

Pemodelan full-heusler alloy dengan pendekatan tightbinding: studi kasus pada Fe₂MnAl = Modeling of full heusler alloy within tight binding approximation case study of Fe₂MnAl

Anugrah Azhar, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20454625&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Heusler alloys telah diketahui sejak satu abad silam, dan prediksi-prediksi nilai momen magnetnya menggunakan aturan Slater-Pauling telah sukses untuk banyak material. Walaupun demikian, perhitungan sederhana ini tidak selalu berhasil untuk semua Heusler Alloy. Sebagai contoh, Fe₂CuAl diketahui memiliki momen magnet sebesar 3.30 B per formula unit walaupun prediksi aturan Slater-Pauling adalah 2 B. Di sisi lain, eksperimen pada susunan Heusler Alloy yang non-stoikiometri Fe₂Mn_{0.5}Cu_{0.5}Al memiliki nilai momen magnet sebesar 4 B, yang mirip dengan prediksi Slater-Pauling untuk paduan yang stoikiometri. Ketidaksesuaian ini menandakan bahwa teori untuk memprediksi momen magnet pada Heusler Alloy secara umum masih belum lengkap sepenuhnya. Berangkat dari isu ini, kami mengajukan studi teoritik pada Full-Heusler Alloy Fe₂MnAl dengan struktur L21 untuk memahami pembentukan momen magnet secara mikroskopik. Kami memodelkan sistem ini dengan mengkonstruksi Hamiltonian berbasis Tight-Binding dan menambahkan interaksi repulsif Hubbard seperti halnya pada interaksi antar spin pada elektron-elektron yang menempati orbital d-orbitals. Selanjutnya, kami selesaikan model ini menggunakan pendekatan fungsi Green, dan menerapkan pendekatan medan rata-rata pada suku-suku interaksi. Tujuan akhir kami yakni untuk menghitung momen magnet total dari Fe₂MnAl dan membandingkannya dengan data hasil eksperimen.

ABSTRACT

Heusler alloys have been known for about a century, and predictions of magnetic moment values using Slater Pauling rule have been successful for many such materials. However, such a simple counting rule has been found not to always work for all Heusler alloys. For instance, Fe₂CuAl has been known to have magnetic moment of 3.30 B per formula unit although the Slater Pauling rule suggests the value of 2 B. On the other hand, a recent experiment shows that a nonstoichiometric Heusler compound Fe₂Mn_{0.5}Cu_{0.5}Al possesses magnetic moment of 4 B, closer to the Slater Pauling prediction for the stoichiometric compound. Such discrepancies signify that the theory to predict the magnetic moment of Heusler alloys in general is still far from being complete. Motivated by this issue, we propose to do a theoretical study on a Full Heusler Alloy Fe₂MnAl L21 Structure to understand the formation of magnetic moment microscopically. We model the system by constructing a Tight Binding basis Hamiltonian and incorporating Hubbard repulsive as well as spin spin interactions for the electrons occupying the d orbitals. Then, we solve the model using Green's function approach, and treat the interaction terms within the mean field approximation. Our final goal is to compute the total magnetic moment of this system and compare it with the experimental data.