ABSTRAK

Celah pita energi pada molibdenum disulfida (MoS_2) lapis tunggal mengalami perubahan dari celah pita langsung menjadi tidak langsung saat diberi regangan uniaksial. Hal ini terlihat dari data eksperimen pergeseran panjang gelombang dan peningkatan intensitas fotoluminesensi seiring bertambahnya nilai regangan yang diterapkan pada MoS_2 lapis tunggal. Secara teoretis, celah pita MoS_2 lapis tunggal bernilai semakin kecil seiring bertambahnya nilai regangan dan bertransisi dari celah pita langsung menjadi tidak langsung pada nilai regangan sekitar $\sim 1\%$. Bila regangan terus diperbesar MoS_2 lapis tunggal akan bertransisi dari semikonduktor menjadi metal pada regangan sekitar $\sim 10\%$. Sampai saat ini alasan fisis dari transisi celah pita langsung menjadi tidak langsung pada MoS_2 lapis tunggal yang diinduksi regangan tersebut belum dapat dipastikan. Penelitian ini melakukan kalkulasi *ab initio* yang mengimplementasikan metode *density functional theory* (DFT) dan dilakukan melalui *package* Quantum ESPRESSO untuk menghasilkan pita struktur elektronik, *density of states* (DOS), dan *projected* DOS (PDOS) dari MoS_2 lapis tunggal yang dipengaruhi regangan uniaksial yang bervariasi. Regangan uniaksial yang diterapkan bervariasi dari $0 - 2{,}8\%$ dengan variasi $0{,}2\%$ dan searah dengan konstanta kisi a. Penelitian ini menjawab alasan fisis di balik terjadinya transisi celah pita langsung menjadi tidak langsung pada MoS_2 lapis tunggal yang diinduksi regangan. Transisi tersebut diakibatkan oleh pergeseran densitas elektron dari sulfur menuju molibdenum yang dibuktikan melalui perubahan kontribusi DOS setiap orientasi pada orbital $4d$ molibdenum dan $3p$ sulfur. Kalkulasi spektrum Raman MoS_2 lapis tunggal tanpa pengaruh regangan juga telah dilakukan meskipun belum mendapatkan hasil yang sesuai dengan eksperimen. Kalkulasi menghasilkan mode Raman E' memiliki frekuensi $384\ \mathrm{cm}^{-1}$ sementara mode $A_1{}'$ berfrekuensi $414\ \mathrm{cm}^{-1}$.

Kata Kunci: *MoS_2, Lapis tunggal, Regangan uniaksial, Kalkulasi ab initio, DFT, Struktur pita elektronik, density of states, Quantum ESPRESSO.*