

INTISARI

KAJIAN KOMPUTASIONAL *VALLEY SPLITTING* PADA *HETEROINTERFACE* WS₂/CoO MENGGUNAKAN METODE *DENSITY* *FUNCTIONAL THEORY*

oleh

Arif Lukmantoro

17/409388/PA/17695

Telah dilakukan perhitungan komputasional berbasis *density functional theory* (DFT) pada *heterointerface* WS₂/CoO untuk mengetahui karakteristik elektronik dan *valleytronic* material. Perhitungan dimulai dengan melakukan optimasi struktur *monolayer* WS₂, *bulk* CoO fase kubik dan heksagonal. Setelah itu dimodelkan dua *heterointerface* yang merupakan kombinasi dari WS₂ dengan CoO fase kubik dan CoO fase heksagonal. Karakteristik elektronik dan *valleytronic* dapat diketahui dengan menghitung struktur energi, rapat keadaan, dan struktur *spin* pada material. Hasil kalkulasi menunjukkan menunjukkan adanya perubahan sifat non-magnetik ke sifat magnetik pada WS₂ ketika di-*interface*-kan dengan CoO. *Interface* CoO akan memberikan induksi magnetik kepada WS₂ sehingga menyebabkan pemecahan *time reversal symmetry* pada WS₂. Hilangnya *time reversal symmetry* menyebabkan *valley splitting* diantara *Q* dan *Q'* point pada *unoccupied state* sebesar 186 meV untuk kombinasi WS₂ dengan CoO fase kubik dan 70 meV untuk kombinasi WS₂ dengan CoO heksagonal. Hasil kalkulasi *spin texture* juga menunjukkan adanya perbedaan konfigurasi *spin* pada *Q* dan *Q'* point. Dari hasil perhitungan komputasi yang telah dilakukan menunjukkan bahwa *heterointerface* WS₂/CoO memiliki potensi untuk dijadikan material *valleytronic*.

Kata kunci : *Density Functional Theory, heterointerface* WS₂/CoO, *time reversal symmetry*, struktur elektronik, *valley splitting, valleytronic*.

ABSTRACT

COMPUTATIONAL STUDY OF VALLEY SPLITTING ON WS₂/CoO HETREOINTERFACE USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHOD

By

Arif Lukmantoro

17/409388/PA/17695

Density Functional Theory calculation has been done for calculating electronic and valleytronic properties on WS₂/CoO heterointerface. This work is started by optimizing the structure of WS₂ monolayer, cubic and heksagonal CoO bulk. The models of heterointerface have been designed from the combination of WS₂ with cubic and hexagonal CoO. Electronic and valleytronic properties can be known by band structures, density of states, and spin texture of materials. The results show that non-magnetic WS₂ became to magnetic material because interface with CoO. The presence of CoO gives magnetic induction to WS₂ which break the time reversal symmetry on WS₂. The broken time reversal symmetry causes valley splitting between Q and Q' point in the unoccupied state. In this work valley splitting on the combination WS₂ with cubic CoO and WS₂ with hexagonal CoO are 186 meV and 70 meV, respectively. Spin texture has also been calculated and the results show that spin configuration at Q and Q' have opposite sign (down and up, respectively) that indicates valley splitting on the heterointerface. This results show that WS₂/CoO heterointerface is potentially to become a valleytronic device.

Keywords : Density Functional Theory, WS₂/CoO heterointerface, time reversal symmetry, electronic properties, valley splitting, valleytronic.