

Perhitungan struktur elektronik berdasarkan teori fungsional kerapatan dengan fungsi basis Lagrange: Implementasi awal

Fadjar Fathurrahman

Pusat Penelitian Nanosains dan Nanoteknologi, Institut Teknologi Bandung

This is the abstract.

I. PENDAHULUAN

Peran komputasi dalam nanosains dan nanoteknologi. Teori fungsional kerapatan (*density functional theory*). Peran teori fungsional kerapatan

II. TEORI

[1, 2],

$$E[\rho(\mathbf{r})] = -\frac{1}{2} \sum_i f_i \int d\mathbf{r} \psi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \psi_i(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + E_{\text{xc}}[\rho(\mathbf{r})] \quad (1)$$

LDA XC:

$$E_{\text{xc}}[\rho(\mathbf{r})] = \int d\mathbf{r} \varepsilon_{\text{xc}}(\rho(\mathbf{r})) \rho(\mathbf{r}) \quad (2)$$

$$V_{\text{xc}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\text{xc}}(\rho(\mathbf{r})) + \rho(\mathbf{r}) \frac{d\varepsilon_{\text{xc}}(\rho)}{d\rho} \quad (3)$$

Persamaan sentral pada teori fungsional kerapatan adalah persamaan Kohn-Sham yang dapat ditulis sebagai berikut.

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{\text{Ha}}(\mathbf{r}) + V_{\text{xc}}(\mathbf{r}) + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (4)$$

Suku potensial pertama pada persamaan (4), $V_{\text{Ha}}(\mathbf{r})$ menyatakan potensial Hartree,

$$V_{\text{Ha}}(\mathbf{r}) = \int \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \quad (5)$$

dengan $\rho(\mathbf{r})$ adalah kerapatan (muatan) elektron yang dapat ditulis sebagai

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i f_i \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) \quad (6)$$

Suku potensial ketiga adalah $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ yang menyatakan potensial eksternal yang dirasakan oleh elektron.

III. FUNGSI BASIS LAGRANGE

Untuk suatu interval $[0, L_\alpha]$ yang diberikan, dengan $L_\alpha > 0$, titik grid x_α sesuai untuk fungsi basis Lagrange

Berdasarkan teori fungsional kerapatan, energi total dari sistem yang terdiri dari elektron yang berinteraksi dengan suatu potensial eksternal $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$ dapat dinyatakan sebagai

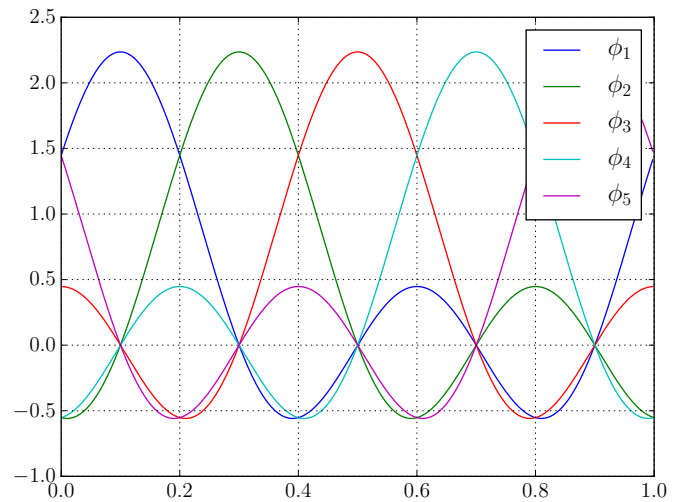
periodik dapat dinyatakan dengan persamaan berikut.

$$x_\alpha = \frac{L_\alpha}{2} \frac{2\alpha - 1}{N_\alpha} \quad (7)$$

Fungsi basis Lagrange periodik yang akan digunakan memiliki bentuk sebagai berikut.

$$\phi_\alpha(x) = \frac{1}{\sqrt{N_\alpha L_\alpha}} \sum_{n_\alpha=1}^{N_\alpha} \cos \left[\frac{\pi}{L_\alpha} (2n_\alpha - N_\alpha - 1)(x - x_\alpha) \right] \quad (8)$$

Test



Sembarang fungsi periodik $f(x) = f(x + L_\alpha)$ dapat

diekspansi dalam fungsi basis Lagrange

$$f(x) = \sum_{\alpha}^{N_{\alpha}} c_{\alpha} \phi_{\alpha}(x) \quad (9)$$

dengan c_{α} adalah koefisien ekspansi. Nilai fungsi $f(x)$ pada titik grid x_{α} dapat diperoleh langsung dari koefisien ekspansi melalui hubungan $c_{\alpha} = \sqrt{L_{\alpha}/N_{\alpha}} f(x_{\alpha})$.

Ekspansi persamaan Kohn-Sham dengan fungsi basis Lagrange:

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\beta\gamma} C_{\alpha\beta\gamma}^i \Phi_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r}) \quad (10)$$

dengan fungsi basis [3]

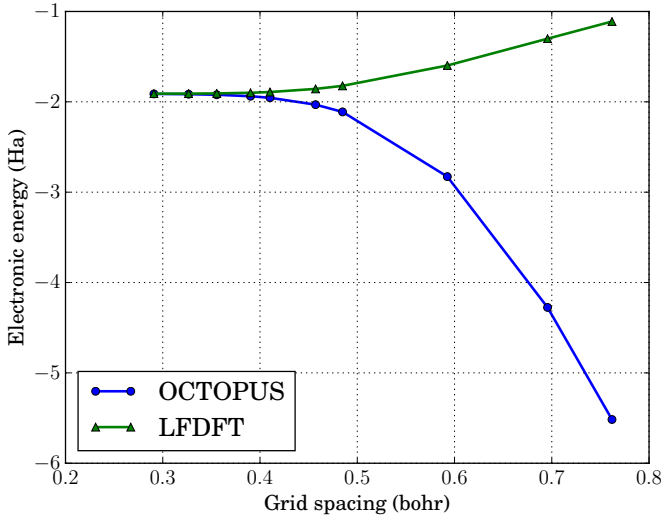
$$\Phi_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r}) = \phi_{\alpha}(x)\phi_{\beta}(y)\phi_{\gamma}(z) \quad (11)$$

IV. PERHITUNGAN

Fortran90: diuji dengan menggunakan kompiler berikut: GFortran, g95, ifort, pgi, dan Sun

Potensial eksternal berupa fungsi Gaussian:

$$V_{\text{ext}}(r) = A \exp(-\alpha r^2) \quad (12)$$



Menggunakan bagian lokal dari pseudopotensial HGH

$$V_{\text{ext}}(r) = -\frac{Z_{\text{ion}}}{r} \text{erf}\left(\frac{\bar{r}}{\sqrt{2}}\right) + \exp\left[-\frac{1}{2}\bar{r}^2\right] \times [C_1 + C_2\bar{r}^2 + C_3\bar{r}^4 + C_4\bar{r}^2] \quad (13)$$

dengan $\bar{r} = r/r_{\text{loc}}$

Contoh molekul diatomik: H₂ dan LiH

Visualisasi orbital molekul

V. KESIMPULAN

Implementasi

- [1] S. Choi, K. Hong, J. Kim, and W. Y. Kim, J. Chem. Phys. **142**, 094116 (2015).
 [2] S. Choi, O.-K. Kwon, J. Kim, and W. Y. Kim, J. Comput. Chem. **XX**, XX (2016).

- [3] D. Baye, Physics Reports **565**, 1 (2015).

