

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL .....	ii
HALAMAN PENGESAHAN .....	iii
PERNYATAAN .....	iv
PRAKATA .....	vii
DAFTAR ISI .....	ix
DAFTAR TABEL .....	xii
DAFTAR GAMBAR .....	xiii
DAFTAR LAMBANG .....	xvii
DAFTAR SINGKATAN .....	xx
INTISARI .....	xxii
ABSTRACT .....	xxiii
BAB I PENDAHULUAN .....	1
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	7
1.3 Batasan Masalah .....	7
1.4 Tujuan Penelitian .....	7
1.5 Kebaruan Penelitian .....	8
1.6 Manfaat Penelitian .....	8
BAB II TINJAUAN PUSTAKA .....	9
2.1 Fenomena Permukaan ZnO-wz .....	9
2.2 Fenomena Permukaan GaN-wz .....	15
BAB III LANDASAN TEORI .....	21
3.1 Struktur Kristal Wurtzite .....	21
3.2 Teorema Bloch .....	24
3.3 <i>Spin Orbit Interaction</i> .....	25
3.4 <i>Spin Orbit Splitting</i> .....	27
3.5 Efek Surface .....	30

3.6 Teori Gangguan <b>k.p</b> .....	31
3.7 <i>Thin Film</i> .....	32
BAB IV METODE PENELITIAN .....	36
4.1 Tempat dan Waktu Penelitian .....	36
4.2 Perangkat Penelitian .....	36
4.3 Metode Komputasi .....	36
4.4 Energi <i>Exchange-Correlation</i> : Pendekatan <i>Generalized Gradient Approximation</i> (GGA) .....	46
4.5 Fungsi Gelombang Coba: Orbital Berbasis <i>Pseudo-Atomic</i> .....	46
4.6 <i>Non Collinear DFT</i> .....	47
4.7 Desain dan Tahapan Penelitian .....	49
BAB V PEMBAHASAN .....	58
5.1 Hasil Perhitungan Struktur Wurtzite (ZnO dan GaN) Sistem <i>Bulk</i> arah <i>Polar</i> [0001] .....	58
5.2 Hasil Perhitungan Struktur Wurtzite (ZnO dan GaN) <i>Non Polar</i> [10 $\bar{1}$ 0].....	64
5.3 Hasil Perhitungan Pengaruh Ketebalan <i>Thin Film</i> Struktur Wurtzite (ZnO dan GaN) pada Keadaan <i>Surface Non Polar</i> [10 $\bar{1}$ 0] .....	67
5.4 Analisis <i>Rashba Spin Splitting</i> Melalui Elektron Bebas dan Teori Grup Simetri .....	71
BAB VI KESIMPULAN .....	80
6.1 Simpulan .....	80
6.2 Saran .....	81
DAFTAR PUSTAKA	

LAMPIRAN 1 Pembuktian Efek Rashba .....	88
LAMPIRAN 2 Penurunan Energi Spin Splitting untuk Efek Rashba .....	89
LAMPIRAN 3 Penurunan Fungsi Gelombang akibat Efek Rashba .....	91
LAMPIRAN 4 Optimasi Parameter Kisi <i>Thin Film</i> Struktur wurtzite (ZnO dan GaN) <i>surface non polar</i> $[10\bar{1}0]$ .....	94
LAMPIRAN 5 Struktur Elektronik pada Daerah VBM <i>Thin Film</i> Struktur wurtzite (ZnO dan GaN) <i>surface</i> <i>non polar</i> $[10\bar{1}0]$ .....	96
LAMPIRAN 6 Bandstructure <i>Thin Film</i> Struktur wurtzite (ZnO dan GaN) <i>surface non polar</i> $[10\bar{1}0]$ .....	98

## DAFTAR TABEL

Tabel 3.1 Sistem Periodik unsur Material ZnO dan GaN .....	21
Tabel 3.2 Tabel karakter point grup $C_{6v}$ .....	23
Tabel 5.1 Hasil Perhitungan Parameter Kisi pada Struktur <i>Wurtzite</i> (ZnO dan GaN) dengan Hasil Eksperimen dan Perhitungan Sebelumnya .....	60
Tabel 5.2 Hasil Perhitungan Parameter internal u Material <i>Wurtzite</i> (ZnO dan GaN) .....	62
Tabel 5.3 Posisi Atom yang Stabil untuk Struktur <i>Wurtzite</i> (ZnO dan GaN) Sistem <i>Bulk</i> Arah Polar [0001] .....	62
Tabel 5.4 Posisi Atom yang Stabil untuk Struktur <i>Wurtzite</i> (ZnO dan GaN) sistem <i>bulk</i> arah $[10\bar{1}0]$ .....	65
Tabel 5.5 Tabel Karakter dari $C_s$ .....	74
Tabel 5.6 Tabel Transformasi Arah .....	75
Tabel 5.7 Hasil Konversi Transformasi dari Vektor Gelombang $\bar{k}$ .....	75
Tabel 5.8 Hasil Konversi Transformasi dari <i>Matrix</i> Pauli $\bar{\sigma}$ .....	76
Tabel 5.9 <i>Diract Product Group</i> $C_s$ .....	76

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 1.1 Fenomena yang muncul akibat pengaruh <i>Spin Orbit Interaction</i> (SOI) (diambil dari Manchon, A., dkk. 2015) .....	2
Gambar 2.1 Spektrum ARPES sepanjang dua sumbu simetri tinggi sekitar $\Gamma$ - X pada ZnO $[10\bar{1}0]$ yang teradsorpsi oleh hidrogen, methanol dan air (diambil dari Ozawa, Kenichi dan Kazuhiko Masc, 2010) .....	9
Gambar 2.2 Struktur pita (a) <i>bandstructure bulk</i> dan permukaan(b) VBM arah Y - $\Gamma$ - X (diambil dari Absor MAU., dkk. 2015) .....	10
Gambar 2.3 Spektrum ARPES untuk permukaan ZnO $[10\bar{1}0]$ $h\nu = 65$ eV pada 13K. (a) Daerah sekitar $\Gamma$ - X <sup>-</sup> , intensitas kelengkungan dari permukaan Fermi (b) permukaan <i>zona Brillouin</i> (diambil dari Yukawa, R. , dkk. 2016) .....	11
Gambar 2.4 Perhitungan struktur elektronik (a) $[(\text{ZnO})_{24}]_5:\text{Bi Zn}$ , (b) $[(\text{ZnO})_{24}]_5:\text{Sb Zn}$ (c) $[(\text{ZnO})_{24}]_5:\text{Tl Zn}$ dan (d) $[(\text{ZnO})_{24}]_5:\text{Au Zn}$ (diambil dari Aras, Mahmet., dkk. 2017) .....	12
Gambar 2.5 Hasil pengukuran dengan ARPES (a) dan (b) Intensitas permukaan ZnO (0001) sepanjang dua sumbu simetri (c) Permukaan fermi di pusat $k_x=0$ dan $k_y = 2.26 \text{ \AA}$ pada energi ikat 40 meV (diambil dari Silva, W.S., 2018) .....	14

- Gambar 2.6 Struktur elektronik GaN-wz. Struktur pita dengan DFT-PBE di sepanjang arah -X (garis hitam) dan kerapatan total *density of state* (DOS) (warna abu-abu gelap) dan *partial density of states* (PDOS), atom Ga (merah) dan atom N (hijau) bagian kiri untuk permukaan 16 *monolayer* sementara bagian kanan 48 *monolayer*.  
(diambil dari Landmann, M., dkk, 2015) ..... 15
- Gambar 2.7 Spektrum hasil pengukuran dengan menggunakan XPS MoS<sub>2</sub>/GaN pada  $h\nu = 340$  eV (b) Pengukuran ARPES pada GaN di  $h\nu = 50$  eV di sekitar titik gamma pada Brillouin zone (diambil dari Henck, Hugo., dkk, 2017) .....17
- Gambar 2.8 Struktur pita yang dihitung untuk struktur NM-p ( $1 \times 1$ ) dari (a) GaN  $[10\bar{1}0]$ -1H dan (b) ZnO  $[10\bar{1}0]$  -1H. Pita-pita diproyeksikan ke orbital s dan pz dari atom permukaan Ga (Zn) juga ditampilkan dengan lingkaran yang jari-jarinya sebanding dengan besarnya dan PDOS yang diproyeksikan ke orbital Ga dan N (atau Zn dan O) yang bersesuaian (diambil dari Kang, Yoon-Gu., dkk, 2017) .....18
- Gambar 2.9 Hasil pengukuran ARPES (a)  $h\nu = 62$  eV dan  $h\nu = 80$  eV yang diukur sepanjang X-G-X (diambil dari Franz, Martin., dkk, 2019) ..... 19
- Gambar 3.1 Skema struktur (i) *rocksalt* (ii) *zinc blende* (iii) *wurtzite* (diambil dari Ozgur dkk. 2005) ..... 22
- Gambar 3.2 Skema (i) struktur kristal *wurtzite* (ii) *BZ hexagonal*..... 22
- Gambar 3.3 Pergerakan relativistik elektron pada dua kerangka acuan yang berbeda ..... 25

Gambar 3.4 Skema representasi dispersi <i>splitting band</i> (i) pemisahan SIA dan BIA (ii) SIA atau BIA 2D (iii) Energi ( $\epsilon$ ) sebagai fungsi $k_x$ dan $k_y$ pada SIA (iv) Energi ( $\epsilon$ ) sebagai fungsi $k_x$ dan $k_y$ pada BIA (v) keadaan untuk SIA=BIA (vi) struktur pita 2D dengan k-linear untuk simetri $C_{2v}$ untuk SIA=BIA (diambil dari Sergey D. Ganichev dan Leonid E. Golub, 2014) .....	29
Gambar 3.5 <i>Bandstructure</i> dan konversi spin pada keadaan spin terpolarisasi 2D, dari permukaan elektron 2D TI (diambil dari A. Soumyanarayanan dkk, 2016) .....	30
Gambar 3.6 Sumur Potensial persegi yang dibatasi oleh dinding .....	32
Gambar 3.7 Fungsi gelombang dan peluang densitas partikel yang dibatasi oleh dinding (diambil dari (Beiser, 2003)) .....	35
Gambar 4.1 Diagram Alir SCF untuk menyelesaikan persamaan Kohn Sham .....	45
Gambar 4.2 Skema Tahapan Penelitian .....	49
Gambar 4.3 Skema Tahapan Komputasional .....	50
Gambar 4.4 Pemodelan sistem <i>bulk</i> dalam struktur <i>wurtzite</i> .....	52
Gambar 4.5 Hasil <i>Fitting</i> energi total dengan parameter kisi material <i>bulk</i> Ga .....	53
Gambar 5.1 Grafik plot energi total versus parameter kisi yang difitting dengan persamaan Birch Murnaghan (a) dan (b) ZnO-wz (c) dan (d) GaN-wz .....	58
Gambar 5.2 Grafik energi versus parameter c/a (a) ZnO-wz (b) GaN-wz .....	59
Gambar 5.3 Grafik energi versus parameter u (a) ZnO-wz (b) GaN-wz .....	61
Gambar 5.4 Hasil Perhitungan Struktur Elektronik ZnO-wz sistem <i>bulk</i> [0001] (a) ZnO-wz (b) GaN-wz .....	63

Gambar 5.5 Visualisasi stuktur wurtzite (ZnO dan GaN) (a) <i>Brilouin zone non polar</i> $[10\bar{1}0]$ (b) representasi <i>real space</i> sistem <i>surface non polar</i> $[10\bar{1}0]$ .....	65
Gambar 5.6 Hasil perhitungan struktur elektronik struktur wurtzite non polar $[10\bar{1}0]$ dengan SOI dan tanpa SOI (a) ZnO-wz (b) GaN-wz .....	66
Gambar 5.7 Konstruksi posisi atom struktur wurtzite sistem <i>surface non polar</i> $[10\bar{1}0]$ dari dua hingga sepuluh bilayer (N) .....	67
Gambar 5.8 Representasi Struktur elektronik struktur wurtzite daerah VBM pada 4 dan 10 bilayer dengan pengaruh SOI dan tanpa SOI (a) ZnO-wz (b) GaN-wz .....	68
Gambar 5.9 <i>Spin splitting</i> sekitar VBM di $\Gamma$ point (a) ZnO-wz (b) GaN-wz .....	69
Gambar 5.10 <i>Unfolding thin film</i> struktur wurtzite pada delapan bilayer (a) ZnO-wz (b) GaN-wz .....	70
Gambar 5.11 <i>Rashba Spin Splitting</i> di daerah $\Gamma$ point .....	71
Gambar 5.12 Grafik hubungan antara jumlah bilayer (N) dan parameter kisi (a) N vs parameter a (Å) (b) N vs parameter kisi c (Å) (c) N vs energi Gap (eV) (d) N vs Rashba spin Splitting ( $\alpha$ ) .	72
Gambar 5.13 Struktur wurtzite (ZnO dan GaN) (a) arah <i>polar</i> $[0001]$ grup simetri $C_{6v}$ (b) <i>surface non polar</i> $[10\bar{1}0]$ grup simetri $C_s$ .....	74
Gambar 5.14 Koordinat $\vec{k}_x$ dan $\vec{k}_y$ pada <i>Brilouin Zone</i> struktur wurtzite (ZnO dan GaN) <i>Non Polar</i> $[10\bar{1}0]$ .....	77