

Pemodelan berbasis tight binding untuk menjelaskan fenomena transisi metal-isolator pada VO₂ dan VO₂₋₈ dalam gambaran mott-hubbard = Tight binding based modeling to explain metal-insulator transition in VO₂ and VO₂₋₈ within mott-hubbard picture / Gerry Resmi Liyana

Gerry Resmi Liyana, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20411929&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Mekanisme terjadinya transisi metal-isolator (TMI) pada vanadium dioksida (VO₂) hingga saat ini masih diperdebatkan apakah disebabkan karena perubahan struktur atau korelasi elektron. Hasil studi sebelumnya yang menunjukkan bahwa fenomena tersebut muncul jauh di bawah suhu kritis ketika sedikit oksigen diambil dari VO₂ menjadi VO_{2-x}; memberikan dugaan bahwa efek screening dan korelasi elektron berperan dalam mekanisme TMI pada VO₂. Untuk mendemonstrasikan hal tersebut, kami mengkonstruksi Hamiltonian suku kinetik dengan skema tight binding dan suku interaksi antar elektron dengan pendekatan medan rata-rata untuk sistem tanpa dan dengan vakansi oksigen. Kemudian, menghitung rapat keadaan pada ke-dua sistem tersebut dengan menggunakan teknik fungsi Green. Hasil studi kami berhasil mendemonstrasikan peran oksigen terhadap kemunculan TMI pada VO₂ dalam gambaran Mott-Hubbard, di mana keadaan dasar ferromagnetik diperlukan untuk dapat bekerjanya skenario ini.

ABSTRACT

The mechanism of metal-insulator transition (MIT) in vanadium dioksida (VO₂) is still under debate whether it is due to the structural phase transition (Peierls distortion) or electron correlation. A previous study indicating that MIT appears far below the critical temperature of TC; 340 K when a small amount of oxygen is taken out the system suggested that oxygen screening and electronic correlations play a dominant role in MIT of VO₂. To demonstrate this mechanism, we construct a Hamiltonian with a kinetic part constructed within the tight-binding scheme and an interaction part treated within the mean-field approximation for the system without and with oxygen vacancies, and then calculate the density of states for both systems using green function technique. Our results successfully demonstrate the role of oxygens in MIT of VO₂ within Mott-Hubbard picture where ferromagnetic ground states are necessary for the scenario to work.