

INTISARI

Analisis struktur dan sifat elektronik telah dilakukan pada *Hybrid Organic-Inorganic Perovskites* (HOIP) $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnX}_3$ ($X=\text{I}, \text{Br}, \text{Cl}$) dalam fase tetragonal. Struktur geometri beserta struktur elektronik tenaga diperoleh dari kalkulasi dengan *Density Functional Theory* (DFT). Efek interaksi spin orbit pada elemen logam berat pada material $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnX}_3$ menyebabkan pemecahan spin yang cukup signifikan. Perhitungan struktur elektronik menunjukkan karakteristik celah tenaga yang *direct* pada material $X=\text{I}$ dan celah tenaga yang *indirect* pada $X=\text{Br}, \text{Cl}$. Perbedaan atom halida sangat berpengaruh terhadap ukuran oktahebra yang dibentuk SnX_6 dan kekuatan ionisasi ikatan Sn-X yang berkibat pada perbedaan ukuran celah tenaga. Sifat konduktivitas material semakin melemah dari $X=\text{I}$ ke Cl dengan celah tenaga yang semakin besar. Untuk menyelidiki karakteristik pemecahan spin anisotropik dari tiap halida, Hamiltonian efektif dikonstruksi dengan menganalisis teori grup dan berdasarkan teori *k.p perturbation*. Kemudian efek Rashba dihitung untuk tiap system material pada *valence band maximum* (VBM) dan *conduction band minimum* (CBM). Besarnya efek Rashba yang diperoleh mengindikasikan bahwa material $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnX}_3$ menjanjikan untuk diterapkan sebagai piranti spintronik.

Kata kunci: HOIP, DFT, interaksi spin orbit, Splitting spin, efek Rashba

ABSTRACT

The structural and electrical properties of tetragonal Hybrid Organic-Inorganic Perovskites (HOIP), $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnX}_3$ (X=I, Br dan Cl) has been analyzed. Geometric and electronic structure has been examined using Density Functional Theory (DFT). The effect of spin orbit interaction on $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnX}_3$ material's heavy metals elements cause significant spin splitting. The calculation of the electronic structure showed direct band gap characteristics in X=I material and indirect band gap in X=Br, Cl materials. The difference of halide atoms greatly effected the size of octahedra formed by SnX_6 cage and ionicity of Sn-X bond which results in size different of the band gap. The conductivity of materials weakens of prom X=I to Cl. To investigate the anisotropic spin splitting of each halide, the effective Hamiltonian is constructed by analyzing group theory and based on the k.p perturbation theory. Then the Rashba effect is calculated for each material system at the valence band maximum (VBM) and conduction band minimum (CBM). The magnitude of the Rashba effect obtained indicates that the $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnX}_3$ material is promising to be applied as a spintronic device.

Keywords: HOIP, DFT, Spin Orbit Interaction, spin splitting, Rashba effect