

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN SAMBUT</b> .....	<b>ii</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b> .....	<b>iii</b>
<b>PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI</b> .....	<b>iii</b>
<b>HALAMAN MOTTO</b> .....	<b>v</b>
<b>PRAKATA</b> .....	<b>vi</b>
<b>DAFTAR ISI</b> .....	<b>viii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	<b>xi</b>
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	<b>xii</b>
<b>INTISARI</b> .....	<b>xiii</b>
<b>ABSTRACT</b> .....	<b>xiv</b>
<b>BAB I</b> .....	<b>1</b>
<b>PENDAHULUAN</b> .....	<b>1</b>
1.1. Latar Belakang .....	1
1.2. Rumusan Masalah .....	4
1.3. Batasan Masalah.....	4
1.4. Tujuan Penelitian.....	5
1.5. Manfaat Penelitian.....	5
1.6. Sistematika Penulisan.....	5
<b>BAB II</b> .....	<b>7</b>
<b>TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	<b>7</b>
<b>BAB III</b> .....	<b>11</b>
<b>LANDASAN TEORI</b> .....	<b>11</b>
3.1 Group-IV monochalcogenides.....	11

3.2	Spin Orbit Interaction .....	12
3.3	Teori $k.p$ .....	15
3.4	<i>Density Functional Theory</i> (DFT) .....	15
3.4.1	Permasalahan banyak partikel .....	16
3.4.2	Teorema Hohenberg-Kohn .....	17
3.4.3	Persamaan Kohn-Sham .....	18
<b>BAB IV METODE PENELITIAN</b> .....		<b>20</b>
4.1.	Energi Exchange Correlation (XC).....	20
4.2.	Metode Potensial Semu .....	21
4.3.	Orbital Pseudo-atomik .....	22
4.4.	Peralatan dan Bahan Penelitian.....	22
4.4.1.	Perangkat Keras.....	23
4.4.2.	Perangkat Lunak .....	23
4.5.	Tempat dan Waktu Penelitian.....	23
4.6.	Tahapan Komputasi .....	23
<b>BAB V</b> .....		<b>28</b>
5. 1.	Optimasi Struktur Material .....	28
5.1.1.	Optimasi parameter kisi.....	28
5.1.2.	Optimasi Posisi Atom .....	30
5. 2.	Perhitungan Efek Pergeseran Menggunakan NEB.....	33
5. 3.	Struktur Elektronik Material .....	37
5.3.1.	Struktur Elektronik Bilayer SnSe.....	37
5.3.2.	Struktur Elektronik Bilayer SnSe NEB.....	39
5. 4.	Potensi <i>bilayer SnSe</i> material 2D <i>tunable ferroic</i> .....	41
<b>BAB VI</b> .....		<b>43</b>
6.1	Kesimpulan .....	43



6.2	Saran .....	43
	<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>44</b>
	<b>LAMPIRAN A .....</b>	<b>50</b>

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 3.1 Struktur kristal dari <i>bilayer</i> SnSe: tampak atas (A), tampak samping (B dan C), unit sel (D), zona brillouine (E) .....	16
Gambar 3.2 Interaksi spin orbit pada atom .....	19
Gambar 4.1 <i>Source code</i> untuk mengatur parameter kisi material, kiri untuk <i>stacking</i> AA dan kanan <i>stacking</i> AB .....	35
Gambar 4.2 <i>Source code</i> mengatur posisi atom dalam <i>unit cell</i> , atas untuk <i>stacking</i> AA dan bawah untuk <i>stacking</i> AB .....	35
Gambar 4.3 <i>Source code</i> untuk kalkulasi <i>band structure</i> .....	36
Gambar 4.4 <i>Source code</i> untuk kalkulasi <i>band structure</i> .....	37
Gambar 4.5 Diagram tahapan alir penelitian .....	37
Gambar 5.1 Hasil optimasi parameter kisi kristal bilayer SnSe AA .....	39
Gambar 5.2 Hasil optimasi parameter kisi kristal bilayer SnSe AB .....	39
Gambar 5.3 Struktur bilayer SnSe hasil optimasi posisi (a) tampak samping stack AA, (b) tampak samping stack AB, (c) tampak atas stack AA, (d) tampak atas stack AB .....	42
Gambar 5.4 Struktur Bilayer SnSe .....	43
Gambar 5.5 Struktur NEB Bilayer SnSe dari kiri pada titik 0, 4 dan 11 .....	44
Gambar 5.6 grafik energi NEB Bilayer SnSe .....	45
Gambar 5.7 Struktur energi bilayer SnSe AB dengan melibatkan SOC .....	47
Gambar 5.8 Struktur PDOS masing-masing orbital untuk material bilayer SnSe atas atom Sn dan bawah atom Se .....	48
Gambar 5.9 Band structure bilayer SnSe pada titik 0 .....	49
Gambar 5.10 Band structure bilayer SnSe pada titik 4 .....	49
Gambar 5.11 Perbandingan Band structure bilayer SnSe pada titik 0 (hitam) dan 11 (merah) .....	50

## DAFTAR TABEL

Tabel 5.1 Parameter kisi hasil penelitian yang dilakukan dan referensi .....	44
Tabel 5.2 Hasil optimasi posisi bilayer SnSe.....	46
Tabel 5.3 Posisi final NEB bilayer SnSe .....	48
Tabel 5.4 Proses NEB bilayer SnSe.....	49
Tabel 5.5 Posisi puncak NEB bilayer SnSe .....	50
Tabel 5.6 Tabel 5.6 <i>Conduction Band Minimum</i> (CBM) dan <i>Valence Band Minimum</i> (VBM) NEB bilayer SnSe .....	55