

DAFTAR ISI

Halaman Judul.....	i
Halaman Pengesahan	ii
Pernyataan	iii
Kata Pengantar	iv
Daftar Isi.....	vi
Daftar Gambar.....	viii
Daftar Tabel	x
Intisari	xi
Abstract	xii
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah.....	3
1.3 Tujuan Penelitian	3
1.4 Batasan Masalah	3
1.5 Manfaat Penelitian	4
1.6 Sistematika Penulisan	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	5
BAB III DASAR TEORI	11
3.1 <i>Transition Metal Dechalcogenides</i>	11
3.2 Teori Interaksi Spin Orbit.....	14
3.2.1 Efek Rashba	15
3.2.2 Efek Dresselhauss	15
3.2.3 Spin Orbit <i>Splitting</i>	16
3.3 Teori Peturbasi <i>k.p</i>	17
3.4 Struktur Elektron berdasarkan <i>Density Functional Theory</i>	20
3.4.1 Mekanika Kuantum Banyak Partikel.....	21
3.4.2 Teorema Hohenberg-Kohn	22
3.4.3 Pendekatan Kolin-Sham	23
3.4.4 <i>Exchange-correlation</i> pada <i>Generalized Gradient Approximation</i> (GAA).....	27
BAB IV METODE PENELITIAN	28
4.1 Waktu dan Tempat Penelitian.....	28
4.2 Peralatan dan <i>Software</i>	28

4.3 Metode Komputasi.....	29
4.3.1 <i>Norm Conserving</i> Pseudo Potential.....	29
4.3.2 Fungsi Basis pada Pseudo Atomik Lokal	32
4.3.3 Perhitungan Konstanta Kisi	33
4.4 Desain dan Tahapan Penelitian.....	34
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN.....	36
5.1 Optimasi Struktur Geometri	36
5.1.1 Optimasi Konstanta Kisi.....	36
5.1.2 Optimasi Posisi Atom.....	37
5.2 Bulk dan Transisi Stuktur Elektron pada Material MoX ₂	38
5.3 Struktur Elektronik MoX ₂ <i>monolayer</i>	41
5.4 Efek Medan Listrik pada Struktur Elektronik MoX ₂ <i>monolayer</i>	45
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN	50
6.1 Kesimpulan	50
6.2 Saran	50
DAFTAR PUSTAKA	51
LAMPIRAN A	54
LAMPIRAN B	61