

INTISARI

Kajian Komputasional Struktur Elektronik Germanium Monochalcogenide GeX (X : S, Se, Te) Monolayer Dengan Metode *Density Fungsional Theory*

Oleh

Yusuf Faishal

16/403597/PPA/05114

Telah dilakukan kajian komputasi berbasis *density functional theory* (DFT) untuk mengamati struktur elektronik material Germanium Monochalcogenide (GeX) *monolayer* pada zona Brillouin pertama akibat pemberian efek *strain*. Penelitian ini menunjukkan adanya fenomena *spin-splitting* di sekitar titik Y dan telah dianalisis menggunakan teori gangguan $\vec{k} \cdot \vec{p}$ dan grup simetri sehingga diperoleh parameter kekuatan interaksi spin-orbit (SOI) untuk sistem GeX *monolayer*. Berdasarkan hasil perhitungan *spin textures* di sekitar titik Y pada pita valensi diperoleh arah orientasi polarisasi spin yang seragam kearah *out-of-plane*. Selain itu, efek *strain* dapat menyebabkan perubahan nilai distorsi *ferroelectric* pada arah *in-plane* yang merubah besarnya polarisasi listrik internal, sehingga menghasilkan perubahan nilai parameter SOI. Hasil penelitian ini menegaskan bahwa kontrol parameter SOI dapat dilakukan dengan *strain* tanpa mengubah arah polarisasi spin yang *out-of-plane* menjadikan system GeX *monolayer* sebagai kandidat material persistent spin helix (PSH) yang menjanjikan untuk piranti spintronik.

Kata-kata kunci : DFT, PSH, GeX, *spin-splitting*, *spin textures*, *strain*.

ABSTRACT

Computational Study on The Electronic Structure of Monolayer Germanium Monochalcogenide GeX (X : S, Se, Te) using The Density Functional Theory

By

Yusuf Faishal

16/403597/PPA/05114

A computational research based on density functional theory (DFT) has been carried out to observe the electronic structure of the Germanium Monochalcogenide (GeX) monolayer material in the first Brillouin zone under strain effect. This research shows the emerged spin-splitting phenomenon around the Y point, which has been analyzed using the $\vec{k} \cdot \vec{p}$ perturbation theory and symmetry group to obtain the spin-orbit interaction (SOI) parameter for the GeX monolayer system. Based on the calculation of spin textures on the valence band around Y point, a uniform spin polarization orientation has been accomplished in the out-of-plane direction. In addition, the strain effect shifts the value of in-plane ferroelectric distortion, which changes the magnitude of internal electric polarization; thus, it affects the magnitude of the SOI parameter. In conclusion, the results of this research confirm that control of the SOI parameter can be carried out by giving strain without changing the direction of out-of-plane spin polarization; therefore it leads the GeX monolayer system to be a promising candidate of a persistent spin helix (PSH) material for spintronic devices.

Keywords : DFT, PSH, GeX, spin-splitting, spin textures, strain.