



## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN JUDUL .....</b>	<b>i</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN .....</b>	<b>ii</b>
<b>HALAMAN PERNYATAAN .....</b>	<b>iii</b>
<b>HALAMAN PERSEMBAHAN .....</b>	<b>iv</b>
<b>PRAKATA.....</b>	<b>v</b>
<b>DAFTAR ISI .....</b>	<b>vii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR .....</b>	<b>x</b>
<b>DAFTAR TABEL.....</b>	<b>xii</b>
<b>INTI SARI.....</b>	<b>xiii</b>
<b>I PENDAHULUAN .....</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Latar Belakang .....</b>	<b>1</b>
1.2 Rumusan Masalah Penelitian .....	4
1.3 Batasan Masalah .....	5
1.4 Tujuan Penelitian .....	5
1.2 Manfaat Penelitian .....	5
<b>II TINJAUAN PUSTAKA .....</b>	<b>6</b>
<b>III LANDASAN TEORI.....</b>	<b>11</b>
3.1 <i>Spin Orbit Interaction</i> .....	11
3.1.1 <i>Dresselhaus Spin Orbit Interaction</i> .....	15
3.1.2 <i>Rashba Spin Orbit Interaction</i> .....	16
3.1.3 <i>Spin-Orbit Splitting Dari Efek Rashba-Dresselhaus</i> .....	17
3.1.4 <i>Persistent Spin Helix</i> .....	19
3.2 Material Perovskite .....	21
3.2.1 Inorganik Perovskite Oksida ABO <sub>3</sub> .....	22



3.2.2 Struktur kristal BiInO <sub>3</sub> .....	22
3.3 <i>Density Functional Theory</i> .....	24
3.3.1 Teorema Sistem Partikel Banyak .....	24
3.3.2 Teorema Hohenberg-Kohn .....	25
3.3.3 Pendekatan Kohn-Sham .....	26
3.3.4 <i>Energy Exchange-Correlation</i> : Pendekatan Generalized Gradient Approximation .....	27
<b>IV METODE PENELITIAN .....</b>	<b>29</b>
4.1 Implementasi DFT .....	29
4.1.1 <i>Pseudo Potential Norm--Conserving</i> .....	29
4.1.2 <i>Pseudo Atomic Basis Orbital</i> .....	30
4.1.3 <i>Non-Collinear DFT</i> .....	31
4.2 Teori Gangguan $k \cdot p$ .....	33
4.3 Tempat dan Waktu Penelitian .....	36
4.4 Alat dan Bahan.....	36
4.4.1 Perangkat Keras .....	36
4.4.2 Perangkat Lunak .....	36
4.5 Tahapan Penelitian .....	37
4.5.1 Studi Litaratur.....	37
4.5.2 Perhitungan Komputasi.....	37
4.5.3 Analisa Data.....	42
<b>V HASIL DAN PEMBAHASAN.....</b>	<b>44</b>
5.1 Hasil Optimasi Parameter Kisi Material BiInO <sub>3</sub> .....	44
5.2 Hasil Optimasi Geometri Struktur Kristal .....	47
5.3 Hasil Perhitungan Struktur Elektronik .....	50
5.3.1 Hasil Perhitungan Struktur Elektronik BiInO <sub>3</sub> tanpa efek SOI .....	50
5.3.2 Hasil Perhitungan Struktur Elektronik BiInO <sub>3</sub> dengan efek SOI .....	53
5.4 Analisis Spin Splitting Menggunakan Teori Grup dan Gangguan $k \cdot p$ .....	56
5.4.1 Splitting Pada Fase Tetragonal .....	56



5.4.2 Splitting Pada Fase Orthorombik .....	61
5.5 Hasil Perhitungan Parameter dan Spin Tekstur SOI .....	65
5.5.1 Perhitungan Untuk Fase Tetragonal .....	66
5.5.2 Perhitungan Untuk Fase Orthorombik .....	69
5.6 Potensi Material BiInO <sub>3</sub> Dalam Aplikasi Spintronik .....	73
<b>VI KESIMPULAN DAN SARAN.....</b>	<b>76</b>
6.1 Kesimpulan .....	76
6.2 Saran .....	76
<b>DAFTAR PUSTAKA.....</b>	<b>78</b>
<b>LAMPIRAN</b>	
A. Contoh Input OpenMX .....	83
B. Contoh Input Kalkulasi Kspin .....	87



## DAFTAR GAMBAR

1.1	Skema dari dari <i>Spin field effect transistor</i> . Gambar diambil dari Schliemann (2017) .....	2
2.1	<i>Perhitungan DFT</i> dari LaAlO <sub>3</sub> /SrTiO <sub>3</sub> beserta perbesarannya. Gambar diambil dari Zhong dkk (2011) .....	8
2.2	Perbandingan unit sel kubik, tetragonal dan orthorombik .....	10
3.1	Skema struktur pita dari efek Rashba dan Dresselhauss dan tekstur spinnya Gambar diambil dari Lechner (2012) .....	18
3.2	Permukaan fermi untuk pita tenaga PSH. Gambar diambil dari Berneving (2006) .....	19
3.3	Tekstur spin pada kondisi PSH. Gambar diambil dari Tao dkk (2018) .....	20
3.4	(a) Struktur kristal umum perovskite ABX <sub>3</sub> , (b) Unit sel perovskite di fase kubik. Gambar diambil dari De Vries (2016) .....	21
3.5	Unit sel dari perovskite BiInO <sub>3</sub> kubik. Diambil dari Behram dkk (2016) ...	23
3.6	Unit sel dari perovskite BiInO <sub>3</sub> Orthorombik. Diambil dari Tao dkk (2018) .....	23
3.7	Flowchart SCF untuk solusi persamaan Kohn-Sham .....	28
4.1	Struktur penyelesaian persamaan Kohn-Sham pada OpenMX.....	32
4.2	Skema dekomposisi komponen polarisasi spin dari struktur pita elektronik. Diambil dari Hiroki Kotaka dkk (2019).....	42
4.4	Diagram alir penelitian .....	43
5.1	Hasil optimasi kisi material BiInO <sub>3</sub> (a) kubik, (b) tetragonal dan (c) orthorombik .....	45
5.2	Struktur hasil optimasi geometri BiInO <sub>3</sub> (a) kubik, (b) tetragonal dan (c) orthorombik .....	48
5.3	Struktur elektronik tanpa SOI untuk fase (a) kubik, (b) tetragonal dan (c) orthorombik .....	52
5.4	Struktur elektronik SOI untuk fase (a) kubik, (b) tetragonal dan (c)	



orthorombik .....	54
5.5 Operasi Simetri pencerminan pada fase tetragonal disertai dengan simetri $C_2, C_4$ pada sumbu pusat .....	57
5.6 Operasi $C_{2v}$ pada struktur kristal orthorombik (a) simetri rotasi dan (b) simetri pencerminan .....	62
5.7 Skema pemecahan spin. Gambar diambil dari Zhai dkk (2017).....	65
5.8 Pemecahan anisotropic di sekitar $Z$ .....	66
5.9 Zona brillouin tetragonal. Diambil dari Setyawan dan Curtarolo (2010) ...	67
5.10 Hasil perhitungan parameter SOI fase tetragonal .....	68
5.11 Spin texture Sekitar $Z$ point fase tetragonal (a) pita atas dan (b) pita bawah .....	68
5.12 Pemecahan tenaga di sekitar $X$ Point.....	69
5.13 Zona brillouin orthorombik. Gambar diambil dari Setyawan dan Curtarolo (2010) .....	70
5.14 Hasil perhitungan parameter SOI fase orthorombik (a) untuk doublet (+) dan (b) untuk doublet (-) .....	71
5.15 Spin texture sekitar $X$ point fase orthorombik doublet $\alpha_1^{1-}$ (a) pita atas, (b) pita bawah dan doublet $\alpha_1^{1+}$ di mana (c) pita bawah, (d) pita atas .....	72
5.16 Skema operasional dari SFET .....	74



## DAFTAR TABEL

5.1 Hasil optimasi konstanta kisi perhitungan DFT dan perbandingan referensi BiInO <sub>3</sub> .....	46
5.2 Hasil optimasi posisi atom fase kubik.....	49
5.3 Hasil optimasi posisi atom fase tetragonal.....	49
5.4 Hasil optimasi posisi atom fase orthorombik.....	50
5.5 Perbandingan celah tenaga .....	51
5.6 Perbandingan celah tenaga untuk kasus SOI.....	56
5.7 Tabel karakter point group $C_{4v}$ .....	57
5.8 Perkalian langsung dari point grup $C_{4v}$ .....	57
5.9 Hasil dari operasi Simetri vektor $k$ dan $\sigma$ pada $C_{4v}$ .....	58
5.10 Tabel karakteristik $C_{2v}$ .....	61
5.11 Perkalian langsung untuk operasi simetri $C_{2v}$ .....	61
5.12 Hasil dari operasi simetri vektor $k$ dan $\sigma$ pada $C_{2v}$ .....	62