

INTISARI

PERHITUNGAN NUMERIK NILAI RAPAT KEADAAAN MATERIAL WS₂ DENGAN MODEL IKATAN KUAT MENGGUNAKAN METODE TROTTER-SUZUKI

Oleh:

HENDRIKUS SIVAN CHRISIA ZEBUA

14/366466/PA/16238

Telah dilakukan perhitungan rapat keadaan (DOS) material WS₂ *monolayer* dua dimensi menggunakan model *Tight-Binding* (TB) melalui penyelesaian persamaan Schrödinger gayut waktu (PSGW) menggunakan metode Trotter-Suzuki. Bilangan acak antara -1 dan 1 digunakan sebagai fungsi gelombang superposisi dari basis tiap-tiap site atom sesuai dengan struktur kristal heksagonal untuk memperoleh fungsi korelasi. Fungsi korelasi ini ditransformasi menggunakan transformasi Fourier untuk memperoleh DOS material WS₂. Perhitungan dilakukan dengan menggunakan dua orbital, $d_{3z^2-r^2}$ dan p_z . Dengan menggunakan parameter *hopping* $t_1^{WS} = t_2^{WS} = t_3^{WS} = 0,0716$ eV dan parameter *on-site* atom logam $\epsilon_W = 4$ eV serta parameter *on-site* atom chalcogen $\epsilon_S = -13$ eV, diperoleh *bandgap* sebesar 1,75 eV.

Kata Kunci: WS₂, tungsten disulfida, rapat keadaan, metode Trotter-Suzuki, model ikatan kuat, persamaan Schrödinger gayut waktu

ABSTRACT

NUMERICAL CALCULATION OF DENSITY OF STATE OF WS₂ MATERIAL USING TIGHT-BINDING PROPAGATION METHOD

By:

HENDRIKUS SIVAN CHRISSA ZEBUA

14/366466/PA/16238

A computational study has been carried out to calculate the density of state (DOS) of WS₂ material using tight binding model and Trotter-Suzuki time propagation method to find the solution of time-dependent Schrödinger equation. Random number between -1 and 1 used as superposition wave function for every base site atom corresponding to hexagonal crystal structures for finding correlation function. Correlation function transformed into DOS using Fourier transformation. Calculation has been done using two orbital, $d_{3z^2-r^2}$ dan p_z . Using hopping parameter $t_1^{WS} = t_2^{WS} = t_3^{WS} = 0,0716$ eV, on-site parameter of metal atom $\epsilon_W = 4$ eV, and on-site parameter of chalcogen atom $\epsilon_S = -13$ eV, we obtain bandgap of WS₂ material is around 1,75 eV.

Key Words: tungsten disulfide, WS₂, density of state, Trotter-Suzuki method, tight binding model, time-dependent Schrödinger equation