

INTISARI

KAJIAN KOMPUTASIONAL STRUKTUR ELEKTRONIK BiInO₃ DENGAN PENDEKATAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

Oleh

HANIF YUANDI WIDYANDARU
16/398445/PA/17406

Telah dilakukan kajian komputasional struktur elektronik pada material BiInO₃ dengan pendekatan *density functional theory* (DFT) untuk fase kubik, tetragonal dan orthorombik. Pada fase tetragonal, diamati adanya efek Rashba yang anisotropik pada pita konduksi minimum. Sedangkan pada efek orthorombik terjadi pemecahan *fourfold degenerate* menjadi doublet yang di mana tiap doublet mengalami pemecahan menjadi singlet yang memiliki efek *Persistent Spin Helix* (PSH) yang ditunjukkan oleh kontur spin yang seragam. Keadaan pemecahan diinduksi oleh efek interaksi spin orbit dan simetri pada kristal. Untuk menganalisis dan melakukan perhitungan terkait parameter SOI-nya, dirumuskan hamiltonian efektif menggunakan teori grup dan teori gangguan $k \cdot p$. Dari hasil penelitian ini juga menunjukkan bahwa material BiInO₃ merupakan material yang menjanjikan dalam pengembangan perangkat spintronik.

Kata-kata Kunci: Inorganic Perovskite, Efek Rashba, *Persistent Spin Helix*, *Density Functional Theory*, Interaksi Spin-Orbit, Teori gangguan $k \cdot p$, Spintronik.

ABSTRACT

COMPUTATIONAL STUDY OF BiInO₃ ELECTRONIC STRUCTURE BASED ON DENSITY FUNCTIONAL THEORY APPROACH

by

HANIF YUANDI WIDYANDARU
16/398445/PA/17406

An electronic structure study has been conducted on the BiInO₃ material by using the density functional theory (DFT) approach for the cubic, tetragonal and orthorhombic phases. In the tetragonal phase, there is an anisotropic Rashba splitting on the minimum conduction band. While the orthorhombic there is a fourfold degenerate that splits into a doublet and then each doublet split again into a singlet which has the effect of the Persistent Spin Helix (PSH) shown by a uniform spin contour. This splitting is induced due interplay between spin orbit interaction and symmetry of the crystal. To analyze properties and calculate related SOI parameters, an effective Hamiltonian is formulated using group theory and $k \cdot p$ perturbation. The results of this study also show that BiInO₃ is a promising material in the development of spintronic devices.

Keyword: Inorganic Perovskite, Rashba Effect, *Persistent Spin Helix*, *Density Functional Theory*, Spin-Orbit Interaction, $k \cdot p$ Perturbation, Spintronics.