

Study of band structure renormalization of tight binding model semiconductor by incorporating gw self energy = Studi teoretis renormalisasi struktur pita energi semikonduktor model tight-binding dengan memperhitungkan gw self-energy

Altifani Rizky Hayyu, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20456428&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRACT

Current electronics technology still relies on semiconductors for several purposes. The special property that distinguishes a semiconductor from another material is band gap energy inside of which the Fermi energy is located. Most conventional semiconductors such as Ge, Si, or GaAs may be classified into none or weakly correlated systems in which electron-electron interactions do not play any significant role, where the band gaps are insensitive to temperature change. Meanwhile, in semiconductors containing transition metal elements having d orbitals in their valence and/or conduction bands, which we consider as strongly correlated semiconductors, e-e interactions may play a more significant role. We hypothesize that such kind of semiconductors would have band structures, including their band gaps, being rather sensitive to temperature change due to e-e interactions. We propose to explore this hypothesis theoretically by modeling the semiconductor band structure through Tight Binding Approximation with the GW method numerically in the Matsubara frequency domain. At the end, we use Pad approximant to obtain the self energy defined in the real frequency domain. Using this self energy we can calculate and analyze the Density Of States DOS at various temperatures, by giving the certain range of bare interaction line V . Our research results show that correlation effects become stronger as we decrease the temperature. In short ranged interaction confirms that the semiconductor band gap increases and chemical potential shifts to a higher energy. Whereas with long ranged interaction shows that the range of two bands semiconductor becomes farther apart as compared to the bare DOS.

ABSTRACT

Teknologi elektronik saat ini masih mengandalkan material semikonduktor untuk berbagai kebutuhan. Properti yang membedakan semikonduktor dari material lain adalah celah pita energi di mana energi Fermi berada di dalamnya. Umumnya semikonduktor seperti Ge, Si, atau GaAs dapat diklasifikasikan ke dalam sistem non terkorrelasi / terkorrelasi lemah di mana interaksi elektron-elektron e-e tidak memiliki peran penting, sehingga pita energinya mungkin tidak sensitif terhadap perubahan suhu. Sedangkan semikonduktor yang mengandung unsur logam transisi dan orbital d dalam pita valensi dan / atau pita konduksi dianggap sebagai semikonduktor terkorrelasi kuat, dimana interaksi e-e memainkan peran lebih signifikan. Kami berhipotesis bahwa jenis semikonduktor ini akan memiliki lebar celah pita yang agak sensitif terhadap perubahan suhu. Kami mengeksplorasi hipotesis ini secara teoritis dengan pemodelan struktur pita semikonduktor melalui pendekatan Tight-Binding, kemudian menerapkan interaksi e-e dalam metode GW secara numerik dalam domain frekuensi Matsubara. Setelah itu kami menggunakan Pad approximant untuk memperoleh self-energy yang didefinisikan dalam domain frekuensi riil. Dengan menggunakan self-energy ini kita dapat menghitung dan menganalisis Density Of States DOS seiring

dengan bertambahnya suhu, dengan memberikan variasi rentang dari bare interaction line V . Penelitian kami membuktikan bahwa efek-efek korelasi menjadi lebih kuat seiring menurunnya suhu. Untuk variasi interaksi rentang pendek, pita energi melebar dan potensial kimia semakin bergeser ke tingkat energi lebih tinggi. Sedangkan pada variasi interaksi rentang panjang, jarak antara dua pita energi semikonduktor semakin melebar jika dibandingkan dengan DOS murni.