

INTISARI

Efek *Strain* terhadap *Magnetocrystalline Anisotropy* pada Material Dua Dimensi (*Monolayer*) H-FeX₂ (X= Se, Te) dengan Pendekatan *Density Functional Theory*

oleh

Afrioni Roma Rio
17/418512/PPA/05296

Belakangan ini, material dua dimensi (2D) telah menarik perhatian dikarenakan potensinya dalam penerapan perangkat *spintronic*. Khususnya pada material 2D *transition metal dichalcogenides* (TMDs), yang telah diprediksi mampu memodifikasi *magnetocrystalline anisotropy* (MCA) dengan menggunakan medan listrik eksternal. Dalam penelitian ini, menggunakan perhitungan berbasis *density functional theory* untuk menganalisa sifat kemagnetan dari *monolayer* H-FeX₂ (X=Se, Te) sebagai anggota dari material 2D TMDs. Diperoleh nilai MCA dari sistem *monolayer* H-FeSe₂ dan H-FeTe₂ secara berurutan adalah -3.46 erg/cm² dan -7.95 erg/cm², yang sudah sesuai dengan perhitungan sebelumnya. Selanjutnya sistem diberikan perlakuan *biaxial strain* untuk mencoba mengendalikan MCA. Diperoleh ternyata nilai dan arah MCA sangat sensitif saat diberikan perlakuan *strain*. Hal ini menunjukkan bahwa *strain* dapat membalikkan konfigurasi momen magnetik dari arah sejajar terhadap bidang menjadi tegak lurus terhadap bidang. Sehingga dapat disimpulkan bahwa *strain* memiliki peranan yang penting untuk pengendalian konfigurasi magnetik spin, yang berguna dalam pembalikan momen magnet untuk perangkat *spintronic*.

Kata kunci: Material 2D, *Transition Metal Dichalcogenides* (TMDs), *Magnetocrystalline anisotropy* (MCA), *Density Functional Theory* (DFT)

ABSTRACT

Strain Effect to Magnetocrystalline Anisotropy in a Monolayer H-FeX₂ (X=Se, Te): First-Principles Density-Functional Study

by

Afrioni Roma Rio
17/418512/PPA/05296

Recently, two-dimensional (2D) materials have attracted much attention due to its potential application in spintronic devices. In particular, 2D transition metal dichalcogenides (TMDs) has been predicted to show sizeable magnetocrystalline anisotropy (MCA), which is controllable under the influence of external electric field. In this study, we report density-functional theory calculations of the magnetic properties of monolayer H-FeX₂ (X=Se, Te) as a new member of the 2D TMDs materials. We find that the calculated values of the MCA of H-FeSe₂ and H-FeTe₂ are -3.46 erg/cm² and -7.95 erg/cm², respectively, which are in good agreement with previous calculation. We then introduce biaxial strain to modulate the MCA. We find that strain sensitively controlled the sign and magnitude of the MCA. This indicates that strain can switch the magnetic moment configuration from the in-plane to out-of-plane directions. These results suggest that strain plays an important role to modulate spin magnetic configuration, which is important for switching spintronics devices.

Keyword: 2D Materials, Transition Metal Dichalcogenides, Magnetocrystalline Anisotropy, Density Functional Theory