

## STUDI SIFAT ELEKTRONIK PYROCHLORE $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ MENGUNAKAN DFT

NURANNISA WAHYUNI \*, RAHMA HI MANRULU, IRWAN RAMLI +

*Program Studi Fisika, Fakultas Sains, Universitas Cokroaminoto Palopo  
Jl. Lamaranginang Kota Palopo, Sulawesi Selatan,  
Phone: +62 822-7146-3948*

*\*email : nurannisawahyuni31@gmail.com*

*+email : irwan@uncp.ac.id*

**Abstrak.** *Pyrochlore* adalah mineral yang akan mengeluarkan api berwarna hijau apabila dibakar dan memiliki struktur kubus. *Pyrochlore* memiliki banyak jenis salah satunya *pyrochlore* yang disintetiskan dengan senyawa lantanida. *Pyrochlore* lantanida ini memiliki *Metal Insulator Transition* (MIT) yang berbeda berdasarkan senyawa lantanidanya yang juga memiliki sifat elektronik yang berbeda. Penelitian ini dilakukan dengan tujuan untuk mengetahui sifat elektronik *pyrochlore*  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ , sifat elektronik *pyrochlore*  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  diketahui dengan cara menganalisis dan menghitung *Electronic Band Structure* dan *Density of State* (DOS) menggunakan metode komputasi *Density Functional Theory* (DFT) yang diimplementasikan pada perangkat lunak *Quantum Espresso*. Perhitungan dilakukan dengan *energy cut-off wave function* ( $\text{ecutwfc}=50 \text{ Ry}$ ) dan K-Point optimal  $4 \times 4 \times 4$ , dimana hasil perhitungan tersebut diperoleh *electronic bands structure* yang menunjukkan bahwa tidak terdapat *band gap* atau *zero band gap* pada  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ . Pada perhitungan telah melibatkan efek Hubbard dan spin orbit Coupling tetapi belum melibatkan struktur spin.

**Kata kunci:** *Pyrochlore*,  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ , density functional theory, electronic bands structure, density of state

**Abstract.** *Pyrochlore* is a mineral which emit a green flame when burned and has a cubic structure. *Pyrochlore* has many types, one of them is synthesized with lanthanide compounds. *Pyrochlore* lanthanides have different Metal Insulator Transition (MIT) based on the lanthanide ion which also have different electronic properties. This research was conducted with the aim to determine the electronic properties of *pyrochlore*  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  by means Electronic Band Structure and Density of State (DOS) using Density Functional Theory (DFT) computing method using Quantum Espresso software. The calculation is carried out with an energy cut-off wave function ( $\text{ecutwfc}=50 \text{ Ry}$ ) with K-Point mesh  $4 \times 4 \times 4$ . The results showed that there is no band gap or zero band gap and the DOS calculation showed that the electron density across the fermi level. This calculation has considered the hubbard correction and spin-orbit coupling but still missing the magnetic ordering of the *pyrochlore*.

**Keywords:** *Pyrochlore*,  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ , density functional theory, electronic bands structure, density of state

### 1. Pendahuluan

#### 1.1. *Pyrochlore* $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$

*Pyrochlore* adalah senyawa yang memiliki struktur kubus. *Pyrochlore* digunakan sebagai bahan switching, elemen panas, elektroda oksigen, keramik permivitas tinggi, termistor, resistor film tebal, selain itu *pyrochlore* juga digunakan untuk

mengolah limbah radioaktif. *Pyrochlore* juga dapat disintesis dengan logam tanah jarang dalam hal ini adalah Lantanida (Ln) sebagai kation A.

*Pyrochlore iridate*,  $\text{Ln}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  (Ln=Y dan senyawa lantanida) menunjukkan keadaan nontrival dan *metal insulator transition* (MIT) *pyrochlore* menunjukkan hasil yang bervariasi, dimana MIT *pyrochlore* menurun seiring perubahan Ln, selain itu *pyrochlore iridate* memiliki kopling spin-orbit (SCO) yang kuat di dalam atom Ir dan atom *d-f*, sehingga keadaan elektronik, seperti spin-liquid kuantum, sifat semimetal Weyl dapat diamati [1].

*Pyrochlore iridate* dari senyawa lantanida memiliki MIT yang berbeda karena perberbedaan jari-jari ionik *R* ditandai dengan sifat konduktivitas listrik  $R = \text{Pr, Nd, Sm, dan Eu}$  menunjukkan sifat logam, sedangkan  $R = \text{Gd, Tb, Dy, Ho, E, Tm, Yb, Lu dan Y}$  menunjukkan sifat semikonduktor. Perbedaan MIT ini disebabkan karena perbedaan jari-jari ionik lantanida. Unsur lantanida memiliki ion yang trivalen, dimana elektron  $(5d)^5$  dari  $\text{Ir}^{4+}$  membentuk pita  $t_{2g}$  yang tidak terisi, dalam hal ini hanya unsur lantanida yang memiliki elektron *5d* dan dapat menunjukkan sifat konduktivitas listrik. Senyawa dari lantanida Pr diidentifikasi tidak memiliki MIT hingga suhu 0,3K, sedangkan identifikasi menggunakan efek Kondo pada  $T_K=25\text{k}$  dengan efek kuat *c-f* hibridisasi menunjukkan hasil bahwa batas jari-jari ionik untuk MIT ( $\text{Ln}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ ) berada antara Ln=Pr dan Nd.  $\text{Ln}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  untuk Ln=Nd, Sm, dan Eu memiliki MIT masing masing 36K, 117K, dan 120K [8].

$\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  adalah salah satu *pyrochlore* yang disintetiskan dengan senyawa lantanida. Pada awalnya Nd-227 adalah logam pada semua suhu, sedangkan dalam penelitian selanjutnya menunjukkan transisi MI baru terjadi pada 37 K. Survei  $\text{Ln}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  menunjukkan penurunan sistematis temperatur MIT pada jari-jari ionik Ln yang mencapai nilai nol antara Ln=Nd dan Pr, sehingga  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  adalah isolator yang paling dekat dengan  $T=0$  quantum MIT. MIT  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  kontinu pada  $T_{MI}\sim 32\text{K}$  [9].

Hasil *muon-spin relaxation* pada  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  *pyrochlore iridate* dilaporkan bahwa telah teramati presesi spin muon koheren spontan di bawah suhu transisi insulator logam (MIT) sekitar 33 K, yang menunjukkan munculnya tatanan magnet jarak jauh pada  $\text{Ir}^{4+}$ . Selain itu penurunan suhu terus dilakukan dan menunjukkan hasil bahwa bidang internal di situs muon meningkat lagi ketika suhu di bawah suhu sekitar 9 K. Peningkatan kedua bidang internal menunjukkan urutan  $\text{Nd}^{3+}$  yang konsisten dengan percobaan neutron sebelumnya. Selain itu, juga diperoleh hasil bahwa MIT dan urutan magnet  $\text{Ir}^{4+}$  memiliki hubungan dekat dan kopling spin-orbit besar dari Ir elektron *5d* memainkan peran kunci untuk MIT dan mekanisme pemesanan magnetik pada *pyrochlore iridates* dalam keadaan dasar [4].

Resistivitas Nd-227 bergantung pada suhu, dimana telah diamati penurunan resistivitas di bawah suhu kamar yang mencapai batas minimum  $T\sim 65\text{K}$ . Namun, pada suhu antara 65K dan 8K terdapat peningkatan resistivitas yang sangat lemah, sehingga disimpulkan bahwa medan magnet yang diterapkan pada 9 T memiliki efek yang sangat kecil terhadap resistansi berbeda dengan magnetoresistensi yang diamati pada suhu yang relatif rendah [3].

*Pyrochlore*  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  memiliki kombinasi kopling spin-orbit (SCO) yang kuat dan korelasi elektronik yang mungkin secara hipotesis mengarah ke berbagai fase topologi seperti Isolator Mott dan isolator semimetal Weyl [13]. *Pyrochlore iridate* ini memiliki fase topologi dengan struktur yang berbentuk tetrahedral dengan berbagai sudut, SOC yang kuat ini terdapat pada Ir *5d* elektron. Interaksi antara

SOC dan korelasi elektron-elektron ( $U$ ) menghasilkan keadaan elektronik yang khas.

Magnetisasi bergantung pada suhu di bawah 120K, dan peningkatan tiba-tiba pada resistivitas bergantung pada suhu di bawah 8K. Muon spin menunjukkan bahwa magnetisasi histerik didorong oleh transisi ke keadaan tidak teratur magnetis, dan pada suhu di bawah 8K keadaan dasar diatur secara magnetis yang dibuktikan dengan presisi muon spontan. Pengukuran menunjukkan tidak adanya MI [3].

Kalkulasi struktur elektronik prinsip pertama yang sepenuhnya relativistik berdasarkan kerapatan spin lokal nonkolinear aproksimasi (LSDA) dilakukan pada *pyrochlore iridates*  $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  dan  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ . All-in, all-out antiferromagnetik (AF) order distabilkan oleh tolakan Coulomb di tempat  $U > U_c$  dalam skema LSDA +  $U$ , dengan  $U_c \sim 1.1$  eV dan 1.3 eV masing-masing untuk  $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  dan  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ . Semimetal AF dengan dan tanpa poin Weyl dan kemudian isolator AF yang secara topologis berturut-turut muncul dengan  $U$  yang semakin meningkat. Untuk  $U = 1,3$  eV.  $\text{Y}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  adalah isolator AF yang bercelah sempit dengan topologi yang memiliki momen magnet lokal yang teratur  $\sim 0,5\mu_B / \text{Ir}$ , sementara  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  hampir merupakan semimetal paramagnetik dengan konsentrasi elektron dan lubang 0,016/Ir, secara keseluruhan kesepakatan dengan eksperimen. Dengan penurunan parameter posisi oksigen  $x$  menggambarkan komposisi trigonal-ion  $\text{IrO}_6$  oktahedra,  $\text{Pr}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  digerakkan melalui semimetal non-Fermi-cair yang hanya memiliki Fermi yang terisolasi  $\Gamma_8^+$ , menunjukkan kuadrat band ke  $Z_2$  isolator topologi [6].

Keadaan terurut magnetik dari *pyrochlore iridate*  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  (Nd227) dan  $\text{Sm}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  (Sm227), menunjukkan transisi logam-isolator masing-masing pada 33 dan 117 K, dipelajari dengan metode muon-spin-relaxation ( $\mu\text{SR}$ ) dan teori fungsi densitas (perhitungan DFT). Urutan magnetik jarak jauh dari momen Ir muncul dalam hubungannya dengan transisi isolator logam, dan tambahan urutan jarak jauh momen Nd/Sm dikonfirmasi pada suhu di bawah sekitar 10 K. Ditemukan bahwa all-in all-out struktur putaran paling meyakinkan menjelaskan hasil  $\mu\text{SR}$  saat ini dari Nd227 dan Sm227. Bidang internal yang diamati dibandingkan dengan nilai yang diperoleh dari perhitungan DFT. Batas bawah ukuran momen magnetik diperkirakan masing-masing 0,12  $\mu_B$  dan 0,2  $\mu_B$  untuk momen Ir dan Nd di Nd227, dan 0,3  $\mu_B$  dan 0,1  $\mu_B$  untuk momen Ir dan Sm di Sm227. Analisis lebih lanjut menunjukkan bahwa spin coupling antara momen Ir dan Nd/Sm bersifat feromagnetik untuk Nd227 dan antiferromagnetik untuk Sm227. Perubahan sifat elektronik dan magnetic karena pengaruh jari-jari ionik lantanida dan perubahan magnetic moment setiap ion yang dilaporkan menjadikan material ini menjadi menarik untuk dipelajari secara sistematis [2].

## 1.2. Electronic Band Structure

Elektron-elektron pada atom bebas mengisi orbital-orbital atom, membentuk sekumpulan tingkat-tingkat energi yang diskrit. Bila beberapa atom didekatkan bersama-sama dalam sebuah molekul, orbital atomik mereka terbelah. Ini menghasilkan sejumlah orbital molekuler yang sebanding dengan jumlah atom. Bila sejumlah besar atom (dalam orde  $10^{20}$ ) digabungkan bersama-sama membentuk padatan, banyaknya orbital ini menjadi sangat besar, dan perbedaan energi di antara mereka menjadi sangat kecil, sehingga tingkat-tingkat energi ini dapat dianggap membentuk pita energi kontinu, bukannya tingkat energi diskrit seperti yang dijumpai atom bebas. Namun beberapa selang energi tidak memiliki orbital, berapa pun banyaknya atom yang bergabung ini membentuk celah pita.

Dalam pita energi, tingkat energi begitu banyaknya sehingga membentuk kesinambungan. Pertama, selisih antara tingkat energi dalam padatan dapat dibandingkan dengan energi yang terus-menerus dipertukarkan dengan fonon (vibrasi atom). Kedua, selisih tersebut sebanding dengan ketidakpastian energi akibat prinsip ketidakpastian Heisenberg, untuk jangka waktu yang cukup panjang. Akibatnya, selisih antara tingkat-tingkat energi ini dapat diabaikan [5].

### 1.3. Density of States (DOS)

*Density of States* atau yang disingkat DOS adalah sistem yang menggambarkan jumlah keadaan per selang energi pada tingkat energi yang tersedia untuk ditempati elektron. Distribusi rapatan kontinyu dan tidak seperti sistem terisolasi. DOS yang tinggi pada tingkat energi tertentu menandakan bahwa terdapat banyak keadaan yang tersedia untuk di tempati. Dalam mekanika kuantum tidak semua gelombang atau partikel dapat ditemukan dalam beberapa sistem. Jarak antar atom dan muatan atom dalam material hanya memungkinkan elektron-elektron dengan panjang gelombang tertentu untuk ditemukan. Dalam sistem lain, struktur kristal material memungkinkan gelombang untuk merambat dalam satu arah dan menghambat perambatan gelombang pada arah yang lain [5].

### 1.4. Density Functional Theory

*Density Functional Theory* (DFT) merupakan metode komputasi berbasis kuantum untuk penentuan struktur elektronik suatu bahan pada keadaan dasar (*ground state*) melalui fungsional kerapatan elektron (electron density) karena DFT hanya bekerja pada keadaan energi *ground state* maka temperatur yang bekerja dalam perhitungan ini adalah 0K. Meskipun dilakukan pada temperatur 0K, penentuan struktur elektronik baik secara komputasi (dengan DFT) ataupun eksperimen cenderung memberikan hasil yang hampir sama, dengan kata lain akurasi perhitungan dengan DFT cukup tinggi sehingga sejak tahun 1990-an metode ini semakin populer digunakan di dunia fisika zat padat selain karena keakurasiannya yang tinggi, biaya komputasional relatif rendah dibandingkan dengan metode tradisional berbasis fungsi gelombang banyak elektron seperti misalnya Hartree-Fock Theory dan turunnya [10].

## 2. Metode Penelitian

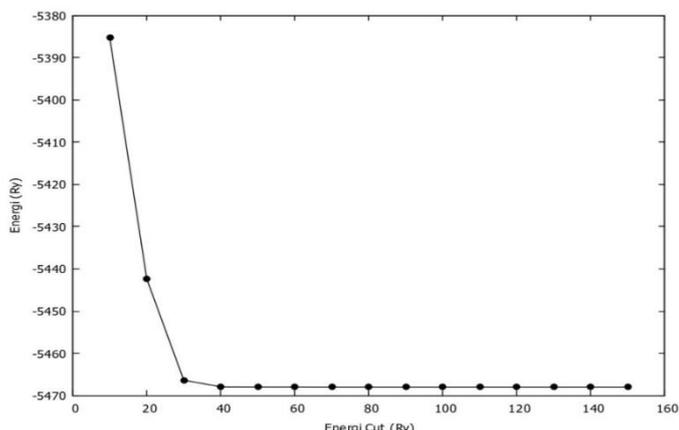
Penelitian ini dimulai dengan melakukan pengambilan data CIF  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  dari pusat data *materials project* [7], file CIF tersebut terjabarkan menjadi input *pwscf* yang meliputi beberapa parameter yang menghasilkan output, sehingga memungkinkan untuk menentukan *energy cut-off* optimal dan K-point optimal dengan menggunakan perangkat lunak *Quantum Espresso*. Penentuan *energy cut-off* optimal dan K-point optimal ini bertujuan untuk menentukan input *nscf*  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  sehingga *electronic bands structure* dan *density of states pyrochlore*  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  dapat diketahui untuk kemudian dianalisis untuk mengetahui sifat elektroniknya.

## 3. Hasil dan Pembahasan

Metode *Density Functional Theory* menggunakan perangkat lunak *quantum espresso* dimulai dengan menetapkan nilai *energy cut-off wave function* dan nilai kpoint untuk mendapatkan nilai energi yang konstan. Setelah mendapatkan nilai *ecutwfc* dan kpoint yang konvergen, maka dilanjutkan dengan perhitungan *electronic bands structure* dan *Density of States* dari *Pyrochlore*  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ .

### 3.1. Energy Cut-Off Wave Function

*Energy cut-off wave functional* (*ecutwfc*) adalah batasan energi yang digunakan untuk mewakili ekspansi dari fungsi gelombang. *Energy cut-off wave functional optimal pyrochlore* ditentukan dengan menginput angka secara acak dan tetap memastikan deretan angka acak tersebut merupakan posisi *ground state Ecut-off pyrochlore*. Setelah mendapat energi total dari setiap energi *cut-off*, maka dibuatlah grafik perbandingan energi *cut-off* dengan energi totalnya.

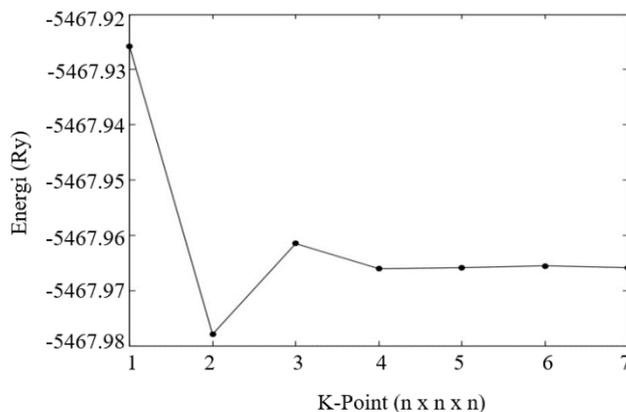


**Gambar 1.** Grafik energi cut-off dan energi total (Ry)

Grafik ini menunjukkan bahwa energi total menurun seiring bertambahnya *energy cut-off wave functional* dan terlihat lurus mulai dari *ecutwfc* = 40, maka energi total mulai konvergen pada nilai *energy cut* 40 Ry. Sehingga untuk menjamin konvergensi pada perhitungan selanjutnya, maka akan digunakan *energy cut* 50 Ry.

### 3.2. K-Point

Nilai k-point optimal ditentukan dengan menginput angka secara acak dengan tetap memastikan deretan angka tersebut merupakan posisi *ground k-point*. Struktur kristal *pyrochlore* adalah kubik, sedangkan K-point memiliki rumus umum, yaitu  $n \times n \times n$ , sehingga untuk menentukan nilai K-point optimal dilakukan dengan mengacak angka yang dimulai dengan  $1 \times 1 \times 1$ . Setelah energi total dari setiap k-point didapatkan, maka dibuatlah grafik perbandingan energi *cut-off* dengan energi totalnya.



**Gambar 2.** Grafik K-Point dan energi total (Ry)

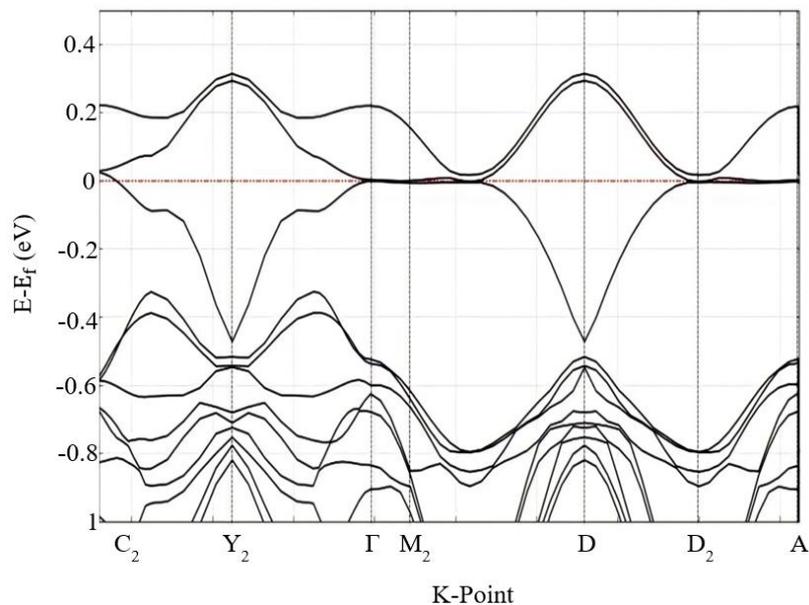
Grafik tersebut memperlihatkan perbandingan k-point dengan energy total. Energy total menurun seiring bertambahnya nilai k-point hingga grafik nampak konvergen mulai dari k-point =  $4 \times 4 \times 4$ . Oleh karena itu, untuk menjamin konvergensi nilai k-point yang digunakan adalah k-point =  $4 \times 4 \times 4$  untuk perhitungan berikutnya.

### 3.3. Electronic Bands Structure

Perhitungan *self-consistent* (scf) dan nscf dilakukan menggunakan nilai optimal e-cut dan nilai optimal k-point, selain itu juga dilakukan perhitungan pada simetri k-point dengan memasukkan *High-symmetry points*. Hasil perhitungan tersebut yang akan menjadi patokan untuk perhitungan *electronic band structure*, maupun *Density Of States* (DOS) *pyrochlore*  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ . Output *electronic band structure* yang dihasilkan menggunakan metode DFT akan diplot menggunakan perangkat lunak GNUPLOT *Electronic band structure* ini digunakan untuk menunjukkan beberapa ciri material, terutama sifat elektronik dan optic material tersebut.

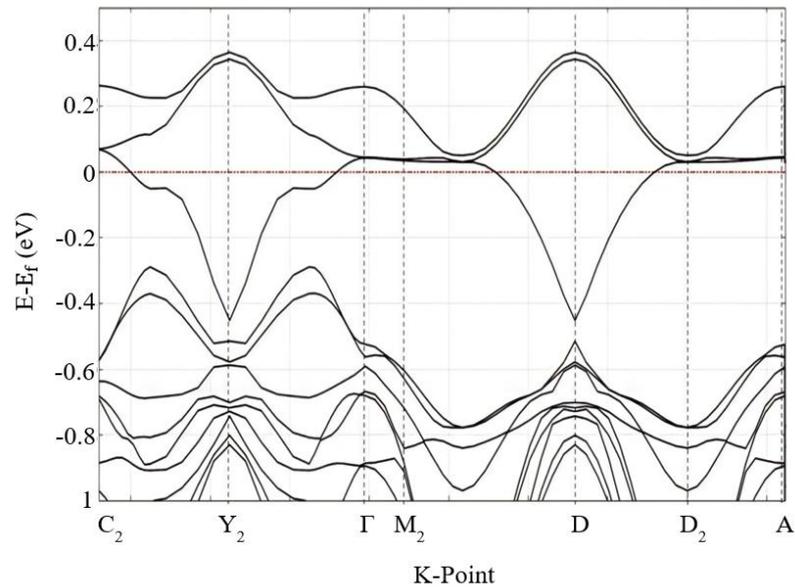
#### Tanpa koreksi Hubbard dan tanpa Spin Orbit Copling

Gambar 3 memperlihatkan kurva bands structure tanpa koreksi hubbard dan tanpa *Spin Orbit Copling*. Gambar tersebut menunjukkan tingkat energi yang dapat electron *pyrochlore*, diantara pita valensi dan pita konduksi pada *pyrochlore* tidak terdapat celah antara pita valensi dan pita konduksi, sehingga disebut sebagai *zero band gap* (celah pita).



**Gambar 3.** Electronic bands structure  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  tanpa Hubbard ( $U=0$ ) dan tanpa Spin Orbit Copling

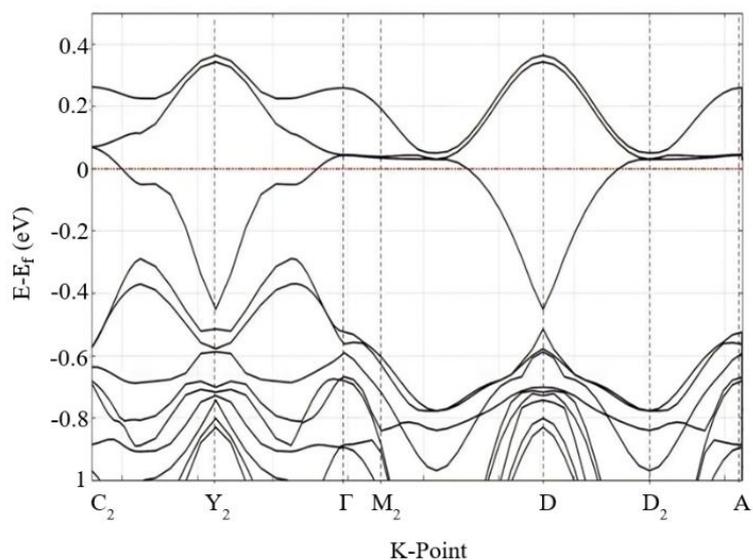
### Dengan koreksi Hubbard dan tanpa Spin Orbit Copling



**Gambar 4.** Electronic bands structure  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  dengan koreksi Hubbard ( $U=1,3\text{eV}$ ) dan tanpa Spin Orbit Copling

Gambar *bands structure* dengan hubbard ( $U=1,3\text{ eV}$ ) dan tanpa SOC di atas menunjukkan keadaan pita energi, yakni diantara pita valensi dan pita konduksi tidak terdapat *band gap* atau celah antara pita valensi dan pita konduksi *zero band gap*. pita valensi (*valance band*) adalah pita energi yang berada di bawah level Fermi, sedangkan pita konduksi (*conduction band*) adalah pita energi yang berada di atas level Fermi.

### Dengan koreksi Hubbard dan dengan Spin Orbit Copling



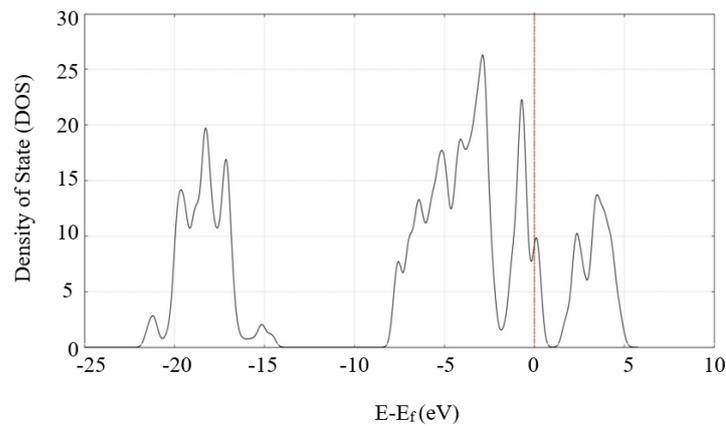
**Gambar 5.** Electronic bands structure  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  dengan koreksi Hubbard ( $U=1,3\text{eV}$ ) dan Spin Orbit Copling

Gambar *electronic bands structure*  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  dengan koreksi hubbard ( $U=1,3$  eV) dan dengan koreksi *Spin Orbit Copling* di atas juga menunjukkan keadaan *zero band gap*. Keadaan ini jelas terlihat melalui pita energi yang tampak melewati tingkat energi Fermi sebesar 11.0999 eV.

### 3.4. Density Of States (DOS)

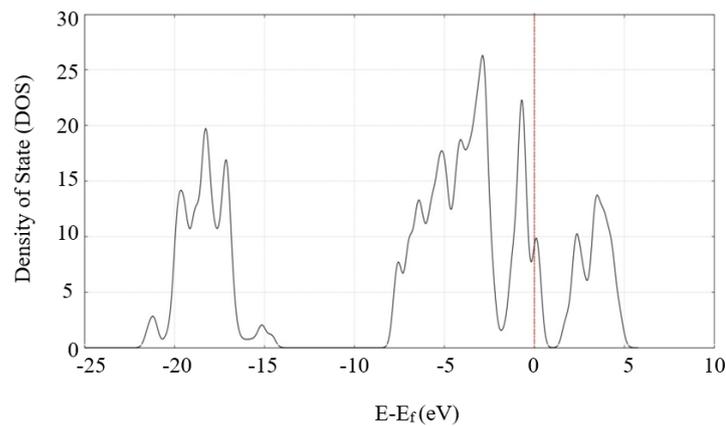
Perhitungan density of state dimulai dengan menghitung nilai scf dan nscf yang telah konvergen. Setelah didapatkan hasilnya, maka akan dilanjutkan dengan menghitung input file dos yang akan menghasilkan output berupa data dos. Output yang telah dihasilkan tersebut akan diplot menggunakan perangkat lunak GNUPLOT.

#### Tanpa koreksi Hubbard dan tanpa *Spin Orbit Copling*



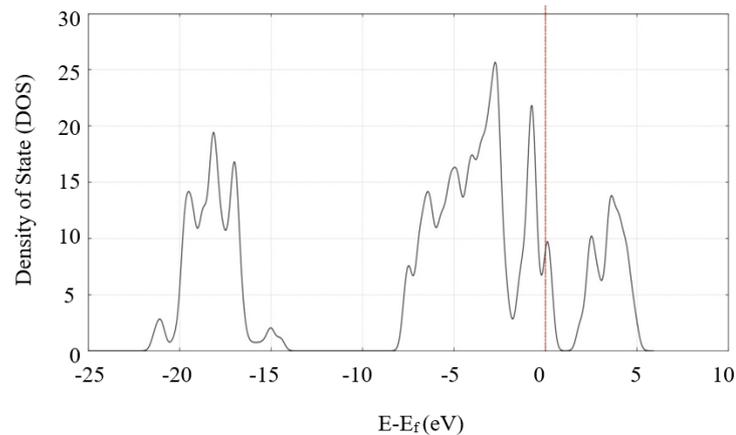
**Gambar 6.** Kurva *Density of State pyrochlore* tanpa koreksi Hubbard ( $U=0$ ) dan tanpa *Spin Orbit Copling*

#### Dengan koreksi Hubbard dan tanpa *Spin Orbit Copling*



**Gambar 7.** Kurva *Density of State pyrochlore* dengan koreksi Hubbard ( $U=1,3$  eV) dan tanpa *Spin Orbit Copling*

### Dengan koreksi Hubbard dan *Spin Orbit Copling*



**Gambar 8.** Kurva *Density of State* pyrochlore dengan koreksi Hubbard ( $U=1,3$  eV) dan *Spin Orbit Copling*

*Density Of States* (DOS) seluruh jumlah keadaan elektron pada setiap level energy dari perhitungan *band structure* yang dinyatakan dalam DOS. Gambar kurva DOS *Pyrochlore* tanpa koreksi *Hubbard* dan tanpa SOC memiliki hasil yang sama dengan DOS yang ditambahkan dengan koreksi *Hubbard* ( $U=1,3$  eV) dan tanpa SOC, begitupun kurva DOS dengan *Hubbard* ( $U=1,3$  eV) dan dengan SOC, ketiganya menunjukkan bahwa pyrochlore tidak memiliki celah antara pita valensi dan pita konduksi.

Perhitungan *electronic band structure* pyrochlore  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  menggunakan Metode *Density Functional Theory* dilakukan dengan tiga model koreksi dimana pada model pertama dilakukan perhitungan band structure tanpa koreksi *Hubbard* ( $U=0$ ) dan tanpa SOC dengan energy Fermi 11.279 eV, pada model kedua dilakukan perhitungan dengan menambahkan koreksi *Hubbard* ( $U=1,3$  eV) dan tanpa SOC dengan energy Fermi 11.082 eV, sedangkan pada model ketiga perhitungan *bands structure* ditambahkan dengan koreksi *Hubbard* ( $U=1,3$  eV) dan koreksi SOC dengan energy Fermi 11.0999 eV. Tiga model koreksi yang berbeda ini memiliki energy Fermi yang juga berbeda, yaitu menurun sesuai dengan penambahan koreksinya. Selain itu, pada kurva dapat terlihat perbedaan, yaitu pada model *electronic bands structure* 2 dan *electronic bands structure* 3 lebih padat dibandingkan dengan *electronic bands structure* 1 yang disebabkan karena *band symmetry electronic bands structure* 1 lebih besar, yakni sebesar  $-25,973$  eV dibandingkan dengan *band symmetry electronic bands structure* 2 dan *electronic bands structure* 3, yakni sebesar  $-26,011$ . Pada struktur pita elektron pyrochlore juga terdapat *dirac cone* atau titik pertemuan antara pita valensi dan pita konduksi yang berbentuk kerucut.

*Dirac point* ini menunjukkan bahwa pyrochlore memiliki interaksi electron-elektron yang menginduksi fase semimetal Weyl. *Pyrochlore*  $\text{Nd}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$  memiliki *Spin-Orbit Copling* (SOC) yang kuat, dan interaksi antara SOC dengan korelasi elektron-elektron ( $U$ ) ini akan menghasilkan keadaan elektronik yang khas, dimana elektronik  $\text{Nd}^{2+}$  mengalami isolasi yang ditandai dengan adanya Metal Insulator

Transition (MIT). Namun pada penelitian ini menambahkan nilai SOC dan nilai U tidak menunjukkan hasil yang signifikan.

Pada grafik Density Of States (DOS) terdapat tingkat energi yang melewati energy Fermi yang menunjukkan sifat logam. Hal ini sesuai dengan hasil eksperimen teoritis, dimana Nd227 memiliki MIT kontinu pada  $T_{MI} \sim 32K$  [9]. Nd227 memiliki sifat kemagnetan ferromagnetic yang disebabkan karena adanya momen magnetik spin elektron yang tidak berpasangan, masing-masing spin elektron yang tidak berpasangan tersebut akan memberikan medan magnetik. Dari hasil perhitungan *electronic band structure* dan DOS dapat diketahui bahwa sifat elektronik *pyrochlore* Nd<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub> adalah konduktor.

#### 4. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian dapat disimpulkan bahwa :

- Sifat elektronik *pyrochlore* Nd<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub> dapat diketahui dengan menggunakan gambaran *electronic bands structure* serta *Density Of States* (DOS). Perhitungan *electronic bands structure* dan *Density Of States* (DOS) dilakukan menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) yang diimplementasikan dengan menggunakan perangkat lunak *Quantum Espresso*.
- Perhitungan dilakukan dengan  $ecutwfc = 50$  Ry dengan K-Point = 4 x 4 x 4. Hasil perhitungan pita energy menggunakan metode DFT memperlihatkan bahwa *pyrochlore* tidak memiliki celah antara pita valensi dan pita konduksi atau yang disebut dengan *zero band gap* baik pada ketiga model *bands structure* dengan energi Fermi yang berbeda. Daftar Pustaka

#### Ucapan Terima Kasih

Penelitian ini dapat dilaksanakan dengan baik berkat bantuan dari berbagai pihak, untuk itu peneliti mengucapkan terima kasih kepada Kepala Laboratorium Komputer Fakultas Sains Universitas Cokroaminoto Palopo yang telah memberikan akses untuk penelitian ini.

#### Daftar Pustaka

1. J. Angel, R. Asih, H. Nomura, T. Taniguchi, K. Matsuhira, M.R. Ramadhan, I. Ramli, M. Wakeshima, Y. Hinatsu, M. Ismail, S. Sulaiman, & I. Watanabe, Magnetic Properties of Hole-Doped Pyrochlore Iridate (Y<sub>1-x-y</sub>Cu<sub>x</sub>Ca<sub>y</sub>)<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub>, In Materials Science Forum, Vol. 966 (2019), p. 269-276.
2. R. Asih, N. Adam, S.S. Mohd-Tajudin, D.P. Sari, K. Matsuhira, H. Guo, M. Wakeshima, Y. Hinatsu, T. Nakano, Y. Nozue, S. Sulaiman, & I. Watanabe, Magnetic moments and ordered states in pyrochlore iridates Nd<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub> and Sm<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub> studied by Muon-spin relaxation, Journal Of The Physical Society Of Japan, 86(2), 024705, (2017).
3. S.M. Disseler, C. Dhital, T.C. Hogan, A. Amato, S.R. Giblin, C. de la Cruz, A. Daoud-Aladine, S.D. Wilson, M.J. & Graf, Magnetic order and the electronic ground state in the pyrochlore iridate Nd<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub>, Physical Review B, 85(17), 174441, (2012).

4. H. Guo, K. Matsuhira, I. Kawasaki, M. Wakeshima, Y. Hinatsu, I. Watanabe, & Z.A. Xu, Magnetic Order In The Pyrochlore Iridate Nd<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub> Probed By Muon Spin Relaxation, *Physical Review B*, 88(6), 060411, (2013).
5. G. Hutagalung, Perhitungan Electronic Band Structure dan Fonon Dos Silikon Menggunakan Metode DFT dan Teknik Hamburan Neutron Inelastik, Skripsi, Sumatera Utara, Universitas Sumatera Utara, (2018).
6. F. Ishii, Y.P. Mizuta, T. Kato, T. Ozaki, H. Weng & S. Onoda, First-principles study on cubic pyrochlore iridates Y<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub> and Pr<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub>, *Journal of the Physical Society of Japan*, 84(7), 073703, (2015).
7. Materialsproject.org, mp-1190299. <http://materialsproject.org/materials/mp-1190299/>. 16 Mei 2021.
8. K. Matsuhira, M. Wakeshima, R. Nakanishi, T. Yamada, A. Nakamura, W. Kawano, S. Takagi & Y. Hinatsu. Metal–Insulator Transition in Pyrochlore Iridates Ln<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub> (Ln= Nd, Sm, and Eu), *Journal of the Physical Society of Japan*, 76(4), 043706, (2007).
9. Z. Tian, Y. Kohama, T. Tomita, H. Ishizuka, T.H. Hsieh, J.J. Ishikawa, K. Kindo, L. Balents & S. Nakatsuji, Field-induced quantum metal–insulator transition in the pyrochlore iridate Nd<sub>2</sub>Ir<sub>2</sub>O<sub>7</sub>, *Nature Physics*, 12(2), 134-138. 84(7), 073703, (2016).
10. T.D.K. Wungu & Suprijadi, *Studi Komputasi Density Functional Theory dalam Kajian Pengaruh Exchange Cation pada Proses Penyerapan Logam Berat oleh Montmorillonite*, ISBN: 978-602-61045-3-3, (2017).