



## Studi Sifat Elektronik Grafit Menggunakan Metode *Density Functional Theory*

Drusila Wilce Linome, Antonius Suban Hali, Marsi Devid Setyawan Bani, Nikodemus Umbu Janga Hauwali\*

Program Studi Pendidikan Fisika, Universitas Nusa Cendana

\* Corresponding author. E-mail: [nuj.hauwali@staf.undana.ac.id](mailto:nuj.hauwali@staf.undana.ac.id)

### ABSTRAK

Penelitian ini telah dilakukan untuk mengetahui sifat elektronik grafit berdasarkan kurva *band structure* dan *density of states* menggunakan metode *density functional theory* yang diimplementasikan dengan perangkat lunak Quantum Espresso. Sebelum melakukan perhitungan dilakukan studi konvergensi *energy cut-off* dan *k-point*. Perhitungan dilakukan dengan *energy cut-off* 125 Ry dan *k-point* 30 30 30. Dari kurva *band structure*, maka sifat elektronik grafit adalah semikonduktor dengan energi *band gap* 0,01085552 eV. Sedangkan, berdasarkan kurva *density of states*, maka diperoleh *density of states* yang tinggi pada 2 eV di dekat tingkat Fermi. Kurva *density of states* dengan *spin-up* dan *spin-down* menunjukkan bahwa grafit merupakan material non-magnetik.

### INFO ARTIKEL

**Sejarah Artikel:**

Diserahkan 5 Agustus 2024

Diterima Desember 2024

Tersedia online Desember 2024

**Kata Kunci:**

*Density functional theory; grafit; band structure; density of states*

---

## ABSTRACT

*This study investigates the electronic properties of graphite by analyzing its band structure and density of states using the density functional theory (DFT) method as implemented in Quantum Espresso software. Prior to performing the calculations, a convergence study for the energy cut-off and k-point values was conducted. The calculations were performed using an energy cut-off of 125 Ry and a k-point grid of 30x30x30. The band structure analysis reveals that graphite exhibits semiconductor behavior with a band gap energy of 0.0109 eV. Additionally, the density of states (DOS) analysis shows a high density near 2 eV, close to the Fermi level. The spin-up and spin-down DOS curves further indicate that graphite is a non-magnetic material.*

---

---

## ARTICLE INFO

**Article History:**

Submitted August 2024

Accepted December 2024

Available online December 2024

---

**Keyword:**

Density functional theory;  
graphite; band structure; density  
of states

## 1. Pendahuluan

Superkapasitor merupakan terobosan terbaru dalam memenuhi tuntutan penyimpanan energi. Prinsip kerja superkapasitor sendiri memanfaatkan material yang memiliki permukaan aktif sangat luas sebagai pengisi elektroda sehingga mampu meningkatkan performanya. Salah satu material yang dapat diaplikasikan menjadi superkapasitor adalah grafit [1].

Grafit merupakan kristalin karbon berbentuk serbuk dan berwarna hitam atau sering disebut bentuk alotrop dari karbon [2,3]. Grafit memiliki potensi yang dapat digunakan untuk peralatan elektrokimia seperti bahan bakar, baterai lithium, dan superkapasitor [4]. Struktur grafit telah ditentukan melalui metode seperti difraksi sinar-X, mikroskop elektron transmisi, difraksi neutron, dan difraksi berkas elektron konvergen. Metode-metode ini sangat canggih dan umumnya memerlukan peralatan yang sangat mahal dan operator yang sangat terampil [5]. Selain eksperimen laboratorium terdapat metode komputasi untuk mengetahui sifat grafit. Terdapat 3 metode yang dapat digunakan dalam komputasi, yaitu metode *ab-initio*, semiempiris, dan *density functional theory* [6].

*Density Functional Theory* dapat menyelesaikan persamaan Schrödinger

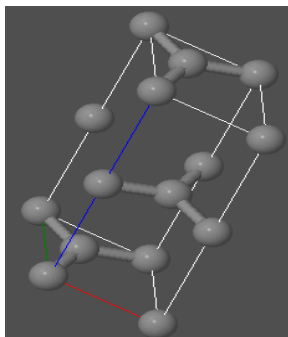
secara sederhana karena didasarkan pada kerapatan elektron [7]. Ide utama *density functional theory* muncul dari teori Hohenberg-Kohn dimana kerapatan elektron dalam keadaan dasar secara prinsip dapat digunakan untuk menghitung fungsi gelombang dalam keadaan dasar [8]. Fungsi gelombang yang biasanya didefinisikan dalam fungsi dari banyak variabel dapat diganti dengan fungsi gelombang yang merupakan fungsional dari kerapatan elektron saja, namun tetap memberikan informasi kuantitas fisis yang sama [9].

Dalam melakukan perhitungan kuantum, menentukan perangkat lunak yang tepat sebelum memulai perhitungan untuk menyelesaikan permasalahan mekanika kuantum adalah sangat penting agar perhitungan yang dilakukan dapat berjalan dengan cepat dan hasilnya akurat [10].

Pada penelitian ini, digunakan perangkat lunak Quantum Espresso. Quantum Espresso merupakan perangkat lunak sumber terbuka dan gratis yang didistribusikan di bawah ketentuan *General Public License* [11].

Penelitian ini dilakukan untuk mengetahui sifat elektronik grafit berdasarkan kurva *band structure* dan *density of states*. Sifat elektronik grafit diketahui dengan cara menganalisis dan

menghitung *band structure* dan *density of states* menggunakan metode komputasi *density functional theory* yang diimplementasikan pada perangkat lunak Quantum Espresso. Struktur grafit yang digunakan dalam penelitian ini ditampilkan pada Gambar 1.



Gambar 1. Struktur grafit [12]

## 2. Metode Penelitian

Penelitian ini menggunakan perangkat lunak Quantum Espresso dan *exchange correlation general gradient approximation* (GGA).

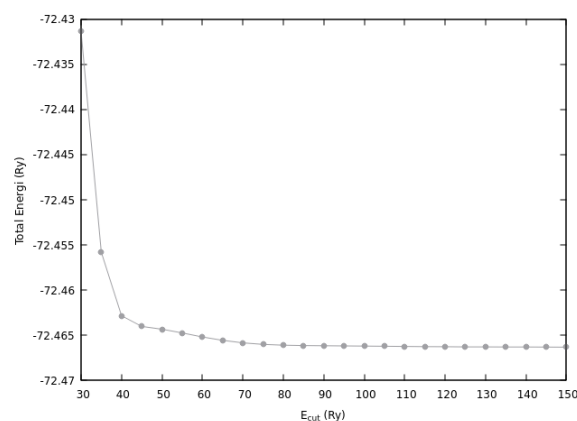
### 2.1. Studi Konvergensi

Studi konvergensi adalah bagian dari perhitungan *band structure* dan *density of states*. Pada tahap ini dilakukan variasi nilai energi *cut-off* dan *k-point* untuk memperoleh nilai energi yang konvergen. Studi konvergensi ini dilakukan dengan cara *self-consistent field* yang berfungsi untuk menghitung energi keadaan dasar dengan proses pencarian fungsi gelombang dan dicek energinya. Saat nilainya semakin rendah dan tidak terjadi perubahan, maka perhitungan telah mencapai *self-consistent*

atau konvergen [7]. Studi konvergensi perlu dilakukan agar menjamin perhitungan itu tepat atau akurat sehingga nilai energi *cut-off* dan *k-point* yang konvergen dapat digunakan pada perhitungan *scf* dan *nscf*.

## 3. Hasil dan Pembahasan

### 3.1. Studi Konvergensi *Energy cut-off*

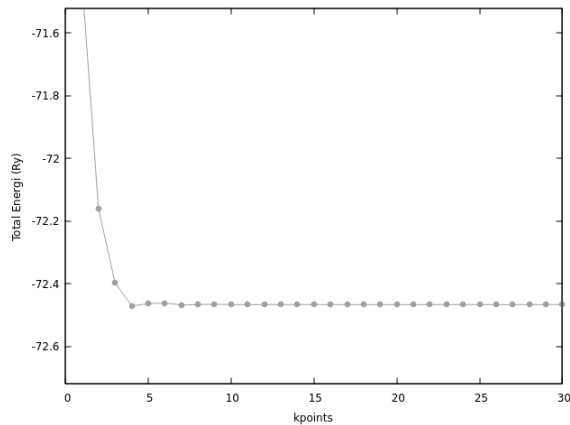


Gambar 2. Grafik *energy cut-off* dan energi total

Pada Gambar 2 menunjukkan bahwa pada energi *cut-off* 30 Ry sampai energi *cut-off* 60 Ry terdapat kemiringan artinya masih ada perubahan energi total yang sangat jauh. Kemudian, pada energi *cut-off* 65 Ry sampai energi *cut-off* 105 Ry perubahan energi totalnya tidak terlalu jauh atau sudah mulai terlihat stabil. Sistem dikatakan konvergen ketika energi total tidak lagi berubah secara signifikan saat energi *cut-off* meningkat. Berdasarkan grafik tersebut energi total mulai konvergen pada energi *cut-off* 110 Ry sampai 150 Ry. Sehingga untuk menjamin konvergensi pada perhitungan selanjutnya akan digunakan energi *cut-off* 125 Ry. Peneliti

menggunakan energi *cut-off* 125 Ry karena energi *cut-off* yang tinggi akan sama seperti hasil referensi. Namun, energi *cut-off* yang tinggi juga akan membutuhkan waktu yang banyak untuk mendapatkan hasil perhitungan.

### 3.2. Studi Konvergensi *k-point*



Gambar 3. Grafik *k-point* dan energi total

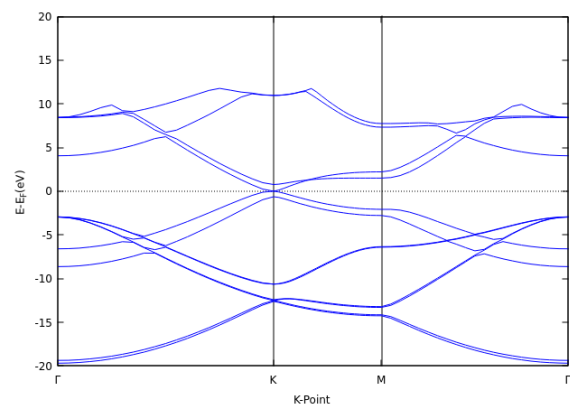
Pada Gambar 3 menunjukkan bahwa pada *k-point* 1 1 1 sampai *k-point* 4 4 4 terdapat kemiringan artinya masih ada perubahan energi total yang sangat jauh. Kemudian, pada *k-point* 5 5 5 sampai 9 9 9 perubahan energi totalnya tidak terlalu jauh atau sudah mulai terlihat stabil. Berdasarkan grafik tersebut energi total mulai konvergen pada *k-point* 10 10 10 sampai *k-point* 30 30 30. Sehingga untuk menjamin konvergensi pada perhitungan selanjutnya akan digunakan *k-point* 30 30 30. Peneliti menggunakan *k-point* 30 30 30 karena *k-point* yang semakin tinggi akan sama seperti hasil referensi. Namun, penggunaan *k-point* yang tinggi juga

membutuhkan waktu yang lama untuk mendapatkan hasil perhitungan.

### 3.3. Band Structure

Berdasarkan kurva *band structure* grafit terdapat garis putus-putus horizontal pada 0 eV yang merupakan level Fermi ( $E_F$ ). Di atas energi fermi merupakan pita konduksi sedangkan di bawah energi fermi merupakan pita valensi. Celah energi merupakan perbedaan tingkatan energi antara energi HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital*) terhadap LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital*).

LUMO adalah orbital terendah pada pita konduksi yang tidak ditempati elektron, sedangkan HOMO adalah orbital tertinggi pada pita valensi yang ditempati elektron [13].



Gambar 4. Hasil perhitungan kurva *band structure* grafit

Berdasarkan kurva *band structure* grafit pada Gambar 4, diperoleh nilai energi minimum pita konduksi 0,00845180 eV dan nilai energi maksimum pita valensi -0,00240372 eV, sehingga diperoleh energi *band gap* grafit 0,01085552 eV.

Berdasarkan nilai energi *band gap* grafit, maka grafit bersifat semikonduktor.

Tipe *band gap* grafit adalah *direct band gap* dimana energi minimum yang terisi pada pita konduksi berada pada titik yang sama dengan energi maksimum yang terisi pada pita valensi yaitu titik K.

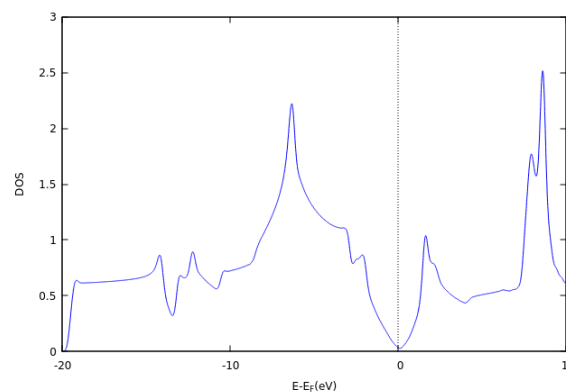
Hasil ini sama seperti hasil penelitian yang telah dilakukan sebelumnya oleh Kaloni & Mukherjee [14]. Penelitian tersebut menggunakan metode *ab-initio* dan ditemukan bahwa grafit bersifat semikonduktor dengan tipe *band gap* grafit adalah *direct band gap*.

Selain itu, terdapat juga hasil yang sama seperti penelitian yang dilakukan sebelumnya oleh Newson [15]. Penelitian ini menggunakan metode *Tight Binding Theory* dan ditemukan bahwa grafit bersifat semikonduktor dengan tipe *band gap* grafit adalah *direct band gap*.

### 3.4. Density of States

*Density of states* adalah jumlah keadaan tiap unit energi pada tingkat energi yang tersedia untuk ditempati elektron. Berdasarkan kurva *density of states* grafit terdapat garis putus-putus vertikal pada 0 eV yang merupakan level Fermi ( $E_F$ ).

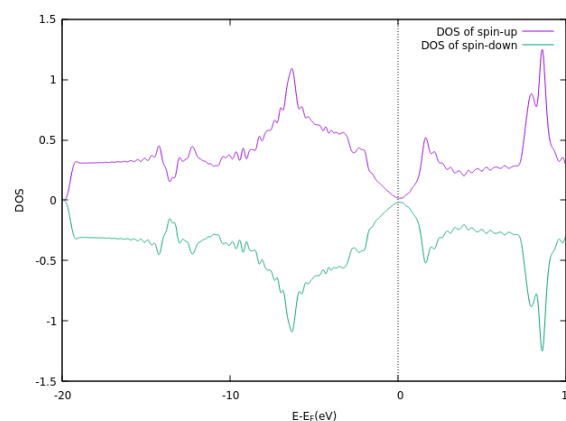
Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, pada energi 2 eV grafit memiliki *density of states* yang tinggi di dekat tingkat Fermi yang artinya banyak keadaan energi yang tersedia untuk ditempati elektron.



Gambar 5. Hasil perhitungan *density of states* grafit

Kurva *density of states* grafit pada Gambar 5 menggunakan *k-point* 30 30 30 pada *scf*, kemudian dinaikkan *k-point* pada *nscf* menjadi 70 70 70 agar mendapatkan *density of states* yang sesuai dengan hasil referensi. Hasil ini sama seperti hasil penelitian yang telah dilakukan sebelumnya oleh Vehvilainen et al., [16]. Penelitian tersebut menggunakan metode *density functional theory* dengan perangkat lunak VASP.

Kurva *density of states* untuk *spin-up* dan *spin-down* grafit ditampilkan pada Gambar 6.



Gambar 6. Hasil perhitungan kurva *density of states spin-up* dan *spin-down*

Berdasarkan kurva *density of states*, maka sifat magnetik grafit adalah non-magnetik. Hal itu karena, *density of states spin-up* dan *spin-down* terlihat simetri.

#### 4. Simpulan

Analisis sifat elektronik grafit dilakukan dengan kurva *band structure* dan *density of states* menggunakan metode *density functional theory* yang diimplementasikan menggunakan perangkat lunak Quantum Espresso dan menggunakan  $E_{cut}$  125 Ry dan  $k$ -point 30 30 30 menunjukkan sistem sudah mulai konvergen.

Berdasarkan kurva *band structure*, maka sifat elektronik grafit adalah semikonduktor dengan nilai energi *band gap* 0,01085552 eV. Dan berdasarkan kurva *density of states*, maka diperoleh *density of states* yang tinggi pada 2 eV di dekat tingkat Fermi yang artinya banyak keadaan energi yang tersedia untuk ditempati elektron. Kurva *density of states* dengan *spin-up* dan *spin-down* juga menunjukkan bahwa grafit merupakan material non-magnetik.

#### 5. Referensi

1. Maulidia, A. H. (2020). Analisis Pengaruh Konsentrasi Asam Tartarat Terhadap Struktur Graphene Hasil Sintesis Dengan Metode Microwave Assisted Solvothermal Untuk Aplikasi Superkapasitor.
2. Dwandaru, W. S. B., Wijaya, R. I. W., & Parwati, L.D. (2019). Nanomaterial Graphene Oxide Sintesis dan Karakteristiknya. Yogyakarta: UNY Press
3. Aditia, F. L. (2022). Sintesis nanostructured graphitic carbon dari tempurung kelapa melalui proses grafitisasi katalitik dengan variasi konsentrasi nikel (Bachelor's thesis, Fakultas Sains dan Teknologi UIN Syarif Hidayatullah Jakarta).
4. Umar, F., & Burhendi, F. C. A. (2022). Studi Sifat Optik dari Hasil Sintesis Grafena Oksida dengan Metode Ultrasonik. *Wahana Fisika*, 7(2), 93-104.
5. Poco. (1997). Graphite Properties and Characteristics. Amerika: Entegris Poco Materials Chemistry Chemical Physics, 22(15), 7903-7911.
6. Kadir, L. A., Permana, D., & Ramadhan, I. (2020). Struktur dan Vibrasi Carbamida: Eksperimen dan Kajian Teoritik Density Functional Theory (DFT). *Jurnal Matematika, Sains, dan Pembelajarannya*.
7. Sudiarta, I.W., Alaa', S., & Parameswari, K. S. (2022). Studi Awal Struktur Pita Ws2 Menggunakan Metode Density Functional Theory.
8. Capelle, K. (2006). *A Bird's-Eye View of Density-Functional*

- Theory*.<http://arxiv.org/archive/cond-mat>
9. Rahman, I. A., & Purqon, A. (2015). *Studi Density Functional Theory (DFT) dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS2*.
  10. Mahyuddin, M. H., & Ginting, L. Y. (2013). Simulasi Material dengan Quantum Espresso. <https://www.researchgate.net/publication/343770115>
  11. Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G. L., Cococcioni, M., Dabo, I., Dal Corso, A., De Gironcoli, S., Fabris, S., Fratesi, G., Gebauer, R., Gerstmann, U., Gougoussis, C., Kokalj, A., Lazzeri, M., ... Wentzcovitch, R. M. (2009). *QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials. Journal of Physics Condensed Matter*, 21(39). <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
  12. Wyckoff, R. W. G. (1963). Second edition. Interscience Publishers, New York, New York Crystal Structures 1 7-83
  13. Siregar, AM, & Sinaga, HJ (2017). Semiconductor Determination Study Through Energy Gap Study of Be-Porphyrin Compound Complexes Using the ZINDO/1 Semiempirical Computing Method. *Einstein E-Journal* , 5 (1).
  14. Kaloni, T. P., & Mukherjee, S. (2011). Comparative study of electronic properties of graphite and hexagonal boron nitride (h-BN) using pseudopotential plane wave method. *Modern Physics Letters B*, 25(22), 1855-1866.
  15. Newson, R. W. (2010). Dynamics of Carriers and Photoinjected Currents in Carbon Nanotubes and Graphene. University of Toronto.
  16. Vehviläinen, T. T., Ganchenkova, M. G., & Nieminen, R. M. (2009). C20 based polymers: electronic and elastic properties and stability studies. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 9(7), 4360-4366.