

DAFTAR ISI

Halaman Judul	ii
Halaman Pengesahan	iii
Halaman Pernyataan	iv
Halaman Persembahan	v
Halaman Motto	vi
PRAKATA	vii
INTISARI	xv
ABSTRACT	xvi
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Masalah	1
1.2 Perumusan Masalah	3
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan Penelitian	4
1.5 Manfaat Penelitian	5
1.6 Sistematika Penulisan Skripsi	5
II TINJAUAN PUSTAKA	6
III LANDASAN TEORI	9
3.1 <i>Graphene</i>	9
3.1.1 Struktur Ruang Kristal pada <i>Graphene</i>	9
3.1.2 Struktur Ruang Kisi Balik pada <i>Graphene</i>	10
3.1.3 Orbital Atom pada <i>Graphene</i>	12
3.1.4 Model Ikatan Kuat (<i>Tight-Binding Model</i>)	13
3.1.4.1 Persamaan Sekular	13
3.2 Model Ikatan Kuat untuk <i>Graphene Monolayer</i>	16
3.2.1 Elemen Matriks Diagonal	17

3.2.2	Elemen Matriks <i>off-Diagonal</i>	18
3.2.3	Pita Elektronik Tenaga Rendah pada <i>Graphene Monolayer</i> . .	20
3.3	Model Ikatan Kuat pada <i>Graphene Bilayer</i>	22
3.4	Struktur Elektronik berdasarkan pada <i>Density-Functional Theory</i> . . .	26
3.4.1	Masalah Banyak Benda pada Zat Mampat	26
3.4.2	Pendekatan Hartree	27
3.4.3	Pendekatan Hartree-Fock	28
3.4.4	Pendekatan <i>Density Functional Theory</i>	29
3.4.4.1	Teorema Hohenberg-Kohn	29
3.4.4.2	Persamaan Kohn-Sham	30
3.4.4.3	<i>Exchange-Correlation</i> pada <i>Local Density Approximation (LDA)</i>	32
3.4.4.4	<i>Exchange-Correlation</i> pada <i>Generalized Gradient Approximation (GGA)</i>	35
3.5	Teorema Bloch dan Pita Elektron	35
3.5.1	Teorema Bloch	35
3.5.2	Pita pada Swanilai	36
3.5.3	Kekekalan Momentum Kristal	37
3.5.4	Integral Ruang \vec{k}	37
IV METODE PENELITIAN		38
4.1	<i>Norm-conserving pseudo potential</i>	38
4.2	Pseudo Atomik Basis Orbital	40
4.3	Metode Komputasi	41
4.4	Tahapan Perhitungan Komputasi	44
4.4.1	Pemodelan Sistem <i>Graphene Mono dan Bilayer</i>	44
4.4.2	Optimasi Geometri <i>Graphene Mono dan Bilayer</i>	45
4.4.3	Perhitungan Pita Tenaga dan Rapat Keadaan	46
4.4.3.1	Perhitungan Pita Tenaga	46
4.4.3.2	Perhitungan Rapat Keadaan	48
V HASIL DAN PEMBAHASAN		50
5.1	Tinjauan Akurasi Perhitungan pada Ukuran Supersel Sistem <i>Graphene</i>	50
5.1.1	Tinjauan Struktur Geometri	50
5.1.2	Tinjauan Struktur Elektronik	51
5.2	Tinjauan Konfigurasi Struktur pada Sistem <i>Graphene</i>	56

5.2.1	Tinjauan Struktur Geometri	56
5.2.2	Tinjauan Struktur Elektronik	58
5.3	Tinjauan Sistem <i>Graphene</i> 3×3	59
5.3.1	<i>Graphene Monolayer</i> 3×3	60
5.3.1.1	Tinjauan Struktur Geometri	60
5.3.1.2	Tinjauan Struktur Elektronik	61
5.3.2	<i>Graphene Bilayer</i> 3×3	63
5.3.2.1	Tinjauan Struktur Geometri	63
5.3.2.2	Tinjauan Struktur Elektronik	64
5.3.2.3	Sifat Logam pada <i>Graphene Bilayer</i> 3×3 dengan Konsentrasi Atom Oksigen 33%	67
VI	KESIMPULAN DAN SARAN	70
6.1	Kesimpulan	70
6.2	Saran	71
A	SOURCE CODE UNTUK INPUT FILE PADA PROGRAM XCRYSDEN	78
B	SOURCE CODE INPUT FILE OPTIMASI GEOMETRI PADA PROGRAM OPENMX	83
C	SOURCE CODE INPUT FILE PERHITUNGAN PITA DAN DOS PADA PROGRAM OPENMX	94
D	PEMBUKTIAN TEOREMA HOHENBERG-KOHN	108

DAFTAR TABEL

4.1	Parameter komputasi pada OpenMX	43
5.1	Rangkuman data struktur <i>graphene monolayer</i> dan <i>graphene bilayer</i> dengan ukuran supersel 1×1 dan 3×3 pada keadaan murni	50
5.2	Rangkuman data struktur <i>graphene monolayer</i> dan <i>graphene bilayer</i> dengan ukuran supersel 1×1 dan 3×3 pada keadaan ditambah atom oksigen konsentrasi 50%	51
5.3	Rangkuman celah tenaga <i>graphene monolayer</i> dan <i>bilayer</i> yang ditambah atom oksigen dengan konsentrasi 50%	54
5.4	Rangkuman tenaga total hasil optimasi struktur geometri pada rancang bangun sistem yang ditunjukkan oleh gambar (5.6)	57
5.5	Rangkuman data optimasi struktur geometri <i>graphene monolayer</i> ditambah dengan atom oksigen dengan konsentrasi 0%, 6%, 11%, 17%, 33% dan 50%	61
5.6	Rangkuman celah tenaga <i>graphene monolayer</i> yang ditambah dengan atom oksigen konsentrasi 0%, 6%, 11%, 17%, 33% dan 50%	61
5.7	Rangkuman data optimasi struktur geometri <i>graphene bilayer</i> ditambah dengan atom oksigen dengan konsentrasi 0%, 6%, 11%, 17%, 33% dan 50%	64
5.8	Rangkuman celah tenaga <i>graphene bilayer</i> yang ditambah dengan atom oksigen konsentrasi 0%, 6%, 11%, 17%, 33% dan 50%	65
5.9	Rangkuman data optimasi struktur geometri <i>graphene bilayer</i> ditambah dengan atom oksigen dengan konsentrasi 33% dengan konfigurasi 4 – 8, 6 – 6 dan 8 – 4	67
5.10	Rangkuman celah tenaga <i>graphene bilayer</i> yang ditambah dengan atom oksigen konsentrasi 33%	68

DAFTAR GAMBAR

3.1	Struktur segi enam pada <i>graphene monolayer</i> dan titik kisi dari struktur segi enam	10
3.2	Struktur kisi balik pada <i>graphene monolayer</i>	11
3.3	Sistem Periodik Unsur	12
3.4	Struktur <i>graphene monolayer</i> dengan pendekatan atom terdekat	19
3.5	Struktur pita pada tenaga rendah di <i>graphene monolayer</i>	21
3.6	Struktur kristal pada <i>graphene bilayer</i>	23
3.7	Struktur pita tenaga rendah pada <i>graphene bilayer</i>	25
3.8	<i>Self-Consistent</i> pada penyelesaian persamaan Kohn-Sham	33
4.1	Rancang bangun sistem <i>graphene mono</i> dan <i>bilayer</i> dengan supersel 3×3 pada keadaan murni	43
4.2	Rancang bangun sistem <i>graphene mono</i> dan <i>bilayer</i> dengan supersel 3×3 pada keadaan ditambah dengan oksigen pada konsentrasi 6%	45
4.3	Diagram alir untuk proses-proses penelitian secara garis besar	49
5.1	Hasil optimasi struktur pada <i>graphene</i> supersel 1×1 dan <i>graphene</i> supersel 3×3 yang ditambah dengan atom oksigen dengan konsentrasi 50%	52
5.2	Pita tenaga dan rapat keadaan untuk sistem <i>graphene monolayer</i> dan <i>bilayer</i> supersel 1×1 pada keadaan murni	53
5.3	Pita tenaga dan rapat keadaan untuk sistem <i>graphene monolayer</i> dan <i>bilayer</i> supersel 3×3 pada keadaan murni	54
5.4	Pita tenaga dan rapat keadaan untuk sistem <i>graphene monolayer</i> dan <i>bilayer</i> supersel 1×1 yang ditambah oksigen dengan konsentrasi 50%	55
5.5	Pita tenaga dan rapat keadaan untuk sistem <i>graphene monolayer</i> dan <i>bilayer</i> 3×3 yang ditambah atom oksigen dengan konsentrasi 50%	56
5.6	Rancangan bangun sistem <i>graphene monolayer</i> dan <i>bilayer</i> dengan supersel 3×3	57
5.7	Hasil optimasi untuk sistem <i>graphene monolayer</i> dan <i>bilayer</i> supersel 3×3	58
5.8	Rapat keadaan pada sistem <i>graphene monolayer</i> dan <i>bilayer</i> supersel 3×3	59

5.9 Hasil optimasi untuk sistem <i>graphene monolayer</i> dengan supersel 3×3 yang ditambah dengan atom oksigen konsentrasi 0%, 6%, 11%, 17%, 33% dan 50%	60
5.10 Rapat keadaan <i>graphene monolayer</i> yang ditambah dengan atom oksigen sesuai dengan konsentrasinya	62
5.11 PDOS untuk atom C dan O pada <i>graphene monolayer</i> dengan konsentrasi 0% dan 50%	63
5.12 Hasil optimasi untuk sistem <i>graphene bilayer</i> dengan supersel 3×3 yang ditambah dengan atom oksigen konsentrasi 0%, 6%, 11%, 17%, 33% dan 50%	64
5.13 Rapat keadaan <i>graphene bilayer</i> yang ditambah dengan atom oksigen sesuai dengan konsentrasinya	65
5.14 PDOS untuk atom C dan O pada <i>graphene bilayer</i> dengan konsentrasi 0% dan 50%	66
5.15 Hasil optimasi struktur geometri untuk sistem <i>graphene bilayer</i> yang ditambah atom oksigen sebanyak 33%	68
5.16 Rapat keadaan <i>graphene bilayer</i> yang ditambah dengan atom oksigen konsentrasi 33%	68
5.17 Pita tenaga untuk sistem <i>graphene bilayer</i> yang ditambah dengan atom oksigen konsentrasi 33%	69