



UNIVERSITAS INDONESIA

PERHITUNGAN ENERGI  
DALAM COLOSSAL MAGNETORESISTANCE  
BAHAN  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana sains

CHARLES BERNANDO  
0305027017

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
PROGRAM STUDI FISIKA  
KEKHUSUSAN FISIKA MATERIAL DAN ZAT PADAT  
DEPOK  
MEI 2009

i

## HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS

Skripsi ini adalah hasil karya saya sendiri,  
dan semua sumber baik yang dikutip maupun dirujuk  
telah saya nyatakan dengan benar.

Nama : Charles Bernando

NPM : 0305027017

Tanda Tangan :

Tanggal : 1 Mei 2009

## HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi ini diajukan oleh :  
Nama : Charles Bernando  
NPM : 0305027017  
Program Studi : Fisika Material dan Zat Padat  
Judul Skripsi : Perhitungan Energi dalam Colossal  
Magnetoresistance Bahan  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$

Telah berhasil dipertahankan di hadapan Dewan Penguji dan diterima sebagai bagian persyaratan yang diperlukan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Program Studi Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Indonesia

### DEWAN PENGUJI

Pembimbing : Dr. Budhy Kurniawan (.....)

Penguji : Dr. Imam Fachruddin (.....)

Penguji : Dr. Azwar Manaf (.....)

Ditetapkan di : Depok

Tanggal : 17 Juni 2009

## KATA PENGANTAR/UCAPAN TERIMA KASIH

Terima kasih dan puji syukur penulis panjatkan kepada Tuhan Yesus Kristus yang telah memberikan berkat dan kasih sayang-Nya kepada penulis, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dengan sebaik-baiknya. Penulis mendedikasikan skripsi ini untuk kepentingan semua orang, semoga skripsi ini dapat memberikan manfaat dalam bentuk apapun bagi siapapun yang terlibat maupun tak terlibat dalam pembuatannya serta siapapun yang membacanya.

Skripsi ini berisi tentang teori perhitungan energi yang menjelaskan proses terjadinya fenomena *Colossal Magnetoresistance* (CMR). Perhitungannya menggunakan Hamiltonian. Dari hasil ini kemudian akan dihubungkan dengan besaran konduktivitas yang pada akhirnya didapatkan kurva magnetoresistansi bahan sebagai fungsi medan magnet.

Skripsi ini merupakan penerapan dan pengembangan ilmu yang telah didapat penulis sebelumnya. Namun, dalam penyusunan skripsi ini penulis menyadari sepenuhnya bahwa penulis tidak dapat menyelesaikannya sendiri tanpa bantuan yang telah diberikan dari berbagai pihak kepada penulis. Oleh karena itu, pada kesempatan ini penulis mengucapkan terima kasih kepada:

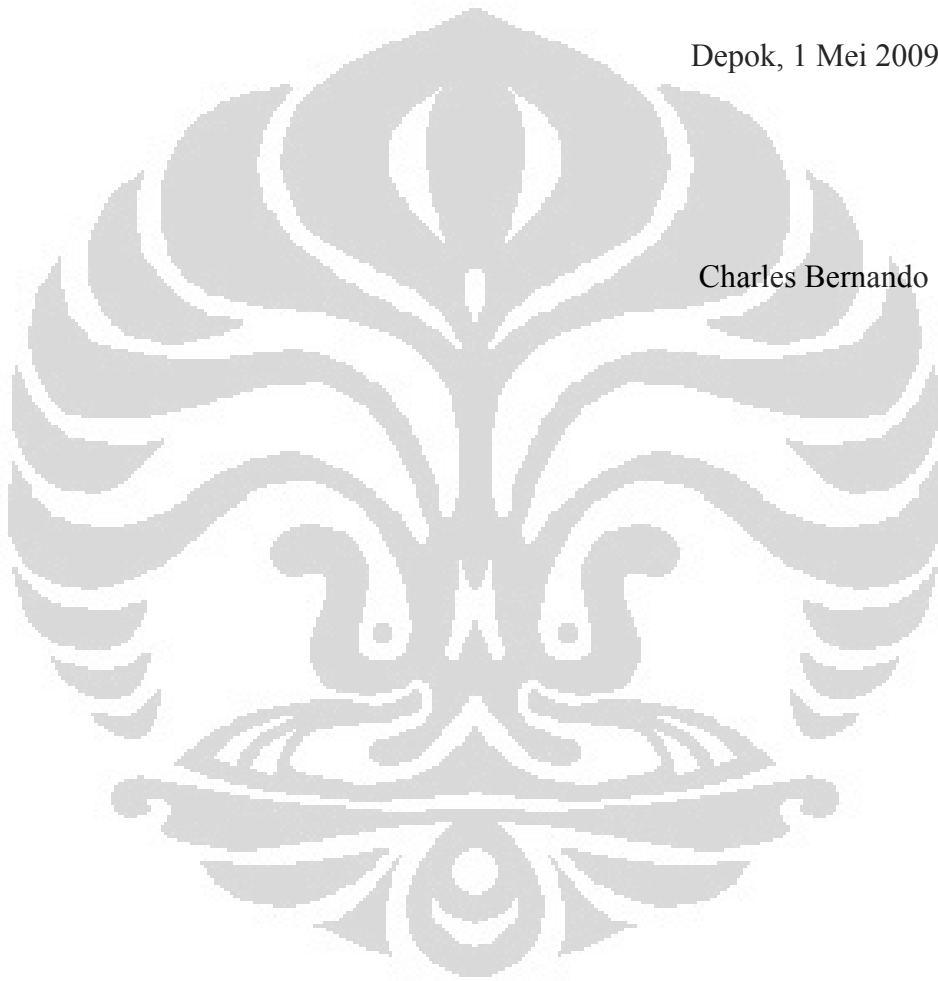
1. Bapak Dr. Budhy Kurniawan selaku Pembimbing Tugas Akhir atas segenap bimbingan, dukungan, dan fasilitas yang telah diberikan selama penulis mengerjakan skripsi ini.
2. Kedua opungku, yang telah menginspirasi untuk selalu memberikan yang terbaik bagi Tuhan dan keluarga. Terima kasih opung atas setiap hal yang telah opung berikan kepadaku.
3. Papa dan Mama tercinta yang telah banyak mendukung dan memberikan segala hal baik bantuan, bimbingan maupun semangat kepada penulis, serta mendoakan penulis yang tak mampu penulis balas.
4. Adikku, Maria Fransisca dan seluruh keluarga besar yang tidak dapat aku sebutkan satu persatu yang selalu berdoa, membantu dan memberikan semangat dalam banyak hal kepada penulis.

5. Kekasihku tercinta, Moria Oktaviane (Farmasi 07) yang telah banyak memberikan bantuan, semangat dan dukungan serta mendoakan penulis. Ketahuilah, engkau adalah pemberian Tuhan yang terbaik didalam hidupku dan kau membuat hidupku menjadi sempurna. Terima kasih atas perhatian dan cinta kasih yang kau berikan bagiku.
6. Anak kelompok kecilku: Michael Joel, Rahman Torkis dan Singkop Marulitua (Fisika 07) yang telah mendoakanku dan memberikan semangat bagiku. Kalian adalah orang yang berharga dalam hidupku. Aku bersyukur dapat membina dan membimbing kalian selama ini, baik dalam kehidupan rohani maupun dalam kuliah.
7. Kak Ryky Nelson (Fisika 03), pemimpin kelompok kecilku yang terbaik yang telah membimbing dalam kehidupan rohaniku. Terima kasih juga atas perhatian yang kakak berikan dalam skripsiku.
8. Kak Pramudya, yang telah banyak membantu memberikan paper-paper dalam proses pengerjaan skripsi ini.
9. Sahabat penulis: Andes Goutama (Fisika 04), Bayu Gautama (FT 05), kak Franky (Ekstensi Fisika 07), kak Ludy (Farmasi 04), Frans Indrata (Farmasi 05). Semua peran kalian dalam penulisan skripsi ini merupakan bantuan terbesar bagiku.
10. Seluruh Dosen pengajar Fisika UI yang telah memberikan ilmu dan modal hidup yang tidak ternilai harganya bagi penulis.
11. Seluruh staff Fisika diantaranya Mbak Ratna, staff Perpustakaan Fisika UI dan staff laboratorium Fisika UI yang telah banyak membantu penulis dalam penulisan skripsi.
12. Seluruh teman-teman PO (Persekutuan Oikumene) FMIPA UI yang telah banyak membantu dan mendoakan penulis.
13. Seluruh mahasiswa-mahasiswi Fisika yang tidak dapat disebutkan namanya satu persatu. Terima kasih atas bantuan dan dukungan kalian.
14. Terakhir, penulis ucapkan terima kasih yang sangat besar kepada orang-orang yang namanya tercantum dalam daftar pustaka, karena tanpa karya mereka penulis tidak dapat menyelesaikan skripsi ini.

Dalam pembuatan skripsi ini, tentu masih ada banyak kekurangan baik dari segi penyajian materi maupun dari segi teknis karena keterbatasan kemampuan yang penulis miliki. Oleh karena itu, penulis sangat mengharapkan kritik dan saran yang membangun demi kesempurnaan skripsi ini. Semoga skripsi ini dapat berguna bagi siapa saja baik saat ini maupun di masa yang akan datang.

Depok, 1 Mei 2009

Charles Bernando



**HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI  
TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS**

---

---

Sebagai sivitas akademik Universitas Indonesia, saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Charles Bernando

NPM : 0305027017

Program Studi : Fisika Material dan Zat Padat

Departemen : Fisika

Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Jenis Karya : Skripsi

demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Indonesia **Hak Bebas Royalti Noneksklusif (*Non-exclusive Royalty-Free Right*)** atas karya ilmiah saya yang berjudul:

Perhitungan Energi dalam Colossal Magnetoresistance Bahan  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$

beserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneksklusif ini Universitas Indonesia berhak menyimpan, mengalihmedia/formatkan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (*database*), merawat, dan memublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Dibuat di : Depok

Pada Tanggal : 1 Mei 2009

Yang menyatakan

(Charles Bernando)

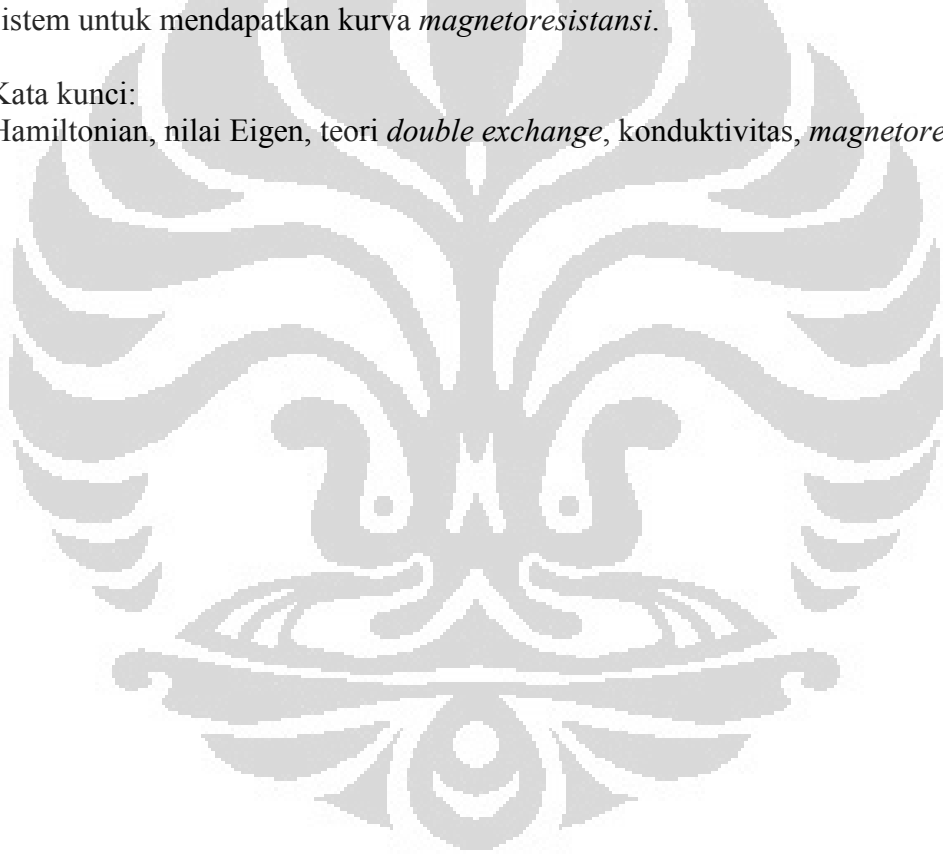
## ABSTRAK

Nama : Charles Bernando  
Program Studi : Fisika  
Judul : Perhitungan Energi dalam *Colossal Magnetoresistance* Bahan  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$

Penelitian ini membahas Hamiltonian dalam fenomena *colossal magnetoresistance* yang mempengaruhi energi total elektron yang berpindah. Hamiltonian ini ditentukan berdasarkan teori *double exchange* dan aturan Hund, terdiri dari suku perpindahan elektron, kopling Hund, pengaruh phonon dan potensial acak tiap site. Dengan Hamiltonian ini diperoleh hasil bahwa energi dari elektron dipengaruhi oleh banyaknya unit sel yang digunakan sebagai model. Selain itu dibahas juga pengaruh medan magnet luar sebagai perturbasi pada sistem untuk mendapatkan kurva *magnetoresistansi*.

Kata kunci:

Hamiltonian, nilai Eigen, teori *double exchange*, konduktivitas, *magnetoresistansi*





## ABSTRACT

Name : Charles Bernando  
Study Program : Physics  
Title : Energy Calculation in Colossal Magnetoresistance on  
 $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$  Material

This research investigate Hamiltonian in colossal magnetoresistance. It influences total energy of electron transfer. This Hamiltonian is based on double exchange theory and Hund's arrangement. This Hamiltonian factor is from electron transfer, Hund's coupling, phonon's effect and random potential on site. The result of this Hamiltonian shows that this electron's energy influenced by the number of unit cell which is used as a model. Beside that, this paper study the influence of external magnetic field as a perturbation in this system to get a magnetoresistance curve.

Key words:  
Hamiltonian, Eigenvalue, double exchange theory, conductivity, magnetoresistance

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL .....	i
HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS .....	ii
LEMBAR PENGESAHAN .....	iii
KATA PENGANTAR/UCAPAN TERIMA KASIH .....	iv
LEMBAR PERSETUJUAN PUBLIKASI KARYA ILMIAH .....	vii
ABSTRAK .....	viii
DAFTAR ISI .....	x
DAFTAR GAMBAR .....	xi
DAFTAR TABEL .....	xii
DAFTAR LAMPIRAN .....	xiii
<b>BAB. 1 PENDAHULUAN .....</b>	<b>1</b>
<b>BAB. 2 LANDASAN TEORI.....</b>	<b>3</b>
2.1 Manganat .....	4
2.2 Teori Double Exchange .....	7
2.3 Hamiltonian.....	9
2.4 Jenis Bahan Berdasarkan Keteraturan Spin .....	10
2.4.1 Ferromagnet .....	11
2.4.2 Antiferromagnet.....	12
2.4.3 Paramagnet.....	13
<b>BAB. 3 PERHITUNGAN ENERGI.....</b>	<b>15</b>
3.1 Model .....	15
3.2 Perhitungan Energi.....	17
3.3 Diagram Alir Perhitungan Energi .....	21
<b>BAB.4 HASIL DAN PEMBAHASAN .....</b>	<b>22</b>
4.1 Hamiltonian Pengaruh Double Exchange .....	22
4.2 Hamiltonian Pengaruh Double Exchange dan Perturbasi Medan Magnet .....	24
4.3 Hamiltonian Pengaruh Double Exchange dan Phonon .....	25
4.4 Hamiltonian Pengaruh Double Exchange, Phonon dan Perturbasi Medan Magnet.....	30
4.5 Hubungan Energi dengan Fenomena dalam Colossal Magnetoresistance.....	30
<b>BAB.5 KESIMPULAN DAN SARAN .....</b>	<b>35</b>
5.1 Kesimpulan .....	35
5.2 Saran .....	35
<b>DAFTAR REFERENSI .....</b>	<b>36</b>
LAMPIRAN.....	38

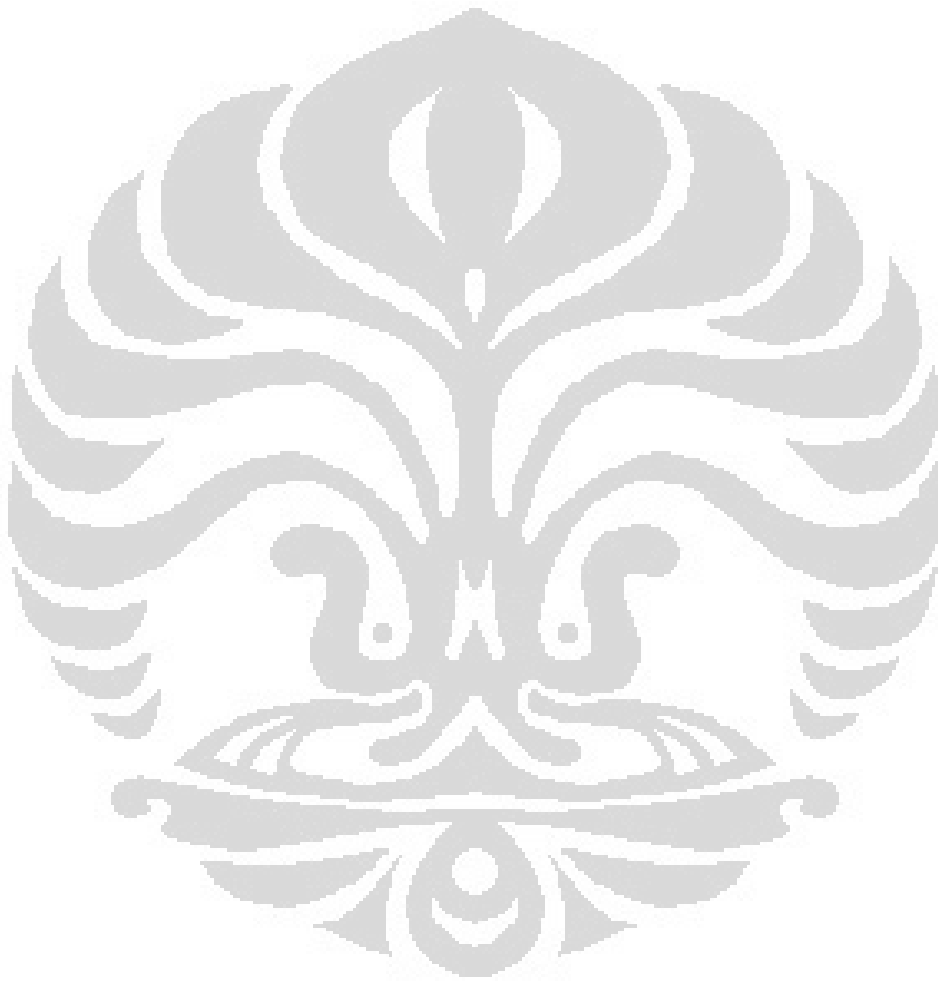
## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1. Material Perovskite Oxides Manganat .....	4
Gambar 2.2. Contoh Material Perovskite Manganites: $\text{LaCaMnO}_3$ .....	6
Gambar 2.3. Skema Teori Double Exchange .....	8
Gambar 2.4. Susunan Momen Magnet pada Bahan Ferromagnet .....	11
Gambar 2.5. Susunan Momen Magnet pada Bahan Antiferromagnet.....	12
Gambar 2.6. Tipe Bahan Antiferromagnet dalam Cubic Lattice .....	12
Gambar 2.7. Tipe Bahan Antiferromagnet dalam Lattice BCC.....	13
Gambar 2.8. Jenis Bahan Berdasarkan Keteraturan Spinnya: Ferromagnet dan Antiferromagnet .....	13
Gambar 2.9. Transisi Sifat Bahan dari Paramagnet Menjadi Ferromagnet.....	14
Gambar 3.1. Model Mn untuk Teori Double Exchange (3 Unit Sel).....	16
Gambar 3.2. Contoh Model 2 Dimensi .....	16
Gambar 4.1. Dua Mode Distorsi Kisi (Phonon): Arah x dan z .....	26
Gambar 4.2. Kurva Magnetoresistansi Model 2 Dimensi yang Dipengaruhi Double Exchange .....	31
Gambar 4.3. Kurva Magnetoresistansi Model 3 Dimensi yang Dipengaruhi Double Exchange .....	32
Gambar 4.4. Kurva Magnetoresistansi Model 2 Dimensi yang Dipengaruhi Double Exchange dan Phonon .....	33
Gambar 4.5. Kurva Magnetoresistansi Model 3 Dimensi yang Dipengaruhi Double Exchange dan Phonon .....	34

## DAFTAR TABEL

Tabel 2.1. Spesifikasi Bahan untuk Membuat Bahan Manganat  $\text{La}_{1-x}\text{Mg}_x\text{MnO}_3$ ... 5

Tabel 2.2. Konfigurasi Elektron Beberapa Unsur dalam Material Manganat..... 7



## DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Data Magnetoresistansi Model 2 Dimensi dan 3 Dimensi Pengaruh Double Exchange serta Double Exchange + Phonon.....	38
--	----



## BAB 1 PENDAHULUAN

Dunia ilmu pengetahuan dan teknologi yang berkembang saat ini membuat kebutuhan akan dunia informasi juga semakin meningkat, khususnya perkembangan teknologi baru dalam dunia informasi untuk media penyimpanan data. Media penyimpanan data seperti *high capacity magnetic storage* menjadi salah satu contohnya.

*Magnetic storage* ialah suatu media penyimpanan data dalam medium yang termagnetisasi. Pada tahun 2007, *magnetic storage* (terutama harddisk sebagai media penyimpanan data dalam komputer) banyak digunakan untuk menyimpan data dalam komputer seperti sinyal audio dan video [1].

*Magnetic storage* menggunakan suatu fenomena magnetoresistance, yaitu *Colossal Magnetoresistance* (CMR). *Magnetoresistance* ialah perubahan hambatan listrik dari suatu bahan dalam pengaruh medan magnet luar. Fenomena ini pertama kali ditemukan oleh William Thomson pada tahun 1856 [2]. Berdasarkan besarnya, *magnetoresistance* terbagi menjadi 2 yaitu *Giant Magnetoresistance* (GMR) dan *Colossal Magnetoresistance* (CMR). *Colossal Magnetoresistance* ialah suatu fenomena dimana suatu bahan akan berkurang hambatan listriknya dalam orde  $10^4$  hingga  $10^6$  saat diberikan medan magnet luar dalam orde beberapa tesla saja [3]. Selain itu, fenomena ini juga dipengaruhi oleh temperatur ruangan dimana bahan itu berada. Bahan yang dapat menunjukkan fenomena ini ialah manganese based perovskite oxides atau biasa disebut dengan manganat.

Telah banyak penelitian yang dikembangkan tentang colossal magnetoresistance, khususnya tentang proses terjadinya fenomena ini. Ada yang mengemukakan suatu teori yang disebut double exchange theory atau teori pertukaran ganda [4, 5]. Teori ini awalnya dikemukakan oleh Clarence Zener pada tahun 1951. Teori ini menjelaskan pertukaran elektron diantara dua spesies (dua ion). Teori ini juga dapat menjelaskan sifat bahan yang akan digunakan, yaitu apakah bahan itu bersifat ferromagnetik, antiferromagnetik atau paramagnetik.

Ferromagnetik menunjukkan bahwa bahan bersifat konduktor, sedangkan paramagnetik menunjukkan bahwa bahan bersifat isolator.

Selain itu, ada penelitian lain tentang fenomena colossal magnetoresistance yaitu adanya disorder atau ketidakteraturan pada setiap site pada bahan [6]. Ketidakteraturan terjadi karena efek logam campuran pada ion A dalam bahan  $AMnO_3$  ataupun karena substitusi Cr ke site Mn yang akan menyebabkan ketidakteraturan struktural maupun elektrostatik, yang akan berpengaruh pada potensial di tiap site pada bahan.

Dalam penelitian ini dibahas fenomena colossal magnetoresistance dari segi teori perhitungannya yaitu dengan menggunakan suatu model Hamiltonian. Hamiltonian dalam hal ini menggunakan teori double exchange dan juga dipengaruhi oleh faktor lain, seperti kopling Hund, pengaruh phonon, dan juga potensial acak yang ada pada setiap tempat dalam bahan. Namun, dalam penelitian ini pengaruh potensial acak tidak akan dimasukkan. Kemudian dengan memasukkan Hamiltonian ini ke persamaan Eigen maka didapatkan nilai Eigen atau nilai energi yang diperlukan dalam fenomena colossal magnetoresistance ini. Nilai energi ini kemudian dimasukkan ke persamaan konduktivitas, sehingga akan didapatkan nilai resistivitas dari tiap bahan, yang dibatasi hanya untuk bahan  $LaCaMnO_3$ .

Penelitian ini bersifat teoritik yaitu menggunakan metode analitik dan bertujuan untuk menjelaskan fenomena colossal magnetoresistance pada bahan melalui Hamiltonian dan juga bertujuan untuk menentukan hubungan antara energi dengan fenomena colossal magnetoresistance.

Sistematika penulisan skripsi ini disusun sebagai berikut: Bab 1 berisi latar belakang, permasalahan serta tujuan dilakukannya penelitian ini. Bab 2 berisi tentang teori-teori yang menjelaskan fenomena colossal magnetoresistance, seperti teori double exchange dan lain-lain. Pada bab 3 akan dijelaskan Hamiltonian yang digunakan untuk mendapatkan nilai energi pada fenomena colossal magnetoresistance, sedangkan hasil penelitian yaitu kurva magnetoresistansi dari nilai energi dibahas pada bab 4.

## BAB 2

### LANDASAN TEORI

*Colossal Magnetoresistance* ialah fenomena berkurangnya hambatan listrik suatu bahan karena pengaruh medan magnet luar. Hambatan listrik bahan tersebut berkurang dalam orde  $10^4$ - $10^6$  dengan memberikan medan magnet sebesar beberapa tesla saja [4, 5]. Fenomena ini banyak digunakan dalam media penyimpanan data, seperti harddisk, dan media lainnya. Dalam memahami dan menjelaskan fenomena *colossal magnetoresistance* ini, banyak sekali penelitian yang dikembangkan.

Salah satu teori yang dikembangkan untuk menjelaskan fenomena ini ialah teori double exchange atau teori pertukaran ganda yang dikemukakan oleh Clarence Zener pada tahun 1951. Selain itu, masih banyak lagi penelitian yang dikembangkan oleh para peneliti hingga saat ini.

Material atau bahan yang dapat menimbulkan fenomena colossal magnetoresistance ialah material perovskite oxides, salah satunya ialah manganites [4, 5, 7, 8]. Material ini ialah material campuran beberapa bahan dasar, yang terdiri dari rare earth ion (ion tanah jarang) dan juga logam alkali tanah serta atom mangan (Mn) dan atom oksigen (O) sebagai unsur utama penyusun material manganat.

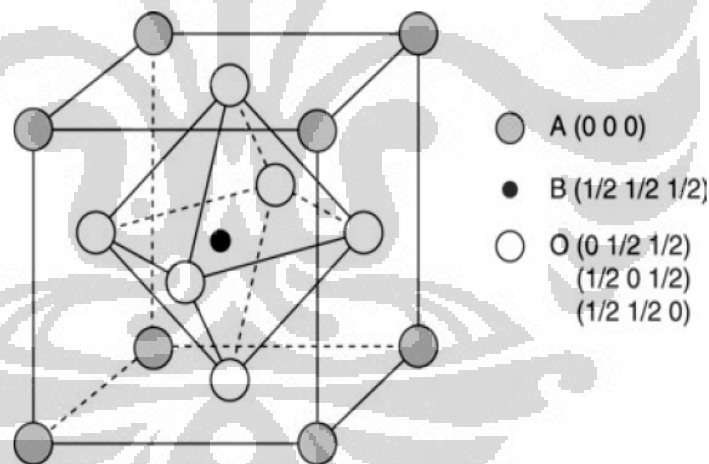
Sifat utama dari material ini ialah dapat menimbulkan fenomena colossal magnetoresistance, dimana dengan hanya memberikan medan magnet beberapa tesla saja dapat menimbulkan efek magnetoresistance yang negatif, yaitu berkurangnya hambatan material tersebut dalam orde yang besar, sekitar  $10^4$  hingga  $10^6$ . Selain itu, dengan pemberian doping yang berbeda pada bahan ini, dapat juga menimbulkan fenomena transisi dari bahan yang bersifat isolator menjadi konduktor atau sebaliknya. Dalam hal ini, sifat bahan tersebut dilihat dari susunan spin-spin elektron pada bahan. Susunan spin-spin yang searah semua disebut bahan ferromagnet, dan merupakan bahan yang bersifat konduktor, sedangkan susunan spin-spin yang berlawanan arah maupun arahnya acak disebut bahan antiferromagnet atau paramagnet, dan merupakan bahan yang bersifat isolator. Sifat bahan yang berupa isolator maupun konduktor ini juga berhubungan



dengan besar kecilnya hambatan bahan tersebut. Jika hambatan bahan tersebut kecil, maka elektron akan dapat bergerak dengan bebas sehingga ini menyebabkan bahan tersebut bersifat konduktor (mudah mentransfer elektron), sedangkan jika hambatan bahan tersebut besar, maka elektron akan sulit untuk bergerak dengan bebas dalam bahan, sehingga ini menyebabkan bahan tersebut bersifat isolator. Jadi, dari hal ini dapat disimpulkan bahwa ada hubungan antara keteraturan spin dengan transfer elektron, yang akan menentukan sifat suatu bahan.

## 2.1 MANGANAT

Bahan manganat merupakan material yang termasuk ke dalam jenis material perovskite, dimana perovskite merupakan material alami dengan formula umum  $ABX_3$  dan oksida perovskite berasal dari tanah jarang dengan unsur transisi 3d. Nama perovskite sendiri berasal dari seorang kebangsaan Rusia yang bernama Count Perovski pada abad ke-19 [9].



Gambar 2.1 Material Perovskite Oxides Manganat  
(telah diolah kembali)

Material manganate dengan formula umum  $ABO_3$  pada umumnya merupakan material yang mempunyai kristal dengan struktur orthorombic maupun simple cubic, seperti yang ditunjukkan gambar 2.1. A melambangkan ion yang berasal dari jenis rare earth (ion tanah jarang) dan merupakan trivalent ion. Contohnya ialah La (lantan), Nd (neodimium) dan Sm (samarium). Selain itu A juga dapat melambangkan ion yang berasal dari logam earth alkaline (logam alkali

tanah) dan merupakan divalent ion. Logam alkali tanah merupakan logam yang termasuk dalam golongan II A, yang mempunyai 2 elektron valensi. Contohnya ialah logam Be (berilium), Mg (magnesium), Ca (kalsium), Sr (stronsium), Ba (barium) dan Ra (radium). Sedangkan B melambangkan ion Mn (mangan) dan O melambangkan atom O (oksigen).

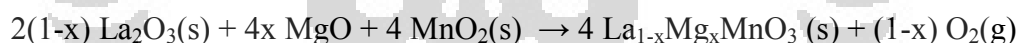
Proses pembuatannya ialah dengan pencampuran bahan-bahan dasarnya. Contohnya, untuk menghasilkan material manganat  $La_{1-x}Mg_xMnO_3$ , maka prosesnya ialah dengan mencampurkan bahan dasar:  $La_2O_3$ , MgO dan juga  $MnO_2$ .

Tabel 2.1. Spesifikasi Bahan untuk Membuat Bahan Manganat  $La_{1-x}Mg_xMnO_3$

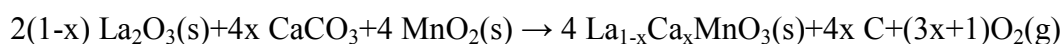
No	Nama Bahan	Rumus Kimia	Mr (gram/mol)
1.	Lantanum oksida	$La_2O_3$	325,8
2.	Mangan (IV) oksida	$MnO_2$	86,94
3.	Magnesium oksida	MgO	40,3

[10]

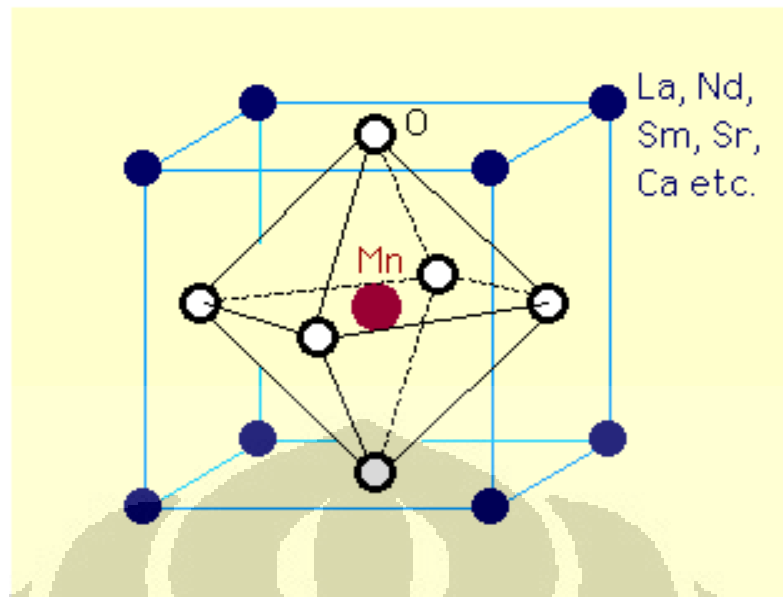
Persamaan reaksinya ialah seperti dibawah ini:



Setelah proses pencampuran ini, kemudian akan dilakukan proses milling (penggerusan atau penggilingan) selama 10 jam, lalu akan mengalami proses furnace (pemanasan) pada suhu  $1300^0C$  selama 6 jam dan akan dimilling lagi selama 10 jam. Kemudian, akan difurnace kembali pada suhu  $1100^0 C$  selama 24 jam dan akhirnya akan didapat material manganat  $La_{1-x}Mg_xMnO_3$  [10]. Contoh lainnya ialah bahan manganat  $La_{1-x}Ca_xMnO_3$  yang merupakan hasil dari proses pencampuran bahan dasar:  $La_2O_3$ ,  $CaCO_3$  dan  $MnO_2$ . Persamaan reaksinya ialah:



Semua material ini jika diberikan medan magnet beberapa tesla saja akan menunjukkan fenomena colossal magnetoresistance.



Gambar 2.2 Contoh Material Perovskite Manganites:  $\text{LaCaMnO}_3$   
[10]

Fraksi  $x$  dalam hal ini jika diubah-ubah akan mempengaruhi sifat bahan manganat. Dalam persamaan reaksi untuk mendapat  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ , jika bahan dasar  $\text{CaCO}_3$  tidak ikut dimilling (fraksi  $x = 0$ ), maka hasil akhirnya ialah  $\text{LaMnO}_3$  dengan bilangan oksidasi  $\text{La}^{3+}\text{Mn}^{3+}\text{O}_3^{2-}$ . Sebaliknya, jika  $\text{La}_2\text{O}_3$  tidak ikut dimilling (fraksi  $x = 1$ ), maka hasil akhirnya ialah  $\text{CaMnO}_3$  dengan bilangan oksidasi  $\text{Ca}^{2+}\text{Mn}^{4+}\text{O}_3^{2-}$ . Jadi, jika salah satu bahan ini didoping ( $\text{LaMnO}_3$  didoping dengan  $\text{Ca}$  sedangkan  $\text{CaMnO}_3$  didoping dengan  $\text{La}$ ), akan terbentuk bahan perovskite oxides manganat  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$  dengan bilangan oksidasinya  $\text{La}_{1-x}^{3+}\text{Ca}_x^{2+}\text{Mn}_{1-x}^{3+}\text{Mn}_x^{4+}\text{O}_3^{2-}$ . Jadi, dapat disimpulkan bahwa saat didoping,  $\text{Mn}$  akan berubah bentuk menjadi ion, yaitu masing-masing ion  $\text{Mn}^{3+}$  dan  $\text{Mn}^{4+}$  dengan fraksi masing-masing  $1-x$  dan  $x$  [4, 5]. Ion  $\text{Mn}^{3+}$  dan  $\text{Mn}^{4+}$  ini ada dalam 1 unit sel tergantung pada banyaknya  $\text{La}$  atau  $\text{Ca}$  dalam unit sel tersebut.

Melalui hasil-hasil eksperimen, dapat diketahui bahwa fraksi  $x$  sangat berpengaruh dalam bahan manganat. Dari hasil eksperimen, bahan akan bertransisi dari isolator menjadi konduktor (ferromagnet) saat nilai fraksi  $x$  diantara 0,2 hingga 0,4. Sedangkan diluar nilai itu, bahan akan bersifat isolator (antiferromagnet) [8].

Tabel 2.2. Konfigurasi Elektron Beberapa Unsur dalam Material Manganat

Atom	Konfigurasi Elektron
Mn	[Ar] 3d <sup>5</sup> 4s <sup>2</sup>
O	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>4</sup>
Be	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>
Mg	[Ne] 3s <sup>2</sup>
Ca	[Ar] 4s <sup>2</sup>
Sr	[Kr] 5s <sup>2</sup>
Ba	[Xe] 6s <sup>2</sup>
Ra	[Rn] 7s <sup>2</sup>
La	[Xe] 5d <sup>1</sup> 6s <sup>2</sup>
Nd	[Xe] 4f <sup>4</sup> 5d <sup>0</sup> 6s <sup>2</sup>
Sm	[Xe] 4f <sup>6</sup> 5d <sup>0</sup> 6s <sup>2</sup>

(telah diolah kembali)

## 2.2 TEORI DOUBLE EXCHANGE

Teori double exchange ialah teori yang memprediksi perpindahan elektron diantara dua spesies atau dua ion [4, 5]. Teori ini mempunyai implikasi yang penting apakah material atau bahan itu bersifat ferromagnet, antiferromagnet atau sifat-sifat lainnya. Teori ini berdasarkan atas aturan Hund untuk membuat energi sistem menjadi seminimal mungkin, yaitu dari aturan pertama Hund: energi akan minimum bila susunan spin-spin elektron saling sejajar satu dengan yang lainnya [11]. Dalam hal ini susunan spin-spinnya akan menuju ke satu arah: arah atas atau 'up' terlebih dahulu. Teori ini serupa dengan teori superexchange, tetapi perbedaannya hanya pada dua sistem yang berinteraksi. Pada superexchange, dua ion yang berinteraksi punya elektron valensi yang sama sedangkan pada double exchange, dua ion yang berinteraksi salah satunya harus punya satu elektron valensi yang lebih.

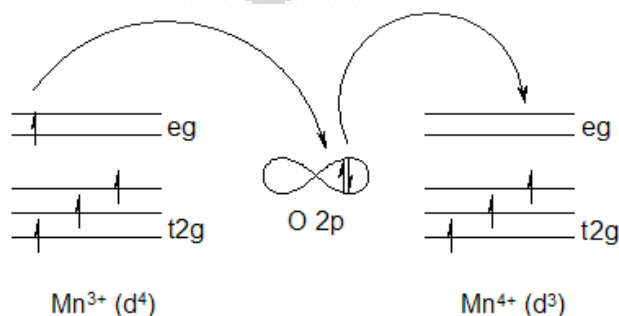
Teori ini ialah salah satu dari sekian banyak teori pertukaran yang ada dalam material. Dalam hal ini pertukarannya ialah perpindahan elektron. Elektron tersebut berpindah dari satu ion ke ion yang lain dengan cara hopping (melompat). Sebagai contoh, dalam bahan LaCaMnO<sub>3</sub>, yang berperan sebagai ion ialah atom Mn karena atom Mn telah menjadi ion Mn<sup>3+</sup> dan Mn<sup>4+</sup> akibat dari doping atom La pada CaMnO<sub>3</sub> atau doping atom Ca pada LaMnO<sub>3</sub>. Karena hal ini, maka ion Mn<sup>3+</sup>

dan  $\text{Mn}^{4+}$  akan berinteraksi, yaitu dengan adanya transfer atau perpindahan elektron dari ion  $\text{Mn}^{3+}$  ke  $\text{Mn}^{4+}$ .

Secara spesifik, elektron yang berpindah tersebut memerlukan waktu yang lama untuk sampai ke ion  $\text{Mn}^{4+}$ . Namun, teori double exchange mengemukakan bahwa elektron yang berpindah harus melewati suatu spesies atau atom perantara. Dalam hal ini elektron yang berpindah akan melewati atom O, yang berada di tengah-tengah tiap sisi pada bahan  $\text{LaCaMnO}_3$ . Jadi, perpindahan elektron yang terjadi ialah dari ion  $\text{Mn}^{3+}$  ke atom O dan elektron dari atom O berpindah ke ion  $\text{Mn}^{4+}$ . Proses perpindahan ini terjadi secara bersamaan, sehingga proses ini dinamakan double exchange [4, 5, 12].

Sesuai dengan aturan pertama Hund, bahwa energi akan minimum jika spin elektron disusun secara paralel terlebih dahulu, maka dalam teori double exchange, perpindahan elektron akan terjadi jika arah spin elektron di spesies penerima (ion  $\text{Mn}^{4+}$ ) sama dengan arah spin dari elektron yang berpindah. Arah spin elektron ini akan sama jika ada interaksi magnetik antara spin dengan medan magnet. Disinilah pengaruh medan magnet pada fenomena colossal magnetoresistance, yaitu untuk menyearahkan spin-spin elektron.

Saat medan magnet diberikan pada bahan  $\text{LaCaMnO}_3$ , maka spin-spin elektron valensinya akan menuju ke satu arah. Saat ini, arah spin elektron valensi di  $\text{Mn}^{3+}$  akan sama dengan arah spin elektron valensi di  $\text{Mn}^{4+}$ . Dengan demikian, akan terjadi perpindahan elektron dari  $\text{Mn}^{3+}$  ke  $\text{Mn}^{4+}$  dengan dua perpindahan: elektron dari  $\text{Mn}^{3+}$  berpindah ke atom O sedangkan elektron di atom O (yang arah spinnya sama dengan arah spin elektron dari  $\text{Mn}^{3+}$ ) akan berpindah ke  $\text{Mn}^{4+}$ . Perpindahan elektron seperti ini akan terjadi terus menerus hingga ke ujung bahan.



Gambar 2.3 Skema Teori Double Exchange

[12]

Perpindahan elektron seperti ini harus berlangsung terus hingga ujung bahan sebab konduksi merupakan peristiwa transfer elektron dari ujung bahan yang satu hingga ujung yang satunya lagi. Karena itu, dalam teori ini, akan dibuat suatu model yang memungkinkan elektron dapat ditransfer hingga ujung bahan.

### 2.3 HAMILTONIAN

Dalam colossal magnetoresistance, telah dijelaskan bahwa fenomena yang terjadi dapat dijelaskan dengan teori double exchange, dimana terjadi perpindahan elektron dengan cara hopping secara bersamaan antara ion yang mempunyai elektron valensi lebih banyak ke atom perantara dan juga antara atom perantara ke ion yang mempunyai elektron valensi lebih sedikit. Selain itu ada juga Hund's coupling atau kopling Hund antara elektron valensi yang berpindah (elektron yang terdelokalisasi di ion donor) dengan elektron valensi yang tidak berpindah (elektron yang terlokalisasi di ion penerima). Hal lain yang juga berpengaruh ialah adanya pengaruh phonon (vibrasi kisi) pada sistem. Phonon ini terjadi karena adanya pengaruh suhu atau temperatur pada bahan. Dengan naiknya temperatur bahan, maka dinamika kisi-kisi akan bertambah sehingga akan terjadi vibrasi dan ini akan menimbulkan adanya phonon pada bahan [6]. Karena hal-hal yang disebutkan ini, maka Hamiltonian pada fenomena colossal magnetoresistance sangat bergantung pada teori double exchange, kopling Hund dan pengaruh phonon. Hamiltonian pada colossal magnetoresistance ialah [3, 6]:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + Hc) - J_H \sum_i \sigma_i^z S_i - g \sum_i n_i Q_i + \frac{1}{2} \sum_i Q_i^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{\langle ij \rangle} Q_i Q_j + \sum_i \varepsilon_i n_i$$

Dalam Hamiltonian diatas, suku pertama merupakan teori double exchange, suku kedua merupakan kopling Hund, suku ketiga merupakan suku karena kopling antara elektron dengan phonon. Suku keempat dan kelima merupakan suku energi elastik phonon, sedangkan suku terakhir merupakan suku karena random disorder potential. Suku karena energi elastik phonon dapat juga disebut energi karena distorsi Jahn-Teller (Jahn-Teller distortion).

Dalam persamaan diatas,  $t$  ialah transfer integral, sedangkan  $c_{i\sigma}^\dagger$  ialah operator untuk mengkreasikan elektron pada site  $i$  dengan spin  $\sigma$ , dan  $c_{j\sigma}$  ialah

operator untuk menganihilasi elektron pada site  $j$  dengan spin  $\sigma$  [13, 14] dan H.c. ialah kependekan dari Hermitian Conjugate, dimana Hermitian Conjugate menunjukkan kombinasi linear dengan operator sebelumnya sehingga operator tersebut mempunyai arti dan bersifat fisis [14]. Jadi, Hamiltonian diatas dapat juga dituliskan:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) - J_H \sum_i \sigma_i^z S_i - g \sum_i n_i Q_i + \frac{1}{2} \sum_i Q_i^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{\langle ij \rangle} Q_i Q_j + \sum_i \varepsilon_i n_i$$

Suku kedua merupakan kopling Hund antara elektron yang terdelokalisasi  $\sigma_i^z$  dengan elektron-elektron yang terlokalisasi  $S_i$  dimana  $\sigma_i^z$  ialah spin arah  $z$  dari elektron yang berpindah (terdelokalisasi) pada site  $i$  sedangkan  $S_i$  ialah spin elektron yang terlokalisasi pada site  $i$ .  $J_H$  ialah konstanta kopling Hund. Suku ketiga ialah suku kopling antara elektron dengan phonon. Pada suku ketiga ini,  $g$  ialah konstanta kopling elektron-phonon, sedangkan  $n_i$  ialah kerapatan elektron lokal pada site  $i$  dimana  $n_i = \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ . Variabel lainnya,  $Q_i$  ialah amplitudo distorsi kisi pada site  $i$ . Suku keempat ialah energi elastik phonon pada site  $i$ , sedangkan suku kelima ialah suku energi elastik phonon antara site  $i$  dan site  $j$ . Variabel  $\lambda$  ialah konstanta distorsi antara phonon pada site  $i$  dan  $j$ . Suku terakhir merupakan suku random disorder potensial. Suku ini ada karena perubahan energi yang terjadi pada tiap site dalam bahan akibat pengaruh doping. Variabel  $\varepsilon_i$  merupakan energi potensial acak pada site  $i$ . Pada umumnya,  $\varepsilon_i$  merupakan tipe potensial biner yaitu  $\varepsilon_i = \pm \Delta$  dimana  $\Delta$  ialah energi potensialnya. [3, 6].

## 2.4 JENIS BAHAN BERDASARKAN KETERATURAN SPIN

Bahan atau material pada umumnya diklasifikasikan menjadi 3 jenis, yaitu logam, keramik dan polimer. Tetapi ada juga yang disebut dengan komposit, yaitu gabungan dari dua atau lebih jenis material. Secara makroskopis material terlihat sebagai sebuah benda tegar yang padat, tetapi sesungguhnya secara mikroskopis material terdiri dari bagian-bagian yang lebih kecil berupa kristal-kristal dengan struktur dan ukuran tertentu. Kristal-kristal tersebut juga tersusun dari atom-atom

yang memiliki elektron-elektron yang mempunyai spin tertentu serta inti atom yang terdiri atas proton dan neutron.

Jenis bahan berdasarkan keteraturan spinnya dibagi menjadi 3 bagian yaitu bahan ferromagnet, antiferromagnet dan paramagnet [11].

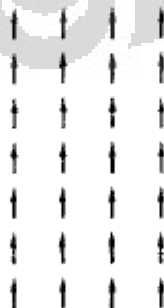
#### 2.4.1. Ferromagnet

Ferromagnet ialah jenis bahan yang jika diberikan suatu medan magnet luar menjadi termagnetisasi dan tetap akan termagnetisasi untuk beberapa waktu yang lama setelah bahan tersebut tidak diberikan medan magnet luar lagi. Contoh bahan jenis ini ialah besi. Magnetisasinya bersifat spontan. Material jenis ini domain-domain magnetnya akan menuju ke satu arah setelah medan magnet luar diberikan. Dengan kata lain, momen-momen magnetnya akan memberikan kontribusi pada total magnetisasinya. Proses penyearahan ini hanya akan terjadi pada temperatur dibawah suatu temperatur kritis bahan tersebut, yang disebut dengan temperatur Curie [11].

Bahan ferromagnet juga mengalami interaksi pertukaran untuk mempertahankan agar semua momen magnetnya menuju ke satu arah. Hamiltoniannya untuk bahan ferromagnet yang diberikan medan magnet luar ialah: [11]

$$H = -\sum_{ij} J_{ij} S_i \cdot S_j + g \mu_B \sum_j S_j \cdot B$$

Suku pertama dalam persamaan ini ialah energi pertukaran Heisenberg sedangkan suku keduanya ialah energi efek Zeeman.



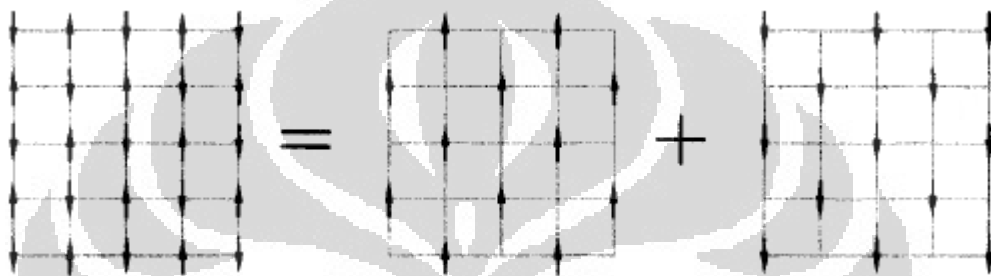
Gambar 2.4 Susunan Momen Magnet pada Bahan Ferromagnet

[11]



### 2.4.2 Antiferromagnet

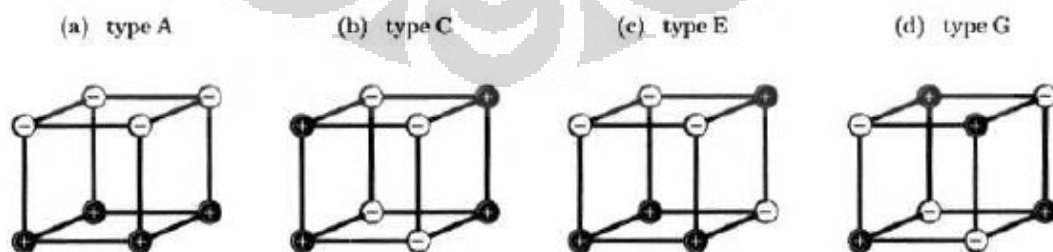
Antiferromagnet ialah sifat bahan yang susunan momen magnetnya antiparalel antara momen magnet yang satu dengan momen magnet tetangganya. Ini terjadi karena konstanta pertukaran  $J$  dalam Hamiltonian pada ferromagnet bernilai negatif. Antiferromagnet juga dapat dimisalkan dengan superposisi dua lattice atau kisi yang salah satu kisi mempunyai susunan momen magnet yang menuju ke satu arah dan kisi yang lainnya mempunyai susunan momen magnet yang berlawanan arahnya [11], seperti pada gambar 2.4



Gambar 2.5 Susunan Momen Magnet pada Bahan Antiferromagnet

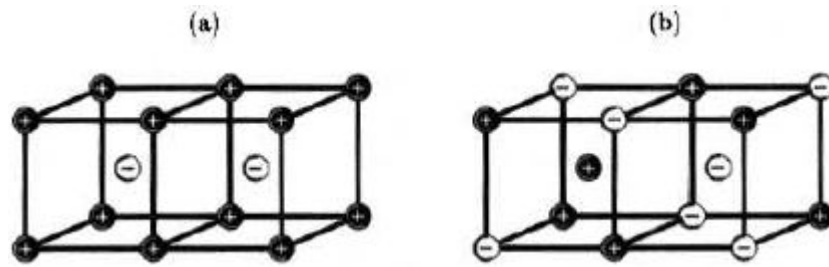
[11]

Karena banyaknya susunan yang dapat dibuat dari superposisi dua lattice ini, maka bahan antiferromagnet mempunyai banyak tipe. Tipe yang umum dalam kisi yang berbentuk kubik atau kubus, ialah tipe A, tipe C, tipe E dan tipe G seperti yang ditunjukkan pada gambar 2.6. Dalam tipe-tipe bahan antiferromagnet diatas, tipe G ialah tipe yang paling umum. Contohnya ialah dalam bahan  $\text{LaFeO}_3$  dan  $\text{LaCrO}_3$ . Selain itu ada tipe A, yang salah satu contohnya ialah bahan  $\text{LaMnO}_3$  cubic perovskite [11].



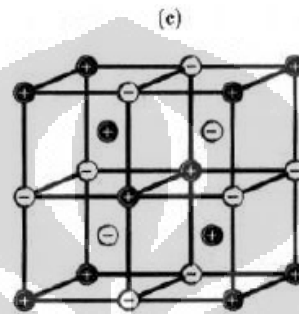
Gambar 2.6 Tipe Bahan Antiferromagnet dalam Cubic Lattice (Kisi Kubik)

[11]



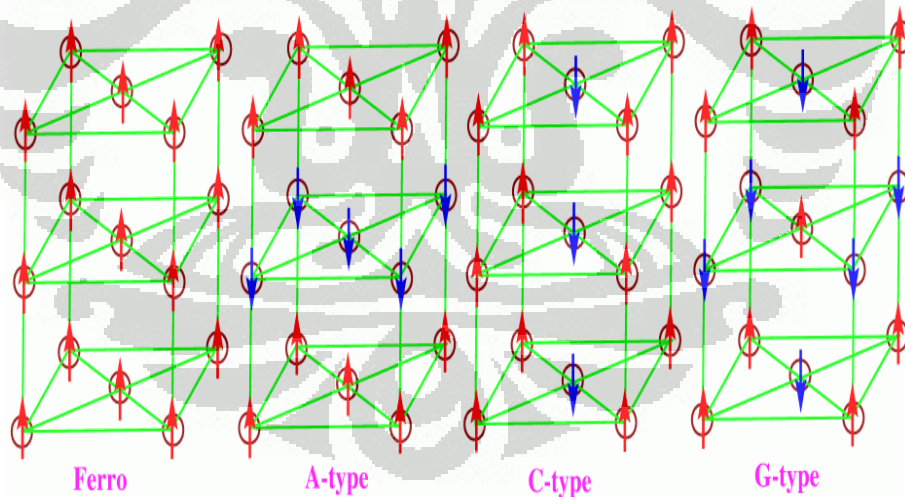
Gambar 2.7 (a) dan (b) Tipe Bahan Antiferromagnet dalam Lattice BCC

[11]



Gambar 2.7 (c) Tipe Bahan Antiferromagnet dalam Lattice BCC

[11]

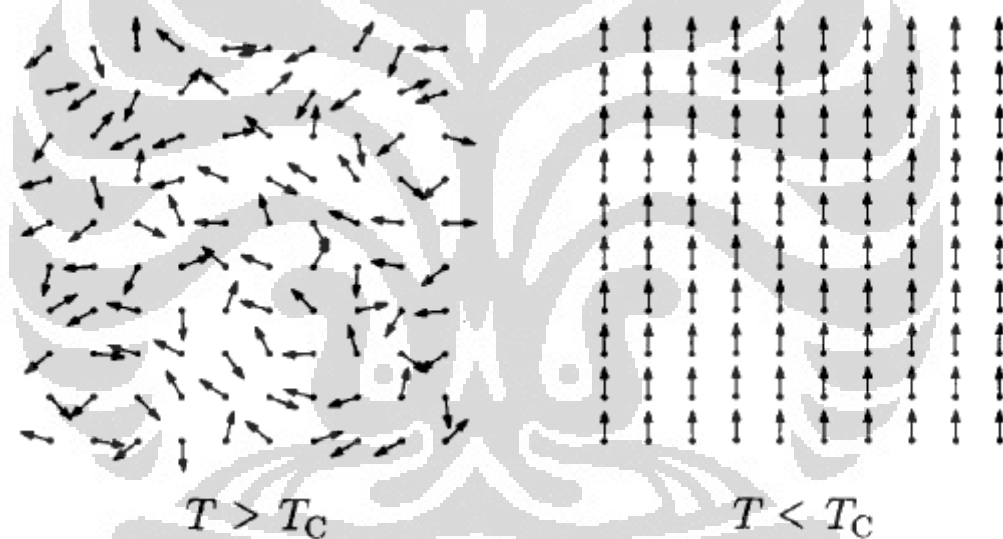


Gambar 2.8 Jenis Bahan Berdasarkan Keteraturan Spinnya: Ferromagnet dan Antiferromagnet (telah diolah kembali)

### 2.4.3 Paramagnet

Paramagnet ialah bahan yang ketika diberikan medan magnet luar, spinnya akan menuju ke satu arah sedangkan ketika medan magnet tersebut dihilangkan,

maka susunan spinnya akan menjadi acak kembali sebab dalam bahan paramagnet interaksi antar momen magnetnya sangat lemah sehingga dapat diasumsikan momen magnetnya saling independen. Selain itu, bahan ini juga dipengaruhi faktor temperatur. Jika bahan ini berada di bawah suatu temperatur kritisnya (dalam hal ini temperatur Curie) maka bahan ini akan berubah menjadi bahan ferromagnet. Hal ini terjadi karena semakin tinggi temperatur bahan, semakin banyak dinamika yang terjadi dalam bahan dan ini akan menyebabkan spin-spinnya akan semakin tidak teratur sehingga bahan akan bersifat paramagnet. Sedangkan, pemberian medan magnet luar  $B$  akan menyetarakan kembali spin-spin ini sehingga akan menjadi bahan yang bersifat ferromagnet. Jadi, dalam bahan paramagnet, magnetisasinya akan bergantung dari rasio  $B/T$  dimana  $T$  ialah temperatur bahan.[11]



Gambar 2.9 Transisi Sifat Bahan dari Paramagnet Menjadi Ferromagnet

[11]

## BAB 3

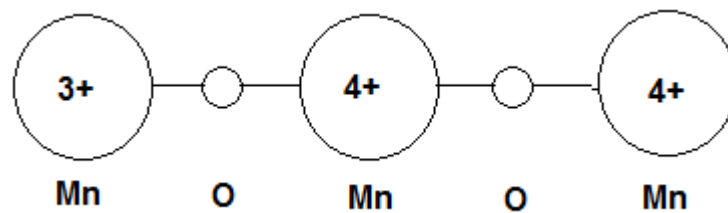
### PERHITUNGAN ENERGI

Hamiltonian dalam fenomena colossal magnetoresistance dapat digunakan untuk mengetahui besaran-besaran fisis, seperti magnetisasi, kapasitas panas bahan, dan lain-lain. Dalam penelitian ini akan difokuskan pada faktor-faktor Hamiltonian yang akan mempengaruhi energi total sistem. Karena itu, hal pertama yang harus dilakukan ialah membuat model sistemnya, kemudian mencari energi total dari Hamiltonian yang ada (mencari eigenvalue dari Hamiltonian untuk colossal magnetoresistance).

#### 3.1 MODEL

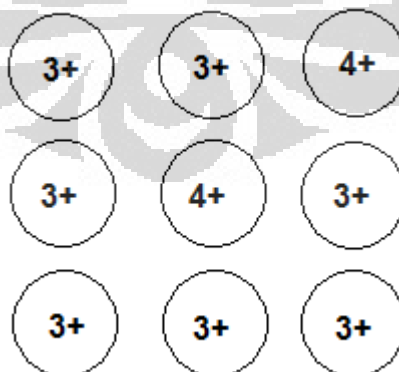
Model untuk fenomena colossal magnetoresistance didapat dari teori double exchange. Dari teori double exchange, telah diketahui bahwa elektron akan berpindah dari  $Mn^{3+}$  ke atom O secara bersamaan dengan perpindahan elektron dari atom O ke ion  $Mn^{4+}$  [4, 5, 12]. Proses perpindahan ini akan melibatkan 2 unit sel, sebab dalam 1 unit sel hanya terdapat 1 ion Mn, yaitu pada pusat atau tengah-tengah unit sel. Jika terdapat 3 unit sel, maka elektron yang telah pindah dari unit sel pertama (dari  $Mn^{3+}$ ) ke unit sel kedua (ke  $Mn^{4+}$ ) akan berpindah lagi ke unit sel ketiga.

Model yang akan dibuat berhubungan dengan muatan Mn pada unit sel ketiga ini. Sebelum elektron berpindah dari unit sel pertama, muatan Mn ialah  $3+$  dan muatan Mn di unit sel kedua ialah  $4+$ . Setelah elektron berpindah, maka muatan Mn pada unit sel pertama menjadi  $4+$  sedangkan sebaliknya, muatan Mn pada unit sel kedua akan menjadi  $3+$ . Proses ini juga akan berlangsung antara unit sel kedua dengan unit sel ketiga jika ada perbedaan banyaknya elektron valensi pada Mn di unit sel kedua dengan Mn pada unit sel ketiga. Dengan demikian, dapat disimpulkan bahwa setelah elektron berpindah dari unit sel pertama ke unit sel kedua, maka saat itu Mn di unit sel kedua bermuatan  $3+$ , sehingga jika proses ini diinginkan berlangsung terus, maka Mn di unit sel ketiga harus bermuatan  $4+$ . Begitu seterusnya hingga mencapai Mn di unit sel yang terakhir.



Gambar 3.1 Model Mn untuk Teori Double Exchange (3 Unit Sel)  
(telah diolah kembali)

Model yang ada dapat dikembangkan juga untuk dua dimensi maupun tiga dimensi. Untuk model 2 dimensi, contohnya ialah untuk unit sel sebanyak  $2 \times 2$ ,  $3 \times 3$ ,  $4 \times 4$  dan seterusnya. Sedang untuk model 3 dimensi, contohnya untuk unit sel  $2 \times 2 \times 2$ ,  $3 \times 3 \times 3$ ,  $4 \times 4 \times 4$  dan seterusnya. Semua model ini akhirnya dapat disederhanakan menjadi hanya 1 dimensi. Contohnya, untuk model 2 dimensi pada unit sel  $3 \times 3$  seperti gambar 3.2. Pada model tersebut, elektron dapat berpindah dari ujung kiri ke ujung kanan. Caranya ialah dengan mengambil salah satu ion  $Mn^{3+}$  di bagian kiri. Kemudian untuk berpindah, elektron itu harus ke ion  $Mn^{4+}$ , jadi ia harus berpindah ke ion  $Mn^{4+}$  yang ada di tengah-tengah. Setelah elektron itu pindah, maka Mn di tengah-tengah yang awalnya bermuatan  $4+$  akan bermuatan  $3+$ , sehingga untuk berpindah lagi ia harus menuju ke Mn yang ada di kanan atas, yang bermuatan  $4+$ . Jadi, urutan perpindahannya dapat disederhanakan menjadi hanya satu dimensi saja, yaitu seperti pada gambar 3.1.



Gambar 3.2 Contoh Model 2 Dimensi  
(telah diolah kembali)

### 3.2 PERHITUNGAN ENERGI

Perhitungan energi dalam penelitian ini ditentukan dari Hamiltonian pada sistem. Energi total ini merupakan nilai eigen (eigenvalue) dari Hamiltonian pada colossal magnetoresistance. Persamaan eigennya ialah:

$$H\psi = E\psi$$

Dimana H ialah Hamiltonian,  $\psi$  ialah fungsi gelombang dan E ialah energi total sistem atau disebut juga eigen value atau nilai eigennya.

Dalam fenomena colossal magnetoresistance telah dijelaskan bahwa fenomena ini berhubungan dengan proses perpindahan elektron yang sesuai dengan teori double exchange, dan juga dengan kopling Hund. Selain itu, jika suhu atau temperatur ruangan cukup besar, maka akan terjadi juga vibrasi kisi atau biasa disebut dengan phonon yang akan mempengaruhi proses perpindahan elektron. Ketika kisi-kisi bervibrasi, maka panjang konstanta kisinya juga akan berubah-ubah dan ini disebut juga dengan fenomena distorsi Jahn-Teller. Selain itu, ada juga pengaruh dari potensial acak pada satu site. Karena itu, Hamiltonian sistem akan dipengaruhi oleh faktor-faktor diatas. Hamiltonian sistem ialah:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + Hc) - J_H \sum_i \sigma_i^z S_i - g \sum_i n_i Q_i + \frac{1}{2} \sum_i Q_i^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{\langle ij \rangle} Q_i Q_j + \sum_i \varepsilon_i n_i$$

Persamaan ini kemudian akan dimasukkan ke persamaan Eigen diatas.

Hamiltonian diatas merupakan persamaan yang terdiri atas Hamiltonian karena proses perpindahan elektron dengan teori double exchange (suku pertama), karena kopling Hund (suku kedua), karena kopling elektron-phonon (suku ketiga), karena energi elastik phonon (suku keempat dan kelima), dan karena energi potensial acak (suku keenam). Jika suku-suku ini dipisah, maka akan didapatkan:

$$H_{DE} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + Hc)$$

$$H_{Hund} = -J_H \sum_i \sigma_i^z S_i$$

$$H_{el-phon} = -g \sum_i n_i Q_i$$

$$H_{phon} = \frac{1}{2} \sum_i Q_i^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{\langle ij \rangle} Q_i Q_j$$

$$H_{potential} = \sum_i \varepsilon_i n_i$$

Dimana  $H = H_{DE} + H_{Hund} + H_{el-phon} + H_{phon} + H_{potential}$  dan  $n_i = \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$  yaitu kerapatan elektron pada site i. Pada hamiltonian untuk double exchange, H.c ialah Hermitian Conjugate, yaitu kombinasi linear dari operator  $c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}$  yaitu operator  $c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$  [15, ]. Jadi, Hamiltonian untuk double exchange ialah:

$$H_{DE} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma})$$

Hamiltonian untuk persamaan seperti ini sangat sulit untuk diselesaikan. Oleh karena itu, cara yang dapat digunakan untuk menyelesaikan persamaan ini ialah dengan menganggap suku-suku yang kurang berpengaruh mempunyai kontribusi yang sangat kecil, sehingga dapat disederhanakan. Suku-suku yang berpengaruh sangat kecil dan kurang memberikan kontribusi ialah suku Hamiltonian untuk phonon dan begitu juga berpengaruh pada Hamiltonian untuk kopling elektron-phonon. Jadi, dalam hal ini kita dapat mengasumsikan bahwa:

$$Q_i = 0$$

Jadi, dengan kata lain suku-suku yang mengandung variabel  $Q_i$  atau amplitudo phonon pada site ke i dapat diabaikan dan dihilangkan dari persamaan. Sehingga Hamiltonian awal dapat disederhanakan menjadi:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + Hc) - J_H \sum_i \sigma_i^z S_i + \sum_i \varepsilon_i n_i$$

Model yang lebih sederhana lagi didapat dengan mengabaikan faktor ketidakteraturan elektrostatis dan struktural, yang disebabkan karena substitusi atom. Jadi, Hamiltonian karena potensial acak diasumsikan tidak berpengaruh dan Hamiltoniannya menjadi:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + Hc) - J_H \sum_i \sigma_i^z S_i$$

Dengan Hamiltonian seperti ini mudah untuk dapat menyelesaikannya.

Dalam material perovskite manganese oxides, kopling antara elektron konduksi (elektron yang berpindah atau terdelokalisasi) dan elektron yang terlokalisasi sangat besar. Jadi, dalam hal ini dapat dianggap bahwa faktor kopling Hund antara elektron yang berpindah dengan elektron yang terlokalisasi dalam

Hamiltonian sangat besar dan dapat diasumsikan  $J_H \rightarrow \infty$ . Untuk kasus ini, komponen elektron konduksi yang mempunyai spin yang antiparalel dengan elektron terlokalisasi akan dihilangkan, dan komponen elektron konduksi yang mempunyai spin yang paralel dengan elektron terlokalisasi akan dihitung. Jadi, dalam hal ini Hamiltoniannya mempunyai bentuk [16, 17, 18, 19, 25]:

$$H = -\sum_{ij} \tilde{t}_{ij} (c_i^\dagger c_j + h.c.)$$

Dimana  $\tilde{t}_{ij}$  mempunyai bentuk:

$$\tilde{t}_{ij} = t \left[ \cos\left(\frac{\theta_i}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_j}{2}\right) + \sin\left(\frac{\theta_i}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta_j}{2}\right) e^{i(\phi_j - \phi_i)} \right]$$

Dalam persamaan ini  $\theta_i$  dan  $\phi_i$  ialah koordinat bola dari spin yang terlokalisasi  $S_i$  pada site  $i$ . Sehingga persamaan untuk spin terlokalisasi  $S_i$  ialah:

$$S_i^x = S \sin \theta_i \cos \phi_i$$

$$S_i^y = S \sin \theta_i \sin \phi_i$$

$$S_i^z = S \cos \theta_i$$

Dalam kejadian yang real, spin  $S$  haruslah menuju ke arah sumbu  $z$  (ke arah atas) untuk dapat menerima spin dari elektron konduksi. Jadi, dengan kata lain:

$$S_i^x = 0$$

$$S_i^y = 0$$

$$S_i^z = S$$

Ini menunjukkan bahwa  $\theta_i = 0$ . Sedangkan untuk kasus yang sama, pada site  $j$  berlaku:  $\theta_j = 0$ . Sehingga didapatkan:

$$\tilde{t}_{ij} = t \left[ \cos\left(\frac{0}{2}\right) \cos\left(\frac{0}{2}\right) \right] = t$$

Hamiltoniannya menjadi:

$$H = -t \sum_{ij} (c_i^\dagger c_j + h.c.)$$

Untuk proses penyederhanaan dari Hamiltonian pada persamaan awal, dapat dilakukan beberapa pendekatan, salah satunya seperti pada pendekatan diatas. Namun, dalam beberapa hal persamaan seperti diatas yang hanya



memperhitungkan kontribusi terbesar (dari teori double exchange dan aturan kopling Hund) dirasakan kurang, sebab pada kenyataannya faktor adanya distorsi kisi pada bahan cukup berpengaruh. Pengaruh temperatur di sekitar bahan memberikan pengaruh yang besar terhadap munculnya phonon. Semakin besar temperatur di sekitar bahan, semakin banyak dinamika yang terjadi pada bahan, seperti vibrasi kisi dan hal ini menimbulkan adanya phonon.

Karena hal ini, maka dalam Hamiltonian yang telah disederhanakan diatas harus ditambahkan faktor dari phonon. Jadi, Hamiltoniannya ialah:

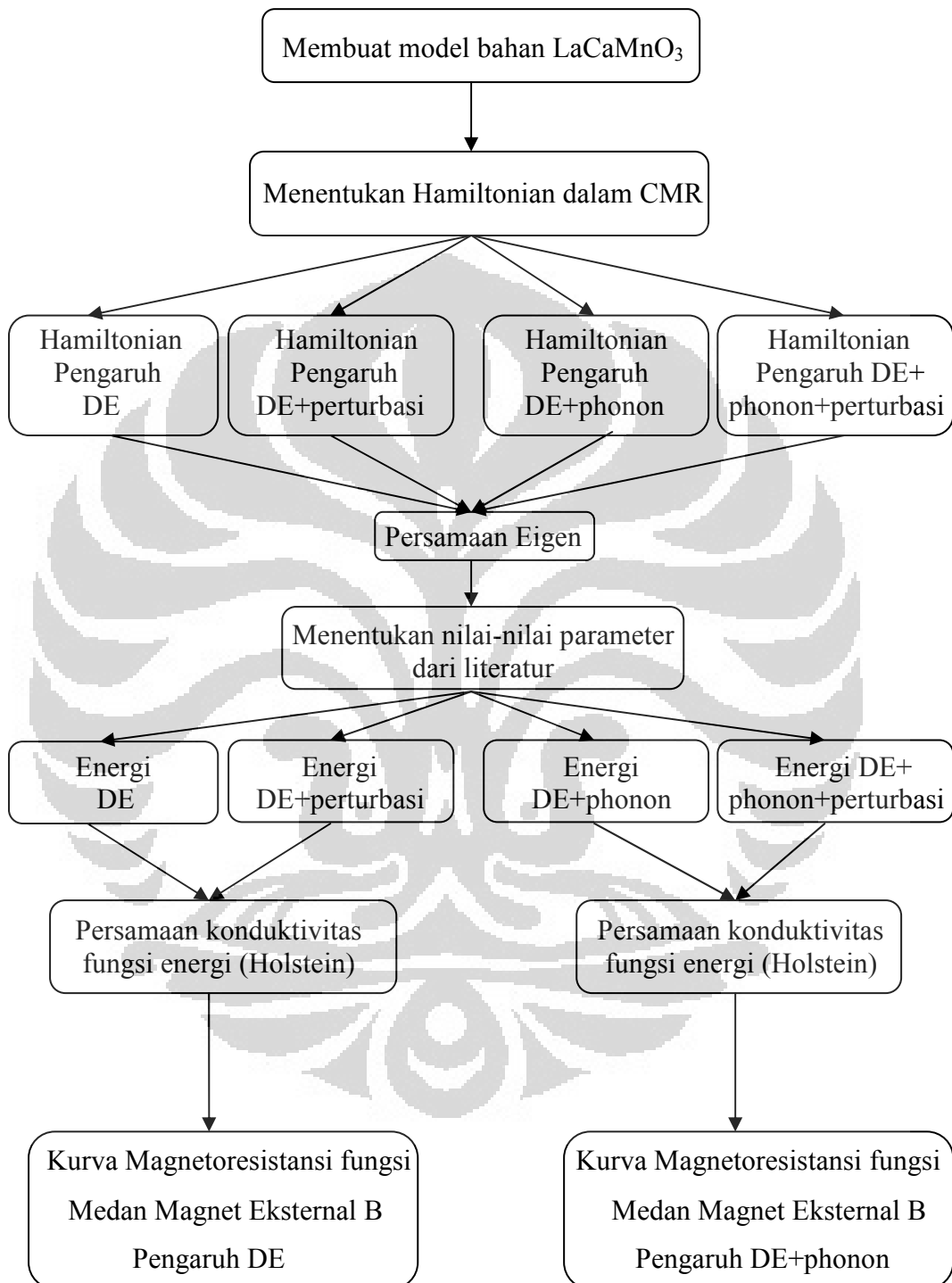
$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + Hc) - J_H \sum_i \sigma_i^z S_i + \frac{1}{2} \sum_i Q_i^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{\langle ij \rangle} Q_i Q_j$$

Dalam persamaan ini, suku pertama dan kedua dapat diselesaikan dengan cara sebelumnya. Jadi, persamaan ini dapat disederhanakan menjadi:

$$H = -\sum_{ij} \tilde{t}_{ij} (c_i^\dagger c_j + h.c.) + \frac{1}{2} \sum_i Q_i^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{\langle ij \rangle} Q_i Q_j$$

Kemudian, masukkan persamaan ini ke dalam persamaan eigen. Dalam penelitian ini akan dimasukkan Hamiltonian pengaruh double exchange, aturan Hund dan energi elastik phonon saja.

### 3.3 DIAGRAM ALIR PERHITUNGAN ENERGI



## BAB 4

### HASIL DAN PEMBAHASAN

Pada penelitian yang telah dilakukan dalam bab sebelumnya, proses untuk mendapatkan perhitungan energi atau eigenvalue dari Hamiltonian dalam colossal magnetoresistance dilakukan dengan cara pendekatan. Pendekatan yang dilakukan ialah dengan mengabaikan faktor-faktor yang kurang berpengaruh dalam colossal magnetoresistance. Contoh faktor yang kurang memberikan kontribusi dapat diabaikan, seperti pengaruh phonon, dan pengaruh energi potensial pada tiap site. Faktor-faktor yang paling berpengaruh dalam perhitungan ialah teori double exchange, yaitu energi perpindahan (hopping) elektron dari satu site ke site yang lain dan juga energi interaksi antara elektron konduksi dengan elektron yang terlokalisasi, yang merupakan energi interaksi elektron karena aturan Hund.

Dalam Hamiltonian untuk colossal magnetoresistance, banyak faktor yang berpengaruh dalam proses terjadinya fenomena ini. Secara lengkap, Hamiltoniannya ialah:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + Hc) - J_H \sum_i \sigma_i^z S_i - g \sum_i n_i Q_i + \frac{1}{2} \sum_i Q_i^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{\langle ij \rangle} Q_i Q_j + \sum_i \varepsilon_i n_i$$

Dalam persamaan ini, suku pertama dan suku kedua merupakan suku yang paling berpengaruh dalam proses terjadinya fenomena colossal magnetoresistance. Suku ini merupakan teori dari Zener, yaitu teori double exchange. Selain itu, suku ketiga dan keempat serta kelima merupakan suku yang ada karena pengaruh phonon atau distorsi kisi. Suku terakhir merupakan suku karena proses substitusi atom untuk doping. Ini menimbulkan perbedaan potensial pada tiap site.

#### 4.1 HAMILTONIAN PENGARUH DARI DOUBLE EXCHANGE

Dalam Hamiltonian diatas, sangat sulit untuk menyelesaikannya dengan analitik. Namun, dapat dilakukan suatu pendekatan dimana suku-suku yang kurang berpengaruh dapat diabaikan. Contohnya dalam hal ini ialah pengaruh phonon, dan juga pengaruh energi potensial pada tiap site. Sehingga, dalam kasus ini Hamiltoniannya menjadi hanya karena faktor double exchange saja, yaitu:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + Hc) - J_H \sum_i \sigma_i^z S_i$$

Dari bab sebelumnya, dapat disederhanakan lagi bahwa  $J_H \rightarrow \infty$  sehingga persamaan diatas dapat disederhanakan lagi menjadi:

$$H = -\sum_{ij} \tilde{t}_{ij} (c_i^\dagger c_j + h.c.)$$

Dimana  $\tilde{t}_{ij}$  mempunyai bentuk:

$$\tilde{t}_{ij} = t \left[ \cos\left(\frac{\theta_i}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta_j}{2}\right) + \sin\left(\frac{\theta_i}{2}\right) \sin\left(\frac{\theta_j}{2}\right) e^{i(\phi_j - \phi_i)} \right]$$

Dengan menganggap bahwa semua spin elektron yang terlokalisasi menuju ke satu arah (spin up) yaitu arah z positif maka didapatkan:

$$\tilde{t}_{ij} = t \left[ \cos\left(\frac{0}{2}\right) \cos\left(\frac{0}{2}\right) \right] = t$$

Dan Hamiltoniannya menjadi:

$$H = -t \sum_{ij} (c_i^\dagger c_j + h.c.)$$

Dengan memasukkan Hamiltonian ini ke dalam persamaan eigen maka akan didapatkan:

$$H\psi = -t \sum_{ij} (c_i^\dagger c_j + h.c.)\psi$$

Anggap suatu model 2 dimensi seperti pada gambar 3.2. Dalam model ini dapat dicari eigenvaluenya dari Hamiltonian ini.

Dengan menganggap model seperti pada gambar 3.2, yaitu model untuk 3 x 3 unit sel maka perpindahan elektron ialah dari site kiri ke tengah kemudian dari site tengah ke site sebelah kanan. Perpindahan pertama menunjukkan bahwa terjadi kreasi elektron pada site tengah dan terjadi anihilasi elektron pada site kiri, sedangkan perpindahan kedua menunjukkan bahwa terjadi kreasi elektron pada site kanan dan terjadi anihilasi elektron pada site tengah. Jadi, dari model ini didapat:

$$-t \sum_{ij} (c_i^\dagger c_j + h.c.)\psi = -2t\psi = E\psi$$

Eigenvalue dari persamaan eigennya ialah  $E = -2t$ , dimana  $t$  ialah konstanta energi. Untuk mengetahui nilainya, dapat diambil satu contoh bahan. Sebagai

contoh, untuk struktur kubus dengan konstanta kisi  $a=3,935 \text{ \AA}$  konstanta hoppingnya ialah  $t=0,655 \text{ eV}$  dan  $t'=0,035 \text{ eV}$  [21] dimana  $t'$  ialah konstanta hopping untuk tetangga terdekat berikutnya (dalam model 2 dimensi,  $t'$  ialah untuk elektron yang berpindah secara diagonal). Dengan menganggap bahwa elektron berpindah secara lurus dalam 1 dimensi, maka energi yang diperlukan ialah  $E = -2t = -1,31 \text{ eV} = -2,096 \times 10^{-19} \text{ Joule}$ .

Dalam unit sel yang lebih banyak jumlahnya, energi total yang diperlukan elektron untuk berpindah (hopping) lebih besar lagi. Karena itu, energi ini juga berhubungan dengan banyaknya unit sel atau site Mn yang ada pada bahan manganat.

#### 4.2 HAMILTONIAN PENGARUH DARI DOUBLE EXCHANGE DENGAN PERTURBASI MEDAN MAGNET

Dalam kasus ini medan magnet yang diberikan ke sistem (bahan manganat) akan mempengaruhi Hamiltonian. Dalam fenomena colossal magnetoresistance, besar medan magnet yang diberikan sangat kecil dan besarnya pada umumnya kurang dari 1 Tesla. Oleh karena itu, faktor karena pengaruh medan magnet terhadap Hamiltonian akan dianggap sebagai perturbasi (Hamiltonian gangguan).

Hamiltonian awalnya karena pengaruh double exchange akan ditambah dengan faktor Hamiltonian dari medan magnet. Hamiltonian karena pengaruh medan magnet ialah:

$$\lambda H_1 = -\mu \cdot B$$

Dalam persamaan ini,  $\mu$  ialah momen dipol magnet sedangkan  $B$  ialah medan magnet. Hamiltoniannya menjadi:

$$H = H_0 + \lambda H_1$$

$$H = -\sum_{ij} \tilde{t}_{ij} (c_i^\dagger c_j + h.c.) - \mu \cdot B$$

Dengan menggunakan teori perturbasi dalam mekanika kuantum, didapat energi total: [14]

$$E_n = E_n^0 + \langle \phi_n | \lambda H_1 | \phi_n \rangle$$

$$E_n = -2t - \int \phi_n^* \lambda H_1 \phi_n d^3r$$

$$\lambda E_n^{(1)} = \langle \phi_n | \lambda H_1 | \phi_n \rangle$$

Dengan persamaan ini akan didapatkan energi total setelah sistem mengalami perturbasi. Energi totalnya cukup dibatasi hingga suku kedua saja, sebab suku ketiga, keempat dan seterusnya bernilai sangat kecil karena konstanta  $\lambda$  bernilai sangat kecil. Jadi, energi totalnya untuk model seperti gambar 3.2 ialah:

$$E_n = E_n^0 + \langle \phi_n | \mu B | \phi_n \rangle$$

$$E_n = -2t + \int \phi_n^* \mu B \phi_n d^3r$$

$$E_n = -2t + \mu B$$

Persamaan terakhir menunjukkan bahwa momen magnet  $\mu$  bernilai konstan.

Untuk mengetahui energinya, akan dimasukkan nilai  $\mu$  yang berasal dari satu ion Mn bernilai 4,9 magneton Bohr atau senilai  $9,27 \times 10^{-24}$  J/T. Sedangkan nilai B dalam colossal magnetoresistance kecil, dapat bernilai 0,1 Tesla hingga maksimum 1 Tesla. Untuk nilai B maksimum, maka akan didapat nilai energi elektron saat dipengaruhi perturbasi ialah:  $E = -2,09517 \times 10^{-19}$  Joule.

Hal ini menunjukkan bahwa faktor medan magnet juga mempengaruhi energi total yang diperlukan elektron untuk berpindah. Dalam hal ini, medan magnet hanya memberikan pengaruh yang sangat kecil.

#### 4.3 HAMILTONIAN PENGARUH DARI DOUBLE EXCHANGE DAN PHONON

Dalam kasus ini, pengaruh phonon dimasukkan ke dalam Hamiltonian awal. Pengaruh phonon ialah pengaruh yang walaupun kecil, tetapi cukup berpengaruh dalam penentuan eigenvalue fenomena colossal magnetoresistance. Pengaruh phonon dalam hal ini terdiri dari 2 hal yaitu pengaruh phonon pada satu site dan juga antara satu site dengan site yang lainnya.

Hamiltonian untuk pengaruh phonon yaitu:

$$H_{phon} = \frac{1}{2} \sum_i Q_i^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{\langle ij \rangle} Q_i Q_j$$

dengan  $Q_i$  ialah amplitudo distorsi kisi (phonon) pada site  $i$ . Amplitudo distorsi kisi ini berbeda-beda untuk arah distorsi yang berbeda. Amplitudo untuk arah  $x$  maupun  $y$  pada site  $R$  ialah sama, yaitu [21]:

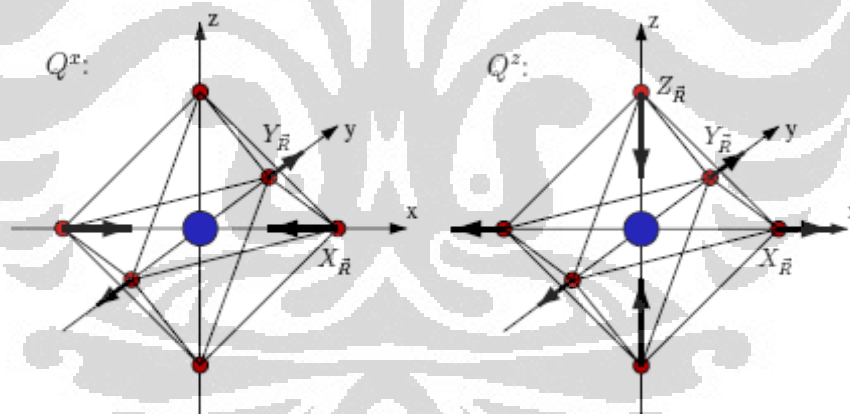
$$Q_{\bar{R}}^x = \frac{1}{\sqrt{2}}(X_{\bar{R}} - Y_{\bar{R}})$$

$$Q_{\bar{R}}^y = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{\bar{R}} - X_{\bar{R}})$$

Dimana  $X_{\bar{R}}$  ialah pergeseran kisi arah  $X$  pada site  $R$ , dan  $Y_{\bar{R}}$  ialah pergeseran kisi arah  $Y$  pada site  $R$ . Sedangkan amplitudo distorsi kisi untuk arah  $z$  pada site  $R$  ialah [21]:

$$Q_{\bar{R}}^z = \frac{1}{\sqrt{6}}(2Z_{\bar{R}} - X_{\bar{R}} - Y_{\bar{R}})$$

Dengan demikian, dapat ditentukan nilai amplitudo distorsi kisi pada bahan, baik distorsi arah  $x$ ,  $y$  maupun  $z$ . Pergeseran yang dimaksud ialah pergeseran anion, yaitu atom oksigen.



Gambar 4.1 Dua Mode Distorsi Kisi (Phonon): Arah  $x$  dan  $z$   
[21]

Sedangkan perpindahan elektron dengan hopping akan ditentukan dengan menentukan proses hopping ke tetangga terdekat dan tetangga terdekat berikutnya dalam bentuk matrix. Matrix hoppingnya dari site  $R$  ialah [21]:

$$t_{\bar{R}, \bar{R} \pm a\hat{x}} = \frac{t}{4} \begin{pmatrix} 1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 3 \end{pmatrix}$$

$$t_{\bar{R},\bar{R}\pm a\hat{y}} = \frac{t}{4} \begin{pmatrix} 1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 3 \end{pmatrix}$$

$$t_{\bar{R},\bar{R}\pm a\hat{z}} = t \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Sedangkan matrix hopping ke tetangga terdekat berikutnya ialah:

$$t_{\bar{R},\bar{R}\pm a\hat{x}\pm a\hat{z}} = \frac{t'}{2} \begin{pmatrix} -2 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$$

$$t_{\bar{R},\bar{R}\pm a\hat{y}\pm a\hat{z}} = \frac{t'}{2} \begin{pmatrix} -2 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}$$

$$t_{\bar{R},\bar{R}\pm a\hat{x}\pm a\hat{y}} = \frac{t'}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -3 \end{pmatrix}$$

Dalam persamaan diatas,  $a$  ialah konstanta kisi dari perovskite oxides, sedangkan  $t$  dan  $t'$  ialah konstanta hopping yang akan ditentukan melalui eksperimen (telah ditentukan nilai  $t=0,655$  eV dan  $t'=0,035$  eV untuk struktur kubus dengan konstanta kisi  $a=3,935$  Å) [21].

Hamiltonian untuk fenomena colossal magnetoresistance dengan pengaruh double exchange dan pengaruh phonon ialah:

$$H = -\sum_{ij} \tilde{t}_{ij} (c_i^\dagger c_j + h.c.) + \frac{1}{2} \sum_i Q_i^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{\langle ij \rangle} Q_i Q_j$$

Dalam persamaan ini, faktor phonon  $Q_i$  terdiri dari 2 hal yaitu faktor distorsi arah  $x$ ,  $y$  dan  $z$ . Jika distorsinya arah  $x$ , maka anion O yang terletak di sumbu  $x$  akan menuju ke tengah-tengah yaitu ke ion Mn, sedangkan anion O yang terletak di sumbu  $y$  akan menjauh dari ion Mn. Sementara itu, anion O yang ada pada sumbu  $z$  akan tetap (tidak bergerak). Begitu juga untuk distorsi arah  $y$ , yaitu anion O pada sumbu  $y$  akan bergerak ke tengah-tengah unit sel, sedangkan anion O pada sumbu  $x$  akan menjauh dari ion Mn, dan anion O yang ada di sumbu  $z$  akan tetap diam. Untuk distorsi arah  $z$ , maka anion O yang terletak pada sumbu  $z$  akan menuju ke tengah-tengah yaitu ke ion Mn, sedangkan anion O yang terletak pada sumbu  $x$  dan  $y$  akan menjauh dari ion Mn. Jadi, jika pada satu unit sel terjadi distorsi arah  $x$ , maka pada unit sel sebelahnya (pada sumbu  $x$  dan  $y$ ) akan terjadi

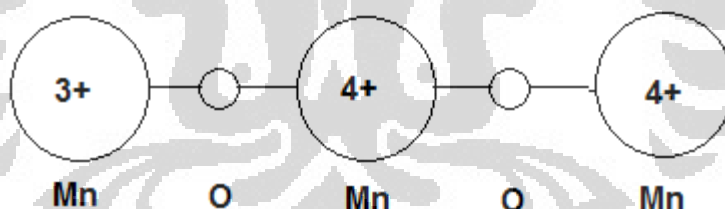


distorsi arah y, sedangkan pada unit sel sebelahnya yaitu di arah z akan tetap (tidak terjadi distorsi).

Dalam perpindahan elektron dengan cara hopping, hopping elektron ke site berikutnya akan berbeda jika dimasukkan pengaruh phonon ke dalam Hamiltonian, sebab akan terjadi distorsi kisi dan ini akan merubah panjang konstanta kisi yang akan dilewati oleh elektron. Semakin besar jarak Mn-O, maka semakin kecil energi hopping yang diperlukan elektron untuk berpindah, sedangkan semakin kecil jarak ikatan Mn-O, maka semakin besar energi hopping yang diperlukan elektron untuk berpindah.

Untuk menghitung energi eigenvalue dari Hamiltonian dengan pengaruh double exchange dan pengaruh phonon, maka harus diketahui kondisi distorsi kisinya terlebih dahulu. Untuk suatu unit sel yang kisinya terdistorsi arah x, maka unit sel tetangganya akan terdistorsi arah y, dan unit sel yang disebelahnya lagi akan terdistorsi arah x, demikian seterusnya.

Kemudian, juga harus ditentukan model unit sel yang akan digunakan. Sebagai contoh, akan digunakan kembali model seperti gambar 3.2 yang dapat disederhanakan menjadi gambar 3.1 dibawah ini:



Dalam model ini, asumsikan ion  $Mn^{4+}$  di tengah dan di kanan ada dalam satu sumbu dengan ion  $Mn^{3+}$  di kiri, yaitu pada sumbu x. Jika kisinya telah terdistorsi, maka untuk transfer elektron dengan cara hopping dari site kiri ke tengah maupun dari site tengah ke kanan, energinya akan dilambangkan dengan  $t$ . Dengan nilai yang telah didapat sebelumnya dari perhitungan eksperimen dan dengan pendekatan LSDA (*local spin density approximation*) [21], maka didapat energi total untuk perpindahan elektron dari kiri ke kanan ialah:

$$H_{DE}\psi = -\sum_{ij} \tilde{t}_{ij} (c_i^\dagger c_j + h.c.) \psi = (-2t)\psi$$

Dengan demikian, kita dapatkan untuk suku double exchange, energinya ialah:

$$E = -2t$$

Atau, dengan memasukkan nilai-nilai  $t$  dan  $t'$  untuk kisi dengan konstanta  $a=3,935$  Å, didapat  $E = -1,31$  eV =  $-2,096 \times 10^{-19}$  J.

Setelah itu, akan dihitung energi untuk pengaruh phonon. Anggap site kiri mengalami distorsi arah  $x$ , sehingga site tengah mengalami distorsi arah  $y$  dan site kanan mengalami distorsi arah  $x$  lagi. Dengan demikian, energi untuk pengaruh phonon dalam colossal magnetoresistance ialah:

$$E_{JT} = Q_1^2 + Q_2^2 + Q_3^2 + \lambda Q_1 Q_2 + \lambda Q_2 Q_3$$

$$E_{JT} = \frac{1}{2}(x-y)^2 + \frac{1}{2}(y-x)^2 + \frac{1}{2}(x-y)^2 - \frac{\lambda}{2}(x-y)^2 - \frac{\lambda}{2}(x-y)^2$$

$$E_{JT} = (x-y)^2 + \frac{1}{2}(y-x)^2 - \lambda(x-y)^2$$

$$E_{JT} = (x-y)^2 \left( \frac{3}{2} - \lambda \right)$$

$$E_{JT} = (x^2 + y^2) \left( \frac{3}{2} - \lambda \right)$$

Dalam distorsi kisi arah  $x$ , besar simpangan arah  $x$  sama dengan besar simpangan arah  $y$ . Jadi, energi elastik distorsinya:

$$E_{JT} = x^2 (3 - 2\lambda)$$

Jadi, dengan demikian energi totalnya ialah:

$$E = E_{DE} + E_{JT} = -2t + x^2 (3 - 2\lambda)$$

Dengan memasukkan nilai parameter-parameter diatas, akan didapatkan energi total elektron. Sebagai contoh, nilai  $t = 0,655$  eV [21], nilai simpangan arah  $x = 0,0136$  Å [21] dan nilai konstanta  $\lambda$  ialah 0,1. Jadi, nilai energi totalnya:  $E = -2,09595 \times 10^{-19}$  Joule.

#### 4.4 HAMILTONIAN PENGARUH DARI DOUBLE EXCHANGE, PHONON DAN PERTURBASI MEDAN MAGNET

Dalam kasus ini, pengaruh perturbasi dari medan magnet akan dimasukkan ke dalam persamaan energi yang didapat pada bagian 4.3. Seperti yang telah dijelaskan dalam bagian 4.2 tentang teori perturbasi, maka dalam bagian ini energi totalnya ialah:

$$E = E_{DE} + E_{JT} + E_{perturbasi} = -2t + x^2(3 - 2\lambda) + \mu B$$

Dengan memasukkan nilai-nilai sebelumnya, maka akan didapatkan nilai energi total untuk elektron dalam kasus ini ialah:  $E = -2,09511 \times 10^{-19}$  Joule.

#### 4.5 HUBUNGAN ENERGI DENGAN FENOMENA DALAM COLOSSAL MAGNETORESISTANCE

Setelah mengetahui nilai energi dari model yang diberikan, hubungan energi itu dengan fenomena colossal magnetoresistance dijelaskan oleh Holstein (1959) [8]. Ia menjelaskan hubungan antara temperatur bahan  $T$  dengan konduktivitas listrik  $\sigma$  yaitu:

$$\sigma(T) \propto T^{-1} \exp\left(\frac{E_p}{k_B T}\right)$$

dengan  $E_p$  setengah energi ikat polaron [22] (elektron dalam pengaruh phonon) yaitu  $6,2848 \times 10^{-19}$  Joule [23] dan  $k_B$  konstanta Boltzman. Dengan mendefinisikan  $E = k_B \cdot T$  maka akan didapatkan konduktivitas listrik:

$$\sigma(E) \propto E^{-1} \exp\left(\frac{E_p}{E}\right)$$

Dari tinjauan mikroskopis untuk hambatan listrik, didapatkan bahwa resistivitas bahan akan berbanding terbalik dengan konduktivitasnya. Jadi:

$$\rho = \frac{1}{\sigma}$$

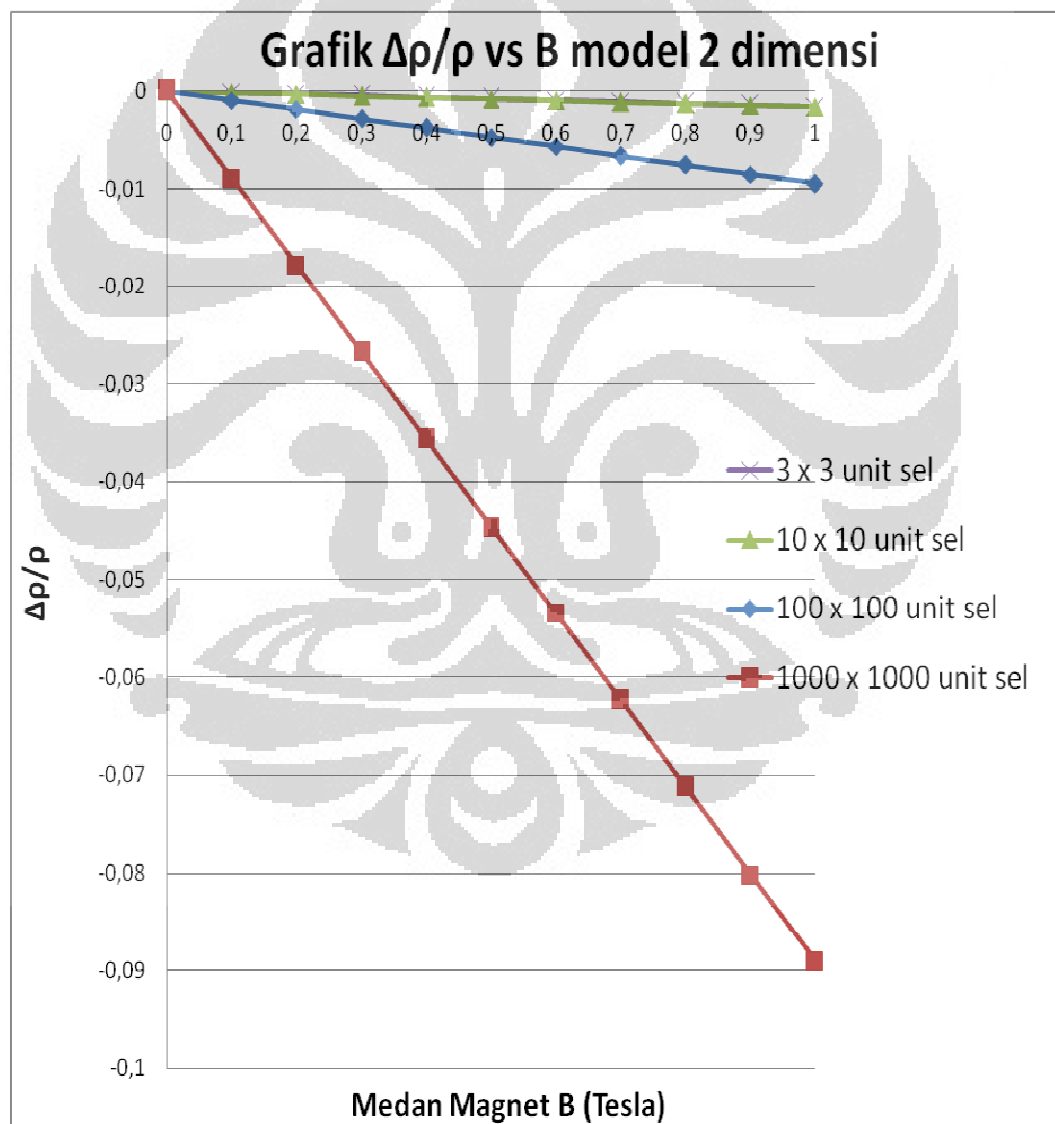
$$\rho(E) \propto E \exp\left(-\frac{E_p}{E}\right)$$

Dengan persamaan ini akan didapatkan kurva magnetoresistance, yaitu rasio perubahan resistivitas bahan akibat pengaruh medan magnet luar, yang didefinisikan dengan:

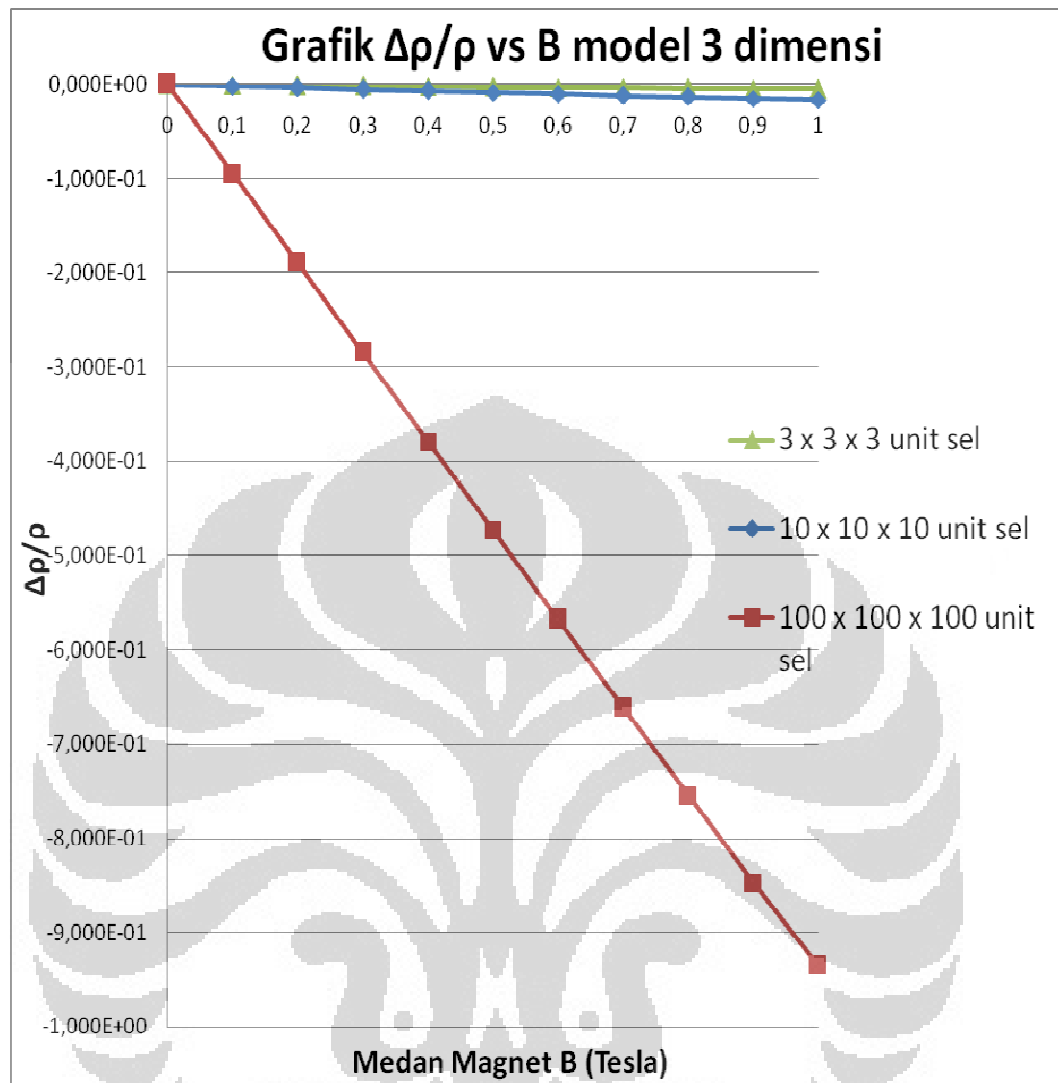
$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\rho(B) - \rho(0)}{\rho(0)}$$

Dalam keadaan yang sebenarnya, bahan yang dijadikan sample terdiri dari banyak unit sel. Jadi, agar hasil yang diinginkan menjadi real, maka akan diambil sebanyak 3 unit sel, 10 unit sel, 100 unit sel dan 1.000 unit sel.

Untuk pengaruh dari double exchange saja akan didapatkan grafik:



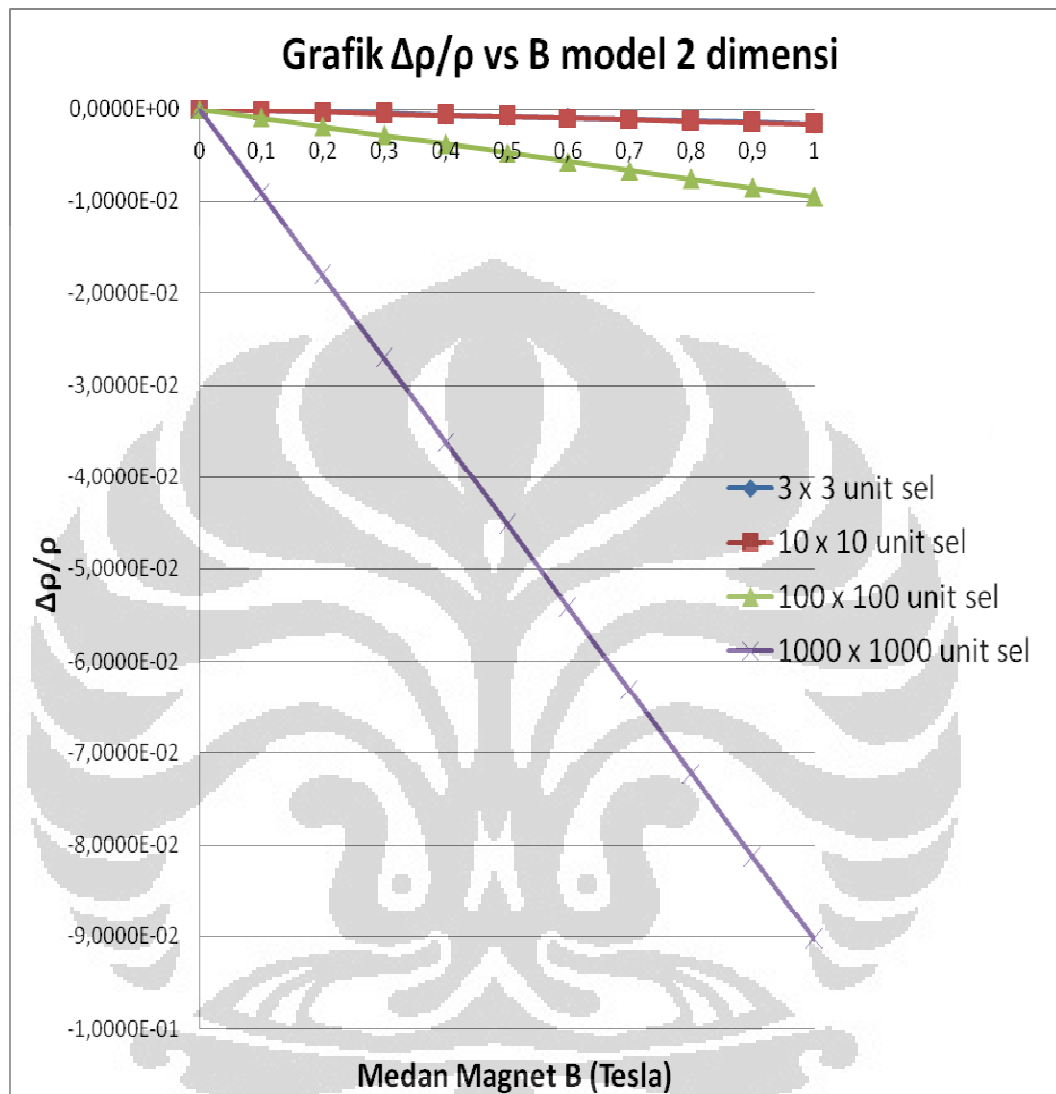
Gambar 4.2 Kurva Magnetoresistansi Model 2 Dimensi yang Dipengaruhi Double Exchange (telah diolah kembali)



Gambar 4.3 Kurva Magneto-resistansi Model 3 Dimensi yang Dipengaruhi Double Exchange (telah diolah kembali)

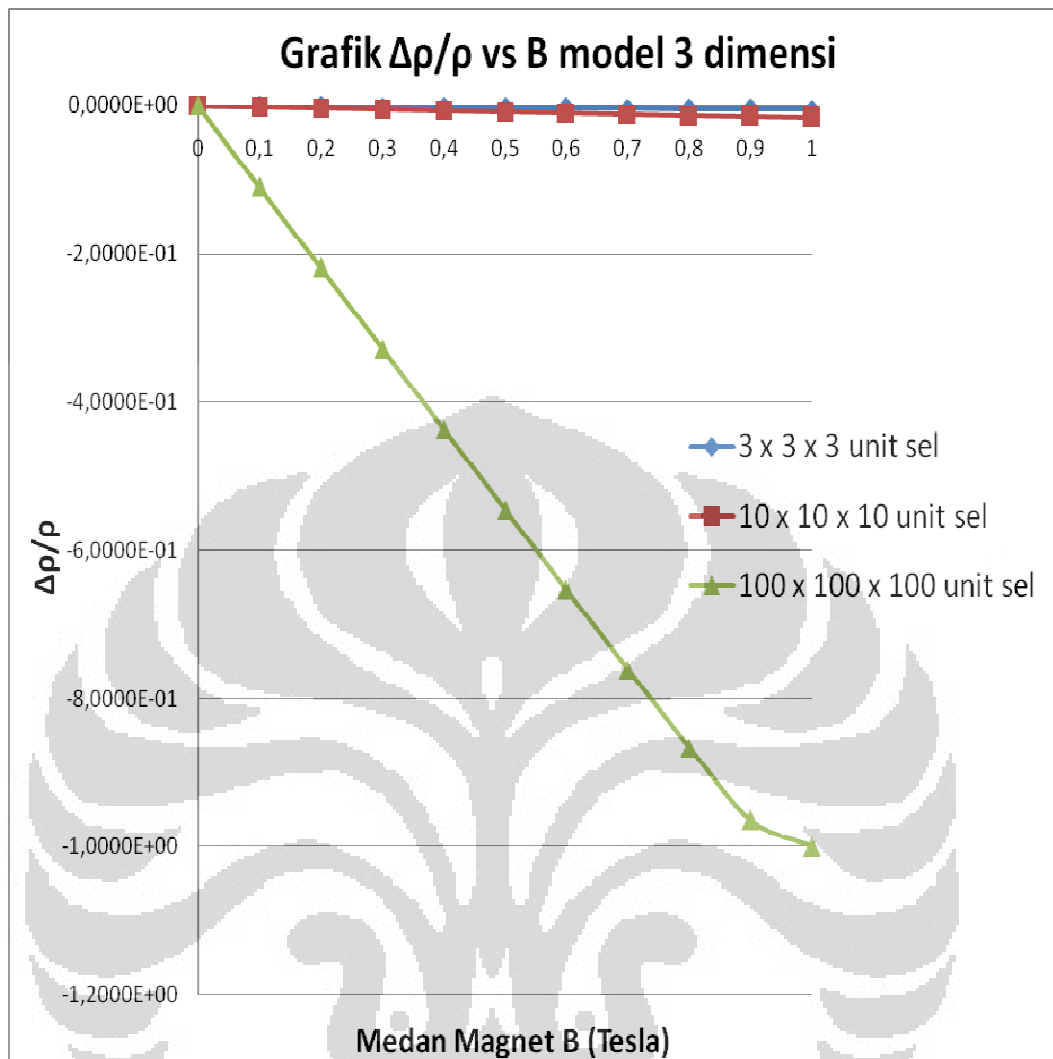
Data nilai lengkap magneto-resistansinya dapat dilihat pada lampiran. Dari kedua grafik ini dapat disimpulkan bahwa semakin banyak unit sel yang ada pada bahan, maka nilai magneto-resistansinya akan semakin mendekati nilai sebenarnya, sebab secara real, bahan yang dijadikan sample yaitu bahan 3 dimensi, seperti gambar 4.3. Selain itu, semakin sesuai dimensi model bahan (3 dimensi), maka akan semakin sesuai juga nilai magneto-resistansinya, yaitu sekitar 40% hingga 70% saat ini (melalui eksperimen).

Sedangkan untuk pengaruh dari double exchange dan energi elastik phonon, maka akan didapatkan grafik seperti:



Gambar 4.4 Kurva Magnetoresistansi Model 2 Dimensi yang Dipengaruhi Double Exchange dan Phonon (telah diolah kembali)

Dari kedua kurva untuk pengaruh double exchange dan phonon ini terlihat bahwa kurvanya hampir sama dengan gambar 4.2 (dengan pengaruh double exchange saja). Hal ini disebabkan karena pengaruh phonon sangat kecil ordenya dibandingkan dengan double exchange. (Untuk nilai jelasnya dapat dilihat pada lampiran).



Gambar 4.5 Kurva Magnetoresistansi Model 3 Dimensi yang Dipengaruhi Double Exchange dan Phonon (telah diolah kembali)

Kedua hasil ini menunjukkan bahwa magnetoresistance dalam hal ini bertanda negatif (negative magnetoresistance) sebab saat medan magnet diberikan lebih besar, maka resistivitas bahan akan turun (selisih resistivitas menjadi negatif) sehingga bahan menjadi semakin bersifat konduktor. Hal ini sama dengan teori yang dijelaskan sebelumnya yaitu bahwa medan magnet akan membuat susunan spin-spin dalam sistem menjadi semakin teratur dan searah, sehingga hal ini akan memudahkan elektron untuk berpindah dari satu site ke site lain dengan cara hopping sesuai aturan Hund. Bahan dalam hal ini menjadi bersifat konduktif.

## **BAB 5**

### **KESIMPULAN DAN SARAN**

#### **5.1. KESIMPULAN**

Dari studi perhitungan energi dalam fenomena colossal magnetoresistance pada suatu model bahan manganat ini diperoleh beberapa hasil sebagai berikut:

- Besar energi yang diperlukan elektron pada fenomena colossal magnetoresistance bergantung pada banyaknya site pada bahan manganat.
- Besar energi yang diperlukan elektron pada fenomena colossal magnetoresistance sangat bergantung pada energi hopping elektron, kopling Hund dan juga pengaruh phonon
- Perturbasi karena medan magnet pada bahan manganat mempengaruhi energi total elektron

#### **5.2 SARAN**

Untuk dapat melakukan perhitungan yang lebih akurat dan real dalam Hamiltonian ini diperlukan penelitian lebih lanjut dengan mengaplikasikan metode Monte Carlo dalam perhitungan. Metode ini merupakan metode untuk menentukan nilai-nilai tertentu yang acak pada sample. Nilai-nilai ini kemudian akan diseleksi dengan metode-metode tertentu agar mendapat hasil yang diinginkan dalam perhitungan. Untuk perhitungan pada colossal magnetoresistance sendiri, perhitungannya pada umumnya menggunakan model Ising dan untuk merepresentasikan kisi, menggunakan kisi persegi (untuk model 2 dimensi) maupun kisi kubik (untuk model 3 dimensi). Ada juga yang menggunakan kisi triangular, honeycomb maupun kisi Kagome. Pengaplikasian metode Monte Carlo ini dapat dilakukan dalam perhitungan pemrograman.

Selain itu, dapat juga dicari dan ditentukan sifat-sifat fisis lainnya pada bahan tersebut, seperti nilai magnetisasi bahan, nilai kapasitas panasnya dan lain-lain. Untuk mencari besaran-besaran seperti ini umumnya menggunakan fisika statistik dimana fungsi partisi berperan sangat besar dalam penentuan nilai besaran ini.



## DAFTAR REFERENSI

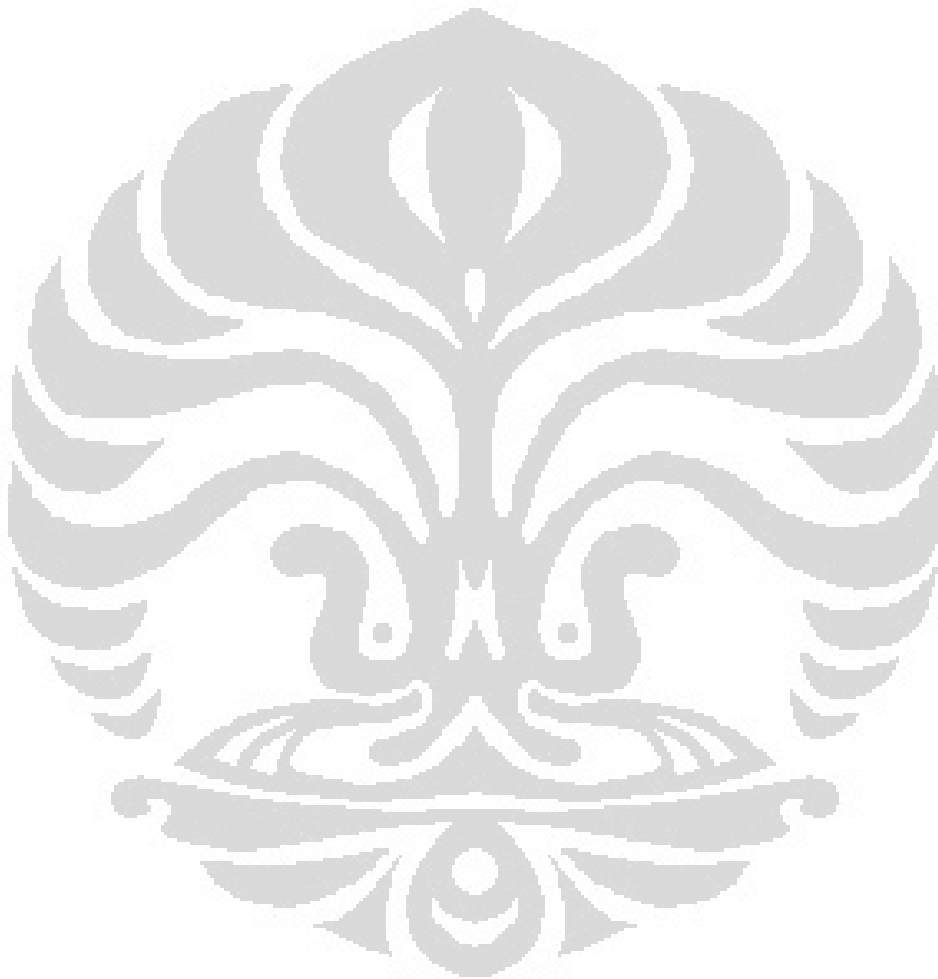
- [1] [http://en.wikipedia.org/wiki/Magnetic\\_storage](http://en.wikipedia.org/wiki/Magnetic_storage)
- [2] <http://en.wikipedia.org/wiki/Magnetoresistance>
- [3] Y. Motome, N. Furukawa, dan N. Nagaosa, Phys.Rev.Lett. **91**, 167204 (2003).
- [4] C. Zener, Phys.Rev. **81**, 440 (1951).
- [5] C. Zener, Phys.Rev. **82**, 403-405 (1951).
- [6] Y. Motome, N. Furukawa, dan N. Nagaosa, arXiv:cond-mat/0406463 v1 (Juni 2004).
- [7] A. P. Ramirez, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 8171-8199 (1997).
- [8] M. B. Salomon dan M. Jaime, Reviews Of Modern Physics Vol. **73** (Juli 2001).
- [9] Twochil Setiadi, Departemen Fisika, Skripsi. Universitas Indonesia, Depok (2007).
- [10] Ade Novriyadi, Departemen Fisika, Skripsi, UNJ Jakarta (2009).
- [11] Blundell, Stephen, *Magnetism in Condensed Matter*, Oxford University Press, 2001.
- [12] [http://en.wikipedia.org/wiki/Double-exchange\\_mechanism](http://en.wikipedia.org/wiki/Double-exchange_mechanism)
- [13] [http://en.wikipedia.org/wiki/Creation\\_and\\_annihilation\\_operators](http://en.wikipedia.org/wiki/Creation_and_annihilation_operators)
- [14] Gasiorowicz, Stephen, *Quantum Physics* 2nd edition, John-Wiley & Sons, Inc., 1996.
- [15] Levitt, Malcolm, *Spin Dynamics: Basics of Nuclear Magnetic Resonance*, John Wiley & Sons, Ltd, 2005.
- [16] N. Furukawa dan Y. Motome, arXiv:cond-mat/0210333 v1 (Oktober 2002).
- [17] Y. Motome dan N. Furukawa, arXiv:cond-mat/0305029 v1 (Mei 2003).
- [18] N. Furukawa dan Y. Motome, arXiv:cond-mat/0308298 v1 (Agustus 2003).
- [19] C. Sen, G. Alvarez dan E. Dagotto, Phys. Rev.B **70**, 064428 (2004).
- [20] S. Cheong dan C. L. Henley, Phys. Rev.B **69**, 075111 (2004).
- [21] C. Ederer, C. Lin, dan A. J. Millis, Phys.Rev.B **76**, 155105 (2007).

[22]<http://en.wikipedia.org/wiki/polaron>

[23]Y. Motome dan N. Furukawa, arXiv:cond-mat/0106266 v1 (Juni 2001).

[24]Y. Motome dan N. Furukawa, arXiv:cond-mat/0203213 v1 (Maret 2002).

[25]Y. Motome dan N. Furukawa, arXiv:cond-mat/0304551 v1 (April 2003).



## LAMPIRAN

### Data Magnetoresistansi Model 2 Dimensi dan 3 Dimensi Pengaruh Double Exchange serta Double Exchange + Phonon

Data Magnetoresistansi Model 2 Dimensi Pengaruh DE				
B (T)	3 x 3 site	10 x 10 site	100 x 100 site	1000 x 1000 site
0	0	0	0	0
0,1	-1,591E-04	-1,638E-04	-9,476E-04	-8,907E-03
0,2	-3,183E-04	-3,275E-04	-1,895E-03	-1,781E-02
0,3	-4,774E-04	-4,913E-04	-2,843E-03	-2,672E-02
0,4	-6,365E-04	-6,550E-04	-3,790E-03	-3,563E-02
0,5	-7,956E-04	-8,188E-04	-4,738E-03	-4,454E-02
0,6	-9,547E-04	-9,825E-04	-5,686E-03	-5,344E-02
0,7	-1,114E-03	-1,146E-03	-6,633E-03	-6,235E-02
0,8	-1,273E-03	-1,310E-03	-7,581E-03	-7,126E-02
0,9	-1,432E-03	-1,474E-03	-8,528E-03	-8,017E-02
1	-1,591E-03	-1,637E-03	-9,476E-03	-8,907E-02

Data Magnetoresistansi Model 3 Dimensi Pengaruh DE			
B (T)	3 x 3 x 3 site	10 x 10 x 10 site	100 x 100 x 100 site
0	0	0	0
0,1	-4,774E-04	-1,637E-03	-9,474E-02
0,2	-9,547E-04	-3,275E-03	-1,894E-01
0,3	-1,432E-03	-4,911E-03	-2,841E-01
0,4	-1,909E-03	-6,547E-03	-3,787E-01
0,5	-2,386E-03	-8,183E-03	-4,731E-01
0,6	-2,863E-03	-9,818E-03	-5,674E-01
0,7	-3,339E-03	-1,145E-02	-6,615E-01
0,8	-3,816E-03	-1,309E-02	-7,550E-01
0,9	-4,292E-03	-1,472E-02	-8,473E-01
1	-4,768E-03	-1,636E-02	-9,359E-01

(lanjutan)

Data Magnetoresistansi Model 2 Dimensi Pengaruh DE + Phonon				
B (T)	3 x 3 site	10 x 10 site	100 x 100 site	1000 x 1000 site
0	0	0	0	0
0,1	-1,5917E-04	-1,6381E-04	-9,4903E-04	-9,0359E-03
0,2	-3,1832E-04	-3,2761E-04	-1,8981E-03	-1,8072E-02
0,3	-4,7746E-04	-4,9140E-04	-2,8471E-03	-2,7108E-02
0,4	-6,3659E-04	-6,5520E-04	-3,7961E-03	-3,6144E-02
0,5	-7,9570E-04	-8,1898E-04	-4,7451E-03	-4,5180E-02
0,6	-9,5480E-04	-9,8277E-04	-5,6941E-03	-5,4215E-02
0,7	-1,1139E-03	-1,1465E-03	-6,6431E-03	-6,3251E-02
0,8	-1,2730E-03	-1,3103E-03	-7,5921E-03	-7,2287E-02
0,9	-1,4320E-03	-1,4741E-03	-8,5412E-03	-8,1323E-02
1	-1,5910E-03	-1,6379E-03	-9,4902E-03	-9,0359E-02

Data Magnetoresistansi Model 3 Dimensi Pengaruh DE + Phonon			
B (T)	3 x 3 x 3 site	10 x 10 x 10 site	100 x 100 x 100 site
0	0	0	0
0,1	-4,7757E-04	-1,6408E-03	-1,0919E-01
0,2	-9,5500E-04	-3,2811E-03	-2,1832E-01
0,3	-1,4323E-03	-4,9210E-03	-3,2734E-01
0,4	-1,9095E-03	-6,5605E-03	-4,3622E-01
0,5	-2,3865E-03	-8,1996E-03	-5,4485E-01
0,6	-2,8635E-03	-9,8382E-03	-6,5308E-01
0,7	-3,3403E-03	-1,1476E-02	-7,6048E-01
0,8	-3,8169E-03	-1,3114E-02	-8,6584E-01
0,9	-4,2935E-03	-1,4751E-02	-9,6335E-01
1	-4,7699E-03	-1,6388E-02	-1,0000E+00