

DAFTAR ISI

Halaman Judul	ii
Halaman Pengesahan	iii
Halaman Persembahan	iv
Halaman Motto	v
PRAKATA	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR TABEL	xi
DAFTAR GAMBAR	xiv
INTISARI	xv
ABSTRACT	xvi
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Perumusan Masalah	5
1.3 Tujuan Penelitian	6
1.4 Manfaat Penelitian	6
II TINJAUAN PUSTAKA	7
2.1 Efek SOC pada Material	7
2.2 Efek <i>Hidden Spin Polarization</i> (HSP)	9
III LANDASAN TEORI	12
3.1 Karakteristik <i>Bismuth Oxychalcogenide</i>	12
3.2 <i>Spin Orbit Coupling</i> (SOC)	14
3.2.1 Efek Rashba	16
3.2.2 Efek Dresselhaus	17
3.2.3 Pemecahan Spin (<i>Spin Splitting</i>)	18
3.2.4 <i>Persistent Spin Helix</i> (PSH)	20

3.3	Teori $k \cdot p$	21
3.4	Metode Density Functional Theory	23
3.4.1	Masalah Partikel Banyak	23
3.4.2	Teorema Hohenberg-Kohn	24
3.4.3	Pendekatan Kohn-Sham	25
3.4.4	Pseudo-Atomic Orbital	26
3.4.5	Non-Collinear DFT	27
3.4.6	Energi Exchange-Correlation: Pendekatan Generalized Gradient Approximation (GGA)	29
IV	METODOLOGI PENELITIAN	31
4.1	Lokasi Penelitian	31
4.2	Alat dan Bahan Penelitian	31
4.3	Implementasi <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	31
4.4	Desain dan Tahapan Penelitian	32
4.4.1	Perhitungan dan Optimasi Parameter Struktur Geometri	32
4.4.2	Perhitungan Struktur Elektronik	36
4.4.3	Perhitungan dan Karakterisasi Struktur Spin	36
V	HASIL DAN PEMBAHASAN	40
5.1	Sistem bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ equilibrium	40
5.1.1	Optimasi Geometri	40
5.1.2	Struktur Elektronik	43
5.2	Pengaruh Medan Listrik Luar <i>External Electric Field</i>	46
5.2.1	Optimasi Geometri $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dibawah Pengaruh Medan Listrik	46
5.2.2	Struktur Elektronik dibawah Pengaruh Medan Listrik dengan efek SOC	48
5.2.3	Analisis <i>Spin Splitting</i> Menggunakan Teori Gangguan $k \cdot p$	52
5.2.4	<i>Fitting</i> Parameter <i>Spin Orbit Coupling</i>	56
5.2.5	Hasil Visualisasi Perhitungan Tekstur Spin Bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dibawah Pengaruh Medan Listrik	58
5.3	Potensi Bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ Untuk Aplikasi Spintronik	63
VI	KESIMPULAN DAN SARAN	65
6.1	Kesimpulan	65
6.2	Saran	65

DAFTAR PUSTAKA

DAFTAR TABEL

3.1	Karakteristik grup D_{4h} dalam keadaan ortonormal	13
3.2	Karakteristik grup D_{2h} dalam keadaan ortonormal	14
5.1	Hasil perhitungan parameter kisi untuk sistem bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dan beberapa referensi parameter kisi hasil eksperimen dan hasil penelitian terdahulu	41
5.2	Hasil optimasi geometri struktur kristal sistem bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dalam keadaan ekulibrum (tanpa medan listrik)	42
5.3	Jarak antara atom Se dan atom - atom Bi disekitarnya pada keadaan ekulibrum dan keadaan diberikan medan listrik luar pada material bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$	46
5.4	Perbandingan besar kekuatan SOC yang dihasilkan pada penelitian ini dan material - material lain pada penelitian sebelumnya .	58

DAFTAR GAMBAR

1.1	Tiga tipe polarisasi spin pada kristal <i>Bulk</i> non-magnetik (a) Spin polarisasi yang lenyap pada <i>centrosymmetric</i> (b) sistem <i>non-centrosymmetric</i> dengan medan dipol lokal (c) Sistem <i>centrosymmetric</i> dengan medan dipol lokal. Gambar diambil dari Zhang, Liu, Luo, Freeman dan Zunger (2014)	3
1.2	Skema mekanisme efek HSP pada material <i>bulk centrosymmetric</i> Bi ₂ Se ₃ , LaOBiS ₂ , dan 2H–MoS ₂ yang mempunyai sepasang sektor lokal. Gambar diambil dari Liu dkk. (2015)	4
2.1	(a) Polarisasi spin pada dispersi pita konduksi sepanjang <i>k-point</i> A-L ($k_y = 0, k_z = \phi/c$) (b) Struktur spin bulk BiTel menunjukkan orientasi SOC Rashba. Gambar diambil dari Ishizaka dkk. (2011)	8
2.2	Polarisasi atom Ga pada masing - masing sektor berlawanan arah. Gambar diambil dari Absor dan Ishii (2020)	10
3.1	Struktur kristal Bi ₂ O ₂ X sistem <i>bulk</i> (a) Bi ₂ O ₂ S (b) Bi ₂ O ₂ Se (c) Bi ₂ O ₂ Te	13
3.2	Skema gerak relativistik elektron dalam dua kerangka acuan yang berbeda	15
3.3	(a) Skema ilustrasi Rashba SOC pada 2DEG, (b) dispersi energi momentum dengan energi <i>splitting</i> karena pengaruh efek Rashba. 17	
3.4	Struktur kristal zinc-blende yang tidak memiliki simetri inversi	18
3.5	Energi Spin-splitting $\epsilon(\vec{k}, \uparrow\downarrow)$ pada permukaan <i>k-space</i> dengan energi konstan untuk a) Rashba SOC b) Dresselhaus SOC c) <i>Persistent Spin Helix</i> . Gambar diambil dari Tao dan Tsymbal (2018)	19
3.6	Skema representasi spin <i>splitting</i> pada pita dispersi dan bentuk <i>k-surface</i> pada tingkatan energi konstan. (a) Rashba SOC murni, dan (b) kombinasi Rashba dan Dresselhaus SOC dengan besar spin-orbit yang sama ($\alpha_R = \beta_1$). Gambar diambil dari Absor (2015)	21

4.3	Visualisasi struktur geometri kristal bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ arah (a)[111] dengan medan listrik (E_z) searah sumbu-z dan (b) arah [100] yang menunjukkan sektor - sektor kristal α dan β	32
4.1	Diagram alir perhitungan OPENMX berbasis DFT	33
4.2	Desain tahapan - tahapan penelitian	34
4.4	Hasil <i>fitting</i> energi total dengan parameter kisi material bulk Mn dengan struktur kristal FCC. Gambar diambil dari Ozaki, dkk (2013)	35
4.5	Skema dekomposisi komponen polarisasi spin dari struktur pita elektronik	38
4.6	<i>Flowchart</i> prosedur perhitungan struktur spin	39
5.1	Hasil optimasi parameter kisi a untuk bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dengan kisi a=b (tetragonal).	41
5.2	(a,b) struktur atom dari material bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ beserta operasi simetrinya masing - masing pada bidang x-y dan y-z. Sel unit dari kristal tersebut ditandai dengan garis putus berwarna hitam pada arah x dan y. (c) Zona Brillouin pertama dari material bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$	43
5.3	Jarak antar atom - atom Bi dan atom Se pada sistem material bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$	44
5.4	Struktur pita elektronik material bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ (a)Tanpa dan dengan spin orbit coupling (SOC),proyeksi orbital masing - masing atom (b) Dengan efek SOC (c) proyeksi orbital dengan efek SOC	45
5.5	Perubahan panjang ikatan antar atom pada struktur kristal bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dibawah pengaruh medan listrik luar.	47
5.6	Struktur kristal bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dalam keadaan (a)ekuilibrium/ <i>pristine</i> , (b)Medan listrik luar 0,1 V/Å, (c)0,2 V/Å, (d)0,3 V/Å, (e)0,4 V/Å.	48
5.7	Hasil perhitungan struktur elektronik material $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ akibat pemberian medan listrik luar arah sumbu-z masing - masing sebesar (a)0,1 V/Å (b)0,2 V/Å (c)0,3 V/Å dan (d)0,4 V/Å . . .	50
5.8	Rashba <i>spin-splitting</i> ($\Delta\epsilon_R$) disekitar titik Γ pada material $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ akibat pemberian medan listrik luar arah sumbu-z masing - masing sebesar 0,1,0,2, 0,3, dan 0,4 V/Å.	51

5.9	Grafik Rashba <i>spin-splitting</i> akibat pemberian medan listrik luar arah sumbu-z masing - masing sebesar 0,1,0,2, 0,3, dan 0,4 $\text{V}/\text{\AA}$ disekitar titik Γ pada material $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$	52
5.10	Hasil <i>fitting</i> parameter SOC disekitar titik $M' - \Gamma - M$ pada material bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dibawah pengaruh medan listrik luar arah sumbu-z masing - masing sebesar (a)0,1, (b)0,2, (c)0,3, dan (e)0,4 $\text{V}/\text{\AA}$	57
5.11	Parameter SOC orde pertama (α_1) dengan linearitas kurva $Y = a + bX$ (a) dan parameter SOC orde ketiga (α_3) (a) disekitar titik $M' - \Gamma - M$ pada material bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dibawah pengaruh medan listrik luar arah sumbu-z.	57
5.12	Tektur spin kristal bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dibawah pengaruh medan listrik luar, bagian kiri menunjukkan <i>upper band</i> dan bagian kanan <i>lower band</i> (a) Medan listrik luar 0,1 $\text{V}/\text{\AA}$, (b)0,2 $\text{V}/\text{\AA}$, (c)0,3 $\text{V}/\text{\AA}$, (e)0,4 $\text{V}/\text{\AA}$	60
5.13	Struktur kristal bulk $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ dalam keadaan (a)ekuilibrium/ <i>pristine</i> , (b)Medan listrik luar 0,1 $\text{V}/\text{\AA}$, (c)0,2 $\text{V}/\text{\AA}$, (d)0,3 $\text{V}/\text{\AA}$, (e)0,4 $\text{V}/\text{\AA}$	62
5.14	Prototipe dari model piranti SFET yang diambil dari Datta dan Das (2016)	63