

Struktur Elektronik dan Sifat-Sifat Optik Bismut Selenida dengan Teori Fungsional Densitas = Electronic Structure and Optical Properties of Bismuth Selenide within Density Functional Theory

Muhammad Hasan, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20499575&lokasi=lokal>

Abstrak

Bismuth Selenide Bi_2Se_3 adalah isolator topologi tipe 3D yang terkenal. bagian dalam bagian dari bahan ini adalah isolasi, tetapi ada keadaan logam di permukaan yang: dilindungi oleh simetri pembalikan waktu. Studi eksperimental bahan ini dengan memvariasikan ketebalannya mengungkapkan bahwa keadaan permukaan logam mulai muncul pada ketebalan 6 Quintuple Layer (QL). Penyelidikan keadaan permukaan bahan ini juga mengungkapkan keadaan logam sampai ketebalan mencapai 4 QL. Penelitian ini dilakukan dengan menghitung struktur multilayer (dipisahkan oleh celah vakum) dari bismut selenide, yang bisa mewakili keadaan permukaan material. Kami menyelidiki bahan yang lebih tebal dengan ketebalan 9 QL, dan struktur pita sistem ini mengungkapkan keadaan logam yang sama dengan banyak pita tambahan sebagai konsekuensi dari lapisan yang lebih tebal. Selain itu, penelitian ini juga mengungkapkan sifat optik material, seperti fungsi Dielektrik, Konduktivitas Optik, Refleksi, dll. Penelitian ini diimplementasikan dengan perhitungan DFT, terutama dengan Quantum Paket Espresso (QE).

.....Bismuth Selenide Bi_2Se_3 is a well-known 3D type topological insulator. the inside of this part of the material is insulating, but there is a metallic state on the surface which is: protected by the symmetry of the reversal of time. Experimental studies of this material by varying its thickness revealed that the surface state of the metal began to appear at a thickness of 6 Quintuple Layer (QL). Investigation of the surface state of this material also revealed the metallic state up to a thickness of up to 4 QL. This research was carried out by calculating the multilayer structure (separated by a vacuum gap) of bismuth selenide, which could represent the surface state of the material. We investigated a thicker material of 9 QL thickness, and the band structure of this system revealed the same metallic state with many additional bands as a consequence of the thicker layer. In addition, this research also reveals the optical properties of materials, such as Dielectric function, Optical Conductivity, Reflection, etc. This research is implemented with DFT calculations, especially with Quantum Espresso Package (QE).