

INTISARI

EFEK *IN-PLANE SLIDING* PADA STRUKTUR ELEKTRONIK PADA *TIN SELENIDE BILAYER*: KAJIAN KOMPUTASIONAL BERBASIS *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

oleh

Muhammad ‘Abud Fathul ‘Ulum

17/412601/PA/17920

Telah dilakukan perhitungan komputasional berbasis *density functional theory* (DFT) pada *bilayer SnSe* untuk mengetahui karakteristik elektronik material. Perhitungan dimulai dengan melakukan optimasi struktur *bilayer SnSe* fase *pnma* dengan stacking AA dan AB. Setelah itu dimodelkan *bilayer SnSe* dengan menggunakan metode NEB untuk mengetahui *saddle point* material. Karakteristik elektronik dapat diketahui dengan menghitung struktur energi, rapat keadaan pada material. Hasil kalkulasi menunjukkan adanya perubahan sifat anti-feroelektrik ke sifat feroelektrik pada *bilayer SnSe* ketika dilakukan proses penggeseran pada kali ini menggunakan metode *Nudged Elastic Band* (NEB). Perlakuan penggeseran akan memberikan perubahan gaya *van der Waals* (*vdW*) kepada *bilayer SnSe* sehingga menyebabkan pemecahan *inverse symmetry* pada *bilayer SnSe*. Hilangnya *inverse symmetry* menyebabkan perubahan ikatan struktur *bilayer SnSe* berubah dan menyebabkan perubahan fase feroelektrik. Hasil kalkulasi Hasil kalkulasi DOS menunjukkan bahwa pada atom Sn kontribusi orbital P_x mendominasi pita minimal konduksi dan pada atom Se pita valensi minimal terdiri dari orbital P_x dan P_z . Dari hasil perhitungan komputasi yang telah dilakukan menunjukkan bahwa *bilayer SnSe* merupakan material dengan sifat ferroelastis yang dapat digunakan sebagai material piezoelektrik.

Kata kunci : *Density Functional Theory, bilayer SnSe, inverse symmetry, struktur elektronik, ferroelastic material.*

ABSTRACT

EFFECT OF IN-PLANE SLIDING ON ELECTRONICS STRUCTURE OF TIN SELENIDE BILAYER: DENSITY FUNCTIONAL THEORY BASED COMPUTATIONAL STUDY

By

Muhammad ‘Abud Fathul ‘Ulum

17/412601/PA/17920

Density functional theory (DFT)-based computational calculations have been performed on SnSe bilayers to determine the electronic characteristics of the material. The calculation starts by optimizing the structure of the pnma phase SnSe bilayer with AA and AB stacking. After that, the SnSe bilayer is modeled using the NEB method to determine the saddle point of the material. Electronic characteristics can be known by calculating the energy structure, density of states in the material. The calculation results show that there is a change in anti-ferroelectric properties to ferroelectric properties in the SnSe bilayer when the shifting process is carried out in this case using the Nudged Elastic Band (NEB) method. The shifting treatment will provide a change in van der Waals force to the SnSe bilayer, causing the inverse symmetry to be broken in the SnSe bilayer. The loss of inverse symmetry causes changes in the bonding structure of the SnSe bilayer to change and causes changes in the ferroelectric phase. The DOS calculation results show that at the Sn atom the contribution of P_x orbitals dominates the minimal conduction band and at the Se atom the minimal valence band consists of P_x and P_z orbitals. From the results of computational calculations that have been carried out, it shows that the SnSe bilayer is a material with ferroelastic properties that can be used as a piezoelectric material.

Keywords : Density Functional Theory, bilayer SnSe, inverse symmetry, electronic structure, ferroelastic material.