

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	iii
PERNYATAAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	ix
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR SINGKATAN	xiv
DAFTAR SIMBOL	xv
INTISARI	xviii
ABSTRACT	xix
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang dan Permasalahan	1
1.2 Hipotesa	7
1.3 Rumusan Masalah	8
1.4 Tujuan Penelitian	9
1.5 Batasan Masalah	9
1.6 Manfaat Penelitian	10
1.7 Kebaruan (<i>Novelty</i>)	10
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	11
BAB III DASAR TEORI	21
3.1 <i>Graphene</i>	21
3.2 Termoelektrik dan Kinerjanya	26
3.3 Struktur Elektronik Berdasarkan DFT	31
3.4 Sintesis <i>graphene</i>	46
3.5 Spektroskopi	51
3.6 SEM	54
BAB IV METODE PENELITIAN	57
4.1 Metode Penelitian Eksperimen	57
4.2 Metode Penelitian Komputasi	67
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN	78
5.1 Struktur dan Sifat Elektronik Material <i>Graphene</i>	78
5.2 Sifat Termoelektrik Material <i>graphene</i> Murni dan Terdoping	101
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN	114
6.1 Kesimpulan	114
6.2 Saran	116
DAFTAR PUSTAKA	116
LAMPIRAN	130

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1.1	Struktur TEG Bi_2Te_3 komersial	2
Gambar 3.1	Beberapa alotrop karbon. <i>Graphene</i> (kiri atas) merupakan alotrop karbon yang mempunyai kisi kristal berbentuk seperti sarang lebah (hexagonal). <i>Graphite</i> (kanan atas) dapat dilihat sebagai tumpukan lapisan <i>graphene</i> . <i>Carbon Nanotubes</i> (kiri bawah) merupakan <i>graphene</i> yang digulung menyerupai silinder. <i>Fullerenes</i> (kanan bawah) merupakan molekul berbentuk bola yang terdiri dari 60 atom karbon dengan kisi berbentuk pentagon dan hexagonal	21
Gambar 3.2	Evolusi orbital dari tingkat energi dasar atom karbon menjadi <i>graphene</i> hibridisasi sp^2	23
Gambar 3.3	Struktur kisi hexagonal pada <i>graphene</i> dengan vektor posisi tetangga terdekat pertama. Vektor \vec{a}_1 dan \vec{a}_2 merupakan vektor kisi primitif yang panjangnya sama untuk konstanta kisi a . Belahan ketupat yang di arsir merupakan satu unit sel kristal yang terdiri oleh dua atom karbon A dan B	24
Gambar 3.4	Kisi balik <i>graphene</i> pada zona Brillouin pertama, di mana vektor \vec{b}_1 dan \vec{b}_2 adalah vektor kisi primitif pada kisi balik	25
Gambar 3.5	Efek Seebeck: Pembentukan potensial listrik sebagai respons terhadap gradien suhu	26
Gambar 3.6	Diagram alir <i>self-consistent</i> penyelesaian persamaan Kohn-Sham untuk perhitungan komputasi	40
Gambar 3.7	Bagan metode sintesis <i>graphene</i>	46
Gambar 3.8	Sistem CVD	48
Gambar 3.9	Mekanisme pertumbuhan <i>graphene</i> pada Cu melalui proses CVD ..	49
Gambar 3.10	Skema yang menggambarkan tahapan pertumbuhan <i>graphene</i> pada tembaga dengan CVD: (a) <i>foil</i> tembaga; (b) pembentukan nukleasi pulau-pulau <i>graphene</i> ; (c) pembesaran pulau <i>graphene</i> dengan orientasi kisi yang berbeda	50
Gambar 3.11	Spektrum gelombang elektromagnetik	51
Gambar 3.12	Penjalaran gelombang elektromagnet pada arah sumbu Z	51
Gambar 3.13	a. Interaksi cahaya dengan materi, b. Representasi skematis dari hamburan Rayleigh, hamburan Stokes Raman, hamburan Anti-Stokes Raman	54
Gambar 3.14	Interaksi berkas elektron yang datang pada sampel	55
Gambar 3.15	Interaksi volume dan kedalaman elektron terhambur karakteristik ..	55

Gambar 4.1	Tahapan penelitian eksperimental	58
Gambar 4.2	Sistem peralatan nitridasi	59
Gambar 4.3	Peralatan spektroskopi Raman	61
Gambar 4.4	Prinsip kerja spektroskopi Raman	61
Gambar 4.5	Peralatan SEM-EDX	62
Gambar 4.6	Skema bagian-bagian penting SEM.....	63
Gambar 4.7	Peralatan LSR-4	64
Gambar 4.8	Skema peletakan sampel	65
Gambar 4.9	Skema pengukuran Koefisien Seebeck	65
Gambar 4.10	Skema pengukuran Konduktivitas Listrik	66
Gambar 4.11	Perangkat <i>Personal Computer</i> (PC)	67
Gambar 4.12	Tahapan penelitian komputasi	69
Gambar 4.13	Tiga model konstruksi posisi atom doping pada struktur supersel <i>graphene</i> 4×4 : (a) <i>hollow</i> (H), (b) <i>bridge</i> (B) , dan (c) <i>top</i> (T)	73
Gambar 5.1	<i>Fitting</i> data energi total vs parameter kisi unit sel <i>monolayer graphene</i>	79
Gambar 5.2	<i>Fitting</i> data energi total vs parameter kisi supersel <i>monolayer graphene</i>	79
Gambar 5.3	(a) Struktur supersel <i>graphene</i> murni 4×4 setelah optimasi (tampak atas) (b) Struktur pita energi (c) DOS	81
Gambar 5.4	(a) Struktur supersel <i>graphene</i> 4×4 terdoping N setelah optimasi (tampak atas) (b) Struktur Pita energi (c) DOS (d) PDOS	83
Gambar 5.5.	Charge density difference dari sistem <i>graphene</i> terdoping N	85
Gambar 5.6	Spektrum Raman MLG-Murni dan terdoping N	86
Gambar 5.7	Gambar SEM dan komposisi unsur EDX dari MLG-Murni: (a dan c) morfologi, (b) spektrum EDX (dan tabel untuk persentase massa dan atom berbagai unsur), (d) total, (e) C, dan (f) Cu	88
Gambar 5.8	Gambar SEM dan komposisi unsur EDX dari MLG-N1: (a) morfologi, (b) spektrum EDX (dan tabel untuk persentase massa dan atom berbagai unsur), (c) total, (d) C, (e) N, dan (f) Cu	89
Gambar 5.9	Gambar SEM dan komposisi unsur EDX dari MLG-N2: (a) morfologi, (b) spektrum EDX (dan tabel untuk persentase massa dan atom berbagai unsur), (c) total, (d) C, (e) N, dan (f) Cu	90

Gambar 5.10	Gambar SEM dan komposisi unsur EDX dari MLG-N3: (a) morfologi, (b) spektrum EDX (dan tabel untuk persentase massa dan atom berbagai unsur), (c) total, (d) C, (e) N, dan (f) Cu	91
Gambar 5.11	(a) Struktur supersel <i>graphene</i> 4×4 terdoping Au setelah optimasi (tampak atas) (b) Struktur pita energi (c) DOS (d) PDOS	94
Gambar 5.12	Spektrum Raman MLG-Murni dan terdoping Au	95
Gambar 5.13	Gambar morfologi dan komposisi unsur dengan SEM-EDX dari MLG-Murni: (a dan c) morfologi, (b) spektrum EDX (dan tabel untuk persentase massa dan prosentase atom berbagai unsur), (d) total, (e) C, dan (f) Cu	98
Gambar 5.14	Gambar SEM dan komposisi unsur EDX dari MLG-Au1: (a) morfologi, (b) spektrum EDX (dan tabel untuk persentase massa dan prosentase atom berbagai unsur), (c) total, (d) C, (e) Au, dan (f) Cu	99
Gambar 5.15	Gambar <i>cross section</i> dengan SEM dari MLG-Au1	99
Gambar 5.16	Gambar SEM dan komposisi unsur EDX dari MLG-Au2: (a) morfologi, (b) spektrum EDX (dan tabel untuk persentase massa dan atom berbagai unsur), (c) total, (d) C, (e) Au, dan (f) Cu	101
Gambar 5.17	(Panel atas) Ketergantungan suhu dari (a) koefisien Seebeck, (b) konduktivitas listrik, (c) konduktivitas termal, dan (d) <i>figure of merit</i> dari supersel <i>graphene</i> murni. (Panel tengah) Ketergantungan suhu dari (e) koefisien Seebeck, (f) konduktivitas listrik, (g) konduktivitas termal, dan (h) <i>figure of merit</i> dari supersel <i>graphene</i> terdoping 6,25% N. (Panel bawah) Ketergantungan suhu dari (i) koefisien Seebeck, (j) konduktivitas listrik, (k) konduktivitas termal, dan (l) <i>figure of merit</i> dari supersel <i>graphene</i> terdoping 50% N	103
Gambar 5.18	Ketergantungan terhadap suhu dari (a) koefisien Seebeck (S), (b) konduktivitas listrik (σ_e/τ), (c) konduktivitas termal (κ_e/τ), dan (d) <i>figure of merit</i> (ZT) sebagai fungsi suhu	105
Gambar 5.19	Ketergantungan MLG-Murni dan setelah deposisi nitrogen (MLG-N1, MLG-N2, dan MLG-N3) pada suhu: (a) Koefisien Seebeck, (b) faktor daya, dan (c) resistivitas	109
Gambar 5.20	Ketergantungan MLG-Murni dan setelah deposisi Au (MLG-Au1 dan MLG-Au2) pada suhu: (a) Koefisien Seebeck, (b) faktor daya, dan (c) resistivitas	112

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1	Sifat termoelektrik <i>graphene</i> dan material dua dimensi	12
Tabel 2.2	Sifat termoelektrik sistem <i>graphene</i> (kajian eksperimental dan teoritis)	18
Tabel 4.1	VPS dan PAO	70
Tabel 4.2	Parameter komputasi yang digunakan	71
Tabel 5.1	Sifat struktural sistem supersel <i>graphene</i> terdoping N secara interstisial	82
Tabel 5.2	Rasio I_{2D}/I_G dan I_D/I_G dari MLG-murni dan setelah deposisi nitrogen	87
Tabel 5.3	Sifat struktural supersel <i>graphene</i> terdoping Au secara interstisial	92
Tabel 5.4	Rasio I_{2D}/I_G dan I_D/I_G dari MLG-murni dan setelah deposisi Au	96
Tabel 5.5	Sifat termoelektrik <i>graphene</i>	113

DAFTAR SINGKATAN

Singkatan	Nama	Halaman pertama digunakan
TEG	<i>Thermoelectric Generator</i>	1
PEDOT:PSS	poli(3,4-ethylenedioxythiophene):poli(styrenesulfonate)	2
PANI	polyaniline	2
CVD	<i>Chemical Vapor Deposition</i>	3
DFT	<i>Density Functional Theory</i>	4
VASP	<i>Vienna Ab initio Simulation Package</i>	5
DOS	<i>Density of States</i>	6
SEM	<i>Scanning Electron Microscopy</i>	7
EDX	<i>Energy Dispersive X-ray</i>	7
PF	<i>Power Factor</i>	12
SLG	<i>Single Layer Graphene</i>	14
FLG	<i>few-layered graphene</i>	16
GNR	<i>Graphene nano-ribbons</i>	17
C60	<i>Fullerenes</i>	21
LDA	<i>Local Density Approximation</i>	41
GGA	<i>Generalized Gradient Approximation</i>	42
OpenMX	<i>Open source package for Material eXplore</i>	43
LPAO	<i>Linear Pseudo Atomic Orbitals</i>	44
PECVD	<i>Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition</i>	46
Fismatel	Fisika Material dan Instrumentasi	48
MLG	<i>Multilayer Graphene</i>	60
PC	<i>Personal Computer</i>	67
XCrySDen	<i>X-window CRYstalline Structures and DENsities</i>	68
VPS	<i>Pseudopotentials</i>	70
PAO	<i>pseudo-atomic orbitals</i>	70
RF	<i>Rational Function</i>	72
H	<i>Hollow</i>	73
B	<i>Bridge</i>	73
T	<i>Top</i>	73

DAFTAR SIMBOL

Simbol	Nama	Halaman pertama digunakan
ZT	<i>figure of merit</i>	1
$\sigma_0 = \pi e^2 / 2h$	konduktivitas optik <i>universal</i>	3
ΔE_F	pergeseran Fermi	5
n	konsentrasi atom doping	5
S	koefisien Seebeck	12
a	unit sel	23
a_{CC}	panjang ikatan atom karbon dengan atom karbon	23
$\vec{\delta}_1, \vec{\delta}_2, \vec{\delta}_3$	vektor posisi atom B_i relatif terhadap atom A_i dalam ruang riil	23
\vec{b}_i	vektor kisi balik	24
\vec{a}_i	vektor kisi primitif kisi Kristal	24
δ_{ij}	delta Kronecker	25
ΔV	perbedaan potensial	26
ΔT	perbedaan suhu	26
σ_e	konduktivitas listrik	27
T	suhu mutlak	27
κ	konduktivitas termal	27
k_B	konstanta Boltzmann	27
e	pembawa muatan	27
h	tetapan Planck	27
m^*	massa efektif	27
n	konsentrasi pembawa muatan	27
μ	mobilitas pembawa muatan	27
κ_e	konduktivitas termal kontribusi elektron	27
κ_l	konduktivitas termal kontribusi <i>hole</i>	28
L	faktor Lorentz	28
q	muatan	28
n	jumlah elektron	28
μ_c	mobilitas pembawa muatan	28
J	rapat arus	29
J_Q	arus panas (atau rapat flux energi)	29
E	medan listrik	29
μ	potensial kimia	29
$f(\epsilon, \mu, T)$	fungsi distribusi Fermi – Dirac	29
$\Sigma_{ij}(\epsilon)$	tensor fungsi ditribusi transport	29
n	jumlah seluruh pita dan semua keadaan \vec{k} (termasuk spin)	29
$E_{n,\vec{k}}$	energi pita ke- n pada keadaan \vec{k}	29
$v_i(n, \vec{k})$	komponen ke- i dari kecepatan pita pada (n, k)	29
δ	fungsi delta Dirac	29
V_s	volume total sistem	29
N_k	jumlah k-point pada zone Brillouin	29
Ω_c	volume sel satuan	30
τ	waktu relaksasi	30

$v_i(n, \vec{k})$	kecepatan grup	30
ρ_{gr}	DOS	30
V_s	volume <i>graphene</i>	30
N	jumlah keadaan yang tersedia di bola Fermi	30
g_s, g_v	faktor degenerasi	30
$f_{FD}(E)$	fungsi distribusi Fermi-Dirac	31
$n(T)$	jumlah elektron konduksi	31
$p(T)$	jumlah hole konduksi	31
v_F	kecepatan Fermi	31
\hat{H}	Hamiltonian sistem banyak partikel	31
Ψ	fungsi gelombang sistem	31
\vec{r}_1, \vec{r}_2	vektor posisi elektron	32
\vec{R}_1, \vec{R}_2	vektor posisi inti	32
\hat{T}_e	energi kinetik elektron	32
\hat{T}_n	energi kinetik inti	32
\hat{V}_{en}	energi potensial elektron dengan inti	32
\hat{V}_{ee}	energi potensial elektron dengan elektron	33
\hat{V}_{nn}	energi potensial inti dengan inti	32
M	massa inti	32
Z	muatan inti	32
E_0	penyelesaian energi keadaan dasar pada persamaan Schrödinger	33
ϕ	fungsi gelombang	33
$V_{ext}(\vec{r})$	potensial eksternal	35
$n_0(\vec{r})$	kerapatan keadaan dasar	35
$E[n]$	fungsional universal untuk energi	36
$E_{HK}(n)$	fungsional energi sistem	36
$T(n)$	energi kinetik	36
$E_{int}(n)$	energi interaksi elektron	36
$V_{eks}(\vec{r})$	energi potensial eksternal	36
$n(\vec{r})$	kerapatan elektron	36
E_N	energi inti	36
$T_S[n(\vec{r})]$	energi kinetik elektron <i>non-interaction</i>	37
$E_H[n(\vec{r})]$	energi Hartree	37
$E_{XC}[n(\vec{r})]$	energi <i>exchange correlation</i>	37
λ	pengali Lagrange	38
$E_{XC}[n(\vec{r})]$	fungsional energi <i>exchange-correlation</i>	41
$\epsilon_{XC}(n(\vec{r}))$	energi <i>exchange correlation</i> perpartikel gas elektron	42
$\epsilon_C(n(\vec{r}))$	kontribusi <i>correlation</i> pada suatu gas homogen	42
r_s	radius Weigner-Seitz	42
ϵ_i^{AE}	nilai eigen elektron valensi	44
ϵ_i^{PS}	nilai eigen pseudo valensi	44
$p(r)$	polinomial orde enam	44
$\Psi_\mu(\vec{r})$	fungsi gelombang Kohn-Sam	44
i	indeks <i>sites</i>	44
$\alpha \equiv (p, l, m)$	indeks orbital	44
$R_{i,p,l}(r)$	fungsi gelombang radial	45

$V_{core}(r)$	potensial inti atom	45
Z	nomor atom	45
b_n	konstanta yang tergantung dari nilai r_1 dan r_c	45
$\vec{E}(\vec{r}, t)$	getaran medan listrik	52
$\vec{H}(\vec{r}, t)$	getaran medan magnet	52
$\varphi(\vec{r})$	fase gelombang elektromagnetik	52
\vec{k}	vektor gelombang	52
ν	frekwensi gelombang elektromagnetik	52
ρ	resistivitas	66
A	luas penampang sampel	66
L	jarak antar kedua <i>probe</i>	66
σ_e	konduktivitas listrik	66
ε_0	energi minimum	72
V_0	volume sel ketika energinya minimum	72
B_0	modulus bulk ketika energinya minimum	72
B'_0	turunan pertama dari B_0	72
$\sigma_e \tau^{-1}$	konduktivitas listrik relatif	75
κ_e	konduktivitas termal elektronik	75
κ_e	konduktivitas termal elektronik	75
K_n	koefisien transport	75
$\sigma_e(\varepsilon, T)$	spektrum konduktivitas pada ε dan T	75
ε	energi	75
f_{FD}	fungsi distribusi Fermi-Dirac	75
N	jumlah pembawa muatan per unit sel	77
L_a	ukuran kristalit	88
A	konstanta frekuensi eksitasi Raman	88
E_g	energi gap	102
L	bilangan Lorentz	105
R	fungsi hamburan	106