

Studi komputasi sifat-sifat magnetoresistif dan magnetokalorik bahan oksida mangan

Muhammad Khabib Junaini, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20294740&lokasi=lokal>

Abstrak

Tesis ini merupakan studi teoretik-komputasi tentang sifat-sifat magnetoresistif dan magnetokalorik bahan oksida mangan. Studi dimulai dengan memformulasikan model dalam Hamiltonian yang terdiri atas suku kinetik elektron yang diturunkan dari pendekatan tight binding, suku interaksi magnetik Double Exchange (DE) antara spin-spin elektron konduksi dengan momen-momen magnetik lokal ion-ion Mn, suku kinetik dan potensial fonon, serta suku interaksi elektron-fonon (EP) yang diformulasikan dengan pendekatan Holstein. Model ini diselesaikan dengan metode Dynamical Mean Field Theory (DMFT). Secara khusus hasil-hasil studi ini dibandingkan dengan data-data eksperimental bahan kristal tunggal $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ (dengan $x=0,3$). Hasil-hasil perhitungan density of states (DOS), resistivitas, dan magnetisasi dengan variasi temperatur menunjukkan bahwa interaksi DE membentuk fase ferromagnetik-metal pada temperatur rendah, sedangkan interaksi EP bertendensi merusak keteraturan magnetik, yang mengakibatkan turunnya temperatur transisi magnetik, sekaligus melokalisasi elektron sehingga membentuk fase paramagnetik-insulator pada temperatur tinggi. Lebih lanjut, perbandingan perilaku resistivitas sebagai fungsi temperatur untuk berbagai nilai medan magnet luar antara hasil perhitungan teoretik dan data eksperimental menunjukkan bahwa efek magnetoresistansi kolosal bahan oksida mangan merupakan hasil dari keterkaitan peran (interplay) antara interaksi-interaksi DE dan EP. Investigasi terhadap magnetisasi dan perubahan entropi sebagai fungsi temperatur untuk berbagai nilai medan magnet luar menegaskan bahwa efek magnetokalorik timbul karena adanya transisi fase paramagnetik-ferromagnetik yang muncul sebagai akibat dari adanya interaksi DE. Interaksi EP tidak banyak mempengaruhi nilai perubahan entropi akibat pemberian medan magnet luar, tetapi menyebabkan turunnya temperatur transisi magnetik secara signifikan, sehingga menggeser daerah kerja aplikasinya untuk mesin pendingin magnetik ke arah temperatur yang lebih rendah. Untuk lebih memahami peran interaksi EP terhadap efek magnetokalorik, penelitian teoretik lebih lanjut masih perlu dilakukan mengingat masih adanya aspek-aspek magnetikalorik lainnya, seperti kapasitas panas (c_v) sebagai fungsi temperatur, yang belum dieksplorasi secara teoretik untuk dibandingkan dengan data-data eksperimental yang sudah tersedia.