

# Perhitungan suhu curie sistem magnetis TiO<sub>2</sub>:Ta berbasis density functional theory (DFT) dan dynamical mean-field theory (DMFT) = Calculation of curie temperature of TiO<sub>2</sub>:Ta ferromagnetic system based on density functional theory (DFT) and dynamical mean-field theory (DMFT)

Jaka Septian Kustanto, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20476178&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

### <b>ABSTRAK</b><br>

Hasil eksperimen pada feromagnetis TiO<sub>2</sub> yang didoping dengan beberapa elemen tanah jarang menjadi topik yang diminati sebagai bahan semikonduktor feromagnetis di atas suhu kamar. TiO<sub>2</sub> mengalami perubahan sifat material dari nonmagnetis menjadi magnetis akibat adanya formasi vakansi Ti yang diinduksikan penambahan atom Ta. Mekanisme terjadinya sifat feromagnetis diduga akibat interaksi Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida RKKY. Dalam penelitian ini, kami melakukan studi teoritis untuk memprediksi suhu Curie feromagnetis dari sistem berdasarkan kesimpulan-kesimpulan dari studi-studi sebelum ini. Kami menggunakan algoritma metode Dynamical Mean Field Theory DMFT yang mengambil hasil perhitungan Density Functional Theory DFT untuk memberikan nilai-nilai parameter fisis yang sesuai dengan keadaan material sebenarnya. Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa TiO<sub>2</sub>:Ta memiliki bentuk semikonduktor tipe-n dan besar TC dari TiO<sub>2</sub>:Ta berkisar antara 480 - 596 K.

<hr />

### <b>ABSTRACT</b><br>

Recent experimental reports on ferromagnetism in TiO<sub>2</sub> doped with certain rare earth elements have renewed interest in the search of optimal room temperature ferromagnetic semiconductors. TiO<sub>2</sub> undergoes a change in its properties from nonmagnetic to magnetic which is attributed to formation of Ti vacancies induced by the addition of Ta atoms. The mechanism leading to ferromagnetic is believed to be governed by Ruderman Kittel Kasuya Yosida RKKY. Here we conduct a theoretical study to calculate and predict the ferromagnetic Curie temperature of the system based on conclusions of previous studies. We use Dynamical Mean Field Theory DMFT algorithm which employs result of Density Functional Theory DFT calculation to provide the proper physical parameters. Our results show that TiO<sub>2</sub> Ta has a n type semiconductor and has TC value ranges from 480 to 596 K.