

## DAFTAR ISI

<b>Halaman Judul</b>	<b>ii</b>
<b>Halaman Persetujuan</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>INTISARI</b>	<b>xiii</b>
<b>ABSTRACT</b>	<b>xiv</b>
<b>I PENDAHULUAN</b>	<b>1</b>
1.1 Latar Belakang Masalah . . . . .	1
1.2 Rumusan Masalah . . . . .	4
1.3 Tujuan Penelitian . . . . .	5
1.4 Manfaat Penelitian . . . . .	5
1.5 Batasan Masalah . . . . .	5
1.6 Sistematika Penelitian . . . . .	5
<b>II TINJAUAN PUSTAKA</b>	<b>7</b>
<b>III DASAR TEORI</b>	<b>15</b>
3.1 Tungsten Ditelluride . . . . .	15
3.2 Masalah Fundamental dalam Sistem Banyak Partikel . . . . .	16
3.3 Aproksimasi Born-Oppenheimer . . . . .	18
3.4 Aproksimasi Hartree . . . . .	20
3.5 Metode Hartree-Fock . . . . .	22
3.6 Teori Fungsional Kerapatam (DFT) . . . . .	25
3.6.1 Teorema Hohenberg-Kohn . . . . .	25
3.6.2 Kohn-Sham Self-Consistent Equation . . . . .	26
3.7 Karakteristik Topologi dari Struktur Elektronik . . . . .	27
3.8 Karakteristik sifat Transport dan Termoelektrik . . . . .	30

<b>IV METODE PENELITIAN</b>	<b>35</b>
4.1 Pemodelan Material . . . . .	35
4.2 <i>Basis Set</i> dan Pseudopotensial . . . . .	36
4.3 Potensial Exchange-Correlation . . . . .	37
4.4 Perhitungan <i>Self-Consistent Field</i> . . . . .	38
4.4.1 Optimasi Geometri . . . . .	39
4.4.2 Perhitungan <i>Band Structure</i> dan <i>Density of State</i> . . . . .	41
4.5 Diskritisasi Zona Brillouin dan <i>Berry Flux</i> Lokal (Metode Fukui-Hatsugai-Suzuki) . . . . .	41
4.6 Perhitungan Konduktivitas Hall Anomali dan Konduktivitas Nernst . .	43
4.7 Perhitungan Koefisien Seebeck . . . . .	44
4.7.1 Tahap Interpolasi . . . . .	45
4.7.2 Tahap Integrasi . . . . .	47
4.8 Alat dan Bahan Penelitian . . . . .	49
4.9 Tempat dan Waktu Penelitian . . . . .	49
4.10 Alur Penelitian . . . . .	49
<b>V HASIL DAN PEMBAHASAN</b>	<b>52</b>
5.1 Hasil Perhitungan Struktur Elektronik <i>Band Structure</i> dan <i>Density of States</i> dari $WTe_2$ . . . . .	55
5.2 Hasil Perhitungan Struktur Topologi <i>Berry Curvature</i> dari $WTe_2$ . . .	57
5.3 Hasil Perhitungan Konduktivitas Hall Anomali dan Konduktivitas Nernst Anomali dari $WTe_2$ . . . . .	60
5.4 Hasil Perhitungan Koefisien Termoelektrik Seebeck dan Nersnt dari $WTe_2$ . . . . .	62
<b>VI KESIMPULAN DAN SARAN</b>	<b>66</b>
6.1 Kesimpulan . . . . .	66
6.2 Saran . . . . .	66
<b>A Code dan Input File</b>	<b>74</b>
<b>B</b>	<b>75</b>
2.1 Elektron di dalam medan magnet $\vec{B}$ . . . . .	75
2.2 Elektron di dalam medan Berry $\vec{\Omega}$ . . . . .	75
2.3 Elektron di dalam medan Spin Orbit $\vec{\sigma} \times \vec{k}$ . . . . .	76