**Pengembangan Perangkat Lunak untuk Perhitungan Struktur Elektronik dengan Fungsi Basis Lagrange**

Fadjar Fathurrahman, Hermawan K. Dipojono

*Teknik Fisika, Institut Teknologi Bandung*

*Pusat Penelitian Nanosains dan Nanoteknologi, Institut Teknologi Bandung*

**ABSTRAK**

Perhitungan struktur elektronik merupakan salah satu pendekatan yang dapat dilakukan untuk mempelajari struktur material, terutama dalam skala nano di mana elektron dapat berperan dominan dalam menentukan sifat material. Salah satu metode struktur elektronik yang sering digunakan berdasarkan pada teori fungsional kerapatan (*density functional theory*) dan persamaan Kohn-Sham. Dalam implementasi perhitungan struktur elektronik, fungsi gelombang dari elektron perlu direpresentasikan dalam bentuk diskritisasi atau ekspansi fungsi basis. Beberapa perangkat lunak yang populer, misalnya Quantum Espresso dan Gaussian09, menggunakan fungsi basis seperti gelombang bidang dan gaussian. Beberapa perangkat lunak lain seperti Octopus dan GPAW menggunakan diskritisasi beda hingga (*finite-difference*). Dalam artikel ini akan dilaporkan mengenai implementasi awal dari perangkat lunak yang kami kembangkan untuk perhitungan struktur elektronik berdasarkan teori fungsional kerapatan dengan menggunakan fungsi basis Lagrange. Penggunaan fungsi basis ini terhadap persamaan Kohn-Sham menghasilkan struktur yang mirip dengan metode *finite-difference*. Beberapa implementasi metode untuk solusi persamaan Kohn-Sham yakni SCF (*self-consistent field*) dan DM (*direct minimization)* juga akan dilaporkan. Perbandingan juga dilakukan dengan metode *finite-difference* yang diimplementasikan pada Octopus untuk beberapa sistem sederhana. Hasil perbandingan menunjukkan bahwa fungsi basis Lagrange memiliki konvergensi yang lebih baik.

**Kata kunci**: teori fungsional kerapatan, persamaan Kohn-Sham, fungsi basis Lagrange, metode beda hingga