

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	i
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	ii
MOTTO DAN PERSEMBAHAN	iii
PRAKATA.....	iv
DAFTAR ISI.....	vii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL.....	xi
INTISARI.....	xii
ABSTRACT.....	xiii
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Batasan Masalah.....	3
1.4 Tujuan Penelitian	4
1.5 Manfaat Penelitian	4
1.6 Sistematika Penulisan	5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	7
BAB III DASAR TEORI	13
3.1 Material 2D	13
3.2 Sifat Elektronik Material dan Konsep <i>Band gap</i>	14
3.2.1 Definisi <i>Band gap</i> dalam Teori Pita Energi.....	15
3.2.2 <i>Band gap</i> pada Material 2D Semikonduktor.....	15
3.2.3 Hubungan Fisik Fitur Material dengan <i>Band gap</i> pada Material 2D	16
3.2.4 Pengaruh Dimensi, Simetri, dan Ketebalan terhadap <i>Band gap</i> ...	17
3.3 Density Functional Theory (DFT) sebagai Data.....	18
3.3.1 Prinsip Dasar Density Functional Theory	18
3.3.2 Pendekatan Kohn-Sham dalam DFT.....	19
3.3.3 Fungsi Pertukaran-Korelasi PBE	19
3.3.4 Keterbatasan <i>Band gap</i> Kohn-Sham (PBE).....	20
3.4 Fitur Fisik Global dalam Fisika Material.....	21

3.4.1	Energi Total dan Energi Pembentukan	21
3.4.2	Energi terhadap <i>convex hull</i> (ehull) dan Stabilitas Material	21
3.4.3	Ketebalan Material dan Pengaruh Dimensi.....	22
3.4.4	Simetri Kristal dan <i>Inversion Symmetry</i>	22
3.4.5	Fitur Global sebagai Representasi Sederhana Material	23
3.5	<i>Machine learning</i> dalam Fisika Material	24
3.5.1	Konsep Dasar <i>Machine learning</i> untuk Regresi	24
3.5.2	Peran <i>Machine learning</i> sebagai Pendukung DFT.....	25
3.5.3	Hubungan Nonlinear antara Fitur Fisik dan Sifat Elektronik	25
3.6	Random Forest	26
3.6.1	Konsep <i>Decision tree</i>	26
3.6.2	<i>Ensemble Learning dan Bagging</i>	27
3.6.3	Karakteristik Random Forest dan Masalah Regresi.....	27
3.7	Extreme Gradient Boosting (XGBoost).....	28
3.7.1	Konsep <i>Boosting</i>	28
3.7.2	Pembelajaran Residual dan Optimisasi.....	28
3.7.3	Keunggulan XGBoost pada Data Kompleks.....	29
3.8	Evaluasi Model Regresi	30
3.8.1	Mean Absolute Error (MAE)	30
3.8.2	Root Mean Square Error (RMSE).....	31
3.8.3	Koefisien Determinasi (R^2)	31
3.9	Interpretabilitas Model dalam <i>Machine learning</i>	32
3.9.1	Pentingnya Interpretabilitas dalam Fisika Material	32
3.9.2	Konsep Dasar <i>Shapley Value</i>	33
3.10	Shapley Additive exPlanations (SHAP).....	33
3.10.1	Prinsip Dasar Metode SHAP.....	34
3.10.2	SHAP pada Model Berbasis Pohon.....	35
3.10.3	Interpretasi Fisik Kontribusi Fitur Menggunakan SHAP	35
BAB IV METODE PENELITIAN		37
4.1	Waktu dan Tempat Penelitian	37
4.2	Alat dan Bahan Penelitian.....	37
4.2.1	Alat.....	37
4.2.2	Bahan.....	37
4.3	Skema Penelitian.....	38

4.4	Prosedur Penelitian.....	39
4.4.1	Identifikasi Masalah dan Studi Literatur.....	39
4.4.2	Akuisisi dan Karakteristik Data	40
4.4.3	Pra-pemrosesan Data.....	41
4.4.4	Pembagian Data dan Pelatihan Model	41
4.4.5	Evaluasi Performa Model.....	42
4.4.6	Interpretasi Model dan Analisis Hasil.....	42
BAB V HASIL DAN PEMBAHASAN.....		43
5.1	Dataset C2DB dan Fitur Material 2D.....	43
5.2	Karakteristik Statistik Dataset.....	45
5.3	Pra-pemrosesan dan Pembagian Data	47
5.4	Training Model.....	49
5.5	Kinerja Model Prediksi <i>Band gap</i>	50
5.6	Perbandingan Nilai Prediksi dan Aktual	52
5.7	Interpretasi Model dengan SHAP	55
5.8	Keterbatasan Penelitian	58
5.9	Arah Pengembangan dan Pengayaan Representasi Fitur	59
BAB VI KESIMPULAN DAN SARAN		61
6.1	Kesimpulan	61
6.2	Saran.....	61
DAFTAR PUSTAKA		63
LAMPIRAN.....		67