

Theoretical study on the magnetic moment formation and the ferromagnetic ordering in TA Doped TiO₂ = Studi teoretik pembentukan momen magnet dan keteraturan ferromagnetik pada TA : TiO₂

Annamaria Bupu, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20429868&lokasi=lokal>

Abstrak

Studi ini mempelajari pembentukan momen magnet dan keteraturan ferromagnetik pada sistem Ta:TiO₂. Berdasarkan hasil eksperimen yang dilakukan oleh Rusydi et al., kami membuat hipotesis bahwa adanya vakansi Ti pada satu unit sel sistem akan menyebabkan empat elektron dari atom oksigen yang berada di sekitarnya menjadi tidak berpasangan. Elektron yang tidak berpasangan tersebut akan membentuk momen magnet yang tidak bernilai nol. Selanjutnya, momen magnet yang telah terbentuk akan berinteraksi dengan momen magnet lain dengan dimediasikan oleh elektron. Untuk membuktikan hipotesis tersebut, kami melakukan perhitungan $\langle S^2 \rangle$ dari elektron-elektron yang tidak berpasangan dengan terlebih dahulu mengkonstruksi Hamiltonian yang menjelaskan keempat elektron tersebut dan melakukan perhitungan konstanta kopling RKKY sebagai fungsi jarak dua momen magnet pada berbagai temperatur untuk mempelajari interaksi magnetik yang terjadi.

Hasil perhitungan menunjukkan bahwa pada keadaan dasar, keempat elektron cenderung memiliki spin yang searah dan kesearahan dari spin elektron-elektron tersebut tidak dipengaruhi oleh temperatur. Selain itu, perhitungan konstanta kopling RKKY menunjukkan bahwa kopling ferromagnetik terjadi hingga jarak 5 unit sel dan sedikit bertambah seiring dengan pertambahan temperatur. Hasil ini menunjukkan bahwa vakansi Ti pada Ta:TiO₂ akan membentuk momen magnet dan ferromagnetik yang terjadi disebabkan oleh mekanisme RKKY.

Based on a previous experimental study that reported a RTFM induced by Ti vacancies in Ta-doped TiO₂, here we present a theoretical study on the formation of magnetic moments and the ferromagnetic ordering in that system. We hypothesize that Ti-vacancy in one unit cell of the system has caused four electrons from the surrounding oxygen atoms to become unpaired with a non-zero net magnetic moment. Further, the magnetic moments interact with one another mediated by conduction electrons leading to a ferromagnetic order. To examine our hypothesis, first we calculate the $\langle S^2 \rangle$ by constructing a Hamiltonian for the four interacting electrons. We restrict our Hilbert space by expanding the eigenstates (all possible configurations of the four electrons among the four p orbitals of the oxygen atoms surrounding the Ti vacancy).

Our results confirm that the ground state of the system prefers to be in almost perfect alignment, and this alignment is robust up to far above room temperature. Next, we calculate the RKKY coupling constant as a function of distance between two local magnetic moments at various temperatures. Our calculations show that the ferromagnetic coupling extends up to 5 unit cells and enhances slightly as temperature is increased. These results support our hypothesis that the Ti vacancies in anatase TiO₂ form magnetic moments and the ferromagnetism of this system is driven by RKKY mechanism.