

Studi teoretis pembentukan plasmon inkonvensional pada sistem nanopartikel melalui penyelesaian model hubbard 3D sistem terbatas dengan pendekatan medan rata-rata = Theoretical study of unconventional plasmons generation in nanoparticle systems by solving finite-Size 3D hubbard model within mean-field approximation

Dedi Prakasa, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20491224&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Studi eksperimen terkini pada sistem oksida stronsium niobat telah mengungkap kemunculan plasmon inkonvensional yang diakibatkan kungkungan bidang-bidang oksigen. Sebuah model fenomenologis yang menyertai data eksperimen pada studi tersebut telah mengindikasikan bahwa elektron yang terkungkung berperilaku sebagaimana osilator harmonik. Hal-hal tersebut memotivasi kami untuk mempelajari lebih lanjut efek kungkungan spasial terhadap elektron dalam pembentukan plasmon inkonvensional pada sistem terbatas. Dinamika elektron terkorelasi pada sistem ini dijelaskan menggunakan model Hubbard 3D untuk ukuran terbatas yang diselesaikan melalui pendekatan medan rata-rata. Kami mempelajari sistem kubus hipotetis yang terdiri dari $n \times n \times n$ atom berorbital tunggal dengan n adalah 3, 5, 7, dan 9. Kalkulasi dilakukan dengan dan tanpa memperhitungkan repulsi Coulomb on-site Kami juga mempertimbangkan sistem diperpanjang sebagai pembandingan untuk mengetahui efek kungkungan. Perhitungan kami menunjukkan bahwa plasmon inkonvensional terbentuk hanya jika kita memperhitungkan efek kungkungan dan repulsi Coulomb on-site.

ABSTRACT

Recent experimental study on strontium niobate oxide system has revealed unconventional plasmons generation due to confinement by oxygen planes. A phenomenological model accompanied the experimental data on that study has suggested that the confined electrons behave as harmonic oscillators. These motivate us to further study the effect of space confinement to the electrons on the generation of the unconventional plasmons in a finite-size system. The dynamics of the correlated electrons in this confined system is described using the finite-size 3D Hubbard model that is solved within mean-field approximation. We study a hypothetical cubic systems that consist of $n \times n \times n$ single-orbital atoms with n being 3, 5, 7, and 9. The calculation is done with and without incorporating the on-site Coulomb repulsion. We also consider extended system as a comparison to know the effect of confinement. Our calculations show that unconventional plasmons are observed only if we take into account both the confinement effect and the on-site Coulomb repulsion.