

INTISARI

Kajian Pengaruh *Strain* pada Struktur Elektronik Feroelektrik BiInO₃ dengan Pendekatan *Density Functional Theory* dan Teori Gangguan $\vec{k} \cdot \vec{p}$

Oleh

Berton Maruli Siahaan
18/433733/PPA/05548

Telah dilakukan kajian komputasional berbasis *Density Functional Theory* dengan variasi *strain* untuk mengamati struktur elektronik material perovskite BiInO₃. Penelitian ini menunjukkan adanya *spin splitting* disekitar X *point* dan telah dianalisis menggunakan teori gangguan $\vec{k} \cdot \vec{p}$ dan grup simetri sehingga diperoleh parameter Rashba untuk sistem *bulk* material BiInO₃. Selain itu, juga diperoleh orientasi polarisasi spin di sekitar X *point* dari hasil perhitungan *spin texture*, yang menunjukkan adanya polarisasi untuk *lower band* dan *upper band*. Dengan analisis berbasis teori gangguan $\vec{k} \cdot \vec{p}$ diperoleh polarisasi spin yang konsisten dengan hasil kalkulasi DFT. Hasil penelitian ini menegaskan bahwa dengan adanya *Rashba spin splitting* menjadikan sistem *bulk* material BiInO₃ menjanjikan untuk aplikasi divais SFET.

Kata kunci: *Spin splitting*, *Density Functional Theory* (DFT), *strain*

ABSTRACT

A Study The Effect Of Strain on Electronic Structure of Ferroelectric BiInO₃ with Density Functional Theory Approach and $\bar{\mathbf{k}}\cdot\bar{\mathbf{p}}$ Perturbation Theory

By

Berton Maruli Siahaan
18/433733/PPA/05548

A computational study based on Density Functional Theory with strain variations has been carried out to observe the electronic structure of BiInO₃ perovskite material. This study shows that there is an existence of spin splitting around the X point and it has been analyzed using perturbation theory and symmetry groups that it obtain the Rashba parameters for the BiInO₃ bulk material system. In addition, the spin polarization orientation is also obtained around the X point from the spin texture calculation results, which indicates a polarization for the lower band and upper band. By analysis based on perturbation theory, it's obtained a spin polarization which is consistent with the results of DFT calculations. The results of this study confirm that the presence of Rashba spin splitting makes the BiInO₃ bulk material system promising for SFET device applications.

Keywords: *Spin splitting, Density Functional Theory (DFT), Perovskite*