

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
PRAKATA.....	iv
DAFTAR GAMBAR	v
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR ISI.....	x
INTISARI	xiii
ABSTRACT	xiv
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	5
1.3 Batasan Masalah.....	5
1.4 Tujuan.....	6
1.5 Manfaat	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	7
2.1 Perkembangan Spintronik berbasis Material Non-Magnetik.....	7
2.2 Riset Material 2D TMDCs sebagai Kandidat Spintronik	8
2.3 Riset <i>Point Defect</i> pada Material TMDCs dan Karakteristik <i>Spin-valley</i>	10
BAB III DASAR TEORI	17
3.1 <i>Spin orbit Interaction</i>	17
3.1.1 Dresselhaus <i>spin orbit interaction</i>	20
3.1.2 Rashba <i>spin orbit interaction</i>	20
3.1.3 <i>Spin-orbit Splitting</i> pada Efek Rashba-Dresselhaus	21
3.1.4 Persistent Spin Texture.....	23

3.2	<i>Spin-valley Locking</i>	25
3.3	<i>Density Functional Theory</i>	26
3.3.1	<i>Many-body particle system</i>	27
3.3.2	Teorema Hohenberg-Kohn.....	28
3.3.3	Pendekatan Kohn-Sham.....	29
3.3.4	<i>Non-collinear DFT</i>	31
3.4	<i>Unfolding Band Structure</i>	33
3.5	Material Transition Metal Dichalcogenides (TMDCs)	34
3.5.1	Struktur kristal material 1H-WSe ₂ dengan <i>point defect</i>	36
BAB IV METODOLOGI.....		38
4.1	Implementasi komputasi DFT.....	38
4.1.1	<i>Norm-conserving Pseudopotential</i>	38
4.1.2	Energi <i>exchange correlation</i>	39
4.1.3	<i>Pseudo-atomic orbital</i>	40
4.2	Tempat dan waktu penelitian.....	41
4.3	Alat dan bahan.....	41
4.3.1	Perangkat lunak.....	41
4.3.2	Perangkat keras	42
4.4	Tahapan penelitian.....	42
4.4.1	Studi literatur.....	42
4.4.2	Tahapan komputasi.....	42
4.4.3	Analisis Hamiltonian pada <i>point group symmetry</i>	47
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN		51
5.1	1H-WSe ₂ <i>monolayer</i> dengan sistem <i>pristine</i>	51
5.1.1	Optimasi kisi kristal	51
5.1.2	Struktur geometri yang teroptimasi.....	53

5.1.3	Struktur Pita Elektronik.....	54
5.2	1H-WSe ₂ <i>monolayer</i> dengan sistem <i>vacancy</i> atom Se.....	59
5.2.1	Stabilitas dari struktur geometri yang teroptimasi	59
5.2.2	Struktur Pita Elektronik dan Karakteristik Spin.....	61
5.3	1H-WSe ₂ <i>monolayer</i> dengan sistem <i>vacancy</i> atom W	69
5.3.1	Stabilitas geometri yang teroptimasi	69
5.3.2	Struktur Pita Elektronik dan Karakteristik Spin.....	71
5.4	Potensi perangkat valleytronik dengan sistem <i>defect</i> pada 1H-WSe ₂ <i>monolayer</i>	74
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN.....		76
6.1	Kesimpulan	76
6.2	Saran.....	77
DAFTAR PUSTAKA.....		78
LAMPIRAN A PENURUNAN FUNGSI SPEKTRAL DAN BOBOT SPEKTRAL DALAM METODE <i>UNFOLDING</i>.....		83
LAMPIRAN B CONTOH MASUKAN PADA INPUT OpenMX.....		85