

Theoretical study of optical response of Fe_3O_4 reduced graphene oxide nanoparticle system within dynamical mean field theory = Studi teoretik respon optik pada Fe_3O_4 - reduced graphene oxide sistem nanopartikel dengan dynamical mean-field theory

Regi Kusumaatmadja, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20429922&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Kami melakukan investigasi secara teori terhadap konduktivitas optik dan hal yang berkaitan dengan respon optik dari sistem nanopartikel Fe_3O_4 - reduced graphene oxide (rGO). Data eksperimen menunjukkan adanya peningkatan nilai magnetisasi yang telah tersaturasi seiring dengan penambahan konten rGO sampai dengan 5 persen dari berat dan mengalami penurunan seiring penambahan konten rGO. Kami memiliki hipotesis bahwa penguatan nilai magnetisasi

ini disebabkan oleh terjadinya spin-flipping Fe^{3+} pada lokasi tetrahedral yang diinduksi oleh ketiadaan oksigen (oxygen vacancies) pada nanopartikel Fe_3O_4 dibantu oleh rGO yang menarik atom oksigen dari sistem tersebut. Pada studi ini, kami bertujuan untuk melakukan eksplorasi atas implikasi dari efek yang telah disebutkan pada respon optik dari sistem. Model kami mencakup interaksi Hubbard antara elektron pada orbital e_g dari Fe^{3+} dan interaksi Heisenberg antara spin elektron dan spin ion dari Fe^{3+} . Kami memperlakukan interaksi-interaksi tersebut dalam algoritma mean-field dan dynamical mean-field approximations. Hasil kami akan dibandingkan dengan data eksperimen reflektansi dari sistem nanopartikel Fe_3O_4 .

ABSTRAK

We theoretically investigate the optical conductivity and its related optical response of Fe_3O_4 - reduced graphene oxide (rGO) nanoparticle system. Experimental data of magnetization of the Fe_3O_4 -rGO nano particle system have shown that the saturated magnetization increases with increasing rGO content upto about 5 weight percentage and decreases back as the rGO content is increased further. We hypothesize that the magnetization enhancement is due to spin-flipping of Fe^{3+} in tetrahedral sites induced by oxygen vacancies at the Fe_3O_4 particle boundaries assisted by rGO flakes that adsorb oxygen atoms from Fe_3O_4 particle around them. In this study, we aim to explore the implications of this effect to the optical response of the system as a function of the rGO content. Our model incorporates Hubbard-repulsive interactions between electrons occupying the e_g orbitals of Fe^{3+} and Heisenberg-like interactions between electron spins and spins of Fe^{3+} ions. We treat the relevant interactions within mean-field and dynamical mean-field approximations. Our results are to be compared with the existing experimental reflectance data of Fe_3O_4 nanoparticle system.