

ABSTRAK

Material Tungsten Disulfide (WS_2) merupakan salah satu material dua dimensi yang menunjukkan perubahan sifat elektronik yang bergantung pada jumlah lapisan atomik. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis perbedaan sifat elektronik dari WS_2 dalam bentuk monolayer dan bilayer menggunakan pendekatan teoritis berbasis *Density Functional Theory* (DFT). Struktur awal WS_2 didapatkan dari database situs Materials Project yang kemudian dikonversikan ke dalam file input dari *Quantum ESPRESSO* dengan menggunakan Burai. Struktur material yang sudah dikonversi kemudian akan diuji konvergensi terhadap nilai cut-off energy dan titik k-point. Simulasi dilakukan dengan metode SCF (*Self Consistency Field*) dan NSCF (*Non-Self Consistency Field*) untuk memperoleh struktur pita energi dan *Density of States* (DOS). Hasil perhitungan menunjukkan bahwa monolayer WS_2 memiliki bandgap langsung sekitar 1.845 eV, Sementara untuk struktur bilayer WS_2 mengalami perubahan menjadi bandgap tidak langsung karena adanya interlayer coupling, dengan nilai bandgap yang lebih kecil yaitu 1,593 eV. Hasil menunjukkan bahwa bilayer WS_2 memiliki energi Bandgap yang lebih rendah dibandingkan monolayer. Perbedaan sifat elektronik pada kedua struktur ini memberikan informasi penting dalam merancang material WS_2 untuk aplikasi optoelektronik seperti fotodetektor dan emisi cahaya.

Kata Kunci : WS_2 , Density Functional Theory (DFT), Bandgap, monolayer, bilayer, Optoelektronik

Semarang, 14 Oktober 2025

Dosen Pembimbing I,



Vincensius G. S. R., S.Si., M.Si., Ph.D
NIP. 197105221997021001

Dosen Pembimbing II,



Dr. Edi Suprayoga
NIP. 198804082019021003