

SKRIPSI

PENGARUH DOPING ATOM ALUMINIUM DAN POSPHORUS TERHADAP SIFAT MAGNETIK STANENE DENGAN METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT)*

Oleh :

VINSA KHARISMA ROFIQO SARI
155090300111027

PROGRAM STUDI : S1 FISIKA



**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS BRAWIJAYA
MALANG
2018**

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

**PENGARUH DOPING ATOM ALUMINIUM DAN
PHOSPORUS TERHADAP SIFAT MAGNETIK
STANENE DENGAN METODE *DENSITY FUNCTIONAL
THEORY* (DFT)**

Oleh :

**VINSA KHARISMA ROFIQO SARI
155090300111027**

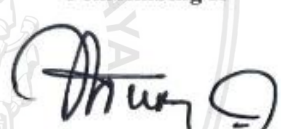
Setelah dipertahankan di depan Majelis Penguji
Pada tanggal **02 JAN 2019**...
dan dinyatakan memenuhi syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana Sains dalam bidang Fisika

Pembimbing I

Pembimbing II



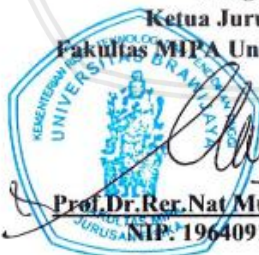
Mauludi Arcisto P., M.Si., Ph.D.
NIP 197304122000031013



Dr. rer.nat Abdurrouf, M.Si.
NIP 197209031994121001

Mengetahui,

**Ketua Jurusan Fisika
Fakultas MIPA Universitas Brawijaya**



Prof. Dr. Rer. Nat Muhammad Nurhuda
NIP. 19640910199021001

LEMBAR PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Vinsa Kharisma
NIM : 155090300111027
Jurusan : Fisika
Penulis skripsi berjudul :

**PENGARUH DOPING ATOM ALUMINIUM DAN
PHOSPHORUS TERHADAP SIFAT MAGNETIK STANENE
DENGAN METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY* (DFT)**

Dengan ini menyatakan bahwa :

1. Isi dari skripsi yang saya buat adalah benar-benar karya sendiri dan tidak menjiplak karya orang lain, selain nama-nama yang termaktub diisi dan tertulis di daftar pustaka dalam Skripsi ini.
2. Apabila dikemudian hari ternyata Skripsi yang saya tulis terbukti hasil jiplakan, maka saya akan bersedia menanggung segala resiko yang akan saya terima.

Demikian pernyataan ini dibuat dengan segala kesadaran.

Malang, 20 Desember 2018

Yang Menyatakan



(Vinsa Kharisma)

NIM.155090300111027



repository.ub.ac.id

PENGARUH DOPING ATOM ALUMINIUM DAN PHOSPHORUS TERHADAP SIFAT MAGNETIK STANENE DENGAN METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY* (DFT)

ABSTRAK

Sifat magnetik material dua dimensi *stanene* yang didop atom Aluminium dan Phosphorus, telah dilakukan dengan metode Density Functionl Theory (DFT). Hasilnya mengindikasikan bahwa Atom Aluminium dan atom Phosphorus lebih stabil di posisi doping Hollow pada *stanene*. *Stanene* yang terhidrogenasi menghasilkan Grafik Kerapatan keadaan yang asimetris, sehingga bersifat feromagnetik dan, dilanjutkan dengan di dop atom Aluminium dan Phosphorus pada stanene murni dan stanene terhidrogenasi. Hasil total magnetisasi terbesar pada penelitian ini dimiliki oleh sistem stanene terhidrogenasi yang didop oleh atom Phosphorus yaitu $3,88 \mu_B$ yang meningkat 7004,6 kali dari magnetisasi yang dihasilkan oleh stanene murni dimana nilai magnetisasinya sangat kecil hampir mendekati nol, yaitu $0.0006 (6 \times 10^{-4}) \mu_B$. Modifikasi struktur *stanene* dengan hidrogenasi dan diberi atom phosphorus, memiliki potensial yang baik untuk design *spintronic device* baru.

Kata Kunci : *Stanene*, Magnetisasi, Kerapatan keadaan



repository.ub.ac.id

EFFECT OF ALUMINIUM AND PHOSPHORUS DOPED STANENE ON THE MAGNETIC PROPERTIES WITH DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHOD

ABSTRACT

Magnetic properties of Aluminium and Phosphorus-doped 2-dimensional stanene have been examined using Density Functional Theory method. This resulted in that stanene doped by aluminium and phosphorus in hollow points was more stable. Hydrogenated stanene yielded asymmetric density-of-state graphs. Consequently, it showed ferromagnetic behaviour. Then pure and hydrogenated stanene was doped by aluminium and phosphorus. *Hydrogenated P-doped Stanene* depicted the highest magnetization which accounted for $3.88\mu_B$, increasing up to 7004.6 times more than pure-stanene magnetization with $0.0006\mu_B$, extremely low at almost 0. Structure modification of . *Hydrogenated P-doped Stanene* is a promising method for designing new spintronic devices.

Keyword : Stanene, Magnetization, Density-of-state



KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT atas segala bimbingan, kekuatan, dan kesehatan yang diberikan-Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul Pengaruh Doping Atom Aluminium Dan Phosphorus Terhadap Sifat Magnetik *Stanene* Dengan Metode *Density Functional Theory* (DFT), dan telah disusun kurang lebih selama lima bulan.

Skripsi ini merupakan salah satu syarat kelulusan mahasiswa Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (FMIPA) Universitas Brawijaya dan sebagai sarana penerapan ilmu yang didapatkan pada bangku kuliah.

Skripsi ini disusun sebagai hasil dari penelitian penulis di Laboratorium Fisika Komputasi dan Pemodelan Gedung Biomol Lt 3 Jurusan Fisika FMIPA Universitas Brawijaya pada bulan November Juni 2018 - November 2018. Dalam naskah ini membahas tentang Pengaruh Doping Atom Aluminium Dan Phosphorus Terhadap Sifat Magnetik *Stanene* Dengan Metode *Density Functional Theory* (DFT)

Skripsi ini dapat tersusun karena adanya dorongan, bimbingan dan peran aktif dari berbagai pihak. Oleh sebab itu, tidak berlebihan apabila dalam kesempatan ini penulis mengucapkan banyak terima kasih kepada :

1. Kedua orang tua beserta keluarga besar yang selalu mendukung baik dari segi motivasi dan materi
2. Prof. Dr. rer. nat. Muhammad Nurhuda, selaku Ketua Jurusan Fisika FMIPA Universitas Brawijaya.
3. Ahmad Nadhir, S.Si., MT., Ph.D, selaku Sekertaris Jurusan Fisika FMIPA Universitas Brawijaya.
4. Dr. Eng Masruroh, S.Si. M.Si selaku Ketua Prodi S1 Jurusan Fisika FMIPA Universitas Brawijaya.
5. Mauludi Ariesto Pamungkas, S.Si., M.Si., Ph.D. selaku dosen pembimbing I dan Dr. rer.nat Abdurrouf, S.Si., M.Si selaku dosen pembimbing II yang telah memberikan arahan dan bimbingan dari awal hingga terselesaikannya skripsi ini.
6. Seluruh Dosen Jurusan Fisika FMIPA UB yang telah memberi ilmu dan bimbingan selama ini..
7. Petrus Darius, merupakan temen seperjuangan saya dalam menyelesaikan penelitian ini.

8. Mbak Fatmala Sari, Mas Roni Cahyadi, Mas Adwi Arifin merupakan kakak tingkat yang banyak mengajarkan ilmu baru dalam menjalankan skripsi ini.
9. Teman-teman fisika angkatan 2015 khususnya Moch. Febriantoro, Hirzatun Nafisah, dan Pratiwi Kusumawardhani yang telah mendukung proses penelitian skripsi.

Malang, 20 Desember 2018

Penulis



DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSIError! **Bookmark** **not defined.**

LEMBAR PERNYATAAN.....i

ABSTRAK.....iv

ABSTRACTvi

KATA PENGANTAR viii

DAFTAR ISIx

DAFTAR TABELxiv

DAFTAR GAMBARxvi

DAFTAR LAMPIRAN.....xx

BAB I PENDAHULUAN.....1

1.1 Latar Belakang1

1.2 Rumusan Masalah3

1.3 Batasan Masalah.....3

1.4 Tujuan Penelitian3

1.5 Manfaat Penelitian3

BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....5

2.1 Kristal.....5

2.2 Stanene7

2.2 Aluminium8

2.3 Phosphorus.....8

2.4 Sifat Magnetik11

2.5 Momen Magnetik Atom.....12

2.6 Density of State (DOS).....13

2.7.1 Persamaan Schrodinger Mekanika Banyak Partikel

 14

2.7.2 Pendekatan Born-Oppenheimer	14
2.7.3 Teori Hohenberg-Kohn.....	15
2.7.4 Pendekatan Kohn-Sham	15
BAB III METODE PENELITIAN	19
3.1 Waktu dan Tempat Pelaksanaan	19
3.2 Metode Penelitian	19
3.3 Rancangan Penelitian.....	19
3.3.1 Tes Konvergensi.....	20
3.3.2 Doping.....	20
3.3.3 Perhitungan	21
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	25
4.1 Tes Konvergensi.....	25
4.1.1 Energi <i>Cut-off</i> (e-cut).....	25
4.1.2 Jumlah perhitungan atau Iterasi (<i>n-step</i>).....	26
4.1.3 Jumlah <i>k-point</i> dalam <i>brillioin zone</i> (ngkpt)....	28
4.1.4 Konstanta Kisi <i>Stanene</i>	30
4.2 Doping Atom	32
4.3 Sifat Magnetik	37
4.3.1 <i>Stanene</i> Murni.....	39
4.3.2 <i>Stanene</i> Doping Aluminium	41
43	
4.3.3 <i>Stanene</i> Doping Phosphorus	44
4.3.4 <i>Stanene</i> Terhidrogenasi.....	47
4.3.5 <i>Stanene</i> Terhidrogenasi Doping Aluminium ...	50
4.3.4 <i>Stanene</i> Terhidrogenasi Doping Phosphorus ...	51
BAB V PENUTUP.....	57
5.1 Kesimpulan.....	57

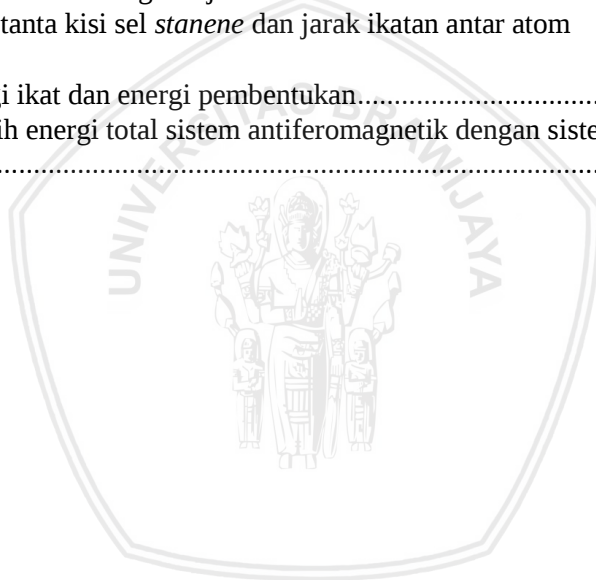
5.2 Saran.....	57
DAFTAR PUSTAKA	59
LAMPIRAN	61





DAFTAR TABEL

Tabel 2. 1 Sifat Unsur Stannum.....	7
Tabel 2. 2 Sifat Unsur Aluminium.....	8
Tabel 2. 3 Sifat Unsur Phosphorus.....	11
Tabel 4. 1 Hasil Tes Konvergensi energi cut-off <i>stanene</i> murni	26
Tabel 4 .2 Data hasil Tes Konvergensi N-step (Jumlah Iterasi)	27
Tabel 4. 3 Hasil Tes Konvergensi jumlah K-Point	29
Tabel 4. 4 Konstanta kisi sel <i>stanene</i> dan jarak ikatan antar atom stannum	30
Tabel 4. 5 Energi ikat dan energi pembentukan.....	33
Tabel 4. 6 Selisih energi total sistem antiferomagnetik dengan sistem feromagnetik.....	38





DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Kristal Zat Padat yang atommya tersusun secara periodik.....	5
Gambar 2. 2 Kristal dua dimensi	5
Gambar 2. 3 (A) Struktur Honeycomb (sarang lebah) Graphene, (B) a_1 dan a_2 adalah vektor dasar sel asli Graphene, (C) Brillouin zone dari Graphene.....	8
Gambar 2. 4 Struktur <i>Stanene</i>	8
Gambar 2. 5 Garis medan magnet gaya di sekitar arus lingkaran dan magnet batang.....	12
Gambar 2. 6 Momen magnetik yang ditunjuk oleh anak panah.	12
Gambar 2. 7 Demonstrasi dari momen magnet.....	13
Gambar 2. 8 Self Consistent Field (SCF)	17
Gambar 3. 1 Posisi Doping.	20
Gambar 3. 2 Diagram alir penelitian.....	21
Gambar 3. 3 Struktur atom <i>stanene</i>	22
Gambar 3. 3 sumbu Z berjarak 20 Angstrom.....	22
Gambar 4. 1 Hasil Tes Konvergensi energi cut-off stanene murni...	26
Gambar 4. 2 Hasil Tes Konvergensi jmlah iterasi pada <i>stanene</i> murni	28
Gambar 4. 3 Hasil Tes Konvergensi Ngkpt (Jumlah K-pint dalam Brillouin Zone <i>Stanene</i> Murni)	29
Gambar 4. 4 Struktur stanene (Jarak antar atom Stannum dalam ... struktur 2D <i>Stanene</i> yaitu 2.82 Angstrom)	31
Gambar 4. 5 Gambar posisi doping Bridge.....	35
Gambar 4. 6 Gambar posisi doping Top	36



Gambar 4. 7	Gambar posisi hollow pada <i>stanene</i>	37
Gambar 4. 8	Rapat Keadaan elektron <i>stanene</i> murni	39

Gambar 4. 9 Pita energi dan total Rapatan keadaan elektron <i>stanene</i> murni	41
Gambar 4 .10 Rapat Keadaan elektron <i>stanene</i> di doping atom Aluminium.....	43
Gambar 4 .11 Pita energi spin-up (kiri) spin-down (kanan) dan Rapat keadaan elektron <i>stanene</i> didoping atom aluminium	44
Gambar 4. 12 Rapat Keadaan elektron <i>stanene</i> di doping atom Phosphorus	45
Gambar 4 .13 Pita energi spin-up (kiri),spin-down (kanan) dan Rapat Keadaan elektron <i>stanene</i> murni di doping atom Phosphorus	46
Gambar 4 .14 Rapat keadaan elektron <i>stanene</i> terhidrogenasi	47
Gambar 4 .15 Pita energi spin-up (kiri),spin-down (kanan) dan Rapat Keadaan elektron <i>stanene</i> terhidrogenasi	49
Gambar 4 .16 Rapat keadaan elektron <i>stanene</i> terhidrogenasi di dop atom Aluminium.....	50
Gambar 4 .17 Pita energi spin-up (kiri),spin-down (kanan) dan Rapat Keadaan elektron <i>stanene</i> terhidrogenasi di dop atom Aluminium.....	51
Gambar 4.18 Rapat keadaan elektron <i>stanene</i> terhidrogenasi didop atom Phosphorus	52
Gambar 4. 19. Pita energi spin-up (kiri),spin-down (kanan) dan Rapat Keadaan elektron <i>stanene</i> terhidrogenasi didop atom Phosphorus	53



DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Abinit	61
Lampiran 2.....	62
Lampiran 3.....	64
Lampiran 4.....	677
Lampiran 5.....	688
Lampiran 6.....	71
Lampiran 7.....	73
Lampiran 8.....	78



BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Dalam beberapa tahun terakhir, penelitian tentang *properties* dari struktur dua dimensi menjadi perhatian tersendiri, sehingga penemuan struktur dua dimensi baru yang stabil terus dilakukan oleh beberapa peneliti. Struktur dua dimensi yang pertama diteliti yaitu *graphene* (struktur 2D dari atom *carbon*) material yang memiliki properti *zero bandgap*, topologi, optikal, dan elektronik yang luar biasa. (Fadaie, M *et al.* 2017). Karakteristik yang langka dan terbarukan ini membuat para peneliti terinspirasi untuk belajar dan menemukan struktur dua dimensi *graphene-like structure* lainnya dari tabel periodik. Sebagai contoh, struktur dua dimensi sarang lebah (*honeycomb*) berasal dari elemen grup IV tabel periodik, senyawa dari grup III-V dan II-IV memberikan sifat unik dan memberikan aplikasi terbarukan.

Penelitian struktur dua dimensi yang sudah banyak dilakukan selain *graphene* yaitu *Silicene* (struktur 2D dari atom Si) dan *Germanene* (struktur 2D dari atom Ge). Meskipun *graphene* memiliki properti elektronik yang unik dan dapat di-*tuning*, coupling spin-orbit (SO) yang lemah membatasi aplikasinya sebagai filter spin & insulator topologi. Eksplorasi unsur-unsur golongan IV tabel periodik menggunakan pendekatan teori fungsi kerapatan fungsional telah mengungkapkan bahwa kopling spin orbit meningkat sebagai berat atom dari atom-atom dasar dalam kisi sarang lebah. *Stannum* adalah salah satu elemen berat dari tabel periodik golongan IV yang memiliki kopling spin-orbit yang kuat. (Saxena, S., *et al.* 2016). Struktur 2D *stanene* berbentuk seperti sarang lebah (*honeycomb*) terdiri dari satu layer tin (Sn, (*stannum*)) atom telah diprediksi oleh Zhang *et al.* Dibandingkan dengan *Carbon* (C), *Silicon* (Si), dan *Germanen* (Ge), Atom *Stannum* (Sn) mempunyai jari-jari atom yang lebih besar dan elektronegatifitas rendah, yang mana dapat menyebabkan banyak sifat yang berbeda. *Silicene* dan *germanene*

memiliki zero band gap seperti *graphene*, walaupun mereka memiliki mobilitas elektron tinggi, karakteristik metalik *silicen* dan *germanene* aplikasinya terbatas di nanoelektronik. Keterbatasan dari *graphene*, *silicen* dan *germanene*, maka ditemukan *stanene* yang memiliki band gap dalam meV, cocok dalam beberapa aplikasi yang lebih baik dari pada *graphene*, *silicen*, dan *germanene* (M. Fadaie et al. 2017). Selanjutnya *stanene* yang merupakan lapisan tipis dari tin (Sn) dengan konfigurasi sedikit tertekuk telah diobservasi pada eksperimen epitaksi berkas monukuler (MBE (*Molecular Beam Epitaxy*)) dan fungsionalisasi monolayer *stanene* yang telah dilakukan adalah isolator dengan *large-gap quantum spin Hall* (QSH). (Sheng-shi,. 2016) yang mana bisa digunakan untuk fabrikasi alat elektronik lebih kecil, cepat dan energinya lebih efisien.

Atom *stannum* murni bersifat diamagnetik yang mana merupakan sifat magnet yang cukup lemah. *Stanene* telah disempurnakan sifat magnetiknya dengan metode hidrogenasi dimana menambahkan doping posisi *top* 1 atom hidrogen pada setiap atom *stannum*. (Sheng-Shi. 2016) Sifat magnetik *stanene* telah disempurnakan dengan doping atom transisi metal, yaitu V, Mn, Cr, Fe pada posisi *valley*, *top*, *hollow*, dan *bridge*. Tidak semua posisi doping atom menghasilkan sifat magnet. Hasil penelitian ini mengatakan bahwa doping atom V pada posisi *valley*, Mn, Fe & Cr pada posisi *hollow* berturut-turut menghasilkan momen magnetik sebesar 2,93, 3.20, 2, 4.43. (Dan-Xu. et al. 2017). Pada penelitian Majumdar, Arab et al. 2014 telah meneliti induksi magnetik pada *silicene* menggunakan doping atom aluminium dan phosphorus menunjukkan bahwa menghasilkan momen magnetik yang cukup besar. Sehingga peneliti ingin menyempurnakan sifat magnetik pada *stanene* dengan doping atom *aluminium* dan *phosphorus*.

Penyelesaian penelitian pada sistem banyak partikel dalam komputasi terdapat beberapa metode, diantaranya adalah *Density Functional Theory* (DFT), *Many Body Perturbation Theory* (DFPT), dan *Quantum Monte Carlo* (QMC). DFT merupakan metode yang digunakan dalam penelitian ini. Hal ini dikarenakan memberikan keseimbangan antara kerumitan perhitungan dan keakurasian data yang diperoleh (Gygi dan Giulia, 2015). Pada penelitian ini akan

diteliti tentang pengaruh doping atom *aluminium* dan *phosphorus* terhadap sifat magnetik *stanene* dengan pendekatan teori fungsi kerapatan (DOS).

1.2 Rumusan Masalah

Perumusan masalah yang ingin diteliti diantaranya:

1. Bagaimana sifat magnetik *stanene* murni?
2. Bagaimana pengaruh doping atom *aluminium* dan *phosphorus* terhadap sifat magnetik *stanene*?

1.3 Batasan Masalah

Batasan masalah dalam penelitian ini diantaranya:

1. Sel yang digunakan adalah 2×2
2. Perhitungan dilakukan dalam keadaan *ground state*.
3. Perhitungan menggunakan teori fungsi kerapatan dengan pendekatan GGA-PBE (Generalized Gradient Approximation within the Perdew-Burke-Ernzerhof)
4. Jumlah atom doping 1 atom.
5. Parameter yang digunakan dalam menganalisa sifat magnetik hanya kerapatan keadaan, total magnetization dan selisih energi sistem.

1.4 Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui sifat magnetik *stanene* murni dan pengaruh doping atom *aluminium* dan *phosphorus* terhadap sifat magnetik *stanene*.

1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat dari hasil studi teoritik pengaruh doping atom *aluminium* dan *phosphorus* terhadap sifat magnetik *stanene*, dengan pendekatan Teori Fungsi Kerapatan diharapkan dapat dijadikan acuan bagi peneliti untuk memverifikasikan hasil secara eksperimen.

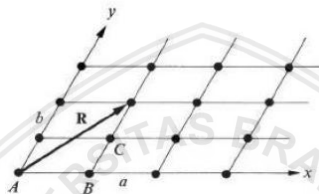


BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

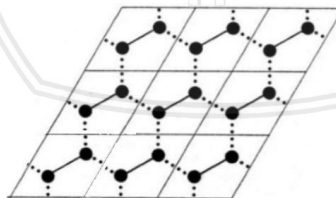
2.1 Kristal

Zat padat dikatakan Kristal apabila atom atomnya tersusun pada posisi yang periodik. Kristal yang sempurna akan periodik dalam arah x maupun y dari $-\infty$ sampai ∞ . Seperti diilustrasikan pada gambar 2.1



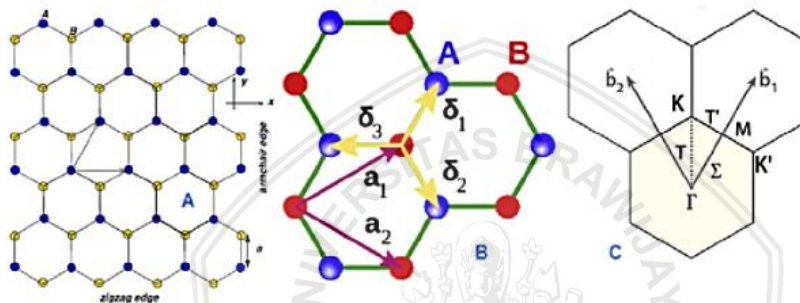
Gambar 2. 1 Kristal Zat Padat yang atommya tersusun secara periodik

Struktur kristal terdiri dari repetisi identik dari unit fisik yang sama disebut sebagai basis. pada kristal dua dimensi kisi Bravais terbentuk dari gabungan garis identik yang ditempatkan di sel primitif (jajaran genjang) dasar dari kisi Bravais seperti pada gambar 2.2



Gambar 2. 2 Kristal dua dimensi (Ashcroft & Mermin 1976).

Krital zat padat yang susunannya periodik atau tersusun secara berulang dapat dideskripsikan dengan menggunakan konsep kisi bravais. (Ashcroft & Mermin. 1976). Kisi balik memiliki periode yang sama dengan kisi bravais. Kisi balik merupakan kisi yang dibentuk oleh arah vektor translasi dari kisi primitif. Seperti gambar 2.3 struktur sarang lebah dari *graphene* dengan vektor δ_1 , δ_2 , dan δ_3 menghubungkan antar atom karbon dipisahkan oleh jarak $a = 0,142$ nm. (1,42 Angstrom). Vektor a_1 dan a_2 adalah vektor basis dari kisi Bravais *triangular* (segitiga).



Gambar 2. 3 (A) Struktur Honeycomb (sarang lebah) Graphene, (B) a_1 dan a_2 adalah vektor dasar sel asli Graphene, (C) Brillouin zone (Kisi Resiprok) dari Graphene .
(Sumber : Wang,J et al. 2017)

Pada Gambar 2.3 (c) merupakan gambaran dari kisi balik Kristal. Setiap kisi bravais memiliki kisi timbal balik tertentu. Kisi resiprokal juga merupakan kisi Bravais, karena ketika G_1 dan G_2 adalah dua vector kisi resiprokal, maka $G_1 + G_2$ untuk vektor primitif a_1 , a_2 , 3 dari kisi primitif, vektor b_1 , b_2 , b_3 untuk kisi balik.

Sehingga, vektor kisi balik yaitu : $\mathbf{G} = n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3$, sedangkan vektor kisi primitive yaitu : $\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$.

$\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ dan $\mathbf{a}_3$ merupakan konstanta kisi primitive, sedangkan $\mathbf{b}_1$, $\mathbf{b}_2$ dan $\mathbf{b}_3$ merupakan konstanta kisi balik dari “*reciprocal space*”

dimana,

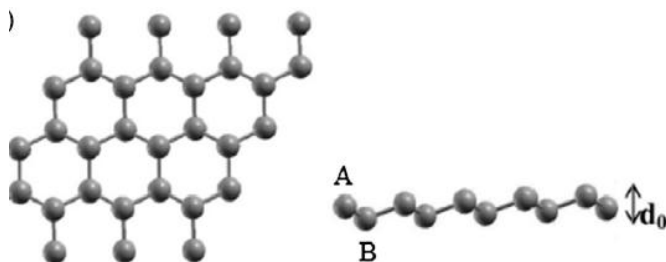
$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{V_a}(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{V_a}(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1) \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{2\pi}{V_a}(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2), \\ V_a &= \mathbf{a}_1(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)\end{aligned}$$

(Grundmann,M. 2006).

2.2 Stanene

Stanene merupakan monolayer dari atom *stannum* yang memiliki struktur yang mirip dengan *graphene* yaitu *honeycomb* (struktur sarang lebah). Timah atau Stannum (Sn) memiliki nomor atom 50 dan massa atom relatif 118,71 sma. Pada tabel periodik timah termasuk golongan IVA dan periode 5 bersama- sama dengan karbon, silikon, germanium, dan timbal (Daintith, 1990). Properti dari atom stannum ditunjukkan pada Tabel 2.1

Struktur *honeycomb* stanene dapat dilihat pada Gambar 2.4 yang sedikit tertekuk dari stanene murni telah dihitung dengan pendekatan GGA-PBE (Generalized Gradient Approximation within the Perdew-Burke-Ernzerhof) menunjukkan panjang ikatan Antara ujung atom Sn yaitu 2.77 Angstrom lebih pendek dibandingkan dengan panjang ikatan yang lainnya yaitu 2.82 Angstrom. Hal ini dikarenakan *stanene* murni direlaksasi menggunakan doping atom hidrogen. Parameter kisi 2D hexagonal sheet dari stanene yaitu 4.68 Angstrom dengan ketebalan tekuk 0.86 Angstrom. (Fadaie,M, et al 2017)



Gambar 2. 4 Struktur Stanene (Fadaie, Shahtahmassebi, Roknabad dan Gulseren. 2017)

2.2 Aluminium

Aluminium merupakan unsur kimia golongan IIIA dalam sistim periodik tabel, dengan nomor atom 13 dan berat atom 26,98 gram per mol (Sma). Aluminium memiliki titik leleh sebesar 66.3 Celcius dan titik didih 2467 celcius. Kerapatan aluminium yaitu 1,738 grams per cubic centimeter. Di dalam udara bebas aluminium mudah teroksidasi membentuk lapisan tipis oksida (Al_2O_3) yang tahan terhadap korosi. Aluminium merupakan logam ringan yang mempunyai ketahanan korosi yang baik, tidak mudah bereaksi terhadap kondisi cuaca atau bahan kima, hantaran listrik yang baik dan sifat – sifat yang baik lainnya sebagai sifat logam. (Surdia, T. 2005). Sifat unsur Aluminium dapat dilihat pada Tabel 2.2.

2.3 Phosphorus

Unsur fosfor di alam tidak terdapat dalam keadaan bebas, tetapi terikat dengan unsur-unsur lain dalam bentuk senyawa di dalam mineral. Contohnya apatit yang mengandung garam rangkap. Unsur fosfor berada pada golongan VA yang memiliki nomor atom 15. Phosphorus memiliki titik leleh 44.1 celcius dan titik didih 280 derajat celcius dengan kerapatan 1.82 grams per cubic centimeter. Dengan struktur Kristal Simple Triclinic. Sifat unsur Phosphorus dapat dilihat pada Tabel 2.3

Tabel 2. 1 Sifat Unsur Stannum (rsc.org (Royal Society of Chemistry. 2018))

Nama (simbol)	(Sn) Stannum / Tin
Fase	Solid
Tipe Magnetik	Diamagnetik
Tipe elektrik	Gapless semikonduktor
Konstanta Kisi	583.18, 583.18, 318.19 pm
Valensi	4
Elektronegatifitas	1.96
Jari-jari atom	145 pm
Jari-jari Kovalen	139 pm

Tabel 2. 2 Sifat Unsur Aluminium (rsc.org (Royal Society of Chemistry. 2018))

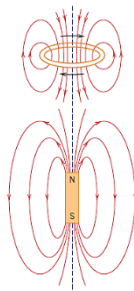
Nama (simbol)	Aluminium (Al)
Fase	Solid
Tipe Magnetik	Paramagnetic
Tipe elektrik	Konduktor
Konstanta Kisi	404.95, 404.95, 404.95 pm
Valensi	3
Elektronegatifitas	1,61
Jari-jari atom	118 pm
Jari-jari Kovalen	121 pm

Tabel 2. 3 Sifat Unsur Phosphorus (rsc.org (Royal Society of Chemistry. 2018))

Nama (simbol)	Phosphorus (P)
Fase	Solid
Tipe Magnetik	Diamagnetic
Tipe elektrik	Konduktor
Konstanta Kisi	1145, 550.3, 1126.1 pm
Valensi	5
Elektronegatifitas	2.19
Jari-jari atom	98 pm
Jari-jari Kovalen	107 pm

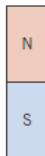
2.4 Sifat Magnetik

Konsep dasar dari sifat magnet adalah dipol magnet. Gaya magnet dihasilkan oleh partikel bermuatan yang bergerak secara elektrik. Gaya magnet ini merupakan tambahan dari gaya elektrostatik. Gaya magnet dapat di lihat dari hal medan magnet. Garis – garis gaya imajiner dapat ditarik untuk menunjukkan arah gaya pada posisi disekitar sumber medan. Gambar 2.5 menunjukkan distribusi medan magnet oleh garis-garis gaya.



Gambar 2.5 Garis medan magnet gaya di sekitar arus lingkaran dan magnet batang. (Callister D. 2007)

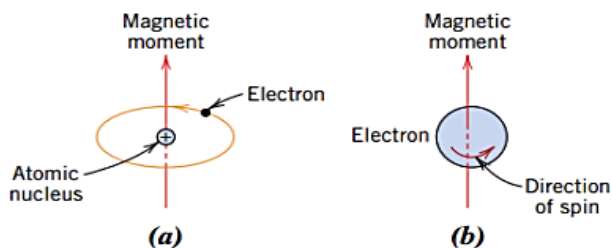
Dipol magnetik dapat dianggap sebagai magnet bar kecil yang terdiri dari kutub utara dan selatan. Dalam pembahasan ini, momen dipol magnetik diwakili oleh panah seperti yang ditunjukkan pada Gambar 2.6 Dipol magnet dipengaruhi oleh medan magnet, dan didalam medan magnet, gaya medan itu sendirilah yang memberikan torsi dimana cenderung mengarahkan dipol dengan medan. Contoh yang sudah ada yaitu jarum kompas magnetik yang menunjuk kearah medan magnet bumi.



Gambar 2.6 Momen magnetik yang ditunjuk oleh anak panah. (Callister D. 2007)

2.5 Momen Magnetik Atom

Sifat magnetik dari suatu material adalah konsekuensi dari momen magnetik yang hubungannya dengan elektron tunggal. Setiap elektron didalam atom, memiliki momen magnetic yang berasal dari dua sumber, yaitu dari orbital elektron dan spin elektron. Demonstrasi sumber momen magnet dapat dilihat pada Gambar 2.7



Gambar 2. 7 Momen magnet berkaitan dengan (a) orbital elektron
(b) spin elektron. (Callister D. 2007)

2.6 Density of State (DOS)

DOS (*Density of State*) yang sering dikatakan kerapatan keadaan merupakan metode untuk perhitungan struktur elektron banyak-partikel secara mekanika kuantum untuk sistem molekul dan bahan rapat. (Trivedi et al. 2014). Teori Fungsi Kerapatan (DFT) adalah teori mekanika kuantum yang digunakan untuk mengamati keadaan dasar (*ground state*) dari sistem banyak partikel. Metode ini digunakan untuk optimasi geometri dan stuktur elektron kompleks logam transisi. Metode ini cukup akurat, mudah digunakan, dan cukup cepat untuk mempelajari sistem molekul dan bahan rapat. (Hastiawan et al. 2013)

Sifat magnetik suatu sistem banyak partikel dapat diidentifikasi dari metode ini yaitu dengan cara perhitungan terpolarisasi spin yang berada pada titik dirac pada tingkat Fermi. Hasil yang menunjukkan antara *spin up* dan *spin down* adalah simetri dan asimetri. Kesimetrian antara spin up dan spin down dapat menyatakan bahwa sistem banya partikel tersebut bersifat non-magnetik. Sebaliknya, apabila hasil menunjukkan keasimetrian, maka bersifat magnetik. (Paudel, et al. 2015)

2.7 DFT (*Density Functional Theory*)

2.7.1 Persamaan Schrodinger Mekanika Banyak Partikel

Tinjauan studi kuantum diperlukan untuk mengetahui sistem fisis dalam suatu material. Studi kuantum ini melibatkan dua jenis partikel, yaitu inti dan elektron. Interaksi – interaksi antara elektron dan inti inilah yang mendefinisikan konfigurasi elektronik dalam material. Persamaan schrodinger untuk banyak partikel jika diselesaikan, dapat mengetahui sifat fisis suatu material atau konfigurasi elektronnya. Persamaan Schrodinger memiliki bentuk sebagai berikut :

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

Dengan bentuk Hamiltonian pada banyak partikel,

$$\frac{1}{2} \sum_{inti} \frac{1}{M} \nabla^2 - \frac{1}{2} \sum_{elektron} \nabla^2 + \sum_{inti} \frac{ZZ'}{|R-R'|} - \sum_{inti-elektron} \frac{Z}{|r-R|} + \sum_{elektron} \frac{1}{|r-r'|} = \hat{H}$$

(Rahman, & Purqon. 2015)

2.7.2 Pendekatan Born-Oppenheimer

Pendekatan Born-Oppenheimer merupakan pemisahan perhitungan pergerakan inti dan elektron atom. Diketahui massa inti jauh lebih besar dibanding massa elektron, dengan perubahan momentum yang sama, maka kecepatan inti atom sangat kecil, dapat diabaikan. Dan dalam menyelesaikan persamaan schrodinger dapat diasumsikan, inti bergerak stasioner. Maka, persamaan schrodinger dikerjakan dengan menyelesaikan konfigurasi ground state terlebih dahulu, kemudian menghitung energi dari konfigurasi sistem tersebut dan terakhir menyelesaikan perhitungan pergerakan inti.

Persamaan Hamiltonian ditulis sebagai berikut :

$$-\frac{1}{2} \sum_{\text{elektron}} \nabla^2 - \sum_{\text{inti-elektron}} \frac{Z}{|r-R|} + V_{\text{external}} = \hat{H}$$

(Rahman, & Purqon. 2015)

2.7.3 Teori Hohenberg-Kohn

Teori Hohenberg-Kohn merupakan penyederhanaan persamaan schrodinger banyak partikel yaitu bahwa fungsi gelombang banyak partikel, dapat didefinisikan sebagai fungsional dari kerapatan elektron. Suatu nilai kerapatan elektron tertentu, akan mempresentasikan fungsi gelombang yang tertentu pula. Maka dapat dituliskan sebagai berikut :

$$\Psi_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) \rightarrow \Psi[n_0(r)]$$

(Rahman, & Purqon. 2015)

2.7.4 Pendekatan Kohn-Sham

Pendekatan Kohn-Sham merupakan pendekatan dengan mengaplikasikan teori Hohenberg-Kohn. Pendekatan Kohn Sham menginterpretasikan energi total merupakan fungsional dari kerapatan elektron $n(\vec{r})$.

$$E[n] = T[n] + U[n] + V_{\text{external}}[n] + E_{\text{sc}}[n]$$

dengan,

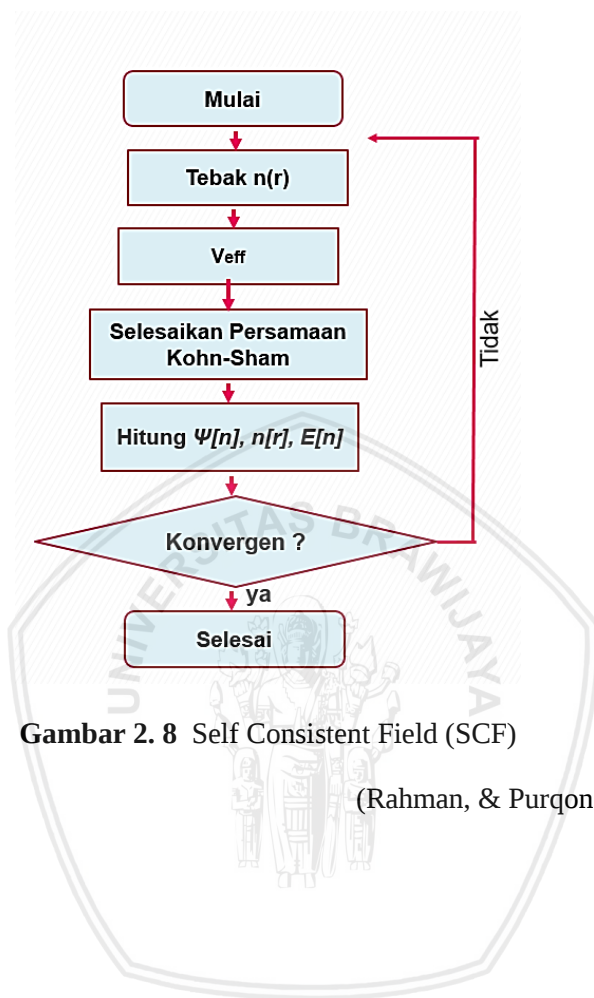
$$T[n] = \psi[n] \left| -\frac{1}{2} \sum \nabla^2 \right| \psi[n]$$

$$U[n] = \frac{1}{2} \int v_{ee} n[r] d^3r, \quad v_{ee} = \int \frac{n[r']}{|r - r'|} d^3r'$$

$$V_{external}[n] = - \int v_{external} n[r] d^3r$$

$E_{sc}[n]$, adalah energi *exchange-correlation* yang merupakan bentuk koreksi energi dari pendekatan Kohn-Sham. Agar persamaan kohn sham dapat terselesaikan maka diperlukan informasi dari kerapatan elektron total $n(\vec{r})$. Kerapatan total merupakan jumlah dari kuadrat seluruh solusi fungsi gelombang $n(\vec{r}) = \sum_i |\varphi_i(\vec{r})|^2$. Maka diperlukann nilai tebakan kerapatan elekton yang selanjutnya digunakan untuk menyelesaikan persamaan Kohn-Sham. Setelah didapatkan solusi persamaan Kohn-Sham, kemudian dihitung kerapatan elektron. Sehingga didapat nilai kerapatan elektron yang baru untuk menyelesaikan persamaan Kohn-Sham kembali. Hal ini disebut siklus *Self Consistent Field* (SCF).

Siklus *Self Consistent Field* (SCF) dilakukan berulang sehingga mendapat nilai kerapatan elektron yang tetap atau konvergen, maka kerapatan elektron tersebut merupakan kerapatan elektron pada keadaan dasar dengan energi yang minimal. Dapat diperoleh juga solusi persamaan Kohn-Sham yang merupakan fungsi gelombang orbital pada keadaan dasar. Siklus *Self Consistent Field* (SCF), ditunjukkan pada Gambar 2.8.



Gambar 2. 8 Self Consistent Field (SCF)

(Rahman, & Purqon. 2015)



BAB III

METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Pelaksanaan

Penelitian dilakukan pada Juli 2018 hingga November 2018 di Laboratorium Fisika Komputasi dan Pemodelan Gedung Biomol Lt 3 Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Brawijaya.

3.2 Metode Penelitian

Metode penelitian dilakukan perhitungan dengan pendekatan *Density Fungsional Theory* (DFT) yang merupakan penyelesaian kuantum pada sistem banyak partikel untuk mengetahui struktur elektronik, optik bahkan magnetik suatu bahan pada *ground state*. Metode DFT ini diimplementasikan ke dalam software ABINIT. Pendekatan yang digunakan adalah pendekatan *Generalized Gradient Approximation Pardew Bucke Erzhenhof* (GGA-PBE).

Tahapan penelitian ini dilakukan dalam tiga tahapan, Tahap pertama yaitu tes konvergensi. Tahap kedua yaitu pendopingan atom pada *stanene*. Dan tahap ketiga yaitu perhitungan sifat magnetik menggunakan kerapatan keadaan (DOS) dan selisih energi.

3.3 Rancangan Penelitian

Rancangan penelitian terbagi dalam 3 tahap yaitu tahap pertama tes konvergensi, kemudian setelah didapatkan hasil yang konvergen, stanene di doping. Setelah itu, *output* doping dihitung. DOS (*Density of State* : kerapatan keadaan) diplot dan ditampilkan menggunakan gnuplot. File kerapatan keadaan diolah menggunakan program CUT3D dan ditampilkan melalui *xcrysden*. Rancangan penelitian digambarkan dalam diagram alir pada Gambar 3.2 dan beberapa tahapan diuraikan dibawah ini:

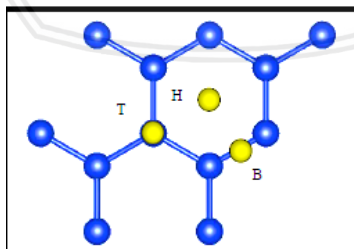
3.3.1 Tes Konvergensi

Tes konvergensi merupakan tes untuk menentukan parameter yang digunakan agar mendapatkan hasil yang akurat atau konvergen dan waktu yang efisien dalam *running* menggunakan komputer. Parameter-parameter yang digunakan dalam tes konvergensi yaitu energi *cut-off*, banyaknya interaksi (*nstep*) dan jumlah *k-point* (*ngkpt*).

3.3.2 Doping

Tahap Doping merupakan tahap penambahan atom impuritas pada *stanene*. Pada penelitian ini dilakukan dengan doping 1 atom yaitu pemberian atom impuritas pada *stanene*. Posisi doping atom terdapat 3 macam, yaitu *Bridge-site* (*B-site*), *Hollow-site* (*H-site*), dan *Top-site*. Doping atom Aluminium pada posisi *Hollow-site*, *Bridge-site*, *Top-site* kemudian dilanjutkan dengan atom Phosphorus pada posisi *Hollow-site*, *Bridge-site*, *Top-site*. Posisi doping atom pengotor, ditunjukkan pada Gambar 3.1

- *B-site* merupakan posisi doping atom *impuritas* yang terletak di tengah-tengah ikatan antar atom *stanene*.
- *T-site* merupakan posisi doping atom *impuritas* yang terletak di atas atom *stanene*.
- *H-site* merupakan posisi doping atom *impuritas* yang terletak di tengah-tengah struktur *stanene*.



Gambar 3. 1 Posisi doping

3.3.3 Perhitungan

Dalam penelitian ini perhitungan *binding energy* (energi ikat) dan perhitungan sifat magnetik yang diperlukan. Energi ikat merupakan suatu energi yang digunakan untuk memisahkan / memutuskan ikatan partikel dari suatu sistem. Energi ikat secara matematis dituliskan :

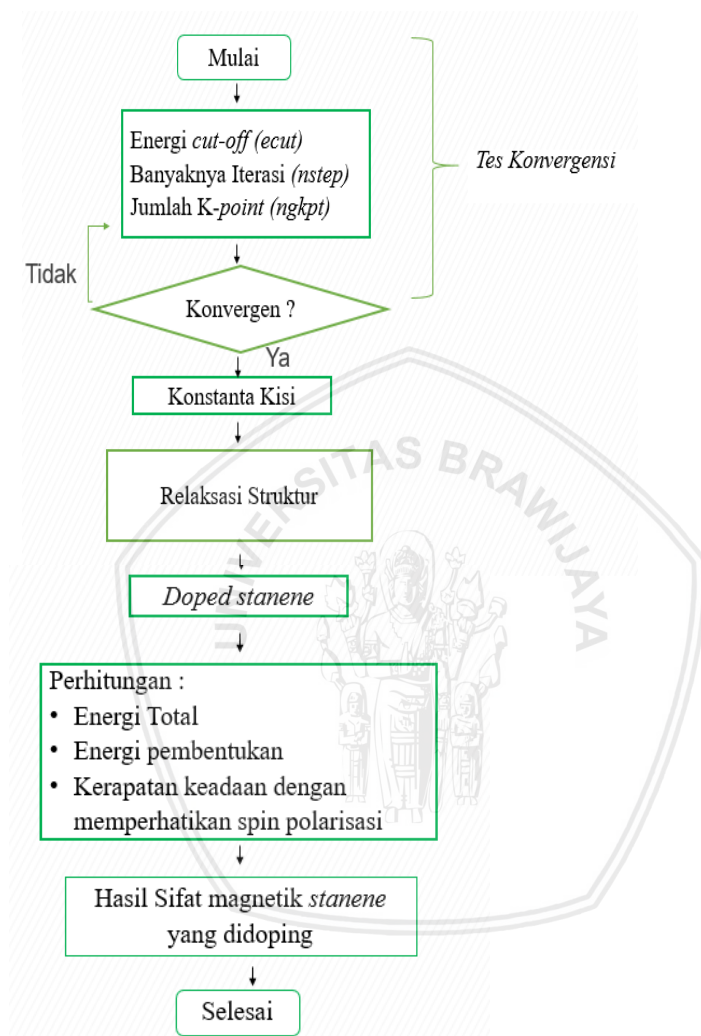
$$E_{bind} = - (E_{H-stanenedop} - (E_{stanenemurni} + E_{dop}))$$

Berdasarkan persamaan matematis diatas, E_{bind} merupakan energi ikat (Ev). $E_{H-stanenedop}$ merupakan energi total dari *stanene* yang telah didoping dengan atom *impuritas*. Sedangkan $E_{stanenemurni}$ merupakan energi total *stanene* murni tanpa adanya atom *impuritas*. E_{dop} merupakan energi total dari atom impuritasnya.

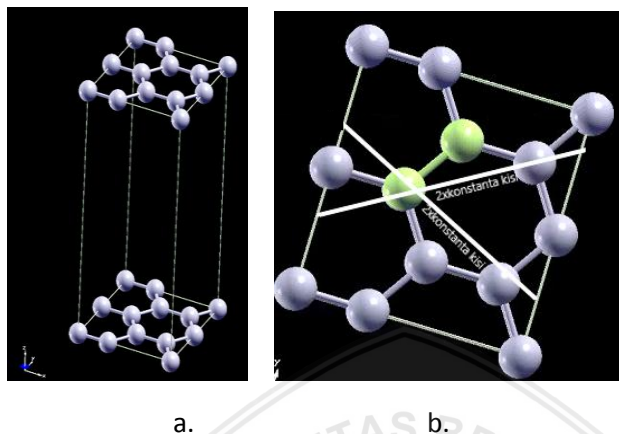
Perhitungan selanjutnya yaitu perhitungan energi pembentukan (E_{form}) dimana merupakan energi minimum yang dibutuhkan untuk atom atom bebas membentuk menjadi suatu struktur Kristal. Struktur dianggap stabil, apabila energi pembentukannya minimum. Rumus energi pembentukan secara matematis ditulis sebagai berikut :

$$= E_{H-stanenedop} - (E_{stanenemurni} + E_{dop})$$

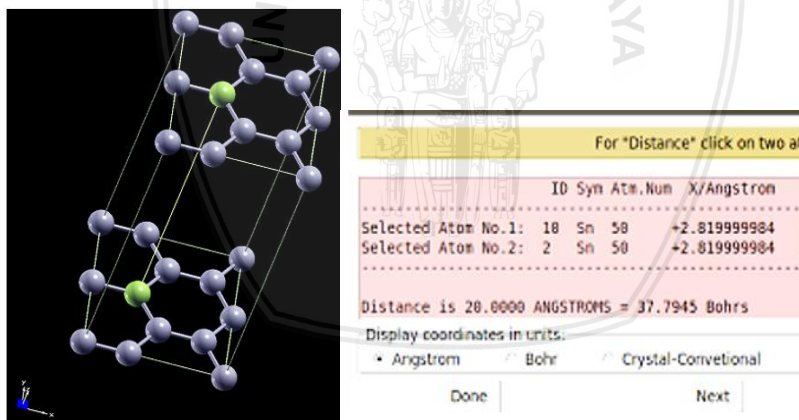
Sifat magnetik *stanene* yang didoping atom impuritas Aluminium dan Phosphorus diketahui dengan beberapa perhitungan, diantaranya adalah kerapatan keadaan total dengan memperhatikan spin polarisasi, dan energi total. Hasil perhitungan tersebut kemudian diplotting dengan gnuplot, sehingga dapat diketahui sifat magnetik *stanene*. Energi total merupakan selisish dari energi sistem feromagnetik dan energi anti-feromagnetik.



Gambar 3. 2. Diagram Alir Penelitian



Gambar 3.3 Struktur Atom Stenene 1 sel (a) , Struktur atom Stanene 2x2 sel (b)



Gambar 3.4 Sumbu Z berjarak 20 Angstrom



BAB IV

HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1 Tes Konvergensi

Tes Konvergensi yaitu metode awal dari penelitian yang tujuannya untuk menentukan keadaan suatu Kristal yang stabil. Keadaan yang stabil diidentifikasi dengan energi yang paling minimum. Selain itu tes konvergensi ini dilakukan agar hasil yang didapatkan konvergen, dan efisien untuk perhitungan selanjutnya. Dalam perhitungan terdapat perulangan dimana hasil yang didapat sudah maksimal dan tidak ada perubahan atau perubahannya sangat kecil mendekati nol. Jumlah perulangan yang sudah tidak ada perubahan tersebut dapat dikatakan konvergen. Tahap-tahap pada tes konvergensi yaitu *ecut*, *nstep* dan *ngkpt*.

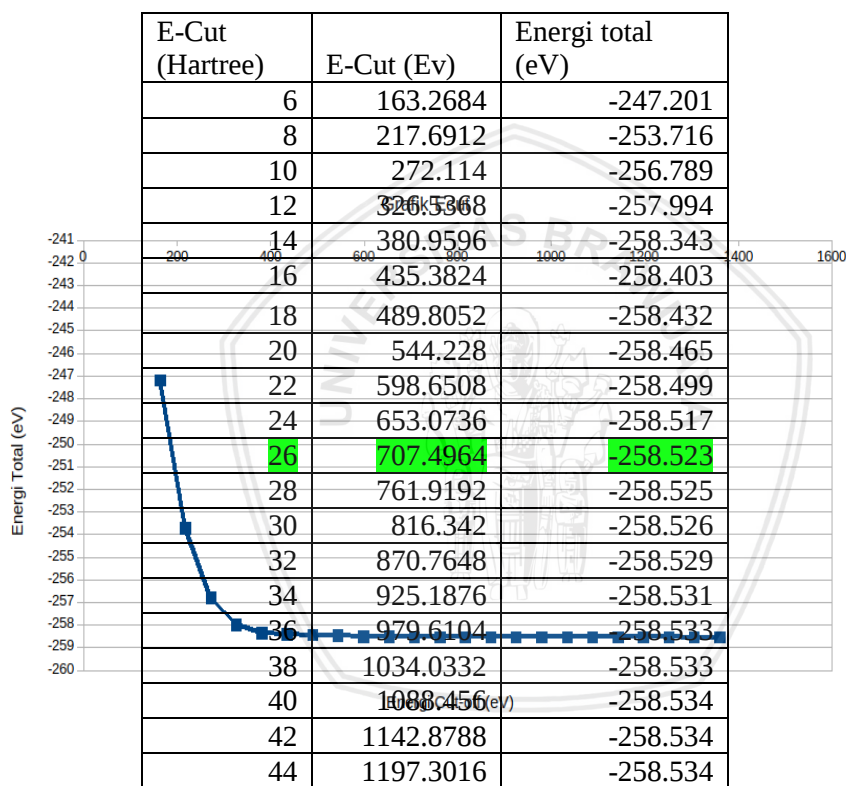
4.1.1 Energi *Cut-off* (e-cut)

Energi kinetik maksimum yang digunakan untuk menentukan panjang gelombang bidang dalam suatu sistem, ialah bersifat tak terbatas, maka dilakukan untuk mencari energi kinetik minimum yang konvergen sehingga bisa digunakan untuk perhitungan sistem selanjutnya. Energi *cut-off* didapatkan dari pemotongan energi kinetik pada selisih perhitungan yang kecil, sehingga selisih tersebut dapat diabaikan. Nilai dari *cut-off* mempengaruhi hasil yang didapatkan dan lamanya perhitungan, semakin besar nilai *cut-off* yang digunakan, maka hasilnya akan semakin akurat namun lama perhitungan bisa sangat lama. Nilai energi *cut-off* yang digunakan dalam penelitian ini adalah nilai yang sudah mencapai batas konvergen.

Berdasarkan hasil tes konvergensi energi *cut-off* diatas didapatkan nilai *cut-off* stanene murni $2 \times 2 \times 1$ yang digunakan dalam penelitian yaitu sebesar 707,496 eV atau 26 Hartree, pada

energi tersebut, grafik sudah konvergen. Sehingga pada perhitungan selanjutnya digunakan nilai cut-off sebesar 26 Hartree. Nilai cut-off dapat dikatakan konvergen karena nilai selisish yang kecil dengan nilai energi selanjutnya yaitu sebesar 10^{-3} eV, sehingga perubahan yang sangat kecil itu dapat diabaikan. Hasil plot grafik pada Gambar 4.1 ditunjukkan pada Tabel 4.1

Tabel 4. 1 Hasil Tes Konvergensi energi cut-off stanene murni



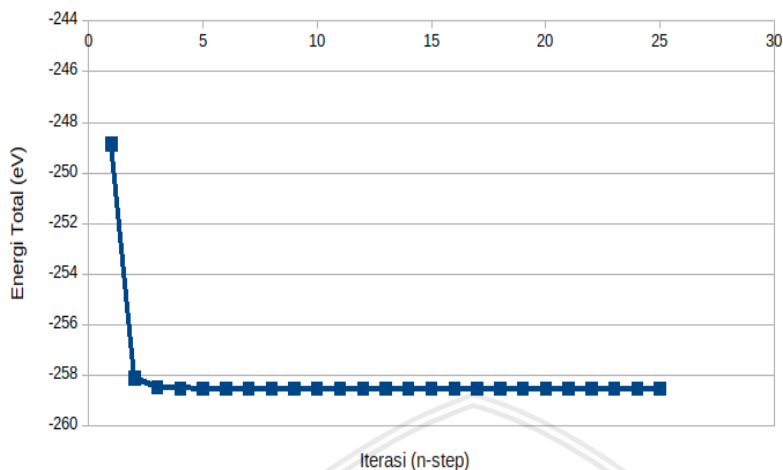
Gambar 4. 1 Hasil Tes Konvergensi energi cut-off stanene murni

4.1.2 Jumlah perhitungan atau Iterasi (*n-step*)

Iterasi (n-step) merupakan banyaknya perhitungan yang berjalan agar dapat nilai output yang akurat dan efisien. Seperti halnya menentukan nilai cut off sebelumnya, nilai n-step juga ditentukan dari kekonvergenan dari suatu grafik yang dihasilkan. Semakin banyak iterasi yang digunakan, maka hasilnya akan lebih akurat, namun dalam melakukan perhitungan, akan membutuhkan waktu yang sangat lama. Iterasi yang digunakan dalam penelitian ini yaitu nilai dengan energi total yang sudah konvergen. Pada Tabel 4.1 merupakan tabel hasil nstep yang akan diplot menjadi grafik dengan sumbu-x sebagai n-step (jumlah iterasi) dan sumbu-y merupakan energi total (eV).

Tabel 4.2 Data hasil Tes Konvergensi N-step (Jumlah Iterasi)

Nstep	Energi Total (eV)	Nstep	Energi Total (eV)
1	-248.8658316	13	-258.5234612
2	-258.1054818	14	-258.5234612
3	-258.4777846	15	-258.5234612
4	-258.5172876	16	-258.5234612
5	-258.5220824	17	-258.5234612
6	-258.523134	18	-258.5234612
7	-258.5233634	19	-258.5234612
8	-258.5234314	20	-258.5234612
9	-258.5234536	21	-258.5234612
10	-258.5234612	22	-258.5234612
11	-258.5234612	23	-258.5234612
12	-258.5234612	24	-258.5234612

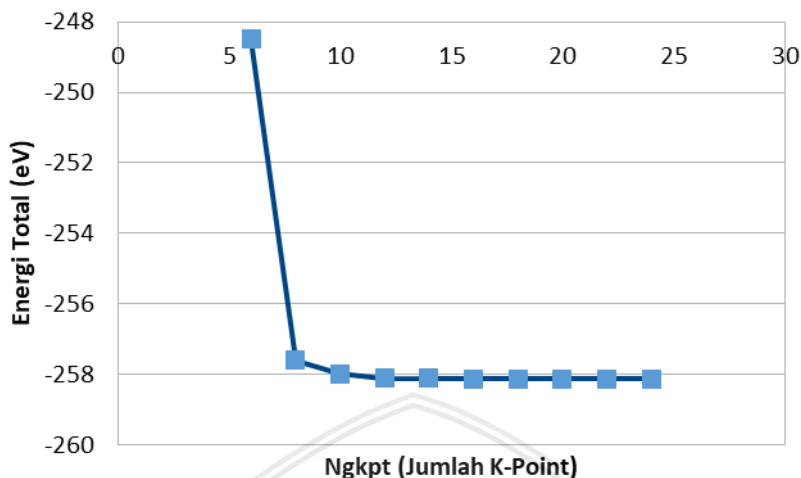


Gambar 4. 2 Hasil Tes Konvergensi jumlah iterasi pada *stanene* murni

Berdasarkan Gambar 4.2, iterasi yang telah konvergen terletak pada n-step 10 yaitu dengan energi total sebesar 282.5234612 eV dengan kenaikan energi total selanjutnya dengan iterasi berikutnya memiliki selisih hanya 10^{-5} eV, sehingga jumlah iterasi yang digunakan pada penelitian ini yaitu 10 kali.

4.1.3 Jumlah *k-point* dalam *brillioin zone* (ngkpt)

Jumlah K-point dalam *brillioin zone* berpengaruh pada perhitungan gelombang bidang dan yang dapat membentuk pita energi suatu struktur kristal. Nilai ngkpt ditentukan dengan menganalisa energi total sistem yang konvergen.



Gambar 4. 3 Hasil Tes Konvergenti Ngkpt (Jumlah K-point dalam Brilliou Zone *Stanene* Murni)

Berdasarkan Gambar 4.3 dapat dianalisa bahwa nilai k-point yang energi totalnya telah konvergen memiliki selisih nilai energi total dengan selanjutnya yaitu 10^{-3} . Nilai energi total telah mencapai titik konvergen pada jumlah k-point 18 dengan energi total yaitu -483.2593 eV, namun penulis menetapkan jumlah k-point yang akan digunakan dalam penelitian ini yaitu 20 dengan energi total sebesar -483.2598 eV, agar hasil yang didapatkan nantinya mendekati kata akurat, dan telah diperhitungkan efisiensinya dalam perhitungan program abinit. Besarnya jumlah k-point akan berpengaruh pada keakuratan dan keefesiensian perhitungan. Hasil dari plot grafik Ngkpt ditunjukkan pada Tabel 4.3.

Tabel 4. 3 Hasil Tes Konvergensi jumlah K-Point

Jumlah K-Point	Energy Total (eV)
6	-248.4899034
8	-257.6074462
10	-257.9964202
12	-258.1073641

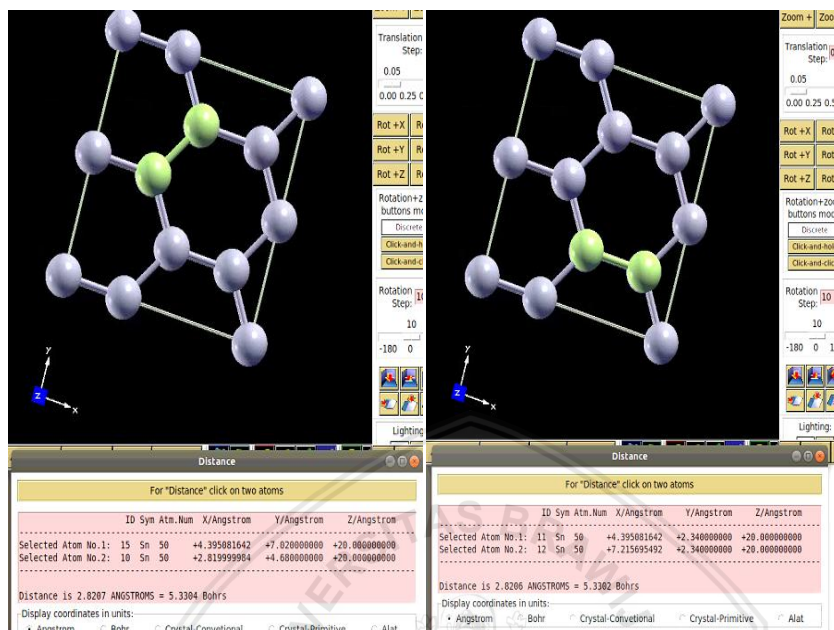
14	-258.1202822
16	-258.1250175
18	-258.1266278
20	-258.1273105
22	-258.1276862
24	-258.1279052

4.1.4 Konstanta Kisi *Stanene*

Konstanta kisi *stanene* didapatkan dengan optimalisasi struktur *stanene* menggunakan software Xcrysden ditunjukkan pada Gambar 4.4 struktur *stanene* diset pada bentuk honeycomb (kisi sarang lebah) hasil yang didapatkan pada penelitian ini yaitu sebesar 4,68 Angstrom dan panjang ikatan antar atom didapatkan sebesar 2,8206 Å dan 2,8207 Å atau bisa dibulatkan menjadi 2,82 Å pada semua panjang ikatan atom *Stannum*. Besar nilai konstanta kisi sel *stanene* dan ikatan antar atom *stannum* disajikan pada Tabel 4.4 serta dibandingkan dengan referensi perhitungan komputasi yang telah dilakukan.

Tabel 4. 4 Konstanta kisi sel *stanene* dan jarak ikatan antar atom *stannum*

No	Parameter	Hasil Perhitungan	Referensi Perhitungan Komputasi		
			<i>Sheng-Shi Li et al.</i>	Dan Xu <i>et al</i> ,	M fadaie <i>et al</i>
1	Konstanta kisi	4,68 Å	4,68 Å	4,68 Å	4,68 Å
2	Ikatan <i>Sn-Sn</i>	2,82 Å	2,83 Å	2,82 Å	2,82 Å



Gambar 4.4 Struktur *stanene* (Jarak antar atom Stannum dalam struktur 2D *Stanene* yaitu 2.82 Angstrom)

Penetapan jarak sumbu-z diperlukan dikarenakan, struktur yang kita teliti adalah struktur 2 dimensi, sedangkan untuk perhitungan didalam software abinit memerlukan jarak sumbu z, oleh karena itu jarak sumbu-z di set sejauh mungkin, agar antara struktur 2 dimensi tidak berinteraksi. Jarak sumbu-z pada penelitian ini yaitu sebesar 20 Å, hal ini didukung oleh beberapa penelitian, Sheng-Shi Li mengatakan bahwa stannum dua dimensi atau *stanene* pada jarak 20 Angstrom merupakan keadaan yang vakum (Sheng-Shi Li et al., 2016). Pada penelitian Dan Xu et al. 2017 mengatakan bahwa pada jarak Z 20 Å *stanene* yang di doping dengan transisi metal di telah mencapai konvergensi untuk perubahan energi kurang dari 10^{-5} eV, perubahan energi yang kecil inilah bisa dikatakan bahwa jarak z pada struktur *stanene* bisa digunakan 20 Angstrom, sehingga bisa dikatakan pada jarak 20 angstrom ke arah Z, struktur *stanene* tidak saling berinteraksi. Pada penelitian bahwa jarak vakum sepanjang

sumbu z adalah lebih dari 15 angstrom, pada struktur *stanene* (Dan Liang, et al 2017)

4.2 Doping Atom

Doping merupakan pemberian atom pengotor pada suatu struktur Kristal *Stanene*. Interaksi dari struktur dua dimensi dengan partikel asing atau dipenelitian ini yaitu atom doping, dapat dipahami dengan jenis dari absorpsi, yang pertama chemisorption (karena penataan ulang elektronik lokal) dan physisorption (karena interaksi elektronik non-lokal), yang dinamakan gaya van der Waals [Ferrari et al., 2010]. Kekuatan interaksi antara struktur dua dimensi seperti graphene, silicene, *stanene* dengan adatom ditentukan oleh sifat elektronik/magnetik dari partikel yang berinteraksi. [Mao et al., 2008]

Pada penelitian ini atom doping yang digunakan yaitu Aluminium dan Phosphorus. Adapun posisi- posisi doping atom telah ditentukan dan terdapat tiga macam yaitu posisi Hollow, Top dan Brigde (Gambar 4.6).Doping atom ini dilakukan pada sistem *Stanene* Terhidrogenasi dan *Stanene* murni. Batasan masalah pada penelitian ini yaitu jumlah atom pendoping yaitu satu atom. Dalam proses doping memerlukan *binding energy* (energi ikat, energi minimal yang dibutuhkan suatu Kristal memutuskan ikatannya antar atom dan menjadi atom-atom bebas, dan *forming energy* (energi pembentukan) suatu energi yang dibutuhkan untuk membentuk Kristal dari atom-atom penyusunnya. Apabila energi ikat suatu Kristal tinggi, maka interaksi antar elektronnya sangat kuat sehingga sistem dalam keadaan stabil. Sebaliknya dengan energi pembentukan, apabila sistem dikatakan stabil, maka dibutuhkan energi pembentukan yang minimum.

Berdasarkan perhitungan yang telah dilakukan, posisi doping yang memiliki energi ikat tertinggi dan energi pembentukan terendah ialah pada posisi *hollow* (atom pendoping berada di tengah-tengah struktur *stanene*), yaitu energi ikat tertinggi dan energi pembentukan terendah berturut-turut pada sistem *stanene* terhidrogenasi yang

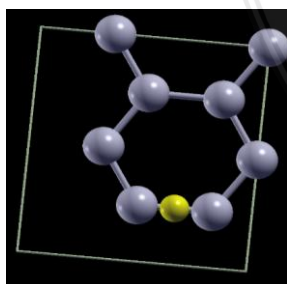
didoping oleh atom *aluminium* sebesar -29.418650084 eV, 29.418650084 eV dan energi ikat tertinggi serta energi pembentukan terendah pada sistem *stanene* terhidrogenasi yang didoping oleh atom *phosphorus* secara berturut-turut yaitu -27.74957815 eV, dan 27.74957815 eV. Pada sistem *stanene* murni yang didoping oleh atom aluminium dan phosphorus juga menunjukkan posisi *hollow* lah yang paling stabil. Energi ikat tertinggi serta energi pembentukan terendah yang didoping oleh atom *aluminium* & *phosphorus* secara berturut-turut yaitu (2.543534409 eV, -2.543534409 eV) & (4.279161061 eV, -4.279161061 eV). Hal ini didukung oleh penelitian Dan-Xu Xing tahun 2017 yang meneliti pengaruh doping atom transisi metal pada stanene menunjukkan bahwa posisi doping atom (Cr,Mn,Fe,Co,Ni,Cu,Zn) yang paling stabil diantara posisi doping ialah posisi Hollow. Tabel 4.5 merupakan tabel hasil perhitungan energi ikat dan energi pembentukan pada penelitiann ini.

Dari hasil perhitungan energi ikat dan energi pembentukan diatas dapat disimpulkan, bahwa posisi hollow merupakan posisi paling stabil diantara posisi-posisi doping lainnya. Sebaliknya pada sistem *stanene* baik yang didoping oleh aluminium dan phosphorus menunjukkan posisi *top* (posisi atom pendoping berada diatas satu atom *stanene*) yang interaksi antara elektronnya cenderung lemah. Sedangkan, posisi yang interaksi antara elektronnya rendah pada sistem *stanene* terhidrogenasi yang telah didoping aluminium dan phosphorus terdapat pada posisi *brigde* (posisi atom pendoping berada ditengah-tengah ikatan antar atom, seperti jembatan atara 2 atom).

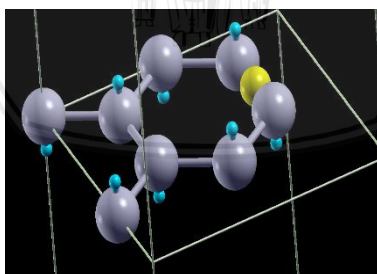
Setelah dilakukan pendopingan dan didapatkan hasil output energi total, maka dilakukan perhitungan energi ikat dan energi pembentukan. Sehingga ditemukannya posisi yang paling stabil diantara 12 sistem tersebut menggambarkan, bahwa pada posisi hollow,atom pendoping berada pada kondisi yang stabil, sehingga akan digunakan untuk menganalisa sifat magnetik *stanene* yang hanya memperhitungkan pada sistem yang stabil.

Tabel 4. 5 Energi ikat dan energi pembentukan

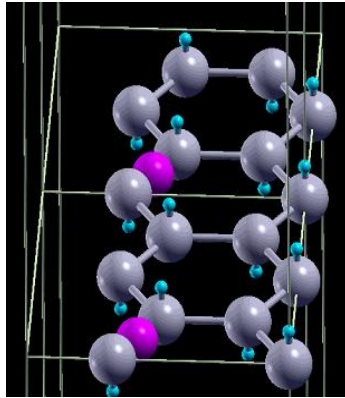
No	Sistem	Doping Atom	Posisi	Binding Energy (eV)	Form Energy (eV)
1	Stanene Terhidrogenasi	Al	Bridge	-54.35	-54.35
2			Hollow	-29.45	-29.45
3			Top	-68.21	-68.21
4		P	Bridge	-71.72	-71.72
5			Hollow	-27.75	-27.75
6			Top	-134.41	-134.41
7	Stanene Murni	Al	Bridge	-42.02	-42.02
8			Hollow	2.54	-2.54
9			Top	-28.79	28.79
10		P	Bridge	-36.43	36.43
11			Hollow	4.28	-4.28
12			Top	-34.62	34.62



a.

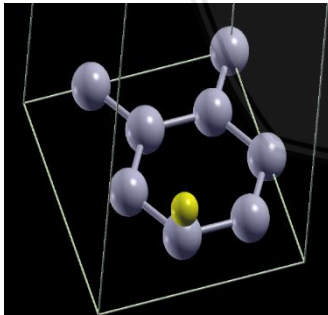


b.

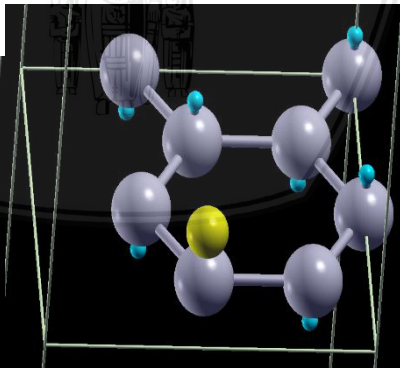


c. d.

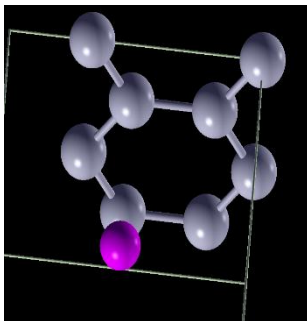
Gambar 4. 5 Gambar posisi doping Bridge (a.) stanene murni didop Phosphorus (b) Stanene terhidrogenasi didop atom Phosphorus. (c.) stanene murni didop Aluminium serta (d) Stanene terhidrogenasi didop atom Aluminium.



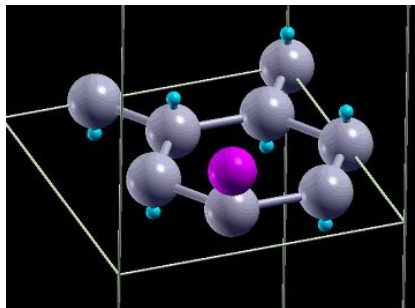
a.



b.

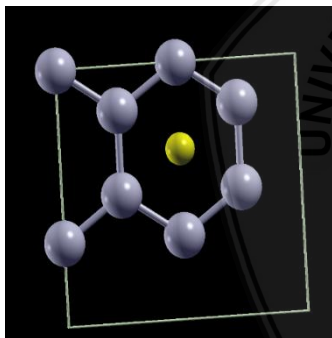


c.

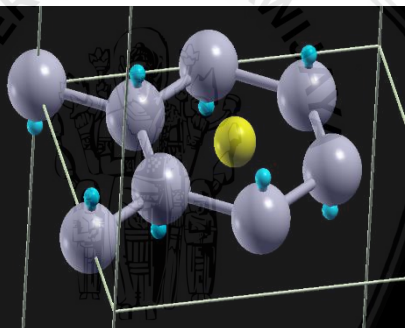


d.

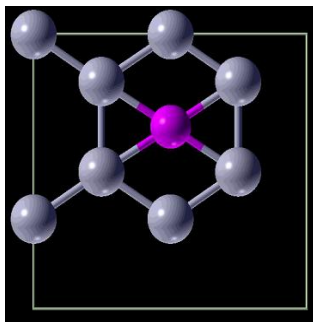
Gambar 4. 6 Gambar posisi doping Top, (a.) stanene murni didop Phosphorus (b) Stanene terhidrogenasi didop atom Phosphorus. (c.) stanene murni didop Aluminium serta (d) Stanene terhidrogenasi didop atom Aluminium.



a.



b.



Gambar 4. 7 Gambar posisi hollow pada (a) *stanene* murni di dop
didop atom Aluminium. Dan (b) *stanene* terhidrogenasi
atom Aluminium.

4.3 Sifat Magnetik

Sifat magnetik merupakan suatu kemampuan suatu material untuk menarik benda disekitarnya. Hal ini disebabkan oleh karena adanya spin elektron yang bergerak, sehingga menimbulkan arus dan arus tersebut menyebabkan kemagnetan. Pada penelitian struktur dua dimensi seperti *stanene*, sifat magnetik dianalisa dengan perhitungan DOS (Density of State) atau kerapatan keadaan yang terpolarisasi dan selisih energi dari dua sistem (sistem feromagnetik dan sistem anti-feromagnetik).

$$\Delta E = E (AFM) - E (FM) \quad (4.1)$$

Bila hasil selisih antara dua sistem tersebut adalah minus, maka sistem yang akan di plot pada DOS yaitu sistem feromagnetik, sebaliknya jika selisih antara dua sistem tersebut hasilnya menunjukkan plus, maka hasil yang akan di plot DOS nya yaitu sistem anti-feromagnetik. Hal ini sesuai dengan analisa yang dilakukan oleh Rufinus pada tahun 2010, Selisih energi bernilai

positif menandakan bahwa material tersebut bersifat anti-feromagnetik. Sebaliknya, apabila selisih energi bernilai negatif menandakan bahwa material tersebut bersifat feromagnetik (Rufinus, 2010). Pada grafik kerapatan keadaan (DOS) terdapat kerapatan keadaan spin up dan spin down, apabila kedua kerapatan keadaan tersebut simetris atas dan bawah, maka struktur dua dimensi yang kita teliti merupakan bersifat nonmagnetik, sebaliknya jika hasil plot DOS spin up dan spin up menunjukkan hasil asimetris, maka struktur 2 dimensi tersebut bersifat magnetik.

Hasil penelitian disini menunjukkan bahwa *stanene* murni bersifat anti-feromagnetik, sedangkan pada material *stanene* terhidrognasi dan *stanene* terhidrogenasi doping aluminium dan phosphorus, serta *stanene* murni doping aluminium dan phosphorus menunjukkan sifat feromagnetik. Dari tabel 4.3 diketahui bahwa selisih energi total AFM dan FM pada sistem *stanene* murni adalah 0 eV sehingga bernilai positif, maka *stanene* murni bersifat antiferromagnetik dan selisih energi sistem *stanene* terhidrogenasi yaitu -88,022 eV yang mana memiliki orientasi magnet karena bernilai negatif. Selisih energi tertinggi dimiliki oleh *stanene* yang didoping aluminium kemudian *Stanene* Terhidrogenasi dan selisih energi yang paling kecil yaitu *stanene* murni.

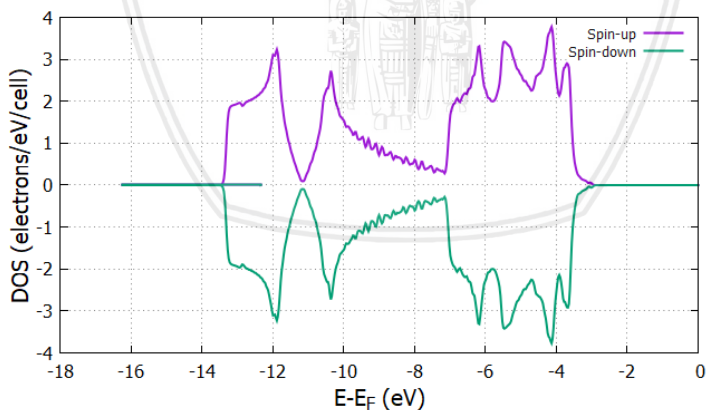
Tabel 4. 6 Selisih energi total sistem antiferomagnetik dengan sistem feromagnetik

No	Sistem	Energi FM (eV)	Energi AFM (eV)	Etot (eV)
1	Murni	-758.20	-758.20	0.00
2	Hidrogenasi	-758.20	-846.20	-88.02
3	SN H AL	-880.30	-881.40	-1.04
4	SN H P	-1,003	-1,004	-1.27
5	SN P	-936.00	-936.30	-0.30

6	SN Al	-537.70	-813.60	-275.90
---	-------	---------	---------	---------

4.3.1 Stanene Murni

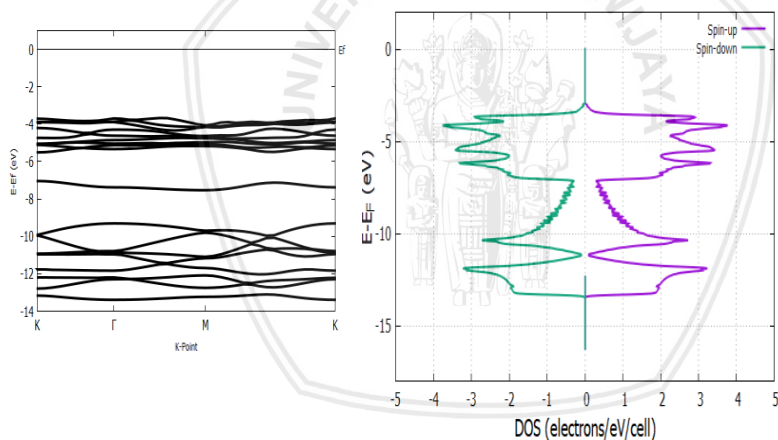
Kesimetrian pada grafik rapat keadaan suatu material adalah parameter pertama untuk mengindikasikan bahwa material tersebut bersifat magnetik atau non-magnetik. Jika hasil yang ditunjukkan grafik ialah simetri, maka material tersebut rapat keadaannya antara spin-up dan spin-down dalam keadaan sama, sehingga akan saling meniadakan dan bersifat non-magnetik. Apabila hasil grafik rapat keadaan (DOS) asimetri, maka sistem berada pada keadaan magnetik. Pada grafik rapat keadaan (DOS) Gambar 4.8 menunjukkan bahwa *stanene* murni memiliki sifat nonmagnetik karena kerapatan keadaan yang dimiliki spin-up (orientasi naik) simetri dengan kerapatan keadaan yang dimiliki spin-down (orientasi turun). Keadaan ini secara garis besar dikatakan tersusun elektron dengan orientasi yang berpasangan, sehingga efek putarannya akan saling meniadakan dan menetralkan. Hal ini didukung oleh data di buku berjudul *Chemistry* dikarang oleh Allan et al., 2008 mengatakan bahwa Tin atau Stannum bersifat diamagnetik.



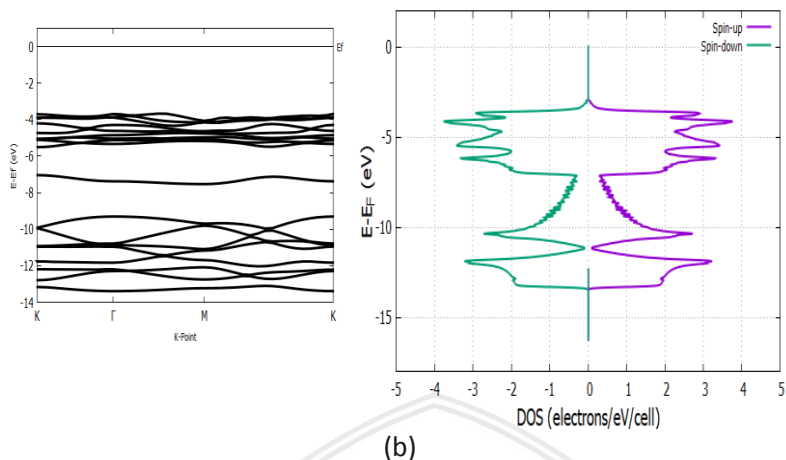
Gambar 4. 8 Rapat Keadaan elektron *stanene* murni

Sifat non-magnetik *stanene* murni dapat diamati juga dari rapat keadaan pada energi Fermi, dimana energi ini merupakan energi tertinggi yang dapat diisi oleh elektron. Pada grafik DOS *stanene* murni didapatkan dengan rapat keadaan spin-up sebesar 0 dan rapat keadaan spin-down sebesar 0. Sehingga, kesamaan jumlah keadaan yang dibentuk merupakan bukti bahwa kerapatan elektron dalam orientasi spin-up dan spin-down memiliki jumlah yang sama.

Parameter selanjutnya yang dapat dijadikan alasan bahwa *stanene* murni bersifat diamagnetik, yaitu berada pada sistem anti-ferromagnetik. *Stanene* murni memiliki magnetisasi $0,0006 \mu_B$ hampir mendekati nol. Hal ini menunjukkan sifat non-magnetik pada *stanene* murni. *Stanene* murni memiliki orientasi spin orbital yang saling berpasangan, dan menyebabkan *stanene* murni bersifat diamagnetik.



(a)



Gambar 4. 9 Pita energi dan total Rapatan keadaan elektron *stanene* murni spin-down (a) spin-up (b)

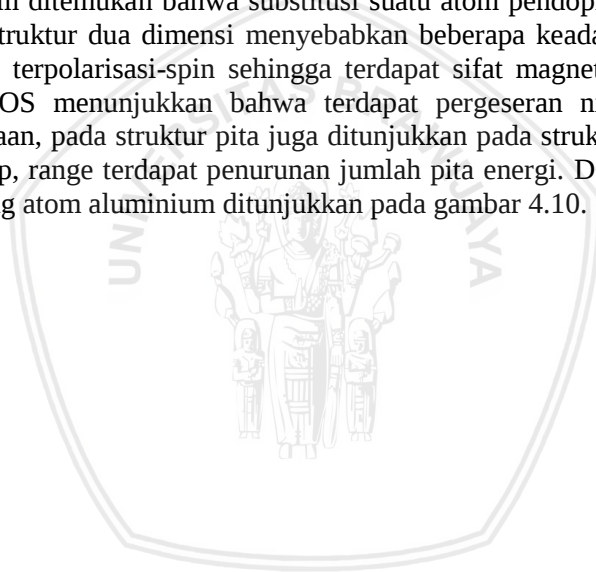
Dalam penelitian ini hasil perhitungan DOS (Density of State) atau kerapatan keadaan juga terlihat sama yang dibandingkan dengan pola struktur pita pada sistem *stanene* murni ditemukan bahwa substitusi suatu atom pendoping untuk sebuah struktur dua dimensi menyebabkan beberapa keadaan ketidakmurnian terpolarisasi-spin sehingga terdapat sifat magnetik. Pada grafik DOS menunjukkan bahwa terdapat penurunan nilai kerapatan keadaan pada range 10 eV – 6 eV, pada struktur pita, juga menunjukkan bahwa pada range tersebut terdapat penurunan jumlah pita energi.

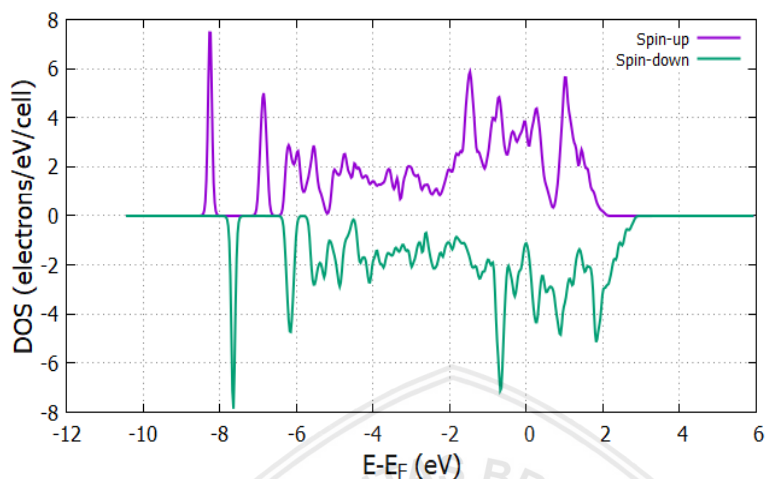
4.3.2 *Stanene* Doping Aluminium

Grafik DOS *stanene* didoping Aluminium menunjukkan pergeseran karena adanya tambahan moment magnet dari elektron-elektron atom aluminium sehingga grafik antara rapat keadaan spin-up dan spin-down menjadi asimetri. Ketidak simetrian inilah yang menyebabkan *stanene* didoping aluminium mempunyai sifat magnetik. Parameter yang digunakan dalam menentukan sifat magnetik suatu material adalah total magnetisasi (bohr magneton) yang dihasilkan dikarenakan oleh berputarnya spin elektron dalam

atom. Magnetisasi atau polarisasi magnet sendiri menjelaskan bagaimana material merespon medan magnet yang diterapkan. Besar total magnetisasi yang dihasilkan pada proses pendopingan 1 atom aluminium terhadap 8 atom stannum yaitu sebesar $2.61 \mu_B$. Total magnetisasi dari *stanene* terhidrogenasi didoping atom aluminium ini meningkat 4707,3 kali dari total magnetisasi yang dihasilkan oleh *stanene* murni yang memiliki nilai magnetisasi sangat kecil hampir mendekati nol, yaitu bernilai $0.0006 (6 \times 10^{-4}) \mu_B$.

Dalam penelitian ini hasil perhitungan DOS (Density of State) atau kerapatan keadaan juga terlihat sama yang dibandingkan dengan pola struktur pita pada sistem *stanene* murni yang didoping atom Aluminium ditemukan bahwa substitusi suatu atom pendoping untuk sebuah struktur dua dimensi menyebabkan beberapa keadaan ketidakmurnian terpolarisasi-spin sehingga terdapat sifat magnetik. Pada grafik DOS menunjukkan bahwa terdapat pergeseran nilai kerapatan keadaan, pada struktur pita juga ditunjukkan pada struktur bandgap spin up, range terdapat penurunan jumlah pita energi. DOS *stanene* didoping atom aluminium ditunjukkan pada gambar 4.10.

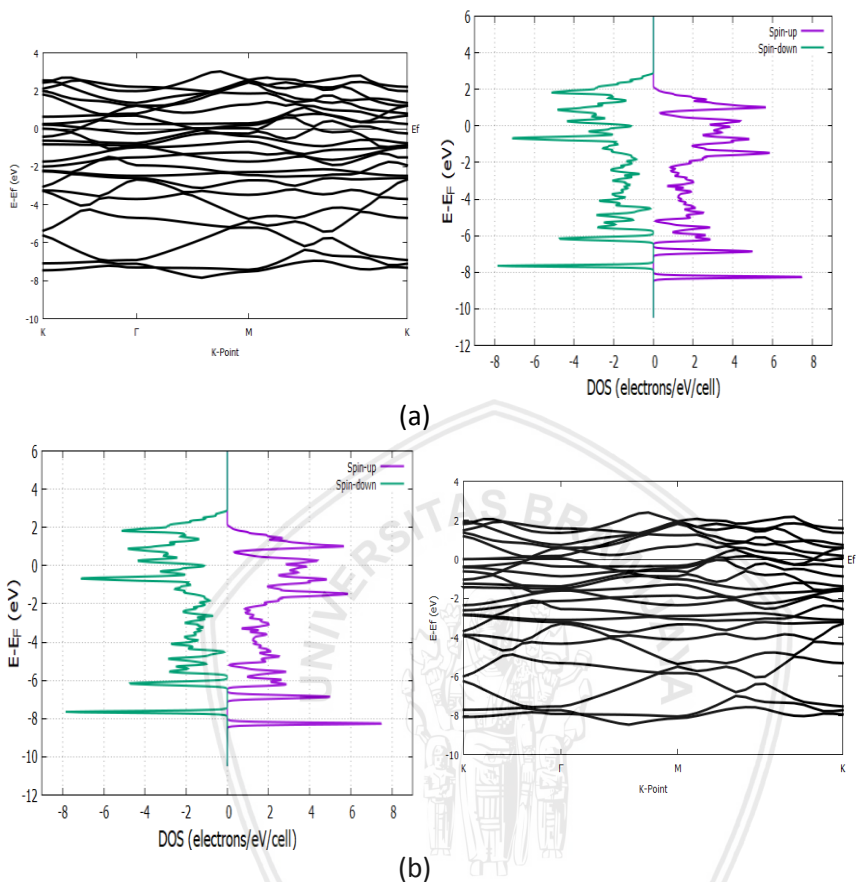




Gambar 4.10 Rapat Keadaan elektron *stanene* di doping atom Aluminium

Aluminium atom memiliki kekuatan ikat yang cukup tinggi dengan atom *stanene* karena elektron yang terisi sebagian dalam orbital 3p dapat berpartisipasi dalam ikatan kimia. Konfigurasi atom aluminium adalah $[\text{Ne}] 3s^2 3p^1$ sehingga, pada orbital p terdapat elektron tidak berpasangan, setelah di doping terhadap struktur *stanene*, dimana atom stannum memiliki konfigurasi elektron yaitu $[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2 5p^2$ dari kekosongan orbital ini, maka posisi dalam orbital tersebut bisa diisi oleh elektron pendopingnya, sehingga tercipta sifat magnetik pada *stanene*.

Struktur pita energi pada sistem ini menunjukkan pola yang berbeda antara orientasi naik (spin up) dan orientasi turun (spin down). Struktur pita energi merupakan kebolehberadaan untuk sebutir elektron berada pada rentang energi tertentu.

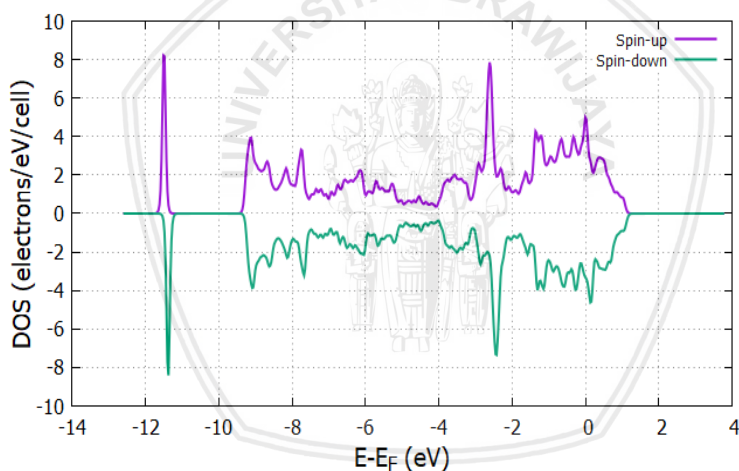


Gambar 4.11 Pita energi spin-down (a) spin-up (b) dan Rapat keadaan elektron *stanene* didoping atom aluminium.

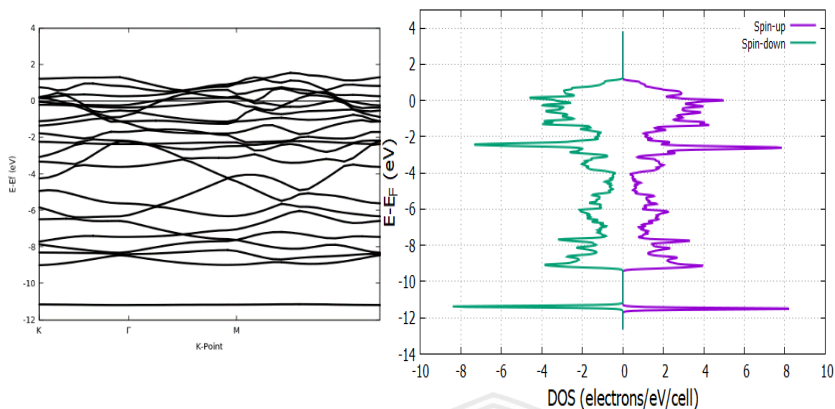
4.3.3 *Stanene* Doping Phosphorus

Grafik DOS *stanene* didoping Phosphorus menunjukkan pergeseran karena adanya tambahan moment magnet dari elektron-elektron atom phosphorus. Grafik pada Gambar 4.12 juga menunjukkan antara rapat keadaan spin-up dan spin-down

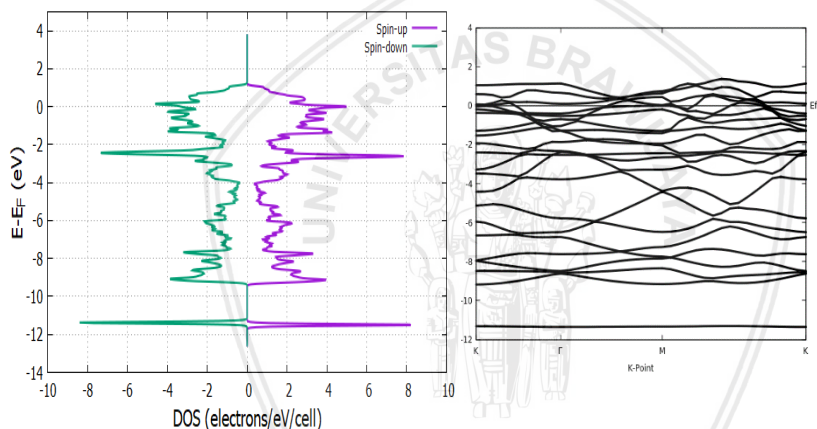
menjadi asimetri. Namun pergeseran nya tidak sebesar sistem *stanene* yang di doping atom aluminium, *stanene* doping atom phosphorus hasil pergeseran nya sebesar 0.136 eV sedangkan pada *stanene* yang didoping Aluminium pergesarannya sebesar 0.625 eV. Parameter yang digunakan dalam menentukan sifat magnetik suatu material adalah total magnetisasi (bohr magneton) yang dihasilkan dikarenakan oleh berputarnya spin elektron dalam atom. Besar total magnetisasi yang dihasilkan pada proses pendopongan 1 atom aluminium terhadap 8 atom stannum yaitu sebesar $2.63 \mu_B$. Total magnetisasi dari *stanene* terhidrogenasi didoping atom phosphorus ini meningkat 4755,3 kali dari total magnetisasi yang dihasilkan oleh *stanene* murni yang memiliki momen magnetik sangat kecil hampir mendekati nol, yaitu $0.0006 (6 \times 10^{-4}) \mu_B$.



Gambar 4. 12 Rapat Keadaan elektron *stanene* di doping atom Phosphorus



(a)



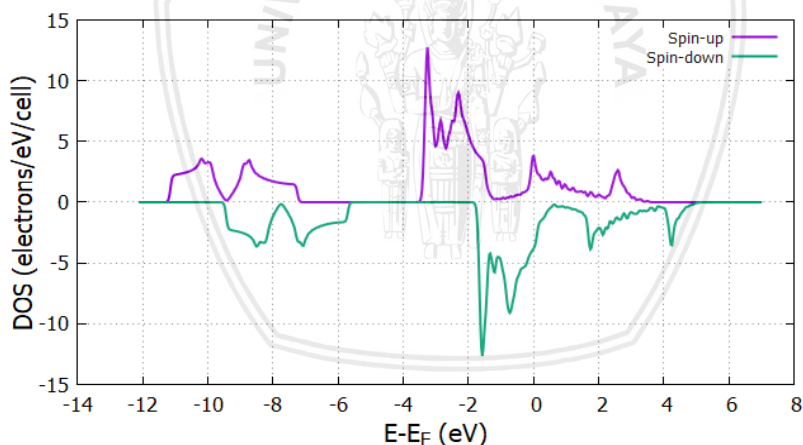
(b)

Gambar 4.13 . Pita energi spin-down (a), spin-up (b) dan Rapat Keadaan elektron *stanene* murni di doping atom Phosphorus

Pada Gambar 4.13 pita energi spin-up (hijau) dan spin-down (ungu) menunjukkan bahwa semakin tinggi nilai kerapatan keadaan yang ada di grafik DOS, maka semakin banyak pula jumlah pita energi yang terdapat pada range $E-E_f$ tertentu.

4.3.4 Stanene Terhidrogenasi

Penelitian yang dilakukan oleh Sheng-shi Li dan Chang-wen Zhang pada tahun 2016, mengungkapkan bahwa kasus *stanene* terhidrogenasi, menunjukkan sifat elektronik yang berbeda, termasuk semimetal, dan karakter semikonduktor, yang sensitif terhadap pengaturan atom hidrogen didalam penelitian mereka bahwa posisi doping atom terletak secara *zig-zag* pada sisi atas permukaan *stanene* adalah feromagnetik (Sheng dan Chang, 2016). Ketika atom *stannum* diberi doping atom hidrogen, maka akan terbentuk ikatan yang kuat antar atom *stannum* dan *hidrogen*. Hal ini terdapat proses hidridisasi sp^3 . Maka atom *stannum* terlokalisasi dan tidak berpasangan, atom yang terlokalisasi dan menjadi tidak berpasangan inilah yang akan menyebabkan suatu material memiliki sifat magnetik.



Gambar 4 .14 Rapat keadaan elektron *stanene* terhidrogenasi

Grafik DOS *stanene* terhidrogenasi menunjukkan pergeseran karena adanya tambahan moment magnet dari elektron-elektron 8 atom hidrogen yang menyumbang orientasi elektron spin-up

repository.ub.ac.id

dikarenakan oleh nomor atom hidrogen adalah 1, sehingga hanya terdapat spin up dan hasil pergeseran nya sebesar 1.714 eV

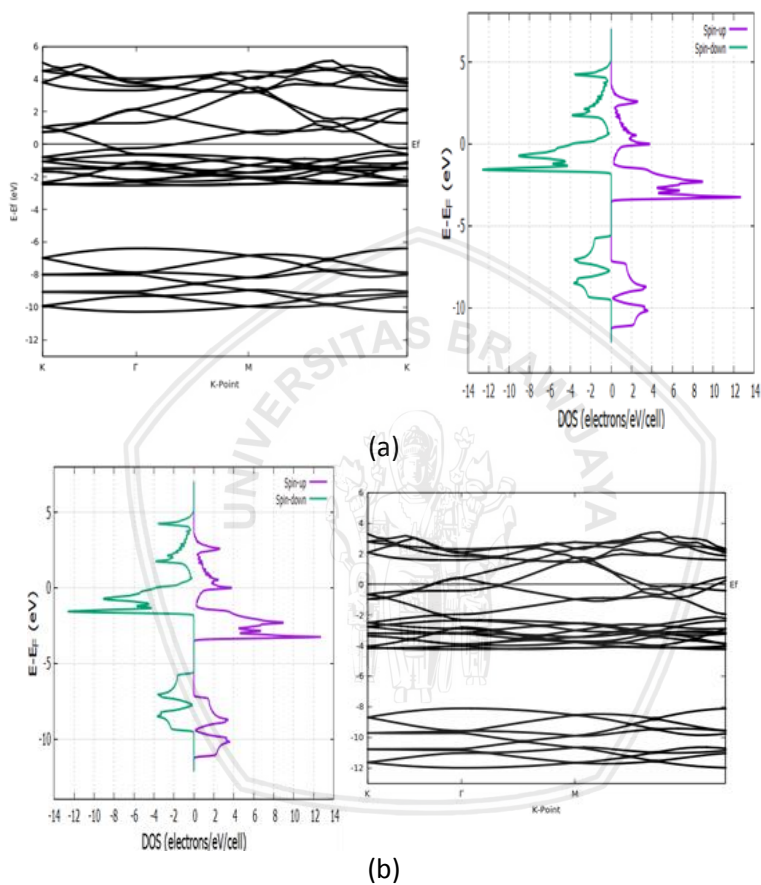
Parameter yang digunakan dalam menentukan sifat magnetik suatu material adalah total magnetisasi (bohr magneton) yang dihasilkan dikarenakan oleh berputarnya spin elektron dalam atom. Besar momen magnet yang dihasilkan pada proses pendopingan 8 atom hidrogen terhadap 8 atom stannum yaitu sebesar $1.85 \mu_B$. Momen magnetic dari *stanene* terhidrogenasi ini meningkat 3341.2 kali dari momen magnetik yang dihasilkan oleh *stanene* murni yang memiliki momen magnetik sangat kecil hampir mendekati nol, yaitu $0.0006 (6 \times 10^{-4}) \mu_B$.

Hal ini didukung oleh Penelitian yang dilakukan oleh Sheng-shi Li dan Chang-wen Zhang pada tahun 2016, mengungkapkan bahwa kasus *staanene* terhidrogenasi, menunjukkan sifat elektronik yang berbeda, termasuk semimetal, dan karakter semikonduktor, yang sensitif terhadap pengaturan atom hidrogen didalam penelitian mereka bahwa posisi doping atom terletak secara *zig-zag* pada sisi atas permukaan *stanene* adalah feromagnetik (Sheng dan Chang, 2016). Ketika atom *stannum* diberi doping atom hidrogen, maka akan terbentuk ikatan yang kuat antar atom *stannum* dan *hidrogen*. Hal ini mengakibatkan terjadinya proses hidridisasi sp^3 . Maka atom *stannum* akan terlokalisasi dan menjadi tidak berpasangan, atom yang terlokalisasi dan menjadi tidak berpasangan inilah yang akan menyebabkan suatu material bersifat magnetik.

Gambar Grafik 4.14 Menunjukkan bahwa terjadi pergeseran spin down ke kanan dan menjadi asimetri. Pergeseran ini lah yang menyebabkan munculnya momen magnetik. Terpecahnya kesetangkupan nilai rapat keadaan mengikuti aturan interaksi pertukaran. Dimana arah putar antara *spin-up* dan *spin-down* dapat berubah akibat distribusi muatan spasialnya. Jika hasil kerapatan menunjukkan simetri, maka arah putar antara *spin-up* dan *spin-down* akan saling meniadakan, dan memiliki momen magnet yang sangat kecil, bahkan tidak ada.

Pada gambar pita energi (Gambar 4.15) menunjukkan bahwa pita energi spin-down (hijau) dan spin-up (ungu) memiliki

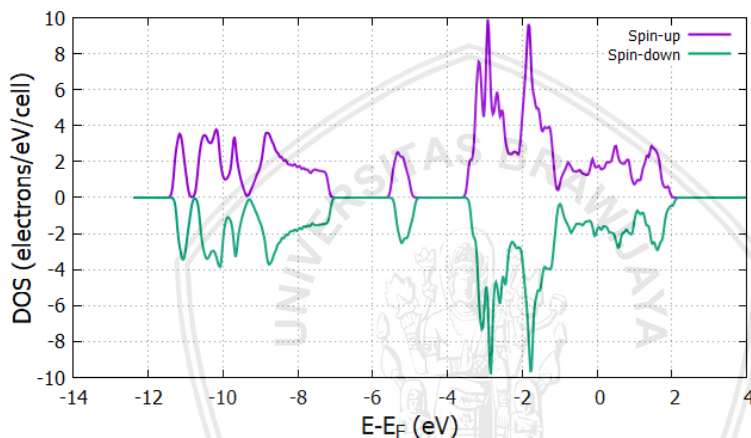
range energi yang berbeda, dikarenakan kerapatan keadaan orientasi spin-up bergeser, sehingga pita energi juga bergeser sesuai dengan kerapatan keadaan.



Gambar 4 .15 Pita energi spin-down (a),spin-up(b) dan Rapat Keadaan elektron *stanene* terhidrogenasi

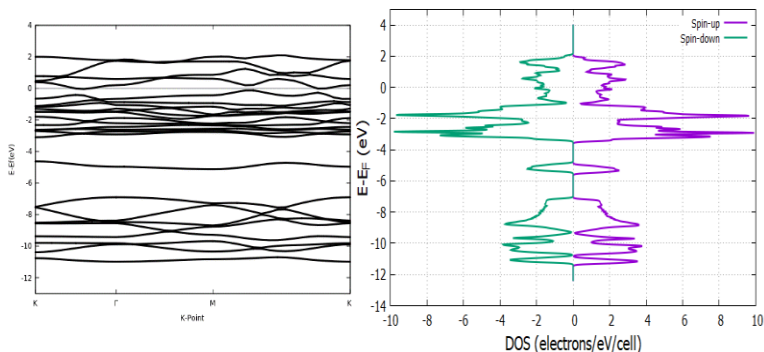
4.3.5 Stanene Terhidrogenasi Doping Aluminium

Pada grafik kerapatan keadaan Stanene Terhidronegasi doping Aluminium pada Gambar 4.16 menunjukkan adanya ketidaksimetrian antara orientasi spin up dan orientasi spin down. Hal ini dikarenakan adanya sumbangan momen magnetik dari atom hydrogen dan Aluminium.

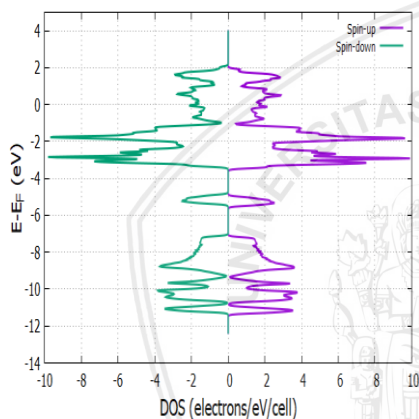


Gambar 4.16 Rapat keadaan elektron *stanene* terhidrogenasi di doping atom Aluminium

Besar total magnetisasi yang dihasilkan pada proses pendopingan 1 atom Aluminium pada *Stanene* Terhidrogenasi yaitu sebesar $3.02 \mu_B$. Total magnetisasi dari pendopingan atom aluminium pada *stanene* terhidrogenasi ini meningkat 5444,9 kali dari nilai magnetisasi yang dihasilkan oleh *stanene* murni yang memiliki nilai magnetisasi sangat kecil hampir mendekati nol, yaitu sebesar $0.0006 (6 \times 10^{-4}) \mu_B$.



(a)

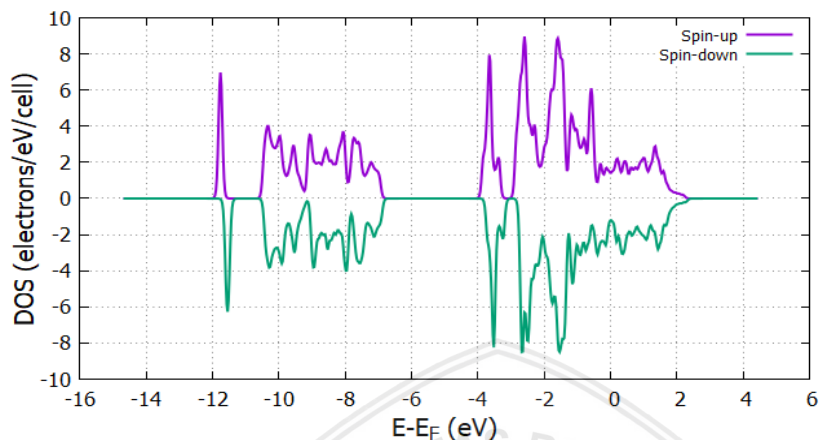


(b)

Gambar 4 .17 Pita energi spin-down (a),spin-up (b) dan Rapat Keadaan elektron *stanene* terhidrogenasi di doping atom Aluminium

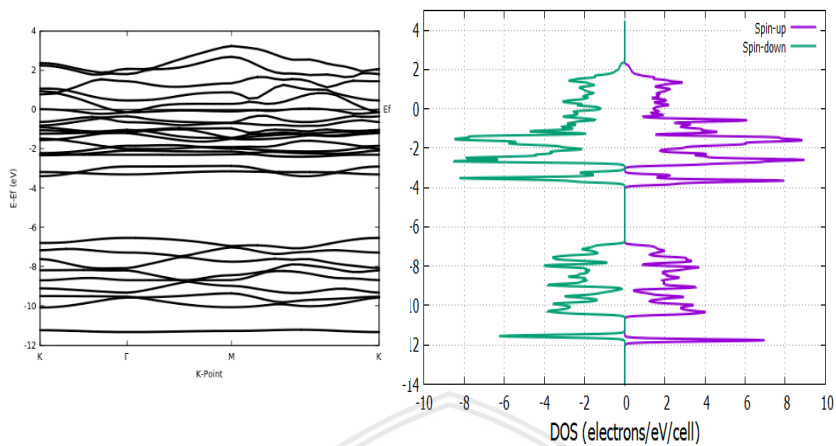
4.3.4 *Stanene* Terhidrogenasi Doping Phosphorus

Pada grafik kerapatan keadaan *Stanene* Terhidronegasi doping Phosphorus pada Gambar 4.16 menunjukkan adanya ketidaksimetrian antara orientasi spin up dan orientasi spin down. Hal ini dikarenakan adanya sumbangan momen magnetik dari atom hydrogen dan Phosphorus.

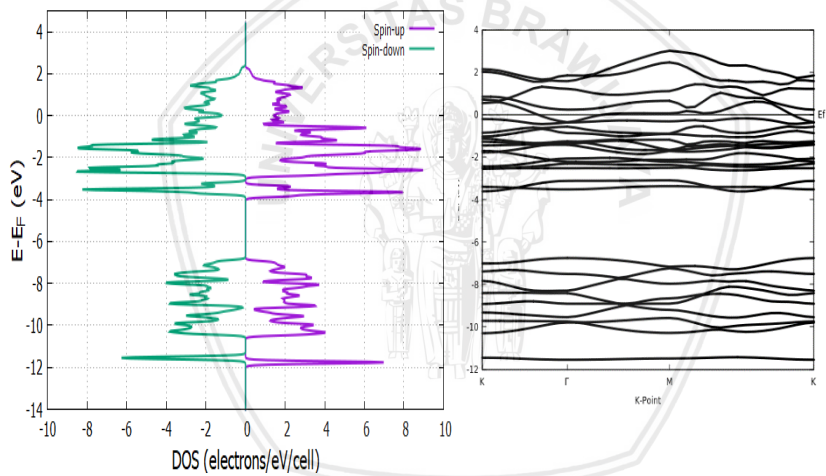


Gambar 4.18 Rapat keadaan elektron *stanene* terhidrogenasi didoping atom Phosphorus

Besar total magnetisasi yang dihasilkan pada proses pendopingan 1 atom Phosphorus pada *Stanene* Terhidrogenasi yaitu sebesar $3.8 \mu_B$. Total magnetisasi dari pendopingan atom phosphorus pada *stanene* terhidrogenasi ini meningkat 7004,6 kali dari magnetisasi yang dihasilkan oleh *stanene* murni yang memiliki nilai magnetisasi sangat kecil hampir mendekati nol, yaitu sebesar $0.0006 (6 \times 10^{-4}) \mu_B$. Pada gambar pita energi (Gambar 4.19) menunjukkan adanya kerapatan elektron antara spin-up dan spin-down struktur pita yang sama pola nya dengan grafik kerapatan keadaan (DOS) yang dihasilkan. Kerapatan keadaan dan struktur pita dibandingkan dan hasilnya adalah tidak simetri. Ketidak simetrian pita energi dan kerapatan keadaan inilah yang mengindikasikan sifat magnetik.

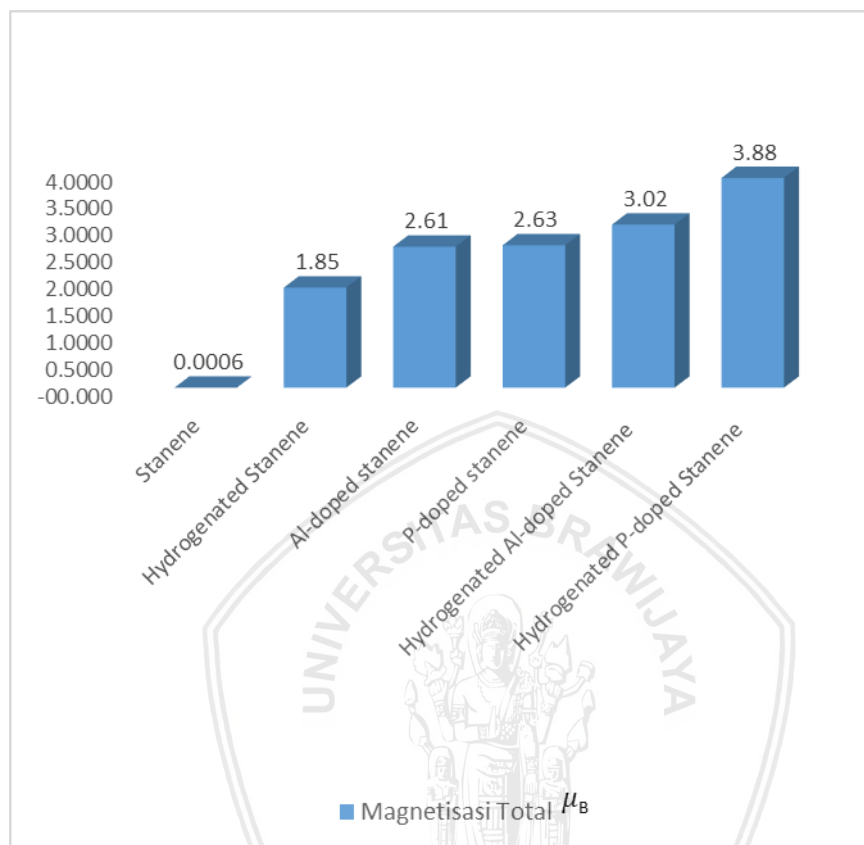


(a)



(b)

Gambar 4. 19. Pita energi spin-down (a), spin-up (b) dan Rapat Keadaan elektron stanene terhidrogenasi didoping atom Phosphorus



Gambar 4. 20 Magnetisasi Total pada semua sistem *stanene*

Berdasarkan Gambar 4.20, ditunjukkan bahwa nilai total magnetisasi tertinggi berada pada sistem *Stanene* Terhidrogennasi di beri atom phosphorus. Dari hasil penelitian ini dapat ditarik suatu kesimpulan bahwa semakin banyak atom penyusun suatu bahan (kristal), maka magnetisasi total yang dihasilkan akan semakin bertambah pula. Nomor atom yang semakin tinggi juga mempengaruhi besarnya total magnetisasi hal ini dapat terlihat pada grafik diatas (Gambar 4.20) Magnetisasi total *P-doped stanene* lebih besar dari total magnetisasi dari *Al-doped Stanene* begitu pula dengan sistem terhidrogenasi, sistem *Hydrogenated P-doped Stanene*

memiliki total magnetisasi yang jauh lebih tinggi dari pada sistem *Hydrogenated Al-doped Stanene*. Kecenderungan ini bisa dikarenakan faktor besarnya nomor atom yang dimiliki atom *Phosphorus* lebih besar dari pada atom *Aluminium*. Dimana elektron bebas ini memiliki orientasi tunggal yang dapat menimbulkan adanya momen magnetik spin. Selain itu nilai total magnetisasi tertinggi yang dihasilkan dari doping atom *phosphorus* pada *stanene* terhidrogenasi.





BAB V PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Sifat magnet pada *stanene* murni yaitu anti-feromagnetik dengan nilai magnetisasi hampir mendekati nol yaitu $0,0006 \mu_B$. Perhitungan sifat magnetik *Hydrogenated Stanene*, *Hydrogenated Al-doped Stanene*, *Hydrogenated P-doped Stanene*, *Al-doped stanene*, *P-doped stanene* dengan metode *density functional theory* menunjukkan bahwa terdapat perubahan sifat non-magnetik *stanene* murni menjadi feromagnetik, dengan nilai total magnetisasi secara berturut-turut yaitu sebesar $1,85 \mu_B$, $3,02 \mu_B$, $3,88 \mu_B$, $2,61 \mu_B$, $2,63 \mu_B$. Modifikasi permukaan struktur *stanene* dengan doping atom *Aluminium* dan *Phosphorus* meningkatkan sifat magnet dari *stanene* serta memiliki potensial yang baik untuk design *spintronic device* baru.

5.2 Saran

Untuk penelitian selanjutnya disarankan untuk menghitung sifat optik *stanene* didop dengan atom Al dan P dengan pendekatan Teori Fungsi Kerapatan.



DAFTAR PUSTAKA

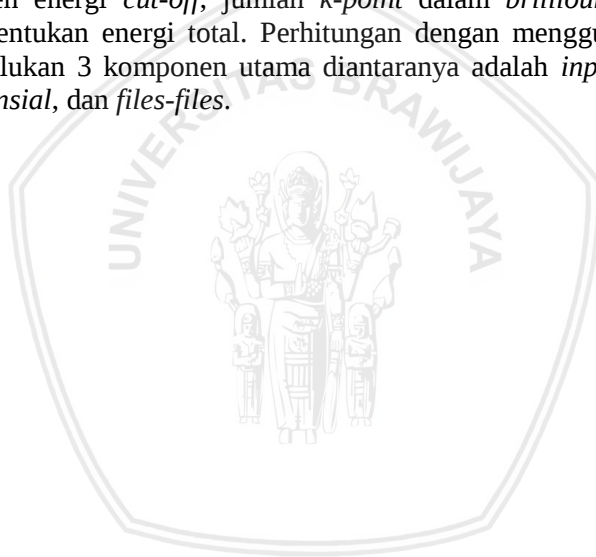
- Ashcroft, W. & Mermin, D.N., 1976. Solid State Physics. Orlando Austin New York : Saunders College PublisherCallister,
- William D. 2007. "Material Science and Engineering An Introduction". New York: John Wiley and Sons, Inc
- Dan-Xu Xing, Ceng-ceng Ren, Shu-Feng Zhang, Young Feng, Xin-Lian Chen, Chang-Wen Zhang, Pei-Ji Wang. 2017. Tunable electronic and magnetic properties in stanene by 3d transition metal atoms absorption. 139-144
- Grundmann,M. 2006. The Physics of Semiconductors: An Introduction Including Devices and Nanophysics. Berlin : Springer-verlag
- Gygi, F. and Giulia G. 2005. Electronic Structure of Quasicristal. Condensed Matter Physics, 2, hal. 95.
- M.Faide, N. Shahtahmassebi, M.R. Roknabad, O. Gulseren. 2017. Investigation of new two-dimensional materials derived from Stanene. Computational Materials Science 137 (208-214)
- M.Faide, N. Shahtahmassebi, M.R. Roknabad, O. Gulseren. 2017 First Principle investigation of armchair stanene nanoribbons. Physics Letter A 382 (180-185)
- Paudel. Bishnu Prasad., Pantha. Nurapati., Adhikari. Narayan Prasad. 2015. First-principles Study of Electronic and Magnetic Properties of Manganese Decorated Graphene. Vol.3 No.1
- Rahman, I.A. & Purqon, A., 2015. Studi Density Functional Theory (DFT) dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS 2., pp.497–503.

- repository.ub.ac.id
- Rufinus, J. 2010. Ab-initio Calculation of Magnetic Properties of Mn-doped ZnGeN₂', *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. Elsevier, **322**(9), hal. 1182.
- Saxena, Sumit, Pratap, R, & Shukla, S. (2016) 'Saxena, S. et al. Stanene: Atomically Thick Free-standing Layer of 2D Hexagonal Tin. Sci. Rep. 6, 31073; doi: 10.1038/srep31073
- Shen-shi Li, Chang-wen Zhang. 2016. Tunable electronic structures and magnetic properties in two-dimensionnal stanene with hydrogenation. *Material Chemistry and Physics* 173 (246 - 254)
- Surdia, T., Shinroku, S., 2005, Pengetahuan Bahan Teknik, PT. Pradnya Paramita, Jakarta.
- Trivedi, S., Srivastava, A. & Kurchania, R., 2014. Silicene and Germanene: A First Principle Study of Elektronik Structure and Effect of Hydrogenation- Passivation Silicene and Germanene : A First Principle Study of Elektronik Structure and Effect of. *American Scientific Publishers*, (August 2015).
- Wang, J, Xu X, Mu X, Ma F, Sun M. 2017. Magnetics and spintronics on two-dimensional composite material graphene/hexagonal boron nitride. 93-117

LAMPIRAN

Lampiran 1 *Abinit*

Abinit merupakan salah satu perangkat lunak berdasar teori fungsi kerapatan secara kuantum. Dimana, dapat digunakan untuk menghitung berbagai properti suatu material diantaranya (sifat optik, sifat magnet, sifat mekanik serta properti bahan lainnya secara simulasi). Perhitungan abinit ini membutuhkan informasi dasar mengenai jumlah atom, posisi atom, sebuah gelombang bidang yang dibatasi oleh energi *cut-off*, jumlah *k-point* dalam *brillioun zone* dalam menentukan energi total. Perhitungan dengan menggunakan abinit diperlukan 3 komponen utama diantaranya adalah *input file*, *pseudopotensial*, dan *files-files*.



Lampiran 2.

Input file *perhitungan sistem feromagnetik dan rapat keadaan (DOS)*

```
spinat
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
nsppol 2
#generate the total density of states in both cases
prtdos 1
#Rather standard input for a bcc metal
prtden 1
tolvrs 1.0d-10
acell 8.757 9.36 20 angstrom
ecut 28
natom 16
nband 25
ngkpt 20 20 1
nshiftk 1
nstep 10
ntypat 2
occopt 3
rprim 1.0 0.0 0.0
```

```

0.0  1.0  0.0
0.0  0.0  1.0
shiftk 0.0 0.0 0.0
tsmear 0.001
typat 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2 2 2 2 2 2
xred
-2.4443748200E-03 4.9867030236E-01 -5.8/100
3.2608340376E-01 4.9868669603E-01 5.8/100
4.9783060947E-01 2.5131342910E-01 -5.8/100
8.2644372054E-01 2.5132956100E-01 5.8/100
-2.4444556100E-03 9.9867038528E-01 -5.8/100
3.2608327060E-01 9.9868660766E-01 5.8/100
4.9783069678E-01 7.5131327419E-01 -5.8/100
8.2644380929E-01 7.5132974439E-01 5.8/100
-2.4443748200E-03 4.9867030236E-01 0
3.2608340376E-01 4.9868669603E-01 0
4.9783060947E-01 2.5131342910E-01 0
8.2644372054E-01 2.5132956100E-01 0
-2.4444556100E-03 9.9867038528E-01 0
3.2608327060E-01 9.9868660766E-01 0
4.9783069678E-01 7.5131327419E-01 0
8.2644380929E-01 7.5132974439E-01 0
znucl 1 50

```

Lampiran 3.

Input file *perhitungan sistem anti-feromagnetik dan rapat keadaan (DOS)*

#data for each data set: how to get densities of state

iscf 5

ngkpt 20 20 1

prtdos 1

#Common data

prtden 1

tolwfr 1.0d-7

acell 8.757 9.36 20 Angstrom

ecut 28

natom 16

nband 25

nshiftk 1

#Antiferromagnet order

spinat 0.0 0.0 1.7

0.0 0.0 -1.7

0.0 0.0 1.7

0.0 0.0 -1.7

0.0 0.0 1.7

0.0 0.0 -1.7

0.0 0.0 1.7

0.0 0.0 -1.7

0.0 0.0 1.7

0.0 0.0 -1.7

0.0 0.0 1.7

0.0 0.0 -1.7

0.0 0.0 1.7

0.0 0.0 -1.7

0.0 0.0 1.7

0.0 0.0 -1.7

0.0 0.0 1.7

0.0 0.0 -1.7

0.0 0.0 1.7

0.0 0.0 -1.7

0.0 0.0 1.7
 0.0 0.0 -1.7
 0.0 0.0 1.7
 0.0 0.0 -1.7
 0.0 0.0 1.7
 0.0 0.0 -1.7
 0.0 0.0 1.7
 0.0 0.0 -1.7
 0.0 0.0 1.7
 0.0 0.0 -1.7
 0.0 0.0 1.7
 0.0 0.0 -1.7

nsppol 2
 nspden 2
 #Antiferromagnet
 nstep 10
 ntypat 2
 occopt 3
 rprim 1.0 0.0 0.0
 0.0 1.0 0.0
 0.0 0.0 1.0

shiftk 0.0 0.0 0.0
 tsmear 0.001
 typat 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2 2 2 2 2 2
 xred
 -2.4443748200E-03 4.9867030236E-01 -5.8/100
 3.2608340376E-01 4.9868669603E-01 5.8/100
 4.9783060947E-01 2.5131342910E-01 -5.8/100
 8.2644372054E-01 2.5132956100E-01 5.8/100
 -2.4444556100E-03 9.9867038528E-01 -5.8/100
 3.2608327060E-01 9.9868660766E-01 5.8/100
 4.9783069678E-01 7.5131327419E-01 -5.8/100
 8.2644380929E-01 7.5132974439E-01 5.8/100
 -2.4443748200E-03 4.9867030236E-01 0
 3.2608340376E-01 4.9868669603E-01 0

4.9783060947E-01 2.5131342910E-01 0
 8.2644372054E-01 2.5132956100E-01 0
 -2.4444556100E-03 9.9867038528E-01 0
 3.2608327060E-01 9.9868660766E-01 0
 4.9783069678E-01 7.5131327419E-01 0
 8.2644380929E-01 7.5132974439E-01 0
 znucl 1 50



Lampiran 4.

kenaikan total magnetisasi

$$1. \quad \delta = \left(\frac{m_{\text{stanene terhidrogenasi}} - m_{\text{stanene murni}}}{m_{\text{stanene murni}}} \right) \\ = \left(\frac{1.85 - 0,0006}{0,0006} \right)$$

3341,8 kali

$$2. \quad \delta = \left(\frac{m_{\text{stanene terhidrogenasi didoping Aluminium}} - m_{\text{stanene murni}}}{m_{\text{stanene murni}}} \right) \\ = \left(\frac{3.02 - 0,0006}{0,0006} \right)$$

5544,9 kali

$$3. \quad \delta = \left(\frac{m_{\text{stanene terhidrogenasi didoping Phosphorus}} - m_{\text{stanene murni}}}{m_{\text{stanene murni}}} \right) \\ = \left(\frac{3.88 - 0,0006}{0,0006} \right)$$

7004.6 kali

$$4. \quad \delta = \left(\frac{m_{\text{stanene didoping Aluminium}} - m_{\text{stanene murni}}}{m_{\text{stanene murni}}} \right) \\ = \left(\frac{2,61 - 0,0006}{0,0006} \right)$$

4707,2 kali

$$5. \quad \delta = \left(\frac{m_{\text{stanene didoping Phosphorus}} - m_{\text{stanene murni}}}{m_{\text{stanene murni}}} \right) \\ = \left(\frac{2,63 - 0,0006}{0,0006} \right)$$

4755,3 kali

Lampiran 5.

Input file *perhitungan Pita Energi*

The first dataset is without magnetization for comparison

kptopt1 1

nshiftk1 1

shiftk1 0.0 0.0 0.0

ngkpt1 20 20 1

prtden1 1

toldfe1 1.0d-6

#Dataset 2 : the band structure

iscf2 -2

getden2 -1

kptopt2 -3

nband2 30

ndivk2 10 12 17 # 10, 12 and 17 divisions of the 3 segments,
delimited

kptbounds2 0.5 0.0 0.0 # L point

0.0 0.0 0.0 # Gamma point

0.0 0.5 0.5 # X point

1.0 1.0 1.0 # Gamma point in another cell.

tolwfr2 1.0d-12

enunit2 1 # Will output the eigenenergies in eV

Fe normal bcc structure for test of a ferromagnetic calculation

The first dataset is without magnetization for comparison

ndtset 2

#spin related quantities (only second dataset)

spinat2

0.0 0.0 1.7

0.0 0.0 1.7

0.0 0.0 1.7

0.0 0.0 1.7

68

```

0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
nsppol2 2
#generate the total density of states in both cases
prtdos 1
#Rather standard input for a bcc metal
prtden 1
tolvrs 1.0d-10
acell 8.757 9.36 20 angstrom
ecut 28
natom 16
nstep 10
ntypat 2
occopt 3
rprim 1.0 0.0 0.0
      0.0 1.0 0.0
      0.0 0.0 1.0
tsmear 0.001
typat 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2 2 2 2 2 2 2
xred
-2.4443748200E-03 4.9867030236E-01 -5.8/100
3.2608340376E-01 4.9868669603E-01 5.8/100
4.9783060947E-01 2.5131342910E-01 -5.8/100
8.2644372054E-01 2.5132956100E-01 5.8/100
-2.4444556100E-03 9.9867038528E-01 -5.8/100
3.2608327060E-01 9.9868660766E-01 5.8/100
4.9783069678E-01 7.5131327419E-01 -5.8/100
8.2644380929E-01 7.5132974439E-01 5.8/100

```

-2.4443748200E-03 4.9867030236E-01 0
 3.2608340376E-01 4.9868669603E-01 0
 4.9783060947E-01 2.5131342910E-01 0
 8.2644372054E-01 2.5132956100E-01 0
 -2.4444556100E-03 9.9867038528E-01 0
 3.2608327060E-01 9.9868660766E-01 0
 4.9783069678E-01 7.5131327419E-01 0
 8.2644380929E-01 7.5132974439E-01 0

znuc1 1 50

optforces 1

chkprim 0



Lampiran 6.

Input file perhitungan sistem feromagnetik dan rapat keadaan (DOS)

```

ndtset 2
#spin related quantities (only second dataset)
spinat2
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
0.0 0.0 1.7
nsppol2 2
#generate the total density of states in both cases
prtdos 1
#Rather standard input for a bcc metal
prtden 1
tolvrs 1.0d-10
acell 8.757 9.36 20 angstrom
ecut 28
natom 16
nband 25
ngkpt 20 20 1

```

```

nshiftk 1
nstep 10
ntypat 2
occopt 3
rprim 1.0 0.0 0.0
      0.0 1.0 0.0
      0.0 0.0 1.0
shiftk 0.0 0.0 0.0
tsmear 0.001
typat 1 1 1 1 1 1 1 1 2 2 2 2 2 2 2
xred
-2.4443748200E-03 4.9867030236E-01 -5.8/100
3.2608340376E-01 4.9868669603E-01 5.8/100
4.9783060947E-01 2.5131342910E-01 -5.8/100
8.2644372054E-01 2.5132956100E-01 5.8/100
-2.4444556100E-03 9.9867038528E-01 -5.8/100
3.2608327060E-01 9.9868660766E-01 5.8/100
4.9783069678E-01 7.5131327419E-01 -5.8/100
8.2644380929E-01 7.5132974439E-01 5.8/100
-2.4443748200E-03 4.9867030236E-01 0
3.2608340376E-01 4.9868669603E-01 0
4.9783060947E-01 2.5131342910E-01 0
8.2644372054E-01 2.5132956100E-01 0
-2.4444556100E-03 9.9867038528E-01 0
3.2608327060E-01 9.9868660766E-01 0
4.9783069678E-01 7.5131327419E-01 0
8.2644380929E-01 7.5132974439E-01 0
znucl 1 50
# add to conserve old < 6.7.2 behavior for calculating forces at each
SCF step
optforces 1
chkprim 0

```

Lampiran 7.

Input file plot struktur pita menggunakan gnuplot

```
unset clip points
set clip one
unset clip two
set bar 1.000000 front
set border 31 front linetype -1 linewidth 1.000
set timefmt z "%d/%m/%y,%H:%M"
set zdata
set timefmt y "%d/%m/%y,%H:%M"
set ydata
set timefmt x "%d/%m/%y,%H:%M"
set xdata
set timefmt cb "%d/%m/%y,%H:%M"
set timefmt y2 "%d/%m/%y,%H:%M"
set y2data
set timefmt x2 "%d/%m/%y,%H:%M"
set x2data
set boxwidth
set style fill empty border
set style rectangle back fc lt -3 fillstyle solid 1.00 border lt -1
set style circle radius graph 0.02, first 0, 0
set style ellipse size graph 0.05, 0.03, first 0 angle 0 units xy
set dummy x,y
set format x "% g"
set format y "% g"
set format x2 "% g"
set format y2 "% g"
set format z "% g"
set format cb "% g"
set format r "% g"
set angles radians
unset grid
set raxis
```

set key title ""
set key inside right top vertical Right noreverse enhanced autotitles
nobox
set key noinvert samplen 4 spacing 1 width 0 height 0
set key maxcolumns 0 maxrows 0
set key noopaque
unset key
unset label
unset arrow
set style increment default
unset style line
unset style arrow
set style histogram clustered gap 2 title offset character 0, 0, 0
unset logscale
set offsets 0, 0, 0, 0
set pointsize 1
set pointintervalbox 1
set encoding default
unset polar
unset parametric
unset decimalsign
set view 60, 30, 1, 1
set samples 100, 100
set isosamples 10, 10
set surface
unset contour
set clabel '%8.3g'
set mapping cartesian
set datafile separator whitespace
unset hidden3d
set cntrparam order 4
set cntrparam linear
set cntrparam levels auto 5
set cntrparam points 5
set size ratio 0 1,1
set origin 0,0
set style data points
set style function lines

```
set xzeroaxis linetype -1 linewidth 1.000
set yzeroaxis linetype -1 linewidth 1.000
set zzeroaxis linetype -1 linewidth 1.000
set x2zeroaxis linetype -1 linewidth 1.000
set y2zeroaxis linetype -1 linewidth 1.000
set ticslevel 0.5
set mxtics default
set mytics default
set mztics default
set mx2tics default
set my2tics default
set mcbtics default
set xtics border in scale 1,0.5 mirror norotate offset character 0, 0, 0
autojustify
set xtics norangelimit
set xtics ("K" 1.00000, "{/Symbol G}" 11.0000, "M" 23.0000, "K"
40.0000)
set ytics border in scale 1,0.5 mirror norotate offset character 0, 0, 0
autojustify
set ytics autofreq norangelimit
set ztics border in scale 1,0.5 nomirror norotate offset character 0, 0,
0 autojustify
set ztics autofreq norangelimit
set nox2tics
set y2tics border in scale 1,0.5 nomirror norotate offset character 0,
0, 0 autojustify
set y2tics norangelimit
set y2tics ("Ef" 0)
set cbtics border in scale 1,0.5 mirror norotate offset character 0, 0,
0 autojustify
set cbtics autofreq norangelimit
set rtics axis in scale 1,0.5 nomirror norotate offset character 0, 0, 0
autojustify
set rtics autofreq norangelimit
set title ""
set title offset character 0, 0, 0 font "" norotate
set timestamp bottom
set timestamp ""
```

```

set timestamp offset character 0, 0, 0 font "" norotate
set rrange [ * : * ] noreverse nowriteback
set trange [ * : * ] noreverse nowriteback
set urange [ * : * ] noreverse nowriteback
set vrange [ * : * ] noreverse nowriteback
set xlabel "K-Point"
set xlabel offset character 0, 0, 0 font "" textcolor lt -1 norotate
set x2label ""
set x2label offset character 0, 0, 0 font "" textcolor lt -1 norotate
set xrange [ * : * ] noreverse nowriteback
set x2range [ * : * ] noreverse nowriteback
set ylabel "E-Ef (eV)"
set ylabel offset character 0, 0, 0 font "" textcolor lt -1 rotate by -270
set y2label ""
set y2label offset character 0, 0, 0 font "" textcolor lt -1 rotate by -
270
set yrange [ -10 : 4 ] noreverse nowriteback
set y2range [ * : * ] noreverse nowriteback
set zlabel ""
set zlabel offset character 0, 0, 0 font "" textcolor lt -1 norotate
set zrange [ * : * ] noreverse nowriteback
set cblabel ""
set cblabel offset character 0, 0, 0 font "" textcolor lt -1 rotate by -
270
set cbrange [ * : * ] noreverse nowriteback
set zero 1e-08
set lmargin -1
set bmargin -1
set rmargin -1
set tmargin -1
set locale "id_ID.UTF-8"
set pm3d explicit at s
set pm3d scansautomatic
set pm3d interpolate 1,1 flush begin noftriangles nohidden3d
corners2color mean
set palette positive nops_allcF maxcolors 0 gamma 1.5 color model
RGB
set palette rgbformulae 7, 5, 15

```

```
set colorbox default
set colorbox vertical origin screen 0.9, 0.2, 0 size screen 0.05, 0.6, 0
front bdefault
set style boxplot candles range 1.50 outliers pt 7 separation 1 labels
auto unsorted
set loadpath
set fontpath
set psdir
set fit noerrorvariables
GNUTERM = "wxt"
plot "B" using 1:2 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:3 w l lw 3 lt -1, "B"
using 1:4 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:5 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:6 w l
lw 3 lt -1, "B" using 1:7 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:8 w l lw 3 lt -1
, "B" using 1:9 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:10 w l lw 3 lt -1, "B" using
1:11 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:12 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:13 w l
lw 3 lt -1, "B" using 1:14 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:15 w l lw 3 lt -1
, "B" using 1:16 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:17 w l lw 3 lt -1, "B" using
1:18 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:19 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:20 w l
lw 3 lt -1, "B" using 1:21 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:22 w l lw 3 lt -1
, "B" using 1:23 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:24 w l lw 3 lt -1, "B" using
1:25 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:26 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:27 w l
lw 3 lt -1, "B" using 1:28 w l lw 3 lt -1, "B" using 1:29 w l lw 3 lt -1
, "B" using 1:30 w l lw 3 lt -1
```

Lampiran 8

Input file *plot rapat keadaan (DOS) menggunakan gnuplot*

```
set xlabel "E-E_{F} (eV)" font "Times,15"  
set xtics font "Times, 12"  
set ylabel "DOS (electrons/eV/cell)" font "Times, 15"  
set ytics font "Times, 12"  
set grid  
set yrange [-15: 15]  
set xrange [-14:8]  
plot "dos" using 2:1 title "Spin-up" w l lw 2, "dos" using 3:1 title  
"Spin-down" w l lw 2
```

plot grafik DOS ini merupakan salah satu contoh dalam plot grafik DOS pada sistem stanene terhidrogenasi.

