

Formulasi algoritma gw berbasis tight binding untuk graphene = Formulation of tight binding based gw algorithm for graphene

Ahmad Syahroni, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20387831&lokasi=lokal>

Abstrak

Permasalahan banyak benda (many-body) secara lengkap, dimana melibatkan interaksi elektron-ion dan interaksi elektron-elektron, merupakan permasalahan yang sulit untuk dipecahkan secara eksak. Pendekatan first-principles seperti Density Functional Theory (DFT) telah menjadi pilihan yang populer untuk mengamati band structure secara lengkap pada suatu material. Bagaimanapun juga, terlepas dari perumusannya yang telah mapan, hal itu tetap menjadi tantangan besar untuk menggunakan pendekatan DFT untuk mengamati efek yang disebabkan oleh korelasi yang kuat antara elektron secara benar. Saat ini telah diperkenalkan pendekatan yang menggabungkan DFT dengan pendekatan diagram Feynman, yang disebut metode GW, untuk mengoreksi efek dari interaksi antara elektron. Terlepas dari beberapa keberhasilan dari pendekatan GW berbasis DFT ini, pendekatan ini memiliki kekurangan yaitu tidak cukup eksibel untuk digunakan untuk memecahkan masalah dengan interaksi yang lain, seperti interaksi magnetik. Pada skripsi ini, kami memperkenalkan algoritma metode GW dalam kerangka tight-binding. Kami turunkan setiap langkah pada algoritma secara lengkap dengan menggunakan diagram Feynman dan konsep analytic continuation untuk mengekspresikan besaran-besaran fisika pada real frequency. Untuk tujuan tertentu, kami tertarik untuk menerapkan algoritma ini pada sistem graphene dengan harapan menggunakan metode ini untuk sifat optik sistem graphene dengan berbagai jenis interaksi tambahan dalam waktu mendatang.

.....

The full many-body problem in condensed-matter physics, in which electron-ion as well as electron-electron (e-e) interactions play crucial roles, is very tough to solve exactly. To explore the details of the band structure of the material, a first-principles approach such as Density Functional Theory (DFT) has become a popular choice. However, apart from its well-established formulation, it remains a big challenge to use such an approach to capture effects arising from strong correlations among the electrons correctly. Nowadays, an approach to combine DFT with a Feynman diagrammatic approach, so called the GW method, to address the effects of e-e interactions, has been introduced. Despite some successes of the DFT-based GW approach, there is an issue that this approach does not seem flexible enough to use for solving problems with other types of interactions, such as magnetic interactions. In this skripsi, we aim to introduce an algorithm of the implementation of GW method in the frame of tight-binding approximation. We rigorously derive each step in the algorithm with the aid of Feynman diagrams, and the concept of analytic continuation to express the physical quantities of interest in real frequency. For a particular purpose, we are interested to apply this algorithm to graphene in hope of using this method address optical properties of graphene systems with various kinds of additional interactions in the near future.