

# Theoretical Study of Complex Susceptibility of Heavy Metal Palladium and Platinum = Studi Teoretis Suseptibilitas Kompleks Logam Berat Paladium dan Platina

Sitorus, Rico Martin, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920556026&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

Fenomena transfer spin pada sistem lapisan magnetik dapat dipahami sebagai interaksi antara normal metal dengan lapisan feromagnetik terdekatnya yang dipengaruhi oleh suseptibilitas magnetik normal metal. Sebagian besar kajian eksperimen terhadap fenomena transfer spin menggunakan logam berat seperti Palladium dan Platina yang memiliki interaksi Coulomb yang cukup besar, sementara itu teori yang ada saat ini mengasumsikan memakai logam ringan, yang mengabaikan interaksi Coulomb tersebut. Pada penelitian ini, kami bertujuan untuk mempelajari secara teoretis pengaruh dari interaksi Coulomb terhadap suseptibilitas magnetik kompleks. Kami memakai model satu pita energi dengan menggunakan perhitungan Density Functional Theory (DFT), model Hubbard dan model Tight-binding. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa untuk logam berat, sifat material didominasi oleh orbital-d, dan suseptibilitas magnetik kompleks mengalami penguatan akibat adanya interaksi Coulomb. Pada logam transisi seperti Pd dan Pt, kulit terluar memiliki orbital-orbital d dan orbital s yang dapat berinteraksi. Kami melakukan kalkulasi pendekatan dua pita energi dengan menggunakan model Anderson, Density Functional Theory, interpolasi Wannier, dan intepolasi pita energi. Dari hasil DFT kami mengamati adanya hibridisasi orbital-s dengan orbital-d. Hasil perhitungan teoretis menunjukkan bahwa untuk elektron pita konduksi dari orbital-s, besaran Stoner proporsional terhadap kuadrat dari parameter hibridisasi serta berkebalikan dengan kuadrat dari selisih energi elektron orbital-s terhadap energi dari elektron orbital-d. Hasil perhitungan juga menunjukkan bahwa untuk sistem fermion berat, nilai suseptibilitas magnetik ditentukan oleh nilai massa efektif elektron. Hasil perhitungan kami menunjukkan bahwa model dua pita energi mampu memodelkan suseptibilitas magnetik dengan akurat.

.....Spin transfer torque in a magnetic multilayer system can be viewed as interaction between a normal metal and adjacent ferromagnetic layer. The magnetic susceptibility of normal metal plays essential role in characterizes the interaction. Most experimental studies on this subject utilize heavy metals, such as Palladium (Pd) and Platinum (Pt), that possess large Coulomb interaction, while a recent theory assume a light metal as normal metal, which neglect the Coulomb interaction. In this research, we aim to theoretically investigate the effect of Coulomb interaction to the complex magnetic susceptibility of Pd and Pt. We calculate a single-band susceptibility for Pd and Pt by applying Density Functional Theory (DFT), tight-binding model, and Hubbard model. For single-band susceptibility, our final results show that the d-orbitals dominate the band structure with large repulsive interaction that enhances the magnetic susceptibility. To extend our study, we calculate the more complex approaches. Transition metals Pd and Pt outer shell d-orbitals and s-orbital can interact. We calculate the double-band model using the Aderson model, Density Functional Theory, Wannier interpolation, and band fitting. From the DFT calculation, we observe s-d hybridization for Pd and Pt. Our theoretical results show that for conduction electron, the Stoner term is proportional to the square of the hybridization parameter and the inverse of the square of the energy difference between the s and d-electron. We also obtain that for the heavy fermionic system, the magnetic

susceptibility value strongly determined by the effective mass of the electron. Our results show that dual-band model is sufficient to model the magnetic susceptibility accurately.