

Studi First Principles Transpor Elektron Melalui NiFe₂O₄ Bercacat = First Principles Study of Electron Transport Through Defective NiFe₂O₄

Situmeang, Jesaya Christian Ido Raja, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920547748&lokasi=lokal>

Abstrak

Karena resistansi yang tinggi dan celah pita yang moderat, nikel ferit NiFe₂O₄ telah banyak diteliti dalam beberapa tahun terakhir, terutama dalam aplikasi untuk perangkat memori. Selain itu, struktur spinel yang sepenuhnya invers menunjukkan sifat elektronik menarik seperti pita valensi yang dispersif dan perbedaan jenis celah pita antara polarisasi spin, serta sifat transportasi yang sesuai untuk perangkat memori seperti resistansi tinggi dan aliran elektron yang dapat dipolarisasi oleh spin. Namun, berdasarkan berbagai hasil eksperimen, jenis transportasi NiFe₂O₄ — baik tipe n atau p — belum menunjukkan kejelasan yang pasti. Meskipun hal ini sebagian besar disebabkan oleh proses sintesis material, kemajuan dalam menentukan jenis transportasi yang sebenarnya tampaknya terbatas. Namun, dapat dikatakan bahwa tipe p yang dilaporkan dalam beberapa penelitian nikel ferit mungkin disebabkan oleh kekosongan oksigen. Selain itu, kekosongan oksigen sendiri sering meningkatkan resistansi, seperti yang dilaporkan dalam banyak penelitian lain tentang oksida. Namun demikian, penjelasan yang memadai di balik hal tersebut tampaknya belum ada dalam kasus nikel ferit.

Dalam penelitian ini, penelitian prinsip pertama menggunakan teori fungsional kerapatan dan fungsi Green non-ekuilibrium dilakukan. Model nikel ferit murni yang terdiri dari 28 atom sebagai sel satuan dikembangkan, serta model cacat untuk kekosongan oksigen tunggal dan ganda. Selain itu, perangkat transportasi yang mengadopsi kerangka kerja Landauer-Buttiker diimplementasikan, dengan dua probe yang terhubung ke daerah pusat. Kekosongan dalam perangkat transportasi diperkenalkan secara periodik dan sentral, menjelaskan kontribusi orbital melalui analisis spektrum transmisi. Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa nikel ferit murni cenderung memiliki transportasi tipe n sementara kekosongan oksigen menyebabkan transportasi tipe p dan peningkatan resistansi.

.....

Due to its high resistance and moderate band gap, nickel ferrite has been extensively researched for the past few years, especially in applications for memory devices. Additionally, its fully inverse spinel structure shows interesting electronic properties such as a dispersive valence band and difference in band gap type between spin polarizations, as well as suitable transport properties for memory device such as high resistance and spin-polarizable electron flow. However, based on various experimental results, transport type of — either or type — has not taken a clear stand. While this is mainly caused by the material synthesis process, progress on determining the actual transport type seems limited. However, one may argue that the type reported in some nickel ferrites research could be caused by oxygen vacancies. Further, oxygen vacancies themselves often enhances resistance, as many other works on oxides have reported. Nevertheless, a satisfactory explanation behind the former has seems absent in the case of Nickel ferrites.

In this work, first principles research using density functional theory and nonequilibrium Green's functions

is conducted. A pristine nickel ferrite model consisting of 28 atoms as unit cell is developed, as well as defective model for single and double oxygen vacancies. Additionally, a transport device adopting the Landauer-Buttiker framework is incorporated, with two probes coupled to a central region. Vacancies in the transport device is introduced both periodically and centrally, elucidating the contribution of orbitals through transmission spectra analysis. Gathered results suggest that pristine nickel ferrite tend to have type transport while oxygen vacancies induce type transport and enhancement in resistance.