

INTISARI

EFEK MEDAN LISTRIK TERHADAP POLARISASI SPIN PADA MATERIAL $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$: KAJIAN KOMPUTASIONAL BERBASIS *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

Oleh

LALU DALILUL FALIHIN

19/448667/PPA/05750

Perhitungan dan analisis struktur elektronik pada material *bismuth oxyselenide* $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dengan struktur *centrosymmetric* berbasis *density functional theory* (DFT) telah dilakukan. Penelitian ini fokus pada pengaruh pemberian efek medan listrik terhadap polarisasi spin pada material. Hasil perhitungan mengkonfirmasi bahwa efek medan listrik pada arah-z dapat menginduksi polarisasi spin pada material bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ ditandai dengan muncul *spin splitting* di titik Γ pada *conduction band minimum* (CBM). *Spin splitting* pada material bertambah secara linear seiring dengan meningkatnya pemberian medan listrik. Analisis dilakukan terhadap *spin-splitting* menggunakan teori gangguan \vec{k}, \vec{p} dan grup simetri. Proyeksi orbital menunjukkan titik Γ didominasi oleh atom Bi-pz yang memiliki kontribusi besar pada kekuatan *spin orbit coupling* (SOC) pada kristal $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$. Pemberian medan listrik mentransformasi grup titik kristal bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dari D_{4h} (*centrosymmetric*) menuju C_{4v} (*non-centrosymmetric*). Selain itu, hasil perhitungan tekstur spin mengkonfirmasi bahwa pemberian medan listrik menginduksi *net* polarisasi spin kristal bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ sehingga potensial untuk diaplikasikan pada perangkat spintronik.

Keywords: $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$, polarisasi spin, medan listrik, *centrosymmetric*, *spintronik*.

ABSTRACT

ELECTRIC FIELD EFFECT ON SPIN POLARIZATION IN $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ MATERIALS: A COMPUTATIONAL STUDY BASED-ON DENSITY FUNCTIONAL THEORY

By

LALU DALILUL FALIHIN

19/448667/PPA/05750

Electronic structure calculation and analysis on *bismuth oxyselenide* $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ material with centrosymmetric structure based on density functional theory (DFT) have been carried out. This research was focus on the influence of electric field on spin polarization in material. The calculation results confirms that electric field effect in z-axis direction induced spin polarization on bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ materials identified by spin splitting appearance in conduction band minimum (CBM) Γ point. Spin splitting on material increases linearly which has consistent with the electric field effect value. Spin splitting analysis was carried out using $\vec{k} \cdot \vec{p}$ perturbation theory and symmetry group. Orbital projections found that Bi-pz dominantly characterized Γ point which has high spin orbit strength contribution on bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ crystal. The influence of the electric field has transformed bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ point group from D_{4h} (centrosymmetric) to C_{4v} (non-centrosymmetric). Moreover, further spin texture investigation confirms that external electric field induced bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ spin polarization so that feasible to the application of spintronic devices.

Keywords: $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$, spin polarization, electric field, centrosymmetric, spintronics.