

DAFTAR ISI

Halaman Judul	ii
Halaman Pengesahan	iii
Halaman Pernyataan	iv
Halaman Persembahan	v
Halaman Motto	vi
PRAKATA	vii
DAFTAR LAMBANG DAN SINGKATAN	xiii
INTISARI	xiv
ABSTRACT	xv
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Perumusan Masalah	2
1.3 Batasan Masalah	2
1.4 Tujuan Penelitian	3
1.5 Manfaat Penelitian	3
1.6 Sistematika Penulisan Skripsi	3
II TINJAUAN PUSTAKA	5
III LANDASAN TEORI	7
3.1 Prinsip-prinsip Density Functional Theory	7
3.1.1 Pendekatan Born - Oppenheimer	8
3.1.2 Asas Variasi	8
3.1.3 Pendekatan Hartree-Fock	10
3.2 Density Functional Theory	12
3.2.1 Teorema Hohenberg-Kohn	13
3.2.2 Persamaan Kohn-Sham	14

3.2.3	Persamaan Kohn Sham dan-Asas Variasi	15
3.2.4	Fungsional Pertukaran-Korelasi (<i>Exchange-Correlation Functional</i>)	17
3.2.4.1	<i>Local Density Approximation (LDA)</i>	17
3.2.4.2	<i>Generalized Gradient Approximations (GGA)</i>	19
3.2.4.3	Metode Gelombang Bidang	23
3.2.4.4	Metode Potensial-semu (<i>Pseudopotential</i>)	25
3.3	Persamaan Keadaan Birch-Murnaghan (<i>Birch-Murnaghan Equation of State</i>)	28
3.4	Germanene	29
3.4.1	Parameter Struktural dan Sifat Elektronik <i>Germanene</i>	30
3.4.2	Impuritas pada Germanene	31
3.5	<i>Iridium</i>	33
3.5.1	Sifat Atomik dan Mekanik <i>Ir</i>	33
3.5.2	Sifat Fisis <i>Ir</i>	33
3.6	<i>Platinum</i>	34
3.6.1	Sifat Atomik dan Mekanik <i>Pt</i>	35
3.6.2	Sifat Fisis <i>Pt</i>	36
IV	METODE PENELITIAN	37
4.1	Waktu dan Tempat Penelitian	37
4.2	Metode Komputasi Berbasis DFT	37
4.3	Tahap Penelitian	38
4.3.1	Optimasi Tetapan Kisi <i>Germanene</i>	38
4.3.2	Konstruksi Unit Sel dan Super Sel Germanene	39
4.3.3	Optimasi Super Sel <i>Germanene</i> Murni dan Super Sel <i>Germanene</i> dengan Impuritas <i>Ir</i> dan <i>Pt</i>	40
4.3.4	Optimasi Tetapan Kisi Atom Impuritas dan Perhitungan Energi Formasi Sistem	40
4.3.5	Perhitungan Pita Energi	41
V	HASIL DAN PEMBAHASAN	43
5.1	Tinjauan terhadap Parameter Komputasi	43
5.2	Tinjauan terhadap Struktur <i>Germanene</i> beserta Konfigurasi Sistem <i>Defect</i>	44
5.3	Tinjauan terhadap Struktur Geometri Super sel <i>Germanene</i>	45

5.3.1	Sistem <i>Germanene</i> Murni	45
5.3.2	Sistem <i>Defect Germanene</i>	46
5.4	Tinjauan terhadap Optimasi Atom Impuritas dan Energi Formasi Sistem	47
5.5	Tinjauan terhadap Sifat Elektronik <i>Germanene</i> dengan Impuritas <i>Ir</i> dan <i>Pt</i>	49
VI	Penutup	54
6.1	Kesimpulan	54
6.2	Saran	54
A	Fungsional dan Derivatif Fungsional	59

DAFTAR TABEL

3.1	Parameter Struktur Germanene-LB (Cahangirov <i>dkk</i> , 2009)	31
3.2	Sifat Atomik dan Mekanik Ir (Lide, 2003)	34
3.3	Sifat Fisis Ir (Lide, 2003)	34
3.4	Sifat Atomik dan Mekanik Pt (Lide, 2003)	35
3.5	Sifat Fisis Pt (Lide, 2003)	36
5.1	Struktur Geometri Sistem <i>Defect-Germanene</i>	47
5.2	Parameter Atom Impuritas Hasil <i>Fitting</i> BM-EOS	48
5.3	Parameter Teroptimasi Atom Impuritas	49
5.4	Energi Optimum dan Energi Formasi Sistem <i>Defect Germanene</i>	49

DAFTAR GAMBAR

4.1	(a) Unit sel <i>Ge</i> dan (b) : super Sel <i>Ge</i> $4 \times 4 \times 1$	39
4.2	Super sel <i>germanene</i> $4 \times 4 \times 1$ dengan impuritas pada konfigurasi <i>hollow-site</i>	40
4.3	Rute zona <i>brilouin</i> pertama pada <i>germanene</i>	41
5.1	Konfigurasi impuritas pada super sel <i>Ge</i> (a) : <i>t-site</i> tampak atas, (b) : <i>t-site</i> tampak depan, (c) : <i>v-site</i> tampak atas, (d) <i>v-site</i> tampak depan, (e) : <i>h-site</i> tampak atas, (f) : <i>h-site</i> tampak depan, (g) :	44
5.2	Kurva Energi terhadap Volume Optimasi <i>Ge</i> dengan <i>fitting</i> BM-EOS .	45
5.3	Super sel <i>Ge</i> $4 \times 4 \times 1$, (a) : tampak atas, (b) : tampak depan	46
5.4	Super Sel Sistem <i>Defect Ge</i> pada Konfigurasi <i>Hollow-Site</i> dengan, (a) : impuritas <i>Ir</i> tampak atas (b) : impuritas <i>Ir</i> tampak depan, (c) : impuritas <i>Pt</i> tampak atas, (d) : impuritas <i>Pt</i> tampak depan	47
5.5	Kurva energi terhadap volume sel <i>fitting</i> BM-EOS atom impuritas, (a) : <i>Ir</i> , (b) : <i>Pt</i>	48
5.6	Kurva pita energi (a) <i>germanene</i> murni (b) <i>germanene</i> dengan impu- ritas <i>Ir</i> (c) <i>germanene</i> dengan impuritas <i>Pt</i> ,	53

DAFTAR LAMBANG DAN SINGKATAN

BM-EOS	<i>Birch Murnaghan Equation of State</i>
DFT	<i>Density Functional Theory</i>
DSSDI	Direktorat Sistem dan Sumber Daya Informasi
FBZ	Zona Brillouin Pertama (<i>First Brillouin Zone</i>)
<i>fcc</i>	<i>face centered cubic</i>
FET	<i>Field Effect Transistor</i>
GGA	<i>Generalized Gradient Approximation</i>
HPC	<i>High Performance Computer</i>
LB	<i>low buckled</i>
LDA	<i>Local Density Approximation</i>
LIPI	Lembaga Ilmu Pengetahuan Indonesia
LSDA	<i>Local Spin Density Approximation</i>
PL	<i>planar</i>
SCF	<i>self-consistent field</i>
STM	<i>Scanning Tunneling Microscope</i>
TFET	<i>Tunneling Field Effect Transistor</i>
<i>t-site</i>	<i>top-site</i>
<i>v-site</i>	<i>valley-site</i>
<i>h-site</i>	<i>hollow-site</i>
<i>b-site</i>	<i>bridge-site</i>
<i>Cu</i>	tembaga
<i>Ge</i>	germanium
<i>Ir</i>	iridium
<i>Pt</i>	platinum
E_0	energi minimum
V_0	volume sel saat energi minimum
B_0	modulus Bulk pada V_0
B'_0	turunan pertama dari modulus Bulk, pada volume saat energi minimum
E_{form}	energi formasi
E_c	<i>conduction band edge</i>
E_v	<i>valence band edge</i>
b	panjang lengan ikatan
θ	sudut yang dibentuk dua atom <i>Ge</i> yang berikatan dengan atom impuritas
d	nilai <i>buckling</i>
h_{za}	perbedaan ketinggian atom impuritas dengan atom <i>Ge</i> pada subkisi A
h_{zb}	perbedaan ketinggian atom impuritas dengan atom <i>Ge</i> pada subkisi B