

## DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	i
PRAKATA.....	v
DAFTAR ISI.....	vi
DAFTAR TABEL.....	viii
DAFTAR GAMBAR.....	ix
INTISARI.....	xi
ABSTRACT.....	xii
Bab I PENDAHULUAN.....	1
1.1. Latar Belakang.....	1
1.2. Rumusan Masalah.....	7
1.3. Batasan Masalah.....	7
1.4. Tujuan Penelitian.....	8
1.5. Manfaat Penelitian.....	8
Bab II TINJAUAN PUSTAKA.....	9
Bab III LANDASAN TEORI.....	17
3.1. Struktur <i>Perovskite</i> Umum.....	17
3.2. Struktur Kristal dan Kisi Balik ( <i>Reciprocal</i> ).....	18
3.3. Struktur <i>Perovskite</i> Kubik.....	21
3.4. Struktur $\text{PbTiO}_3$ dan $\text{BaTiO}_3$ .....	22
3.5. Interaksi Spin Orbit.....	24
3.6. Interaksi Spin – Orbit <i>Rashba</i> .....	27
3.7. Interaksi Spin – Orbit <i>Dresselhaus</i> .....	28
3.8. Spin – Orbit <i>Splitting</i> .....	29
3.9. <i>Persistent Spin Helix</i> .....	30
3.10. Sistem Banyak Partikel.....	31
3.11. Teori Kerapatan Fungsional (DFT).....	36
Bab IV METODE PENELITIAN.....	42
4.1 Desain dan Tahapan Penelitian.....	42
Bab V HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN.....	55

5.1.	Analisis Material $PbTiO_3$ .....	55
5.2.	Analisis Material $BaTiO_3$ .....	64
5.3.	Analisis Spin <i>Splitting</i> dan Analisis Spin Tekstur Efek Strain .....	70
5.4.	Efek <i>Strain</i> terhadap Kajian tetragonalitas.....	75
	Bab VI KESIMPULAN DAN SARAN.....	79
6.1.	Kesimpulan.....	79
6.2.	Saran .....	79
	DAFTAR PUSTAKA .....	80
	LAMPIRAN.....	84

## DAFTAR TABEL

Tabel 3.1 Posisi Wyckoff pada space group $Pm3m$ .....	20
Tabel 3.2 Karakter point group $O_h$ .....	20
Tabel 3.3 Posisi Wyckoff pada <i>space group</i> $P4mm$ .....	21
Tabel 3.3.4 Point Group $C_{4v}$ .....	21
Tabel 5.1 Konstanta Kisi Untuk Material Perovksite. ....	58
Tabel 5.2 Hasil Optimasi Posisi Material $\text{PbTiO}_3$ . ....	58
Tabel 5.3 Konstanta Kisi Untuk Material Perovksite. ....	66
Tabel 5.4 Hasil Optimasi Posisi Material $\text{BaTiO}_3$ . ....	66
Tabel 5.5 Referensi Nilai Struktur pita $\text{BaTiO}_3$ . ....	68
Tabel 5.6 Hasil Fitting Ekuilibrium Sistem <i>Peovskite</i> . ....	70

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 1.1 Spin tekstur yang dihasilkan dari interaksi spin orbit: (a) Rashba, (b) Dresselhaus, dan (c) persisten spin tekstur. Panah merah dan biru menunjukkan orientasi spin untuk dua sub pita yang dihasilkan dari interaksi spin orbit. ....	4
Gambar 2.1 Struktur geometri Bi/BaTiO <sub>3</sub> (001). (a) tampak atas dan (b) tampak samping Bi terhalang permukaan BaTiO <sub>3</sub> (001). ....	12
Gambar 2.2 Keadaan permukaan pada Bi/BaTiO <sub>3</sub> (001). ....	12
Gambar 2.3 Pita elektron bebas dari Rashba SOI dan <i>Splitting</i> Zeeman. ....	13
Gambar 2.4. (a). Pita interfacial spin- <i>splitting</i> tensile strain 5%. (b) Koefisien spin orbit dan momentum. ....	14
Gambar 2.5 (a) spin tekstur <i>tensile strain</i> 5% dan (b) Fermi <i>tensile strain</i> 5%....	14
Gambar 2.6 Konstanta Kisi (a dan c) dan rasio c/a sebagai fungsi Cu. ....	15
Gambar 2.7 Proyeksi pita pada komponen $\pm\sigma_y$ , sepanjang arah polarisasi +P dan polarisasi -P. ....	16
Gambar 2.8 Spin tekstur pada bidang ( $k_x, k_y$ ) saat energi sekitar +2 eV dan diproyeksikan pada (a) $\pm\sigma_y$ atau (b) $\pm\sigma_x$ . ....	16
Gambar 3.1 Struktur <i>Perovskite</i> Oksida. ....	17
Gambar 3.2 Kisi bravais dan kisi balik untuk struktur FCC. ....	19
Gambar 3.3 (a) Struktur kubik <i>perovskite</i> . (b) struktur yang mengalami disorder pada fase kubik. ....	22
Gambar 3.4 Struktur kristal kubik ABO <sub>3</sub> <i>perovskite</i> untuk tiga bidang yang berbeda: (a) permukaan (100) AO, (b) permukaan (110), dan (c) permukaan (001) dengan TiO <sub>2</sub> . ....	23
Gambar 3.5 Skema gerak relativistik elektron dan dua kerangka acuan, kerangka acuan inti atom (kiri) dan kerangka acuan elektron (kanan). ....	27
Gambar 3.6 Skema Rashba spin <i>splitting</i> yang disebabkan inversi asimetri. ....	28
Gambar 3.7 (a) Dispersi spin <i>splitting</i> permukaan efek Rashba dan (b) tekstur energi <i>splitting</i> . ....	30
Gambar 3.8 Tekstur orientasi spin dengan konstanta energi unidirectional. ....	31
Gambar 4.1 Diagram Alir Penelitian. ....	43
Gambar 4.2 Diagram Alir Perhitungan. ....	45
Gambar 4.3. Struktur Zona Brillouin Kubik. ....	50
Gambar 4.4. Struktur Zona Brillouin Tetragonal. ....	50
Gambar 4.5 Proyeksi Bentuk Spin Tekstur. ....	53
Gambar 4.6. Perhitungan Fitting Energi spin <i>Splitting</i> Rashba Bi/Ag(111) dan BiAlO <sub>3</sub> . ....	54
Gambar 5.1 Konstanta Kisi Kubik PbTiO <sub>3</sub> . ....	56
Gambar 5.2 Konstanta Kisi Tetragonal PbTiO <sub>3</sub> . ....	57

Gambar 5.3 Zona Brillouin <i>perovskite</i> (a) Kubik dan (b) Tetragonal.....	59
Gambar 5.4 Struktur Pita dan Rapat keadaan $PbTiO_3$ (a) kubik dan (b)Tetragonal. .....	61
Gambar 5.5 Struktur pita, b) Distribusi Spin Up, dan c) Distribusi Spin Down Pada Pita VBM Keadaan Ekuilibrium $PbTiO_3$ . ....	62
Gambar 5.6 Zona Brillouin Spin <i>Splitting</i> Pada Sistem $PbTiO_3$ .....	63
Gambar 5.7 Hasil Energi ( $\Delta\epsilon^2$ ) vs k Spin <i>Splitting</i> . ....	64
Gambar 5.8 Konstanta Kisi (a) Kubik dan (b) Tetragonal $BaTiO_3$ .....	65
Gambar 5.9 Struktur Pita dan Rapat keadaan $BaTiO_3$ (a) kubik dan (b)Tetragonal. .....	67
Gambar 5.10 a) Struktur pita dan Distribusi polarisasi (b) Spin Up, (c) Spin Down Pada Pita VBM Keadaan Ekuilibrium $BaTiO_3$ . ....	69
Gambar 5.11 Hasil Energi ( $\Delta\epsilon^2$ ) vs k Spin <i>Splitting</i> . ....	69
Gambar 5.12 Perbandingan (a) Struktur pita dan (b) Hasil Energi ( $\Delta\epsilon^2$ ) vs k Spin <i>Splitting</i> Efek Strain (-4%, +4%) dan ekuilibrium $PbTiO_3$ . ....	71
Gambar 5.13 Distribusi polarisasi (a) Spin Up dan (b) Spin Down Pada Pita VBM $PbTiO_3$ Yang Diberi Efek Strain.....	72
Gambar 5.14 Perbandingan (a) Struktur pita dan (b) Hasil Energi ( $\Delta\epsilon^2$ ) vs k Spin <i>Splitting</i> Efek Strain (-4%, +4%) dan ekuilibrium $BaTiO_3$ . ....	73
Gambar 5.15 Distribusi polarisasi (a) Spin Up dan (b) Spin Down Pada Pita VBM $BaTiO_3$ Yang Diberi Efek Strain.....	74
Gambar 5.16 Perubahan Parameter Rashba $PbTiO_3$ dengan efek strain. ....	75
Gambar 5.17 Perubahan Parameter Rashba $BaTiO_3$ dengan efek strain. ....	75
Gambar 5.18. Skema Tetragonalitas ( $\Delta\tau$ ) Selisih Nilai Konstanta Kisi Kubik ( $C_K$ ) Dan Tetragonal ( $C_T$ ) $PbTiO_3$ .....	76
Gambar 5.19 Perubahan Posisi Atom Ti dengan dan Tanpa Strain. ....	76
Gambar 5.20 Perubahan spin <i>splitting</i> $\Delta\tau$ $PbTiO_3$ . ....	77
Gambar 5.21 Perubahan spin <i>splitting</i> $\Delta\tau$ $BaTiO_3$ .....	77
Gambar 5.22 Perubahan $\delta z$ Diberi Efek Strain. ....	78
Gambar 5.23 Grafik struktur pita terhadap efek strain. ....	78