

Teori konduktivitas optik tergantung temperatur La_{0,7}Ca_{0,3}MnO₃ yang menampakkan gejala transisi metal insulator = Theory of temperature-dependent optical conductivity of La_{0.7}Ca_{0.3}MnO₃ showing metal to insulator transition

Listiana Satiawati, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20500969&lokasi=lokal>

Abstrak

Termotivasi untuk memperluas studi teoritis yang pernah dilakukan sebelumnya, kami melakukan perhitungan konduktivitas optik tergantung temperatur pada La_{0,7}Ca_{0,3}MnO₃ dalam rentang energi foton yang luas hingga 22 eV, untuk menangkap transisi logam ke insulator, dengan tetap mempertahankan profil ketergantungan terhadap temperatur yang sesuai dengan data eksperimen pada energi foton yang lebih tinggi. Sistem dimodelkan dengan koordinasi Mn-O sederhana melalui metode tight binding dengan beberapa integral hopping dianggap sebagai fungsi magnetisasi. Menggabungkan efek Jahn-Teller statis, Coulomb-Hubbard dan interaksi pertukaran magnetik, kami dapat mereproduksi tren kualitatif dari konduktivitas optik yang tergantung pada suhu, terutama untuk rezim energi rendah dan tinggi, seperti yang diamati dalam data eksperimen. Hasil kami menggarisbawahi pentingnya efek korelasi yang saling mempengaruhi pada derajat kebebasan kisi, muatan dan magnet dalam menentukan profil keseluruhan respon optik terhadap temperatur dari manganite, hubungannya dengan respon fisika optik energi tinggi dan sifat transpor listrik DC.

.....

Motivated to extend our previous theoretical study, we perform temperature-dependent optical conductivity calculation on La_{0,7}Ca_{0,3}MnO₃ in a wide photon energy range up to 22 eV, to capture the metal to insulator transition, while still preserving in most way the correct temperature-dependent profile at higher photon energies. The system is modeled with a simple Mn-O coordination via the tight binding method with some hopping integrals being considered as functions of magnetization. Incorporating static Jahn-Teller effect, Coulomb-Hubbard and magnetic exchange interactions, we are able to reproduce the qualitative trend of the temperature-dependent optical conductivity, especially for the low-and high-energy regimes, as observed in the experimental data. Our results underline the importance of correlation effects due to interplay of lattice, charge, and magnetic degrees of freedom in determining the overall profile of temperature-dependent optical response of manganites, connecting the physics of high-energy optical response and the transport properties at the dc limit.