

DAFTAR ISI

Penyataan Bebas Plagiasi	i
Halaman Motto	ii
Prakata	iii
DAFTAR GAMBAR	vii
DAFTAR TABEL	x
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan Penelitian	3
1.4 Manfaat Penelitian.....	3
1.5 Batasan Masalah	4
1.6 Sistematika Penulisan	4
BAB II Tinjauan Pustaka	5
BAB III LANDASAN TEORI	10
3.1 Density Functional Theory (DFT)	10
3.1.1 The Many-Body problem	10
3.1.2 System of Non-Interacting Electron	11
3.1.3 Hartree Potential.....	14
3.1.4 Exchange Potential.....	15
3.1.5 Correlation Potential.....	17
3.1.6 Teorema Hohenberg-Kohn	18
3.1.7 Persamaan Kohn-Sham	18
3.2 Spin-Orbit Interaction	20
3.2.1 Pendekatan Semi-Klasik	20
3.2.2 Transisi ke Pendekatan Kuantum	21

3.3	Kemagnetan pada Zat Padat	22
3.3.1	Spin Exchange Energy	23
3.3.2	Magnetic Ordering	25
3.3.3	Magnetic Anisotropy Energy	27
3.3.4	Band Theory of Magnetism	28
3.4	Karakteristik Topologi dari Struktur Elektronik.....	30
3.4.1	Proses Adiabatik	30
3.4.2	Fase Berry	30
3.5	Karakteristik sifat Transport dan Termoelektrik	32
3.5.1	Efek Seebeck dan Peltier	32
3.5.2	Anomalous Hall Effect	33
3.5.3	Anomalous Nernst Effect	34
3.6	Monolayer Manganese Trihalides.....	35
BAB IV	METODE PENELITIAN	39
4.1	Exchange-Correlation Energy	39
4.2	Pseudopotential dan Orbital Atom Semu	40
4.3	DFT +U	42
4.4	Non-Collinear DFT.....	42
4.5	Tahapan Penelitian	44
4.5.1	Pemodelan Material	44
4.5.2	Uji Konvergensi Parameter Teknis	44
4.5.3	Optimasi Kisi dan Posisi	45
4.5.4	Perhitungan Magnetic Anisotropy Energy dan Exchange Energy.....	45
4.5.5	Kalkulasi Struktur Elektronik	47
4.5.6	Perhitungan <i>Berry Curvature</i>	47
4.5.7	Perhitungan Anomalous Hall Conductivity.....	50
4.5.8	Perhitungan <i>Anomalous Nernst Conductivity</i>	50
4.5.9	Perhitungan <i>ZT</i>	51
4.5.10	Alur Penelitian	51
4.6	Aspek Teknis Penelitian	52
4.6.1	Peralatan dan Bahan Penelitian	52
4.6.2	Tempat dan Waktu Penelitian	52
BAB V	HASIL DAN PEMBAHASAN	54
5.1	Kisi dan Geometri Teroptimsasi.....	54

5.2	Perhitungan Struktur Elektronik.....	55
5.3	Berry Curvature.....	58
5.4	Koefisien Termoelektrik	59
5.4.1	Anomalous Hall Conductivity	59
5.4.2	Anomalous Nernst Coefficient	60
5.4.3	Pure Nernst and Seebeck Coefficient	62
5.4.4	Figure of Merit	64
BAB VI	KESIMPULAN DAN SARAN	66
6.1	Kesimpulan.....	66
6.2	Saran	66
DAFTAR PUSTAKA		67