

**PROPOSAL PENELITIAN TUGAS AKHIR**

**PENGARUH DOPING ATOM Na DAN Cl TERHADAP SIFAT  
OPTIK GERMANENE DENGAN PENDEKATAN TEORI  
FUNGSI KERAPATAN**

oleh  
**MUHAMMAD FIKRI SALIM**  
NIM. 135090301111024



**JURUSAN FISIKA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN  
ALAM  
UNIVERSITAS BRAWIJAYA  
MALANG  
2017**



**LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI**  
**PENGARUH DOPING ATOM Na DAN CI TERHADAP SIFAT**  
**OPTIK GERMANENE DENGAN PENDEKATAN TEORI**  
**FUNGSI KERAPATAN**

oleh:

**Muhammad Fikri Salim 135090301111024**

Setelah dipertahankan di depan Majelis Penguji pada tanggal

.....

dan dinyatakan memenuhi syarat untuk memperoleh gelar  
**Sarjana Sains dalam bidang fisika**

**Pembimbing I,**

**Pembimbing II,**

**Mauludi Ariesto Pamungkas, Ph.D.**  
**NIP. 19691020 199512 1 002**

**Dr. Istiroyah, S.Si., MT**  
**NIP. 19740815 1999930 2 001**

**Mengetahui,**

**Ketua Jurusan Fisika**

**Fakultas MIPA Universitas Brawijaya,**

**Prof.Dr.rer.nat Muhammad Nurhuda**  
**NIP. 19640910 199002 1 001**



## **LEMBAR PERNYATAAN**

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Muhammad Fikri Salim

Nim : 135090301111024

Jurusan : Fisika

Penulis Skripsi berjudul :

### **PENGARUH DOPING ATOM Na DAN CI TERHADAP SIFAT OPTIK GERMANENE DENGAN PENDEKATAN TEORI FUNGSI KERAPATAN**

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 di isi 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, Juli 2017**

**Yang menyatakan**

**(Muhammad Fikri Salim)**  
**(NIM. 135090301111024)**



# PENGARUH *DOPING* ATOM NATRIUM DAN KLORIN TERHADAP SIFAT OPTIK GERMANENE DENGAN PENDEKATAN TEORI FUNGSI KERAPATAN

## ABSTRAK

Germanene merupakan material dua dimensi yang berasal dari unsur germanium yang tersusun dalam kisi heksagonal seperti sarang lebah. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui sifat optik dari germanene murni serta pengaruh *doping* unsur Natrium (Na) dan Klorin (Cl) pada germanene. Atom ini dipilih sebagai pendoping karena dapat membuat ikatan yang kuat dengan germanene serta mudah didapatkan di alam. Penelitian ini menggunakan pendekatan Teori Fungsi Kerapatan untuk menghitung pengaruh sifat optik doping natrium dan klorin terhadap germanene. Hasil penelitian menunjukkan bahwa pada germanene murni memiliki nilai sifat optik dan energi yang lebih tinggi dibandingkan ketika di *doping* oleh natrium dan klorin ataupun dengan NaCl sekaligus. Germanene yang di doping oleh natrium menyebabkan energi foton mengalami fluktuasi atau cenderung tidak periodik yang menandakan terjadinya perluasan aktivitas absorpsi dan refleksi pada energi yang berbeda dari germanene murni. Germanene yang di *doping* oleh klorin memiliki bentuk grafik yang mirip dengan germanene murni yang berarti bahwa terdapat perubahan yang tidak signifikan jika dibandingkan dengan *doping* atom natrium. Sedangkan ketika di doping dengan NaCl menyebabkan nilai sifat optik lebih rendah dibandingkan dengan germanene murni ataupun ketika di *doping* oleh satu atom.

**Kata kunci** : *Doping*, Germanene, Sifat Optik, Teori Fungsi Kerapatan





# **SODIUM AND CHLORINE ATOM DOPING EFFECT ON GERMANENE OPTICAL PROPERTIES BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY APPROACH**

## **ABSTRACT**

Germanene is a two-dimensional material which is derived from germanium elements and arranged in a honeycomb-like hexagonal. This study aims to determine the optical properties of pristine germanene and effect of doping Sodium (Na) and Chlorine (Cl) atom on germanene. This atom is chosen because it can create strong bonds with germanene and easily available in nature. This research uses Density Functional Theory approach to measure the effect of sodium and chlorine doping on germanene's optical properties. The results showed that pristine germanene had higher optical and energy than the doped with sodium and chlorine, or even NaCl simultaneously. Sodium-doped germanene experienced photon energy fluctuation or tend not to be periodic, indicating the occurrence of expansion of absorption and revolution activities. Chlorine-doped germanene had similar graphical shape with pristine germanene, which indicated no significant change compared to the sodium atoms doping of. However, when germanene was doped by NaCl, it lowered the optical properties compared to pristine germanene or single atom-doped germanene

**Keywords:** Doping, Germanene, Optical Properties, Density Functional Theory



## KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan atas kehadiran Allah SWT atas Rahmat, Hidayah dan Inayah-Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan Penelitian skripsi yang dilaksanakan di Jurusan Fisika Fakultas MIPA Universitas Brawijaya dengan baik. Salawat serta salam penulis panjatkan kepada Nabi Muhammad SAW, beserta keluarga dan para sahabatnya. Pada skripsi ini disusun berdasarkan berbagai teori dari referensi yang menunjang penelitian dan data yang diambil dari bulan Mei hingga Juli 2017 dengan judul “Pengaruh doping atom Na dan Cl terhadap sifat optik Germanene dengan Pendekatan Teori Fungsi Kerapatan”. Penyelesaian Skripsi ini tidak lepas dari dukungan, bantuan dan nasihat yang berarti bagi penulis sehingga penulis dapat menyelesaikannya tepat waktu. Pada kesempatan ini penulis ingin mengucapkan terima kasih atas bimbingan dan bantuan yang telah diberikan oleh:

1. Kedua orang tua penulis yang tak pernah lelah dan tak pernah berhenti dengan tulus mencurahkan limpahan kasih sayang, doa, nasihat, semangat, dukungan moral serta materil kepada penulis sehingga penulis mampu menghadapi dan menyelesaikan segala proses dengan baik.
2. Bapak Mauludi Ariesto Pamungkas, Ph.D dan Ibu Istiroyah, S.Si., M.Si, yang telah bersedia meluangkan waktunya dan selalu memberikan perhatian besar dalam membimbing penulis.
3. Bapak Prof.Dr.rer.nat Muhammad Nurhuda selaku Ketua Jurusan Fisika Fakultas MIPA Universitas Brawijaya
4. Dosen-dosen dan staf Jurusan Fisika atas ilmu dan pelayanan akademik yang diberikan selama ini kepada penulis.
5. Teman-teman kelompok penelitian pemodelan dan komputasi dalam satu perjuangan (Tri Sugiono, Dessy Anggraeny, Almo Elghifahri).
6. Teman-teman Jurusan Fisika khususnya angkatan 2013 yang selalu dekat di hati yang selalu memberikan semangat dan hiburan ketika penulis merasa jenuh.
7. Semua pihak yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu, atas bantuannya dengan ikhlas dan tulus membantu dan memberikan bantuan baik secara fisik ataupun fikiran, moral

maupun materil kepada penulis dalam penyelesaian Skripsi ini.

Penulis sangat menyadari bahwa dalam makalah ini masih banyak kekurangan dan kesalahan dalam penjelasannya bahkan masih jauh dari kesempurnaan. Oleh karena itu, penulis mohon kepada bapak Dosen, sahabat-sahabat serta siapa saja yang dapat memberikan arahan, bimbingan serta kritikan selanjutnya yang bersifat membangun untuk menuju kearah yang lebih baik kedepannya dan di masa yang akan datang, semoga Skripsi ini dapat bermanfaat bagi kita semua, Aamiin.

Malang, Juli 2017

Penulis

## DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI .....	i
LEMBAR PERNYATAAN .....	iii
ABSTRAK .....	v
ABSTRACT .....	vii
KATA PENGANTAR.....	ix
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR GAMBAR .....	xiii
DAFTAR TABEL .....	xvii
BAB I    PENDAHULUAN .....	1
1.1   Latar Belakang .....	2
1.2   Rumusan Masalah .....	2
1.3   Batasan Masalah.....	2
1.4   Tujuan.....	3
1.5   Manfaat.....	3
BAB II   TINJAUAN PUSTAKA .....	5
2.1   Ikatan Kimia .....	5
2.2   Hibridisasi Orbital .....	6
2.3   Germanium.....	7
2.4   Natrium .....	8
2.5   Klorin .....	8
2.6   Kristal Dua Dimensi.....	9
2.7   Germanene .....	10
2.8   Kisi Balik .....	10
2.9   Fungsi Dielektrik.....	11
2.10  Sifat Optik.....	12
2.10.1 Indeks Bias .....	13
2.10.2 Revlektivitas.....	13
2.10.3 Koefisien Absropsi.....	14
2.11  Teori Fungsi Kerapatan.....	15
2.11.1 Persamaan Schodinger .....	15
2.11.2 Theorema Hohenberg – Kohn.....	16
2.11.3 Theorema Kohn-Sham .....	16
2.11.4 Theorema Bloch.....	18
BAB III    METODE PENELITIAN.....	21
3.1   Waktu dan Tempat Pelaksanaan.....	21
3.2   Metode Penelitian.....	21
3.3   Rancangan Penelitian .....	21

3.3.1	Persiapan Perhitungan .....	23
3.3.2	Doping Atom Tunggal.....	23
3.3.3	Doping Atom Ganda .....	23
3.4	Perhitungan.....	25
<b>BAB IV</b>	<b>HASIL DAN PEMBAHASAN .....</b>	<b>27</b>
4.1	Tes Konvergensi.....	28
4.2	Tes Validasi .....	28
4.2.1	Lattice Constant.....	28
4.2.2	Validasi Fungsi Dielektrik.....	29
4.3	Sifat Optik.....	31
4.4	Sifat Optik Germanene Doping Natrium.....	33
4.4.1	Pada Variasi Posisi Bridge .....	33
4.4.2	Pada Variasi Posisi Top.....	34
4.4.3	Pada Variasi Posisi Hollow .....	36
4.5	Sifat Optik Germanene Doping Klorin.....	36
4.5.1	Pada Variasi Posisi Bridge .....	37
4.5.2	Pada Variasi Posisi Top.....	37
4.5.3	Pada Variasi Posisi Hollow .....	38
4.6	Sifat Optik Germanene Doping Natrium dan Klorin	40
4.6.1	Pada Variasi Doping Natrium Posisi Bridge	40
4.6.1.1	Doping NaCl Variasi Posisi BB .....	40
4.6.1.2	Doping NaCl Variasi Posisi BT .....	41
4.6.1.3	Doping NaCl Variasi Posisi BH.....	42
4.6.2	Pada Variasi Doping Natrium Posisi Top ...	43
4.6.2.1	Doping NaCl Variasi Posisi TB .....	44
4.6.2.2	Doping NaCl Variasi Posisi TT .....	44
4.6.2.3	Doping NaCl Variasi Posisi TH.....	45
4.6.3	Pada Variasi Doping Natrium Posisi H.....	46
4.6.3.1	Doping NaCl Variasi Posisi HB.....	47
4.6.3.2	Doping NaCl Variasi Posisi HT .....	47
4.6.3.3	Doping NaCl Variasi Posisi HH ...	48
<b>BAB V PENUTUP .....</b>		<b>51</b>
5.1	Kesimpulan.....	51
5.2	Saran .....	51
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>		<b>53</b>
<b>LAMPIRAN .....</b>		<b>57</b>
Lampiran 1.....		57
Lampiran 2.....		58

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Ikatan Kovalen Atom Silikon.....	6
Gambar 2. 2 Hibridisasi Atom Karbon .....	7
Gambar 2. 3 Kristal dua dimensi.....	9
Gambar 2. 4 Bentuk Honeycomb.....	10
Gambar 2. 5 Polarisasi Dielektrik dengan mekanisme; .....	11
Gambar 2. 6 Efek Cahaya Pada Material .....	12
Gambar 2. 7 Penyerapan Optik pada semikonduktor.....	14
Gambar 3. 1 Unit Sel.....	21
Gambar 3. 2 Diagram Alir Penelitian.....	22
Gambar 3. 3 Penempatan Doping Atom dengan 3 posisi berbeda: B(Bridge), T (Top) dan H(Hollow).....	24
Gambar 4. 1 Tes Konvergensi Variabel Masukan Germanene Murni.....	27
Gambar 4. 2 Skala Vektor Kisi Germanene .....	28
Gambar 4. 3 .....	29
Gambar 4. 4 Fungsi Dielektrik Germanium.....	30
Gambar 4. 5 Fungsi Dielektrik Hasil Perhitungan .....	31
Gambar 4. 6 Indek Bias Germanene Murni .....	32
Gambar 4. 7 Sifat Optik Germanene Murni .....	32
Gambar 4. 8 Sifat Optik Germanene didoping Natrium Posisi B .....	34
Gambar 4. 9 Sifat Optik Germanene didoping Natrium Posisi-B .....	34

Gambar 4. 10 Sifat Optik Germanene didoping Natrium Posisi Hollow.....	35
Gambar 4. 11 Sifat Optik Germanene didoping Klorin Posisi Bridge.....	37
Gambar 4. 12 Sifat Optik Germanene didoping Klorin Posisi Top .....	38
Gambar 4. 13 Sifat Optik Germanene didoping Klorin Posisi Hollow.....	38
Gambar 4. 14 Sifat Optik Germanene didoping Na dan Cl Posisi BB .....	41
Gambar 4. 15 Sifat Optik Germanene didoping Na dan Cl Posisi BT.....	41
Gambar 4. 16 Sifat Optik Germanene didoping Na dan Cl Posisi BH .....	42
Gambar 4. 17 Sifat Optik Germanene didoping Na dan Cl Posisi TB.....	44
Gambar 4. 18 Sifat Optik Germanene didoping Na dan Cl Posisi TT.....	45
Gambar 4. 19 Sifat Optik Germanene didoping Na dan Cl Posisi TH .....	45
Gambar 4. 20 Sifat Optik Germanene didoping Na dan Cl Posisi HB .....	47
Gambar 4. 21 Sifat Optik Germanene didoping Na dan Cl Posisi HT .....	48



Gambar 4. 22 Sifat Optik Germanene didoping Na dan Cl Posisi  
HH .....48



## DAFTAR TABEL

Tabel 2. 1 Hubungan Geometri Elektron dan Hibridisasi .....	7
Tabel 2. 2 Sifat Unsur Natrium .....	8
Tabel 2. 3 Sifat Unsur Klorin .....	9
Tabel 4. 1 Validasi Lattice Constant .....	29
Tabel 4. 2 Sifat Optik Germanene didoping Natrium .....	35
Tabel 4. 3 Sifat Optik Germanene didoping Klorin .....	39
Tabel 4. 4 Sifat Optik doping Na dan Cl saat Na-Bridge.....	42
Tabel 4. 5 Sifat Optik Doping Na dan Cl saat Na-Top .....	46
Tabel 4. 6 Sifat Optik Doping Na dan Cl saat Na-Hollow.....	49

