

Pemodelan berbasis tight binding untuk menginvestigasi mekanisme pembalikan spin pada lapisan tipis Fe_3O_4 akibat vakansi oksigen = Tight binding based modeling to investigate spin flipping mechanism in Fe_3O_4 thin film due to oxygen vacancies

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20402515&lokasi=lokal>

Abstrak

[Fe_3O_4 is a half-metallic ferrimagnet material with $T_C = \sim 860$ K. In bulk form the saturated magnetization is about 0.6 Tesla. Recent studies of Fe_3O_4 thin films show that the saturated magnetization of such thin films turns to be much higher than 0.6 Tesla. The origin of the giant magnetization is still under debate. Some experimental data show that the giant enhancement is due to spin-flipping of Fe^{3+} in tetrahedral sites assisted by oxygen vacancies at grain boundary. To understand the spin-flipping mechanism, and then, the enhancement of the saturated magnetization of Fe_3O_4 , we construct a tight-binding based model Hamiltonian and calculate the electronic structure of Fe_3O_4 within the dynamical mean-field theory for both ferrimagnetic (down-up-up) and ferromagnetic (up-up-up) spin orderings in the system without and with oxygen vacancies. Our results show that for the system without oxygen vacancies, the ferrimagnetic configuration is energetically favorable. Remarkably, by including the effect of oxygen vacancies into our calculations, especially for the on-site Coulomb repulsion, U , around 4 eV, the ground-state configuration switches into ferromagnetic. Our calculation results support that this spin-flipping phenomenon is due to the suppression of superexchange interactions between Fe^{3+} in octahedral sites and Fe^{3+} in tetrahedral sites, which are replaced by RKKY interactions that tend to couple the ions ferromagnetically. Fe_3O_4 adalah material ferrimagnet half-metallic dengan $T_C = \sim 860$ K. Dalam sampel bulk, material ini memiliki magnetisasi saturasi sebesar 0,6 Tesla. Penelitian terbaru terhadap lapisan tipis Fe_3O_4 menunjukkan bahwa magnetisasi saturasi dari lapisan tipis tersebut jauh lebih besar daripada 0,6 Tesla. Penyebab dari magnetisasi yang cukup besar tersebut masih dalam perdebatan. Beberapa data eksperimen menunjukkan bahwa magnetisasi yang besar tersebut adalah akibat dari pembalikan spin Fe^{3+} pada site tetrahedral yang dibantu oleh vakansi oksigen pada grain boundary. Untuk memahami mekanisme pembalikan spin dan peningkatan magnetisasi saturasi dari Fe_3O_4 , kami mengonstruksi Hamiltonian model berbasis tight-binding dan menghitung struktur elektronik Fe_3O_4 dalam kerangka dynamical mean-field theory untuk konfigurasi spin ferrimagnetik (down-up-up) dan ferromagnetik (up-up-up) pada sistem tanpa dan dengan vakansi oksigen. Hasil perhitungan kami menunjukkan bahwa untuk sistem tanpa vakansi oksigen, konfigurasi ferrimagnetik lebih stabil secara energetik. Dengan memasukkan efek vakansi oksigen ke dalam perhitungan, khususnya untuk nilai parameter on-site Coulomb repulsion, U , sekitar 4 eV, konfigurasi keadaan dasar berubah menjadi ferromagnetik. Hasil perhitungan kami mendukung hipotesis bahwa fenomena pembalikan spin merupakan akibat dari pelemahan interaksi superexchange antara Fe^{3+} pada site oktahedral dan Fe^{3+} pada site tetrahedral yang tergantikan oleh interaksi RKKY yang memiliki kecenderungan mengkopel ion tersebut secara ferromagnetik.]