

Efek-efek kopling spin-orbit pada struktur-struktur elektronik dan eksitonik WS₂ monolayer = Effects of spin-orbit coupling on the electronic and excitonic structures of monolayer WS₂

Budi Eka Dharma, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20491912&lokasi=lokal>

Abstrak

Logam transisi dichalcogenides (TMDs) memperlihatkan sifat-sifat yang unik pada fase struktur monolayernya, yaitu celah pita langsung, yang menjadikannya kandidat menjanjikan dalam penerapannya dalam optoelektronik. Diantara TMDs tersebut, WS₂ memperlihatkan interaksi spin-orbit yang kuat sehingga dalam uji eksperimen dapat memisahkan pita-pita energi pada band valensinya hingga sebesar ~400 meV. Tidak seperti TMDs lainnya, puncak eksitonik pertamanya A berbentuk sangat tajam, sedangkan puncak eksitonik keduanya berbentuk lebih lebar dengan intensitas yang relatif lebih kecil jika dibandingkan puncak pertama. Untuk mendapatkan nilai eksitoniknya secara teori, khususnya puncak B, kami menerapkan metode *Double-Grid*. Efek-efek interaksi elektron-hole sendiri dibahas dengan membandingkannya terhadap yang dihitung pada level partikel independen. Perhitungan *first principle* yang kami lakukan dengan menerapkan efek interaksi spin-orbit menunjukkan terjadinya pergeseran celah pita energi ke wilayah energi yang lebih rendah sebesar 0.36 eV jika dibandingkan dengan perhitungan tanpa menggunakan efek spin-orbit. Lebih lanjut, efek spin-orbit ini juga menyebabkan pemisahan pada pita energi valensi tertingginya sebesar 410 meV. Dari sisi struktur eksitoniknya, interaksi spin-orbit menyebabkan terpecahnya puncak-puncak eksiton WS₂ monolayer menjadi dua bagian, khususnya pada puncak kedua dan ketiga.

Transition metal dichalcogenides (TMDs) display unique properties in their monolayer structures, namely a direct band-gap transition, which becomes a promising candidate for optoelectronics applications. Among them, WS₂ exhibits strong spin-orbit (SO) interaction which splits the electronic valence band as observed in the experimental data up to 400 meV. Unlike the other TMDs, the first excitonic peak A is very sharp for WS₂, while the secondary peak B is broader with smaller relative intensity. In this study, we perform first-principles calculations on the electronic band structure and solve the Bethe-Salpeter equation (BSE) for the complex dielectric function of monolayer WS₂ to study the effects of spin-orbit coupling on its excitonic structures. To resolve the excitonic peaks, in particular the B peak, we implement the double-grid method. We discuss the effects of electron-hole interaction on the absorption spectrum by comparing it with that calculated at the independent-particle level. Our first principle with spin-orbit calculation band structure shows spin-orbit coupling induce red-shifting of 0.36 eV compare to one without spin-orbit interaction. It also induces splitting of 400 meV on the valence band structure. From perspective of excitonic structure, spin-orbit coupling induces peak splitting on the second and third peak of WS₂ monolayer absorption optical spectra.