

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN JUDUL</b>	<b>ii</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b>	<b>iii</b>
<b>HALAMAN PERNYATAAN</b>	<b>iv</b>
<b>HALAMAN PERSEMBAHAN</b>	<b>v</b>
<b>HALAMAN MOTTO</b>	<b>vi</b>
<b>PRAKATA</b>	<b>vii</b>
<b>DAFTAR ISI</b>	<b>ix</b>
<b>DAFTAR TABEL</b>	<b>xii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	<b>xiii</b>
<b>INTISARI</b>	<b>xv</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xvi</b>
<b>I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang . . . . .	1
1.2 Rumusan Masalah Penelitian . . . . .	6
1.3 Batasan Masalah Penelitian . . . . .	7
1.4 Tujuan Penelitian . . . . .	7
1.5 Manfaat Penelitian . . . . .	8
1.6 Sistematika penulisan . . . . .	9
<b>II TINJAUAN PUSTAKA</b>	<b>10</b>
<b>III DASAR TEORI</b>	<b>16</b>
3.1 Interaksi Spin Orbit . . . . .	16
3.1.1 Interaksi Spin Orbit pada Atom . . . . .	16
3.1.2 Interaksi Spin-Orbit pada Material Fase Padatan . . . . .	21

3.1.3	Efek Rashba . . . . .	23
3.1.4	Efek Dresselhaus . . . . .	24
3.1.5	Efek Rashba-Dresselhaus . . . . .	25
3.1.6	Efek <i>Persistent Spin Helix</i> (PSH) . . . . .	26
3.2	Deskripsi Umum Material Perovskite . . . . .	28
3.2.1	Material Perovskite $\text{ABX}_3$ . . . . .	28
3.2.2	Material Perovskite Oksida $\text{ABO}_3$ . . . . .	29
3.2.3	Material <i>Hybrid Organic-Inorganic Perovskite</i> . . . . .	31
3.3	Penjelasan Singkat dari Teori Grup . . . . .	36
3.3.1	Grup Ruang Struktur Kubik Pada Kisi Riil . . . . .	38
3.3.2	Grup Ruang Struktur Kubik Pada Kisi Balik . . . . .	41
3.3.3	Karakteristik Simetri pada Struktur Kristal HOIP . . . . .	42
3.4	Teori k·p perturbation . . . . .	43
3.5	Struktur Elektronik berdasarkan pada Density Functional Theory . . . . .	46
3.5.1	Masalah Banyak Elektron dari Material Termampatkan . . . . .	46
3.5.2	Pendekatan Hartree . . . . .	48
3.5.3	Pendekatan Hartree-Fock . . . . .	49
3.5.4	Pendekatan Density Functional Theory . . . . .	50
<b>IV</b>	<b>METODE PENELITIAN</b>	<b>57</b>
4.1	Metode Komputasi Density Functional Theory . . . . .	57
4.1.1	Potensial Semu <i>Norm-Conserving</i> . . . . .	57
4.1.2	<i>Pseudo-Atomic</i> Basis Orbital . . . . .	60
4.1.3	<i>Non-Collinear Density Functional Theory</i> . . . . .	61
4.2	Metode Perhitungan Spin Tekstur . . . . .	63
4.3	Skema dan Tahapan Penelitian . . . . .	65
4.3.1	Pemodelan Struktur Kristal Bulk HOIP . . . . .	66
4.3.2	Pengoptimalan Geometri Struktur Kristal Bulk HOIP . . . . .	68
4.3.3	Perhitungan Struktur Elektronik Bulk HOIP . . . . .	71
4.3.4	Perhitungan Struktur Spin Bulk HOIP . . . . .	72
4.3.5	Analisa Hasil Data Perhitungan . . . . .	73
4.4	Tempat dan Waktu Penelitian . . . . .	75
4.5	Alat dan Bahan Penelitian . . . . .	75
4.5.1	Perangkat Keras . . . . .	75
4.5.2	Perangkat Lunak . . . . .	75

<b>V</b>	<b>HASIL PERHITUNGAN DAN PEMBAHASAN</b>	<b>78</b>
5.1	Hasil Optimisasi Parameter Tetapan Kisi . . . . .	78
5.2	Hasil Optimisasi Geometri Struktur Kristal . . . . .	83
5.2.1	Analisis Distorsi Oktahedra dan Keseimbangan Struktur . . .	86
5.3	Hasil Perhitungan Struktur Elektronik dari Sistem HOIP . . . . .	89
5.3.1	Hasil Perhitungan Struktur Elektronik dengan efek SOI . . . .	89
5.3.2	Hasil Perhitungan Struktur Elektronik dengan efek SOI . . . .	94
5.3.3	Hasil Perhitungan Struktur Elektronik tanpa kation . . . . .	95
5.4	Analisis Simetri Grup Struktur Kristal dan Fungsi <i>k.p perturbation</i> . .	100
5.4.1	Persamaan Hamiltonian untuk Grup $C_s$ . . . . .	100
5.4.2	Persamaan Hamiltonian untuk Grup $C_{3v}$ . . . . .	105
5.5	Hasil Perhitungan Struktur Spin dari Sistem Bulk HOIP . . . . .	108
5.5.1	Hasil Perhitungan Parameter Hamiltonian SOI . . . . .	109
5.5.2	Hasil Perhitungan Spin tekstur . . . . .	117
5.5.3	Analisis Polarisasi Spin melalui Spin tekstur . . . . .	122
5.6	Potensi Sistem Bulk Material $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ untuk Penerapan Piranti Spintronik . . . . .	125
<b>VI</b>	<b>KESIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>130</b>
6.1	Kesimpulan . . . . .	130
6.2	Saran . . . . .	132
<b>LAMPIRAN A</b>	<b>ANALISIS TEKSTUR SPIN DARI HOIP <math>\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3</math></b>	<b>143</b>
<b>LAMPIRAN B</b>	<b>CONTOH MASUKAN OPENMX</b>	<b>148</b>
<b>LAMPIRAN C</b>	<b>CONTOH MASUKAN FERMIS</b>	<b>152</b>
<b>LAMPIRAN D</b>	<b>SISTEM PERIODIK TABEL KIMIA</b>	<b>153</b>

## DAFTAR TABEL

3.1	Tabel Perkalian dari grup permutasi . . . . .	36
3.2	Tabel grup titik dari beberapa struktur kristal . . . . .	37
3.3	Tabel notasi Schoenflies dan Herman-Mauguin . . . . .	38
3.4	Posisi koordinat Wckoff pada grup ruang $Pm3m$ . . . . .	40
3.5	Tabel karakter untuk grup ruang kubik SC, BCC dan FCC . . . . .	41
3.6	Tabel karakter untuk grup ruang kubik SC, BCC dan FCC . . . . .	42
3.7	Rangkuman karakteristik fase struktur kristal dari HOIP . . . . .	42
4.1	Orbital atom X untuk HOIP $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ . . . . .	68
5.1	Tabel Tetapan Kisi HOIP . . . . .	79
5.2	Hasil Optimisasi Struktur Kristal bulk HOIP arah kation (011) . . . . .	84
5.3	Hasil Optimisasi Struktur Kristal bulk HOIP arah kation (101) . . . . .	85
5.4	Hasil Optimisasi Struktur Kristal bulk HOIP arah kation (111) . . . . .	85
5.5	Nilai deviasi sudut dan panjang ikatan Pb-X bulk HOIP . . . . .	86
5.6	Selisih Tenaga Total dari tiap Orientasi Kation . . . . .	88
5.7	Hasil perhitungan tenaga celah pita bulk HOIP $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ . . . . .	90
5.8	Tabel Karakteristik grup $C_s$ . . . . .	101
5.9	Perkalian langsung untuk operasi simetri grup $C_s$ . . . . .	101
5.10	Hasil operasi simetri terhadap vektor $k$ dan $\sigma$ simetri grup $C_s$ . . . . .	101
5.11	Tabel Karakteristik grup $C_{3v}$ . . . . .	105
5.12	Perkalian langsung untuk operasi simetri grup $C_{3v}$ . . . . .	105
5.13	Hasil operasi simetri grup $C_{3v}$ pada vektor <i>axial</i> dan polar . . . . .	106
5.14	Hasil perhitungan parameter fitting dengan pendekatan teori $k \cdot p$ . . . . .	109
5.15	Hasil perhitungan terdahulu untuk parameter efek SOI . . . . .	116
5.16	Hasil Perhitungan Tetapan Efek SOI Bulk HOIP . . . . .	117

## DAFTAR GAMBAR

3.1	Ilustrasi elektron bergerak pada gradien potensial di dekat inti . . . . .	20
3.2	Orientasi spin dari tiga efek SOI pada material fase padatan . . . . .	25
3.3	Representasi skematis efek gabungan Rashba-Dresselhaus SOI . . . . .	27
3.4	Struktur umum kristal perovskite $\text{ABX}_3$ . . . . .	28
3.5	Struktur ideal perovskite ( $\text{ABO}_3$ ) . . . . .	29
3.6	Wilayah Brillouin pertama tetragonal dan heksagonal $\text{BiAlO}_3$ . . . . .	30
3.7	Transisi struktur kristal dari material $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ . . . . .	32
3.8	Ilustrasi skematis sifat feroelektrik dan orientasi momen dipol . . . . .	33
3.9	Unit Sel Kisi Ruang Bravais Kubik . . . . .	34
3.10	Wilayah Brillouin untuk kisi kubik . . . . .	34
3.11	Ilustrasi skematis dari sumbu simetri dihedral $\sigma_d$ . . . . .	38
3.12	Struktur kristal kisi kubik dengan grup ruang $O_h^1$ . . . . .	39
3.13	Skema Penyelesaian Kohn-Sham . . . . .	55
4.1	Struktur Oktahedra $\text{PbX}_6$ . . . . .	66
4.2	Struktur Kristal bulk HOIP $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ . . . . .	67
4.3	Tenaga Total vs Tetapan Kisi . . . . .	70
4.4	Tampilan skematis perhitungan polarisasi spin . . . . .	73
4.5	Skema Tahapan Penelitian dan Perhitungan DFT . . . . .	76
5.1	Hasil Optimisasi Tetapan Kisi bulk HOIP $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ . . . . .	80
5.2	Hasil Optimisasi Tetapan Kisi bulk HOIP $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ . . . . .	81
5.3	Hasil Optimisasi Tetapan Kisi bulk HOIP $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$ . . . . .	82
5.4	Hasil Optimisasi struktur kristal bulk HOIP $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ . . . . .	87
5.5	Perhitungan struktur pita bulk HOIP $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ . . . . .	91
5.6	Perhitungan struktur pita bulk HOIP $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ . . . . .	92
5.7	Perhitungan struktur pita bulk HOIP $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$ . . . . .	93
5.8	Perhitungan DOS, P-DOS dan kontribusi orbital untuk $X = \text{I}$ . . . . .	96
5.9	Perhitungan DOS, P-DOS dan kontribusi orbital untuk $X = \text{Br}$ . . . . .	97
5.10	Perhitungan DOS, P-DOS dan kontribusi orbital untuk $X = \text{Cl}$ . . . . .	98
5.11	Perhitungan struktur pita $\text{PbX}_6$ untuk $X = \text{I, Br dan Cl}$ . . . . .	99
5.12	Contoh pemecahan tenaga spin Rashba isotropik . . . . .	108
5.13	Pemecahan spin anisotropik pada struktur pita di sekitar titik R . . . . .	110
5.14	Hasil rotasi struktur kristal di ruang kisi balik . . . . .	111

5.15	Perhitungan parameter Rashba pada CBM di sekitar titik $R$ . . . . .	113
5.16	Perhitungan parameter Rashba pada CBM di sekitar titik $R$ . . . . .	114
5.17	Perhitungan parameter Rashba pada CBM di sekitar titik $R$ . . . . .	115
5.18	Tekstur spin ditinjau di sekitar titik $R$ untuk bulk HOIP $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ . . . . .	119
5.19	Tekstur spin ditinjau di sekitar titik $R$ untuk bulk HOIP $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$ . . . . .	120
5.20	Hasil Tekstur Spin Bulk HOIP dari analisis simetri grup . . . . .	123
5.21	Skema SFET berbasis HOIP . . . . .	126
5.22	Skema SFET pada wilayah <i>diffusive</i> . . . . .	128
5.23	Skema SFET untuk prinsip operasi resonant <i>spin lifetime</i> transistor . . . . .	129
4.1	Tabel sistem periodik kimia untuk golongan VII-A . . . . .	153