

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
SURAT KETERANGAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI.....	iii
MOTO DAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKARTA	vi
DAFTAR ISI.....	viii
DAFTAR GAMBAR.....	xi
DAFTAR TABEL	xii
INTISARI	xiii
ABSTRACT.....	xiv
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah	6
1.3 Batasan Masalah.....	6
1.4 Tujuan Penelitian.....	6
1.5 Manfaat Penelitian.....	7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	8
BAB III DASAR TEORI	13
3.1 Interaksi Spin Orbit	13
3.1.1 Interaksi spin orbit dengan pendekatan klasik.....	13
3.1.2 Interaksi spin orbit dengan pendekatan persamaan Dirac	15
3.1.3 Interaksi spin orbit pada material padatan non-magnetik.....	19
3.1.3.1 Efek Rashba.....	21
3.1.3.2 Efek Dresselhaus	23
3.2 Teori <i>k.p Perturbation</i>	24
3.3 Struktur Kristal Tiga Dimensi	27
3.3.1 Struktur kristal	27
3.3.2 Struktur kisi balik kristal	29
3.3 <i>Hybrid Organic-Inorganic Perovskites (HOIP)</i>	30
3.4 <i>Point Group</i>	33
BAB IV METODE PENELITIAN	36
4.1 Metode <i>Density Functional Theory (DFT)</i>	36

4.1.1	Persamaan Schrodinger untuk masalah banyak benda	36
4.1.1.1	Pendekatan Born-Oppenheimer.....	38
4.1.1.2	Pendekatan Hartree.....	39
4.1.1.3	Pendekatan Hartree-Fock	41
4.1.2	<i>Density Functional Theory</i> (DFT).....	42
4.1.2.1	Teorema Kohn-Hohenbergh	43
4.1.2.2	Pendekatan Kohn-Sham	44
4.1.2.3	<i>Generalized Gradient Approximation</i> (GGA)	47
4.1.3	<i>Norm-Conserving Pseudopotentials</i>	47
4.1.4	<i>Pseudo Atomic Orbitals</i> (PAO).....	50
4.1.5	<i>Non-Collinear</i> DFT	51
4.2	Tahap Penelitian dengan Menggunakan OpenMX.....	53
4.2.1	Pemodelan struktur kristal	54
4.2.2	Optimasi Geometri	56
4.2.2.1	Optimasi kisi.....	57
4.2.2.2	Optimasi posisi.....	58
4.2.3	Kalkulasi struktur elektronik	59
4.3	Alat yang Digunakan dalam Penelitian	62
4.3.1	Perangkat keras.....	62
4.3.2	Perangkat lunak	62
BAB V	HASIL DAN PEMBAHASAN	64
5.1	Hasil Optimasi Kisi CH ₃ NH ₃ SnX ₃	64
5.2	Hasil Optimasi Posisi CH ₃ NH ₃ SnX ₃	69
5.3	Hasil Kalkulasi Struktur Elektronik material CH ₃ NH ₃ SnX ₃	71
5.3.1	Struktur elektronik tanpa efek SOI.....	73
5.3.2	Struktur elektronik dengan melibatkan efek SOI	75
5.3.3	Kontribusi orbital atom	78
5.4	<i>Splitting</i> Rashba pada Material CH ₃ NH ₃ SnX ₃	82
5.4.1	Analisis simetri grup dan teori <i>k.p perturbation</i>	83
5.4.2	Hasil Perhitungan Parameter Rashba	88
5.4	Potensi Material CH ₃ NH ₃ SnX ₃ Fase Tetragonal untuk Penerapan Piranti Spintronik.....	93
BAB V	KESIMPULAN DAN SARAN	96

6.1 Kesimpulan.....	96
6.2 Saran	97
DAFTAR PUSTAKA	98
LAMPIRAN A.....	103
LAMPIRAN B	107