UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Kajian Komputasional Valley Splitting pada Heterointerface WS2/CoO Menggunakan Metode Density Functional Theory
ARIF LUKMANTORO, Moh. Adhib Ulil Absor, S.Si., M.Sc., Ph.D
Universitas Gadjah Mada, 2021 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

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 *k.p* 18
3.6. *Density Functional Theory* (DFT) 19
3.6.1. Permasalahan banyak partikel 19

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Kajian Komputasional Valley Splitting pada Heterointerface WS2/CoO Menggunakan Metode Density Functional Theory
ARIF LUKMANTORO, Moh. Adhib Ulil Absor, S.Si., M.Sc., Ph.D
Universitas Gadjah Mada, 2021 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

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 WS2·····42
5.2.2. Struktur Elektronik CoO·····44
5.2.3. Struktur Elektronik *Heterointerface* WS2/CoO Fase Kubik····· 48
5.2.4. Struktur Elektronik *Heterointerface* WS2/CoO dengan CoO Fase Heksagonal····· 50
5.3. Potensi *Heterointerface* WS2/CoO Sebagai Aplikasi *valleytronic*·····52
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN·····55
6.1. Kesimpulan·····55
6.2. Saran ·····56
DAFTAR PUSTAKA ····· 57
LAMPIRAN A····· 63

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Kajian Komputasional Valley Splitting pada Heterointerface WS2/CoO Menggunakan Metode Density Functional Theory
ARIF LUKMANTORO, Moh. Adhib Ulil Absor, S.Si., M.Sc., Ph.D
Universitas Gadjah Mada, 2021 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

Lampiran B **69**
Lampiran C **72**

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Kajian Komputasional Valley Splitting pada Heterointerface WS2/CoO Menggunakan Metode Density Functional Theory
ARIF LUKMANTORO, Moh. Adhib Ulil Absor, S.Si., M.Sc., Ph.D
Universitas Gadjah Mada, 2021 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1.1 Struktur energi pada material (a) tidak ada *valley splitting* (b) saat terjadi *valley splitting*..... 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 *monolayer* (kanan)..... 11
Gambar 3.2 Struktur kristal dari *monolayer* 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 *density of states* dari material non-magnetik..... 18
Gambar 3.5 grafik *density of states* dari material magnetik..... 18
Gambar 4.1 *Source code* untuk mengatur parameter kisi material..... 28
Gambar 4.2 *Source code* mengatur posisi atom dalam *unit cell*..... 28
Gambar 4.3 *Source code* untuk kalkulasi *band structure* dan *density of states*.... 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