Kontribusi Fisika Indonesia
Vol. 13 No.4, Oktober 2002

Proyeksi Kernel GCM pada Sembarang Fungsi

Rizal Kurniadi, Marsongkohadi, Zaki Su'ud dan Triyanta
Departemen Fisika Institut Teknologi Bandung
Jl. Ganesa 10 Bandung 40132
E-mail : rijalk@fi.itb.ac.id

Abstrak

Proyeksi kernel generator coordinate method (GCM) pada sembarang fungsi adalah suatu teknik pemecahan persamaan Schroedinger dalam bentuk integro-differensial. Gagasan dasar dari teknik ini adalah membangun persamaan nilai eigen dari persamaan Schroedinger melalui sembarang fungsi yang tidak perlu ortonormal. Untuk melihat sejauh mana teknik ini diterapkan, akan diuraikan perhitungan energi dasar dari inti deuteron.

Kata kunci : *Sembarang fungsi, Proyeksi, GCM*

Abstract

The GCM kernel projection on arbitrary function is a technique to solve Schredinger integro-differential equation. The Basic idea is making eigen value equation from Schroedinger equation by projecting the GCM kernel into no orthonormal functions. In this paper the technique is presented to calculate ground state energy of deuteron.

Keywords : *arbitrary function, projection, GCM*

1. Pendahuluan

Metoda koordinat generator adalah metoda yang banyak dipergunakan dalam model gerak bersama (*Collective Motions*), dan model kulit (*Shell Model*). Adapun bentuk potensial yang sering dipergunakan dalam model kulit untuk GCM ini adalah osilator harmonik[1). Selain bentuk potensial osilator harmonik, bentuk potensial sumur[1) juga dapat diaplikasikan dalam hamiltoniannya.

Pada GCM diperkenalkan sebuah koordinat generator sebagai koordinat di dalam persamaan integral. Melalui persamaan integral ini persamaan Schroedinger diubah menjadi bentuk integro-differensial dengan koordinat generator sebagai variabel integrasinya[1). Persamaan integro-differensial dari persamaan Scroedinger dikenal dengan nama persamaan Hill-Wheeler-Griffin (HWG)[1). Komponen dari persamaan HWG adalah fungsi generasi, kernel, dan fungsi bobot. Fungsi generasi adalah fungsi yang membawa bentuk fungsi dari solusi persamaan Schroedinger dengan potensial yang telah dipilih sebelumnya, sedangkan fungsi bobot adalah fungsi yang berperan memberikan bobot pada persamaan integrasinya. Berbeda dengan fungsi bobot dan fungsi generasi, kernel GCM adalah nilai integrasi fungsi generasi dari suatu operator.

Inti perhitungan dalam GCM adalah mencari fungsi bobot sedemikian rupa sehingga fungsi gelombang total dari sistem inti dapat diperoleh. Berbagai teknik dapat ditempuh untuk memecahkan persamaan HWG, seperti metoda Yukawa[2), prosedur Gram-Schmidt[3), dan sebagainya.

Proyeksi kernel pada sembarang fungsi pada dasarnya adalah prosedur Gram-Schmidt, hanya saja fungsi yang dipilih sebagai komponen ekspansi dari fungsi gelombang total bukan merupakan basis. Implikasi yang muncul dari teknik ini adalah bahwa pemilihan fungsi untuk ekspansi menjadi lebih bebas dan mudah dilakukan. Adapun langkah yang mudah dalam pemilihan fungsi tersebut adalah dengan memilih keserupaan sifat fungsi dengan fungsi generasi[3).

Sebagai contoh pemakaian teknik proyeksi ini adalah dilakukannya perhitungan energi keadaan dasar inti detron yang kemudian dibandingkan dengan data hasil eksperimen[4).

2. Formulasi

Pada GCM fungsi gelombang total dari sistem inti dinyatakan sebagai persamaan integral dari fungsi generasi dan fungsi bobotnya,

$$\left|\Psi(\vec{r})\right\rangle = \int d\vec{a}\; f(\vec{a})\,\Phi(\vec{r},\vec{a}) \tag{1}$$

dengan $\Phi(\vec{r},\vec{a})$, dan $f(\vec{a})$ menyatakan fungsi generasi dan fungsi bobot. Apabila persamaan (1) diaplikasikan dalam perhitungan besaran ekpektasi O dari operator $\hat{O}$, dan diterapkan prinsip variasi padanya akan diperoleh persamaan integro differensial HWG,

$$\int d\vec{a}\left[K(\vec{a},\vec{b}) - O\,N(\vec{a},\vec{b})\right] f(\vec{a}) \tag{2}$$

dengan kernel-kernelnya,

$$N(\vec{a},\vec{b}) = \left\langle \Phi(\vec{r},\vec{a}) \middle| \Phi(\vec{r},\vec{b}) \right\rangle \tag{3}$$

$$K(\vec{a},\vec{b}) = \left\langle \Phi(\vec{r},\vec{a}) \middle| \hat{O} \middle| \Phi(\vec{r},\vec{b}) \right\rangle \tag{4}$$

Jika operator yang dipergunakan adalah hamiltonian, maka persamaan (3) dan (4) biasanya dikenal sebagai kernel normalisasi, dan kernel hamiltonan.

Pada teknik proyeksi ini fungsi gelombang total pada persamaan (1) diekspansikan pada fungsi $U_k(\vec{a})$, yang tidak perlu sifat ortonormalnya dipenuhi, yaitu,

$$\left|\Psi(\vec{r})\right\rangle = \sum_k g_k \left|k(\vec{r})\right\rangle \tag{5}$$

dengan,

$$\left|k(\vec{r})\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{\eta_k}} \int d\vec{a}\, U_k(\vec{a}) \left|\Phi(\vec{a},\vec{r})\right\rangle \tag{6}$$

Apabila persamaan (5) dan (6) diterapkan pada perhitungan nilai ekspektasi operator $\hat{O}$ akan diperoleh persamaan nilai eigen,

$$\sum_k W_{k'k}\, g_k = O g_k \tag{7}$$

dengan,

$$W = I^{-1} D \tag{8}$$

$$I_{k'k} = \frac{1}{\sqrt{\eta_{k'}\eta_k}} \int d\vec{a} \int d\vec{b}\; U_{k'}^{*}(\vec{a}) N(\vec{a},\vec{b}) U_k(\vec{b}) \tag{9}$$

$$D_{k'k} = \frac{1}{\sqrt{\eta_{k'}\eta_k}} \int d\vec{a} \int d\vec{b}\; U_k^{*}(\vec{a}) N(\vec{a},\vec{b}) U_k(\vec{b}) \tag{10}$$

$$\eta_k = \int d\vec{a} \int d\vec{b}\, U_k^{*}(\vec{a}) N(\vec{a},\vec{b}) U_k(\vec{b}) \tag{11}$$

Solusi persamaan (7) akan menghasilkan sejumlah nilai eigen dan vektor eigennya. Akan tetapi meski demikian nilai eigen yang memenuhi hanyalah satu, yaitu nilai eigen yang vektor eigennya memenuhi syarat batas. Untuk potensial yang dipilih adalah "*square well based*" maka syarat batas yang dimaksud adalah bahwa fungsi gelombang total haruslah kontinu di titik $r = \rho$ yaitu perbedaan turunan logaritmik di tempat tersebut haruslah nol.

$$Z_i = k_{2i} + k_{1i} \frac{\sum_j g_{ij} \frac{1}{\sqrt{\eta_j}} \left(\tan(k_{1i}\rho) \int_0^{\rho} da \cos(k_{1j}a)\sin(k_{1i}a) + \int_0^{\rho} da \cos(k_{1j}a)\cos(k_{1i}a) \right)}{\sum_j g_{ij} \frac{1}{\sqrt{\eta_j}} \left(\tan(k_{1i}\rho) \int_0^{\rho} da \cos(k_{1j}a)\cos(k_{1i}a) - \int_0^{\rho} da \cos(k_{1j}a)\sin(k_{1i}a) \right)} \tag{12}$$

Pada persamaan (12) dapat ditunjukkan bahwa nilai Z adalah selisih turunan logaritmik dari fungsi gelombang total di $r = \rho$, dan menuju nol untuk energi yang bersesuaian.

Harga k_{2i} dan k_{1i} ditentukan menurut solusi persamaan Schroedinger untuk inti detron yaitu,

$$\psi_{E_i}(\vec{r}) = \begin{cases} A\, d \sin(k_{1i}\vec{r}) & r \le \rho \\ A \cos(k_{2i}\vec{r}) & r > \rho \end{cases} \tag{13}$$

dengan,

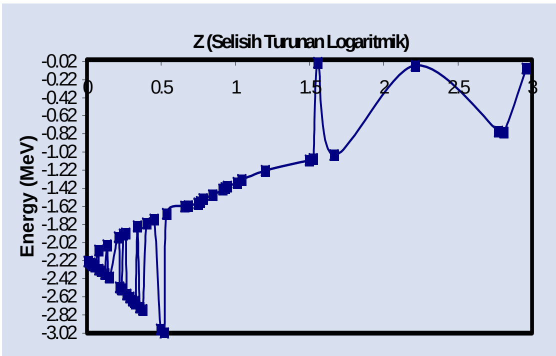
$$k_{1i} = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E_i + V_o)} \quad \text{dan} \quad k_{2i} = \sqrt{-\frac{2\mu}{\hbar^2} E_i}$$

Melalui persamaan (13) dibentuk fungsi generasi untuk inti detron,

$$\Phi_i(\vec{r},\vec{a}) = \psi_{E_i}(\vec{r} - \vec{a}) \tag{14}$$

3. Hasil dan Pembahasan

Perhitungan yang telah dilakukan memberikan konvergensi pada pembagian grid energi sekitar 900 buah, dengan hasil yang ditunjukkan pada Gambar 1.



Gambar 1. Nilai Z (selisih turunan logaritmik) terhadap Energi keadaan dasar inti deuteron.

Pada gambar 1 ditunjukkan bahwa nilai Z terkecil (Z=0.00783) diperoleh pada nilai eigen –2.2271 MeV yang ternyata memiliki selisih sebesar 0.0025 MeV dari hasil eksperimen yaitu sekitar –2.2246 MeV[5].

4. Kesimpulan

Hasil selisih sebesar 0.0025 dan masih memiliki kemungkinan untuk dipertajam lagi telah menunjukkan bahwa proyeksi kernel GCM pada sembarang fungsi dapat dipergunakan sebagai salah satu teknik lain selain metoda yang telah ada sekarang ini. Selain itu dengan kelebihan bahwa fungsi yang dipilih tidak harus memiliki sifat ortonormal dapat menunjukkan bahwa teknik ini lebih mudah dari teknik sebelumnya, yaitu teknik ortonormalisasi Gram-Schmidt.

Referensi

1. Griffin, J.J. & Wheeler, J. A., *Collective motions in nuclei by the method of generator coordinates*, Phys. Rev., 108, 311 (1957).
2. Horiuchi, H., *Kernel of GCM, RGM and OCM and their calculational methods,* Sup. Prog. Theor. Phys., 62, 90 (1977).
3. Kurniadi, R., Marsongkohadi, Su'ud, Z. and Triyanta, *An Alternative Calculation Technique in the Generator-Coordinate Method (GCM) to Determine the Ground State Energies of ^2H and ^4He and the Electric Quadrupole Moment of ^2H*, Journal of Nuclear Science and Technology, Sup. 2, Vol 1, pp. 431, (2002)
4. Carlson, J. & Schiavilla, R., *Structure and dynamics of few-nucleon system*, Rev. Mod. Phys., 70, 743 (1998).
5. Blatt, J.M., & Weiskopf, V.F., *Theoretical Nuclear Physics*, John Wiley & Sons, 1970