

**PENGARUH DOPING ATOM B DAN N TERHADAP SIFAT
OPTIK GERMANENE DARI HASIL PERHITUNGAN TEORI
FUNGSI KERAPATAN**

SKRIPSI

**Oleh:
TRI SUGIONO
135090307111003**



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

**PENGARUH DOPING ATOM B DAN N TERHADAP SIFAT
OPTIK GERMANENE DARI HASIL PERHITUNGAN TEORI
FUNGSI KERAPATAN**

SKRIPSI

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana Sains dalam bidang Fisika

**Oleh:
TRI SUGIONO
135090307111003**



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

LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

**PENGARUH DOPING ATOM B DAN N TERHADAP SIFAT
OPTIK GERMANENE DARI HASIL PERHITUNGAN TEORI
FUNGSI KERAPATAN**

Oleh:

TRI SUGIONO
135090307111003

Setelah dipertahankan di depan Majelis Penguji
pada tanggal
dan dinyatakan memenuhi syarat memperoleh gelar
Sarjana Sains dalam bidang Fisika

Pembimbing I

Pembimbing II

Mauludi Ariesto Pamungkas, Ph.D.
NIP. 197303122000031013

Dr. Istiroyah, S.Si., M.T
NIP. 197408151999032002

Mengetahui,
Ketua Jurusan Fisika
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Brawijaya

Prof.Dr.rer.nat Muhammad Nurhuda
NIP. 196409101990021001

LEMBAR PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : TRI SUGIONO
NIM : 135090307111003
Jurusan : Fisika
Penulis Skripsi Berjudul:

PENGARUH DOPING ATOM B DAN N TERHADAP SIFAT OPTIK GERMANENE DARI HASIL PERHITUNGAN 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 termasuk 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,

Yang menyatakan,

Tri Sugiono
NIM. 135090307111003

Pengaruh Doping Atom B dan N Terhadap Sifat Optik Germanene Dari Hasil Perhitungan Perhitungan Teori Fungsi Kerapatan

ABSTRAK

Germanene merupakan material dua dimensi yang berasal dari unsur germanium yang tersusun dalam kisi heksagonal yang berbentuk seperti sarang lebah. Germanene memiliki karakteristik *gapless* yang menyebabkan pemanfaatannya terbatas, sehingga diperlukan *doping* yang cocok dan efektif untuk menyempurnakan karakteristiknya yaitu Boron dan Nitrogen. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui sifat optik dari germanene murni dan pengaruh *doping* dari unsur Boron (B) dan Nitrogen (N) terhadap germanene murni. Atom-atom ini dipilih sebagai pendoping karena dapat membuat ikatan yang kuat dengan germanene serta mudah didapatkan di alam. Penelitian ini menggunakan pendekatan dengan metode Teori Fungsi Kerapatan untuk menghitung pengaruh sifat optik dari doping atom Boron dan Nitrogen terhadap germanene murni. Hasil penelitian menunjukkan bahwa pada germanene murni memiliki nilai sifat optik dan energi yang cenderung lebih tinggi dibandingkan ketika di *doping* oleh Boron dan Nitrogen ataupun dengan Boron-Nitrogen sekaligus. Germanene yang didoping memiliki grafik yang cenderung lebih fluktuatif dibandingkan dengan germanene murni. Pada doping menggunakan satu atom Boron nilai dari sifat optik tertinggi berada pada posisi Hollow dan terendah pada posisi Bridge. Pada doping satu atom Nitrogen nilai dari sifat optik tertinggi berada pada posisi Top dan terendah berada pada posisi Bridge. Pada doping menggunakan dua atom menyebabkan nilai optik lebih rendah dibandingkan dengan germanene pada keadaan murni.

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

Boron and Nitrogen Doping Effect On the Optical Properties of Germanene from The Calculation of Density Function Theory

ABSTRACT

Germanene is a two-dimensional material composed of germanium elements arranged in a hexagonal lattice which shaped like a honeycomb. Germanene has a gapless characteristic which causes its limited usage, so that the suitable and effective dopants such as Boron and Nitrogen are used to modify its optical band structure and enhance its electrical properties. This study aims to determine the optical properties of pristine germanene and the doping effect of Boron (B) and Nitrogen (N) elements on pristine germanene. These elements are chosen as dopants because they can make strong bonds with germanene and are abundant in nature. This study uses the Density Function Theory method to calculate the influence of doping of Boron and Nitrogen atoms on optical properties pristine germanene. The results showed that pristine germanene had higher optical and energy properties than it doped by Boron, Nitrogen or Boron-Nitrogen at the same time. Doped Germanene has a graph of optical properties that tends to be more fluctuating graph compared to pristine germanene. Boron adatom changes optical properties of germanene. Optical properties of Boron adatom at Hollow site, compared to other possible sites, resulting the highest optical properties of germanene. While it placed at Bridge site resulting the lowest optical properties of germanene. Nitrogen adatom changes optical properties of germanene. Optical properties of Nitrogen adatom at Top site, compared to other possible sites, resulting the highest optical properties of germanene. While it placed at Bridge site resulting the lowest optical properties of germanene. Boron-Nitrogen adatom causes the optical properties to be lower than pristine germanene.

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

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis ucapkan kepada Allah SWT, atas segala limpahan rahmat, inayah dan hidayah-Nya lah sehingga penulis dapat menyelesaikan Proposal Penelitian Tugas Akhir di Jurusan Fisika Fakultas MIPA Universitas Brawijaya dengan lancar. Proposal ini disusun untuk melaksanakan Penelitian Tugas Akhir (skripsi) sebagai salah satu syarat menempuh jenjang kuliah S-1 untuk mendapatkan gelar S.Si di Jurusan Fisika FMIPA Universitas Brawijaya. Pada penelitian ini penulis mengambil judul “**Pengaruh doping atom B dan N terhadap sifat optik Germanene dari hasil perhitungan Density Functional Theory**”

Pembuatan Proposal ini tidak lepas dari bantuan dan bimbingan dari semua pihak yang telah mendukung pelaksanaan penelitian ini. Oleh karena itu penulis mengucapkan terima kasih atas bimbingan dan bantuan yang telah diberikan oleh:

1. Kedua orang tua penulis yang tak pernah lelah mencurahkan kasih sayang, doa, nasihat, semangat, serta materil kepada penulis sehingga penulis mampu menyelesaikan segala proses dengan baik.
2. Bapak Prof.Dr.rer.nat Muhammad Nurhuda selaku Ketua Jurusan Fisika FMIPA Universitas Brawijaya.
3. Bapak Mauludi Ariesto Pamungkas, S.Si., M.Si. selaku Dosen Pembimbing I Tugas Akhir yang telah bersedia meluangkan waktunya dan selalu memberikan perhatian besar dalam membimbing penulis.
4. Bu Dr. Istiroyah, S.Si., M.T. selaku Dosen Pembimbing II Tugas Akhir yang telah bersedia meluangkan waktunya dan selalu memberikan perhatian besar dalam membimbing penulis.
5. Dosen-dosen dan staf-staf di Jurusan Fisika atas ilmu dan pelayanan akademik yang diberikan selama ini kepada penulis.
6. Teman-teman Jurusan Fisika khususnya angkatan 2013 yang selalu memberikan semangat dan hiburan ketika penulis merasa jenuh.

7. Rekan seperjuangan satu tim penelitian (M. fikri Salim, Dessy Anggraeny, Almo Elghifahri).
8. Semua pihak yang tidak disebutkan disini serta telah ikut membantu pelaksanaan Tugas Akhir ini.

Adapun saran dan kritik yang bersifat membangun sangat penulis harapkan demi perbaikan proposal penelitian ini dan semoga proposal ini dapat bermanfaat khususnya bagi penulis dan pembaca pada umumnya.

Malang, September 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	xv
DAFTAR LAMPIRAN	xvii
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1. Latar Belakang.....	1
1.2. Rumusan Masalah.....	2
1.3. Batasan Masalah.....	3
1.4. Tujuan.....	3
1.5. Manfaat.....	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1. Kristal	5
2.1.1. Germanene	5
2.2. Kisi Resiprok (kisi balik).....	6
2.3. Ikatan Kimia	7
2.4. Hibridisasi Orbital	8
2.5. Semikonduktor.....	8
2.6. Unsur	8
2.6.1. Germanium	8
2.6.2. Boron	10
2.6.3. Nitrogen	10
2.7. Density Functional Theory	11
2.7.1. Persamaan Schrodinger.....	12
2.7.2. Teorema Hohenberg - Kohn	12
2.7.3. Teorema Kohn – Sham	12
2.7.4. Teorema Bloch.....	13
2.8. Sifat Optik	14
2.8.1. Fungsi Dielektrik	14
2.8.2. Indek Bias	15
2.8.3. Reflektivitas	16
2.8.4. Absorpsi.....	16
BAB III METODE PENELITIAN	19

3.1. Waktu dan Tempat Pelaksanaan	19
3.2. Metode Penelitian	19
3.3. Rancangan Penelitian.....	20
3.3.1. Persiapan Perhitungan.....	22
3.3.2. Doping Atom.....	22
3.3.3. Doping atom BN	22
3.3.4. Perhitungan	24
BAB IV ANALISA DAN PEMBAHASAN	25
4.1. Tes Konvergensi	25
4.2. Tes Validasi	27
4.2.1. Lattice Constant (konstata kisi).....	27
4.2.2. Fungsi Dielektrik.....	29
4.3. Sifat Optik.....	30
4.3.1. Sifat optik germanene didoping Boron	32
4.3.2. Sifat optik germanene didoping Nitrogen	37
4.3.3. Sifat optik germanene didoping Boron-Nitrogen.....	42
BAB V PENUTUP	55
5.1. Kesimpulan.....	55
5.2. Saran.....	55
DAFTAR PUSTAKA.....	57
LAMPIRAN	61

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 (a) Kisi graphene pada ruang riil dengan basis vektor $\mathbf{a1}$ dan $\mathbf{a2}$.(b) zona Brillouin dari kisi resiprok dengan basis vektor $\mathbf{b1}$ dan $\mathbf{b2}$	7
Gambar 2. 2 Struktur Atom (a) silikon ; (b) germanium.....	7
Gambar 2. 3 Ilustrasi cahaya merambat dalam suatu bahan.....	14
Gambar 2. 4 Pembiasan cahaya dalam 2 medium berbeda.	15
Gambar 2. 5 Refleksi cahaya pada bahan.....	16
Gambar 3. 1 (a) Teknik pemilihan supersel (b) supFigure 1ersel 2x2 dan unit sel (c) sumbu z dengan jarak 29.5 Angstrom 20	
Gambar 3. 2 Diagram alir penelitian	21
Gambar 3. 3 Bentuk struktur adsorpsi atom dengan 3 posisi berbeda : T (Top), H (Hollow), dan B (Bridge).....	24
Gambar 4. 1 Hasil Tes konvergensi a). Ngkpt, b). Energi cut-off, dan c). Nstep.	26
Gambar 4. 2 Hasil Validasi nilai acell, a) Sumbu Z, b) Sumbu X ; Y	28
Gambar 4. 3 Struktur kisi dari germanene dengan menggunakan xcrysdn , a) kisi germanene murni b) Skema konstanta kisi germanene	28
Gambar 4. 4 Validasi fungsi dielektri germanium	29
Gambar 4. 5 Fungsi dielektrik germanene	30
Gambar 4. 6 Sifat optik germanene murni, a) indek bias real, b) indek bias imaginer	31
Gambar 4. 7 Sifat optik germanene murni, a) reflektivitas , b) koefisien absorps	32
Gambar 4. 8 Sifat optik germanene didoping Boron posisi Brige, a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi	33
Gambar 4. 9 Sifat optik germanene didoping Boron posisi Hollow, a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi	34
Gambar 4. 10 Sifat optik germanene didoping Boron posisi Top, a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi	35
Gambar 4. 11 Sifat optik germanene didoping Nitrogen posisi Bridge , a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi	38

Gambar 4. 12 Sifat optik germanene didoping Nitrogen posisi Hollow, a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi.....	39
Gambar 4. 13 Sifat optik germanene didoping Nitrogen posisi Top, a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi.....	40
Gambar 4. 14 Sifat optik germanene didoping Boron-Nitrogen posisi Bridge-Bridge, a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi.....	43
Gambar 4. 15 Sifat optik germanene didoping Boron-Nitrogen posisi Bridge-Hollow, a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi	44
Gambar 4. 16 Sifat optik germanene didoping Boron-Nitrogen posisi Bridge-Top, a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi.....	45
Gambar 4. 17 Sifat optik germanene didoping Boron-Nitrogen posisi Hollow-Bridge, a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi	47
Gambar 4. 18 Sifat optik germanene didoping Boron-Nitrogen posisi Hollow-Hollow, a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi	48
Gambar 4. 19 Sifat optik germanene didoping Boron-Nitrogen posisi Hollow-Top, a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi.....	49
Gambar 4. 20 Sifat optik germanene didoping Boron-Nitrogen posisi Top-Bridge, a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi.....	51
Gambar 4. 21 Sifat optik germanene didoping Boron-Nitrogen posisi Top-Hollow, a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi.....	52
Gambar 4. 22 Sifat optik germanene didoping Boron-Nitrogen posisi Top-Top, a) indek bias real, b) indek bias imaginer, c) reflektivitas, d) koefisien absorpsi.....	53

DAFTAR TABEL

Tabel 1. 1 Karakteristik Atom Germanium	9
Tabel 1. 2 Karakteristik Atom Boron	10
Tabel 1. 3 Karakteristik Atom Nitrogen	11
Tabel 4. 1 Konstanta kisi	29
Tabel 4. 2 Sifat optik germanene didoping Boron	36
Tabel 4. 3 Sifat optik germanene didoping Nitrogen	40
Tabel 4. 4 Sifat optik Germanene didoping Boron-Nitrogen	45
Tabel 4. 5 Sifat optik Germanene didoping Boron-Nitrogen	49
Tabel 4. 6 Sifat optik Germanene didoping Boron-Nitrogen	53

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. 1 Software	61
Lampiran 1. 2 Input file dari germanene didoping atom boron poisis Bridge.....	61
Lampiran 1. 3 Input file dari germanene didoping atom boron posisi Hollow.....	63
Lampiran 1. 4 Input file dari germanene didoping atom boron posisi Hollow.....	64
Lampiran 1. 5 Input file dari germanene didoping atom Nitrogen...	66
Lampiran 1. 6 Input file dari germanene didoping atom Boron dan Nitrogen.....	67
Lampiran 1. 7 Konstanta Kisi (Lattice Constant).....	69
Lampiran 1. 8 Peralatan untuk penelitian.....	70

