

**ANALISIS PENGARUH LEBAR POTENSIAL  
PENGHALANG TERHADAP PITA ENERGI PADA  
POTENSIAL KRONIG-PENNEY MENGGUNAKAN  
METODE FILTER**

**SKRIPSI**

oleh:  
**CITRA BENING NATALIA**  
**205090301111016**



**DEPARTEMEN FISIKA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS BRAWIJAYA  
MALANG  
2024**



**ANALISIS PENGARUH LEBAR POTENSIAL  
PENGHALANG TERHADAP PITA ENERGI PADA  
POTENSIAL KRONIG-PENNEY MENGGUNAKAN  
METODE FILTER**

**SKRIPSI**

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains  
dalam bidang fisika

oleh:

**CITRA BENING NATALIA  
205090301111016**



**DEPARTEMEN FISIKA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS BRAWIJAYA  
MALANG  
2024**



## **LEMBAR PENGESAHAN**

### **ANALISIS PENGARUH LEBAR POTENSIAL PENGHALANG TERHADAP PITA ENERGI PADA POTENSIAL KRONIG-PENNEY MENGGUNAKAN METODE FILTER**

oleh:

**CITRA BENING NATALIA**  
**205090301111016**

**Telah dipertahankan di depan Majelis Penguji pada tanggal 2  
Juli 2024 dan dinyatakan memenuhi syarat untuk memperoleh  
gelar Sarjana Sains dalam bidang fisika**

**Pembimbing I**

**Pembimbing II**

**Dr.rer.nat.Abdurrouf, S.Si., M.Si.**  
**NIP. 197209031994121001**

**Gancang Saroja, S.Si, M.T.**  
**NIP. 197711182005011002**

**Mengetahui,**  
**Ketua Departemen Fisika**  
**Fakultas MIPA Universitas Brawijaya**

**Dr. Eng. Masruroh, S.Si., M.Si.**  
**NIP. 197512312002122002**



*Ucapan terimakasih penulis sampaikan kepada BOPTN Fakultas  
Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam yang telah mendanai  
penelitian ini berdasarkan surat perjanjian Nomor.  
19/UN10.F09.01/PN/2017.*

(Halaman ini dapat dikosongkan jika penelitian Tugas Akhir tidak  
mendapat pendanaan atau semacamnya)





## **LEMBAR PERNYATAAN**

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Citra Bening Natalia  
NIM : 205090301111016  
Departemen/Program Studi : Fisika/Fisika  
Penulis Skripsi berjudul :

### **ANALISIS PENGARUH LEBAR POTENSIAL PENGHALANG TERHADAP PITA ENERGI PADA POTENSIAL KRONIG-PENNEY MENGGUNAKAN METODE FILTER**

Dengan ini menyatakan bahwa:

1. Tugas akhir ini adalah benar-benar karya saya sendiri dan bukan hasil plagiat dari karya orang lain. Karya-karya yang tercantum dalam Daftar Pustaka tugas akhir ini, semata-mata digunakan sebagai rujukan atau referensi.
2. Apabila di kemudian hari diketahui bahwa isi tugas akhir merupakan hasil plagiat, maka saya bersedia menanggung segala akibat dari keadaan tersebut.

Demikian pernyataan ini dibuat dengan segala kesadaran.

**Malang, 9 Mei 2024**  
**Yang menyatakan,**

**CITRA BENING NATALIA**  
**205090301111016**



# **ANALISIS PENGARUH LEBAR POTENSIAL PENGHALANG TERHADAP PITA ENERGI PADA POTENSIAL KRONIG-PENNEY MENGGUNAKAN METODE FILTER**

## **ABSTRAK**

Sifat konduktivitas listrik merupakan aspek penting dalam perkembangan teknologi saat ini karena berhubungan erat dengan gerak elektron dalam bahan. Dengan mengetahui spektrum energi atau kurva dispersi dalam struktur kisi kristal, sifat konduktivitas listrik dapat dipelajari lebih mendalam. Kronig-Penney adalah model matematis sederhana yang menggambarkan periodisitas struktur kristal. Metode Filter dapat digunakan untuk mencari nilai eigen dan fungsi eigen di potensial Kronig-Penney yang digunakan untuk mendapatkan spektrum energi atau kurva dispersi. Akan tetapi, metode Filter tidak dapat digunakan untuk menentukan bilangan gelombang yang merupakan aspek penting dalam kurva dispersi. Pada penelitian ini menganalisis pengaruh lebar penghalang terhadap pita energi dan kurva dispersi pada Kronig-penney. Selain itu, penelitian ini juga mengamati pengaruh medan listrik dalam potensial Kronig-Penney. Hasil penelitian menunjukkan bahwa pita energi menjadi lebih sempit dan bandgap menjadi lebar seiring dengan meningkatnya lebar penghalang. Sebaliknya pita energi menjadi lebih lebar seiring dengan meningkatnya kekuatan medan listrik. Kurva dispersi juga berubah, besarnya muatan listrik mempengaruhi luas daerah yang diperbolehkan dan daerah terlarang.

**Kata kunci:** Kronig-Penney, Metode Filter, Medan Listrik, Pita Energi, Kurva Dispersi



# **ANALYSIS OF THE INFLUENCE OF THE WIDTH OF THE POTENTIAL BARRIER ON THE ENERGY BAND AT THE KRONIG-PENNEY POTENTIAL USING THE FILTER METHOD**

## **ABSTRACT**

The property of electrical conductivity is a crucial aspect in current technological advancements because it is closely related to the motion of electrons within materials. By understanding the energy spectrum or dispersion curve in the crystal lattice structure, the properties of electrical conductivity can be studied more thoroughly. The Kronig-Penney model is a simple mathematical model that describes the periodicity of crystal structures. The Filter Method can be used to find eigenvalues and eigenfunctions in the Kronig-Penney potential, which are used to obtain the energy spectrum or dispersion curve. However, the Filter Method cannot be used to determine the wave number, which is an important aspect of the dispersion curve. This study analyzes the effect of barrier width on the energy band and dispersion curve in the Kronig-Penney model. Additionally, this study observes the influence of an electric field in the Kronig-Penney potential. The results indicate that the energy band becomes narrower and the bandgap widens as the barrier width increases. Conversely, the energy band widens as the strength of the electric field increases. The dispersion curve also changes, with the magnitude of the electric charge affecting the allowed and forbidden regions.

**Keyword:** Kronig-Penney, Filter Method, Electric Field, Energy Bands, Dispersion Curve



## KATA PENGANTAR

Puji dan syukur penulis panjatkan kehadiran Tuhan Yang Maha Esa, karena atas segala rahmat serta karunia-Nya, penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul **“ANALISIS PENGARUH LEBAR POTENSIAL PENGHALANG TERHADAP PITA ENERGI PADA POTENSIAL KRONIG-PENNEY MENGGUNAKAN METODE FILTER”** dengan baik dan lancar.

Skripsi ini disusun sebagai salah satu persyaratan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains (S.Si) dibidang Fisika, yang dalam pembuatannya tidak lepas dari bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak.

Oleh karena itu penulis mengucapkan terima kasih kepada:

1. Keluarga kecil tercinta, ayah, ibu, kedua kakak, dan Gentala yang telah memberikan doa, motivasi, dan memberi semangat baru ketika putus asa, serta materiil yang diberikan mulai dari awal perkuliahan sampai akhir perkuliahan, hingga pelaksanaan skripsi
2. Bapak Dr.rer.nat. Abdurrouf, S.Si., M.Si selaku dosen pembimbing I yang senantiasa meluangkan waktu untuk memberikan bimbingan, masukan, arahan sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dengan baik.
3. Bapak Gancang Saroja, S.Si, M.T., selaku pembimbing II yang senantiasa meluangkan waktu untuk memberikan bimbingan dan masukan dalam membimbing penulis sehingga skripsi dapat terselesaikan dengan baik.
4. Ibu Dr. Eng. Masrurroh, S.Si., M.Si selaku ketua Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (FMIPA).
5. Keluarga besar Jurusan Fisika mulai dari Sekretaris Jurusan, Dosen – dosen, Staff Tata Usaha, Ketua Laboratorium, dan Laboran yang memfasilitasi semua yang penulis butuhkan selama pelaksanaan skripsi.
6. Teman-teman Fisika angkatan 2020, kakak tingkat, adik tingkat, dan semua sahabat dekat atas pertemanan selama masa perkuliahan dan pelaksanaan skripsi.
7. Ucapan terima kasih khusus penulis ucapkan kepada mas Imam Rosyidi dan Iqbal Maulan Yusuf atas bantuannya baik tenaga, waktu, maupun pikiran.

8. Semua pihak yang terlibat dalam pengerjaan skripsi ini baik secara langsung dan tidak langsung yang tidak bisa disebutkan satu persatu.
9. Pembaca yang telah meluangkan waktu untuk membaca laporan skripsi ini.

Semoga Tuhan Yang Maha Esa memberikan balasan berlipat atas bantuan dan dukungan yang telah diberikan. Dan semoga skripsi ini bermanfaat khususnya bagi penulis, dan pembaca.

Penulis menyadari, skripsi ini masih banyak terdapat kekurangan, sehingga kritik dan saran sangat penulis harapkan.

Malang, 13 Mei 2024

Citra Bening Natalia



## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL .....	i
LEMBAR PENGESAHAN .....	v
LEMBAR PERNYATAAN .....	ix
ABSTRAK.....	xi
ABSTRACT.....	xiii
KATA PENGANTAR.....	xv
DAFTAR ISI.....	xvii
DAFTAR GAMBAR.....	xix
DAFTAR TABEL .....	xxi
DAFTAR LAMPIRAN .....	xxiii
DAFTAR SIMBOL DAN ISTILAH.....	xxv
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1. Latar Belakang.....	1
1.2. Rumusan Masalah .....	2
1.3. Batasan Masalah .....	3
1.4. Tujuan Penelitian .....	3
1.5. Manfaat Penelitian .....	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	5
2.1. Persamaan Schrodinger .....	5
2.2. Potensial Kronig-Penney .....	6
2.3. Gangguan Medan Listrik.....	9
2.4. Kurva Dispersi .....	10
2.5. Pita Energi .....	11
2.6. Metode Filter .....	13
2.7. Python .....	16
BAB III METODOLOGI PENELITIAN .....	17

xvii

3.1.	Tempat dan Waktu .....	17
3.2.	Peralatan dan Bahan .....	17
3.3.	Tahap Penelitian .....	17
3.4.	Diagram Alir Penelitian .....	20
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN .....		25
4.1.	Potensial Kronig-Penney Tanpa Medan Listrik .....	25
4.1.1	Nilai Eigen .....	25
4.1.2	Spektrum energi .....	27
4.1.3	Kurva dispersi .....	29
4.2.	Potensial Kronig Penney dengan Medan Listrik .....	33
BAB V PENUTUP .....		45
5.1.	Kesimpulan .....	45
5.2.	Saran .....	46
DAFTAR PUSTAKA .....		47

## DAFTAR GAMBAR

<b>Gambar 2.1</b>	Potensial Kronig-Penney. Lebar penghalang potensial adalah $L_{QD}$ , lebar sumur potensial adalah $L_B$ , dan tinggi potensial adalah $V_0$ .....	7
<b>Gambar 2.2</b>	Potensial Periodik Sebelum Medan Listrik Konstan Diterapkan ditunjukkan (a) dan Setelah Diterapkan Medan Listrik Konstan (b) .....	9
<b>Gambar 2.3</b>	Hubungan Energi dengan Bilangan Gelombang dengan celah yang Muncul Ketika $kL = n\pi$ .....	10
<b>Gambar 2.4</b>	Pita Energi dari Bahan Isolator, Semikonduktor, dan Konduktor .....	11
<b>Gambar 3.1</b>	Diagram Alir Skema Penelitian .....	22
<b>Gambar 3.2</b>	Diagram Alir Implementasi Program Perhitungan Komputasi dan Analitik Potensial Kronig-Penney Tanpa Medan Listrik .....	23
<b>Gambar 3.3</b>	Diagram Alir Implementasi Program Perhitungan Komputasi dan Analitik Potensial Kronig-Penney dengan Medan Listrik .....	24
<b>Gambar 4.1</b>	Spektrum energi potensial periodik Kronig-Penney dengan variasi lebar penghalang potensial.....	28
<b>Gambar 4.2</b>	Perbandingan Kurva Dispersi Potensial Kronig-Penney Numerik dan Analitik .....	31
<b>Gambar 4.3</b>	Spektrum energi potensial periodik Kronig-Penney ...	35
<b>Gambar 4.4</b>	Perbandingan Kurva Dispersi Tanpa Medan Listrik dan dengan Medan Listrik dengan.....	38



## DAFTAR TABEL

<b>Tabel 4.1a</b> Perbandingan nilai eigen numerik dan analitik untuk lebar penghalang sebesar 2 <i>a. u.</i> .....	27
<b>Tabel 4.1b</b> Perbandingan nilai eigen numerik dan analitik untuk lebar penghalang sebesar 4 <i>a. u.</i> .....	27
<b>Tabel 4.1c</b> Perbandingan nilai eigen numerik dan analitik untuk lebar penghalang sebesar 2 <i>a. u.</i> .....	27
<b>Tabel 4.2</b> Nilai eigen untuk setiap variasi perubahan medan listrik .....	34



## DAFTAR LAMPIRAN

<b>LAMPIRAN A1</b> Keluaran Simulasi Potensial Tanpa Medan Listrik dengan $a = 10 \text{ a.u.}$ , $b = 2 \text{ a.u.}$ , dan $V = 0.5 \text{ a.u.}$ .....	38
<b>LAMPIRAN A2</b> Keluaran Simulasi Potensial Tanpa Medan Listrik dengan $a = 10 \text{ a.u.}$ , $b = 4 \text{ a.u.}$ , dan $V = 0.5 \text{ a.u.}$ .....	39
<b>LAMPIRAN A3</b> Keluaran Simulasi Potensial Tanpa Medan Listrik dengan $a = 10 \text{ a.u.}$ , $b = 6 \text{ a.u.}$ , dan $V = 0.5 \text{ a.u.}$ .....	40
<b>LAMPIRAN A.4</b> Potensial dengan Medan Listrik $\varepsilon = 0 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$ .....	43
<b>LAMPIRAN A.5</b> Potensial dengan Medan Listrik $\varepsilon = 0 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$ .....	43
<b>LAMPIRAN A6</b> Potensial dengan Medan Listrik $\varepsilon = 2 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$ .....	44
<b>LAMPIRAN A7</b> Potensial dengan Medan Listrik $\varepsilon = 3 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$ .....	44
<b>LAMPIRAN A8</b> Potensial dengan Medan Listrik $\varepsilon = 4 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$ .....	45
<b>LAMPIRAN A9</b> Potensial dengan Medan Listrik $\varepsilon = 5 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$ .....	45
<b>LAMPIRAN 1B</b> Kode Program Spektrum Energi Tanpa Medan Listrik .....	46
<b>LAMPIRAN 2B</b> Kode Program Spektrum Energi dengan Medan Listrik .....	52

<b>LAMPIRAN 3B</b> Kode Program Kurva Dispersi Tanpa Medan Listrik .....	57
--	----

<b>LAMPIRAN 4B</b> Kode Program Kurva Dispersi dengan Medan Listrik .....	74
---	----



## DAFTAR SIMBOL DAN ISTILAH

### Simbol

$m^*$       Massa efektif elektron

### Istilah

*Boundary condition*      : kondisi batas

*Superlattice*      : struktur periodik yang terdiri dari dua atau lebih lapisan

Energi band      : rentang atau nilai – nilai energi yang diizinkan

Energi gap      : rentang atau nilai nilai energi yang tidak diizinkan

Spektrum energi      : Kumpulan nilai – nilai energi

Pita valensi      : rentang energi yang diisi oleh elektron valensi

Pita konduksi      : rentang energi di atas pita valensi]

*Tunneling*      : kemampuan elektron untuk menembus potensial penghalang



# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1. Latar Belakang

Pengetahuan sifat material suatu bahan menjadi hal yang penting dalam perkembangan teknologi pada saat ini. Salah satu sifat material yang penting yaitu kemampuan bahan untuk dapat menghantarkan listrik atau yang sering disebut sebagai sifat konduktivitas listrik. Sifat ini berhubungan erat dengan bagaimana cara elektron bergerak dalam bahan. Sifat konduktivitas ini dapat diketahui, diamati, dan dianalisis. Salah satu cara yang dapat dilakukan yaitu dengan mengetahui spektrum energi dalam suatu struktur kisi kristal.

Kronig-penney merupakan salah satu model matematis sederhana yang dapat menggambarkan periodisitas dari struktur kristal. Model Kronig-Penney adalah model yang disederhanakan untuk sebuah elektron dalam potensial periodik satu dimensi. Model ini terbentuk dari rangkaian tak terbatas dari penghalang dan sumur potensial berbentuk persegi panjang. Kelebihan dari model ini terletak pada kemampuannya untuk menentukan nilai-nilai eigen dan fungsi eigen secara analitis (Abdurrouf dkk., 2020). Dengan menggunakan representasi dari model potensial ini, maka akan didapatkan struktur pita energi. Pita energi merupakan sekelompok garis pada tingkat energi yang serupa, saling tumpang tindih, dan membentuk suatu pita (Pamungkas & Sanjaya, 2013).

Pita energi dalam suatu model potensial tidak akan bisa diperoleh jika nilai spektrum energi dari model potensial tidak diketahui, sehingga spektrum energi memiliki hubungan yang erat dengan pita energi. Karena spektrum energi menjadi hal yang penting maka dalam penelitian ini, nilai spektrum energi atau kumpulan nilai dari *eigenvalue* akan dicari terlebih dahulu. *Eigenvalue* merupakan suatu nilai energi pada saat elektron berada dalam keadaan tertentu. Dalam mekanika kuantum nilai energi akan bersifat diskrit bergantung pada keberadaan partikel tersebut.

*Eigenvalue* bisa didapatkan dengan memecahkan persamaan Schrodinger. Dengan memecahkan solusi persamaan Schrodinger pada suatu sistem potensial tertentu kita akan mendapatkan *eigenfunction* dan *eigenvalue*. Schrodinger merupakan suatu

persamaan matematika yang setara dengan mekanika matriks, yang disebut sebagai mekanika gelombang. Mekanika matriks Heisenberg dan mekanika gelombang Schrodinger dikenal sebagai mekanika kuantum dengan pengertian yang berbeda. Pada Mekanika matriks Heisenberg akan membahas operator – operator kuantum dalam sebuah matriks, sedangkan Mekanika gelombang Schrodinger lebih membahas tentang fungsi gelombang dalam mekanika kuantum. (Barde dkk., 2015).

Persamaan Schrodinger memiliki penyelesaian yang kompleks dan akan sangat sulit untuk dilakukan secara analitik. Oleh karena itu, sebagai alternatifnya perlu dilakukan perhitungan numerik untuk menyelesaikannya. Perhitungan numerik yang umum digunakan untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger stasioner ada 4 kategori, yaitu metode integrasi langsung, metode diagonal, metode relaksasi dan metode spektral (Nurhuda & Rouf, 2017). Dari beberapa metode tersebut memiliki keterbatasan dalam beberapa aspek, mulai dari masalah penentuan *boundary condition*, serta dibutuhkan komputasi yang sangat besar pada kasus yang lebih kompleks. Karena itu, dikembangkan metode metode Filter. Metode Filter merupakan metode yang digunakan untuk mencari nilai *eigenfunction* dan *eigenvalue* dalam persamaan diferensial yang didasarkan pada fungsi kontinu dari superposisi fungsi - fungsi eigen (Abdurrouf dkk., 2020).

Nilai *eigenvalue* akan mudah untuk didapatkan dengan menggunakan metode Filter. Akan tetapi pada metode Filter nilai bilangan gelombang ( $k$ ) yang terdapat pada kurva dispersi tidak bisa didapatkan. Dengan penelitian ini bisa didapatkan nilai bilangan gelombang yang memiliki peran penting dalam kurva dispersi. Dengan diketahui kurva dispersi maka bentuk *bandgap* bisa diketahui, apakah termasuk *direct* atau *indirect*. Kedua hal tersebut berperan penting dalam bahan material. Penyelesaian secara analitik juga dapat menghasilkan kurva dispersi tetapi dalam yang spesifik, misal untuk jenis material semikonduktor tertentu.

## 1.2. Rumusan Masalah

Beberapa masalah yang dapat dirumuskan pada penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Bagaimana nilai *eigenvalue* yang dihasilkan oleh metode Filter untuk potensial Kronig-Penney tanpa medan listrik dan dengan adanya medan listrik?
2. Bagaimana pengaruh perubahan lebar potensial penghalang dan medan listrik pada lebar pita energi?
3. Bagaimana bentuk kurva dispersi pada potensial Kronig-Penney?
4. Bagaimana pengaruh medan listrik pada kurva dispersi dalam potensial Kronig-Penney?

### 1.3. Batasan Masalah

Batasan masalah pada penelitian ini adalah:

1. Diterapkan pada sumur potensial periodik satu dimensi Kronig-Penney.
2. Metode numerik yang digunakan adalah metode Filter dengan variasi lebar potensial penghalang pada potensial Kronig-Penney.
3. Digunakan satuan *atomic units* (a.u.).
4. Orde medan Listrik yang digunakan sebesar  $-4$  untuk perhitungan potensial Kronig-Penney dengan medan listrik.

### 1.4. Tujuan Penelitian

Penelitian ini dilakukan dengan beberapa tujuan sebagai berikut.

1. Mengetahui nilai *eigenvalue* pada potensial Kronig-Penney tanpa medan listrik dan dengan medan listrik dengan metode Filter.
2. Mengetahui pengaruh lebar potensial penghalang dan penerapan medan listrik pada potensial Kronig-Penney terhadap lebar pita energi.
3. Mendapatkan kurva dispersi untuk potensial Kronig-Penney.

4. Mengetahui pengaruh medan Listrik pada kurva dispersi di potensial Kronig-Penney.

### **1.5. Manfaat Penelitian**

Penelitian ini dapat diterapkan untuk menentukan *eigenvalue* dan pita energi dari sumur potensial Kronig-Penney. Sehingga, dapat membentuk pemahaman terkait dengan nilai fisis pada Solusi persamaan Schrodinger dengan metode Filter. Nilai *eigenvalue* dapat digunakan untuk mengamati variasi pita energi yang terbentuk pada setiap keadaan sumur, sehingga akan didapatkan kurva dispersi dari potensial yang dicari.

## BAB II TINJAUAN PUSTAKA

### 2.1. Persamaan Schrodinger

De-Broglie menyatakan bahwa setiap terdapat suatu partikel yang bergerak, maka akan terdapat gelombang materi. Kedua konsep antara partikel dan gelombang materi dijelaskan lebih lanjut dengan menggunakan persamaan gelombang diferensial orde kedua. Partikel sebagai gelombang akan menghasilkan suatu fungsi gelombang, sehingga akan menghasilkan fungsi gelombang  $\psi$  dan energi  $E$  dari partikel. Probabilitas ditemukannya suatu partikel di wilayah tertentu pada waktu tertentu dapat diketahui dengan mengetahui nilai kuadrat absolut dari nilai  $\psi$ , yaitu  $|\psi|^2$ . Nilai  $E$  akan bergantung pada potensial  $V$  dan kondisi batas pada partikel. Heisenberg mengembangkan mekanika matriks di mana besaran fisika dijelaskan dalam bentuk nilai Eigen matriks. Schrodinger merupakan suatu persamaan matematika yang setara dengan mekanika matriks, yang disebut sebagai mekanika gelombang. Mekanika matriks Heisenberg dan mekanika gelombang Schrodinger dikenal sebagai mekanika kuantum dengan pengertian yang berbeda. Persamaan Schrodinger dibagi menjadi dua yaitu persamaan yang bergantung pada waktu dan tidak bergantung pada waktu. Dalam program ini digunakan persamaan Schrodinger tidak bergantung pada waktu. Dasar persamaan Schrodinger yaitu mengacu pada prinsip mekanika klasik yang dinyatakan dengan persamaan Hamiltonian (Barde dkk., 2015).

Partikel akan beresilasi jika terdapat gelombang yang merambat, yang mana terjadi di sepanjang lintasan. Gerakan partikel tersebut disebut sebagai gerak harmonik Sederhana dan perpindahan partikel dapat dirumuskan dengan mekanika gelombang (Barde dkk., 2015).

$$y = A \sin(\omega t - \delta). \quad (2.1)$$

Gerak harmonis suatu partikel akan memiliki gelombang yang direpresentasikan dengan fungsi gelombang  $\psi$ .

$$\psi = A \cdot e^{-i\omega(t-x/v)}. \quad (2.2)$$

Dengan

$$\omega = 2\pi\nu,$$

Dan

$$v = \nu\lambda,$$

sehingga,

$$\psi = A \cdot e^{-i2\pi(vt-x/\lambda)}. \quad (2.3)$$

Jika  $v$  adalah frekuensi osilasi, maka nilai total energinya adalah

$$E = hv = 2\pi\hbar.$$

$$v = \frac{E}{2\pi\hbar}.$$

$$\lambda = h/p = \frac{2\pi\hbar}{p}. \quad (2.4)$$

sehingga Persamaan (2.3) akan menjadi.

$$\psi = A \cdot e^{-i/h(Et-xp)}. \quad (2.5)$$

Persamaan (2.5) mewakili representasi matematis dari partikel tak terbatas energi total  $E$  dan momentum  $p$  bergerak sepanjang arah  $x$  dan nilai energi total partikel dapat ditulis sebagai berikut.

$$\begin{aligned} E &= K.E + P.E, \\ E &= \frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{m^2v^2}{2m} + V = \frac{p^2}{2m} + V, \\ E\psi &= \frac{p^2\psi}{2m} + V\psi. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Di mana,  $V$  adalah energi potensial dari partikel yang merupakan fungsi dari  $x$ . Mendiferensiasikan Persamaan (2.6) terhadap  $x$ .

$$\begin{aligned} \frac{\partial\psi}{\partial x} &= A \cdot e^{-\frac{i}{\hbar\bar{a}r}(Et-xp)} \cdot \frac{ip}{\hbar}, \\ \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} &= -\frac{p^2}{\hbar^2} A \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-xp)}, \\ \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} &= -\frac{p^2\psi}{\hbar^2}, \\ p^2\psi &= -\hbar^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}, \\ E\psi &= \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Persamaan Schrodinger 3D tidak bergantung waktu dirumuskan (Barde dkk., 2015).

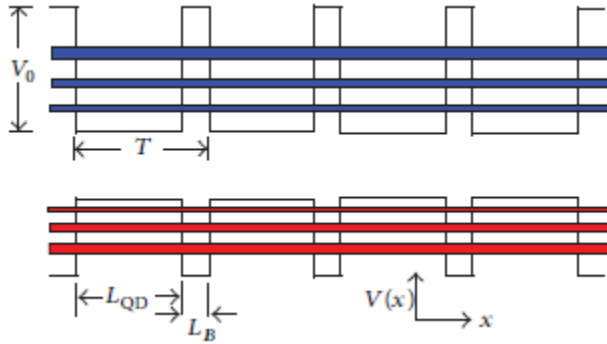
$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0. \quad (2.8)$$

## 2.2. Potensial Kronig-Penney

Model Kronig-Penney adalah model yang disederhanakan untuk sebuah elektron dalam potensial periodik satu dimensi. Model ini



terbentuk dari rangkaian tak terbatas dari penghalang dan sumur potensial berbentuk persegi panjang, sesuai dengan yang terlihat pada Gambar (2.1). Kelebihan dari model ini terletak pada kemampuannya untuk menentukan nilai-nilai eigen dan fungsi eigen secara analitis (Abdurrouf dkk., 2020).



**Gambar 2.1** Potensial Kronig-Penney. Lebar penghalang potensial adalah  $L_{QD}$ , lebar sumur potensial adalah  $L_B$ , dan tinggi potensial adalah  $V_0$  (Aly & Nasr, 2014).

Persamaan Schrodinger yang terdapat dalam sub-bab sebelumnya digunakan dalam perumusan potensial Kronig-Penney, yang mana dapat dituliskan dalam persamaan berikut.

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) k = Ek \quad (2.9)$$

Di mana  $\hbar$  adalah konstanta Plank,  $m$  adalah massa efektif,  $\nabla^2$  adalah operator differensial orde dua,  $V$  adalah energi potensial,  $E$  adalah energi total, dan  $k$  adalah bilangan gelombang (Aly & Nasr, 2014).

Dalam ruang satu dimensi, gelombang dengan muatan diasumsikan akan bergerak ke arah positif  $x$  pada potensial Kronig-Penney. Oleh karena itu, bentuk matematis dari pengulangan potensial ini yaitu sebagai berikut.

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & \text{untuk } x = L_B, \\ 0, & \text{untuk } x = L_{QD}. \end{cases} \quad (2.10)$$

Di mana pada rumusan tersebut  $V_0$  merupakan tinggi potensial,  $L_B$  merupakan lebar sumur potensial, dan  $L_{QD}$  merupakan lebar penghalang potensial. Berdasarkan Persamaan (2.10), maka persamaan Schrodinger akan dituliskan menjadi dua rumusan berikut.

$$\begin{aligned}\frac{d^2k}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}k &= 0, & \text{untuk } x = L_{QD}, \\ \frac{d^2k}{dx^2} + \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}k &= 0, & \text{untuk } x = L_B.\end{aligned}\quad (2.11)$$

Kedua Persamaan (2.11) dapat dinyatakan seperti pada Persamaan (2.12a) dalam model Kronig-Penney.

$$\frac{\sigma^2 - \delta^2}{2\sigma\delta} \sinh(\sigma L_B) \sin(\delta L_{QD}) - \quad (2.12a)$$

$$\cosh(\sigma L_B) \cos(\delta L_{QD}) = \cos((L_B + L_{QD})k), \quad (2.12b)$$

$$\sigma^2 = \frac{2m_B(V_0 - E)}{\hbar^2} = \frac{2m_B V_0}{\hbar^2} (1 - \epsilon), \quad (2.12c)$$

$$\delta^2 = \frac{2m_Q V_0}{\hbar^2} \frac{E}{V_0} = \frac{2m_Q V_0}{\hbar^2} \epsilon, \quad \epsilon = \frac{E}{V_0}.$$

Di mana  $m_B, m_Q$  masing – masing merupakan massa elektron di penghalang dan di sumur potensial. Berdasarkan pada Persamaan (2.12a), maka akan didefinisikan argumen lain untuk fungsi sinusoidal dan hiperbolik sebagai berikut.

$$\begin{aligned}\mu &= \frac{L_B}{L_{QD}}, \\ A_B &= L_{QD} \left( \frac{2m_B V_0}{\hbar^2} \right)^{1/2}, \\ A_Q &= L_{QD} \left( \frac{2m_Q V_0}{\hbar^2} \right)^{1/2}.\end{aligned}\quad (2.13)$$

Kemudian argumen – argumen pada Persamaan (2.13) disubstitusikan dalam Persamaan (2.12a) akan menjadi Persamaan (2.14) seperti berikut (Aly & Nasr, 2014).

$$\begin{aligned}&\frac{m_Q - (m_Q + m_B)\epsilon}{2(m_Q m_B)^{\frac{1}{2}}(1 - \epsilon)^{1/2}} \sinh \left[ \mu A_B (1 - \epsilon)^{\frac{1}{2}} \right] \sin \left( A_Q \epsilon^{\frac{1}{2}} \right) \\ &\quad + \cosh \left[ \mu A_B (1 - \epsilon)^{\frac{1}{2}} \right] \cos \left( A_Q \epsilon^{\frac{1}{2}} \right) \\ &= \cos[k L_{QD} (1 + \mu)], \text{ untuk } \epsilon < 1\end{aligned}\quad (2.14a)$$

$$\frac{m_{Q-(m_Q+m_B)\epsilon}}{2(m_Q m_B)^{\frac{1}{2}}(\epsilon-1)^{1/2}} \sin \left[ \mu A_B (\epsilon-1)^{\frac{1}{2}} \right] \sin \left( A_Q \epsilon^{\frac{1}{2}} \right) \quad (2.14b)$$

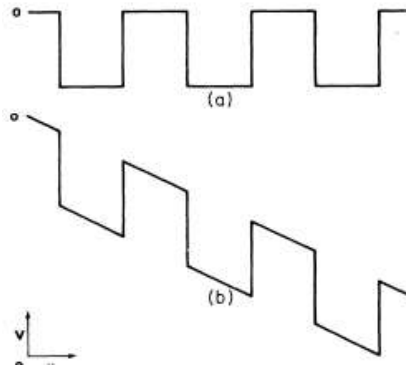
$$\begin{aligned} & + \cos \left[ \mu A_B (\epsilon-1)^{\frac{1}{2}} \right] \cos \left( A_Q \epsilon^{\frac{1}{2}} \right) \\ & = \cos \left[ k L_{QD} (1 + \mu) \right], \text{ untuk } \epsilon > 1, \\ \cos(A_Q) - \frac{\mu A_B}{2} \sin(A_Q) & \quad (2.14c) \\ & = \cos \left[ k L_{QD} (1 + \mu) \right], \text{ untuk } \epsilon = 1. \end{aligned}$$

### 2.3. Gangguan Medan Listrik

Medan listrik merupakan pengaruh listrik yang diakibatkan oleh adanya materi yang bermuatan listrik. Kuat medan di sekitar sumber muatan bergantung pada besar muatan listrik yang dimiliki oleh suatu materi (Nuriyah & Juwono, 2017). Ketika medan listrik eksternal yang bernilai tetap pada setiap posisi diterapkan pada potensial Kronig-Penney, maka akan sangat berdampak terhadap potensialnya. Dampak dari adanya penerapan medan listrik menghasilkan dua efek dalam potensial Kronig-Penney. Efek yang pertama mengakibatkan adanya perubahan bentuk pada setiap sumur potensial. Kedua, penerapan medan listrik dapat menggeser setiap energi pada sumur potensial (Emin & Hart, 1987). Ketika medan listrik diterapkan pada potensial Kronig-Penney, maka rumusan potensial juga akan berbeda sebelum adanya medan listrik. Untuk rumusan potensialnya seperti pada persamaan di bawah ini (Tarakanov, dkk., 2005).

$$V_{tot} = V(x) + e\epsilon x. \quad (2.15)$$

Yang mana  $V(x)$  merupakan nilai dari potensial Kronig-Penney sebelum penerapan medan listrik,  $e$  merupakan muatan elektron, dan  $\epsilon$  merupakan kuat medan listrik (Tarakanov, dkk., 2005).



Gambar 2.2 Potensial Periodik Sebelum Medan Listrik Konstan Diterapkan ditunjukkan (a) dan Setelah Diterapkan Medan Listrik Konstan (b) (Emin & Hart, 1987).

## 2.4. Kurva Dispersi

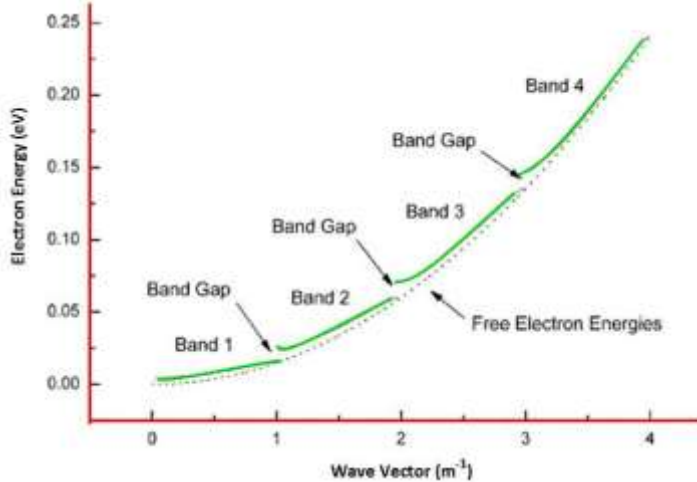
Kurva dispersi merupakan kurva yang menghubungkan antara energi ( $E$ ) dan bilangan gelombang  $k$  untuk elektron yang berada dalam superlattice seperti potensial Kronig-Penney. Pada kurva dispersi akan terjadi kondisi diskontinuitas dalam spektrum energi untuk  $kL = \pm n\pi$  atau  $k = \pm \frac{n\pi}{L}$ , yang mana kondisi ini akan sesuai dengan kondisi Bragg dengan  $n$  adalah bilangan bulat tidak nol. Sehingga, untuk bandgap pertama akan berada di  $k = \frac{\pi}{L}$ , bandgap kedua di  $k = \frac{2\pi}{L}$ , dan seterusnya. Berdasarkan hal tersebut maka, nilai  $k$  akan menentukan batas yang disebut Brillouin zones (Ikeri, dkk., 2020). Bilangan gelombang ( $k$ ) dapat dicari jika nilai panjang gelombang dapat diketahui atau jika dirumuskan dalam persamaan matematis seperti pada persamaan di bawah ini (Collins, dkk., 2017).

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (2.16a)$$

$$\lambda = \frac{s}{n}. \quad (2.16b)$$

Kurva dispersi untuk potensial periodik seperti pada Gambar (2.2). Pada gambar tersebut daerah yang diizinkan terletak di area di mana elektron memiliki energi sebelum mencapai celah pita. Sedangkan, untuk daerah di celah pita tidak terdapat elektron atau daerah yang tidak diizinkan. Nilai energi band akan meningkat dengan

meningkatnya nilai energi elektron. Sedangkan nilai energi celah pita menurun dengan meningkatnya energi elektron (Ikeri, dkk., 2020).



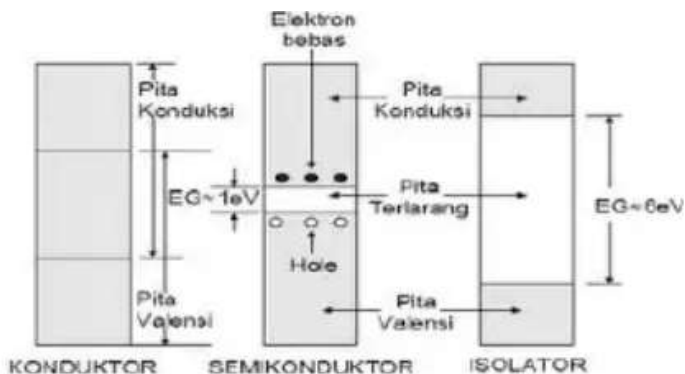
**Gambar 2.3** Hubungan Energi dengan Bilangan Gelombang dengan celah yang Muncul Ketika  $kL = n\pi$  (Ikeri, dkk., 2020).

Persamaan dispersi merupakan persamaan yang menghubungkan antara energi dan bilangan gelombang ( $k$ ), yang mana hubungan dari persamaan tersebut seperti yang telah dituliskan di Persamaan (2.12a). Di sisi kiri persamaan merupakan persamaan untuk energi dan sisi kanan untuk bilangan gelombang ( $k$ ). Dalam potensial periodik, persamaan tersebut harus terpenuhi jika fungsi gelombang ingin merepresentasikan sebuah elektron. Ruas kiri persamaan tersebut dapat dituliskan sebagai  $f(E)$ , sehingga akan didapat  $f(E) = \cos(L_B + L_{QD})k$ . Pada persamaan tersebut, untuk ruas kanan akan berada di rentang  $\pm 1$ . Hanya nilai energi direntang tersebutlah yang akan diizinkan, sedangkan untuk nilai di atas atau di bawah rentang tidak diizinkan. Rentang untuk daerah yang diizinkan akan terjadi saat  $k = 0$  atau  $k = \pm \frac{\pi}{L}$  (Ikeri, dkk., 2020).

## 2.5. Pita Energi

Pita energi merupakan sekelompok garis pada tingkat energi yang serupa, saling tumpang tindih, dan membentuk suatu pita. Elektron yang berada di orbit luar memiliki tingkat energi yang dekat antara satu sama lain. Sesuai dengan prinsip Pauli, dalam suatu tingkat

energi, tidak boleh ada lebih dari satu elektron yang memiliki keadaan serupa. Oleh karena itu, jika terdapat lebih dari satu elektron dalam keadaan yang sama, akan terjadi pergeseran tingkat energi, menghindarkan tumpang tindihnya garis energi (Pamungkas & Sanjaya, 2013). Dalam menjelaskan konduktivitas suatu materi, sering kali konsep pita energi digunakan. Terdapat dua jenis pita energi, yakni pita energi valensi dan pita energi konduksi. Pita energi valensi merupakan kisaran energi yang dapat diisi oleh elektron dalam bahan padat hingga mencapai keadaan penuh, sementara pita energi konduksi adalah tempat tambahan yang akan diisi oleh elektron setelah penuhnya pita energi valensi. Pada suhu 0 K, pita konduksi sebagian terisi untuk bahan konduktor, sedangkan pada isolator dan semikonduktor, tidak ada elektron yang mengisi penuh pita energi konduksi. Secara diagramatik pita energi dari isolator, semikonduktor, dan konduktor ditunjukkan Gambar (2.4) berikut.



**Gambar 2.4** Pita Energi dari Bahan Isolator, Semikonduktor, dan Konduktor (Handayani & Yazibarahmah, 2017).

Elektron yang berasal dari pita valensi perlu memiliki energi setidaknya sebesar energi gap untuk dapat berpindah ke pita konduksi. Ilustrasi di atas menunjukkan besarnya energi gap pada berbagai jenis bahan. Terlihat bahwa isolator memiliki energi gap yang paling besar, sehingga elektron pada pita valensi sulit untuk beralih ke pita konduksi. Pada konduktor, celah energi atau energi gap sangat kecil, bahkan pada beberapa logam, di mana pita konduksi dan pita valensi tumpang tindih sehingga tidak ada energi gap yang dapat diidentifikasi. Pada bahan semikonduktor, energi gap dapat

berubah sesuai dengan suhunya. Celah energi pada semikonduktor menjadi semakin kecil ketika dipanaskan, atau dengan kata lain, ketika suhu dinaikkan. Energi band adalah kisaran energi tertentu yang mencakup semua kemungkinan nilai energi elektron. Sedangkan energi gap merupakan selisih antara dua pita energi atau biasanya disebut sebagai daerah terlarang (Handayani & Yazibarahmah, 2017).

## 2.6. Metode Filter

Metode filter merupakan metode yang digunakan untuk mencari nilai *eigenfunction* dan *eigenvalue* dalam persamaan diferensial yang didasarkan pada fungsi kontinu dari superposisi fungsi - fungsi eigen. Fungsi eigen tersebut dapat diimplementasikan dengan operator berikut (Abdurrouf dkk., 2020).

$$\hat{F} = \frac{1}{\hat{H} - E_n}. \quad (2.17)$$

Operator yang diterapkan pada fungsi  $\Psi(x)$  akan menghasilkan operasi berikut.

$$\begin{aligned} F\Psi(x) &= \frac{1}{H - E} \sum_m a_m \phi_m(x), \\ &= \sum_m a_m \phi_m(x) \delta(E_m - E), \\ &= \tilde{\phi}_m(x). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Apabila metode Filter diterapkan, maka untuk menentukan  $E_m$  bisa dilakukan proses iterasi seperti berikut (Nurhuda & Rouf, 2017).

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_m^1(x) &= \frac{\Psi(x)}{H - E_m^0}, \\ \phi_m^1(x) &= \frac{\tilde{\phi}_m^1(x)}{\sqrt{\int d^3r |\tilde{\phi}_m^1(x)|^2}}, \\ E_n^1 &= \int d^3r \tilde{\phi}_m^1(x) H \tilde{\phi}_m^1(x). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Fungsi eigen untuk tingkat ke- $m$  dan pada iterasi  $n + 1$  dapat ditentukan dengan persamaan berikut.

$$\begin{aligned} (H - E_m^n) \tilde{\phi}_m^{n+1}(x) &= \phi_m^n(x), \\ H \tilde{\phi}_m^{n+1}(x) - E_m^n \tilde{\phi}_m^{n+1}(x) &= \phi_m^n(x). \end{aligned} \quad (2.20)$$

$E_m^n$  merupakan nilai eigen untuk tingkat ke- $m$  hasil iterasi ke- $n$  dan  $\phi_m^n(x)$  merupakan fungsi eigen untuk tingkat ke- $m$  hasil iterasi ke- $n$ . Sehingga, persamaan di atas dapat dinyatakan sebagai berikut.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \tilde{\phi}_m^{n+1}(x) + V(x) \tilde{\phi}_m^{n+1}(x) - E_m^n \tilde{\phi}_m^{n+1}(x) \quad (2.21)$$

$$= \phi_m^n(x).$$

Pada persamaan di atas nilai  $\hbar$  dan  $m$  yaitu satu karena digunakan satuan atomic (a.u.), sehingga akan menjadi,

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \tilde{\phi}_m^{n+1}(x) + V(x) \tilde{\phi}_m^{n+1}(x) - E_m^n \tilde{\phi}_m^{n+1}(x) \quad (2.22)$$

$$= \phi_m^n(x).$$

Turunan orde dua dari  $\phi_m^{n+1}$  dapat dicari dengan menggunakan metode beda hingga yang dapat dirumuskan seperti pada persamaan di bawah ini,

$$\frac{d^2}{dx^2} \tilde{\phi}(x_i) \approx \frac{\tilde{\phi}(x_{i+1}) - 2\tilde{\phi}(x_i) + \tilde{\phi}(x_{i-1}))}{\Delta x^2}. \quad (2.23)$$

Sehingga Persamaan (2.22) akan menjadi,

$$\frac{-\tilde{\phi}_m^{n+1}(x_{i+1}) + 2\tilde{\phi}_m^{n+1}(x_i) - \tilde{\phi}_m^{n+1}(x_{i-1}))}{2\Delta x^2} + V(x_i) \tilde{\phi}_m^{n+1}(x_i) - E_m^n \tilde{\phi}_m^{n+1}(x_i)$$

$$= \phi_m^n(x_i), \quad (2.24)$$

$$-\frac{\tilde{\phi}_m^{n+1}(x_{i+1})}{2\Delta x^2} + \frac{\tilde{\phi}_m^{n+1}(x_i)}{2\Delta x^2} + V(x_i) \tilde{\phi}_m^{n+1}(x_i)$$

$$- E_m^n \tilde{\phi}_m^{n+1}(x_i) - \frac{\tilde{\phi}_m^{n+1}(x_{i-1}))}{2\Delta x^2}$$

$$= \phi_m^n(x_i).$$

Dengan melakukan permisalan

$$\alpha = -\frac{1}{2\Delta x^2}, \beta_i = \frac{1}{\Delta x^2} + V(x_i) - E_m^n. \quad (2.25)$$

Sehingga, Persamaan (2.24) akan menjadi seperti persamaan berikut,

$$\alpha \tilde{\phi}_m^{n+1}(x_{i+1}) + \beta_i \tilde{\phi}_m^{n+1}(x_i) + \alpha \tilde{\phi}_m^{n+1}(x_{i-1})) \quad (2.26)$$

$$= \phi_m^n(x_i).$$

Untuk menyelesaikan persamaan tersebut, maka digunakan matriks tridiagonal



$$\begin{bmatrix} \beta_1 & \alpha & & & 0 \\ \alpha & \beta_2 & \alpha & & \\ & \alpha & \beta_3 & \alpha & \\ & & \alpha & \beta_4 & \alpha \\ & & & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \alpha & \beta_{i-1} & \alpha \\ & & & & \alpha & \beta_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\phi}_m^{n+1}(x_1) \\ \tilde{\phi}_m^{n+1}(x_2) \\ \tilde{\phi}_m^{n+1}(x_3) \\ \tilde{\phi}_m^{n+1}(x_4) \\ \vdots \\ \tilde{\phi}_m^{n+1}(x_{i-1}) \\ \tilde{\phi}_m^{n+1}(x_i) \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

$$= \begin{bmatrix} \phi_m^n(x_1) \\ \phi_m^n(x_2) \\ \phi_m^n(x_3) \\ \phi_m^n(x_4) \\ \vdots \\ \phi_m^n(x_{i-1}) \\ \phi_m^n(x_i) \end{bmatrix}$$

Penyelesaian matriks tridiagonal tersebut diselesaikan dengan menggunakan metode dekomposisi LU. Setelah diselesaikan dengan metode tersebut, maka nilai  $\tilde{\phi}_m^{n+1}$  dan  $\tilde{o}$  dapat diketahui. Setelah  $\tilde{\phi}_m^{n+1}$  dilakukan normalisasi, maka akan didapatkan rumusan sebagai berikut.

$$\phi_m^{n+1} = \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^i |\tilde{\phi}_m^{n+1}(x_i)|^2 \Delta x}} \tilde{\phi}_m^{n+1}. \quad (2.28)$$

Untuk tingkat ke-  $n + 1$ ,  $E_m^{n+1}$  nilai energi dapat dirumuskan dengan persamaan berikut,

$$\begin{aligned} E_m^{n+1} &= \int_i \phi_m^{n+1}(x) (H \phi_m^{n+1}(x)) dx, \\ E_m^{n+1} &= \int_{i=1} \phi_m^{n+1}(x_i) (H \phi_m^{n+1}(x_i)) dx. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Dengan menggunakan operasi numerik, Hamiltonian nilai  $H \phi_m^{n+1}(x_i)$  sebagai berikut,

$$\begin{aligned} &H \phi_m^{n+1}(x_i) \\ &= \frac{\phi_m^{n+1}(x_{i+1}) - 2\phi_m^{n+1}(x_i) + \phi_m^{n+1}(x_{i-1}))}{2\Delta x^2} \\ &+ V(x_i) \phi_m^{n+1}(x_i). \end{aligned} \quad (2.30)$$

$$H\phi_m^{n+1}(x_i) = -\frac{\phi_m^{n+1}(x_{i-1})}{2\Delta x^2} + \frac{\phi_m^{n+1}(x_i)}{\Delta x^2} + V(x_i)\phi_m^{n+1}(x_i) - \frac{\phi_m^{n+1}(x_{i+1})}{2\Delta x^2}. \quad (2.31)$$

Dengan melakukan permisalan

$$\alpha = -\frac{1}{2\Delta x^2}, \beta_i = \frac{1}{\Delta x^2} + V(x_i). \quad (2.32)$$

Maka, nilai Hamiltonian akan menjadi,

$$H\phi_m^{n+1}(x_i) = -\alpha\phi_m^{n+1}(x_{i-1}) + \beta\phi_m^{n+1}(x_i) - \alpha\phi_m^{n+1}(x_{i+1}). \quad (2.32)$$

$$E_m^{n+1} = \sum_{i=1}^i \left[ \left( -\alpha\phi_m^{n+1}(x_{i-1})\phi_m^{n+1}(x_i) + \beta(\phi_m^{n+1}(x_i))^2 - \alpha\phi_m^{n+1}(x_{i+1})\phi_m^{n+1}(x_i) \right) \Delta x \right]. \quad (2.33)$$

Jika error target lebih besar, maka operasi metode filter dari akan terus dilakukan dengan  $\phi_m^{n+1}$  menjadi  $\phi_m^n$  dan  $E_m^{n+1}$  menjadi  $E_m^n$  (Abdurrouf dkk., 2020).

## 2.7. Python

Python pertama kali dirancang dan ditemukan oleh Guido van Rossum pada tahun 1990. Bahasa pemrograman ini merupakan *open source* yang dapat digunakan secara gratis dan dapat diinstal pada berbagai sistem operasi seperti MacOS, Windows, Linux dll. Memiliki sintaks yang sederhana sehingga mudah untuk dipahami. Python menggunakan kompilasi kode *byte* yang dilakukan secara otomatis oleh interpreter yang kemudian akan diinterpretasikan. Pada Bahasa python terdapat data tingkat tinggi yang disebut dengan *list* dan array atau yang biasa disebut sebagai *dictionary*. Terdapat banyak *library* yang dapat digunakan di Bahasa pemrograman python sehingga semakin mudah untuk digunakan. Selain itu, Python juga menawarkan berbagai fitur lainnya seperti modul, kelas, dan manajemen memori otomatis (Sanner, 1999).

## **BAB III**

### **METODOLOGI PENELITIAN**

#### **3.1. Tempat dan Waktu**

Penelitian ini dilaksanakan pada bulan Maret 2024 sampai dengan Mei 2024. Ada pula tempat penelitian dan juga penulisan laporan ini dilakukan di kediaman penulis.

#### **3.2. Peralatan dan Bahan**

Alat yang digunakan dalam penelitian ini antara lain sebagai berikut:

1. Laptop Asus dengan *processor* 11th Gen Intel(R) Core(TM) i3-1115G4 @ 3.00GHz 3.00 GHz, RAM 8.00 GB.
2. IDE (*Integrated Development Environment*) berupa *google collab*.

#### **3.3. Tahap Penelitian**

Penelitian ini dilakukan dengan beberapa tahapan yaitu sebagai berikut:

##### **1. Tinjauan Pustaka**

Pada tahap ini penulis melakukan studi literatur dan mempelajari materi yang digunakan untuk metode Filter sebagai perhitungan secara komputasi. Disini penulis juga mempelajari konsep dan materi tentang potensial Kronig-Penney untuk diterapkan dalam metode Filter serta untuk melakukan perhitungan secara analitik. Kemudian melakukan studi literatur terkait pita energi untuk potensial periodik.

##### **2. Penyusunan Program**

Untuk penyusunan program ini digunakan IDE berbasis web *open source* yang berupa *google collab* untuk mencari nilai eigen, pita energi, dan kurva dispersi pada potensial Kronig-Penney tanpa medan listrik dan adanya medan listrik:

##### **2.1 Kronig-Penney tanpa medan listrik**

Implementasi program pada potensial tanpa medan listrik ini dilakukan sebanyak dua kali untuk setiap data yang akan dicari, yang mana akan dicari dengan melakukan perhitungan komputasi dan analitik.

### 2.1.1 Komputasi

Pada perhitungan secara komputasi menggunakan metode Filter. Fungsi eigen dan nilai eigen dari potensial Kronig-Penney bisa diperoleh dengan metode Filter. Untuk mendapatkan nilai eigen dari potensial Kronig-Penney, maka visualisasi dari potensial Kronig-Penney harus dicari terlebih dahulu dengan menggunakan Persamaan (2.10). Sehingga berdasarkan persamaan tersebut dibutuhkan beberapa inputan untuk mendapatkan model potensial Kronig-Penney. Inputan tersebut diantaranya tinggi potensial ( $V_0$ ), lebar penghalang potensial ( $L_B$ ) yang mana pada implementasinya dimisalkan dalam sebuah variabel  $b$ , lebar sumur potensial ( $L_{QD}$ ) yang dimisalkan dalam sebuah variabel  $a$ . Kemudian untuk mendapatkan nilai eigennya, maka digunakan metode Filter. Dalam operator Filter pada Persamaan (2.17), hasil dari potensial Kronig-Penney yang telah dicari sebelumnya akan digunakan. Pada metode Filter ini dibutuhkan inputan untuk mendapatkan nilai – nilai eigen, yaitu rentang nilai eigen yang akan dicari dan banyaknya nilai eigen.

Lebar pita energi dari potensial Kronig-Penney bisa diperoleh dari spektrum energi yang dihasilkan. Dilakukan plot grafik nilai – nilai energi terhadap variasi lebar penghalang untuk mendapatkan spektrum energi. Di mana sumbu x merupakan nilai energi dan variasi lebar penghalang adalah sumbu y. Untuk dapat melakukan plot grafik, maka banyaknya elemen sumbu x dan y harus sama, sehingga banyaknya elemen sumbu y disesuaikan dengan banyaknya nilai eigen.

Kurva dispersi didapatkan dengan melakukan plot grafik nilai – nilai energi terhadap nilai bilangan gelombang ( $k$ ), yang mana sumbu x merupakan nilai bilangan gelombang ( $k$ ) dan sumbu y merupakan nilai energi. Banyaknya nilai energi dan bilangan gelombang harus sama sehingga bisa dilakukan plot. Nilai – nilai energi didapatkan dari proses mencari nilai eigen pada metode sebelumnya. Berdasarkan Persamaan (2.16a) maka untuk mendapatkan nilai bilangan gelombang, panjang gelombang ( $\lambda$ ) harus didapatkan terlebih dahulu. Panjang gelombang didapatkan berdasarkan fungsi eigen

yang diperoleh dari metode Filter. Setiap nilai eigen memiliki fungsi eigennya masing – masing. Dari fungsi eigen tersebut digunakan untuk menentukan panjang gelombang dengan menggunakan (2.16b), dari persamaan tersebut maka dibutuhkan parameter lain yaitu panjang seluruh gelombang dan banyaknya gelombang. Dengan melihat fungsi eigen, maka banyaknya gelombang bisa ditentukan. Gelombang terdiri dari puncak dan lembah, dalam implementasi ini, antara puncak dan lembah dipisahkan. Untuk mencari puncak, maka dicari dari nilai gradien yang lebih besar dari nol dan kurang dari nol. Sebaliknya dengan lembah, terbentuk saat gradien kurang dari nol dan gradien lebih dari nol. Kemudian pada implementasi ini digunakan dua kondisi yang berbeda untuk menentukan banyaknya lembah dan puncak. Untuk kondisi pertama, karena pada tingkat energi awal fungsi eigen yang terbentuk sulit untuk menentukan lembah yang terbentuk, maka digunakan *threshold* sebesar 0,01, sehingga indeks lembah yang di bawah *threshold* bukan merupakan lembah. Pada kondisi yang kedua, yaitu pada level energi yang lebih tinggi di mana puncak dan lembah mudah untuk diamati maka nilai puncak sama dengan lembah. Ketika jumlah puncak dan lembah sudah ditemukan, maka nilai  $\lambda$  bisa dicari menggunakan Persamaan (2.16b) dan nilai bilangan gelombang bisa dicari juga berdasarkan Persamaan (2.16a). Setelah itu kurva dispersi yang terbentuk diubah nilai bilangan gelombangnya dalam rentang  $\frac{\pi}{L}$  sampai  $-\frac{\pi}{L}$ . Kemudian melakukan plot grafik dari hasil bilangan gelombang tersebut terhadap nilai energi.

### 2.1.2 Analitik

Berbeda dengan perhitungan komputasi, dalam perhitungan secara analitik nilai eigen dicari dengan menerapkan Persamaan (2.14a) sampai (2.14c). Berdasarkan persamaan tersebut, maka untuk mendapatkan nilai eigen memerlukan beberapa nilai inputan yang sama seperti perhitungan komputasi yaitu tinggi potensial ( $V_0$ ), lebar penghalang potensial ( $L_B$ ) yang mana pada implementasinya dimisalkan dalam sebuah variabel  $b$ , lebar sumur potensial  $L_{QD}$  yang dimisalkan dalam sebuah variabel  $a$ . Sama seperti

pada perhitungan secara komputasi, untuk mendapatkan pita energi maka dapat diperoleh dari spektrum energi. Berbeda untuk mencari kurva dispersi pada perhitungan analitik. Pada analitik, nilai bilangan gelombang dapat dicari dari invers cosinus dari nilai  $f_{eps}$  atau ruas kiri persamaan dari Persamaan (2.14a) sampai (2.14c). Kemudian hasil invers tersebut diubah dalam rentang  $\left[-\frac{\pi}{L}, \frac{\pi}{L}\right]$ .

## 2.2 Kronig-Penney dengan medan Listrik

Implementasi program untuk potensial Kronig-Penney dengan medan listrik hanya dilakukan perhitungan secara komputasi, karena perhitungan secara analitik sulit untuk didapatkan. Implementasi pada kasus ini hampir sama seperti sebelum adanya medan listrik untuk nilai eigen, pita energi, dan kurva dispersi. Hal yang membedakan yaitu rumusan potensial yang digunakan. Pada kasus ini menggunakan Persamaan (2.15), berdasarkan rumus tersebut terdapat sebuah inputan yaitu besarnya medan ( $\varepsilon$ ), sedangkan nilai muatan elektron diubah menjadi satuan *atomic unit* yang nilainya  $1 a.u.$  Selanjutnya untuk proses yang lain sama seperti pada potensial Kronig-Penney sebelum adanya medan listrik.

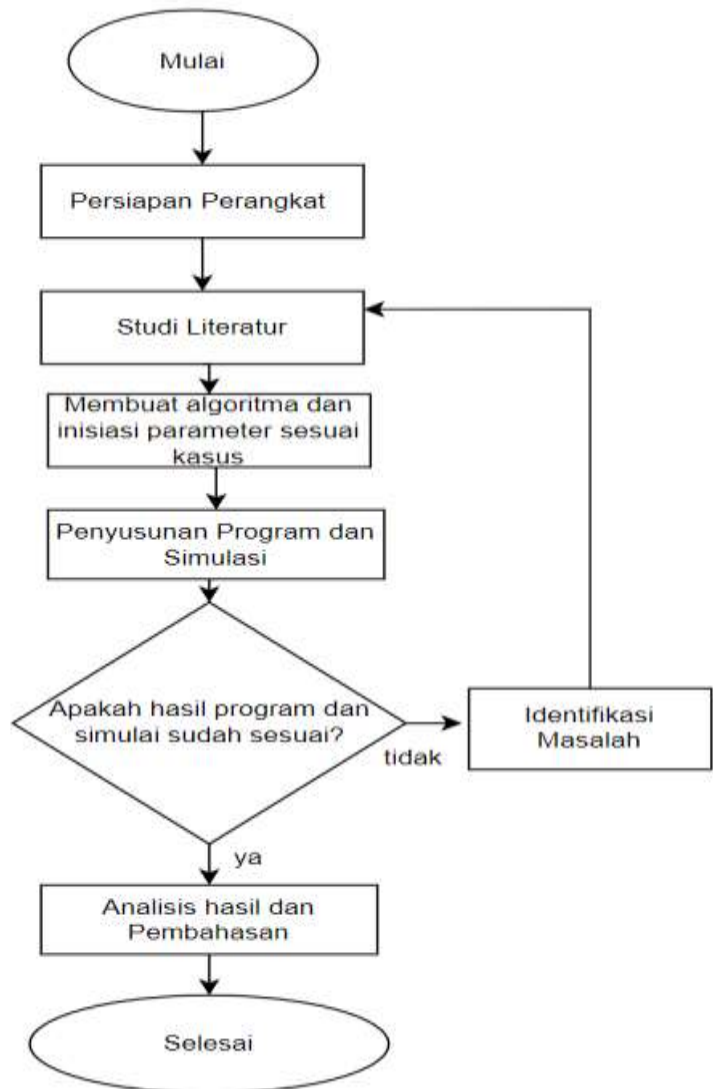
## 3. Simulasi Program

Setelah dilakukan penyusunan program, maka dilakukan simulasi untuk kode program yang sudah dituliskan. Dalam melakukan simulasi ini, untuk kasus potensial Kronig-Penney tanpa medan listrik dilakukan variasi lebar penghalang potensial untuk mencari nilai eigen, lebar pita energi, dan kurva dispersi. Yang mana nilai – nilai lebar penghalang potensial yang digunakan yaitu  $2 a.u.$ ,  $3 a.u.$ ,  $4 a.u.$  Sedangkan untuk potensial Kronig-Penney dengan medan listrik dilakukan variasi nilai medan untuk mencari nilai eigen, lebar pita. Digunakan beberapa nilai medan listrik yaitu  $0 \times 10^{-4} a.u.$ ,  $1 \times 10^{-4} a.u.$ ,  $2 \times 10^{-4} a.u.$ ,  $3 \times 10^{-4} a.u.$ ,  $4 \times 10^{-4} a.u.$  dan  $5 \times 10^{-4} a.u.$

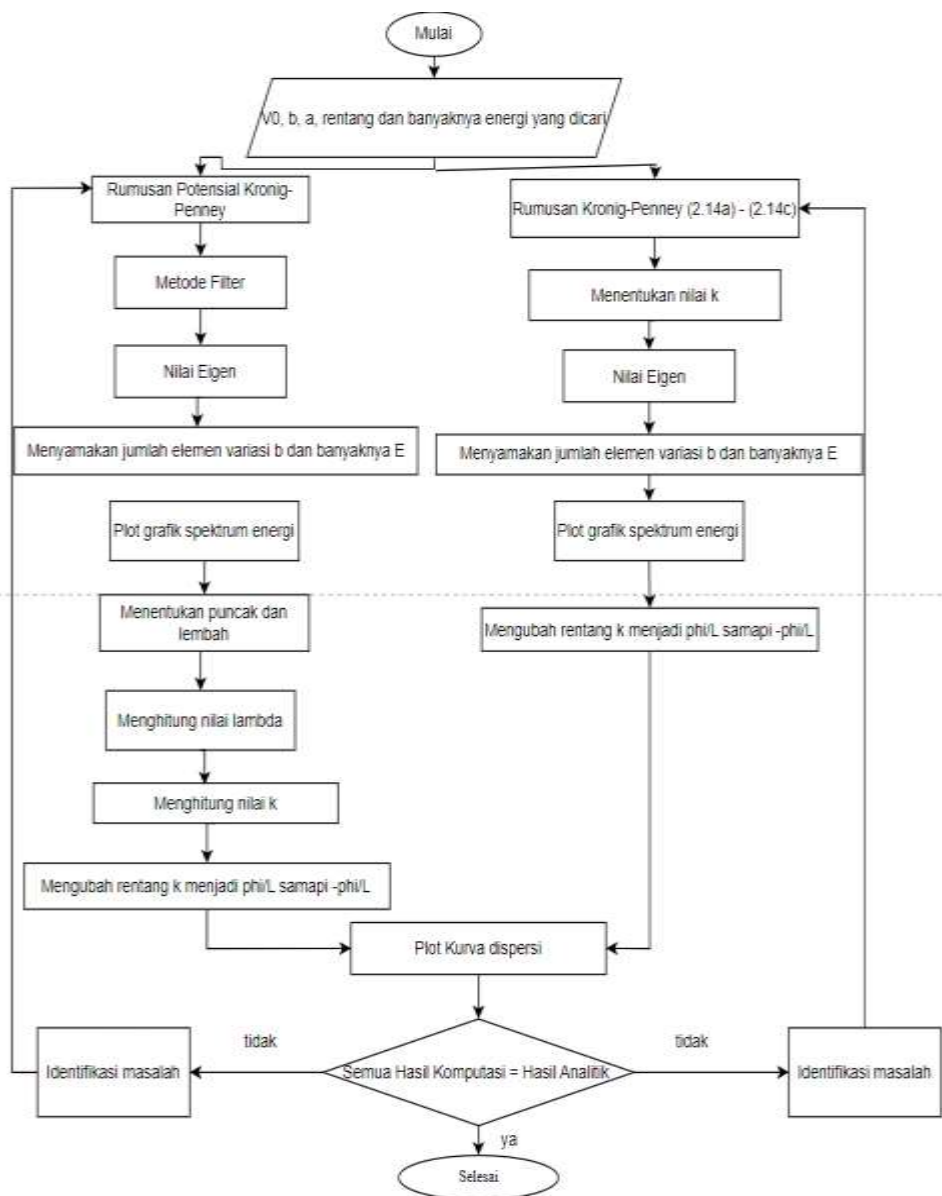
## 3.4. Diagram Alir Penelitian

Pada pengerjaan tugas akhir ini, tahapan yang dilakukan berlangsung secara iteratif seperti yang ditunjukkan pada Gambar (3.1). Jika hasil keluaran dan simulasi program telah sesuai dengan poin – poin yang dipaparkan pada tujuan penelitian maka proses

iterasi dihentikan. Pada tahap yang kedua mengenai proses implementasi program sesuai dengan permasalahan yang terdiri dari sekumpulan proses yang ditunjukkan pada Gambar (3.2) dan (3.3).

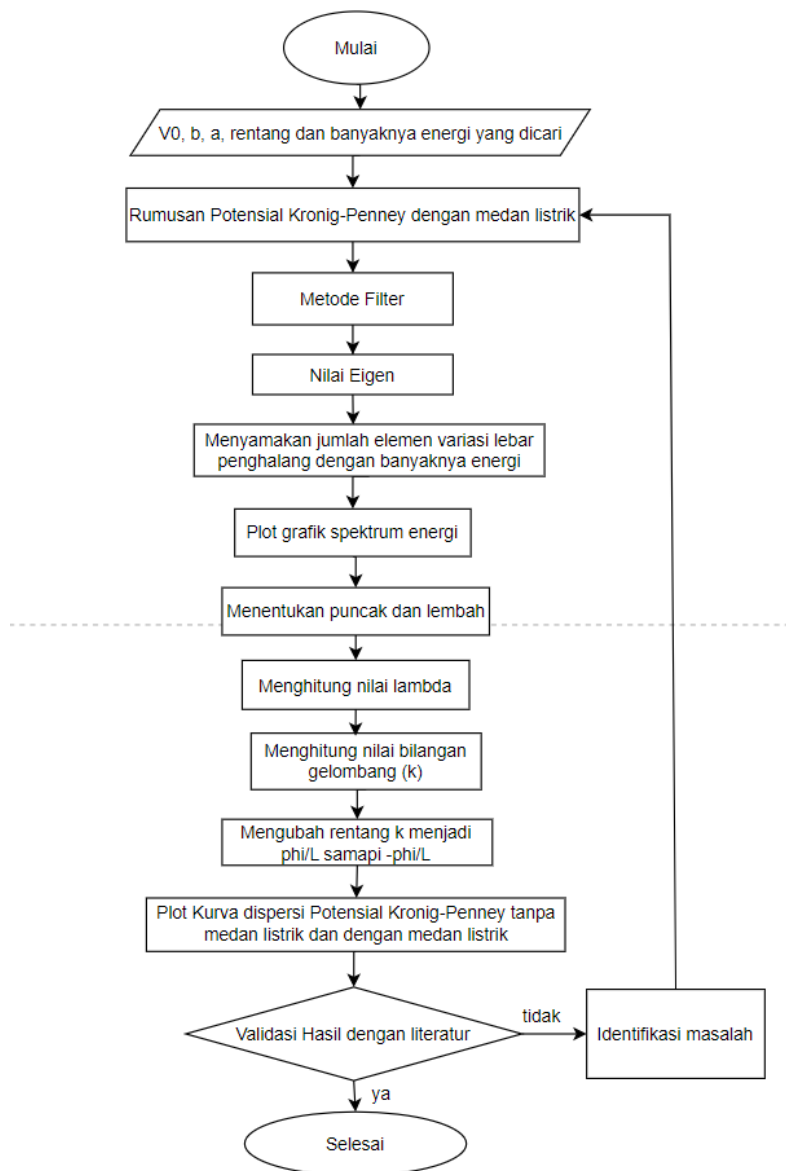


**Gambar 3.1** Diagram Alir Skema Penelitian



**Gambar 3.2** Diagram Alir Implementasi Program Perhitungan Komputasi dan Analitik Potensial Kronig-Penney Tanpa Medan Listrik





**Gambar 3.3** Diagram Alir Implementasi Program Perhitungan Komputasi Potensial Kronig-Penney dengan Medan Listrik



## BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN

### 4.1. Potensial Kronig-Penney Tanpa Medan Listrik

#### 4.1.1 Nilai Eigen

Ketika variabel dari sumur potensial tersebut sudah ditentukan, maka dapat digunakan untuk menentukan *eigenvalue* untuk level energi band tertentu. *Eigenvalue* merupakan nilai energi dari potensial Kronig-penney yang bisa didapatkan dengan memecahkan persamaan Schrodinger sesuai dengan parameter yang sudah ditentukan dengan menggunakan metode Filter. Setelah metode Filter diterapkan, maka diperoleh *eigenvalue*. Pada potensial periodik menghasilkan nilai *eigenvalue* yang berdekatan satu sama lain akan tetapi pada kondisi tertentu nilai *eigenvalue* tersebut kemudian meningkat dengan signifikan dan setelahnya menghasilkan nilai yang berdekatan kembali. Hal tersebut dikarenakan sifat periodisitas dari potensialnya. Dengan adanya sifat periodisitas tersebut, maka elektron dapat merasakan efek potensial yang sama berulang kali dalam struktur periodiknya. Nilai – nilai yang berdekatan terdiri dari nilai – nilai energi band dan nilai – nilai energi gap. Nilai energi band merupakan rentang nilai energi yang diizinkan untuk ditempati oleh elektron dalam pita energi, sedangkan energi gap merupakan rentang nilai energi yang tidak diizinkan untuk ditempati oleh elektron dalam pita energi. Energi band dan energi gap terdiri dari beberapa tingkat, seperti pada Tabel (4.1a-c). Energi gap dalam tabel tersebut yaitu energi yang berada pada rentang energi terakhir pada tingkat pertama sampai energi sebelum tingkat kedua pada tabel energi band. Dalam tabel tersebut untuk nilai energi dibatasi pada rentang 0 a.u sampai 2 a.u untuk setiap variasi lebar penghalang. Pada Tabel (4.1a-c) merupakan hasil perbandingan nilai energi untuk perhitungan komputasi dan analitik, dalam tabel menghasilkan nilai eigen yang hampir sama. Pada hasil tersebut rentang energi pada perhitungan komputasi dan analitik, memiliki perbedaan nilai lebih kecil dari 0,001. Sehingga menghasilkan selisih perbedaan yang kecil. Nilai lebar pita energi akan menurun dengan meningkatnya lebar penghalang potensial, akan tetapi ketika energi sudah di atas nilai

potensial awal ( $V_0$ ) maka nilai lebar pita energi tidak lagi menurun melainkan naik turun

**Tabel 4.1a** Perbandingan nilai eigen numerik dan analitik untuk lebar penghalang sebesar  $2 a.u.$

Energi Band	Komputasi ( $a.u.$ )	Lebar pita ( $a.u.$ )	Analitik ( $a.u.$ )	Lebar pita ( $a.u.$ )
1	0.05344-0.05751	0.00407	0.05340-0.05750	0.0041
2	0.21059-0.22925	0.01866	0.21055-0.22935	0.0188
3	0.46086-0.51296	0.0521	0.46095-0.51315	0.0522
4	0.78335-0.90438	0.12103	0.78345-0.90480	0.12135
5	1.15000-1.39749	0.24749	1.15006-1.39831	0.24825
6	1.55258-1.98449	0.43191	1.55231-1.98596	0.43365

**Tabel 4.1b** Perbandingan nilai eigen numerik dan analitik untuk lebar penghalang sebesar  $3a.u.$

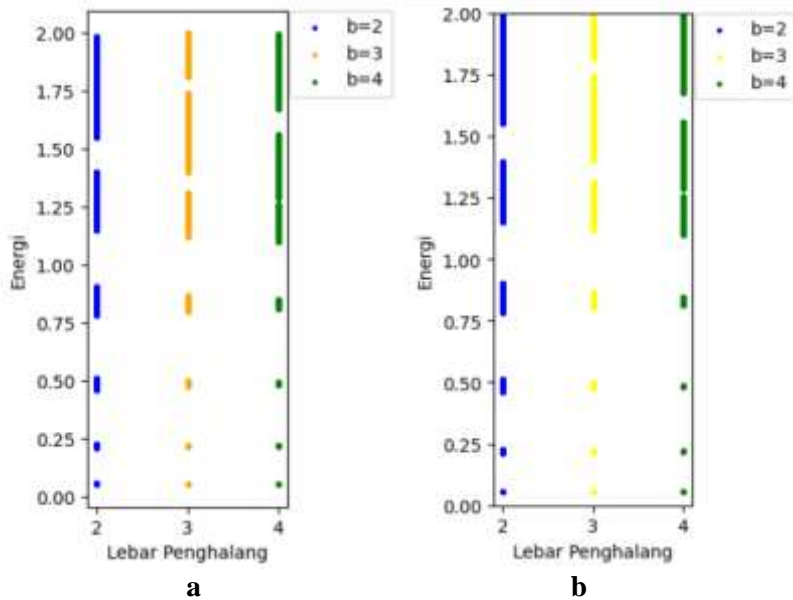
Energi Band	Komputasi ( $a.u.$ )	Lebar pita ( $a.u.$ )	Analitik ( $a.u.$ )	Lebar pita ( $a.u.$ )
1	0.05502-0.05639	0.00137	0.05500-0.05600	0.001
2	0.21690-0.22403	0.00713	0.21735-0.22270	0.00535
3	0.47539-0.49777	0.02238	0.47635-0.49520	0.01885
4	0.80008-0.86708	0.067	0.80150-0.86385	0.06235
5	1.12070-1.31282	0.19212	1.12171-1.31176	0.19005
6	1.40066-1.74065	0.33999	1.40026-1.74351	0.34325
7	1.81262-1.99922	0.1866	1.81406-1.99926	0.1852

**Tabel 4.1c** Perbandingan nilai eigen numerik dan analitik untuk lebar penghalang sebesar 4 *a. u.*

Energi Band	Komputasi ( <i>a. u.</i> )	Lebar pita ( <i>a. u.</i> )	Analitik ( <i>a. u.</i> )	Lebar pita ( <i>a. u.</i> )
1	0.05519-0.05600	0.00081	0.05540-0.05565	0.00025
2	0.21843-0.22214	0.00371	0.21925-0.22075	0.0015
3	0.48042-0.49175	0.01133	0.48215-0.48890	0.00675
4	0.80966-0.84934	0.03968	0.81195-0.84525	0.0333
5	1.09812-1.55901	0.46089	1.09876-1.55911	0.46035
6	1.67166-1.99732	0.32566	1.67401-1.99971	0.3257

#### 4.1.2 Spektrum energi

Perhitungan spektrum energi Kronig-Penney untuk beberapa variasi lebar penghalang dilakukan tanpa medan listrik dengan sistem satuan *atomic unit*. Pada perhitungan ini akan disajikan hasil visualisasi dari pita energi dengan variabel tetap yaitu  $V_{max} = 1 \text{ a.u.}$ ,  $V_{min} = 0 \text{ a.u.}$ , lebar sumur ( $a$ ) = 8 *a.u.*,  $dE = 0.002$  dengan rentang energi 0 – 2 *a.u.*, dan  $dx = 0.01$ . Untuk variabel bebas yang digunakan adalah lebar penghalang ( $b$ ) dalam tiga variasi berbeda yaitu 2 *a.u.*, 3 *a.u.*, dan 4 *a.u.*. Banyaknya kisi pada setiap variasi menjadi variabel tetap, yang mana terdapat 40 kisi pada setiap variasi, sehingga nilai  $x_{max}$  dan  $x_{min}$  menjadi variabel bebas pada setiap variasi. Untuk model pertama nilai  $x_{min} = -200 \text{ a.u.}$  dan  $x_{max} = 200 \text{ a.u.}$ ,  $x_{min} = -220 \text{ a.u.}$  dan  $x_{max} = 220 \text{ a.u.}$  untuk model kedua, dan  $x_{min} = -240 \text{ a.u.}$  dan  $x_{max} = 240 \text{ a.u.}$  untuk model ketiga. Hasil visualisasi dari pita energi yang dihasilkan disajikan pada Gambar (4.1). Dilakukan perhitungan secara analitik sebagai hasil perbandingan untuk nilai spektrum energi. Yang mana untuk analitik ditampilkan dalam Gambar (4.1b). Pada hasil tersebut menunjukkan bahwa hasil numerik dan analitik menghasilkan spektrum energi yang sama.



**Gambar 4.1** Perbandingan spektrum energi potensial Kronig-Penney dengan variasi lebar penghalang dengan perhitungan komputasi (a) dan Analitik (b)

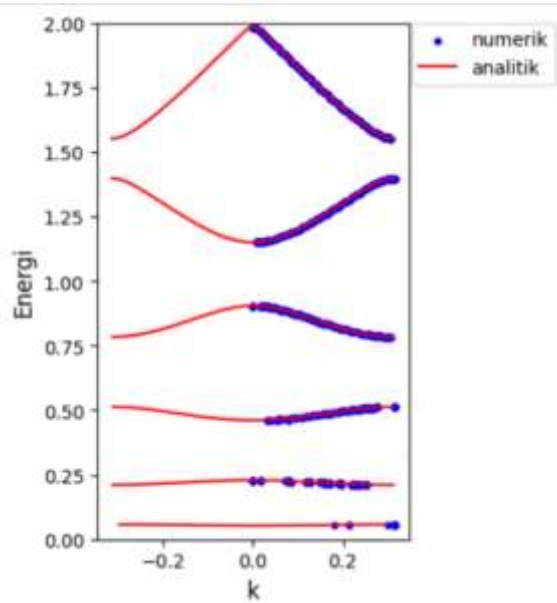
Pada Gambar (4.1) menunjukkan perbedaan pola spektrum energi yang terbentuk untuk ketiga variasi model yang digunakan. Dengan mengetahui pola spektrum energi, maka lebar pita energi yang terbentuk dari variasi lebar penghalang juga akan diketahui. Dari ketiga spektrum energi yang dihasilkan dapat dilihat bahwa semakin nilai energi meningkat, maka lebar pita energi yang terbentuk semakin lama semakin lebar. Hal tersebut terjadi karena elektron memiliki energi kinetik yang besar untuk menembus potensial periodik pada saat energi elektron meningkat, sehingga kemungkinan atau probabilitas energi yang diizinkan juga akan lebih banyak. Tidak hanya itu, pada Gambar (4.1) juga dapat dilihat bahwa dengan bertambahnya lebar penghalang potensial, maka perubahan celah atau energi gap yang terbentuk semakin besar karena elektron susah menembus penghalang jika semakin lebar, sehingga terdapat rentang energi yang tidak diizinkan yang semakin banyak. Jika ditinjau berdasarkan mekanika klasik, ketika energi elektron lebih besar daripada besarnya nilai potensial maka seharusnya tidak terdapat

celah yang terbentuk. Akan tetapi pada hasil spektrum energi yang dihasilkan masih terdapat celah ketika energi elektron berada di atas nilai potensial, hal ini terjadi karena adanya penerapan mekanika kuantum. Ketika energi elektron melewati potensial maksimum, masih ada daerah di mana probabilitas menemukan elektron sangat rendah. Ini disebabkan oleh interferensi gelombang elektron, ketika gelombang elektron bertemu dengan penghalang potensial sebagian energi gelombang tersebut akan dipantulkan, sementara sebagian lagi akan ditransmisikan melalui penghalang di beberapa titik, gelombang elektron yang dipantulkan dan yang ditransmisikan dapat saling membatalkan satu sama lain yang dapat menciptakan daerah – daerah di mana probabilitas menemukan elektron sangat rendah dan dapat menghasilkan celah.

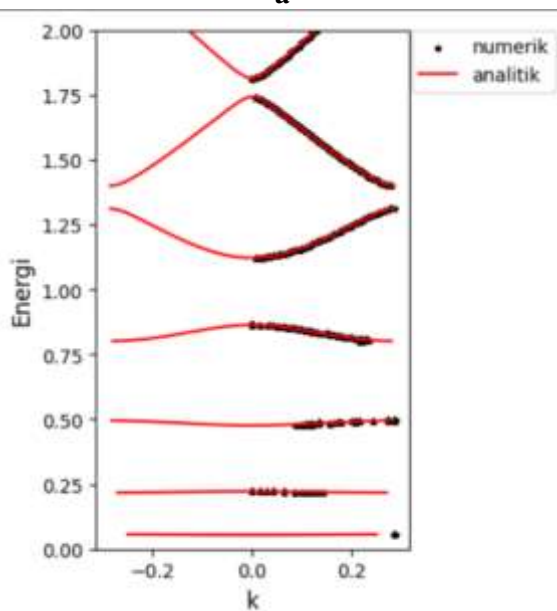
Konduktivitas listrik salah satunya bisa diamati dari spektrum energi yang didasarkan pada pengamatan pita energi dan celah. Banyaknya energi elektron yang tersedia pada pita valensi memungkinkan banyaknya energi elektron yang tersedia di pita konduksi. Dengan semakin lebar pita konduksi maka konduktivitas listrik meningkat. Meningkatnya konduktivitas juga dipengaruhi oleh celah pita energi yang sempit. Celah yang sempit, maka eksitasi elektron dari pita valensi ke pita konduksi hanya memerlukan sedikit energi.

#### **4.1.3 Kurva dispersi**

Gambar (4.2a-c) di bawah ini merupakan gambar yang menunjukkan hasil visualisasi kurva dispersi potensial Kronig-Penney tanpa medan listrik. Visualisasi kurva dispersi potensial Kronig-Penney dalam penelitian ini menggunakan variasi dalam satuan *atomic unit*. Kurva dispersi bisa dicari ketika spektrum energi untuk kondisi potensial tertentu sudah didapatkan. Kurva dispersi adalah representasi lain yang terbentuk dari spektrum energi, Seperti yang sudah dijelaskan pada tinjauan Pustaka, kurva dispersi merupakan kurva yang menghubungkan energi ( $E$ ) dan bilangan gelombang ( $k$ ). Sehingga setiap nilai energi dari spektrum energi yang dihasilkan memiliki nilai bilangan gelombang masing – masing.

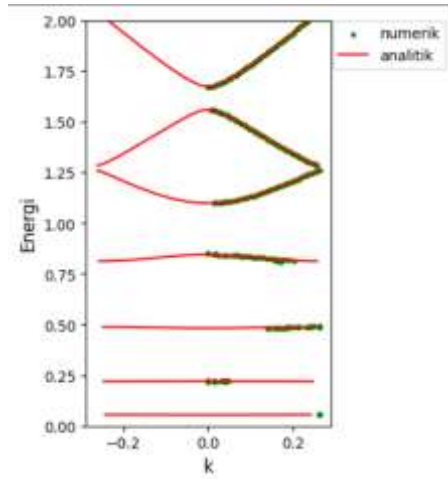


**a**



**b**





c

**Gambar 4.2** Perbandingan kurva dispersi numerik dan analitik dengan  $a = 8 a.u.$ ,  $V = 1 a.u.$ ,  $b = 2 a.u$  pada gambar **a**,  $b = 3 a.u$  pada gambar **b**, dan  $b = 4 a.u$  pada gambar **c**

Berdasarkan Gambar (4.2a-c) tersebut disajikan kurva dispersi untuk perhitungan secara numerik dan analitik sebagai pembandingan hasil, perhitungan secara numerik diplot dalam sebaran titik – titik berwarna biru, hitam dan hijau, serta untuk perhitungan secara analitik diplot dalam garis berwarna merah dalam setiap variasinya. Jika dilihat dari hasil visualisasi kurva dispersi, sebaran energi elektron pada tingkat pertama lebih sedikit jika dibandingkan dari tingkat selanjutnya terlebih lagi untuk lebar penghalang  $3 a.u.$  dan  $4 a.u.$  Dikarenakan pada tingkat pertama fungsi gelombang elektron sulit untuk dideteksi karena terjadi lokalisasi. Lokalisasi dapat terjadi karena elektron memiliki energi yang rendah sehingga probabilitas terjadinya *tunneling* kecil. Karena probabilitas *tunneling* kecil, maka hanya sedikit elektron yang bisa melewati penghalang, sedangkan yang lain akan bergerak di sekitar sumur dan bisa mengakibatkan adanya interferensi. Interferensi yang terjadi adalah destruktif yang mana ketika dua gelombang atau lebih bertemu dan memiliki fase yang berlawanan akan saling membatalkan satu sama lain sehingga probabilitas ditemukannya elektron akan berkurang. Akan tetapi pada saat terjadi lokalisasi terjadi juga interferensi

konstruktif sehingga memungkinkan terjadinya *tunneling* meskipun sangat kecil kemungkinannya. Sehingga pada tingkat pertama masih terdapat sebaran energi.

Berdasarkan hasil kurva dispersi juga dapat dilihat bahwa semakin bertambah besar nilai lebar penghalang, maka lebar pita energi juga terlihat semakin sempit. Hal tersebut dikarenakan kemungkinan terjadinya *tunneling* semakin lama semakin kecil dengan meningkatnya lebar penghalang. Sehingga hanya beberapa elektron dengan energi tertentu saja yang bisa melewati penghalang tersebut. Hasil ini berkorelasi dengan spektrum energi yang dihasilkan dalam pembahasan sebelumnya.

Salah satu keuntungan yang diperoleh jika mengetahui kurva dispersi adalah mengetahui jenis *bandgap* yang dihasilkan. Terdapat dua jenis *bandgap* yang dapat dihasilkan oleh kurva dispersi, yaitu *direct* dan *indirect bandgap*. *Direct bandgap* bisa terjadi ketika titik minimum pita konduksi dan titik maksimum dalam kurva dispersi terjadi pada nilai  $k$  yang sama, sedangkan *indirect* akan terjadi ketika titik minimum dari pita konduksi dan titik maksimum pita valensi terjadi pada nilai  $k$  yang berbeda. Berdasarkan kurva dispersi yang dihasilkan pada Gambar (4.2a-c) menghasilkan *direct bandgap* untuk semua variasi yang dihasilkan, karena pada gambar tersebut antara pita valensi maksimum dan pita konduksi minimum berada pada  $k$  yang sama.

Hubungan antara nilai energi dan bilangan gelombang  $k$  dalam kurva dispersi dapat digunakan untuk mencari massa efektif elektron. Massa efektif dapat diperoleh dengan melakukan perhitungan menggunakan rumus berikut (Toriyama, dkk, 2022).

$$m^* = \hbar^2 \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1} . \quad (4.5)$$

Berdasarkan rumus tersebut dapat diketahui bahwa massa efektif elektron berbanding terbalik dengan turunan kedua dari energi terhadap bilangan gelombang. Besar kecilnya turunan kedua energi terhadap bilangan gelombang dapat dilihat berdasarkan kurva dispersi yang terbentuk. Jika kurva dispersi curam maka nilai  $\left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)$  bernilai besar, sebaliknya jika kurva dispersi landai maka nilai  $\left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)$  bernilai kecil. Karena nilai  $\left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)$  berbanding terbalik dengan nilai  $m^*$ , jika

kurva dispersi terlihat curam maka massa efektif akan kecil sedangkan jika kurva dispersi terlihat landai maka massa efektif akan besar. Besar kecilnya massa efektif akan berpengaruh pada mobilitas elektron. Mobilitas elektron akan rendah saat massa efektif besar dan mobilitas tinggi saat massa efektif kecil.

## **4.2. Potensial Kronig Penney dengan Medan Listrik**

Perhitungan secara numerik untuk potensial Kronig-Penney tanpa medan listrik sudah didapatkan untuk beberapa hasil, yaitu nilai eigen, spektrum energi, dan kurva dispersi. Hasil yang didapatkan sudah cukup baik untuk dijadikan sebagai acuan untuk menentukan beberapa bahasan dalam potensial Kronig-Penney dengan adanya medan listrik. Yang mana pada kasus potensial Kronig-Penney dengan adanya medan listrik solusi analitik susah untuk didapatkan. Beberapa bahasan yang akan dibahas pada kasus medan listrik ini yaitu seperti pada subbab di bawah ini.

### **4.2.1 Nilai eigen**

Hasil nilai eigen pada potensial Kronig-Penney dengan adanya medan listrik sangat berbeda, jika dibandingkan sebelum adanya medan listrik. Yang mana digunakan nilai medan listrik  $0 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$ ,  $1 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$ ,  $2 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$ ,  $3 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$ ,  $4 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$  dan  $5 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$  untuk variabel yang lain dijadikan sebagai variabel tetap. Dalam Tabel (4.2) merupakan hasil nilai eigen yang didapatkan.

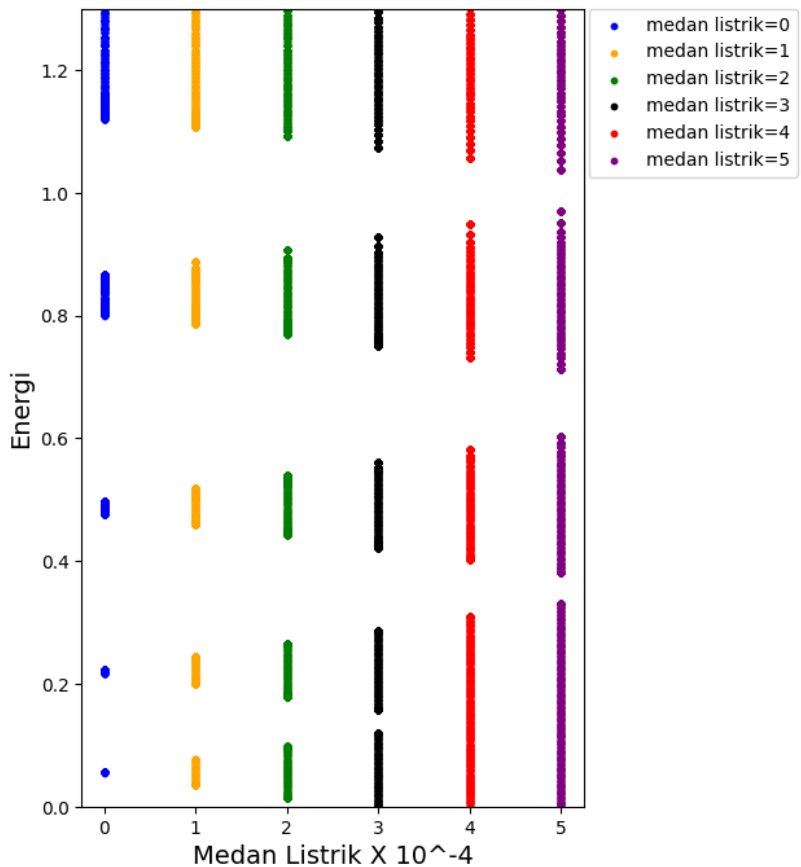
**Tabel 4.2** Nilai eigen untuk setiap variasi perubahan medan listrik

medan listrik $\times 10^{-4}(a.u.)$	Energy Band Lebar Pita( $a.u.$ )	Lebar Pita ( $a.u.$ )
0	0.055052-0.056393	0.0013
	0.216897-0.224033	0.0071
	0.475386-0.497774	0.0224
	0.800084-0.867076	0.0670
	1.120705-1.304051	0.1833
1	0.034629-0.077644	0.0430
	0.199517-0.244894	0.0454
	0.460316-0.518252	0.0579
	0.786324-0.887126	0.1008
	1.108018-1.300557	0.1925
2	0.013217-0.099071	0.1190
	0.178807-0.266135	0.1297
	0.441940-0.539118	0.1382
	0.769629-0.907484	0.1765
	1.091770-1.305985	0.2297
3	0.001467-0.120510	0.2908
	0.157723-0.287470	0.1798
	0.421910-0.560159	0.2161
	0.751572-0.928031	0.2452
	1.074418-1.304089	0.3929
4	0.017998-0.308847	0.2010
	0.401509-0.581299	0.2564
	0.732597-0.948710	0.2727
	1.056402-1.301599	0.1190
5	0.003145-0.396060	0.1297
	0.401479-0.602502	0.1382
	0.713117-0.969486	0.1765
	1.037936-1.310596	0.2297

Dapat dilihat dalam tabel 4.2 ketika nilai medan dinaikkan sebesar  $1 a.u.$ , maka banyaknya level energi band akan berkurang. Dengan berkurangnya level energi band maka celah atau bandgap juga akan berkurang. Pada hasil tersebut juga bisa diketahui ketika medan listrik meningkat, maka lebar pita energi juga meningkat, hal tersebut dapat dilihat pada kolom ketiga dalam Tabel (4.2). Hal tersebut dikarenakan medan listrik mempengaruhi pergerakan elektron di dalam potensial periodik. Dengan adanya medan listrik, percepatan elektron akan bertambah. Penjelasan ini akan dijelaskan lebih lanjut pada subbab selanjutnya.

#### 4.2.2 Spektrum energi

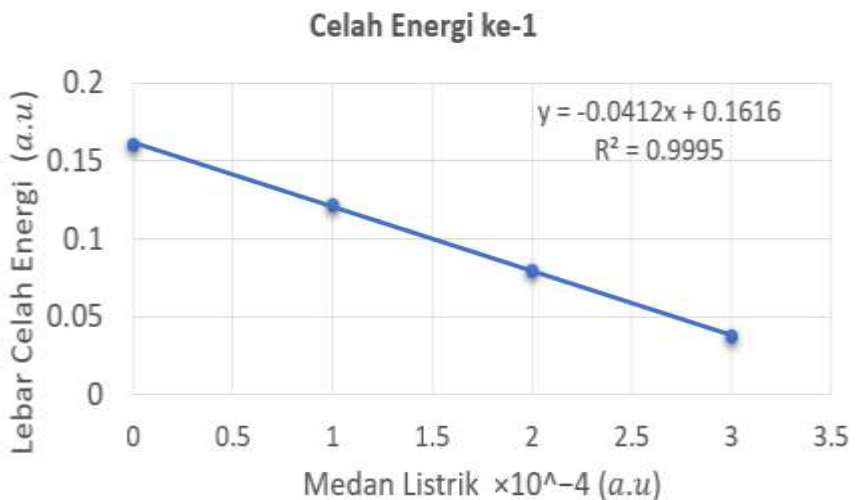
Gangguan medan listrik akan berpengaruh terhadap bentuk potensial yang dialami oleh elektron. Perhitungan spektrum energi juga akan dilakukan untuk potensial dengan adanya medan listrik dengan beberapa parameter variabel tetap yang hampir sama dengan parameter pada potensial tanpa medan listrik. Pada potensial Kronig-Penney dengan medan listrik digunakan variabel tetap yaitu  $V_{max} = 1 a.u.$ ,  $V_{min} = 0 a.u.$ , lebar sumur ( $a$ ) =  $8 a.u.$ , lebar penghalang ( $b$ ) =  $3 a.u.$   $dE = 0.001$  dengan rentang energi  $0 - 1.3 a.u.$ , dan  $dx = 0.01$  serta untuk variabel bebas yang digunakan adalah besarnya medan listrik ( $\epsilon$ ) dalam enam variasi berbeda yaitu  $0 \times 10^{-4} a.u.$ ,  $1 \times 10^{-4} a.u.$ ,  $2 \times 10^{-4} a.u.$ ,  $3 \times 10^{-4} a.u.$ ,  $4 \times 10^{-4} a.u.$  dan  $5 \times 10^{-4} a.u.$  Karena lebar penghalang merupakan variabel tetap, maka banyaknya kisi yang terbentuk pada potensialnya sama jumlahnya untuk setiap kasus. Hasil dari pita energi dengan medan listrik dapat dilihat pada Gambar 4.3.



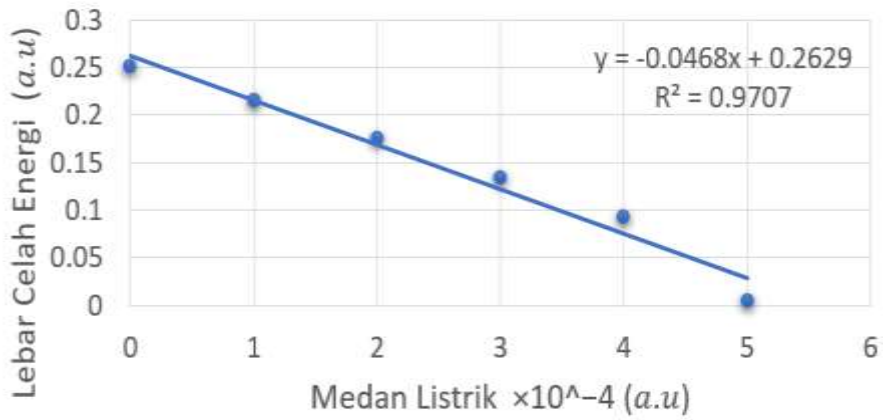
**Gambar 4.3** Spektrum energi potensial Kronig-Penney dengan variasi besar medan listrik dalam orde  $10^{-4}$

Terdapat bentuk pola yang berbeda jika dibandingkan dengan pita energi sebelum adanya medan listrik eksternal. Berdasarkan hasil spektrum yang telah didapatkan, maka lebar pita energi dan lebar celah di setiap pita untuk beberapa nilai medan listrik dapat diketahui. Dari hasil tersebut, pola perubahan spektrum energi yang dihasilkan linier terhadap nilai medan listrik yang diberikan. Pada setiap tingkatan menghasilkan pita energi yang melebar seiring dengan bertambahnya nilai medan listrik. Sehingga celah energi yang dihasilkan semakin kecil seiring dengan bertambahnya nilai medan listrik. Hal tersebut bisa terjadi karena semakin besar nilai medan

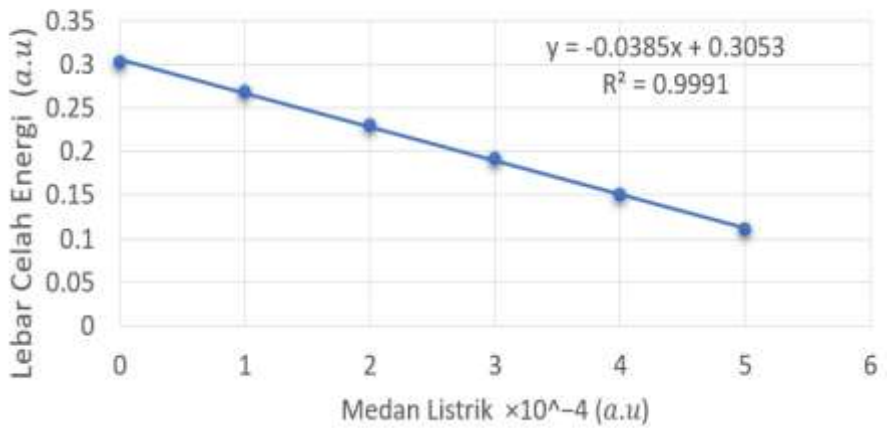
listrik yang diberikan pada potensial Kronig-Penney, maka percepatan yang dialami oleh elektron juga akan semakin besar sehingga kemampuan elektron untuk bisa melewati penghalang juga akan semakin besar dan rentang energi yang diizinkan untuk ditempati oleh elektron juga akan semakin lebar. Besarnya percepatan elektron sebanding dengan besarnya medan listrik yang diberikan, hal ini sesuai dengan konsep Hukum Coulomb. Partikel bermuatan seperti elektron akan mengalami percepatan sebesar  $a$  yang sebanding dengan gaya listrik yang diberikan yang sesuai dengan hukum Newton  $F = ma$ . Semakin besar medan listrik eksternal  $E$ , semakin besar gaya listrik yang dialami partikel bermuatan, dan akibatnya semakin besar percepatan yang dialami. Gambar 4.4 di bawah ini yang menampilkan perubahan celah energi terhadap pertambahan nilai medan listrik.



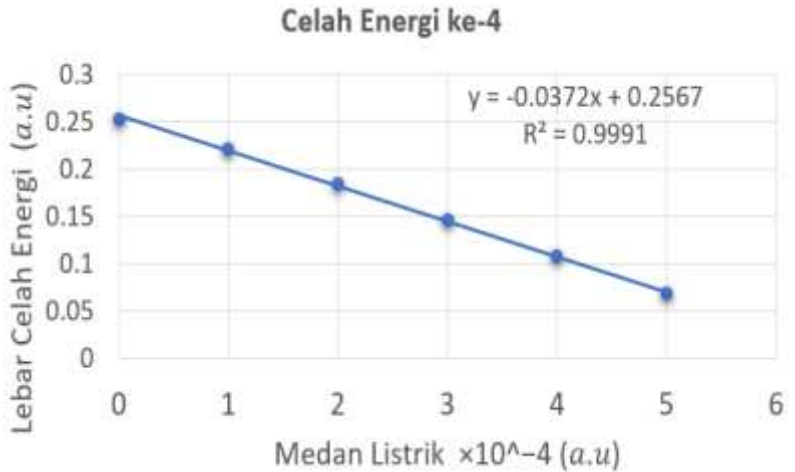
**Celah Energi ke-2**



**Celah Energi ke-3**





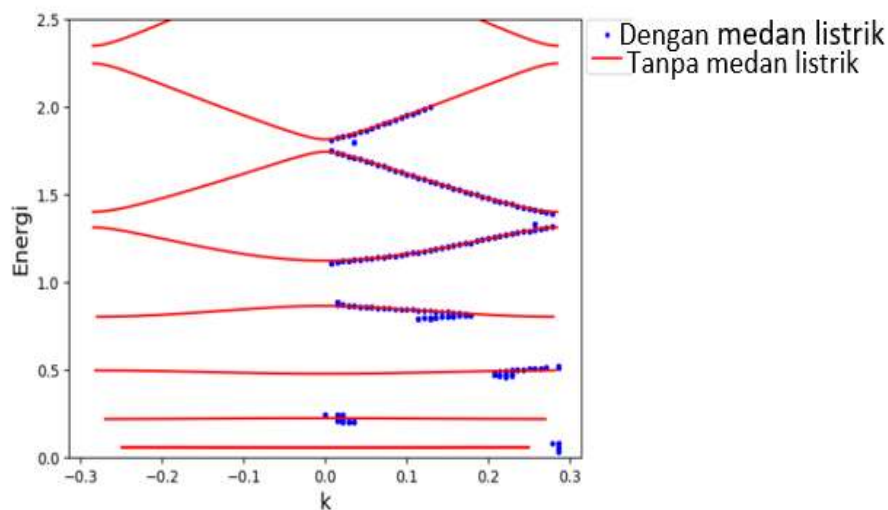


**Gambar 4.4** Grafik perubahan lebar celah energi terhadap perubahan nilai medan listrik berdasarkan tingkatnya

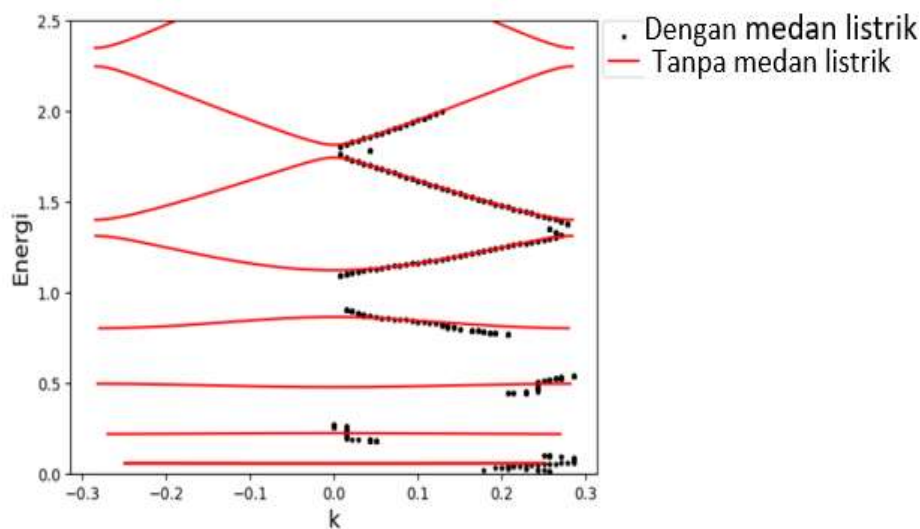
Pada potensial Kronig-Penney dengan medan listrik juga bisa diamati sifat konduktivitas listrik. Dengan adanya medan listrik pada potensial Kronig-Penney, spektrum energi yang dihasilkan semakin lama celah semakin sempit. Sama seperti penjelasan sebelumnya jika semakin sempit celah maka bahan bersifat konduktif.

#### 4.2.3 Kurva dispersi

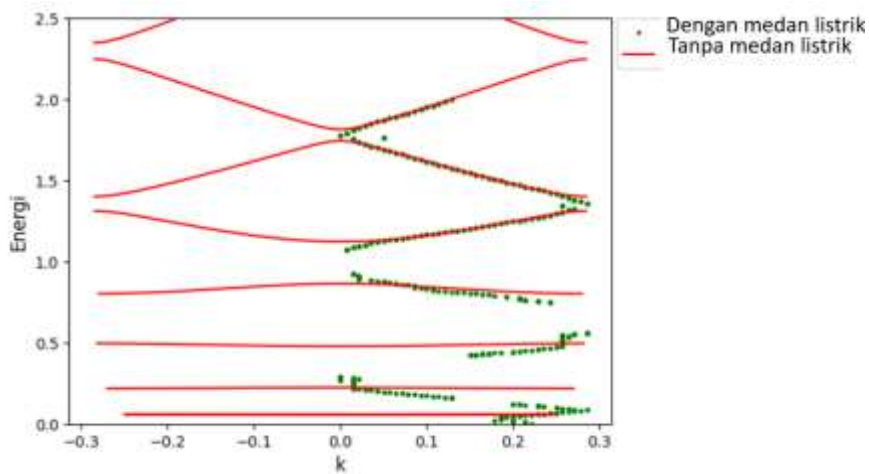
Pada potensial Kronig-Penney dengan medan listrik menghasilkan visualisasi yang sangat berbeda dengan potensial sebelum adanya medan listrik. Dengan adanya medan listrik menyebabkan perubahan amplitudo pada potensial Kronig-penney. Hal tersebut dapat dilihat dari ketinggian sumur dan penghalang yang semakin lama semakin menurun. Sehingga variasi nilai medan listrik akan berpengaruh terhadap bentuk kurva dispersi.



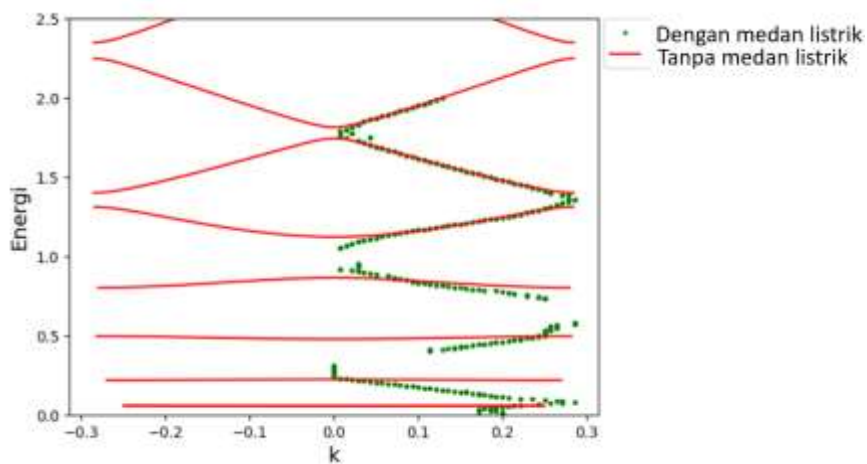
**a**



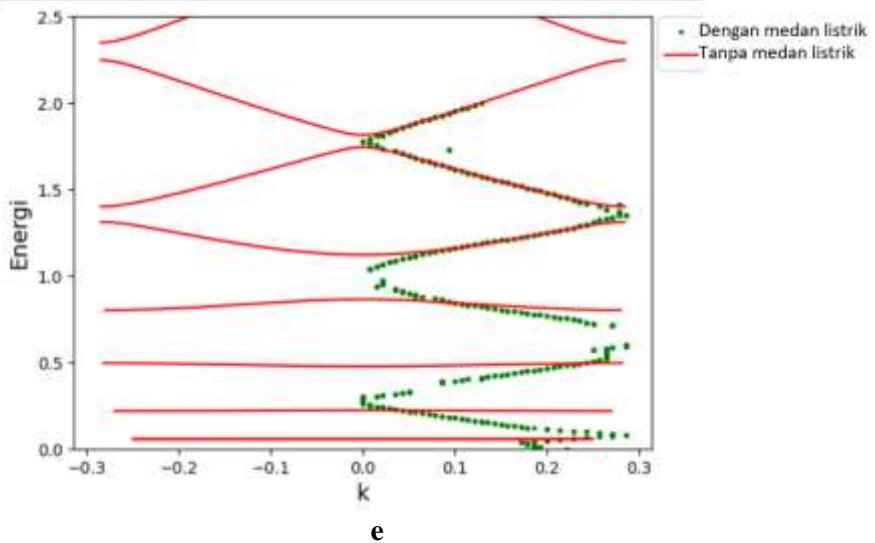
**b**



c



d



**Gambar 4.5** Perbandingan kurva dispersi tanpa medan listrik dan dengan medan listrik dengan  $a = 8 a.u$ ,  $V = 1 a.u$ ,  $b = 3 a.u$ ,  $\varepsilon = 1 \times 10^{-4} a.u$  pada gambar **a**,  $\varepsilon = 2 \times 10^{-4} a.u$  pada gambar **b**,  $\varepsilon = 3 \times 10^{-4} a.u$  pada gambar **c**,  $\varepsilon = 4 \times 10^{-4} a.u$  pada gambar **d**, dan  $\varepsilon = 5 \times 10^{-4} a.u$  pada gambar **e**

Berdasarkan hasil keluaran program kurva dispersi dengan medan listrik, dapat dilihat bahwa hasilnya sangat berbeda sebelum adanya medan listrik. Terdapat anomali pada sebaran data yang dihasilkan untuk tingkat awal. Akan tetapi, untuk tingkat yang lebih tinggi sudah didapatkan hasil yang lebih baik. Dengan adanya medan listrik mengakibatkan perubahan bentuk potensial, terlebih pada perubahan ketinggian potensial. Pada tingkat awal energi kinetik elektron lebih rendah daripada energi potensial. Perubahan bentuk potensial dan energi kinetik yang kecil memberikan dampak yang signifikan pada fungsi gelombangnya. Sehingga juga akan berdampak pada nilai bilangan gelombang ( $k$ ).

Pada kurva dispersi yang dihasilkan juga dapat diamati bahwa celah yang dihasilkan pada setiap variasi medan listrik semakin lama semakin menghilang, terlebih pada saat tingkat energi berada di atas nilai  $1 a.u$ . Celah energi yang menyempit akibat adanya medan listrik

disebabkan oleh perubahan dalam struktur pita energi. Medan listrik menyebabkan elektron mengalami percepatan, yang mengubah distribusi energi elektron dan penghalang potensial antara sumur-sumur potensial. Dengan adanya medan listrik, penghalang potensial dapat berubah sehingga mempengaruhi probabilitas *tunneling*. Medan listrik yang diaplikasikan searah dengan gerakan elektron dapat menurunkan penghalang potensial, sehingga probabilitas terjadinya *tunnelling* meningkat. Ini berarti elektron lebih mudah bergerak antar sumur potensial, yang dapat mempengaruhi distribusi energi elektron dalam pita energi dan menyebabkan penyempitan celah energi (band gap).

Kurva dispersi dengan medan listrik tidak mengubah jenis bandgap yang dihasilkan. Pada hasil visualisasi dalam Gambar (4.4a-c) dapat dilihat bahwa bandgap yang dihasilkan tetap sama sebelum adanya medan listrik yaitu *direct bandgap*. Medan listrik hanya berpengaruh atau berdampak terhadap lebar celah yang dihasilkan bukan pada jenis *bandgap*.



## BAB V PENUTUP

### 5.1. Kesimpulan

Potensial periodik Kronig-Penney menghasilkan nilai eigen yang berdekatan satu sama lain karena adanya sifat periodisitas dari potensialnya. Nilai – nilai yang berdekatan itu terdiri dari nilai – nilai energi gap dan energi band. Lebar pita energi akan menurun dengan meningkatnya lebar penghalang potensial, akan tetapi ketika energi sudah di atas nilai potensial awal ( $V_0$ ) maka lebar pita energi tidak lagi menurun melainkan naik turun. Pada hasil rentang energi tanpa medan listrik pada perhitungan komputasi dan analitik, memiliki perbedaan nilai lebih kecil dari 0,001. Sama halnya dengan nilai eigen pada potensial Kronig-Penney dengan medan listrik, menghasilkan nilai – nilai yang berdekatan. Ketika medan listrik dinaikkan, maka nilai lebar pita energi akan semakin meningkat untuk setiap level energinya.

Perubahan lebar potensial penghalang akan sangat berpengaruh terhadap lebar pita energi. Ketika lebar penghalang semakin diperbesar, maka pita energi yang terbentuk akan semakin sempit. Sebaliknya, pada potensial Kronig-Penney dengan medan listrik, pita energi akan semakin lebar dengan meningkatnya nilai medan listrik, sehingga menghasilkan perubahan yang linier.

Kurva dispersi yang dihasilkan pada setiap variasi lebar penghalang potensial berbeda – beda. Ketika lebar penghalang potensial dinaikkan, maka daerah yang diizinkan untuk ditempati oleh elektron semakin sempit, sedangkan untuk daerah yang tidak diizinkan atau celah akan semakin lebar. Pada potensial Kronig-Penney membentuk *direct bandgap*.

Lain halnya dengan kurva dispersi yang dihasilkan ketika ada medan listrik. Pada potensial Kronig-Penney dengan medan listrik, daerah yang diizinkan akan semakin lebar dengan bertambahnya nilai medan. Sedangkan daerah yang tidak diizinkan atau celah semakin menghilang dengan bertambahnya nilai medan listrik.

## 5.2. Saran

Pada penelitian selanjutnya disarankan untuk menggunakan metode lain untuk mencari bilangan gelombang dalam kurva dispersi dengan adanya medan listrik, misalnya dengan menggunakan *Fast Fourier Transform*. Serta pada penelitian selanjutnya disarankan untuk menggunakan metode numerik lain untuk memecahkan persamaan Schrodinger dalam mencari nilai eigen dan fungsi eigen.



## DAFTAR PUSTAKA

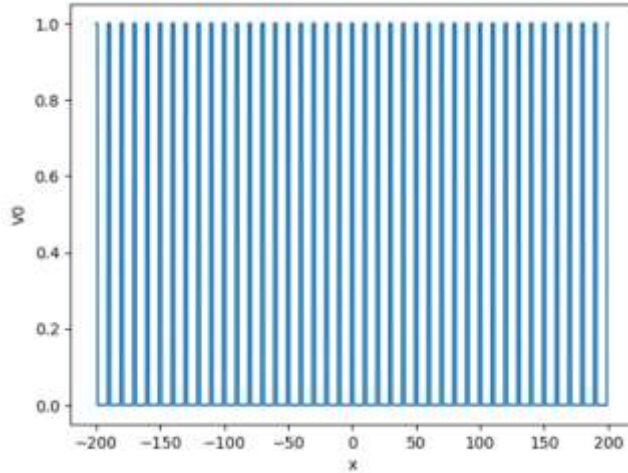
- Aly, A. E-M., & Nasr, A. 2014. Theoretical Study of One-Intermediate Band Quantum Dot Solar Cell. *International Journal of Photoenergy*. 1-10.
- Abdurrouf., Pamungkas, M. A., Wiyono., & Nurhuda, M. 2020. Implementation of filter method to solve the Kronig-Penney model. *AIP Conference Proceedings*. 1 – 5.
- Barde, N. P., Patil, S. D., Kokne, P. M., Bardapurkar, P. P. 2015. Deriving time dependent Schrodinger equation from wave-mechanics, schrodinger time independent equation, classical and Hamiltonian-Jacobi equations. *Leonardo Electronic Journal of Practices and Techonologies*. 26: 31- 48.
- Collins, C. T., Rogers, W. E., & Lund, B. 2017. An investigation into the dispersion of ocean surface waves in sea ice. *Ocean Dynamics*. 67: 263-280.
- Emin, D., & Hart, C. F. 1987. Existence of Wannier-Stark Localization. 36(4): 7353-7359.
- Handayani, R. T., & Yazibarahmah, R. 2017. Band Gap (Pita Energi) Semikonduktor.
- Ikeri, H. I., Onyia, A.I., & Asogwa, P. U. 2020. Theoretical Modeling and Simulation of Electronic Band Structure and Properties of InAs/GaAs Superlattice. *International Journal of Scientific Research in Physics and Applied Sciences*. 8(5): 28 – 37.
- Nurhuda, M., & Rouf, A. 2017. Filter method without boundary-value condition for simultaneous calculation of eigenfunction and eigenvalue of a stationary Schrödinger equation on a grid. *Physical Review E*. 96(3): 1–9.
- Nuriyah, L., & Juwono, A. M. 2017. *Elektromagnetisme*. UB Press.
- Pamungkas, G., & Sanjaya, I. G. M. 2013. Kajian Teoritis untuk Menentukan Celah Energi Porfirin Terkonjugasi Logam Kalsium Menggunakan Teori Fungsional Kerapatan (DFT). *UNESA Journal of Chemistry*. 2(1): 54 – 61.
- Sanner, M. 1999. Python: A programming language for software integration and development. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*. 1 (17): 57 – 61.

- Tarakanov, Y. A., Vettchinkina, V., Odnoblyudov, M. A., Chao, K. A., Sekine, N., & Hirakawa, K. 2005. Scattering-assisted Electric Current in Semiconductor Superlattices in the Wannier-Stark Regime. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*. 72(12): 1 – 8.
- Toriyama, M. Y., Ganose, A. M., Dylla, M., Anand, S., Junsoo, P., Brod, M. K., Munro, J. M., Person, K. A., Jain, A., & Snyder, G, J. 2022. How to Analyse a Density of States. *Materials Today Electronics*. 1: 1 – 4.

## LAMPIRAN A

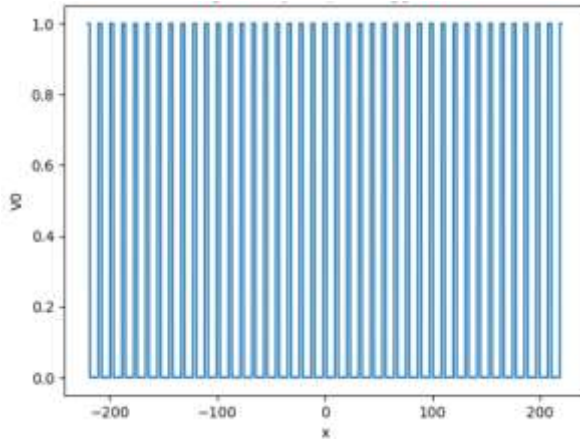
### KELUARAN SIMULASI

**A.1 Potensial Tanpa Medan Listrik** dengan  $a = 8 \text{ a.u.}$ ,  $b = 2 \text{ a.u.}$ , dan  $V = 1 \text{ a.u.}$



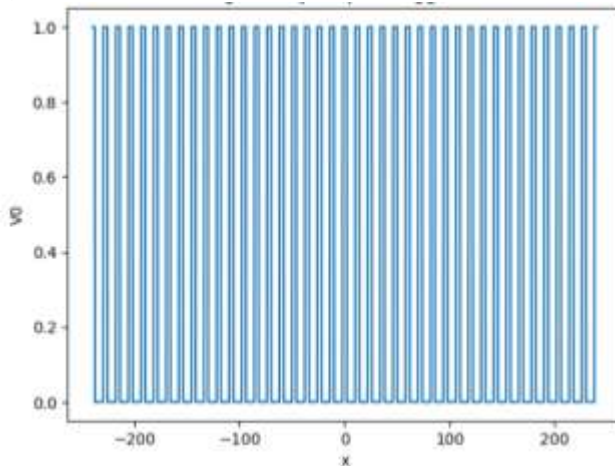
**Gambar A.1** Potensial Kronig-Penney

**A.2 Potensial Tanpa Medan Listrik** dengan  $a = 8 \text{ a.u.}$ ,  $b = 3 \text{ a.u.}$ , dan  $V = 1 \text{ a.u.}$



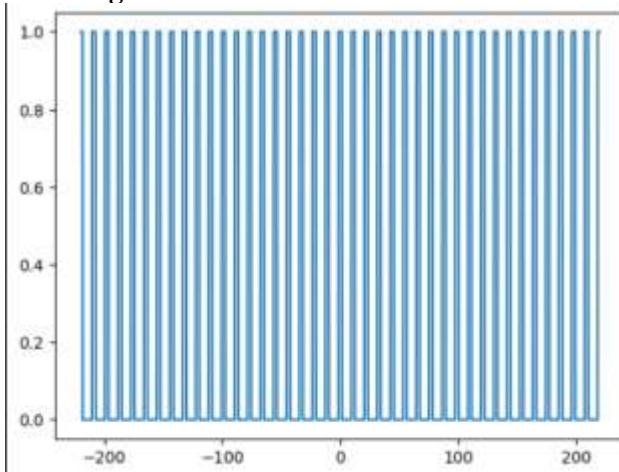
**Gambar A.2** Potensial Kronig-Penney

**A.3 Potensial Tanpa Medan Listrik** dengan  $a = 8 \text{ a.u.}$ ,  $b = 4 \text{ a.u.}$ , dan  $V = 1 \text{ a.u.}$



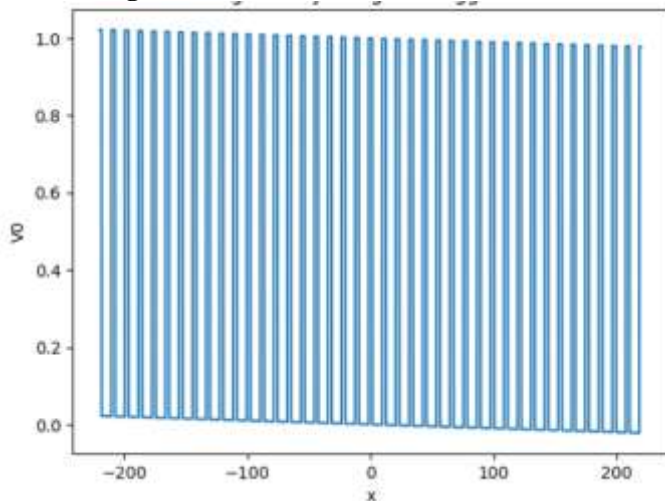
**Gambar A.3** Potensial Kronig-Penney

**A.4 Potensial dengan Medan Listrik**  $\varepsilon = 0 \times 10^{-4} \text{ a.u.}$



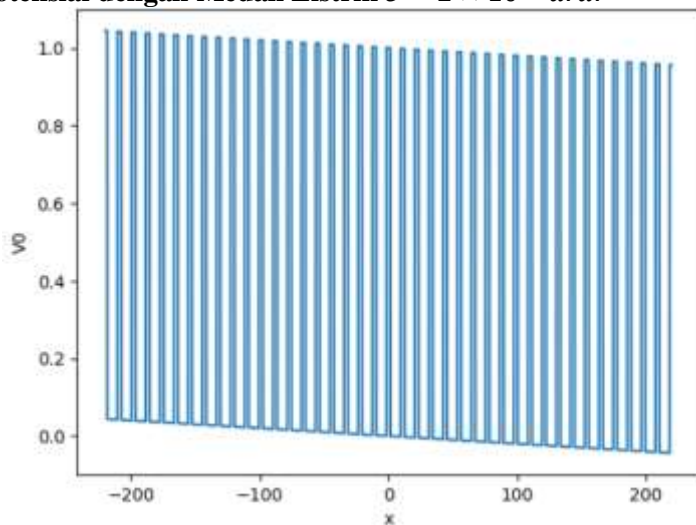
**Gambar A.4** Potensial Kronig-Penney dengan medan Listrik

### A.5 Potensial dengan Medan Listrik $\varepsilon = 1 \times 10^{-4} a.u.$



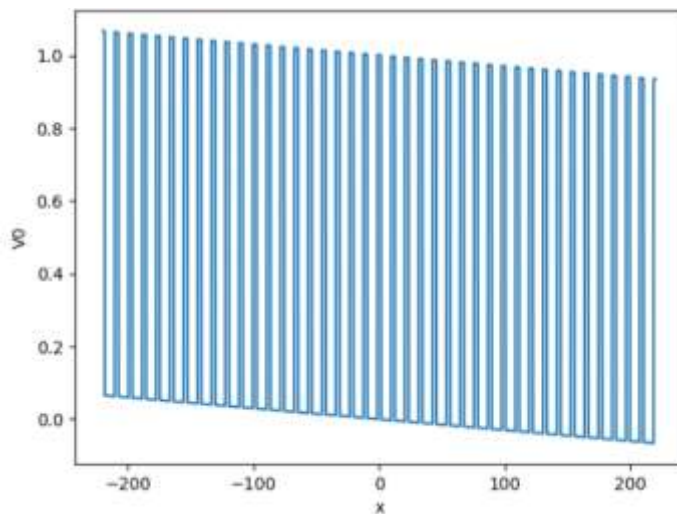
**Gambar A.5** Potensial Kronig-Penney dengan Medan Listrik

### A.6 Potensial dengan Medan Listrik $\varepsilon = 2 \times 10^{-4} a.u.$

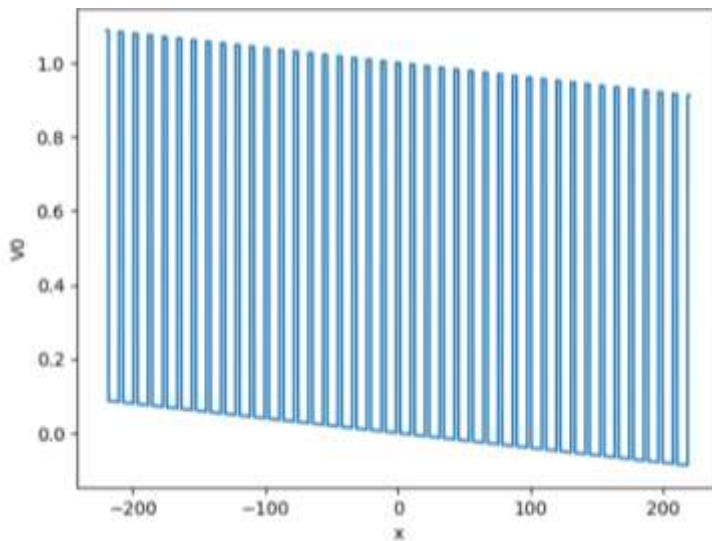


**Gambar A.6** Potensial Kronig-Penney dengan Medan Listrik

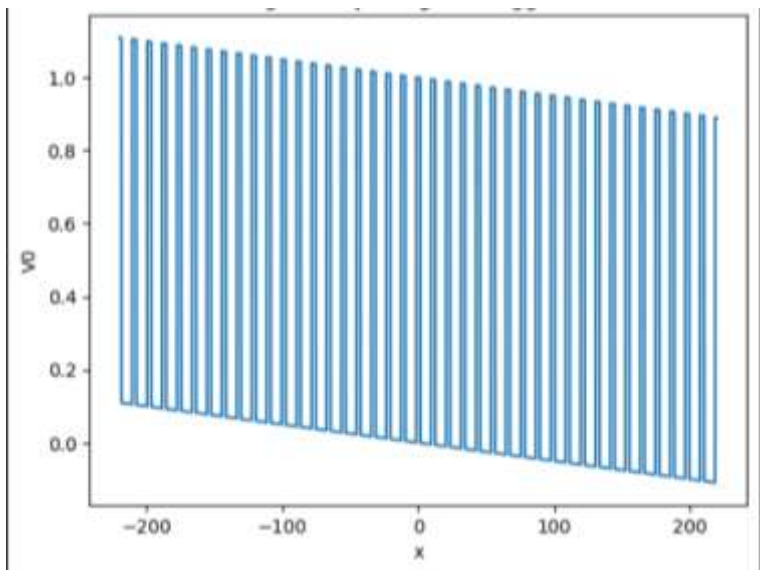
### A.7 Potensial dengan Medan Listrik $\varepsilon = 3 \times 10^{-4} a.u.$



**Gambar A.7** Potensial Kronig-Penney dengan Medan Listrik  
**A.8** Potensial dengan Medan Listrik  $\varepsilon = 4 \times 10^{-4} a. u.$



**Gambar A.8** Potensial Kronig-Penney dengan Medan Listrik  
**A.8** Potensial dengan Medan Listrik  $\varepsilon = 5 \times 10^{-4} a. u.$



**Gambar A.9** Potensial Kronig-Penney dengan Medan Listrik

## **LAMPIRAN B**

### **ALGORITMA PROGRAM**

#### **LAMPIRAN 1** Algoritma Spektrum Energi Tanpa Medan Listrik

1. Mendefinisikan Fungsi Tridiagonal untuk menyelesaikan matriks tridiagonal.
2. Membuat fungsi 'Filter1D' untuk menghitung nilai eigen dan fungsi eigen.
3. Membuat fungsi 'Hamiltonian' untuk menghitung energi.
4. Membuat fungsi 'eigenState' untuk menghitung keadaan eigen.
5. Set potensial Kronig-Penney untuk lebar penghalang yang berbeda dengan menggunakan rumusan potensial tanpa medan listrik.
6. Visualisasi potensial.
7. Perhitungan energi untuk masing – masing lebar penghalang.
8. Visualisasi spektrum energi.

#### **LAMPIRAN 2** Algoritma Program Spektrum Energi dengan Medan Listrik

1. Mendefinisikan Fungsi Tridiagonal untuk menyelesaikan matriks tridiagonal.
2. Membuat fungsi 'Filter1D' untuk menghitung nilai eigen dan fungsi eigen.
3. Membuat fungsi 'Hamiltonian' untuk menghitung energi.
4. Membuat fungsi 'eigenState' untuk menghitung keadaan eigen.
5. Set potensial Kronig-Penney untuk nilai medan listrik yang berbeda dengan menggunakan rumusan potensial dengan medan listrik.
6. Visualisasi potensial.
7. Perhitungan energi untuk masing – masing nilai medan listrik.
8. Visualisasi spektrum energi.



### **LAMPIRAN 3** Algoritma Program Kurva Dispersi Tanpa Medan Listrik

1. Mendefinisikan fungsi matriks Tridiagonal.
2. Mendefinisikan fungsi Filter untuk potensial 1D.
3. Mendefinisikan fungsi Hamiltonian.
4. Mendefinisikan fungsi Eigenstate.
5. Inisialisasi dan pembuatan potensial untuk setiap variasi lebar penghalang.
6. Kalkulasi energi.
7. Mendefinisikan fungsi untuk menghitung nilai 'k'.
8. Menghitung nilai 'k' dan plot hasil.
9. Mendefinisikan fungsi 'k' dalam rentang  $-\pi/L$  sampai  $\pi/L$ .
10. Mencari kurva dispersi dengan perhitungan analitik.
11. Visualisasi kurva dispersi untuk perhitungan analitik dan komputasi.

### **LAMPIRAN 4** Algoritma Program Kurva Dispersi dengan Medan Listrik

1. Mendefinisikan fungsi matriks Tridiagonal.
2. Mendefinisikan fungsi Filter untuk potensial 1D.
3. Mendefinisikan fungsi Hamiltonian.
4. Mendefinisikan fungsi Eigenstate.
5. Inisialisasi dan pembuatan potensial untuk setiap variasi nilai medan listrik.
6. Kalkulasi energi.
7. Mendefinisikan fungsi untuk menghitung nilai 'k'.
8. Menghitung nilai 'k' dan plot hasil.
9. Mendefinisikan fungsi 'k' dalam rentang  $-\pi/L$  sampai  $\pi/L$ .
10. Mencari kurva dispersi dengan perhitungan analitik.
11. Visualisasi kurva dispersi untuk perhitungan analitik dan komputasi.