

INTISARI

HIDDEN SPIN POLARIZATION PADA MATERIAL MoTe₂ BILAYER: KAJIAN KOMPUTASIONAL BERBASIS DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)

Oleh

Sastrawan Nurfatwa

17/409403/PA/17710

Kajian komputasi menggunakan *density functional theory* (DFT) telah dilakukan dalam mengonfirmasi terjadinya *hidden spin polarization* pada sistem material MoTe₂ bilayer dengan menggunakan *spin-orbit coupling* (SOC) pada struktur elektroniknya. Penelitian ini menunjukkan pada struktur elektronik terjadi *valley band maximum* (VBM) di K-point dan *conduction band minimum* (CBM) di daerah K- Γ point sehingga bersifat *indirect bandgap* dan memiliki energi gap (ϵ_g) yaitu 867 meV. Pada saat pemberian medan listrik luar, terjadi *spin-splitting* pada K-point. Kemudian pembuktian terjadinya peristiwa *hidden spin polarization* dilakukan dengan tiga jenis kalkulasi spin yaitu *spin arrow projection*, proyeksi spin di tiap sektor, dan proyeksi spin di tiap atom. Perhitungan dan pengamatan *spin texture* di fokuskan pada K-point dalam interval energi -1,5 eV sampai 1,5 eV. Selain itu, polarisasi spin untuk keadaan normal pada sektor atas dan sektor bawah memiliki polarisasi spin yang berlawanan yaitu $\vec{P}_+ = -\vec{P}_-$ sehingga jika ditotal sama dengan nol. Hasil penelitian ini menegaskan bahwa pada sistem material MoTe₂ bilayer pada keadaan normal terjadi *hidden spin polarization* sedangkan adanya pemberian medan listrik luar mengakibatkan *broken hidden spin polarization* sehingga dapat berpotensi dalam pengaplikasian divais *spintronic*.

Kata-kata Kunci: MoTe₂ bilayer, *density functional theory*, *hidden spin polarization*, medan listrik, *spin orbit coupling*, *spintronic*

ABSTRACT

HIDDEN SPIN POLARIZATION ON MATERIAL BILAYER MoTe₂: COMPUTATIONAL BASED ON DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)

By

SASTRAWAN NURFATWA

17/409403/PA/17710

A computational study using density functional theory (DFT) has been carried out to confirm the hidden spin polarization in the material of bilayer MoTe₂ system using spin-orbit coupling (SOC) in electronic structure. This study show that in the electronic structure there is a valley band maximum (VBM) at the K-point and conduction band minimum (CBM) in the K- Γ point area, so that the indirect bandgap and has an energy gap (ϵ_g) of 867 meV. When presenting an external electric field, spin-splitting occurs at the K-point. Then prove the occurrence of hidden spin polarization events by using three types of spin calculation, namely spin arrow projection, spin projection in each sector, and spin projection in each atom. The calculation and observation of the spin texture is focused on K-point in interval energy of -1.5 eV to 1.5 eV. In addition, the spin polarization for the normal state in the upper and lower sectors have opposite spin polarization $\vec{P}_{\pm} = -\vec{P}_{\pm}$, so total is equal to zero. The results of this study indicate that the MoTe₂ bilayer material system in normal condition occur hidden spin polarization while the induction of an external electric field causes broken hidden spin polarization so that it can be possible in the application of spintronic devices.

Keyword: MoTe₂ bilayer, density functional theory, hidden spin polarization, electric field, spin orbit coupling, spintronic