

INTISARI

PENGARUH KETEBALAN *THIN FILM* TERHADAP SIFAT ELEKTRONIK STRUKTUR WURTZITE (ZnO DAN GaN): KAJIAN KOMPUTASI MENGGUNAKAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

TIN SUBEKTI ZAIDAH DARAJAT
17/422228/PPA/05538

Telah dilakukan kajian komputasi menggunakan *Density Functional Theory* (DFT) mengenai pengaruh ketebalan *thin film* terhadap sifat elektronik struktur wurtzite (ZnO dan GaN) *non polar* $[10\bar{1}0]$ dengan menggunakan analisis elektron bebas dan teori grup simetri. Fenomena Rashba *spin splitting* teridentifikasi pada *valence band maximum* (VBM) di sekitar titik Γ point. Hasil penelitian menunjukkan adanya perubahan grup simetri akibat adanya pengaruh efek *surface* $[10\bar{1}0]$. Pada arah polar, simetri kristal memiliki grup simetri C_{6v} , akibat efek *surface* $[10\bar{1}0]$ maka simetri grup menjadi C_s karena hanya terdiri atas satu *mirror* simetri pada sumbu x. Berdasarkan analisis grup simetri menunjukkan bahwa struktur wurtzite (ZnO dan GaN) bersifat anisotropik di mana arah $\Gamma - X$ terdapat satu parameter Rashba (α_2) dan tiga parameter (α_1, α_2 dan α_3) pada arah $\Gamma - Y$. Melalui perhitungan komputasi dan analisis teori grup simetri diperoleh hasil yang konsisten. Hasil penelitian menegaskan bahwa adanya fenomena Rashba *spin splitting* akibat efek *surface* $[10\bar{1}0]$ yang bersifat anisotropik menjadikan struktur wurtzite menjanjikan sebagai piranti *optoelektronik*.

Kata kunci: wurtzite, efek *surface*, Rashba *spin splitting*, ketebalan *thin film*

ABSTRACT

EFFECT OF THIN FILM THICKNESS ON THE ELECTRONIC PROPERTIES OF WURTZITE STRUCTURE (ZnO AND GaN): USING BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY

TIN SUBEKTI ZAIDAH DARAJAT
17/422228/PPA/05538

A computational studied using by Density Functional Theory (DFT) on the influence of thin film thickness on the electronic properties non-polar wurtzite structure (ZnO and GaN) with free electron analysis and symmetry group theory. The Rashba spin splitting phenomenon was identified in the case of bulk and surface thin film non-polar $[10\bar{1}0]$ in the valence band maximum (VBM) around the Γ point. The results showed that the change in symmetry group due to surface effects. The $[10\bar{1}0]$ symmetry group changes from C_{6v} (polar direction) to C_s (non polar direction) where only one mirror symmetry on the x-axis. Through symmetry group analysis showed that the structure of wurtzite (ZnO and GaN) is anisotropic in which one Rashba parameter in (α_2) Γ -X direction and three parameters $(\alpha_1, \alpha_2$ and $\alpha_3)$ in Γ -Y direction. Results of computational calculations and analysis through symmetry group theory are consistent. The results of the study confirmed that the phenomenon of Rashba spin splitting due to surface effect non polar $[10\bar{1}0]$ makes the wurtzite structure promising as a optoelectronic devices.

Key words: wurtzite, surface effect, Rashba spin splitting, thin film thickness