

## Studi teoretik sifat-sifat optik monolayer MoS<sub>2</sub> = Theoretical study on optical properties of monolayer MoS<sub>2</sub>

Ahmad Syahroni, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20491649&lokasi=lokal>

---

### Abstrak

Molybdenum disulfide (MoS<sub>2</sub>), yang merupakan bagian dari kelompok material yang disebut dengan transition metal dichalcogenides, menarik banyak perhatian dikarenakan sifat-sifat fisis yang unik yang dimilikinya. Single layer material ini mengalami transisi indirect band gap ke direct band gap, yang karenanya dapat dimanfaatkan untuk berbagai aplikasi optoelektronik. Untuk mempelajari struktur pita (band structure) dari material ini secara detail, pendekatan first-principles seperti density functional theory (DFT) menjadi pilihan populer. Namun, terdapat tantangan yang besar untuk menggunakan pendekatan tersebut untuk menghitung dengan benar efek yang ditimbulkan akibat korelasi kuat antar elektron. Saat ini, telah diperkenalkan sebuah pendekatan yang menggabungkan DFT dengan apa yang disebut dengan GW+BSE untuk menghitung efek interaksi elektron-elektron dan elektron-hole. Dalam tesis ini, kami mempelajari sifat-sifat optik 1H- dan distorted 1T'-MoS<sub>2</sub> dengan mengikutsertakan dalam perhitungan interaksi antar elektron dalam kerangka GW dan elektron-hole dengan menyelesaikan persamaan Bethe-Salpeter (BSE).

.....Molybdenum disulfide (MoS<sub>2</sub>), which belongs to transition metal dichalcogenides, has attracted great attention mainly due to their unique physical properties. A single layer of this material undergoes indirect to direct band gap transition, which enables a wide range of optoelectronic applications. To explore the details of the band structure of this material, a first-principles approach such as density functional theory (DFT) has become a popular choice. However, apart from its well-established formulation, it remains a big challenge to use such an approach to capture effects arising from correlations among the electrons correctly. Nowadays, an approach to combine DFT with a so-called GW+BSE to address the effects of electron-electron and electron-hole interactions, has been introduced. In this thesis, we study the optical properties of 1H- and distorted 1T'-MoS<sub>2</sub> taking into account electron-electron interaction within GW approximation and electron-hole interaction by solving Bethe-Salpeter equation (BSE).