

Density Profiles, energy, and oscillation strength of a quantum dot in two dimensions with a harmonic oscillator external potential using an orbital-free energy functional based on Thomas-Fermi theory

Suhufa Alfarisa, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20447949&lokasi=lokal>

Abstrak

This research aims i) to determine the density profile and calculate the ground state energy of a quantum dot in two dimensions (2D) with a harmonic oscillator potential using orbital-free density functional theory, and ii) to understand the effect of the harmonic oscillator potential strength on the electron density profiles in the quantum dot.

This study determines the total energy functional of the quantum dot that is a functional of the density that depends only

on spatial variables. The total energy functional consists of three terms. The first term is the kinetic energy functional,

which is the Thomas-Fermi approximation in this case. The second term is the external potential. The harmonic

oscillator potential is used in this study. The last term is the electron-electron interactions described by the Coulomb

interaction. The functional is formally solved to obtain the electron density as a function of spatial variables.

This equation cannot be solved analytically, and thus a numerical method is used to determine the profile of the electron

density. Using the electron density profiles, the ground state energy of the quantum dot in 2D can be calculated. The

ground state energies obtained are 2.464, 22.26, 90.1957, 252.437, and 496.658 au for 2, 6, 12, 20, and 56 electrons,

respectively. The highest electron density is localized close to the middle of the quantum dot. The density profiles

decrease with the increasing distance, and the lowest density is at the edge of the quantum dot. Generally, increasing the

harmonic oscillator potential strength reduces the density profiles around the center of the quantum dot.

Profil Kerapatan, Energi, dan Kuat Osilasi sebuah Kuantum Dot dalam Dua Dimensi dengan sebuah Potensial

Eksternal Osilator Harmonik menggunakan Fungsional Energi Bebas-orbital berdasarkan Teori Thomas-Fermi. Tujuan dari penelitian ini adalah: i) menentukan profil kerapatan dan menghitung energi keadaan dasar sebuah

kuantum dot dalam dua dimensi (2D) dengan sebuah potensial osilator harmonik menggunakan teori fungsional

kerapatan bebas-orbital, dan ii) memahami efek dari kekuatan potensial osilator harmonik terhadap kerapatan elektron dalam kuantum dot. Penelitian ini menentukan fungsional energi total kuantum dot yang merupakan fungsional dari kerapatan dan hanya bergantung pada variabel posisi. Fungsional energi total terdiri dari tiga suku. Suku pertama adalah fungsional energi kinetik yang dalam hal ini digunakan pendekatan Thomas-Fermi. Suku kedua adalah potensial eksternal. Dalam penelitian ini, potensial osilator harmonik yang digunakan. Suku terakhir adalah interaksi elektron-elektron yang dideskripsikan oleh interaksi Coulomb. Fungsional ini secara formal ditentukan solusinya untuk memperoleh kerapatan elektron sebagai fungsi posisi. Persamaan ini tidak dapat diselesaikan secara analitik, oleh karenanya, sebuah metode numerik digunakan untuk menentukan profil kerapatan elektron. Menggunakan profil kerapatan elektron yang diperoleh, energi keadaan dasar kuantum dot dalam 2D dapat dihitung. Nilai-nilai energi keadaan dasar yang diperoleh adalah 2,464; 22,26; 90,1957; 252,437; dan 496.658 au untuk masing-masing jumlah elektron 2, 6, 12, 20, dan 56. Kerapatan elektron tertinggi terlokalisasi pada bagian tengah kuantum dot. Profil kerapatan berkurang dengan bertambahnya jarak, dan kerapatan terendah berada pada ujung kuantum dot. Secara umum, meningkatkan kuat osilasi akan menurunkan profil kerapatan elektron di sekitar bagian tengah kuantum dot.