

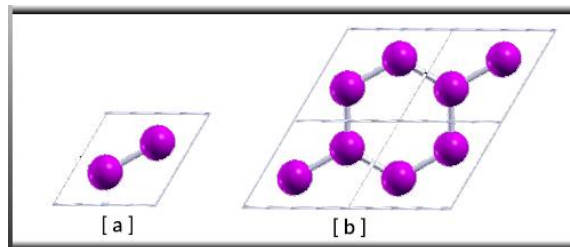
## BAB III METODE PENELITIAN

### 3.1 Waktu dan Tempat Pelaksanaan

Penelitian ini dilaksanakan pada 24 November 2016 – 28 Juni 2017 bertempat di laboratorium komputasi dan pemodelan Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Brawijaya.

### 3.2 Metode Penelitian

Metode yang dipakai dalam penelitian ini adalah *density functional theory* (DFT) yang diimplementasikan dalam *software* ABINIT ([www.abinit.org](http://www.abinit.org)) dengan Pseudopotensial yang digunakan adalah *Generalized Gradient Approximation* (GGA). Pada penelitian ini struktur yang dihitung adalah sel  $2 \times 2$  (Gambar 3.1), sel  $2 \times 2$  digunakan karena dalam perhitungannya sederhana dan efisien.



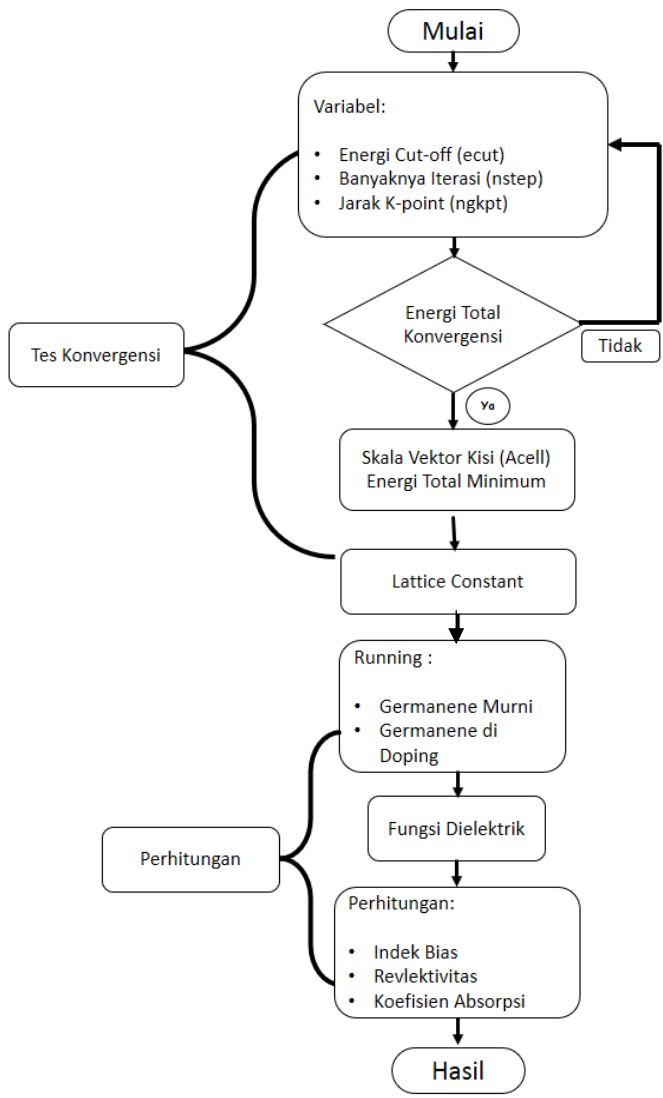
Gambar 3. 1 Unit Sel  
(a) Sel  $1 \times 1$  (b) sel  $2 \times 2$

Pada parameter masukan seperti acell, energi cut-off, kpoint dan nstep terlebih dahulu dilakukan tes konvergensi untuk keakuratan perhitungan dan untuk mengetahui energi minimum dari struktur.

### 3.3 Rancangan Penelitian

Penelitian dibagi menjadi empat tahap. Tahapan pertama adalah persiapan perhitungan yaitu menggunakan uji konvergensi. Tahap kedua adalah doping atom tunggal, tahap ketiga doping atom ganda. tahap keempat adalah dihasilkan nilai fungsi dielektrik melalui perhitungan *Density Functional Theory* (DFT) melalui fungsi dielektrik selanjutnya tahap keempat dari data struktur yang dihasilkan kemudian dihitung sifat optik berupa indeks bias, reflektivitas dan

koefisien absorpsi. Diagram alir penelitian ditunjukkan pada gambar 3.2



Gambar 3. 2 Diagram Alir Penelitian

### 3.3.1 Persiapan Perhitungan

Perhitungan untuk menghasilkan struktur serta hasil yang maksimal dilakukan dengan melakukan tes konvergensi. Pertama ditentukan nilai energi *cut-off* atau *ecut* (dalam software Abinit) untuk menentukan lama proses perhitungan program dan kemudian ditentukan jumlah *kpoint grid* untuk menentukan posisi *kpoint* dalam kristal. Kemudian ditentukan banyaknya iterasi maksimal yang diperlukan dalam melihat *output* yang dihasilkan. Semakin banyak iterasi yang dilakukan maka data *output* akan semakin baik.

### 3.3.2 Doping Atom Tunggal

Setelah didapatkan struktur yang stabil, Germanene didoping dengan atom Natrium (Na) dan Klorin (Cl) dengan posisi doping atom yang berbeda-beda. Posisi doping atom dilakukan pada keadaan berikut:

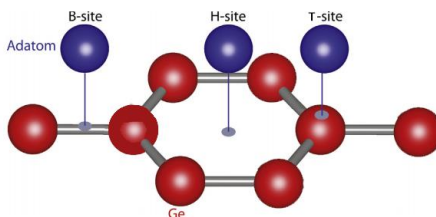
1. Pertama atom doping diletakkan di antara kedua atom germanene. Posisi ini sering disebut *Bridge-posisi* (*B-posisi*),
2. Kemudian doping yang kedua, atom diletakkan di tengah-tengah struktur heksagonal germanene. Posisi ini sering disebut *Hollow-posisi* (*H-posisi*),
3. Kemudian doping yang ketiga, atom diletakkan di atas salah satu atom germanene. Posisi ini sering disebut *Top-posisi* (*T-posisi*), lihat Gambar 3.3.

### 3.3.3 Doping Atom Ganda

Struktur germanene yang stabil, germanene didop dengan atom Natrium (Na) dan Klorin (Cl) dengan posisi doping atom yang berbeda-beda. Posisi doping atom dilakukan pada keadaan berikut:

1. Pertama atom doping Na diletakkan di antara kedua atom germanene dan atom doping Cl juga diletakkan diantara kedua atom germanene. Posisi ini disebut *Bridge Bridge-posisi* (*BB-posisi*),
2. Kemudian doping yang kedua, atom doping Na diletakkan di antara kedua atom germanene dan atom doping Cl diletakkan di tengah-tengah struktur heksagonal germanene. Posisi ini disebut *Bridge Hollow-posisi* (*BH-posisi*),
3. Kemudian doping yang ketiga, atom doping Na diletakkan di antara kedua atom germanene dan atom doping Cl

- diletakkan di atas salah satu atom germanene. Posisi ini sering disebut *Bridge Top-posisi (BT-posisi)*,
4. Kemudian doping yang keempat, atom doping Na diletakkan di tengah-tengah struktur heksagonal germanene dan atom doping Cl juga diletakkan diantara kedua atom germanene. Posisi ini disebut *Hollow Bridge-posisi (HB-posisi)*,
  5. Kemudian doping yang kelima, atom doping Na diletakkan di tengah-tengah struktur heksagonal germanene dan atom doping Cl diletakkan di tengah-tengah struktur heksagonal germanene. Posisi ini disebut *Hollow Hollow-posisi (HH-posisi)*,
  6. Kemudian doping yang keenam, atom doping Na diletakkan di tengah-tengah struktur heksagonal germanene dan atom doping Cl diletakkan di atas salah satu atom germanene. Posisi ini sering disebut *Hollow Top-posisi (HT-posisi)*,
  7. Kemudian doping yang ketujuh, atom doping Na diletakkan di atas salah satu atom germanene dan atom doping Cl juga diletakkan diantara kedua atom germanene. Posisi ini disebut *Top Bridge-posisi (TB-posisi)*,
  8. Kemudian doping yang kedelapan, atom doping Na diletakkan di atas salah satu atom germanene dan atom doping Cl diletakkan di tengah-tengah struktur heksagonal germanene. Posisi ini disebut *Top Hollow-posisi (TH-posisi)*,
  9. Kemudian doping yang keenam, atom doping Na diletakkan di atas salah satu atom germanene dan atom doping Cl diletakkan di atas salah satu atom germanene. Posisi ini sering disebut *Top Top-posisi (TT-posisi)*



**Gambar 3. 3 Penempatan Doping Atom dengan 3 posisi berbeda: B(Bridge), T (Top) dan H(Hollow)**

### **3.3.4 Perhitungan**

Pada penelitian ini digunakan metode DFT (*Density Functional Theory*) dari ab initio untuk menghitung sifat optik dari unsur yang digunakan. Dari metode DFT tersebut didapatkan komponen output yaitu fungsi dielektrik yang nantinya akan digunakan sebagai dasar perhitungan untuk mencari sifat optik material yaitu Indeks Bias, Koefisien Absorpsi dan Reflektivitas. Setelah didapatkan Hasil perhitungan optik selanjutnya akan ditampilkan melalui plotting *xmgrace* dan untuk struktur kristalnya ditampilkan melalui *xcrysden*.

