

Studi teoretik pengaruh vakansi oksigen terhadap kemagnetan dan transpor muatan pada Fe₃O₄ = Theoretical study of the effect of oxygen vacancies on magnetism and charge transport of Fe₃O₄

Angga Dito Fauzi, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20454158&lokasi=lokal>

Abstrak

Fe₃O₄ merupakan material ferrimagnetik paruh logam dengan TC 860 K yang menunjukkan transisi logam-isolator MIT pada 120 K. Dalam bentuk bulk, magnetisasi saturasi material tersebut adalah 0.6 Tesla 471 emu/cm³. Penelitian eksperimental terbaru telah menunjukkan bahwa magnetisasi saturasi dari lapisan tipis nano-Fe₃O₄ dapat mencapai 760 emu/cm³ yang diakibatkan oleh pembalikan spin ion Fe pada situs tetrahedral yang dibantu oleh vakansi oksigen VO. Sistem tersebut telah menunjukkan suhu MIT yang lebih tinggi 150 K. Pembalikan spin merupakan fenomena baru pada Fe₃O₄, sedangkan MIT merupakan fenomena yang sudah ada sejak lama. Kami menggagas sebuah model dan perhitungan untuk menginvestigasi mekanisme dari kedua fenomena tersebut. Hasil perhitungan kami menunjukkan bahwa konfigurasi ferrimagnetik untuk sistem tanpa VO secara energetik lebih disukai. Namun, dengan keberadaan VO, konfigurasi keadaan dasar dari sistem berubah menjadi ferromagnetik. Terkait MIT, dengan menggagas ketergantungan beberapa hopping integral terhadap suhu dalam model, kami mendemonstrasikan bahwa sistem tanpa dan dengan VO mengalami MIT dengan cara yang berbeda, menyebabkan sistem dengan VO memiliki suhu MIT yang lebih tinggi sesuai dengan data eksperimen. Hasil perhitungan kami juga menunjukkan bahwa MIT pada kedua sistem terjadi bersamaan dengan redistribusi elektron pada tiga ion Fe di setiap satuan formula Fe₃O₄. Dengan menganggap bahwa ketergantungan hopping integral terhadap suhu diduga timbul akibat efek Jahn-Teller dinamis, teori fenomenologis kami mampu menjembatani teori yang telah ada terkait MIT akibat transisi struktur dan keteraturan muatan.

.....

Fe₃O₄ is a half metallic ferrimagnet with TC 860 K exhibiting metal insulator transition MIT at 120 K. In bulk form, the saturation magnetization is 0.6 Tesla 471 emu cm³. A recent experimental study has shown that the saturation magnetization of nano Fe₃O₄ thin films can achieve up to 760 emu cm³, attributed to spin flipping of Fe ions at tetrahedral sites assisted by oxygen vacancies VO. Such a system has shown to have higher MIT temperature 150 K. The spin flipping is a new phenomenon in Fe₃O₄, while the MIT is a long standing one. Here, we propose a model and calculations to investigate the mechanisms of both phenomena. Our results show that, for the system without VO, the ferrimagnetic configuration is energetically favorable. Remarkably, upon inclusion of VO, the ground state configuration switches into ferromagnetic. As for the MIT, by proposing temperature dependences of some hopping integrals in the model, we demonstrate that the system without and with VO undergo the MIT in slightly different ways, leading to higher MIT temperature for system with VO, in agreement with the experimental data. Our results also show that the MIT in both systems occur concomitantly with the redistribution of electrons among the three Fe ions in each Fe₃O₄ formula unit. As such temperature dependences of hopping integrals may arise due to dynamic Jahn Teller effects, our phenomenological theory may provide a way to reconcile existing theories relating the MIT to the structural transition and the charge ordering.