

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Metode pemodelan mekanika kuantum memiliki peran penting untuk mempelajari struktur elektronik sistem banyak partikel. Salah satu metode yang dapat digunakan untuk mempelajari struktur elektronik sistem banyak partikel adalah metode *Hartree–Fock* yang dapat menjelaskan sistem banyak elektron secara efisien dengan pendekatan medan elektron rata – rata, namun kekurangan metode ini adalah mengabaikan sebagian besar efek korelasi elektron. Metode yang lebih akurat juga telah digunakan seperti Metode MPn (*Møller–Plesset Perturbation Theory*) yang mampu memperhitungkan korelasi elektron secara eksplisit, namun metode MPn memiliki kompleksitas komputasi yang sangat tinggi, sehingga kurang praktis untuk elektron dengan sistem besar (Møller & Plesset, 1934). Dalam konteks tersebut, salah satu metode yang lebih optimal dan digunakan pada penelitian ini adalah metode *Density Functional Theory* (DFT) yang mampu menawarkan hasil yang ideal untuk akurasi dan efisiensi komputasi dengan pendekatan kerapatan lokal elektron, dan juga memperhitungkan korelasi elektron (Assadi, 2013).

Salah satu topik yang sedang banyak dipelajari menggunakan DFT adalah pengaruh perbedaan jumlah lapisan atomik yang dimiliki oleh sebuah material dua dimensi terhadap struktur elektronik material. Sebuah material yang cocok untuk analisis topik ini adalah material Tungsten Disulfide (WS_2). Material WS_2 memiliki keunggulan untuk topik ini karena memiliki sifat semikonduktor dengan struktur elektronik yang dapat berubah seiring bertambahnya jumlah lapisan atomik. Sebagai contoh pada lapisan tunggal atau monolayer, WS_2 memiliki sifat elektronik yang efisien dalam memancarkan cahaya, berbeda dengan lapisan ganda WS_2 yang mempunyai sifat elektronik lebih unggul pada penyerapan cahaya. Hal ini menjadikan pentingnya untuk

analisis pengaruh jumlah lapisan atomik pada material WS_2 sebelum merancang suatu material.

Studi teoritis berbasis DFT untuk mencari sifat elektronik WS_2 dengan membandingkan jumlah lapisan atomik telah banyak dilakukan, sebagai contoh penelitian Kuc dkk(2011) telah dapat menunjukkan perubahan pita material WS_2 pada struktur monolayer dan bilayer dengan metode DFT, namun penelitian ini belum membahas tentang bagaimana analisis PDOS (*Partial Density of States*) pada setiap lapisan, dan penjelasan fisis bagaimana jarak interlayer yang dimiliki bilayer dapat memengaruhi struktur elektronik. Sementara itu, Penelitian Marco dkk(2015) juga telah melakukan studi DFT untuk mengetahui struktur elektronik dan optik pada material dua dimensi, namun informasi terkait faktor fisis berubahnya struktur elektronik, dan besarnya absorbansi yang dapat diterima oleh struktur monolayer dan bilayer WS_2 masih belum dijelaskan secara rinci.

Berdasarkan hal tersebut, dalam penelitian ini akan difokuskan untuk membandingkan struktur monolayer dan bilayer WS_2 dengan resolusi data yang lebih rinci dibanding studi sebelumnya, meliputi analisis PDOS (*Partial Density of States*) yang terpisah untuk setiap lapisan dan jenis atom dengan faktor fisis yang mempengaruhi hasil tersebut. Melalui penelitian ini diharapkan mampu memberikan wawasan yang lebih mendalam mengenai perbedaan pengaruh fisis yang dimiliki oleh jumlah lapisan atomik sehingga menghasilkan perbedaan struktur elektronik.

1.2 Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mempelajari perbedaan struktur pita elektronik pada monolayer dan bilayer material WS_2 dengan *Density Functional Theory* (DFT).

1.3 Manfaat Penelitian

Manfaat dari penelitian ini adalah untuk mencari informasi terkait karakteristik struktur elektronik material WS_2 pada struktur monolayer, dan bilayer.