

BAB I PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Kemajuan pengetahuan dan teknologi telah mendorong peningkatan di berbagai bidang akademik. Dalam konteks ini, kemajuan teknologi yang pesat mendorong para akademisi untuk terus berinovasi, menciptakan ide-ide baru yang mendukung perkembangan teknologi. Salah satu faktor terpenting dalam pengembangan teknologi adalah ketersediaan material berkualitas, misalnya *graphene* merupakan material yang merepresentasikan kemajuan teknologi baru (Apriansyah. et al., 2024). *Graphene* pertama kali diteliti oleh Andre K. Geim dan Konstantin Novoselov pada tahun 2004 melalui eksperimen dengan metode *peeling* menggunakan selotip dan grafit, yang menghasilkan lapisan karbon atom tunggal yang stabil dan berkualitas tinggi serta mempelajari sifat elektroniknya secara mendalam (Novoselov. et al., 2004).

Sejak ditemukannya *graphene*, material dua dimensi (2D) telah menarik banyak perhatian karena sifat elektronik, optik, dan mekanisnya yang unik, menandai era baru dalam ilmu material dan memperluas pemahaman kita tentang *condensed matter physics* (Yun Junho. et al., 2025). *Graphene* merupakan material karbon dua dimensi (2D) dengan kualitas luar biasa dan potensi besar untuk berbagai aplikasi, seperti konversi energi, sensor, baterai, pengisi polimer, dan perangkat penyimpanan energi (Muh Apriansyah. et al., 2024). Selama dua dekade terakhir, *graphene* telah menarik perhatian luas dan diakui sebagai bahan khas dua dimensi yang dapat digunakan sebagai *template* fabrikasi dalam heterostruktur Van der Waals (Lars Bub. et al., 2024).

Heterostruktur yang terdiri dari berbagai layer material, menjadi penting dalam pembuatan perangkat seperti transistor, diode pemancar cahaya (LED), sensor, dan sel surya. Metode pembuatan heterostruktur adalah cara yang efektif untuk meningkatkan kualitas material (Kanwal. et al., 2024). *Graphene*, sebagai salah satu alotrop karbon, terdiri dari atom karbon yang terikat satu sama lain melalui awan elektron, sehingga menyajikan tantangan fisika kuantum yang menarik (Tiwari. et al., 2020).

Salah satu kekhasan *graphene* adalah struktur elektroniknya, yang memberikan dorongan bagi penelitian di bidang fisika (Syariati. et al., 2012). Struktur dua dimensi atom karbon dalam *graphene* membentuk kisi berbentuk sarang lebah, yang menawarkan kapasitas luar biasa untuk adsorpsi ion (Chamberland. et al., 2024). Karakteristik elektronik, optik, dan mekanis yang unik menjadikan *graphene*



nan yang layak untuk sistem elektronik dan optoelektronik (Yu Shu. et al., 2022).

uk dari lapisan-lapisan *graphene* yang terikat oleh gaya Van der Waals. Struktur fundamental penyusun allotropes karbon, seperti *graphite*, *nanotubes*, dan *fullerenes*, *graphene* menunjukkan sifat fisika yang menarik, seperti elektronik, optik, dan mekanik. Namun, *graphene* tidak memiliki celah pita energi yang menghalangi penggunaannya dalam aplikasi teknologi modern.

(Rafitasari. et al., 2016). Oleh karena itu, penerapan *strain engineering* pada *graphene* dapat menjadi solusi untuk mengubah sifat elektroniknya. *Strain* mampu menginduksi medan magnet semu dan merusak simetri kisi, yang dapat mengubah struktur celah pita elektronik (Dawood. et al., 2023).

Dengan merekayasa struktur planar *graphene* menjadi ukuran terbatas, berbagai elektronik dapat dihasilkan, membuka celah pita *graphene* dan memajukan aplikasi spesifik (Ma. et al., 2020). Dalam industri semikonduktor modern, *strain engineering* telah menjadi penting untuk meningkatkan fungsionalitas dan kinerja perangkat. *Graphene* memiliki potensi besar untuk menciptakan perangkat elektronik generasi berikutnya berkat kemampuannya dalam mengontrol struktur elektronik melalui mekanis *strain* (Hu. et al., 2019).

Strain telah diakui sebagai mekanisme yang efektif dalam mengendalikan sifat elektronik, transportasi, dan optik semikonduktor. Meskipun doping merupakan metode umum untuk memodifikasi sifat elektronik *graphene*, metode ini dapat merusak kemurnian material. Beberapa penelitian menunjukkan bahwa *strain engineering* dapat mengubah sifat elektronik *graphene* tanpa menambahkan elemen asing, sehingga mempertahankan kemurnian material dan membuka celah pita energi, serta mempengaruhi sifat magnetiknya (Fei and Yang, 2014).

Simulasi numerik berbasis *Density Functional Theory* (DFT) telah mendapatkan popularitas sebagai alat yang kuat untuk mempelajari karakteristik material. Ketersediaan perangkat lunak yang andal dan efektif sangat penting dalam penerapan metode berbasis DFT. Salah satu contohnya adalah *Quantum ESPRESSO*, sebuah distribusi perangkat lunak sumber terbuka yang menggunakan basis gelombang datar dan *pseudopotensial* untuk perhitungan struktur elektronik berdasarkan DFT. Dengan pendekatan *pseudopotensial* dan gelombang tambahan proyektor, *Quantum ESPRESSO* menjadi seperangkat kode komprehensif untuk simulasi kuantum material dengan teknik mutakhir (Giannozzi. et al., 2017).

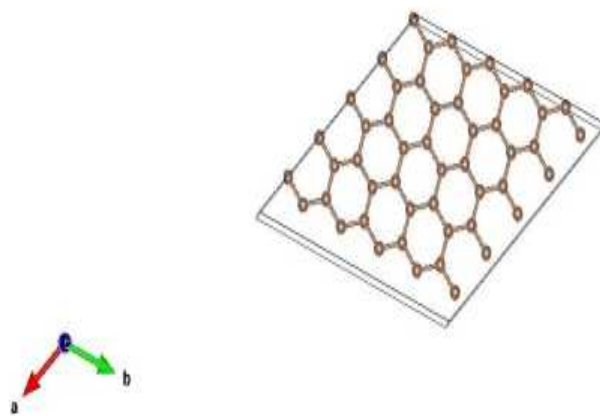
Secara alami *graphene* tidak bersifat magnetik dan tidak memiliki *band gap*. Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan untuk mengeksplorasi bagaimana *strain* dapat memperkenalkan sifat magnetik dan membuka *band gap*. Pendekatan *strain* dalam memodifikasi sifat *graphene* masih kurang dieksplorasi dibandingkan dengan doping. Dengan menggunakan simulasi *Density Functional Theory* (DFT) pada *Quantum ESPRESSO*, penelitian ini bertujuan untuk menganalisis efek *strain* pada sifat elektronik dan magnetik *graphene*. Penerapan *strain* sebagai metode untuk mengubah sifat-sifat ini menawarkan peluang untuk mengembangkan perangkat elektronik dan spintronik yang lebih fleksibel.



Struktur Dasarnya

Material dua dimensi yang terdiri dari satu lapisan atom karbon dengan susunan heksagonal. Struktur ini memberikan *graphene* sifat mekanik seperti kekuatan tarik yang tinggi dan elastisitas yang baik. Selain itu, memiliki konduktivitas listrik yang sangat tinggi, menjadikannya cocok untuk berbagai aplikasi elektronik (Bonaccorso, 2019).

Graphene merupakan material baru tertipis, terkuat, dan terbaik di dunia saat ini. Grafena tersusun dari lapisan atom karbon dan memiliki struktur heksagonal mirip sarang lebah. *Graphene* adalah alotrop karbon dan struktur dasar bahan berbasis karbon seperti grafit, karbon nanotube (CNT) dan *fullerene*. Grafena memiliki jarak antar atom 0,142 nm dan disatukan oleh ikatan kovalen kuat pada satu lapisan, namun oleh ikatan kovalen lemah antar lapisan lainnya (Novianti, 2020). Struktur unik *graphene* memberikan sifat *graphene* yang baik termasuk mobilitas pembawa yang tinggi, efek *Quantum Hall* suhu ruangan, transparansi optik yang baik, luas permukaan spesifik, modulus Young, dan konduktivitas termal yang sangat baik (Rafitasari. et al., 2016).



Gambar 1. Struktur Kristal *Graphene*

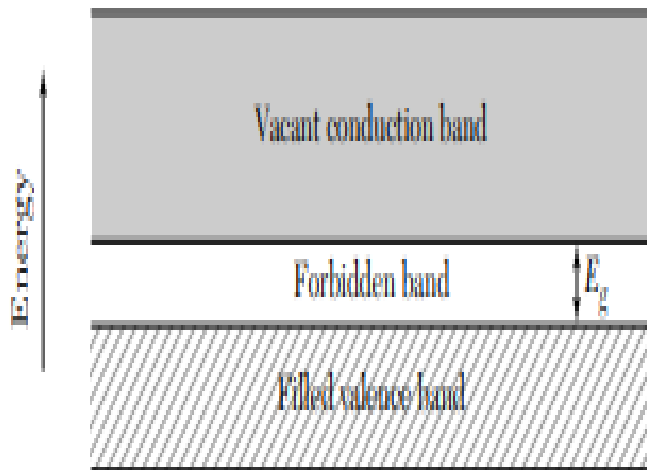
Sumber : mp-48 C Materials project, kemudian gambar divisualisasikan menggunakan VESTA

1.2.2 Struktur Pita Elektronik

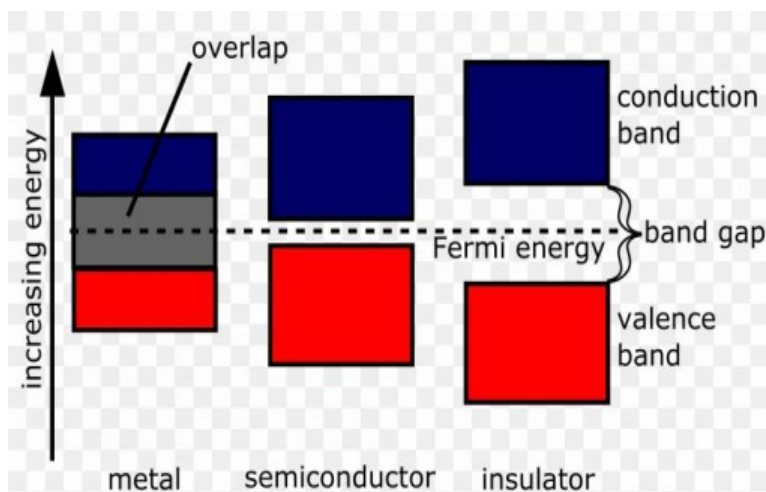
Struktur pita elektronik (*Electronic band structure*) adalah salah satu konsep penting dalam fisika zat padat, banyak sifat listrik, optik dan bahkan beberapa sifat magnetik kristal dapat dijelaskan oleh struktur pita. Jika energi fermi terletak pada celah pita, maka material tersebut dapat bersifat isolator atau semikonduktor (Wacker, 2018). Struktur pita elektronik adalah susunan tingkat energi yang bisa ditempati elektron dalam material padat, ada dua pita penting yaitu pita valensi dan pita konduksi. Pita valensi yang berada di bawah level fermi berisi elektron-elektron terikat dan pita konduksi yang berada di atas level fermi merupakan tempat elektron dapat bergerak



valensi dan pita konduksi terdapat daerah dimana elektron tidak atau sering disebut sebagai *band gap* (celah pita) (Novianti,



Gambar 2. Diagram Struktur Pita Energi (*Band Structure*)
 Sumber : Buku *Introduction to Solid State Physics* oleh Charles Kittel



Gambar 3. Diagram Perbedaan Struktur Pita Energi (*Band Structure*) pada Metal, Semikonduktor, dan Isolator.
 Sumber : favpng.com

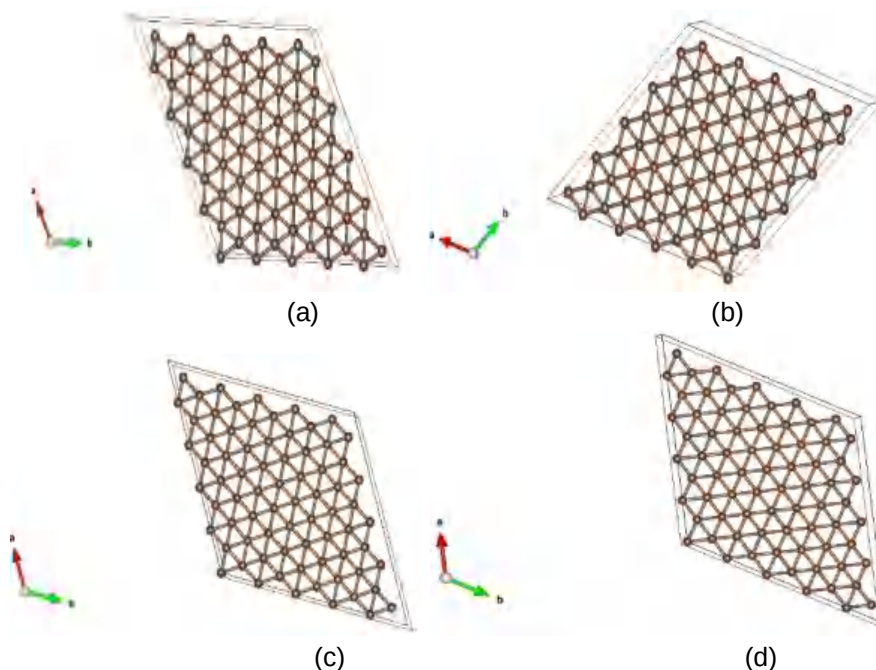


adalah tingkat energi tertinggi yang ditempati elektron pada 0°K konduktivitasnya nol karena semua keadaan di pita valensi laan di pita konduksi tidak terisi. Ketika suhu dinaikkan, elektron mal dari pita valensi ke pita konduksi dimana mereka menjadi).

1.2.3 Strain

Strain (rekayasa regangan) adalah proses mengubah panjang kisi (*cell parameter*). Nanomaterial dua dimensi setebal atom (2DNM), yang telah dipelajari beberapa tahun terakhir sangat cocok untuk rekayasa regangan karena kemampuan mereka untuk menahan regangan yang kuat (Deng. et al., 2018). Karena sifatnya yang luar biasa yang berkaitan dengan struktur yang berbeda, material dua dimensi (2D) telah menarik banyak perhatian penelitian, ini adalah strategi penting untuk mengukur kisi dan struktur elektronik dua dimensi bahan. Hal ini membuatnya lebih fleksibel untuk perangkat nanoelektronik dan optoelektronik (Yang. et al., 2020).

Dalam beberapa dekade terakhir, industri semikonduktor telah melihat penggunaan rekayasa regangan meningkat, sebagai contoh *strain uniaxial* dan *biaxial* dapat meningkatkan mobilitas elektron. Namun, kristal curah tunggal semikonduktor konvensional hanya tahan terhadap regangan yang sangat kecil. Akibatnya, penggunaan modulasi regangan lebih lanjut sangat terbatas. Bahan 2D memiliki kapasitas deformasi yang lebih besar dibandingkan dengan bahan curah dan dapat menahan regangan elastis yang lebih besar tanpa patah, menunjukkan potensi yang luar biasa untuk *strain* (Yang. et al., 2020).



ambar 4. Struktur *Graphene* dengan *Strain*

(a)2%, (b)5%, (c)10%, (d)15%

angan *strain*, kemudian diubah kedalam bentuk file CIF dan divisualisasikan menggunakan VESTA



1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan penelitian ini adalah untuk menganalisis efek *strain* pada sifat elektronik dan sifat magnetik *graphene*

1.4 Manfaat Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk membuka celah pita (*band gap*) pada *graphene* melalui pemberian *strain*, sehingga material tersebut dapat berfungsi sebagai semikonduktor.



BAB II METODE PENELITIAN

2.1 Alat dan Bahan

Alat dan bahan yang digunakan pada penelitian ini yaitu :

1. Komputer dengan spesifikasi RAM minimal 4 GB dan mempunyai sistem operasi Linux Ubuntu 24.04 LTS.
2. Perangkat lunak yang digunakan yaitu *Quantum ESPRESSO* v7.3.1 dan penggunaan *pw.x*, serta Xrysden atau VESTA dan GNUPLOT untuk visualisasi.

2.2 Prosedur Simulasi

Simulasi akan dijalankan melalui langkah-langkah berikut :

1. Menentukan struktur material, yang dapat diperoleh dari file CIF di database seperti *Materials Project* atau dibuat secara manual.
2. Memilih *pseudopotensial* karena sangat berpengaruh terhadap akurasi hasil simulasi, *pseudopotensial* dapat diunduh dari situs resmi *Quantum ESPRESSO* sesuai dengan jenis atom dan fungsi pertukaran korelasi yang digunakan.
3. Membuat *file input* awal tanpa *strain* yang memuat bagian-bagian penting seperti kontrol, sistem, elektron, dan k-point.
4. Menjalankan perhitungan SCF yaitu perhitungan utama untuk memperoleh densitas elektron *self-consistent* menggunakan perintah *pw.x <input.in> output.out*.
5. Menjalankan perhitungan *phonon dispersion* untuk memastikan kestabilan material sebelum dilanjutkan ke tahap berikutnya.
6. Menjalankan perhitungan lanjutan seperti *nscf*, *band*, dan *DOS*.
7. Membuat *file input* baru dengan *strain* yang strukturnya sama seperti input awal namun dengan perubahan pada parameter kisi. *Strain* yang digunakan bisa berupa *uniaxial*, *biaxial*, dan sebagainya dalam hal ini digunakan *strain uniaxial*.
8. Menjalankan kembali perhitungan SCF untuk struktur yang telah diberikan *strain*.
9. Melakukan analisis perbandingan antara hasil simulasi tanpa *strain* dan dengan *strain*, untuk melihat pengaruh *strain* terhadap sifat-sifat elektronik dan magnetik material.

2.3 Metode *Density Functional Theory* (DFT)

Density Functional Theory (DFT) adalah salah satu metode dalam fisika komputasi yang paling efektif untuk mempelajari banyak sistem elektronik. Metode ini memungkinkan kita untuk mensimulasikan sistem elektronik secara efisien dengan



gelombang multi-elektron yang kompleks dengan fungsi yang lebih sederhana. DFT telah terbukti sangat berguna dalam material elektronik dan interaksi antar elektron, terutama untuk seperti *graphene*. *Density Functional Theory* (DFT) digunakan sebagai pendekatan utama untuk memahami sifat elektronik *graphene* (Wang. et al., 2020).

Density Functional Theory (DFT) merupakan pendekatan untuk menemukan solusi persamaan Schrödinger, yang menggambarkan perilaku kuantum atom dan molekul. Dalam aplikasi dunia nyata, DFT memudahkan penelitian ini di berbagai bidang, termasuk kimia, fisika, dan ilmu material (David & Janice, 2009). Ada beberapa pendekatan yang dilakukan pada *Density Functional Theory* (DFT), yaitu sebagai berikut :

a. Mekanika Kuantum Banyak Partikel

Tinjauan studi kuantum pada sistem fisik material melibatkan dua jenis partikel, yaitu ion dan elektron. Konfigurasi elektron suatu bahan ditentukan berdasarkan interaksi antara elektron dan ion atom dalam bahan tersebut (Novianti, 2020). Interaksi ini dijelaskan oleh persamaan Schrödinger, solusi analitik terhadap persamaan Schrödinger hanya ada untuk sistem dengan satu lekelectron (seperti atom hidrogen), sedangkan sebagian besar atom, molekul, dan material terdiri dari dua elektron, persamaan Schrödinger hanya dapat diselesaikan setelah menggunakan beberapa perkiraan karena kompleksitas interaksi Coulomb. Oleh karena itu, diperlukan pendekatan yang baik untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger. Dalam *Quantum ESPRESSO*, teori fungsi kerapatan (DFT) digunakan sebagai metode untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger (Saito, 2023). Dalam *Density Functional Theory* (DFT), pendekatan yang digunakan berlandaskan pada persamaan Schrödinger independent waktu. Persamaan ini digunakan untuk menentukan energi dasar sistem tanpa mempertimbangkan evolusi waktu dari fungsi gelombang. Secara umum, persamaan Schrödinger independen waktu dinyatakan sebagai berikut :

$$H\psi = E\psi \quad (1)$$

dimana H adalah operator Hamiltonian, ψ adalah fungsi gelombang, dan E adalah energi total.

b. Pendekatan Born-Oppenheimer

Born-Oppenheimer mengambil fakta bahwa massa ion jauh lebih besar dari massa elektron, sebagai gambaran jika ion ukurannya seluas stadion bola maka elektron hanya sebesar bola saja, jadi perbandingannya cukup jauh. Sehingga pergerakan dari ion itu tidak cukup berarti dibandingkan dengan pergerakan bola itu sendiri, tetapi bukan berarti ion tidak bergerak, ion bergerak namun pergerakannya tidak cukup berarti jika dibandingkan dengan pergerakan elektron. Dengan bentuk Hamiltonian diberikan oleh energi kinetik T dan energi potensial V dari elektron dan ion. Untuk menyederhanakan perhitungan, pendekatan *Born-Oppenheimer* digunakan dengan mengasumsikan bahwa inti atom jauh lebih lambat dibandingkan dengan demikian, posisi inti dianggap tetap selama perhitungan. Hamiltonian elektronik dalam pendekatan ini dapat dituliskan



$$H = T_e + T_n + V_{nn} + V_{ee} + V_{ne} \quad (2)$$

$$= - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \sum_{I=1}^M \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_I^2 + \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_I Z_J}{|R_I - R_J|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|r_i - r_j|} - \sum_{i,I} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_I}{|r_i - R_I|} \quad (3)$$

Dari lima komponen Hamiltonian diatas kita dapat reduksi, salah satunya yaitu dari pembahasan sebelumnya bahwa massa ion jauh lebih besar sehingga kecepatannya bisa dianggap nol atau diam, karena elektron diam berarti komponen kinetik ion bisa kita hilangkan atau kita anggap nol. Kerena ion-ion tersebut diam otomatis kita mempunyai komponen dari potensial antar ion, jadi interaksi antar ion dan ion menjadi suatu konstanta saja karena dia berada diposisi yang sama terus (Saito, 2023).

$$H = - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 - \sum_{I=1}^M \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_I^2 + \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_I Z_J}{|R_I - R_J|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|r_i - r_j|} - \sum_{i,I} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_I}{|r_i - R_I|} \quad (4)$$

Jadi, bagian yang warna merah tersebut kita anggap nol dan yang warna biru bisa dianggap nol atau bisa dibuat menjadi sebuah konstanta. Sehingga, sekarang kita mempunyai hydrogen hanya dari komponen kinetik elektron, potensial antara elektron dan elektron, serta elektron dan ion. Walaupun telah direduksi atau aproksimasi ternyata Hamiltonian ini masih cukup sulit diselesaikan.

c. Teori Hohenberg-Kohn

Density Functional Theory lahir dari suatu teorema yang dikemukakan oleh Hohenberg dan kohn, dimana mereka menemukan adanya suatu fakta bahwa ternyata ada korespondensi satu-satu antara potensial eksternal $V_{en}(r)$ dengan densitas elektron $n(r)$. Potensial eksternal adalah potensial antara elektron dan ion. Jadi, energi yang merupakan ekspektasi dari Hamiltonian sekarang dirumuskan sebagai :

$$E[n(r)] \langle \psi | H | \psi \rangle = F[n(r)] + \int V_{en}(r) n(r) dr \quad (5)$$

dimana $F[n(r)]$ adalah suatu fungsional yang parameternya berupa fungsi densitas, $V_{en}(r)$ fungsi eksternal, dan $n(r) dr$ fungsi densitas.



ema ini ada satu hal yang menarik yaitu karena sebelumnya asnya $n(r)$ berarti diketahui juga eksternal potensialnya $V_{en}(r)$, ada sekian banyak variasi densitas yang koresponden terhadap namun yang pasti untuk diperhatikan adalah densitas yang dihasilkan energi pada keadaan dasar atau teorema ini menjamin energi pada keadaan dasar (*ground-state*). Karena fungsionalnya

belum diketahui maka penting untuk mengembangkan aproksimasi yang baik untuk fungsional $F[n(\mathbf{r})]$. Teorema Hohenberg-Kohn menunjukkan adanya pemetaan satu-satu antara kerapatan elektron keadaan dasar dan fungsi gelombang keadaan dasar sistem multi-partikel. Selanjutnya teorema Hohenberg-Kohn membuktikan kepadatan keadaan dasar meminimalkan energi elektron total sistem (Sasfan, 2024).

d. Pendekatan Kohn-Sham

Salah satu komponen utama *Density Functional Theory* (DFT) adalah persamaan Kohn-Sham, yang digunakan untuk menentukan fungsi elektronik yang berinteraksi dengan material. Persamaan Kohn-Sham menyelesaikan beberapa masalah elektronik dengan memperkenalkan sistem elektronik non-interaktif dengan kerapatan yang setara dengan sistem asli (David and Janice, 2009). Kohn-Sham mengusulkan sistem fiktif dengan elektron non-interaktif yang memiliki kerapatan elektron yang sama dengan sistem nyata. Persamaan Kohn-Sham dalam pendekatan ini dinyatakan sebagai berikut :

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{eff}(\mathbf{r})\right]\psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\mathbf{r}) \quad (6)$$

di mana $-\frac{1}{2}\nabla^2$ adalah energi kinetik, $V_{eff}(\mathbf{r})$ potensial efektif, dan ε_i adalah nilai eigen. Di mana potensial efektif $V_{eff}(\mathbf{r})$ terdiri dari tiga bagian utama :

$$V_{eff}(\mathbf{r}) = V_{ion}(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r}) \quad (7)$$

dengan $V_{ion}(\mathbf{r})$ sebagai potensial ion, $V_H(\mathbf{r})$ sebagai potensial elektrostatik antar elektron (Hartree potensial), dan $V_{xc}(\mathbf{r})$ sebagai potensial pertukaran-korelasi (*exchange-correlation potential*), sehingga persamaan Kohn-Sham secara umum dituliskan sebagai berikut :

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{ion}(\mathbf{r}) + V_H[n(\mathbf{r})] + V_{xc}[n(\mathbf{r})]\right]\psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\psi_i(\mathbf{r}) \quad (8)$$

Persamaan Kohn-Sham ini akan diselesaikan secara otomatis dalam proses *Self Consistent Field* (SCF) untuk mendapatkan struktur *graphene* yang optimal sebelum menerapkan *strain*. Hasil dari perhitungan ini akan menjadi struktur awal untuk perhitungan selanjutnya dengan penerapan *strain*.

2.4 Quantum ESPRESSO

Quantum ESPRESSO adalah perangkat lunak *open source* yang memungkinkan

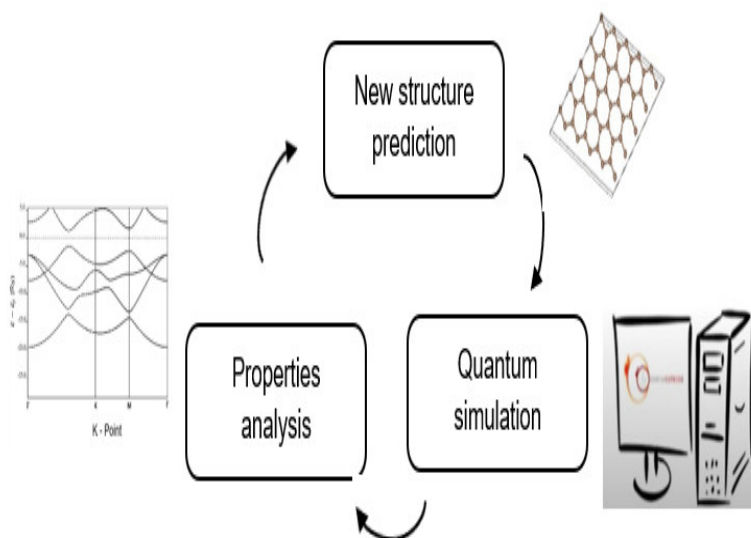


terial menggunakan DFT. Dengan perangkat lunak ini, peneliti rhitungan yang akurat untuk menganalisis efek *strain* pada an sifat magnetik *graphene*. Dalam beberapa tahun terakhir, telah meningkat, memberikan kemampuan untuk pemodelan n sifat material dua dimensi (Giannozzi. et al., 2017).

pada teori fungsional kerapatan, gelombang bidang, dan *Quantum ESPRESSO* adalah rangkaian kode komputer *open-*

source yang digunakan untuk pemodelan material dan perhitungan struktur elektronik pada skala nano. Distribusi *Quantum ESPRESSO* berisi paket inti PWscf (*Plane Wave self-Consistent Field*) dan CP (*Car-Parrinello*) untuk perhitungan sifat struktur elektronik dan *pseudopotensial* dalam teori fungsional kerapatan (DFT) menggunakan basis set gelombang bidang (PW) (Ziabari and Chang, 2023). Didalam desain material tidak terlepas dari tiga cara berikut :

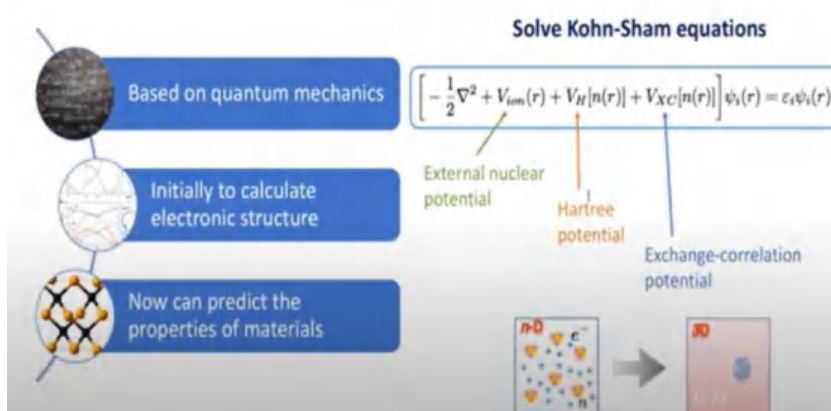
1. Memprediksi struktur baru molekul atau *crystal*.
2. Struktur molekul atau *crystal* tersebut kemudian dianalisis menggunakan simulasi *quantum*.
3. Dari simulasi *quantum* tersebut diperoleh analisis dari sifat-sifat material, baik itu sifat elektronik maupun magnetik.



Gambar 5. Desain Material

Proses perhitungan kuantum berdasarkan prinsip *first principals calculation*, yaitu perhitungan yang berdasarkan mekanika kuantum dan pada awalnya perhitungan ini digunakan hanya untuk menghitung sifat-sifat elektronik dari material, namun sekarang perkembangannya dapat memprediksi sifat-sifat material. Perhitungan ini intinya adalah memecahkan persamaan Kohn-Sham, persamaan ini mengubah persamaan dari permasalahan *many body problems* ke *single body* untuk melakukan perhitungan tersebut kita memerlukan *tools hardware*, disini kita menggunakan *software* dengan perhitungan yaitu *Quantum ESPRESSO*.

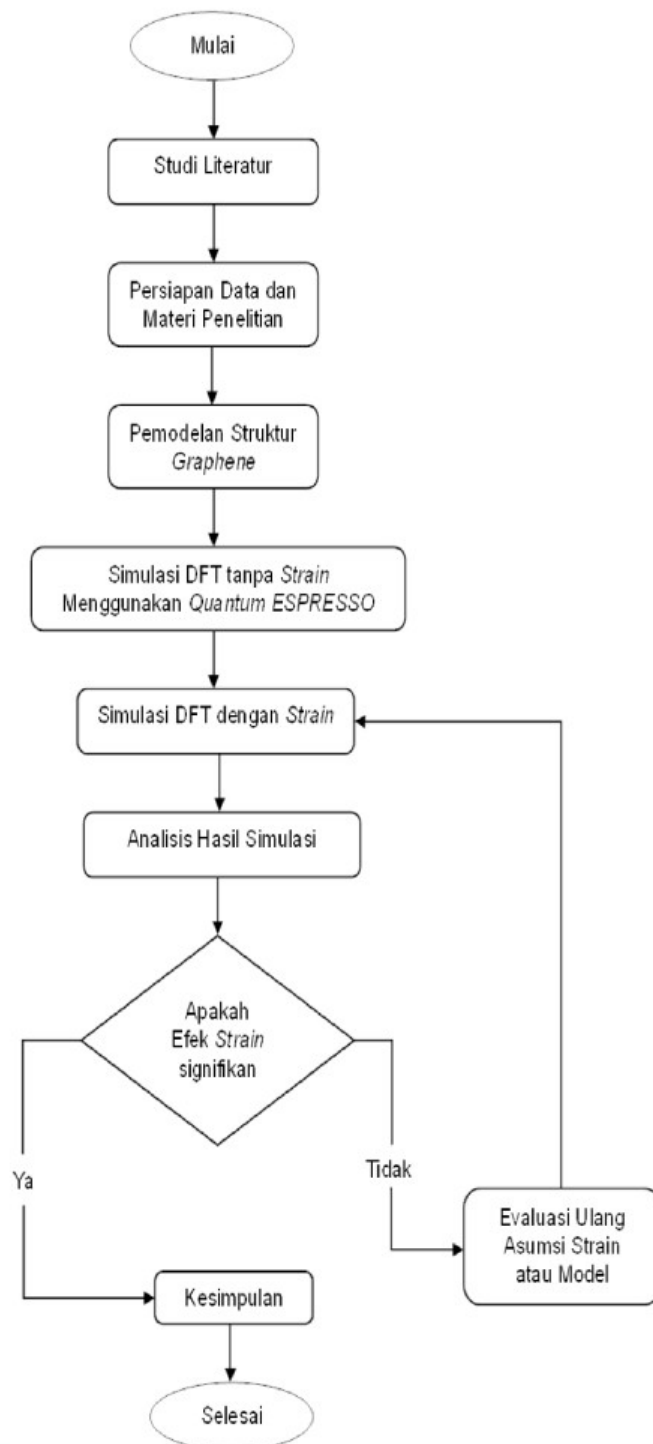




Gambar 6. *First Principals Calculation*

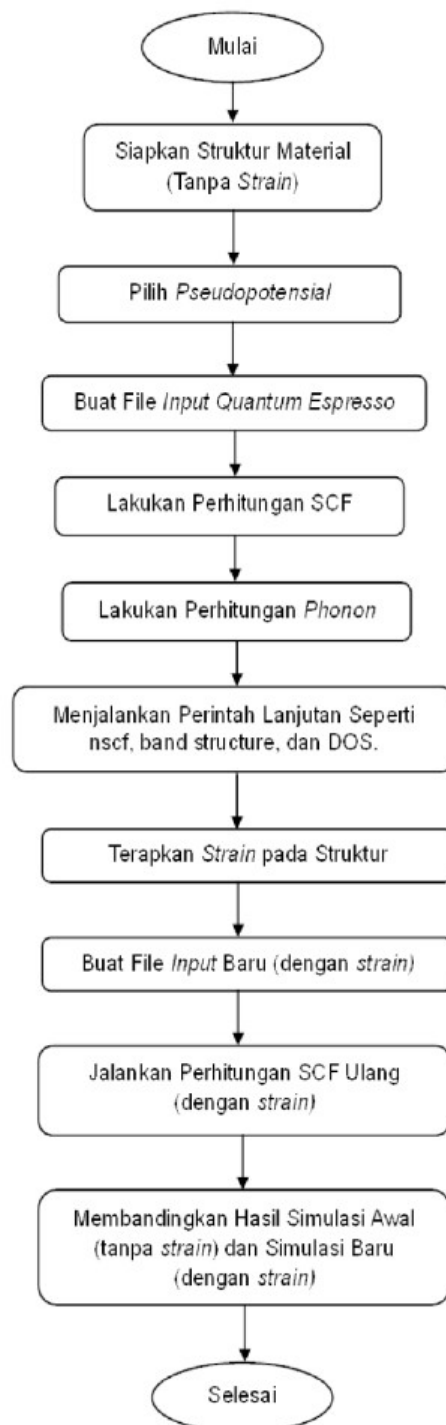


2.5 Bagan Alir Penelitian



Gambar 7. Bagan Alir Penelitian

2.6 Bagan Alir Simulasi



Gambar 8. Bagan Alir Simulasi



Optimized using
trial version
www.balesio.com