

INTISARI

Pengaruh Struktur Kristal pada Struktur Elektronik dan Spin pada Material *Perovskites* CH₃NH₃SnI₃: Kajian Komputasional Berbasis *Density Functional Theory*

oleh

Syifa Fauzia Hariyanti Putri
16/395734/PA/17310

Telah dilakukan perhitungan struktur elektronik dan spin pada material *perovskites* CH₃NH₃SnI₃ menggunakan pendekatan *density functional theory* (DFT). Perhitungan dilakukan menggunakan tiga struktur kristal yang berbeda, yaitu kubik, tetragonal, dan orthorhombik. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa struktur elektronik memiliki celah pita *direct* sebesar 0,6 eV pada titik *R* dan 1,35 eV pada titik Γ untuk fase kubik dan orthorhombik yang menunjukkan sifat semikonduktor. Sedangkan pada fase tetragonal kristal memiliki sifat *metallic*. Pelibatan efek SOC menyebabkan penurunan lebar celah pita dan pemecahan spin. Analisa spin tekstur menggunakan teori perturbasi $k \cdot p$ untuk mengkonstruksi Hamiltonian Rashba dengan meninjau simetri C_{4v} pada fase kubik dan tetragonal dan C_{2v} pada fase orthorhombik menunjukkan polarisasi spin pada kristal berupa pemecahan spin tipe Rashba pada semua fase. Hal ini dibuktikan dengan perhitungan spin tekstur yang menunjukkan komponen spin *in plane*. Dengan adanya kation CH₃NH₃⁺ yang menginduksi polarisasi pada sistem kristal menyebabkan kemungkinan pengontrolan pemecahan spin dengan menggunakan medan listrik eksternal. Hal ini menjadikan CH₃NH₃SnI₃ kandidat material untuk pengembangan piranti spintronik.

Kata kunci: struktur elektronik, spin struktur, spin orbit coupling, density functional theory, simetri grup, teori perturbasi $k \cdot p$, spintronik

ABSTRACT

The Effect of Crystal Structures on Electronic Structure and Spin on CH₃NH₃SnI₃ Perovskites Material: Computational Study Based on Density Functional Theory

by

Syifa Fauzia Hariyanti Putri
16/395734/PA/17310

The calculation of electronic band structure and spin of CH₃NH₃SnI₃ has been conducted by density functional theory (DFT). The calculation is performed to three different crystal structure, which is cubic, tetragonal, dan orthorhombic. Electronic band structure calculation shows a direct band gap with 0,6 eV in *R* point and 1,35 eV in Γ point for cubic and orthorhombic phase depicting a semiconductor. Meanwhile tetragonal phase has a metallic characteristic. Involving the SOC induce a band gap reduction and a spin-splitting. Spin texture analysis using $k \cdot p$ perturbation theory to construct Rashba Hamiltonian concerning C_{4v} symmetry for cubic and tetragonal phase and C_{2v} for orthorhombic phase represents Rashba type spin polarization. This is confirmed by the calculation of spin texture showing in plane spin polarization. The presence of CH₃NH₃⁺ inducing polarization in the crystal system is leading to fully control the spin-splitting by external electric field. The study makes it possible for CH₃NH₃SnI₃ as a spintronic device.

Keywords: electronic structure, spin structure, Spin Orbit Coupling, Density Functional Theory, group symmetry, $k \cdot p$ perturbation theory, spintronics