

Investigation of muon's quantum electronic state in the La₂CuO₄: a muSR and DFT study = Investigasi struktur kuantum elektronik dari muon pada La₂CuO₄: studi muSR dan DFT

Muhammad Redo Ramadhan, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20515041&lokasi=lokal>

Abstrak

Metode relaksasi spin muon (muon spin relaxation - muSR adalah peralatan sangat baik untuk menginvestigasi struktur elektronik dari material superkonduktor temperatur tinggi berbasis tembaga. Dengan mendapatkan posisi muon yang ada pada bahan La₂CuO₄ (LCO) kita dapat mencapai pemahaman yang lebih dalam mengenai struktur elektronik dari bahan tersebut pada fase magnetik tersusun. Namun, metode universal yang dapat digunakan untuk mencari posisi muon yang akurat masih belum ditemukan. Karena hal tersebut, hasil muSR pada bahan LCO masih belum tuntas untuk dipelajari. Dengan menggunakan teori fungsi kerapatan (density functional theory - DFT) dengan kerangka supercell menyertakan satu muon sebagai impuritas yang sangat kecil. Potensial Coulomb (U) juga disertakan untuk mencapai struktur elektronik yang tepat pada bahan LCO. Dengan mempertimbangkan efek kuantum lokal yang disebabkan oleh muon beserta keadaan spin dari atom Cu, kami berhasil untuk menghasilkan posisi muon yang akurat dan dapat dibandingkan dengan hasil eksperimen. Dengan menyesuaikan hasil dari DFT dan muSR, didapatkan nilai optimal dari U yaitu 4.94(5) eV, hingga kita bisa mendapatkan informasi yang akurat dari struktur elektronik bahan LCO dan menghasilkan metode baru untuk menggunakan alat muSR pada sistem yang elektron-nya terkorelasi secara kuat.

.....The muon spin relaxation (muSR) method is a powerful tool to investigate the electronic state of Cu-based high-TC superconducting oxides. To reveal muon positions inside La₂CuO₄ (LCO) gives us a useful information to achieve deeper understandings of the electronic states on its magnetically ordered state. However, any unified method to investigate muon positions have not yet been firmly established. For this reason, the muSR results achieved on LCO in the early stage of high-TC history have not yet been fully explained. We are approaching this issue by using the density functional theory (DFT) calculation method, with a supercell framework and including one muon as a dilute-charged impurity. The on-sites Coulomb potential, U, is included to achieve correct electronic states of the LCO. By considering the quantum local effects caused by the implanted muon and the Cu-spin states in the LCO, we finally succeeded to reveal the muon positions that corresponds well with the muSR experimental results. Adjusting the DFT and muSR results, we also optimized to be 4.94(5) eV precisely, providing an accurate information of the electronic states in LCO and proposing a novel way to utilize SR experiment on many strongly correlated systems