

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Perkembangan sains komputasi telah membuka ruang baru dalam memahami perilaku material pada skala atomik. Pendekatan ini memungkinkan peneliti menelusuri sifat mikroskopik material yang sebelumnya sulit dijangkau melalui eksperimen langsung. Representasi sistem fisik secara matematis dan numerik memberikan kesempatan untuk mengeksplorasi fenomena fundamental dengan tingkat kendali yang tinggi terhadap variabel yang terlibat. Melalui simulasi komputasi, berbagai kondisi ideal maupun terkontrol dapat direpresentasikan secara konsisten, sehingga pemahaman terhadap mekanisme dasar material dapat diperoleh secara lebih mendalam (Gusarov et al., 2024).

Kajian material pada skala atom menuntut kerangka teori yang mampu menggambarkan interaksi elektron secara akurat. Fenomena seperti distribusi muatan, tingkat energi, dan pergerakan elektron berperan besar dalam menentukan sifat fisis suatu material. Pendekatan klasik tidak mampu menangkap kompleksitas tersebut secara memadai, terutama ketika sistem melibatkan banyak partikel yang saling berinteraksi. Oleh sebab itu, pemodelan berbasis mekanika kuantum berkembang sebagai fondasi utama dalam studi sifat elektronik material (Fedotov et al., 2021).

Seiring meningkatnya kompleksitas sistem yang dikaji, muncul kebutuhan akan metode komputasi yang mampu menjaga keseimbangan antara ketelitian fisik dan efisiensi perhitungan. Pendekatan berbasis densitas elektron berkembang dari kebutuhan tersebut dan menawarkan cara pandang yang lebih sederhana terhadap sistem banyak elektron. Kompleksitas interaksi antar elektron direpresentasikan melalui besaran kolektif, sehingga perhitungan dapat dilakukan dengan sumber daya komputasi yang lebih rasional. Kerangka ini kemudian banyak diterapkan dalam penelitian material modern dengan tingkat keandalan yang tinggi (Napiórkowska et al., 2023).

Pemanfaatan *Density Functional Theory* (DFT) dalam kajian ini berangkat dari kemampuannya menghasilkan deskripsi struktur elektronik yang sesuai dengan kebutuhan penelitian teoritis. Melalui pendekatan ini, informasi mengenai pita energi dan distribusi keadaan elektronik dapat diperoleh secara sistematis. Hasil simulasi memungkinkan peneliti mengamati karakter elektronik material tanpa keterbatasan eksperimental tertentu. Pendekatan ini juga memberikan fleksibilitas dalam menguji berbagai skenario komputasi secara terkontrol (Song et al., 2024).

Perhatian besar dalam penelitian material beberapa tahun terakhir tertuju pada sistem dua dimensi yang memiliki ketebalan ekstrem hingga satu lapisan atom. Dimensi yang sangat terbatas tersebut menyebabkan elektron bergerak dalam ruang yang terkonfinasi secara kuat. Kondisi ini memunculkan respon elektronik yang sering kali tidak ditemukan pada material tiga dimensi. Situasi tersebut menjadikan material dua dimensi sebagai platform penting dalam eksplorasi sifat elektronik fundamental (Zhao et al., 2022).

Graphene muncul sebagai salah satu sistem dua dimensi yang paling banyak dikaji karena kesederhanaan struktur atomiknya. Susunan atom karbon dalam kisi heksagonal membentuk sistem yang stabil sekaligus mudah dimodelkan secara teoritis. Kesederhanaan ini memberikan keuntungan dalam analisis komputasi karena meminimalkan kompleksitas struktural. Sifat elektronik yang muncul tetap menampilkan perilaku yang kompleks meskipun sistemnya sederhana (Ramli et al., 2025).

Pemanfaatan *graphene* murni tanpa cacat struktural dalam kajian ini diarahkan untuk memperoleh gambaran sifat elektronik yang tidak terdistorsi oleh faktor eksternal. Kondisi *perfect graphene* memungkinkan analisis difokuskan sepenuhnya pada pengaruh pendekatan teoritis dan metode komputasi yang digunakan. Dengan menghilangkan efek cacat, doping, atau regangan, perubahan hasil simulasi dapat ditelusuri secara langsung sebagai konsekuensi dari variasi *exchange-correlation* (XC) *functional*. Pendekatan ini memberikan kejelasan interpretasi serta memperkuat peran *graphene* sebagai sistem referensi dalam evaluasi metodologi komputasi material dua dimensi (Disa et al., 2022).

Kajian teoritis menunjukkan bahwa pita valensi dan pita konduksi pada *graphene* bertemu pada titik tertentu dalam ruang momentum. Konfigurasi tersebut mengarah pada ketiadaan celah pita energi dalam kondisi ideal. Distribusi densitas keadaan elektronik di sekitar tingkat Fermi pun menunjukkan karakteristik yang khas dengan nilai yang sangat kecil. Karakter semimetalik ini sering digunakan sebagai referensi untuk menilai konsistensi dan akurasi pendekatan komputasi (Shintov et al., 2021).

Kecepatan Fermi digunakan dalam kajian ini sebagai parameter tambahan untuk melengkapi analisis struktur pita energi dan densitas keadaan elektronik *graphene*. Besaran ini diperoleh dari kemiringan hubungan energi–momentum di sekitar titik Dirac dan berkaitan dengan kecepatan efektif pembawa muatan yang bergerak di dalam sistem. Nilai kecepatan Fermi memberikan gambaran mengenai dinamika elektron pada energi rendah dan berpengaruh langsung terhadap sifat konduktivitas elektron *graphene*. Karena ditentukan oleh gradien pita energi, kecepatan Fermi menjadi parameter yang sensitif terhadap detail struktur elektronik yang dihasilkan oleh pilihan *XC functional* (Ji et al., 2024).

Karakter elektronik yang telah banyak diprediksi secara teoritis menjadikan *graphene* sebagai sistem uji yang sensitif terhadap pendekatan komputasi. Ketika hasil simulasi menunjukkan perbedaan dari perilaku ideal, perhatian perlu diarahkan pada aspek metodologis yang digunakan. Penyimpangan tersebut dapat berasal dari pilihan metode, parameter numerik, maupun pendekatan teoritis tertentu. Situasi ini membuka ruang evaluasi yang penting dalam studi komputasi material (Mancardi et al., 2023).

Salah satu komponen penting dalam perhitungan berbasis DFT terletak pada perlakuan interaksi pertukaran dan korelasi elektron. Implementasi interaksi ini dilakukan melalui *XC functional* yang berperan langsung dalam menentukan hasil simulasi. Formulasi fungsional yang berbeda dapat memengaruhi posisi pita energi dan bentuk distribusi keadaan elektronik. Dampak tersebut menjadi semakin signifikan pada sistem dua dimensi yang sensitif terhadap perubahan kecil dalam pendekatan komputasi (Borlido et al., 2020).

Perbandingan antara *Local Density Approximation* (LDA), *Generalized Gradient Approximation* (GGA), dan *meta-Generalized Gradient Approximation* (meta-GGA) dilakukan untuk menilai sensitivitas prediksi sifat elektronik *graphene* terhadap variasi pendekatan tersebut. Setiap fungsional merepresentasikan tingkat pendekatan yang berbeda terhadap deskripsi elektron. Analisis komparatif memungkinkan identifikasi perbedaan yang muncul akibat asumsi dan formulasi yang digunakan. Hasil perbandingan ini diharapkan memberikan gambaran yang lebih komprehensif mengenai pengaruh pilihan fungsional (Yuk et al., 2024).

Pemilihan Quantum ESPRESSO sebagai perangkat lunak komputasi didasarkan pada kemampuannya menangani perhitungan DFT secara efisien dan konsisten. Perangkat ini mendukung berbagai *XC functional* yang relevan dengan penelitian ini. Fleksibilitas pengaturan parameter memungkinkan kontrol yang baik terhadap kondisi simulasi. Selain itu, penggunaannya yang luas dalam komunitas riset memperkuat aspek keterbandingan dan reproduktibilitas hasil.

Kajian difokuskan pada struktur pita energi dan densitas keadaan elektronik karena kedua besaran tersebut merepresentasikan sifat elektronik fundamental material. Analisis terhadap celah pita energi memberikan gambaran mengenai karakter konduktivitas *graphene*. Distribusi densitas keadaan di sekitar tingkat Fermi mencerminkan perilaku elektron pada energi rendah. Fokus pada dua parameter ini memungkinkan evaluasi yang tajam terhadap pengaruh variasi *functional*.

Tahapan penelitian diawali dengan pembangunan model *graphene* murni serta penetapan parameter komputasi yang seragam untuk seluruh simulasi. Struktur awal disiapkan dengan mempertimbangkan kondisi ideal tanpa cacat. Perhitungan kemudian dilakukan menggunakan beberapa *XC functional* dengan pengaturan *k-point mesh*, *cutoff* energi, dan pseudopotensial yang dijaga tetap konsisten.

Hasil simulasi selanjutnya dianalisis melalui visualisasi struktur pita energi dan densitas keadaan elektronik. Setiap hasil dibandingkan untuk mengidentifikasi perbedaan karakter elektronik yang muncul. Perhatian khusus diberikan pada wilayah sekitar tingkat Fermi untuk mendeteksi kemungkinan pembukaan celah

pita semu. Analisis ini dilakukan secara sistematis agar perbandingan antarfungsional tetap objektif.

Tahap akhir penelitian diarahkan pada penarikan kesimpulan mengenai pengaruh variasi XC *functional* terhadap struktur elektronik *graphene* ideal. Hasil analisis diinterpretasikan dalam konteks metodologi komputasi material dua dimensi. Kajian ini diharapkan dapat menjadi acuan numerik dan konseptual bagi penelitian sejenis serta mendorong peningkatan konsistensi dan ketepatan pemodelan berbasis DFT.

B. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang yang telah dijelaskan sebelumnya, maka rumusan masalah dalam penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Bagaimana variasi XC *functional* berupa *Local Density Approximation – Perdew–Zunger* (LDA-PZ), *Generalized Gradient Approximation – Perdew–Burke–Ernzerhof* (GGA-PBE), dan *meta-Generalized Gradient Approximation – Strongly Constrained and Appropriately Normed* (meta-GGA-SCAN) memengaruhi struktur elektronik dan kecepatan Fermi (*Fermi Velocity*) *perfect graphene* yang dihitung melalui pendekatan DFT?
2. Di antara fungsional LDA-PZ, GGA-PBE, dan meta-GGA-SCAN, pendekatan manakah yang secara konsisten merepresentasikan karakteristik elektronik *perfect graphene* berdasarkan struktur pita energi dan densitas keadaan elektronik, serta bagaimana variasi fungsional tersebut memengaruhi nilai kecepatan Fermi sebagai karakteristik parameter tambahan dalam analisis sifat elektronik *perfect graphene*?

C. Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah di atas, maka tujuan dari penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Mengkaji pengaruh variasi LDA-PZ, GGA-PBE, dan meta-GGA-SCAN terhadap struktur elektronik dan kecepatan Fermi *perfect graphene* melalui simulasi berbasis DFT.
2. Mengevaluasi tingkat konsistensi dan ketepatan fungsional LDA-PZ, GGA-PBE, dan meta-GGA-SCAN dalam merepresentasikan karakteristik elektronik *perfect graphene* berdasarkan hasil perhitungan struktur pita energi, densitas keadaan elektronik, serta nilai kecepatan Fermi sebagai karakteristik parameter tambahan dalam analisis sifat elektronik *perfect graphene*

D. Batasan Penelitian

Untuk menjaga fokus dan ruang lingkup penelitian terkait pengaruh variasi XC *functional* terhadap sifat elektronik *graphene*, maka penelitian ini dibatasi pada beberapa hal berikut:

1. Material yang dikaji adalah *graphene* ideal (*perfect monolayer graphene*) dengan struktur *honeycomb* sempurna, tanpa mempertimbangkan cacat kristal, doping, adsorpsi atom lain, pengaruh substrat, maupun aplikasi medan listrik atau regangan (*strain*).
2. Perhitungan dilakukan menggunakan teori DFT melalui perangkat lunak Quantum ESPRESSO dalam konfigurasi standar, tanpa integrasi pustaka eksternal seperti *Lib exchange-correlation* untuk memperluas opsi fungsional XC.
3. Variasi XC *functional* terbatas pada fungsional yang tersedia secara internal di Quantum ESPRESSO, yaitu:
 - LDA-PZ
 - GGA-PBE
 - meta-GGA-SCAN
4. Pemilihan pseudopotensial disesuaikan dengan XC *functional* yang digunakan, dan hanya menggunakan pseudopotensial yang tersedia pada repositori resmi Quantum ESPRESSO untuk memastikan konsistensi dan kompatibilitas perhitungan.

5. Penelitian ini berfokus pada pengaruh variasi *XC functional* terhadap karakteristik struktur pita energi, densitas keadaan elektronik, dan kecepatan Fermi pada *graphene* ideal, tanpa mengevaluasi upaya rekayasa pembukaan *band gap* melalui modifikasi struktur maupun penerapan kondisi eksternal.
6. Penelitian ini tidak membahas sifat mekanik grafena, seperti modulus elastisitas, tegangan, regangan, dan kekuatan tarik, karena tidak dilakukan variasi strain maupun perhitungan konstanta elastis.

E. Manfaat Penelitian

Adapun manfaat dari penelitian ini diharapkan mampu memberikan kontribusi yang berarti ke depannya. Berikut manfaat yang diperoleh dari penelitian ini:

1. Memberikan pemahaman mengenai pengaruh variasi *XC functional* fungsional LDA-PZ, GGA-PBE, dan meta-GGA-SCAN terhadap struktur elektronik dan kecepatan Fermi material dua dimensi, khususnya *perfect graphene*, sehingga dapat digunakan sebagai referensi dalam kajian sifat elektronik material berbasis komputasi.
2. Menyediakan acuan metodologis terkait keterkaitan antara pemilihan *XC functional* dan konsistensi hasil simulasi DFT, khususnya dalam analisis struktur pita energi, densitas keadaan elektronik, serta kecepatan Fermi, yang dapat mendukung peningkatan ketepatan dan keterbandingan studi komputasi material dua dimensi.