

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	ii
HALAMAN PENGESAHAN	iii
HALAMAN PERNYATAAN	iv
HALAMAN MOTTO	v
PRAKATA	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR TABEL	xiv
INTISARI	xv
ABSTRACT	xvi
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan Penelitian	4
1.5 Manfaat Penelitian	4
1.6 Sistematika Penulisan	4
II TINJAUAN PUSTAKA	6

III	DASAR TEORI	10
3.1	Tungsten Diselenida	10
3.2	Interaksi Spin-Orbit	12
3.3	<i>Valleytronic</i>	14
3.4	<i>Magnetic Proximity Effect</i>	16
3.5	<i>Density Functional Theory</i>	17
3.5.1	Persamaan Schrödinger dalam <i>Many Body Problem</i>	17
3.5.2	Pendekatan Born-Oppenheimer	18
3.5.3	Pendekatan Hartree	19
3.5.4	Pendekatan Hartree-Fock	20
	Potensial <i>Exchange</i>	22
3.5.5	Teorema Hohenberg-Kohn	22
3.5.6	Persamaan Kohn-Sham	23
	Metode Iteratif <i>Self Consistent Field</i>	24
3.5.7	Potensial <i>Exchange-Correlation</i>	26
	Potensial <i>Correlation</i>	26
	<i>Generalized Gradient Approximation</i>	27
	Energi Koreksi Hubbard U	28
3.5.8	Fungsi Gelombang Orbital Pseudo-Atomik	29
3.5.9	Suku Interaksi Spin-Orbit dalam Persamaan Kohn-Sham	30
IV	METODE PENELITIAN	32
4.1	Alat dan Bahan Penelitian	32
4.1.1	Perangkat Lunak	32
4.1.2	Perangkat Keras	32
4.2	Waktu dan Tempat Penelitian	33
4.3	Langkah-Langkah Komputasi	33
4.3.1	Penentuan Sistem Atom	33
4.3.2	Optimasi Geometri	34
4.3.3	Kalkulasi Struktur Elektronik	35
4.4	Alur Penelitian	37

V HASIL DAN PEMBAHASAN	39
5.1 Optimasi Geometri WSe ₂ dan CoO	39
5.2 Konstruksi Sistem Heterointerface WSe ₂ /CoO	46
5.3 Struktur Elektronik	49
5.3.1 Monolayer WSe ₂	49
5.3.2 CoO Heksagonal	52
5.3.3 Sistem <i>Heterointerface</i> WSe ₂ /CoO	56
VI KESIMPULAN	60
6.1 Kesimpulan	60
6.2 Saran	60
DAFTAR PUSTAKA	61
LAMPIRAN	66