

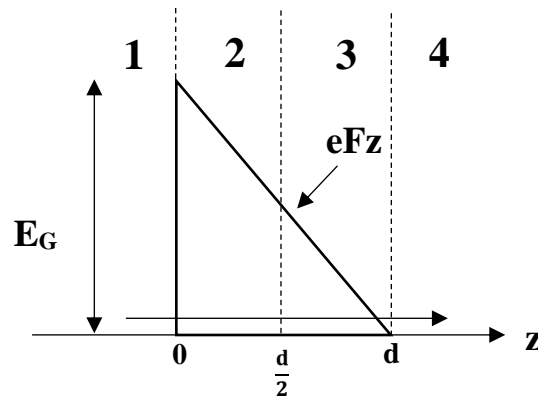
## BAB III

### METODE PENELITIAN

Penelitian ini menggunakan pemodelan yang dilakukan melalui studi literatur dan komputasi dengan metode semi numerik. Studi literatur dilakukan untuk mempelajari hal-hal yang diperlukan dalam pemodelan dan menyelesaikan persamaan Schrödinger untuk dioda sambungan p-n berbahan AGNR. Penyelesaian persamaan Schrödinger kemudian digunakan dalam perhitungan transmitansi dengan pendekatan fungsi Airy. Proses komputasi menggunakan bahasa pemrograman. Arus terobosan dihitung menggunakan metode *Gauss Legendre Quadrature*.

#### 3.1 Perhitungan Transmitansi

Transmitansi merupakan fraksi dari partikel yang datang terhadap partikel yang berhasil menerobos keluar. Untuk menghitung koefisien transmisi (transmitansi), digunakan syarat batas pada profil potensial persambungan p-n berbasis BAGNR



Gambar 3.1. Profil potensial persambungan p-n berbasis bilayer AGNR  
(Yansen, dkk. 2010)

Secara matematis, profil potensial di atas dapat dituliskan sebagai berikut:

$$V(z) = \begin{cases} 0, & z < 0 \\ E_G - eFz, & 0 \leq z \leq d \\ 0, & z > d \end{cases} \quad (3.1)$$

Dengan  $V$  adalah energi potensial penghalang, celah pita energi BAGNR ( $E_G$ ), muatan elektron  $e$ , medan listrik  $F$ , dan  $z$  sebagai posisi pada potensial penghalang.

Potensial di atas kemudian dimasukkan dalam persamaan Schrödinger sebagai berikut:

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= Re^{ik_1z} + Se^{-ik_1z}, & z < d_1 \\
\psi_2 &= CA_i(\zeta(z)) + DB_i(\zeta(z)), & d_1 < z < d_2 \\
\psi_3 &= EA_i(\xi(z)) + FB_i\xi(z), & d_2 < z < d_3 \\
\psi_4 &= Ge^{ik_2z} & z > d_3
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Dalam persamaan di atas,  $A_i(\zeta(z))$  dan  $B_i(\zeta(z))$  merupakan fungsi Airy jenis pertama, sementara  $A_i(\xi(z))$  dan  $B_i(\xi(z))$  merupakan fungsi Airy jenis kedua. Dengan  $\zeta(z) = \left(\frac{2m_1ef}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(\frac{E_g-E}{eF} - z\right)$  dan  $\xi(z) = \left(\frac{2m_2ef}{\hbar^2}\right)^{1/3} \left(\frac{E_g-E}{eF} - z\right)$ , dimana  $E$  merupakan energi elektron,  $m_1$  dan  $m_2$  adalah massa efektif elektron di tipe p dan tipe n. Karena lebar *barrier* adalah  $d$ , maka  $d_1 = 0$ ,  $d_2 = \frac{d}{2}$ , dan  $d_3 = d$ . Kemudian konstanta R, S, C, D, E, F, dan G dapat diket ahui dengan menggunakan syarat batas di  $z = 0, \frac{d}{2},$  dan  $d$ . Setelah seluruh konstanta diketahui, nilai transmitansi didapatkan melalui persamaan:

$$T = \frac{k_2}{k_1} \left(\frac{G}{R}\right) \left(\frac{G}{R}\right)^* \tag{3.3}$$

tanda \* merupakan konjugate.

### 3.2 Perhitungan Arus Terobosan

Perhitungan arus terobosan diawali dengan melakukan transformasi persamaan arus terobosan ke dalam bentuk integrasi metode *Gauss Legendre Quadrature*. Dalam perhitungan ini dilibatkan absisan ( $x_i$ ) dan bobot/*weights* ( $w_i$ ) yang bersesuaian. Bentuk integrasi dengan metode Gauss Legendre Quadrature adalah sebagai berikut:

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n W_i f(x_i) \tag{3.4}$$

Secara matematis, arus terobosan pada persambungan p-n berbasis *bilayer* AGNR dinyatakan dalam (Yansen, dkk. 2010)

$$I = \frac{2g_V e}{h} \int_0^{eV_b} [f_V(E) - f_C(E)]T(E) dE \tag{3.5}$$

$f_V(E) = (1 + \exp[(E - eV_b)/(k_B T)])^{-1}$  dan  $f_C(E) = (1 + \exp[E/(k_B T)])^{-1}$  adalah fungsi distribusi Fermi-Dirac untuk elektron pada pita valensi dan pita

konduksi,  $k_B$  adalah konstanta Boltzmann,  $h$  adalah konstanta Planck,  $g_v$  adalah degenerasi dari GNR ( $g_v = 1$ ) dan  $T(E)$  adalah transmitansi.

Dengan pemisalan

$$E = \left(\frac{e \cdot V_b}{2}\right)(x + 1) \quad (3.6)$$

maka,

$$dE = \left(\frac{e \cdot V_b}{2}\right) dx \quad (3.7)$$

dengan  $x$  adalah titik tempat fungsi akan dievaluasi.

Kemudian fungsi  $g(x)$  didefinisikan sebagai berikut.

$$g(x) = \left\{ f_V \left( \left( \frac{e \cdot V_b}{2} \right) (x + 1) \right) - f_C \left( \left( \frac{e \cdot V_b}{2} \right) (x + 1) \right) \right\} T \left( \left( \frac{e \cdot V_b}{2} \right) (x + 1) \right) \quad (3.8)$$

Lalu kita substitusikan persamaan 3.6, 3.7 dan 3.8 ke persamaan 3.5 sehingga diperoleh persamaan arus terobosan

$$I = \frac{g_v e^2 V_b}{h} \int_{-1}^1 g(x) dx \quad (3.9)$$

Persamaan 3.8 diselesaikan menggunakan metode Gauss Legendre Quadrature sebagai berikut:

$$I = \frac{g_v e^2 V_b}{h} \sum_{i=1}^N w_i g(x_i) \quad (3.10)$$

Dengan  $w_i$  adalah factor pengali (bobot),  $g(x_i)$  adalah nilai fungsi  $g(x)$  di titik  $x = x_i$  dan  $N$  adalah jumlah segmen.

### 3.3 Prosedur Penelitian

Dalam pelaksanaannya, penelitian ini dilakukan melalui beberapa tahapan sebagai berikut:

#### 1. Kajian Pustaka

Kajian pustaka dilakukan dengan mengumpulkan berbagai informasi dan materi mengenai penelitian yang dilakukan melalui berbagai media, seperti jurnal, buku, dan karya ilmiah. Hal ini dimaksudkan agar kita memahami penelitian yang akan dilakukan, khususnya mengenai pemodelan arus terobosan pada dioda persambungan p-n berbahan BAGNR.

## 2. Perumusan Algoritma

Perumusan algoritma dilakukan sesuai dengan metode yang digunakan dalam perhitungan, yaitu metode pendekatan fungsi Airy untuk perhitungan transmitansi dan metode *Gauss Legendre Quadrature* (MGLQ) untuk perhitungan arus terobosan.

## 3. Penulisan Program

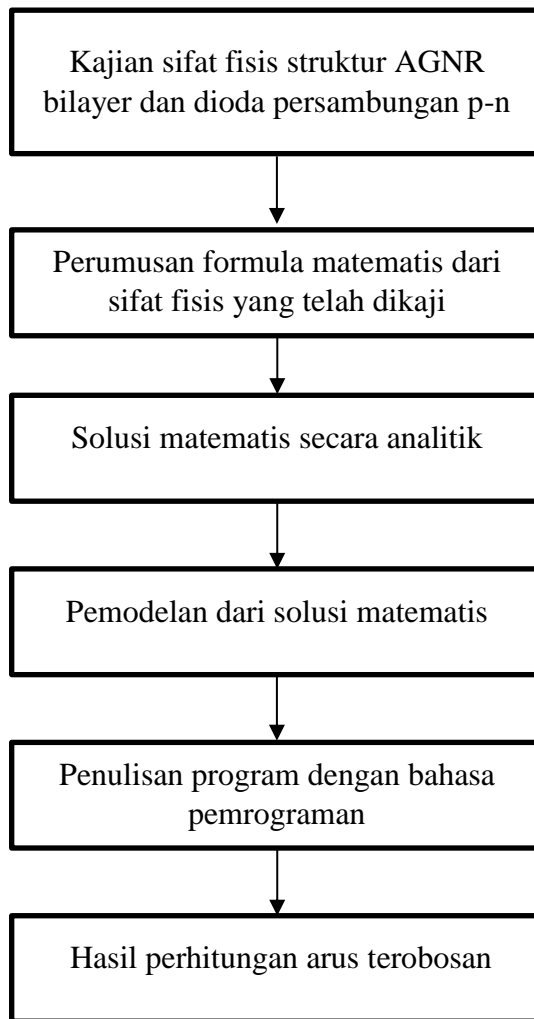
Penulisan program dilakukan dengan bahasa pemrograman menggunakan aplikasi *Wolfram Mathematica*. Penulisan program dan memasukkan data dilakukan berulang-ulang dengan parameter yang telah ditentukan sesuai tujuan penelitian.

### 3.4 Alur Penelitian

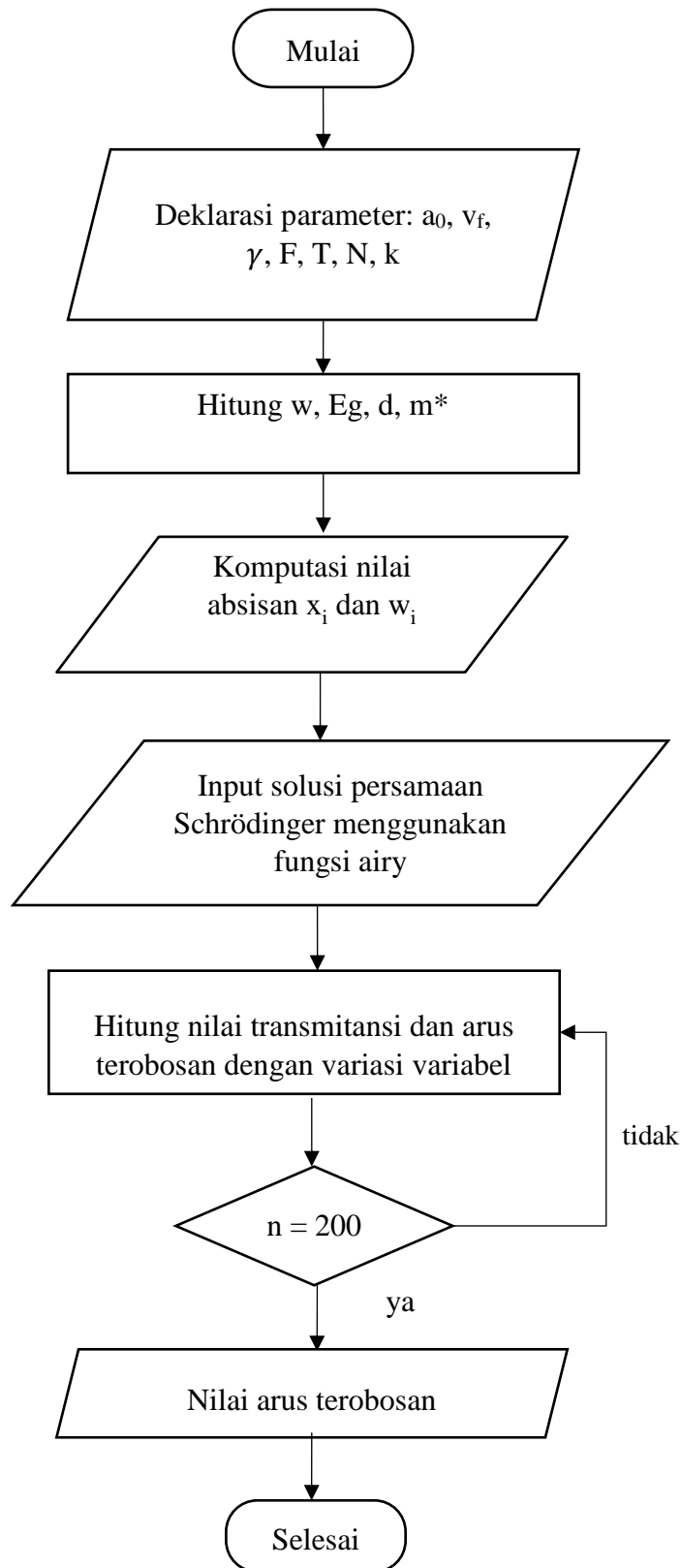
Penelitian ini dilakukan mengikuti alur penelitian sebagai berikut:

1. Mengkaji struktur Bilayer AGNR dan sifat-sifat fisis yang dimilikinya serta memahami model profil potensial untuk divais dioda persambungan p-n berbasis Bilayer AGNR.
2. Pemodelan elektron dengan persamaan Schrödinger kemudian menggunakan metode pendekatan fungsi *airy* sebagai solusi persamaan Schrödinger. Solusi persamaan Schrödinger kemudian diselesaikan pada model profil potensial dengan memasukan sejumlah syarat batas.
3. Setelah penyelesaian persamaan Schrödinger menggunakan pendekatan fungsi *airy* didapatkan, dilakukan perhitungan transmitansi dengan bantuan komputer dan bahasa pemrograman.
4. Setelah model persamaan dibuat, program ditulis dengan menyesuaikan variabel yang akan diubah menggunakan aplikasi pemrograman MATLAB dan *Wolfram Mathematica*.
5. Hasil perhitungan arus terobosan dengan mengubah-ubah nilai tegangan, suhu dan indeks N AGNR pada mode operasi aktif-maju dan aktif-mundur ditampilkan.

Diagram alur penelitian ditunjukkan oleh gambar 3.3 berikut ini:



Gambar 3.3. diagram alur penelitian.



Gambar 3.4. *Flowchart* perhitungan arus terobosan.