mn = 1.67482e-27;        % kg  massa neutron
eps0 = 8.854e-12;         % F/m

m = me;                   % Massan Partikel

Ese = 1.6e-19;            % factor penyekalaan energi
Lse = 1e-9;               % factor penyekalaan panjang
Cse = -hbar^2/(2*m) / (Lse^2*Ese); % konstanta Schrodinger Eq.

U_matrix = zeros(num-2); % inisialisasi matriks U(cn) untuk
                        % metode matriks

% membuat matriks untuk L-J Potensial
dx = (x(2)-x(1));
dx2 = dx^2;

for cn =1:(num-2)
    U_matrix(cn,cn) = U(cn+1);
end;

s = sprintf('Potential Well: LJ 1 molekul NaCl');

```

- **Untuk 3 molekul Kristal NaCl**

```

clear all
closeall
clc

num = 401; % Banyaknya titik data (sumbu x)

% Potential well parameters -----
----
U = zeros(num,1); % inisialisasi awal nilai U(cn)
epsilon = 42.6;    % Maximal well-depth of the attractive part of the
                  % potential well / kedalaman sumur potensial. Untuk
                  % NaCl = 4.26 eV
sigma = 0.236;    % Equilibrium bond distance (nm): NaCl = 0.236 nm

xMin = 0.985*sigma; % jarak sumbu x awal
xMax = 2.5*sigma;   % jarak sumbu x akhir

dx = (xMax-xMin)/(num-1);
x = xMin : dx : xMax;

% Perhitungan L-J Potensial -----
for cn = 5 : num
    U(cn) =4* epsilon * ((sigma/x(cn))^12- (sigma/x(cn))^6 );
    UU(cn)=U(cn);
    xx(cn)=x(cn);

```

```

end

for cn = 1 : num
    UU(num+cn)=U(cn);
    xx(num+cn)=x(num)+x(cn);
end

for cn = 1 : num
    UU(2*num+cn)=U(cn);
    xx(2*num+cn)=x(num)+x(num)+x(cn);
end

%Plot Kurva-----
-----

figure(1);
set(gcf,'Name','Potential Energi','NumberTitle','off')
plot(xx,UU,'LineWidth',2);
axis([xMin-eps xMax*3min(UU)-1max(UU)+1]);

title('Lennard-Jones Potential');
xlabel('jarak separasi / x (nm)');
ylabel('energi (eV)');
grid on

% Parameter Untuk menyelesaikan schrodinger eq.

% Kosntanta -----
-----
hbar = 1.055e-34; % J.s
e = 1.602e-19; % C
me = 9.109e-31; % kg massa elektron
mp = 1.67252e-27; % kg massa proton
mn = 1.67482e-27; % kg massa neutron
eps0 = 8.854e-12; % F/m

m = me; % Massan Partikel

Ese = 1.6e-19; % factor penyekalaan energi
Lse = 1e-9; % factor penyekalaan panjang
Cse = -hbar^2/(2*m) / (Lse^2*Ese); % konstanta Schrodinger Eq.

U_matrix = zeros((num-2)*3); % inisialisasi matriks U(cn) untuk
                                matriks method 3 molekul NaCl

% membuat matriks untuk L-J Potensial
dx = (x(2)-x(1));
dx2 = dx^2;

for cn =1:(3*num-2)
    U_matrix(cn,cn) = UU(cn+1);
end;

```

```
s = sprintf('Potential Well: LJ 3 molekul NaCl');
```

1.2. Listing FDM (Finite Difference Methods)

- Untuk 1 Molekul NaCl

```
clear all
close all
clc

num=2000;%Inisialisasi jumlah grid

%inisialisasi Parameter potensial LJ
u=zeros(num,1);
psi=zeros(num,1);
epsilon=4.26; %kedalaman maksimum dari bagian atraktif ...
%dari potensial NaCl=4.26 eV
sigma=0.236 %jarak equilibrium (nm): NaCl=0.236 nm

xmin=0.9999*sigma;
xmax=2.5*sigma;
dx=(xmax-xmin)/(num-1);
x=xmin:dx:xmax;
hbar=6.62*10^-34;
me=9.1*10^-31;
E=100/(6.24*10^18);
psi(2)=1;
%Potensial LJ-----
for cn=1:num
    u(cn)=(4*epsilon*((sigma/x(cn))^12-
    (sigma/x(cn))^6))/(6.24*10^18);
end
%Penyelesaian Persamaan Schrodinger-----
for cm=2:num-1;
    kc=sqrt((2*me/(hbar^2))*(E-u(cm)))
    psi(cm+1)=(2-(kc*dx)^2)*psi(cm)-psi(cm-1);
end
%Plot Grafik-----
figure(1);
hold on
plot(x,u)
plot(x,psi,'r+')
grid on
```

- **Untuk 3 Molekul NaCl**

```
clear all
close all
clc

num=2000;
u=zeros(num,1);
psi=zeros(num,1);
epsilon=4.26;    %kedalaman maksimum dari bagian atraktif ...
                  %dari potensial NaCl=4.26 eV
sigma=0.236      %jarak equilibrium (nm): NaCl=0.236 nm

xmin=0.9999*sigma;
xmax=2.5*sigma;
dx=(xmax-xmin)/(num-1);
x=xmin:dx:xmax;
hbar=6.62*10^-34;
me=9.1*10^-31;
E=100/(6.24*10^18);
psi(2)=1;

for cn = 5 : num
    U(cn) = 4* epsilon * ((sigma/x(cn))^12- (sigma/x(cn))^6 );
    UU(cn)=U(cn);
    xx(cn)=x(cn);
end

for cn = 1 : num
    UU(num+cn)=U(cn);
    xx(num+cn)=x(num)+x(cn);
end

for cn = 1 : num
    UU(2*num+cn)=U(cn);
    xx(2*num+cn)=x(num)+x(num)+x(cn);
end

for cm=2:3*num-1;
    kc=sqrt((2*me/(hbar^2))*(E-UU(cm)))
    psi(cm+1)=(2-(kc*dx)^2)*psi(cm)-psi(cm-1);
end

figure(1);
hold on
plot(xx,UU)
plot(xx,psi,'r+')
grid on
```


1.3. Listing Matrix Methods

- Untuk Satu Molekul NaCl

```
% Make Second Derivative Matrix -----
-----
off      = ones(num-3,1);
SD_matrix = (-2*eye(num-2) + diag(off,1) + diag(off,-1))/dx2;

% Make KE Matrix
K_matrix = Cse * SD_matrix;

% Make Hamiltonian Matrix
H_matrix = K_matrix + U_matrix;

% Find Eignevalues E_n and Eigenfunctions psi_N -----
-----
[e_funct e_values] = eig(H_matrix);

% All Eigenvalues 1, 2 , ... n  where E_N < 0
flag = 0;
n = 1;
while flag == 0
    E(n) = e_values(n,n);
    if E(n) > 0, flag = 1; end; % if
    n = n + 1;
end% while
E(n-1) = [];
n = n-2;

% Corresponding Eigenfunctions 1, 2, ... ,n: Normalizing the
wavefunction
for cn = 1 : n
    psi(:,cn) = [0; e_funct(:,cn); 0];
    area = simpson1d((psi(:,cn) .* psi(:,cn))',xMin,xMax);
    psi(:,cn) = psi(:,cn)/sqrt(area);          % normalize
    prob(:,cn) = psi(:,cn) .* psi(:,cn);
    if psi(5,cn) < 0, psi(:,cn) = -psi(:,cn); end; % curve starts positive
end% for
```

- Untuk 3 molekul NaCl

```
tic
% Make Second Derivative Matrix -----
-----
off      = ones((3*num-3),1);
SD_matrix = (-2*eye(3*num-2) + diag(off,1) + diag(off,-1))/dx2;
```

```

% Make KE Matrix
K_matrix = Cse * SD_matrix;

% Make Hamiltonian Matrix
H_matrix = K_matrix + U_matrix;

% Find Eignevalues E_n and Eigenfunctions psi_N -----
-----
[e_funcnt e_values] = eig(H_matrix);

% All Eigenvalues 1, 2 , ... n  where E_N < 0
flag = 0;
n = 1;
while flag == 0
    E(n) = e_values(n,n);
    if E(n) > 0, flag = 1; end; % if
        n = n + 1;
end% while
E(n-1) = [];
n = n-2;

% Corresponding Eigenfunctions 1, 2, ... ,n: Normalizing the
wavefunction
for cn = 1 : n
    psi(:,cn) = [0; e_funcnt(:,cn); 0];
    area = simpson1d((psi(:,cn) .* psi(:,cn))',xMin,xMax*3);
    psi(:,cn) = psi(:,cn)/sqrt(area);          % normalize
    prob(:,cn) = psi(:,cn) .* psi(:,cn);
    if psi(5,cn) < 0, psi(:,cn) = -psi(:,cn); end; % curve starts positive
end% for

% Display eigenvalues in Command Window -----
--
disp(' ');
disp('=====');
disp(' ');
disp(' ');
fprintf('No. bound states found = %0.0g \n',n);
disp(' ');
disp('Quantum State / Eigenvalues En (eV)');

for cn = 1 : n
    fprintf(' %0.0f ',cn);
    fprintf(' %0.5g \n',E(cn));
end
disp(' ')
disp(' ');

% Plot energi spectrum -----
--
xs(1) = xMin;
xs(2) = xMax*3;

```

```

figure(2);
set(gcf, 'Name', 'Energi Spectrum', 'NumberTitle', 'off')
set(gcf, 'color', [1 1 1]);
set(gca, 'fontSize', 12);

plot(xx, UU, 'b', 'LineWidth', 2);
xlabel('position x (nm)', 'FontSize', 12);
ylabel('energi U, E_n (eV)', 'FontSize', 12);
h_title = title(s);
set(h_title, 'FontSize', 12);
hold on

cnmax = length(E);

for cn = 1 : cnmax
    ys(1) = E(cn);
    ys(2) = ys(1);
    plot(xs, ys, 'r', 'LineWidth', 2);
end%for
%axis([xMin-eps xMax min(U)-50 max(U)+50]);

% Plots first 5 wavefunctions & probability density functions
if n < 5;
    nMax = n;
else
    nMax = 5;
end;

figure(11)
clf
set(gcf, 'NumberTitle', 'off');
set(gcf, 'Name', 'Eigenvectors & Prob. densities');
set(gcf, 'Color', [1 1 1]);
%nMax = 8;
for cn = 1:nMax
    subplot(nMax, 2, 2*cn-1);
    y1 = psi(:, cn) ./ (max(psi(:, cn)) - min(psi(:, cn)));
    y2 = 1 + 2 * UU ./ (max(UU) - min(UU));
    plot(xx, y1, 'lineWidth', 2)
    hold on
    plot(xx, y2, 'r', 'lineWidth', 1)
    %plotyy(x, psi(:, cn), x, U);
    axis off
    %title('\psi cn);
    title_m = ['\psi    n = ', num2str(cn)] ;
    title(title_m, 'Fontsize', 10);

    subplot(nMax, 2, 2*cn);
    y1 = prob(:, cn) ./ max(prob(:, cn));
    y2 = 1 + 2 * UU ./ (max(UU) - min(UU));
    plot(xx, y1, 'lineWidth', 2)

```

```
    hold on
    plot(xx,y2,'r','lineWidth',1)
    title_m = ['\psi^2    n = ', num2str(cn)] ;
    title(title_m,'FontSize',10);
    axis off
end
toc
```

