

Investigation on Minimal Hamiltonian for System of Material with Highly Anisotropic Transport and Optical Properties

Bayu Aditya^{1,b)} and Muhammad Aziz Majidi^{1,a)}

¹*Department of Physics, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Indonesia, Kampus UI Depok, Indonesia*

^{a)}Corresponding author: aziz.majidi@sci.ui.ac.id

^{b)}bayu.aditya@sci.ui.ac.id

Abstract. Pada penelitian di Departemen Fisika, National University Singapore (NUS) terhadap material Sr1-yNbO3+delta mengungkapkan bahwa material tersebut memiliki karakteristik anisotropik yang sangat tinggi, yaitu bersifat konduktor di sumbu kristal a, dan bersifat insulator di sumbu kristal b dan c. Hal tersebut terjadi karena adanya kontribusi dari orbital pada atom tertentu yang membuat material tersebut bersifat anisotropik. Untuk mengetahui orbital yang berkontribusi tersebut, kami merekonstruksi hamiltonian Tight-Binding multiband dan mereduksi orbital-orbital yang berdampak lemah pada daerah sekitar fermi level, sehingga akan didapat hamiltonian minimal yang memiliki karakteristik anisotropik. Hasil menunjukkan bahwa orbital-d pada atom Nb tertentu memiliki kontribusi pada material sehingga bersifat anisotropik.

INTRODUCTION

Do not abbreviate Figure, Equation, etc.; display items are always singular, i.e., Figure 1 and 2. Equations are always singular, i.e., Equation 1 and 2, and should be inserted using the Equation Editor, not as graphics, in the main text. Display items and captions should be inserted after the reference section. Please do not use footnotes in the text, additional information can be added to the reference list.

This is the paragraph spacing that occurs when you use the [ENTER] key.

MODEL

Perbedaan material SrNbO3 dengan SrNbO3,4 adalah adanya tambahan atom oksigen di setiap 5 layer [1]. Karena terdapat tambahan oksigen tersebut maka terdapat jarak yang renggang dan membentuk 3 grup di sebelah kiri, tengah, dan kanan gambar 1.

Kami memodelkan sistem material SrNbO3,4 dengan persamaan hamiltonian Tight-Binding multiband,

$$H_{ij}(\vec{k}) = \frac{1}{N} \sum_{ij} \sum_{nm} \sum_{\alpha\beta} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_{in} - \vec{r}_{jm})} t_{in\alpha, jm\beta}$$

dengan asumsi elektron hopping dari orbital i ke j , atom n ke m , dan unit cell α ke β sebanyak N unit cell. Posisi elektron di orbital i dan atom n berada di r_{in} , dan elektron di orbital j dan atom m berada di r_{jm} . Momentum yang dimiliki elektron sebesar \vec{k} . Sedangkan $t_{in\alpha, jm\beta}$ merupakan parameter hopping pada elektron.

Dalam tulisan kali ini, kami memodelkan material tersebut dengan beberapa jenis orbital yang dianggap sebagai elektron valensi. Seperti atom Strontium (Sr) memiliki orbital $4s - 5s - 4p - 5p$, atom Niobium (Nb) memiliki orbital $4s - 5s - 4p - 5p - 4d$, dan atom Oksigen (O) memiliki orbital $2s - 2p$. Material yang kami gunakan memiliki 10 atom Strontium, 10 atom Niobium, dan 34 atom Oksigen[2]. Sehingga terdapat 346 jenis orbital elektron valensi yang kami gunakan.

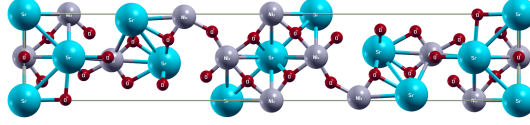


FIGURE 1: Material $\text{SrNbO}_{3.4}$. Atom Sr ditandai warna biru, atom Nb ditandai warna abu-abu, atom O ditandai warna merah. Terdapat jarak yang renggang dan membentuk 3 grup (kiri, tengah, kanan) karena adanya tambahan elektron.

METHOD

Pada tahap awal, kami melakukan perhitungan secara first-principle dengan menghitung density functional theory (DFT) dan maximally-localised wannier function (MLWF). Untuk perhitungan DFT, kami menggunakan package Quantum Espresso[3, 4]. Sedangkan untuk perhitungan MLWF, kami menggunakan package Wannier90[5]. Perhitungan DFT dilakukan untuk mendapatkan electronic structure secara lengkap dari semua orbital valensi setiap atom. Selanjutnya dari hasil perhitungan tersebut, dilanjutkan dengan perhitungan MLWF untuk mendapatkan parameter tight-binding. Dari parameter tersebut akan kami gunakan untuk mengkonstruksi matriks hamiltonian tight-binding multiband.

Dari matriks hamiltonian tight-binding tersebut, kami melakukan perhitungan eigenvalues untuk mendapatkan band-structure dengan pendekatan tight-binding, dan perhitungan rapat elektron dengan menggunakan green function. Persamaan green function yang digunakan adalah,

$$[G(\omega, \vec{k})] = \frac{1}{(\omega + i\eta)[I] - [H(\vec{k})]}$$

Dari green function tersebut dapat digunakan untuk menentukan partial density of states (PDOS) dengan menggunakan,

$$PDOS_{\alpha}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_k [G_{\alpha\alpha}(\omega, \vec{k})]$$

dan juga total density of states (DOS) dengan menggunakan,

$$DOS(\omega) = \sum_{\alpha} PDOS_{\alpha}(\omega)$$

RESULT AND DISCUSSION

Perhitungan first-principle pada material $\text{Sr}_5\text{Nb}_5\text{O}_{17}$ menghasilkan grafik struktur pita energi yang memiliki struktur anisotropik. Dapat dilihat pada gambar 2 bahwa untuk arah sumbu a ($X - \Gamma$) memiliki sifat konduktor, sedangkan untuk arah sumbu b ($\Gamma - Y$) dan c ($\Gamma - Z$) memiliki sifat insulator. Pada perhitungan tersebut, besar dari fermi level diatur berdasarkan data eksperimen dari angular-resolved photoemission spectroscopy (ARPES)[6].

Hasil perhitungan dengan pendekatan tight-binding menunjukkan bahwa band-structure pada gambar 3 sama seperti perhitungan first-principle. Sama halnya dengan rapat keadaan pada gambar 4 menunjukkan bahwa hasil perhitungan dengan pendekatan tight-binding dan first principle sama. Hal tersebut menunjukkan bahwa hanya dengan model pendekatan tight-binding saja sudah cukup untuk dapat menghasilkan sifat fisis yang sama sesuai dengan perhitungan first-principle.

Kami mereduksi matriks hamiltonian tight binding dengan cara menghilangkan orbital-orbital yang tidak memiliki kontribusi di rentang energi 3 hingga 13.5 eV. Karena di rentang energi tersebut terdapat banyak elektron yang menempati keadaan tersebut, dan juga rentang energi tersebut terletak di sekitar fermi level. Untuk melihat orbital mana saja yang tidak memiliki kontribusi di rentang energi tersebut, kami menggunakan perhitungan partial density of states (PDOS) untuk setiap orbital dan menghilangkan orbital yang memiliki nilai rendah di rentang energi tersebut.

Dari 346 orbital elektron valensi, kami mereduksi 133 orbital yang tidak memiliki kontribusi elektron di rentang frekuensi tersebut. Hasil dari band structure setelah orbital tersebut direduksi dapat dilihat pada gambar 5. Pada gambar

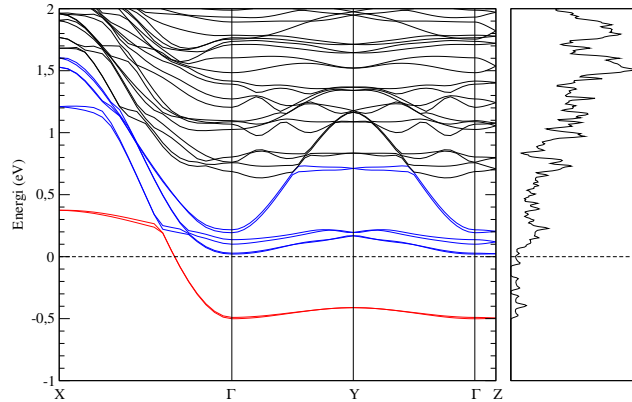


FIGURE 2: Band Structure and Density of States from First Principle Calculation Using Quantum Espresso

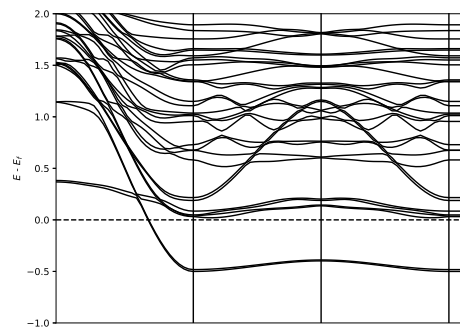


FIGURE 3: Band Structure from Hamiltonian Tight-Binding Multiband.

tersebut dapat dilihat bahwa material tersebut tetap dapat mempertahankan karakteristik anisotropik seperti sebelumnya.

Berdasarkan perhitungan PDOS dengan DFT menunjukkan bahwa di sekitar fermi level didominasi oleh orbital-d pada atom Nb[1]. Dan juga pada reduksi sebelumnya didapat bahwa terdapat beberapa atom Nb yang mana orbital-d nya mendominasi di daerah sekitar fermi level. Atom Nb tersebut berada di batas-batas grup yang terbentuk karena adanya tambahan elektron (fig 1).

CONCLUSION

Here are the main points you need to follow (the AIP Publishing author template packages contain comprehensive guidance):

ACKNOWLEDGMENTS

The reference section will follow the “Acknowledgment” section. References should be numbered using Arabic numerals followed by a period (.) as shown below, and should follow the format in the below examples.

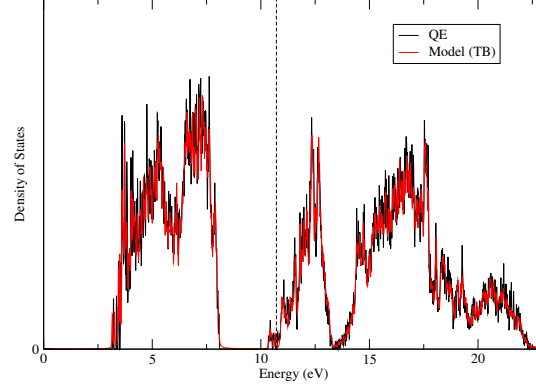


FIGURE 4: Comparison Density of States between First Principle Calculation and Tight Binding Calculations.

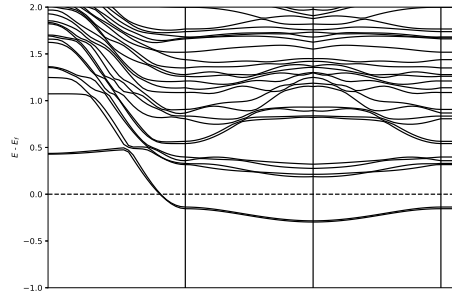


FIGURE 5: Band Structure after Orbitals Reduction.

REFERENCES

- [1] D. Y. Wan et al. Electron transport and visible light absorption in a plasmonic photocatalyst based on strontium niobate. *Nature Communications*, 8:15070 EP –, Apr 2017. Article.
- [2] K. Persson. Materials data on sr5nb5o17 (sg:58) by materials project, 4 2016.
- [3] P. Giannozzi et al. Advanced capabilities for materials modelling with quantum espresso. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 29(46):465901, 2017.
- [4] P. Giannozzi et al. Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(39):395502 (19pp), 2009.
- [5] A. A. Mostofi, Jonathan R. Yates, Giovanni Pizzi, Young-Su Lee, Ivo Souza, David Vanderbilt, and Nicola Marzari. An updated version of wannier90: A tool for obtaining maximally-localised wannier functions. *Computer Physics Communications*, 185(8):2309 – 2310, 2014.
- [6] C. A. Kuntscher, S. Gerhold, N. Nücker, T. R. Cummins, D.-H. Lu, S. Schuppler, C. S. Gopinath, F. Lichtenberg, J. Mannhart, and K.-P. Bohnen. Electronic structure of layered perovskite-related $\text{Sr}_{1-y}\text{La}_y\text{NbO}_{3.5-x}$. *Physical Review B*, 61(3):1876–1883, Jan 2000.
- [7] A. Rusydi et al. Near-100% optically controlled switching in quasi-one-dimensional metallic oxides. (Under Review).