

## DAFTAR ISI

|   |           |
|---|-----------|
| Halaman Judul   | ii        |
| Halaman Pengesahan  | iii       |
| Halaman Pernyataan  | iv        |
| Halaman Persembahan   | v         |
| Halaman Motto   | vi        |
| PRAKATA   | vii       |
| DAFTAR ISI  | ix        |
| DAFTAR GAMBAR   | xiv       |
| INTISARI  | xv        |
| ABSTRACT  | xvi       |
| <b>I PENDAHULUAN</b>  | <b>1</b>  |
| 1.1 Latar Belakang Masalah . . . . .                            | 1         |
| 1.2 Perumusan Masalah . . . . .                                 | 4         |
| 1.3 Perumusan Masalah . . . . .                                 | 4         |
| 1.4 Batasan Masalah . . . . .                                   | 4         |
| 1.5 Tujuan Penelitian . . . . .                                 | 5         |
| 1.6 Manfaat Penelitian . . . . .                                | 5         |
| 1.7 Sistematika Penulisan . . . . .                             | 5         |
| <b>II TINJAUAN PUSTAKA</b>                                      | <b>7</b>  |
| <b>III LANDASAN TEORI</b>                                       | <b>12</b> |
| 3.1 Persamaan Schrödinger pada Sistem Elektron Banyak . . . . . | 12        |
| 3.2 Pendekatan Born Oppenheimer . . . . .                       | 14        |
| 3.3 Dasar Density Functional Theory . . . . .                   | 15        |
| 3.4 Density Functional Theory . . . . .                         | 16        |

|           |   |           |
|-----------|---|-----------|
| 3.5       | <i>Fungsional Energi</i> . . . . .  | 17        |
| 3.6       | <i>Skema Algoritma Kohn-Sham</i> . . . . .  | 18        |
| 3.7       | <i>Gelombang Bidang pada DFT</i> . . . . .  | 21        |
| 3.7.1     | Teorema Bloch . . . . .   | 21        |
| 3.7.2     | Energi Cut-Off pada DFT . . . . .   | 21        |
| 3.7.3     | <i>DFT K-Points</i> . . . . .   | 22        |
| 3.8       | <i>Pseudopotential DFT</i> . . . . .  | 24        |
| 3.9       | Simetri dan <i>Point Group</i> . . . . .  | 25        |
| 3.9.1     | <i>Point Group</i> . . . . .  | 26        |
| 3.10      | <i>Defect</i> pada Sistem Kristal . . . . .   | 27        |
| 3.10.1    | <i>Interstitialcy Defect</i> . . . . .  | 28        |
| 3.10.2    | <i>Vacancy Defect</i> . . . . .   | 29        |
| 3.10.3    | <i>Substitutional Defect</i> . . . . .  | 30        |
| 3.11      | <i>Gray Tin (<math>\alpha</math>-Sn)</i> . . . . .  | 32        |
| <b>IV</b> | <b>METODE PENELITIAN</b>  | <b>34</b> |
| 4.1       | Sarana Penelitian . . . . .   | 34        |
| 4.2       | Tahapan Penelitian . . . . .  | 35        |
| 4.2.1     | Penentuan nilai K-Point dan Energi Cutoff pada sistem kristal Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . .                      | 37        |
| 4.2.2     | Optimasi Konstanta Kisi pada Material Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . .  | 37        |
| 4.2.3     | Konstruksi <i>supercell</i> 64 Atom Pada Material Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . .                                  | 39        |
| 4.2.4     | Konstruksi <i>supercell</i> 64 Atom dengan <i>Defect Monovacancy</i> Pada Material Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . . | 41        |
| 4.2.5     | Perhitungan Energi Formasi pada Material Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . .   | 41        |
| 4.2.6     | Perhitungan Phonon Pada Sistem Perfect dan Monovacancy Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . .                             | 42        |
| 4.2.7     | Perhitungan Konsentrasi Vacancy Pada Sistem Perfect dan Monovacancy Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . .                | 48        |
| <b>V</b>  | <b>HASIL DAN PEMBAHASAN</b>   | <b>51</b> |
| 5.1       | K-point dan Energi Cutoff Pada Unit Cell Sistem Kristal Grey Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . .                            | 51        |
| 5.1.1     | K-point . . . . .   | 51        |
| 5.1.2     | Energi Cutoff . . . . .   | 54        |

|   |   |            |
|---|---|------------|
| 5.2   | Konstanta Kisi Pada Sistem <i>Grey Tin (<math>\alpha</math>-Sn) Monovacancy</i> . .                             | 56         |
| 5.3   | Konstruksi <i>Supercell Perfect</i> dan <i>Monovacancy</i> Sistem Kristal<br>Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . . | 58         |
| 5.4   | Energi Formasi Sistem <i>Grey Tin Monovacancy</i> . . . . .   | 65         |
| 5.5   | Gejala Phonon dan Rapat Keadaan Phonon (Phonon-DOS) Sis-<br>tem Kristal Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . .      | 66         |
| 5.6   | Konsentrasi <i>Vacancy</i> pada Sistem Monovacancy Grey Tin ( $\alpha$ -Sn)                                     | 70         |
| <b>VIPENUTUP</b>  |   | <b>74</b>  |
| 6.1   | Kesimpulan . . . . .  | 74         |
| 6.2   | Saran . . . . .   | 74         |
| <b>DAFTAR PUSTAKA</b>   |   | <b>75</b>  |
| <b>A SOURCE CODE UNTUK INPUT FILE PADA PROGRAM<br/>PHASE-0</b>  |   | <b>78</b>  |
| <b>B SOURCE CODE Kalkulasi Phonon-DOS dan Konsentrasi Va-<br/>cancy pada sistem Gray Tin (<math>\alpha</math>-Sn)</b> |   | <b>100</b> |

## DAFTAR TABEL

|     |  |    |
|-----|--|----|
| 3.1 | Tabel karakteristik <i>Point Group</i> $T_d$ . . . . .   | 27 |
| 3.2 | Tabel karakteristik <i>Point Group</i> $D_{2d}$ . . . . .  | 27 |
| 3.3 | Tabel karakteristik <i>Grey Tin</i> (Jones, W.N. ,1949) . . . . .  | 33 |
| 4.1 | Tabel Spesifikasi Super Komputer pada GRID LIPI digunakan<br>untuk Kalkulasi dan Simulasi Sistem Kristal Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) .      | 35 |
| 5.1 | Tabel Hasil Perhitungan DFT Pada Sistem Kristal Gray Tin ( $\alpha$ -<br>Sn) Dengan Variasi K-Point Terhadap Energi Total Sistem . . .   | 52 |
| 5.2 | Tabel Hasil Perhitungan DFT Pada Sistem Kristal Gray Tin ( $\alpha$ -<br>Sn) Dengan Variasi Energi Cutoff Terhadap Energi Total . . . .  | 54 |
| 5.3 | Tabel Volume <i>Defective</i> pada Sistem <i>Supercell</i> kristal Gray Tin<br>( $\alpha$ -Sn) dengan variasi terhadap K-point . . . . . | 63 |
| 5.4 | Tabel Hasil Perhitungan energi formasi sistem monovacancy Gray<br>Tin ( $\alpha$ -Sn) untuk Kpoint masing-masing 1 dan 2 . . . . .       | 65 |
| 5.5 | Tabel Konvergensi Keadaan <i>Supercell</i> terhadap nilai Energi To-<br>tal/Atom . . . . .   | 65 |

## DAFTAR GAMBAR

|     |  |    |
|-----|--|----|
| 3.1 | Skema <i>Self-Consistent</i> Persamaan Kohn-Sham . . . . .   | 20 |
| 3.2 | Ilustrasi pseudopotential . . . . .  | 25 |
| 3.3 | Ilustrasi fenomena <i>interstialcy defect</i> pada sebuah sistem kristal   | 29 |
| 3.4 | Ilustrasi fenomena <i>vacancy defect</i> pada sebuah sistem kristal . .  | 30 |
| 3.5 | Ilustrasi fenomena <i>substitutional defect</i> pada sebuah sistem kristal   | 31 |
| 4.1 | Perangkat lunak <i>nautilus</i> pada OS Linux digunakan untuk meng-<br>akses data pada superkomputer . . . . .   | 34 |
| 4.2 | Diagram alir langkah kerja pada penelitian . . . . .   | 36 |
| 4.3 | Unit sel 8 atom sistem kristal $\alpha$ -Sn (Belum teroptimasi) . . . .  | 40 |
| 4.4 | <i>supercell</i> 64 atom sistem kristal $\alpha$ -Sn (Belum teroptimasi) . . .   | 41 |
| 4.5 | Diagram alir perhitungan Phonon-DOS . . . . .  | 47 |
| 4.6 | Diagram alir perhitungan konsentrasi vacancy . . . . .   | 50 |
| 5.1 | Hubungan antara Total energi per atom (Hartree) terhadap K-<br>Point untuk material kristal Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . .   | 53 |
| 5.2 | Hubungan antara Total energi (per atom) (Hartree) terhadap<br>Energi Cutoff (Rydberg) untuk material kristal Gray Tin ( $\alpha$ -Sn)  | 55 |
| 5.3 | Hubungan Energi total sistem (eV) terhadap Volume <i>Unit Cell</i><br>( $\text{\AA}^3$ ) untuk material kristal Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . .   | 57 |
| 5.4 | <i>Unitcell</i> (8 atom) untuk sistem kristal Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) yang akan<br>digunakan untuk melakukan konstruksi <i>supercell</i> Gray Tin ( $\alpha$ -Sn)   | 58 |
| 5.5 | <i>Supercell perfect</i> (64 atom) pada sistem kristal Gray Tin ( $\alpha$ -Sn)<br>yang dibentuk setelah melewati proses relaksasi pada algoritma<br>DFT . . . . .   | 59 |
| 5.6 | (a) Gambar simetri <i>tetrahedral</i> ( $T_d$ ) dalam sudut pandang 3-D<br>untuk sistem kristal Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) (b) Ilustrasi simetri tetra-<br>hedral ( $T_d$ ) untuk sistem <i>supercell perfect</i> 64 atom kristal Gray<br>Tin ( $\alpha$ -Sn) (c) Ilustrasi operasi simetri tetrahedral ( $T_d$ ) untuk<br>sistem kristal Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . . | 60 |
| 5.7 | Difusi reaksi pada sistem kristal Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) selama proses<br>relaksasi . . . . .  | 61 |
| 5.8 | <i>Supercell monovacancy</i> untuk sistem kristal Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) .   | 62 |

|      |   |    |
|------|---|----|
| 5.9  | Relasi antara jarak atom dengan vacancy ( <i>distance from vacancy</i> ( $\text{\AA}$ )) terhadap perpindahan atom selama proses relaksasi ( <i>displacement</i> ( $\text{\AA}$ )) pada sistem kristal Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . . | 64 |
| 5.10 | Kurva Frekuensi ( $\text{cm}^{-1}$ ) vs Vibrational Mode Untuk Sistem <i>Perfect</i> (Hitam) dan <i>Monovacancy</i> (Biru) pada material Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . .   | 68 |
| 5.11 | Kurva Vibrational Density of States (DOS) Untuk Sistem <i>Perfect</i> (Hitam) dan <i>Monovacancy</i> (Biru) pada material Gray Tin ( $\alpha$ -Sn)  | 69 |
| 5.12 | Konsentrasi <i>Vacancy</i> sebagai Fungsi dari Invers Suhu Untuk Sistem <i>Monovacancy</i> pada material Gray Tin ( $\alpha$ -Sn) . . . . .   | 71 |