



**STUDI MATERIAL ZnO SEBAGAI BASIS PENGEMBANGAN
MATERIAL OPTOELEKTRONIK DENGAN METODE DFT**

SKRIPSI

Oleh

**Fajar Alfian Yusuf
NIM 161810201002**

**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER
2020**



**STUDI MATERIAL ZnO SEBAGAI BASIS PENGEMBANGAN
MATERIAL OPTOELEKTRONIK DENGAN METODE DFT**

SKRIPSI

diajukan guna melengkapi tugas akhir dan memenuhi salah satu syarat untuk menyelesaikan Program Studi Fisika (S-1) dan mencapai gelar Sarjana Sains

Oleh

**Fajar Alfian Yusuf
NIM 161810201002**

**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER
2020**

PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan dengan penuh rasa sayang dan rasa syukur untuk :

1. Kedua orang tua saya, Ibu Sunarmi dan Ayah Rupai yang selalu memberikan doa, dukungan, kepercayaan, dan pengorbanan tiada tara yang membuat hati merasakan kedamaian yang dipenuhi penuh cinta kasih .
2. Seluruh orang tua ditempat belajar saya, dosen, guru yang telah membagi ilmu dan pengalaman berharga dengan penuh rasa sayang dan tanggung jawab.
3. Seluruh sahabat saya, keluarga saya yang kesekian.
4. Almamater Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

MOTTO

“Hanya kepada Engkaulah kami meyembah dan hanya kepada Engkaulah kami
mohon pertolongan”

(QS. Al-Fatihah)

“Maka nikmat Tuhan kamu yang manakah yang kamu dustakan”

(QS. Ar-Rahman)



PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini.

Nama : Fajar Alfian Yusuf

Nim : 161810201002

Menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul “Studi Material ZnO sebagai Basis Pengembangan Material Optoelektronik dengan Metode DFT” adalah benar hasil karya saya sendiri kecuali kutipan yang sudah saya sebutkan sumbernya dan belum pernah diajukan ke instansi mana pun. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya dengan sikap ilmiah yang lurus dijunjung tinggi.

Penelitian ini merupakan bagian dari penelitian bersama dosen dan mahasiswa. Penelitian ini hanya dapat dipublikasikan dengan mencantumkan nama dosen pembimbing. Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya, tanpa ada paksaan dan tekanan dari pihak manapun. Saya bersedia mendapatkan sanksi akademik apabila ternyata dikemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember, Desember 2020

Yang menyatakan,

Fajar Alfian Yusuf
NIM.161810201002

SKRIPSI

**STUDI MATERIAL ZnO SEBAGAI BASIS PENGEMBANGAN
MATERIAL OPTOELEKTRONIK DENGAN METODE DFT**

Oleh :

Fajar Alfian Yusuf
NIM 161810201002

Pembimbing

Dosen Pembimbing Utama : Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si.

Dosen Pembimbing Anggota : Dr. Lutfi Rohman, S.Si., M.Si.

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Studi Material ZnO sebagai Basis Pengembangan Material Optoelektronik dengan Metode DFT” telah disetujui pada:

hari, tanggal :

tempat : Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan
Alam Universitas Jember.

Tim Penguji :

Ketua,

Anggota I,

Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si.
NIP 196912251999031001

Dr. Lutfi Rohman, S.Si., M.Si.
NIP 197208201998021001

Anggota II,

Anggota III

Dr. Ratna Dewi Syarifah. S.Pd., M.Si.
NIP 198803202019032011

Drs. Imam Rofi'i, GDPHys., M.Sc.
NIP 196805081992011001

Mengesahkan

Dekan,

Drs. Achmad Sjaifullah, M.Sc., Ph.D.
NIP 195910091986021001

RINGKASAN

Studi Material ZnO sebagai Basis Pengembangan Material Optoelektronik dengan Metode DFT; Fajar Alfian Yusuf, 161810201002; 2020; 57 Halaman; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Nano sains dan teknologi telah merevolusi berbagai sektor industri. Pengembangan material nanopartikel dewasa ini sangat penting. Kelebihan yang dimiliki oleh nanopartikel ada pada nilai perbandingan antara luas permukaan dan volume yang lebih besar jika dibandingkan dengan partikel sejenis dalam ukuran besar. Aplikasi yang sering dipakai terkait nanopartikel misalnya material ZnO (*zinc Oxide*) yang ditentukan oleh sifat fundamentalnya. ZnO banyak dipakai dalam berbagai keperluan, sebagai katalis maupun sebagai pendukung katalis, dan sebagai semikonduktor. ZnO memiliki sejumlah keunikan pada senyawa kimianya dapat berpadu dengan senyawa semikonduktor. ZnO merupakan material semikonduktor dengan tipe-n. ZnO memiliki beberapa struktur yaitu *wurtzite* (B4), *zinblend* (B3), dan *roksalt* (B1).

Pada penelitian ini dilakukan simulasi secara komputasi menggunakan metode DFT dengan material ZnO struktur *wurtzite*. Alasan memakai struktur *wurtzite*, karena struktur ini adalah struktur yang paling stabil diantara tiga struktur dari ZnO. Hal yang menjadikan material ZnO sebagai bahan penelitian ini, karena material ZnO dapat dikembangkan sebagai basis pengembangan optoelektronik berdasarkan sifatnya fundamentalnya. Penelitian ini menghitung besaran celah pita dan DOS (*Density Of State*) dari material ZnO. Penelitian menggunakan DFT yang merupakan salah satu metode komputasi yang sering digunakan riset material yang dikembangkan berdasarkan prinsip mekanika kuantum yang berguna untuk mempelajari dan memprediksi sifat - sifat fisis bahan. Penelitian menggunakan *software* HiLAPW dirancang khusus untuk dapat melakukan perhitungan struktur pita dan DOS dengan lebih akurat dibanding dengan program DFT yang lain seperti *Quantum Espresso* dan VASP, meskipun

secara komputasi sangat berat dibanding keduanya. Pada penelitian ini diketahui sifat fisis elektronik dari bahan ZnO, yaitu karakter dari DOS dan struktur pita energi menggunakan metode DFT dengan *software* HiLAPW yang dikembangkan oleh Prof. Tamio Oguchi (Jepang).

Hasil perhitungan DOS menunjukkan bahwa material ZnO memiliki sifat sebagai bahan konduktif yang terlihat pada pita valensi dan pita konduksi. Hal ini menjadikannya media baik untuk membatasi arus listrik yang keluar maupun arus listrik yang masuk, dimana konduktansinya bervariasi tergantung pada arus dan tegangan yang diberikan. Hasil perhitungan struktur pita ini tampak bahwa ZnO merupakan material semikonduktor dengan celah pita langsung, dimana titik maksimum dan minimum antara pita valensi dan pita konduksi sejajar. Pada struktur pita energi yang diamati disekitar tingkat energi fermi dan dari penelitian ini menunjukkan bahwa material ini memiliki sifat semikonduktor. Material ini menunjukkan bahwa material bersifat semikonduktor dengan adanya celah pita dengan konduktivitas listrik yang berada pada insulator dan konduktor. Pengaruh variasi konstanta kisi untuk temperatur yang berbeda pada material ZnO mempengaruhi besaran celah pita, dimana semakin besar suhu kalsinasi akan mempengaruhi sifat dari partikel dan celah pita akan semakin kecil.

Penelitian yang menggunakan HiLAPW memperoleh hasil dengan energi celah pita sebesar 0.732 eV. HiLAPW adalah suatu program yang tidak perlu adanya *pseudopotential* akan tetapi memerlukan sebuah input dari struktur kristal dan jenis atom material yang akan dihitung secara komputasi. Perbandingan penelitian ini dilakukan dengan simulasi *Quantum Espresso* dimana input dari simulasi *Quantum Espresso* memerlukan adanya *pseudopotential* yang mana perlu adanya riset lagi terkait masing-masing material. Hasil yang didapatkan dari simulasi *Quantum Espresso* memperoleh energi celah pita sebesar 0.65 eV. Hal ini membuktikan bahwa HiLAPW menghitung secara komputasi lebih baik tanpa adanya input *pseudopotential* dan hasilnya mendekati nilai dari hasil eksperimen meskipun masih jauh dari hasil eksperimen yang menghasilkan energi celah pita sebesar 3.37 eV

PRAKATA

Puji syukur kehadiran Allah SWT atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul Studi Material ZnO sebagai Basis Pengembangan Material Optoelektronik dengan Metode DFT". Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) pada Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Penyusunan skripsi ini tidak terlepas dari bantuan, pengetahuan dan bimbingan berbagai pihak. Oleh karena itu, dalam kesempatan ini penulis menyampaikan terimakasih kepada:

1. Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si selaku Dosen Pembimbing Utama dan selaku Dosen Pembimbing Akademik dan Dr. Lutfi Rohman, S.Si., M.Si selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah membimbing dan memotivasi saya, memberikan ilmu, arahan, dan segala hal yang mendukung saya menyelesaikan skripsi ini;
2. Dr. Ratna Dewei Syarifah. S.Pd., M.Si selaku Dosen Penguji I dan Drs. Imam Rofi'i, GDPHys., M.Sc selaku Dosen Penguji II yang telah meluangkan waktu dan pikiran untuk tambahan, kritik, dan saran yang membangun demi kesempurnaan skripsi ini;
3. Bapak Edi selaku teknisi laboratorium Fisika Komputasi Jurusan Fisika FMIPA Universitas Jember yang telah membantu menyelesaikan penulis menyelesaikan kegiatan.
4. Teman-teman seperjuangan angkatan 2016 Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember yang telah memberikan semangat, doa, dorongan, dan kasih sayang;
5. Semua pihak yang berjasa dan tidak dapat disebutkan satu per satu.

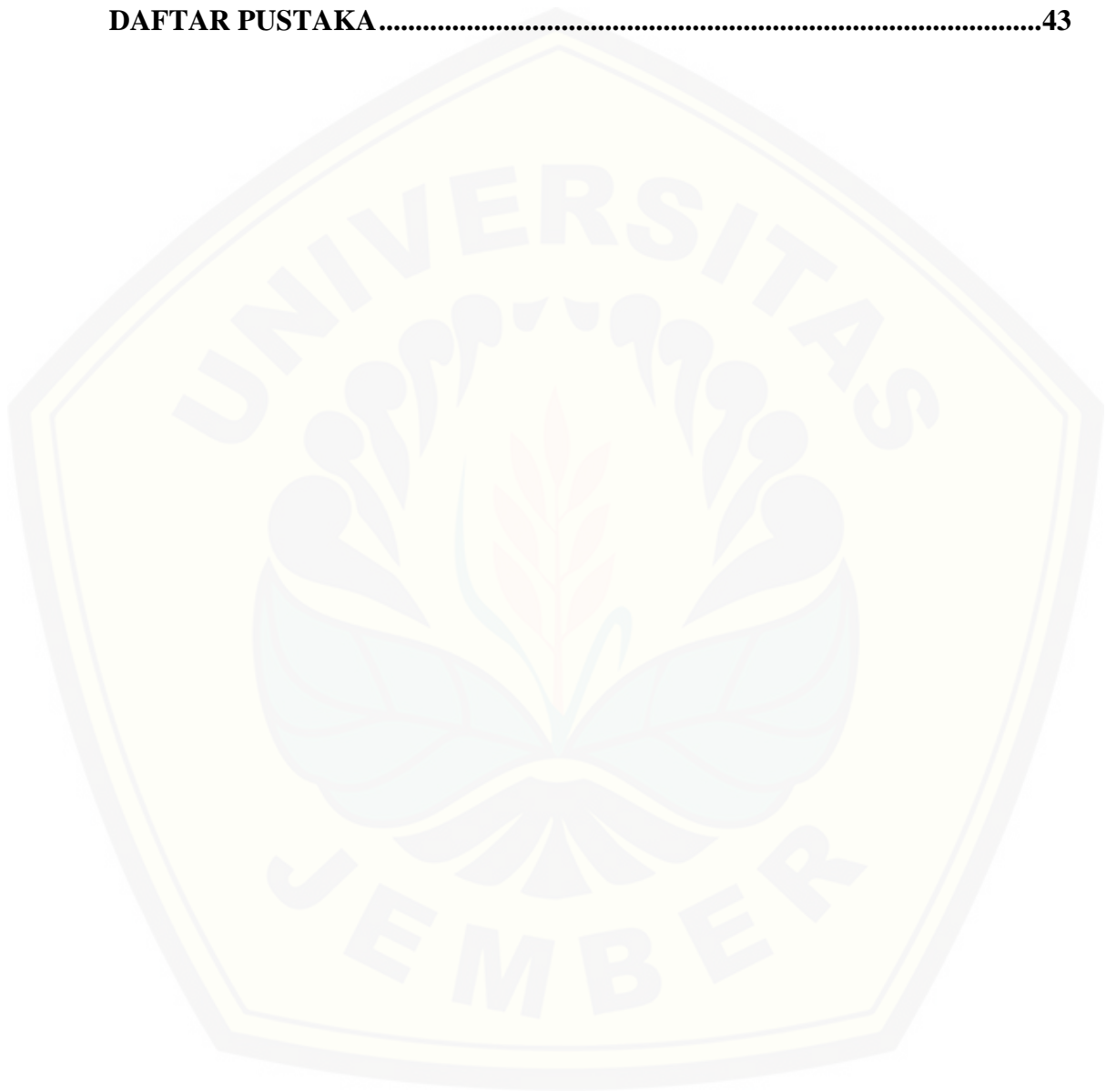
Jember, Desember 2020

Penulis

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN SAMPUL.....	i
HALAMAN JUDUL	ii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iii
HALAMAN MOTTO	iv
HALAMAN PERNYATAAN	v
HALAMAN HALAMAN PEMBIMBING	vi
HALAMAN PENGESAHAN.....	vii
RINGKASAN/SUMMARY	viii
PRAKATA.....	x
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR GAMBAR.....	xiv
BAB 1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Batasan Masalah.....	4
1.4 Tujuan	5
1.5 Manfaat Penelitian	5
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA.....	6
2.1 Seng Oksida (ZnO).....	6
2.2 Struktur Kristal ZnO	6
2.3 Struktur Pita	7
2.4 Pita Energi.....	9
2.5 Brillouin Zone (Zona Brillouin).....	11
2.6 <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	13
2.6.1 Teori Khon-Sham	14
2.7 <i>Density Of State</i> (DOS)	15
2.8 Gnuplot.....	16
2.9 HiLAPW.....	17
BAB 3. METODE PENELITIAN.....	21
3.1 Rancangan Kegiatan Penelitian	21
3.2 Jenis dan Sumber Data Penelitian	22
3.3 Variabel Penelitian	22
3.4 Kerangka Pemecahan Masalah.....	23
3.5 Prosedur Penelitian	24
3.5.1 Alat dan Bahan	24
3.5.2 <i>Pre-Processing Step</i>	24
3.5.3 <i>Simulation Step</i>	25
3.6 Metode Analisis Data	28
BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN.....	30
4.1 DOS dan Struktur Pita pada berbagai Nilai Konstanta Kisi..	30

4.2 Perbandingan Perhitungan Celah Pita secara Komputasi dan Eksperimen	37
BAB 5. PENUTUP	41
5.1 Kesimpulan	41
5.2 Saran.....	42
DAFTAR PUSTAKA.....	43



DAFTAR TABEL

	Halaman
2.1 Executable dan data terkait file HiLAPW.....	17
3.1 Konstanta material ZnO wurtzite.....	22
4.1 Celah Pita ZnO terhadap Variasi Suhu Kalsinasi (Konstanta Kisi).....	36



DAFTAR GAMBAR

	Halaman
2.1 Struktur <i>Wurtzite</i>	7
2.2 Tingkat pita energi pada meterial silicon	9
2.3 Tingkat energi pada atom tunggal dan pita energi pada kristal	10
2.4 Struktur pita energi	10
2.5 Heksagonal Primitif	12
2.6 Relativistik Skalar pada Struktur Pita	13
3.1 Diagram Alir Rancangan Penelitian.....	21
3.2 Diagram Alir Kerangka Pemecahan Masalah	23
3.3 file input sets.in	25
3.4 Isi Perintah Perhitungan SCF	26
3.5 Isi Perintah Perhitungan DOS	26
3.6 Isi Perintah Perhitungan Nilai Eigen.....	27
3.7 Isi Perintah Perhitungan <i>Band Structure</i>	28
4.1 (a) DOS dan (b) Struktur pita, pada suhu kalsinasi 0°C.....	31
4.2 (a) DOS dan (b) Struktur pita, pada suhu kalsinasi 450°C.....	31
4.3 (a) DOS dan (b) Struktur pita, pada suhu kalsinasi 600°C.....	32
4.4 (a) DOS dan (b) Struktur pita, pada suhu kalsinasi 750°C.....	32
4.5 Grafik Hubungan Temperatur dengan energi Celah Pita.....	37
4.6 Perbandingan Perhitungan Celah pita yang	38
4.7 Struktur Pita dengan <i>Quantum Espresso</i>	39

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Ilmu dan teknologi nano adalah ilmu pengetahuan tentang fenomena material dalam skala nano dan bagaimana caranya mengontrol suatu zat material dan sistem pada skala nanometer, sehingga dapat menghasilkan sebuah fungsi baru yang belum pernah ada sebelumnya. Sains dan teknologi nano merupakan suatu kemajuan ilmu dan rekayasa material yang berkembang pada saat ini. Perkembangan teknologi tersebut seiring dengan peningkatan ilmu pengetahuan dan teknologi pada berbagai bidang seperti kimia, fisika, biologi, dan kemajuan dalam mengolah data yang didukung oleh peralatan yang modern. Adanya teknologi dapat diupayakan material yang lebih efektif dan efisien, terutama dengan kecenderungan upaya *miniaturisasi* perangkat teknologi. Pengembangan teknologi nano ini didasarkan pada eksplorasi sifat atau karakteristik kimia, fisika dan biologi pada skala nano (Ristian, 2013).

Hadirnya teknologi nano memiliki peranan penting dalam pemanfaatan suatu material khususnya dalam material ukuran nano. Teknologi nano terus dikembangkan karena memiliki berbagai kelebihan dibandingkan dengan material yang berukuran lebih besar. Nano teknologi membantu banyak meningkatkan, bahkan merevolusi, banyak sektor teknologi dan industri misalnya saja teknologi informasi, keamanan tanah air, kedokteran, transportasi, energi, keamanan pangan, dan ilmu lingkungan, dan masih banyak diantara lainnya (Initiative, 2019).

Kelebihan utama yang dimiliki oleh nanopartikel ini adalah memiliki aktif area energi yang dihasilkan lebih besar. Nanopartikel dapat diaplikasikan ke dalam berbagai bidang seperti kesehatan, lingkungan, pertanian, pangan, tekstil, industri kosmetik, elektronika, semikonduktor dan energi. Aplikasi nanopartikel pada bidang semikonduktor dalam hal ini diketahui sangat bergantung pada keunggulan sifat optik material yang digunakan. Salah satu material yang sering digunakan untuk aplikasi semikonduktor yaitu seng oksida (ZnO). Prinsip

aplikasi pada partikel nano dari ZnO sangat ditentukan oleh sifat fundamental, baik pada sifat fisiknya maupun sifat kimianya (Cardona, 2011).

ZnO merupakan salah satu kristal yang telah dipakai dalam banyak keperluan, sebagai katalis maupun pendukung katalis dalam pembuatan biodiesel, dan sebagai semikonduktor (Dehkoda et. al., 2010). ZnO merupakan sebuah material yang memiliki berbagai karakteristik yang unik. Sejumlah keunikan yang dimiliki yaitu memiliki *gap* energi sebesar 3.37 eV dan senyawa kimianya dapat berpadu dengan senyawa lain serta ZnO adalah material semikonduktor tipe-n (Yulianti, 2012). Material ZnO memiliki beberapa struktur yaitu *wurtzite* (B4), *zinblend* (B3), dan *rocksalt* (B1). Wurtzite adalah struktur yang paling stabil pada kondisi lingkungan (Özgür et. al., 2005). Sifat dari ZnO sudah dipelajari sejak lama yang meliputi sifat listrik dan sifat optik. Berdasarkan sifat dan struktur yang dimiliki, ZnO dapat diaplikasikan pada berbagai bidang contohnya adalah karet, pencegahan korosi pada reaktor nuklir, bahan pembuatan elektronik dan masih banyak lagi (Kim et. al., 2007).

Penelitian tentang struktur dan sifat elektronik dari ZnO telah banyak dilakukan baik secara eksperimen maupun secara teori. Kajian tentang sifat elektronik dari ZnO telah banyak dilakukan dengan berbagai metode. Metode DFT (*Density Functional Theory*) merupakan salah satu metode yang sering digunakan oleh banyak peneliti dalam bidang komputasi. Metode DFT dikembangkan berdasarkan prinsip-prinsip mekanika kuantum. DFT merupakan teori yang berguna untuk mempelajari perilaku-perilaku keadaan dasar suatu sistem elektron melalui prinsip variasi. Dalam suatu sistem atom yang kompleks diperlukan penyelesaian persamaan Schrödinger dan itu tidak dapat dilakukan secara eksak, tetapi dengan metode penghampiran atau metode pendekatan yang sudah sering dilakukan untuk menyelesaikan suatu persamaan Schrödinger. DFT memungkinkan mempelajari berbagai perilaku suatu sistem melalui besaran densitas fungsional kerapatan dimana fungsi gelombang partikel tidak dicari sendiri-sendiri, namun untuk mempercepat komputasi digagas adanya fungsi kerapatan awan elektron yang mewakili elektron-elektron dalam atom. DFT dengan demikian adalah salah satu gagasan eksak tentang masalah dengan banyak

partikel. Oleh karena itu, diperlukan suatu teknik atau metode pendekatan, karena metode DFT ini adalah salah satu metode yang mempelajari karakteristik struktur atom yang dipandang lebih mudah dan lebih praktis dan mudah karena hanya melibatkan besaran fungsi kerapatan dengan derajat kebebasan yang lebih sedikit untuk mendapatkan hasil. Teori Khon-Sham merupakan suatu pendekatan potensial pada tingkat dasar atom, hasil ini diperoleh dengan perilaku fungsi kerapatan Khon-Sham dan bagian elektronik potensial untuk tingkat dasar atom (Sulistiyani dan Nurwantoro, 2010).

Berdasarkan Darma et. al. (2015) penelitian sebelumnya pernah menyelidiki sifat elektronik dan magnetik pada ZnO dan pengotor atau *Dopping* Cu dengan menggunakan *Quantum Espresso*, akan tetapi peneliti menemukan sebuah kesalahan yaitu pada struktur *wurtzite* tanpa koreksi Hubbard, kemudian penelitian dilanjutkan dengan penggabungan metode koreksi Hubbard, dimana koreksi Hubbard adalah model perkiraan dan penggambaran pada fisika padat. Hasil yang didapatkan dari penelitian ini menunjukkan bahwa total DOS (*Density Of State*) yang simetris antara elektron spin atas dan bawah menunjukkan momen magnetik total nol dengan menggunakan pendekatan GGA (*Generalized Gradient Approximation*).

Berdasarkan penelitian sebelumnya maka akan dilakukan sebuah penelitian dengan material ZnO menggunakan metode DFT namun menggunakan software HiLAPW yang dikembangkan oleh Prof. Tamio Oguchi dari *Lab Theoretical Nanotechnology* dari Sanken Osaka University Jepang untuk mendapatkan hasil yang berbeda tanpa *dopping* dan menggunakan variasi konstanta kisi yang berbeda untuk masing – masing suhu kalsinasi. HiLAPW merupakan sebuah software yang dirancang untuk melakukan perhitungan pita struktur berdasarkan teori fungsi kerapatan dan fungsi potensial. Metode pada software ini dipilih karena dapat memodelkan sistem dengan akurat dan memberikan data dalam tingkat mikroskopik. Metode DFT juga dapat menentukan karakteristik bahan melalui sebuah proses komputasi yang lebih ringan dengan hasil yang akurat. Pada penelitian ini juga dipelajari sifat fisis elektroniknya yang berbasis pada struktur ZnO, oleh sebab itu pada penelitian ini ingin diketahui dan dipelajari

bagaimana sifat fisis elektronik bahan ZnO menggunakan software HiLAPW. File input yang diperlukan dalam menjalankan komputasi ini yaitu file input *sets.in* yang berisi tentang informasi struktur kristal, polarisasi dari *nspin*, informasi *space group* (grup ruang) yang berisi konfigurasi dari ruang simetris, konstanta kisi atau parameter kisi, posisi atom vektor yang diberikan dalam satuan kisi konvensional, dan nilai k-point yang dihitung sebagai titik koordinat. Pada penelitian simulasi DFT ini diketahui besaran penting dalam rekayasa bahan seperti DOS (*Density Of State*) dan struktur pita energi (*energy band structure*) dari bahan ZnO dengan melakukan perhitungan SCF (*Self-Consistent Field*) melalui simulasi HiLAPW. Hasil yang didapatkan berupa kurva struktur pita energi yang akan diplot melalui software Gnuplot. Fungsi dari DOS itu sendiri adalah suatu sistem yang menjelaskan jumlah keadaan elektron yang harus ditempati pada setiap energi. Sedangkan rekayasa suatu bahan merupakan suatu proses atau mengubah celah pita suatu material dengan mengendalikan komposisi paduan atau membuat bahan berlapis dengan komposisi bergantian.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas, rumusan masalah pada penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Bagaimana struktur pita energi dan nilai DOS dari bahan ZnO ?
2. Apa makna fisis dari struktur pita energi dan DOS yang telah didapat untuk bahan ZnO ?
3. Bagaimana nilai celah pita energi terhadap variasi konstanta kisi untuk temperatur yang berbeda ?

1.3 Batasan Masalah

Batasan Masalah pada penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Simulasi yang dilakukan adalah dengan menggunakan menggunakan metode DFT yang direalisasikan dalam software HiLAPW.
2. Bahan material yang menjadi penelitian adalah ZnO.
3. Sifat fisis bahan yang ditinjau adalah DOS dan *energy band structure*.

4. Struktur yang ditinjau adalah *wurtzite*.

1.4 Tujuan

Penelitian ini dilakukan bertujuan untuk mengetahui struktur pita energi dan nilai DOS dari bahan ZnO yang selanjutnya digunakan sebagai acuan untuk menentukan sifat fisis elektronik ZnO berdasarkan hasil yang ditinjau dari output pita energinya dan nilai DOS.

1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat dari penelitian tugas akhir ini adalah untuk mengetahui sifat elektronik dari ZnO yang dapat menjelaskan karakteristik bahan tersebut serta potensi yang dapat diaplikasikan untuk perkembangan material optoelektronik yang berguna menghasilkan peralatan yang jauh lebih baik dan lebih berguna, terutama yang berkaitan dengan teknologi. Hasil dari penelitian ini dapat digunakan sebagai acuan dalam penelitian selanjutnya yang berbasis pada bidang komputasi khususnya pada metode DFT.

BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

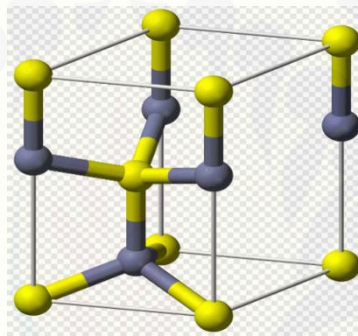
2.1 Seng Oksida (ZnO)

ZnO merupakan material nanopartikel semikonduktor anorganik dengan tipe-n yang mempunyai struktur kristal *wurtzite* (heksagonal) yang pada umumnya bahan ini berbentuk serbuk putih dan tidak bersifat *toxic* (beracun) serta memiliki mobilitas elektron dan stabilitas termal tinggi. Material ini memiliki energi celah pita langsung dengan lebar celah sebesar 3.37 eV (Yuwono, 2015). ZnO merupakan bahan semikonduktor yang memiliki celah pita energi yang lebar dari kelompok semikonduktor II-VI. Material ZnO memiliki lebar celah pita energi ZnO tergantung dari ukuran partikelnya ketika dalam orde nanometer (Abdullah, 2009). ZnO berwarna putih yang banyak digunakan oleh industri plastik, keramik, *rubber* (karet), cat kosmetik bahkan ZnO dalam ukuran nano banyak digunakan sebagai bahan semikonduktor. ZnO secara luas diproduksi menggunakan proses kering dimana dengan cara oksidasi uap Zn yang ada di udara pada proses pembakaran Zn pada suhu sekitar 1.100°C (Hyman, 1989). ZnO mempunyai titik lebur mencapai 1.975°C, berat molekul 81,4 g/mol, densitas sebesar 5,6 g/mL dan titik didih sekitar 2.360°C meskipun ZnO mengalami dekomposisi pada suhu yang akan mencapai titik leburnya senyawa ini hampir tidak larut pada air tetapi dapat larut pada senyawa yang bersifat basa (Klingshirn et. al., 2010). Kelebihan ZnO adalah dapat ditumbuhkan pada substrat dengan suhu yang relatif rendah yaitu berkisar antara 200-400°C, hal tersebut yang membuat ZnO terlihat menarik karena pembentukan sifat kristal dibawah suhu 400°C (Yanti, 2013).

2.2 Struktur Kristal ZnO

Material zat padat dapat diklarifikasikan berdasarkan keteraturan pada bahan dimana atom atau ion yang tersusun secara teratur antara atom satu dengan atom lain disebut kristal. Material kristal merupakan suatu kondisi atom yang terletak dalam susunan yang berulang dalam jarak atomik yang besar, oleh karena itu akan muncul urutan panjang. Proses solidifikasi (pemadatan) dimana atom-

atom akan menempatkan sendiri ke dalam pengulangan pola tiga dimensi dimana masing-masing atom terikat dengan atom tetangga yang letaknya berdekatan (Morkoç dan Özgür, 2008). Sifat fisik dari struktur nano ZnO merupakan sebuah catatan yang penting bahwa ukuran dari material semikonduktor akan menyusut secara kontinyu menuju skala nanometer atau bahkan lebih kecil dan beberapa dari sifat fisik akan mengalami perubahan yang dikenal dengan efek ukuran kuantum. ZnO memiliki struktur hexagonal (*wurtzite*) yang mana bergantian membentuk bidang dasar dan memiliki dua sub kisi yaitu Zn^{2+} dan O^{2-} (Surono dan Sutanto, 2014). Struktur wurtzite merupakan struktur dari ZnO yang paling stabil pada temperatur kamar (Baruah dan Samir Dutta, 2012).



Gambar 2.1 Struktur *Wurtzite* (Behera, 2009)

Pada gambar 2.1 struktur heksagonal memiliki *point group* $6mm$ dan *space group* $P63mc$ atau $C6v$. parameter kisi pada gambar 2.1 menggunakan $a = 3,25 \text{ \AA}$ dan $c = 5,2 \text{ \AA}$ dan rasio c/a adalah 1.633 \AA (Behera, 2009).

2.3 Struktur Pita

Teori struktur pita padatan dapat diterapkan untuk menjelaskan sifat materi, baik sifat fisik dan material. Landasan teori struktur pita adalah teori yang disebut sebagai teorema Bloch (Bloch, 1928) yang dapat ditulis

$$[\nabla^2 + V(r)] \psi(r) = \epsilon \psi(r) \quad (2.1)$$

Struktur pita dapat berubah ketika ukuran sistem berkurang dengan kata lain bahwa konsep pita energi juga berlaku untuk sistem nanoskopik. Batasan ukuran sistem memiliki 2 konsekuensi yaitu, (i) gelombang vektor k menjadi diskrit dan (ii) fungsi gelombang dialokasikan dalam ruang momentum. Rantai monoatomik

atom N dengan parameter kisi. Vektor gelombang kisi yang dipisahkan oleh gelombang :

$$\Delta k^1 \frac{2\pi}{aN} = \frac{2\pi}{L} \quad (2.2)$$

dimana $L = Na$ adalah panjang rantai. Jika nilai N menjadi kecil, maka pemisah antara gelombang vektor k menjadi lebih besar. Δk^1 . Pernyataan (ii) sesuai dengan prinsip ketidakpastian Heisenberg, momentum kristal menjadi didelokasi sebagai berikut :

$$\Delta x \Delta p > h \quad (2.3)$$

dengan mensubstitusikan kristal momentum $p = \frac{h}{2\pi} k$ dan ukuran dari nanokristal $\Delta x = L$ dari persamaan tersebut akan didapatkan relasi dari didelokasi gelombang vektor terbatas ukuran sistem :

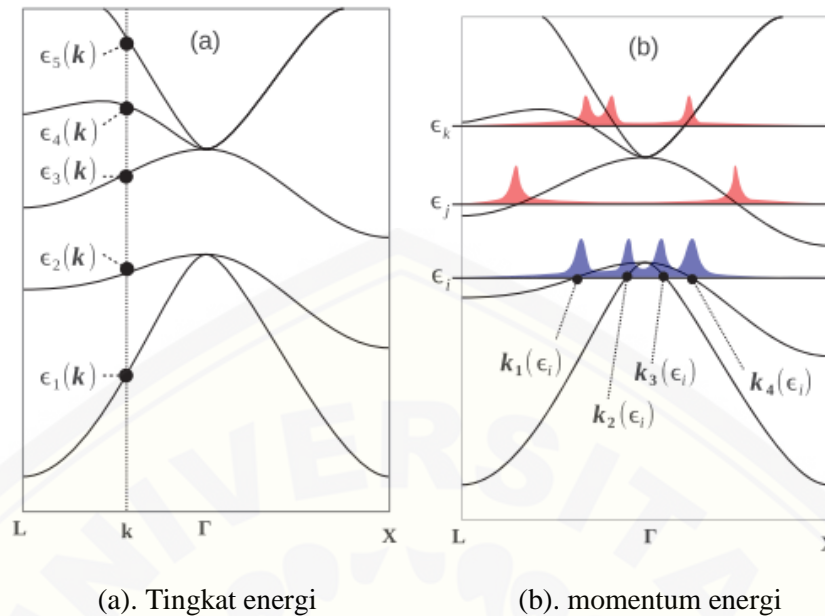
$$\Delta k^2 > \frac{2\pi}{L} \quad (2.4)$$

Fakta bahwa pemisah vektor gelombang diskrit k (1) dan didelokasi memiliki urutan penamaan yang sama untuk struktur pita hingga sistem dan fungsi gelombang $\psi_{n,k}(r)$ ruang sistem yang dibatasi kemudian dimodifikasi :

$$\psi_{n,k}(r) = \omega(r) u_{n,k}(r).e^{ik.r} \quad (2.5)$$

Pertimbangan masalah terbaik dari perhitungan struktur pita dari teorema Bloch (gambar 2.2a). Dimana yang kita tahu fungsi gelombang ruang nyata $\phi_i(r)$ dari eigenstate dengan Kohn-Sham molecul orbital dari perhitungan DFT aperiodik dari sistem nanoskopik dan menetapkan sesuai dengan momentum kristal k setiap molecul orbital energi ϵ_i dapat melintasi satu atau beberapa pita n,k (gambar 2.2b), lalu dapat dianggap bahwa molecul orbital $\phi_i(r)$ sebagai kombinasi dari pita A $\psi_{n,k}(r)$,

$$\phi_i(r) = \sum_{a=0}^A d_a \psi_{n_a, k_a}(r) \quad (2.6)$$



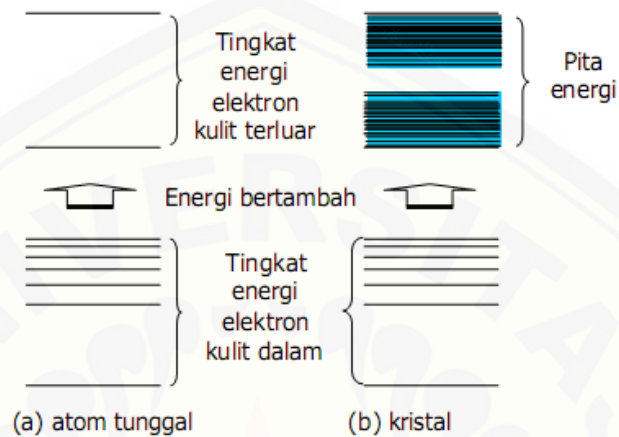
Gambar 2.2 Tingkat pita energi pada material *silicon* (Hapala et. al., 2013)

Pada gambar 2.2a persamaan (2.6) pendekatan biasa untuk mendapatkan struktur kristal tak terbatas menggunakan teorema Bloch. Vektor k diberikan spektrum energi $\epsilon_{n,k}$ ditemukan. Gambar 2.2b pendekatan terbalik dalam sistem terbatas, kondisi energi ϵ_i tertentu pada orbital ϕ_i , vektor k yang sesuai harus ditemukan. Orbital itu adalah kombinasi linear dari semua fungsi gelombang Bloch $\psi_{n,k}(r)$ sesuai n,k dengan energi orbital ϵ_i melintasi pita energi $\epsilon_n(k)$, dimana untuk $\phi_i(r)$ tertentu, baik pada indeks n_a, k_a maupun koefisien d_a diketahui secara eksplisit (Hapala et al., 2013)

2.4 Pita Energi

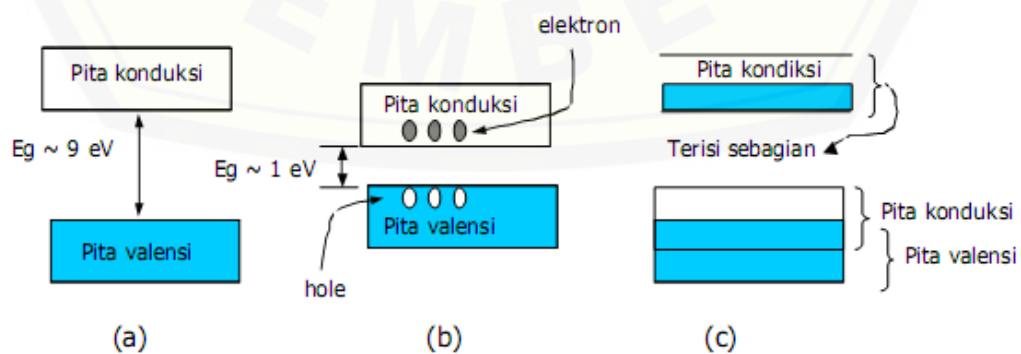
Berdasarkan teori atom, dinyatakan bahwa atom terdiri dari inti atom dan elektron yang mengelilingi inti atom, elektron yang berada pada kulit atom dibedakan berdasarkan tingkat energi. Semakin jauh dari inti atom yang ditempati oleh proton dan neutron, maka energi ikat elektron semakin kecil, dan sebaliknya. Interaksi antar atom pada kristal hanya terjadi pada elektron dikulit terluar (elektron valensi). Berdasarkan azas Pauli, pada suatu tingkat energi tidak boleh terdapat lebih dari satu elektron pada keadaan yang sama, jadi apabila terdapat lebih dari satu elektron pada keadaan yang sama, maka terjadi pergeseran tingkat

energi, sehingga tidak pernah terjadi pada tingkat energi yang bertindihan. Pita energi adalah kumpulan garis pada tingkat energi yang sama akan saling berhimpit (Siregar, 2016). Tingkat energi pada kristal dapat seperti atom tunggal (lihat gambar 2.3).



Gambar 2.3 Tingkat energi pada atom tunggal dan pita energi pada kristal (Siregar, 2016)

Penentuan pita energi dapat dinyatakan pada fisika kuantum, secara sederhana, dapat ditunjukkan sebagai contoh dari penentuan struktur pita energi bahan padat kristal. Gambar 2.3 dapat diilustrasikan pada struktur pita energi untuk kristal isolator, kristal semikonduktor, dan kristal konduktor, dimana pada keadaan kesetimbangan (*equilibrium*), pita energi tersplit menjadi dua bagian dan dipisahkan oleh daerah, dimana elektron tidak bisa bergerak atau beroperasi, daerah ini disebut daerah terlarang (*forbidden gap* atau *band gap*). Pita atas dinamakan pita konduksi, dan pita bagian bawah dinamakan pita valensi.



(a) Bahan Isolator; (b) Bahan Semikonduktor; (c) Bahan Konduktor

Gambar 2.4 Struktur pita energi (Siregar, 2016)

Gambar 2.4a, adalah isolator dimana konduksi tidak terisi oleh elektron, sedangkan pita valensi terisi penuh oleh elektron, sehingga elektron tidak dapat menghantarkan listrik karena energinya celah yang cukup besar yaitu sebesar 9eV. Gambar 2.4b, dimana sebagian dari elektron pita valensi berpindah menuju pita konduksi, hal ini disebabkan oleh energi gap yang kecil. Gambar 2.4c adalah konduktor dimana pita konduksi terisi oleh elektron dan tidak ada celah energi antara pita valensi dengan pita valensi, sehingga elektron dapat mudah berpindah menuju pita konduksi.

2.5 Brillouin Zone (Zona Brillouin)

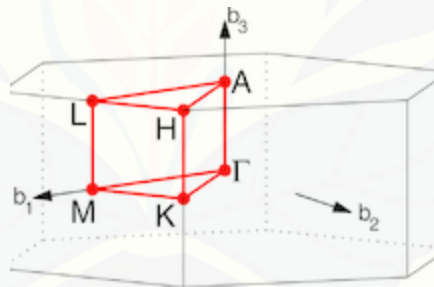
Dalam matematika dan fisika padat, zona brillouin adalah sel primitif yang didefinisikan secara unik dalam ruang timbal balik (Veerman et. al., 2000). Sel primitif merupakan sel dengan volume minimum (sel satuan) yang berhubungan dengan titik kisi tunggal struktur dengan simetri translasi diskrit. Konsep ini digunakan terutama dalam menggambarkan struktur kristal dalam dua dan tiga dimensi. Kisi resiprokal yang dipecah akan menjadi zona brillouin, batas sel ini diberikan oleh bidang yang berhubungan dengan titik pada kisi resiprokal (Jones, 1984). Pentingnya zona brillouin berasal dari deskripsi gelombang bloch (fungsi bloch/gelombang bidang yang dimodulasi oleh fungsi periodik) yang berguna untuk menghitung *density* elektron dan *density* keadaan yang dapat ditulis:

$$\psi(r) = e^{ik \cdot r} u(r) \quad (2.7)$$

Dimana r adalah posisi, ψ adalah gelombang bloch, dan u adalah fungsi periodik dengan periodisitas yang sama dengan kristal, vektor gelombang k adalah vektor momentum kristal, e adalah nomor Euler, dan i adalah unit imajiner. Gelombang bloch penting dalam fisika padat, dimana sering digunakan untuk menggambarkan elektron dalam kristal. Aplikasi ini dimotivasi dari teorema bloch yang menyatakan bahwa status eigen energi untuk sebuah elektron dalam kristal dapat ditulis sebagai gelombang bloch atau lebih tepatnya, menyatakan bahwa fungsi gelombang elektron alam kristal memiliki basis seluruhnya dari status energi eigen gelombang bloch (Brillouin, 1931).

Gelombang dalam media periodik, dimana ditemukan bahwa solusi dapat sepenuhnya ditandai oleh perilaku dalam satu zona Brillouin. Zona Brillouin pertama adalah lokus (tempat semua titik) di ruang resiprokal. Definisi lain adalah sebagai himpunan dari titik dalam k -space (space group). Ada juga zona Brillouin kedua dan ketiga, dan lain-lain sesuai dengan urutan daerah terpisah (semua dengan volume yang sama) pada jarak yang semakin jauh dari titik asal, tetapi ini jarang digunakan. Akibatnya zona pertama sering disebut juga dengan zona Brillouin (Kittel et. al., 1996).

Brillouin zone hanya sel unit Wigner-Seitz (sel primitif) di ruang timbal balik. Zona Brillouin hanyalah wilayah energi yang diizinkan dalam ruang momentum untuk elektron yang ada dalam kristal periodik. Wilayah energi yang diizinkan (zona Brillouin) memiliki batas tertentu dalam ruang momentum, untuk struktur kubik sederhana pada batas zona Brillouin, kecepatan group gelombang cenderung nol, akibatnya gelombang berdiri terbentuk dibatas (Wigner dan Seitz, 1933).

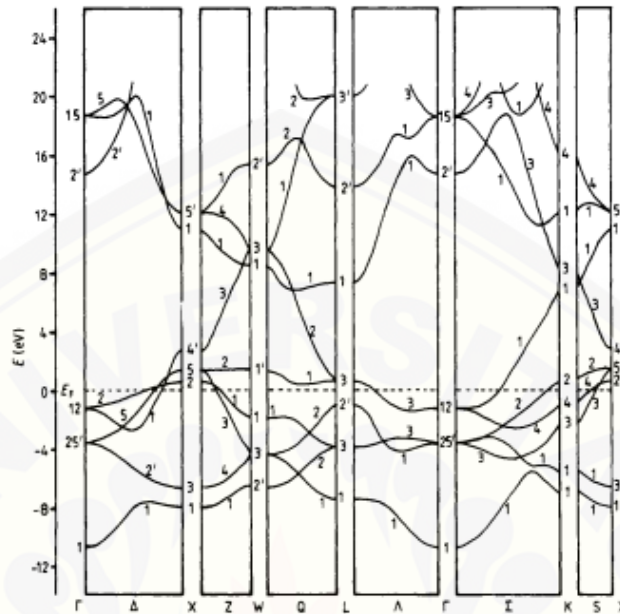


Gambar 2.5 Heksagonal Primitif (Setyawan dan Curtarolo, 2010)

Beberapa titik simetri tinggi menjadi perhatian khusus, hal ini disebut titik kritis, yaitu: Γ (pusat zona Brillouin), M (pusat wajah persegi panjang), K (bagian tengah tepi yang menghubungkan dua permukaan persegi panjang), L (ditengah-tengah tepi bergabung dengan wajah heksagonal dan persegi panjang), H/R (titik sudut) (Setyawan dan Curtarolo, 2010).

Berikut adalah contoh dari zona Brillouin dari iridium dengan konfigurasi elektron $5d^7 6s^2$, jika atom yang dibentuk menjadi kisi reguler dari jenis atom yang sama seperti elektron bebas atau dalam band-gap, maka dalam keadaan

tingkat 6s terhibridasi oleh 6p dengan 5f dan menyebabkan percampuran yang berbeda dalam kasus ini yang terakhir adalah 6p dan 5f.



Gambar 2.6 Relativistik Skalar pada Struktur Pita (Noffke dan Fritsche, 1982)

Pita di sepanjang garis simetri dan titik dari zona Brillouin masing-masing diberi label dalam notasi. Pita yang lebih rendah di sepanjang arah pada gambar 2.4 yang berakhir pada x dalam urutan x_1 , x_3 , x dan x_5 , memiliki karakter yang pasti pada titik tersebut. Perbedaan energi $x_5 - x_1 = 9.37$ eV yang dapat dianggap sebagai lebar pita. Penyebaran pita pada gambar 1 terjadi untuk pita simetri yang berbeda (Noffke dan Fritsche, 1982).

2.6 Density Functional Theory (DFT)

Tujuan dari metode DFT adalah untuk memberlakukan landasan teoritis model dari mekanika kuantum yang digunakan untuk simulasi dari ZnO. Inti dari simulasi ini adalah persamaan Schrödinger. DFT bukan metode yang terbaik, tetapi efisiensi cocok untuk sebagian besar pada beberapa permasalahan. Perhitungan DFT sebagian besar digunakan untuk zat padat untuk pemodelan struktur pita dengan beberapa parameter (Neto et. al., 2009). Pengikatan struktur bisa digunakan lebih baik terutama sebagai perhitungan energi total. Perhitungan yang menghasilkan energi total adalah parameter langsung perhitungan DFT,

karena prinsip yang pertama yaitu ikatan antar kerapatan atom satu dengan yang lain. Skala yang dapat dicapai oleh DFT lebih baik untuk ukuran skala nano dan struktur dari bahan (Koskinen et. al., 2007).

Metode pemodelan struktur nano yang saat ini banyak digunakan adalah DFT. Persamaan yang digunakan dalam DFT adalah menggunakan persamaan Schrödinger dalam 2.4 yang dirumuskan dalam kerapatan elektron $n(r)$ dimana dapat dinyatakan N gelombang elektron (Dahl, 2001),

$$n(r) = \int dx_2 \dots \int dr_N \psi^*(r, r_2, \dots, r_N) \psi(r, r_2, \dots, r_N) \quad (2.8)$$

potensi eksternal memungkinkan dapat menghitung suatu kepadatan keadaan dasar sistem, mengingat ini adalah metode yang dilakukan untuk memecahkan persamaan Schrödinger. Keadaan yang umum disini adalah kondisi dasar kepadatan unik mendefinisikan potensi dengan demikian kondisi eigen ψ itu sendiri kedalam fase kompleks (Hohenberg dan Kohn, 1964). Kondisi umum disini adalah tentang kepadatan sistem secara unik untuk mendefinisikan potensi dengan fase yang kompleks dengan konstruksi mekanika kuantum yang beroperasi pada densitas (Dahl, 2001).

2.6.1 Teori Khon-Sham

Persamaan Khon-Sham pada dasarnya adalah persamaan numerik yang dikerjakan secara berulang (*iterative*) sehingga dapat ditemukan suatu nilai tertentu dari perulangan tersebut. Nilai perulangan tersebut merupakan nilai yang memiliki korespondensi satu-satu dengan energi keadaan dasar. Pada keadaan dasar dengan perhitungan yang berulang memerlukan suatu nilai awal biasanya berupa nilai *density* atom $n_0(r)$. Nilai tebakan dilakukan untuk mencari nilai dari potensial Kohn-Sham V_{ks} . Nilai tersebut dibutuhkan untuk menghitung Hamiltonian Kohn-Sham yang mengandung nilai dari sebuah energi gelombang. $H_{ks} \psi$, hasil perhitungan Hamiltonian tersebut akan diekstrak lagi sehingga akan diperoleh nilai *density* hasil dari perhitungan $n_i(r)$. Nilai *density* harus menuju suatu nilai (konvergen) (Alfianto, 2015).

Fungsi eigen elektronik yang tidak dapat dipisahkan, maka Khon dan Sham mengusulkan untuk mempelajari Hamiltonian yang tidak digabungkan dengan

potensial efektif V_{eff}^{KS} dipilih sedemikian agar mendapatkan kepadatan dasar n_{ks} dari sistem Kohn-Sham yang sama dengan n dalam sistem yang sebenarnya (Kohn dan Sham, 1965). Persamaan sistem KS menjadi masalah pada nilai eigen elektron tunggal :

$$\left[-\frac{\hbar}{2m_c} \nabla^2 + V_{eff}^{KS}(r) \right] \psi_i = E_i \psi_i \quad (2.9)$$

Kepadatan elektron N yang dihitung adalah :

$$n(r) = \sum_i n_i |\psi_i(r)|^2 \quad (2.10)$$

dengan n_i menempati keadaan nilai elektron ψ_i .

2.7 Density Of State (DOS)

DOS pada dasarnya adalah jumlah *states* yang berbeda pada tingkat energi tertentu yang diperbolehkan untuk ditempati elektron, yaitu jumlah keadaan elektron per satuan volume per satuan energi. Perhitungan DOS memungkinkan seseorang untuk menentukan distribusi umum keadaan sebagai fungsi energi dan juga dapat menentukan jarak antara pita energi dalam semikonduktor (Haus, 2016). Perhitungan beberapa proses elektronik seperti penyerapan, emisi dan distribusi umum dalam suatu material mengharuskan untuk mengetahui jumlah keadaan yang tersedia per satuan energi $\rho(E)$ = jumlah keadaan elektron dengan energi dalam interval $(E, E+dE)$ (Sachs, 1963).

Berdasarkan konsep dasar perhitungan DFT adalah dengan mengapresiasi kerapatan elektron dalam fungsi persamaan yang dikenal sebagai teorema Bloch yang menyatakan bahwa solusi dapat dinyatakan sebagai :

$$\phi_k(r) = e^{ik \cdot r} u_k(r) \quad (2.11)$$

Dimana $u_k(r)$ merupakan periodik di ruang dengan periodisitas yang sama dengan *supercell*. Teorema ini memungkinkan untuk menyelesaikan masalah Schrödinger untuk setiap nilai indeks k secara independen. Elektron yang terkait dengan gelombang bidang ini memiliki energi sebesar :

$$E = (\hbar k)^2 / 2m \quad (2.12)$$

Sebagai hasil setelah perhitungan DFT telah dilakukan, DOS elektronik dapat ditentukan dengan mengintegrasikan kerapatan elektron yang dihasilkan dalam ruang K (ruang timbal balik) (Sholl dan Steckel, 2011).

2.8 Gnuplot

Gnuplot adalah utilitas grafik yang berbasis baris perintah portabel untuk Linux, OS/2, MS Windows, OSX, VMS, dan banyak platform lainnya. Awal Gnuplot dibuat adalah untuk memungkinkan para ilmuwan dan siswa dapat memvisualisasikan fungsi matematika dan data secara interaktif. Gnuplot mendukung banyak jenis plot, baik 2D maupun 3D. Gnuplot juga dapat menggambarkan garis titik, kotak, kontur, bidang vektor, permukaan dan berbagai teks terkait (Ethan A et. al., 2020)

Gnuplot merupakan suatu program grafik interaktif yang berbasis CLI (*command-line interface*). Program ini sebenarnya sangat mudah digunakan dan sebenarnya memiliki 2 perintah untuk membuat suatu gambar plot, yaitu perintah plot dan splot. Program ini menghasilkan berbagai macam grafik dengan banyak pilihan untuk mengubahnya dan dapat disimpan ke dalam berbagai macam devais grafik (terminal grafik, printer atau ploter) (Susanto et. al., 2000). Disamping itu terkadang data mentah yang diperoleh dari suatu pengukuran memerlukan suatu proses awal sebelum diplot kedalam grafik. Program Gnuplot yang berbasis CLI tidak perlu melakukan perhitungan seperti itu, karena program ini dapat melakukan perhitungan bersama-sama dengan pemplotan. Gnuplot dapat digabung dengan skrip program tertentu misalnya python dan lain-lain. Hal ini membuat program jauh lebih cepat dalam membuat grafik dengan bebrbasi GUI (*Graphical User Interface*). Ada beberapa cara untuk menginstal program gnuplot pada Linux maupun Windows yaitu :

- Instalasi dari sources code gnuplot dapat didownload disitus resmi gnuplot <http://www.gnuplot.info/download.html>. Download gnuplot versi terbaru dari server Gnuplot yang biasanya sudah satu paket yang berisi file-file gnuplot.
- Ektrak file yang terkompres.

- Linux : buka terminal dan ketikkan `sudo apt-get install gnuplot`, maka sudah otomatis akan terinstall dan panggil lewat terminal.
- Windows : download melalui server dan ekstrak file yang terkompres, maka otomatis akan terinstall dan panggil lewat *command prompt*.

2.9 HiLAPW

Paket program HiLAPW (Hiroshima *Linear-Augmented Plane-Wave*) dirancang bertujuan untuk melakukan perhitungan pita struktur yang sangat rumit berdasarkan *density functional theory* (DFT). HiLAPW dirancang untuk melakukan perhitungan berdasarkan DFT. Fitur utama HiLAPW adalah :

- Perhitungan terpolarisasi spin skalar relativistik dalam pendekatan *density* (spin).
- Perhitungan semua elektron yang konsisten.
- Perhitungan total energi dan gaya atom untuk menentukan struktur kesetimbangan dan fonon.
- Perhitungan elektron DOS.
- *Density* elektron dan perhitungan fungsi potensial untuk gambar 2D dan 3D.

HiLAPW berisi paket-paket yang dapat dieksekusi untuk melakukan bagian perhitungan. Paket dibuat menggunakan *make file* dan berisi cara instalasi. HiLAPW terdiri dari file *executable* kernel (penghubung antara *software* dan *hardware*) seperti *xsets* dan *xlapw*. Semua *executable* dapat dibuat dengan menggunakan *make file* yang melekat dengan paket dan Fortran *compiler* pada komputer pengguna. Daftar *executable* dan data terkait diringkas dalam tabel 2 Pada buku manual HiLAPW (Oguchi, 2013).

Tabel 2.1 Executable dan data terkait file HiLAPW

executable	Peran	Input file	Output file
xsets	generasi awal	atomdata	wavout
		atomdens	sets.out
		spgrdata	

		sets.in	
xlapw	perhitungan SCF	wavin lapw.in	wavout ekn dis foa tau ten lapw.out
xdoss	perhitungan DOS	wavin doss.in	pdos pdos.index doss.out
xnewa	k-point	wavin	wavout newa.out
xwbox	perhitungan elektron <i>density</i> dalam 3d	wavin wbox.in	wbox.list wbox.out
xpbox	perhitungan nilai potensial	wavin pbox.in	pbox.list pbox.out
xspin	spin berputar	wavin	wavout spin.out
xwcon	konversi file wav	wavin wavin.frm wcon.in	wavout wavout.frm wcon.out
xsymm	perhitungan simetri	wavin	ekl cml symm.out
xrept	eigenstate	ekl cml	eig1 eig2 rept.out

Hal pertama yang harus dilakukan dalam menginstall program adalah mendownload paket HiLAPW.ta.gz pada server <http://www.cmp.sanken.osaka-u.ac.jp/~oguchi/HiLAPW/introduction.html> dan ekstrak pada Linux :


```
# cd~  
# gunzip HiLAPW.tar  
# tar xvf HiLAPW.tar
```

selanjutnya file akan berisi :

```
# HiLAPW/  
# bin/  
# bz/  
# data/  
# lib/  
# ps/  
# sources/
```

sebelum kompilasi adalah memastikan bahwa fortran90 sudah terinstall. Modifikasi file yang tersedia dalam tiga direktori /HiLAPW/sources. Install file lapack dan blass terlebih dahulu. Perintah selanjutnya adalah mengkompilasi dan menjadikan satu file kedalam satu program dengan perintah :

```
# cd HiLAPW/sources  
# make clean  
# make all  
# make install
```

langkah selanjutnya juga diperlukan pada direktori /HiLAPW/sources dan /HiLAPW/bin

```
# cd ~/HiLAPW/ps  
# make clean  
# make all  
# make install  
# cd ~/HiLAPW/lib  
# make clean  
# make all  
# make install
```

semua program perlu diaktifkan untuk file executable, direktori /HiLAPW/bin harus ditambahkan, sebagai contoh ketika csh atau tcsh digunakan dengan perintah

```
set path = ( . $home/HiLAPW/bin $path)
```

dan untuk mengaktifkannya dengan perintah :

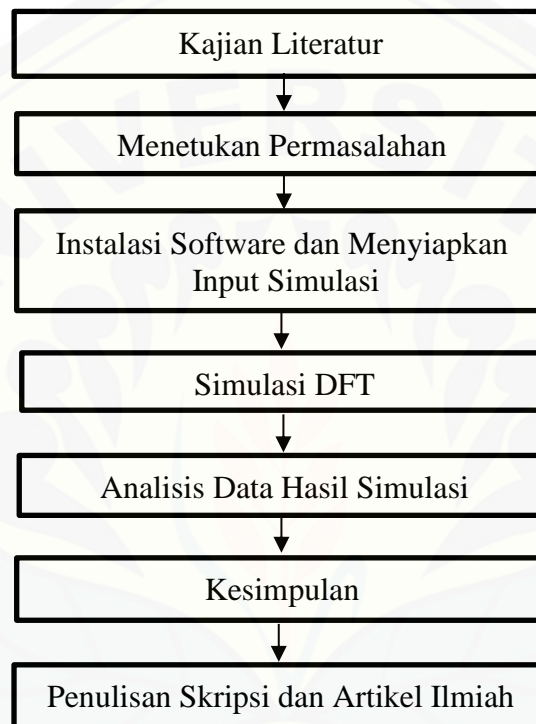
```
# sources~/cshrc
```



BAB 3. METODE PENELITIAN

3.1 Rancangan Kegiatan Penelitian

Rancangan penelitian diperlukan dalam menjelaskan langkah-langkah yang akan dilakukan dalam penelitian, sehingga dapat dijelaskan melalui skema rancangan penelitian dalam bentuk diagram alir sebagai berikut :



Gambar 3.1 Diagram Alir Rancangan Penelitian

Penelitian ini dilakukan dengan mencari studi literatur hingga didapatkan sebuah masalah dan didapatkan permasalahan. Permasalahan yang didapatkan akan dikaji melalui teori yang berkaitan dengan permasalahan tersebut. Melalui pengkajian teori, peneliti akan mengumpulkan dan mendapatkan sumber beserta variabel sebagai data awal input simulasi. Simulasi dilakukan untuk menyelesaikan permasalahan penelitian dengan menggunakan metode simulasi *density functional theory* melalui program HiLAPW. Simulasi dilakukan dengan dua tahapan yaitu : pertama adalah perhitungan DOS dan kedua adalah perhitungan pita struktur. Hasil simulasi kemudian akan ditarik kesimpulan yang selanjutnya akan dikemas dalam bentuk karya tulis ilmiah berupa laporan tugas

akhir. Penelitian dilakukan di Laboratorium Fisika Komputasi, Universitas Jember yang dimulai bulan Agustus – September 2020.

3.2 Jenis dan Sumber Data Penelitian

Jenis data yang digunakan dalam penelitian berupa data kuantitatif yaitu jenis data yang tidak dapat dihitung atau diukur secara langsung dan dapat dinyatakan dalam sebuah angka. Sedangkan sumber data yang digunakan pada penelitian ini terdiri dari data sekunder. Data sekunder merupakan data yang diperoleh dari penelitian sebelumnya berdasarkan simulasi. Data yang diperoleh selama simulasi adalah nilai DOS (eV) dan *band structure* (eV).

Tabel 3.1 Konstanta kisi material ZnO *wurtzite*

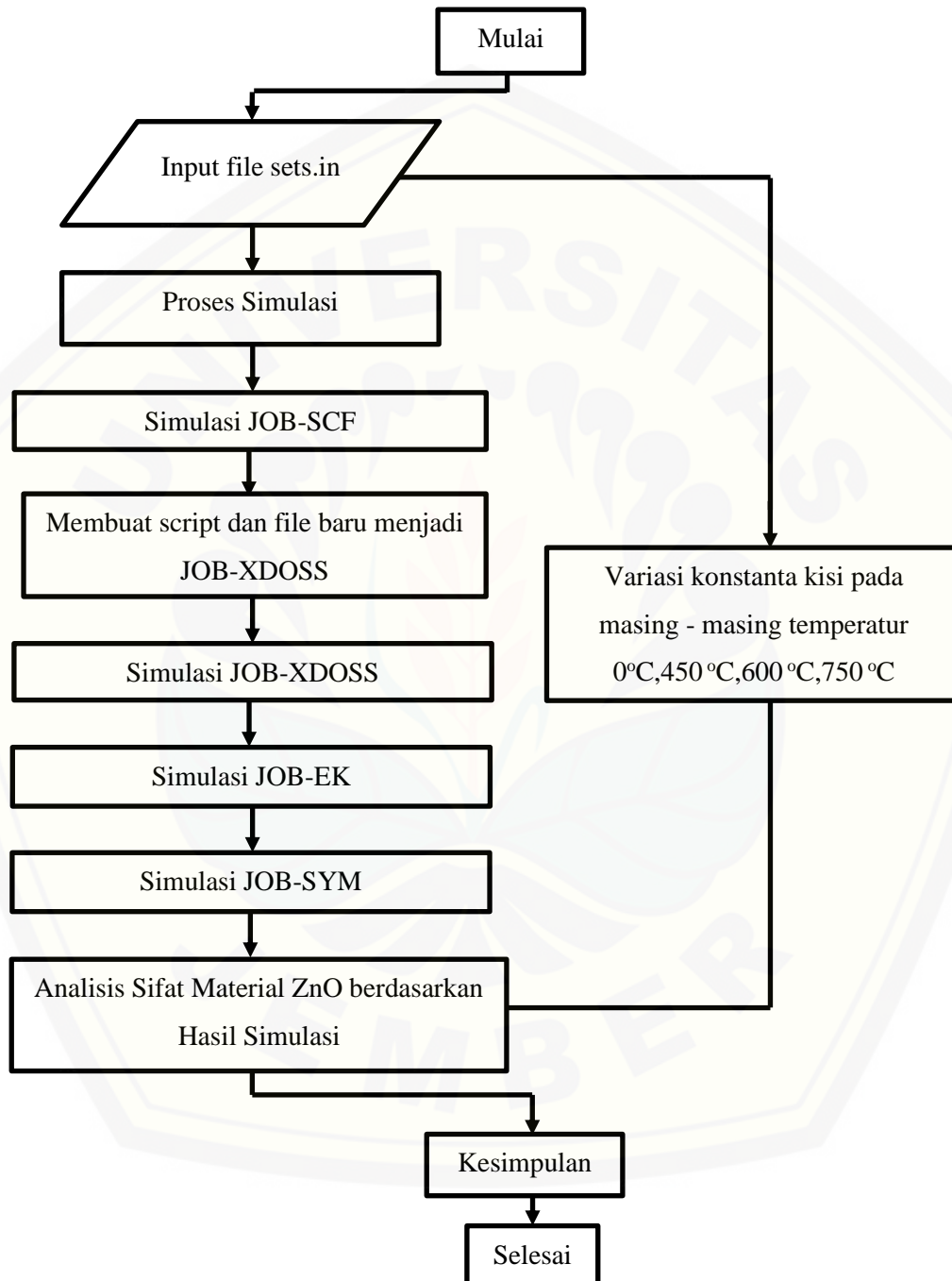
suhu kalsinasi (°C)	struktur kristal	konstanta kisi (Å)			<i>k-point</i>
		α	β	γ	
0	heksagonal	3.2499	3.2499	5.2066	2 2 2
450		3.247	3.247	5.303	
600		3.244	3.244	5.299	
750		3.248	3.248	5.304	

3.3 Variabel Penelitian

Data yang digunakan dalam simulasi dinyatakan dalam tabel 3.1 sebagai input awal dalam menjalankan simulasi. Data yang digunakan ini bertujuan untuk menghitung densitas elektron dalam keadaan dasar. Data input awal yang akan digunakan dalam menghitung DOS dan struktur pita energi.

3.4 Kerangka Pemecahan Masalah

Penelitian ini dilakukan sesuai tahapan kegiatan penelitian yang digambarkan pada diagram alir yang ditunjukkan pada gambar 3.2



Gambar 3.2 Diagram Alir Kerangka Pemecahan Masalah

3.5 Prosedur Penelitian

Prosedur yang dilakukan pada penelitian ini adalah sebagai berikut :

3.5.1 Alat dan Bahan

Alat dan bahan yang digunakan dalam penelitian antara lain :

1. Perangkat komputer dengan spesifikasi
 - a. Prosesor : Intel (R) Celeron (R) CPU 1000M @1.80 GHz
 - b. Sistem : 64 bit
 - c. Ram : 6,00 GB
 - d. OS : Linux Ubuntu 16.04 LTS 64 Bit
2. Program yang digunakan dalam simulasi antara lain :
 - a. HiLAPW merupakan program yang dapat mesimulasikan perhitungan *band structure* dengan berdasarkan pada teori DFT.
 - b. Gnuplot merupakan suatu program interaktif yang berbasis CLI yang dapat memplot berbagai macam grafik.

3.5.2 Pre-Processing Step

Pre-Processing Step adalah kegiatan yang dilakukan sebelum proses simulasi berlangsung. Tahap ini dilakukan dengan menyiapkan data-data pendukung simulasi DFT. Data yang dibutuhkan untuk input simulasi berada pada file *sets.in* meliputi : struktur kristal, nomor NSPIN, *space group*, *lattice constants*, nomor indeks *Crystallographically*, posisi vektor atom, nilai *k-points*. Data yang diproses tersebut dijadikan salah satu file *input* dalam simulasi DFT dengan menggunakan program HiLAPW. Berikut adalah spesifikasi file *sets.in* yang digunakan dalam simulasi :

```

1 wultzite ZnO a=3.2499 c=5.2066
2 nspin
3 1
4 crystal symmetry and lattice constants
5 P63mc
6 3.2499 3.2499 5.2066
7 90.0 90.0 120.0
8 atomic data
9
10 Zn 2
11 0.3333333333333333 0.6666666666666666 0.00
12 0.6666666666666666 0.3333333333333333 0.50
13 O 2
14 0.3333333333333333 0.6666666666666666 0.3819
15 0.6666666666666666 0.3333333333333333 0.8819
16 k-point data
17 0
18 2 2 2

```

Gambar 3.3 file input sets.in

Sedangkan pada file JOB-SCF, JOB-XDOSS JOB-EK, dan JOB-SYM merupakan sebuah file perintah, dimana perintah ini akan menghitung secara otomatis dengan menghubungkan direktori bin sebagai *executable* dan output yang berbeda.

3.5.3 Simulation Step

Simulation step adalah tahapan dijalankan simulasi dengan file input yang telah disesuaikan dengan sistem. Proses simulasi menggunakan program HiLAPW yang memerlukan beberapa file input. Perhitungan akan dilakukan secara otomatis oleh *software* HiLAPW dengan cara proses simulasi yang berurutan. Hal yang harus dilakukan adalah menyiapkan beberapa file yang dijadikan dalam satu folder antara lain : Sets.in, JOB-SCF, JOB-EK, JOB-SYM dan file-file lain yang berada dalam satu file *compress*. Tahap selanjutnya adalah menyesuaikan file sets.in yang akan dijalankan melalui perintah JOB-SCF, JOB-EK, dan JOB-SYM. Pada gambar 3.3 adalah isi dari file sets.in termasuk data tentang sistem material kristal, struktur, informasi atom, dan *k-point*.

Perhitungan dengan simulasi file JOB-SCF adalah dengan menyiapkan perintah terminal Linux dengan menggabungkan file atomdata (file dengan informasi nomor atom), atomdens (file dengan informasi kerapatan atom), dan spgrdata (file dengan informasi struktur atom). Berikut adalah isi perintah dari file JOB-SCF :

```
1 #!/bin/csh -f
2 #JOB-SCF
3
4 set SD=/home/fajar/Desktop/hilapw/bin
5
6 pwd
7 set path = (/home/fajar/Desktop/hilapw/bin $path)
8 getdata
9
10 ${SD}/xsets
11 mv wavout wavin
12
13 cp lapw.inSCF lapw.in
14 ${SD}/xlapw
15 LAcopy A1
16
17 cp kpts.in0 kpts.in
18 ${SD}/xnewa
19 mv wavout wavin
20
21 ${SD}/xlapw
22 LAcopy A2
23
```

Gambar 3.4 Isi Perintah Perhitungan SCF

Sesuai apa yang diperintahkan oleh file tersebut maka output dari file JOB-SCF dan berdasarkan tabel 2.1 pada Bab 2 adalah wavout, xlapw.out, OutA1, xnewa.out, dan OutA2.

Perhitungan JOB-XDOSS adalah perhitungan dimana output dari file ini berupa grafik hubungan antara DOS (/eV) dan energi (eV). Langkah yang dilakukan dalam perhitungan JOB-XDOSS adalah dengan membuat scrip baru dan nama file baru, kemudian mengubah sedikit isi *script* dan membuat *link* ke direktori folder *bin*. Isi dari folder *bin* merupakan file *executing* dari semua perhitungan, sehingga file *executing* dapat menghitung dan memunculkan perhitungan grafik hubungan antara DOS (/eV) dan energi (eV). Berikut adalah isi perintah dari file JOB-XDOSS :

```
1 #!/bin/csh -f
2 #JOB-XDOSS
3
4 pwd
5 set path = (/home/fajar/Desktop/hilapw/bin $path)
6
7 xdoss
8 mv pdos pdosA2
9 getfermi outA2 > fermiA2
10 PSP < psp_tdos > tdos.ps
11 PSP < psp_pdos > pdos.ps
```

Gambar 3.5 Isi Perintah Perhitungan DOS

Perhitungan JOB-EK adalah langkah untuk memulai perhitungan *band structure*. Langkah yang dilakukan dalam memulai perhitungan *band structure* dengan tuntutan perhitungan nilai *eigen* untuk *k-point* dengan sepanjang garis simetri zona Brillouin adalah dengan menjalankan file perintah JOB-EK dan

membuat *link* ke dalam folder bz (*Brillouin*) dimana isi dari folder tersebut adalah perintah mengitung daerah bz dan membuat *link* pada folder *bin*. Output dari file ini merupakan data perkiraan input dan output dari perhitungan bz. Berikut adalah isi dari perintah dari file JOB-EK :

```

1 #!/bin/csh -f
2 #JOB-EK
3
4 set SD=/home/fajar/Desktop/hilapw/bin
5 set SCF_result=A2
6
7 #set system=bcc
8 #set zone=( GH GN HN NP PG )
9 #set system=fcc
10 #set zone=( GX KG LG WL XU )
11 #set system=hex
12 #set zone=( GM MK KG GA AL LH HA )
13 #set system=sc
14 #set zone=( GX XM MG GR RM )
15 #set system=ort
16 #set zone=( GX GY GZ GS )
17 #set system=ort
18 #set zone=( GX XS GY YS GZ ZU UR ZT TR XU YT SR )
19
20 set BD=/home/fajar/Desktop/hilapw/bz
21 set NB=`awk 'NR==6 {print $1}' lapw.inEK`
22
23 date
24 pwd
25 set path = (/home/fajar/Desktop/hilapw/bin $path)
26
27 cp lapw.inEK lapw.in
28
29 foreach JOB ( ${zone} )
30
31     cp wav${SCF_result} wavin
32
33     cp ${BD}/kpt.${system}.${JOB} kpts.in
34
35     $SD/xnewa
36     mv wavout wavin
37
38     $SD/xlapw
39     LAcopy ${SCF_result}${JOB}
40
41     echo "eigenvalues along "${JOB} > eigen${JOB}
42     echo `awk 'NR==1 {print $0}' kpts.in` ${NB} >> eigen${JOB}
43     echo `awk 'NR==3,NR==9999 {print $0}' ekn${SCF_result}${JOB} >> eigen${JOB}
44
45 end

```

Gambar 3.6 Isi Perintah Perhitungan Nilai Eigen

Perhitungan JOB-SYM merupakan perhitungan representasi yang tidak tereduksi untuk setiap nilai *eigen*. Perhitungan simulasi pada file ini berfungsi untuk mendapatkan gambar dari *band structure*. Langkah yang dilakukan sama halnya seperti pada perhitungan nilai *eigen* pada JOB-EK. Berikut merupakan isi dari file JOB-SYM :

```

1 #!/bin/csh -f
2 #JOB-SYM
3
4 set SD=/home/fajar/Desktop/hilapw/bin
5 set SCF_result=A2
6
7 #set system=bcc
8 #set zone=( GH GN HN NP PG )
9 #set system=fcc
10 #set zone=( GX KG LG WL XU )
11 set system=hex
12 set zone=( GM MK KG GA AL LH HA )
13 #set system=sc
14 #set zone=( GX XM MG GR RM )
15 #set system=lort
16 #set zone=( GX GY GZ GS )
17 #set system=ort
18 #set zone=( GX XS GY YS GZ ZU UR ZT TR XU YT SR )
19
20 set BD=/home/fajar/Desktop/hilapw/bz
21 set NB='awk 'NR==6 {print $1}' lapw.in'
22
23 date
24 pwd
25 set path = (/home/fajar/Desktop/hilapw/bin $path)
26
27 foreach JOB ( ${zone} )
28
29     cp wav${SCF_result}${JOB} wavin
30
31     $SD/xsymm
32     cat ek.list cm.list | $SD/xrept
33     mv eig1 eig1${JOB}
34     if( -e eig2 ) then
35         mv eig2 eig2${JOB}
36     endif
37     mv symm.out sout${SCF_result}${JOB}
38     mv ek.list ekl${SCF_result}${JOB}
39     mv cm.list cml${SCF_result}${JOB}
40
41 end

```

Gambar 3.7 Isi Perintah Perhitungan *Band Structure*

3.6 Metode Analisis Data

Metode analisis data adalah tahapan yang dilakukan setelah simulasi yaitu menganalisis data output yang dihasilkan oleh simulasi. Berdasarkan teori Khon-Sham maka akan diketahui nilai besaran potensial dari bahan ZnO. Nilai potensial merupakan nilai dari gaya gerak listrik atau elektron yang mengalir pada bahan ZnO. Hasil simulasi akan menghasilkan dua fungsi grafik yaitu grafik hubungan antara total DOS dengan energi total dan grafik *band structure*. Analisis *band structure* ZnO dapat dilihat berdasarkan lebar *band*, *brillouin*, arah vektor, dan kisi yang terdapat pada grafik hasil simulasi. Pada kondisi ini berguna untuk melihat jumlah kerapatan elektron. Sedangkan hasil grafik antara total DOS

dengan energi total adalah menganalisis pada perbandingan DOS dan energi, pada kondisi ini juga memiliki efisiensi dari material ini.



BAB 5. PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan dapat diambil kesimpulan yaitu:

1. Material Bahan ZnO memiliki makna fisis sebagai bahan konduktif yang terlihat pada tingkat sekitar fermi yang menjadikannya media baik untuk mengendalikan arus listrik, dimana konduktansinya bervariasi tergantung pada arus dan tegangan yang diberikan, beberapa daerah pada material ini juga memiliki sifat isolator.
2. Material ini menunjukkan bahwa material bersifat semikonduktor dengan adanya celah pita dengan konduktivitas listrik yang berada pada insulator dan konduktor. Material ini memiliki tegangan breakdown yang cukup tinggi dan kemampuan untuk mempertahankan medan listrik yang besar. Apabila semikonduktor digunakan sebagai konduktor, maka kondisi tertentu memungkinkan sirkulasi listrik, tetapi hanya satu arah. Selain itu semikonduktor tidak memiliki konduktivitas setinggi logam konduktif.
3. Pengaruh variasi suhu kalsinasi pada material ZnO mempengaruhi sifat dari partikel. Penelitian menggunakan HiLAPW lebih baik jika dibandingkan dengan menggunakan *Quantum Espresso* pada suhu 0°C. Hal ini terlihat pada energi celah pita yang dihasilkan lebih besar dan mendekati hasil dari eksperimen yaitu sebesar 3.37 eV. Pada HiLAPW 0.732 eV dan *Quantum Espresso* 0.65 eV.
4. Sifat struktural, elektronik, dan optik ZnO dipelajari dengan menggunakan metode DFT prinsip pertama. Hal yang menjadikan ZnO sebagai basis pengembangan optoelektronik berdasarkan sifat material ZnO yang dapat ditumbuhkan dalam berbagai substrat senyawa kimia semikonduktor. Sifat properti elektronik dan dielektrik dari struktur nano ZnO ini dapat berguna untuk aplikasi di perangkat mikroelektronika dan optoelektronik.
5. Hasil simulasi hubungan antara temperatur dan energi celah pita adalah berbanding lurus. Apabila semakin tinggi temperatur yang dikenakan pada

suatu bahan, maka energi celah pita akan mengecil karena mendekati titik leleh dari bahan.

5.2 Saran

Pemahaman teori dalam penelitian ini perlu dipelajari kembali. Perhitungan DFT memerlukan beberapa perbandingan dari beberapa *software* yang menghitung persamaan Schrödinger secara komputasi. Penelitian ini perlu diteliti kembali dengan berbagai variasi energi. Pada HiLAPW 0.732 eV dan *Quantum Espresso* 0.65 eV.



DAFTAR PUSTAKA

- Abdullah, M. 2009. Pengantar Nanosains. *Institut Teknologi Bandung (ITB)*.
- Alfianto, E. 2015. Implementasi Metode Teori Fungsional Kerapatan pada bahasa C untuk menemukan energi keadaan dasar berbagai atom. *Jurnal Arus Elektro Indonesia* 1 (3).
- Baruah, S., K Pal., dan J. Samir Dutta. 2012. Nanostructured zinc oxide for water treatment. *Nano Science. Nanotechnology-Asia* 2 (2): 90-102.
- Behera, J. K. 2009. Synthesis and Characterizations of ZnO Nanoparticles, MASTER OF SCINCE IN PHYSICS Departement of Physics, National Intitute of Technology Rourkela-769008, ORISSA, INDIA.
- Benkrima, Y., O. Bentouila, A. Achouri, dan A. Ouahab. 2018. ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF ZnO: FIRST PRINCIPLE INVESTIGATIONS.
- Bloch, F. 1928. Quantum mechanics of electrons in crystal lattices. *Z. Phys* 52: 555-600.
- Brillouin, L. 1931. *Quantenstatistik*. Dalam *Die Quantenstatistik und Ihre Anwendung auf die Elektronentheorie der Metalle*. Springer.
- Cardona, M. Y., PY. 2011. Optical properties of semiconductors. *Science and Technology Elsevir*: 125-195.
- Chan, M. C., Gerbrand J Physical review letters. 2010. Efficient band gap prediction for solids. 105 (19): 196403.
- Dahl, J. P. 2001. *Introduction to the quantum world of atoms and molecules*. World Scientific Publishing Company:
- Darma, Y. S., Freddy Giovanni, M. A. Majidi, dan A. Rusydi. 2015. Theoretical investigation on electronic properties of ZnO crystals using DFT-based calculation method, *Proceedings of Advanced Materials Research*, 1112. *Trans Tech Publ*: 41-44.
- Dehkhoda, A. M., A. H. West, dan N. Ellis, J Applied Catalysis A: General. 2010. Biochar based solid acid catalyst for biodiesel production. 382 (2): 197-204.
- Ethan A, m. M., Christoph Bersch, H.-B. B. ker., John Campbell, Robert Cunningham, David Denholm, R. F. Gershon Elber, Carsten Grammes, Lucas Hart, Lars Hecking, Pé ter Juha' sz, Thomas Koenig, David Kotz, Ed

- Kubaitis, Russell Lang, Timoth e Lecomte, Alexander Lehmann, J er me Lodewyck, Alexander Mai, Bastian M arkisch, Ethan A Merritt, Petr Mikul k, Daniel Sebald, Carsten Steger, Shigeharu Takeno, Tom Tkacik, Jos Van der Woude, James R. Van Zandt, Alex Woo, dan J. Zellner. 2020. Gnuplot 5.4 an Interactive Plotting Program Web site and issue trackers: <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>.
- Fiorentini, V., dan A. J. P. R. B. Baldereschi. 1995. Dielectric scaling of the self-energy scissor operator in semiconductors and insulators. 51 (23): 17196.
- Godby, R. W., M. Schl uter, dan L. J. P. R. B. Sham. 1988. Self-energy operators and exchange-correlation potentials in semiconductors. 37 (17): 10159.
- Hapala, P. K., Kateřina Pelant, dan J. Ivan, Pavel. 2013. Theoretical analysis of electronic band structure of 2-to 3-nm Si nanocrystals. *J Physical Review B* 87 (19): 195420.
- Haus, J. W. 2016. *Fundamentals and applications of nanophotonics*. Woodhead Publishing: Univesity of Dayton, Dayton, OH, USA:
- Hohenberg, P., dan W. Kohn. 1964. Inhomogeneous electron gas. *J Physical Review* 136 (3B): B864.
- Hyman, M. 1989. Evidentiary Certificate on Zinc Ash. <http://environment.gov.au/settleents/chemicals/hazardouswaste/publication-s-evidentiaryzinc-ash.html>. [Diakses 7 Mei 2020].
- Initiative, N. N. 2019. Benefits and Applications in Nanotechnology <https://www.nano.gov/you/nanotechnology-benefits>. [Diakses Pada 13 Mei 2020].
- Jones, G. A. 1984. Geometric and asymptotic properties of Brillouin zones in lattices. *J Bulletin Of The London Mathematical Society* 16 (3): 241-263.
- Kim, D. C. H., Won Suk Kong, Bo Hyun Cho, Hyung Koun Hong, dan C. Hee. 2007. Fabrication of the hybrid ZnO LED structure grown on p-type GaN by metal organic chemical vapor deposition. *J Physical B : Condensed Matter* 401: 386-390.
- Kittel, Charles McEuen, dan P. Paul McEuen. 1996. *Introduction to solid state physics*. Wiley New York. Vol. 8:
- Klingshirn, C. F., A. Waag, A. Hoffmann, dan J. Geurts. 2010. *Zinc oxide: from fundamental properties towards novel applications*. Springer Science & Business Media. Vol. 120:

- Kohn, W., dan L. J. Sham. 1965. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *J Physical Review* 140 (4A): A1133.
- Koskinen, P., H. Häkkinen, B. Huber, B. von Issendorff, dan M. Moseler. 2007. Liquid-liquid phase coexistence in gold clusters: 2D or not 2D? *J Physical Letters* 98 (1): 015701.
- Material, P. 2020. Calculation Manual <https://materialsproject.org/materials/mp-2133/> [diakses pada 5 September 2020].
- Morkoç, H., dan Ü. Özgür. 2008. *Zinc oxide: fundamentals, materials and device technology*. John Wiley & Sons:
- Muhammady, S., F. G. Setiawan, I. M. Sutjahja, T. Winata, dan Y. J. J. M. d. S. Darma. 2015. Studi Ab Initio dengan Metode GGA dan GGA+ U Terpolarisasi Spin Untuk Mengkaji Sifat Elektronik dan Magnetik Kristal TiO₂ pada Fasa Rutile, Anatase, dan Brookite. 19 (3): 98-105.
- Nagai, K., H. Fujiwara, H. Aratani, S. Fujioka, H. Yomosa, Y. Nakatani, T. Kiss, A. Sekiyama, F. Kuroda, dan H. J. P. R. B. Fujii. 2018. Electronic structure and magnetic properties of the half-metallic ferrimagnet Mn 2 VA1 probed by soft x-ray spectroscopies. 97 (3): 035143.
- Neto, A. C., F. Guinea, N. M. Peres, K. S. Novoselov, dan A. K. Geim. 2009. The electronic properties of graphene. *J Reviews of Modern Physics* 81 (1): 109.
- Noffke, J., dan L. Fritsche. 1982. Band structure calculation and photoemission analysis of iridium. *Journal of Physics F: Metal Physics* 12 (5): 921.
- Oguchi, T. 2013. Hilapw Basic Edition. *ISIR. Osaka University*.
- Özgür, Ü., Y. I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M. Reshchikov, S. Doğan, V. Avrutin, S.-J. Cho, Morkoç, dan H. 2005. A comprehensive review of ZnO materials and devices. *Journal of Applied Physics* 98 (4): 11.
- Ristian, I. 2013. Kajian pengaruh konsentrasi perak nitrat (AgNO₃) terhadap ukuran nanopartikel perak, Universitas Negeri Semarang.
- Sachs, M. 1963. *Solid State Theory*. New York: McGraw-Hill Book Company, pp159-160;238-242:
- Setyawan, W., dan S. Curtarolo. 2010. High-throughput electronic band structure calculations: Challenges and tools. *J Computational Material Science* 49 (2): 299-312.

- Shahjahan, M. 2013. First-Principles Study on Dilute Magnetic States and Half Metallicity in Chalcopyrite Semiconductors.
- Sholl, D., dan J. A. Steckel. 2011. *Density functional theory: a practical introduction*. John Wiley & Sons:
- Singh, R. P. P., I. Hudiara, dan S. B. J. M. S.-P. Rana. 2016. Effect of calcination temperature on the structural, optical and magnetic properties of pure and Fe-doped ZnO nanoparticles. 34 (2): 451-459.
- Siregar, R. E. 2016. *Edisi Perbaikan Fisika Kuntum*: Departement Fisika. Bandung. Fakultas MIPA Universitas Padjajaran.
- Sulistiyani, E. T., dan P. Nurwantoro. 2010. Kajian metode penghampiran hartree-fock untuk atom-atom ringan dan potensi penggunaannya untuk atom barium, [Yogyakarta]: Universitas Gadjah Mada.
- Surono, A. T., dan H. J. Y. P. J. Sutanto. 2014. Sifat Optik Zinc Oxide (ZnO) yang Dideposisi di atas Substrat Kaca Menggunakan Metode Chemical Solution Deposition (CSD) dan Aplikasinya untuk Degradasi Zat Warna Methylene Blue. 3 (1): 7-14.
- Susanto, A., I. W. Warmada, T. PANDU, dan I. M. Wiryana. 2000. Gnuplot untuk Orang Lugu. *J St Pauli*.
- Veerman, J., M. M. Peixoto, A. C. Rocha, dan S. Sutherland. 2000. On Brillouin Zones. *J Communicationns In Mathematical Physics* 212 (3): 725-744.
- Wendri, N. 2016. *Diktat Fisika Zat Padat 1*: Bali. Fakultas MIPA Universitas Udayana.
- Wigner, E., dan F. Seitz. 1933. On the constitution of metallic sodium. *J Physical Review* 43 (10): 804.
- Yanti. 2013. Penumbuhan dan Karakterisasi Sifat Fisis Film Tipis ZnO dopping Al dengan Metode DC Magnetron Sputtering. *Semarang. FMIPA Universitas Semarang*.
- Yulianti, C. H. 2012. Sintesis dan Karakterisasi Kristal Nano ZnO. *Jurnal Teknik* 4 (2).
- Yuwono, A. H. 2015. Fabrikasi Nanorod Seng Oksida (Zno) Menggunakan Metode Sol-Gel dengan Variasi Konsentrasi Polyethylene Glycol dan Waktu Tunda Evaporasi Amonia. *J Metalurgi* 26 (2): 101-108.