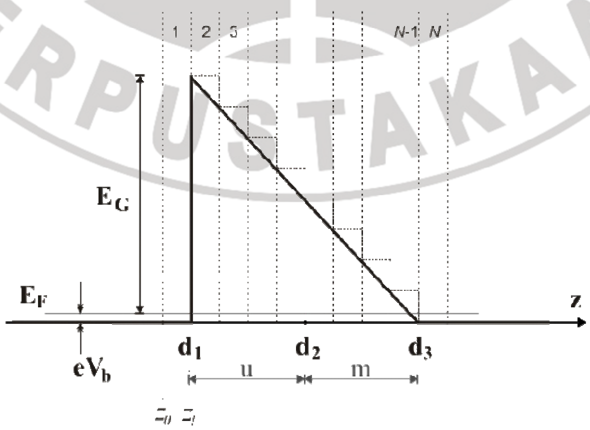
BAB III

METODOLOGI PENELITIAN

Metoda yang digunakan pada penelitian ini adalah studi literatur dan komputasi. Studi literatur digunakan untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger sambungan p-n AGNR menggunakan pendekatan Metode Matriks Transfer (MMT) kemudian perhitungan untuk arus terobosannya dihitung menggunakan Metode Gauss Legendre Quadrature. Sedangkan komputasi digunakan untuk perhitungan dan memodelkan karakteristrik listrik AGNR. Proses pemodelan dilakukan dengan bantuan *software* Mathematica 8.

3.1. Perhitungan Transmitansi

Peluang transmisi didefinisikan sebagai fraksi dari partikel datang terhadap partikel yang berhasil menerobos potensial penghalang. Dalam perhitungan koefisian transmitansi, terlebih dahulu diterapkan syarat batas untuk mendapatkan solusi khusus.



Gambar 3.1. Profil potensial AGNR yang dibagi menjadi *N* segmen untuk digunakan dalam perhitungan menggunakan Metode Matrik Transfer

UNIVERSITAS PENDIDIKAN INDONESIA PERPUSTAKAAN

Fungsi gelombang elektron bebas waktu pada tiap daerah pada Gambar 3.1 adalah

$$\psi_1 = A_1 e^{ik_1 z} + B_1 e^{-ik_1 z} \quad , \; z < d_1 \tag{3.1.a}$$

$$\psi_U = A_U e^{k_U z} + B_U e^{-k_U z} \quad , \; d_1 < z < d_2 \tag{3.1.b}$$

$$\psi_M = A_M e^{k_M z} + B_M e^{-k_M z} \quad , \; d_2 < z < d_3 \tag{3.1.c}$$

$$\psi_N = A_N e^{ik_N z} \quad , \; z > d_3 \tag{3.1.d}$$

dengan A_1, B_1, A_U, B_U, A_M, B_M dan A_N adalah konstanta dimana $U = 2 , \ldots , \frac{N}{2}$, dan $M = \left(\frac{N}{2} + 1\right), \ldots , N - 1$. Untuk mempermudah perhitungan maka nilai konstanta A_1 ditetapkan sama dengan satu dan B_N sama dengan nol, karena tidak ada refleksi.

Dimana uraian bilangan gelombang k_1 dan k_N untuk potensial penghalang datar pada 0 > z dan z > d_3 dinyatakan sebagai berikut

$$k_1{}^2 = \frac{2m_1}{\hbar^2} E \tag{3.2.a}$$

$$k_N{}^2 = \frac{2m_2}{\hbar^2} E \tag{3.2.a}$$

Sedangkan bilangan gelombang untuk potensial penghalang miring yaitu pada $0 < z_1 < d_1$ adalah

$$k_U{}^2 = \frac{2m_1}{\hbar^2}\left(E_g - eFz_U - E\right) \tag{3.3.a}$$

$$k_M{}^2 = \frac{2m_2}{\hbar^2}\left(E_g - eFz_M - E\right) \tag{3.3.b}$$

Pada gambar 3.1, apabila terdapat *N* segmen maka banyak titik antarmukanya ada *N*-1 buah sehingga jumlah syarat batasnya adalah 2(*N*-1) buah. Penerapan sarat batas pada keseluruhan segmen menghasilkan matriks total untuk seluruh struktur potensial yang diaproksimasikan oleh *N* elemen empat persegi panjang sebagai berikut :

$$\begin{pmatrix} 1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{M}_{12} \boldsymbol{M}_{23} \boldsymbol{M}_{34} \ldots \boldsymbol{M}_{(N-2)(N-1)} \begin{pmatrix} A_N \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

dengan

$$\boldsymbol{M}_{j(j+1)} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left[1 + \frac{\alpha_{[j+1]}}{\alpha_j}\right] e^{(-ik_j + k_{[j+1]})x} & \left[1 - \frac{\alpha_{[j+1]}}{\alpha_j}\right] e^{(-ik_j - k_{[j+1]})x} \\ \left[1 - \frac{\alpha_{[j+1]}}{\alpha_j}\right] e^{(ik_j + k_{[j+1]})x} & \left[1 + \frac{\alpha_{[j+1]}}{\alpha_j}\right] e^{(ik_j - k_{[j+1]})x} \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

hasil produk $\boldsymbol{M}_{12} \boldsymbol{M}_{23} \boldsymbol{M}_{34} \ldots \boldsymbol{M}_{(N-2)(N-1)}$ juga merupakan matrik 2 x 2

$$\begin{pmatrix} 1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

dan koefisien transmisi elektron t dihitung dari

$$t = A_N = \frac{1}{a_{11}} \quad (3.7)$$

Transmitansi elektron diperoleh dari

$$T(E) = \left(\frac{k_n}{k_1}\right) t t^* \quad (3.8)$$

dengan t* adalah konjuget dari koefisian transmitansi.

3.2. Perhitungan Arus Terobosan dengan Metode Gauss-Legendre Quadrature

Untuk menghitung arus terobosan maka terlebih dahulu dilakukan transformasi persamaan arus terobosan menjadi bentuk integrasi metode Gauss Legendre Quadrature. Perhitungan dengan metode ini melibatkan absisan (x_i) dan bobot/*weigths* (w_i) yang bersesuaian. Bentuk integrasi dengan metode Gauss Legendre Quadrature adalah sebagai berikut (L.Fousse, 2005)

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} W_i f(x_i) \tag{3.9}$$

Arus terobosan pada sambungan p-n AGNR dinyatakan dalam (D. Jena, 2008)

$$I = \frac{2g_V e}{h} \int_{0}^{eV_b} [f_V(E) - f_C(E)]T(E)\, dE \tag{3.10}$$

Untuk mengintegrasi persamaan arus terobosan diatas maka bentuk integrasinya harus ditransformasikan dengan pemisalan

$$E = \left(\frac{e.V_b}{2}\right)(x+1) \tag{3.11}$$

dan

$$dE = \left(\frac{e.V_b}{2}\right)dx \tag{3.12}$$

dengan x adalah titik tempat fungsi akan dievaluasi.

Kemudian kita definisikan fungsi *g(x)* berikut

$$g(x) = \left\{f_V\left(\left(\frac{e.V_b}{2}\right)(x+1)\right) - f_C\left(\left(\frac{e.V_b}{2}\right)(x+1)\right)\right\} T\left(\left(\frac{e.V_b}{2}\right)(x+1)\right) \tag{3.13}$$

Lalu kita substitusikan persamaan 3.11, 3.12 dan 3.13 ke persamaan 3.10 sehingga diperoleh

$$I = \frac{g_V e^2 V_b}{h} \int_{-1}^{1} g(x)dx \tag{3.14}$$

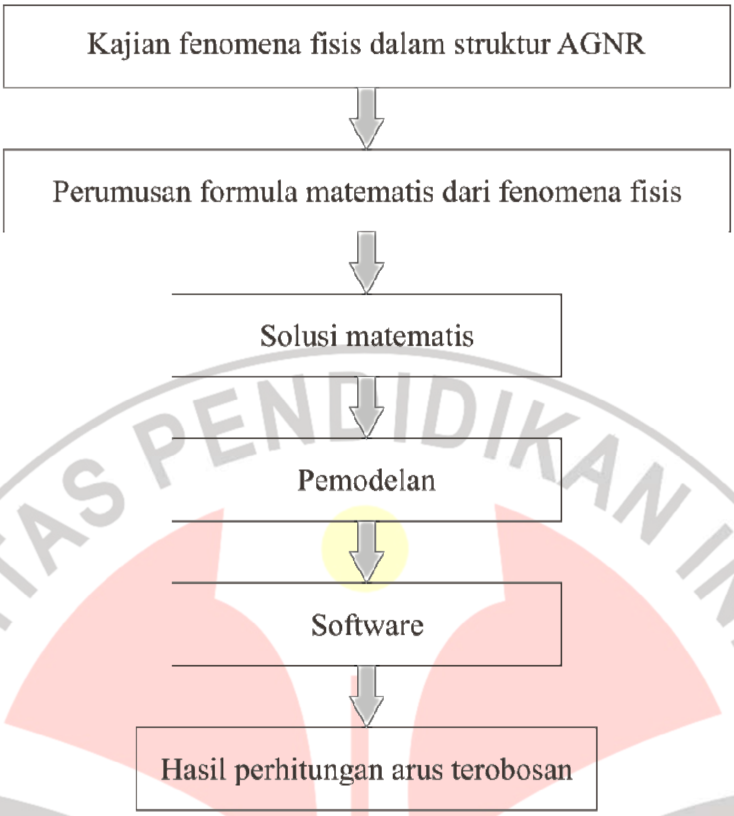
Setelah dilakukan transformasi domain kemudian persamaan 3.14 diselesaikan dengan metode Gauss Legendre Quadrature sebagai berikut,

$$I = \frac{g_V e^2 V_b}{h} \sum_{i=1}^{N} w_i g(x_i) \tag{3.15}$$

dengan w_i adalah faktor pengali (bobot), $g(x_i)$ adalah nilai fungsi $g(x)$ di titik $x = x_i$ dan N adalah jumlah segmen pada selang [-1,1].

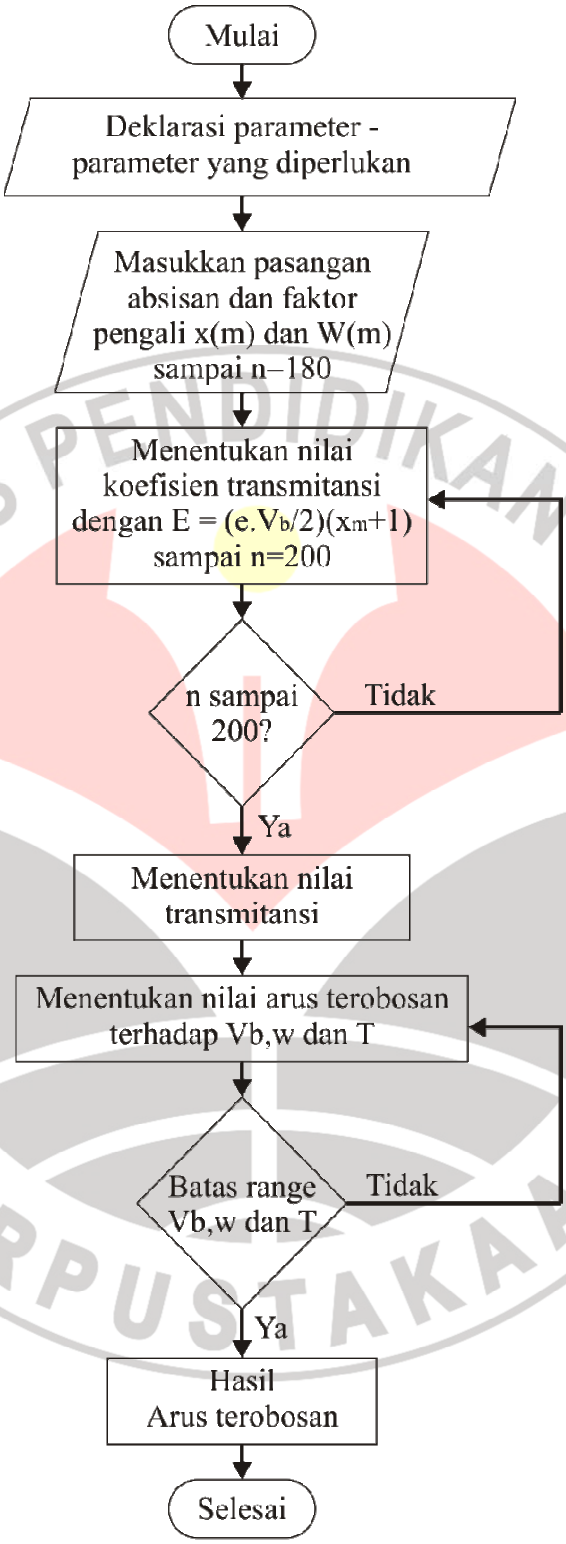
3.3 Alur Penelitian

Adapun diagram alir penelitian adalah sebagai berikut :



Gambar 3.2 (a) Diagram Alur Penelitian

Flowchart program perhitungan arus terobosan adalah sebagai berikut :



Gambar 3.2 (b) Flowchart Perhitungan Arus Terobosan