

## **BAB III**

### **METODE PENELITIAN**

#### **3.1 Waktu dan Tempat Pelaksanaan**

Penelitian ini dilaksanakan mulai bulan Januari hingga Juli 2017, bertempat di Laboratorium Komputasi dan Pemodelan Gedung Biomol Jurusan Fisika Fakultas MIPA Universitas Brawijaya.

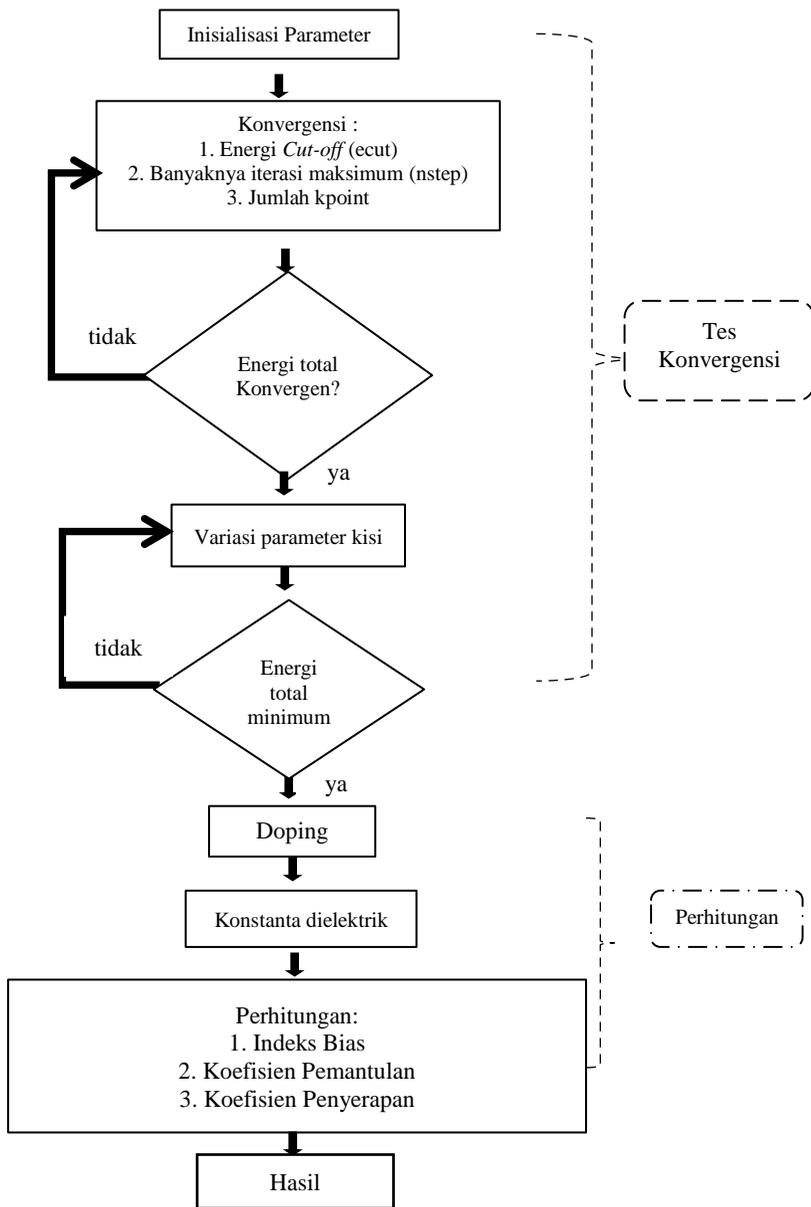
#### **3.2 Alat Penelitian**

Alat yang digunakan dalam penelitian ini adalah seperangkat komputer, *software* abinit, dan *xcrysden*.

#### **3.3 Skema penelitian**

##### **3.3.1 Diagram Alir Penelitian**

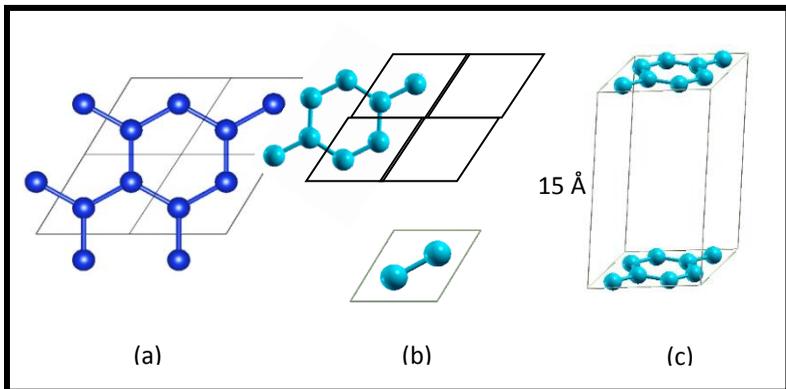
Tahapan dalam penelitian ini dapat dilihat pada diagram alir yang dapat dilihat pada Gambar 3.1



Gambar 3.1 Diagram Alir Penelitian

### 3.3.2 Metode Perhitungan

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah Teori fungsi kerapatan yang diimplementasikan dalam *software* ABINIT. Teori fungsi kerapatan adalah satu metode yang dapat digunakan dalam pemodelan berbasis kuantum secara komputasi yang digunakan dalam fisika, kimia, dan ilmu material untuk menyelidiki struktur elektronik maupun struktur optik suatu bahan pada keadaan *groundstate*. Konvergensi dari parameter-parameter *lattice constant*, energi *cut-off*, jumlah k-point dan banyaknya iterasi (*nstep*) sangat penting dilakukan untuk mendapatkan hasil yang pasti secara ilmiah dan efisiensi waktu.



Gambar 3.2 (a) Teknik pemilihan supersel (b) supersel 2x2 dan unit sel (c) sumbu z sel 15 angstrom.

Energi total kristal dihitung secara *self consistent* dengan bagian energi *exchange-correlation* didapat melalui pendekatan *Generalized Gradient Approximation Perdew Bucke Erzhnhof (GGA-PBE)*. Untuk mengatasi sistem yang periodik digunakan prinsip supersel. Pada penelitian ini struktur yang dihitung adalah supersel 2x2 (Gambar 3.2 a), hal ini dikarenakan perhitungan menggunakan supersel 2x2 Kemudian pada sumbu z dibuat vakum pada besaran 15 Angstrom (lihat Gambar 3.2c)

di mana pada jarak 15 Angstrom tidak ada interaksi antar elektron pada sumbu z.

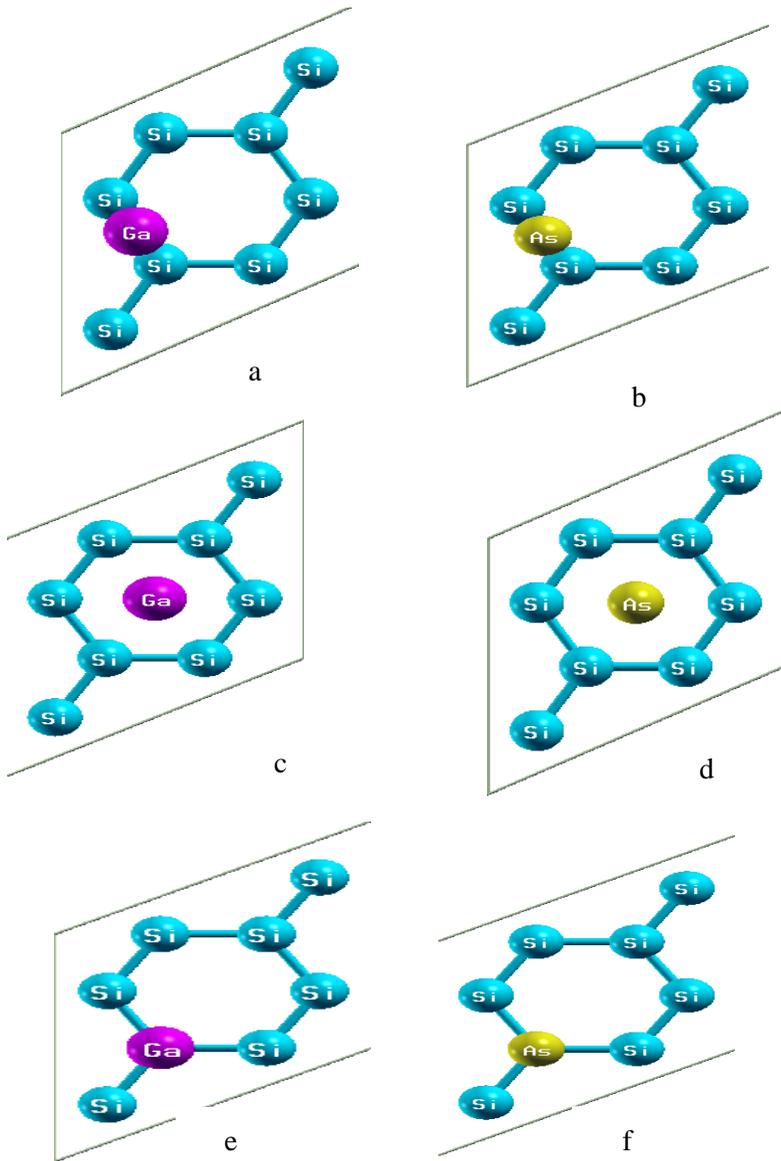
Penelitian ini dibagi dalam tiga tahap. Tahap pertama adalah persiapan perhitungan yaitu dengan melakukan uji konvergensi, kemudian tahap kedua adalah posisi adatom, selanjutnya untuk tahap ketiga, perhitungan berupa sifat optik yaitu indeks bias, Koefisien pemantulan, dan koefisien penyerapan.

### 3.3.3 Posisi adatom

Setelah didapatkan struktur silicene yang stabil, Silicene didop dengan atom galium (Ga) dan atom arsenik (As) dengan posisi doping atom yang berbeda-beda. Posisi doping atom dilakukan pada keadaan berikut :

1. Pertama atom doping diletakkan di antara kedua atom silikon. Posisi ini sering disebut *Bridge-site* (B-site), lihat pada Gambar 3.3 (a) dan Gambar 3.3 (b).
2. Kemudian doping yang kedua, atom diletakkan di tengah-tengah struktur heksagonal silicene. Posisi ini sering disebut *Hollow-site* (H-site), lihat Gambar 3.3 (c) dan Gambar 3.3 (d).
3. Kemudian doping yang ketiga, atom diletakkan di atas salah satu atom silicene. Posisi ini sering disebut *Top-site* (T-site), lihat Gambar 3.3 (e) dan Gambar 3.3 (f).

Masing-masing perlakuan doping ini dilakukan untuk doping atom yang berbeda yaitu untuk atom Ga dan As



Gambar 3.3 Posisi adatom galium dan arsenik pada posisi (a) dan (b) *Bridge*, (c) dan (d) *Hollow*, (e) dan (f) *Top*

## **3.4 Perhitungan**

### **3.4.1 Sifat Optik**

Setelah mengetahui fungsi dielektrik, kemudian menghitung parameter yang lain yaitu indeks bias, Koefisien pemantulan, koefisien penyerapan. File rapat elektron valensi diolah menggunakan program CUT3D dan ditampilkan melalui *xcrysdn* dalam bentuk distribusi kerapatan elektron valensi.