



## INTISARI

**PEMODELAN TEKSTUR SPIN RUANG MOMENTUM PADA  
MATERIAL BILAYER RHENIUM DICHALCOGENIDES ( $\text{ReX}_2$ )  
MENGGUNAKAN DENSITY FUNCTIONAL THEORY**

oleh

Syahrul Ramadhani  
19/445597/PA/19421

Telah dilakukan kajian komputasi berdasarkan *density functional theory* (DFT) pada material *bilayer*  $\text{ReX}_2$  ( $X = \text{S}, \text{Se}$ ) dengan efek interaksi spin orbit (SOI) dan efek pergeseran antara satu lapisan terhadap lapisan lainnya pada  $\text{ReX}_2$ . Baik pada material *bilayer*  $\text{ReS}_2$  dan *bilayer* janus  $\text{ReSSe}$  ditemukan bahwa adanya efek Rashba yang anisotropik pada pita konduksi minimum (CBM). Besar dari parameter Rashba untuk material *bilayer*  $\text{ReS}_2$  dan *bilayer* janus  $\text{ReSSe}$  berturut-turut adalah  $\alpha_R \approx 18 - 43 \text{ meV } \text{\AA}$  dan  $1,4 \text{ meV } \text{\AA}$ . Tekstur spin dari material *bilayer*  $\text{ReS}_2$  berputar masuk ke titik  $\Gamma$ . Kemudian setelah diberi efek pergeseran ditemukan bahwa tekstur spinnya berkebalikan dari titik awalnya, menjadi berputar keluar dari titik  $\Gamma$  yang disebabkan oleh perbedaan arah polarisasi yang diinduksi oleh efek pergeseran. Tekstur spin dari material *bilayer* janus  $\text{ReSSe}$  pada posisi awal maupun ketika diberi efek pergeseran tetap berputar di sekitar titik  $\Gamma$  dikarenakan polarisasi yang disebabkan oleh struktur janusnya itu sendiri lebih kuat daripada polarisasi yang diinduksi oleh efek pergeseran. Penelitian ini menunjukkan bahwa material *bilayer*  $\text{ReS}_2$  merupakan material yang menjanjikan dalam pengembangan perangkat spintronik, sementara material *bilayer* janus  $\text{ReSSe}$  perlu dikaji lebih dalam untuk mengetahui potensi dari material ini untuk perangkat spintronik.



UNIVERSITAS  
GADJAH MADA

**PEMODELAN TEKSTUR SPIN RUANG MOMENTUM PADA MATERIAL BILAYER RHENIUM  
DICHALCOGENIDES (ReX<sub>2</sub>)  
MENGGUNAKAN DENSITY FUNCTIONAL THEORY**

Syahrul Ramadhani, Moh. Adhib Ulil Absor, S.Si., M.Sc., Ph.D.

Universitas Gadjah Mada, 2023 | Diunduh dari <http://etd.repository.ugm.ac.id/>

**Kata kunci:** bilayer ReX<sub>2</sub>, density functional theory, efek pergeseran, parameter Rashba, spintronik, tekstur spin.



UNIVERSITAS  
GADJAH MADA

PEMODELAN TEKSTUR SPIN RUANG MOMENTUM PADA MATERIAL BILAYER RHENIUM  
DICHALCOGENIDES ( $\text{ReX}_2$ )  
MENGGUNAKAN DENSITY FUNCTIONAL THEORY  
Syahrul Ramadhani, Moh. Adhib Ulil Absor, S.Si., M.Sc., Ph.D.  
Universitas Gadjah Mada, 2023 | Diunduh dari <http://etd.repository.ugm.ac.id/>

## ABSTRACT

### SPIN TEXTURE MOMENTUM SPACE MODELLING ON BILAYER MATERIAL OF RHENIUM DICHALCOGENIDES ( $\text{ReX}_2$ ) USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

by

Syahrul Ramadhani

19/445597/PA/19421

Computational studies based on density functional theory (DFT) have been conducted on  $\text{ReX}_2$  ( $X = \text{S}, \text{Se}$ ) bilayer materials with spin orbit interaction (SOI) effects and sliding effects between adjacent layer in  $\text{ReX}_2$ . In both bilayer  $\text{ReS}_2$  bilayer and bilayer jannus  $\text{ReSSe}$  materials, it is found that there is an anisotropic Rashba effect at the conduction band minimum (CBM). The magnitude of the Rashba parameter for the  $\text{ReS}_2$  bilayer and janus  $\text{ReSSe}$  bilayer materials are  $\alpha_R \approx 18 - 43 \text{ meV } \text{\AA}$  and  $1,4 \text{ meV } \text{\AA}$ , respectively. The spin texture of the bilayer  $\text{ReS}_2$  material rotates into the  $\Gamma$  point. After applying sliding effect, it is found that the spin texture is reversed from its initial point, being rotated out of the  $\Gamma$  point due to the difference in polarization direction induced by the sliding effect. The spin texture of the bilayer janus  $\text{ReSSe}$  material in the initial position as well as when sliding effect applied remains rotating around the  $\Gamma$  point because the polarization caused by the janus structure itself is stronger than the polarization induced by the sliding effect. This research shows that  $\text{ReS}_2$  bilayer material is a promising material in the development of spintronic devices, while  $\text{ReS}_2$  bilayer material is a promising material in the development of spintronic devices.

**Keyword:** bilayer  $\text{ReX}_2$ , density functional theory, Rashba parameter, sliding effect, spin texture, spintronic.