UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Efek Polarity pada Struktur Elektronik Molybdenum Dichalcogenides MoXY (X, Y= S, Se): Kajian Komputasional berbasis Density Functional Theory dan Analisa dengan Teori Gangguan k ÃÆ'ï¿½Ãâ€šÂ· p
SALSABILA AMANDA P, Moh. Adhib Ulil Absor, M.Sc., Ph.D; Dr. Eng. Edi Suharyadi
Universitas Gadjah Mada, 2020 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

INTISARI

Efek *Polarity* pada Struktur Elektronik *Molybdenum Dichalcogenides* MoXY (X, Y= S, Se): Kajian Komputasional berbasis *Density Functional Theory* dan Analisa dengan Teori Gangguan $\vec{k} \cdot \vec{p}$

Oleh

Salsabila Amanda Putri
18/433757/PPA/05572

Telah dilakukan kajian komputasi berbasis *Density Functional Theory* (DFT) untuk mengamati struktur elektronik material *monolayer Transition Metal Dichalcogenides* (TMDCs) Molybdenum Dichalcogenides $MoXY$ $(X, Y = S, Se)$ pada zona Brillouin pertama dengan merusak *mirror symmetry* kristal melalui pemberian efek *polarity*. Pada penelitian ini ditemukan bahwa pemberian efek *polarity* dapat memunculkan Rashba *spin-splitting* di sekitar Γ *point*. Sifat anisotropik Rashba *spin-splitting* pada sistem berhasil dianalisa dengan menggunakan teori gangguan $\vec{k} \cdot \vec{p}$ dan grup simetri hingga orde ketiga, serta melalui analisa *spin textures* dapat diketahui bahwa arah orientasi spin bersifat *in-plane*. Selain itu, parameter Rashba pada sistem monolayer polar $MoSSe$ yang bersifat *tunable* dengan pemberian efek *strain* menunjukkan bahwa sistem berpotensi untuk digunakan sebagai material semikonduktor pada divais *Spin Field Effect Transistor* (SFET). Nilai parameter Rashba orde pertama α_1 pada sistem monolayer polar $MoSSe$ tertinggi yang bernilai 1.224 eVÅ diperoleh dengan pemberian efek *compressive-strain* sebesar -4% pada arah Γ-M dengan prediksi dimensi panjang material sebesar 19.57 nm.

Kata-kata kunci : TMDCs, *spin-splitting*, *polarity*, DFT, Rashba, *strain*.

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Efek Polarity pada Struktur Elektronik Molybdenum Dichalcogenides MoXY (X, Y= S, Se): Kajian Komputasional berbasis Density Functional Theory dan Analisa dengan Teori Gangguan k ÃÆ'ï¿½Ãâ€šÂ· p
SALSABILA AMANDA P, Moh. Adhib Ulil Absor, M.Sc., Ph.D; Dr. Eng. Edi Suharyadi
Universitas Gadjah Mada, 2020 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

ABSTRACT

Polarity Effect on Electronic Structure of Molybdenum Dichalcogenides MoXY (X, Y= S, Se): Computational Study based on Density Functional Theory and $\vec{k} \cdot \vec{p}$ Perturbation Theory Analysis

By

Salsabila Amanda Putri
18/433757/PPA/05572

A computational research based on *Density Functional Theory* (DFT) has been performed to observe the electronic structure of monolayer material *Transition Metal Dichalcogenides* (TMDCs) Molybdenum Dichalcogenides $MoXY$ $(X, Y = S, Se)$ in the first Brillouin zone by breaking its crystal mirror symmetry under polarity effect. It is discovered that Rashba spin-splitting can be identified around Γ point by giving the polarity effect to the system. Besides, the anisotropic characteristic of Rashba spin-splitting in this system can be clearly analysed by using $\vec{k} \cdot \vec{p}$ perturbation theory and the third-order symmetry group analysis. By doing the spin textures analysis, this research also recognizes the in-plane direction of spin textures. The tunable characteristic of the Rashba parameter of this monolayer polar $MoSSe$ system shows its potential to be the candidate of semiconductor material for Spin Field Effect Transistor (SFET) device by applying the strain effect. The highest value of the first-order Rashba parameter α_1 in this system, which is 1.224 eVÅ, has been achieved by applying -4% compressive-strain on the Γ-M direction with respect to 19.57 nm of the material's length prediction.

Keywords : TMDCs, spin-splitting, polarity, DFT, Rashba, strain.