

## INTISARI

**PERHITUNGAN NUMERIK RAPAT KEADAAN (*DENSITY OF STATES*)  
MATERIAL MoS<sub>2</sub> DENGAN MODEL TIGHT-BINDING MELALUI  
PENYELESAIAN PERSAMAAN SCHRÖDINGER GAYUT WAKTU  
MENGGUNAKAN METODE *TROTTER-SUZUKI FORMULA***

Oleh :

Rizky Zul Ashary Hasibuan  
12/ 331271/ PA/ 14551

Telah dilakukan perhitungan rapat keadaan (DOS) material MoS<sub>2</sub> dua dimensi menggunakan model *Tight-Binding* (TB) melalui penyelesaian persamaan Schrödinger gayut waktu (PSGW) menggunakan metode *Trotter-Suzuki Formula*. Bilangan acak digunakan sebagai fungsi gelombang superposisi dari basis tiap-tiap site atom sesuai dengan struktur kristal *hexagonal* untuk memperoleh fungsi korelasi. Fungsi korelasi ini ditransformasi menggunakan transformasi Fourier untuk memperoleh rapat keadaan. Pada proses transformasi ini diperoleh nilai *time interval* ( $\tau$ )=0,03 dan jumlah *step* ( $T$ )=10000 yang memberikan hasil yang konsisten. Hasil penelitian menunjukkan bahwa model TB ini dapat menjelaskan rapat keadaan material MoS<sub>2</sub> dengan parameter-parameter TB, *hopping* ( $t$ )=2,0 eV; energi *onsite* ( $\epsilon_A$ )=1,0 eV;  $\epsilon_B$ =-1,0 eV. Nilai parameter-parameter tersebut merupakan nilai yang paling sesuai merujuk pada beberapa kajian rapat keadaan material MoS<sub>2</sub> murni sebelumnya. Kajian untuk MoS<sub>2</sub> vacancy baik untuk S vacancy atau Mo vacancy tidak memberikan perubahan yang signifikan pada rapat keadaan yang diperoleh.

Kata kunci: Rapat keadaan, *Trotter-Suzuki Formula*, MoS<sub>2</sub>

## ABSTRACT

### **NUMERICAL CALCULATION OF DENSITY OF STATES MoS<sub>2</sub> MATERIAL WITH TIGHT-BINDING MODEL BY SOLVING TIME DEPENDENT SCHRÖDINGER EQUATION USING TROTTER-SUZUKI FORMULA**

By:

Rizky Zul Ashary Hasibuan  
12/ 331271/ PA/ 14551

Numerical calculation of density of states of two-dimensional MoS<sub>2</sub> has been done using Tight-Binding models to solve time dependent Schrödinger equation (TDSE) with Trotter-Suzuki Formula. Random number used as superposition wave function which is a basis from site in hexagonal crystal structure to obtain the correlation function. The correlation function is transformed using Fourier Transformation to obtain density of states (DOS). In this transformation we get a value of time interval ( $\tau$ )=0,03 and total of step ( $T$ )=10000 that gives reliable result of density of states. The result of numerical calculation that TB model can describe the density of state of MoS<sub>2</sub> material with this TB parameters, hopping ( $t$ )=2,0 eV; on-site energy ( $\epsilon_A$ )=1,0 eV;  $\epsilon_B$ =-1,0 eV. The value of these parameters is most corresponding value refer to the previous study of MoS<sub>2</sub>. Within this model, there is no significant change of density of states if we introduce vacancy neither S vacancy nor Mo vacancy.

Keyword: density of states, Trotter-Suzuki Formula, MoS<sub>2</sub>