

DAFTAR ISI

Halaman Judul	ii
Halaman Pengesahan	iii
Halaman Pernyataan	iv
Halaman Persembahan	v
Halaman Motto	vi
PRAKATA	vii
DAFTAR LAMBANG DAN SINGKATAN	xvii
INTISARI	xviii
ABSTRACT	xix
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Perumusan Masalah	3
1.3 Batasan Masalah	3
1.4 Tujuan Penelitian	3
1.5 Manfaat Penelitian	4
1.6 Sistematika Penulisan Skripsi	4
II Tinjauan Pustaka	5
III LANDASAN TEORI	10
3.1 Silikon Karbida	10
3.1.1 Struktur kristal silikon karbida dua dimensi <i>monolayer</i>	11
3.1.2 Struktur kristal silikon karbida dua dimensi <i>bilayer</i>	13
3.2 Pendekatan Born-Oppenheimer	15
3.3 Pendekatan Hartree-Fock	17
3.4 Density Functional Theory	18
3.4.1 Teorema I (Hohenberg-Kohn 1)	19

3.4.2	Teorema II (Hohenberg-Kohn 2)	20
3.4.3	Persamaan Kohn-Sham	21
3.5	Fungsi Korelasi dan Pertukaran	23
3.5.1	<i>Local density approximation</i> (LDA)	23
3.5.2	<i>Generalized gradient approximation</i> (GGA)	24
3.6	Pseudopotensial	24
3.7	Teorema Bloch	25
3.8	Energi <i>Cut-off</i>	26
3.9	Teori Pita	26
3.10	<i>Defect</i>	28
3.11	Energi Formasi	29
3.12	Stronsium	30
3.13	Perak	30
IV	METODE PENELITIAN	31
4.1	Metode Komputasi	31
4.2	Tahapan Komputasi	31
4.2.1	Optimasi geometri SiC dua dimensi <i>bilayer</i>	31
4.2.2	Konstruksi unit sel dan super sel SiC <i>bilayer</i>	32
4.2.3	Perhitungan energi formasi dan sktuktur pita	34
4.3	Sarana <i>software</i> Pendukung	36
4.3.1	WinSCP	36
4.3.2	Tera Term	37
4.3.3	JuiceSSH	37
4.4	Diagram Alir	38
V	HASIL DAN PEMBAHASAN	39
5.1	Tinjauan Terhadap Sistem Geometri SiC <i>Bilayer</i>	39
5.1.1	Sistem geometri SiC <i>bilayer</i> murni	39
5.1.2	Sistem geometri SiC <i>bilayer interstitial</i> Sr pada <i>hollow-site</i>	42
5.1.3	Sistem geometri SiC <i>bilayer interstitial</i> Ag pada <i>hollow-site</i>	45
5.2	Perhitungan Energi Formasi	46
5.3	Tinjauan pada pita tenaga	47
5.3.1	Pita tenaga sistem SiC <i>bilayer</i> murni	47
5.3.2	Pita tenaga sistem <i>bilayer interstitial</i> Sr dan Ag pada <i>hollow-site</i>	49

VI KESIMPULAN	53
6.1 Kesimpulan	53
6.2 Saran	54

DAFTAR TABEL

5.1	Data variasi nilai jarak antar lapisan (d) terhadap energi sistem SiC <i>bilayer</i>	39
5.2	Data struktur SiC <i>bilayer</i> supersel $4 \times 4 \times 1$ pada keadaan murni. d_{Si-C} (Å) dinotasikan dengan jarak antar dua atom Si dan C yang berikatan pada satu lapisan, d (Å) merupakan jarak antar lapisan . . .	40
5.3	Data struktur SiC <i>bilayer</i> supersel AA <i>stacking</i> $4 \times 4 \times 1$ pada keadaan ditambah atom Sr, d_{Si-C} (Å) dinotasikan dengan jarak antar dua atom Si dan C yang berikatan pada satu lapisan, $d_{Si_{top1}-C}$ (Å) dinotasikan dengan jarak antara atom Si puncak lapisan 1 dan C yang berikatan, $d_{Si_{top2}-C}$ (Å) dinotasikan dengan jarak antara atom Si puncak lapisan 2 dan C yang berikatan, $d_{Si_{top}-Sr}$ (Å) merupakan jarak antara atom Si puncak dan Sr yang berikatan serta $d_{Si_{top1}-Si_{top2}}$ jarak antara atom Si puncak lapisan 1 dan lapisan 2 yang berikatan	43
5.4	Data struktur SiC <i>bilayer</i> supersel AB' <i>stacking</i> $4 \times 4 \times 1$ pada keadaan ditambah atom Sr, d_{Si-C} (Å) dinotasikan dengan jarak antar dua atom Si dan C yang berikatan pada satu lapisan, $d_{Si_{top1}-C}$ (Å) dinotasikan dengan jarak antara atom Si puncak lapisan 1 dan C yang berikatan, $d_{Si_{top2}-C}$ (Å) dinotasikan dengan jarak antara atom Si puncak lapisan 2 dan C yang berikatan, $d_{Si_{top}-Sr}$ (Å) merupakan jarak antara atom Si puncak dan Sr yang berikatan serta $d_{Si_{top1}-Si_{top2}}$ jarak antara atom Si puncak lapisan 1 dan lapisan 2 yang berikatan	44
5.5	Hasil perhitungan energi formasi sistem SiC <i>bilayer</i>	47
5.6	Hasil perhitungan celah tenaga sistem SiC <i>bilayer</i> murni (referensi dari You dan Zhao Lan (2018))	47
5.7	Hasil perhitungan celah tenaga sistem SiC <i>bilayer</i> AA dan AB' <i>stacking</i> dengan <i>interstitial</i> Sr dan Ag	50

DAFTAR GAMBAR

2.1	Struktur atomik lapisan SiC <i>bilayer</i> dengan <i>defect</i> atom Flour, gambar (a) tampak atas dan tampak samping struktur I , (b) tampak atas dan tampak samping struktur II, (<i>gambar diadaptasi dari Gao dkk (2011)</i>)	7
3.1	Klasifikasi kisi kristal bravais dua-dimensi, (a) <i>square</i> , (b) <i>rectangular</i> , (c) <i>hexagonal</i> , (d) <i>centered rectangular</i> dan (e) <i>oblique</i> (<i>gambar diadaptasi dari Tsutaoka dkk (2014)</i>)	11
3.2	Struktur atomik <i>honeycomb</i> SiC <i>monolayer</i> dua dimensi dengan bu- latan biru dan coklat berturut-turut adalah atom silikon dan karbon (<i>gambar diadaptasi dari Bekaroglu dkk (2010)</i>)	12
3.3	(a) Struktur pita tenaga (b) mode fonon SiC dua dimensi. Tanaga nol dalam stuktur pita diatur pada level Fermi (<i>gambar diadaptasi dari Bekaroglu dkk (2010)</i>)	13
3.4	Struktur <i>bilayer</i> pada <i>graphene</i> sebagai analogi dari struktur SiC <i>bi- layer</i> , a_1 dan a_2 merupakan vektor kisi Bravais (<i>gambar diadaptasi dari McCann (2012)</i>)	14
3.5	Model struktur atomik (a) AA, (b) AB, (c) AB' <i>bilayer stacking</i> pada <i>graphene</i> sebagai analogi dari struktur SiC <i>bilayer</i> (<i>gambar diadaptasi dari Fumihiko (2016)</i>)	15
3.6	Gambar pita tenaga material (<i>gambar diadaptasi dari Kittel (2005)</i>) .	27
3.7	Gambar celah pita tenaga langsung dan tidak langsung pada material semikonduktor (<i>gambar diadaptasi dari Igumbor (2017)</i>)	28
3.8	Ilustrasi cacat titik yakni kekosongan, <i>interstisial</i> , substitusi (<i>gambar diadaptasi dari Ruihuan (2015)</i>)	29
4.1	Sistem SiC <i>bilayer</i> murni $1 \times 1 \times 1$, gambar (a) AA <i>stacking</i> dan gambar (b) AB' <i>stacking</i> dengan d adalah jarak antar lapisan, bulatan warna kuning menunjukkan atom silikon dan bulatan abu-abu menun- jukkan atom karbon (Simulasi model dijalankan dengan menggunak- an program PHASE)	33

- 4.2 Sistem SiC *bilayer* dengan supersel $4 \times 4 \times 1$ pada keadaan murni yang belum teroptimasi, gambar (a) dan (b) merupakan sistem SiC *bilayer AA stacking* tampak atas dan tampak samping secara berurutan. Sedangkan untuk gambar (c) dan (d) merupakan sistem SiC *bilayer AB' stacking*, bulatan warna kuning menunjukkan atom silikon dan bulatan abu-abu menunjukkan atom karbon. 34
- 4.3 Sistem SiC *bilayer* dengan supersel $4 \times 4 \times 1$ yang belum teroptimasi pada keadaan ditambah dengan atom Sr yang ditempatkan pada *hollow site* di antara kedua lapisan, di mana untuk gambar (a) dan (b) merupakan sistem SiC *bilayer AA stacking* tampak atas dan tampak samping secara berurutan. Sedangkan untuk gambar (c) dan (d) merupakan sistem SiC *bilayer AB' stacking* tampak atas dan tampak samping secara berurutan. Bulatan warna kuning menunjukkan atom silikon, bulatan abu-abu menunjukkan atom karbon serta bulatan hijau menunjukkan atom Sr (Simulasi model dijalankan dengan menggunakan program PHASE) 35
- 4.4 Sistem SiC *bilayer* dengan supersel $4 \times 4 \times 1$ yang belum teroptimasi pada keadaan ditambah dengan atom Ag yang ditempatkan pada *hollow site* di antara kedua lapisan, di mana untuk gambar (a) dan (b) merupakan sistem SiC *bilayer AA stacking* tampak atas dan tampak samping secara berurutan. Sedangkan untuk gambar (c) dan (d) merupakan sistem SiC *bilayer AB' stacking* tampak atas dan tampak samping secara berurutan. Bulatan warna kuning menunjukkan atom silikon, bulatan abu-abu menunjukkan atom karbon serta bulatan abu-abu berukuran besar menunjukkan atom Ag (Simulasi model dijalankan dengan menggunakan program PHASE) 36
- 4.5 Diagram alir yang dilakukan pada penelitian ini 38
- 5.1 Grafik energi sistem (E) vs jarak antar lapisan SiC *bilayer* (d) 40
- 5.2 Hasil optimasi struktur supersel SiC *bilayer* $4 \times 4 \times 1$ murni AA *stacking*, gambar (a) dan (b) merupakan sistem SiC *bilayer* tampak atas dan tampak samping secara berurutan (Simulasi model dijalankan dengan menggunakan program PHASE) 41

5.3	Hasil optimasi struktur supersel SiC <i>bilayer</i> $4 \times 4 \times 1$ murni AB' <i>stacking</i> , gambar (a) dan (b) merupakan sistem SiC <i>bilayer</i> tampak atas dan tampak samping secara berurutan (Simulasi model dijalankan dengan menggunakan program PHASE)	41
5.4	Hasil optimasi struktur supersel SiC <i>bilayer</i> $4 \times 4 \times 1$ AA <i>stacking</i> dengan <i>defect</i> Sr pada posisi <i>hollow-site</i> , gambar (a) dan (b) merupakan sistem SiC <i>bilayer</i> tampak atas dan tampak samping secara berurutan (Simulasi model dijalankan dengan menggunakan program PHASE) .	42
5.5	Hasil optimasi struktur supersel SiC <i>bilayer</i> $4 \times 4 \times 1$ AB' <i>stacking</i> dengan <i>defect</i> Sr pada posisi <i>hollow-site</i> , gambar (a) dan (b) merupakan sistem SiC <i>bilayer</i> tampak atas dan tampak samping secara berurutan (Simulasi model dijalankan dengan menggunakan program PHASE) .	44
5.6	Hasil optimasi struktur supersel SiC <i>bilayer</i> $4 \times 4 \times 1$ AA <i>stacking</i> dengan <i>defect</i> pada Ag <i>hollow-site</i> , gambar (a) dan (b) merupakan sistem SiC <i>bilayer</i> tampak atas dan tampak samping secara berurutan (Simulasi model dijalankan dengan menggunakan program PHASE) .	45
5.7	Hasil optimasi struktur supersel SiC <i>bilayer</i> $4 \times 4 \times 1$ AB' <i>stacking</i> dengan <i>defect</i> Ag pada posisi <i>hollow-site</i> , gambar (a) dan (b) merupakan sistem SiC <i>bilayer</i> tampak atas dan tampak samping secara berurutan (Simulasi model dijalankan dengan menggunakan program PHASE)	46
5.8	Celah pita tenaga sistem SiC <i>bilayer</i> murni dua dimensi AA <i>stacking</i> .	48
5.9	Celah pita tenaga sistem SiC <i>bilayer</i> murni dua dimensi AB' <i>stacking</i> .	48
5.10	Celah pita tenaga sistem SiC <i>bilayer</i> AA <i>stacking</i> dengan <i>defect</i> Sr <i>hollow-site</i> . Sr_1, Sr_2, Sr_3 , berturut-turut adalah jarak antara maksimum pita valensi dengan minimum pita <i>impurity</i> Sr, jarak antara 2 <i>impurity band</i> , jarak antara maksimum pita valensi dengan minimum pita konduksi.	50
5.11	Celah pita tenaga sistem SiC <i>bilayer</i> AA <i>stacking</i> dengan <i>defect</i> Ag <i>hollow-site</i> . Ag_1 merupakan jarak antara maksimum pita valensi dengan minimum pita <i>impurity</i> Ag, Ag_2 jarak antara maksimum pita <i>impurity</i> Ag dengan minimum pita konduksi serta Ag_3 merupakan jarak antara maksimum pita valensi dengan minimum pita konduksi .	51

- 5.12 Celah pita tenaga sistem SiC *bilayer* AB' *stacking* dengan *defect* Sr *hollow-site*. Sr_1, Sr_2, Sr_3 , berturut-turut adalah jarak antara maksimum pita valensi dengan minimum pita *impurity* Sr, jarak antara 2 *impurity band*, jarak antara maksimum pita valensi dengan minimum pita konduksi. 52
- 5.13 Celah pita tenaga sistem SiC *bilayer* AB' *stacking* dengan *defect* Ag *hollow-site*. Ag_1 merupakan jarak antara maksimum pita valensi dengan minimum pita *impurity* Ag, Ag_2 jarak antara maksimum pita *impurity* Ag dengan minimum pita konduksi serta Ag_3 merupakan jarak antara maksimum pita valensi dengan minimum pita konduksi . 52

DAFTAR LAMBANG DAN SINGKATAN

\AA	Amstrong
Ag	<i>Argentum</i>
C	Karbon
Cs	<i>Caesium</i>
CBM	Pita konduksi maksimum
DFT	<i>Density Functional Theory</i>
d	Jarak antar lapisan
d_{Si-C}	<i>Bond length</i> silikon dan karbon
$d_{Si_{top1}-C}$	Jarak antara atom Si puncak lapisan 1 dan C yang berikatan
$d_{Si_{top2}-C}$	Jarak antara atom Si puncak lapisan 2 dan C yang berikatan
$d_{Si_{top}-Sr}$	Jarak antara atom Si puncak dan Sr yang berikatan
$d_{Si_{top1}-C}$	Jarak antara atom Si puncak lapisan 1 dan C yang berikatan
$d_{Si_{top2}-C}$	Jarak antara atom Si puncak lapisan 2 dan C yang berikatan
$d_{Si_{top1}-Si_{top2}}$	Jarak antara atom Si puncak lapisan 1 dan lapisan 2 yang berikatan
E_{cutt}	Energi <i>cut-off</i>
$E(d, q)$	Total energi sistem <i>defect</i>
$E^f(d, q)$	Energi formasi
E_g	Celah tanaga
GGA	<i>Generalized Gradient Approximation</i> (GGA)
FCC	<i>Face Centered Cubic</i>
<i>h-site</i>	<i>Hollow site</i>
HPC	<i>High Performance Computer</i>
MOSFET	<i>Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistors</i>
LDA	<i>Local Density Approximation</i>
LIPI	Lembaga Pengetahuan Indonesia
Si	Silikon
Sr	Stronsium
SiC	Silikon karbida
$r(c)$	Radius <i>cut-off</i>
Ry	Rydberg
VBM	Pita valensi maksimum
μ	Potensial kimia