

Struktur Pita Elektronik dan Spektroskopi Fotoelektron

Fadjar Fathurrahman

1 Pendahuluan

Signifikansi struktur pita elektronik

2 Energi dan fungsi gelombang Kohn-Sham

Untuk suatu konfigurasi inti atom yang diberikan, DFT dapat menghitung total energi dari sistem elektron, E , serta kerapatan elektron, $n(\mathbf{r})$, pada keadaan dasar. Persamaan Kohn-Sham dapat dituliskan sebagai:

$$-\frac{1}{2}\nabla^2\phi_i(\mathbf{r}) + V_{\text{tot}}(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\phi_i(\mathbf{r}) \quad (1)$$