

INTISARI

KAJIAN KARAKTERISTIK ELEKTRONIK TUNGSTEN DISELENIDE MONOLAYER MENGGUNAKAN METODE PERAMBATAN IKATAN KUAT: TROTTER-SUZUKI

Oleh

I WAYAN WINDU SARA

19/448666/PPA/05749

Telah dilakukan perhitungan rapat keadaan dan konduktivitas elektrik dari salah satu varian *Transition Metal Dichalcogenides* (TMDC), yaitu sistem Tungsten Diselenide (WSe_2) *monolayer* menggunakan metode perambatan ikatan kuat Trotter-Suzuki. Perhitungan yang dilakukan berdasarkan model ikatan kuat 6 buah orbital minimal ($d_{3z^2-r^2}$, $d_{x^2-y^2}$, d_{xy} , p_x^S , p_y^S , p_z^A) dengan mengabaikan efek *spin-orbit coupling*. Dari metode ini dapat diperoleh solusi persamaan Schrödinger gayut waktu yang selanjutnya digunakan untuk menentukan fungsi korelasi dan keadaan eigen kuasi. Kedua besaran ini masing-masing dihitung lebih lanjut menggunakan transformasi Fourier dan formalisme Kubo untuk memperoleh nilai rapat keadaan dan konduktivitas elektrik. Rapat keadaan yang diperoleh dapat merepresentasikan karakteristik WSe_2 *monolayer* di sekitar tingkat Fermi, yaitu jenis celah pita langsung di titik K dan minimum kedua pita konduksi di titik Q . Selain itu, nilai celah pita terbaik yang diperoleh bernilai 1.38 eV dengan kesalahan relatif 5.26% . Sementara untuk konduktivitas elektrik yang diperoleh dapat merepresentasikan perbedaan karakter pembawa muatan pada pita valensi dan konduksi secara kualitatif.

Kata Kunci: TMDC, WSe_2 *monolayer*, model ikatan kuat, metode perambatan waktu Trotter-Suzuki, rapat keadaan, konduktivitas elektrik.

ABSTRACT

ELECTRONIC CHARACTERISTICS STUDIES OF TUNGSTEN DISELENIDE MONOLAYER USING TIGHT BINDING PROPAGATION METHOD: TROTTER-SUZUKI

By

I WAYAN WINDU SARA

19/448666/PPA/05749

The density of states and dc conductivity of one variant of Transition Metal Dichalcogenides (TMDC), i.e. the monolayer Tungsten Diselenide system (WSe_2) has been calculated using the Trotter-Suzuki tight binding propagation method. The calculation is based on the tight-binding model of 6 minimal orbitals ($d_{3z^2-r^2}$, $d_{x^2-y^2}$, d_{xy} , p_x^S , p_y^S , p_z^A) by ignoring the spin-orbit coupling effect. A solution to the time-dependent Schrödinger equation can be obtained from this method, which is then used to determine the correlation function and the quasi-eigenstate. These two quantities were further calculated using Fourier transform and Kubo formalism to obtain the density of states and dc conductivity values. The density of states obtained can represent the characteristics of monolayer WSe_2 around the Fermi level, namely the direct bandgap at the K point and the second minimum of the conduction band at the Q point. In addition, the best bandgap value obtained is 1.38 eV with a relative error of 5.26% . Meanwhile, the electrical conductivity obtained can qualitatively represent the difference in the character of charge carriers in the valence and conduction bands.

Key Words: TMDC, monolayer WSe_2 , tight-binding model, Trotter-Suzuki time propagation method, density of states, dc conductivity.