

INTISARI

KONTROL SIFAT FERROELEKTRIK MELALUI STRAIN TERHADAP *SPIN-ORBIT SPLITTING* PADA MATERIAL $ATiO_3$ (A = Pb DAN Ba): KAJIAN KOMPUTASIONAL BERBASIS *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

INTAN MASRUROH S
16/403567/PPA/05084

Pada penelitian ini telah dilakukan perhitungan struktur geometri dan elektronik untuk material *perovskite* $PbTiO_3$ dan $BaTiO_3$ dengan kajian *Density Functional Theory* (DFT). Penelitian ini ditinjau pada sistem dengan suhu ruang untuk sistem bulk dan fase tetragonal. Perhitungan struktur elektronik menunjukkan adanya *spin splitting* pada struktur tetragonal yang disebabkan rusaknya invasi simetri. *Spin splitting* yang dihasilkan merupakan efek yang disebabkan oleh adanya sifat ferroelektrik material yang mampu meningkatkan kemampuan pembacaan data yang lebih cepat dan efisien. *Spin splitting* yang dihasilkan merupakan tipe Rashba untuk material $PbTiO_3$ terletak pada titik X dan $BaTiO_3$ pada titik Γ , dengan parameter yang didapatkan dengan perhitungan fitting energi menggunakan point group simetri C_{4v} . Dengan menggunakan kisi tetragonal optimasi 3,972Å; 4,233Å dan 4,076Å; 4,094Å Pb dan Ba secara berturut diketahui adanya perubahan energi struktur pita pada material yang diberi efek *strain* (-8%, -6%, -4%, -2%, +2%, +4%, +6%, +8%). Pada sistem $PbTiO_3$, struktur pita paling besar ketika diberi efek *strain* minimum (-8%) sebesar 1,73 eV dan trend grafik struktur pita cenderung berkurang berbanding terbalik dengan efek *strain*. Pada sistem $BaTiO_3$, struktur pita memiliki trend meningkat seiring penambahan jumlah *strain*. Struktur pita terbesar pada *strain* (+6%) sebesar 1,76 eV, karena nilai bandgap pada *strain* -8% sistem $BaTiO_3$ mengalami anomali terhadap struktur pita lainnya dengan *strain* (-6% ... 8%).

Katakunci: *DFT, perovskite, $PbTiO_3$, $BaTiO_3$, spin splitting*

ABSTRACT

***A STUDY OF STRAIN EFFECT ON MATERIAL SPIN-ORBIT SPLITTING
 ATiO_3 (A= Pb AND Ba) MATERIAL: A COMPUTATIONAL STUDY BASED
ON DENSITY FUNCTIONAL THEORY***

INTAN MASRUROH S
16/403567/PPA/05084

This research has calculated the geometry dan electronic structure for *perovskite* material PbTiO_3 and BaTiO_3 using *Density Functional Theory* (DFT). This study was reviewed in systems with room temperature for bulk and tetragonal systems. Electronic structure calculations show the existence of spin splitting on tetragonal structures caused by symmetry invasion. The resulting spin splitting is an effect caused by the ferroelectric properties of the material which can increase the ability to read data faster and more efficiently. The resulting spin splitting is a Rashba type for PbTiO_3 material located at point X and BaTiO_3 at point Γ , with parameters obtained by calculating the energy fittings using C_{4v} symmetry point groups. By using the $3,972\text{\AA}$ tetragonal optimization lattice; $4,233\text{\AA}$ and $4,076\text{\AA}$; $4,094\text{\AA}$ Pb and Ba are respectively known to be changes in band gap energy in the material which is given the effect of strain (-8%, -6%, -4%, -2%, +2%, +4%, +6%, +8%). In the PbTiO_3 system, the band gap is greatest when given a minimum strain effect (-8%) of 1.73 eV and the trend of the band gap graph tends to decrease inversely with the strain effect. In the BaTiO_3 system, the band gap has a rising trend with increasing number of strains. The largest band gap in the strain (+ 6%) was 1.76 eV, because the bandgap value in -8% of the BaTiO_3 system was anomalous towards other bandgap with strain (-6% ... 8%).

Keyword: *DFT, perovskite, PbTiO_3 , BaTiO_3 , spin splitting*