



**UNIVERSITAS INDONESIA**

**MODEL *DOUBLE-EXCHANGE* DAN INTERAKSI  
ELEKTRON-FONON UNTUK MENJELASKAN TRANSISI  
ISOLATOR-METAL DAN FENOMENA  
*MAGNETORESISTANCE* PADA BAHAN *MANGANITES***

**TESIS**

**ALBERT ZICKO JOHANNES**

**0806420745**

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN  
ALAM  
PROGRAM STUDI FISIKA  
KEKHUSUSAN FISIKA MURNI DAN TERAPAN  
DEPOK  
JUNI 2011**

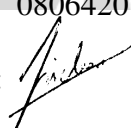
## HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS

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

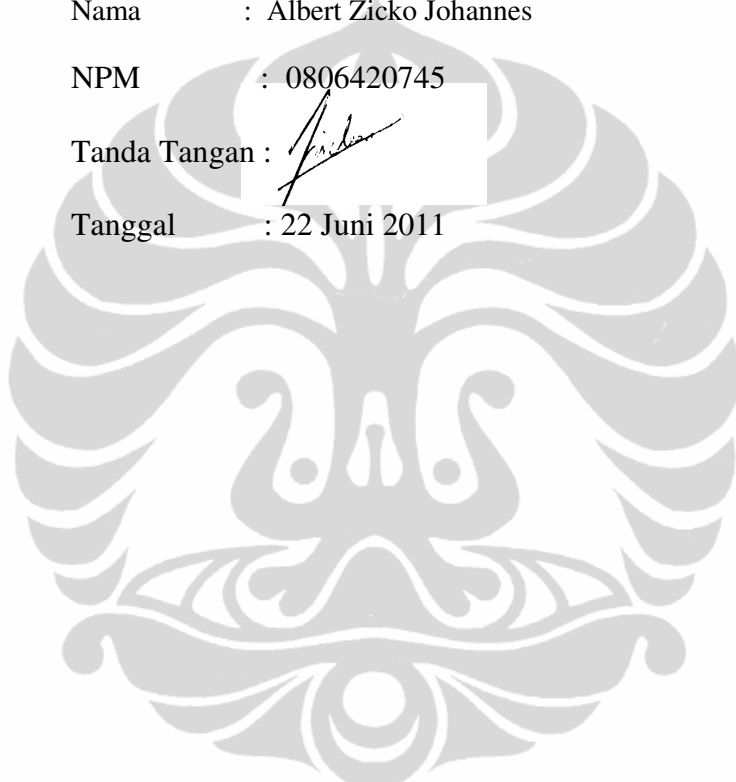
Nama : Albert Zicko Johannes

NPM : 0806420745

Tanda Tangan :



Tanggal : 22 Juni 2011



HALAMAN PENGESAHAN

Tesis ini diajukan oleh

Nama : Albert Zicko Johannes

NPM : 0806420745

Program Studi : FISIKA

Judul Tesis **MODEL *DOUBLE-EXCHANGE* DAN INTERAKSI ELEKTRON-FONON UNTUK MENJELASKAN TRANSISI ISOLATOR-METAL DAN FENOMENA MAGNETORESISTANCE PADA BAHAN MANGANITES**

Telah berhasil dipertahankan dihadapan Dewan Penguji dan diterima sebagai bagian persyaratan yang diperlukan untuk memperoleh gelar Magister Sains pada Program Studi Fisika Fakultas Matematika dan Pengetahuan Alam, Universitas Indonesia.

**DEWAN PENGUJI**

Pembimbing : Dr. M. Aziz Majidi

()

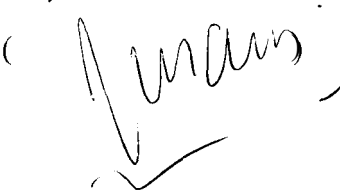
Penguji : Prof. Dr. Rosari Saleh

()

Penguji : Dr. Budhy Kurniawan

()

Penguji : Dr. Imam Fachrudin

()

Ditetapkan di : Depok  
Tanggal : 11 Juni 2011

## KATA PENGANTAR/UCAPAN TERIMA KASIH

Puji syukur saya panjatkan kepada Allah swt, karena atas berkat dan rahmat-NYA, saya dapat menyelesaikan tesis ini. Penulisan tesis ini dilakukan dalam rangka memenuhi salah satu syarat untuk mencapai gelar Magister Fisika pada Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Indonesia. Saya menyadari bahwa tanpa bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak, dari masa perkuliahan sampai pada penyusunan tesis ini, sangatlah sulit bagi saya untuk menyelesaikan tesis ini. Oleh karena itu, saya mengucapkan banyak terima kasih kepada :

- (1) Dr. M. Aziz Majidi, selaku dosen pembimbing yang telah menyediakan waktu, tenaga, dan pikiran untuk mengarahkan saya dalam penyusunan tesis ini;
- (2) Orang tua dan Keluarga saya yang telah memberikan bantuan dukungan material dan moral; dan
- (3) Sahabat yang telah banyak membantu saya dalam menyelesaikan tesis ini.

Akhir kata, saya berharap Allah swt berkenan membalas segala kebaikan semua pihak yang telah membantu. Semoga tesis ini membawa manfaat bagi pengembangan ilmu.

Depok, 6 Juni 2011

HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI

TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS

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

Nama : Albert Zicko Johannes

NPM : 0806420745

Program Studi : Fisika Teoritis dan Terapan

Departemen : Fisika

Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Jenis Karya : Tesis

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

**MODEL *DOUBLE-EXCHANGE* DAN INTERAKSI ELEKTRON-FONON  
UNTUK MENJELASKAN TRANSISI ISOLATOR-METAL DAN FENOMENA  
*MAGNETORESISTANCE* PADA BAHAN *MANGANITES***

Beserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneklusif ini Universitas Indonesia bebas menyimpan, mengalih media/formatkan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (*database*), merawat, dan memublikasikan tugas akhir saya tanpa meminta izin dari saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Dibuat di : Jakarta

Pada tanggal : 22 Juni 2011

Yang menyatakan



(Albert Zicko Johannes)

## ABSTRAK

Suatu model sederhana satu orbital-spin diajukan untuk menganalisis fenomena *Colossal Magnetoresistance* (CMR) yang muncul pada bahan manganites. Fenomena CMR yang muncul pada bahan manganites ini menunjukkan kaitan erat antara perubahan magnetik dan perubahan konduktivitas listriknya, atau dengan kata lain fenomena CMR ini berkaitan dengan mekanisme transisi paramagnetik isolator - feromagnetik metal (PI-FM). Untuk menjelaskan keterkaitan tersebut model satu orbital-spin ini memasukkan pengaruh-pengaruh fonon dan interaksi spin-spin *double-exchange* dalam perhitungannya. Model ini kemudian diselesaikan dengan menggunakan metode perhitungan *Dynamical Mean Field Theory* atau DMFT. Hasil perhitungan yang diperoleh dengan model ini cukup memadai untuk menerangkan fenomena CMR serta transisi PI-FM dibandingkan dengan model-model yang lebih kompleks lainnya.

Kata kunci : Magnetoresistance, CMR, manganites, DMFT, transisi PI-FM

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL .....	i
HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS .....	ii
HALAMAN PENGESAHAN .....	iii
KATA PENGANTAR .....	iv
LEMBAR PERSETUJUAN PUBLIKASI KARYA ILMIAH .....	v
ABSTRAK .....	vi
DAFTAR ISI .....	vii
DAFTAR GAMBAR .....	ix
I. PENDAHULUAN .....	1
1.1. LATAR BELAKANG .....	1
1.2. MANGANITES .....	1
1.3. SIFAT-SIFAT DARI MANGANITES .....	3
1.4. DIAGRAM FASE DARI $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ .....	4
1.5. TUJUAN PENELITIAN .....	5
II. MODEL .....	7
2.1. MODEL <i>TIGHT-BINDING</i> .....	7
2.2. FONON (MODEL HOLSTEIN) .....	9
2.3. INTERAKSI SPIN-SPIN <i>DOUBLE-EXCHANGE</i> .....	11
2.4. MODEL YANG DIGUNAKAN .....	13

III. METODE PERHITUNGAN .....	15
3.1. PENDEKATAN MEDAN RATA-RATA.....	15
3.2. FUNGSI GREEN.....	16
3.3. <i>DYNAMICAL MEAN FIELD THEORY</i> .....	16
3.4. PERHITUNGAN RESISTIVITAS.....	23
IV. HASIL PERHITUNGAN DAN ANALISIS .....	26
4.1. VARIASI KOPLING ELEKTRON-FONON PADA T TETAP.....	26
4.1.1. OKUPASI SETENGAH PENUH.....	26
4.1.2. OKUPASI $n = 1.4$ .....	28
4.2. VARIASI INTERAKSI <i>DOUBLE-EXCHANGE</i> PADA T TETAP .....	29
4.2.1. OKUPASI SETENGAH PENUH.....	30
4.2.2. OKUPASI $n = 1.4$ .....	31
4.3. VARIASI PENGARUH KOPLING ELEKTRON-FONON DAN INTERAKSI <i>DOUBLE-EXCHANGE</i> PADA T TETAP.....	32
4.4. PLOT MAGNETISASI vs T DENGAN VARIASI H, PADA OKUPASI $n = 1.4$ .....	33
4.5. PLOT RESISTIVITAS vs T DENGAN VARIASI H, PADA OKUPASI $n = 1.4$ .....	34
V. KESIMPULAN DAN SARAN.....	38
5.1. KESIMPULAN.....	38
5.2. SARAN .....	39
<b>DAFTAR PUSTAKA.....</b>	<b>40</b>



## DAFTAR GAMBAR

Gambar 1.1 Struktur perovskite manganites sederhana dari $ABO_3$ dimana $A=La$ atau $Ca$ $B=Mn$ [8] .....	3
Gambar 1.2. Diagram fase untuk $La_{1-x}Ca_xMnO_3$ [9] .....	4
Gambar 2.1. Mode vibrasi Jahn-Teller[20].....	10
Gambar 2.2. Degenerasi kulit d Mn[21] .....	12
Gambar 2.3. Proses <i>double-exchange</i> [22] .....	12
Gambar 3.1. Ilustrasi <i>site</i> terkopel dengan <i>bath</i> efektif .....	15
Gambar 3.2. Algoritma DMFT dimulai dengan member harga self-energy $\Sigma$ tebakan kemudian diselesaikan melalui loop self-consistent sampai diperoleh harga self-energy $\Sigma$ konvergen. Catatan : loop dilakukan untuk kedua frekuensi Matsubara ( $z = i\omega_n + \mu$ ) dan frekuensi real ( $z = \omega + i0^+$ ) .....	18
Gambar 3.3. Ilustrasi gambar dos untuk <i>simple cubic</i> .....	19
Gambar 3.4. Kisi Bethe dengan $z=3$ [24] .....	19
Gambar 3.5. Ilustrasi gambar bare-dos untuk kisi bethe $z=tak$ terhingga.. .....	20
Gambar4.1. DOS vs $\epsilon$ untuk keadaan tanpa kopling elektron-fonon dan interaksi double-exchange pada temperatur = $10^{-3}$ eV .....	27
Gambar4.2. DOS vs $\epsilon$ untuk pengaruh kopling electron – fonon pada temperatur = $10^{-3}$ eV .....	28
Gambar4.3. DOS vs $\epsilon$ untuk pengaruh kopling elektron-fonon $n = 1.4$ dan temperatur = $10^{-3}$ eV.....	29
Gambar4.4. DOS vs $\epsilon$ untuk pengaruh interaksi DE ( $n=1$ ) pada temperatur = $10^{-3}$ eV ...	30
Gambar4.5. DOS vs $\epsilon$ untuk pengaruh interaksi DE ( $n=1.4$ ) pada temperatur = $10^{-3}$ eV. 31	31
Gambar4.6. DOS vs $\epsilon$ untuk pengaruh interaksi elektron-fonon & DE keadaan $n=1.4$ , variasi T. inset : zoom plot pada potensial kimia.....	32
Gambar4.7. Magnetisasi vs T untuk pengaruh interaksi elektron-fonon & DE keadaan $n=1.4$ , dengan variasi $\mathcal{H}$ .....	34
Gambar4.8. Resistivitas vs T untuk pengaruh interaksi elektron-fonon fonon & DE keadaan $n=1.4$ , variasi $\mathcal{H}$ . .....	35
Gambar4.9. Resistivitas vs T hasil eksperimen LCMO pada doping $x=0.3$ , variasi $\mathcal{H}$ [20].....	36



# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1. LATAR BELAKANG

Beberapa tahun belakangan ini *harddisk* menjadi semakin besar kemampuannya untuk menyimpan data. Semua ini dapat terjadi karena pengaruh fenomena yang dinamakan efek *Magnetoresistance*. Efek *Magnetoresistance* adalah efek perubahan hambatan atau resistansi listrik dikarena perubahan medan magnet. Efek ini dimanfaatkan pada *disk read/write head* yang berfungsi sebagai pembaca dan penulisan data pada *harddisk*. Apabila efek *Magnetoresistance* ini semakin kuat maka material pada *disk read/write head* bisa semakin kecil ukurannya, dengan mengecilnya alat ini permukaan domain magnetik pada *harddisk* sebagai tempat untuk dibaca/ditulis bisa jauh diperkecil ukurannya atau dengan kata lain domain magnetik dapat diperbanyak sehingga kapasitas simpan data *harddisk* menjadi semakin besar.

Sekarang ini para ilmuwan sedang mempelajari suatu fenomena yang menimbulkan perubahan *Magnetoresistance* yang besar yaitu *Colossal Magnetoresistance* (CMR). Fenomena CMR ini diharapkan menjadi dasar untuk revolusi dibidang elektronik, seperti aplikasi pada spintronik, dimana keadaan spin dari elektron digunakan untuk menangani, menyimpan dan menarik informasi.

Salah satu bahan yang menunjukkan fenomena CMR ini adalah bahan manganites [1,2], hal ini membuat manganites menjadi salah satu bahan yang sering diteliti oleh para ilmuwan sekarang ini.

### 1.2. MANGANITES

*Mixed valence manganese oxides*  $R_{1-x}A_xMnO_3$  (R = rare earth, A = divalensi atau tetra valensi kation, seperti Ca, Sr, Ba atau Pb) dan beberapa jenis sifatnya telah diketahui sejak lama, namun sejak ditemukannya CMR disekitar temperatur transisi feromagnetik ke paramagnetik atau  $T_c$  [1] memicu ketertarikan kembali untuk meneliti material ini.

Berbagai penelitian menunjukkan banyak variasi dari fenomena dan fase di material ini adalah timbul dari pengaruh struktur, muatan, orbital serta spin.

Material ini telah dipelajari sejak tahun 1950, khususnya untuk salah satu jenis manganites oksida, yaitu *Manganites Perovskites*. *Manganites Perovskites* atau  $\text{La}_{1-x}\text{A}_x\text{MnO}_3$  (La= alkali dan A = doping yaitu Ca, Sr, Ba atau Pb), pertama kali diteliti oleh Jonker dan Van Santen [2]. Mereka menemukan pada bagian akhir dari doping x yaitu  $x=0$  dan  $x=1$  bersifat antiferromagnetik isolator. Tetapi pada bagian x diantaranya memberikan sifat ferromagnetik. Terutama pada  $x=0.3$  mereka menemukan perubahan ferromagnetik yang berhubungan dengan peningkatan yang tajam dari konduktivitas listrik atau terjadi mekanisme transisi paramagnetik isolator-ferromagnetik metal (PI-FM).

Pada tahun 1951 Zener mengajukan model *double-exchange* [3] untuk menjelaskan mekanisme transisi PI-FM ini. Model ini cocok secara kualitatif dengan hasil eksperimen untuk manganites. Tetapi pada awal tahun 1990an ketika dilaporkan munculnya CMR pada manganites [1], model Zener ini tidak dapat menjelaskan secara lengkap. Hal ini menimbulkan keinginan kembali untuk mengerti apa penyebab dari fenomena ini. Hasil *double-exchange* model dapat menjelaskan secara kualitatif tetapi bila dibandingkan dengan temperatur transisi yang diperoleh secara eksperimental hasilnya jauh berbeda (berada jauh dibawah hasil model).

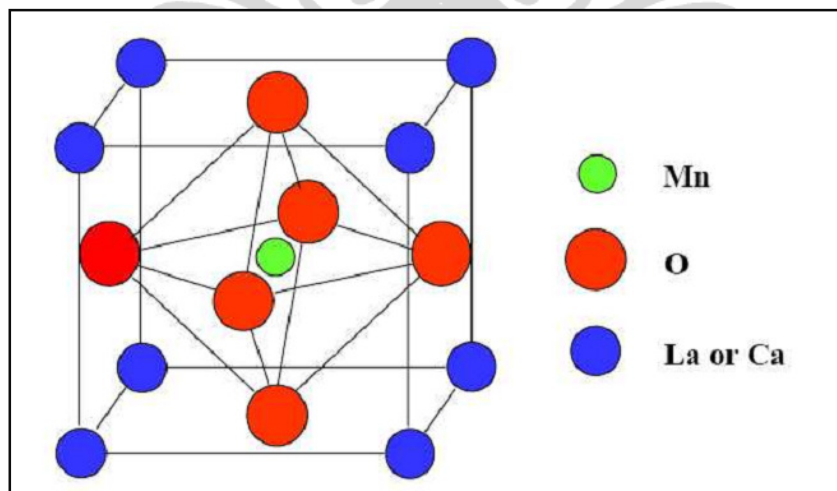
Millis [4] pada tahun 1995 mengajukan model yang memasukkan pengaruh fonon Jahn-teller. Dengan memasukkan pengaruh fonon tersebut, model baru ini dapat menjelaskan terjadinya fenomena transisi PI-FM dan CMR pada LCMO untuk doping 0.3. Ramakhrisan [5] pada tahun 2007 juga mengajukan model yang mirip yaitu pentingnya fonon Jahn-Teller dengan tambahan memasukan pengaruh interaksi Hubbard (*onsite-repulsion*) dan dapat juga menunjukkan fenomena transisi PI-FM dan CMR pada LCMO.

Baru-baru ini hasil eksperimen konduktivitas optis untuk LCMO oleh Rusydi et al. [6] menjelaskan adanya ketergantungan doping dan temperatur pada energi tinggi. Model Millis dan Ramakhrisan tidak dapat menjelaskan sifat optis material ini, dikarenakan model ini hanya berlaku untuk keadaan sistem elektron pada energi rendah tidak pada keadaan energi tinggi dimana konduktivitas optis terjadi. Salah satu model yang

mencoba menjelaskan pada energi tinggi ini adalah model Majidi et al.[7], dimana model ini mengajukan pentingnya keberadaan atom lain yaitu Oksigen pada perhitungan. Model ini cocok dengan hasil eksperimen Rusydi et al., kecuali pada daerah sistem elektron energi rendah 0-0,1 dimana terjadi fenomena transisi PI-FM pada energi 0. Untuk daerah energi tersebut Majidi et al. menyarankan bahwa fenomena transisi paramagnetik isolator-feromagnetik metal dapat terjadi karena adanya penguatan dan perlemahan parameter hopping MnO yang dipicu oleh adanya interaksi spin-spin dan kopling elektron-fonon.

### 1.3. SIFAT-SIFAT DARI MANGANITES

Pada penelitian ini akan dipelajari  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$  (LCMO). Oleh karena itu diskusi selanjutnya akan dibatasi untuk sifat dari sistem LCMO manganites. Gambar struktur LCMO manganite dapat dilihat pada gambar 1.1. Ini adalah gambaran unit sel ideal yang terlihat pada temperatur tinggi 1000 K, dimana semua perovskite berbentuk kubus. Ketika temperatur turun terjadi distorsi pada  $\text{MnO}_6$  terdistorsi dan berotasi disekitar ikatan oksigen dimana hal ini menyebabkan terjadi perubahan simetri dari LCMO. Pada temperatur dibawah 700k LCMO berbentuk orthorhombik.



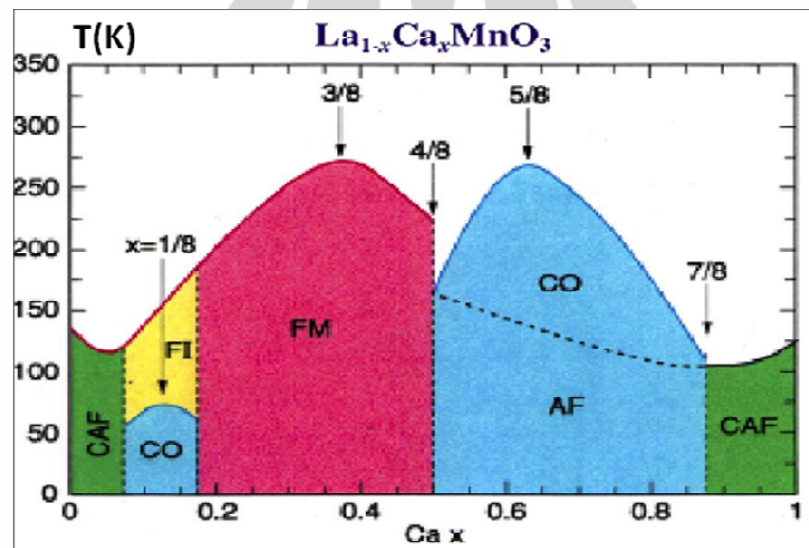
**Gambar 1.1** Struktur perovskite manganites sederhana dari  $\text{ABO}_3$  dimana  $\text{A}=\text{La}$  atau  $\text{Ca}$  ,  $\text{B}=\text{Mn}$ [8]

Konduksi elektron utama pada LCMO terjadi lewat pita konduksi yang terbentuk akibat overlap orbital Mn 3d dan O 2p. Overlap maksimal akan diperoleh pada struktur

berbentuk kubik perovskite (struktur faktor=1), gangguan dari bentuk struktur ini akan menurunkan overlap orbital dan hopping elektron antar *site* dan menurunkan konduktivitas.

#### 1.4. DIAGRAM FASE DARI $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$

Gambar 1.2 menunjukkan diagram fase yang kompleks dari LCMO dimana sumbu axis menunjukkan x atau konsentrasi doping dan sumbu ordinat menunjukkan temperatur.



Gambar 1.2. Diagram fase untuk  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$ [9]

Terlihat pada gambar terdapat banyak fase dimana FM =ferromagnetic metal, FI, ferromagnetic Insulating, CO = Charge ordered , CAF= Canted Anti Ferromagnetik. AF = antiferromagnetik, dan bagian putih menunjukkan fase paramagnetik.

Keberadaan banyak fase yang beragam ini menyebabkan orang-orang berasumsi adanya kaitan erat antara magnetik dan konduktivitas pada manganites. Tetapi implikasi dari hal ini baru dipelajari pada tahun 1993 ketika magnetoresistance yang besar sekitar 50% terlihat pada thin film [10]. Setahun berikutnya (1994) pada  $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$  dilaporkan magnetoresistance yang lebih besar lagi terlihat yaitu 127% [1]. Dari hasil ini istilah *Collosal Magnetoresitance* (CMR) pertama kali digunakan. Hal ini untuk membedakan dengan *Giant Magnetoresitance* (GMR) yaitu kejadian yang sama seperti CMR tetapi

ditemukan pada material berbentuk lapisan ferromagnetik dan nonmagnetik sebagai penyebab perubahan magnetisasinya, sedangkan pada CMR materialnya berbentuk *bulk*, dimana magnetisasi terjadi oleh ordering spin magnetik pada material tersebut.

Setelah CMR ditemukan, berbagai fase lainnya sebagai fungsi temperatur versus konsentrasi doping atau medan magnet diperoleh [11-19]

### 1.5. TUJUAN PENELITIAN

Penelitian ini akan menyelidiki secara kualitatif mekanisme transisi PI-FM dan CMR pada manganites khususnya untuk LCMO. Parameter-parameter yang disarankan oleh Majidi et al [7] yaitu penguatan dan perlemahan parameter hopping MnO yang dipicu oleh adanya interaksi spin-spin dan kopling elektron-fonon akan diterapkan pada penelitian ini. Penelitian ini akan difokuskan pada doping  $x=0$  dan  $x=0.3$ , hal ini dikarenakan pada doping  $x=0.3$  terjadi perubahan maksimum CMR [1] serta hasil eksperimen lainnya menunjukkan dengan jelas adanya transisi PI-FM pada temperatur kamar [2,20].

Secara khusus penelitian yang dilakukan adalah :

1. Menyelidiki bagaimana *Density of States* (DOS) berubah sebagai fungsi dari parameter-paramater model (konsenterasi doping  $x$ , temperatur  $T$ , parameter interaksi elektron-fonon  $\lambda$ , parameter interaksi spin-spin  $J$ , medan magnet eksternal  $\mathcal{H}$ ). Khususnya bagaimana *pseudo-gap* terbentuk dan hilang pada DOS sebagai akibat kompetisi antara pengaruh interaksi spin-spin *double-exchange* dan interaksi elektron-fonon, dimana *pseudo-gap* ini menggambarkan pola transisi dari metal ke isolator
2. Menghitung resistivitas listrik sebagai fungsi temperatur untuk nilai parameter  $x$ ,  $\lambda$ , dan  $J$  tertentu pada nilai  $\mathcal{H}$  yang bervariasi. Dengan melihat hal ini besar perubahan CMR dapat diperkirakan.

Perhitungan diatas dilakukan dengan menggunakan metode *Dynamical Mean Field Theory* (DMFT) yang sekarang ini merupakan metode yang dapat diandalkan untuk menyelesaikan dinamika lokal dari sistem kuantum *many-body*.

Analisis hasil-hasil studi / perhitungan ini kemudian akan dibandingkan dengan data eksperimen, secara kualitatif, yaitu dengan membandingkan profile kurva hasil perhitungan teoritik dengan data eksperimen.

Penulisan tesis ini akan disusun sebagai berikut :

- Pada bab 2 akan dibahas model perhitungan yang akan digunakan, yaitu model *tight-binding* dengan interaksi *double-exchange* dan interaksi fonon .
- Bab 3 dibahas penerapan model tersebut dengan metode perhitungan DMFT.
- Bab 4 akan dibahas hasil simulasi dengan DMFT data eksperimen.
- Dan Bab 5 Kesimpulan dan Saran.



## BAB II

### MODEL PERHITUNGAN

Fenomena transisi paramagnetik isolator - feromagnetik metal pada manganites berhubungan erat dengan kopling antara konduktivitas listrik dan magnetik. Majidi et. al [7] menyarankan bahwa fenomena transisi ini dapat terjadi karena adanya penguatan dan perlemahan parameter hopping MnO yang dipicu oleh adanya interaksi spin-spin. Untuk mensimulasikan hal ini akan digunakan model *tight-binding* yang menyertakan interaksi elektron-fonon serta interaksi spin-spin *double-exchange*.

Subbab berikut akan dijelaskan pemodelan-pemodelan yang akan digunakan pada model perhitungan pada simulasi ini.

#### 2.1. MODEL *TIGHT-BINDING*

Model *tight-binding* (model TB) adalah model untuk menghitung struktur pita energi elektron dengan menggunakan kumpulan pendekatan dari fungsi gelombang yaitu berdasarkan suatu superposisi dari fungsi-fungsi gelombang atom yang terisolasi berada pada setiap *site* atom.

Sesuai namanya model quantum mekanik ini menjelaskan sifat dari elektron-elektron yang terikat kuat pada zat padat. Elektron-elektron pada model ini harus terikat kuat pada atom dimana elektron tersebut berasal dan elektron-elektron ini hanya mempunyai interaksi yang terbatas dengan keadaan-keadaan atau potensial di sekitar atom-atom di zat padat tersebut. Akibatnya fungsi gelombang dari elektron akan mirip dengan orbital atom dari elektron pada atom bebas. Energi dari elektron ini juga berada dekat dengan energi ionisasi dari elektron yang berada pada atom bebas atau ion, karena interaksi dengan potensial-potensial dan keadaan-keadaan atom tetangga menjadi terbatas.

Jika digunakan penulisan secara *second quantization*, maka akan lebih mudah memahami konsep model *tight-binding*. Dengan menggunakan orbital atom sebagai keadaan dasar (*basis state*), maka operator Hamiltonian dalam bentuk *second quantization* adalah sebagai berikut :

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + h.c.) \quad (2.1)$$

Dimana :

$c_{i,\sigma}^+$  ( $c_{i,\sigma}$ ) = operator kreasi (anihilasi) elektron

$t$  = parameter hopping

$i,j$  = indeks untuk tetangga terdekat

$\sigma$  = indeks spin polarisasi

Disini parameter hopping menyatakan transfer integral atau kemampuan elektron untuk berpindah tempat pada model TB. Untuk kasus ekstrim, bila  $t$  bernilai 0, maka tidak mungkin elektron-elektron dapat *hop* atau melompat ke *site* tetangga terdekat, keadaan ini menunjukkan sistem atom yang terisolasi. Jika nilai hopping ini ada maka elektron-elektron bisa berada pada *site* tetangga terdekat.

Persamaan TB yang akan digunakan pada model perhitungan akan ditransformasi fourier yaitu sebagai berikut :

$$H_{el} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}\sigma}^+ c_{\vec{k}\sigma} + h.c. \quad (2.2)$$

Dengan langkah-langkah dibawah ini :

Pertama tentukan transformasi fourier dari operator kreasi (anihilasi) elektron

$$c_{i,\sigma}^+ = c_{\vec{r}_i\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}_i a} c_{\vec{k},\sigma}^+ \quad (2.3)$$

$$c_{i,\sigma} = c_{\vec{r}_i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}'\vec{r}_i a} c_{\vec{k}',\sigma} \quad (2.4)$$

Masukkan persamaan (2.3) dan (2.4) ke (2.2) maka diperoleh :

$$-t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + h.c.) = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left( \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{r}_i a} c_{\vec{k},\sigma}^+ \right) \left( \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}'\vec{r}_j a} c_{\vec{k}',\sigma} \right) + h.c. \right) \quad (2.5)$$

$$-t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + h.c.) = -t \sum_{\vec{k}\vec{k}', \sigma} \frac{1}{N} \sum_n e^{i(\vec{k}-\vec{k}')a} e^{i\vec{k}a} c_{\vec{k},\sigma}^+ c_{\vec{k}',\sigma} + h.c. \quad (2.6)$$

$$-t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + h.c.) = -t \sum_{\vec{k}\vec{k}', \sigma} \frac{1}{N} \delta_{\vec{k}\vec{k}'} e^{i\vec{k}a} c_{\vec{k},\sigma}^+ c_{\vec{k}',\sigma} + h.c. \quad (2.7)$$

$$-t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + h.c.) = -t \sum_{\vec{k}, \sigma} e^{i\vec{k}a} c_{\vec{k},\sigma}^+ c_{\vec{k},\sigma} + h.c. \quad (2.8)$$

Jika diterapkan untuk kisi berbentuk *simple cubic* maka persamaan (2.8) dapat diselesaikan menjadi:

$$-t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + h.c.) = -2t \sum_{\sigma} (\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)) c_{\vec{k},\sigma}^+ c_{\vec{k},\sigma} + h.c. \quad (2.9)$$

$$-t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + h.c.) = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon(\vec{k}) c_{\vec{k},\sigma}^+ c_{\vec{k},\sigma} + h.c. \quad (2.10)$$

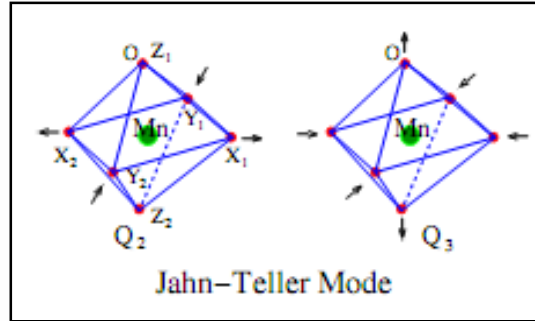
Dengan :

$$\epsilon(\vec{k}) = -2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)) \quad (2.11)$$

## 2.2. FONON (MODEL HOLSTEIN)

Fonon adalah suatu keadaan kuantum untuk mode vibrasi pada kisi kristal. Pada LCMO, fonon berasal dari mode vibrasi dari ion La atau Ca dengan MnO<sub>6</sub> oktahedra. Mode vibrasi ini memberikan kenaikan gangguan statis dan dinamik pada kisi dan akan menimbulkan pengaruh yang kuat pada sifat elektronik dari material.

Hasil perhitungan model Miller [4] menunjukkan fonon menjadi salah satu penyebab terjadinya transisi PI-FM pada LCMO yaitu dengan menghambat pergerakan elektron dan membuat elektron tersebut menjadi terisolasi pada *site* tertentu. Mode vibrasi yang memberikan kontribusi pada transisi PI-FM ini dikenal dengan nama *Jahn-Teller phonon*. Mode vibrasi ini dapat dilihat pada gambar 2.1 dibawah ini :



Gambar 2.1. Mode vibrasi Jahn-Teller[21]

Pada fisika zat mampat pemodelan mode vibrasi ini bisa digambarkan oleh model Holstein dimana model ini mempunyai Hamiltonian sebagai berikut :

$$H = H_{TB} + H_{ph} + H_{el-ph} \quad (2.12)$$

Bagian  $H_{TB}$  merupakan bagian *tight-binding* yang bentuknya seperti yang dijelaskan di subbab 2.1. Sedangkan bagian  $H_{ph}$  dan  $H_{el-ph}$ , menyatakan pengaruh fonon pada sistem dengan bagian  $H_{ph}$  merupakan pengaruh energi kinetik dan potensial dari fonon itu sendiri sedangkan  $H_{el-ph}$  menyatakan suku interaksi antara elektron dan fonon. Hamiltonian untuk fonon model Holstein ini sering ditulis secara *second quantization* seperti berikut :

$$H_{ph} = \sum_i \omega a_i^+ a_i \quad (2.13)$$

$$H_{el-ph} = g' \sum_i n_i (a_i^+ + a_i) \quad (2.14)$$

Dimana :

$a_i^+$  ( $a_i$ ) = operator kreasi (anihilasi) fonon

$n_i$  = densitas keadaan untuk *site* ke -i

$\omega$  = frekuensi resonansi fonon

$g'$  = konstanta kopling elektron-fonon

Selanjutnya jika persamaan-persamaan (2.13) dan (2.14) diatas dikerjakan untuk momentum  $p$  dan simpangan  $x \Rightarrow ip_i = (a_i - a_i^+) \sqrt{M\omega/2}$  ;  $x_i = (a_i^+ + a_i) / \sqrt{2M\omega}$  akan menghasilkan persamaan sebagai berikut :

$$H_{ph} = \sum_i \left( \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} M\omega^2 x_i^2 \right) \quad (2.15)$$

$$H_{el-ph} = g \sum_i n_i x_i \quad (2.16)$$

Dimana :

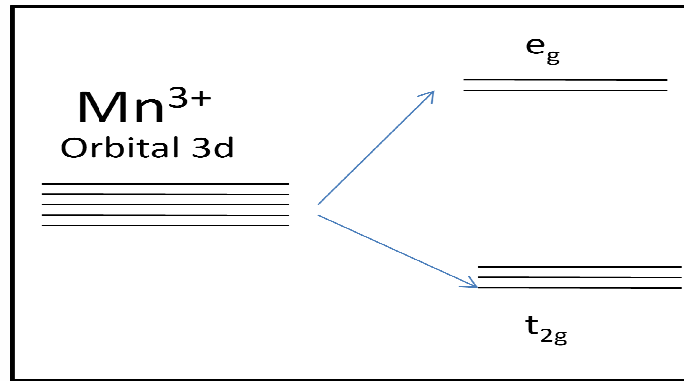
$M$  = massa

$$g = g' \sqrt{2M\omega}$$

Bila dilihat persamaan (2.15) dan (2.16) merupakan persamaan dari osilator harmonik. Dari sini dapat dijelaskan bahwa model Holstein memodelkan pengaruh fonon didasarkan pada model pegas osilator harmonik, dimana model pegas ini sering digambarkan sebagai vibrasi kisi kristal pada zat padat.

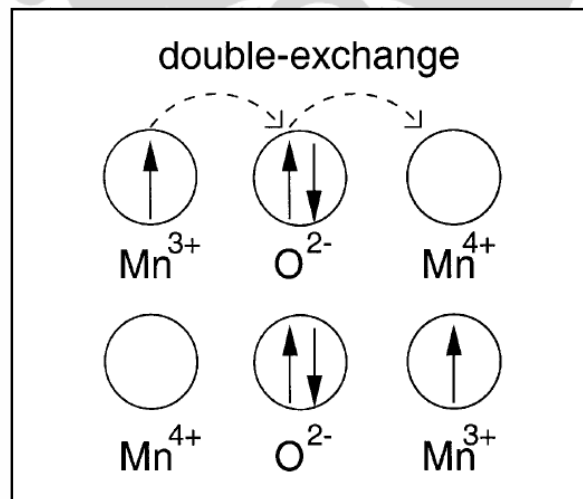
### 2.3. INTERAKSI SPIN-SPIN *DOUBLE-EXCHANGE*

Pada manganites, kulit d dari ion Mn terpisah menjadi 5 degenerasi, 3 degenerasi keadaan  $t_{2g}$  yang berenergi rendah dan 2 degenerasi keadaan  $e_g$  yang berenergi lebih tinggi (gambar 2.2). Spin ion Mn  $t_{2g}$  terkopel sangat kuat dengan spin elektron  $e_g$ . Interaksi spin-spin ini merupakan mekanisme yang disebut *double-exchange*, dimana kopling spin-spin ini mengarahkan pada interaksi ferromagnetik tidak langsung [3]. Interaksi ferromagnetik tidak langsung ini berkompetisi dengan interaksi *super-exchange* anti-ferromagnetik antara spin-spin  $t_{2g}$ , menyebabkan timbul fase anti-ferromagnetik pada  $x=1$  dan fase ferromagnetik di temperatur rendah yang teramati pada manganites berdoping [8].



Gambar 2.2. Degenerasi kulit d Mn

Mekanisme *double-exchange* dapat dijelaskan dengan menganggap suatu sistem ion Mn dipisahkan oleh ion  $O_2$ . Untuk elektron tunggal  $e_g$ , ada dua kemungkinan keadaan muatan yaitu keadaan  $Mn^{3+}O^{2-}Mn^{4+}$  dan keadaan  $Mn^{4+}O^{2-}Mn^{3+}$ . Kedua kemungkinan ini dapat terjadi karena elektron dapat berpindah dari ion  $Mn^{3+}$  ke ion  $Mn^{4+}$  melewati ion  $O_2$  yang berada diantaranya seperti pada gambar 2.3. Seperti terlihat pada gambar terjadi *hopping* elektron dua kali secara simultan dari  $Mn^{3+}$  ke  $O^{2-}$  dan  $O^{2-}$  ke  $Mn^{4+}$ , karena terjadi dua kali lompatan ini maka mekanisme ini dinamakan *double exchange* dimana bila dilihat sekilas hanya terjadi pertukaran antar elektron pada  $Mn^{3+}$  dan  $Mn^{4+}$ . Mekanisme *double-exchange* memberikan *hopping* efektif antara ion Mn tetangga terdekat.



Gambar 2.3. Proses *double-exchange*[22]

Untuk pemodelan *double-exchange* ini secara matematis digambarkan oleh Hamiltonian dibawah ini :

$$H = H_{TB} + H_{DE} \quad (2.17)$$

$$H_{DE} = - \sum_i J \vec{S}_i \cdot \vec{s}_i \quad (2.18)$$

Dimana :

$J$  = konstanta kopling interaksi spin

$\vec{S}_i(\vec{s}_i)$  = spin ion(elektron) ke-  $i$

Hamiltonian diatas merupakan penggambaran terjadinya interaksi antara spin ion dan spin elektron, bila diinterpretasikan dengan gambar 2.3 hal ini menunjukkan interaksi spin-spin yang terjadi antara ion  $Mn^{3+}$  dan elektron  $e_g$  ( $H_{DE}$ ) yang kemudian elektron  $e_g$  ini *hoping* ( $H_{TB}$ ) dua kali dengan melewati ion netral  $O^{2-}$  dan kembali berinteraksi spin-spin lagi dengan ion  $Mn^{4+}$  ( $H_{DE}$ ).

#### 2.4. MODEL PERHITUNGAN YANG AKAN DIGUNAKAN

Model yang akan digunakan pada penelitian ini adalah model Hamiltonian gabungan model-model yang telah dibahas disubbab sebelumnya yaitu model *tight-binding* dengan interaksi *double-exchange* dan interaksi fonon, yang bentuknya sebagai berikut :

$$H = H_{el} + H_{ph} + H_{el-ph} \quad (2.19)$$

Dimana :

$H$  = Hamiltonian total untuk seluruh sistem

$H_{el}$  = Hamiltonian untuk elektron

$H_{ph}$  = Hamiltonian untuk fonon

$H_{el-ph}$  = Hamiltonian untuk interaksi elektron-fonon

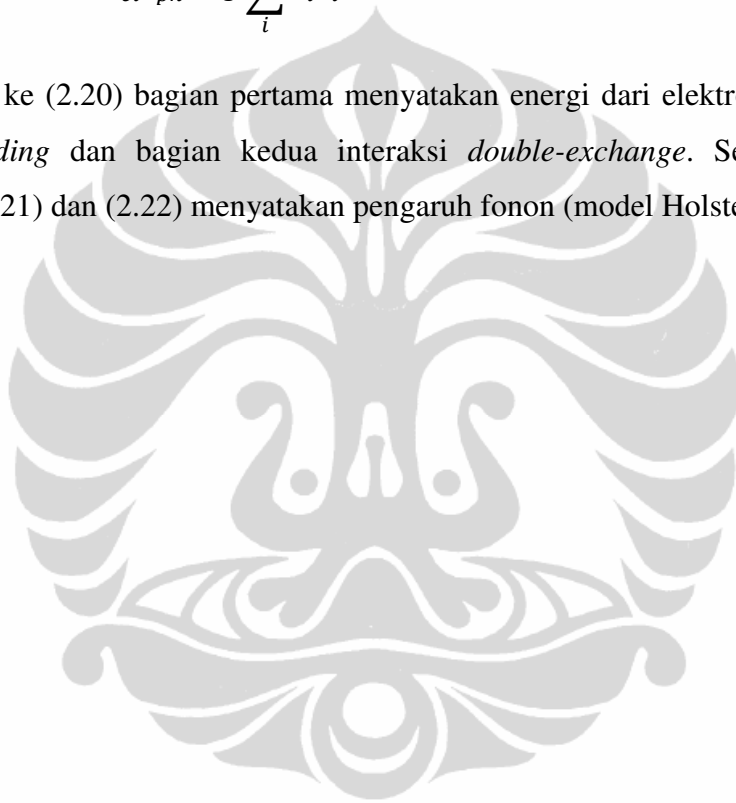
Untuk lebih jelas :

$$H_{el} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon(\vec{k}) c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} - \sum_i J \vec{S}_i \cdot \vec{s}_i \quad (2.20)$$

$$H_{ph} = \sum_i \left( \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} M \omega^2 x_i^2 \right) \quad (2.21)$$

$$H_{el-ph} = g \sum_i n_i x_i \quad (2.22)$$

Pada persamaan ke (2.20) bagian pertama menyatakan energi dari elektron seperti pada model *tight-binding* dan bagian kedua interaksi *double-exchange*. Sedangkan pada persamaan ke (2.21) dan (2.22) menyatakan pengaruh fonon (model Holstein).





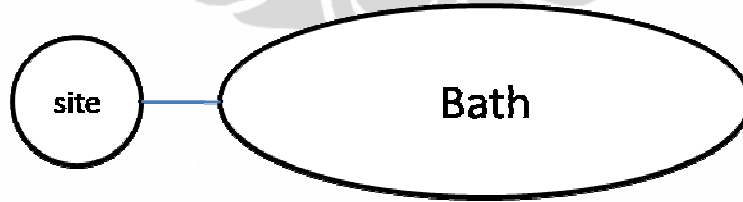
## BAB III

### METODE PERHITUNGAN

Metode perhitungan yang dinamakan metode *Dynamical Mean Field Theory* atau disingkat DMFT akan digunakan untuk menyelesaikan model perhitungan. Dibawah ini akan dijelaskan apa itu metode DMFT dan algoritma perhitungannya.

#### 3.1. PENDEKATAN MEDAN RATA-RATA

Sebelum menjelaskan lebih lanjut tentang metode DMFT akan diterangkan lebih dahulu yang menjadi ide dasar dari DMFT yaitu pendekatan medan rata-rata (*mean-field approximation*) atau yang dikenal juga dengan nama pendekatan lokal (*local-approximation*). Konsep dari pendekatan ini adalah mengaproksimasi masalah sistem kisi atau sistem *many-body* yang saling berinteraksi menjadi masalah lokal satu *site* yang dipengaruhi medan akibat *site-site* lain, yakni dengan mengasumsikan *site* tersebut terkopel dengan suatu *bath* efektif (kumpulan *site-site*) yang menggambarkan keseluruhan pengaruh (medan rata-rata) dari sisa kisi. Ilustrasi ini dapat lihat pada gambar 3.1. Dengan pendekatan ini, jumlah derajat kebebasan yang sangat banyak dari atom-atom pada kisi dapat tereduksi ke dalam *bath* efektif dan masalah dapat disederhanakan secara dramatis [23].



Gambar 3.1. Ilustrasi *site* terkopel dengan *bath* efektif

Lebih jelasnya akan digunakan contoh model Heisenberg. Model ini yang mempunyai Hamiltonian sebagai berikut :

$$H = -J \sum_i \sum_{i \neq j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{h} \quad (3.1)$$

Dimana bagian pertama dari persamaan diatas menggambarkan interaksi spin-spin ion

dan bagian kedua menggambarkan interaksi spin dengan medan magnet eksternal. Sistem ini dapat direduksi menjadi sistem satu partikel dengan cara mengganti  $\vec{S}_j$  dengan suatu spin rata-rata yang tidak bergantung posisi (relasi posisi diabaikan).

$$H = -J \sum_i \sum_{i \neq j} \vec{S}_i \cdot \langle \vec{S}_j \rangle - \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{h} \quad (3.2)$$

$$H = -J \sum_i \vec{S}_i \cdot \left( \sum_{i \neq j} \langle \vec{S}_j \rangle + \vec{h} \right) \quad (3.3)$$

Terlihat pada persamaan (3.3) sekarang Hamiltonian tereduksi dan bisa digambarkan sebagai suatu interaksi spin dengan medan magnet efektif (medan magnet eksternal + pengaruh interaksi rata-rata spin (*mean-field*)).

### 3.2. FUNGSI GREEN

Pada metode DMFT akan digunakan fungsi Green sebagai suatu fungsi yang berguna untuk menyelesaikan persamaan gelombang pada mekanika kuantum. Fungsi Green dari sistem Hamiltonian model perhitungan yang akan digunakan dalam bentuk matriks adalah sebagai berikut:

$$[G(\vec{k}, z)] = [z - H_0(k) - \Sigma(\vec{k}, z)]^{-1} \quad (3.4)$$

Dalam mendefinisikan  $[G(\vec{k}, z)]$  semua bagian interaksi dan potensial dari Hamiltonian terserap ke dalam sebuah fungsi yang disebut matriks *self-energy*  $[\Sigma(\vec{k}, z)]$ . Selanjutnya *Self-energy* ini akan diselesaikan secara *self-consistent* melalui algoritma DMFT pada domain frekuensi Matsubara ( $z = i\omega_n + \mu$ ) dan frekuensi Real ( $z = \omega + i0^+$ ).

### 3.3. DYNAMICAL MEAN FIELD THEORY

Seperti telah diketahui konsep dasar DMFT ialah mereduksi masalah sistem banyak partikel yang berinteraksi menjadi masalah satu partikel yang dipengaruhi oleh medan rata-rata dari partikel-partikel yang lain. Oleh karena itu pada prosedur perhitungan DMFT dilakukan *mean-field* pada fungsi Green yang bertujuan agar fungsi Green

tersebut seolah-olah tidak terganggu oleh interaksi pada *site* yang lain tetapi tetap membawa informasi *site* yang lain secara rata-rata.

Langkah-langkah metode DMFT ini adalah sebagai berikut (algoritma dapat dilihat pada gambar 3.2) :

Pertama-tama fungsi Green di *coarse-graining* atau dirata-ratakan ke seluruh *Brillouin zones* yang bertujuan menghilangkan ketergantungan terhadap momentum agar fungsi Green ini bersifat lokal tidak bergantung posisi, diperoleh :

$$\bar{G}(z) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} [G(\vec{k}, z)] \quad (3.5)$$

Dalam prosedurnya sumasi terhadap titik  $\vec{k}$  dalam *Brillouin zones* seringkali dilakukan pendekatan, yaitu sumasi terhadap titik  $\vec{k}$  ditransformasi menjadi integral terhadap variabel energi sedemikian hingga :

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} F(\epsilon(\vec{k})) = \int d\epsilon \rho_0(\epsilon) F(\epsilon) \quad (3.6)$$

Dimana :

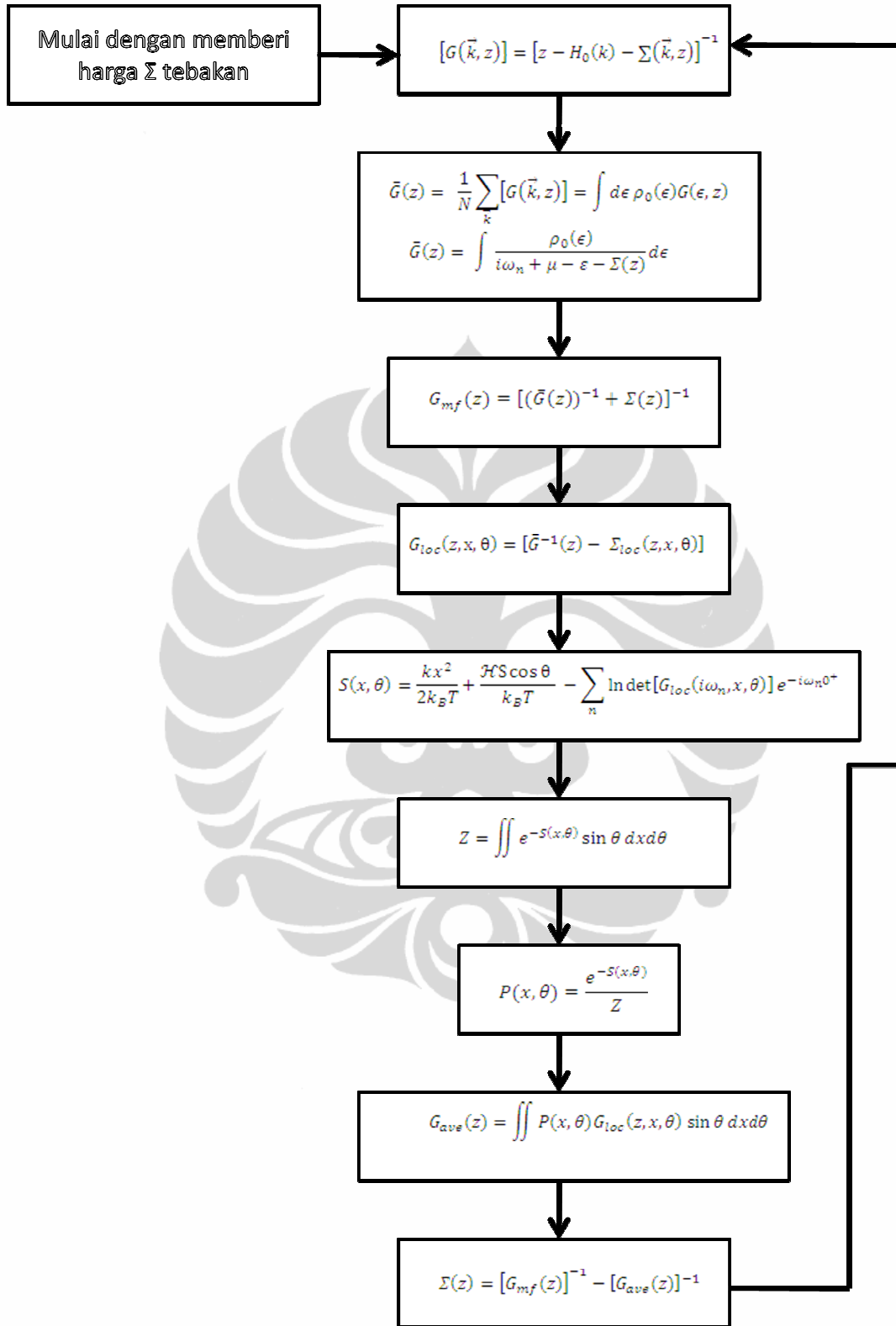
$F(\epsilon(\vec{k}))$  adalah integrand yang merupakan fungsi dari  $\epsilon(\vec{k})$  (spektrum energi kinetik)

$\rho_0(\epsilon)$  adalah *bare density of states* atau rapat keadaan dasar dari spektrum energi kinetiknya.

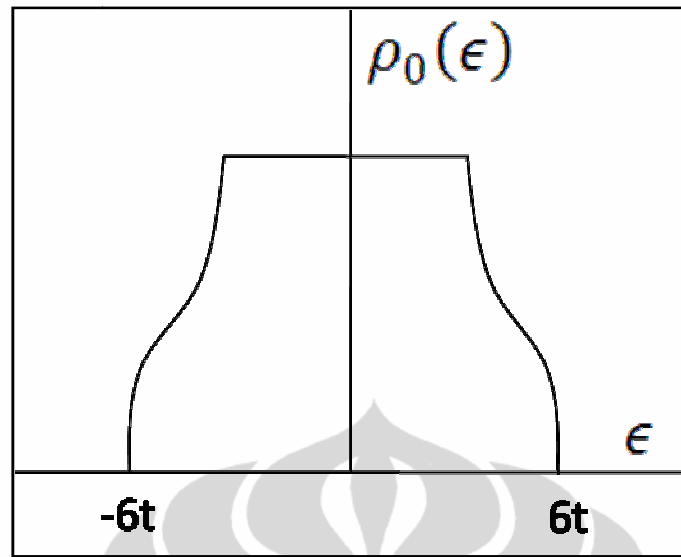
Untuk spektrum energi kinetik dari model TB pada kristal *simple cubic* yang ditunjukkan oleh persamaan (2.11),  $\rho_0(\epsilon)$  dapat dihitung dengan rumus :

$$\rho_0(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \left( \frac{1}{\epsilon + i\eta + \epsilon(\vec{k})} \right) \quad (3.7)$$

$\rho_0(\epsilon)$  dari kisi *simple cubic* ini dapat dilihat ilustrasinya pada gambar 3.3.

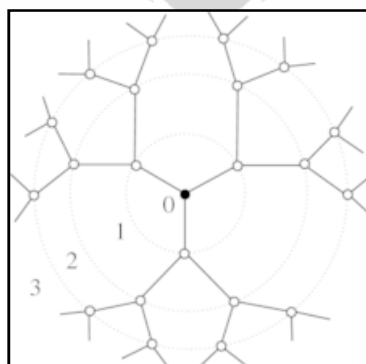


Gambar 3.2. Algoritma DMFT dimulai dengan memberi harga *self-energy*  $\Sigma$  perkiraan kemudian diselesaikan melalui loop self-consistent sampai diperoleh harga *self-energy*  $\Sigma$  konvergen. Catatan : loop dilakukan untuk kedua frekuensi Matsubara ( $z = i\omega_n + \mu$ ) dan frekuensi real ( $z = \omega + i0^+$ ).

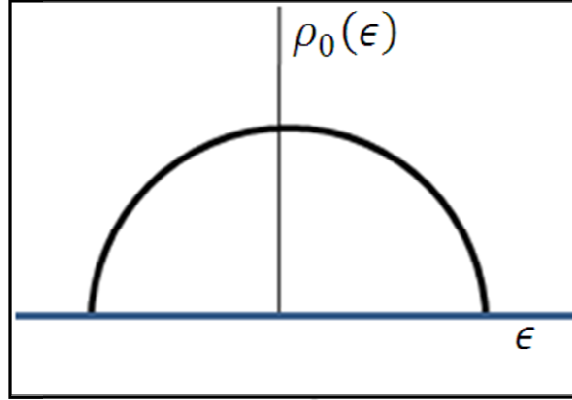


Gambar 3.3. Ilustrasi gambar *bare-dos* untuk *simple cubic*

Hasil perhitungan pada tesis ini hanya akan secara kualitatif menjelaskan hasil eksperimen. Untuk tujuan tersebut detail informasi dari spektrum energi kinetik tidak terlalu dibutuhkan tetapi yang dibutuhkan hanya profil dari  $\rho_0(\epsilon)$ . Oleh karena itu untuk menyingkat waktu komputasi bentuk profil  $\rho_0(\epsilon)$  *simple cubic* diganti menjadi profil  $\rho_0(\epsilon)$  kisi *bethe*, yaitu sebuah kisi fiksional yang setiap *site* / titiknya akan terhubung dengan  $z$  tetangga terdekat (gambar 3.4). Ketika kisi ini mempunyai harga  $z$  tidak berhingga akan terbentuk kurva  $\rho_0(\epsilon)$  yang berbentuk setengah lingkaran seperti diilustrasikan pada gambar 3.5.



Gambar 3.4. Kisi *Bethe* dengan  $z=3$ [24]



Gambar 3.5. Ilustrasi gambar *bare-dos* untuk kisi bethe  $z$ -tak terhingga.

Persamaan (3.5) kemudian dapat diubah dengan mengimplementasikan persamaan (3.6) menjadi sebagai berikut :

$$\bar{G}(z) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} [G(\vec{k}, z)] = \int d\epsilon \rho_0(\epsilon) G(\epsilon, z) \quad (3.7)$$

$$\bar{G}(z) = \int \frac{\rho_0(\epsilon)}{i\omega_n + \mu - \epsilon - \Sigma(z)} d\epsilon \quad (3.8)$$

Setelah  $\bar{G}(z)$  diperoleh kemudian pencarian  $G_{mf}(z)$  yaitu nilai fungsi Green *Mean Field* atau merupakan *bath* efektif dari fungsi green dapat dilakukan, yaitu dengan cara pengekstrakan *self-energy* :

$$G_{mf}(z) = [\bar{G}^{-1}(z) + \Sigma(z)] \quad (3.9)$$

Selanjutnya dari nilai tersebut dapat diperoleh fungsi Green lokal  $G_{loc}(z, x, \theta)$  :

$$G_{loc}(z, x, \theta) = [\bar{G}^{-1}(z) - \Sigma_{loc}(z, x, \theta)] \quad (3.10)$$

Dimana :

$$\Sigma_{loc}(z, x, \theta) = gx - J\vec{S}_i \cdot \vec{S}_i \quad (3.11)$$

$$\Sigma_{loc}(z, x, \theta) = gx - J(S_x S_x + S_y S_y + S_z S_z) \quad (3.12)$$

$$\Sigma_{loc}(z, x, \theta) = gx - J \left( S \sin \theta \cos \phi \frac{\sigma_x}{2} + S \sin \theta \sin \phi \frac{\sigma_y}{2} + S \cos \theta \frac{\sigma_z}{2} \right) \quad (3.13)$$

$$\Sigma_{loc}(z, x, \theta) = gx - \frac{JS}{2} \left( \sin \theta \cos \phi \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \sin \theta \sin \phi \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \cos \theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \quad (3.14)$$

$$\Sigma_{loc}(z, x, \theta) = \begin{bmatrix} gx - \frac{JS}{2} \cos \theta & \frac{JS}{2} \sin \theta e^{-i\phi} \\ \frac{JS}{2} \sin \theta e^{i\phi} & gx + \frac{JS}{2} \cos \theta \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

Nilai  $e^{i\phi}$  dan  $e^{-i\phi}$  pada perhitungannya nanti akan hilang setelah dicari determinannya (simestris azimuthal), maka untuk menyingkat perhitungan komputasi dapat dihilangkan dan  $G_{loc}(z, x, \theta)$  untuk spin up dan down dapat ditulis sebagai berikut :

$$G_{loc}(z, x, \theta) = \begin{bmatrix} \frac{1}{G_{mf}(\uparrow, z)} - gx + \frac{JS}{2} \cos \theta & \frac{JS}{2} \sin \theta \\ \frac{JS}{2} \sin \theta & \frac{1}{G_{mf}(\downarrow, z)} - gx - \frac{JS}{2} \cos \theta \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

Pada perhitungan komputasi yang dilakukan nilai  $g$  akan dihubungkan dengan suatu parameter kopling fonon tidak berdimensi yaitu  $\lambda$ , dimana keduanya dihubungkan oleh persamaan berikut [25] :

$$g = \sqrt{\lambda kT} \quad (3.17)$$

Dengan  $k$  konstanta Boltzmann, dan  $T$  temperatur.

Langkah berikutnya adalah mencari probabilitas  $P(x, \theta)$  dari tiap spin  $S$  di setiap *site*.

Hal ini dapat dilakukan dengan menghitung aksi efektif  $S(x, \theta)$  dan fungsi partisi lokal  $Z$ .

$$P(x, \theta) = \frac{e^{-S(x, \theta)}}{Z} \quad (3.18)$$

$$S(x, \theta) = \frac{kx^2}{2k_B T} + \frac{\mathcal{H}S \cos \theta}{k_B T} - \sum_n \ln \det[G_{loc}(i\omega_n, x, \theta)] e^{-i\omega_n 0^+} \quad (3.19)$$

$$Z = \iint e^{-S(x, \theta)} \sin \theta dx d\theta \quad (3.20)$$

Dimana pada aksi efektif  $S(x, \theta)$  persamaan (3.19) bagian pertama adalah pengaruh fonon dan bagian kedua adalah pengaruh medan magnet eksternal  $\mathcal{H}$ .

Dari perhitungan  $P(x, \theta)$  ini dapat dihitung magnetisasi  $M$  :

$$M = \iint P(x, \theta) \cos \theta \sin \theta dx d\theta \quad (3.21)$$

Setelah  $P(x, \theta)$  didapat nilai fungsi Green *average*  $G_{ave}(z)$  juga dapat diperoleh :

$$G_{ave}(z) = \iint P(x, \theta) G_{loc}(z, x, \theta) \sin \theta dx d\theta \quad (3.22)$$

Dan nilai *self-energy*  $\Sigma(z)$  dapat dihitung kembali dengan menggunakan  $G(z)_{ave}$  dan  $G_{mf}(z)$  :

$$\Sigma(z) = [G_{mf}(z)]^{-1} - [G_{ave}(z)]^{-1} \quad (3.23)$$

Proses iterasi ini dilanjutkan untuk nilai  $z$  frekuensi real ( $z = \omega + i0^+$ ) sampai nilai *self-energy* yang diperoleh konvergen.

Selanjutnya bila perhitungan telah konvergen nilai *density of state* atau DOS dapat diperoleh dengan rumus :

$$DOS(\epsilon) = -\frac{1}{\pi} \text{ImTr}[G_{ave,R}(z)] \quad (3.24)$$

Dengan tanda R menyatakan untuk frekuensi Real.

Dan nilai potensial kimia untuk keadaan doping  $x$  juga dapat diperoleh dengan memanfaatkan rumus dibawah ini :

$$b = (1 - x) = \int f(\epsilon) DOS(\epsilon) d\epsilon \quad (3.8)$$

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon - \mu)/k_b T} + 1} \quad (3.9)$$

Dimana :

$b$  = densitas dari partikel non-doping,

$f(\epsilon)$  = fungsi distribusi Fermi-Dirac,

$\mu$  = potensial kimia

$\epsilon$  = energi

$T$  = Temperatur



Dengan mengetahui nilai DOS,  $\epsilon$ , T, dan  $b$  maka potensial kimia  $\mu$ , dapat dihitung.

Dari nilai DOS dan posisi potensial kimia hasil ini secara tidak langsung dapat dilihat apakah sistem berada pada keadaan isolator/metal dan sifat konduktivitas dari sistem dapat diperkirakan. Tetapi untuk lebih jelasnya perlu dilakukan perhitungan resistivitas.

### 3.4. PERHITUNGAN RESISTIVITAS

Untuk konduktivitas dc  $\sigma(\omega = 0)$  dan  $T \neq 0$  maka menurut *linear response theory* dapat digunakan rumus sebagai berikut untuk menghitung konduktivitas [26] :

$$\sigma(\omega = 0) = \frac{\pi e^2}{3\hbar a} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \frac{f(\nu)\{1-f(\nu)\}}{T} \sum_{\vec{k}} Tr \left[ (v_{\vec{k}}^z) \cdot (A_{\vec{k}}(\nu)) \cdot (v_{\vec{k}}^z) \cdot (A_{\vec{k}}(\nu)) \right] \quad (3.10)$$

Dengan  $e$  = muatan elektron ,  $\hbar$  = konstanta planck dan,  $a$ = lebar kisi.

Bila *trace* dilakukan maka diperoleh :

$$\sigma = \frac{\pi e^2}{3\hbar a} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \frac{f(\nu)\{1-f(\nu)\}}{T} \sum_{\vec{k}} \left\{ (v_{\vec{k}\uparrow}^z A_{\vec{k}\uparrow}(\nu))^2 + (v_{\vec{k}\downarrow}^z A_{\vec{k}\downarrow}(\nu))^2 \right\} \quad (3.11)$$

Dimana fungsi *spectral* untuk spin up dan down ( $A_{\vec{k}\uparrow}(\nu)$  dan  $A_{\vec{k}\downarrow}(\nu)$ ) dapat dihitung dengan *self-energy* yang diperoleh dari DMFT :

$$A_{\vec{k}\uparrow}(\nu) = -\frac{1}{\pi} Im \left( \frac{1}{\nu + i\theta^+ + \epsilon - \Sigma_{\uparrow}(\nu)} \right) \quad (3.12)$$

$$A_{\vec{k}\downarrow}(\nu) = -\frac{1}{\pi} Im \left( \frac{1}{\nu + i\theta^+ + \epsilon - \Sigma_{\downarrow}(\nu)} \right) \quad (3.13)$$

Selanjutnya nilai  $v_{\vec{k}\uparrow/\downarrow}^z$  juga dapat ditentukan dari :

$$v_k^z = \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial k_z} \quad (3.14)$$

Tetapi karena perhitungan dilakukan dalam domain energi  $\varepsilon$ , hasil diferensial diatas susah diselesaikan secara eksak, contoh pada kasus *simple cubic* dimana nilai dari  $E(\vec{k}) = -2t(\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a))$  bila diferensialkan maka diperoleh  $v_k^z = 2ta(\sin(k_z a))$ . Hasil ini susah untuk ditransformasi daridomain k ke domain energi  $\varepsilon$ .

Oleh karena itu diambil suatu pendekatan  $\rightarrow E(\vec{k}) = \frac{\vec{k}^2}{2m}$  dimana  $\vec{k} = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$  dan  $k = k_x = k_y = k_z$ . Maka nilai  $v_k^z$  adalah :

$$v_k^z = \frac{k_z}{m} = \frac{k}{m} = \frac{\sqrt{\frac{2}{3}mE(\vec{k})}}{m} \quad (3.15)$$

Selanjutnya dengan mendiferensial dua kali  $E(\vec{k})$  maka diperoleh  $\frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial^2 k_z} = \frac{1}{m}$ . Kembali pada *simple cubic* dilakukan hal yang sama mendiferensial dua kali  $E(\vec{k})$  maka diperoleh  $\frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial^2 k_z} = 2ta^2 \cos(ka)$ , dengan mengambil  $a = 1$  dan limit  $k \rightarrow 0$  maka  $\frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial^2 k_z} = 2t$ . Digabungkan kedua hasil tersebut maka :

$$\frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial^2 k_z} = 2t = \frac{1}{m} \quad (3.16)$$

Masukkan rumus (3.16) ke (3.15) diperoleh :

$$v_k^z = \frac{\sqrt{\frac{2}{3}mE(\vec{k})}}{m} = 2t \sqrt{\frac{1}{3t}E(\vec{k})} = \sqrt{\frac{4t}{3}E(\vec{k})} = 2 \sqrt{\frac{t\varepsilon}{3}} \quad (3.17)$$

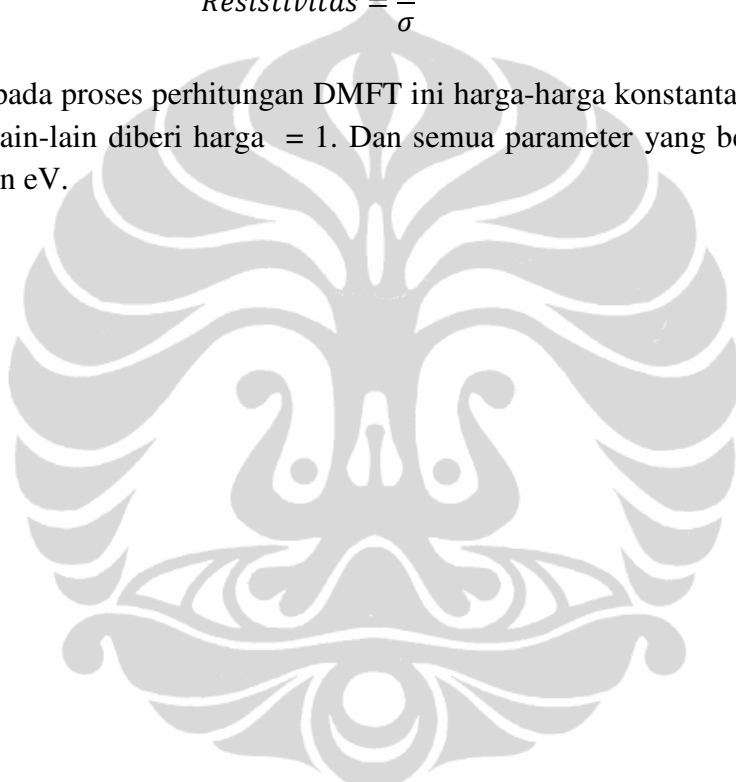
Kembali ke persamaan (3.11) maka rumus tersebut dapat diselesaikan dalam domain energi menjadi :

$$\sigma = \frac{\pi e^2}{3\hbar a} \int_{-\infty}^{\infty} d\nu \frac{f(\nu)\{1-f(\nu)\}}{T} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \rho(\varepsilon) 2 \frac{t\varepsilon}{3} \left( (A_{\vec{k}\uparrow}(\nu))^2 + (A_{\vec{k}\downarrow}(\nu))^2 \right) \right\} \quad (3.18)$$

Resistivitas kemudian dapat dicari

$$\text{Resistivitas} = \frac{1}{\sigma} \quad (3.1)$$

Sebagai catatan pada proses perhitungan DMFT ini harga-harga konstanta seperti Planck, Boltzmann dan lain-lain diberi harga = 1. Dan semua parameter yang bersatuan berada dalam nilai satuan eV.



## BAB IV

### HASIL PERHITUNGAN DAN ANALISIS

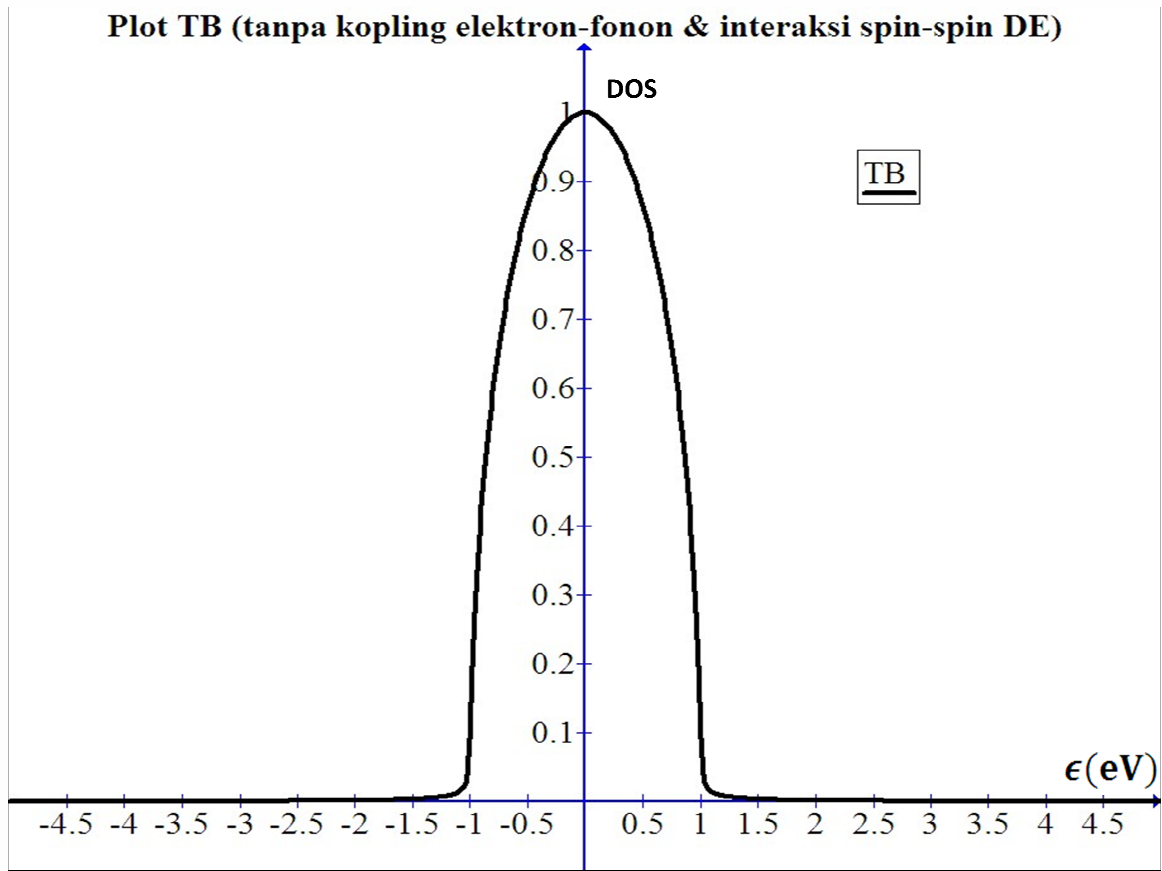
Pada bab ini akan ditunjukkan hasil perhitungan dari DMFT. Perhitungan ini dilakukan untuk beberapa variasi yaitu variasi  $\lambda$  pada T tetap untuk  $J = 0$ , variasi J untuk T tetap  $\lambda = 0$ , variasi T untuk  $\lambda/J$  tertentu, plot Magnetisasi vs T dengan variasi H untuk  $\lambda/J$  tertentu, dan plot Resistivitas vs T dengan variasi H untuk  $\lambda/J$  tertentu. Kesemua variasi-variasi ini akan dilakukan untuk keadaan doping  $x = 0$  atau okupasi setengah penuh (*half-filling*), dan untuk keadaan doping  $x = 0.3$  dimana pada keadaan tersebut transisi PI-FM terjadi di manganites. Kembali diingatkan semua perhitungan dilakukan dalam satuan eV.

#### 4.1. VARIASI KOPLING ELEKTRON-FONON PADA T TETAP

Di subbab ini akan dibahas hasil perhitungan pengaruh variasi kopling elektron-fonon terhadap DOS ( $J = 0$ ) pada T tetap ( $10^{-3}$  eV). Perhitungan yang pertama dilakukan untuk keadaan okupasi setengah penuh  $n = 1$  atau tanpa doping  $x = 0$ , kemudian dilanjutkan untuk keadaan okupasi  $n = 1.4$  atau dengan doping  $x = 0.3$ . Nilai  $n=1.4$  dipilih agar sistem yang dimodelkan relevan dengan kondisi  $\text{La}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$  dengan  $x = 0.3$ , dalam hal ini nilai  $n$  dihubungkan dengan nilai  $x$  melalui hubungan  $n = 2(1 - x)$ .

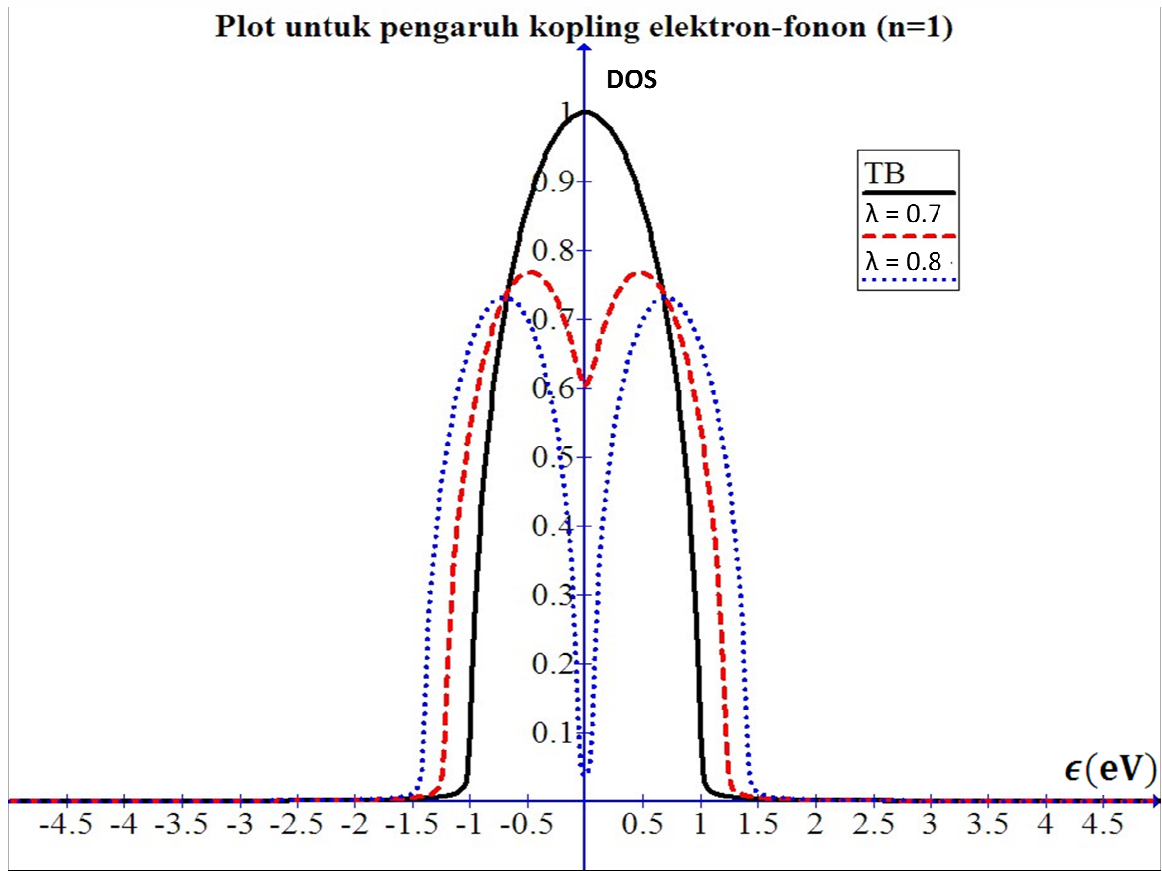
##### 4.1.1. OKUPASI SETENGAH PENUH

Untuk melihat bagaimana fonon mempengaruhi DOS dari sistem maka dalam perhitungan ini dilakukan beberapa variasi  $\lambda = 0 ; 0,7 ; 0.8$  untuk  $J = 0$  pada temperatur  $10^{-3}$  eV.



**Gambar4.1.** DOS vs  $\epsilon$  untuk keadaan tanpa kopling elektron-fonon dan interaksi *double-exchange* pada temperatur =  $10^{-3}$  eV

Keadaan  $\lambda = 0$  dan  $J = 0$  pada gambar 4.1 menunjukkan keadaan normal DOS tanpa pengaruh interaksi-interaksi baik electron-fonon maupun spin-spin *double-exchange*. Terlihat disini hanya pengaruh *tight-binding* yang bekerja, sistem berada dalam keadaan metalik sepenuhnya, hal ini dapat ditentukan dari posisi DOS maksimum tepat berada pada potensial kimia dimana pada keadaan okupasi setengah penuh potensial kimia tepat berada pada  $\epsilon = 0$ .

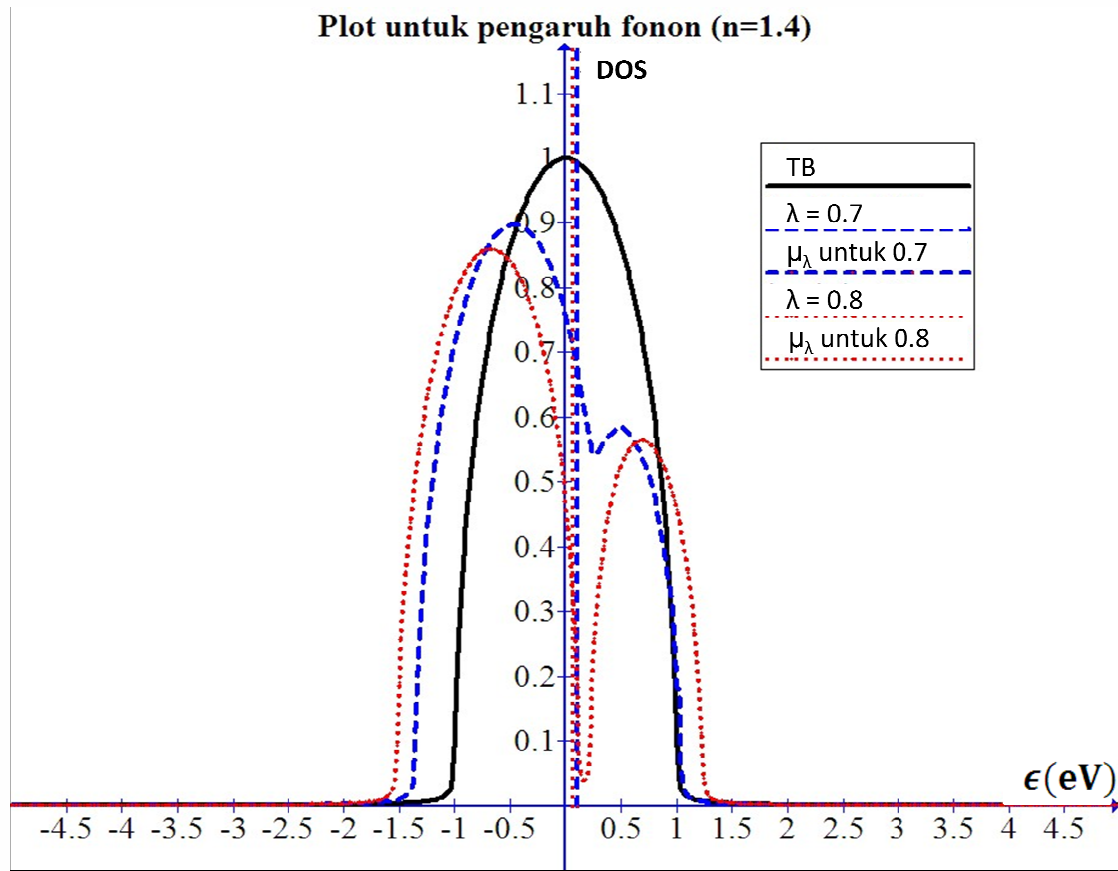


**Gambar4.2.** DOS vs  $\epsilon$  untuk pengaruh kopling elektron-fonon (n=1) pada temperatur =  $10^{-3}$ eV

Selanjutnya pada gambar 4.2. terlihat timbulnya pseudo-gap dengan semakin besarnya  $\lambda$ . Keberadaan kopling antara elektron-fonon ini mengurangi kebebasan elektron-elektron untuk berpindah dari satu *site* ke *site* lain. Kopling ini seperti memberikan dampak mengikat elektron untuk tetap berada di *site* tersebut atau dapat disebut juga terjadi lokalisasi. Semakin kuat kopling ini sebagian elektron mulai terlokalisasi, yang ditandai semakin besarnya pseudo-gap yang timbul. Terlihat pada  $\lambda$  0.8 sudah membuat pseudo-gap sangat dalam membuat sistem bersifat menuju isolator.

#### 4.1.2. OKUPASI $n = 1.4$

Gambar 4.3 menunjukkan pengaruh fonon untuk okupasi  $n = 1.4$ . Pada gambar posisi pseudo-gap bergeser mengikuti potensial kimia berada. Dimana nilai potensial kimia ini diubah sesuai dengan besarnya nilai okupasi. Karena posisi pseudo-gap terbentuk



**Gambar4.3.** DOS vs  $\epsilon$  untuk pengaruh kopling elektron-fonon pada  $n = 1.4$  dan temperatur =  $10^{-3}$  eV.

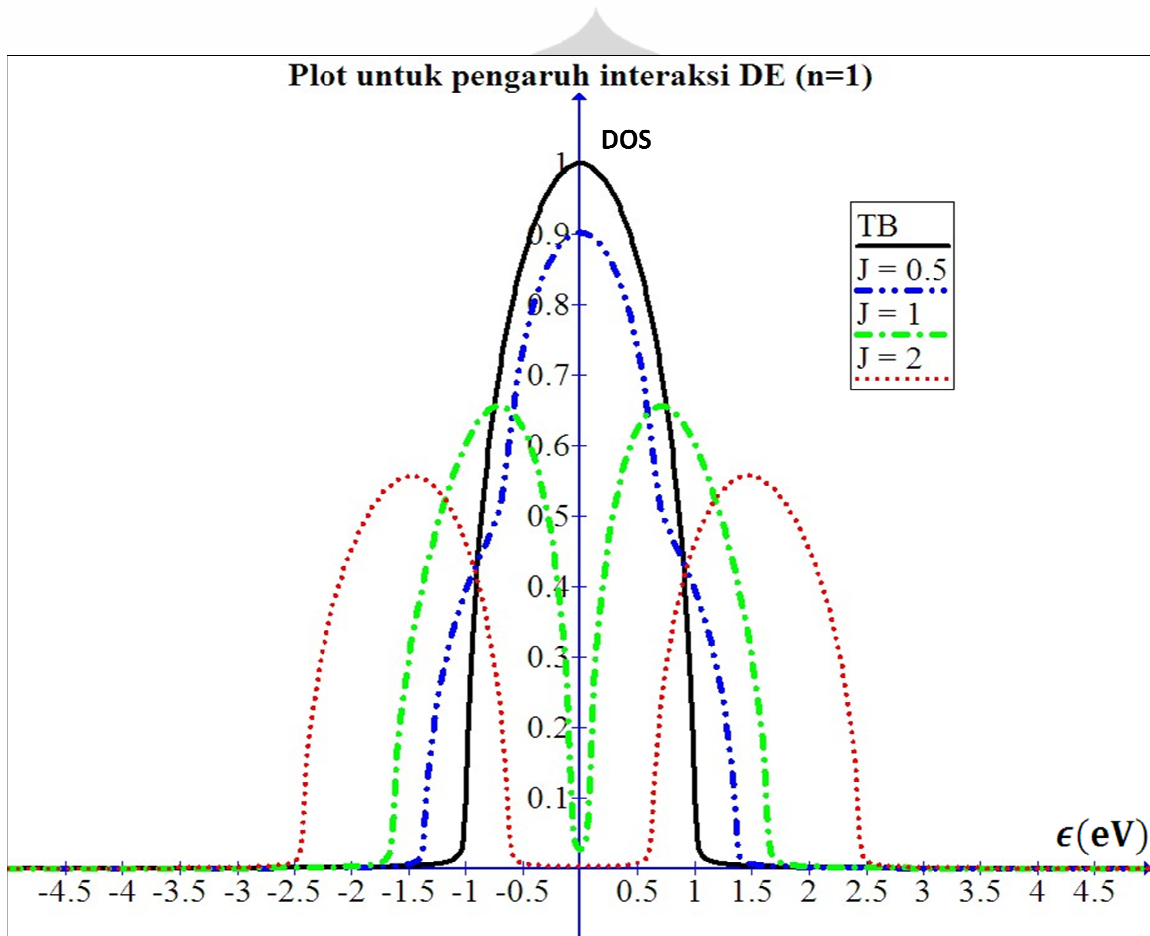
pada sekitar potensial kimia menyebabkan sistem menjadi semakin isolatif, efek keberadaan kopling antara elektron-fonon ini mengurangi kebebasan elektron-elektron untuk berpindah dari satu *site* ke *site* lain sama seperti pada okupasi  $n=1$ .

#### **4.2. VARIASI INTERAKSI *DOUBLE-EXCHANGE* PADA T TETAP**

Sama seperti di subbab 4.1 dilakukan perhitungan untuk keadaan okupasi  $n = 1$  atau setengah penuh, kemudian dilanjutkan untuk keadaan okupasi  $n = 1.4$  dan pada temperatur tetap  $10^{-3}$  eV. Perbedaannya pada subbab ini akan dibahas hasil perhitungan pengaruh interaksi *double-exchange* terhadap DOS tanpa kopling elektron-fonon ( $\lambda = 0$ ).

#### 4.2.1. OKUPASI SETENGAH PENUH

Hasil perhitungan untuk pengaruh interaksi *double-exchange* dapat dilihat pada gambar 4.4 dibawah ini. Gambar ini menunjukkan plot dari pengaruh J dengan  $\lambda = 0$ , yang dilakukan pada temperatur  $10^{-3}$  eV pada keadaan okupasi setengah penuh. Terlihat pada gambar terjadi hal yang mirip seperti pada pengaruh fonon yaitu terjadi pseudo-gap yang bila diperbesar akan membentuk real gap. Hanya saja penyebab gap ini berbeda dengan pengaruh  $\lambda$ .



Gambar4.4. DOS vs  $\epsilon$  untuk pengaruh interaksi DE (n=1) pada temperatur =  $10^{-3}$  eV.

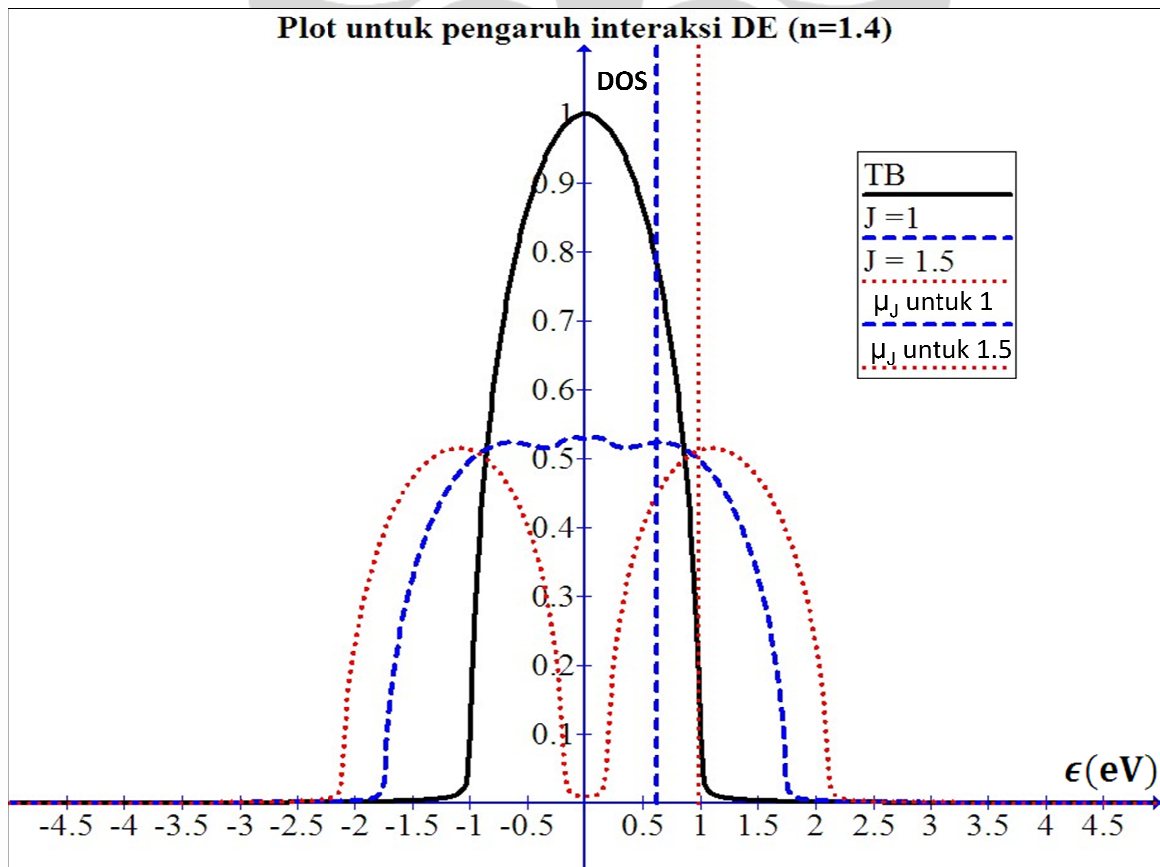
Kopling magnetik antara spin elektron dengan spin ion Mn menyebabkan energi elektron menjadi tergantung pada arah relatif ( $\cos \theta$ ) antara spin elektron dengan spin ion magnetik Mn. Secara garis besar timbul dua keadaan yaitu keadaan-keadaan elektron dengan  $\cos \theta > 0$  dan keadaan-keadaan  $\cos \theta < 0$ . Keadaan-keadaan elektron dengan  $\cos \theta > 0$  memiliki energi lebih rendah daripada keadaan-keadaan dengan  $\cos$



$\theta < 0$ . Hal ini menyebabkan DOS cenderung terpecah menjadi 2 bagian dan menimbulkan pseudo-gap. Pada  $J$  kritis pseudogap ini akan menjadi real gap seperti yg terlihat pada  $J = 2$ .

#### 4.2.2. OKUPASI $n = 1.4$

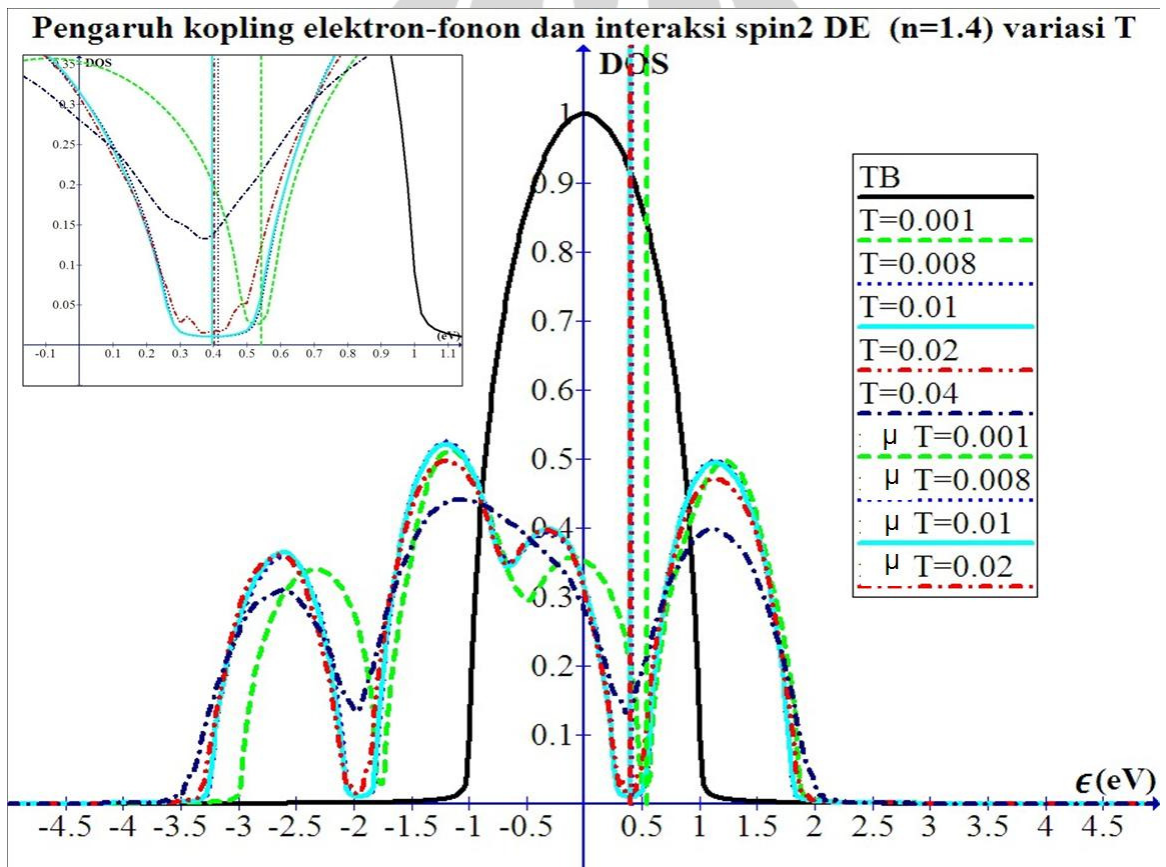
Pengaruh interaksi *double-exchange* untuk okupasi  $n=1.4$  dapat dilihat pada gambar 4.5. Gambar ini menunjukkan terjadi pembentukan pseudo-gap yang berlanjut menjadi real gap yang sama seperti pada gambar-gambar sebelumnya. Yang berbeda disini adalah, posisi pseudo-gap/real gap akibat interaksi *double-exchange* tidak tergantung pada posisi potensial kimia. Terlihat jelas pada gambar posisi potensial kimia tidak berada pada posisi gap. Hal ini menunjukkan pengaruh *double-exchange* saja tidak membuat sistem terjadi perubahan secara jelas sifat konduktansinya.



Gambar4.5. DOS vs  $\epsilon$  untuk pengaruh interaksi DE ( $n=1.4$ ) pada temperatur =  $10^{-3}$  eV

### 4.3. VARIASI PENGARUH KOPLING ELEKTRON-FONON DAN INTERAKSI *DOUBLE-EXCHANGE* TERTENTU PADA BERBAGAI NILAI T DI OKUPASI $n = 1.4$

Pengaruh fonon dan interaksi spin-spin *double-exchange* akan diperiksa pada subbab ini. Plot untuk kedua pengaruh interaksi ini dapat dilihat pada gambar 4.6. Nilai  $\lambda=1,55$  dan  $J = 1.5$  dipilih karena pada nilai ini cukup optimal dalam menunjukkan keberadaan gap oleh kedua interaksi yang saling berpartisipasi dalam mempengaruhi sistem. Pada kedua nilai ini pada T rendah  $10^{-3}$  eV telah terlihat cukup jelas terbentuknya pseudo-gap yang menggambarkan pengaruh pembentukan oleh fonon dan interaksi *double-exchange*.



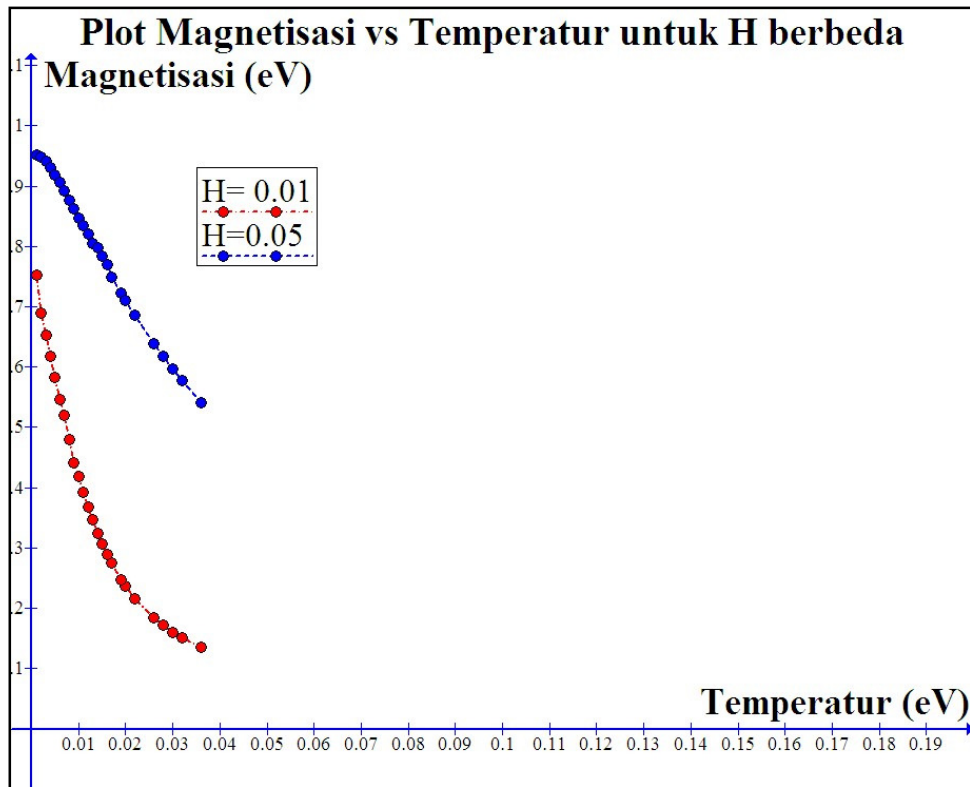
Gambar4.6. DOS vs  $\epsilon$  untuk pengaruh interaksi elektron-fonon & DE keadaan  $n=1.4$ , variasi T.  
inset : zoom plot pada potensial kimia

Pada plot pada gambar 4.6 dilakukan beberapa variasi T dari nilai T cukup kecil sampai T cukup besar. Pengaruh perubahan T terlihat cukup jelas pada inset dengan terjadinya pembentukan pseudo-gap yang semakin dalam dan kemudian kembali mengecil setelah T tertentu. Dari perubahan pseudo-gap yang berada tepat pada nilai potensial kimia dapat

ditarik suatu kesimpulan bahwa terjadi transisi dari metal ke isolator jika  $T$  dinaikkan mulai  $T < T_{mi}$  sampai  $T > T_{mi}$  dengan  $T_{mi}$  sebagai Temperatur kritis transisi metal isolator. Terlihat pada  $T < T_{mi}$  dengan naiknya temperatur pseudo-gap pada potensial kimia semakin dalam, menunjukkan elektron-elektron semakin terhambat atau konduktivitas elektron menurun, hal ini menunjukkan sifat dari metal. Pada  $T > T_{mi}$  terjadi hal sebaliknya, dengan naiknya temperatur pseudo-gap pada potensial kimia semakin kecil atau konduktivitas elektron bertambah dimana hal tersebut menunjukkan sifat dari isolator. Dari hasil kurva ini dapat diperkirakan transisi sifat listrik ini berhubungan erat dengan transisi magnetik  $T_c$ , hal ini karena bila dikembalikan pada sistem *manganites* dimana  $T_c$  berada terletak sekitar  $\sim 250$  K (25) nilai temperatur terjadinya transisi hasil dari plot ini yaitu  $T_{mi} \sim 0.01$  eV bila dikonversi secara cepat ke Kelvin mendekati  $\sim 100$  K berada seorde dengan  $T_c$ .

#### **4.4. PLOT MAGNETISASI vs T DENGAN VARIASI $\mathcal{H}$ , PADA OKUPASI $n = 1.4$**

Dibawah ini hasil plot dari Magnetisasi dari berbagai Temperatur untuk 2 nilai  $\mathcal{H}$  berbeda yaitu  $\mathcal{H} = 0.01$  eV dan  $\mathcal{H} = 0.05$  eV. Hasil yang diperoleh masih belum bisa menunjukkan secara jelas posisi  $T_c$ , tetapi dapat diperkirakan bernilai disekitar  $\sim 0.01$ - $0.02$  eV dan mendekati harga perkiraan  $T_{mi}$  yang diperoleh pada subbab 4.3. Dari plot magnetisasi yang diperoleh dapat ditarik suatu kesimpulan ferromagnetik –paramagnetik terjadi hampir bersamaan dengan transisi metal-isolator.

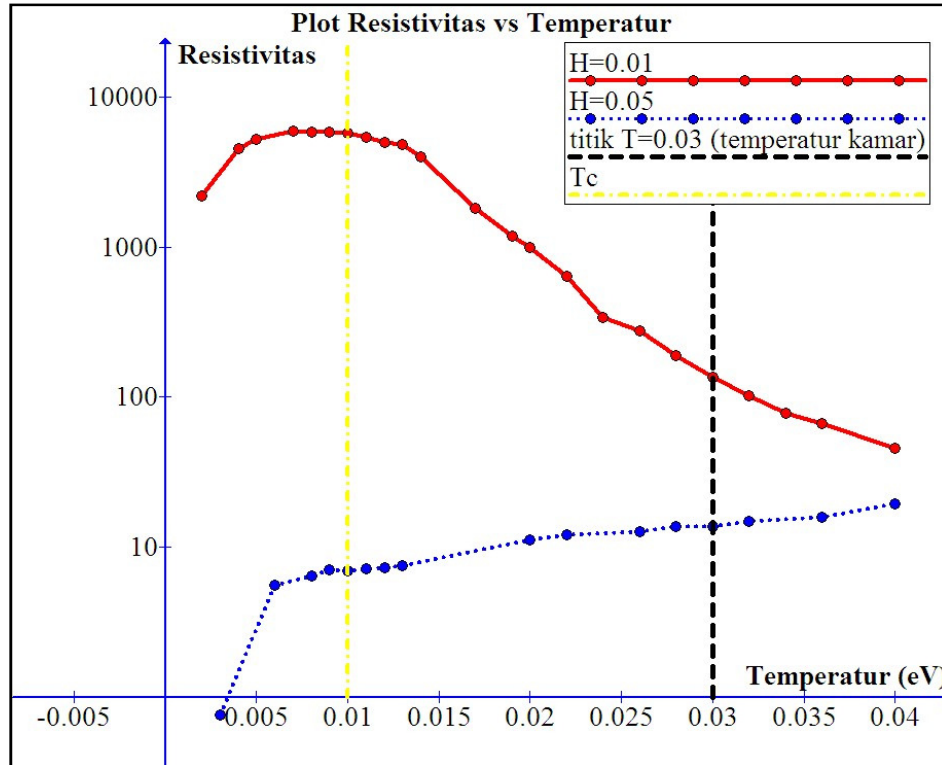


Gambar 4.7. Magnetisasi vs T untuk pengaruh interaksi elektron-fonon & DE keadaan  $n=1.4$ , dengan variasi  $\mathcal{H}$ .

Hasil lain dari kurva juga menunjukkan terjadinya penurunan nilai magnetisasi maksimum untuk  $T$  sangat kecil yang tidak cocok dengan eksperimen. Hasil ini disebabkan oleh akumulasi dari berbagai kurang akuratnya input yang dimasukkan seperti jumlah titik frekuensi Real, jumlah titik frekuensi Matsubara dan jumlah sudut theta yang masih terlalu sedikit dipakai dalam perhitungan.

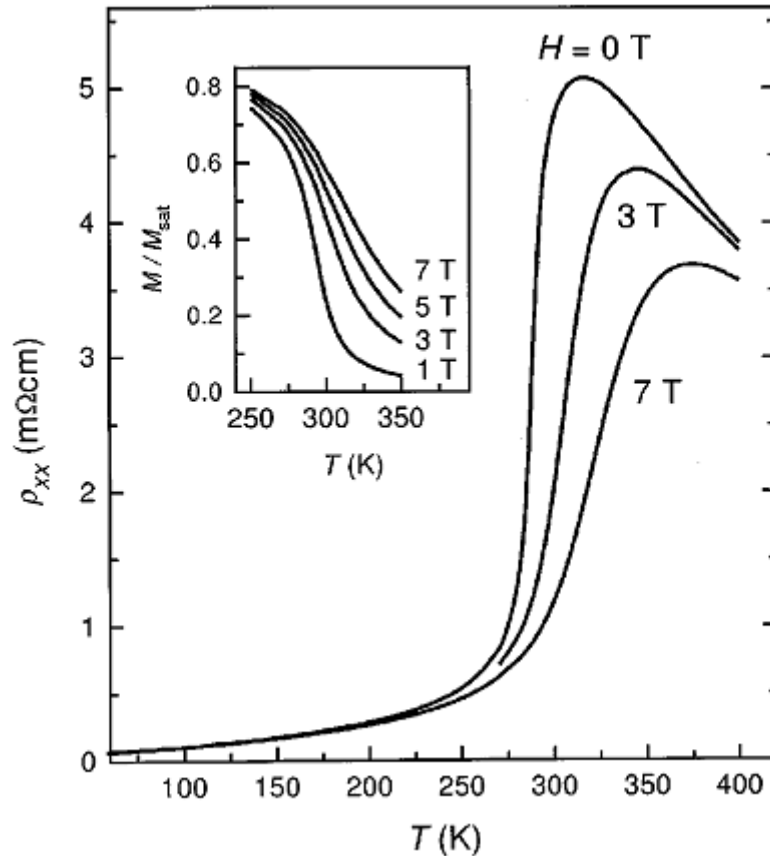
#### 4.5. PLOT RESISTIVITAS vs T DENGAN VARIASI $\mathcal{H}$ , PADA OKUPASI $n = 1.4$

Hasil plot resistivitas vs temperatur untuk dua variasi  $\mathcal{H}$  pada okupasi  $n=1.4$  diperoleh pada gambar 4.8 dibawah ini. Dari hasil ini dapat terlihat dengan jelas terjadinya transisi metalik-isolator. Hasil plot ini mempertegas  $T_{mi}$  terjadi pada sekitar  $\sim 0.01$  eV dan bila digabungkan dengan harga perkiraan  $T_c$  dari subbab 4.4 model 1 orbital-spin in telah cukup berhasil menangkap adanya transisi transisi PI-FM.



Gambar 4.8. Resistivitas vs T untuk pengaruh interaksi elektron-fonon & DE keadaan  $n=1.4$ , variasi  $\mathcal{H}$ .

Selain itu terlihat pada gambar terjadi perubahan resistivitas yang besar ketika dilakukan penambahan  $\mathcal{H}$  atau terlihat perubahan *magnetoresistance* yang besar. Garis putus-putus hitam menandakan ketika temperatur ketika berada pada T kamar. Bila dilihat dari perbandingan resistivitas pada T kamar ini yang diperoleh maka terdapat perubahan sebesar  $\sim 10$  kali atau dapat diperkirakan penguatan *magnetoresistance* hampir sebesar  $\sim 100\%$ . Hasil ini cukup mendekati hasil yang diperoleh untuk besar CMR yang diperoleh dari eksperimen yaitu  $127\%$  [1].



Gambar4.9. Resistivitas vs T hasil eksperimen LCMO pada doping  $x=0.3$ , variasi  $\mathcal{H}$  [20].

Gambar 4.9 diatas merupakan gambar hasil eksperimen LCMO pada doping  $x = 0.3$ [20]. Pada hasil ekperimen diatas bila temperatur dan medan magnet dikonversi ke satuan eV maka akan memberikan nilai yang sebanding dengan  $\sim 0 - 0.04\text{eV}$  untuk skala temperatur 0-400 K dan  $\sim 0 - 0.001\text{ eV}$  sebanding dengan 0 - 7 T medan magnet. Medan magnet terbesar yakni 7 T ( $\sim 0.001\text{ eV}$ ) yang diberikan pada hasil eksperimen di atas jauh lebih kecil dibanding  $T_c$  -nya yaitu sekitar 250k K atau 0.025 eV. Untuk mendapat hasil yang lebih sesuai dengan eksperimen di atas nilai  $\mathcal{H}$  yang jauh lebih kecil dari  $T_c$  harus dipergunakan, tetapi karena terdapat masalah konvergensi pada perhitungan,  $\mathcal{H}$  terkecil yang bisa digunakan hanya bisa sampai  $\mathcal{H} = 0.01\text{eV}$  yaitu sebanding dengan  $T_c$  hasil perhitungan. Bila dibandingkan dengan hasil eksperimen pada gambar 4.9 maka terlihat profil plot masih cukup untuk memberikan bentuk yang mirip untuk  $\mathcal{H} = 0.01\text{ eV}$ . Tetapi untuk  $\mathcal{H} = 0.05\text{ eV}$  hasil terlihat sudah berbeda jauh, hal ini disebabkan  $\mathcal{H}$  yang

diberikan sudah jauh terlalu besar dari  $T_c$  oleh karena itu hasil resistivitas menjadi terlihat garis datar yang meningkat ke atas.



## BAB V

### KESIMPULAN DAN SARAN

#### 5.1. KESIMPULAN

Penelitian secara simulasi untuk mengetahui mekanisme transisi paramagnetik isolator-feromagnetik metal dan *magnetoresistance* pada manganites LCMO telah dilakukan. Dari penelitian ini dapat ditarik beberapa kesimpulan. Yaitu sebagai berikut :

- Pseudo-gap / real gap dapat terbentuk oleh pengaruh kopling elektron-fonon maupun pengaruh interaksi spin-spin *double-exchange*.
- Perubahan kedalaman pseudo-gap sebanding dengan semakin besarnya  $\lambda$ . Keberadaan kopling antara elektron-fonon ini mengurangi kebebasan elektron-elektron untuk berpindah dari satu *site* ke *site* lain. Semakin besarnya kopling ini membuat elektron semakin terlokalisasi.
- Perubahan kedalaman pseudo-gap dipengaruhi juga oleh semakin besarnya interaksi spin-spin *double-exchange*. Kopling magnetik antara spin elektron dengan spin ion Mn menyebabkan energi elektron menjadi tergantung pada arah relatif ( $\cos \theta$ ) antara spin elektron dengan spin ion magnetik Mn. Keadaan-keadaan elektron dengan  $\cos \theta > 0$  memiliki energi lebih rendah daripada keadaan-keadaan dengan  $\cos \theta < 0$ . Hal ini menyebabkan DOS cenderung terpecah menjadi 2 bagian dan menimbulkan pseudo-gap.
- Posisi pseudo-gap untuk variasi kopling elektron-fonon berada disekitar potensial kimia. Sedang posisi pseudo-gap untuk interaksi spin-spin *double-exchange* memberi efek berbeda dengan variasi kopling elektron-fonon, pseudo-gap pada interaksi *double-exchange* tidak berada disekitar potensial kimia.
- Posisi potensial kimia dipengaruhi oleh nilai  $x$  atau dalam hal ini konsentrasi dari  $\text{dpoing } x$ .
- Pada keadaan  $\lambda$  dan  $J$  tertentu dapat terjadi transisi dari metal ke isolator dimana transisi ini berkaitan erat dengan transisi magnetik karena berada pada orde yang sama dan pada nilai yang berdekatan.



- Perubahan  $\mathcal{H}$  dapat memicu perubahan resistivitas yang besar dan dapat menimbulkan CMR yang besar.
- Pemodelan 1 orbital spin ini cukup baik dalam memodelkan transpor elektron pada *manganites* LCMO karena dapat menangkap fenomena PI-FM dan CMR yang terjadi.

## 5.2. SARAN

Selanjutnya untuk penelitian lebih lanjut disarankan beberapa hal yaitu :

- Diharapkan dilakukan beberapa penyederhanaan pada program komputasi agar tercapai konvergensi DOS dengan lebih cepat.
- Nilai DOS untuk  $\mathcal{H}$  jauh mendekati 0 yang tidak tercapai konvergensi pada penelitian ini dapat diperoleh pada penelitian selanjutnya.
- Kurva Magnetisasi yang diperoleh diharapkan dapat menunjukkan posisi  $T_c$  dengan lebih tepat serta tidak terjadi penurunan nilai magnetisasi seperti pada hasil yang diperoleh.
- Error perhitungan diharapkan dapat diperkecil sehingga didapatkan data jauh lebih baik.
- Penggunaan perangkat perhitungan yang lebih baik dari hanya sekedar PC atau laptop (seperti penggunaan *cluster* atau *parallel computing*).

## DAFTAR PUSTAKA

1. S. Jin, T.H. Tiefel, M. McCormack, R.A. Fastnacht, R. Ramesh, and L.H. Chen, *Science* 264, 413 (1994)
2. G. H. Jonker dan J. H. Van Sauten, *Physica*, 16, 337 (1950); J. H. Van Sauten dan G. H. Jonker, *ibid*, 16, 599 (1950)
3. C. Zener, *Phys. Rev.*, 81, 440 (1951); 82, 403 (1951).
4. A. J. Millis, *Phys. Rev. B* 53, 8434 (1995)
5. T. V. Ramakrishnan, *J. Phys.: Condens. Matter* 19 125211 (2007)
6. A. Rusydi, R. Rauer, G. Neuber, M. Bastjan, I. Mahns, S. Muller, P. Saichu, B. Schulz, S. G. Singer, A. I. Lichtenstein, D. Qi, X. Gao, X. Yu, A. T. S. Wee, G. Stryganyuk, K. Dorr, G. A. Sawatzky, S. L. Cooper, dan M. Rubhausen, *Phys. Rev. B* 78, 125110 (2008).
7. M.A. Majidi, H-Su, Y.P. Feng, M. Rubhausen, dan A. Rusydi, arXiv: 1101.3059v1, [cond-mat.mtrl-sci] (2011).
8. Dolgin, B, “*Transport Properties and Noise in CMR Manganites*”, Tesis M.Sc., Department of Physics, Faculty of Natural Sciences Ben-Gurion University of the Negev (2010).
9. S.-W. Cheong et al., *Phys. Rev. B* 49, 7088 (1994)
10. K. Chahara, M. Kasai, and Y. Kozono, *Appl. Phys. Lett.* 63 , 1990 (1993).
11. Tokura et al. , *J. Phys. Soc. Japan* 63, 3931 (1994)
12. Urushibara et al., *Phys. Rev. B* 51, 14 103 (1995)
13. Kuwahara et al., *Science* 270, 961 (1995)
14. Tomioka et al., *Phys. Rev. Lett.* 74, 5108 (1995)
15. Tomioka et al., *J. Phys. Soc. Japan* 64, 3626 (1995)
16. Tomioka et al., *Phys. Rev. B* 53, R1689 (1996)
17. Tomioka et al. , *J. Phys. Soc. Japan* 66, 302 (1997)
18. Moritomo et al. , *Phys. Rev. B* 55, 7549 (1997)
19. Mukhin et al. *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 68, 331 (1998)
20. Chun, S., M. Salamon, Y. Lyanda-Geller, P. Goldbart, and P.Han, 2000, *Phys. Rev. Lett.* 84, 757.

21. Y. -F Yang, “*Dynamical Mean-Field Theory for Manganites*”, Disertasi Dr. rer. nat, Max-Planck-Institut fur Festkorperforschung (2007)
22. Dagotto, et al. Phys. Rep. 344, 1 (2001)
23. Georges et al., Rev. Mod. Phys. 68, 13 (1996).
24. [http://en.wikipedia.org/wiki/File:Bethe\\_lattice.PNG](http://en.wikipedia.org/wiki/File:Bethe_lattice.PNG), (tanggal 3 Mei 2011)
25. Slezak, C., et al. Phys. Rev. B 73, 205122 (2006)
26. Kubo, R., J. Phys. Soc. Jap. 12 , 570–586 (1957)



