

DAFTAR ISI

Halaman Pengesahan	ii
Halaman Pernyataan	iii
Halaman Persembahan	iv
Halaman Motto	v
PRAKATA	vi
DAFTAR ISI	vii
DAFTAR GAMBAR	xiv
INTISARI	xv
ABSTRACT	xvi
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Perumusan Masalah	5
1.3 Batasan Masalah	5
1.4 Tujuan Penelitian	5
1.5 Manfaat Penelitian	6
II TINJAUAN PUSTAKA	7
III LANDASAN TEORI	12
3.1 <i>Transition Metal Dichalcogenides</i> (TMDCs)	12
3.2 Interaksi Spin-Orbit (SOI)	15
3.2.1 Efek Dresselhauss	18
3.2.2 Efek Rashba	19
3.2.3 <i>Spin-Orbit Splitting</i>	19
3.3 Teori Gangguan $\vec{k} \cdot \vec{p}$	20
3.4 Density Functional Theory	22

IV	METODOLOGI PENELITIAN	23
4.1	Waktu dan Tempat Penelitian	23
4.2	Sarana Penelitian	23
4.2.1	Perangkat Keras	23
4.2.2	Perangkat Lunak	23
4.3	Metode <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	24
4.3.1	Sistem Banyak Partikel	24
4.3.2	Teorema Hohenberg-Kohn	25
4.3.3	Pendekatan Kohn-Sham	26
4.3.4	Fungsional Energi <i>Exchange-Correlation: Generalized Gradient Approximation (GGA)</i>	27
4.3.5	<i>Pseudo-Atomic Orbital</i>	29
4.4	Tahapan Penelitian	29
4.4.1	Studi Literatur	29
4.4.2	Perhitungan Komputasi	29
4.4.3	Analisa Data	34
4.4.4	Hasil dan Kesimpulan	35
V	HASIL DAN PEMBAHASAN	36
5.1	Hasil Optimasi Parameter Kisi	36
5.1.1	Keadaan Ekuilibrium	36
5.1.2	Pemberian Efek <i>Strain</i>	38
5.2	Hasil Optimasi Posisi Atom	39
5.2.1	Keadaan Ekuilibrium	39
5.2.2	Pemberian Efek <i>Strain</i>	41
5.3	Hasil Perhitungan Struktur Elektronik dan Pita <i>Unfolding</i>	43
5.3.1	Keadaan Ekuilibrium	43
5.3.2	Pemberian Efek <i>Strain</i>	47
5.4	Analisa Efek Rashba menggunakan Teori Gangguan $\vec{k} \cdot \vec{p}$ dan Grup Simetri	50
5.5	Hasil Perhitungan <i>Spin Textures</i>	56
5.5.1	Analisa <i>Spin Textures</i>	57
5.6	Potensi Sistem untuk Divais Spintronik	59

VIKESIMPULAN DAN SARAN	62
6.1 Kesimpulan	62
6.2 Saran	62
DAFTAR PUSTAKA	63
LAMPIRAN	67