

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
LEMBAR PENGESAHAN .....	ii
PERNYATAAN.....	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN .....	iv
PRAKATA.....	vi
DAFTAR ISI.....	viii
DAFTAR TABEL.....	xi
DAFTAR GAMBAR .....	xii
DAFTAR LAMBANG .....	xv
DAFTAR SINGKATAN .....	xviii
TABEL KONVERSI SATUAN .....	xix
INTISARI.....	xx
ABSTRACT .....	xxi
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	7
1.3 Batasan Masalah.....	8
1.4 Tujuan Penelitian.....	8
1.5 Kebaharuan Penelitian.....	8
1.6 Manfaat Penelitian.....	9
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	10
2.1 Fenomena <i>Spin Splitting</i> Pada Material <i>Polar TMD Monolayer</i> .....	10
2.2 Analisa Grup Simetri <i>via</i> Hamiltonian $C_{3v}$ .....	12
2.3 Pengaruh Medan Listrik Terhadap Struktur Elektronik Material TMD .....	13

3.1 Ruang Resiprok dan $k$ Point .....	17
3.2 Persamaan <i>Bloch</i> .....	19
3.3 <i>Spin-Orbit Interaction</i> (SOI) dalam Zat Padat .....	21
3.4 <i>Spin Orbit Splitting</i> .....	25
3.5 Teori Gangguan $\bar{k} \cdot \bar{p}$ .....	27
3.6 Celah Pita Langsung ( <i>Direct</i> ) dan Tak Langsung ( <i>Indirect</i> ) dalam Material Semikonduktor .....	31
3.7 <i>Polar Transition Metal Dichalcogenides</i> (TMD) .....	32
3.8 Metode <i>non</i> -DFT .....	34
3.9 Metode DFT .....	37
3.9.1 Teorema <i>Hohenberg-Kohn</i> .....	38
3.9.2 Pendekatan Kohn-Sham.....	39
3.9.3 Energi <i>Exchange-Correlation</i> : Pendekatan <i>Generalized Gradient Approximation</i> (GGA) .....	43
3.9.4 Fungsi Gelombang Coba : <i>Linier Combination Pseudo-Atomic Orbital</i> 43	
3.9.5 <i>Non-Collinear</i> DFT .....	44
3.9.6 Perhitungan <i>Spin Texture</i> .....	47
BAB IV METODE PENELITIAN .....	49
4.1 Tempat dan Waktu Penelitian .....	49
4.2 Alat dan Bahan Penelitian .....	49
4.3 Desain dan Tahapan Penelitian .....	50
4.2.1 Studi Literatur .....	50
4.2.2 Studi Program OpenMX dan Perancangan Input Data.....	51
4.2.3 Perhitungan Komputasi.....	51



<b>BAB V</b> .....	58
5.1. Hasil Optimasi Parameter Kisi .....	58
5.2. Hasil Optimasi Posisi Atom.....	60
5.3. Hasil Perhitungan Struktur Elektronik dan <i>Density of State (DOS)</i> Tanpa Medan Listrik Luar .....	66
5.4. Hasil Perhitungan Struktur Elektronik Dengan Medan Listrik Luar ....	70
5.5. Analisis <i>Rashba Spin-Splitting</i> via Teori Gangguan $k \cdot p$ dan Grup Simetri.....	73
5.6. Hasil Perhitungan <i>Spin Texture</i> .....	84
5.7. Analisis <i>Spin Texture</i> .....	86
5.8. Potensi Sistem <i>MoXY Monolayer</i> untuk Aplikasi Spintronik .....	91
<b>BAB VI</b> .....	94
<b>DAFTAR PUSTAKA</b> .....	96
<b>LAMPIRAN A</b> .....	104
<b>LAMPIRAN B</b> .....	106
<b>LAMPIRAN C</b> .....	108