

# Dynamical mean field theoretical approach to explore the magnetic field dependence of magnetite-graphene oxide nanoparticle systems = Pendekatan dynamical mean-field theory untuk meneliti ketergantungan medan magnet dari sistem nanopartikel $\text{Fe}_3\text{O}_4$ -graphene oxide

Yusuf Wicaksono, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20429994&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

Kami menunjukkan penelitian secara teoretik pada kenaikan nilai magnetisasi dari sistem nanopartikel  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  dengan adanya penambahan reduced Graphene Oxide (rGO). Data eksperimen telah menunjukkan bahwa magnetisasi sistem nanopartikel  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  -rGO meningkat dengan peningkatan jumlah rGO sampai sekitar 5 wt%, tetapi menurun kembali dengan bertambah lebih banyaknya jumlah rGO. Kami mengajukan bahwa kenaikan terjadi dipengaruhi oleh adanya pembalikan spin pada  $\text{Fe}^{3+}$  dalam bagian tertrahedral dibantu oleh kekosongan oksigen di perbatasan partikel  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ . Kekosongan oksigen diinduksi oleh adanya lapisan rGO yang menarik atom oksigen dari permukaan partikel  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  disekitarnya. Untuk memahami peningkatan magnetisasi, kami mengkonstruksi model Hamiltonian berdasarkan tight-binding untuk sistem nanopartikel  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  dengan konsentrasi kekosongan oksigen dikontrol melalui konten rGO. Kami menghitung magnetisasi sebagai fungsi dari medan magnet eksternal untuk berbagai variasi wt% rGO. Kami menggunakan metode dynamical mean-field theory dan melakukan perhitungan pada temperatur ruangan. Hasil kami untuk ketergantungan rGO wt% dari magnetisasi saturasi menunjukkan hasil yang sangat sesuai dengan data eksperimen dari sistem nanopartikel  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  -rGO yang ada. Hasil ini mungkin dapat mengkonfirmasi bahwa model kami telah membawa ide paling penting yang dibutuhkan untuk menjelaskan fenomena kenaikan magnetisasi diatas.

.....We present a theoretical study on the enhancement of magnetization of  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  nanoparticle system upon addition of reduced Graphene Oxide (rGO). Experimental data have shown that the magnetization of  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  -rGO nanoparticle system increases with increasing rGO content up to about 5 wt%, but decreases back as the rGO content increases further. We propose that the enhancement is due to spin-flipping of  $\text{Fe}^{3+}$  in the tetrahedral sites assisted by oxygen vacancies at the  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  particle boundaries. These oxygen vacancies are induced by the presence of rGO flakes that adsorb oxygen atoms from  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  particles around them. To understand the enhancement of the magnetization we construct a tight-binding based model Hamiltonian for the  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  nanoparticle system with the concentration of oxygen vacancies being controlled by the rGO content. We calculate the magnetization as a function of the applied magnetic field for various values of rGO wt%. We use the method of dynamical mean-field theory and perform the calculations for a room temperature. Our result for rGO wt% dependence of the saturated magnetization shows a very good agreement with the existing experimental data of the  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  -rGO nanoparticle system. This result may confirm that our model already carries the most essential idea needed to explain the above phenomenon of magnetization enhancement.