

INTISARI

KAJIAN KOMPUTASIONAL *K-SPACE SPIN TEXTURES* DAN *SURFACE EFFECT* PADA MATERIAL PEROVSKITE HALIDE SF₃PBI₃ BERBASIS *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

Oleh

KHARISMA ANDRI MULYANA

16/403569/PPA/05086

Telah dilakukan kajian komputasional berbasis *density functional theory* (DFT) pada material *halide organic-inorganic perovskite* (HOIP) SF₃PbI₃. Fokus penelitian ini adalah pada perhitungan struktur elektronik dan karakteristik *k-space spin textures* di ruang Brillouin pertama. Penelitian ini menunjukkan adanya *spin splitting* yang dapat dimodulasi dengan memberikan pengaruh *strain*. Selain itu, karakteristik *spin textures* pada *k-space* dipengaruhi oleh orientasi kation pada material SF₃PbI₃. Terakhir, penelitian ini juga menunjukkan bahwa terdapat *surface state* pada perhitungan *surface* yang merubah sifat semikonduktor menjadi *metallic* konduktor dengan adanya *persistent spin helix* (PSH) state di atas *fermi level*. Hasil ini mengndikasikan bahwa material SF₃PbI₃ memiliki potensi yang tinggi dalam pembuatan piranti spintronik.

Keywords: Perovskite, persistent spin helix, DFT, *strain*, *surface*.

ABSTRACT

COMPUTATIONAL STUDY K-SPACE SPIN TEXTURES AND SURFACE EFFECT ON HALIDE PEROVSKITE SF₃PBI₃ BASED ON DENSITY FUNCTIONAL THEORY

By

KHARISMA ANDRI MULYANA

16/403569/PPA/05086

A computational study based on density functional theory (DFT) on halide perovskite SF₃PbI₃ has been carried out. This study focused on the electronics structure and characteristic of k-space spin textures in the first Brillouin zone. The results shows that the spin splitting can be modulated by giving strain effect. Also the characteristic of k-space spin textures is dependent on the cation orientation of the crystal SF₃PbI₃. Lastly, this study also shows the occurrence of surface states on surface effect calculation that changed the properties of this material from semiconductor into metallic conductor with PSH state appears above the fermi level. The result of this study clarifies that this material has a big potential for producing spintronics devices.

Keywords: Perovskite, persistent spin helix, DFT, *strain*, *surface*.