

DAFTAR ISI

PRAKATA	iv
DAFTAR ISI	v
INTISARI	viii
ABSTRACT	ix
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Perumusan Masalah	5
1.3 Batasan Masalah	6
1.4 Tujuan Penelitian	6
1.5 Manfaat Penelitian	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	7
2.1 Material Dua Dimensi (2D)	7
2.1.1 Tinjauan eksperimen	7
2.1.2 Pemodelan material 2D secara komputasi	9
2.2 <i>Magneto Crystalline Anisotropy</i> (MCA)	10
2.1.1 Tinjauan secara eksperimen	10
2.1.2 Perhitungan MCA dengan pemodelan secara komputasi	11
BAB III LANDASAN TEORI	13
3.1 Material 2D <i>Transition Metal Dichalcogenides</i> (TMDs)	13
3.2 Konsep Pita Energi	16
3.2.1 Model elektron hampir bebas (<i>nearly free electron model</i>)	16
3.2.2 Fungsi Bloch	17
3.2 Dasar Kemagnetan	17
3.2.1 Paramagnetik (<i>paramagnetism</i>) dan diamagnetik (<i>diamagnetism</i>) ...	17
3.2.2 Ferromagnetik dan Antiferromagnetik	18
3.2.3 <i>Stoner mean-field theory</i>	19
3.3 Sistem Banyak Partikel	22
3.3.1 Pendekatan <i>Born-Oppenheimer</i>	23
3.3.2 Pendekatan <i>Hartree</i>	23
3.3.3 Pendekatan <i>Hartree-Fock</i>	24

3.4 Struktur Elektronik dengan Pendekatan <i>Density-Functional Theory</i>	25
3.4.1 Teorema <i>Hohenberg-Kohn</i>	25
3.4.2 Pendekatan <i>Kohn-Sham</i>	27
3.4.3 Energi <i>Exchange-Correlation</i> : Pendekatan <i>Generalized Gradient Approximation (GGA)</i>	30
3.4.4 Fungsi Gelombang Coba: Orbital Berbasis <i>Pseudo-Atomic</i>	31
3.4.5 <i>Magnetocrystalline Anisotropy (MCA)</i>	32
BAB IV METODE PENELITIAN	36
4.1 Peralatan dan Bahan	36
4.1.1 Perangkat keras (<i>hardware</i>).....	36
4.1.2 Perangkat lunak (<i>software</i>).....	36
4.2 Prosedur Kerja dan Pengumpulan Data	37
4.2.1 Optimasi parameter kisi (\mathbf{a}).....	39
4.2.2 Optimasi geometri	42
4.2.3 Menghitung <i>magnetocrystalline anisotropy (MCA)</i>	43
4.2.4 Variasi <i>strain</i> terhadap MCA	44
4.2.3 Menghitung pita energi dan rapat keadaan (DoS)	44
4.3 Diagram Alir Penelitian	45
4.4 Metode Analisa Data.....	46
4.4.1 Analisa parameter kisi dengan persamaan keadaan <i>Birch-Murnaghan</i>	46
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN.....	48
5.1 Geometri Optimum dari Material <i>Monolayer</i> H-FeX ₂	48
5.1.1 Parameter kisi dan geometri optimum.....	48
5.2 Struktur Elektronik dari <i>Monolayer</i> H-FeX ₂	53
5.2.1 <i>Generalized Gradient Approximation (GGA)</i> dan GGA + U.....	53
5.2.2 Pengaruh <i>strain</i> terhadap struktur elektronik dari <i>monolayer</i> H-FeX ₂	56
5.2.3 Pengaruh <i>strain</i> terhadap struktur elektronik dari <i>monolayer</i> H-FeX ₂ di permukaan <i>Fermi</i>	67
5.3 <i>Magnetocrystalline Anisotropy</i> dari <i>Monolayer</i> H-FeX ₂	70
5.3.1 Pengaruh <i>strain</i> terhadap momentum sudut orbital dengan analisa menggunakan metode <i>unfolding band</i>	73

BAB VI KESIMPULAN	78
LAMPIRAN	80
LAMPIRAN A (<i>script</i> untuk masukan ‘ <i>input</i> ’ dalam program <i>OpenMX</i>)	80
LAMPIRAN B (perhitungan <i>magnetocrystalline anisotropy</i> ‘MCA’)	85
DAFTAR PUSTAKA	86