KAJIAN SIFAT MAGNETIK TOPOLOGI PADA MATERIAL INSULATOR CHERN DINITRIDA LOGAM TANAH JARANG (REMN_2)
BERSTRUKTUR DUA DIMENSI DENGAN PENDEKATAN NUMERIK BERBASIS DENSITY FUNCTIONAL THEORY
Finantius Enrico M. Rahangiar, Moh. Adhib Ulil Absor, S.Si., M.Sc, Ph.D; Dr. Muhammad Darwis, S.Si., M.Sc
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR ISI

Halaman Pengesahan iii

Halaman Pernyataan iii

Halaman Persembahan iv

PRAKATA v

INTISARI xi

ABSTRACT xii

I PENDAHULUAN 1
- 1.1 Latar Belakang Masalah . . . 1
- 1.2 Perumusan Masalah . . . 2
- 1.3 Tujuan Penelitian . . . 3
- 1.4 Batasan Masalah . . . 3
- 1.5 Manfaat Penelitian . . . 3

II TINJAUAN PUSTAKA 4

III DASAR TEORI 7
- 3.1 Nitrida Logam Tanah Jarang ($RemN_2$) . . . 7
- 3.2 Teorema Bloch . . . 8
- 3.3 Model Heisenberg . . . 9
- 3.4 Efek Hall Kuantum Anomali . . . 10
  - 3.4.1 Korespondensi *bulk* dan *boundary* . . . 11
  - 3.4.2 Fase, koneksi, dan kurvatur Berry . . . 12
  - 3.4.3 Respon linear konduktivitas Hall . . . 14
  - 3.4.4 Kuantisasi konduktivitas Hall . . . 15
- 3.5 Simetri dan Grup . . . 17
- 3.6 Topologi pada materi mampat . . . 18
- 3.7 Metode *Density Functional Theory* . . . 20
  - 3.7.1 Penyelesaian sistem banyak partikel . . . 20
  - 3.7.2 Pendekatan Hartree-Fock . . . 21

KAJIAN SIFAT MAGNETIK TOPOLOGI PADA MATERIAL INSULATOR CHERN DINITRIDA LOGAM TANAH JARANG (REMN_2)
BERSTRUKTUR DUA DIMENSI DENGAN PENDEKATAN NUMERIK BERBASIS DENSITY FUNCTIONAL THEORY
Finantius Enrico M. Rahangiar, Moh. Adhib Ulil Absor, S.Si., M.Sc, Ph.D; Dr. Muhammad Darwis, S.Si., M.Sc
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

3.7.3 Teorema Hohenberg-Kohn 22
3.7.4 Persamaan Kohn-Sham 23
3.7.5 *Exchange correlation* 23

IV METODOLOGI RISET 25
4.1 Alat dan Bahan 25
4.2 Metode DFT 25
4.2.1 Set basis 25
4.2.2 Potensial semu 26
4.2.3 Perhitungan energi anisotropi magnetik (MAE) 27
4.2.4 Metode Fukui-Hatsugai-Suzuki 28
4.3 Fungsi Wannier Terlokalisasi Maximal 29
4.4 Kestabilan Pita Fonon 29
4.5 Perhitungan Model Heissenberg dan Monte-Carlo 30
4.6 Model Material 30
4.7 Tahapan Penelitian 32

V HASIL DAN PEMBAHASAN 35
5.1 Struktur Kristal, Magnetik, dan Elektronik pada LaN_2 35
5.1.1 Struktur kristal dan grup simetri LaN_2 35
5.1.2 Keadaan dasar kemagnetan LaN_2 36
5.1.3 Sifat elektronik LaN_2 38
5.2 Kebergantungan Sifat Magnetik Topologi pada Magnetisasi 42
5.3 Efek *Strain* dan Medan Listrik 43
5.3.1 Efek *strain* 43
5.3.2 Efek Medan Listrik 46
5.4 Antar-muka pada 1T-LaN_2 47

VI KESIMPULAN 51

A TOPOLOGI DAN GEOMETRI STRUKTUR PITA 52
A.1 *Fiber Bundle* dan Bilangan Chern 52

B TAMBAHAN DATA SIFAT ELEKTRONIK DAN MAGNETIK 55

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
KAJIAN SIFAT MAGNETIK TOPOLOGI PADA MATERIAL INSULATOR CHERN DINITRIDA LOGAM TANAH JARANG (REMN_2)
BERSTRUKTUR DUA DIMENSI DENGAN PENDEKATAN NUMERIK BERBASIS DENSITY FUNCTIONAL THEORY
Finantius Enrico M. Rahangiar, Moh. Adhib Ulil Absor, S.Si., M.Sc, Ph.D; Dr. Muhammad Darwis, S.Si., M.Sc
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR TABEL

3.1 Material $ReMN_2$ beserta celah pita dan kecepatan Fermi 8

5.1 Tabel arah magnetisasi dan grup titik 41
5.2 Lebar celah pita pada setiap variasi medan listrik pada arah $+z$ dan $-z$ 45

2.1 *Mulliken Population* dan momen magnetik dari hasil perhitungan DFT untuk *pristine* 1T-LaN_2 55

KAJIAN SIFAT MAGNETIK TOPOLOGI PADA MATERIAL INSULATOR CHERN DINITRIDA LOGAM TANAH JARANG (REMN_2)
BERSTRUKTUR DUA DIMENSI DENGAN PENDEKATAN NUMERIK BERBASIS DENSITY FUNCTIONAL THEORY
Finantius Enrico M. Rahangiar, Moh. Adhib Ulil Absor, S.Si., M.Sc, Ph.D; Dr. Muhammad Darwis, S.Si., M.Sc
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR GAMBAR

3.1 Ilustrasi sifat konduktif pada tepi insulator yang muncul pada efek Hall kuantum (kiri), efek Hall kuantum spin (tengah), dan efek Hall kuantum anomali (kanan). 11
3.2 Klasifikasi fase topologi pada material topologis bercelah berdasarkan karakter muatan pembawa pada keadaan tepi. 19

4.1 (a) Vektor kisi Bravais dan (b) vektor kisi balik pada 1T-LaN_2. Persegi panjang berwarna hijau pada (b) menunjukkan zona Brillouin pertama dari kisi konvensional dalam perhitungan keadaan tepi. . . . 31
4.2 Ilustrasi supersel 2×2 yang digunakan dalam perhitungan *ground state magnetic* pada sistem 1T-LaN_2 mulai dari (a)FM, (b)AFM-Neel, (c)AFM-zig-zag, dan (d)AFM-stripe 32
4.3 Model antar-muka LaN_2/*h*BN dilihat dari (a) arah-$\vec{c}$ dan (b) arah-$\vec{a}$. Model antar-muka LaN_2/InSe dilihat dari (c) arah-$\vec{c}$ dan (d) arah $\vec{a}$ . . 33
4.4 Alur pengerjaan penelitian. (a) Algoritma *self-consistent field*(SCF) yang digunakan dalam peritungan DFT. (b) Tahapan wannierisasi, perhitungan struktur pita wannier, dan keadaan tepi. (c) Alur pelaksanaan penelitian dari awal hingga akhir. 34

5.1 (a) Struktur kristal 1T-LaN_2 dengan 3 bidang cermin dari simetri pencerminan. (b) Ilustrasi ruang kisi balik 1T-LaN_2 dan simetri pencerminan yang diinduksi dari ruang riil. (c) dispersi fonon pada lintasan Γ-K-M-K'-Γ. 36
5.2 (a) Ilustrasi mekanisme pembentukan momen magnetik pada LaN_2. Diagram energi sebagai fungsi arah momen magnetik untuk (b) sudut-θ pada bidang-yz dan (c)sudut-ϕ pada bidang-xy 37
5.3 (kiri) Grafik magnetisasi ternormalisasi terhadap temperatur dengan persamaan $m(T)$. (kanan) Ilustrasi mekanisme interaksi pertukaran antar atom N sebagai penyumban momen magnetik 38
5.4 (a) Struktur pita elektronik dengan spin terpolarisasi.(b) *Projected Density of States*(PDOs) pada keadaan spin terpolarisasi.(C)Struktur pita elektronik dengan spin tak-kolinear dengan adanya efek kopling spin-orbit.(d) Proyeksi orbital p dari atom N pada dispersi pita di sekitar level Fermi. 39

UNIVERSITAS GADJAH MADA
KAJIAN SIFAT MAGNETIK TOPOLOGI PADA MATERIAL INSULATOR CHERN DINITRIDA LOGAM TANAH JARANG (REMN_2) BERSTRUKTUR DUA DIMENSI DENGAN PENDEKATAN NUMERIK BERBASIS DENSITY FUNCTIONAL THEORY
Finantius Enrico M. Rahangiar, Moh. Adhib Ulil Absor, S.Si., M.Sc, Ph.D; Dr. Muhammad Darwis, S.Si., M.Sc
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

5.5 (a) pita elektronik tak trivial dan kurvatur Berry terproyeksi pada K-M-K'. (b) Kurvatur Berry di seluruh zona Brillouin. (c) Kondutivitas Hall anomali pada nilai potensial kimia -0,5 hingga 0,5 eV. (d) Nilai rapat keadaan *bulk* dan tepi dari model semi-infinit 1T-LaN_2 40
5.6 Struktur pita elektronik, kurvatur Berry, dan konduktivitas Hall anomali pada 1T-LaN_2 dengan orientasi magnetisasi yang berbeda-beda . 41
5.7 Struktur pita elektronik 1T-LaN_2 dibawah pengaruh strain -2%, -1%, +4%, dan +8% 44
5.8 (a) Jarak antar atom La-N (biru) dan lebar celah energi (merah) sebagai fungsi *strain*. (b) Konduktivitas Hall anomali sebagai fungsi energi. 44
5.9 Struktur pita elektronik 1T-LaN_2 dibawah pengaruh medan listrik $+E_z$ 46
5.10 Struktur pita elektronik 1T-LaN_2 dibawah pengaruh medan listrik $-E_z$ 47
5.11 Struktur pita elektronik LaN_2/hBN dengan (a) spin terpolarisasi dan (b) tak-kolinear dengan SOC.(c) Proyeksi orbital p atom N pada pita di sekitar level Fermi. (d) Konduktivitas Hall anomali sebaga fungsi energi dengan nilai terkuantisasi 3 e^2/h. 48
5.12 Struktur pita elektronik LaN_2/InSe dengan (a) spin terpolarisasi dan (b) tak-kolinear dengan SOC.(c) Proyeksi orbital p atom N pada pita di sekitar level Fermi. (d) Konduktivitas Hall anomali sebaga fungsi energi dengan nilai terkuantisasi 3 e^2/h pada celah pita. 49

2.1 Proyeksi *Density of States* terhadap (a) orbital -*s* dari atom La, (b) orbital -*d* dari atom La, dan (c) orbital -*p* dari atom N. (d) Diagram hibridisasi orbital menunjukkan proses pergeseran energi dari orbital atomik ketika terjadi hibridisasi. (d) Skematik proses pemunculan momen magnetik pada 1T-LaN_2. 56
2.2 *Fitting* strutur pita elektronik dari 1T-LaN_2 yang diperoleh melalui DFT dan Wannier90. 57