

Investigasi hamiltonian minimal sistem material dengan sifat anisotropik transpor dan optik yang sangat tinggi = Investigation on minimal hamiltonian for system of material with highly anisotropic transport and optical properties

Bayu Aditya, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20499642&lokasi=lokal>

Abstrak

Sebuah studi eksperimental baru-baru ini pada $\text{Sr}_{(1-y)}\text{NbO}_{(3+)}$ mengungkapkan bahwa terdapat material yang memiliki sifat anisotropi yang sangat tinggi dalam sifat-sifat transpor dan optis material. Material tersebut berperilaku sebagai konduktor pada sumbu kristal a, tetapi berperilaku sebagai insulator pada sumbu kristal b dan c. Kami berhipotesis bahwa sifat anisotropi terjadi karena adanya susunan unik orbital yang terjadi pada atom tertentu dan memiliki kontribusi tinggi di sekitar energi Fermi. Untuk mengetahui orbital yang paling berkontribusi tersebut, kami melakukan perhitungan density functional theory (DFT) dan mengekstrak parameter tight-binding untuk membangun matriks hamiltoniannya. Selanjutnya, kami mereduksi orbital yang memiliki kontribusi rendah pada rentang energi di sekitar energi Fermi, sampai kami mendapatkan Hamiltonian minimal yang masih membawa karakteristik anisotropik yang kuat. Hasil mengungkapkan bahwa yang menyebabkan material menjadi logam adalah atom yang jauh dari interface, dan interface tersebut yang memisahkan setiap 5 lapisan pada rantai-rantai oktahedral NbO_6 menyebabkan material menjadi insulator. Berdasarkan bentuk hamiltonian minimal, kita dapat menyarankan kepada kristalografer bentuk lain dari struktur kristal yang memiliki sifat anisotropik serupa.

.....A recent experimental study on $\text{Sr}_{(1-y)}\text{NbO}_{(3+)}$ revealed that the material has very high anisotropy in its transport and optical response characteristics. The material behaves as a conductor in the a-axis, but as an insulator in the b and c crystal axes. We hypothesize that the strong anisotropy occurs because of the unique arrangement of orbitals of certain atoms around the Fermi level. To find out the most contributing orbitals, we do density functional theory (DFT) calculation and map the results to construct a multi-band tight-binding Hamiltonian. We remove the orbitals that have low contribution to the main feature of the band structure around the Fermi level, until we obtain a minimal Hamiltonian that still carries the strong anisotropic characteristic. Our results reveal that causes the material to be metal are atoms that are far from the interface, and the interface that separated the chain-like octahedral NbO_6 for every 5 layers causes the material to become an insulator. And based on minimal Hamiltonian, we can suggest other forms of crystal structure that have anisotropic properties to the crystallographer.