

In questo lavoro di tesi abbiamo studiato, tramite la teoria del funzionale densità (DFT), lo stato fondamentale (GS) di un particolare sistema: il gas elettronico in "discesa". Un sistema di elettroni in una regione di spazio infinitamente estesa in due dimensioni e confinato a rimanere in un intervallo di lunghezza finita pari a L nella terza. In questa direzione agisce una forza esterna, che prendiamo costante pari a K , descritta dal potenziale lineare $V = Kz$. Trattiamo questo modello in campo medio, con una teoria auto-consistente di elettroni indipendenti. La simmetria del problema ci permette di separarlo in modo tale da poter trattare esattamente le soluzioni lungo il piano trasversale xy e dover studiare numericamente solo il moto in z . Equilibriamo elettricamente le cariche degli elettroni con un gellio di cariche positive uniformemente distribuite nel dominio di definizione del problema. La prima parte della tesi riassume il background teorico sottostante: da alcuni concetti fondamentali della teoria many-body ai teoremi di Hohenberg-Kohn (HK) alla base della teoria del funzionale densità, la quale permette di calcolare l'energia di stato fondamentale di un dato sistema di molti elettroni grazie la minimizzazione di un opportuno funzionale. Siccome non noto, però, ne abbiamo considerato due approssimazioni: l'equazione di Thomas-Fermi (TF) e la parametrizzazione di Kohn-Sham (KS). L'obiettivo fondamentale della tesi è l'implementazione di questi due metodi per il problema del gas elettronico in esame, realizzando da zero dei programmi - scritti in `c++` - per risolvere in modo auto-consistente la equazione per la ricerca della densità di stato fondamentale con cui poi calcolarsi l'energia corrispondente. La differenza sostanziale tra i due metodi è che se l'equazione di TF è scritta esplicitamente con la densità come funzione incognita, al contrario in KS è parametrizzata in termini di orbitali di singolo elettrone e l'equazione da risolvere è una equazione agli autovalori le cui soluzioni sono autofunzioni ottenute via diagonalizzazione numerica. In ogni caso la logica è sempre la medesima: data una certa densità, risolviamo l'equazione ottenendone una nuova e ripetiamo iterativamente il procedimento fino al raggiungimento della convergenza. Il modello dipende da tre parametri fisici: l'ampiezza L della regione di confinamento che fissiamo $= 20a_0$, la forza esterna K e la densità superficiale di elettroni σ . Variando K e σ , abbiamo potuto confrontare i calcoli di diverse grandezze nei due modelli in modo tale da metterne in luce le differenze: per esemplificare abbiamo studiato quantità tipo la densità a fissati K e σ e l'energia di stato fondamentale al variare di σ a fissato campo esterno. Consideriamo in particolare il primo calcolo raffigurato nell'immagine 1. Sebbene il raccordo sia abbastanza buono, una rapida disamina porta subito ad osservare che la differenza principale la troviamo a piccoli valori di z , nell'intorno di $1 - 2 a_0$. In questa regione osserviamo che in TF si origina, in virtù della forma della equazione di TF, una discontinuità in $z = 0$, al contrario del metodo di KS dove invece è imposta esplicitamente la condizione al contorno di azzeramento ai bordi e di conseguenza la densità si annulla agli estremi in modo continuo. In generale, la discordanza è tanto maggiore quanto più siamo vicini alle superfici $z = 0$ e $z = L$, al contrario nelle regioni intermedie il raccordo è abbastanza significativo ed in particolare per densità superficiali alte: l'unica distinzione da fare è che KS presenta leggere oscillazioni, sempre dovute alla presenza delle

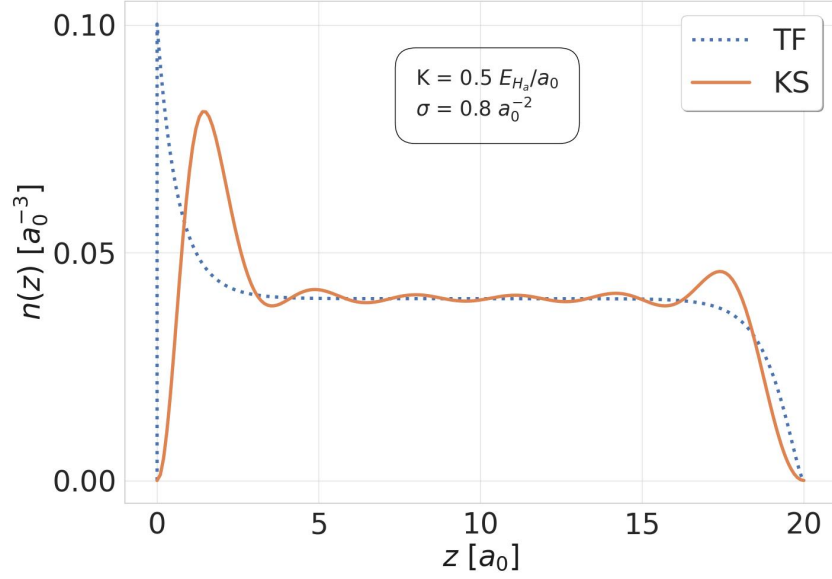


Figura 1: Confronto distribuzioni spaziali della densità elettronica in approssimazione di TF e KS a fissati $K = 0.5 \frac{E_{H_s}}{a_0}$ e $\sigma = 0.8 a_0^{-2}$

superfici, della densità elettronica, che invece in TF è pressoché uniforme. In conclusione riassumiamo che l'obiettivo della tesi è quello di applicare la DFT nelle due approssimazioni di TF e KS al particolare gas elettronico considerato, realizzare due programmi che permettano di risolverne le equazioni in maniera auto-consistente e poi confrontare i risultati delle due simulazioni indagandone analogie e differenze.