

PROFIL DENSITAS MODEL THOMAS-FERMI-DIRAC-VON WEIZSACKER

Siti Wahyuni

Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Semarang
Email: yunibr@yahoo.com

Abstrak. Model Thomas-Fermi-Dirac-von Weizsacker merupakan perluasan dari model Thomas-Fermi dengan menambahkan koreksi suku *exchange* dan koreksi gradien energi kinetik. Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah Metode Langsung (*Direct Methods*). Penerapan metode ini dalam Teori Fungsional Densitas berarti bahwa profil densitas pada keadaan dasar dapat diperoleh secara langsung melalui analisis fungsional energi sistem terkait, tanpa menyentuh persamaan Euler-Lagrange, seperti yang sudah biasa dilakukan. Penerapan pada kristal NaCl menghasilkan gambaran batas atas *minimizer* yang berupa suatu fungsi sehingga disebut sebagai fungsi payung.

Kata kunci: fungsional energi, metode langsung, *minimizer*, fungsi payung.

PENDAHULUAN

Teori Fungsional Densitas (TFD) pada awalnya dikembangkan untuk sistem-sistem kuantum. Pada tahun 1927, sekitar dua tahun setelah Schroedinger menemukan mekanika gelombang, L.H. Thomas dan E. Fermi mengemukakan sebuah teori. Teori ini memberikan suatu bentuk fungsional energi total suatu sistem gas elektron yang saling maupun tidak saling berinteraksi, dalam suatu potensial luar tertentu, sebagai fungsi kerapatan (densitas). Fungsional ini bersifat lokal dan didasarkan pada pendekatan semi-klasik. Untuk sistem gas elektron yang homogen, teori ini memberikan hasil yang eksak.

Pada tahun 1964, TFD pertama kali digagas dan dibuktikan eksistensinya oleh P. Hohenberg dan Walter Kohn, yang mempelajari struktur elektron [1]. Hasil kerja ini dikenal sebagai teorema Hohenberg-Kohn (HK). Namun, yang dihasilkan masih sebatas konsep, belum berada pada tataran terapan. Selanjutnya, skema Kohn-Sham dikenalkan pada tahun 1965 [2]. Dengan adanya formalisme yang dihasilkan Kohn-Sham ini, TFD semakin dikenal luas dan berkembang pesat.

Pada awalnya, TFD Hohenberg-Kohn ini diusulkan untuk memecahkan masalah menemukan energi keadaan dasar N buah partikel melalui prinsip variasi. Kemudian teori

ini berkembang pesat sampai saat ini. Beberapa penelitian terakhir di antaranya [3] dan [4].

Masalah kalkulus variasi seringkali diselesaikan dengan menyelesaikan persamaan Euler-Lagrange. Namun, ada cara lain yaitu menggunakan metode langsung. Metode langsung berisi pembuktian keberadaan minimizer dari fungsional integral tanpa melalui persamaan Euler-Lagrange, tetapi menarik kesimpulan secara langsung dari sifat-sifat fungsional, ditinjau sebagai pemetaan dari suatu manifold ke himpunan bilangan riil \mathbb{R} . Metode langsung ini lahir untuk mengatasi keterbatasan yang diakibatkan oleh kesulitan dalam memecahkan persamaan secara eksplisit dalam kasus yang melibatkan integral berdimensi lebih tinggi. Jadi, dengan hanya menganalisis fungsional energi sistem fisis terkait, dapat diperoleh sifat-sifat sistem fisis tersebut.

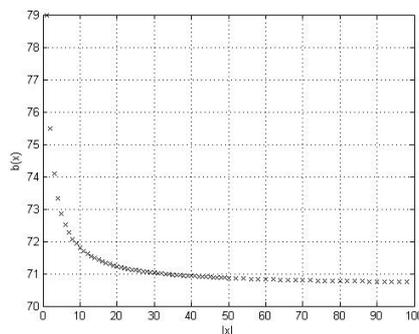
Kajian ini membahas penerapan metode langsung pada model Thomas-Fermi-Dirac-von Weizsacker. Lu dan Otto [5] mendapatkan bahwa jika jumlah elektron melebihi suatu bilangan positif tertentu, maka pada sistem tersebut tidak ditemukan adanya *minimizer*. Fenomena ini ditemukan pada kajian fungsional energi model Thomas-Fermi-Dirac-von Weizsacker tanpa melibatkan potensial luar. Selain itu, diperoleh pula perkiraan nilai *minimizer* berada pada selang 0 sampai dengan $(4/5)_3$.

Kemudian, Wahyuni dkk. [6] menyelidiki *minimizer* pada model Thomas-Fermi-Dirac-von Weizsacker dengan melibatkan potensial luar. Diperoleh perkiraan fungsi *minimizer* berada pada selang 0 sampai dengan suatu fungsi. Fungsi ini disebut sebagai fungsi payung karena fungsi ini menjadi batas atas bagi *minimizer*. Jadi, nilai *minimizer* tidak akan melebihi fungsi payung tersebut. Fungsi payung diperoleh dalam bentuk:

$$b(x) = \frac{\sqrt{16 - 60|x|}}{10}$$

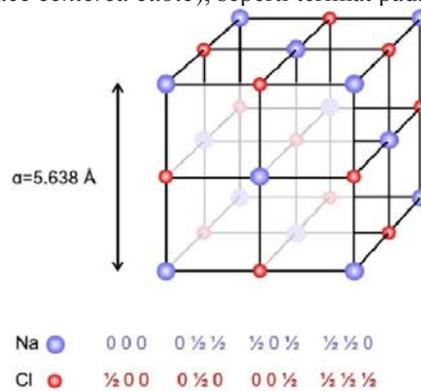
dengan V adalah potensial luar.

Dalam kasus potensial luar berupa potensial Coulomb sederhana, diperoleh gambaran *minimizer* seperti ditunjukkan pada Gambar 1 berikut ini:



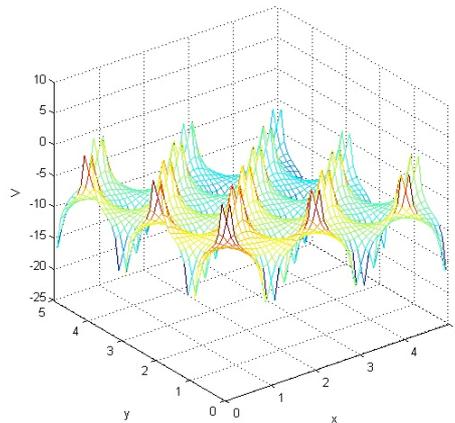
Gambar 1. Fungsi payung untuk kasus potensial Coulomb sederhana.

Fungsi payung yang sudah dihasilkan pada [6] selanjutnya diterapkan pada Kristal NaCl. Sel satuan kristal ini berbentuk kubus terpusat sisi (*face centered cubic*), seperti terlihat pada Gambar 2.



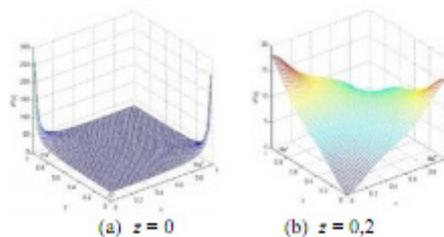
Gambar 2. Sel satuan NaCl

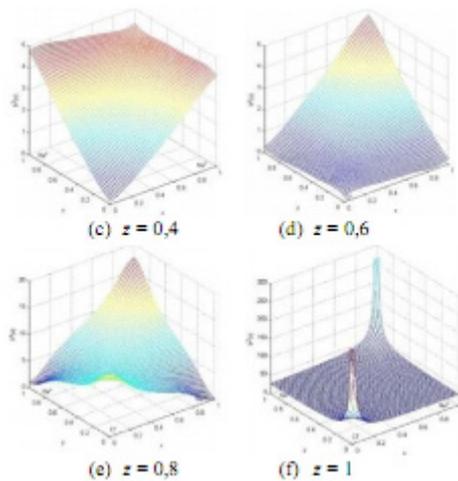
Adapun potensial yang timbul pada Kristal NaCl dapat dilihat pada Gambar 3.



Gambar 3. Potensial Kristal NaCl

Selanjutnya, penerapan fungsi payung tersebut sudah dicoba pada fisika kristal, yaitu dipilih kristal NaCl [7,8]. Diperoleh gambaran fungsi payung di antaranya yaitu seperti tampak pada Gambar 2.





Gambar 4. Fungsi payung untuk potensial Kristal NaCl

Salah satu pengembangan yang dilakukan dalam penelitian ini adalah adaptasi model TFDW dengan penambahan potensial yang diakibatkan oleh densitas elektron pribumi (elektron-elektron yang sudah berada dalam atom-atom kristal) [9]. Potensial yang timbul didefinisikan sebagai

$$\bar{V}(\mathbf{x}) = \int_{\mathbf{R}^3} \frac{\rho_p(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d^3\mathbf{y},$$

dengan ρ_p adalah densitas elektron pribumi. Adanya elektron asing yang masuk ke dalam struktur kristal akan menimbulkan interaksi elektrostatik dengan elektron-elektron pribumi menurut

$$\begin{aligned} \bar{D}(\rho_p, \rho) &= \int_{\mathbf{R}^3} \bar{V}(\mathbf{x})\rho(\mathbf{x})d^3\mathbf{x} \\ &= \int_{\mathbf{R}^3} \int_{\mathbf{R}^3} \frac{\rho_p(\mathbf{y})\rho(\mathbf{x})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d^3\mathbf{x} d^3\mathbf{y}. \end{aligned}$$

Adapun penentuan densitas elektron pribumi tidak terlepas dari suatu faktor yang dikenal sebagai faktor struktur.

Terdapat beberapa faktor yang memengaruhi intensitas sinar X pada pola difraksi. Salah satunya faktor yang hanya bergantung pada struktur kristal disebut sebagai faktor struktur. Faktor struktur ini dapat dinyatakan dalam suku-suku yang dikandung oleh satu sel satuan sebagai

$$F(hkl) = \sum_{j=1}^N f_j e^{2\pi i(hx_j + ky_j + lz_j)}.$$

Posisi atom ke- j diberikan oleh koordinat (x_j, y_j, z_j) , mempunyai faktor hamburan f_j dan

terdapat N buah atom dalam sel. Faktor struktur dihitung dalam jumlah elektron; yaitu memberikan deskripsi matematis dari suatu pola difraksi. Setiap faktor struktur mewakili suatu cahaya yang terdifraksi dengan amplitudo $|F(hkl)|$ dan fase relatif $\varphi(hkl)$. Adapun densitas elektron dinyatakan dalam faktor struktur sebagai

$$\rho(xyz) = \frac{1}{V} \sum_{hkl} F(hkl) \exp[-2\pi i(hx + ky + lz)],$$

Adapun perhitungan faktor hamburan atom f_{Na^+} dan f_{Cl^-} tidak terlepas dari hukum Bragg

$$\lambda = 2d \sin \theta,$$

dengan d untuk kristal berbentuk kubus yaitu

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}.$$

Kemudian, hasil perhitungan dibandingkan dengan data pada Tabel Internasional untuk Kristalografi (*International Tables for Crystallography*), untuk kemudian dihitung dengan interpolasi. Hasil lengkap perhitungan tampak pada Tabel 1 dan Tabel 2.

Tabel 1. Perhitungan faktor hamburan Na dan Cl pada semua bidang Miller yang mungkin

Bragg	f Na+	f Cl-	No	h	k	l	dhkl	Bragg	f Na+	f Cl-
0.15	9.026	13.747	1	1	1	1	3.255	0.154	8.982	13.611
0.16	8.904	13.371	2	2	0	0	2.819	0.177	8.681	12.746
0.17	8.777	13.006	3	2	2	0	1.993	0.251	7.633	10.560
0.18	8.647	12.653	4	2	2	2	1.628	0.307	6.787	9.401
0.25	7.646	10.58	5	3	1	1	1.700	0.294	6.982	9.637
0.26	7.496	10.343	6	3	3	1	1.293	0.387	5.651	8.306
0.28	7.195	9.908	7	3	3	3	1.085	0.461	4.719	7.610
0.30	6.894	9.524	8	4	0	0	1.410	0.355	6.093	8.684
0.32	6.597	9.184	9	4	2	0	1.261	0.397	5.516	8.198
0.35	6.16	8.746	10	4	2	2	1.151	0.434	5.033	7.835
0.36	6.018	8.616	11	4	4	0	0.997	0.502	4.274	7.293
0.38	5.739	8.377	12	4	4	2	0.940	0.532	3.981	7.074
0.40	5.471	8.162	13	5	1	1	1.085	0.461	4.719	7.610
0.42	5.212	7.965	14	5	3	1	0.953	0.525	4.052	7.127
0.44	4.964	7.785	15	6	0	0	0.940	0.532	3.981	7.074
0.46	4.728	7.616								
0.48	4.503	7.457								
0.50	4.29	7.305								
0.55	3.808	6.945								

Tabel 2. Hasil perhitungan Faktor Struktur untuk semua bidang Miller yang mungkin

h+k+l	k+l	h+l	h+k	e1	e2	e3	e4	F_hkl
3	2	2	2	-1	1	1	1	-18.518
2	0	2	2	1	1	1	1	85.709
4	2	2	4	1	1	1	1	72.775
6	4	4	4	1	1	1	1	64.753
5	2	4	4	-1	1	1	1	-10.617
7	4	4	6	-1	1	1	1	-10.622
9	6	6	6	-1	1	1	1	-11.563
4	0	4	4	1	1	1	1	59.109
6	2	4	6	1	1	1	1	54.860
8	4	6	6	1	1	1	1	51.470
8	4	4	8	1	1	1	1	46.267
10	6	6	8	1	1	1	1	44.218
7	2	6	6	-1	1	1	1	-11.563
9	4	6	8	-1	1	1	1	-12.301
6	0	6	6	1	1	1	1	44.218

Oleh karena itu, jika hasil-hasil tersebut dimasukkan dalam persamaan densitas elektron, maka akan diperoleh densitas elektron pribumi dalam bentuk komponen riil dan imajiner terpisah, seperti tampak pada Tabel 3.

Tabel 3. Daftar komponen riil dan imajiner dari persamaan densitas elektron pribumi

No	hkl	Bagian riil	Bagian Imajiner
1	(111)	$-18,518 \cos 2\pi(x + y + z)$	$18,518 \sin 2\pi(x + y + z)$
2	(200)	$85,709 \cos 4\pi x$	$-85,709 \sin 4\pi x$
3	(220)	$72,775 \cos 4\pi(x + y)$	$-72,775 \sin 4\pi(x + y)$
4	(222)	$64,753 \cos 4\pi(x + y + z)$	$-64,753 \sin 4\pi(x + y + z)$
5	(311)	$-10,617 \cos 2\pi(3x + y + z)$	$10,617 \sin 2\pi(3x + y + z)$
6	(331)	$-10,622 \cos 2\pi(3x + 3y + z)$	$10,622 \sin 2\pi(3x + 3y + z)$
7	(333)	$-11,563 \cos 6\pi(x + y + z)$	$11,563 \sin 6\pi(x + y + z)$
8	(400)	$59,109 \cos 8\pi x$	$-59,109 \sin 8\pi x$
9	(420)	$54,860 \cos 4\pi(2x + y)$	$-54,860 \sin 4\pi(2x + y)$
10	(422)	$51,470 \cos 4\pi(2x + y + z)$	$-51,470 \sin 4\pi(2x + y + z)$
11	(440)	$46,267 \cos 8\pi(x + y)$	$-46,267 \sin 8\pi(x + y)$
12	(442)	$44,218 \cos 4\pi(2x + 2y + z)$	$-44,218 \sin 4\pi(2x + 2y + z)$
13	(511)	$-11,563 \cos 2\pi(5x + y + z)$	$11,563 \sin 2\pi(5x + y + z)$
14	(531)	$-12,301 \cos 2\pi(5x + 3y + z)$	$12,301 \sin 2\pi(5x + 3y + z)$
15	(600)	$44,218 \cos 12\pi x$	$-44,218 \sin 12\pi x$

SIMPULAN DAN SARAN

Simpulan

Berikut kesimpulan yang diperoleh pada penelitian ini antara lain telah diberikan contoh penerapan metode langsung ini pada bidang Fisika Kristal dengan menyelidiki *minimizer* kekisi kristal NaCl dalam model Thomas-Fermi- Dirac-von Weizsäcker. Dengan visualisasi Matlab, dapat dilihat potensial kristal NaCl. Ditunjukkan estimasi *minimizer* pada NaCl, yaitu dibatasi dari atas oleh fungsi payung. Pengembangan model ini diperoleh dengan melibatkan densitas elektron pribumi. Densitas tersebut berperan juga dalam menyumbang potensial Kristal, dan tentu saja ikut mengubah fungsional energi sistem.

DAFTAR PUSTAKA

- Hohenberg, P., dan Kohn, W., Inhomogeneous Electron Gas, *Physical Review*, Volume 136, Number 3B, 9 November 1964, pp. B 864 – B 871.
- Kohn, W., dan Sham, L.J., Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, *Physical Review*, Volume 140, Number 4A, 15 November 1965, pp. A 1133 – A 1138.
- Mapasha, R.E., 2011, *Theoretical Studies of Graphene and Graphene-related Materials involving Carbon and Silicon*, University of Pretoria: tesis.
- Lin Lin, 2011, *Density Functional Theory and Nuclear Quantum Effects*, Princeton University: Disertasi.
- Lu, J., dan Otto, F., Nonexistence of a Minimizer for Thomas-Fermi-Dirac-von Weizsacker Model, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, DOI: 10.1002/cpa.21477 (2013).
- Wahyuni, S., Dwandaru, W.S.B, dan Rosyid, M.F., On the minimizer of the Thomas-Fermi-Dirac-von Weizsacker Model, *Journal of Physics: Conference Series*, **539**, 012015 (2014).
- Wahyuni, S., Dwandaru, W.S.B, dan Rosyid, M.F., Kajian Metode Langsung pada Teori Fungsional Densitas, *Jurnal Fisika*, Vol. 5 No. 2 Th. 2015.
- Wahyuni, S., Dwandaru, W.S.B, dan Rosyid, M.F., 2105, Estimation of the minimizer of the Thomas – Fermi – Dirac- von Weizsacker model of NaCl crystal lattice, dipresentasikan pada The 6th Asian Physics Symposium, Bandung, 19-20 Agustus 2015
- Wahyuni, S., Dwandaru, W.S.B, dan Rosyid, M.F., 2105, *The Influence of The NaCl Crystal Lattice Prior Density to The Thomas-Fermi-Dirac-von Weizsacker Functional*, draft.