

**SIMULASI PENGARUH SPIN-ORBIT COUPLING PADA PEMISAHAN SUB-
BAND PITA VALENSI MATERIAL BERBASIS FILM TIPIS EMAS DAN
IMPLIKASINYA UNTUK SENSOR DETEKTOR TERMAL**



SKRIPSI

Diajukan untuk memenuhi sebagian syarat untuk memperoleh gelar sarjana sains program
studi fisika kelompok bidang kajian fisika antariksa dan energi tinggi

Oleh:

Nisfu Baina Rochman

NIM 2107072

PROGRAM STUDI FISIKA

FAKULTAS PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS PENDIDIKAN INDONESIA

2025

LEMBAR HAK CIPTA
SIMULASI PENGARUH SPIN-ORBIT COUPLING PADA PEMISAHAN
SUB-BAND PITA VALENSI MATERIAL BERBASIS FILM TIPIS EMAS
DAN IMPLIKASINYA UNTUK SENSOR DETEKTOR TERMAL

(Skripsi ini merupakan bagian dari payung penelitian Prof. Dr. Lilik Hasanah,
M.Si)

Oleh
Nisfu Baina Rochman

Diajukan untuk memenuhi sebagian syarat untuk memperoleh gelar sarjana Sains
pada Fakultas Pendidikan Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam.

© Nisfu Baina Rochman
Universitas Pendidikan Indonesia
Agustus 2025

Hak cipta dilindungi undang-undang.
Skripsi ini tidak boleh diperbanyak seluruhnya atau sebagian,
dengan dicetak ulang, difotocopy, atau cara lainnya tanpa izin dari penulis

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

Nisfu Baina Rochman

**SIMULASI PENGARUH SPIN-ORBIT COUPLING PADA PEMISAHAN
SUB-BAND PITA VALENSI MATERIAL BERBASIS FILM TIPIS EMAS
DAN IMPLIKASINYA UNTUK SENSOR DETEKTOR TERMAL**

Disetujui dan disahkan oleh:

Pembimbing I



ACC skripsi
25/8/2025

Prof. Dr. Lilik Hasanah, M.Si.

NIP. 197706162001122002

Pembimbing II



Prof. Dr. Endi Suhendi, M.Si.

NIP. 197905012003121001

Mengetahui

Ketua Program Studi Fisika



Prof. Dr. Endi Suhendi, M.Si.

NIP. 197905012003121001

PERNYATAAN BEBAS PLAGIARISME

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “**Simulasi Pengaruh Spin-Orbit Coupling Pada Pemisahan Sub-Band Pita Valensi Material Berbasis Film Tipis Emas Dan Implikasinya untuk Sensor Detektor Termal**” ini beserta seluruh isinya adalah benar-benar karya saya sendiri. Saya tidak melakukan penjiplakan atau pengutipan dengan cara-cara yang tidak sesuai dengan etika ilmu yang berlaku dalam masyarakat keilmuan. Atas pernyataan ini, saya siap menanggung resiko/sanksi apabila di kemudian hari ditemukan adanya pelanggaran etika keilmuan atau ada klaim dari pihak lain terhadap keaslian karya saya ini.

Bandung, 28 Agustus 2025

Yang membuat pernyataan,



Nisfu Baina Rochman

NIM. 2107072

KATA PENGANTAR

Alhamdulillah, Puji syukur kehadiran Tuhan Yang Maha Esa yang telah memberikan berkat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “ **Simulasi Pengaruh Spin-Orbit Coupling Pada Pemisahan Sub-Band Pita Valensi Material Berbasis Film Tipis Emas Dan Implikasinya untuk Sensor Detektor Termal**” ini dengan baik. Shalawat serta salam semoga tercurah selalu kepada tokoh dan teladan kita Nabi Muhammad SAW.

Pada kesempatan kali ini penulis mengucapkan terimakasih kepada semua pihak yang telah membantu jalannya penyusunan Skripsi ini hingga selesai. Skripsi ini telah disusun untuk memenuhi syarat memperoleh gelar Sarjana Sains, Program Studi Fisika, Fakultas Pendidikan Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam. Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih terdapat kekurangan dan jauh dari kata sempurna. Oleh karena itu, selaku penulis sangat mengharapkan sekali adanya kritik dan saran agar penulis dapat memperbaiki Skripsi ini. Akhir kata, penulis berharap semoga skripsi ini dapat memberikan manfaat dan menjadi referensi yang berguna bagi pembacanya. Terima kasih.

Bandung, 28 Agustus 2025



Penulis

Nisfu Baina Rochman

NIM 2107072

UCAPAN TERIMA KASIH

Dalam Penyelesaian Skripsi ini, penulis tidak lepas dari bantuan, bimbingan, motivasi dan semangat baik secara langsung maupun tidak langsung dari berbagai pihak. Oleh karena itu, Penulis mengucapkan terima kasih kepada:

1. Prof. Dr. Lilik Hasanah, M.Si. selaku pembimbing I yang dengan penuh rasa tanggung jawab, kesabaran dan keikhlasan sepanjang penulis mengerjakan skripsi. Ibu bukan hanya seorang pembimbing, tetapi sosok yang menginspirasi, yang meluangkan waktu dari kesibukannya untuk memberi arahan, dukungan serta dorongan yang tak ternilai harganya.
2. Prof. Dr. Endi Suhendi, M.Si., selaku pembimbing II yang dengan penuh rasa tanggung jawab, sabar memberikan arahan dan solusi dengan ikhlas ketika penulis mengalami kendala. Bapak yang selalu bertanya “mau kapan lulus?” pertanyaan itu yang memotivasi penulis untuk cepat menyelesaikan skripsinya agar cepat lulus.
3. Prof. Dr. Endi Suhendi, M.Si., selaku ketua program studi Fisika.
4. Kedua orang tua, kakak, dan keluarga besar penulis yang senantiasa memberikan doa serta dukungan sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan baik.
5. Dr. Selly Feranie, M.Si., selaku pembimbing akademik yang telah membimbing penulis selama menjadi mahasiswa.
6. Aghisna Nuthfah Anshar, S.Si selaku asisten peneliti yang selalu telaten dan menemani dalam pengerjaan skripsi ini sampai dengan selesai.
7. Teman Penelitian Hilman Fauzan yang telah membantu dan menemani selama proses penelitian dan penyusunan skripsi ini.
8. Teman Seperjuangan dan sepenelitian Ririn, Hilman, Fasya, Adi dan Diya yang selalu memberikan semangat dan saran atas keluhan yang ada.
9. Keluarga besar Fisika C 2021 selaku teman seperjuangan masa perkuliahan penulis.
10. Kepada seluruh pihak yang telah membantu dalam proses penelitian dan penulisan skripsi yang telah memberikan bantuan kecil maupun besar yang tidak dapat penulis tuliskan satu persatu.

ABSTRAK

Penelitian ini menganalisis pengaruh *spin-orbit coupling* (SOC) pada pemisahan sub-band pita valensi film tipis emas menggunakan *Density Functional Theory* (DFT) melalui perangkat lunak Quantum ESPRESSO dan JDFTx. Tujuan dari simulasi ini menentukan analisis struktur pita (*band structure*), *density of states* (DOS), dan dampak SOC terhadap sifat optik material. Simulasi dilakukan dengan membandingkan perhitungan *scalar-relativistic* (tanpa SOC) dan *fully relativistic* (dengan SOC) menggunakan pseudopotensial relativistik. Hasil yang didapatkan dalam simulasi ini menunjukkan bahwa *spin-orbit coupling* (SOC) menyebabkan pemisahan energi sub-band pita valensi yang mencapai -0,4~1,4 eV yang berkontribusi dalam pergeseran puncak absorpsi dan modifikasi celah optik. Fenomena ini berkontribusi terhadap pergeseran puncak absorpsi optik dan perubahan celah optik material. Implikasi dari modifikasi ini sangat signifikan dalam meningkatkan sensitivitas dan efisiensi deteksi pada aplikasi sensor detektor termal berbasis respons optoelektronik film tipis emas. Dengan demikian, peran SOC perlu diperhitungkan dalam perancangan material *sensor termal* presisi tinggi.

Kata Kunci: *Spin-orbit coupling*, film tipis emas, DFT, Quantum ESPRESSO, JDFTx, sifat optik

ABSTRACT

This study analyzes the effect of spin-orbit coupling (SOC) on the valence band sub-band discount of gold thin films using Density Functional Theory (DFT) through Quantum ESPRESSO and JDFTx software. The purpose of this analysis simulation is to determine the band structure (band structure), density of states (DOS), and the impact of SOC on the optical properties of the material. The simulation was carried out by calculating scalar-relativistic (without SOC) and fully relativistic (with SOC) calculations using relativistic pseudopotentials. The results obtained in this simulation indicate that spin-orbit coupling (SOC) causes a valence band sub-band energy frigival reaching -0.4~1.4 eV which contributes to the shift of the absorption peak and modification of the optical gap. This phenomenon contributes to the shift of the optical absorption peak and changes in the optical gap of the material. The implications of this modification are very significant in improving the sensitivity and detection efficiency in thermal detector sensor applications based on the optoelectronic response of gold thin films. Therefore, the role of SOC needs to be taken into account in the design of high-precision thermal sensor materials.

Keywords: *Spin-orbit coupling*, film tipis emas, DFT, Quantum ESPRESSO, JDFTx, sifat optik

DAFTAR ISI

LEMBAR HAK CIPTA	i
LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIARISME	iii
KATA PENGANTAR	iv
UCAPAN TERIMA KASIH	v
ABSTRAK	vi
ABSTRACT	vii
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL	xi
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan Penelitian	4
1.4 Batasan Masalah	4
1.5 Manfaat Penelitian	5
BAB II KAJIAN PUSTAKA	6
2.1 <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	6
2.2 Struktur Elektronik	8
2.3 <i>Density of States</i> (DOS)	10
2.4 Konsep Dasar Interaksi Spin dan Momentum Orbital	12
2.5 Detektor termal	12
BAB III METODE PENELITIAN	13
3.1 Alur Penelitian	13

3.2	Tahapan Penelitian	14
3.2.1	Menentukan DOS	14
3.2.2	Menentukan Struktur Pita Energi	15
3.2.3	Menentukan Spin-Orbit Coupling	16
3.2.4	Menentukan Konduktivitas Listrik dan Termal	17
3.3	Spesifikasi Perangkat	17
3.4	Analisis Data Hasil Simulasi	17
3.4.1	Analisis Struktur Pita Energi dan DOS Film Tipis Emas	17
3.4.2	Analisis Pengaruh SOC pada Struktur Pita Energi Film Tipis Emas	18
3.4.3	Analisis Hubungan Resistivitas, Konduktivitas Listrik dan Konduktivitas Termal Terhadap Temperatur	18
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN		20
4.1	Struktur Pita Energi (<i>band structure</i>) dan Densitas Keadaan (DOS) film tipis emas (Au)	20
4.1.1	Konvergensi Struktur dengan Kalkulasi SCF	20
4.1.2	Struktur Pita (<i>Band Structure</i>)	21
4.2	Pengaruh SOC pada Struktur Pita Energi Film Tipis Emas	28
4.3	Resistivitas, Konduktivitas Listrik, dan Konduktivitas Termal Film Tipis Emas Terhadap Temperatur	29
BAB V SIMPULAN, IMPLIKASI DAN REKOMENDASI		33
5.1	Simpulan	33
5.2	Implikasi	33
5.3	Rekomendasi	33
DAFTAR PUSTAKA		35
LAMPIRAN		40

DAFTAR GAMBAR

Gambar 3. 1 Bagan alur penelitian	13
Gambar 4.1 Hasil konvergensi energi cutwfc	21
Gambar 4.2 Hasil band structure untuk bahan Au thin film	21
Gambar 4.3 Hasil band structure untuk bahan film tipis emas jika dibandingkan dengan literatur	24
Gambar 4.4 Hasil band structure untuk bahan film tipis emas jika dibandingkan dengan emas bulk	25
Gambar 4.5 Hasil DOS film tipis emas menggunakan Quantum ESPRESSO	27
Gambar 4.6 Hasil Densiy of States of Film Tipis Emas menggunakan JDFTx	28
Gambar 4.7 Perbandingan band structure tanpa SOC dan dengan SOC	29

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1 Tabel Energi Fermi Film Tipis Emas	23
Tabel 4.2 Tabel Pita Energi Fermi Film Tipis Emas	26
Tabel 4.3 Tabel Nilai Konduktivitas Listrik dan Resistivitas Listrik terhadap Temperatur	30
Tabel 4. 4 Tabel Nilai Konduktivitas Termal terhadap Temperatur	31

DAFTAR PUSTAKA

- Barletti, L., & Abdallah, N. Ben. (2014). *Quantum transport in crystals: effective-mass theorem and $k.p$ Hamiltonians*. <https://doi.org/10.1007/s00220-011-1344-4>
- Ben Mahmoud, C., Anelli, A., Csanyi, G., & Ceriotti, M. (2020). Learning the electronic density of states in condensed matter. *Physical Review B*, *102*(23), 1–14. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.235130>
- Bowman, A. R., Rodríguez Echarri, A., Kiani, F., Iyikanat, F., Tsoulos, T. V., Cox, J. D., Sundararaman, R., García de Abajo, F. J., & Tagliabue, G. (2024). Quantum-mechanical effects in photoluminescence from thin crystalline gold films. *Light: Science and Applications*, *13*(1). <https://doi.org/10.1038/s41377-024-01408-2>
- Carnimeo, I., Affinito, F., Baroni, S., Baseggio, O., Bellentani, L., Bertossa, R., Delugas, P. D., Ruffino, F. F., Orlandini, S., Spiga, F., & Giannozzi, P. (2023). Quantum ESPRESSO: One Further Step toward the Exascale. *Journal of Chemical Theory and Computation*, *19*(20), 6992–7006. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.3c00249>
- Chiang, T. C. (2000). Photoemission studies of quantum well states in thin films. *Surface Science Reports*, *39*(7), 181–235. [https://doi.org/10.1016/S0167-5729\(00\)00006-6](https://doi.org/10.1016/S0167-5729(00)00006-6)
- Choudhary, K., & Tavazza, F. (2019). Convergence and machine learning predictions of Monkhorst-Pack k -points and plane-wave cut-off in high-throughput DFT calculations. *Computational Materials Science*, *161*(September 2018), 300–308. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.02.006>
- Cipriano, L. A., Di Liberto, G., Tosoni, S., & Pacchioni, G. (2020). Quantum confinement in group III-V semiconductor 2D nanostructures. *Nanoscale*, *12*(33), 17494–17501. <https://doi.org/10.1039/d0nr03577g>
- Coviello, V., Badocco, D., Pastore, P., Fracchia, M., Ghigna, P., Martucci, A., Forrer, D., & Amendola, V. (2024). Accurate prediction of the optical properties of nanoalloys with both plasmonic and magnetic elements. *Nature Communications*, *15*(1). <https://doi.org/10.1038/s41467-024-45137-x>
- Dash, P. P., Kabiraj, A., Mallik, G., Kumari, P., Jha, S. N., Kumar, Y., & Rath, S. (2024). Observation of doping-induced spin-orbit coupling in gold cluster assembly to carrier-tuneable semiconductors and Schottky behaviors. *Journal of Applied Physics*, *136*(16). <https://doi.org/10.1063/5.0228521>
- Disa, N. M., Malakar, H., & Abdullah, N. (2022). Dft Study on Structural Properties, Density of States and Band Structure of Monolayer & Bilayer Graphene. *Malaysian Journal of Analytical Sciences*, *26*(5), 1142–1157.

- Fiedler, L., Shah, K., Bussmann, M., & Cangi, A. (2022). Deep dive into machine learning density functional theory for materials science and chemistry. *Physical Review Materials*, 6(4), 1–22. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.6.040301>
- Fleszar, A., & Hanke, W. (2015). Two-dimensional metallicity with a large spin-orbit splitting: DFT Calculations of the atomic, electronic, and spin structures of the Au/Ge(111)-($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° surface. *Advances in Condensed Matter Physics*, 2015(February 2015). <https://doi.org/10.1155/2015/531498>
- Flores-Holguín, N., Frau, J., & Glossman-Mitnik, D. (2022). Editorial: Recent advances, new perspectives and applications of conceptual density functional theory. *Frontiers in Chemistry*, 10(September), 2021–2023. <https://doi.org/10.3389/fchem.2022.1003106>
- Hopkins, P. E., & Stewart, D. A. (2009). Contribution of d -band electrons to ballistic transport and scattering during electron-phonon nonequilibrium in nanoscale Au films using an ab initio density of states. *Journal of Applied Physics*, 106(5). <https://doi.org/10.1063/1.3211310>
- Hüger, E., Zelený, M., Káňa, T., & Sob, M. (2008). Spin-orbit coupling in low-dimensional gold. *Physica Status Solidi - Rapid Research Letters*, 2(3), 117–119. <https://doi.org/10.1002/pssr.200802040>
- Jankousky, M., Pashov, D., Larsen, R. E., Dobrosavljevic, V., van Schilfgaarde, M., & Stevanovic, V. (2025). *Effective bands and band-like electron transport in amorphous solids*. 1–17.
- Janssen, J., Makarov, E., Hickel, T., Shapeev, A. V., & Neugebauer, J. (2024). Automated optimization and uncertainty quantification of convergence parameters in plane wave density functional theory calculations. *npj Computational Materials*, 10(1). <https://doi.org/10.1038/s41524-024-01388-2>
- Jones, R. O. (2015). Density functional theory: Its origins, rise to prominence, and future. *Reviews of Modern Physics*, 87(3). <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.87.897>
- Koroteev, Y. M., Silkin, I. V., Silkin, V. M., & Chulkov, E. V. (2024). Quantum-Size Effects in Ultra-Thin Gold Films on Pt(111) Surface. *Materials*, 17(1), 1–19. <https://doi.org/10.3390/ma17010063>
- Krasnov, D. O., Khoroshavin, L. O., & D'yachkov, P. N. (2019). Spin—Orbit Coupling in Single-Walled Gold Nanotubes. *Russian Journal of Inorganic Chemistry*, 64(1), 108–113. <https://doi.org/10.1134/S0036023619010145>
- Li, Y., Bowers, J. W., Hlevyack, J. A., Lin, M. K., & Chiang, T. C. (2022). Emergent and Tunable Topological Surface States in Complementary Sb/Bi₂Te₃ and

- Bi₂Te₃/Sb Thin-Film Heterostructures. *ACS Nano*, 16(6), 9953–9959.
<https://doi.org/10.1021/acsnano.2c04639>
- Liao, C., Kasper, J. M., Jenkins, A. J., Yang, P., Batista, E. R., Frisch, M. J., & Li, X. (2023). State Interaction Linear Response Time-Dependent Density Functional Theory with Perturbative Spin-Orbit Coupling: Benchmark and Perspectives. *JACS Au*, 3(2), 358–367. <https://doi.org/10.1021/jacsau.2c00659>
- Liti, S. S. (2022). *Study on the Electronic Band Structure of the Spinel Superconductor LiTi₂O₄ GAIA DI BERARDINO*.
- Nkomo, D., Ngobe, B., Phasha, M., & Yamabe-Mitarai, Y. (2023). The SCF convergence criteria of the ab initio calculations of elastic properties of single-crystal B2 ZrPd phase. *Materials Today: Proceedings*, xxxx.
<https://doi.org/10.1016/j.matpr.2023.05.219>
- Nomura, Y., & Akashi, R. (2024). Density functional theory. *Encyclopedia of Condensed Matter Physics*, V1:867–V1:878. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-90800-9.00148-7>
- Politano, A., & Chiarello, G. (2015). The influence of electron confinement, quantum size effects, and film morphology on the dispersion and the damping of plasmonic modes in Ag and Au thin films. *Progress in Surface Science*, 90(2), 144–193.
<https://doi.org/10.1016/j.progsurf.2014.12.002>
- Ramadhan, M. T., Haryanti, M., & Sugiharto, A. (2021). Potensi Pemanfaatan Sumber Panas Pembakaran Sampah Tempurung Kelapa Sebagai Penghasil Listrik Dengan Prinsip Termoelektrik Generator. *Jurnal Teknologi Industri*, 10(1), 23–28.
- Requist, R., Sheverdyeva, P. M., Moras, P., Mahatha, S. K., Carbone, C., & Tosatti, E. (2015). Spin-orbit interaction and Dirac cones in d-orbital noble metal surface states. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 91(4), 1–10.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.045432>
- Rhim, J. W., & Yang, B. J. (2021). Singular flat bands. *Advances in Physics: X*, 6(1).
<https://doi.org/10.1080/23746149.2021.1901606>
- Rosyidi, M. F., Santoso, D. B., & Nurpulaela, L. (2020). Rancang bangun kompor biomassa penghasil energi listrik untuk mengisi baterai 12 V. *Teknika: Jurnal Sains dan Teknologi*, 16(2), 279. <https://doi.org/10.36055/tjst.v16i2.9112>
- Sheverdyeva, P. M., Requist, R., Moras, P., Mahatha, S. K., Papagno, M., Ferrari, L., Tosatti, E., & Carbone, C. (2016). Energy-momentum mapping of d-derived Au(111) states in a thin film. *Physical Review B*, 93(3), 1–7.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.035113>

- Singh, P. (2021). Density-functional theory of material design: Fundamentals and applications-I. *Oxford Open Materials Science*, 1(1).
<https://doi.org/10.1093/oxfmat/itab018>
- Slattery, S. A., Yon, J. C., & Valeev, E. F. (2024). Revisiting Artifacts of Kohn-Sham Density Functionals for Biosimulation. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 20(15), 6652–6660. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.4c00712>
- Soumyanarayanan, A., Reyren, N., Fert, A., & Panagopoulos, C. (2016). Emergent phenomena induced by spin-orbit coupling at surfaces and interfaces. *Nature*, 539(7630), 509–517. <https://doi.org/10.1038/nature19820>
- Tambunan, W., Umar, L., & Fuji, D. (2015). Pengembangan Dan Optimalisasi Elemen Peltier Sebagai Generator Termal Memanfaatkan Energi Panas Terbuang. *Komunikasi Fisika Indonesia*, 12(11), 720–726.
- Toriyama, M. Y., Ganose, A. M., Dylla, M., Anand, S., Park, J., Brod, M. K., Munro, J. M., Persson, K. A., Jain, A., & Snyder, G. J. (2022). How to analyse a density of states. *Materials Today Electronics*, 1(April), 100002.
<https://doi.org/10.1016/j.mtelec.2022.100002>
- Toriyama, M. Y., Ganose, A. M., Dylla, M., Anand, S., Park, J., Brod, M. K., Munro, J., Persson, K. A., Jain, A., & Snyder, G. J. (2021). *Comparison of the Tetrahedron Method to Smearing Methods for the Electronic Density of States*. 5–7.
- Volk, S., Yazdani, N., & Wood, V. (2020). Manipulating Electronic Structure from the Bottom-Up: Colloidal Nanocrystal-Based Semiconductors. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 11(21), 9255–9264. <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.0c01417>
- Whalley, L. D., Frost, J. M., Morgan, B. J., & Walsh, A. (2019). Impact of nonparabolic electronic band structure on the optical and transport properties of photovoltaic materials. *Physical Review B*, 99(8), 1–11.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.085207>
- Xue, X., Yu, X. N., Zhou, D. Y., Peng, C., Wang, X., Zhou, Z. B., & Wang, F. Y. (2023). Computational Experiments: Past, Present and Perspective. *Zidonghua Xuebao/Acta Automatica Sinica*, 49(2), 246–271.
<https://doi.org/10.16383/j.aas.c220092>
- Yang, B., Uphoff, M., Zhang, Y. Q., Reichert, J., Seitsonen, A. P., Bauer, A., Pfeleiderer, C., & Barth, J. V. (2021). Atomistic investigation of surface characteristics and electronic features at high-purity FeSi(110) presenting interfacial metallicity. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 118(17), 1–9. <https://doi.org/10.1073/pnas.2021203118>

- Zaccone, A. (2025). Quantum confinement theory of ultra-thin films: electronic, thermal and superconducting properties. *JPhys Materials*, 8(3), 1–16. <https://doi.org/10.1088/2515-7639/adc83f>
- Zawadzki, W. (2013). Electron dynamics in crystalline semiconductors. *Acta Physica Polonica A*, 123(1), 132–138. <https://doi.org/10.12693/APhysPolA.123.132>