

## Struktur elektronik dan sifat magnetik ZnO didop Cr = electronic structure and magnetic properties of Cr-doped ZnO

Nedya Farisia, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20353539&lokasi=lokal>

---

### Abstrak

Dilute Magnetic Semiconductors (DMS) merupakan material yang ideal untuk aplikasi spintronik bahwasanya bukan hanya muatan elektron namun juga spin dari pembawa muatan digunakan untuk proses penyimpanan informasi magnetik. Meskipun telah diketahui bahwa defek berperan penting untuk struktur elektronik dan sifat magnetik DMS, namun pada DMS yang berbasis semikonduktor ZnO, defek mana yang berperan pada kondisi ruang masih diperdebatkan. Skripsi ini menjelaskan interaksi defek yang mungkin terjadi di dalam ZnO didop Cr dan pengaruhnya. Dalam kerangka Density Functional Theory (DFT) kami telah mempelajari struktur elektronik dan sifat magnetik ZnO wurtzite didop dengan Cr, serta dengan keberadaan beberapa varian defek (vakansi oksigen(Vo), impuritas hidrogen(H), dan keduanya(VoH)). Kami menggunakan supersel 2x2x2 untuk mempertahankan konsentrasi dopan Cr rendah (6.25%), pseudopotensial standar Projector Augmented Wave (PAW) untuk menyatakan elektron dekat inti atom maupun elektron valensi, dan pendekatan GGA-PBE untuk energi exchange-correlation yang dikombinasikan dengan pendekatan Hubbard untuk memperhitungkan korelasi elektron yang kuat pada keadaan 3d. Hasil spektrum pita energi, densitas keadaan (DOS), proyeksi densitas keadaan (PDOS), dan distribusi densitas-spin telah diinvestigasi. Hasil investigasi tersebut menunjukkan bahwa keberadaan Vo dalam ZnO:Cr membuat sistem tersebut memiliki keadaan feromagnetik yang lebih stabil daripada ZnO:Cr murni, akibat didapatkan magnetisasi serta densitas keadaan pada level energi Fermi yang lebih tinggi. Keberadaan H dalam ZnO:Cr menyumbang elektron donor pada ZnO:Cr namun hanya terpolarisasi pada daerah pita konduksi sehingga tidak banyak merubah sifat magnetiknya. Dan adapun keberadaan VoH dalam ZnO:Cr ternyata mampu menunjukkan sifat half-metallic. Dengan demikian, dapat dikatakan bahwa untuk memperoleh sifat tertentu dari ZnO didop Cr dapat dilakukan dengan mengatur keberadaan dari ketiga varian defek tersebut.

.....Dilute Magnetic Semiconductors (DMS) are ideal materials for applications in spintronics where not only the electron charge but also the spin of the charge carrier is used for information processing. However, the origin of observed interaction in DMS is still a subject of debate. This bachelor thesis put forward an explanation of defect interaction which may occur and the effects within Cr-doped ZnO. Within the framework of Density Functional Theory (DFT) we have studied the electronic and the magnetic properties of wurtzite ZnO doped with transition-metal Cr in the presence of some defects (Vo, H, VoH). We used a 2x2x2 supercell to maintain dilute Cr concentration, the standard Projector Augmented Wave (PAW) pseudopotentials to describe the core electrons and valence electrons, and the exchange-correlation energy of the electrons is treated within the Generalized Gradient Approximation of Perdew, Burke, and Ernzerhof (GGA-PBE) which is combined with a Hubbard approach to include strong electron correlations within the 3d state. The spectrum of band structure, density of states (DOS) and projected density of states (PDOS), and spin-density distribution in this system were investigated. The results of investigation shows that the existence of Vo in ZnO:Cr could stabilize ferromagnetic state of the system, due to the large magnetization

and density of states at Fermi level. While, the existence of H introduce donor in ZnO:Cr but just polarized above Fermi level so there is no much change observed in its magnetic properties. And as for the existence of VoH in ZnO:Cr, it turn out able to show the half-metallic properties. Thus, it can be said that we could determine some characteristics of ZnO:Cr by controlling the existence of those defects.