



## DAFTAR ISI

|   |             |
|---|-------------|
| <b>HALAMAN JUDUL .....</b>                                    | <b>i</b>    |
| <b>HALAMAN PENGESAHAN.....</b>                                | <b>ii</b>   |
| <b>PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI .....</b>                        | <b>iii</b>  |
| <b>HALAMAN MOTTO .....</b>                                    | <b>iv</b>   |
| <b>KATA PENGANTAR .....</b>                                   | <b>v</b>    |
| <b>DAFTAR ISI .....</b>                                       | <b>vii</b>  |
| <b>DAFTAR GAMBAR .....</b>                                    | <b>x</b>    |
| <b>DAFTAR TABEL .....</b>                                     | <b>xii</b>  |
| <b>INTISARI .....</b>   | <b>xiii</b> |
| <b>ABSTRACT .....</b>   | <b>xiv</b>  |
| <b>BAB I PENDAHULUAN.....</b>                                 | <b>1</b>    |
| 1.1    Latar Belakang .....                                   | 1           |
| 1.2    Rumusan Masalah .....                                  | 6           |
| 1.3    Batasan Masalah.....                                   | 7           |
| 1.4    Tujuan Penelitian .....                                | 7           |
| 1.5    Manfaat Penelitian .....                               | 8           |
| <b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA .....</b>                          | <b>9</b>    |
| 2.1    Perkembangan Riset Spintronik .....                    | 9           |
| 2.2    Perkembangan Studi Material untuk Spintronik .....     | 10          |
| <b>BAB III DASAR TEORI .....</b>                              | <b>16</b>   |
| 3.1    2D Material Group IV-V .....                           | 16          |
| 3.2    Cacat Kristal (Crystallographic Defect).....           | 17          |
| 3.3 <i>Spin-Orbit Interaction (SOI)</i> .....                 | 20          |
| 3.3.1    Interaksi spin orbit pada Atom.....                  | 20          |
| 3.3.2    Interaksi spin orbit pada kristal non-magnetik ..... | 24          |
| 3.3.3    Efek Dresselhaus .....                               | 25          |
| 3.3.4    Efek Rashba .....                                    | 26          |



|                                   |  |           |
|-----------------------------------|--|-----------|
| 3.3.5                             | Efek Rashba-Dresselhaus.....                             | 26        |
| 3.3.6                             | Persistent-Spin Textures (PST) .....                     | 27        |
| 3.4                               | Density Functional Theory (DFT) .....                    | 28        |
| 3.4.1                             | Permasalahan banyak partikel.....                        | 28        |
| 3.4.2                             | Pendekatan Hartree .....                                 | 30        |
| 3.4.3                             | Pendekatan Hartree-Fock .....                            | 31        |
| 3.4.4                             | Teorema Hohenberg-Kohn.....                              | 32        |
| 3.4.5                             | Persamaan Kohn-Sham .....                                | 34        |
| 3.5                               | Teori Grup .....   | 36        |
| 3.6                               | Teori Gangguan <i>k.p</i> .....                          | 38        |
| <b>BAB IV METODE PENELITIAN</b>   | .....  | <b>44</b> |
| 4.1                               | Peralatan dan Bahan Penelitian .....                     | 44        |
| 4.1.1                             | Perangkat Keras .....                                    | 44        |
| 4.1.2                             | Perangkat Lunak.....                                     | 44        |
| 4.2                               | Tempat dan Waktu Penelitian .....                        | 44        |
| 4.3                               | Tahapan Penelitian .....                                 | 45        |
| 4.3.1                             | Studi Literatur .....                                    | 45        |
| 4.3.2                             | Pemodelan Kristal .....                                  | 45        |
| 4.3.3                             | Optimasi Geometri .....                                  | 47        |
| 4.3.4                             | Kalkulasi Struktur Elektronik .....                      | 48        |
| 4.3.5                             | Metode Komputasi Tekstur Spin .....                      | 48        |
| 4.3.6                             | Analisa Simetri <i>k.p</i> .....                         | 51        |
| 4.4                               | Energi Exchange Correlation .....                        | 53        |
| 4.5                               | Potensial Semu ( <i>pseudopotentials</i> ) .....         | 54        |
| 4.6                               | Non-Colinear DFT .....                                   | 56        |
| <b>BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN</b> | .....  | <b>58</b> |
| 5.1                               | 2D <i>Pristine</i> Si <sub>2</sub> Bi <sub>2</sub> ..... | 58        |
| 5.1.1                             | Optimisasi Energi Kristal.....                           | 58        |
| 5.1.2                             | Optimisasi Gaya pada Atom .....                          | 60        |



|                            |   |            |
|----------------------------|---|------------|
| 5.1.3                      | Stuktur Elektronik .....  | 62         |
| 5.1.4                      | Stuktur Spin dan Analisis Teori Grup .....                                    | 65         |
| 5.2                        | Substitusi atom Bi dengan Sb pada 2D Si <sub>2</sub> Bi <sub>2</sub> .....    | 69         |
| 5.2.1                      | Optimisasi Geometri .....   | 69         |
| 5.2.2                      | Struktur Elektronik.....  | 73         |
| 5.2.3                      | Struktur spin dan Analisa Teori grup .....                                    | 77         |
| 5.3                        | Vacancy Line Defect (VLD) pada 2D Si <sub>2</sub> Bi <sub>2</sub> .....       | 83         |
| 5.3.1                      | Optimisasi Geometri .....   | 83         |
| 5.3.2                      | Struktur Elektronik.....  | 86         |
| 5.3.3                      | Struktur spin dan Analisa Teori grup .....                                    | 90         |
| 5.4                        | Potensi Surface Imperfection pada Material untuk Perangkat<br>Spintronik..... | 95         |
| <b>BAB VI</b>              | <b>PENUTUP .....</b>  | <b>98</b>  |
| 6.1                        | Kesimpulan .....  | 98         |
| 6.2                        | Saran.....  | 99         |
| <b>DAFTAR PUSTAKA.....</b> |   | <b>100</b> |
| <b>LAMPIRAN A .....</b>    |   | <b>108</b> |
| <b>LAMPIRAN B .....</b>    |   | <b>111</b> |