

INTISARI

PERHITUNGAN RAPAT KEADAAN PADA SISTEM *MONOLAYER* *MOLYBDENUM DISELENIDE*: KAJIAN NUMERIK BERBASIS MODEL IKATAN KUAT MENGGUNAKAN METODE PERAMBATAN WAKTU TROTTER-SUZUKI

Oleh

AHMAD FAISAL HARISH

19/448655/PPA/05738

Telah dilakukan perhitungan rapat keadaan pada sistem *monolayer* MoSe₂ berbasis model ikatan kuat dengan menggunakan metode prambatan waktu Trotter-Suzuki untuk mencari penyelesaian dari persamaan Schrödinger gayut waktu sistem yang kemudian dilakukan transformasi Fourier terhadap fungsi korelasi untuk mendapatkan nilai rapat keadaan. Penelitian ini dilakukan dalam dua model: (1) dengan melibatkan satu orbital pada setiap atom Mo (d_{z^2}) dan Se (p_z), serta hanya meninjau interaksi atom Mo-Se dan Se-Se terdekat pertama, dan (2) dengan melibatkan tiga orbital pada setiap atom Mo (d_{z^2} , d_{xy} , dan $d_{x^2-y^2}$), serta hanya meninjau interaksi atom Mo-Mo terdekat pertama, dalam hal ini kontribusi orbital dari atom Se diabaikan. Kedua model ini dilakukan dengan mengabaikan *spin-orbit coupling*. Model pertama belum dapat menangkap karakter struktur pita *monolayer* MoSe₂ dan model tersebut hanya dapat memberikan kontribusi bentuk pada tepi pita valensi. Sedangkan, model kedua dapat dengan baik menangkap sifat tepi pita konduksi dan valensi di lembah $\pm K$. Menggunakan parameter yang disesuaikan dari perhitungan *first principle* dengan GGA dan LDA, masing-masing diperoleh celah pita langsung sebesar 1,478 eV dan 1,661 eV, hasil tersebut mendekati dengan referensi yang digunakan. Selain itu, kami menyajikan perhitungan rapat keadaan untuk sistem TMDCs lainnya, seperti MoS₂, MoTe₂, WS₂, WSe₂, dan WTe₂.

Kata Kunci: MoSe₂, rapat keadaan, metode perambatan waktu, Trotter-Suzuki, model ikatan kuat, persamaan Schrödinger gayut waktu

ABSTRACT

CALCULATION OF DENSITY OF STATES ON MONOLAYER MOLYBDENUM DISELENIDE SYSTEM: NUMERICAL STUDIES BASED ON TIGHT-BINDING MODEL USING TROTTER-SUZUKI TIME PROPAGATION METHOD

By

AHMAD FAISAL HARISH

19/448655/PPA/05738

The density of states (DOS) of monolayer MoSe₂ was calculated based on a tight-binding model using the Trotter-Suzuki time propagation method in order to obtain the DOS value through the use of Fourier transform of the correlation function. This study was conducted in two ways: (1) by involving only one orbital on each Mo atom (d_{z^2}) and Se atom (p_z) and examining only the first neighbor Mo-Se and Se-Se atomic interactions; and (2) by involving three orbitals on each Mo atom (d_{z^2} , d_{xy} , and $d_{x^2-y^2}$) and examining only the first neighbor Mo-Mo atomic interactions, in which case the orbital contribution of the Se atoms ignored. Furthermore, both models are implemented without regard for spin-orbit coupling. The first model was unable to capture the unique properties of the monolayer MoSe₂ band structure, and its combination of orbitals can only contribute to the shape of the valence band edge. Meanwhile, the second model can accurately describe the conduction and valence band edges in the $\pm K$ valley. By adjusting the parameters from the first principle calculations with GGA and LDA, we obtain a direct band gap of 1.478 eV and 1.661 eV, respectively, which is close to the reference value. Additionally, we present the DOS calculation for other transition metal dichalcogenides (TMDCs) systems, including MoS₂, MoTe₂, WS₂, WSe₂, and WTe₂.

Key words: MoSe₂, density of states, time propagation method, Trotter-Suzuki, tight binding model, time-dependent Schrödinger equation