

## DAFTAR ISI

Halaman Judul	ii
Halaman Pengesahan	iii
Halaman Pernyataan	iv
Halaman Persembahan	v
Halaman Motto	vi
PRAKATA	vii
DAFTAR ISI	ix
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR GAMBAR	xvi
INTISARI	xvii
ABSTRACT	xviii
<b>I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang Masalah . . . . .	1
1.2 Perumusan Masalah . . . . .	4
1.3 Batasan Masalah . . . . .	5
1.4 Tujuan Penelitian . . . . .	5
1.5 Manfaat Penelitian . . . . .	5
1.6 Keaslian Tesis . . . . .	5
<b>II TINJAUAN PUSTAKA</b>	<b>6</b>
2.1 <i>Spin Orbit Interaction</i> Pada <i>Halide Hybrid Organic-Inorganic Perovskites</i> . . . . .	6
2.2 Pengaruh <i>Strain</i> Terhadap Sifat <i>Spin Splitting</i> . . . . .	9

<b>III</b>	<b>LANDASAN TEORI</b>	<b>12</b>
3.1	Material Perovskite . . . . .	12
3.1.1	<i>Halide Hybrid Organic-Inorganic</i> Perovskite . . . . .	13
3.1.2	Struktur Kristal HOIP SF <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> . . . . .	14
3.2	<i>Spin Orbit Interaction</i> . . . . .	14
3.2.1	Rashba <i>Spin Orbit Interaction</i> . . . . .	16
3.2.2	Dresselhaus Spin Orbit Interaction . . . . .	17
3.2.3	Spin-Orbit Splitting . . . . .	18
3.2.4	<i>Persistent Spin Helix</i> (PSH) . . . . .	20
3.3	Density Functional Theory . . . . .	22
3.4	Teori k-p . . . . .	22
<b>IV</b>	<b>METODE PENELITIAN</b>	<b>25</b>
4.1	Tempat dan Waktu Penelitian . . . . .	25
4.2	Alat dan Bahan Penelitian . . . . .	25
4.2.1	Perangkat Keras . . . . .	25
4.2.2	Perangkat Lunak . . . . .	25
4.3	Metode DFT . . . . .	26
4.3.1	Teorema <i>Many Body Particle</i> . . . . .	26
4.3.2	Teorema Hohenberg-Kohn . . . . .	27
4.3.3	Pendekatan Kohn-Sham . . . . .	28
4.3.4	Energi Exchange-Correlation: Pendekatan Generalized Gradient Approximation (GGA) . . . . .	29
4.3.5	Fungsi Gelombang Coba . . . . .	31
4.3.6	Non-Collinear DFT . . . . .	32
4.4	Desain dan Tahapan Penelitian . . . . .	34
4.4.1	Studi Literatur . . . . .	34
4.4.2	Studi Program OpenMX . . . . .	35
4.4.3	Pemodelan Input Data Material . . . . .	36
4.4.4	Perhitungan Komputasi . . . . .	36
4.4.5	Pemberian Efek <i>Strain</i> . . . . .	38
4.4.6	Perhitungan Efek <i>Surface</i> . . . . .	39
4.4.7	Perhitungan Spin Textures . . . . .	39
<b>V</b>	<b>HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	<b>43</b>
5.1	Hasil Optimasi Parameter Kisi Material SF <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> . . . . .	43

5.2 Hasil Optimasi Relaksasi Posisi Atom . . . . .	44
5.3 Hasil Perhitungan Struktur Elektronik . . . . .	45
5.3.1 Analisis Parameter <i>Spin Splitting</i> . . . . .	48
5.4 Analisis <i>Spin Splitting</i> Dengan Menggunakan Teori $k \cdot p$ Dan Teori Grup . . . . .	49
5.4.1 <i>Splitting</i> Pada M <i>Point</i> . . . . .	49
5.4.2 <i>Splitting</i> Pada R <i>Point</i> . . . . .	54
5.4.3 Rotasi Kristal Pada <i>Real Space</i> . . . . .	57
5.5 Pemberian Efek <i>Strain</i> . . . . .	62
5.6 Hasil Perhitungan Parameter <i>splitting</i> dan <i>Spin Texture</i> . . . . .	67
5.7 Hasil Perhitungan Efek <i>Surface</i> . . . . .	72
5.8 Potensi Material SF <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> Dalam Aplikasi Devais Spintronik . . . . .	75
<b>VI KESIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>78</b>
6.1 Kesimpulan . . . . .	78
6.2 Saran . . . . .	79
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	<b>79</b>
<b>LAMPIRAN</b>	<b>85</b>
A.1 Lampiran A . . . . .	85
A.1.1 Hasil optimasi koordinat atom bulk . . . . .	85
A.1.2 Hasil optimasi koordinat atom surface . . . . .	87
A.2 Lampiran B . . . . .	89
A.2.1 <i>unfolding bulk system</i> . . . . .	89
A.2.2 <i>Unfolding</i> untuk sistem <i>surface</i> . . . . .	90
A.3 Lampiran C . . . . .	91
A.4 Lampiran E . . . . .	94