

DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPUL	ii
HALAMAN PENGESAHAN	iii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iv
HALAMAN MOTTO	v
PRAKATA	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR TABEL	xiii
INTISARI	xiv
ABSTRACT	xv
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1. Latar Belakang	1
1.2. Rumusan Masalah	4
1.3. Batasan Masalah	5
1.4. Tujuan Penelitian	5
1.5. Manfaat Penelitian	5
1.6. Sistematika Penulisan	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	7
BAB III LANDASAN TEORI	11
3.1. Tungsten Disulfida (WS ₂)	11
3.2. Spin Orbit Interaction	13
3.3. Magnetic Proximity Effect	16
3.4. Kemagnetan Pada Material	16
3.5. Teori <i>k.p</i>	18
3.6. <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	19
3.6.1. Permasalahan banyak partikel	19

3.6.2. Teorema Hohenberg-Kohn	21
3.6.3. Persamaan Kohn-Sham	22
BAB IV METODE PENELITIAN	24
4.1. Energi Exchange Corellation (XC)	24
4.2. Metode Potensial Semu	25
4.3. Orbital Pseudo-atomik	26
4.4. Peralatan dan Bahan Penelitian	26
4.4.1. Perangkat Keras	27
4.4.2. Perangkat Lunak	27
4.5. Tempat dan Waktu Penelitian	27
4.6. Tahapan Komputasi	27
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN	31
5.1. Optimasi Struktur Material	31
5.1.1. Optimasi parameter kisi	31
5.1.2. Optimasi Poisisi Atom	35
5.2. Struktur Elektronik Material	41
5.2.1. Struktur Elektronik Monolayer WS ₂	42
5.2.2. Struktur Elektronik CoO	44
5.2.3. Struktur Elektronik <i>Heterointerface</i> WS ₂ /CoO Fase Kubik	48
5.2.4. Struktur Elektronik <i>Heterointerface</i> WS ₂ /CoO dengan CoO Fase Heksagonal	50
5.3. Potensi <i>Heterointerface</i> WS ₂ /CoO Sebagai Aplikasi <i>valleytronic</i>	52
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN	55
6.1. Kesimpulan	55
6.2. Saran	56
DAFTAR PUSTAKA	57
LAMPIRAN A	63

Lampiran B.....	69
Lampiran C.....	72

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1.1 Struktur energi pada material (a) tidak ada <i>valley splitting</i> (b) saat terjadi <i>valley splitting</i>	2
Gambar 2.1 Pita Energi pada zona Brillouin (atas) dan momen orbital magnetik dari pita konduksi (bawah) dari graphene dengan inversion symmetry yang telah dirusak.....	8
Gambar 3.1 Struktur energi dari WS ₂ dalam fase bulk (kiri) dan <i>monolayer</i> (kanan).....	11
Gambar 3.2 Struktur kristal dari <i>monolayer</i> WX ₂ : (a) tampak atas (b) tampak samping, dan (c) zona Brillouin TMD.....	13
Gambar 3.3 Interaksi spin orbit pada atom.....	14
Gambar 3.4 grafik <i>density of states</i> dari material non-magnetik.....	18
Gambar 3.5 grafik <i>density of states</i> dari material magnetik.....	18
Gambar 4.1 <i>Source code</i> untuk mengatur parameter kisi material.....	28
Gambar 4.2 <i>Source code</i> mengatur posisi atom dalam <i>unit cell</i>	28
Gambar 4.3 <i>Source code</i> untuk kalkulasi <i>band structure</i> dan <i>density of states</i>	29
Gambar 4.4 Diagram alir penelitian.....	30
Gambar 5.1 Hasil optimasi parameter kisi kristal monolayer WS ₂	32
Gambar 5.2 Hasil optimasi parameter kisi kristal CoO fase kubik.....	32
Gambar 5.3 Hasil optimasi parameter kisi kristal CoO fase heksagonal.....	33
Gambar 5.4 Struktur monolayer WS ₂ hasil optimasi posisi (a) tampak samping (sumbu a), (b) tampak atas (sumbu c).....	36
Gambar 5.5 Struktur CoO fase kubik hasil optimasi posisi (a) tampak 2 dimensi (b) tampak 3 dimensi.....	37
Gambar 5.6 Hasil transformasi CoO fase kubik menjadi CoO(111) (a) tampak sumbu a (b) tampak sumbu c.....	38
Gambar 5.7 Hasil optimasi posisi CoO fase heksagonal (a) dilihat dari sumbu a (samping) (b) dilihat dari sumbu c (atas).....	38
Gambar 5.8 Model pertama heterostruktur WS ₂ /CoO(111) setelah teroptimasi	