TEKNIK PEMISAHAN OPERATOR DAN PENDEKATAN SPEKTRAL SEBAGAI SOLUSI PERSAMAAN SCHRÖDINGER BERGANTUNG WAKTU PADA ATOM HIDROGEN

Salman Abdul Azis, Zulfi Abdullah
Jurusan Fisika FMIPA Universitas Andalas
Kampus Unand, Limau Manis, Padang, 25163
e-mail: salmanoe@live.com

ABSTRAK

Telah dikembangkan sebuah metode numerik dengan teknik pemisahan operator dan pendekatan oleh fungsi basis spektral (Sorevik dkk., 2009) untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger bergantung waktu pada koordinat bola. Penelitian Sorevik dkk. mendefinisikan fungsi gelombang tereduksi, teknik *splitting* Strang, metode kolokasi Chebyshev, variabel transformasi di arah radial, rumus umum metode swadekomposisi pada swanilai di arah radial, swanilai fungsi basis harmonik bola, dan teknik memulihkan fungsi basis Chebyshev. Sedangkan, penelitian ini memberikan analisis fisis dan matematis untuk menjabarkan metode ini disertai penerapannya pada sistem atom hidrogen. Hasil penelitian ini melengkapi penelitian Sorevik dkk. dalam memberikan seluruh tafsiran dan penyusunan persamaan numerik meliputi nilai inisialisasi swafungsi, diskritisasi fungsi Chebyshev dan polinomial Legendre terasosiasi yang dinormalisasi, ortogonalitas koefisien fungsi basis Chebyshev dan harmonik bola, transformasi Householder dan Metode QR untuk menghitung swanilai operator di arah radial, dan propagasi waktu imajiner.
Kata kunci : persamaan Schrödinger bergantung waktu, model atom kuantum, teknik pemisahan operator, pendekatan spektral, atom hidrogen

ABSTRACT

It has been developed a numerical method with operator-splitting technique and spectral approximation by spectral basis functions (Sorevik et al., 2009) to solve the time-dependent Schrödinger equation on spherical coordinates. Sorevik et al.'s research defines the reduced wave function, Strang splitting technique, Chebyshev collocation method, variable transformation in the radial direction, the general formula of eigen decomposition method on eigen values in the radial direction, eigen values of spherical harmonic basis function, and a technique to restore the Chebyshev basis function. While this study provides physical and mathematical analysis to describe this method with its application in hydrogen atom system. This study complements the results of research Sorevik et al in giving the whole interpretation and compilation of numerical equations include initialization value of eigen function, discretization Chebyshev function and normalized associated Legendre polynomial, orthogonality coefficient of Chebyshev and spherical harmonic basis functions, Householder transformation and QR method for calculating eigen values of operator in the radial direction, and the propagation of imaginary time.
Keywords : the time dependent Schrödinger equation, quantum atomic model, splitting-operator technique, spectral approximation, hydrogen atom

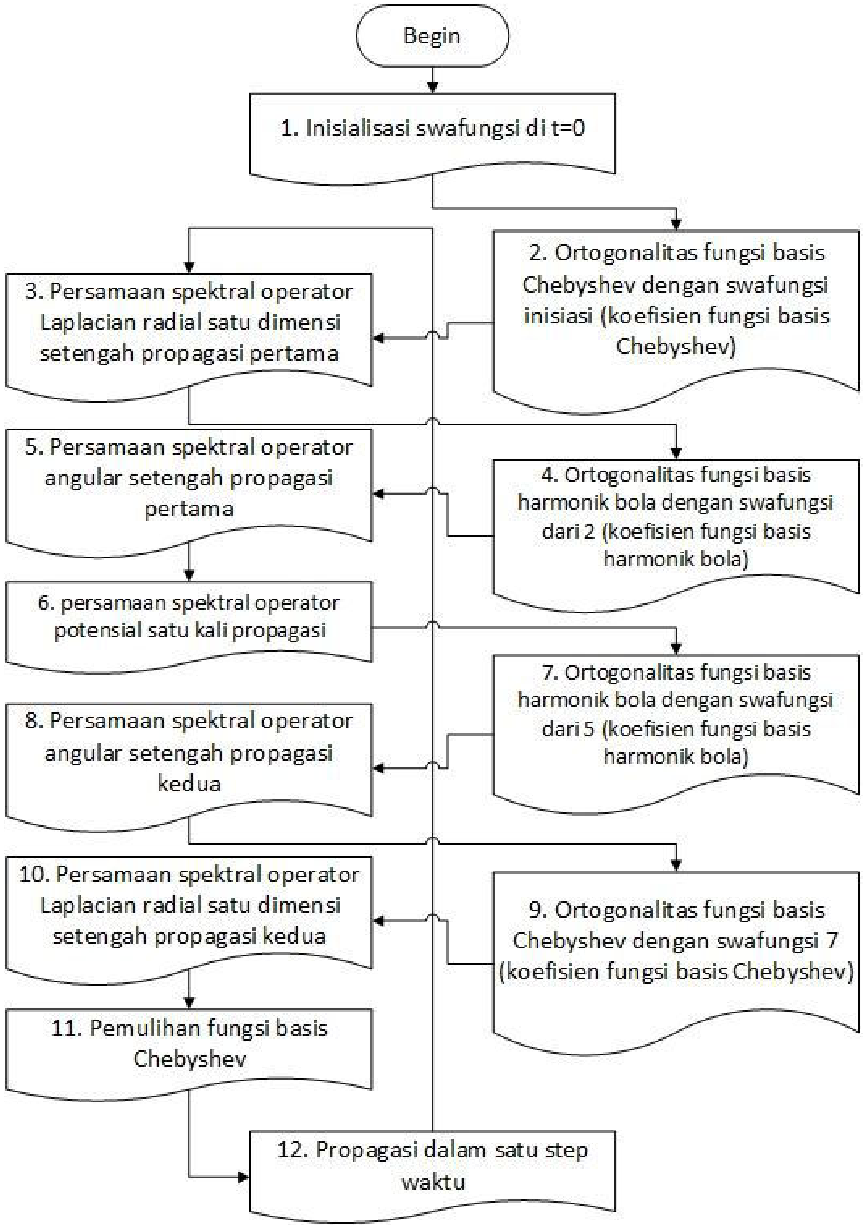
I. PENDAHULUAN

Persamaan Schrödinger menjadi landasan dalam menyusun model atom kuantum. Namun, semakin banyak jumlah elektron dalam suatu sistem atom maka semakin rumit penyelesaian persamaan Schrödinger untuk atom tersebut. Untuk mengatasinya telah dikembangkan suatu metode dengan menggunakan teknik pemisahan operator dan pendekatan spektral menggunakan basis fungsi ortogonal (Sorevik dkk., 2009). Metode ini diterapkan di koordinat bola untuk digunakan dalam menafsirkan model atom kuantum. Teknik pemisahan operator merupakan metode yang paling populer dikembangkan akhir-akhir ini (Sorevik dkk. 2009; Yazici, 2010). Kombinasinya dengan metode spektral membuat waktu komputasi dan peforma perangkat komputer menjadi efisien serta memiliki tingkat akurasi tinggi (Hansen dkk., 2003; Iqbal, 2012). Metode ini sangat mudah diterapkan untuk menafsirkan sistem kuantum karena teknik pemisahan operator dan pendekatan spektral menyelesaikan masing-masing bagian waktu dan ruang secara terpisah (Sorevik dkk., 2009). Selain itu, metode ini stabil dan cocok untuk energi atom yang nonrelativistik (Persson, 2012) dan dapat menentukan swanilai dan swafungsi sistem kuantum atom (Feit dkk., 1982).

Penelitian ini ditujukan untuk melengkapi penjelasan teori teknik pemisahan operator dan pendekatan spektral (dengan menerapkan fungsi basis Chebyshev dan fungsi harmonik bola) yang telah dikembangkan Sorevik dkk. Penelitian ini juga ditujukan untuk menafsirkan persamaan Schrödinger bergantung waktu pada koordinat bola yang diterapkan untuk sistem kuantum atom hidrogen, dan pada akhirnya merumuskan serta menjabarkan seluruh bentuk numerik solusi persamaan Schrödinger tersebut. Hasil penelitian ini berupa penjelasan dan analisis teoritik teknik pemisahan operator dan pendekatan spektral meliputi seluruh persamaan diskrit setelah di-*splitting* meliputi penggunaan fungsi basis Chebyshev, perumusan koefisien fungsi basis dan metode swadekomposisi.

II. METODE

Penelitian ini dilakukan berdasarkan pada hasil penelitian Sorevik dkk. Perbedaan penelitian ini adalah dalam memberikan penafsiran numerik penelitian Sorevik dkk. dan melengkapi seluruh bentuk numeriknya.



Gambar 1 Diagram alir perhitungan swafungsi sistem kuantum atom hidrogen

Gambar 1 memperlihatkan prosedur penurunan rumus dalam penelitian ini meliputi:

1. Mendefinisikan inisialisasi swafungsi di $t = 0$ (digunakan di diagram bagian 1).
2. Menggunakan transformasi variabel untuk mengganti operator di arah radial (digunakan di diagram bagian 3 dan 10).
3. Menerapkan metode kolokasi Chebyshev untuk persamaan diferensial sekuen radial (digunakan di diagram bagian 3 dan 10).
4. Mengintegrasikan persamaan-persamaan diferensial hasil pemisahan operator (mengintegrasikan persamaan diferensial di diagram bagian 3, 5, 6, 8, dan 10).
5. Mendefinisikan fungsi Chebyshev dari perumusan titik kolokasi yang diberikan Sorevik dkk (digunakan di diagram bagian 3 dan 10).
6. Mendefinisikan rumus koefisien fungsi basis Chebyshev (digunakan di diagram bagian 2 dan 9).
7. Mendefinisikan metode swadekomposisi matriks dan merumuskannya untuk menghitung swanilai di arah radial (digunakan di diagram bagian 3 dan 10).
8. Mendefinisikan rumus fungsi harmonik bola (digunakan di diagram bagian 5 dan 8).

9. Mendefinisikan rumus koefisien fungsi basis harmonik bola (digunakan di diagram bagian 4 dan 7).
10. Menggunakan swanilai fungsi harmonik bola pada operator momentum sudut (digunakan di diagram bagian 5 dan 8).
11. Mendefinisikan matriks pemulih fungsi basis Chebyshev (digunakan di diagram bagian 11).

Poin 1, 4, 5, 6, 8, dan 9 belum dijelaskan dengan lengkap dalam penelitian Sorevik dkk., sedangkan poin 7 dijelaskan persamaan umumnya tanpa penjelasan detail. Sementara poin 2, 3, 10, dan 11 sudah didefinisikan dalam penelitian tersebut sehingga hanya perlu menerapkannya pada penyusunan solusi lengkap.

Teknik pemisahan operator dan pendekatan spektral dengan menerapkan fungsi basis Chebyshev dan fungsi basis harmonik bola digunakan sebagaimana Gambar 1. Gambar 1 menggambarkan iterasi swafungsi sistem kuantum yang berhubungan dengan koordinat bola di ruang tiga dimensi (dalam penelitian ini adalah atom hidrogen). Koefisien fungsi basis Chebyshev dihitung di bagian nomor 2 dan 9, sementara koefisien fungsi basis harmonik bola dihitung di bagian nomor 4 dan 7. Transformasi variabel, metode kolokasi Chebyshev disertai fungsi Chebyshev di dalamnya, dan metode swadekomposisi didefinisikan dan dihitung di bagian 3 dan 10. Sedangkan, fungsi harmonik bola dan swanilainya dihitung dan didefinisikan di bagian 5 dan 8. Gambar 1 juga menjelaskan alur iterasi teknik pemisahan operator dan pendekatan spektral dalam ruang lingkup komputasi. Setiap satu kali propagasi waktu, swafungsi yang didapat dikembalikan menjadi swafungsi inisialisasi di propagasi waktu berikutnya. Begitu seterusnya, proses ini berulang seiring majunya propagasi waktu hingga memenuhi syarat konvergensi.

III. HASIL DAN DISKUSI

Solusi persamaan Schrödinger bergantung waktu pada koordinat bola dengan menggunakan teknik pemisahan operator dan pendekatan spektral melibatkan swafungsi tereduksi. Hal ini membuat pemisahan operator membagi operator Hamiltonian menjadi 3 yaitu: operator Laplacian radial satu dimensi, operator momentum sudut, dan operator potensial (Sorevik dkk., 2009). Teknik pemisahan operator Strang kemudian membuat ketiga operator dioperasikan dalam 5 persamaan sekuensial (Hochbruck and Ostermann, 2005). Permasalahan di arah radial diselesaikan dengan transformasi variabel radial. Hal ini membuat semua titik evaluasi di arah radial $[0, \infty]$ dapat diwakili rentang $[-1,1]$ dan penyelesaiannya menggunakan metode kolokasi Chebyshev (Sorevik dkk., 2009).

3.1 Teknik Pemisahan Operator

Persamaan Schrödinger bergantung waktu pada koordinat bola dengan teknik pemisahan operator dan metode kolokasi Chebyshev (radial) dapat ditulis,

$$\frac{\partial}{\partial t}u = -\frac{i}{4}Au; \qquad u(x(r),\theta,\varphi,t_n) = \Phi(x(r),\theta,\varphi,t_n) \tag{1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\Phi} = -\frac{i}{2r(x)^2}L^2\hat{\Phi}; \qquad \hat{\Phi}(x(r),\theta,\varphi,t_n) = u\left(x(r),\theta,\varphi,t_{n+1/2}\right) \tag{2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\Phi} = \frac{i}{r(x)}\tilde{\Phi}; \qquad \tilde{\Phi}(x(r),\theta,\varphi,t_n) = \hat{\Phi}\left(x(r),\theta,\varphi,t_{n+1/2}\right) \tag{3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\Phi} = -\frac{i}{2r(x)^2}L^2\hat{\Phi}; \qquad \hat{\Phi}(x(r),\theta,\varphi,t_n+\Delta t/2) = \tilde{\Phi}(x(r),\theta,\varphi,t_{n+1}) \tag{4}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}u = -\frac{i}{4}Au; \qquad u(x(r),\theta,\varphi,t_n+\Delta t/2) = \hat{\Phi}(x(r),\theta,\varphi,t_{n+1}) \tag{5}$$

$$\Phi(x(r),\theta,\varphi,t_{n+1}) = u(x(r),\theta,\varphi,t_{n+1}) \tag{6}$$

dengan swafungsi sistem atom hidrogen Φ, vektor pendekatan swafungsi sekuen radial r atau fungsi basis Chebyshev u, swafungsi sekuen angular θ dan φ atau fungsi basis harmonik bola $\hat{\Phi}$, swafungsi sekuen potensial $\tilde{\Phi}$, operator Laplacian radial satu dimensi A setelah transformasi variabel x, dan operator momentum sudut L^2. Hasil integrasi Persamaan (1) sampai dengan Persamaan (6) dan penerapan propagasi waktu imajiner $t = -i\tau$ (Birkeland, 2009) adalah,

$$u\left(\tau_{n+1/2}\right) = e^{-\frac{i\Delta\tau}{4i}A}u(\tau_n); \qquad u(x(r),\theta,\varphi,\tau_n) = \Phi(x(r),\theta,\varphi,\tau_n) \tag{7}$$

$$\hat{\Phi}(\tau_{n+1/2}) = e^{-\frac{1}{2r(x)^2}\frac{\Delta\tau}{2}L^2}\hat{\Phi}(\tau_n); \qquad \hat{\Phi}(x(r),\theta,\varphi,\tau_n) = u(x(r),\theta,\varphi,\tau_{n+1/2}) \tag{8}$$

$$\tilde{\Phi}(\tau_{n+1}) = e^{\frac{1}{r(x)}\Delta\tau}\tilde{\Phi}(\tau_n); \qquad \tilde{\Phi}(x(r),\theta,\varphi,\tau_n) = \hat{\Phi}(x(r),\theta,\varphi,\tau_{n+1/2}) \tag{9}$$

$$\hat{\Phi}(\tau_{n+1}) = e^{-\frac{1}{2r(x)^2}\frac{\Delta\tau}{2}L^2}\hat{\Phi}(\tau_n+\Delta\tau/2); \; \hat{\Phi}(x(r),\theta,\varphi,\tau_n+\Delta\tau/2) = \tilde{\Phi}(x(r),\theta,\varphi,\tau_{n+1}) \tag{10}$$

$$u(\tau_{n+1}) = e^{-\frac{1\Delta\tau}{4\,2}A}u(\tau_n+\Delta\tau/2); \qquad u(x(r),\theta,\varphi,\tau_n+\Delta\tau/2) = \hat{\Phi}(x(r),\theta,\varphi,\tau_{n+1}) \tag{11}$$

$$\Phi(x(r),\theta,\varphi,\tau_{n+1}) = u(x(r),\theta,\varphi,\tau_{n+1}) \tag{12}$$

3.2 Pendekatan Spektral

Teknik pemisahan operator telah menyederhanakan persamaan Schrödinger menjadi persamaan-persamaan yang hanya bergantung masing-masing operatornya. Hal ini juga telah menyelesaikan bagian temporal dalam proses integrasi persamaan diferensial terhadap waktu. Sementara, dalam penyelesaian bagian ruang (radial dan angular), digunakan fungsi basis yang ortogonal dalam mendekati sistem sebenarnya. Fungsi basis alternatif yang digunakan untuk menyelesaikan bagian radial adalah fungsi basis Chebyshev. Penggunaan fungsi basis Chebyshev dilakukan karena cocok digunakan pada koordinat bola (Sorevik dkk., 2009) dan menyertakan transformasi variabel untuk setiap titik evaluasi di arah radial. Sedangkan, penyelesaian bagian angular menggunakan fungsi basis harmonik bola dan solusi operator momentum sudut L^2 adalah swanilai fungsi harmonik bola,

$$L^2 = l(l+1) \tag{13}$$

Dalam penyelesaian swanilai, operator Laplacian radial satu dimensi diselesaikan melalui metode swadekomposisi dan operator momentum sudut menerapkan swanilai fungsi harmonik bola.

3.2.1 Transformasi Variabel

Pemilihan variabel transformasi yang paling cocok dilakukan dengan memperhatikan perbandingan nilai ralat dalam penelitian Sorevik dkk. Variabel transformasi yang paling kecil ralatnya adalah,

$$x(r) = \frac{4}{\pi}\tan^{-1}\left(\frac{r}{S}\right) - 1; \qquad r \in [0,\infty); x \in [-1,1) \tag{14}$$

dengan sifat-sifatnya sebagai berikut, invers Persamaan (14),

$$r(x) = S\tan\left(\frac{\pi}{4}(x+1)\right) \tag{15}$$

turunan pertama Persamaan (14),

$$x'(r) = \frac{4S^2}{\pi(S^2+r^2)} \tag{16}$$

dan turunan kedua Persamaan (14),

$$x''(r) = -\frac{8Sr}{\pi(S^2+r^2)^2} \tag{17}$$

3.2.2 Fungsi Basis Chebyshev

Pendekatan spektral di arah radial dilakukan dengan menerapkan fungsi basis Chebyshev,

$$u(\tau_k) = \sum_{n=0}^{N_{max}} c_n(\theta,\phi,\tau_k)T_n(x(r)) \tag{18}$$

T_n fungsi Chebyshev didefinisikan sebagai,

$$T_n = \cos\left(\frac{ni\pi}{N}\right) \qquad 1 \le n \le N-1 \tag{19}$$

dengan x titik kolokasi di dalam Persamaan (14) didefinisikan sebagai,

$$x = \cos\left(\frac{i\pi}{N}\right); \qquad 1 \le i \le N-1 \tag{20}$$

turunan pertama Persamaan (19) terhadap titik kolokasi adalah (Boyd, 2000),

$$\frac{dT_n}{dx} = \frac{n\sin(n\theta)}{\sin(\theta)} \tag{21}$$

dan turunan kedua Persamaan (19) terhadap titik kolokasi adalah (Boyd, 2000),

$$\frac{d^2T_n}{dx^2} = -\frac{n^2\cos(n\theta)}{\sin^2(\theta)} + \frac{n\cos(\theta)\sin(n\theta)}{\sin^3(\theta)} \quad (22)$$

dengan θ dalam bentuk diskrit adalah $\frac{i\pi}{N}$. Rentang diskritisasi didefinisikan $[1, N-1]$ karena syarat batas swafungsi di titik asal dan di titik tak hingga sama dengan 0 (Sorevik dkk., 2009). Sehingga, berdasarkan syarat ortogonalitas, koefisien fungsi basis Chebyshev ditulis sebagai,

$$c_n = \frac{2}{N}\sum_{i=1}^{N} u(x_i)\cos\left(\frac{ni\pi}{N}\right); \qquad 1 \le n \le N-1 \quad (23)$$

3.2.3 Fungsi Basis Harmonik Bola

Pendekatan spektral di arah angular dilakukan dengan menerapkan fungsi basis harmonik bola,

$$\tilde{\Phi}(\tau_k) = \sum_{l=0}^{L_{max}}\sum_{m=-l}^{l} c_{lm}(x,\tau_k) Y_l^m(\theta,\varphi) \quad (24)$$

Nilai sudut yang dievaluasi berada di rentang $[0,2\pi]$. Dalam perumusan diskritisasi koefisien fungsi basis di arah angular, nilai di sudut 0 dan di 2π sama dengan 0. Sehingga, berdasarkan syarat ortogonalitas, koefisien fungsi basis harmonik bola ditulis sebagai,

$$c_{lm} = \sum_{1}^{N-1}\sum_{1}^{N/2-1}\tilde{\Phi}(\theta,\varphi) Y_l^m(\theta,\varphi)\sin\theta\,\Delta\theta\Delta\varphi \quad (25)$$

Sedangkan fungsi harmonik bola Y_l^m didefinisikan sebagai (Reuter dkk., 2009),

$$Y_m^l(\theta,\varphi) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{\pi}}\,\tilde{P}_l^m(\cos\theta)\cos(m\varphi), & m > 0 \\ \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\,\tilde{P}_l^0(\cos\theta), & m = 0 \\ \sqrt{\frac{1}{\pi}}\,\tilde{P}_l^{-m}(\cos\theta)\sin(m\varphi), & m < 0 \end{cases} \quad (26)$$

$\tilde{P}_l^m$ merupakan polinomial Legendre terasosiasi yang dinormalisasi dan diselesaikan dengan program yang disadur dari kode *built-in* Matlab (Legendre.m).

3.2.4 Metode Swadekomposisi

Operator Laplacian radial satu dimensi A merupakan matriks simetri operator di titik-titik kolokasi terhadap setiap derajat fungsi basisnya. Dengan menggunakan metode swadekomposisi, matriks A diuraikan menjadi matriks swavektor dan swanilainya (Salkind, 2007; Goncalves, 2015; Weisstein, 2015) satu kali bersamaan untuk seluruh titik kolokasi dan derajat fungsi basis dan kemudian swanilai tersebut dapat digunakan dalam perhitungan. Berdasarkan metode swadekomposisi, matriks A diuraikan dengan definisi,

$$A = \frac{R^{-1}Au}{R^{-1}u} \quad (27)$$

dengan matriks swavektor R^{-1} didefinisikan acak dan fungsi basis Chebyshev u. Nilai-nilai matriks elemen Λ adalah,

$$\lambda_{ij} = \sum_{k=1}^{N}(R^{-1}Au)_{ik}((R^{-1}u)^{-1})_{kj} \quad (28)$$

nilai elemen matriks $R^{-1}Au$ adalah,

$$(R^{-1}Au)_{ij} = \sum_{k=1}^{N}(R^{-1})_{ik}\left(\sum_{a=1}^{N}\left(\frac{\partial x_{ka}}{\partial r}\right)^2\left(c_j\frac{\partial^2 T_j(x_a)}{\partial x^2}\right) + \sum_{b=1}^{N}\frac{\partial^2 x_{kb}}{\partial r^2}\left(c_j\frac{\partial T_j(x_b)}{\partial x}\right)\right) \quad (29)$$

dan nilai elemen matriks $(R^{-1}u)$ adalah,

$$(R^{-1}u)_{ij} = \sum_{k=1}^{N}(R^{-1})_{ik}\left(c_j T_j(x_k)\right) \quad (30)$$

Persamaan (27) diselesaikan dengan melibatkan transformasi Householder dan metode QR dalam sebuah program (Kosasih, 2006) (dengan catatan sedikit perbaikan pada syarat konvergensinya).

Bentuk numerik lengkap perhitungan sesuai Gambar 1 meliputi Persamaan (7) sampai dengan Persamaan (12) dengan penjelasan rinci di bagian pendekatan spektral yang telah dijelaskan di pembahasan 3.2. Dengan demikian, solusi persamaan Schrödinger bergantung waktu dengan menggunakan teknik pemisahan operator dan pendekatan spektral dapat dimengerti seluruhnya dan ditambah penerapannya pada sistem atom hidrogen. Penelitian ini merupakan penjelasan teoritis dari penelitian Sorevik dkk. Penelitian ini memberikan penjelasan rinci seluruh bentuk numerik dan program-program yang digunakan untuk menghitung swafungsi sistem atom hidrogen meliputi nilai inisialisasi swafungsi, diskritisasi fungsi Chebyshev dan polinomial Legendre terasosiasi yang dinormalisasi, ortogonalitas koefisien fungsi basis Chebyshev dan harmonik bola, transformasi Householder dan Metode QR untuk menghitung swanilai operator di arah radial, dan propagasi waktu imajiner.

Selanjutnya, penelitian ini memerlukan pemeriksaan subrutin polinomial Legendre terasosiasi yang dinormalisasi dan memodifikasi bentuk yang lebih baik sehingga dapat menghimpun nilai l dan m yang cukup banyak dalam memberikan set fungsi basis harmonik bola yang luas. Kemudian, diharapakan dapat dilanjutkan sampai pada tahap membuat visualisasi dan simulasi program untuk menampilkan model kuantum atom hidrogen sebagai cara untuk menganalisis kekuatan teknik pemisahan operator dan pendekatan spektral dalam mendekati sistem kuantum atom hidrogen.

IV. KESIMPULAN

Penelitian ini memberikan tafsiran hasil lengkap uraian persamaan dari teknik pemisahan operator dan pendekatan spektral dengan menerapkan fungsi basis Chebyshev dan fungsi basis harmonik bola pada sistem kuantum atom hidrogen berupa persamaan-persamaan sekuensial lengkap dengan teknik perhitungannya. Persamaan Schrödinger bergantung waktu tiga dimensi dalam koordinat bola dapat disederhanakan dan dihitung dengan teknik pemisahan operator dan pendekatan spektral dengan menerapkan fungsi basis Chebyshev dan fungsi basis harmonik bola. Perhitungan sistem kuantum atom hidrogen dapat dipisahkan berdasarkan operator-operatornya, yaitu: operator Laplacian radial satu dimensi, operator momentum sudut, dan operator potensial. Dalam perhitungan koefisien fungsi basis Chebyshev dan fungsi basis harmonik bola melibatkan syarat ortogonalitas antar persamaan yang dipisahkan operatornya. Dalam menghitung fungsi harmonik bola, sebuah subrutin program numerik diperlukan untuk menghitung polinomial Legendre terasosiasi yang dinormalisasi. Kemudian juga, sebuah program numerik diperlukan untuk menghitung swanilai operator Laplacian radial satu dimensi dalam metode swadekomposisi secara serentak.

DAFTAR PUSTAKA

Birkeland, T., 2009, PyProp - A Python Framework for Propagating the Time Dependent Schrödinger Equation, Disertasi, Department of Mathematics, University of Bergen, Bergen.

Boyd, J.P., 2000, Chebyshev and Fourier Spectral Methods, Dover Publications, Inc., New York.

Feit, M.D., Fleck, J.A., Steiger, A., 1982, Solution of The Schrödinger Equation by a Spectral Method, *Journal of Computational Physics*, 47, 412 – 433.

Hansen, J.P., Matthey, T., Sorevik, T., 2003, A Parallel Split Operator Method for The Time Dependent Schrödinger Equation, *Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface*, 2840, 503 – 510.

Hochbruck, M. dan Ostermann, A., 2005, Time Integration: Splitting and Exponential Methods, *Computational Problem in Physics-CPiP 2005*, Helsinki.

Iqbal, A., 2012, Some Aspect on Schrödinger Equation, Tesis, Department of Mathematical Sciences, Chalmers University of Technology, Gothenburg.

Kosasih, P.B., 2006, Komputasi Numerik, Teori dan Aplikasi, Ed. 1, ANDI, Yogyakarta.

Persson, A., 2012, Numerical Methods for Solving The Time-Dependent Schrödinger Equation, Skripsi, Department of Physics, Lund University, Lund.

Reuter, M.G., Ratner, M.A., dan Seideman, T., 2009, A Fast Method for Solving Both the Time-Dependent Schrödinger Equation in Angular Coordinates and Its Associated “*m*-mixing” Problem, *The Journal of Chemical Physics*, 131, American Institute of Physics, 094108-1 – 094108-6.

Salkind, N.J., 2007, *Encyclopedia of Measurement Statistics*, SAGE, Thousand Oaks.

Sorevik, T., Birkeland, T., dan Oksa, G., 2009, Numerical Solution of The 3D Time Dependent Schrödinger Equation in Spherical Coordinates: Spectral Basis and Effects of Split-operator Technique, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 225, Elsevier, 56 – 67.

Yazici, Y., 2010, Operator Splitting Methods for Differential Equation, Tesis S-2, Department of Mathematics Izmir Institute of Technology.

Goncalves, H., 2015, Eigenvalues, Eigenvectors and Eigendecomposition, www.onmyphd.com /?p=eigen.decomposition, diakses Maret 2015.

Weisstein, E., 2015, Eigen Decomposition, mathworld.wolfram.com/EigenDecomposition.html, diakses Maret 2015.