

LAPORAN KERJA PRAKTIK

**SIMULASI MATERIAL MoS_2 DUA DIMENSI UNTUK APLIKASI SENSOR
GAS**

**Bertempat di
PUSAT RISET FISIKA KUANTUM
BADAN RISET DAN INOVASI NASIONAL (BRIN)**



Disusun Oleh:

Shafira Zaujatina Nasution

NIM. 101042300006

PROGRAM STUDI TEKNIK FISIKA

FAKULTAS TEKNIK ELEKTRO

TELKOM UNIVERSITY

2026

LEMBAR PENGESAHAN
LAPORAN KERJA PRAKTIK
PUSAT RISET FISIKA KUANTUM, BADAN RISET DAN INOVASI
NASIONAL (BRIN)

Periode 12 januari 2026 - 12 februari 2026

Disusun oleh:

Shafira Zaujatina Nasution
NIM. 101042300006



Pembimbing Akademik

Pembimbing Lapangan

Dr. Ismudiati Puri Handayani, M.Sc

Dr. Sasfan Arman Wella

NIP. 00760012

NIP. 196707111993031001

ABSTRAK

Kegiatan Kerja Praktik ini mengeksplorasi potensi *machine learning* kuantum untuk prediksi curah hujan dengan membandingkan kinerja model *hybrid* klasik dan kuantum. Penelitian ini mengimplementasikan dua arsitektur utama, yaitu *Random Forest - Long Short-Term Memory* (RF-LSTM) dan *Random Forest - Quantum Long Short-Term Memory* (RF-QLSTM), yang dibangun di atas data cuaca multivariabel dari BMKG. Proses penelitian mencakup penyiapan infrastruktur komputasi intensif, pra-pemrosesan data yang teliti, dan implementasi model dengan pendekatan yang berbeda untuk setiap domain (klasik dan kuantum).

Hasil eksperimen menunjukkan bahwa model RF-LSTM secara signifikan mengungguli model *hybrid* RF-QLSTM dengan metrik kinerja yang lebih baik, di mana RF-LSTM mencapai nilai *Root Mean Squared Error* (RMSE) sebesar 0.059404 dan koefisien determinasi (R^2) sebesar 0.3364, jauh melampaui RF-QLSTM yang mencatat RMSE 0.064153 dan R^2 0.1073. Analisis kurva *loss* dan plot prediksi juga mengonfirmasi bahwa model klasik mampu menggeneralisasi dengan stabil, sementara model *hybrid* kuantum-klasik menunjukkan ketidakstabilan dan prediksi yang kurang akurat. Meskipun demikian, proyek ini berhasil membangun fondasi teoretis dan teknis yang kuat, sekaligus membuka wawasan tentang tantangan dan peluang penerapan *quantum machine learning* dalam lingkungan *Noisy Intermediate-Scale Quantum* (NISQ) untuk penelitian di masa depan.

KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadiran Tuhan Yang Maha Esa, berkat rahmat dan karunia-Nya, Laporan Kerja Praktik dengan judul “Simulasi Material MoS_2 Dua Dimensi Untuk Aplikasi Berbagai Sensor Gas” ini dapat diselesaikan dengan baik sebagai wujud pertanggungjawaban atas kegiatan yang telah dilaksanakan di Pusat Riset Fisika Kuantum, Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN). Penyelesaian laporan ini tidak terlepas dari dukungan dan bimbingan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis ingin menyampaikan rasa terima kasih dan penghargaan setinggi-tingginya kepada:

- Bapak Dr. Sasfan Arman Wella, Bapak Dr. Ahmad Ridwan Tresna Nugraha dan Bapak Dr. Edi Suprayoga selaku Pembimbing Lapangan di BRIN, dan Ibu Dr. Ismudiati Puri Handayani M.Sc, selaku Dosen Pembimbing Akademik, atas bimbingan dan arahan yang berharga selama pelaksanaan proyek.
- Seluruh tim dan rekan-rekan peneliti di Pusat Riset Fisika Kuantum, BRIN, atas lingkungan kerja yang kolaboratif dan suportif.
- Jajaran pimpinan Program Studi Teknik Fisika, Fakultas Teknik Elektro, Telkom University, atas kesempatan yang diberikan untuk melaksanakan Kerja Praktik ini.
- Keluarga tercinta yang senantiasa memberikan doa, motivasi, dan dukungan penuh.
- Semua pihak yang telah membantu dan berkontribusi secara langsung maupun tidak langsung dalam proses penyusunan laporan ini.

Penulis menyadari bahwa laporan ini masih memiliki banyak kekurangan dan jauh dari kata sempurna. Oleh karena itu, kritik dan saran yang membangun sangat diharapkan demi perbaikan di masa mendatang. Semoga laporan ini dapat memberikan manfaat, baik bagi penulis maupun bagi para pembaca.

Tangerang Selatan, 12 Februari 2025

Shafira Zaujatina Nasution

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN	i
ABSTRAK	ii
KATA PENGANTAR	iii
DAFTAR ISI	iii
DAFTAR GAMBAR	vi
DAFTAR TABEL	vii
DAFTAR ISTILAH	viii
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Penugasan	1
1.2 Lingkup Penugasan	1
1.3 Target Pemecahan Masalah	2
1.4 Metode Pelaksanaan Tugas	3
BAB II PROFIL INSTITUSI KERJA PRAKTIK	5
2.1 Sejarah Badan Riset dan Inovasi Nasional	5
2.2 Struktur Organisasi Badan Riset dan Inovasi Nasional....	5
2.3 Visi, Misi, Tujuan dan Sasaran Badan Riset dan Inovasi Nasional	5
2.3.1 Visi BRIN	6
2.3.2 Misi BRIN	6
2.3.3 Tujuan BRIN	7
2.3.4 Sasaran Strategis BRIN	7
2.3.5 Logo	8
2.4 Pusat Riset Fisika Kuantum	8
2.5 Kelompok Riset Informasi dan Komputasi Kuantum	9

BAB III KEGIATAN DAN PEMBAHASAN KRITIS	10
3.1 Deskripsi Keterlibatan dan Peran Mahasiswa	10
3.1.1 Penyiapan Infrastruktur Komputasi.....	10
3.1.2 Penguatan Landasan Teori dan Diseminasi.....	11
3.1.3 Persiapan dan Validasi Data	14
3.1.4 Simulasi dan Analisis Sensitivitas Gas <i>Hybrid</i>	19
3.1.5 Simulasi Adsorpsi dan Kalkulasi Sifat Elektronik ..	21
3.1.6 Presentasi Akhir dan Dokumentasi	25
BAB IV Simpulan & Saran.....	27
4.1 SIMPULAN	27
4.2 SARAN	27
4.2.1 Saran untuk Instansi/Perusahaan (BRIN) dan Proyek/Kegiatan	28
4.2.2 Saran untuk Pengembangan Keilmuan Program Studi (Teknik Fisika Telkom University).....	28
DAFTAR PUSTAKA	29
Lampiran	xi

DAFTAR GAMBAR

2.1	Struktur Organisasi Badan Riset dan Inovasi Nasional	5
2.2	Logo BRIN berwarna merah dengan lima simbol elemen ekosistem dan biodiversitas	8
3.1	Konfigurasi <i>SSH Tunneling</i> ke server <i>HPC</i>	11
3.2	Materi studi literatur tentang struktur Monolayer MoS_2	12
3.3	Hasil perhitungan band struktur dan rapat keadaan elektron (DOS) untuk sistem supercell MoS_2 monolayer.	12
3.4	Sesi diseminasi internal materi komputasi kuantum.	14
3.5	Cara penentuan atomic positions untuk MoS_2	15
3.6	Input file MoS_2	15
3.7	Visualisasi struktur supercell MoS_2 4 x 4 menggunakan XCrySDen.	16
3.8	Imputasi data dengan metode <i>linear interpolation</i>	17
3.9	Imputasi data dengan metode <i>forward fill</i>	17
3.10	Imputasi data dengan metode <i>backward fill</i>	18
3.11	Imputasi data dengan metode <i>moving average</i>	18
3.12	Visualisasi molekul CO pada situs <i>Hollow</i> (H) di atas permukaan MoS_2	20
3.13	Visualisasi molekul CO pada situs <i>Bridge</i> (B) di atas permukaan MoS_2	21
3.14	Grafik Energi Adsorpsi diberbagai site.	23
3.15	Scrip komputasi dan <i>post-processing</i> untuk analisis DOS dan <i>Band Structure</i> di H site.	24
3.16	Ekstraksi nilai Transfer Muatan dari luaran <i>Quantum Espresso</i> . .	25
3.17	Presentasi akhir mengenai hasil simulasi DFT adsorpsi gas CO pada <i>Monolayer</i> MoS_2	26

DAFTAR TABEL

3.1	Perhitungan Energi Adsorpsi (E_{ads}) molekul CO pada berbagai situs di permukaan <i>Monolayer</i> MoS ₂	22
-----	---	----

DAFTAR ISTILAH

Angle Encoding Teknik yang digunakan dalam komputasi kuantum untuk memetakan data klasik ke dalam status kuantum dengan mengubah nilai fitur data menjadi sudut rotasi qubit.

Ansatz Dalam komputasi kuantum, sirkuit kuantum terparametrisasi yang dapat dilatih dan disesuaikan untuk memecahkan masalah tertentu.

BusyBox Lingkungan minimal yang digunakan pada sistem embedded atau selama proses boot (*initramfs*) yang berisi utilitas UNIX esensial.

Dropout Metode regularisasi yang digunakan dalam jaringan saraf untuk mencegah *overfitting* dengan secara acak 'menonaktifkan' sejumlah unit pada setiap iterasi pelatihan.

HPC Akronim dari *High-Performance Computing*, merujuk pada pemrosesan data kompleks menggunakan superkomputer atau kluster komputer.

Hybrid Model gabungan yang mengintegrasikan metode dari dua domain berbeda, seperti komputasi klasik dan kuantum.

Imputasi (Imputation) Proses mengisi nilai yang hilang atau tidak tersedia dalam suatu dataset. Metode yang digunakan termasuk *linear interpolation*, *forward fill*, *backward fill*, dan *moving average*.

Inisialisasi (Initialization) Proses menyiapkan lingkungan komputasi untuk menjalankan program atau proyek, termasuk instalasi perangkat lunak dan konfigurasi dependensi.

LSTM Akronim dari *Long Short-Term Memory*, jenis arsitektur jaringan saraf berulang yang dirancang khusus untuk memproses dan memprediksi data deret waktu dengan mengingat informasi dari sekuens yang lebih panjang.

Machine Learning Sub-bidang kecerdasan buatan yang memungkinkan sistem belajar dari data dan membuat prediksi atau keputusan tanpa diprogram secara eksplisit.

MSE Akronim dari *Mean Squared Error*, metrik evaluasi yang mengukur rata-rata selisih kuadrat antara nilai prediksi dan nilai aktual dalam suatu model regresi.

NFS Akronim dari *Network File System*, protokol yang memungkinkan satu komputer untuk mengakses file yang disimpan di komputer lain melalui jaringan.

NISQ Akronim dari *Noisy Intermediate-Scale Quantum*, era komputasi kuantum saat ini di mana perangkat keras memiliki jumlah qubit terbatas dan rentan terhadap *noise*.

Overfitting Masalah dalam *machine learning* di mana model belajar terlalu baik dari data pelatihan sehingga tidak dapat menggeneralisasi dengan baik pada data baru.

PXE Akronim dari *Preboot Execution Environment*, standar untuk *booting* komputer dari jaringan tanpa media penyimpanan lokal.

Qiskit Pustaka perangkat lunak *open-source* yang dikembangkan oleh IBM untuk bekerja dengan komputasi kuantum pada tingkat sirkuit.

Quantum Computing Bidang komputasi yang memanfaatkan fenomena mekanika kuantum seperti superposisi dan entanglemen untuk memecahkan masalah yang rumit bagi komputer klasik.

Quantum Machine Learning (QML) Sub-bidang yang mengeksplorasi penggunaan prinsip-prinsip komputasi kuantum untuk meningkatkan algoritma *machine learning*.

Qubit Satuan dasar informasi dalam komputasi kuantum, setara dengan bit pada komputer klasik. *Qubit* dapat berada dalam keadaan 0, 1, atau superposisi dari keduanya.

R² Akronim dari *R-squared* atau Koefisien Determinasi, metrik statistik yang menunjukkan seberapa baik suatu model regresi mampu menjelaskan variabilitas data.

Raspberry Pi Komputer mini yang sering digunakan untuk tujuan pendidikan atau proyek komputasi skala kecil, termasuk kluster mini.

RMSE Akronim dari *Root Mean Squared Error*, metrik yang menghitung akar kuadrat dari *MSE*, memberikan pengukuran rata-rata kesalahan prediksi dalam unit yang sama dengan variabel yang diprediksi.

Random Forest (RF) Algoritma *machine learning* yang bekerja dengan membangun banyak pohon keputusan dan menggabungkan hasilnya untuk meningkatkan akurasi dan stabilitas.

Secure Shell (SSH) Protokol jaringan yang digunakan untuk mengamankan koneksi ke komputer jarak jauh.

Slurm Manajer beban kerja dan penjadwal pekerjaan *open-source* yang digunakan pada kluster komputer.

TensorFlow Pustaka *open-source* yang digunakan untuk *machine learning* dan pengembangan model jaringan saraf.

Variational Quantum Circuits Sirkuit kuantum yang parameternya dapat disesuaikan untuk mengoptimalkan solusi.

Virtual Environment (Venv) Lingkungan yang terisolasi yang memungkinkan pengguna untuk mengelola dependensi proyek Python yang berbeda secara terpisah tanpa ada konflik.

WSL Akronim dari *Windows Subsystem for Linux*, lapisan kompatibilitas yang memungkinkan pengguna menjalankan lingkungan Linux langsung di dalam Windows.

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang Penugasan

Kerja Praktik (KP) merupakan mata kuliah wajib di Telkom University yang dirancang untuk menjembatani teori dan praktik. Melalui KP, mahasiswa berkesempatan mengaplikasikan ilmu yang diperoleh di perkuliahan ke dalam konteks kerja nyata, berinteraksi langsung dengan tantangan industri, dan memahami dinamika profesional. Dengan demikian, KP bertujuan untuk melatih mahasiswa dalam pemecahan masalah, komunikasi, kerja sama tim, serta manajemen proyek dan waktu.

Pemilihan Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN), Pusat Riset Fisika Kuantum, sebagai tempat pelaksanaan KP didasari oleh relevansi yang kuat antara topik riset di sana dengan kurikulum studi, khususnya dalam bidang fisika komputasi dan rekayasa material. Penugasan ini memberikan kesempatan untuk mengeksplorasi metode komputasi Density Functional Theory (DFT) dalam menganalisis material dua dimensi, yaitu Molybdenum Disulfide (MoS_2), sebagai kandidat sensor gas yang efisien. Riset ini difokuskan pada simulasi adsorpsi berbagai molekul gas (seperti NO , CO , O_2 dan H_2) untuk memahami perubahan struktur elektronik dan sensitivitas material. Lingkungan riset di BRIN sangat ideal untuk menerapkan pengetahuan teoretis ke dalam simulasi tingkat atomik yang berkontribusi pada pengembangan teknologi sensor berkinerja tinggi dan hemat energi.

1.2 Lingkup Penugasan

Kerja Praktik ini dilaksanakan di Pusat Riset Fisika Kuantum, Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) sebagai Asisten Peneliti. Penugasan utama berfokus pada simulasi komputasi material nanoteknologi menggunakan metode Density Functional Theory (DFT). Secara spesifik, penelitian ini menganalisis karakteristik adsorpsi berbagai molekul gas toksik pada material dua dimensi Molybdenum Disulfide (MoS_2) monolayer. Proyek ini bertujuan untuk mengeksplorasi potensi MoS_2 sebagai material sensor gas yang memiliki sensitivitas tinggi dan efisiensi energi melalui pendekatan simulasi prinsip pertama (first-principles) menggunakan perangkat lunak Quantum Espresso.

Tugas spesifik yang diemban meliputi:

1. **Pemodelan dan Optimasi Struktur:** Melakukan konstruksi dan visualisasi struktur kristal monolayer MoS_2 supercell 4×4 serta berbagai molekul target (H_2, O_2, H_2O, NO, NO_2 , dan CO) menggunakan perangkat lunak VESTA atau XCrySDen.
2. **Kalkulasi Energi Adsorpsi (E_{ads}):** Menghitung energi total sistem dan energi adsorpsi pada berbagai variasi posisi situs (Top-Mo, Top-S, Hollow, dan Bridge) serta variasi ketinggian untuk menentukan konfigurasi molekul gas yang paling stabil secara energetik.
3. **Analisis Struktur Elektronik:** Menganalisis perubahan properti elektronik material setelah terpapar gas melalui perhitungan Density of States (DOS) dan Struktur Pita (Band Structure) untuk mengidentifikasi perubahan celah pita energi (band gap) dan munculnya impurity states yang mengindikasikan sensitivitas sensor.

1.3 Target Pemecahan Masalah

Permasalahan utama yang diangkat dalam penugasan ini adalah kebutuhan mendesak akan teknologi sensor gas yang memiliki sensitivitas tinggi, low-noise, dan efisiensi energi untuk mendeteksi gas beracun di lingkungan. Pengembangan material sensor baru seringkali terkendala oleh kurangnya pemahaman mendalam mengenai mekanisme interaksi antara molekul gas dan permukaan material pada tingkat atomik. Tanpa simulasi komputasi yang akurat, sulit untuk memprediksi bagaimana struktur elektronik material berubah saat terpapar gas, yang merupakan kunci utama dalam menentukan selektivitas dan kinerja sensor.

Target utama dari penelitian ini adalah untuk mengevaluasi kelayakan dan karakteristik material dua dimensi Molybdenum Disulfide (MoS_2) monolayer sebagai kandidat sensor gas unggul melalui simulasi first-principles berbasis Density Functional Theory (DFT). Penelitian ini bertujuan untuk memetakan interaksi adsorpsi berbagai gas target (H_2, O_2, H_2O, NO, NO_2 , dan CO) dan dampaknya terhadap properti elektronik material. Target-target spesifik yang diharapkan tercapai meliputi:

1. **Penentuan Konfigurasi Adsorpsi Paling Stabil:** Mengidentifikasi posisi situs adsorpsi (Top-Mo, Top-S, Hollow, atau Bridge) dan orientasi

molekul yang menghasilkan energi adsorpsi minimum (E_{ads}) guna menentukan kestabilan interaksi antara gas dan MoS_2 .

2. Analisis Mekanisme Adsorpsi (Fisisorpsi vs Kemisorpsi): Mengklasifikasikan jenis interaksi yang terjadi—apakah fisisorpsi lemah (seperti pada H_2 dan CO) atau kemisorpsi kuat (seperti pada NO_2)—berdasarkan nilai energi adsorpsi dan jarak ekuilibrium molekul.
3. Evaluasi Respons Elektronik dan Selektivitas: Menganalisis perubahan pada Density of States (DOS) dan struktur pita energi (Band Structure) untuk mendeteksi munculnya impurity states di dalam celah pita (band gap), yang membuktikan kemampuan material dalam membedakan jenis gas (selektivitas).

1.4 Metode Pelaksanaan Tugas

Pelaksanaan tugas ini menerapkan pendekatan simulasi komputasi berbasis prinsip pertama (first-principles) yang dijalankan secara sistematis dan terstruktur. Metode ini mengintegrasikan studi literatur mendalam dengan eksperimen komputasi (computational experiment) untuk menjamin validitas hasil prediksi material. Setiap tahapan dirancang untuk memastikan proses penelitian berjalan efisien, mulai dari konstruksi model hingga analisis data elektronik. Berikut adalah alur kerja teknis yang diterapkan:

1. Studi Literatur dan Persiapan Perangkat Lunak: Tahap awal melibatkan pendalaman teori mengenai Density Functional Theory (DFT) dan material nanoteknologi. Persiapan teknis meliputi instalasi dan konfigurasi perangkat lunak Quantum Espresso sebagai mesin kalkulasi utama, serta VESTA atau XCrySDen untuk visualisasi struktur kristal.
2. Pemodelan Sistem Komputasi (*Computational Modeling*): Dilakukan konstruksi model material monolayer MoS_2 menggunakan supercell berukuran 4×4 dengan konstanta kisi 12.48 \AA . Ruang vakum sebesar 20 \AA ditambahkan pada arah sumbu-z untuk meminimalisir interaksi antar-lapisan periodik (inter-layer interaction). Model gas target (H_2 , O_2 , H_2O , NO , NO_2 , dan CO) juga dibangun pada tahap ini.

3. Optimasi Geometri dan Relaksasi Struktur: Dilakukan simulasi relaksasi ionik untuk mencari konfigurasi energi terendah (ground state). Molekul gas ditempatkan pada berbagai posisi situs adsorpsi, yaitu Top-Mo (T_M), Top-S (T_S), Hollow (H), dan Bridge (B), dengan variasi orientasi vertikal dan horizontal. Parameter kalkulasi menggunakan energi cutoff gelombang datar sebesar 30 Ry dan k-point mesh Monkhorst-Pack $5 \times 5 \times 1$ untuk optimasi struktur.
4. Kalkulasi Energi Adsorpsi dan Struktur Elektronik: Setelah struktur teroptimasi, dilakukan perhitungan energi total sistem untuk menentukan Energi Adsorpsi (E_{ads}) guna mengevaluasi kestabilan ikatan (eksotermik/endotermik). Selanjutnya, dilakukan kalkulasi properti elektronik mendalam yang mencakup Density of States (DOS) dan Struktur Pita Energi (Band Structure) dengan k-point mesh yang lebih rapat ($10 \times 10 \times 1$) untuk mendapatkan resolusi data yang akurat.
5. Analisis Data dan Interpretasi: Tahap akhir berfokus pada analisis interaksi antara gas dan material. Data E_{ads} digunakan untuk mengklasifikasikan jenis adsorpsi (fisisorpsi atau kemisorpsi). Analisis DOS dan Band Structure digunakan untuk mengidentifikasi perubahan celah pita energi (band gap) dan munculnya impurity states yang menjadi indikator sensitivitas sensor terhadap gas tertentu.

BAB II

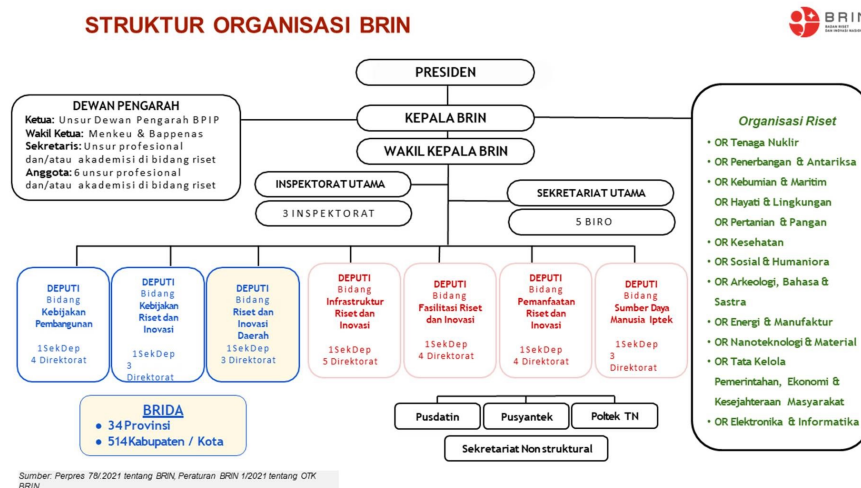
PROFIL INSTITUSI KERJA PRAKTIK

2.1 Sejarah Badan Riset dan Inovasi Nasional

Badan Riset dan Inovasi Nasional merupakan kumpulan badan riset yang dijadikan menjadi satu kesatuan badan. Pada awalnya lembaga penelitian Indonesia seperti Lembaga Ilmu Pengetahuan Indonesia (LIPI), Badan Pengkajian dan Penerapan Teknologi (BPPT), Badan Tenaga Nuklir Nasional (BATAN), dan Lembaga Penerbangan dan Antariksa Nasional (LAPAN) berdiri secara terpisah. Namun pada tanggal 5 Mei 2021, Joko Widodo menandatangani Peraturan Presiden nomor 33 tahun 2021 yang menetapkan BRIN sebagai satu satunya badan penelitian nasional.

2.2 Struktur Organisasi Badan Riset dan Inovasi Nasional

Seperti dengan badan organisasi lainnya, Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) memiliki struktur organisasi. Berikut merupakan struktur organisasi dari BRIN:



Gambar 2.1. Struktur Organisasi Badan Riset dan Inovasi Nasional

2.3 Visi, Misi, Tujuan dan Sasaran Badan Riset dan Inovasi Nasional

Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) adalah lembaga pemerintah nonkementerian yang secara langsung bertanggung jawab kepada Presiden

Indonesia melalui menteri yang memiliki wewenang dalam urusan pemerintahan di bidang riset dan teknologi.

2.3.1 Visi BRIN

Pada periode 2025 ini BRIN memiliki visi sebagai berikut:

“Terwujudnya Badan Riset dan Inovasi Nasional yang andal, profesional, inovatif, dan berintegritas dalam pelayanan kepada Presiden dan Wakil Presiden, untuk mewujudkan Visi dan Misi Presiden : Indonesia Maju yang Berdaulat, Mandiri, dan Berkepribadian berlandaskan Gotong Royong”.

Berdasarkan visi yang disampaikan dapat disimpulkan bahwa BRIN bertekad untuk menjadi lembaga penelitian yang profesional, dan inovatif dalam menciptakan teknologi. Selain itu BRIN juga bertekad untuk mewujudkan Visi dan Misi presiden untuk memajukan bangsa dengan asas gotong royong.

2.3.2 Misi BRIN

Untuk mewujudkan visi yang telah ditetapkan, Badan Riset dan Inovasi Nasional menetapkan misi sebagai berikut:

1. Memberikan dukungan teknis dan administrasi serta analisis yang cepat, akurat dan responsif, kepada Presiden dan Wakil Presiden dalam menyelenggarakan penelitian, pengembangan, pengkajian dan penerapan, serta invensi dan inovasi, penyelenggaraan ketenaganukliran, dan penyelenggaraan keantariksaan secara nasional yang terintegrasi serta melakukan *monitoring* pengendalian dan evaluasi terhadap pelaksanaan tugas dan fungsi BRIDA
2. Meningkatkan kualitas sumber daya manusia dan prasarana riset dan inovasi penyelenggaraan ketenaganukliran, dan keantariksaan secara nasional yang terintegrasi dan pembinaan terhadap pelaksanaan tugas dan fungsi BRIDA
3. Menyelenggarakan pelayanan yang efektif dan efisien di bidang pengawasan, administrasi umum, informasi, dan hubungan kelembagaan

Pada misi yang telah dipaparkan, dapat disimpulkan bahwa BRIN akan memberikan dukungan teknis administrasi serta analisis yang cepat, responsifi kepada Presiden dan Wakil Presiden dalam menyelenggarakan

penelitian. BRIN juga akan hadir dalam masyarakat untuk meningkatkan kualitas sumber daya manusia dan juga menyelenggarakan pelayanan efektif.

2.3.3 Tujuan BRIN

Untuk mencapai visi dan melaksanakan misi Badan Riset dan Inovasi Nasional, tujuan strategis yang harus dicapai adalah:

1. Terwujudnya temuan, terobosan dan pembaharuan ilmu pengetahuan dari hasil penelitian, pengembangan, pengkajian dan penerapan, serta invensi dan inovasi, penyelenggaraan ketenaganukliran, dan penyelenggaraan keantariksaan dalam rangka peningkatan produktivitas dan daya saing, peningkatan kualitas lingkungan hidup dan ketahanan bencana, serta iklim.
2. Terwujudnya sumber daya manusia, infrastruktur, fasilitasi dan pemanfaatan riset dan inovasi yang unggul dan kompetitif.
3. Terwujudnya Tata Kelola Pemerintahan di Badan Riset dan Inovasi Nasional yang baik dan bersih.

Tujuan strategis ini dirancang untuk menanggapi permasalahan yang dihadapi dan untuk mewujudkan visi serta melaksanakan misi Badan Riset dan Inovasi Nasional.

2.3.4 Sasaran Strategis BRIN

Sasaran strategis yang dirancang bertujuan mengatasi berbagai permasalahan yang ada. Berikut merupakan sasaran strategis dari BRIN:

1. Meningkatnya keunggulan riset dan inovasi ilmu pengetahuan dan teknologi, serta dapat dijadikan kebijakan berbasis bukti yang selaras dengan arah pembangunan berkelanjutan.
2. Meningkatnya kolaborasi dalam pengembangan dan pemanfaatan produk ilmu pengetahuan berdasarkan prioritas pembangunan berkelanjutan.
3. Meningkatnya produktivitas dan daya saing sumber daya riset dan inovasi BRIN.

4. Meningkatnya penerapan ilmu pengetahuan dan teknologi untuk mendukung kualitas lingkungan hidup, ketahanan bencana, dan kerentanan iklim.
5. Tata kelola BRIN yang efektif, efisien dan akuntabel.

2.3.5 Logo

Logo BRIN terdiri dari logograf dan logotipe bertuliskan "BRIN" yang modern dan mudah dibaca, memperkuat citra BRIN sebagai institusi yang visioner, tegas, dan tangkas. Warna merah pada logo mencerminkan optimisme, kepercayaan diri, dan kesiapan BRIN dalam menghadapi masa depan.



Gambar 2.2. Logo BRIN berwarna merah dengan lima simbol elemen ekosistem dan biodiversitas

Logo ini menggabungkan abstraksi simbol lima elemen ekosistem dan biodiversitas yang saling terkoneksi, yaitu manusia, ilmu pengetahuan, persatuan, flora, dan fauna. Simbol-simbol ini terdiri dari daun yang mewakili flora, bintang yang melambangkan angkasa dan ilmu pengetahuan, ikan yang mewakili fauna, manusia, dan biodiversitas yang menunjukkan persatuan tanah air.

2.4 Pusat Riset Fisika Kuantum

Pusat Riset Fisika Kuantum BRIN adalah pusat riset nasional yang didirikan pada tahun 2022 oleh Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN), dengan tujuan utama untuk penelitian dasar-dasar fisika kuantum dan aplikasinya untuk teknologi masa depan. Dalam konteks visi Indonesia untuk mencapai masa keemasan pada tahun 2045, pusat riset ini juga bertujuan untuk mempersiapkan negara dengan pengetahuan dan infrastruktur yang memadai untuk revolusi industri kuantum.

Pusat Riset Fisika Kuantum memiliki tujuh kelompok riset: (1) Kelompok Riset Fisika Energi Tinggi Teoretis, (2) Kelompok Riset Fisika Energi Tinggi Eksperimental, (3) Fisika Non-Perturbatif, (4) Kelompok Riset Teori Materi Kuantum, (5) Kelompok Riset Informasi dan Komputasi Kuantum, (6) Kelompok Riset Simulasi Kuantum, dan (7) Kelompok Riset Perangkat & Teknologi Kuantum.

2.5 Kelompok Riset Informasi dan Komputasi Kuantum

Kelompok Riset Informasi dan Komputasi Kuantum memiliki fokus utama pada pengembangan teknologi *artificial intelligence* dengan pendekatan komputasi kuantum. Kegiatan riset yang dilakukan meliputi studi literatur, simulasi numerik, analisis data, pengembangan model prediktif, serta implementasi komputasi berbasis *platform* kuantum.

Penugasan kerja praktik yang dilaksanakan berada dalam lingkup pengembangan model *machine learning* untuk prediksi curah hujan, melalui pendekatan komparatif antara model konvensional dan model *hybrid* (gabungan metode klasik dan kuantum). Kegiatan utama dalam pengerjaan ini meliputi pemanfaatan *High Performance Computing* (HPC), implementasi sistem komputasi klaster, dan penggunaan lingkungan WSL Debian. Teknologi dan perangkat lunak yang digunakan mencakup Python, Jupyter Notebook, Qiskit, PennyLane, PyTorch, dan TensorFlow.

Selain itu, Raspberry Pi 5 akan dimanfaatkan sebagai media eksplorasi untuk memahami instalasi dan konfigurasi dasar sistem komputasi klaster mini. Penggunaan perangkat ini bertujuan untuk mendapatkan pengalaman praktis dalam membangun infrastruktur komputasi skala kecil, bukan untuk implementasi model itu sendiri.

Tujuan akhir dari proyek ini adalah menghasilkan model prediksi curah hujan yang optimal, baik dari pendekatan klasik maupun *hybrid* kuantum-klasik.

BAB III

KEGIATAN DAN PEMBAHASAN KRITIS

3.1 Deskripsi Keterlibatan dan Peran Mahasiswa

Kerja Praktik (KP) dilaksanakan oleh penulis di Pusat Riset Fisika Kuantum, Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN), selama periode 12 Januari hingga 12 Februari 2025. Penulis berperan sebagai Asisten Peneliti di Kelompok Riset Informasi dan Komputasi Kuantum, dengan fokus utama pada proyek simulasi material dua dimensi MoS_2 untuk aplikasi sensor gas. Keterlibatan ini mencakup seluruh siklus riset, mulai dari pembelajaran awal.

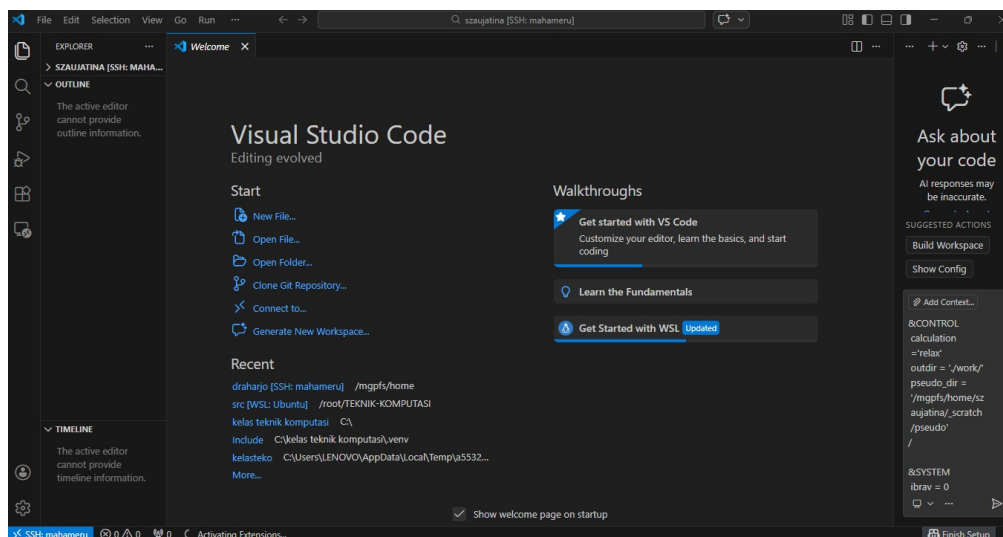
Berikut adalah uraian sistematis mengenai kegiatan inti yang diemban selama pelaksanaan Kerja Praktik, yang mencakup alur kerja dari tahap persiapan hingga pelaporan hasil.

3.1.1 Penyiapan Infrastruktur Komputasi

Fase awal kerja praktik difokuskan pada penyiapan landasan komputasi yang stabil dan efisien untuk mendukung eksperimen model skala besar. Penulis bertanggung jawab penuh atas konfigurasi lingkungan komputasi, yang melibatkan dua platform utama, *Windows Subsystem for Linux (WSL-Debian)* pada mesin lokal dan akses jarak jauh ke *High-Performance Computing (HPC)* milik BRIN. Penyiapan ini terdiri dari tiga langkah utama.

1. Konfigurasi Akses dan Keamanan

Tahap pertama adalah mengonfigurasi akses *Secure Shell (SSH)* dan *SSH Tunneling* untuk memastikan koneksi yang aman dan stabil ke server *HPC*. Proses ini krusial untuk orkestrasi beban kerja dan transfer data. Seperti yang ditunjukkan pada Gambar 3.1, penulis melakukan konfigurasi untuk menghubungkan mesin lokal ke server.



Gambar 3.1. Konfigurasi *SSH Tunneling* ke server *HPC*.

3.1.2 Penguatan Landasan Teori dan Diseminasi

Sebelum memulai implementasi model, penulis memperdalam pemahaman teoretis yang relevan dengan proyek. Kegiatan ini bertujuan untuk memastikan koherensi antara konsep dasar dan praktik implementasi.

(a) Studi Literatur

Penulis mendalami karakteristik fundamental material Molybdenum Disulfide (MoS_2) sebagai material Transition-Metal Dichalcogenide (TMDC) yang memiliki potensi besar dalam aplikasi sensor. Fokus utama literatur mencakup analisis struktur kristal heksagonal MoS_2 serta perubahan sifat elektronik yang signifikan dari fasa bulk ke monolayer. Secara spesifik, penulis mempelajari fenomena transisi celah pita energi (band gap) dari indirect pada fasa bulk (1.23 eV) menjadi direct pada fasa monolayer (1.8 eV), yang menjadi dasar pemilihan material ini untuk aplikasi sensing. Selain aspek material, penulis juga mendalami metode komputasi Density Functional Theory (DFT) menggunakan perangkat lunak Quantum ESPRESSO. Studi ini mencakup penggunaan fungsional Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Landasan teori mengenai struktur geometri MoS_2 yang digunakan untuk membangun model supercell 4×4 terlihat pada Gambar 3.2, sementara ilustrasi densitas keadaan (Density of

States) yang memvalidasi sifat semikonduktor material terdapat pada Gambar 3.3 .3.2, sementara materi komputasi kuantum terdapat pada Gambar 3.3.

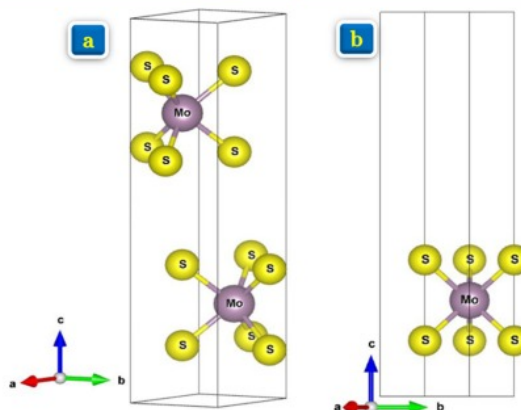


Figure 1. (a, b) Crystal structure of 2H-MX₂ (a) bulk and (b) monolayer.

wide range of industrial applications, beginning with lubricant, energy storage, photovoltaics, and catalysts.^{7–10}

This material has a hexagonal crystal structure space group (*P63/mmc*). The MoS₂ bulk forms a layered semiconducting compound with the *P3m1* space group.^{11,12} The interlayer stacking of the compound possesses Mo metal atoms inserted

band gap in the range of 1.17–1.71 eV for bulk system and 1.6–1.71 eV for monolayer. Lahourpour et al.¹⁷ reported a direct energy band gap of 1.50 eV at the K-point symmetry, determined within the (GGA) approach by employing the full-potential linear augmented plane waves and local orbital (FP-LAPW + lo) method. We should emphasize herein that even

Gambar 3.2. Materi studi literatur tentang struktur Monolayer MoS₂.

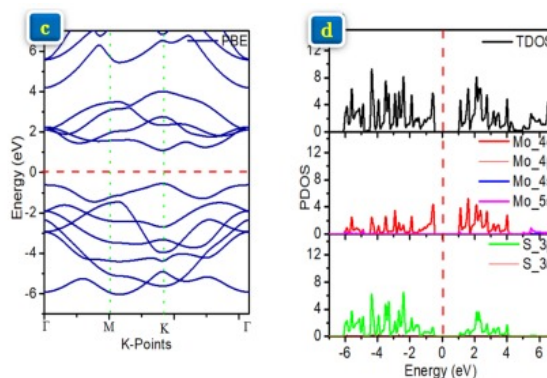


Figure 2. (a–d) Calculated band structure and density of state for (a) and (b) bulk MoS₂ within PBE and (c, d) monolayer within PBE.

the performance of the calculation, which significantly replicates the experimental findings.

3.2. Density of States and Electronic Band Structure. The bulk MoS₂ and the monolayer MoS₂ density of states and its corresponding electronic band structure, determined within the framework of the PBE, rVV10, and vdW-DF2 density functionals, and calculated in the first Brillouin zone at the high symmetry points Γ –K–M– Γ , are illustrated in Figures 2–5. The figures also show the total state density and the partial state density of the functionals. The band gap of the bulk MoS₂

band gap of 0.89 eV obtained using the rVV10 dispersion correction agrees with the result obtained by Ahmad et al.¹⁸ who reported a value of 0.89 eV within GGA. For the monolayer MoS₂, the analysis of the position of the lowest point of the conduction band and the highest point of the valence band indicates a direct band-gap energy for this material. Our obtained energy gaps of 1.68, 1.62, and 1.55 eV evaluated within the use of PBE, rVV10, and vdW-DF2, respectively, show a pronounced effect of the vdW-DF2 functional.

Gambar 3.3. Hasil perhitungan band struktur dan rapat keadaan elektron (DOS) untuk sistem supercell MoS₂ monolayer.

Melengkapi pemahaman mengenai karakteristik material,

tinjauan literatur selanjutnya difokuskan pada interaksi permukaan MoS_2 dengan lingkungan eksternal. Dalam konteks aplikasi sensor, mekanisme adsorpsi molekul gas target—seperti NO , NO_2 , CO , O_2 , dan H_2 menjadi topik pembahasan utama. Studi fundamental oleh Yue et al. (2013) menunjukkan bahwa adsorpsi molekul-molekul ini pada permukaan monolayer MoS_2 mampu memodulasi band struktur energi dan densitas keadaan (Density of States) material secara signifikan. Secara spesifik, fenomena transfer muatan (charge transfer) antara molekul gas dan permukaan MoS_2 diidentifikasi sebagai mekanisme kunci yang mengubah konduktivitas listrik material, yang sekaligus menjadi prinsip dasar operasional sensor resistif. Sejalan dengan tinjauan pada aspek elektronik tersebut, penentuan konfigurasi geometri yang paling stabil juga menjadi landasan teoritis yang tak kalah penting. Analisis ini mencakup evaluasi preferensi situs adsorpsi pada berbagai posisi simetri tinggi—yaitu Top-Mo, Top-S, Hollow, dan Bridge serta pengaruh orientasi molekul relatif terhadap permukaan. Evaluasi geometri ini bertujuan untuk menentukan konfigurasi dengan energi adsorpsi terendah guna memastikan stabilitas maksimum sistem sensor yang dirancang.

(b) Diseminasi Internal

Sebagai langkah implementasi dari studi literatur, dilaksanakan sesi konsultasi teknis dan validasi metode bersama pembimbing lapangan. Kegiatan ini difokuskan pada penyusunan strategi simulasi menggunakan Quantum ESPRESSO, mencakup tata cara penyiapan berkas input (input file) serta protokol uji konvergensi (convergence test) yang sesuai dengan kaidah Density Functional Theory (DFT). Dalam forum ini, data parameter kisi dan koordinat atom yang diperoleh dari literatur dikonversi dan disesuaikan ke dalam format komputasi untuk memastikan akurasi model awal (Gambar 3.4).

3.1.3 Persiapan dan Validasi Data

(a) Akuisisi Parameter dan Konstruksi Input

Penulis menyusun data struktur kristal MoS_2 monolayer dengan melakukan penentuan posisi atom (atomic positions) dan parameter kisi (lattice constants) secara presisi. Penentuan konstanta kisi yang optimal dilakukan melalui metode kalkulasi relaksasi sel variabel (vc-relax), di mana sistem disimulasikan agar mencapai konfigurasi energi minimum. Berdasarkan parameter awal, digunakan nilai konstanta kisi $a = 3.12 \text{ \AA}$ (yang diturunkan dari dimensi supercell 4×4 sebesar 12.48 \AA pada sumbu lateral). Data input tersebut mencakup dimensi sel satuan, konfigurasi atom Mo dan S, serta penambahan lapisan vakum sebesar 20 \AA untuk mencegah interaksi antar-periodik. Proses transformasi dari parameter teoritis menjadi berkas input (input file) Quantum ESPRESSO, yang disusun menggunakan editor teks Nano, ditampilkan pada Gambar 3.5. 3.7.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
1	Mo	0.0000000000	0.0000000000	0.5000000000											
2	Mo	0.2500000000	0.0000000000	0.5000000000											
3	Mo	0.5000000000	0.0000000000	0.5000000000											
4	Mo	0.7500000000	0.0000000000	0.5000000000											
5	Mo	0.0000000000	0.2500000000	0.5000000000											
6	Mo	0.2500000000	0.2500000000	0.5000000000											
7	Mo	0.5000000000	0.2500000000	0.5000000000											
8	Mo	0.7500000000	0.2500000000	0.5000000000											
9	Mo	0.0000000000	0.5000000000	0.5000000000											
10	Mo	0.2500000000	0.5000000000	0.5000000000											
11	Mo	0.5000000000	0.5000000000	0.5000000000											
12	Mo	0.7500000000	0.5000000000	0.5000000000											
13	Mo	0.0000000000	0.7500000000	0.5000000000											
14	Mo	0.2500000000	0.7500000000	0.5000000000											
15	Mo	0.5000000000	0.7500000000	0.5000000000											
16	Mo	0.7500000000	0.7500000000	0.5000000000											
17	S	0.0833333333	0.0833333333	0.5750000000											
18	S	0.3333333333	0.0833333333	0.5750000000											
19	S	0.5833333333	0.0833333333	0.5750000000											
20	S	0.8333333333	0.0833333333	0.5750000000											
21	S	0.0833333333	0.3333333333	0.5750000000											
22	S	0.0833333333	0.3333333333	0.5750000000											

Gambar 3.5. Cara penentuan atomic positions untuk MoS_2 .

```

GNU nano 2.9.8 mos4x4.relax.in

$CONTROL
  calculation = 'vc-relax'
  outdir = './work'
  pseudo_dir = '/mgpfs/home/szaujatina/_scratch/pseudo'
/

$SYSTEM
ibrav = 0
nat = 48
ntyp = 2
ecutwfc = 30
occupations = 'smearing'
smearing = 'mv'
degauss = 0.02
/

$ELECTRONS
conv_thr = 1e-6
mixing_beta = 0.7
/

$IONS
/

$CELL
cell_dofree = '2Dxy'
/

$ATOMIC_SPECIES
Mo 95.959 Mo.pbe-spn-kjpaw_psl.1.0.0.UPF
S 32.065 S.pbe-n-kjpaw_psl.1.0.0.UPF

$CELL_PARAMETERS {angstroms}
12.4800000000 0.0000000000 0.0000000000
6.2400000000 10.8079970392 0.0000000000
0.0000000000 0.0000000000 20.0000000000

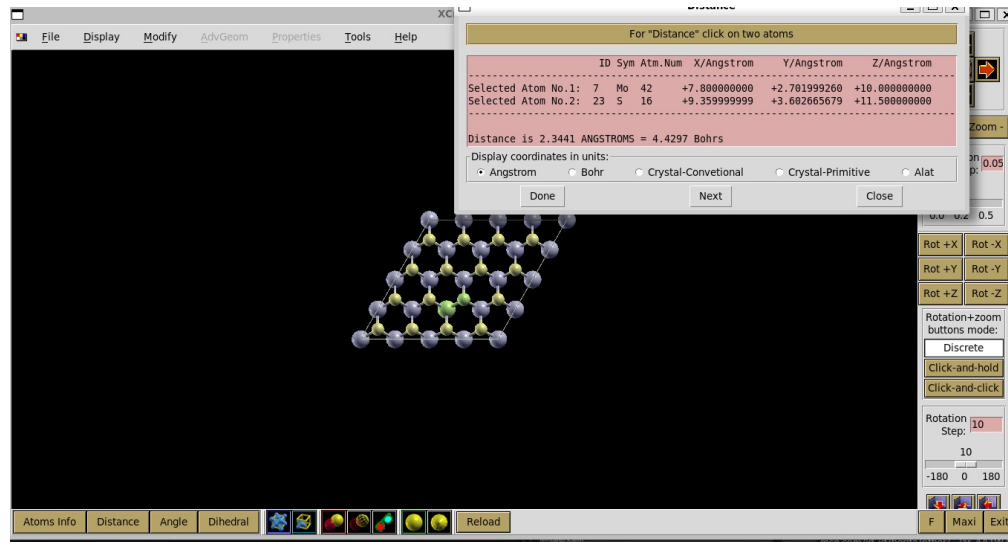
$ATOMIC_POSITIONS {crystal}
Mo 0.0000000000 0.0000000000 0.5000000000
Mo 0.2500000000 0.0000000000 0.5000000000
Mo 0.5000000000 0.0000000000 0.5000000000
Mo 0.7500000000 0.0000000000 0.5000000000
Mo 0.0000000000 0.2500000000 0.5000000000
Mo 0.2500000000 0.2500000000 0.5000000000
Mo 0.5000000000 0.2500000000 0.5000000000
Mo 0.7500000000 0.2500000000 0.5000000000
Mo 0.0000000000 0.5000000000 0.5000000000
Mo 0.2500000000 0.5000000000 0.5000000000
Mo 0.5000000000 0.5000000000 0.5000000000
Mo 0.7500000000 0.5000000000 0.5000000000
S 0.0833333333 0.0833333333 0.5750000000
S 0.3333333333 0.0833333333 0.5750000000
S 0.5833333333 0.0833333333 0.5750000000
S 0.8333333333 0.0833333333 0.5750000000
S 0.0833333333 0.3333333333 0.5750000000
S 0.3333333333 0.3333333333 0.5750000000

```

Gambar 3.6. Input file MoS_2 .

Selanjutnya, untuk memastikan integritas model komputasi yang telah disusun, dilakukan validasi geometri secara visual

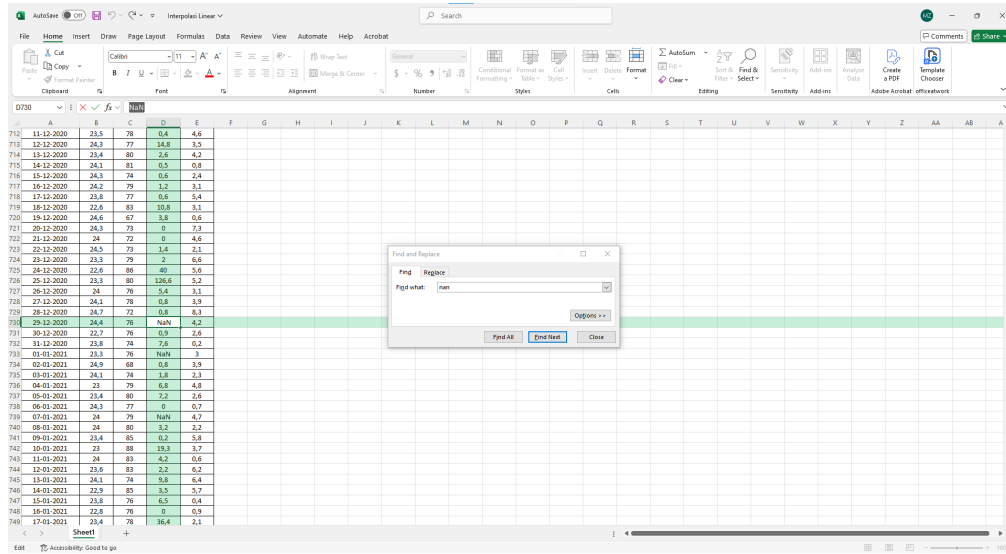
menggunakan perangkat lunak XCrySDen (X-Window CrySTal Density). Langkah ini bertujuan untuk memverifikasi bahwa koordinat atom pada input file telah diterjemahkan dengan benar menjadi struktur supercell MoS_2 monolayer 4×4 dengan simetri heksagonal yang sesuai. Selain itu, visualisasi ini juga mengonfirmasi keberadaan lapisan vakum vertikal (20 Å) guna memastikan isolasi antar-periodik yang efektif.



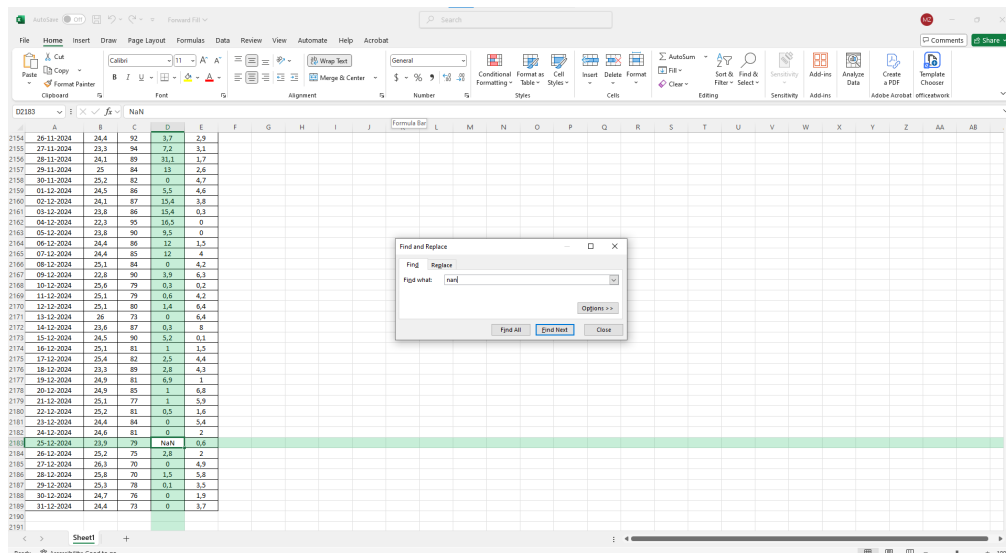
Gambar 3.7. Visualisasi struktur supercell MoS_2 4×4 menggunakan XCrySDen.

(b) Kalkulasi Band Struktur dan DOS

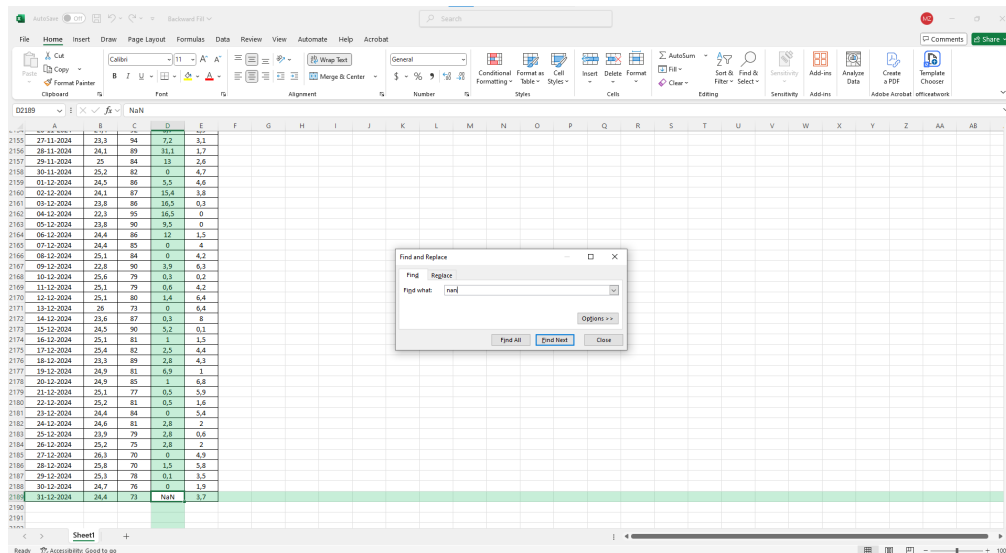
Nilai-nilai yang hilang dalam data diidentifikasi dan ditangani menggunakan berbagai skenario imputasi, seperti *linear interpolation*, *forward fill*, *backward fill*, atau *moving average*. Penanganan ini esensial untuk menjaga integritas data dan stabilitas pelatihan model, seperti yang terlihat pada Gambar 3.8, Gambar 3.9, Gambar 3.10, dan Gambar 3.11.



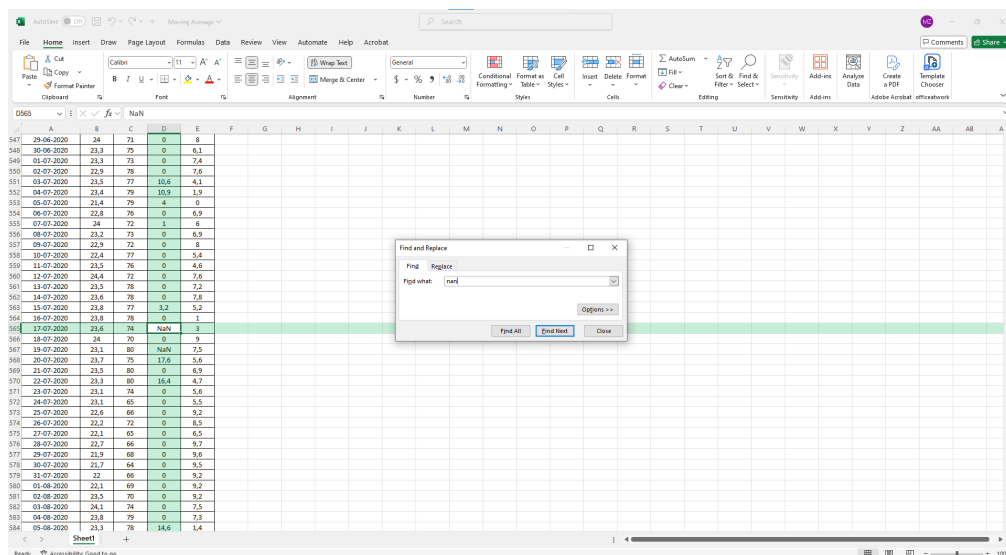
Gambar 3.8. Imputasi data dengan metode *linear interpolation*.



Gambar 3.9. Imputasi data dengan metode *forward fill*.



Gambar 3.10. Imputasi data dengan metode *backward fill*.



Gambar 3.11. Imputasi data dengan metode *moving average*.

(c) Konfigurasi Adsorpsi Gas

Kinerja material sensor gas yang ideal ditentukan oleh dua parameter utama: sensitivitas (kepekaan respon terhadap keberadaan gas) dan selektivitas (kemampuan untuk membedakan target gas dengan pengganggu gas lainnya). Dalam rangka memunculkan kapabilitas tersebut, tahap simulasi utama difokuskan pada analisis interaksi antara permukaan monolayer MoS_2 dengan berbagai molekul gas target, yaitu H_2 , O_2 , NO , dan CO . Untuk menentukan konfigurasi geometri

yang paling stabil secara energik, dilakukan variasi posisi adsorpsi pada empat situs simetri tinggi di permukaan supercell, yaitu: Top-Mo (T_M): Tepat di atas atom Molibdenum. Top-S (T_S): Tepat di atas atom Sulfur. Hollow (H): Di tengah cincin heksagonal (pusat heksagon). Bridge (B): Di antara ikatan Mo-S. Selain variasi posisi, orientasi awal molekul juga disimulasikan dalam posisi Vertikal dan Horizontal relatif terhadap permukaan MoS_2 untuk mencari kemungkinan interaksi terbaik. Stabilitas sistem dievaluasi berdasarkan Energi Adsorpsi (E_{ads}), yang dihitung menggunakan persamaan berikut:

$$E_{ads} = E_{tot} - (E_{MoS_2} + E_{gas})$$

Di mana: E_{tot} adalah energi total sistem gabungan ($MoS_2 + gas$). E_{MoS_2} adalah energi total monolayer MoS_2 murni. E_{gas} adalah energi total molekul gas yang dipertahankan (molekul gas terisolasi). Berdasarkan persamaan tersebut, nilai E_{ads} yang paling negatif mengindikasikan bahwa reaksi adsorpsi bersifat eksotermik (melepaskan energi), yang menandakan konfigurasi tersebut adalah posisi paling stabil dan disukai secara termodinamika. Sebaliknya, nilai positif menunjukkan sistem tidak stabil. Konfigurasi dengan energi terendah (paling negatif) inilah yang kemudian dipilih sebagai model acuan untuk analisis sifat elektronik lebih lanjut.

3.1.4 Simulasi dan Analisis Sensitivitas Gas Hybrid

Kegiatan inti proyek ini adalah pelaksanaan simulasi komputasi untuk menguji respons material MoS_2 terhadap berbagai molekul gas, guna mengevaluasi kinerja sensor dari aspek sensitivitas dan selektivitas.

1. Pengujian Variasi Target Gas

Penulis mensimulasikan interaksi adsorpsi pada empat spesies gas target utama, yang terdiri dari molekul polutan berbahaya (NO dan CO) serta molekul gas diatomik lainnya (H_2 dan O_2). Pada tahap ini, setiap molekul gas ditempatkan pada posisi geometri yang paling stabil di atas permukaan monolayer MoS_2 . Tujuannya adalah untuk menghitung

energi adsorpsi (E_{ads}) dan menganalisis perubahan struktur elektronik (Band Structure DOS) yang terjadi akibat adanya transfer muatan.

i. **Pemodelan dan Analisis Adsorpsi Gas Hidrogen (H_2) pada Monolayer MoS_2)**

Untuk mengeksplorasi seluruh kemungkinan posisi ikatan yang paling stabil, molekul CO juga ditempatkan pada situs simetri lainnya di permukaan. Situs *Hollow* (H) memposisikan molekul tepat di pusat rongga heksagonal yang dikelilingi oleh cincin atom Mo dan S. Sementara itu, situs *Bridge* (B) memposisikan molekul tepat di tengah-tengah ikatan kovalen antara atom Mo dan atom S terdekat. Visualisasi dari kedua konfigurasi spasial ini ditampilkan pada Gambar 3.12 dan Gambar 3.13.



Gambar 3.12. Visualisasi molekul CO pada situs *Hollow* (H) di atas permukaan MoS_2 .



Gambar 3.13. Visualisasi molekul CO pada situs *Bridge* (B) di atas permukaan MoS₂.

3.1.5 Simulasi Adsorpsi dan Kalkulasi Sifat Elektronik

Kegiatan inti dalam proyek ini adalah eksekusi komputasi *Density Functional Theory* (DFT) untuk memodelkan interaksi gas Karbon Monoksida (CO) pada permukaan *Monolayer* MoS₂ dan mengevaluasi kelayakannya sebagai sensor gas.

i. Perhitungan Energi Adsorpsi (E_{ads})

Penulis menjalankan komputasi *Self-Consistent Field* (SCF) dan optimasi geometri (vc-relax/relax) untuk mendapatkan energi total dari tiga komponen utama: sistem *supercell* MoS₂ murni (E_{MoS_2}), molekul CO terisolasi (E_{CO}), dan sistem gabungan pasca-relaksasi ($E_{(MoS_2+CO)}$). Selisih energi ini digunakan untuk menentukan Energi Adsorpsi (E_{ads}) melalui persamaan:

$$E_{ads} = E_{(MoS_2+CO)} - (E_{MoS_2} + E_{CO}) \quad (3.1)$$

Kalkulasi ini dieksekusi pada empat variasi situs adsorpsi (*adsorption sites*) yang berbeda di atas permukaan *monolayer*, yaitu situs *Hollow* (H), *Top Mo* (T_{Mo}), *Top S* (T_S), dan *Bridge* (B). Hasil perhitungan energi disajikan pada Tabel 3.1. Indikator stabilitas ikatan molekul gas pada permukaan sensor ditandai dengan nilai E_{ads} yang bernilai negatif (eksotermis).

Tabel 3.1. Perhitungan Energi Adsorpsi (E_{ads}) molekul CO pada berbagai situs di permukaan *Monolayer* MoS₂.

Situs Adsorpsi	$E_{(MoS_2+CO)}$ (Ry)	E_{MoS_2} (Ry)	E_{CO} (Ry)	E_{ads} (eV)
Hollow (H)	-8005.95402020	-7,946.06545840	-59.86894291	-266.9288097
Top Mo (T_{Mo})	-8005.94051268	-7,946.06545840	-59.86894291	-83.1494911
Top S (T_S)	-8005.95682179	-7,946.06545840	-59.86894291	-305.0464139
Bridge (B)	-8005.95495662	-7,946.06545840	-59.86894291	-279.669463

*Catatan: Konversi energi dari Rydberg ke eV menggunakan faktor pengali 13.6057.



Gambar 3.14. Grafik Energi Adsorpsi diberbagai site.

ii. **Kalkulasi *Density of States* (DOS) dan Struktur Pita Energi**

Untuk menganalisis perubahan konduktivitas material akibat paparan gas, penulis melakukan perhitungan *Non-Self-Consistent Field* (NSCF) dengan *k-points mesh* yang lebih rapat. Hasil dari *running* ini kemudian diekstraksi menggunakan modul *post-processing* (*dos.x* dan *bands.x* pada *Quantum Espresso*) untuk memvisualisasikan pergeseran celah pita energi (*bandgap*) dan distribusi elektron (*Density of States*).



Gambar 3.15. Skrip komputasi dan *post-processing* untuk analisis DOS dan *Band Structure* di H site.

iii. **Analisis Transfer Muatan (*Charge Transfer*)**

Sebagai tahap validasi mekanisme *sensing* (apakah gas bertindak sebagai donor atau akseptor elektron), penulis melakukan perhitungan distribusi muatan (*charge density*). Analisis populasi muatan (seperti analisis Löwdin yang terintegrasi di *Quantum Espresso*) dieksekusi untuk mengkuantifikasi jumlah elektron yang berpindah antara molekul CO dan *monolayer* MoS₂ saat proses adsorpsi terjadi.



Gambar 3.16. Ekstraksi nilai Transfer Muatan dari luaran *Quantum Espresso*.

3.1.6 Presentasi Akhir dan Dokumentasi

Pada akhir periode pelaksanaan Magang MBKM Mandiri, penulis bertanggung jawab untuk menyusun dokumentasi komprehensif dan mempresentasikan seluruh hasil komputasi *ab-initio* yang telah dieksekusi.

i. Dokumentasi

Seluruh tahapan riset, mulai dari parameter *input* simulasi, proses optimasi geometri (*relaxation*), hingga ekstraksi data sifat fisis material (seperti Energi Adsorpsi, *Density of States*, dan *Charge Transfer*), didokumentasikan secara sistematis ke dalam Laporan Magang. Dokumentasi ini juga mencakup skrip komputasi yang dijalankan pada klaster *High Performance Computing* (HPC) BRIN.

ii. Pemaparan Hasil

Penulis mempresentasikan capaian proyek, meliputi analisis stabilitas adsorpsi molekul gas CO pada berbagai situs di permukaan *Monolayer* MoS₂ beserta modifikasi sifat elektroniknya, di hadapan pembimbing lapangan dan tim peneliti Pusat Riset Fisika Kuantum BRIN. Presentasi ini bertujuan untuk mengevaluasi kelayakan material tersebut sebagai kandidat nanosensor gas secara teoretis, sekaligus memberikan rekomendasi untuk studi komputasi material lanjutan. Dokumentasi sesi presentasi akhir dapat dilihat pada Gambar 3.17.



Gambar 3.17. Presentasi akhir mengenai hasil simulasi DFT adsorpsi gas CO pada *Monolayer* MoS₂.

BAB IV

SIMPULAN & SARAN

4.1 SIMPULAN

Kegiatan Kerja Praktik di Pusat Riset Fisika Kuantum, Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) telah berhasil mengimplementasikan dan menguji dua model *hybrid* untuk prediksi curah hujan, yaitu *Random Forest - Long Short-Term Memory* (RF-LSTM) dan *Random Forest - Quantum Long Short-Term Memory* (RF-QLSTM). Proyek ini dimulai dengan penyiapan infrastruktur komputasi yang stabil, pra-pemrosesan data multivariabel dari BMKG, dan pengembangan kedua model dengan arsitektur yang sebanding.

Dari hasil pengujian, model klasik RF-LSTM secara signifikan mengungguli model *hybrid* RF-QLSTM. Secara kuantitatif, model RF-LSTM mencapai metrik *Root Mean Squared Error* (RMSE) yang lebih rendah (0.059404) dan koefisien determinasi (R^2) yang lebih tinggi (0.3364). Performa ini mengindikasikan bahwa model RF-LSTM lebih akurat dan mampu menjelaskan variabilitas data curah hujan secara lebih baik. Secara kualitatif, analisis kurva *loss* menunjukkan bahwa model RF-LSTM belajar dengan stabil dan menggeneralisasi dengan baik, sementara model RF-QLSTM mengalami fluktuasi yang tinggi dan gagal menggeneralisasi. Selain itu, plot visual memperkuat temuan ini, di mana prediksi model RF-LSTM berhasil mengikuti tren data aktual dengan lebih baik, sedangkan prediksi RF-QLSTM cenderung datar dan tidak mampu menangkap variabilitas puncak curah hujan. Meskipun demikian, proyek ini telah berhasil membangun fondasi teoretis dan teknis yang kuat untuk eksplorasi lebih lanjut di bidang *quantum machine learning*.

4.2 SARAN

Berdasarkan pengalaman dan tantangan yang dihadapi selama Kerja Praktik, berikut adalah beberapa saran yang diharapkan dapat memberikan kontribusi bagi pengembangan proyek dan

program studi di masa depan.

4.2.1 Saran untuk Instansi/Perusahaan (BRIN) dan Proyek/Kegiatan

- i. Melanjutkan proyek penelitian ini dengan melakukan analisis kinerja model secara mendalam, termasuk perbandingan metrik *Root Mean Square Error* (RMSE) dan metrik lain yang relevan, untuk mendapatkan kesimpulan berbasis bukti mengenai keunggulan model kuantum-klasik.
- ii. Mengimplementasikan model RF-QLSTM pada perangkat keras kuantum asli (*hardware*) ketika ketersediaannya memungkinkan, bukan hanya pada simulator. Hal ini akan memberikan validasi kinerja yang lebih akurat dan menyoroti tantangan nyata dalam komputasi kuantum saat ini.
- iii. Mengeksplorasi lebih lanjut penerapan konsep *Variational Quantum Circuits* (VQC) untuk pemodelan cuaca. Hal ini diperlukan untuk menghubungkan teori fundamental dengan praktik implementasi pada perangkat keras yang tersedia.
- iv. Mengembangkan kegiatan pendukung pembangunan kluster komputer mini berbasis *Raspberry Pi* sebagai sarana edukasi dan eksperimen, guna memberikan pemahaman praktis mengenai arsitektur kluster komputasi terdistribusi skala kecil.

4.2.2 Saran untuk Pengembangan Keilmuan Program Studi (Teknik Fisika Telkom University)

- i. Memperkuat fundamental fisika kuantum dalam kurikulum. Pemahaman teori yang mendalam sangat penting sebagai landasan untuk perkembangan teknologi modern di bidang komputasi, termasuk kecerdasan buatan (*artificial intelligence*) dan komputasi kuantum.
- ii. Memperluas mata kuliah Sistem Cerdas terkait komputasi *machine learning* dengan memperkenalkan konsep dasar *quantum machine learning* dan penerapannya, memberikan pemahaman teoretis yang kuat dan relevan dengan perkembangan teknologi terkini.

DAFTAR PUSTAKA

- [1] Google Developers, "Machine Learning Crash Course." [Online]. Tersedia: <https://developers.google.com/machine-learning/crash-course/>
- [2] Quantum.Country, "An Introduction to Quantum Computing." [Online]. Tersedia: <https://quantum.country/qm>
- [3] IBM, "Qiskit." [Online]. Tersedia: <https://www.ibm.com/quantum/qiskit>
- [4] Frontiers in Physics, "Title of the article." [Online]. Tersedia: <https://www.frontiersin.org/journals/physics/articles/10.3389/fphy.2024.1439180/full>
- [5] QML Tutorial, "A tutorial on Quantum Machine Learning." [Online]. Tersedia: <https://qml-tutorial.github.io/>
- [6] B. Geerts and A. Otero-de-la-Roza, "Probabilistic forecast of precipitation: A machine learning approach," *Journal of Hydrology*, vol. 615, p. 128795, 2022.
- [7] A. Otero-de-la-Roza, *Diskless Raspberry Pi Cluster Guide*. [Online]. Tersedia: <https://aoterodelaroza.github.io/devnotes/diskless-rpi-cluster/>

LAMPIRAN

**Lampiran A - Kegiatan Kerja Praktik Selama di Tempat Kerja
Praktik**

LOGBOOK

Pekan ke-1

Nama / NIM : Shafira Zaujatina Nasution / 101042300006

Hari	Tanggal	Jam Datang	Jam Pulang	Jumlah Jam	Kegiatan
Senin	12/01/2026	09:00	17:00	8 Jam	Melakukan studi literatur mengenai fundamental mekanika kuantum zat padat dan pengantar <i>Density Functional Theory</i> (DFT). Membaca referensi terkait fungsional penukar-korelasi dan persamaan Kohn-Sham.
Selasa	13/01/2026	09:15	16:30	7 Jam 15 Menit	Mempelajari literatur spesifik mengenai kristalografi material dua dimensi (2D), khususnya <i>Monolayer</i> MoS ₂ , dan potensinya sebagai material sensor gas. Membuat rangkuman parameter fisis material.

Hari	Tanggal	Jam Datang	Jam Pulang	Jumlah Jam	Kegiatan
Rabu	14/01/2026	09:30	16:45	7 Jam 15 Menit	Melakukan instalasi dan konfigurasi lingkungan <i>Windows Subsystem for Linux</i> (WSL) untuk kebutuhan komputasi. Mempelajari manajemen SSH key untuk akses <i>remote server</i> ke HPC BRIN dan perintah dasar <i>bash</i> Linux.
Kamis	15/01/2026	09:00	16:30	7 Jam 30 Menit	Aktivasi akun dan uji coba koneksi SSH ke klaster <i>High Performance Computing</i> (HPC) Trembesi dan Mahaameru BRIN. Mempelajari sistem <i>module load</i> dan cara menyusun skrip <i>job scheduler</i> (Slurm) untuk komputasi paralel.
Jumat	16/01/2026	–	–	–	Libur
Sabtu	17/01/2026	–	–	–	Libur
Minggu	18/01/2026	–	–	–	Libur
Total Jam Mingguan					30 Jam
					<p>Mengetahui, Atasan Langsung/ Pembimbing Lapangan</p> <p>Dr. Sasfan Arman Wella</p>

LOGBOOK

Pekan ke-2

Nama / NIM : Shafira Zaujatina Nasution / 101042300006

Hari	Tanggal	Jam Datang	Jam Pulang	Jumlah Jam	Kegiatan
Senin	19/01/2026	09:20	16:30	7 Jam 10 Menit	Mempelajari penyusunan skrip <i>input</i> (.in) untuk paket program <i>Quantum Espresso</i> . Melakukan uji coba komputasi <i>Self-Consistent Field</i> (SCF) skala kecil di klaster HPC untuk memvalidasi fungsi pseudopotensial dan pustaka MPI.
Selasa	20/01/2026	09:00	17:00	8 Jam	Menyiapkan skrip otomatisasi dan mengeksekusi perhitungan uji konvergensi parameter komputasi, secara spesifik mencari nilai optimal untuk energi <i>cutoff</i> (ecutwfc) dan densitas <i>k-points mesh</i> pada sistem material 2D.

Hari	Tanggal	Jam Datang	Jam Pulang	Jumlah Jam	Kegiatan
Rabu	21/01/2026	09:15	16:45	7 Jam 30 Menit	Mengekstraksi data hasil uji konvergensi dari HPC. Membuat visualisasi plot grafik konvergensi menggunakan Python (Matplotlib). Mengeksekusi <i>running geometry optimization</i> (vc-relax) untuk sistem MoS ₂ murni.
Kamis	22/01/2026	09:30	16:30	7 Jam	Menggunakan aplikasi VESTA untuk memodelkan struktur molekul gas di atas permukaan <i>supercell</i> MoS ₂ . Konfigurasi dibuat dalam empat variasi situs adsorpsi: <i>Hollow</i> (H), <i>Top Mo</i> (T _{Mo}), <i>Top S</i> (T _S), dan <i>Bridge</i> (B).
Jumat	23/01/2026	09:10	16:50	7 Jam 40 Menit	Menyusun skrip alokasi <i>node</i> (SBATCH) dan mengirimkan beban kerja simulasi komputasi <i>relaxation</i> untuk keempat konfigurasi adsorpsi tersebut ke dalam sistem antrean klaster HPC Trembesi. Melakukan pemantauan status <i>job</i> secara berkala.
Sabtu	24/01/2026	–	–	–	Libur
Minggu	25/01/2026	–	–	–	Libur
Total Jam Mingguan					37 Jam 20 Menit

Hari	Tanggal	Jam Datang	Jam Pulang	Jumlah Jam	Kegiatan
					<p>Mengetahui, Atasan Langsung/ Pembimbing Lapangan</p> <p>Dr. Sasfan Arman Wella</p>

LOGBOOK

Pekan ke-3

Nama / NIM : Shafira Zaujatina Nasution / 101042300006

Hari	Tanggal	Jam Datang	Jam Pulang	Jumlah Jam	Kegiatan
Senin	26/01/2026	09:15	16:40	7 Jam 25 Menit	Melakukan <i>troubleshooting</i> terhadap *job* komputasi yang mengalami kegagalan konvergensi SCF. Menganalisis <i>log output</i> dan melakukan penyesuaian parameter iterasi elektronik (seperti <i>mixing_beta</i>) agar perhitungan dapat selesai.
Selasa	27/01/2026	09:00	16:30	7 Jam 30 Menit	Mengekstraksi data energi total dari <i>file output</i> (.out) hasil optimasi geometri. Menghitung secara matematis nilai Energi Adsorpsi (E_{ads}) untuk keempat situs guna mengidentifikasi konfigurasi adsorpsi yang paling stabil secara termodinamika.

Hari	Tanggal	Jam Datang	Jam Pulang	Jumlah Jam	Kegiatan
Rabu	28/01/2026	09:30	17:00	7 Jam 30 Menit	Menyusun dan mengeksekusi <i>running Non-Self-Consistent Field</i> (NSCF) dengan densitas <i>k-points</i> yang lebih tinggi. Dilanjutkan dengan eksekusi modul <i>post-processing</i> (<i>dos.x</i> dan <i>bands.x</i>) untuk kalkulasi sifat elektronik.
Kamis	29/01/2026	09:10	16:20	7 Jam 10 Menit	Menjalankan modul <i>projwfc.x</i> untuk melakukan Analisis Populasi Muatan (Löwdin). Mengekstraksi jumlah elektron valensi guna menghitung besaran Transfer Muatan (<i>Charge Transfer</i>) dan mengonfirmasi mekanisme fisisorpsi donor/akseptor.

Hari	Tanggal	Jam Datang	Jam Pulang	Jumlah Jam	Kegiatan
Jumat	30/01/2026	09:00	16:00	7 Jam	Melakukan studi komparasi dan validasi hasil perhitungan <i>ab-initio</i> (khususnya nilai Energi Adsorpsi dan Transfer Muatan) terhadap literatur referensi bereputasi. Analisis ini bertujuan untuk mengonfirmasi keakuratan model fisisorpsi molekul gas pada MoS_2 murni yang telah disimulasikan agar memiliki kesesuaian dengan standar publikasi jurnal riset terdahulu.
Sabtu	31/01/2026	–	–	–	Libur
Minggu	01/02/2026	–	–	–	Libur
Total Jam Mingguan					36 Jam 35 Menit
					<p>Mengetahui, Atasan Langsung/ Pembimbing Lapangan</p> <p>Dr. Sasfan Arman Wella</p>

LOGBOOK

Pekan ke-4

Nama / NIM : Shafira Zaujatina Nasution / 101042300006

Hari	Tanggal	Jam Datang	Jam Pulang	Jumlah Jam	Kegiatan
Senin	02/02/2026	09:00	16:30	7 Jam 30 Menit	Mengolah data luaran DOS dan Struktur Pita Energi. Memvisualisasikan hasil ke dalam bentuk grafik 2D menggunakan bahasa pemrograman Python untuk menganalisis modifikasi celah pita (<i>bandgap</i>) pasca-adsorpsi gas.
Selasa	03/02/2026	09:15	16:45	7 Jam 30 Menit	Mengekstrak fungsi gelombang untuk mendapatkan <i>file</i> kerapatan muatan (.cube). Melakukan visualisasi 3D <i>Charge Density Difference</i> (CDD) menggunakan VESTA untuk memetakan arah distribusi elektron di ruang antar atom.

Hari	Tanggal	Jam Datang	Jam Pulang	Jumlah Jam	Kegiatan
Rabu	04/02/2026	09:00	16:00	7 Jam	Mulai menyusun kerangka dan draf awal <i>slide</i> presentasi (PowerPoint) untuk persiapan Kolokium Akhir Magang. Fokus pengerjaan hari ini mencakup penyusunan materi untuk bagian Latar Belakang, Tujuan Riset, dan Metodologi Komputasi (meliputi pemodelan VESTA dan konfigurasi <i>Quantum Espresso</i> di HPC).
Kamis	05/02/2026	09:30	17:00	7 Jam 30 Menit	Melanjutkan dan menyelesaikan penyusunan materi presentasi (PowerPoint) pada bagian Hasil dan Pembahasan. Mengintegrasikan grafik uji konvergensi, tabel energi adsorpsi, visualisasi 3D <i>Charge Density Difference</i> (CDD), dan plot <i>Density of States</i> (DOS) ke dalam <i>slide</i> agar informatif dan siap dipaparkan.

Hari	Tanggal	Jam Datang	Jam Pulang	Jumlah Jam	Kegiatan
Jumat	06/02/2026	09:00	16:00	7 Jam	Menyusun bahan presentasi (PowerPoint) untuk pemaparan hasil. Melakukan diskusi, <i>review</i> progres analisis data, dan bimbingan akhir dengan pembimbing lapangan terkait kelayakan teoretis sensor gas yang disimulasikan.
Sabtu	07/02/2026	–	–	–	Libur
Minggu	08/02/2026	–	–	–	Libur
Total Jam Mingguan					36 Jam 30 Menit
					<p>Mengetahui, Atasan Langsung/ Pembimbing Lapangan</p> <p>Dr. Sasfan Arman Wella</p>

LOGBOOK

Pekan ke-5

Nama / NIM : Shafira Zaujatina Nasution / 101042300006

Hari	Tanggal	Jam Datang	Jam Pulang	Jumlah Jam	Kegiatan
Senin	09/02/2026	09:00	16:30	7 Jam 30 Menit	Melaksanakan kegiatan Kolokium (Presentasi Akhir) di hadapan kelompok riset Fisika Kuantum BRIN untuk memaparkan seluruh hasil komputasi dan analisis nanosensor gas MoS ₂ . Finalisasi dan pengumpulan Laporan Magang, serta acara perpisahan periode magang.
Selasa	10/02/2026	09:00	16:30	7 Jam 30 Menit	Melakukan revisi Laporan Akhir Magang MBKM berdasarkan masukan, evaluasi, dan saran yang diberikan oleh pembimbing lapangan serta tim riset saat sesi presentasi kolokium.

Hari	Tanggal	Jam Datang	Jam Pulang	Jumlah Jam	Kegiatan
Rabu	11/02/2026	09:15	16:00	6 Jam 45 Menit	Melanjutkan penyusunan laporan akhir. Melakukan finalisasi pemformatan dokumen LaTeX agar sesuai dengan panduan kampus, serta melengkapi bagian lampiran seperti logbook dan dokumentasi kegiatan.
Kamis	12/02/2026	09:00	15:00	6 Jam	Menyelesaikan draf final Laporan Akhir Magang MBKM, menyusun lembar pengesahan (tanda tangan pembimbing), dan melakukan pengumpulan (<i>submission</i>) dokumen final kepada pihak instansi (BRIN) dan program studi.
Jumat	13/02/2026	–	–	–	-
Sabtu	14/02/2026	–	–	–	Libur
Minggu	15/02/2026	–	–	–	Libur
Total Jam Mingguan					7 Jam 30 Menit
					<p>Mengetahui, Atasan Langsung/ Pembimbing Lapangan</p> <p>Dr. Sasfan Arman Wella</p>