

DAFTAR ISI

Halaman Judul	ii
Halaman Pengesahan	iii
Halaman Persembahan	iv
Halaman Motto	v
PRAKATA	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR GAMBAR	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Perumusan Masalah	4
1.3 Tujuan Penelitian	4
1.4 Manfaat Penelitian	4
II TINJAUAN PUSTAKA	5
III LANDASAN TEORI	9
3.1 Struktur Kristal <i>Black Phosphorus</i>	9
3.2 Struktur Kristal Monolayer GaTeCl	10
3.3 <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	11
3.4 Teori Kopling Spin-Orbit dalam Kristal	21
3.4.1 Prinsip Torca Spin-Orbit Terinduksi	23
3.5 Kopling Spin-Orbit Rashba	25
3.6 Teori Gangguan k.p	26

IV	METODOLOGI PENELITIAN	29
4.1	Implementasi <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	29
4.1.1	<i>Norm-conserving Pseudo-potential</i>	30
4.1.2	Basis Orbital <i>Pseudo-atomic</i>	31
4.1.3	<i>Non-Collinear Density Functional Theory</i> (DFT)	32
4.1.4	Desain & Tahapan Penelitian	35
4.1.4.1	Desain Penelitian	35
4.1.4.2	Tahapan Penelitian	37
V	HASIL PEMBAHASAN	42
5.1	Optimasi Parameter Kisi Monolayer GaTeCl	42
5.2	Diagram Struktur Pita Elektronik GaTeCl	44
5.2.1	Diagram Struktur Pita Elektronik GaTeCl dalam Keadaan Setimbang	44
5.2.2	Proyeksi Orbital Struktur Pita Energi Monolayer GaTeCl.	45
5.2.3	Diagram Struktur Pita Elektronik GaTeCl di Bawah Penga- ruh <i>Strain</i>	47
5.3	Penurunan Hamiltonian Sistem & Analisis Kopling Spin Orbit (SOI)	51
5.4	Solusi Hamiltonian <i>Fitting</i> Parameter Kopling Spin-Orbit	56
5.4.1	<i>Fitting</i> Parameter Kopling Spin Orbit	58
5.4.2	Visualisasi Tekstur Spin Kopling Spin-orbit Monolayer Ga- TeCl di Bawah Pengaruh <i>Strain</i>	60
5.4.3	Analisis Hasil Tekstur Spin Kopling Spin-orbit Monolayer GaTeCl di Bawah Pengaruh <i>Strain</i>	63
VI	KESIMPULAN & SARAN	69
6.1	Kesimpulan	69
6.2	Saran	69
	DAFTAR PUSTAKA	70
A		74
B		75
C	Contoh <i>Input file</i> untuk Kalkulasi Parameter Kisi	76
D	Contoh <i>Input file</i> untuk Optimasi Posisi	77

E	Contoh <i>Input file</i> untuk Kalkulasi Pita Energi Dispersi	78
F	Contoh <i>Input file</i> untuk Kalkulasi Struktur Elektronik di Bawah Pengaruh <i>strain</i>	79
G	Contoh <i>Input file</i> untuk Kalkulasi Struktur Spin	80