

INTISARI

METODE LANGSUNG KALKULUS VARIASI PADA MODEL THOMAS-FERMI DAN PERLUASANNYA

Oleh

SITI WAHYUNI

11/324439/SPA/00385

Teori Fungsional Kerapatan (*Density Functional Theory*) merupakan suatu metode yang digunakan untuk menemukan struktur elektronik atom hanya dengan menggunakan kerapatan elektron pada keadaan dasar. Model Thomas-Fermi (TF) menjadi generasi awal perkembangan teori ini. Penggabungan model TF dan perluasannya oleh Dirac dan von Weizsäcker memunculkan model Thomas-Fermi-Dirac-von Weizsäcker (TFDW). Kerapatan elektron pada keadaan dasar terkait dengan pememinim (*minimizer*) fungsional energi sistem fisis yang dikaji. Profil kerapatan tersebut dapat diperoleh secara langsung melalui analisis fungsional energi sistem fisis terkait tanpa menyentuh persamaan Euler-Lagrange. Metode tersebut dikenal sebagai metode langsung kalkulus variasi. Penerapan metode langsung pada suatu sistem elektron dalam penelitian ini menghasilkan suatu fungsi yang disebut sebagai fungsi payung. Fungsi ini berperan sebagai batas atas pememinim, yang berarti bahwa kerapatan elektron keadaan dasar selalu berada di bawah fungsi payung. Penelitian ini menghasilkan kesesuaian yang bagus dengan metode pendekatan lain yang sudah dikenal luas, yaitu pendekatan kerapatan lokal (*Local Density Approximation*). Secara umum disimpulkan bahwa fungsi payung ini dapat dipakai untuk memperkirakan profil kerapatan elektron keadaan dasar asalkan diketahui fungsional energi sistem fisis terkait. Sebagai contoh penerapan fungsi payung ditinjau sistem fisis keberadaan elektron yang diinjeksikan ke dalam suatu kristal. Fungsional energi model TFDW dalam kasus ini dikembangkan dengan melibatkan potensial akibat elektron 'pribumi' pada kristal NaCl. Selain penerapan pada model TFDW tersebut, kajian pememinim yang lain dilakukan pada sistem elektron kuantum dot dua dimensi.

Kata-kata kunci: Teori Fungsional Kerapatan, model Thomas-Fermi, metode langsung, kalkulus variasi, pememinim, fungsi payung.

ABSTRACT

DIRECT METHOD OF THE CALCULUS OF VARIATION ON THE THOMAS-FERMI MODEL AND ITS EXTENSIONS

By

SITI WAHYUNI

11/324439/SPA/00385

Density Functional Theory (DFT) is a method used to find the electronic structure of atoms using only the ground state electron density. Thomas-Fermi (TF) model is the earliest generations of this theory. The extension of TF models by Dirac and von Weizsäcker gave rise to the Thomas-Fermi-Dirac-von Weizsäcker (TFDW) model. The ground state electron density is associated with the minimizer of the energy functional of the physical system under consideration. The density profile can be obtained directly through analyze the energy functional, without 'touching' the Euler-Lagrange equation. This method known as the direct method of the calculus of variations. The application of the direct method of calculus of variation to a physical system yields here the so-called umbrella function. This function bounds the minimizer from above, which means that the ground state electron density is always under the umbrella function. This method gives a good agreement with other approaches, like the Local Density Approximation (LDA). Generally, it concluded that this umbrella function can be used to estimate the ground state electron density profiles as long as the energy functional of the physical system is known. As a concrete example for the application of the method to physical system, we investigated the density of electrons injected in NaCl crystal. The TFDW energy functional in this study is extended in which the potential due to the internal electrons in NaCl crystal is taken into account. Another application of the method is the investigation of the density of electrons in two dimensional quantum dot.

Keywords: Density Functional Theory, Thomas-Fermi model, direct method, calculus of variation, minimizer, umbrella function.