

ABSTRAK

EFEK POLARITY PADA STRUKTUR ELEKTRONIK *MONOLAYER* *MOLEBDINUM DICHALCOGENIDE* MoXY (X / Y = S, Se, Te) : KAJIAN KOMPUTASIONAL MENGGUNAKAN PENDEKATAN *DENSITY* *FUNCTIONAL THEORY*

Oleh

A. M. MUKHLIS INDRAWAN

16/403541/PPA/05058

Telah dilakukan kajian komputasi berbasis *density functional theory* (DFT) mengenai efek *polarity* pada sifat elektronik sistem polar MoXY (X/Y = S, Se, Te) *monolayer* yang dilengkapi dengan analisis menggunakan teori gangguan $k \cdot p$. Pada penelitian ini akan dilakukan pemberian medan listrik luar hingga $0,6 \text{ V/\AA}$ untuk melihat perubahan struktur elektronik pada material polar MoXY *monolayer*. Selanjutnya diperoleh bentuk *spin-splitting* disekitar $\Gamma - K$ point dan diperoleh bentuk *spin-splitting* baru yang disebut *Rashba Spin-splitting* disekitar titik Γ point. Kemudian diidentifikasi menggunakan teori gangguan $k \cdot p$, sehingga diperoleh parameter *Rashba* hingga orde ke tiga pada setiap sistem polar MoXY *monolayer*. Selain itu juga, diperoleh bentuk *spin texture* di sekitar Γ point dan diperoleh bentuk orientasi arah polarisasi spin melalui perhitungan analisis berbasis teori gangguan $k \cdot p$ yang konsisten dengan hasil perhitungan DFT. Hasil penelitian ini menegaskan bahwa efek *polarity* dan pemberian medan listrik luar hingga $0,6 \text{ V/\AA}$, menjadikan material polar MoXY *monolayer* menjanjikan untuk aplikasi divais SFET.

Kata-kata kunci : DFT, teori gangguan $k \cdot p$, *Rashba spin-splitting*, sistem MoXY *monolayer*.

ABSTRACT

***POLARITY EFFECTS ON MONOLAYER MOLEBDINUM
DICHALCOGENIDE ELECTRONIC STRUCTURE MoXY ($X/Y = \text{S, Se, Te}$) :
COMPUTATIONAL STUDY USING DENSITY-FUNCTIONAL THEORY***

By

A M. MUKHLIS INDRAWAN
16/403541/PPA/05058

The investigation of computational materials based on Density Functional Theory (DFT) about polarity effects in MoXY ($X/Y = \text{S, Se, Te}$) monolayer polar systems and the using of the $k \cdot p$ perturbation theory analysis has been carried out. This study finds out the band structure in MoXY monolayer polar materials with the giving of the external electric fields up to $0,6 \text{ V/\AA}$. So, it has obtained the phenomenon of the spin-splitting around the $\Gamma - K$ points and find out the new spin splitting called *Rashba spin splitting* around the Γ points. Then, it has been identified using the $k \cdot p$ perturbation theory and it has resulted the *Rashba* parameters up to third orders for each MoXY monolayer polar system. Moreover, this study has exhibited the spin texture around the Γ point and than it has resulted of the orientations of the spin polarizations by calculations of the $k \cdot p$ perturbations theory which has been consistent with DFT calculations. This clarify results that the polarity effects and the adding of the external electric fields up to $0,6 \text{ V/\AA}$ leads MoXY monolayers to be a potential candidate for SFET device applications.

Keyword : DFT, $k \cdot p$ perturbation theory, *Rashba* spin-splitting, MoXY monolayer systems.