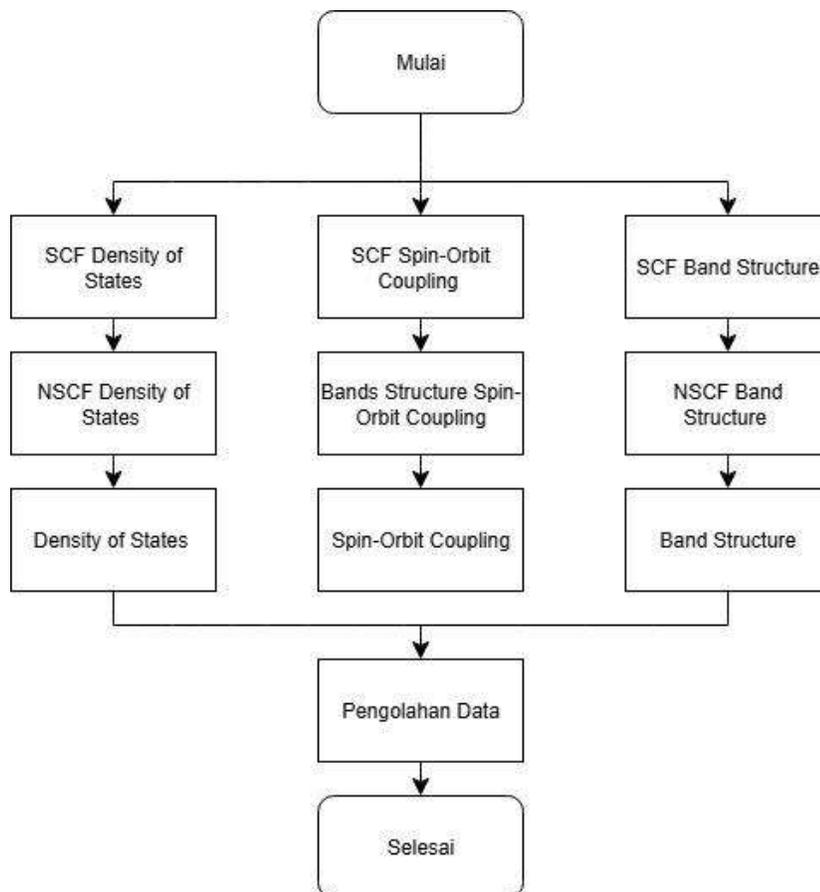


BAB III METODE PENELITIAN

3.1 Alur Penelitian

Penelitian ini menggunakan perangkat lunak Quantum ESPRESSO dengan alur perhitungan yang ditunjukkan pada Gambar 3.1. Tahap awal dilakukan dengan SCF, kemudian dilanjutkan ke tiga jalur, yaitu perhitungan DOS, SOC, dan Band Structure. Pada jalur DOS, setelah SCF dilakukan NSCF untuk memperoleh data lebih detail sebelum dianalisis dalam bentuk grafik DOS. Pada jalur SOC, perhitungan dimulai dengan SCF yang mengaktifkan efek spin-orbit coupling, lalu dilanjutkan dengan band structure untuk melihat pengaruh interaksi spin dan orbit elektron. Sementara itu, jalur band structure diawali dengan SCF, diteruskan NSCF, dan diakhiri dengan visualisasi pita energi.



Gambar 3. 1 Bagan alur penelitian

3.2 Tahapan Penelitian

3.2.1 Menentukan DOS

Komputasi DOS untuk material film tipis emas menggunakan Quantum ESPRESSO, terdapat beberapa tahapan yang harus dilakukan, dimana diperlukan beberapa tahapan komputasi yang dilakukan secara bertahap. Pertama, dilakukan perhitungan *self-consistent field* (SCF) untuk mendapatkan potensial dan rapat muatan elektronik yang konvergen dalam kondisi yang setimbang. File input SCF harus menyertakan struktur kristal, jenis atom, serta parameter yang penting seperti energi cut-off dan k-grid. Setelah komputasi SCF selesai dilakukan, kemudian dilanjutkan dengan melakukan perhitungan *non-self-consistent field* (NSCF) menggunakan k-point grid yang lebih rapat untuk mendapatkan data yang lebih detail mengenai keadaan elektron di sekitar energi fermi. Data dari perhitungan NSCF ini untuk perhitungan DOS menggunakan memiliki resolusi energi yang baik. Terakhir, melakukan perhitungan DOS menggunakan module `dos.x`, yang memproses data dari hasil NSCF yang sudah dilakukan tadi untuk menghasilkan distribusi kepadatan keadaan elektronik terhadap energi. Hasil yang didapatkan dari perhitungan ini berupa file yang dapat divisualisasikan untuk melihat karakteristik elektronik dari material, seperti adanya celah pita (band gap) atau tingkat kepadatan keadaan yang terdapat di dekat energi fermi.

Selanjutnya dalam komputasi DOS untuk material film tipis emas menggunakan JDFTx, terdapat beberapa tahapan yang perlu dilakukan. Pertama, melakukan perhitungan DFT untuk menemukan solusi SCF. Pada tahap ini, file input disiapkan dengan menentukan pseudopotential untuk elemen film tipis emas serta parameter perhitungan seperti potong energi, fungsi pertukaran-korelasi (misalnya GGA-PBE), dan grid k-point untuk sampling zona Brillouin, kemudian dijalankan menggunakan JDFTx untuk menghasilkan solusi SCF. Setelah tahap SCF selesai, dilakukan perhitungan NSCF untuk menghitung DOS dengan grid k-point yang lebih rapat. Pada tahap ini, file input baru disiapkan, memuat informasi

dari hasil SCF sebelumnya dan pengaturan tambahan untuk menghasilkan DOS. Setelah perhitungan selesai, JDFTx akan menghasilkan data DOS dalam file keluaran. Langkah berikutnya adalah memvisualisasikan DOS, di mana hasil komputasi DOS ini dapat diplot menggunakan perangkat lunak seperti gnuplot atau Python dengan pustaka matplotlib. Plot DOS ini menunjukkan distribusi keadaan energi di sekitar tingkat Fermi, yang berguna untuk memahami sifat elektronik material film tipis emas, memberikan informasi tentang keberadaan pita konduksi, pita valensi, dan sifat semikonduktor atau logam dari material tersebut. Dengan demikian, tahapan komputasi DOS menggunakan JDFTx mencakup persiapan struktur, perhitungan SCF, perhitungan DOS, dan visualisasi hasil, yang semuanya penting untuk analisis sifat elektronik material.

3.2.2 Menentukan Struktur Pita Energi

Mendapatkan struktur pita energi suatu material menggunakan software Quantum ESPRESSO, terdapat beberapa tahapan komputasi yang harus dilakukan. Pertama, dilakukan SCF untuk memperoleh potensial elektronik yang konvergen berdasarkan pada struktur kristal dan parameter awal sistem. Hasil dari perhitungan SCF ini akan menjadi dasar untuk perhitungan yang akan dilakukan selanjutnya. Kemudian melakukan perhitungan NSCF untuk mendapatkan peningkatan akurasi data. Untuk mendapatkan struktur pita energi tahapan utamanya yaitu perhitungan *bands* menggunakan file input yang memuat jalur k-point khusus di ruang resiprokal yang menghubungkan titik-titik istimewa yang terdapat dalam *Brillouin zone* (seperti Γ , X, L, W, dll). Hasil perhitungan yang didapatkan ini berupa energi elektron pada berbagai k-point yang kemudian dapat divisualisasikan sebagai diagram struktur pita. Visualisasi ini akan menggambarkan dispersi energi terhadap vektor gelombang dan memberikan informasi mengenai sifat konduktivitas, celah pita, dan interaksi elektronik dalam material tersebut.

Menghitung struktur pita energi (band structure) material film tipis emas menggunakan JDFTx, langkah pertama yang harus dilakukan adalah mempersiapkan struktur kristal thin film emas dalam format seperti ``.xsf`` atau

`.cif`, yang dapat diperoleh dari database material atau dibangun menggunakan perangkat lunak seperti VESTA. Setelah struktur tersedia, perhitungan SCF dilakukan untuk mendapatkan potensial elektronik yang konsisten. Pada tahap ini, file input disiapkan dengan menentukan pseudopotential, parameter energi cutoff, fungsi pertukaran-korelasi (seperti GGA-PBE), dan grid k-point untuk sampling zona Brillouin. Setelah perhitungan SCF selesai, perhitungan NSCF dilakukan dengan menentukan jalur k-point yang mencakup high-symmetry points di zona Brillouin, yang bisa diperoleh dari tools seperti SeeK-path. Perhitungan band structure ini menggunakan hasil dari SCF sebagai referensi, dan menghasilkan data energi pada setiap titik k di sepanjang jalur yang ditentukan. Langkah terakhir adalah memvisualisasikan struktur pita energi menggunakan perangkat lunak seperti gnuplot atau Python (matplotlib) untuk memplot energi terhadap jalur k-point. Hasil plot ini memberikan wawasan tentang gap energi, dispersivitas pita, serta sifat logam atau semikonduktor dari material film tipis emas, sehingga memungkinkan analisis mendalam terhadap sifat elektronik material tersebut.

3.2.3 Menentukan Spin-Orbit Coupling

Mendapatkan efek *spin-orbit coupling* (SOC) dalam simulasi menggunakan software Quantum ESPRESSO, akan memerlukan tahapan khusus yang melibatkan penggunaan pseudotensial relativistik dan aktivasi opsi relativistik penuh. Pertama, pada tahap ini menjalankan perhitungan SCF dengan mengaktifkan parameter **noncolin = ,true**, dan **lspinorb = .true**. dalam bagian **&SYSTEM** untuk mengaktifkan perhitungan spin tak kolinear dan interaksi *spin-orbit*. Selain itu, pseudotensial yang digunakan harus kompatibel dengan SOC, biasanya bertipe relativistik penuh (*fully relativistik*) dan biasanya berformat .UPF yang dapat mendukung komponen spin. Setelah SCF dengan SOC selesai dijalankan, hasilnya dapat digunakan untuk melakukan analisis seperti perhitungan struktur pita energi atau *density of states* yang mempertimbangkan efek *spin-orbit*. Efek SOC dalam material logam sangat penting karena dapat menyebabkan perpecahan pita energi dan mempengaruhi sifat elektroniknya.

3.2.4 Menentukan Konduktivitas Listrik dan Termal

Perhitungan sifat transport, seperti resistivitas dan konduktivitas listrik, dapat dilakukan menggunakan perangkat lunak BoltzTraP2 dengan memanfaatkan data struktur pita energi yang diperoleh dari hasil simulasi SCF dan NSCF pada Quantum ESPRESSO. Langkah pertama dimulai dengan melakukan simulasi SCF untuk mendapatkan potensial elektron yang stabil, diikuti oleh simulasi NSCF menggunakan k-point grid yang lebih rapat guna menghasilkan distribusi energi pita yang akurat di sepanjang zona Brillouin. Selanjutnya, digunakan *utility bands.x* atau *projwfc.x* dari Quantum ESPRESSO untuk mengekstrak informasi energi pita dan k-point yang kemudian dikonversi ke dalam format yang dapat dibaca oleh BoltzTraP2. Setelah file input dikonversi, BoltzTraP2 melakukan interpolasi terhadap data pita menggunakan pendekatan fungsi dasar Fourier, kemudian menghitung koefisien transport seperti konduktivitas listrik, resistivitas, dan koefisien Seebeck sebagai fungsi dari temperatur dan tingkat doping. Hasil ini diperoleh dalam kerangka pendekatan *Boltzmann transport equation* dengan asumsi waktu relaksasi konstan (constant relaxation time approximation). Dengan demikian, BoltzTraP2 memungkinkan analisis kuantitatif terhadap sifat transportasi elektron berbasis struktur pita yang diperoleh dari simulasi Quantum ESPRESSO.

3.3 Spesifikasi Perangkat

Pada penelitian ini menggunakan device ASUS dengan spesifikasi processor AMD Ryzen 5 3500U with Radeon Vega Mobile Gfx 2.10 GHz dengan RAM 8 GB dengan tipe sistem 64-bit operating system, x64-based processor berbasis Windows 11 Home Single Language.

3.4 Analisis Data Hasil Simulasi

3.4.1 Analisis Struktur Pita Energi dan DOS Film Tipis Emas

Analisis ini bertujuan untuk memperoleh gambaran struktur pita energi dan distribusi densitas keadaan (DOS). Data band structure diperoleh dari hasil simulasi jalur k-point pada zona Brillouin, kemudian divisualisasikan sebagai

hubungan dispersi energi $E(k)$ terhadap vektor gelombang k . Energi Fermi (E_f) menjadi acuan untuk mengidentifikasi sifat logam atau semikonduktor dari film tipis emas. DOS dihitung dari :

$$D(E) = \sum_{n,k} \delta(E - E_n(k)) \quad (3.1)$$

dimana $E_n(k)$ adalah energi pita ke- n pada titik k . Nilai $D(E_f)$ menunjukkan jumlah keadaan elektronik di sekitar energi Fermi yang berperan dalam konduktivitas listrik.

3.4.2 Analisis Pengaruh SOC pada Struktur Pita Energi Film Tipis Emas

Analisis ini difokuskan pada perbandingan hasil simulasi dengan dan tanpa efek SOC. Perubahan yang diamati meliputi pemisahan sub-band pada pita valensi, pergeseran energi, serta kemungkinan munculnya fenomena seperti *Rashba splitting*. Energi interaksi SOC secara umum ditulis:

$$H_{SOC} = \xi(r)L \cdot S \quad (3.2)$$

dimana $\xi(r)$ adalah parameter kopling spin-orbit, L adalah momentum sudut, dan S adalah spin elektron. Adanya H_{SOC} menyebabkan degenerasi pita terpecah, khususnya pada pita valensi, yang diamati dari hasil perbandingan struktur pita dengan dan tanpa SOC.

3.4.3 Analisis Hubungan Resistivitas, Konduktivitas Listrik dan Konduktivitas Termal Terhadap Temperatur

Analisis ini dilakukan menggunakan data transport yang dihitung dengan perangkat lunak BoltzTraP2 berdasarkan hasil band structure. Resistivitas listrik (ρ) dan konduktivitas listrik (σ) memiliki hubungan timbal balik :

$$\rho = \frac{1}{\sigma} \quad (3.3)$$

sementara itu, konduktivitas listrik dihitung dari persamaan transport Boltzmann dalam pendekatan waktu relaksasi:

$$\sigma_{\alpha\beta}(T, \mu) = \frac{1}{\Omega} \int \sigma_{\alpha\beta}(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_{\mu}(T, \varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \quad (3.4)$$

dengan

$$\sigma_{\alpha\beta}(\varepsilon) = \frac{e^2 \tau}{N} \sum_{i,k} v_{\alpha}(i, k) v_{\beta}(i, k) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{i, k}) \quad (3.5)$$

dimana τ adalah waktu relaksasi, $v_{\alpha}(i, k)$ adalah kecepatan grup elektron dan $\varepsilon_{i, k}$ adalah energi pita ke- i pada titik k . Konduktivitas termal elektronik (k_e) dikaitkan dengan konduktivitas listrik melalui hukum Wiedemann-Franz :

$$k_e = L\sigma T \quad (3.6)$$

dimana L adalah konstanta Lorenz ($L \approx 2.44 \times 10^{-8} W\Omega K^{-2}$). Analisis ini bertujuan untuk memberikan pemahaman mengenai sensitivitas material terhadap perubahan suhu dan relevansinya dalam aplikasi detektor termal.