

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	iii
HALAMAN SURAT KETERANGAN	iii
HALAMAN PERNYATAAN	iv
HALAMAN PERSEMBAHAN	v
PRAKATA	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	xi
INTISARI	xiii
ABSTRACT	xiv
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Tujuan Penelitian	5
1.4 Batasan Masalah	5
1.5 Manfaat Penelitian	5
II TINJAUAN PUSTAKA	6
III DASAR TEORI	14
3.1 Struktur Kristal MoSe ₂	14
3.2 Model Ikatan Kuat	17
3.2.1 Melibatkan 1 Orbital pada Setiap Atom Mo dan Se	19
3.2.2 Melibatkan 3 Orbital pada Setiap Atom Mo	22
3.3 Model Ikatan Kuat Kuantisasi Kedua	24
3.3.1 Melibatkan 1 Orbital pada Setiap Atom Mo dan Se	25
3.3.2 Melibatkan 3 Orbital pada Setiap Atom Mo	30
3.4 Metode Perambatan Waktu Trotter-Suzuki	31
3.5 Perhitungan Rapat Keadaan	36
IV METODE PENELITIAN	38
4.1 Alat dan Bahan	38
4.2 Implementasi Metode Trotter-Suzuki ke Matriks Hamiltonian <i>Mo-nolayer</i> MoSe ₂	38
4.2.1 Melibatkan 1 Orbital pada Setiap Atom Mo dan Se	38

4.2.2 Melibatkan 3 Orbital pada Setiap Atom Mo	41
4.3 Implementasi Perkalian Blok dalam Program	43
4.4 Prosedur Penelitian	44
4.5 Diagram Alir	45
V HASIL DAN PEMBAHASAN	47
5.1 Perhitungan Rapat Keadaan MoSe_2 dengan 1 Orbital pada Setiap Atom Mo dan Se	49
5.2 Perhitungan Rapat Keadaan MoSe_2 dengan 3 Orbital pada Setiap Atom Mo	50
5.3 Variasi Jumlah Langkah (<i>Step</i>) Waktu pada Perhitungan Rapat Keadaan	54
5.4 Perhitungan Rapat Keadaan <i>monolayer</i> TMDCs Lainnya	55
VI KESIMPULAN DAN SARAN	61
6.1 Kesimpulan	61
6.2 Saran	62
DAFTAR PUSTAKA	63
A Elemen Matriks Hamiltonian <i>Monolayer</i> MoSe_2 Kasus Kedua	67
B Dekomposisi Matriks Hamiltonian <i>Monolayer</i> MoSe_2	80
2.1 Melibatkan 1 Orbital pada Setiap Atom Mo dan Se	80
2.2 Melibatkan 3 Orbital pada Setiap Atom Mo	94
C Skrip Program Distribusi Posisi Atom Mo dan Se	140
D Skrip Program Metode Trotter-Suzuki dengan Melibatkan 1 Orbital pada Setiap Atom Mo dan Se	142
4.1 Skrip <i>header</i> program	142
4.2 Skrip <i>body</i> program	143
E Skrip Program Metode Trotter-Suzuki dengan Melibatkan 3 Orbital pada Setiap Atom Mo	164
5.1 Skrip <i>header</i> program	164
5.2 Skrip <i>body</i> program	165
F Skrip Program Perhitungan Rapat Keadaan	217

DAFTAR TABEL

2.1	<i>Spin-orbit coupling</i> λ_α dan parameter ikatan kuat untuk <i>monolayer</i> MX_2 dalam satuan eV (Silva-Guillén dkk., 2016).	9
5.1	Parameter untuk <i>monolayer</i> MoSe_2 dengan orbital d_{z^2} atom Mo dan p_z atom Se dalam satuan eV (Silva-Guillén dkk., 2016).	49
5.2	Parameter untuk <i>monolayer</i> MoSe_2 dengan 3 orbital Mo menggunakan GGA dan LDA dalam satuan eV (Liu dkk., 2013).	50
5.3	Nilai celah pita <i>monolayer</i> MoSe_2 dengan 3 orbital Mo menggunakan GGA dan LDA dalam variasi langkah waktu dalam satuan eV.	55
5.4	Parameter untuk <i>monolayer</i> TMDCs lainnya dengan 3 orbital Mo menggunakan GGA dan LDA dalam satuan eV (Liu dkk., 2013).	56

DAFTAR GAMBAR

2.1	JDOS sebagai fungsi energi transisi yang dihitung untuk seluruh zona Brillouin <i>monolayer</i> MoS ₂ menggunakan model tiga pita (merah) dan model enam pita (biru). Garis putus-putus hijau dan garis putus-putus hitam masing-masing menunjukkan titik K dan Q (No- uri dkk.,2017).	8
2.2	Struktur pita elektronik MoSe ₂ dengan <i>density functional theory</i> (garis hitam) dan dengan model ikatan kuat (garis merah) (Silva-Guillén dkk.,2016).	9
2.3	Struktur pita <i>monolayer</i> MoSe ₂ dengan menggunakan tiga orbital Mo model ikatan kuat. (Kiri) melibatkan tetangga terdekat pertama dan (kanan) melibatkan tiga tetangga terdekat (Liu dkk.,2013).	11
2.4	Struktur pita pada <i>monolayer</i> MoS ₂ , WS ₂ , MoSe ₂ , dan WSe ₂ dengan perhitungan DFT, termasuk melibatkan SOC (Roldán dkk.,2014).	12
3.1	Skema struktur MoSe ₂ 3D dengan atom <i>chalcogen</i> Se (kuning) dan atom metal Mo (hitam) (Radisavljevic dkk.,2011).	14
3.2	Struktur <i>monolayer</i> MoSe ₂ tampak atas. Lingkaran hitam dan putih masing-masing merepresentasikan atom Mo dan Se. Sel satuan ditunjukkan dalam heksagon abu-abu. (Ridolfi dkk.,2015).	15
3.3	Sisi kiri (tampak atas), sisi tengah (tampak tiga dimensi) atom Mo dengan tetangga terdekat pertama, dan sisi kanan (tampak skema sel satuan) MoSe ₂ dengan garis hitam menunjukkan loncatan tetangga terdekat (Ridolfi,2017).	16
3.4	Zona Brillouin pada kisi MoSe ₂ .	16
3.5	Tampak atas <i>monolayer</i> MoSe ₂ dengan atom <i>chalcogen</i> Se (kuning) dan atom metal Mo (hitam). $R_i, i = 1, \dots, 6$ adalah tetangga terdekat pertama atom Mo-Mo. Daerah hijau adalah sel satuan dengan konstanta kisi a (Liu dkk.,2013).	23
3.6	Pendekatan <i>brickwall lattice</i> pada MoSe ₂ .	26
4.1	Diagram alir perhitungan rapat keadaan.	46
5.1	Rapat keadaan TMDCs dengan Trotter-Suzuki pada berbagai ukuran atom.	48
5.2	Struktur pita TMDCs dengan metode diagonalisasi	48
5.3	Rapat keadaan MoSe ₂ dengan melibatkan 1 orbital pada setiap atom Mo dan Se	50

5.4	Rapat keadaan MoSe_2 dengan melibatkan 3 orbital Mo menggunakan GGA	51
5.5	Struktur pita MoSe_2 dengan melibatkan 3 orbital Mo menggunakan GGA	51
5.6	Rapat keadaan MoSe_2 dengan melibatkan 3 orbital Mo menggunakan LDA	53
5.7	Struktur pita MoSe_2 dengan melibatkan 3 orbital Mo menggunakan LDA	53
5.8	(a) Pengaruh jumlah langkah waktu terhadap nilai rapat keadaan <i>monolayer</i> MoSe_2 menggunakan GGA, dan (b) perbesaran gambar pada daerah pita konduksi minimum	55
5.9	(a) Pengaruh jumlah langkah waktu terhadap nilai rapat keadaan <i>monolayer</i> MoSe_2 menggunakan LDA, dan (b) perbesaran gambar pada daerah pita konduksi minimum	56
5.10	Rapat keadaan <i>monolayer</i> TMDCs lainnya menggunakan parameter GGA	57
5.11	Struktur pita <i>monolayer</i> TMDCs lainnya menggunakan parameter GGA	58
5.12	Rapat keadaan <i>monolayer</i> TMDCs lainnya menggunakan parameter LDA	59
5.13	Struktur pita <i>monolayer</i> TMDCs lainnya menggunakan parameter LDA	60