

# Penentuan *Density Matrix* Sistem Kuantum Satu Partikel Dimensi Satu dengan Metode *Discretized Path Integral* (DPI)

Iyan Islamiyati<sup>(1,a)</sup>, I Wayan Sudiarta<sup>(1,b)\*</sup> dan Lily Maysari Angraini<sup>(1,c)</sup>

<sup>(1)</sup>Jurusan Fisika, Universitas Mataram, Mataram, Indonesia, 83115

Email : <sup>(a)</sup>iyanislamiyati9@gmail.com, <sup>(b)\*</sup>wayansudiarta@unram.ac.id, <sup>(c)</sup>lilyangraini@unram.ac.id

Diterima (07 November 2021), Direvisi (06 Desember 2022)

**Abstract.** A mixed quantum system can be represented by a density matrix. By knowing the system's density matrix, other thermodynamic properties such as Helmholtz free energy and entropy can be determined. This paper presents the computation of density matrices of one-dimensional single-particle quantum systems using the discretized path integral (DPI) method. The DPI method was validated using the finite difference time domain (FDTD) method for two cases, a particle in an infinite square well and a harmonic oscillator potential. The density matrices, Helmholtz's free energy, and entropy have shown that the DPI method produces correct numerical values compared to the FDTD results. Then, the DPI method is used in the double-well potential by giving variations in barrier potential and temperature of the system. The results show that the particle will be tunneling when the barrier potential energy is more than particle's kinetic energy. The particle also can tunnel easily if the system has a higher temperature.

**Keywords:** density matrix, Helmholtz's free energy, entropy, discretized path integral.

**Abstrak.** Sistem kuantum campuran dapat direpresentasikan menggunakan *density matrix*. Dengan mengetahui *density matrix* sistem, sifat-sifat termodinamika lain dari sistem seperti energi bebas Helmholtz dan entropi dapat diketahui. Pada penelitian ini, dilakukan proses komputasi *density matrix* pada sistem kuantum satu partikel dimensi satu menggunakan metode *discretized path integral* (DPI). Metode DPI sebelumnya divalidasi menggunakan metode *finite difference time domain* (FDTD) pada kasus potensial kotak tak hingga dan potensial osilator harmonik. Hasil perhitungan metode DPI pada kedua kasus menunjukkan nilai yang sesuai dengan metode FDTD. Metode DPI kemudian digunakan pada kasus potensial sumur ganda dengan pemberian variasi pada nilai potensial barrier dan suhu. Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa, partikel akan mengalami tunneling ketika energi potensial barrier lebih besar dari energi kinetik partikel. Partikel juga lebih mudah melakukan tunneling jika sistem memiliki suhu yang lebih tinggi.

**Kata kunci:** *density matrix*, energi bebas Helmholtz, entropi, *discretized path integral*.

---

## PENDAHULUAN

Sistem kuantum dapat dibagi menjadi dua jenis, yaitu sistem kuantum murni dan sistem kuantum campuran. Sistem kuantum murni terdiri dari keadaan mikro tertentu dan direpresentasikan oleh vektor keadaan, sedangkan sistem kuantum

campuran terdiri dari keadaan-keadaan mikro yang berbeda serta direpresentasikan oleh *density matrix*. Melalui *density matrix*, sifat-sifat termodinamika lain dari sistem juga dapat diketahui [1], seperti energi dalam, energi bebas Helmholtz, entropi dan kapasitas panas. Sifat-sifat tersebut diperoleh dengan memanfaatkan *trace* atau

penjumlahan elemen diagonal dari *density matrix* [2].

*Density matrix* sistem dalam keadaan kenonik dapat dihitung dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger bergantung waktu, kemudian solusinya digunakan untuk membentuk *Bloch density matrix*. Namun solusi analitiks persamaan Schrödinger hanya dapat diperoleh untuk sejumlah kecil kasus ideal [3] sistem *distinguishable* atau sistem dengan partikel yang dapat dibedakan.

Beberapa metode yang telah digunakan untuk menghitung *density matrix* diantaranya adalah metode *Monte Carlo*, *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG), *Finite Difference Time Domain* (FDTD), dan *Discretized Path Integral* (DPI). Metode *Monte Carlo* digunakan untuk menghitung *density matrix* sistem partikel banyak pada suhu terbatas [4], dan merupakan metode yang paling cocok untuk diterapkan pada *n body quantum system* sekalipun membutuhkan banyak konfigurasi dan konvergensi yang lambat [5]. Metode *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG) juga digunakan untuk menghitung *density matrix* partikel [6], namun memori yang dibutuhkan untuk menggunakan metode ini meningkat secara cepat untuk menyimpan jumlah *basis state* yang lebih banyak [7] serta hanya efisien dalam menjelaskan daerah/*locality* dalam dimensi ruang (*spatial dimension*) [6].

Metode *Finite Difference Time Domain* (FDTD) berhasil digunakan untuk menghitung *density matrix* dan sifat termodinamika lain seperti energi bebas pada sistem kuantum satu partikel dalam ruang *finite* dan memberikan efisiensi serta akurasi yang lebih baik [3]. Bahkan untuk sistem kuantum dua partikel pun, metode FDTD memberikan akurasi yang signifikan [8].

Metode *Discretized Path Integral* (DPI) menggunakan *Numerical Matrix*

*Multiplication* (NMM) untuk menghitung *density matrix* dengan menyelesaikan persamaan *Bloch density matrix*. Kelebihan NMM adalah mempersingkat proses perhitungan pada algoritma yang digunakan sehingga tidak membutuhkan jumlah iterasi yang banyak dalam proses pengerjaannya [5].

Pada paper ini, metode DPI digunakan untuk menghitung *density matrix*, energi bebas Helmholtz dan entropi sistem kuantum satu partikel pada dimensi satu. Perhitungan nilai awal *density matrix* dan validasi dilakukan dengan menggunakan metode FDTD. Validasi dilakukan pada sistem potensial kotak tak hingga dan potensial osilator harmonik. Setelah itu, metode DPI diterapkan pada sistem potensial sumur ganda.

## Teori

*Density matrix* sistem kuantum didapatkan dari penentuan *Bloch density matrix* menggunakan **Persamaan 1**.

$$B(x, x', \beta) = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(x) \phi_n^*(x') \exp\{-\beta E_n\} \quad (1)$$

Dengan menggunakan  $\beta = \varepsilon$ , dimana  $\beta = 1/k_b T$  dan  $k_b$  merupakan konstanta Boltzmann, penentuan suhu sistem kuantum dilakukan menggunakan **Persamaan 2** [9].

$$T = 1/(k_b \beta) \quad (2)$$

*Density matrix* pada keadaan ekuilibrium termal dengan statistik *Maxwell-Boltzmann* dapat diperoleh dengan membagi *Bloch density matrix* dengan fungsi partisi dari sistem yaitu  $Z = \sum_n \exp(-\beta E)$  atau dapat diperoleh dari *Bloch density matrix* dengan hubungan seperti pada **Persamaan 3**.

$$Z(\beta) = \text{tr}(B) \quad (3)$$

Sehingga *density matrix* diberikan oleh **Persamaan 4** sebagai berikut:

$$\rho(x, x'; \beta) = B(x, x'; \beta) / Z(\beta) \tag{4}$$

Sedangkan dengan metode DPI, *Bloch density matrix* dapat dihitung dengan **Persamaan 5**.

$$B(x, x'; 2\varepsilon) = \int_{-\infty}^{+\infty} B(x, x'', \varepsilon) B(x'', x', \varepsilon) dx'' \tag{5}$$

Dari fungsi partisi ( $Z$ ), energi bebas Helmholtz dari sistem dapat ditentukan dengan **Persamaan 6**.

$$F = -kT \ln Z \tag{6}$$

Sedangkan entropi sistem, dengan menggunakan hubungan  $F = U - TS$ , dapat dihitung dengan **Persamaan 7**.

$$S = (U - F) / T \tag{7}$$

**Uji Kasus Potensial**

Paper ini memberikan hasil *density matrix* untuk kasus-kasus potensial berikut ini.

1. Potensial Kotak Tak Hingga Dimensi Satu

Fungsi potensial untuk sistem ini dituliskan dalam **Persamaan 8** [10].

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{jika } x < 0 \text{ dan } x > L \\ 0 & \text{jika } 0 \leq x \leq L \end{cases} \tag{8}$$

2. Potensial Osilator Harmonik Dimensi Satu

Fungsi sumur potensial harmonik yang digunakan memiliki bentuk seperti **Persamaan 9** [10].

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2 \tag{9}$$

3. Potensial Sumur Ganda Dimensi Satu

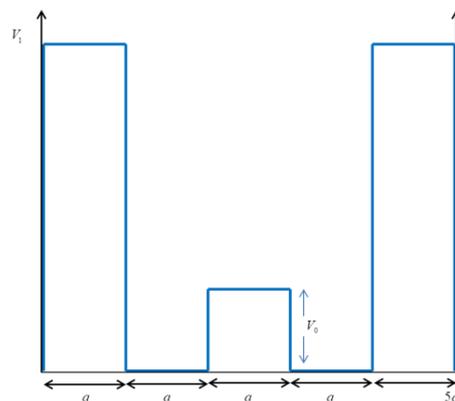
Kasus potensial sumur ganda yang digunakan diberikan variasi pada suhu sistem dan nilai potensial barrier ( $V_0$ ). Fungsi potensial yang digunakan dapat dilihat pada **Persamaan 10**.

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{pada } x < 0 \\ 20 & \text{pada } 0 < x \leq a \\ 0 & \text{pada } a < x \leq 2a \\ V_0 & \text{pada } 2a < x \leq 3a \\ 0 & \text{pada } 3a < x \leq 4a \\ 20 & \text{pada } 4a < x \leq 5a \\ \infty & \text{pada } x > 5a \end{cases} \tag{10}$$

Atau untuk lebih jelasnya dapat dilihat pada **Gambar 1**.

**METODE PENELITIAN**

Program perhitungan *density matrix density matrix* yang digunakan dalam paper ini merupakan modifikasi dari program Sudiarta dan Geldart [3]. Validasi dilakukan dengan cara membandingkan hasil metode DPI dengan metode FDTD



**Gambar 1.** Potensial sumur ganda

untuk kasus potensial kotak tak hingga dan potensial osilator harmonik. Setelah melakukan validasi, metode DPI digunakan pada kasus potensial sumur ganda.

Pada program yang digunakan, **Persamaan 1** digunakan untuk membentuk *Bloch density matrix* sedangkan **Persamaan 4** digunakan untuk menghitung *density matrix* sistem. **Persamaan 5** merupakan metode DPI untuk menghitung *density matrix*. Adapun energi bebas Helmholtz dan entropi sistem dihitung dengan **Persamaan 6** dan **Persamaan 7**.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

### 1. Kasus Potensial Kotak Tak Hingga Dimensi Satu

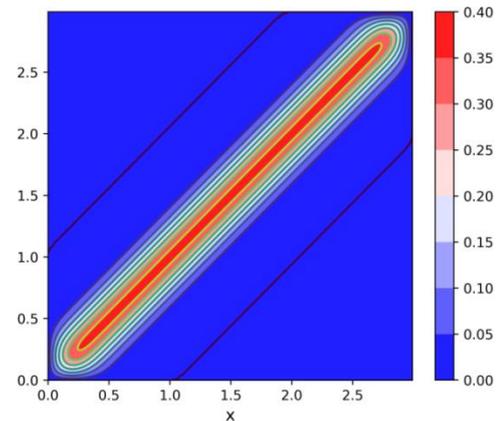
Berdasarkan jumlah iterasi yang digunakan, metode DPI membutuhkan iterasi yang lebih sedikit dibandingkan dengan metode FDTD. Metode DPI menggunakan  $n$  jumlah iterasi, sesuai dengan **Persamaan 5** sedangkan metode FDTD yang menggunakan jumlah iterasi sebanyak  $2^n$ .

**Gambar 2** merupakan hasil validasi *density matrix*. Metode DPI memberikan hasil yang sama dengan metode FDTD. Ini terlihat dari garis kontur pada **Gambar 2** untuk *density matrix* hasil komputasi yang mewakili hasil metode DPI bertepatan dengan batas kontur warna yang mewakili hasil metode FDTD.

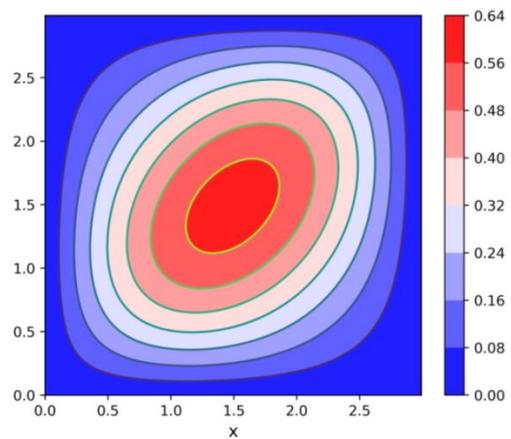
Karena nilai *density matrix* sistem dengan menggunakan metode DPI sudah sama dengan nilai *density matrix* menggunakan metode FDTD, maka nilai variabel turunan seperti energi bebas Helmholtz dan entropi akan bernilai sama selama dihitung dengan cara yang sama. Hasil validasi perhitungan energi bebas Helmholtz dan entropi dapat dilihat pada **Gambar 3**.

Meskipun metode DPI dan FDTD menggunakan jumlah iterasi yang jauh berbeda, dari **Gambar 3(a)** dapat dilihat bahwa metode DPI memberikan nilai energi bebas Helmholtz yang sesuai dengan metode FDTD. Energi bebas Helmholtz yang dihitung dengan metode DPI berada di titik

yang sama dengan energi bebas Helmholtz yang dihitung dengan metode FDTD. Hal yang sama juga terjadi pada perhitungan entropi sistem atau dapat dilihat pada **Gambar 3(b)**.

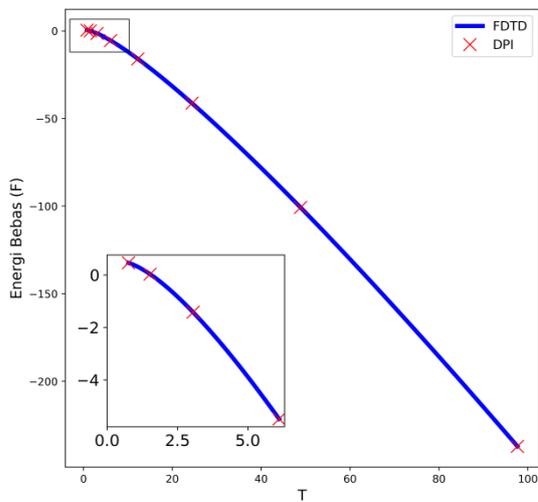


(a)

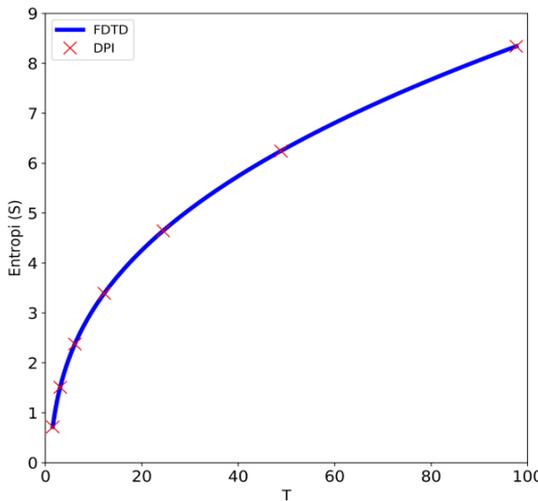


(b)

**Gambar 2.** *Density matrix* partikel pada potensial kotak tak hingga dimensi satu, (a) pada  $T_1 = 24, 40$ , (b) pada  $T_2 = 0, 76$



(a)



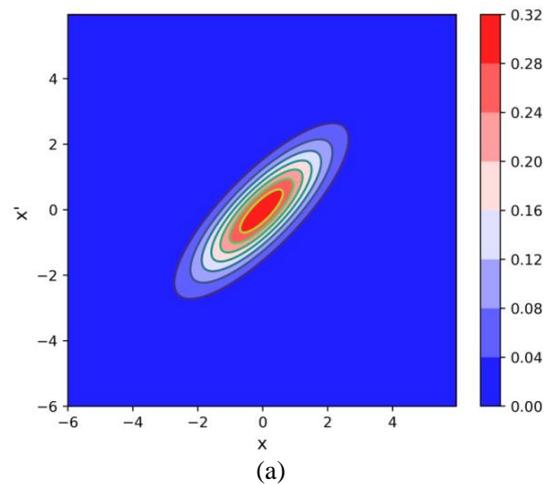
(b)

**Gambar 3.** (a) energi bebas Helmholtz sistem partikel pada potensial kotak tak hingga dimensi satu, (b) entropi sistem

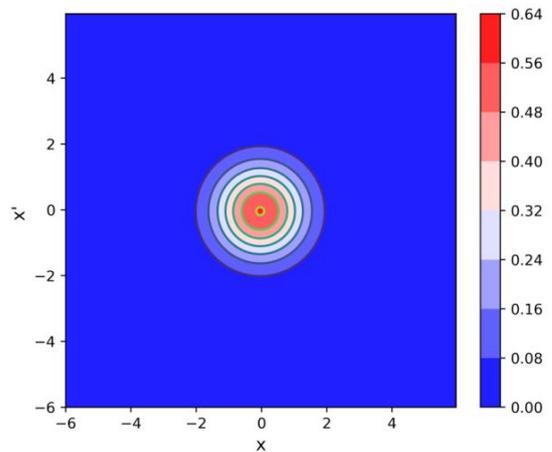
2. Kasus Potensial Osilator Harmonik Dimensi Satu

Dalam sistem potensial osilator harmonik dimensi satu, metode DPI juga menunjukkan hal yang sama seperti pada sistem kuantum potensial kotak tak hingga. Hasil perhitungan *density matrix* sistem partikel menggunakan metode DPI memberikan hasil yang sama dengan metode FDTD seperti yang dapat dilihat pada **Gambar**

4. Validasi hasil perhitungan energi bebas Helmholtz dan entropi pada sistem potensial osilator harmonik diberikan pada **Gambar 5(a)** dan **Gambar 5(b)**. Dari kedua gambar tersebut dapat diketahui bahwa nilai energi bebas Helmholtz dan entropi yang dihasilkan oleh metode DPI sesuai dengan nilai energi bebas Helmholtz dan entropi yang dihasilkan oleh metode FDTD.

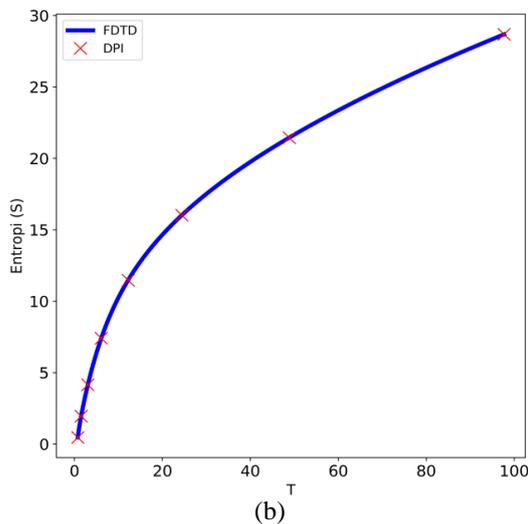
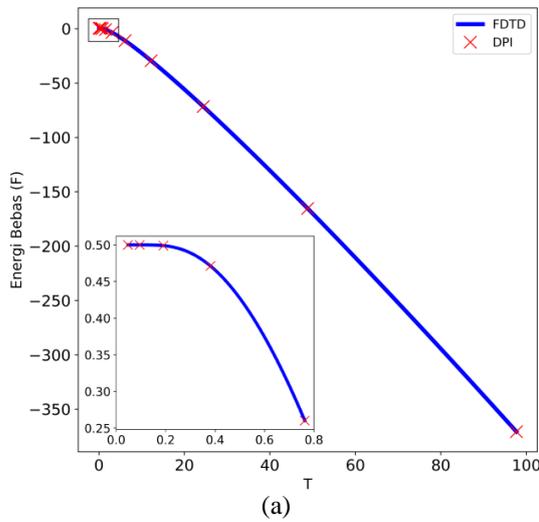


(a)



(b)

**Gambar 4.** *Density matrix* partikel pada potensial osilator harmonik dimensi satu, (a) pada  $T_1 = 24, 40$ , (b) pada  $T_2 = 0,76$



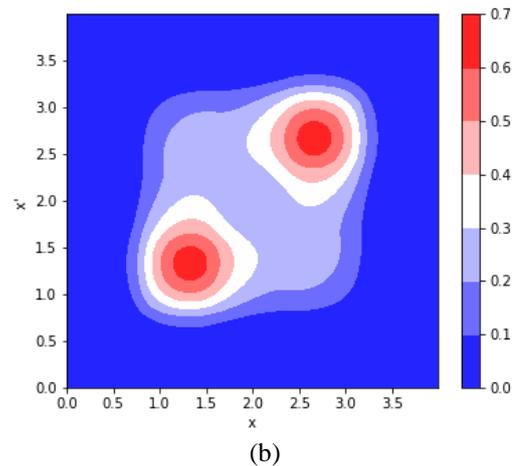
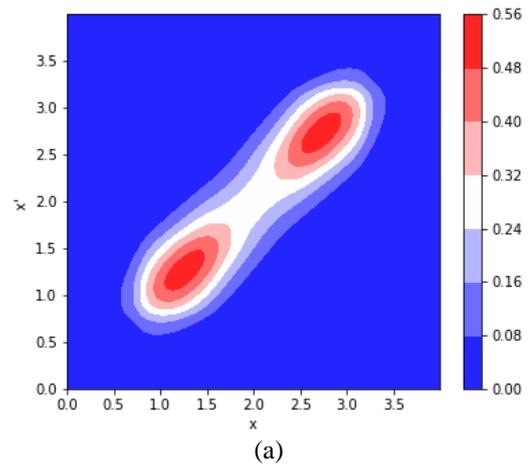
**Gambar 5.** (a) energi bebas Helmholtz sistem partikel pada potensial osilator harmonik dimensi satu, (b) entropi sistem

### 3. Potensial Sumur Ganda Dimensi Satu dengan Suhu Bervariasi

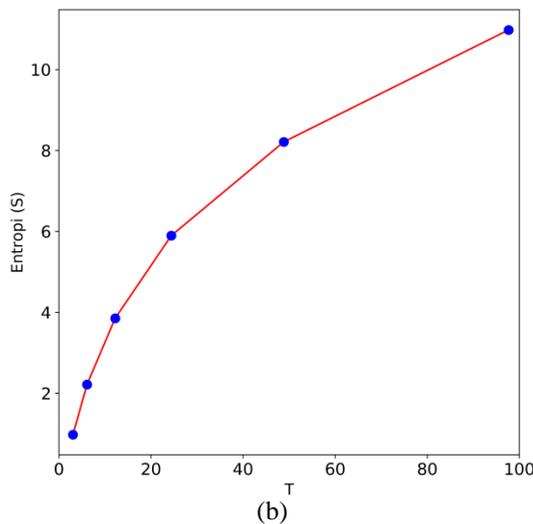
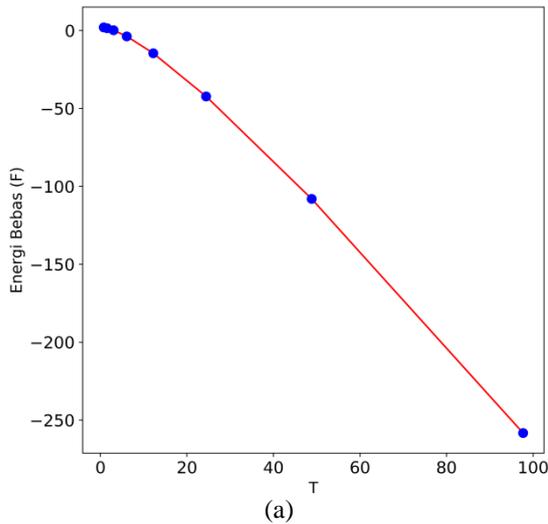
Hasil perhitungan *density matrix* dengan metode DPI dapat dilihat pada **Gambar 6**. Hasil tersebut menunjukkan dua buah puncak probabilitas yang masing-masing menempati dua ruang sumur yang ada pada potensial sumur ganda. Partikel memiliki probabilitas untuk melewati potensial barrier (tunneling) meskipun energi kinetik partikel lebih kecil dari energi potensial

barier. Adanya dua puncak probabilitas pada **Gambar 6** ini menandakan bahwa partikel bisa berpindah karena adanya proses tunneling.

Nilai energi bebas Helmholtz merujuk pada jumlah kerja yang dapat dimanfaatkan dari sistem termodinamika tertutup pada volume dan temperatur konstan. Nilai negatif dari energi bebas Helmholtz memberikan jumlah kerja maksimum yang dapat diperoleh dari sistem kanonik. Nilai ini sesuai dengan hasil yang diperoleh dari simulasi dan dapat dilihat pada **Gambar 7(a)**.



**Gambar 6.** *Density matrix* partikel pada potensial sumur ganda dengan  $V_0 = 4$ , (a) pada  $T_1 = 12, 20$ , (b) pada  $T_2 = 1, 52$



**Gambar 7.** (a) energi bebas Helmholtz sistem partikel pada potensial sumur ganda dimensi satu dengan  $V_0 = 4$  (garis hanya sebagai penghubung) (b) entropi sistem

Pada proses suhu konstan dan tidak ada kerja baik yang dilakukan oleh sistem atau pada sistem, energi bebas Helmholtz menurun dan mencapai kesetimbangan.

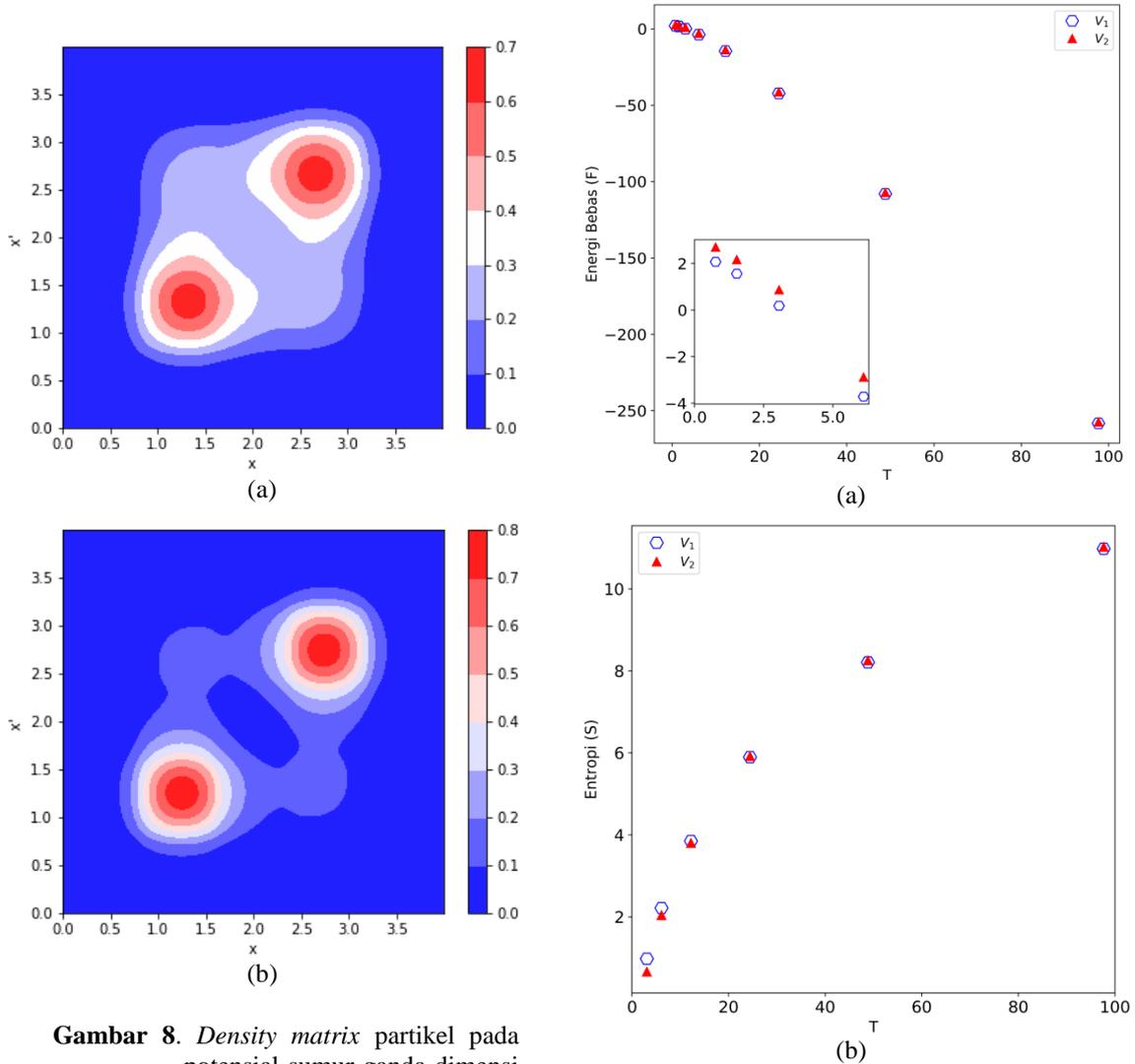
Proses termodinamika dapat terjadi secara spontan menuju kondisi dengan energi bebas semakin mengecil dan entropi sistem semakin besar. Entropi yang diperoleh dari proses simulasi pun menunjukkan hasil yang sesuai dengan

Hukum Termodinamika II, dimana  $S \geq 0$ , serta pada suhu menuju nol, entropi juga menuju nol. Perubahan entropi sistem terhadap suhu diberikan pada **Gambar 7(b)**. Ketika energi bebas Helmholtz menurun, maka entropi sistem akan meningkat.

4. Potensial Sumur Ganda Dimensi Satu dengan Energi Potensial Barrier Bervariasi

Berdasarkan hasil *density matrix* yang didapatkan pada **Gambar 8**, nilai potensial berpengaruh pada peristiwa tunneling yang dialami oleh partikel. Pada  $V_1$  dengan  $V_0 = 4$  atau pada **Gambar 8(a)**, terbentuk dua buah puncak probabilitas yang masing-masing berada pada setiap ruang sumur, namun kedua puncak terlihat masih menyatu. Sedangkan pada  $V_2$  dengan  $V_0 = 8$  atau pada **Gambar 8(b)**, kedua puncak terlihat hampir terpisah antara satu dengan yang lain. Nilai potensial yang lebih besar terlihat menghambat proses tunneling dari partikel.

Sama seperti sistem potensial sumur ganda dengan suhu yang bervariasi, energi bebas Helmholtz sistem potensial dengan potensial barrier yang bervariasi, menurun dan mencapai kesetimbangan seperti yang diperlihatkan pada **Gambar 9(a)** dan **Gambar 9(b)**. Perubahan entropi sistem partikel terhadap suhu diberikan pada **Gambar 9(b)**. Entropi sistem bernilai lebih dari nol dan terus meningkat seiring dengan peningkatan suhu sistem.



**Gambar 8.** *Density matrix* partikel pada potensial sumur ganda dimensi satu, (a) dengan  $V_0 = 4$ , (b) dengan  $V_0 = 8$

**Gambar 9.** (a) energi bebas Helmholtz sistem partikel pada potensial sumur ganda dimensi satu dengan dengan  $V_0 = 4$  dan  $V_0 = 8$ , (b) entropi sistem

## KESIMPULAN

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, maka dapat disimpulkan bahwa validasi hasil perhitungan *density matrix* dan sifat termodinamika turunan seperti energi bebas Helmholtz dan entropi sistem menggunakan metode DPI pada potensial kotak tak hingga dan potensial osilator harmonik sudah akurat. Sedangkan penerapan metode DPI pada potensial

sumur ganda yang dilakukan pada keadaan dengan suhu sistem yang bervariasi dan energi potensial barrier yang bervariasi memberikan hasil bahwa suhu sistem dan energi potensial barrier mempengaruhi nilai *density matrix* dan densitas sistem partikel serta sifat termodinamika turunan dari sistem.

### UCAPAN TERIMAKASIH

Penulis mengucapkan terimakasih kepada dosen program studi Fisika yang telah membantu dalam menyelesaikan penelitian ini.

### DAFTAR PUSTAKA

- [1] D. M. Cerpeley and E. L. Pollock, "Carpeley.pdf," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 56, no. 4, pp. 351–354, 1986.
- [2] O. A. Awoga, A. A. Ikot, E. E. Ituen, and L. E. Akpabio, "Evaluation of the thermodynamics of a four level system using canonical density matrix method," *Arch. Thermodyn.*, vol. 33, no. 4, pp. 91–108, 2012, doi: 10.2478/v10173-012-0029-5.
- [3] I. W. Sudiarta and D. J. W. Geldart, "The finite difference time domain method for computing the single-particle density matrix," *J. Phys. A Math. Theor.*, vol. 42, no. 28, pp. 1–26, 2009, doi: 10.1088/1751-8113/42/28/285002.
- [4] N. S. Blunt, T. W. Rogers, J. S. Spencer, and W. M. C. Foulkes, "Density-matrix quantum Monte Carlo method," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 89, no. 24, pp. 1–11, 2014, doi: 10.1103/PhysRevB.89.245124.
- [5] D. Thirumalai, E. J. Bruskin, and B. J. Berne, "An iterative scheme for the evaluation of discretized path integrals," *J. Chem. Phys.*, vol. 79, no. 10, pp. 5063–5069, 1983, doi: 10.1063/1.445601.
- [6] G. K. L. Chan and S. Sharma, "The density matrix renormalization group in quantum chemistry," *Annu. Rev. Phys. Chem.*, vol. 62, pp. 465–481, 2011, doi: 10.1146/annurev-physchem-032210-103338.
- [7] K. A. Hallberg, "New trends in density matrix renormalization," *Adv. Phys.*, vol. 55, no. 5–6, pp. 477–526, 2006, doi: 10.1080/00018730600766432.
- [8] Subhan, I. W. Sudiarta, and L. M. Angraini, "Indonesian Physical Review," *Indones. Phys. Rev.*, vol. 2, no. 3, pp. 1–8, 2019.
- [9] B. H. Bransden and C. J. Joachain, *Quantum Mechanics*. New York: Longman Scientific and Technical, 1989.
- [10] I. W. Sudiarta and D. Ph, *Mekanika Kuantum*. Mataram: CV. Garuda, 2012.

Islamiyati dkk: Penentuan *Density Matrix* Sistem Kuantum Satu Partikel Dimensi Satu dengan Metode *Discretized Path Integral* (DPI)