

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN JUDUL</b>	<b>ii</b>
<b>HALAMAN SURAT KETERANGAN</b>	<b>iii</b>
<b>HALAMAN PERNYATAAN</b>	<b>iv</b>
<b>HALAMAN MOTTO</b>	<b>v</b>
<b>PRAKATA</b>	<b>vi</b>
<b>DAFTAR ISI</b>	<b>vii</b>
<b>DAFTAR TABEL</b>	<b>ix</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	<b>x</b>
<b>INTISARI</b>	<b>xii</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xiii</b>
<b>BAB I. PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah Penelitian .....	5
1.3 Tujuan Penelitian.....	5
1.4 Manfaat Penelitian.....	5
<b>BAB II. TINJAUAN PUSTAKA</b>	<b>6</b>
<b>BAB III. DASAR TEORI</b>	<b>10</b>
3.1 Spin Orbit Coupling (SOC).....	10
3.1.1 Interaksi Spin Orbit pada Atom .....	10
3.1.2 Interaksi Spin Orbit pada Material Fase Padatan Non-Magnetik ...	13
3.1.3 Teori Perturbasi $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ dan Analisa Simetri .....	14
3.1.4 Efek Rashba .....	16
3.1.5 Efek Dresselhaus .....	17
3.1.6 Efek Rashba-Dresselhaus.....	18
3.1.7 Efek Persistent Spin Helix (PSH) .....	19
3.2 Material Perovskite.....	20
3.2.1 HOIP CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> .....	21
3.3 Struktur Elektronik Berdasarkan Density Functional Theory .....	23
3.3.1 Masalah Banyak Elektron .....	23
3.3.2 Pendekatan Hartree .....	25
3.3.3 Pendekatan Hartree-Fock .....	25
3.3.4 Density Functional Theory (DFT) .....	26
3.3.5 <i>Non-Collinear Density Functional Theory</i> .....	28
<b>BAB IV. METODE PENELITIAN</b>	<b>29</b>
4.1 Metode Komputasi <i>Density Functional Theory</i> .....	29
4.1.1 Potensial Semu <i>Norm Conserving</i> .....	29

4.1.1	Pseudo Atomic Orbital (PAO) .....	30
4.1.2	Tenaga Exchange-Correlation.....	30
4.2	Metode Perhitungan Spin Tekstur .....	31
4.3	Skema dan Tahapan Penelitian.....	32
4.3.1	Pemodelan Struktur Kristal .....	33
4.3.2	Pengoptimalan Struktur Geometri .....	33
4.3.3	Perhitungan Struktur Elektronik .....	35
4.3.4	Perhitungan Spin Tekstur .....	36
4.4	Implementasi Metode DFT dan Teori Perturbasi $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ .....	36
4.5	Tempat dan Waktu Penelitian .....	39
4.6	Alat dan Bahan Penelitian .....	39
<b>BAB V. HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN .....</b>		<b>40</b>
5.1	Hasil Optimisasi Parameter Tetap Kisi.....	40
5.2	Hasil Optimisasi Geometri Struktur Kristal .....	42
5.3	Hasil Perhitungan Struktur Elektronik .....	47
5.3.1	Hasil Perhitungan Struktur Elektronik Tanpa Efek SOC.....	48
5.3.2	Hasil Perhitungan Struktur Elektronik dengan Efek SOC .....	50
5.4	Analisis Simetri Grup dan Fungsi $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ <i>perturbation</i> .....	58
5.4.1	Analisis Fase Kubik .....	58
5.4.2	Analisis Fase Tetragonal .....	61
5.4.3	Analisis Fase Orthorhombik .....	63
5.5	Hasil Perhitungan Spin Tekstur.....	66
5.5.1	Hasil Perhitungan Parameter Rashba .....	66
5.5.2	Hasil Perhitungan Spin Tekstur .....	68
<b>BAB VI. KESIMPULAN DAN SARAB .....</b>		<b>71</b>
6.1	Kesimpulan.....	71
6.2	Saran .....	71
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>		<b>73</b>
<b>LAMPIRAN CONTOH MASUKAN OPENMX .....</b>		<b>80</b>

## DAFTAR TABEL

Tabel 4. 1 Unit vektor kisi kubik .....	34
Tabel 5. 1 Hasil optimisasi geometri kristal CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase kubik .....	43
Tabel 5. 2 Hasil optimisasi geometri kristal CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase kubik fase tetragonal dan orthorhombik .....	43
Tabel 5. 3 Hasil operasi simetri terhadap vektor <b><i>k</i></b> dan <b><i>σ</i></b> .....	59
Tabel 5. 4 Hasil operasi simetri terhadap vektor <b><i>k</i></b> dan <b><i>σ</i></b> .....	62
Tabel 5. 5 Hasil operasi simetri terhadap vektor <b><i>k</i></b> dan <b><i>σ</i></b> .....	65

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 1. 1 Unit sel truktur kristal CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> (a) fase kubik dan (b) tetragonal. Dengan atom Sn (hitam), I (ungu), C (cokelat), N (abu-abu), dan H (putih) (Demchenko <i>et al.</i> , 2016).....	4
Gambar 3. 1 (a) Dispersi energi dalam ( $E +$ garis merah) dan luar ( $E -$ garis biru) pada sistem dengan simetri $C2v$ menggunakan Hamiltonian Rashba-Dresselhaus (b) Skema orientasi spin pada efek Rashba murni (c) efek Dresselhaus murni (Kepenekian, 2015) .....	19
Gambar 3. 2 Orientasi spin di ruang momentum sekitar tingkat Fermi dideskripsikan dalam bentuk tekstur spin (a) efek Rashba (b) efek Dresselhaus (c) efek PSH .....	20
Gambar 3. 3 Struktur geometri HOIP CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> pada fase kubik (Bernal dan Yang, 2014).....	22
Gambar 3. 4 Tampak atas struktur kristal CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> pada fase kubik, orthorhombik, dan tetragonal (Kar and Körzdörfer, 2018).....	23
Gambar 3. 5 Skema penyelesaian persamaan Kohn-Sham melalui metode SCF. 27	
Gambar 4. 1 Perbandingan fungsi gelombang dengan potensial Coulomb (biru) dengan pseudopotensial (merah) yang saling berimpitan pada $r > rc$ .....	30
Gambar 4. 2 Zona Brillouin pertama kristal fase kubik.....	35
Gambar 4. 3 Zona Brillouin pertama kristal fase tetragonal.....	35
Gambar 4. 4 Zona Brillouin pertama kristal fase orthorhombik.....	36
Gambar 4. 5 Skema tahapan penelitian dan perhitungan komputasi DFT.....	38
Gambar 5. 1 Hasil optimisasi tetapan kisi struktur kristal CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase kubik .....	41
Gambar 5. 2 Hasil optimisasi tetapan kisi struktur kristal CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase tetragonal.....	41
Gambar 5. 3 Hasil optimisasi tetapan kisi struktur kristal CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase orthorhombik.....	42
Gambar 5. 4 Struktur kristal super sel $3 \times 3 \times 3$ CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase kubik dilihat dari bidang (a) $x - y$ (b) $x - z$ (c) $y - z$ .....	45
Gambar 5. 5 Struktur kristal super sel $2 \times 2 \times 2$ CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase tetragonal dilihat dari bidang (a) $x - z$ (b) $y - z$ (c) $x - y$ .....	46
Gambar 5. 6 Struktur kristal super sel $2 \times 2 \times 2$ CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase orthorhombik dilihat dari bidang (a) $y - z$ (b) $x - y$ (c) $x - z$ .....	47
Gambar 5. 7 Hasil perhitungan struktur elektronik bulk CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase kubik tanpa melibatkan efek SOC.....	49
Gambar 5. 8 Hasil perhitungan struktur elektronik bulk CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase tetragonal tanpa melibatkan efek SOC.....	49
Gambar 5. 9 Hasil perhitungan struktur elektronik bulk CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase orthorhombik tanpa melibatkan efek SOC.....	50
Gambar 5. 10 Hasil perhitungan struktur elektronik bulk CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase kubik dengan melibatkan efek SOC.....	52
Gambar 5. 11 Hasil perhitungan struktur elektronik bulk CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase tetragonal dengan melibatkan efek SOC.....	52

Gambar 5. 12 Hasil perhitungan struktur elektronik bulk CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase orthorhombic dengan melibatkan efek SOC .....	53
Gambar 5. 13 Transisi fase struktural yang teramati pada <i>halide perovskites</i> dimulai dari struktur kubik <b>Pm3m</b> (Kepenekian <i>et al.</i> , 2015) .....	54
Gambar 5. 14 Kontribusi orbital masing-masing atom terhadap pembentukan struktur elektronik CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase kubik .....	55
Gambar 5. 15 Kontribusi orbital masing-masing atom terhadap pembentukan struktur elektronik CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase tetragonal .....	56
Gambar 5. 16 Kontribusi orbital masing-masing atom terhadap pembentukan struktur elektronik CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> fase orthorhombik .....	57
Gambar 5. 17 Operasi simetri pada kristal fase kubik .....	59
Gambar 5. 18 Operasi pencerminan pada kristal fase tetragonal.....	61
Gambar 5. 19 Operasi simetri rotasi dan pencerminan pada fase orthorhombik..	64
Gambar 5. 20 Hasil fitting parameter Rashba untuk fase kubik pada jalur <b>R – X</b> di VBM.....	67
Gambar 5. 21 Hasil fitting parameter Rashba untuk fase tetragonal pada jalur <b>Γ – X</b> di VBM.....	67
Gambar 5. 22 Hasil fitting parameter Rashba untuk fase tetragonal pada jalur <b>Γ – Z</b> di VBM.....	68
Gambar 5. 23 Hasil fitting parameter Rashba untuk fase orthorhombik pada jalur <b>Γ – Z</b> di VBM.....	68
Gambar 5. 24 Polarisasi spin fase kubik di sekitar titik R di VBM.....	69
Gambar 5. 25 Polarisasi spin fase tetragonal di sekitar titik <b>Γ</b> pada VBM .....	69
Gambar 5. 26 Polarisasi spin pada E = 0 eV fase tetragonal .....	70
Gambar 5. 27 Polarisasi spin fase orthorhombik di sekitar titik <b>Γ</b> pada VBM.....	70