

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

Fadjar Fathurrahman

1 Pendahuluan

Peran komputasi dalam nanosains dan nanoteknologi.

Teori fungsional kerapatan (*density functional theory*).

Peran teori fungsional kerapatan

2 Teori

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

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

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

3 Implementasi

Ekspansi persamaan Kohn-Sham dengan fungsi basis Lagrange:

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha\beta\gamma} C_{\alpha\beta\gamma}^i \Phi_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r}) \quad (7)$$

dengan fungsi basis

$$\Phi_{\alpha\beta\gamma}(\mathbf{r}) = \phi_{\alpha}(x) \phi_{\beta}(y) \phi_{\gamma}(z) \quad (8)$$

4 Perhitungan

Potensial eksternal berupa fungsi Gaussian:

$$V_{\text{ext}}(r) = A \exp(-\alpha r^2) \quad (9)$$